

研究概要

数物科学系

数学コース

代数系研究グループ

菅野孝史教授, 若槻聡准教授, 早川貴之講師

本グループの各人の研究概要は以下の通りである。

1. 代数群上の保型形式・保型L関数について研究している。直交群上の正則保型形式のL関数の関数等式を (Fourier 係数に関する技術的仮定を取り除いて) 一般的に証明すること, 小さなサイズの直交群やユニタリ群の保型形式環を具体的に構成すること等に取り組んでいる。そのためには, 分岐素点でのヘッケ環の考察, 次元公式の計算, テータリフトの改良も必要となる。また, ヤコビ形式をはじめとする非簡約代数群上の保型形式についても研究を進めている。
2. 保型形式と跡公式と概均質ゼータ関数について主

に研究している。特に対称空間の算術商上の調和解析である跡公式の幾何サイドを明示的に記述することで, 2 次の正則ジーゲル保型形式の空間の次元やその空間上のヘッケ作用素の跡などを具体的に調べている。また概均質ゼータ関数の明示的公式を跡公式の研究に応用している。そして, その応用の観点から概均質ゼータ関数を持つべき新たな性質を探求している。

3. 3次元代数多様体の双有理幾何の関する明示的な研究を行う。具体的には, 3次元代数多様体の双有理射のうちで基本的なものである因子収縮射の記述を, 3次元端末特異点を定義する方程式を与えて, 重み付きのプロープを施すことによって実現する。さらにそれらを用いてより一般的な有理写像を基本的なものに分解する。

幾何系研究グループ

加須榮篤教授, 牛島顕准教授, 川上裕准教授,
岩瀬順一助教,
中川泰宏准教授 (平成24年9月30日退職)

本グループの各人の研究概要は以下の通りである。

1. 有限ネットワークの収束理論, および無限ネットワークのディリクレ空間と漸近幾何の研究
有限ネットワークの新たな収束理論の構築とその展開として, 有効抵抗を用いたグロモフの意味での有限ネットワーク列の収束の基本的性質および極限空間の解析を行う。また, 無限ネットワークのp-ディリクレエネルギー有限関数空間を研究対象とし, 指数pを動かすことによって, 関数空間と漸近幾何 (大きなスケールでの視点からの距離空間の研究) の関わりを, 主に擬単射を通して研究する。
2. 低次元位相幾何学や函数論において, 双曲幾何学

に關係する話題を研究している。具体的には, 双曲構造を許容する低次元多様体に対し, その標準的分割の存在証明や具体的な構成と, この分割を用いた多様体の性質の研究や, 曲面の標準的分割の構成を用いたタイヒミュラー空間の研究を進めている。

3. 3次元空間形内の曲面の大域的性質をガウス写像の値分布の観点から研究を行っている。具体的には, 石鹸膜の数学的モデルである極小曲面やある種の特異点を許容する曲面のクラスにあたる波面のガウス写像の除外値数の評価や一意性定理といった函数論的性質の幾何学的背景とその応用について調べている。

4. 4次元多様体の例として, pochette手術を, 学習院大学理学部の松本幸夫氏と, 研究している。pochetteとは, $S^1 \times D^3$ と $D^2 \times S^2$ との境界連結和である。それを4次元多様体から切り取り, 境界の同相写像で貼り戻して得られる多様体の研究である。適当な分量の結果は出ており, いまは論文にまとめる段階になっている。

解析系研究グループ

兄玉秋雄教授, 伊藤秀一教授, 高信敏教授,
大塚浩史教授, 中村健一准教授,
甲斐千舟助教 (平成25年3月31日退職)

本グループの各人の研究概要は以下の通りである。

1. 複素多様体 M に対して, $\text{Aut}(M)$ を M の正則自己同型全体のなす位相変換群とする。このとき, この10年ほど次の基本問題: 「2つの n 次元連結複素多様体 M, N に対して, それらの正則自己同型群 $\text{Aut}(M)$ と $\text{Aut}(N)$ が位相群として同型ならば, M と N は双正則同値であるか?」を研究している。
2. 天体力学の研究に源流をもつ可積分系 (求積可能な系) の摂動問題は, 長い研究の歴史をもつと同時に, 現在もお力学系理論の中心的テーマの1つになっている。このような可積分系とその摂動問題を数学的観点から追求することに興味があり, 現在は通常よりも多くの保存量をもつ超可積分系と呼ばれる系の特異点における標準形と, その摂動に対する安定・不安定な解の挙動の数理的研究を行っている。
3. 数論と確率論に関わる極限定理が研究対象であ

る。リーマンゼータ関数について Bohr-Jessen の極限定理というのがある。これは古典的な数論の結果であるが, 確率論における極限定理と解することもでき, 面白いことがいくつか考えられ, それについて計算している。もう1つは, 舞台を有理整数環をアデール化した有限アデール環にし, その上のシフトについての極限定理を計算している。

