

## 班の報告

- 情報（記憶）班
- 情報（量子情報）班
- エネルギー班
- 医療班
- 超分子・自己組織班
- ナノ物質・ナノデバイス班
- 量子理論・計算班

## 情報（記憶）班

中川活二\*, 伊藤彰義, 塚本新

### 1. 平成 22 年度計画

- 1) 縦プラズモンのフェムト秒レーザによる解析手法を構築し、プラズモン応答評価を実施。
- 2) シミュレーションによるプラズモン励起の過渡応答現象解析手法の検討。
- 3) 表面プラズモンによる円偏光モードの解析を進め、円偏光モードを発生できるアンテナ構造を提案。
- 4) 本研究目標である数十 THz 領域での磁化制御に向け、光-電子-磁気-熱間作用を理解・利用するため、フェムト秒パルスレーザを用いたサブピコ秒時間領域での、①磁化動特性、②光-電子作用による光学応答、の解明と共に制御を試みる。
- 5) 電子構造の異なる他元素材料(TbFeCo)に関し、非熱的光誘起磁化反転現象の発現を確認。
- 6) 稠密空孔配列二次元化（現在の三次元配列における厚さ方向の空孔層数を 1 とする）による、各種金属基板エッチング用テンプレートへの利用について検討。
- 7) ナノ構造テンプレートをマスクとした金属基板のエッチングにおいて、平成 22 予算に挙げた真空エッチング装置が必要となる。これは、平成 24 年度計画に挙げたプラズモンアンテナの試作、基盤課題における「超分子・自己組織班」でのナノ構造形成においても用いる。

### 2. 平成 22 年度の進捗と成果

- 1) サブピコ秒時間領域での光学応答現象計測のための、フェムト秒パルスレーザ光源によるポンププローブ法を用いた時間分解計測システムを構築し、縦プラズモン応答評価の準備が整った。
- 2) 大貫准教授の協力で、ナノスケールの分散性媒質に対応する計算精度の保証が可能な電磁界過渡解析手法を開発した。これにより、三次元任意形状物体のプラズモン共鳴周波数の推定や過渡応答解析を行うことが可能となった。
- 3) 円偏光モードを発生できるアンテナ構造の検討を進め、円偏光モードを発生できるアンテナ構造を複数見いだした。更に、十字型アパチャーと粒子記録媒体との組み合わせで局所的な円偏光モードを生成できることを見いだした。
- 4) サブピコ秒時間領域での磁気特性、光学応答解明のため、フェムト秒パルスレーザ光源によるポンププローブ法を用いた時間分解計測システムを構築した。①の磁化動特性については、磁気ファラデー効果、磁気カー効果を用い、②については、電子温度依存誘電率変化に伴う透過率、反射率の変化率計測により、電子温度上昇を主要因とした減磁現象を確認した。
- 5) 希土類および遷移金属からなる磁性合金として TbFeCo 材料に関し、磁性層厚 20nm の超薄膜において垂直磁気異方性を発現する組成域において光誘起磁化反転現象が発現することを明らかにした。
- 6) 内部に空孔を有するシリカ薄膜の、広範囲にわたる稠密規則化および単層化を Pt および Fe 上で実現するための基礎実験に成功した。空孔を含むシリカ薄膜と双対なナノ表面構造として、超微小シリカ粒子配列膜の作製とそれをマスクとした ICP エッチングにより、熱酸化 Si 基板上への転写構造の作製に成功した。
- 7) 10月8日船橋校舎へ設置を行い、Si および貴金属材料につき、エッチング試験を実施し、基本性能として要求を満たすレートでのエッチングが可能であることを確認した。

### 3. 平成 22 年度の班としての活動

毎月 1~2 回の頻度で大貫准教授を合同で班会議を開催し、プラズモン励起の過渡応答現象解析手法の成果を 2010 年 7 月にカナダで開催された国際会議（IEEE International Symposium on Antennas and Propagation, July 11-17, 2010, Toronto, Ontario, Canada）等で発表した。また、本プロジェクトの成果として見いだした円偏光モードを発生できるアンテナ構造の特許を出願し（特願 2010-161996）、その内容を 2010 年 11 月に米国で開催された国際会議（55th Annual Conference on Magnetism & Magnetic Materials, 14-18 November 2010, Atlanta, Georgia, USA）にて発表（GE-08）し好評であった。

