

令和 5 年 6 月 23 日現在

機関番号：14301

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2017～2022

課題番号：17K04982

研究課題名（和文）場の量子論の局所物理量による量子電気伝導現象の理論的研究

研究課題名（英文）Quantum transportation in terms of local physical quantities defined in quantum field theory

研究代表者

瀬波 大士（Senami, Masato）

京都大学・工学研究科・講師

研究者番号：40431770

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,700,000円

研究成果の概要（和文）：ナノ材料の電気伝導現象は、これまで量子力学に基づいて解析されてきた。本研究では、量子力学の上位理論である場の量子論に基づいて提案された局所的なコンダクタンスやスピン渦密度の観点から研究を行った。局所的なコンダクタンスが大域的に考えたときはLandauer 公式の結果と一致することをベンゼンジチオールやグラフェンを例として示した。また局所的なスピンの記述において、スピン渦密度と電流密度の間には線形関係があることを理論的に提案し、数値計算から実証した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究の局所量を用いた解析手法では、分子内の特定の官能基、特定の原子の効果や、固体内の特定の空孔や不純物がナノ材料全体の物性値へと与える効果を定量的に珪砂することができる。これまではAという分子と一部の官能基を異なる官能基に置換したA'という分子を計算して物性値の違いから比較して間接的にその効果をみるということしかできなかったが、材料のどの部分がどのような効果を持つのか定量的に調べられる道具立てを手に入れたことになる。

研究成果の概要（英文）：Quantum transportation had been discussed in quantum mechanics. In this work, it has studied in quantum field theory, which is an advanced theory over quantum mechanics. Particularly, local physical quantities, local conductance and spin vorticity density, defined in quantum field theory is used to analyze. It has been shown that local conductance is consistent with the conductance of the Landauer formula by using models (benzenedithiol and graphene). The linear relation between the spin vorticity density and electric current density is proposed and this relation has been confirmed in numerical computations for some models, such as helicene and graphene.

研究分野：量子理論

キーワード：量子電気伝導 スピン渦 局所コンダクタンス

## 1. 研究開始当初の背景

ナノスケールの電気伝導は、古典的なオームの法則とは異なり、量子化コンダクタンスなど量子性が顕著となるため、Landauer 公式に代表されるように量子力学に基づいた数多くの報告がある。本研究では、より正しい理論であり、量子力学とは別の理論構造を持つ、場の量子論に基づいて電気伝導現象を研究する。量子力学の物理量は全空間での期待値であり、局所的な寄与は記述されない。ゆえにナノサイズの方法内の微小領域の電気伝導特性は、場の量子論の局所的な力学的物理量により正しく取り扱える。特に、場の量子論は後述の局所的な概念を導くため、その関係式に従って量子電気伝導を調べることで、新たなブレークスルーを起こせる可能性がある。

定常電流中でローレンツ力は、他の力と釣り合い無制限な加速をしない。例えば、ドルーデ模型では、運動量に比例した緩和項と釣り合う。しかし、この緩和は統計的な考え方に基づいており、量子化コンダクタンスのような 1 電子電気伝導のような極限を適切に記述できない。場の量子論におけるローレンツ力は、定常状態では空間の各点各点でテンション力と釣り合う描像を持つ。

スピンの運動方程式に対しても場の量子論は量子力学と異なる定常状態で局所的釣り合いを与える式を導く。量子力学のスピンのハイゼンベルク方程式は、空間の局所的な領域では定常状態でもトルクがゼロとならないが、場の量子論の式は空間のあらゆる点でトルクが消える。

## 2. 研究の目的

場の量子論に基づいて定義された局所物理量を用いて、局所的な視点から量子電気伝導現象を研究し新たな概念の確立を目指す。電気伝導現象を局所的に取り扱う際の理論・手法の整備を行い、既知の量子電気伝導現象をどのように局所物理量が記述するのか調べ、既存の知識と比較することにより明らかにする。

本研究では、特に場の量子論における新たな局所的なコンダクタンスを局所電気伝導率と電流密度を用いて定義し、それを Landauer 公式による結果等と比較検討し、局所電気伝導の描像を明らかにする。局所的なコンダクタンスそのものが確立した概念ではないので、本研究では 2 つの定義を提案しその性質を議論する。具体的には、炭素材料を例として、量子力学の非平衡グリーン関数法に基づく波束に対して、場の量子論に基づいた局所電気伝導率や電流密度などの物理量を計算する。このような量子力学の波束を用いても、場の量子論の局所物理量を用いる事で、電気伝導に関する物理を部分的に明らかにできる。

