

## 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 23 年度計画

- 1) フェムト秒オーダーのプラズマ共鳴による応答解析を、実験・解析の面から確立し、研究計画再構築を行う。
- 2) 円偏光モード解析から、光直接記録に適した近接場アンテナ形状検討を進める。
- 3) 高速記録過程、すなわち非可逆である磁化反転機構を計測/解明するため、超高時間分解計測装置改良と測定実施を行う。
- 4) 十数 nm スケールのナノ構造を有するテンプレート基板を利用した金属/磁性体ナノ構造形成を実施検討する。
- 5) ナノ構造を有する磁性体特有の磁化挙動につきシミュレーションにより検討を行う。

### 2. 平成 23 年度の進捗と成果

- 1) 磁性記録膜上に針状アンテナを配置して短パルスで記録実験する手法について、電磁界・熱伝導シミュレーション計算を行い、構造設計、電子ビーム露光による試作、フェムト秒レーザによる記録実験トライアルを始めた。併せて、超短パルス光照射後数十 ps に渡る光・磁気応答の層構成依存性より高速エネルギー伝達機構に導電金属層の存在が重要な働きを担う事を明らかにした。  
また、本年度申請した設備（モーションコントロールシステム：8 月 12 日納入）により、試料台に微動機構を導入した。本微動機構で、ポンピングとプロービングの位置制御を高精度で走査実験を可能にした。
- 2) 金属板への十字型開口やクローバー型開口により、粒子記録材料に円偏光を生成する構造を見いだした。また、直線偏光を照射して、円偏光を生成する十字型アンテナの検討も行った。
- 3) レーザシステムと同期し、1kOe 程度の磁場印加可能な微小コイルの作製とドライブを試作した。
- 4) 金属膜上にシリカナノ構造を形成し、エッチング装置（N ドット購入）による各種エッチングガス種・条件による加工実験に着手した。
- 5) 近接場プラズモンアンテナを利用した、磁性微粒子媒体への磁気記録シミュレーションを実施し、単一粒子のみを記録可能な条件を見いだした。

### 3. 平成 23 年度の班としての活動

6 月にオランダで開催された国際会議（MORIS2011, June 21-24, 2011, Nijmegen, The Netherlands）において、熱アシスト記録実験、高速磁化反転ダイナミクス、局所円偏光生成に関して 4 件の発表を行い、理論・計算 Gr.の大貫准教授との連名の発表も行った。

7 月には、磁気微粒子媒体作製及び高速磁化反転ダイナミクスに関して、国際会議（Moscow International Symposium on Magnetism, Aug. 21-25, 2011, Moscow, Russia）で 2 件の招待講演を行い、注目を集めた。

一方、同 7 月には、プラズモン励起の過渡応答現象解析手法の成果を米国で開催された国際会議（IEEE International Symposium on Antennas and Propagation and CNC/USNC/URSI Radio Science Meeting, July 5-6, 2011, Spokane, Washington, USA）等で発表し、大きな反響を得た。この成果は、毎月 1~2 回の頻度で理論・計算 Gr.の大貫准教授と合同で班会議での議論の成果を大貫准教授が中心となって得た成果であり、本 N ドットプロジェクトによる成果はますます広がりを得ている。

## 情報（量子情報）班

井上修一郎\*, 桑本剛, 羽柴秀臣

## 1. 平成 23 年度計画

- 1)量子もつれスワッピング装置の開発
- 2)超伝導ナノ細線単一光子検出器の作製とその評価
- 3)金ナノストライプカップラーの作製と表面プラズモンポラリトンの量子干渉実験
- 4)電磁誘起透明化による室温ルビジウム原子気体中への偏光量子もつれ光子対の保存
- 5) Si 微細導波路の作成とシングルモード導波特性の解明
- 6)低屈折率二次元フォトニック結晶に用いる  $\text{TiO}_2$  薄膜周期構造の特性評価

