

Ⅲ. 量子物性研究部門

1. メンバー

教授	矢花 一浩
准教授	小野 倫也、小泉 裕康、全 暁民
講師	前島 展也
学生	大学院生 9 名、学類生 3 名
教授	日野 健一(学内共同研究員、物質工学域)

2. 概要

物質中の電子ダイナミクス、伝導特性、銅酸化物高温超伝導体、レーザー照射による原子・分子の状態制御、固体における光誘起相転移等に関する研究を行っている。電子ダイナミクスについては時間依存密度汎関数理論(TDDFT)に基づく第一原理計算を行い、更に巨視的マクスウェル方程式と微視的 TDDFT 計算をマルチスケール手法で結びつけ高強度なパルス光が物質中を伝播する様子を記述する新しいシミュレーション法の開発も行っている。伝導特性については、量子力学の第一原理に基づいて高精度に計算でき、最先端のスーパーコンピュータで大規模計算を実現できる計算手法の開発を行っている。また、開発した第一原理計算コード RSPACE を用いた大規模シミュレーションにより、表面や界面で起こる物理現象の解明と予測を行っている。さらに、発見した物理現象をデバイスに応用する研究にも取り組むとともに、計算科学手法によるデバイスデザイン技術の構築を推進している。銅酸化物高温超伝導体については、銅酸化物高温超伝導体を始めとする、電子の電荷の自由度が電子のスピン自由度及び格子の自由度と密接に結びついた物質についての量子力学的基礎理論およびその応用についての研究を行っている。特に、銅酸化物高温超伝導体の超伝導機構解明を目指した研究を行っている。また、銅酸化物超伝導体にスピン渦誘起ループ電流の存在を予言しており、スピン渦誘起ループ電流を量子ビットとした量子コンピューターの実現を目指した理論研究も行っている。原子・分子系では、ダイナミクスおよびそれらの電磁場との相互作用により生じる現象について時間依存シュレディンガー方程式の直接解法で解く方法によりシミュレーションを行っている。これは、強レーザー場における原子・分子の非線形過程や反陽子と原子の衝突などにおけるエキゾチック原子の生成、さらに振動磁場などの外場による物理的な過程の制御方法の探索につながる。また、パルスレーザー照射下における半導体(超格子)中の励起子、コヒーレントフォノン状態の解析、光誘起相転移を起こす系における CW レーザー 誘起状態の解析も行なっている。

3. 研究成果

【1】高強度パルス光と誘電体の相互作用の解明

高強度で極めて短いパルスレーザーと物質の相互作用に関する研究は、光科学のフロンティアの一つとして急速に進展している。光の瞬間的な最大強度が 10^{14}W/cm^2 程度を越えると物質は瞬時にプラズマ化され、物質を非熱的に加工する手段として注目されている。一方この光破壊に近い強度では光と物質の相互作用に著しい非線形性が生じる。我々は、このような極限的なパルス光と物質の相互作用を記述する理論と計算法の開発に取り組んでいる。

我々のアプローチの根幹をなすのは、結晶の単位セルに、空間的に一様で時間とともに変化する電場が印加されたときの電子ダイナミクスに対する時間依存密度汎関数理論 (TDDFT) に基づく第一原理計算である。実時間・実空間法を用いて TDDFT の基礎方程式である時間依存コーン・シャム方程式を解くことにより、空間的にはナノメートル以下、時間的にはフェムト秒以下の微視的な解像度で光と物質の相互作用を記述し理解することが可能になる。

この単位セル計算は、与えられた光電場に対して結晶中に生じる電流密度（そして電流密度を時間で積分した分極密度）を得ることができることから、電場と分極を結び付ける数値的な構成方程式とみなすことができる。我々はこの観点から、巨視的マクスウェル方程式と微視的 TDDFT 計算をマルチスケール手法で結びつけ、高強度なパルス光が物質中を伝播する様子を記述する新奇なシミュレーション法 (Maxwell + TDDFT マルチスケールシミュレーション法) の開発に成功している。このシミュレーションは、京コンピュータ程度の今日利用可能な最大規模の計算機を用いてのみ実行可能であり、高強度パルス光と物質の相互作用を自在に記述する手法として注目を集めている。

以下、この課題に関係した今年度の研究の中から特筆すべきものを紹介する。

(1) レーザー光によるシリコン結晶バンドギャップ変化の実時間観測 (M. Schultze 他 (カリフォルニア大)、佐藤 (筑波大院生)、矢花, "Attosecond band-gap dynamics in silicon", *Science* 346, 1348-1352 (2014).)

半導体物質中の電子は光が照射されると、一部の電子が光エネルギーを吸収し、バンドギャップを越えて束縛から解放されることにより、物質中を移動できるようになる。カリフォルニア大の実験グループは、この電子の移動する過程を典型的な半導体物質であるシリコン結晶で、アト秒パルス光を用いた実時間観測することに成功した。実験では非常に短くて強い可視領域のパルス光を照射し電子の励起を引き起こし、続いてさらに短い数十アト秒の X 線パルス照射して、可視パルス光によって電子が励起する過程のスナップショットを撮影している。この実験で、シリコンのバンドギャップが光の照射後 450 アト秒以下の極めて短い時間で変化することが明らかになった。我々は、TDDFT による電子ダイナミクスシミュレ

ーションを行うことで、電子励起のメカニズムの解明に取り組み、実験に相当する条件下で量子トンネル過程による励起が主要であることを示した。また、アト秒パルスによる内殻励起を調べるために必要となる波動関数情報を提供した。

(2) 高強度パルス光を照射したガラス表面に生じる超高速電流の第一原理計算 (G. Wachter 他 (ウィーン工科大)、佐藤、矢花、トン (計科セ) "Ab Initio Simulation of Electrical Currents Induced by Ultrafast Laser Excitation of Dielectric Materials", Phys. Rev. Lett. 113, 087401 (5 pages) (2014).)