局所電気伝導率や電流密度を用いて局所コンダクタンスを計算し、Landauer 公式に基づくコンダクタンスの数値と比較することにより、局所的電気伝導の特徴について議論し、局所物理量が既存の電気伝導現象をどのように記述するのかを明らかにする。また場の量子論の効果が顕著な例として、スピンの電気伝導と関わる現象にも注目して、スピンホール効果と電流とスピントルクの関係についても局所概念ではどう記述されるかを研究する。

ナノスケールのデバイスの物性量は全体の平均的效果ではなく、欠陥等の不純物や界面の効果に支配される。そのため、ナノ材料では、物性量に対し局所的な領域がどのように寄与するのかを第一原理計算により理解することが重要である。材料内部の局所的領域の物性量というのは実験で容易に直接測定できるものではないので、これまでに扱われたことが無い新しい概念である。近年は第一原理計算の信頼性も向上しており、局所物理量概念は今後に大きな可能性を秘めており、新しい解析手法としてパラダイムを作り出す可能性もある。本研究後の進展として、具体的な材料へと応用することにより、どの不純物がどのような効果を与えるか定量的に評価できるようになり、材料の基礎物性の背景となる物理に肉薄できる。

## 3. 研究の方法

第一原理計算の手法による電流を伴う量子状態を用いて、局所物理量を評価する。具体的に局所的なコンダクタンスとしての物理量を 2 種類提案し、この物理量を、炭素材料を例として取り上げて研究を行う。特にスピンホール効果にも注目し、材料内部のスピントルク分布と電気伝導の関係についても調べる。炭素材料の電気伝導性を探るより、既存の特徴的電気伝導現象が局所物理量によりどのように記述されるかを明らかとし、その後の局所物理量による物性解析への道を作ることが目標である。

分子エレクトロニクス材料として期待されるベンゼンジチオール(BDT)を例として、以下に提案する局所的なコンダクタンスと Landauer 公式の結果を比較する。局所的な直方体のコンダクタンスとして、

(1) 直方体の両端面上の電流密度を積分したものを電流とし、その面間に対するバイアス電圧

から計算する方法

(2) 直方体内の電気伝導率を積分したものを直方体の長さの二乗で割る方法を提案する。これらはオームの法則を局所的な概念に置き換えたものである。

場の量子論による量子状態計算は未開発であるので、代用として量子力学の量子状態を用いる。これまでに量子力学による量子状態を用いても局所物理量が有効であることは示してある。

定常電流に対しては駆動力であるローレンツ力と拮抗する力が必要である。例えばドルーデ模型では緩和時間でパラメータ化された摩擦項がある。場の量子論にはテンション力が存在し、定常電気伝導でもローレンツ力と相殺していることが示されている。テンション力・分子内電流の分布、電気伝導を担う軌道の分布の基礎データから、局所的電気伝導の物理の駆動力を明らかにする。

定常電流中のBDTの分子両端でのスピン分極とスピントルクの分布を調べ、電流分布、原子核の分布等と比較し、電流とスピン伝導の関係を研究する。BDTはスピン流の対象として最適ではないが、局所量の観点から基礎物理の理解を進めた後に、より適切な材料へと研究を拡張する。

#### 4. 研究成果

ナノ材料の電気伝導現象をこれまでこれまで量子力学に基づいて解析されてきた量子電気伝導現象を、場の量子論に基づいて再解釈する研究を行った。場の量子論では物理量の運動方程式に局所的な新たな概念を与えることが知られており、その関係式に基づいて量子電気伝導現象を調べることで、新たなブレークスルーを起こせると期待している。具体的には、定常電流を伴う炭素材料における電気伝導現象、特にスピンが電気伝導と関わる現象について局所物理量を用いた研究を行った。