## 情報（量子情報）班

井上修一郎\*, 桑本剛, 羽柴秀臣

### 1. 平成 22 年度の計画の概略

平成 21 年度に開発した偏光量子もつれ光源と高速単一光子検出器を用いて BBM92 量子暗号プロトコルによる量子鍵配送システムを構築し、光ファイバーによる 200km の量子鍵配送実験を行う。これと平行して、偏光量子もつれ光子対源を 2 台作製し、量子もつれスワッピングの実験を行う。さらに、ルビジウム原子による電磁誘起透明化を利用した光保存により偏光量子もつれが保存されることを実証し、冷却原子による量子メモリの可能性を示す。一方、金属ナノストライプカップラーの作成技術を確立し、表面プラズモン・ポラリトンの伝播特性を超伝導転移端センサにより調べる。

### 2. 平成 22 年度の進捗と成果

偏光量子もつれ光源と高速単一光子検出器の最適化を行うことにより、2 光子干渉明瞭度 97 % ( $0^\circ$  方向), 94 % ( $45^\circ$  方向) を得た。また、伝送路が無い状態において量子もつれ配送レート 2.8 kHz を得た。この結果は、**1550 nm 帯における量子もつれ配送レートの世界記録**である。さらに、この偏光量子もつれ光源と高速単一光子検出器を用いて BBM92 量子暗号プロトコルによる量子鍵配送システムを構築した。今後、このシステムを用いて 200 km の伝送実験を行う予定である。一方、量子もつれスワッピングに関しては、タイプ II PPLN バルク結晶による偏光量子もつれ光源を 2 個作製し、生成される偏光量子もつれの忠実度、それぞれの光源で生成される光子の識別不可能性を評価中である。

量子メモリに関する研究では、ルビジウム原子の共鳴波長 (795 nm) をもつ偏光量子もつれ光源を開発し、生成した偏光量子もつれ光子対に対して 2 光子干渉明瞭度 84 % を得た。また、この偏光量子もつれ光子対を長時間保存するために電磁誘起透明化に使用している 2 台のレーザーの相対的な周波数ゆらぎをこれまでの 1/5000 に抑圧した。現在、電磁誘起透明化によるレーザー光の保存時間の評価を行っている。

金属ナノストライプ導波路に関しては、クラッド層として波長 1550 nm の光に対して低損失なポリマー (ZPU12) を使用することにより、結合効率 0.81 dB, 伝播損失 1.7 dB/mm を実現した。また、この導波路構造を用いた 50:50 カップラーの作製を行い、その挿入損失を測定したところ 25 dB であった。今後、この 50:50 カップラーと超伝導転移端センサにより、表面プラズモン・ポラリトンの衝突実験を行い、表面プラズモン・ポラリトンのボーズ粒子性を検証する。

超伝導光子数識別器に関しては、**波長 850 nm において世界最高の検出効率 98.4 %** を実現した。また、超伝導細線単一光子検出器に関しては、**世界で初めて Nb 超伝導ナノ細線を用いた単一光子検出器の開発に成功した。**

CdSe/ZnS コロイダル単一量子ドットによる単一光子発生に関しては、全反射蛍光顕微鏡による観測系を導入し、CdSe/ZnS 量子ドットからのリアルタイム蛍光イメージングにより単一量子ドットの捕捉に成功した。現在、Hanbury-Brown Twiss の実験系により、単一量子ドットからの発光を評価中である。

### 3. 平成 22 年度の班としての活動

単一光子発生に関しては、物質応用化学科の大月研と共同で試料の作製および全反射蛍光顕微鏡の作製を行った。また、超伝導ナノ細線単一光子検出器の設計では、電気工学科の大貫研に金属ナノストライプ導波路を伝搬する表面プラズモン・ポラリトンと超伝導ナノ細線との結合効率の計算を依頼した。平成 22 年度は 3 回の班会議を行い、進捗状況の報告と研究の進め方について議論した。

