

「新機能創成に向けた光・光量子科学技術」

平成 17 年度採択研究代表者

堀 裕和

(山梨大学大学院医学工学総合研究部 教授)

「ナノ光電子機能の創生と局所光シミュレーション」

1. 研究実施の概要

新時代の高機能情報処理システムを構成する「光電子機能」の創生を目指し、ナノ空間固有の近接場光励起移動で機能し、これをマクロに接続する階層的インターフェースを持つ新概念デバイスの作成と、近接場光が生み出す機能に焦点を絞ったシミュレーション技術の開発を目標として、下記項目の基盤研究を推進した。これらを統合した「ナノ空間機能の科学」および「局所光電子系の科学」の構築を目指す。

「スピントランスポール制御励起移動デバイス製作」では、単一量子井戸構造と希薄磁性半導体細線を基本とするデバイスの製作と機能開発を進めた。分子線エピタキシー試料製作と、局在励起子遷移の磁気・光学評価法を確立し、磁性/非磁性結合量子井戸構造を製作した。ナノ光励起輸送過程計測のため、プローブ顕微分光装置と強磁場装置を導入し、実験基盤を整備した。「シミュレーション技術の開発」では、基礎となる数値計算法、特にその精度保証に関して研究を展開し、モデルの数学的・物理的考察を行った。量子論的局在光理論モデルの構築、ナノ領域特有の励起移動素過程の解析を進展させた。「量子機能創生のための分子架橋系およびスピントランスポール系の基礎研究」では、分子架橋、分子ナノ層および分子電極間のトンネル過程、電子輸送過程、電子励起や発光過程の理論研究を推進し、有機分子を含むナノ構造系の性質と機能探索と分子架橋デバイス開発原理の解明を目指している。量子光電子機能探索のために、トンネル電子注入による分子発光分光実験を進展させ、散逸と励起伝送に関する分光計測系を整備するとともに、スピントランスポール形成を目指して、高密度冷却スピン偏極原子生成実験システムを設計・製作し、冷却原子の偏極等の基礎技術開発を進展させた。「ナノ情報通信システム設計理論の構築」では、ナノ光電子機能の階層性の理論解析に基づくシステム設計を進めた。近接場光相互作用の平均化されない疎視化の可能性を理論解析から明らかにし、配線構造を必要とする従来型電子デバイスとの原理的差異に関する解析に着手した。量子系を含むナノ光電子機能探索のため、マイクロとマクロを結ぶ非平衡熱力学と局所平衡アンサンブル理論等を探究し、ナノスケールの非平衡現象/動的現象と量子性について検討した。

これらの研究に基づき、さらにデバイス創生研究を進展させ、研究目標の達成を目指す。

2. 研究実施内容

研究全体の推進と取りまとめ

局所光による励起輸送および近接場光の階層的性質に基づく新機能デバイス創生の目標のもとに協力機関の研究を統合し、研究全体を推進した。今年度は特に、スピントチェーン励起移動型デバイスの素過程研究のための試料製作技術および評価装置を整備するとともに、スケールされない階層構造と散逸過程の分析に基づくデバイス機能原理の確立、および精度保証を含めたシミュレーションアルゴリズムの構築、ナノメートルスケール量子系における光電子機能の解析に大きな進展があり、その実験的検証のための環境整備も進展した。今後これらの成果に基づき、デバイス創生研究を進展させ、「ナノ空間機能の科学」「局所光電子系の科学」の構築を含む目標達成を目指す。

ナノ光電子機能の創生

スピントチェーン埋め込み量子井戸構造をもつ、励起移動型デバイスの基本構造確立と素過程研究のため、量子井戸内局在励起子と磁性半導体のスピント相互作用の諸特性研究用試料を分子線エピタキシー (MBE) 技術で製作し、局在励起子遷移の外部磁界依存性を調べ、微弱な相互作用を光学的に評価する手法を確立した。さらに、多層構造開発に向けて、磁性／非磁性結合量子井戸構造を製作した。相互作用素過程を詳細に評価する強磁場極低温スピントチェーン評価装置の詳細設計と導入を行い、さらに近接場光励起輸送過程のナノメーター計測を目指し、超高真空極低温走査型プローブ顕微鏡を導入し、光電子機能デバイスを製作評価する基盤環境と、構成原理やシステム化等の研究と密接に連携する研究推進体制を確立した。