4. 多体系の平衡状態を記述すると考えられる非線形楕円型方程式の解集合の構造の解析とその応用に取り組んでいる。特に, 系を特徴付けるパラメータ (温度など) の変化に応じた解の特徴的な振る舞い (爆発や消滅など) や平衡状態へ緩和していく過程の解析, またこれらの結果から数学的な問題を取り出して発展させることに取り組んでいる。
5. 反応拡散系などの非線形拡散方程式系の定性的理論, 特に解の安定性や漸近挙動に関する研究を行っている。最近では, 反応拡散系の特異極限として得られる界面運動, 非一様な媒質中を伝播する進行波の速度およびその均質化極限を主要なテーマとし, 数理解析的手法, 漸近解析的手法, 数値シミュレーションを併用した解析を行っている。

物理学コース

超低温物理学グループ

松本宏一教授, 阿部聡准教授

本研究グループは超低温において現れる特異な物理現象の研究を目的としている。 ^3He - ^4He 希釈冷凍機と超伝導磁石による銅一段核断熱消磁冷却装置を始めとして, ^3He 冷凍機, ^4He 冷凍機, 17Tの強磁場を発生する超伝導磁石等を用い, 1mK以下の超低温から室温近傍までの広い温度範囲における研究を行っている。主な研究テーマを以下に示す。

1. 超低温における量子流体・固体の研究
 - (1) エアロジェル中の超流動 ^3He の量子相転移
約2mKの超低温で起こる液体 ^3He の超流動はp波超流動として研究されてきたが, 希薄なシリカであるエアロジェル中では, その不純物効果で転移温度や超流動密度が抑制される。我々は超音波を使った実験で, この系で起こる量子相転移や超流動相の構造を明らかにしている。
 - (2) 制限空間中の ^4He の超流動・結晶化の研究
エアロジェルやシリカゲル中の ^4He が制限空間・次元の効果により起こす, 超流動や結晶成長における特異な現象を超音波を用いた第1音波, 第2音波などによ

り研究している。

2. 超低温における電子系・核磁性の研究

(1) 重い電子系物質の量子相転移

重い電子系物質は近藤効果と磁気相互作用の競合により量子相転移を起こす。高感度の磁化・帯磁率測定や熱膨張・磁歪測定装置の開発を行っている。例えば CeRu_2Si_2 について, 量子臨界現象の詳細を明らかにし, 新しい量子臨界点の探索などを行っている。

(2) 核磁性の研究

希土類Pr化合物は増強核磁性を示す。磁化・帯磁率測定などを行って, $\text{Pr}_3\text{Pd}_{20}\text{Ge}_6$, PrMg_3 の電気四極子近藤効果や PrPb_3 で起こる電気四極子秩序下における核磁気秩序などを研究している。

3. 磁気冷凍に関する研究

磁性体に加えた磁場変化で, 磁性体のエントロピーを制御できる。この磁気熱量効果を利用して, 小型高効率期待される磁気冷凍を研究している。1Kレベルの低温から室温付近までの広い温度範囲でガーネットなどの酸化物や金属間化合物など各種磁性体について磁化や磁場中比熱測定により, 磁気熱量効果の研究と磁性体の開発を進めている。また, これら材料を用いた水素液化磁気冷凍装置の開発も行っている。

量子物性学グループ

藤下豪司教授, 金子浩助教

本グループでは、導体の輸送現象や比熱などの測定、X線を用いた種々の構造とその変化の研究を行っている。主な研究テーマは以下の通りである。

1. 強相関電気伝導体などの輸送現象の研究

低NbドープSrTiO₃の電気抵抗・比熱・熱電能を測定した。電気抵抗は温度の2乗に比例した温度変化を示すが、その比例定数と電子比熱との比が、重い電子系などでよく知られたKadowaki-Woods則から大きくずれることを見いだした。

2. X線を用いた研究

(1) X線回折による超伝導体の自発歪みの研究

粉末X線回折により、銅酸化物高温超伝導体YBa₂Cu₃O_{6.8}および鉄ヒ素系超伝導体NdFeAsO_{0.89}F_{0.11}とSr₂VFeAsO₃の超伝導転移に伴うごくわずかな格子定数変化の検出に成功し、それが超伝導秩序変数と結合した自発歪みとして表せることを示した。

(2) 鉄系超伝導体の超伝導と量子臨界現象の研究

鉄系超伝導体SmFe_{1-x}Co_xAsOの帯磁率と粉末X線回折測定を行い、構造相転移温度および反強磁性転移

温度の相図を明らかにし、超伝導転移温度が最大に近いCo濃度付近に、濃度による構造相転移と反強磁性転移に量子臨界点がある可能性を示した。

(3) 超低温X線回折による重い電子系の研究

反強磁性的量子臨界点に非常に近いと思われる重い電子系Ce(Ru_{0.97}Rh_{0.03})₂Si₂は交流帯磁率により約0.3Kで小さなピークが見いだされていたが、X線回折によりその温度付近で結晶が歪むことを示した。