高強度なパルス光と物質の相互作用は、素過程に対する興味とともに、光の振動数をクロックとして動作する新奇なデバイス原理の開拓という観点から興味を持たれている。我々は、最近マックスプランク量子光学研究所の実験グループが観測した、高強度パルス光を照射したガラスの表面に超高速電流が生成される現象の解明を目指して、 α -SiO₂ 結晶に対して時間依存密度汎関数理論に基づく第一原理電子ダイナミクス計算を遂行した。

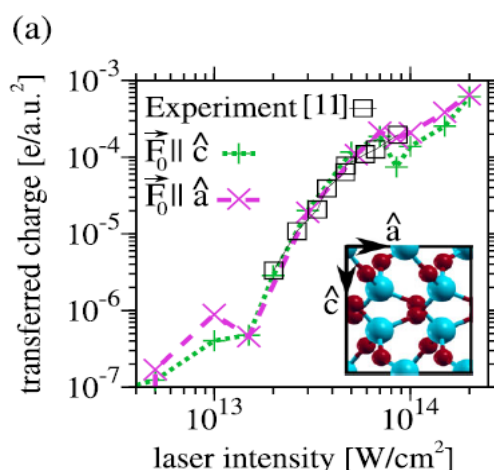


図 1 移動電荷のレーザー強度依存性

図 1 は、パルス光の強度を横軸に、生じた電流により移動した電荷 (分極) を縦軸に示している。図の右端は、誘電体に不可逆な壊変をもたらす強度に近いが、その直前の強度のパルス光の照射により、光の強度とともに指数関数的に増大する電流の発生が確かめられ、測定値を良く再現している。計算によれば、移行電荷は結晶軸と光の偏光方向の角度に敏感に依存しており、電流の発生が電子構造の非等方性に強く依存していることを示唆している。また測定値はパルス光の絶対位相に敏感に依存するが、計算においても同様の依存性が確認された。

(3) フェムト秒レーザーによる光破壊の閾値強度とアブレーション深度の第一原理計算 (佐藤、篠原、乙部 (原研)、李 (APRI、韓国)、矢花、G.F. Bertsch (Univ. Washington), "Time-dependent density functional theory of high-intensity, short-pulse laser irradiation on insulators", arXiv: 1412.1445, (2014).)

高強度なパルス光を透明な誘電体に照射すると、ある強度から物質に不可逆な変化が起き、さらに強度を増すと物質表面から原子が飛散するアブレーションが起こる。フェムト秒程度

の非常に短いパルス光を用いると、これらの光ダメージは、レーザの強度を忠実に反映して局所的に進行し、光ダメージに熱拡散の様相が見られないことが知られており、非熱的レーザ加工法として注目されている。

Maxwell+TDDFT マルチスケールシミュレーション法を用いると、高強度パルス光が透明な誘電体に照射した際の、光から電子へのエネルギー移行を第一原理計算により求めることができる。図 2 は、京コンピュータを用い、 α -SiO₂ に対して計算を行った結果であり、横軸が物質表面からの深度、縦軸が 1 原子あたりの電子励起エネルギーを示している。電子励起エネルギーが物質の結合エネルギーを上回れば、アブレーション等の不可逆変化が起こると考えられることから、計算により物質の光破壊が起こる閾値強度やアブレーション深度を見積もることが可能となると考えられる。計算の結果、レーザダメージの閾値強度は 2 倍程度以下の精度で測定値を再現し、アブレーション深度に関しては測定値である 100-150nm の値を高い精度で再現することを確認している。

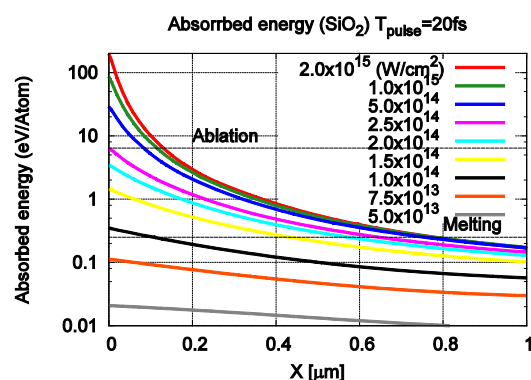


図 2 1 原子あたり電子励起エネルギーの深度依存性

【2】輸送特性計算における高速グリーン関数ソルバーの開発

Overbridging Boundary-Matching(OBM)法や非平衡 Green 関数法により輸送特性を求める際に、半無限電極に挟まれた系の Green 関数を求める必要がある。今、考えるべき Green 関数は

$$G_{ij} = \mathbf{e}_i^T [\epsilon I - H]^{-1} \mathbf{e}_j \quad (i, j = 1, 2, \dots, N_{xy}) \quad (1)$$

である。ここで、 H は左右電極または散乱領域のハミルトニアン、 ϵ は入射電子のエネルギー、 I は単位行列、 \mathbf{e}_i はグリッド上における i 番目の単位ベクトルである。実空間差分法ではハミルトニアンは大規模疎行列となるため LU 分解法などの直接法では、逆行列の計算を実行することは演算量的にもメモリ容量的にも得策ではない。実際の計算の際には(1)式を以下のシフト線形方程式と呼ばれる大規模線形方程式に置き換えて、大規模かつ疎な行列に適した解法である共役勾配法(CG)法を用いて Green 関数の計算を行うのが一般的である。

$$G_{ij}(\epsilon) = (\mathbf{e}_i, \mathbf{x}), [\epsilon I - H] \mathbf{x} = \mathbf{e}_j \quad (i, j = 1, 2, \dots, N_{xy}). \quad (2)$$

OBM 法や非平衡 Green 関数法では、あるエネルギーを持った電子を入射した際の散乱応答を評価しているため、電子伝導に寄与するフェルミレベル近傍の複数エネルギー点に対して(2)式を解く必要がある。これまで Green 関数の求解に用いていた CG 法では、各エネ

ルギーに対する Green 関数を独立に計算していたため、ここで計算が律速されてしまい大規模な系への輸送特性を評価することは困難であった。この数値解法の 1 つに、対称行列向けの高速解法である Shifted COCG 法がある。この手法は大規模疎行列を扱う実空間法に適していること、線形方程式の解法として広く知られている CG 法の考え方を自然に拡張した形式であり、従来の Green 関数計算コードへの組み込み

が容易である。本研究では名古屋大学張グループ、鳥取大学星グループと協力して Green 関数の計算手法として Shifted COCG 法を我々の開発している RSPACE に組み込んだ。

Shifted COCG 法による計算速度向上の評価モデルとしてナトリウム単原子鎖を用いた。ここで、原子間距離 d はナトリウム結晶中における最近接原子間距離 $d=7.0$ bohr とした。散乱領域の大きさは、 $L_x=L_y=10.0$ bohr, $L_z=d$ である。Kohn-Sham 方程式の運動エネルギーの差分近似には中心差分近似を用い、グリッドの間隔は約 0.5 bohr とした。また、電子間の交換相関作用には密度汎関数理論の局所密度近似を用い、原子核からのクーロン相互作用にはノルム保存型擬ポテンシャルを用いた。

図 3 に CG 法と Shifted COCG 法の計算速度の比較を示す。CG 法では、各エネルギー点に対して独立に方程式を解くため、計算時間は点の数にほぼ比例して増加する傾向にある。一方、Shifted COCG 法では、ほぼ横ばいとなっており、点の数に対する依存性は無視できる程度である。エネルギーサンプルが 50 点のとき、約 22 倍の高速化が達成された。

