

IV. 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
研究員	植本 光治、佐藤 駿丞
学生	大学院生 8 名
教授	日野 健一(学内共同研究員、物質工学域) 岡田 晋(学内共同研究員、物理学域) 押山 淳(客員教授、東京大学大学院工学系研究科)

2. 概要

本部門は、計算物質科学のいくつかの分野にわたる研究を行なっているが、特に光科学に関係した計算物質科学研究に特色を有している。時間依存密度汎関数理論 (TDDFT) に基づく固体中の電子ダイナミクスや光応答の計算、時間依存シュレディンガー方程式に基づく原子や分子と光の相互作用、強相関電子系の光応答など、様々な物質を対象とした光科学分野の計算科学研究を行なっている。また、界面の伝導特性に対して第一原理に基づく解析を進めており、SiC-MOSFET 開発に用いる界面の電子状態とキャリア散乱特性の計算を行った。強相関電子系に関しては、銅酸化物高温超伝導体の超伝導機構に関連して電子のスピン自由度をつかした新奇な電気伝導のメカニズム解明と、それを量子ビットとした量子コンピュータの実現を目指した理論研究も行っている。

3. 研究成果

【1】パルス光からガラスへの超高速エネルギー移行 (佐藤、矢花)

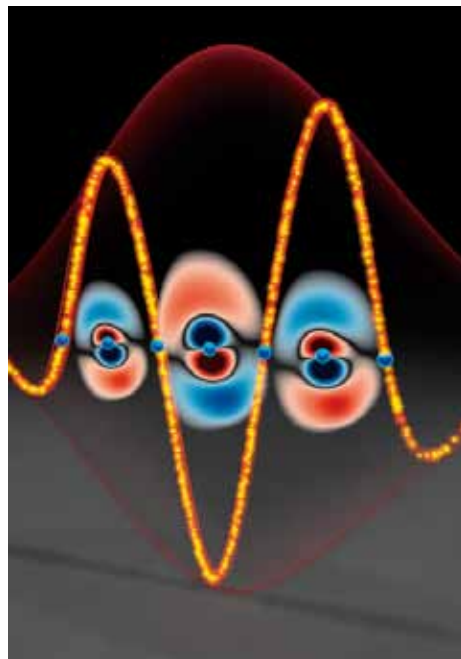
本部門では、時間依存密度汎関数理論 (TDDFT) に基づく電子ダイナミクスの第一原理計算と、パルス光の電磁場を記述するマクスウェル方程式を多階層で連結したシミュレーション法を独自に開発し、高強度超短パルス光と物質の相互作用に関する先端の光科学研究を展開している。本研究は、高強度超短パルスレーザーから透明物質の電子へ、光の1周期よりも短い時間スケールでエネルギーが移行する過程を、マックスプランク量子光学研究所のアト秒科学実験グループと協力して解明したものである。

実験は Fused Silica、計算は α クォーツ (共に SiO_2) の $10\ \mu\text{m}$ の薄膜に対して、平均振動数 1.55eV の数サイクルの高強度超短パルスレーザーを照射する。測定と計算を直接比較することのできる量の一つは、薄膜を透過したパルス光の波形そのものである。実験的にはア

ト秒ストリーキングの方法を用いて計測され、計算では直接透過波の波形を求めることができる。破壊閾値に近い強度のパルスレーザーに対して、測定と計算は共にパルス波形の変化は小さく、両者で変化の傾向（包絡形状と位相）は定性的に一致することが示された。実験で得られたパルス波形変化から、薄膜の中央においてパルス光から物質電子へのエネルギー変化を得ることができ、これをシミュレーションの結果と比較した。その結果、ある強度領域の極めて小さい強度の範囲で、パルス光から物質電子へのエネルギー移行が急激に増大することが示された。その域値は、実験と計算で良く一致している。この結果は透明材料のレーザー加工初期過程で起こる光から物質へのエネルギー移行を初めて直接捉えたものとして、注目される。

本研究の成果を含む論文 A. Sommer et.al, Nature 534, 86-90 (2016)の出版時にプレスリリースを行なった（2016年5月20日）。

図1：左から来る黄色い光が二酸化ケイ素の原子に照射し、各原子の周りにいる電子を振動させる。この電子の動きが光波のエネルギーを吸収する。パルス光の終わりで、電子による吸収されたエネルギーは再び光波に戻る。この物質を通過した後の光波の時間波形を正確に測定し、アト秒の速さで変化する固体の電子の運動を、実時間観測することが可能になった。