(4) 3次元X線トポグラフィによる結晶欠陥の観察

多数の断層トポグラフィをPC上で再構成して結晶欠陥の3次元分布を求める手法を、放射光X線を用いて天然水晶に適用し、刃状転移という欠陥の存在を見つけその方位を決定した。人工ダイヤモンドでは積層欠陥と思われる面状欠陥の存在を見いだした。

(5) Si基板上にナノワイヤーから成長させたGaAs薄膜の評価

ナノワイヤーを利用して作製された薄膜を用いることで、Si基盤とGaAs薄膜界面に発生する欠陥が抑制されているかを、放射光を用いたX線トポグラフィ法により評価し、不整合転位が存在しないことを確認した。また、歪緩和機構を調べるため逆格子マップの測定も行い、界面に不整合転位は存在せず、ナノワイヤー内で弾性的に歪が緩和されることを確認した。

ナノ物理学研究室

新井豊子教授, 岡林則夫助教

本研究室では、固体の表面・界面を研究対象とし、固体内部の連続性が途切れた表面の原子尺度の構造再構成、電子状態の解析や、表面で起こる個々の原子・分子の反応・結合過程など、ナノスケールで起こる量子力学的物理現象を実験的に研究している。そのためには、新たな実験装置・手法の開拓も行う。具体的には、超高真空走査型トンネル顕微鏡／非接触原子間力顕微鏡(UHV STM／ncAFM)の独自開発、大気中・液中でも原子分解能を達成する周波数変調(FM)AFM, ncAFMを活用したナノ力学的分光手法を開発してきた。主な研究テーマは以下の通りである。

1. 走査型プローブ顕微鏡(SPM)の開発研究

(1) 極低温UHV STM／ncAFMの開発

4K付近の極低温環境で駆動するUHV STM／ncAFMの開発している。室温駆動で、原子分解能が確認されている自主開発のSTM／ncAFMを冷凍機を備えたUHVチャンバーに設置した。長時間(ほぼ1日)に渡る、連続的なSTM／ncAFM測定の間、

温度変動がなく、振動も抑制された冷凍技術の開発を行っている。

(2) 大気中・液中で駆動するFM-AFMの開発

超高真空環境で、培ってきたncAFMの周波数変調法による高感度力計測技術を大気中・液中で駆動するAFMに応用・展開し、大気中・液中でも原子分解能で、表面観察可能なFM-AFMを開発した。

(3) 水晶振動子力センサーの開発

音叉型水晶振動子を用いて、高感度に探針試料間に働く相互作用力を検出し、かつ、電流検出が可能な、力センサーを開発している。これをUHV STM／ncAFMに組み込み、原子分解能で、Si表面の表面電子物性を評価している。

2. 表面電子状態・力学的物性研究

UHV STM／ncAFMを用いて、2物体間の局所領域に流れるトンネル電流と結合力との関係を計測し、それらの起源となる電子状態を明らかにする。また、量子力学的共鳴に基づく結合力の変化に対するバイアス電圧の依存性を検出し、化学結合に寄与する表面電子準位を解析する。さらに、共有結合性物質の1から数原子列から成るポイントコンタクトにおける量子化コンダクタンスについて研究している。

実験物理学基礎グループ

鎌田啓一教授

本研究室では、電子ビームを用いた、発振管（電子管）の研究を行っている。

1. 大強度自由電子メーザーの狭帯域化の研究

エネルギー0.5~0.8MeV, 電流10kA, パルス巾10~200nsの大強度ビーム源を用いた実験として。自由電子メーザー（FEM）の大強度テラヘルツ光源化（MW級の高周波化）を遂行している。研究課題は以下の二点である。(1) 新たに提案したハイブリッド・ブラッグ共鳴器を用いた、発振周波数選択性の脆弱性の改善。(2) 円筒型装置の高周波化に伴う相互作用領域縮小による出力減少に対して、平板型電子ビーム／複数電子ビームを用いた相互作用面積の増大による出力増

強。

2. 準定常／出力1Wテラヘルツ光源の開発

テラヘルツ領域物理学研究室と共同で行っている。現在のテラヘルツ光源は出力mW以下である。電子管方式により、小型で、準定常1W級のテラヘルツ光源を開発している。

3. その他

課題研究では高度な知識とその実践が必要とされ、全体を良く把握する事はかなり難しい。本研究室では、課題研究遂行と並行して学生・院生に理科教育を通じた、学外の社会貢献活動を義務づけている。比較的理解や把握のしやすい内容を使った活動を、自ら企画・立案・実行する事は、主体的な研究遂行の演習となり、課題研究に取り組む態度に、主体性がより喚起されている。こうした活動を通して、大学における物理教育を実験物理学の視点から見直している。

プラズマ物理学研究室

安藤利得准教授

純粋な基礎研究に向けて、多極磁場閉じ込め装置（CALM2）の整備を進めると共に、宇宙科学研究所との共同研究において、新型大口径電子ビーム源の開発、および、将来に向けて、極カusp模擬実験（JAXA-CUSP実験）の準備研究と計画の立ち上げを行なった。