完成させた計算プログラムを用いて、ピーポッドがカーボンナノチューブ電極に挟まれた系で、キャリア電子が内包されたフラウンによって散乱されることを第一原理計算で明らかにした。このような系は、タイトバインディング法で行われた実績があったが、第一原理計算

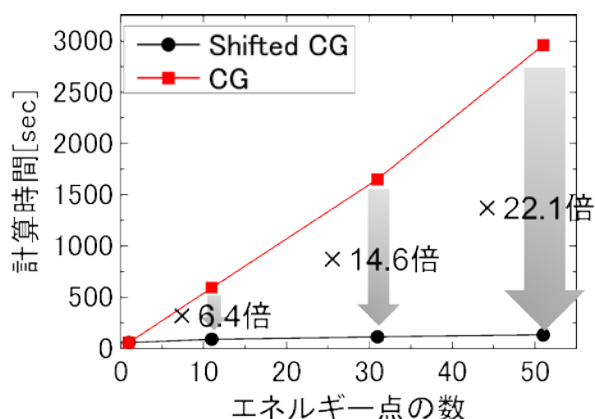


図 3 Shifted CG 法と CG 法の計算時間の比較

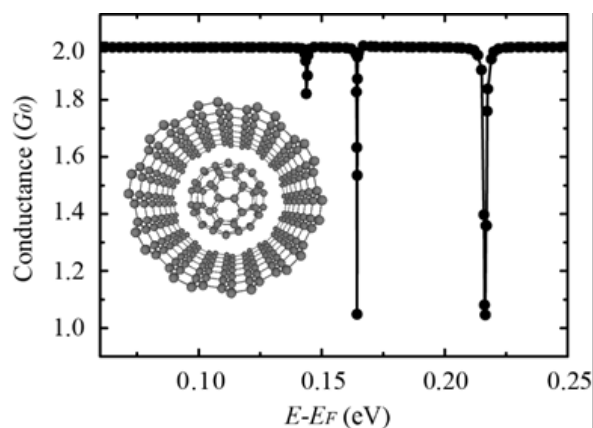


図 4 ピーポッドのコンダクタンス

では計算コストが膨大になるため、扱われた例は私の知る限り皆無である。図 4 に示すように、内包された C_{60} の 3 つある t_{1u} 準位の縮退が解け、それらに入射電子が散乱され、コンダクタンススペクトルに鋭い 3 つのディップが見られる。Shifted CG 法の導入により、多数のエネルギーサンプリングができ、この様にコンダクタンスが急激に変化する部分の詳細な解析が可能になった。

【3】SiC 基板熱酸化機構のシミュレーション

SiC は、Si に比べて高い熱伝導度、高い絶縁破壊電圧、大きなバンドギャップを持つ。これらに加えて、熱酸化により安定な絶縁膜 SiO_2 が得られることから、次世代のパワーデバイス用材料として期待されている。しかし、Si と異なり MOSFET として使用した場合のキャリア移動度が、バルクのキャリア移動度に比べて極端に低いことが SiC-MOSFET の実用化への課題となっている。これは、熱酸化中に生成された界面欠陥によるキャリア散乱が原因であると考えられている。したがって、MOS 構造作成時に生成される界面欠陥の原子構造の理解と制御は、移動度向上に向けた重要な課題となっている。本研究では、密度汎関数理論に基づく第一原理計算により、4H-SiC(001)基板の熱酸化初期と中期での酸化メカニズムの違いを調べた。

密度汎関数理論計算には、本グループで開発している RSPACE を用いた。スーパーセルの界面平行方向のサイズは 4H-SiC(001) の $(6 \times 6\sqrt{3})$ セルとし、基板は、初期酸化モデルで SiC バイレイヤー 6 層分、酸化中期モデルで 4 層分である。基板裏面の C 原子と酸化中期モデルの SiO_2 の未結合手は、水素原子で終端されている。両方のモデルにおいて、SiC の最上面は hexagonal 面である。スーパーセルは、初期酸化モデルで 264 個、酸化中期モデルで 400 個の原子からなる。計算の詳細は、T. Ono and S. Saito, Appl. Phys. Lett. 106 081601 (2015) に記す。

まず、初期酸化モデル表面の SiC 結合の間に一つずつ O 原子を挿入し、酸化エネルギーを

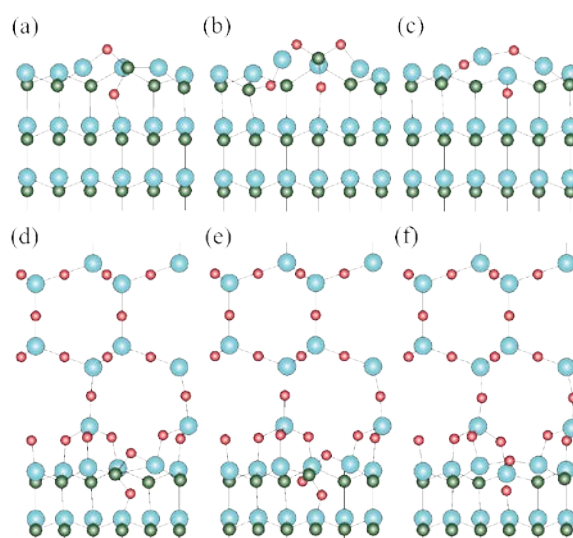


図 5 (上段)4H-SiC(0001)表面モデル。(a) $n=2$ 、(b) $n=4$ 、(c) CO_2 放出前の $n=4$ 。(下段) 4H-SiC(0001)/ β -tridymite SiO_2 界面モデル。(a) $n=2$ 、(b) $n=3$ 、(d) CO 放出前の $n=3$ 。白、緑(大濃灰)、赤(小濃灰)、青(薄灰)の球は、それぞれ H、C、O、Si 原子である。

調べた。図 5 上段に、酸化中に現れる原子構造を示す。また、酸化エネルギーは、 $E_n^{ox} = E_{(n-1)O} + \mu_O - E_{nO}$ と定義した。ここで、 n は挿入した O 原子の数、 E_{nO} は O 原子を n 個挿入したモデルの全エネルギー、 μ_O は真空中の O 分子状態における O 原子の化学ポテンシャルである。挿入した O 原子数に対する酸化エネルギーを図 6 に白棒で示す。

いずれの場合においても、O 原子挿入により安定化されるので、酸化される傾向にある。次に、酸化中に余分な C 原子が放出されるエネルギーを調べた。ここでは、C 原子は CO 分子もしくは CO₂ 分子で放出されるものと仮定し、放出エネルギーを $E_n^{CO_x} = E_{nO}^{w/o C} - E_{(n-x)O}^{w/o C} + E_{CO_x}^{total}$ と定義した。ここで、 $E_{nO}^{w/o C}$ は C 原子放出前の全エネルギー、 $E_{(n-x)O}^{w/o C}$ は C 原子放出後の全エネルギー、 $E_{CO_x}^{total}$ は放出分子の真空中での全エネルギーである。得られた放出エネルギーを図 6 に灰棒、黒棒で示す。