## エネルギー班

橋本拓也\*, 浅田泰男, 大月穰, 西宮伸幸, 松下祥子

### 1. 平成 22 年度の計画の概略

- 1) 太陽光発電の高効率化を目指し、酸化チタン-電解液フルフォトニックバンドギャップ構造体の電子ビームリソグラフィによる作製を試みる。また新たな色素の作成を目指す。さらに、過去に示された自己集積型フォトニック結晶による太陽電池の効率向上の原因を、各種粒径のインバースオパール各種電気化学測定により追求する。
- 2) 光エネルギーによって水から水素を発生する技術の革新を目指して、均一系超分子触媒の効率をプロトタイプより上昇させることを目指す。
- 3) バイオ技術により発生した水素の高効率回収方法の確立および水素貯蔵材料の光制御技術の確立を目指す。またこれを燃料とする固体酸化物型燃料電池の低温作動化および高強度化を目指す。本研究で得られた均質な水素イオン導電体と高い電気伝導を示す電極材料が 600°C 程度でセルを組んで安定であるか否かを評価する。

### 2. 平成 22 年度の進捗と成果

- 1) 色素増感型インバースオパール電極の粒径に依存した太陽電池特性測定ならびに電気化学インピーダンス測定を行った。その結果、少なくとも本インバースオパール電極による光電変換効率向上はナノ/メソスコピック効果ではないことが示唆された。本成果は現在論文投稿中である。また新たな太陽電池用色素としてペリレンイミド系の色素 3 種類を合成し、色素増感太陽電池を試作した。効率は現在のところ 0.5–1.9% である。今後、色素の吸収特性、電気化学特性、分子軌道などを検討し、効率上昇を目指す。
- 2) 水から水素を発生させる新技術として、初めて水溶液系で機能する、光増感部位と触媒部位が自己集合する均一系光水素発生触媒を開発した。本成果を *Chem. Commun.* に論文発表した段階では、8 時間の照射で、触媒のターンオーバー数 40 であったが、その後、2 時間の照射でターンオーバー数 1300 まで増大、変換効率の向上に成功した。
- 3) バイオ技術により発生させた水素について合金を共存させると水素の生産量が多くなることを発見した。また錯体系水素化物に光触媒と助触媒を共存させると、照射により水素が発生することを発見した。

燃料電池研究については高温かつ様々なガス雰囲気強度測定が可能な装置の製作に時間がかかったが、ようやく装置が使用可能となった。今後、本研究室で開発した電解質材料、電極材料およびインターコネクター材料について *in-situ* 評価を実施する。水素イオン導電体についてはナノレベルでの混合が可能な液相法で  $\text{Ba}_{1-x}\text{Sr}_x\text{ZrO}_3$  系の組成最適化を実施していたが、Sr 量が 0.4 のものが焼結特性も良好であり、相転移フリーかつ電気伝導も高いことを発見した。電極材料については  $\text{LaNi}_{1-x}\text{Fe}_x\text{O}_3$  の水溶液法による合成を実施し、従来よりも電気伝導特性に優れた  $x < 0.4$  の試料合成に成功したが、熱力学的な安定性や焼結特性の観点から  $x = 0.4$  のものが電極材料として優れていることを発見した。今後、これらの試料を用いて燃料電池セルの試作を実施し、600°C 程度で作動する高強度燃料電池の実現を目指す。

### 3. 平成 22 年度の班としての活動

インバースオパール電極を持つ太陽電池特性測定は文理学部松下祥子と橋本拓也との共同研究であり、本成果は *Korean-Japan Joint Forum* にてポスター賞を受賞した。

またバイオ水素の回収にあたってはバイオ分野の浅田泰男、合金分野の西宮伸幸の共同研究の成果であり、速やかに特許出願する予定である。

## 医療班

福田昇\*, 阿部克己, 高橋悟, 越永従道, 藤原恭子, 加野浩一郎, 松本宜明, 永瀬浩喜

### 1. 平成 22 年度の計画の概略

- (1) 癌診断マーカーHer2 および MYCN 遺伝子を標的とした癌診断用探索プローブの開発
- (2) ゲノム化学に基づく PI ポリアミドの創薬開発
- (3) 腫瘍集積性を示す光感受性物質ポルフィリン誘導体を用いた治療法の開発