1. 多極磁場閉じ込め装置CALM2の実験

電子ビームがプラズマ中を伝搬する状況では、相互作用ため各種の波動が発生する。そして、その波が系の特性を変える。系の理解のためには波を含めて詳細

を調べることが必要である。粒子のことから測定器の開発を行なった。

2. 新型大口径電子ビーム源の開発

宇宙で観測されている波動の解明をめざして3次元空間で波動の挙動を実験的に調べる必要があり、新型大口径電子ビーム源の開発を行なった。

3. JAXA-CUSP実験

平成24年度よりJAXAとの共同研究において新たにカusp実験を立ち上げている。これは未解明な部分が多い宇宙の極カuspの模擬実験を目指すものである。将来的にカuspの電気磁気的な特性を明らかにするとともに粒子の輸送、揺動の物理を研究する予定である。

非線形物理学研究室

佐藤政行准教授

本研究室では、非線形局在励起と呼ばれる局在現象を主に実験的な研究を行っている。主な研究テーマは以下の通りである。

1. MEMS振動子アレイや電気回路格子中の局在現象

微小なMEMS振動子を結合した振動子アレイ中に生成する非線形局在励起について、その基本的な性質から応用まで、研究対象にしている。非線形局在励起には静止モードや走行モードが存在する。今まで、静止モードの生成、移動、消滅などの制御について報告してきた。最近では分岐現象を調べる上で非線形状態での線形応答に興味を持ち、分岐のダイナミクスが線形応答から得られる他のモードの周波数位置との関連で研究できることが分かってきた。

走行モードについては、詳細な速度分布が実験的、またシミュレーションでも得られるようになり、変調

不安定性より生じる複数の走行モードの相互作用でカオスに至る様子が見られた。また、スムーズな走行モードが得られる条件が求められている。

電気回路を用いた格子では、ソリトンを用いた非線形局在励起の場所選択的な生成や消滅に成功している。

2. 固体結晶中の非線形局在励起、遠赤外光源と非線形分光装置の開発

非線形局在励起は固体結晶中にも存在していると考えられている。励起光源が得られやすいマイクロ波領域にて実験が可能な反強磁性体を用いて生成実験を行っていた。固体の試料としては、反強磁性体以外にいろいろな物質が考えられている。例えばNaIなどのアルカリハライド、カーボンナノチューブ、ニオブ酸リチウムやチタン酸ストロンチウムなどの誘電体もその候補である。これら結晶では、格子振動による非線形局在励起が考えられているが、実験的に研究するには光源が不足している。現在、レーザーを用いた光源と電子ビームを用いた光源が考慮されており、それらを用いた非線形分光装置を建設したい。

分子物理学研究室

藤竹正晴准教授

本研究室では、分子またはそのマイクロ溶媒和分子クラスターの分子構造や動的性質の詳細かつ精密な解明を目的として、超音速パルスノズルジェット・フーリエ変換マイクロ波分光法により気相での高分解能分子純回転スペクトルの研究を行っている。主な研究テーマは以下の通りである。

1. 水素結合形成によるペプチド鎖の柔軟性の変化と情報伝達機構に関する研究

タンパク質に代表されるような生体高分子では、エネルギー的には膨大な数の構造が可能であるにもかかわらず、水溶液中で生体活性機能をもつ特定の高次構造のみを形成するといわれている。それには水和や分子内水素結合の形成が重要な役割を果たすといわれており、タンパク質の主骨格であるペプチド鎖の柔軟性への影響も一つの要因として考えられる。そこで、モデル分子である*N*-メチルアセトアミド等のペプチド分子とその水錯体の純回転スペクトルを観測し、ペプチド鎖の柔軟性に対応するペプチド結合両端のメチル基の内部回転ポテンシャル障壁を決定することで、柔軟性の定量的な評価を行った。その結果、内部回転ポテンシャルは水和により大きく変化し、またその値は配位構造の違いによっても大きく異なることを実験的

に明らかにした。更に重水素同位体置換分子種等でもポテンシャルが異なっている事を発見した。高精度の量子化学計算の手法を活用することで、実験で明らかになった種々のペプチド分子単量体やその水錯体の内部回転ポテンシャルの大きさや種々の性質の変化が、どのような要因によって決まっているのかを総合的に解明しようとしている。

2. ミクロ溶媒和クラスターの分子構造と溶質分子の性質の変化に関する研究

乳酸メチルおよびグルコール酸メチルと水とのマイクロ溶媒和クラスターの純回転スペクトルを観測しその錯体構造を決定した。これらには、既存の分子内水素結合に水分子が挿入してより大きなネットワーク構造をつくる挿入型錯体と、分子内水素結合は保持したまま単純に付加する付加型錯体が存在し、それぞれの場合の溶質分子の構造と性質の違いを研究した。これまでに複数の1:1と1:2錯体の観測に成功した。今後、可能な限り多くの種類のアイソマーやより多くの水が結合した錯体の構造を決定して、水の結合数や結合位置および形態により、溶質分子の構造やメチル基内部回転ポテンシャル等がどのように変化するかを詳細に調査していく。更に、水分子内部回転プロトン交換や鏡映異性体間トンネリング運動の観測から水溶液中での水素結合再配列ダイナミクスに関する情報を導き出していく。