この結果より、初期酸化過程では、O 原子を 4 個挿入した後に CO₂ 分子として放出しやすいことが分かる。

次に、酸化中期過程を模した SiC/SiO₂ 界面の酸化機構を調べた。図 5 の下段に、得られた界面原子構造の例を示す。また、図 7 に酸化エネルギーおよび C 原子放出エネルギーを示す。界面では、O 原子を 3 個挿入した時点で、CO 分子として C 原子を放出する。これは、図 5 (f) に示すように、C 放出によりできた未結合手が、2 個の O 原子によって終端されるからである。一方、表面の場合に優勢であった CO₂ の放出は、最優勢ではない。これは、界面では O 原子が不足している状態であるため、C 原子よりも Si 原子の方が O 原子を引き付けるためである。また、O 原子挿入により反応部分の体積が膨張することが予想できるが、表面の場合は体積膨張によるストレスを表面上方に逃がすことができるのに対し、界面では上部に SiO₂ 層があるため上方に逃がすことができない。したがって、界面の方が体積膨張を抑えるため C 原子を放出するストレスが大きいと、O 原子を 3 つ挿入した時点で、C 原子を CO 分子として放出する。初期酸化と酸化中期で、酸化先端部での C 原子の放出機構(O 原子配位数)や界面ストレスが異なることは、実デバイスで観察されている堆積膜で作成された MOS と熱

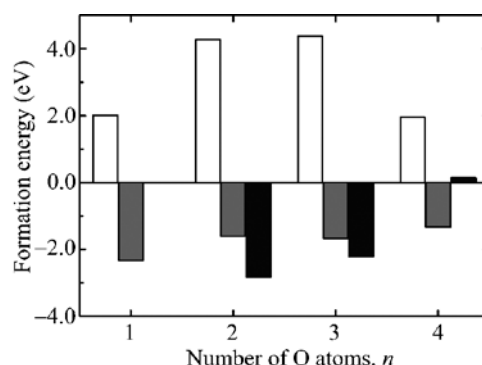


図 6 初期酸化における酸化エネルギー(白)、CO 分子放出エネルギー(灰)、CO₂ 分子放出エネルギー(黒)。

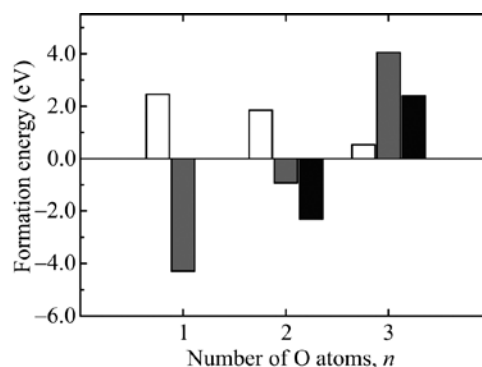


図 7 酸化中期における酸化エネルギー(白)、CO 分子放出エネルギー(灰)、CO₂ 分子放出エネルギー(黒)。

酸化膜で作成された MOS の電気特性の違いを反映しているものであると考えられる。

【4】銅酸化物高温超伝導体の超伝導機構の解明に向けた研究

銅酸化物高温超伝導体の母物質は反強磁性絶縁体であり、そこにホールをドーピングすることにより、超伝導が実現する。ホールは室温では動き回り電流担体となっているが、低温では擬ヤーン・テラー効果による格子変形とそれを中心として発生するスピン渦によりにより、動きが鈍くなっていると考えられる。この状況で、ホールを挟んだ電子間に働く超交換相互作用により、電子は、スピンを回転させながら遍歴運動を起こす。スピンの回転運動の中心は、波動関数のディラックモノポール型の特異点となる。この時、電子波動関数の一価性の要請により全体運動として永久ループ電流をもつ状態が生じる。これが、超伝導状態の高温側に存在する擬ギャップ相であると考えられる。さらに温度を下げると、永久ループ電流がネットワークを作り、巨視的な超伝導電流が流れる状態となる。これが、超伝導相である。このネットワーク形成とそこを超伝導電流が流れる状態に対する波動関数の計算方法を開発した (1. H. Koizumi and A. Okazaki and M. Abou Ghantous, M. Tachiki “Supercurrent flow through the network of spin-vortices in cuprates”, *J. Supercond. Nov. Magn.* **27**, 2435 (2014))。また、この研究で発見された、“電子がスピンを回転させながら遍歴運動を起こす”ことが超伝導電流の発生メカニズムであるということは、BCS 超伝導体に対しても適応可能である事を示した (2. H. Koizumi, M. Tachiki “Supercurrent Generation by Spin-twisting Itinerant Motion of Electrons: Re-derivation of the ac Josephson Effect Including the Current Flow Through the Leads Connected to Josephson Junction”, *J. Supercond. Nov. Magn.* **28**, 61 (2015))。以上の研究は、現在受け入れられている粒子数の非保存(クーパ対の数の揺らぎ)により U(1)ゲージ対称性が起こり、超伝導になるのではなく、“電子がスピンを回転させながら遍歴運動を起こす”ことにより、ディラックモノポール型の特異点が波動関数に生じ、その特異点が U(1)ゲージ対称性を壊し(粒子数は保存される)超伝導が生じていることを示している。

【5】銅酸化物高温超伝導体を使った量子コンピューター実現に向けた研究

我々がその存在を予言しているスピン渦誘起ループ電流は、右回りと左回りの自由度があり、それを量子ビットとして使うことが可能である。スピン渦誘起ループ電流を量子ビットとした量子コンピューター実現の為に、制御ビットを実現しなければならないが、その為の量子ビット間のカップラーについて、外部電流を使うことが可能である事を理論的に示した。また、外部電流からの応答電流が、スピン渦誘起ループ電流系の電流分布を識別する為に使える事も示した。これは、量子コンピューターの結果の読み取りに使える可能性がある。

【6】超短パルス強レーザー場における重水素分子非対称解離の制御

超短パルス強レーザー場における重水素分子解離で産出するイオンの量と向きはレーザー電場の位相と電場包絡線の位相の差に依存するということが実験で明らかになっているが、物理的な起因は分かっていなかった。この実験解明のために、我々は大規模な計算で、その起因を以下のように解明した。まず、レーザー場により、重水素分子が電離され、出てくる電子はレーザー場により加速して、親イオンに戻り、親イオンとの衝突により、親イオンを解離させる。解離された産出物の量と向きは電子が戻る時刻によって、異なるということが