## 2. 平成 23 年度の進捗と成果

- 1) 2 個の量子もつれ光子対源を作成し、それぞれの量子もつれ光子対源から生成された光子の識別不可能性を Hong-Ou-Mandel 型干渉計により調べた。今後、Bell 測定を行い偏光量子もつれスワッピングを実証する予定である。
- 2) 昨年に引き続き、量子論・計算班の大貫准教授と共同で金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の超伝導ナノ細線への結合効率に関する計算機シミュレーションを行い、プラズモン導波路結合型超伝導ナノ細線単一光子検出器の設計を進めている。
- 3) 昨年度確立した金ナノストライプ導波路作製技術を用いて金ナノストライプカップラーの作製を行った。さらに、これまでに開発した偏光量子もつれ光子対源と超伝導光子数識別器を用いて単一表面プラズモンポラリトンの量子干渉実験を行い、表面プラズモンポラリトンのボーズ粒子性を世界で初めて検証した。
- 4) 第 2 高調波発生用蝶ネクタイ型共振器を開発することで波長 397.5 nm のポンプ光を高強度化し、自然パラメトリック下方変換による Rb 原子の共鳴波長 795 nm の偏光量子もつれ光子対の生成率を昨年度の 3 倍に向上させた。このとき、偏光量子もつれ光子対による 2 光子干渉明瞭度は 93 % であった。また、電磁誘起透明化による光保存効率を改善するために、光位相・周波数同期システムの改良および Rb 原子を封入したガラスセル周辺の磁場抑制を行った。その結果、従来の系に比べレーザー光（古典光）の保存効率を 2 倍に改善できた。今後、偏光量子もつれ光子対の Rb 原子への保存実験を行う予定である。
- 5)  $\text{CF}_4$  ガスによる ICP エッチングの条件を見出し、簡便な金属マスクを用いた Si 微細導波路の作成を行った。
- 6) スパッタ法による  $\text{TiO}_2$  薄膜は、焼成によりアナターゼ化する事を見出した。これにより、レジストマスクを用いた微細加工による低屈折率フォトニック結晶が太陽電池の触媒素子として有用であることを示した。

## 3. 平成 23 年度の班としての活動

量子中継技術を実現するための新規ナノデバイスとしてコロイダル量子ドットアレイを提案し、その作製方法の検討を物質応用化学科の大月研に依頼した。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 23 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。また、必要に応じてメールベースで研究計画を遂行するための情報交換を行った。

## 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 23 年度の計画の概略

- 1) 色素増感太陽電池の高効率化を目指し、酸化チタン-電解液フルフォトリソ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引き続き試みる。さらに、自己集積型フォトリソニック結晶による太陽電池の効率向上の原因を、蛍光寿命測定により追求する。また新しい色素を太陽電池の材料として検討する。
- 2) 平成 22 年度に発見した新しい水素発生光触媒の構造および反応機構を解明する。
- 3) バイオ技術により作製した酵素と水素吸蔵合金を用いての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。また光を用いての水素吸蔵・充電型水素電池の開発を目指す。さらに水素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。燃料電池の作製条件最適化のために、新たに発見された電解質と電極材料の導電特性や焼結特性を調査する。

### 2. 平成 23 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入射単色光光電変換効率測定を実施し、より詳細に粒径と光電変換効率の議論を実施することに成功した。また新たな太陽電池用色素としてペリレンイミド誘導体を中心に新たな増感色素を合成し、色素増感太陽電池を試作したところ、効率を 3.1% まで到達させることに成功した。
- 2) 光触媒に関してはトリエチルアミンから暗所で水素が発生することを見出し、様々な条件で反応を検討した。現在、反応機構については検討中である。
- 3) シアノバクテリアの嫌気性条件、明条件下で水素生産試験を実施した。水素吸蔵合金を併用すると、水素が増産できることを明らかにした。さらに水素貯蔵材料として合金ばかりでなく、カーボンナノチューブや BCN クラスタも使用可能であることを示した。

また光触媒  $\text{WO}_3$  の存在下で水素吸蔵合金を共存させて紫外光を照射すると吸蔵水素が安定化され、放出温度が高温にシフトすることを発見した。これは光による水素吸蔵の安定化を意味しており、光による二次電池充電の可能性を示している。