【2】光サイクル以下の時間スケールで起こるダイヤモンド光応答の超高速変化（佐藤、矢花）

電子ダイナミクスに対する TDDFT 計算と光電磁場に対するマクスウェル方程式を組み合わせた第一原理計算を用い、チューリッヒ工科大学のアト秒実験グループと協力して、ダイヤモンドに数サイクルのパルス光を照射した時に、光の1サイクルよりも短い時間スケールでダイヤモンドの光応答（誘電関数）が変化することを示した。

実験と第一原理シミュレーションはともに、50nmの厚さを持つダイヤモンド薄膜に平均振動数1.55eV、数サイクルの高強度パルス光をポンプ光として照射し、それと時間差を制御した平均振動数が40eV程度のアト秒プローブパルス光を照射して、ポンプ光電場がダイヤモンドの40eV近傍の領域に引き起こすプローブ光吸収率の変化を調べた。測定とシミュレーションにより、光電場の大きさに依存して吸収が変化する様子を明らかにすることができた。

シミュレーションの内容を分析することにより、この吸収率の変化が動的フランツ・ケルディッシュ効果によることがわかった。フランツ・ケルディッシュ効果は、バンドギャップ

を持つ誘電体に静電場を印加した時に、電子のトンネル効果によりバンドギャップ以下のエネルギーで光吸収が起こる現象である。本研究は数フェムト秒で振動する電場を照射した場合でも、それに起因する電子運動が誘電率の超高速変化をもたらすことを示したものであり、この結果は将来の光波を用いた新奇なエレクトロニクスの実現に向けて、重要基礎的知見を与えるものである。

本研究の成果を含む論文 M. Lucchini et.al, *Science* 353, 916-919 (2016)の出版時にプレスリリースを行なった (2016年8月26日)。

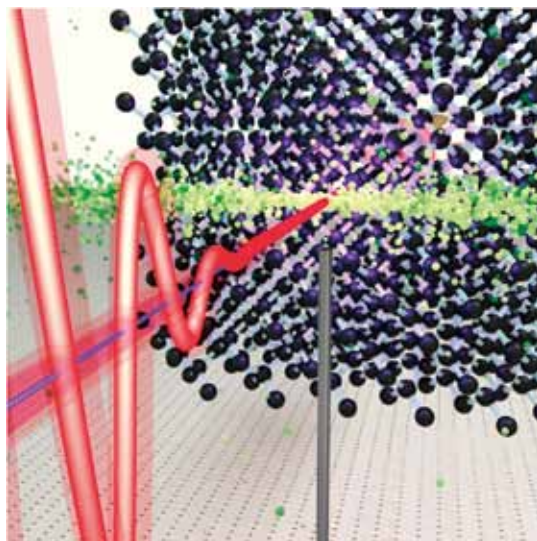


図 2 : ダイヤモンドの薄膜にレーザーパルス照射の様子。

【3】電子ダイナミクス計算コード ARTED の開発 (植本、佐藤、矢花、廣川 (システム情報工学研究科)、朴 (高性能計算システム研究部門))

我々のグループで独自に開発を進めてきた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コード ARTED (Ab-initio Real-Time Electron Dynamics simulator)が多様な計算機において高速に動作するよう、アプリ開発者とシステム研究者との密接な協力によるチューニングを進めた。ARTED は、平成 26 年度の HPCI による「京」コンピュータの一般利用において、最も高い実効性能を持つアプリと認定され表彰された。また、筑波大学と東京大学が共同で運用を開始したメニーコアスパコン Oakforest-PACS を高効率で利用できるよう、Intel Xeon Phi の Knights Landing プロセッサに対するチューニングを進めた。

ARTED を始めとする電子ダイナミクス計算コードを整備して、光科学分野において有用な第一原理ソフトウェアを開発・応用することを目指す CREST 研究「光・電子融合第一原理計算ソフトウェアの開発と応用」(代表：矢花一浩)が、平成 28 年 10 月よりスタートした。この課題は、分子科学研究所の信定グループとの密接な協力を予定しており、分子研ではナノ構造体における電子ダイナミクスを計算するコード GCEED を開発している。CREST 研究の開始を機会に、ARTED と GCEED を統合し、固体からナノ構造までを対象とするソフトウェア SALMON (Scalable Ab-initio Light-Matter simulator for Optics and Nanoscience)を開発することを決め、準備作業を進めた。