生物物理学研究室

安藤敏夫教授, 内橋貴之准教授

当研究室では、タンパク質の動作メカニズムの解明研究を独自の技術を開発して進めている。タンパク質は本質的にダイナミックであると同時に、その構造は機能に密接に関係している。構造はX線結晶構造解析、NMR、電子顕微鏡で調べられるものの、得られる構造は静止構造に限られる。一方、タンパク質の構造の動的变化や動的プロセスは1分子蛍光顕微鏡で調べられるものの、タンパク質分子そのものは観察に現れない。従って、構造と動的振舞いを同時に観察することはできず、間接的なデータから機能メカニズムを推測するしかない。当研究室はこの限界を克服する技術開発とそのタンパク質への応用研究を進めている。主な研究テーマは以下の通りである。

1. 高速AFMの高度化開発研究

タンパク質分子の機能を損なわずにダイナミクスを高解像で可視化可能な高速AFMは既に完成した。この高速AFMをベースに、細胞などの大きなバイオ試料系のダイナミクスをも観察可能な広域・高速スキャナやその振動を抑制する技術などの開発を行ってきた。また、観察中の試料を探針でマニピュレーションし、その結果を素早く観察できるインターラクティブ高速AFMを開発した。更には、試料ステージ走査に代わる探針走査型高速AFMの開発も行ってきた。この探針走査型高速AFMには様々な光学技術が導入

宇宙物理学研究室

藤本龍一准教授, 米徳大輔准教授,
村上敏夫教授 (平成25年3月31日退職)

1. 宇宙物理学研究室では、人工衛星に搭載する観測装置や地上望遠鏡システムを開発し、自らが製作した装置を用いて宇宙観測を行っている。最近では、米徳准教授が担当するグループが開発したガンマ線バースト用偏光観測装置をソーラーセイル「IKAROS」に搭載した。この装置を用いた観測で偏光を捉えることに成功し、宇宙最大の爆発であるガンマ線バーストの発生メカニズムは、相対論的なジェットの中に強い磁場が存在し、シンクロトロン放射で輝いていることを世界で初めて解明している。

2. 将来の衛星プロジェクトに向けた開発を進めている。藤本准教授が担当するグループは、2015年度打ち上げ予定の日本のX線天文衛星ASTRO-Hに搭載される、極低温動作の超精密軟X線分光装置SXSの開発を、JAXA、NASA、国内外の大学・研究機関と協力して進めており、センサを極低温に冷やすために必要となる冷却系の開発・評価を行なっている。また、将来のX線天文衛星への搭載を目指して、超伝導遷移端を温度計として利用したTES型X線マイクロカロリメータと、センサを0.1K以下に冷却するために必要

可能であるため、光ピンセットを導入し、力作用下にあるタンパク質分子の観察実現を目指している。また、超解像蛍光顕微鏡技術を導入し、高速AFMでは可視化できない蛍光性低分子リガンドとそのリガンドと反応するタンパク質の構造動態の同時観察実現を目指している。これらの開発により、従来技術では不可能な観察が可能になり、タンパク質の働く仕組みのより詳細且つ深い理解が進むものと期待している。

2. 生命現象の解明研究

(1) 生体分子の機能解明

分離精製したタンパク質やDNAが溶液中で機能しているときのダイナミックな動作を、高速AFMを用いて高解像撮影する研究を進めている。サブ分子の空間分解能、サブ100msの時間分解で撮影された映像から、従来手法では不可能な詳細理解を得る。既にいくつかの試料系で成功し、我々の独自の手法が有効且つ革新的であることを実証している。実際、生体エネルギー変換に関する全く新しい発見などがもたらされた。この革新的手法を更に様々なタンパク質系に適用する研究を進めている。

(2) 細胞レベルで起こる現象の解明

生きたバクテリアや細胞内オルガネラの表面で起こる分子プロセスを高速AFMで撮影する研究を進めている。また、神経細胞のシナプスで起こる動的現象を高速AFMで撮影することにより、脳で起こる記憶・学習のメカニズムの詳細理解を目指す研究も進めている。

となる断熱消磁冷凍機の研究開発を行なっている。これまでに5.9keVのX線に対して半値全幅で4eVを切る分光性能（半導体検出器より30倍以上優れている）を実現しており、引き続き性能改善を進めている。

3. 宇宙を研究している理学・工学のグループが共同で、50kg級の超小型衛星の開発を利用した教育を展開していく予定である。2018年頃の完成を目指して人工衛星の開発を展開し、米徳准教授が中心となって開発するガンマ線バーストを検出するためのX線撮像検出器を搭載する予定である。