局所光シミュレーション技術の開発

局所光シミュレーション構築のために、階層構造的デバイス構成の基本原則と階層構造的計算手法の展開を貫く、局所光機能開発のコンセプトを進展させた。階層構造型機能と散逸過程の理論解析に基づき、情報通信システム理論、計算機シミュレーション、場の量子論と近接場光理論を融合する基本モデルの構築と、ナノ光電子機能の基礎付けを行った。

近接場光を記述するモデルとして Lippmann-Schwinger 方程式を採用し、その精度保証を含めたアルゴリズムを研究した。数学的視点から、全く新しいモデルの開発についても議論、考察を行った。メソスコピックレベルでの近接場の物理における数理モデルに関して、その逆問題モデルを調査、研究した。さらに、ナノ領域に局在する光と物質の相互作用の特徴を抽出とモデル化のため、光子と電子励起に加えて、フォノン、スピント自由度の働きを取り入れた研究を進展させた。特に、擬1次元ナノ系を対象に、不純物サイトに局在するフォノンモードの特性評価を行い、局在特性を示した。また、スピント自由度を考慮した量子ドット間励起移動の素過程の解明に着手し、双極子禁制レベル間の共鳴効果を考慮したモデルに基づき、配置と選択側の相関とスピント制御性について知見を得た。

ナノ情報通信システム設計原理の構築

前年度に引き続き、局所光に特徴的な階層性に注目した電磁場環境設計による相関距離制御などの基礎技術を構築し、光接続、固有性保証技術等の応用的観点に立ち、局在光に

唯一到達可能な諸原理を備えつつ社会の要求と適合した、システム基礎技術開発を進展させた。局在光の有する顕著な属性の一つである階層性に注目し、アンギュラー・スペクトル展開を用いた階層性の理論解析およびシステム設計を進捗させ、特に、近接場光相互作用の階層性を用いて平均化されない疎視化が可能となることを理論及びシミュレーションによって示した。また、光励起移動を動作原理とするデバイスと、配線構造を必要とする電子デバイスにおける信号伝搬の原理的差異について、特にエネルギー散逸とスケールに注目した理論解析を推進した。

量子機能創生

分子架橋の電子輸送における散逸と環境効果の理論を研究し、局所光の理論と電子系の理論を融合したナノ光電子理論を展開し、さらに発光中心を含むモデル分子系の理論設計を行った。分子架橋、分子ナノ層および分子電極間のトンネル過程、電子輸送過程、電子励起や発光過程を研究し、これらの有機分子を含むナノ構造系の性質と機能を探り分子架橋デバイスの開発原理を解明することを目標に、効率と制御性の良い伝導と発光を実現する分子架橋系等の探索を進めた。

ポーラロン効果、エキシトンポラリトン効果などを含めた分子内の種々の伝導モードの解析、電極への脱励起過程の抑制、分子内の発熱の抑制、発生する輻射場の性質について理論的に検討し、ナノスケール近接場を駆動するデバイスのアイデアを考案するとともに、ナノ光電子系の理論とシミュレーションの研究を進展させた。特に、チオフェン分子やポリアセン分子などの有機分子薄膜・分子架橋におけるポーラロン伝導と非ポーラロン伝導の競合、共存による分子架橋伝導現象の解明と、緑色蛍光タンパク質分子 GFP における蛍光寿命のナノ力学的制御の理論研究を進展させた。

実験研究では、ナノ光電子デバイスへの光励起注入とトンネル電子注入励起技術を開拓するために、前年に引き続き実験基盤の整備を行った。トンネル電子投影顕微鏡および光 AFM 装置に、試料からの発光像を高空間分解で分光測定する機能を付加し、それぞれ可視域および近赤外域において、電子線照射励起による分子発光を局所分光分析できる、超高真空電子線ホログラフィー光検出システムを構築した。併せて、分子架橋デバイスの機能と、ナノ光電子機能素子との結合について理論的分析を行った。

局所光機能に量子効果を付与するスピクラスター創生の基礎技術開発においては、アトムフォトニクスによる原子堆積技術の実験計測環境を整備し、スピクラスター形成に用いる高密度冷却スピン偏極原子生成実験システムを設計・製作した。磁気光学トラップで生成した冷却 Rb 原子の超微細準位間光ポンピングを行い、完全なスピン偏極特性を得た。これと並行して、スピン系計測技術開発のため、走査プローブ顕微鏡下での電子放出と Mott 散乱型電子スピン検出を結合する実験環境整備を推し進めた。