### 2. 平成 22 年度の進捗と成果

(1) MYCN 遺伝子の発現を低下せる PI ポリアミドを設計し神経芽細胞腫(NB)治療薬として新規遺伝子制御薬 PI ポリアミドの開発を目指した。MYCN プロモーターの SP1, E2F 認識領域に結合するポリアミドは NB 細胞株において MYCN の発現を抑制し、また細胞の増殖抑制効果もあった。マウスに移植した細胞株に対しても同様の増殖抑制効果を示す傾向にあった。

(2) 1) 癌細胞においては癌抑制遺伝子の異常メチル化、アセチル化によりそれらの発現が抑制されていることが知られているが、我々はヒストン脱アセチル化酵素 (HDAC) 阻害剤 Suberoylanilide hydroxamic acid (SAHA) と、癌抑制遺伝子の一つ p16 のプロモーター領域を認識する PI ポリアミドを結合させ、この化合物が HDAC 阻害活性を持ち、細胞核内の標的配列領域近傍のヒストン H3 蛋白質のアセチル化を誘導することを明らかにした。またこの分子がヒト子宮頸癌細胞株に対し増殖抑制効果を持つ事を確認した。

2) 被嚢性腹膜硬化症モデルへの TGF- $\beta$ 1 に対する PI ポリアミドの効果として、腹腔内への TGF- $\beta$ 1 に対する PI ポリアミドは腹膜肥厚を抑制した。

3) ヒト TGF- $\beta$ 1 のプロモーターにシスエレメントに対し、7 つの PI ポリアミドを設計し、TGF- $\beta$ 1 の mRNA 発現抑制効果から GB1101, GB1105, GB1106 にリードを絞り込んだ。さらにヒト VSMC の TGF- $\beta$ 1, fibronectin, collagen type IV, CTGF mRNA の発現に対する作用、ヒト上皮細胞の EMT に対する作用を検討している。

4) ヒト iPS 細胞のヒト TGF- $\beta$ 1 に対する PI ポリアミドによる誘導としてフロリダ大学 Terada Lab と N. 研究プロジェクトで MTA 契約を行い、GB1105 での共同研究に入った。また生物資源科学部の花澤研とも TGF- $\beta$ 1 抑制に加え、E-カドヘリンまたは BMP-7 蛋白による iPS 細胞作成の N. 研究プロジェクトでの共同開発を開始した。

(3) 光線力学療法で使用され腫瘍親和性のあるポルフィリン化合物 HPPH (3-(1'-hexyloxyethyl)-3-devinylpyropheophorbide-a) に、x 線撮影時の造影剤として使用されているヨード元素を結合させた化合物「531」「717」を合成し、新たな放射線増感剤としての機能を検証した。培養ヒト膀胱癌株に 531 および 717 を投与後 33.17keV の単色 x 線を照射し、一定時間培養後に生細胞数を計測したところ、ヨード化合物なしのコントロール照射群と比較して化合物投与群で生細胞数がより減少し放射線増感効果が確認された。現在、動物モデルでの作用を確認すると同時に、より効果の高い放射線増感化合物の開発を続けている。

### 3. 平成 22 年度の班としての活動

月に一度のペースで医学部内でポリアミドミーティングを開き、結果報告およびディスカッションを行った。また班のメンバーは常時行き来し、情報交換や機器・試薬類の貸借を行った。平成 22 年 9 月からそれまでの班長の永瀬の異動に伴い、総合科学研究科の福田が班長となる。ヒト iPS 細胞のヒト TGF- $\beta$ 1 に対する PI ポリアミドによる誘導としてフロリダ大学 Terada Lab と N. 研究プロジェクトで MTA 契約を行い、生物資源科学部の花澤研とも N. 研究プロジェクトでの共同開発を開始した。

## 超分子・自己組織班

伊掛浩輝, 伊藤彰義, 大月穰, 塚本新, 松下祥子

### 1. 平成 22 年度 研究計画

N.研究プロジェクトにおいて、基盤的な位置づけにある超分子・自己組織班では、**ナノ物質系と光・量子融合領域の未踏科学開拓と新規技術創出**をテーマに、社会が持続的に発展をする上で欠かせない重要なテーマについて検討し、さらには本プロジェクトのアウトプットである**情報**、**エネルギー**、**医療**班と連携を密に、新規マテリアルの創製をめざしている。以下に各グループの活動内容を列記する。