局所的なコンダクタンスと Landauer 公式の結果を比較する研究を行った。局所的なコンダクタンスはオームの法則を局所的な概念に置き換えたものである。分子エレクトロニクス材料として期待されるベンゼンジチオール(BDT)を例として、同様な傾向を示すことと、局所的な電気伝導特性を評価することができるという有用性を示した。定常電流中の力の釣り合いについての研究も行った。定常電流に対しては駆動力であるローレンツ力と拮抗する力が必要である。例えばドルーデ模型では緩和時間でパラメータ化された摩擦項がある。場の量子論にはテンション力が存在し、定常電気伝導でもローレンツ力と相殺していることと、テンション力は摩擦力と異なり運動量には比例しないことが知られている。定常電流中の力の釣り合いの理解の研究として、ベンゼンジチオール・グラフェンを対象にローレンツ力密度とテンション密度の釣り合いについての理論的研究を進めた。これまで取り入れられていない電場の効果を取り入れて、よりよい釣り合いが数値計算上で実現できた。

スピン偏極した電流についての研究では、ベンゼンジチオール・グラフェン・グラフェンナノリボンを対象に定常電流中のスピン分極・電流分布・原子核の分布等と比較することにより、電流とスピン伝導の関係を研究した。特にスピンの渦度と電流の間に線形関係が成立するという理論的予言を行い、3つのモデルに対する数値計算から検証した。結果は全て場合においてこの関係式が成立していた。この関係式はモデル全体における物理量としても成立するし、モデル内のどんな部分領域に対しても成立している。この線形関係の研究を進め、誘電率や電気伝導率のような物性量として確立を進める。スピン伝導を生み出す力学の研究の一環として、ローレンツ力密度をスピン成分で分離して記述する理論の研究に着手した。その第一段階として、拮抗する力であるテンション密度がスピン成分としてどのように分離されるか調べ、テンション密度中のスピン依存成分がどのようにふるまうかの研究を推進した。テンション密度のスピン依存成分が、スピン軌道相互作用の大きな元素の周りで急速に増大する描像を確認した。

らせん形状をもつ有機分子中を電子が通過するとスピンの分極が出てくる、カイラル誘起スピン選択性(CISS)という現象が最近発見されたが、このスピン分極がどのようなメカニズムで起こるかは明らかとなっていない。場の量子論におけるスピンドYNAMIKSの記述には、電子カイラリティ誘起スピントルクがあることが近年議論されている。この電子カイラリティ誘起スピントルクがCISSにどう寄与するか研究を行った。炭素らせんナノワイヤーモデル・ヘリセンモデルを用いて、非平衡グリーン関数法による電流の計算においてCISSが起こることを実証した。

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計10件（うち査読付論文 10件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 Kuroda Naoya, Oho Takumi, Senami Masato, Sunaga Ayaki	4. 巻 105
2. 論文標題 Enhancement of the parity-violating energy difference of H <sub>2</sub> X <sub>2</sub> molecules by electronic excitation	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review A	6. 最初と最後の頁 1,11
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevA.105.012820	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Senami Masato, Shimizu Tomoki	4. 巻 384
2. 論文標題 Electron chirality in amino acid molecules	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physics Letters A	6. 最初と最後の頁 126796 ~ 126796
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.physleta.2020.126796	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Senami Masato, Kuroda Naoya, Takahashi Toshiki	4. 巻 21
2. 論文標題 Effects of external electric field and internuclear length on effective electric field for measurement of electron electric dipole moment	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Computational Methods in Sciences and Engineering	6. 最初と最後の頁 99 ~ 107
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3233/JCM-204361	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Senami Masato, Matsunaga Shunji	4. 巻 119
2. 論文標題 The effect of electric current on chemical bonding of hydrogen adsorption on an aluminum nanowire	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 International Journal of Quantum Chemistry	6. 最初と最後の頁 e26004
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/qua.26004	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Senami Masato, Fukushima Akinori	4. 巻 1
2. 論文標題 Local Dielectric Constant Density Analysis of High-k Dielectric Nanomaterial	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Theoretical Chemistry for Advanced Nanomaterials: Functional Analysis by Computation and Experiment	6. 最初と最後の頁 53 ~ 87
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/978-981-15-0006-0_3	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Masato Senami, Keito Ito	4. 巻 120
2. 論文標題 Identification of hydrogen bonds using quantum electrodynamics	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 International Journal of Quantum Chemistry	6. 最初と最後の頁 e26237
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/qua.26237	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 M. Senami and K. Ito	4. 巻 99
2. 論文標題 Asymmetry of electron chirality between enantiomeric pair molecules and the origin of homochirality in nature	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review A	6. 最初と最後の頁 012509, 1-10
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevA.99.012509	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Masato Senami, Makoto Nakanishi, and Akitomo Tachibana	4. 巻 9
2. 論文標題 Computational analysis method of local electrical conductive property in nano-size materials	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 AIP advances	6. 最初と最後の頁 025106, 1-8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5085360	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Masato Senami	4. 巻 2019
2. 論文標題 Quantum Electrodynamics and Molecules	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Reference Module in Chemistry, Molecular Sciences and Chemical Engineering	6. 最初と最後の頁 1-12
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/B978-0-12-409547-2.11487-8	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Masato Senami, Ken Inada, Kota Soga, Masahiro Fukuda, Akitomo Tachibana	4. 巻 31
2. 論文標題 Difference of chirality of the electron between enantiomers of H2X2	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Progress in Theoretical Chemistry and Physics	6. 最初と最後の頁 Chap. 6
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計57件 (うち招待講演 10件 / うち国際学会 14件)