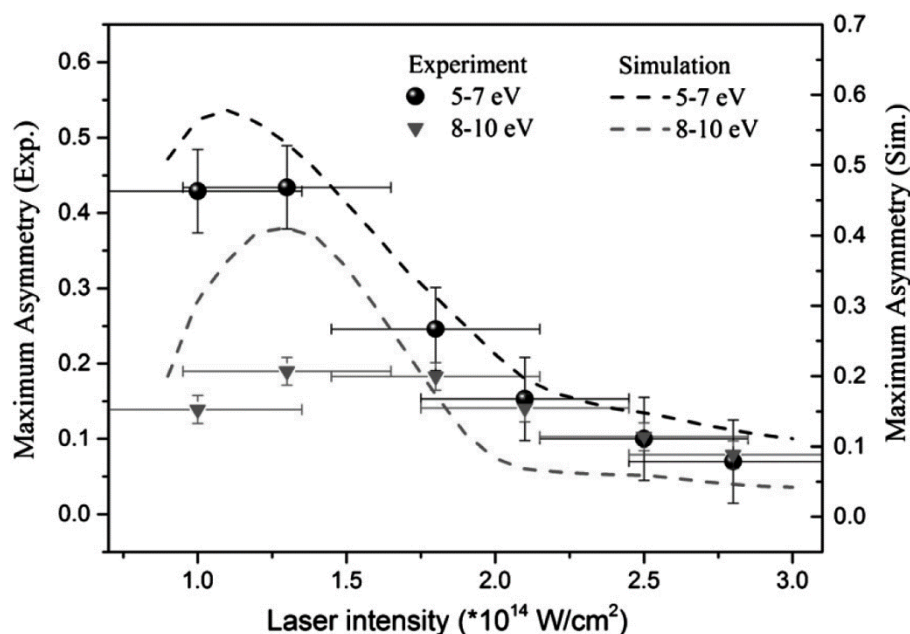


図 8 超短パルス強レーザー場における重水素分子解離の非対称 (右向きと左向きの重水素イオンの差)

明らかになった。この起因に基づいて最大の非対称解離に対応するレーザー強度を見つけた。この計算結果をドイツの実験グループに渡して、図 8 のように、実験と予測した現象が一致した。この研究によって、分子解離過程に対して、有効的な制御が可能になる。共同研究の結果は J. Phys. B に発表された。

【7】中赤外線レーザー場における原子電離過程

中赤外線レーザー場における原子電離について、理論の予測では低エネルギー電離電子の量が極めて少ないが、実験の観測では図 9 のように強い低エネルギー電子が見つかった。その起因はこの分野の研究焦点の一つである。我々はフランスの実験グループとオーストリアの理論グループと共同で、実験と第 1 原理の量子論計算、古典力学の計算を同時に行って、その異常な強い低エネルギー電子の起因を明らかにした。その低エネルギー電子は従来の理論予測で直接電離される電子と異なり、レーザー場で励起される電子が再びレーザー場や静

電場によって2次電離された電子である。その電子は励起状態の情報を持っているので、この手法で原子の高い励起状態の分析が可能になった。共同研究結果はPhys. Rev. Aに発表された

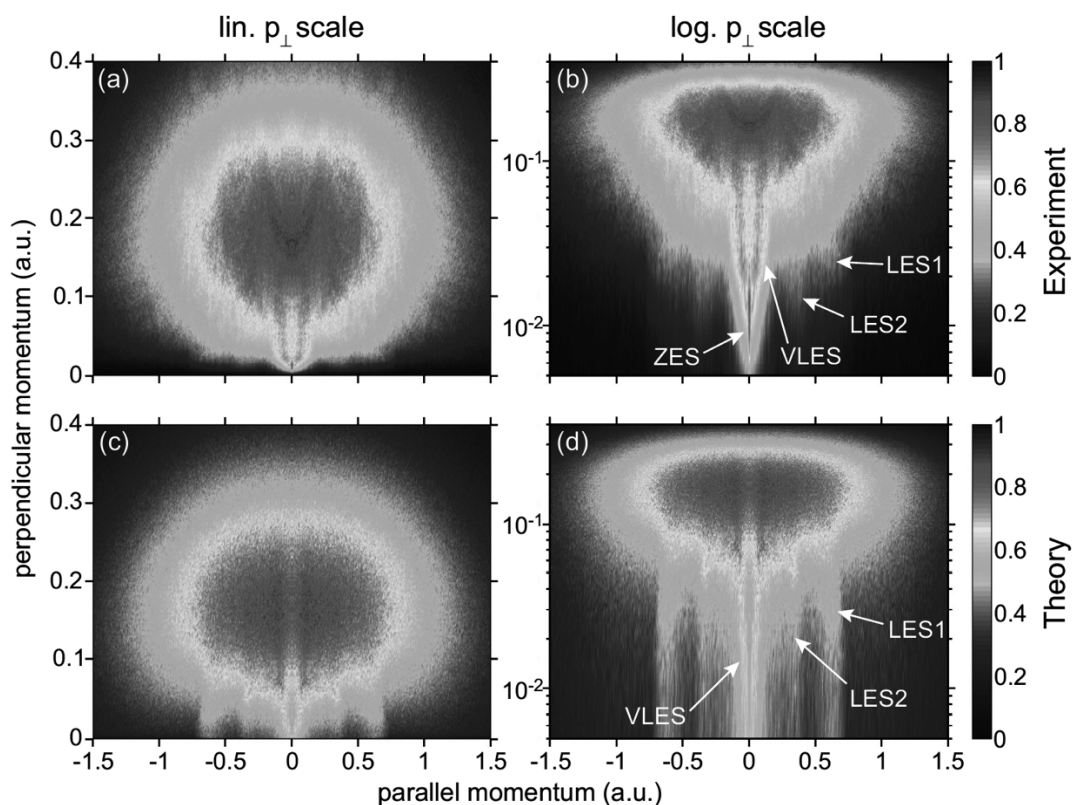


図9 中赤外線強レーザー場における Ar 原子電子運動量分布 (上: 実験、下: 理論)

【8】半導体・強相関電子系におけるレーザー誘起ダイナミクス

N 型 Si などの半導体にパルスレーザーを照射した場合に発生するコヒーレントフォノンの発現機構についてボゾン化法に基づく解析的・数値的方法により調べた。レーザー照射直後は電子正孔対による連続準位からの寄与によるブロードなピークが光学応答スペクトルに出現するが、時間の経過とともにそれが減少してフォノン起源のピークが明瞭となり、前述の連続準位とフォノン状態の相互作用の種類によっては過渡的なファノ共鳴現象が発現することが分かった。またペロブスカイト型バナジウム酸化物 RVO_3 (R は Y もしくは希土類) における光照射による状態変化を調べるため、 $2 \times 2 \times 2$ クラスタ上での 2 軌道ハバード模型に対する厳密対角化計算を行った。励起光の偏光を z 軸に平行とした場合の計算の結果、基底状態と光励起状態ではスピン構造因子に大きな差異がみられること、そしてその原因が xy 平面内を動く光キャリアの存在にあることが分かった。更に、光誘起相転移を起こす物質として知られる一次元電荷移動錯体 TTF-CA に対して、可視光よりもはるかに低エネルギー