### 2. 各グループの研究活動報告

#### ・伊藤・塚本グループ

##### <平成 22 年度計画>

稠密空孔配列二次元化（現在の三次元配列における厚さ方向の空孔層数を 1 とする）による、各種金属基板エッチング用テンプレートへの利用についての検討を重点課題とした。

##### <平成 22 年度の進捗と成果>

内部に空孔を有するシリカ薄膜の、広範囲にわたる稠密規則化および単層化を Pt および Fe 上で実現するための基礎実験に成功した。また、空孔を含むシリカ薄膜と双対なナノ表面構造として、超微小シリカ粒子配列膜の作製とそれをマスクとした ICP エッチングにより、熱酸化 Si 基板上への転写構造の作製に成功した。

#### ・大月グループ

適切に設計された分子の自己集合は、ナノ構造を構築するための有力なボトムアップ的手法である。本グループでは、新しい分子の自己集合系を開発し、分子レベルでの自己集合構造、そのダイナミックな挙動を明らかにするとともに、N.研究プロジェクトの研究者との連携によって、エネルギー、医療、情報への応用を検討している。

1. 分子の自己集合構造と動的挙動の分子レベルでの解明
2. 自己集合錯体を用いた光エネルギーによる水からの水素発生
3. X 線を用いた光線力学療法のための化合物合成

#### ・松下グループ

##### <平成 22 年度の研究概略>

自己集積により球状微粒子が層状に配列した構造体を酸素プラズマエッチング等で加工し、メタマテリアルや単細胞分析への応用を試みる。また、カチオン性界面活性剤を含む水相にアニオン性イオンを含む水滴を滴下すると自発運動する現象において、クロロベンゼン添加による運動活性化の解明を、界面張力測定ならびに溶解度測定により行う。

##### <平成 22 年度の進捗と成果>

メタマテリアルへの応用展開として、ポリスチレン微粒子を固体基板上に一層に配列させ、熱融着を利用してリング状構造体の作製を行った。また、作製したメタマテリアル基材について招待講演を行った。

次に、微粒子自己集積体をテンプレートとした外部応答により硬さや体積が変化するマイクロポケットヒドロゲルの作成について検討した。本研究の展開として、生物資源科学部の加野先生と打ち合わせを行った。

油水界面自発運動活性化について界面張力測定ならびに溶解度測定を行い、活性化モデルの構築を行った。また、界面活性剤水溶液に金属塩類を添加することで、界面活性剤の形状の安定性およびイオン流の影響の観点からディスカッションを行い、油水界面における非平衡的な挙動のメカニズムを探った。

・伊掛グループ

本年度は、モノマーであるラクチドから PLA を化学合成し、得られた PLA のモルフォロジー制御とその精密構造解析を行っている。背景として、PLA がこれまで大きな関心を持たれながらも産業界に大きく貢献できなかった原因として、耐熱性や機械強度が汎用性ポリマーに比べ劣る点にある。そこで、本グループでは、PLA 構造をナノメートルオーダーで制御することで、これらの問題点を克服し、PLA の高汎用化をめざし 1～3 の検討を行っている。

1. 光歪応答性ポリ乳酸フィルムの開発
2. ポリ乳酸/シリカ、及びポリ乳酸/カーボンナノチューブハイブリッド材料の作製
3. ステレオコンプレックス型ポリ乳酸フィルムの作製

## ナノ物質・ナノデバイス班

鈴木薫\*, 高野良紀, 浅井朋彦, 岩田展幸, 羽柴秀臣, 望月章介, 茶園茂

### 1. 平成 22 年度の計画の概略

ナノ物質・ナノデバイス班は 1)層状構造を持つ鉄砒素系超伝導体のバルクを高野が作成し、ナノ薄膜に鈴木が堆積させ、羽柴が量子ドット創成を目指す。2)金属内包カーボンナノチューブを加工し鈴木が走査型プローブ顕微鏡用の磁気センサ開発を、単層カーボンナノチューブのカイラリティを制御し岩田がナノスケール電界効果型トランジスタの作製を試みる。3)光触媒作用により水素と酸素を発生するナノ薄膜を鈴木が成膜し、水素吸蔵合金を浅井が磁化同軸プラズマガンで溶出形成し、酸素(水素)の吸蔵・放出過程の制御を望月が検討する。4)新カラーフォトメモリー物質を望月が探索し、細胞膜受容体タンパク質に蛍光タンパク質などを結合させた高速イメージングを茶園が確立する。