燃料電池研究については小型 SOFC 評価装置がオンハンドとなり各種電解質材料、電極材料を組み合わせた燃料電池の試作および評価が可能となった。電解質としては  $600^\circ\text{C}$  程度での作動を目指して水素イオン導電体を検討したところ、液相法で合成を行った  $\text{Ba}_{0.6}\text{Sr}_{0.4}\text{Zr}_{0.9}\text{Y}_{0.1}\text{O}_3$  系が最も水素イオン導電率が高く、焼結特性も優れていることを明らかにした。また空気極材料については  $\text{LaNi}_{0.6}\text{Fe}_{0.4}\text{O}_3$  に注目し、我々の採用した合成法で作製したものが  $1050^\circ\text{C}$  程度の焼結温度で、表面積が高く気孔率も適度な優れた空気極材料となることを明らかにした。燃料極材料についてはダブルペロブスカイトである  $\text{Sr}_2\text{FeWO}_6$  の作製に成功し、高温・還元下で本物質の安定性が高く有望であるとの見通しを得た。今後、これらの材料を用いて燃料電池セルの試作を実施し、 $600^\circ\text{C}$  程度で作動する高強度燃料電池の実現を目指す。

### 3. 平成 23 年度の班としての活動

インバースオパール電極の粒径に依存した入射単色光光電変換効率測定は現東工大・松下祥子と文理学部・橋本拓也との共同研究であり、本成果は J. New Mat. Electr. Sys. に掲載される予定である。

またバクテリアと水素吸蔵合金の組み合わせによる水素増産については理工学部・浅田泰男と西宮伸幸の共同研究の成果であり、特許共同出願を行った。

## 医療班

### 医療班構成メンバー

総合科学研究科生命科学：福田昇. 医学部癌遺伝学：齋藤孝輔、五十嵐潤、藤原恭子、相馬正義. 医学部放射線科：阿部修、石橋直也. 医学部泌尿器科：高橋悟. 医学部小児外科：越永従道、植草省太. 理工学部：渡部隆義. 生物資源科学部応用生物化学科：舩廣善和、生物資源科学部動物資源科学科：加野浩一郎. 薬学部臨床薬物動態学：松本宜明、青山隆彦. 千葉県癌研究センター：永瀬浩喜

### 1. 平成 23 年度の医療班研究の進捗と成果

- 1) X 線を用いた光線力学療法のための化合物合成 (放射線科阿部、石橋、癌遺伝藤原、千葉癌永瀬)：光線力学療法 (PDT) や放射線増患効果を利用した Photon Activation Therapy (PAT)による新たながん治療法の開発を試み、この化合物にある特殊な条件の放射線を照射することで、腫瘍細胞死を誘導できることを確認した。
- 2) 小児癌に対する新規抗癌 PI ポリアミド開発 (小児外科越永、植草)：ヒト BWS 線維芽細胞株 (BWS6, BWS9) に対して、LIT1 遺伝子プロモーター領域にの CAAT box に結合するよう作成した PI ポリアミド (h-CCAAT1, h-CCAAT3) を投与し p57<sup>KIP2</sup> 遺伝子の発現抑制を確認した。
- 3) TGF-β1PI ポリアミドのリード決定、マーモセット前臨床試験 (総合科学福田、癌遺伝五十嵐)：GB1105 がヒト線維芽細胞では最も強い効果を認めた。実験動物中央研究所とマーモセット実験施設として契約行い、マーモセット由来線維芽細胞におけるヒト TGF-β1 に対する PI ポリアミドの効果を検討した。
- 4) Sutablon と PI ポリアミドによる iPS 細胞誘導 (総合科学福田、癌遺伝齋藤、生物資源舩廣)：レトロウイルスベクターを用いたヒト iPS 細胞誘導時に初期化因子とともに、もしくはフィーダー細胞にリシードした時に TGF-β1 阻害剤、TGF-β1 特異的 PI ポリアミド、Apigenin をそれぞれを用いた時の iPS 細胞の誘導効率を検討した。
- 5) 多能性前駆細胞 DFAT 移植による乳癌発症モデルマウスの作製 (生物資源加野)：乳腺上皮細胞へ転換する DFAT-GFP に癌原遺伝子を導入し、その発現をコンディショナルに調節することによって、より自然な乳癌の発生および進行を誘導可能な新規の乳癌発症モデルマウスの開発を行った。
- 6) PI ポリアミドとヒストン脱アセチル化酵素阻害剤による癌治療開発 (千葉癌永瀬)：配列特異的 DNA 二重螺旋認識化合物とヒストン脱アセチル化酵素阻害剤 SAHA との複合化合物を合成し、ある特異性を持ってゲノム上の特定の部位のヒストンアセチル化を誘導することに成功した。
- 7) 環状 PI ポリアミドの固相合成 (理工渡部)：環状 PI ポリアミドを通常のアミノ酸であるグルタミン酸を用いることで固相合成法により簡便に合成する方法を見出した。
- 8) 光線力学治療化合物の薬物体内動態/薬効解析 (薬学部松本、青山)：腫瘍親和性および放射線増感作用を期待し大月班により合成された新規化合物 CT101019a の HPLC による血漿中濃度測定系を確立し、ラットにおける体内動態を検討した。