ギーのパルスレーザーを照射した場合のレーザー誘起ダイナミクスを有限系に対する対角化計算などの手法で調べ、光キャリアが発生しない場合でもレーザーが赤外活性なスピン波を励起することで逆スピン・パイエルス転移と呼ばれる光誘起相転移が生じる可能性があることを示した。

4. 教育

修士論文

- 岡崎 智 スピン渦誘起ループ電流の自己無撞着場と相転移温度、外部電流存在下での自発電流
- 大野文隆 フラクショナルな動的 Wannier-Stark Ladder における Floquet 状態の不安定化
- 渡辺陽平 コヒーレントフォノン生成初期時間領域における量子ダイナミクスの理論研究

卒業論文

- 渥美雅俊 銅酸化物超伝導体におけるスピン渦誘起ループ電流の相転移
- 森崎 翼 スピン渦誘起ループ電流を使ったナノのスケール電流素子
- 横井浩太 1次元スピン・パイエルス系におけるレーザー誘起ダイナミクス
- 石島 俊 過渡的着衣プラズモンにおける Landau 様減衰効果

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

1. 日本学術振興会科学研究費、基盤研究 (B)、矢花一浩、代表、2014 年度 3250 千円、「固体中のフェムト・アト秒電子ダイナミクスに対する第一原理計算」
2. 日本学術振興会科学研究費、新学術領域研究 (研究領域提案型) 公募研究、矢花一浩、代表、2014 年度 1950 千円、「光と電子のダイナミクスを記述する第一原理マルチスケールシミュレーション法の開発」
3. 日本学術振興会二国間交流事業オープンパートナーシップ共同研究 (アメリカ合衆国)、矢花一浩、代表、2014 年度 2320 千円、「超高速電子ダイナミクスに対する第一原理計算アプローチ」
4. 株式会社 IHI との共同研究、2014 年度研究経費 1000 千円、「時間依存第一原理解析によるフェムト秒レーザと物質との相互作用に関する研究」
5. 科学技術振興機構、戦略的創造研究推進事業・さきがけ、小野倫也、代表、2013 年度より継続、7361 千円、「計算科学的手法による省電力・低損失デバイス用界面のデザイン」
6. 東京大学、委託研究、小野倫也、代表、2012 年度 2360 千円、「実空間手法に基づくナ

ノ構造の電子・スピン輸送特性計算コードの開発」

7. 日本学術振興会科学研究費、新学術領域研究（研究領域提案型）計画研究、小野倫也、分担、2011 年度より継続、1700 千円、「密度汎関数法理論に基づく非平衡ナノスケール電気伝導ダイナミクス」
8. 科学技術振興機構、戦略的創造研究推進事業・CREST、小野倫也、分担、2011 年度より継続、0 円、「ナノとマクロの相界面の物質移動ナノサイクル」
9. 科学技術振興機構、先導的物質変換領域、小野倫也、分担、2012 年度より継続、0 円、「二酸化炭素活性化機構の学理に基づくメタノール室温合成触媒の創成」
10. 文部科学省、ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に関するアプリケーション開発・研究開発、小野倫也、分担、2014 年度 0 円、「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」
11. 日本学術振興会科学研究費、基盤研究(C)、全 曉民（トン ショウミン）、代表、2014 年度 650 千円、「赤外線レーザーの付加による原子・分子高速過程の制御の理論研究」
12. 日本学術振興会科学研究費、若手研究(B)、前島 展也、代表、2014 年度 2340 千円、「多自由度強相関電子系における光誘起超高速ダイナミクスの生成と制御」

6. 研究業績

(1) 研究論文

A) 査読付き論文

1. M. Schultze, K. Ramasesha, C.D. Pemmaraju, S.A. Sato, D. Whitmore, A. Gandman, J.S. Prell, L.J. Borja, D. Prendergast, K. Yabana, D.M. Neumark, S.R. Leone, "Attosecond band-gap dynamics in silicon", *Science* **346**, 1348-1352 (2014).
2. S.A. Sato, Y. Shinohara, T. Otobe, K. Yabana, "Dielectric response of laser-excited silicon at finite electron temperature", *Phys. Rev. B* **90**, 174303 (2014).
3. G. Wachter, C. Lemell, J. Burgdoerfer, S.A. Sato, X.-M. Tong, K. Yabana, "Ab Initio Simulation of Electrical Currents Induced by Ultrafast Laser Excitation of Dielectric Materials", *Phys. Rev. Lett.* **113**, 087401 (2014).
4. S.A. Sato, K. Yabana, "Efficient basis expansion for describing linear and nonlinear electron dynamics in crystalline solids", *Phys. Rev. B* **89**, 224305 (2014).
5. M. Noda, K. Ishimura, K. Nobusada, K. Yabana, T. Boku, "Massively-parallel electron dynamics calculations in real-time and real-space: Toward applications to nanostructures of more than ten-nanometers in size", *J. Comput. Phys.* **265**, 145-155 (2014).
6. T. Ono, S. Saito, "First-principles study on the effect of SiO₂ layers during oxidation of 4H-SiC",