### 2. 平成 22 年度の進捗と成果

鈴木はニッケル等を直径 10~80 nm・長さ 100~800 nm の高アスペクト比で内包したカーボンナノチューブが、外側に 3~50 層のグラフェンとして巻付いて成長することを確認し、特願 2010-198325 を特許出願した。TiO<sub>2</sub> に La と Sr・Ba・Ca 等をドーブルし可視光での水分解反応による水素発生と、 $16 \mu\text{Lh}^{-1}\text{cm}^{-2}$  へと水素発生効率が改善され、学部年がレーザー学会東京支部研究会でポスター講演優秀賞を受賞した。高野と共同で超電導材料 LaOFeAs を成膜し、7th ICPEPA で発表した。

高野は SrFeAs において、Sr の一部をこれまでに報告されていない希土類元素 Nd で置換した Sr<sub>0.5</sub>Nd<sub>0.5</sub>FeAs において超伝導転移温度  $T_c=49\text{K}$  を得ており、SrFeAs 系の希土類元素置換で得られている最高の  $T_c$  に近い。さらに、Fe の一部を Ni で置換した SrFe<sub>1-x</sub>Ni<sub>x</sub>As や、母体物質自身が  $T_c=18\text{K}$  の超伝導体である Li<sub>x</sub>FeAs において Co 置換した Li<sub>x</sub>Fe<sub>1-y</sub>Co<sub>y</sub>As を作成した。

浅井は水素吸蔵合金膜生成用の磁化同軸ガンの開発を行い、ステンレス電極による電極溶出およびターゲット基盤上での合金膜形成を確認した。さらにこの結果を受け、複合材料による同軸ガン電極を製作、年度内に実験に入る予定である。

岩田は単層カーボンナノチューブ(SWNT)のソース・ドレイン電極間を親水性とし触媒金属の付着を制御し、自由電子レーザー(FEL)照射による SWNTs のカイラリティ制御を行った。ラマン散乱・表面観察の結果、未だ報告のない成長位置とカイラリティ制御を同時に達成できた。また超格子の作製と室温マルチフェロイックの発現において、REFeO<sub>3</sub>/AFeO<sub>3</sub> (RE=Bi,La A=Ca,Sr)超格子を作製し、サテライトピークとステップ-テラス構造を確認した。

羽柴は高感度 THz 帯単一光子検出器として GaAs/AlGaAs ヘテロ基板上に作成した量子ドットと、その電荷を測定する超伝導単一電子トランジスタを作成した。量子ドットが THz 光子吸収によりプラズマ励起すると 1 電子をバリアを介して排出し、電荷のポラライゼーションが単一電子トランジスタのコンダクタンスの変化として現れるため、ゲート電極の改良により受光感度を示す NEP が  $\sim 10^{-19}\text{WHz}^{-1/2}$  と、一桁上げる事に成功した。

望月は種々の金属酸化物のフォトルミネッセンススペクトル特性を酸素ガス、真空、炭酸ガス等の雰囲気中で測定し、多くの金属酸化物で炭酸ガスはフォトルミネッセンス強度を増加させることを見つけた。この現象は金属酸化物のフォトルミネッセンス特性の改善や温暖化ガスである炭酸ガスの固定や吸着・脱離の光制御に応用できる可能性がある。

茶園・東條はバイオナノマシン研究で主流であった 100 兆個の分子の平均値を測定する生化学・生物物理学的手法が 1 個 1 個の反応サイクルと同期しているわけではないので、真のコンフォメーションを現すため 1 分子計測が必要と考え、その前段階としての多分子イメージングによる生体分子モーター作動原理と 1 分子イメージングによる細胞膜上受容体蛋白の研究で成果を得た。

### 3. 平成 22 年度の班としての活動

各々のグループで打ち合わせや試料の提供を行い、第一に鉄砒素系超伝導体バルクを薄膜で結晶化することに成功した。また、カーボンナノチューブのデバイス化や水素と酸素の発生・吸蔵・放出過程の制御及びカラーフォトメモリー物質と細胞膜受容体タンパク質の高速イメージングにおいて共同して研究を行い成果が得られた。