1. 発表者名 Masato Senami
2. 発表標題 Electron chirality in chiral molecules and chirality induced spin selectivity
3. 学会等名 The 7th Quantum Science (QS) symposium -The Main Symposium of International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering (ICCMSE) 2021 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Ayaki Sunaga
2. 発表標題 Parity-violating energy difference in chiral molecules enhanced by electronic excitation
3. 学会等名 The 7th Quantum Science (QS) symposium -The Main Symposium of International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering (ICCMSE) 2021 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Naoya Kuroda
2. 発表標題 Understanding of T, P violating interaction parameters in polyatomic polar molecules
3. 学会等名 The 7th Quantum Science (QS) symposium -The Main Symposium of International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering (ICCMSE) 2021 (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Naoya Kuroda
2. 発表標題 Enhancement of Parity-Violating energy difference of H <sub>2</sub> X <sub>2</sub> molecules by electronic excitation
3. 学会等名 The 2021 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2021) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Yukihiro Yoshida
2. 発表標題 Theoretical study on the spin-dependent component of the electron tension density in electrical conduction phenomena
3. 学会等名 The 2021 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2021) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 黒田 直也
2. 発表標題 極性多原子分子における時間・空間反転対称性破れのエネルギーシフトの解析
3. 学会等名 第23回理論化学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 吉田 如寛
2. 発表標題 電気伝導現象における電子テンション密度のスピンの依存成分に関する理論的研究
3. 学会等名 第23回理論化学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 黒田 直也
2. 発表標題 極性多原子分子における時間・空間反転対称性破れのエネルギーシフトの相対論的量子化学計算による評価
3. 学会等名 日本コンピューター化学会 2021年春季年会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 黒田 直也
2. 発表標題 相対論的EOM-CC法を用いた鏡像異性体間のエネルギー差の計算: 電子励起による特異的増大
3. 学会等名 第15回 分子科学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 吉田 如寛
2. 発表標題 電気伝導現象におけるスピンの分極と電子テンション密度の関係
3. 学会等名 第15回 分子科学討論会
4. 発表年 2021年