4. 米徳准教授らのグループは、国内外のガンマ線バースト研究者らと共同で初期宇宙を観測するための衛星プロジェクトを立案している。宇宙で最初に誕生した星が発生させるガンマ線バーストを利用して、この宇宙がどのように進化してきたかを解明したいと考えている。2020年頃の打ち上げを目指して搭載機器の基礎開発を行っている。

5. Suzaku衛星やSwift衛星、Fermi衛星等の人工衛星が観測したデータを解析することで、世界中の研究者らと共同して天体物理学や宇宙論を研究している。最近では、ガンマ線バーストを用いて、初期宇宙の暗黒物質や暗黒エネルギーの量を測定するなど、画期的な手法を用いて新しい宇宙物理学の分野を開拓している。

テラヘルツ領域物理学研究室

曾我之泰助教

本研究室では、電子ビームを種としたテラヘルツ光源の開発、および電子プラズマを対象とした基礎実験を行っている。主な研究テーマは以下の通りである。

1. サブミリ波帯後進波発振管の開発

デスクトップサイズで定常発振が可能なテラヘルツ光源として後進波発振管 (BWO) が実用化されているが、高周波化に伴い遅波構造が微細化し、電子ビームと遅波回路の相互作用領域が減少するため、その出力は周波数1THzで数mW程度である。本研究室では、新たに開発した遅波構造の導入と精密な電子ビーム制御技術を駆使することにより、テラヘルツ帯BWOの

高出力化を目指している。周波数60GHz帯のプロトタイプを用いた検証実験では、設計通り60GHz付近の発振が観測された。電磁波出力は電子ビームの品質劣化により制限されることが判明した。現在、100GHz帯BWOの開発を高エネルギー加速器研究機構、浜松ホトニクス株式会社とともに進めている。

2. 電子プラズマを用いた多粒子系緩和過程に関する実験研究

電子のみからなるプラズマを磁場と電場により捕捉することにより、非平衡状態から平衡状態に至るまでの長時間にわたり、荷電粒子の多体系に関する物理現象を時間、追跡することが可能となる。この特長を利用して、流体・渦現象の緩和過程の追跡、核融合発電に使用されるを高強度イオンビーム生成に関する模擬実験を行っている。

理論物理学グループ

青木健一教授、久保治輔教授、末松大二郎教授、
青木真由美助教、武田真滋助教

自然界の最小構成要素である素粒子の世界の物質像と相互作用、運動法則の解明を中心に、理論物理学の研究を幅広く展開している。現在の研究の主要テーマを分野毎にリストする。

1. 統一理論

強・弱・電磁・重力の4つの相互作用の統一理論の構築、フレーバー対称性による質量行列の予言、ニュートリノ物理、ニュートリノ振動を説明する質量とその混合、ヒッグス粒子の現象論、標準模型を超えるヒッグスセクターのモデル構成、超対称性を持つ理論と超対称性粒子の探索

2. 素粒子的宇宙論

暗黒物質を説明する素粒子統一モデル、初期宇宙を中

心とした素粒子的宇宙像の確立、インフレーション模型の構築、暗黒物質の探索

3. 計算機シミュレーション

格子QCDのシミュレーション、新しいモンテカルロシミュレーション法の開発、超対称格子理論の構築、ゲージ理論における赤外固定点構造の探索、高密度QCDのシミュレーション

4. 非摂動くりこみ群

相対論的場の量子論の非摂動的側面の解明、非摂動くりこみ群の理論の構築と適用、カイラル対称性の自発的破れ、高温高密度QCDの相構造、赤外固定点のあるゲージ理論におけるカイラル対称性の自発的破れとその構造

5. 散逸量子系

散逸のある量子力学系の理論構成、長距離相互作用のある1次元統計系の相転移とその臨界摩擦の評価、長距離相互作用を扱う新しいくりこみ群的解析手法の開発、量子力学から古典力学への相転移

計算科学コース

計算数理研究グループ

大浦学教授, 小俣正朗教授, 木村正人教授,
小栗栖修准教授, 小原功任准教授,
シュワドレンカ・カレル准教授,
川越謙一講師, ポジヤール・ノルベルト助教,
伊藤達郎教授 (平成26年 3月31日退職),
山田美枝子教授 (平成26年 3月31日退職),
長山雅晴教授 (平成24年 3月31日退職)

本グループの各人の研究概要は以下の通りである。

1. 代数的符号理論, 不変式論, モジュラー形式の理論が有機的に結びついた部分を代数的組合せ論の立場から研究している。常に持つ研究姿勢は高種数化であり, 大きな目標の一つは, 種数4のモジュラー形式の次数付き環の構造を明らかにすることである。低い重さの部分はかなり様子が分かってきており, そこでは符号や格子が本質的に用いられる。
2. 自然現象や工学・産業に対して数理モデルの数値シミュレーションによる現象の再現と数理モデルの数学解析を通じた現象の機構を理解する研究を行っている。平成23年度~26年度は, 主に多相間の界面運動のモデルや, 亀裂進展モデル, 流体の粒子法シミュレーションの数学基礎理論, クリスタライン法の数学的基礎付けと拡張, Hele-Shaw問題ノ均質化, などの研究を行っている。