ナノ空間励起輸送・散逸過程の解析と局所光・電子系のサイエンス構築

理論研究では、近接場光相互作用の量子光学理論を進展させ、ナノ光電子機能のコンセプトを研究グループ全体で共有する基盤の構築を推し進めた。多数の半導体量子構造間の

励起輸送の相関制御機構の開拓、局所光の電磁界理論を数学的構造と対比させる新規システム設計理論、極限量子系の反応過程の解析と非平衡統計力学の手法により、ナノデバイスの機能を定める散逸およびマイクロ系とマクロ系の接続と情報伝達等について、広い視野に立つ融合科学の基礎概念構築を目指す研究を進展させた。

3. 研究実施体制

堀裕和(山梨大学大学院医学工学総合研究部)グループ

研究項目

- ・ナノ電子機能の創生

大石進一(早稲田大学理工学術院)グループ

研究項目

- ・局所光シミュレーション

小林潔(東京工業大学大学院理工学研究科)グループ

研究項目

- ・局在光励起輸送の理論展開

成瀬誠((独)情報通信研究機構)グループ

研究項目

- ・局所光を用いた情報処理システムの基盤技術の研究

北原和夫(国際基督教大学教養学部理学科)グループ

研究項目

- ・局所光励起輸送の電磁界及び統計力学理論の展開

塚田捷(早稲田大学理工学術院理工学研究科)グループ

研究項目

- ・ナノ光電子系の理論
- ・分子架橋デバイス開発

根城 均((独)物質・材料研究機構ナノシステム機能センター)グループ

研究項目

- ・電子トンネル励起型分子架橋ナノデバイスの研究

伊藤治彦(東京工業大学大学院総合理工学研究科)グループ

研究項目

- ・近接場光ファネルを用いたスピン偏極原子誘導とスピクラスタ形成

4. 研究成果の発表等

(1) 論文発表(原著論文)

- 表面・界面そしてナノ構造の理論, 塚田捷, 固体物理 41 (2006) 67-79.
- Epitaxial growth and optical investigations of ZnTeO alloys, Y. Nabetani, T. Okuno, K. Aoki,

- T. Kato, T. Matsumoto, and T. Hirai, *phys. stat. sol. (a)* vol.203, 2653–2657 (2006).
- Low temperature growth of transparent conducting ZnO films by plasma assisted deposition, A. Nishii, T. Uehara, T. Sakano, Y. Nabetani, T. Akitsu, T. Kato, T. Matsumoto, S. Hagihara, O. Abe, S. Hiraki, and Y. Fujikawa, *phys. stat. sol. (a)* vol.203, 2887– 2890 (2006).
 - Incorporation of P in CuInS₂ using InP as a p-type dopant, T. Kato, H. Yamaguichi, T. Nakamura, Y. Nabetani, T. Matsumoto, *pss(c)*3,(2006)2606–2609.
 - Role of nitrogen precursor supplies on InAs quantum dot surfaces in their emission wavelength, I. Suemune, G. Sasikala, H. Kumano, K. Uesugi, Y. Nabetani, T. Matsumoto, J. -T. Maeng and T. Y. Seong, *Jpn. J. Appl. Phys.*, vol.45, L529–L532 (2006).
 - Characterization of MBE grown ZnO on GaAs(111) substrates, T. Matsumoto, K. Nishimura, A. Nishii, A. Ota, Y. Nabetani, and T. Kato, *phys. stat. sol. (c)*, 3, 984–987 (2006).
 - Photoluminescence properties of ZnTeO and ZnSeO alloys with dilute O concentration, Y. Nabetani, T. Okuno, K. Aoki, T. Kato, T. Matsumoto and T. Hirai, *physica status solidi (c)*, vol.3, 1078–1081 (2006).
 - Passivation of an isoelectronic impurity by atomic hydrogen: The case of ZnTe:O, M. Felici, A. Polimeni, M. Capizzi, Y. Nabetani, T. Okuno, T. Matsumoto et al., *Appl. Phys. Lett.*, vol.88, 10191 (2006).
 - Composition control of ZnSSeO quaternary alloys grown on GaP, Y.Nabetani, Y.Ito, K.Kamisawa, T.Kato, T.Matsumoto, T.Hirai, *Phys.stat.sol(c)*3.1082–1086.
 - E. Hirose and E. Torikai, “Spin Dependent Scattering of Cs Atoms from Ferromagnetic Surfaces”, *J. Mag. Mag. Mat.*, 310, 2740–2742, (2007).
 - S.Srinivas and E.Torikai, “A Density Functional Study of the Structure and Self-Organization in Spin Clusters”, *J. Mag. Mag. Mat.*, 310, 2390–2392, (2007).
 - J.J. Riera¹, P.A. Vald^{es}, K. Tanabe and R. Kawashima: A theoretical formulation of the electrophysiological inverse problem on the sphere, *Phys. Med. Biol.* 51 (2006), 1737–1758.
 - Y. Ogasawara and A. Kitada: A consideration of the morphological stability of an interface, *Journal of the Physical Society of Japan*, 75:6 (2006), 064003–1–7.
 - M. NARUSE, T. KAWAZOE, S. SANGU, K. KOBAYASHI, and M.OHTSU, “Optical interconnects based on optical far- and near-field interactions for high-density data broadcasting,” *Optics Express* Vol. 14, No.1, 306–313 (2006).
 - Y. TANAKA and K. KOBAYASHI, “Optical near field dressed by localized and coherent phonons,” *Journal of Microscopy* (2007) accepted.
 - Scanning tunneling microscopy and spectroscopy of the electronic local density of states of graphite surfaces near monoatomic step edges, Y.Niimi, T.Matsui, H.Kambara, K.Tagami, M.Tsukada and H.Fukuyama, *Phys. Rev. B*73 (2006) 0854211–0854218.
 - First-Principles Calculations of Quantum Transport in Single Molecule, N.Kobayashi, T.Ozaki,