1. 発表者名 島田 隆史
2. 発表標題 非平衡グリーン関数法を用いた電気伝導計算におけるカイラル誘起スピン選択性とツェータカの関係
3. 学会等名 第15回 分子科学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 黒田 直也
2. 発表標題 電子励起による鏡像異性体間エネルギー差の増大-相対論的EOM-CC法による評価-
3. 学会等名 日本コンピューター化学会 2021年秋季年会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 黒田 直也
2. 発表標題 電子EDMの探索を目指した多原子極性分子における時間・空間反転対称性破れの解析
3. 学会等名 日本物理学会 第77回年次大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Masato Senami
2. 発表標題 Electron Chirality in Amino Acid and Homochirality
3. 学会等名 The 6th Quantum Science (QS) symposium -The Main Symposium of International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering (ICCMSE) 2020 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 黒田 直也
2. 発表標題 多原子極性分子を用いた電子電気双極子能率探索において分子構造が有効電場とスピンの及ぼす影響
3. 学会等名 分子化学オンライン討論会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 吉田 如寛
2. 発表標題 分子の電気伝導現象における電子テンション密度のスピンの依存成分に関する理論的研究
3. 学会等名 計算科学研究センター・ナノテクノロジープラットフォーム事業合同ワークショップ - データ科学に基づく理論・計算科学と実験科学の協働を目指して -
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 吉田 如寛
2. 発表標題 分子の電気伝導現象における電子テンション密度のスピンの依存成分に関する理論的研究
3. 学会等名 京都大学福井謙一記念研究センターオンラインシンポジウム
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 島田 隆史
2. 発表標題 非平衡グリーン関数法を用いた電流によるカイラル誘起スピン選択性の起源の研究
3. 学会等名 京都大学福井謙一記念研究センターオンラインシンポジウム
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Masato Senami
2. 発表標題 The Electron Chirality in Chiral Molecules
3. 学会等名 5th Computational Chemistry Symposium of International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering (ICCMSE) 2019 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 松永 隼治, 瀬波 大土
2. 発表標題 平面構造材料における電気伝導中のローレンツ力密度とテンション密度の理論的研究
3. 学会等名 第22回 理論化学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 清水 智規, 伊藤 圭人, 瀬波 大土
2. 発表標題 鏡像異性体における電子カイラリティの理論的研究
3. 学会等名 第22回 理論化学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 福田 将大, 瀬波 大土, 立花 明知, 尾崎 泰助
2. 発表標題 物質表面における場の量子論に基づく局所物性評価方法
3. 学会等名 日本物理学会 2019年 秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 高松 亮太郎, 高橋 俊貴, 瀬波 大土
2. 発表標題 La <sub>2/3</sub> -xLi <sub>3</sub> TiO <sub>3</sub> 内で形成される化学結合の理論的研究
3. 学会等名 第13回分子科学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 清水 智規, 瀬波 大土
2. 発表標題 鏡像異性体の電子カイラリティに関する理論的研究
3. 学会等名 第13回分子科学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 黒田 直也, 野首原 直之, 瀬波 大土
2. 発表標題 第14族元素の2次元系物質におけるスピンと電流の関係
3. 学会等名 第13回分子科学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 松永 隼治, 瀬波 大土
2. 発表標題 平面構造材料における電気伝導中のローレンツ力密度とテンション密度の理論的研
3. 学会等名 第13回分子科学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Masahiro Fukuda, Masato Senami and Akitomo Tachibana
2. 発表標題 Electronic stress tensor density based on the quantum field theory in surface material systems
3. 学会等名 The 22nd Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (ASIAN-22) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 福田 将大, 瀬波 大土, 立花 明知
2. 発表標題 エネルギー区間ごとに見る電子ストレステンソル密度の描像
3. 学会等名 日本物理学会 第75回年次大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Naoya Kuroda, Masato Senami
2. 発表標題 Effects of molecular structure of polyatomic polar molecules on spin dynamics and effective electric field
3. 学会等名 The 3rd Univ. Ryukyus International Symposium of Theoretical and Computational Science (RIS-TCS) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Tomoki Shimizu, Masato Senami
2. 発表標題 The asymmetry of electron chirality induced by chiral structure of molecule
3. 学会等名 The 3rd Univ. Ryukyus International Symposium of Theoretical and Computational Science (RIS-TCS) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 高橋 俊貴, 瀬波 大土
2. 発表標題 電子の電気双極子モーメントの測定における有効電場と分子内部の電子スピントルク
3. 学会等名 第21回 理論化学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 松永 隼治, 瀬波 大土
2. 発表標題 アルミニウムナノワイヤの電気伝導における化学結合の理論的研究
3. 学会等名 第21回 理論化学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 野曾原 直之, 瀬波 大土
2. 発表標題 平面構造の炭素材料におけるスピン渦と電流の比例関係
3. 学会等名 第21回 理論化学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 清水 智規, 伊藤 圭人, 瀬波 大土
2. 発表標題 自然界におけるホモカイラリティの起源に関する鏡像異性体の電子カイラリティの理論的研究
3. 学会等名 第21回 理論化学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 野曾原 直之, 瀬波 大土
2. 発表標題 平面構造材料におけるスピン渦と電流の関係
3. 学会等名 第12回分子科学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 松永 隼治, 瀬波 大土
2. 発表標題 アルミニウムナノワイヤの電気伝導における化学結合の理論的研究
3. 学会等名 第12回分子科学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 立花 明知, 瀬波 大土
2. 発表標題 量子電磁力学(QED)による二重スリット現象ならびにEPR観測における粒子の位置情報の決定論的予言のためのアルファ振動子理論に基づくコンピューターシミュレーションアルゴリズム
3. 学会等名 第12回分子科学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 清水 智規, 瀬波 大土
2. 発表標題 鏡像異性体間の電子カイラリティの非対称性と自然界におけるホモカイラリティの起源
3. 学会等名 第12回分子科学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 高橋 俊貴, 瀬波 大士
2. 発表標題 電気双極子モーメントの測定における有効電場と分子内部の電子スピントルク
3. 学会等名 第12回分子科学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 瀬波 大士
2. 発表標題 ホモカイラリティの起源としての鏡像異性体分子における電子のカイラリティの非対称性
3. 学会等名 第二回琉球大学計算科学シンポジウム
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Masato Senami
2. 発表標題 Asymmetry of the Electron Chirality between Enantiomeric Pair Molecules and the Origin of Homochirality in Nature
3. 学会等名 Toyama International Symposium on "Physics at the Cosmic Frontier" (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Masato Senami
2. 発表標題 Description of electron spin based on quantum field theory: electron electric dipole moment and chirality of a molecule and electrons
3. 学会等名 3rd Computational Chemistry Symposium of International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering (ICCMSE) 2017 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年