### 2. 平成 23 年度の医療班としての活動

- 1) 毎週 1 回 N.研究プロジェクト癌遺伝分野のミーティング
- 2) 8月3日工学部私立大学戦略的研究基盤形成支援事業報告会で「ケミカルバイオロジーに基づく PI ポリアミドのイノベーション -創薬開発を目指して-」で N.研究プロジェクト医療班成果を報告
- 3) 9月22日に医学部 N.研究プロジェクト合同ミーティング (癌遺伝、放射線科、泌尿器科、小児外科) を開催、現在の研究プロジェクト進捗内容、平成 24 年度以降の研究計画を話し合った
- 4) 12月17日 N.研究プロジェクト医療班成果を第 7 回日本大学先端バイオフィオーラムで報告
- 5) PI ポリアミドの軟膏化の為、医学部附属板橋病院薬剤部製剤室との共同研究合意
- 6) 実験動物中央研究所とマーモセット実験施設として合意

## 超分子・自己組織班

伊掛浩輝<sup>1)</sup>, 伊藤彰義<sup>2)</sup>, 大月穰<sup>1)</sup>, 塚本新<sup>2)</sup>, 松下祥子<sup>3)</sup>

<sup>1)</sup> 理工学部 物質応用化学科, <sup>2)</sup> 理工学部 電子情報工学科,

<sup>3)</sup> 東京工業大学大学院理工学研究科 材料工学専攻

### 1. 平成 23 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 23 年度計画>

高配列化、配列領域拡大 ( $> \mu\text{m}$  四方) を重点課題とし、ナノ構造テンプレート形成手法/条件の改善を行う。

##### <平成 23 年度の進捗と成果>

ドットピッチ $\sim 8\text{nm}$  (5Tdot/inch<sup>2</sup> 相当) で、連続した規則配列領域の面積約  $1 \mu\text{m}^2$  を有するシリカナノ構造基板の作成を達成した。主として、トリブロックコポリマー分子量の低減および、前駆体溶液作成プロセスの改良による。

#### ・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. 新規ペリレン誘導体による色素増感太陽電池
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 23 年度の研究概略>

プラズモニクスデバイスを目指した微粒子自己集積構造体のエッチング加工および評価

##### <平成 23 年度の進捗と成果>

- ・自己集積によって  $\text{SiO}_2$  微粒子の 2 次元配列を作製した
- ・熱処理により配列した粒子間に架橋を形成した
- ・粒子配列に HFaq エッチングを施し突起構造を有する微細構造体を作製した
- ・構造の変化にともなう表面プラズモン共鳴の吸光ピークシフトを確認した

#### ・伊掛グループ

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た。本年度は、PLA のナノ構造を制御する上で、電場誘起、および磁場印加による PLA 結晶配向化を試みた。

1. キラリティーを持つポリ-L-乳酸の光歪応答性薄膜の作製
2. 電場誘起によるポリ-L-乳酸分子鎖の配向制御
3. 強磁場中におけるポリ-L-乳酸フィルムの結晶配向制御

## 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, 十代健

## 1. 平成 23 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、光学ナノ素子と生体物質の結合を十代が担当し、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 23 年度の進捗と成果

鈴木はニッケル・鉄・銅を直径 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、成長の機構を明らかにすると同時に、高密度化に成功した。TiO<sub>2</sub>に La と Sr・Ba・Ca 等をドーピングし可視光での水分解反応による水素発生と水素発生効率を改善し、軽量で安価な高分子フィルムの上にレーザ誘起前方転写 (LIFT; Laser Induced Forward Transfer) 法で成膜することに成功した。高野と共同で超伝導材料 LaOFeAs を成膜した。低温のフレッシュプラズマジェットを用いて物質応用化学科の伊掛先生と高分子の配向制御に関する研究を、歯学部：関・中田・紙本・廣瀬・升谷先生との共同研究で歯周病細菌の殺菌に関する研究を開始した。