- K.Tagami, M.Tsukada and K.Hirose, Jpn. J. Appl. Phys. 45, 3B (2006) 2151–2153.
- Simulation of Atomic Force Microscopy Images of Collagen Molecules on Graphite Surface, K.Tagami and M.Tsukada, e-J. Surf. Sci. Nanotechnol. 4 (2006) 294–298.
 - Theoretical study of electron–vibration coupling on carrier transfer in molecular bridges, K.Mitsutake and M.Tsukada, e-J. Surf. Sci. Nanotechnol. 4 (2006) 311–318.
 - Simulations of constant–height atomic force microscope images of a H–terminated Si(100) 2×1 surface with a CH₃ impurity, A.Masago, S.Watanabe, K.Tagami and M.Tsukada, e-J. Surf. Sci. Nanotechnol. 4 (2006) 197–200.
 - Discontinuous Force Compression Curve of Single Bovine Carbonic Anhydrase Molecule Originated from Atomistic Slip, K.Tagami, M.Tsukada, R.Afrin, H.Sekiguchi and A.Ikai, e-J. Surf. Sci. Nanotechnol. 4 (2006) 552–558.
 - Molecular Structure Alters Apparent Height in nc-AFM Images of Alkanethiolate Embedded in Matrix, K.Tagami and M.Tsukada, e-J. Surf. Sci. Nanotechnol. 4 (2006) 299–306.
 - Quenching Mechanism of Mechanically Compressed Green Fluorescent Protein Studied by CASSCF/AM1, Q.Gao, K.Tagami, M.Fujihira and M.Tsukada, Jpn. J. Appl. Phys. 45 (2006) L929–L931.
 - Simulated non–contact AFM images of an alcohol molecule in an alkanethiol self–assembled monolayer, K.Tagami and M.Tsukada, Nanotechnology 18 (2007) 084005.
 - Theoretical Simulations of Scanning Probe Microscopy for Organic and Inorganic Materials, M.Tsukada, K.Tagami, Q.Gao and N.Watanabe, Current Nanoscience 3 (2007) 57–62.
 - H.Nejo, Y.Maeda and T.Akasaka, ”The topological structures of the debundled single–walled carbon nanotubes on a grid”, Materials Transactions 48, 711–717 (2007).
 - K. Yamamoto, K. Totsuka, H. Ito, ”Two–step photoionization of cold atoms by two–color evanescent–light waves and application to atom detection with high spatial resolution,” Opt. Commun. Vol. 265, 692–695, 2006.
 - K. Yamamoto, K. Totsuka, H. Ito, ”Deflecting atoms through a submicron–sized slit with near–field light,” Opt. Rev. Vol. 13, No. 5, 357–360, 2006.