1. 発表者名 築島千馬, 瀬波 大士
2. 発表標題 電気伝導中におけるローレンツ力密度とテンション密度の関係についての理論的研究
3. 学会等名 第20回 理論化学討論会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 野曾原 直之, 築島 千馬, 瀬波 大士, 立花 明知
2. 発表標題 場の量子論によるキラル分子の電子カイラリティーに関する理論的研究
3. 学会等名 第20回 理論化学討論会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 伊藤圭人, 瀬波 大士
2. 発表標題 場の量子論によるキラル分子の電子カイラリティーに関する理論的研究
3. 学会等名 第20回 理論化学討論会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 瀬波 大士
2. 発表標題 素粒子と物性・化学の協働がもたらすもの
3. 学会等名 第一回琉球大学計算科学シンポジウム(招待講演)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 伊藤圭人
2. 発表標題 鏡像異性体分子中の電子カイラリティ非対称性が導く生体のパリティの破れ
3. 学会等名 第一回琉球大学計算科学シンポジウム（招待講演）
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 高橋 俊貴
2. 発表標題 電子の電気双極子モーメントと場の量子論に基づくスピントルク描像
3. 学会等名 第一回琉球大学計算科学シンポジウム（招待講演）
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Masato Senami
2. 発表標題 Difference of electron chirality between enantiomers as a possible solution to homochirality in Nature
3. 学会等名 The 11th Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 瀬波 大士
2. 発表標題 場の量子論に基づく電子スピンの方程式と電子のカイラリティ
3. 学会等名 第26回量子系分子科学研究セミナー（招待講演）
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 築島 千馬, 瀬波 大土
2. 発表標題 電気伝導中におけるローレンツ力密度とテンション密度の関係についての理論的研究
3. 学会等名 第11回 分子科学討論会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 伊藤 主人, 瀬波 大土
2. 発表標題 QEDの局所物理量に基づく水素結合に関する理論的研究
3. 学会等名 第11回 分子科学討論会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Kazuma Tsukishima, Masato Senami
2. 発表標題 Theoretical Study of the Origin of Resistance in Quantum Electric Conduction Phenomena
3. 学会等名 2017 International Workshop on DIELECTRIC THIN FILMS FOR FUTURE ELECTRON DEVICES ? SCIENCE AND TECHNOLOGY ? (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 築島 千馬, 瀬波 大土
2. 発表標題 量子電気伝導現象における抵抗の起源とテンション密度の関係
3. 学会等名 電子デバイス界面テクノロジー研究会 材料・プロセス・デバイス特性の物理
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Keito Ito
2. 発表標題 Difference of electron chirality between enantiomers and the origin of biomolecular homochirality
3. 学会等名 10th Fundamental Physics Using Atoms (FPUA) 2018
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Toshiki Takahashi
2. 発表標題 Effective electric field for measurement of electron electric dipole
3. 学会等名 10th Fundamental Physics Using Atoms (FPUA) 2018
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Masato Senami
2. 発表標題 Asymmetry of Electron Chirality between Enantiomeric Pair Molecules and the Origin of Homochirality in Nature
3. 学会等名 4th Computational Chemistry Symposium of International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering (ICCMSE) 2018
4. 発表年 2018年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
---------	---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8 . 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------