計算バイオ研究室

長尾秀実教授, 齋藤大明助教, 川口一朋助教,
アチュブ・ブルコン助教 (平成24年 1月31日退職)

本研究室ではタンパク質や生体膜の機能発現機構解明に関する研究を計算機シミュレーションを用いて進めています。現在の研究室の研究テーマは「タンパク質複合体の構造とダイナミクス」と「脂質二重膜と生体物質が関わる構造とダイナミクス」です。また, 長尾と齋藤で中心に進めているのは「タンパク質の酸化還元機構に関する理論的研究」や「タンパク質-リガ

3. 任意次元の整数格子上の離散シュレーディンガー作用素 H が古典的な点相互作用の微分シュレーディンガー作用素と同じグリーン関数の構造を持つことを示し, それに基づいて H のスペクトルを完全に決定した。また, ある種のグラフ上のラプラシアン固有値汎関数の最小値を与えるグラフの構造に関する部分的な結果を得た。

4. 多変数超幾何関数などのホロノミック関数および関連する数式処理を研究している。最近, ホロノミック系の理論の数理統計学への新しい応用に取り組んでおり, この新分野は計算数理統計と呼ばれつつある。具体的には, 数理統計学に現れる重要な積分は母数のホロノミック関数になっていることが多いので, その微分方程式系の変形(グレブナー基底, 積分・制限アルゴリズム)や数値解析を用いて正規化定数の近似値の導出や最尤推定などを行う, ホロノミック勾配法を開発した。また数式処理としては, 留数解析による有限次元線形作用素の不変量の高速計算法の開発にも取り組んでいる。

5. 低次元トポロジー, 特に結び目や3次元多様体の量子不変量の研究を行っている。応用として体積など幾何的な不変量との関係を研究した。さらにツイストホモロジーと量子不変量を通して表現論, 特に高次元ホモロジーと交叉理論と低次元トポロジーを結ぶ背景の研究を行っている。

ンドッキング構造予測」です。これらは実在系タンパク質複合体の会合-解離過程におけるタンパク質間電子移動反応に関する基礎分子理論構築を目的とした研究です。また, 長尾と川口で中心に進めているのは「分子シャペロンの機能発現に関する研究」です。分子シャペロンの機能発現に必要な基質分子との結合や構造変化を自由エネルギーレベルで解明することを目的としています。さらに, 次世代スーパーコンピュータの開発利用プロジェクトにおける研究領域「次世代ナノ生体物質」にも携わっており, 複合体の会合-解離過程に関する自由エネルギーレベルでの相互作用を評価する手法の確立を目指し研究を推進しています。

計算物性研究室

斎藤峯雄教授, 石井史之准教授

本研究室では、量子力学の原理に基づくシミュレーションにより、有用で新奇な物質のデザインを行っている。

1. ナノ炭素物質の研究

(1) 多層グラフェンナノリボンの磁性

ジグザグ端を持つグラフェンナノリボンは、端に磁性を持つが、両端のスピン方向が反対であるため、スピン構造は反強磁性である。多層グラフェンナノリボンは、同様に両端でスピンの方向が反対である一方、層間の相互作用は、強磁性的であり、全体としては、反強磁性となる。シミュレーション研究から、電子及び正孔の注入により、磁性を強磁性に変えることができることを明らかにした。

(2) カーボンナノチューブにおけるキャップの水素化の研究

ナノチューブのキャップ領域に原子状の水素が化学吸着する場合のシミュレーション研究を行った。水素原子の吸着量が増えるに従って、キャップ領域は膨張するが、これは、実験結果と一致している。水素原子が奇数個吸着する場合は、磁性を持つが、偶数個吸着する場合は、非磁性となることを明らかにした。

計算ナノ科学研究室

小田竜樹教授,
佐藤正英教授 (総合メディア基盤センター)

本研究室では、ナノスケールの時空間を舞台とする様々な現象を、計算機を駆使して理論的に解明する研究を行っている。対象は、主に物性科学、分子科学、非平衡科学である。未知のナノ現象に取り組むと共に、新しい手法の開発も積極的に行った。主な研究テーマは以下の通りである。

1. スピン軌道相互作用に起因するナノ現象の解明

(1) 強磁性薄膜の磁気異方性と電界効果の研究

垂直磁化膜はスピントロニクスへの応用上非常に重要であるが、こういった系の候補となる強磁性膜の磁気異方性エネルギー (MAE) と電子状態を、独自に開発している非経験的手法を用いて計算することにより磁気異方性の起源を解明した。またMAEの電界依存性を評価することに成功し、鉄と酸化マグネシウムの界面に由来する大きな垂直磁気異方性と大きな電界効果が、実験結果と半定量的に良く一致していることを明らかにした。