- Applied Physics Letters, **106** 081601 1-4 (2015).
7. H. D. Nguyen, T. Ono, “Electron-transport properties of ethyne-bridged diphenyl zinc-porphyrin molecules”, Japanese Journal of Applied Physics, **54** 055201 1-4 (2015).
 8. S. Iwase, T. Hoshi, T. Ono, “Numerical solver for first-principles transport calculation based on real-space finite-difference method”, Phys. Rev. E, accepted.
 9. H. Koizumi and A. Okazaki and M. Abou Ghantous, M. Tachiki, “Supercurrent flow through the network of spin-vortices in cuprates”, J. Supercond. Nov. Magn. **27**, 2435 (2014)
 10. H. Koizumi, M. Tachiki, “Supercurrent Generation by Spin-twisting Itinerant Motion of Electrons: Re-derivation of the ac Josephson Effect Including the Current Flow Through the Leads Connected to Josephson Junction”, J. Supercond. Nov. Magn. **28**, 61 (2015)
 11. C. Mancuso, D.D. Hickstein, P. Grychtol, R. Knut, O. Kfir, X.M. Tong, F. Dollar, D. Zusin, M. Gopalakrishnan, C. Gentry, E. Turgut, J.L. Ellis, M.C. Chen, A. Fleischer, O. Cohen, H.C. Kapteyn, and M.M. Murnane, “Strong-field ionization with two-color circularly polarized laser fields”, Phys. Rev. A **91**, 031402(R) (2015).
 12. B. Wolter, C. Lemell, M. Baudisch, M.G. Pullen, X.M. Tong, M. Hemmer, A. Senftleben, C.D. Schroter, J. Ullrich, R. Moshhammer, J. Biegert, and J. Burgdorfer, “Formation of very-low-energy states crossing the ionization threshold of argon atoms in strong mid-infrared fields”, Phys. Rev. A **90**, 063424 (2014).
 13. Z.M. Hu, Y.M. Li, X.Y. Han, D. Kato, X.M. Tong, H. Watanabe and N. Nakamura, “Atomic-number dependence of the magnetic-sublevel population in the autoionization state formed in dielectronic recombination”, Phys. Rev. A **90**, 062702 (2014).
 14. Q.G. Li, X.M. Tong, T. Morishita, C.J. H. Wei and C.D. Lin, “Rydberg states in strong field ionization of hydrogen by 800, 1200 and 1600 nm lasers”, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **47**, 204019 (2014).
 15. G. Wachter, C. Lemell, J. Burgdorfer, S.A. Sato, X.M. Tong and K. Yabana, “Ab initio Simulation of Electrical Currents Induced by Ultrafast Laser Excitation of Dielectric Materials”, Phys. Rev. Lett. **113**, 087401 (2014).
 16. H. Li, A.S. Alnaser, X.M. Tong, K.J. Betsch, M. Kubel, T. Pischke, B. Förg, J. Schötz, F. Sumann, S. Zherebtsov, A. Kessel, S. Trushin, A. Azzeer, and M.F. Kling, “Intensity dependence of the attosecond control of the dissociative ionization of D₂”, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **47**, 124020 (2014).
 17. D.A. Arbo, S. Nagele, X.M. Tong, X.H. Xie and M. Kitzler, J. Burgdorfer, “Interference of electron wave packets in atomic ionization by subcycle sculpted laser pulses”, Phys. Rev. A **89**,

043414 (2014).

18. Y. Matsubara, S. Ogihara, J. Itatani, N. Maeshima, K. Yonemitsu, T. Ishikawa, Y. Okimoto, S. Koshihara, T. Hiramatsu, Y. Nakano, H. Yamochi, G. Saito, and K. Onda, "Coherent dynamics of photoinduced phase formation in a strongly correlated organic crystal", Phys. Rev. B 89, 161102(R) (2014)

B) 査読無し論文

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

1. H. Koizumi, "Supercurrent generation in cuprate: spin-vortex model", XXII International symposium on the Jahn-Teller effect, Institute of Experimental Physics, Technical University of Graz, Graz, Austria, Aug. 18-22, 2014.

B) 一般講演

1. K. Yabana, "Progress in first-principles electron dynamics calculations", LAP Annual Meeting, Sept. 22-26, 2014, Frauenchiemsee, Germany
2. K. Yabana, "Time-resolved dynamical Franz-Keldysh effect", Seminar at Vienna Tech., Sept. 29, 2014, Vinnna, Austria
3. K. Yabana, "Time-dependent density functional theory of high-intensity, short-pulse laser irradiation on dielectrics", Seminar at POSTECH, Nov. 10, 2014, Postech, Korea
4. T. Ono, "First-Principles Simulation for Oxidation Process of 4H-SiC", The 17th Asian Workshop on First-principles Electronic Structure Calculations, Nov. 3-5, 2014, Seoul, Korea
5. S. Iwase, T. Ono, "Efficient treatment of the surface Green's function based on real-space finite-difference scheme", The 17th Asian Workshop on First-principles Electronic Structure Calculations, Nov. 3-5, 2014, Seoul, Korea
6. C. Kirkham, T. Ono, "Effect of SiC Stacking on the Electronic Properties of the SiC/SiO₂ Interface", The 17th Asian Workshop on First-principles Electronic Structure Calculations, Nov. 3-5, 2014, Seoul, Korea
7. S. Iwase, T. Ono, "Efficient treatment of the Green's function for first-principles transport calculation", The 2nd International Symposium on Computics: Quantum Simulation and Design, Dec. 1-3, 2014, Tokyo, Japan
8. T. Ono, "DFT calculations for oxidation of SiC", The 2nd International Symposium on Computics: Quantum Simulation and Design, Dec. 1-3, 2014, Tokyo, Japan
9. C. Kirkham, T. Ono, "Effect of SiC stacking on the electronic properties of the SiC/SiO₂

- interface,” The 2nd International Symposium on Computics: Quantum Simulation and Design, Dec. 1-3, 2014, Tokyo, Japan
10. T. Ono, “Density functional theory study on oxidation of SiC”, Semiconductor Interface Specialists Conference, Dec. 10-13, 2014, San Diego, USA
 11. C. Kirkham, T. Ono, “Interplay between defects and stacking at the SiC/SiO₂ interface”, 17th International Workshop on Computational Physics and Materials Science: Total Energy and Force Methods, Jan. 15-17, 2015, Trieste, Italy
 12. T. Ono, “First-Principles Calculation for Thermal Oxidation Process of SiC”, 17th International Workshop on Computational Physics and Materials Science: Total Energy and Force Methods, Jan. 15-17, 2015, Trieste, Italy
 13. D. Kieplinski, W.C. Wallace, O. Ghafur, J.E. Calvert, C. Khurmi, D.E. Laban, I.V. Litvinyuk, R.T. Sang, K. Bartschat, D. Moines, A.N. Grum-Grzhimailo, D. Wells, H.M. Quiney, X.M. TONG, “Percent-level accuracy in measuring photoionisation yields and peak intensities for intense few-cycle laser pulses”, 45th Annual Meeting of the APS Division of Atomic, Molecular and Optical Physics, June 2-6, 2014, Madison, Wisconsin, USA
 14. Y. Watanabe, Y. Nemoto, K. Hino, N. Maeshima, “Polaronic Quasiparticle Picture for Coherent Phonon Dynamics in Semiconductors”, ICPS2014, August 10-15, 2014, Austin, Texas, USA

(3) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

1. 矢花一浩、"透明材料におけるアブレーション初期過程の第一原理計算"、第15回光量子科学研究シンポジウム、原研関西光科学研究所、2014年11月13-14日
2. 矢花一浩、"トリプルアルファ反応率の量子力学計算"、第27回理論懇シンポジウム「理論天文学・宇宙物理学と境界領域」、国立天文台三鷹キャンパス、2014年12月24-26日
3. 小野倫也、“第一原理計算を用いたナノデバイスの機能予測”、応用物理学会関西支部平成26年度第2回講演会「シミュレーションが先導するエレクトロニクス・フォトンクス研究 ～関西発イノベーションと若手からの発信～」、神戸、2014年11月12日