## 量子理論・計算班

石田浩, 大貫進一郎, 佐甲徳栄\*, 藤川和男, 山崎恒樹

## 1. 平成 22 年度の計画の概略

量子理論・計算班は、光とナノ物質との相互作用を明らかにすることを第一義的な目標とし、ナノ物質存在下における (i) 電磁波の伝播, (ii) 少数電子系の電磁応答の厳密計算, (iii) ナノ物質の電子物性, (iv) 量子理論の基礎原理の解明を重点項目として、それぞれの班員が研究を推進している。今年度は、(i) については、(i-1) 局所的円偏光光励起ナノアンテナの設計 (大貫), (i-2) 高速かつ信頼性の高い電磁界シミュレーション法の開発 (大貫, 山崎) およびフォトニックナノ導波路の伝播特性 (山崎), (ii) については、原子におけるフント則の起源の解明 (佐甲), (iii) については、動的平均場理論による強相関物質のヘテロ界面の電子構造の解明 (石田), (iv) については、量子力学の不確定性関係の詳細な検討 (藤川) を行った。また理論班全体の研究として、(v) 電磁場と量子系が相互作用する系について双方の時間発展の計算を可能にする「マックスウェル-シュレディンガー方程式の同時解法」を目指したプロジェクト (全班員) を新たに立ち上げた。

## 2. 平成 22 年度の進捗と成果

まず、研究計画 (i-1) に関しては、情報班の中川教授、伊藤教授、塚本講師との共同研究の下で、局所的な円偏光モードを発生できるアンテナ構造の検討を進め、その見通しを得た。これらの成果は論文 (Journal of Applied Physics, in press) 及び 11 月に米国で開催された国際会議 (55th Annual Conference on Magnetism & Magnetic Materials, 14-18 November 2010, Atlanta, Georgia, USA) 等で発表を行い、また、発表に先立ち特許を出願した (特願 2010-161996)。(i-2) については、情報班の中川教授との協力により、ナノスケールの分散性媒質に適用でき、計算精度の保証が可能な電磁界過渡解析手法を開発した。これにより、三次元任意形状物体のプラズモン共鳴周波数の推定や過渡応答解析を行うことが可能となった。これらの成果は 7 月にカナダで開催された国際会議 (IEEE International Symposium on Antennas and Propagation, July 11-17, 2010, Toronto, Ontario, Canada) 等で発表を行った。

(ii) については、原子の磁性を担う電子スピンとエネルギー準位との関係を規定する「フントの第一規則」が成り立つ起源を、波動関数の内部構造を可視化することによって明らかにした。特に、従来知られているフェルミ孔に対して、低スピン状態において「共役フェルミ孔」が存在することを初めて明らかにした。この研究成果は Physical Review A 誌に投稿中。

(iii) については、金属表面に吸着した強相関単原子薄膜の電子構造を動的平均場理論により調べ、孤立原子層がモット絶縁体の場合でも、下地金属と吸着原子との軌道混成により、吸着原子層は金属になること、その一方、吸着原子層の電子構造は単純なフェルミ金属ではなく、孤立原子層の場合と同様な相転移を示すことが初めて示された。

(iv) については、量子論のもっとも重要な基礎的性質であり、量子情報理論におけるエンタングルメントの判定条件にも関係する不確定性関係について詳細な検討を行い、不確定性関係は量子論の帰結の一つであり、確率解釈で支配される性質であることを明らかにした。この成果は Prog. of Theor. Phys. 誌に掲載決定。また、周期的境界条件の下での不確定性関係の定式化に始めて成功した (Prog. of Theor. Phys. 2010, vol.124, pp.747-759)。

(v) については、全班員の協力の下、マックスウェル-シュレディンガー方程式を数値積分するための定式化を行い、symplectic integrator 法に基づく計算コードの作成を開始した。

## 3. 平成 22 年度の班としての活動

理論班全体のプロジェクト (上記(v)) を立ち上げるために、佐甲および大貫の研究室を拠点として、定期的に勉強会の開催を行った。また、その他の共同研究として、大貫-井上による「プラズモン導波路の電磁界シミュレーション」、大貫-大月による「分子モーターのシミュレーション」、佐甲-石田-藤川による「人工原子の電子構造の解明」等が行われている。