

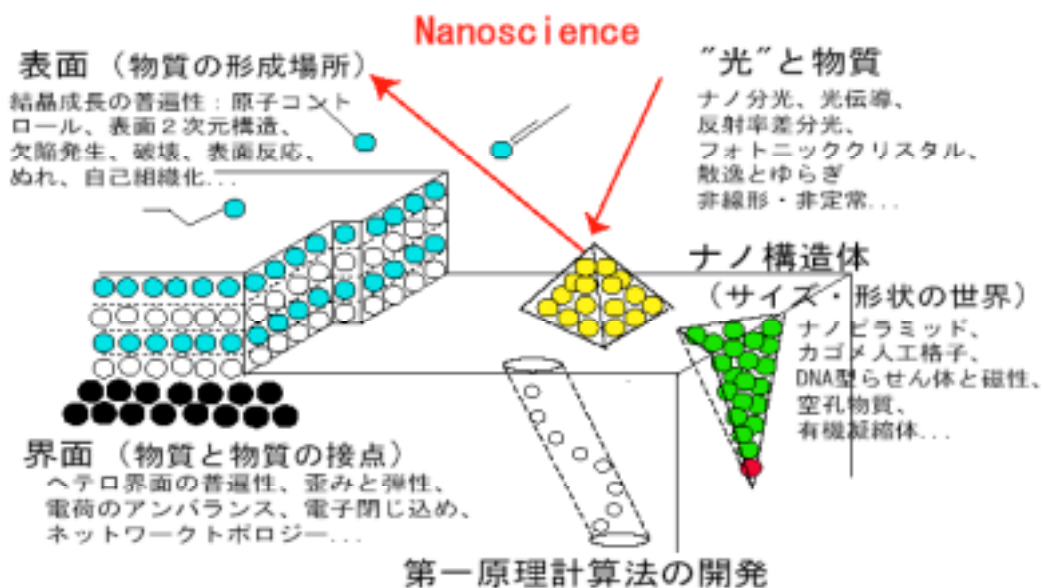
## “ ナノサイエンス ” 物性理論研究室の簡単な紹介

近年、実験技術が進むにつれ、ナノスケール ( $10^{-10} \sim 10^{-8} \text{m}$ ) という非常に小さな世界での現象が観察できるようになり、物が作られ (壊され) ていく瞬間の非平衡過程である結晶成長や結晶破壊、非一様で複雑構造を持つ生物の形態進化や機能の仕組みなどを解明する鍵が、このスケールの世界に潜んでいることがわかってきました。ナノスケールの世界では、形態やサイズといった非一様性 (非局所性) が系の性質を決める新たな自由度となります。また、系が小さいために単純な統計平均ができなく、現象には特異な揺らぎに起因した非平衡性や非線形性がダイナミカルかつ量子力学的に顕著に現れてきます。このナノスケールの世界に潜む法則や仕組みを物理的な観点から捉えていこうとする分野がナノサイエンスです。こうした非局所性、非平衡性、非線形性が本質的に重要となっている量子系の理解は、全くと言って良いほどわからないことが多く、その探求はまさに今世紀の科学のフロンティアといえます。

当研究室では、数式的手法や計算機科学に基づく数値的方法を用いて、このナノスケールの世界における様々な物理現象の仕組みや法則を明らかにしたり、今まで自然界に存在しない新物質の作成・性質を理論的に予言する研究を行い、この新しい分野にチャレンジしています。

当研究室の最近の主なテーマを図に示します。当研究室の十八番は次のような点です：

- (1) **界面の物理**：物質と物質の境界である界面では、それぞれの物質固有の性質が破れて、全く新しい原子構造や電子状態が発生します。界面における電子エネルギーの不連続性とその起源の解明、歪んだ界面・不整電荷の存在する界面・原子ネットワークがトポロジカルに破れた界面などの新界面の提案とその電子構造がもつ普遍性と個別性の解明などを、半導体・金属・絶縁体・有機物質などの具体的なシステムを扱いながら、国内外で先端の界面理論研究を行っています。



- (2) **表面の物理**：表面は、物質の形成・破壊の起こる場所であると共に、外場との相互作用が行われる先端の場です。表面 2 次元再構成構造の解明、結晶成長時における欠陥発生メカニズムの提案、異原子の表面吸着・拡散・脱離機構の解明、混晶化メカニズムの予言などのユニークな研究を行ってきました。現在、物質の結晶成長・破壊の理論、物質や生物の形や機能発生の理論も創っています。
- (3) **光と物質の相互作用**：光は、物質の量子力学的な情報を引き出すことに優れたプローブです。様々な系における線形吸収スペクトルを解明すると共に、2 光子吸収スペクトルを持つ対称性の理論、表面界面からの非局所応答理論、フォトニックバンドの磁気光学理論を創ってきました。また、表面ぬれ層の構造や酸化現象に伴うスペクトルのダイナミカルな変化を実験に先駆けて予言しました。現在、ナノ物体の発光・発色の理論を目指しています。
- (4) **ナノ構造体物理**：人工量子構造は物性物理学の新しい場を提供します。例えば、カゴメ量子細線系にはフラットバンドが現れ、励起子が異常に大きな束縛エネルギーを持つ等の多体効果が顕著になります。また、原子空孔が DNA の様に螺旋状に配列した空孔半導体ではカイラリティーが発生する、有機分子固体はネットワークポロジーにより発光波長が自在に変化する、原子空孔はクーロン力のバランスにより 0 ~ 3 次元的に配列する、などの興味深い現象を予言しています。現在、ナノ伝導の履歴現象の研究も行っています。
- (5) **第一原理計算法の開発**：物理基本定数 ( $h, e$  etc) だけを入力し、物質の結晶構造や様々な性質を予言できる究極の量子力学的方法を第一原理計算と言います。当研究室では、密度汎関数理論に基づく全エネルギー計算を用いた原子ダイナミクスの研究の他に、線形・非線形応答計算法、表面非局所応答計算法などを開発してきました。後 2 つは、当研究室がはじめて生み出した計算手法です。現在、非平衡性を入れた第一原理計算理論を目指しています。

**当研究室の研究の参考となる文献：**

「表面・界面の電子状態」丸善，1997，4 章 p.37.

「反射率差分光は何を見ているのか？」固体物理，2003，38 巻 p.201. など

研究室では、週 3，4 回、物理学の基本的問題の勉強から、最先端の実験のレビューや理論の検討などのゼミが開かれています。大学院生は、それぞれの希望に添ったテーマを相談しながら決めて、一人一人が独立に様々な観点からの研究を行っています。また、内外の実験・理論研究室等と合同でセミナーや共同研究も行っています。H15 年度より千葉大学は物理分野「有機ナノデバイスフロンティア」で 21COE に選ばれましたが、当研究室はこのプロジェクトを理論面で支えています。また現在、科学技術振興機構の戦略的創造研究推進事業 (JST-CREST) 等に参加しています。

当研究室のモットーは「独立心を持って、楽しく!」です。春&秋には合宿を行ったり、レクリエーションにテニスやサッカーなどをしています。みんな明るく親切です。計算 WS6 台、パラレルコンピュータ使用等、豊富な計算機環境で研究が進められています。さらに詳しいことは、気軽にメールで問い合わせたり、研究室を訪問してください。