(2) 半導体表面の巨大ラッシュバ効果の研究

電子スピン操作の起源として重要な物理現象である表面ラッシュバ効果があるが、表面状態に電子供与することにより、フェルミ準位の面直単一スピン状態ヴァ

2. 半導体物性の研究

(1) シリコン中単原子空孔の研究

単原子空孔は、シリコン結晶において、最も、基本的な欠陥であるにもかかわらず、いまなお、その挙動をめぐって多くの議論がなされている。本研究では、シリコンの融点付近における単原子空孔の濃度を明らかにするため、シミュレーション研究を実施した。まず、約1700原子を含む第一原理計算を行い計算された生成エネルギーは実験値とよく一致した。さらに、振動の効果を取り入れた計算により得られた融点付近におけ単原子空孔の濃度は、実験値をよく再現した。振動の効果により、濃度が大幅に増大することが明らかになった。

(2) ZnOにおける相対論的シミュレーション

2014年にノーベル物理学賞の対象となったGa_Nの研究とともに、同じくワイドギャップ半導体であるZnOの研究が注目されている。ZnOは良好な2次元ガス系を生成することから、光学デバイス材料だけでなく、電子およびスピントロニクス材料として注目されている。本研究では、スピン軌道相互作用を取り入れたシミュレーションを行った。その結果、ZnOにストレインを与える基板の導入により、Rashba効果の大きさや、Rashba回転の方向を制御できることを発見した。このことから、ZnOはスピントロニクス材料の候補として、重要であることが示唆された。

レーを物質設計することに成功した。

2. ファン・デル・ワールス密度汎関数の実装

主に分子間に働く相互作用としてファン・デル・ワールス力を、経験的パラメータを使わずに取り入れる方法を、独自に開発する第一原理分子動力学並列計算コードに実装し、分散力が重要となる物質系への適用に成功した。磁性物質系への適用にも展望を開いた。

3. 結晶成長現象に関する研究

(1) 結晶表面上のステップの挙動についての研究

平坦に見える結晶の表面でも原子・分子レベルの大きさでみると多くの場合は平坦ではなく、原子からなる島状の構造や原子レベルの階段 (ステップ) 構造が見られることがある。環境相に流れが加わった場合や、結晶表面上に不純物が吸着することで、ステップの直線性や等間隔な配置が不安定になる現象を調べた。また、不純物が加わることで、2次元臨界核半径が異常に大きくなることを発見した。

(2) 遠心沈降法のコロイド結晶形成の研究

遠心沈降法によるコロイド結晶の形成についてブラウン動力学法により調べた。容器の壁面に2次元的に秩序が形成され、その影響を受けながら3次元的な秩序が形成されることを明らかにした。また、適度な角度をもち底面に対して外力が傾くことで結晶性が向上することも明らかにした。

計算分子科学研究室

三浦伸一教授, 岩崎宏准教授,
西川清教授 (平成24年 3月31日退職)

当研究室では, 液体・溶液のような凝縮分子系の構造と動力学を支配する分子機構を解明するために, 分子シミュレーションの手法を駆使して理論的に研究を進めています。特に新しいシミュレーション手法の開発も積極的に行っているところが特色として強調したいポイントです。研究対象は, いわゆる“分子科学”という分野が指し示すものよりは, もう少し広い領域をカバーしています。現在進行中の具体的なテーマは以下のとおりです。

1. 新しい量子シミュレーション手法の開発

多自由度系の基底状態を数値的に厳密に計算する手法として, 変分経路積分分子動力学法の開発を行っている。これまでに液体ヘリウムや水素クラスターに適用し, その有効性を示してきた。また, 大規模系への応用を見据えて, 密度演算子の高次分解の適用や効率的なサンプリング手法の開発・検討を行っている。

2. 原子・分子クラスターの構造と性質

ナノサイズの量子液滴における超流動性発現機構の研究をヘリウム・水素クラスターに対して行ってい

る。また, プロトン化した水クラスターの経路積分分子動力学計算を実施し, 分子間プロトン移動機構に関する知見を得た。さらには水クラスターの基底状態を明らかにするために, 水分子の変分経路積分分子動力学計算を予備的に開始している。

3. 分子系の量子トンネルダイナミクス

分子系でのプロトン移動反応のようなプロセスは, 量子力学的なトンネル効果が重要な役割を果たしている場合が多々ある。本課題では, 分子内・分子間のトンネルプロトン移動を効率的に取り扱うための半古典論ベースの手法を開発している。インスタントンと呼ばれる手法をもとに分子系のトンネルダイナミクスを取り扱うための効率的なアルゴリズムを開発し, アンモニア分子のトンネル反転に適用した結果, トンネル分裂の実験値との定量的な一致をみた。

4. 蛋白質分子のゆらぎと機能

蛋白質分子の折りたたみ過程を記述するために, 分子動力学法と3D-RISM理論という液体の積分方程式理論を結合した手法を小さな蛋白質分子に適用した。またベンチマークのためにアラニンジペプチドの自由エネルギーランドスケープを上記のハイブリットシミュレーション手法を用いて計算し, 拡張アンサンブルシミュレーションの結果と比較することにより, 理論の信頼性について検討した。