高野は Sr<sub>1-x</sub>R<sub>x</sub>FeAsF (R=La, Pr, Nd, Sm)の合成に成功した。格子定数の R 依存性は R=Pr だけが著しく異なり、Pr が +3 価でない可能性がある。超伝導転移温度も他の R と異なる。また、ほぼ単相の SrFeAsF<sub>1-x</sub>作製に成功した。電気抵抗率の温度依存性を  $\rho(T) = \rho_0 + AT^n$  で解析したところ、他の超伝導体とは異なり、 $x=0.25$  で  $n=1.08$  であったが超伝導を示さなかった。さらに、LaFe<sub>1-y</sub>Zn<sub>y</sub>AsO の作製を行い、 $y \leq 0.2$  で単相の試料を得た。今後は F 置換を行うことにより、超伝導特性を明らかにする。

浅井は水素吸蔵合金膜生成のための複合材料中心電極を持った同軸ガン型製膜装置の開発を終え、製膜実験を開始した。併せて、プラズマ性能を評価するための分光計測システムを開発、運転条件の最適化実験を行っている。また、次世代リソグラフィで要求される極端紫外光源 (~13-14nm) として、プラズモイド衝突加熱による手法を開発、性能評価のための真空紫外分光システムを立ち上げた。

岩田は巨大電気磁気効果発現のための強磁性/反強磁性積層膜において、反強磁性層 Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 薄膜は (0001)配向膜では双晶を含み、(1102)配向膜では双晶は含まず単結晶が成長していることが、X 線逆格子マップから明らかにした。また、ペッチーニ法によって作製した超高密度ターゲットを用いることによって、堆積量を LaFeO<sub>3</sub>(LFO)、CaFeO<sub>x</sub>(CFO)でそれぞれ所望の 1.8%、0.48%の制度で制御できた。LFO においては 133units の成膜終了時まで RHEED 振動を確認できた。[5-units BiFeO<sub>3</sub>/ 7-units CaFeO<sub>x</sub>]×14 人工超格子においては、LFO を堆積速度のキャリブレーションとして用いることによって、BFO では約 6%、CFO では 0.9%以内で各超格子膜厚を制御できた。

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。量子ドットの THz 帯プラズマ励起は量子化抵抗を持つ閉じ込めポテンシャルにより定義されるが、このポテンシャル形状が 2 次元電子系上の熱揺らぎによるトンネル効果を抑制しダークカウントの低下に大きく寄与する事を示した。この時のプラズマ励起頻度がトンネルレートより大きい場合、励起エネルギーは量子ドット中の電子温度の上昇に寄与しドットは熱浴として働く事を示唆することを示した。

望月・吉田 (研究協力者) 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、多くの金属酸化物のナノ粒子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光還元を基礎とした有効利用や吸着・脱離の光制御に応用できる可能性

がある。

茶園・東條はイメージングの手法を用いて、生体分子モーターの再構成運動アッセイ系で ATP 分解活性をイメージングすることに成功し、また、走査型電子顕微鏡で生きたままの細胞をナノメートルオーダーの空間分解能で観察する技術開発の研究で成果を得た。

十代はナノ物質と生体物質の融合を図ることを目標とし、生体内で多くみられる螺旋物質をナノ工学による自己組織化で得ることに挑戦している。銀トリルアセチリド分子がナノ螺旋構造へと結晶成長することを見出した。成長機構を詳細に分析することで、ナノ物質と生体内物質の新たな融合手法開拓に取り組んでいる。

### 3. 平成 23 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 23 年度計画

- 1) 量子情報理論の基礎的な問題であるエンタングルメントの本質の解明.
- 2) 強相関ヘテロ界面の電子構造の解明. 前年までに行った強結合モデル-量子多体計算に基づく強相関系の界面・ヘテロ構造の電子構造の研究を第一原理計算に拡張し, 実際に興味をもたれている実験系の解析を行う.
- 3) 共役フェルミ孔の解析による原子におけるフント則の起源の解明.
- 4) 光直接記録に向けたプラズモンアンテナの設計.
- 5) 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.
- 6) 欠陥構造を設けたフォトニック結晶の光閉じ込め作用.
- 7) マックスウェル-シュレディンガー方程式の混合数値解析法の開発.