B) その他の発表

1. 矢花一浩、"光駆動電子ダイナミクスの第一原理計算"、「限界光駆動系のコンセプトとめざす学理」研究会、京大化研、2014 年 8 月 22 日
2. 矢花一浩、"超高速光電子ダイナミクスの第一原理計算"、「先端物質科学と限界光駆動」、京大吉田キャンパス北部構内益川ホール、2015 年 1 月 10-11 日
3. 矢花一浩、"フェムト秒レーザーと物質の相互作用に対する第一原理量子ダイナミクス計算"、京大工学部三浦研セミナー、2015 年 1 月 15 日
4. 岩瀬滋、小野倫也、「第一原理伝道計算によるピーポッドの輸送特性評価」、応用物理学会 2014 年度秋季大会、北海道大学札幌キャンパス、2014 年 9 月 17-20 日
5. 岡崎智、小泉裕康、「スピン渦誘起ループ電流相転移シミュレーション」、日本物理学会 2014 年秋季大会、中部大学春日井キャンパス、2014 年 9 月 7-10 日
6. 小泉裕康、立木昌、「スピン渦超伝導理論による $hc/4e$ 磁束発生の機構」、日本物理学会 2014 年秋季大会、中部大学春日井キャンパス、2014 年 9 月 7-10 日
7. 若浦光、岡崎智、小泉裕康、「スピン渦誘起ループ電流量子ビットにおける最適電流配置」、日本物理学会 2014 年秋季大会、中部大学春日井キャンパス、2014 年 9 月 7-10 日
8. 岡崎智、小泉裕康、若浦光、森崎翼、「スピン渦誘起ループ電流の自己無撞着場計算」、日本物理学会第 70 回年次大会、早稲田大学早稲田キャンパス、2015 年 3 月 21-24 日
9. 小泉裕康、立木昌、「スピン渦誘起ループ電流、交流ジョセフソン効果、電荷に関する超選択則」、日本物理学会第 70 回年次大会、早稲田大学早稲田キャンパス、2015 年 3 月 21-24 日
10. 若浦光、岡崎智、森崎翼、小泉裕康、「スピン渦誘起ループ電流を量子ビットとした量子コンピューターのアーキテクチャー」、日本物理学会第 70 回年次大会、早稲田大学早稲田キャンパス、2015 年 3 月 21-24 日
11. 森崎翼、岡崎智、若浦光、小泉裕康、「スピン渦誘起ループ電流を使ったナノのスケール電流素子」、日本物理学会第 70 回年次大会、早稲田大学早稲田キャンパス、2015 年 3 月 21-24 日
12. "1 次元拡張イオン性ハバード模型におけるレーザー誘起ダイナミクス"、前島展也、日野健一、日本物理学会、2014 年秋季大会、中央大学、2014 年 9 月 7 日-10 日
13. "ポーラロニック準粒子描像に基づく過渡的ファノ共鳴を伴うコヒーレントフォノンダイナミクス"、渡辺陽平、日野健一、根本裕也、前島展也、長谷宗明、日本物理学会第 70 回年次大会、早稲田大学、2015 年 3 月 21-24 日

(4) 著書、解説記事等

1. K. Yabana, Y. Shinohara, T. Otake, J.-I. Iwata, G.F. Bertsch, "First-Principles Calculations for Laser Induced Electron Dynamics in Solids - Time-Dependent Density-Functional Theory for laser matter interactions", Advances in Multi-Photon Processes and Spectroscopy, Vol. 21, pp. 209-244, Eds. S.H. Lin, A.A. Villaeys, Y. Fujimura, World Scientific (2014).
2. 小野倫也、“実空間差分法に基づく第一原理輸送特性計算によるナノ構造体の電子輸送特性”、シミュレーション、**34** 18-22 (2015).

7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

異分野間連携

1. 宇宙・原子核物理研究部門との共同研究
矢花は、量子物性部門とともに宇宙・原子核物理研究部門にも所属し、両分野において時間依存密度汎関数理論に基づく実時間・実空間解法を用いた多フェルミオン系ダイナミクスの研究を推進している。
2. 高性能計算システム研究部門との共同研究
矢花は、高性能計算システム研究部門の朴、及び大学院生の廣川と、実時間電子ダイナミクス計算コード ARTED のメニーコアシステムを用いた加速に関して共同研究を行っている。
3. 高速数値計算アルゴリズム開発
小野は、名古屋大学数理グループ及び鳥取大学の物性理論グループと、高速数値計算アルゴリズム開発に関して共同研究を行っている。
4. 界面の電子構造解析に関する共同研究
筑波大学パワーエレクトロニクス研究室矢野裕司准教授と SiC/SiO₂ 界面の原子構造の解析について議論を行っている。

国際連携

1. 日本学術振興会二国間交流事業共同研究（平成 25～27 年度）
米国との間で、超高速電子ダイナミクスに対する第一原理計算アプローチをテーマとする共同研究を平成 25 年度より推進している。米国はバンダービルト大学及びワシントン大学（米国側代表はバンダービルト大学の K. Varga 准教授）、日本側は筑波大学の他、分子科学研究所、日本原子力研究開発機構（日本側代表は矢花）が参加している。

2. アト秒科学に関する国際共同研究

矢花は、アト秒科学に関し、マックスプランク量子光学研究所の実験グループ (F. Krausz 教授、M. Schultze 研究員、他)、チューリッヒ工科大学の実験グループ (U. Keller 教授、他) と国際共同研究を推進している。

3. 時間依存密度汎関数理論に基づく光科学に関する国際共同研究

矢花、全は、ウィーン工科大学の理論グループ (J. Burgdoerfer 教授、及びそのグループメンバー) と、実時間電子ダイナミクス計算コード ARTED を用いた国際共同研究を推進している。

4. 第一原理計算コード国際共同開発

小野は、ドイツ・チューリッヒ研究センター及び北海道大学応用物理の物性理論グループと第一原理計算コードの開発に関して共同研究を行っている。

8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

1. 2015 年 2 月に大阪大学にて開催された CMD ワークショップのスパコンコースで、本グループで開発している第一原理計算コード RSPACE のチュートリアルを行った。

9. 管理・運営

1. 矢花は、センターの共同研究担当主幹として、当センターの全国共同利用業務である学際共同利用プログラムの運営を統括した。また、数理物質系物理学域長・数理物質科学研究科物理学専攻長を務めた。
2. 前島は計算科学研究センター共同利用委員会の一般利用 WG において、当センター大規模一般利用プログラムの申請受付などの業務を担当した。

10. 社会貢献・国際貢献

11. その他