## 2. 平成 23 年度の進捗と成果

- 1) 近年話題となっている「エンタングルしていないが量子力学の特性を持つ系」について考察を行い, その成果について以下の論文を投稿中:
  1. K. Fujikawa, "Quantum discord and noncontextual hidden variables models", submitted.
  2. K. Fujikawa, "Does CHSH inequality test the models of local hidden variables in quantum mechanics?", submitted.
- 2) (i) 金属上に吸着したモット絶縁体薄膜の電気伝導度をクラスター動的平均場理論により調べた. その結果, 吸着原子層は金属であるが有限の電気抵抗を持ち, 温度を下げると, 電気抵抗が増大することが示された. この結果は以下の論文に掲載された:
 

H. Ishida, A. Liebsch, "First-order metal-to-metal phase transition and non-Fermi liquid behavior in a two-dimensional Mott insulating layer adsorbed on a metal substrate", *Physical Review B* 2012, Vol.85 (in press) 1-14.
- (ii) 金属電極を架橋する単一原子鎖の電気伝導度を, 原子鎖上の電子相関の効果を厳密に取り入れて計算した. その結果, 強電子相関の効果によって, 原子鎖の電気伝導度が密度汎関数法など一体近似の計算値よりも大幅に減少する場合があることが示された.
- 3) He および He 様原子において, 最近提案した「共役フェルミ孔」に着目した内部波動関数の解析を行った. その結果, この共役フェルミ孔の存在によって, 同じスピンを持つ一重項は三重項状態よりも波動関数が空間的に広がり, その結果エネルギーが増加すること, すなわち, フントの規則が成り立つことが示された.
- 4) 局所的な円偏光を高効率に生成できるプラズモニックアンテナと多数の粒子で構成される記録媒体中の円偏光度および電界強度を検討した. その結果, このアンテナに直線偏光を入射した場合, アンテナ中央部の粒子にのみ局所的な円偏光を生成でき, 電界強度は近傍の粒子に比べ 2 倍程度高くなることを明らかにした.
- 5) (i) 積分方程式法に基づく電磁界時間応答解析  
複素周波数領域の積分方程式法に数値逆ラプラス変換法を併用した高速・高精度な電磁界時間応答解析法を開発した. 積分方程式法に多重レベルの高速多重極展開法を適用することで, 従来法に比べて 5 倍程度の高速化が可能となる. 本手法は並列計算に大変優れており, 使用する計算機の台数に関わらず並列化効率をほぼ 100 パーセントとなることを明らかにした.
- (ii) 高精度な電磁波散乱界解析  
電磁波の規範問題に対する参照解を求めるため, 計算機精度と同程度に解析可能なモード整合法を開発している. 誘電体球の散乱問題に対して, 計算機精度の範囲で厳密界と数値結果が一致することを確認し, 使用するモード数に対する計算精度の予測法を提案した.
- 6) フォトニック結晶中空導波路において, 導波路外に欠陥構造を設け, この欠陥構造内に電磁エネルギー

ギーを多く取り込めるための制御用として誘電体を導波内に設けることを提案した。導波路内の電磁界分布を解析することにより、制御用としての最適誘電体形状を入射偏波も考慮して検討した。その結果、ひし形形状がエネルギー閉じ込め構造として最適であることが示された。この研究成果は以下の論文で発表された:

R. Ozaki and T. Yamasaki, "Propagation Characteristics of Dielectric Waveguides with Arbitrary Inhomogeneous Media along the Middle Layer", IEICE TRANSACTIONS on Electronics, Vol.E95-C, No.1, pp.53-62 (2012).

- 7) 光と物質の相互作用をより詳細に検討するため、FDTD 法に基づくマックスウェル-シュレディンガー混合数値解析法を提案した。長さゲージを考慮したアルゴリズムを用いることで、従来法に比べ 2 倍程度の高速化を実現した。

### 3. 平成 23 年度の班としての活動

毎月 1 回の頻度で大貫准教授の研究室をベースとして、情報班の中川教授および芦澤助手と合同で勉強会を開催した。