【4】光電磁場と電子ダイナミクスを結合した超大規模計算の試み (植本、佐藤、矢花、廣川 (システム情報工学研究科)、朴 (高性能計算システム研究部門))

Oakforest-PACS の試験期間に、同スパコンの全ノードを用いて ARTED による光・電子ダイナミクス超大規模計算を行う機会を得た。これまで光電磁場のマクスウェル方程式と

TDDFT による電子ダイナミクス計算では、電子ダイナミクスは常に 3 次元であるが光伝播に関しては 1 次元計算に限られていた。この全ノードを使用できる機会を利用して、光電磁場を記述するマクスウェル方程式が 2 次元及び 3 次元となる場合について計算を行った。2 次元の場合には光渦を伴う入射パルス光とグラファイト、シリコン表面の相互作用を、3 次元の場合にはシリコンからなるナノピラーや平面状に配置したナノ球体とパルス光の相互作用に関する計算を行った。両者の場合とも、多数のノードを用いた場合にも高いスケーリングを示し、高効率な計算が行えることを確認した。

【5】グラファイト薄膜の非線形光応答計算（植本、矢花）

グラファイトに超短パルス光を照射した際に起こる、光から電子へのエネルギー移行を調べた。グラファイトの単層からなるグラフェンでは 2 次元バンド構造を反映し、非線形光応答の一種である可飽和吸収が顕著に現れることが知られており、すでに超短パルスレーザー発振に応用されている。我々はグラファイトに対して時間依存密度汎関数理論に基づく第一原理計算を行い、パルス電場から電子へのエネルギー移行の様子を調べた。その結果、 10^{10} - 10^{12} W/cm² 程度の限られた強度範囲で、パルスの時間長を増してもエネルギー移行が増大しないことが見出された。このエネルギー移行の飽和現象を理解するため、印加した電場と誘起された電流の関係を調べたところ、半金属であるグラファイトでは通常はオームの法則が成立するが、飽和が起こる強度ではパルス電場が照射する途中で、オームの法則の成り立つ領域から反オーム応答へと変化すること、またより高い強度では絶縁体応答へと変化の様子が見出された。これらは、可飽和吸収現象のメカニズムの理解や、炭素材料に対する非熱レーザー加工の初期過程を理解する上で有用な知見を与えるものである。本研究は、株式会社 IHI との共同研究として行なっている。

【6】固体非線形光応答の実時間・実空間分析（植本、佐藤、矢花）

物質の摂動的な非線形応答を調べる第一原理計算手法として、時間依存密度汎関数理論の実時間計算に基づく方法を、昨年度に引き続き検討した。結晶の単位セルに、波形が等しく強度のみ異なるパルス電場を複数照射した時の電流や電子密度変化を求め、数値的な差分により 2 次、及び 3 次の非線形応答を得る方法である。

【7】第一原理計算コード RSPACE の開発（小野）

超並列計算機での計算に適した実空間差分法に基づく第一原理電子状態・伝導特性計算法とこの方法に基づく計算コード RSPACE を開発している。RSPACE を様々な系の計算に利用していくには、計算の高速化することと擬ポテンシャルの種類を増やしていくことが重要である。今年度は、バンド並列計算部の並列化チューニングと他コードで使われている擬ポ

テンソル変換コードの組み込みを行った。また、28 年度 12 月より運用を開始した Oakforest-PACS に合わせたコード改良とチューニングを行い、メニーコアシステムでの高速シミュレーションを可能にした。

【8】SiC-MOSFET 開発における界面電子状態シミュレーション (小野)

SiC を用いたパワーデバイスには、エネルギー問題の解決や国内半導体デバイス産業の復興に向け、大きな期待が寄せられている。しかし、SiC-MOS 界面でのキャリア移動度が SiC バルクに対して 10%程度しかなく、Si バルクに対して 90%以上を誇る Si-MOS に比べ、深刻な欠点となっている。したがって、SiC パワーデバイスの普及には、移動度の向上が急務である。これまで、SiC-MOS 界面の欠陥準位によるキャリア散乱が移動度低下の原因であることが実験的研究より示唆されている。しかし、どのような界面欠陥がキャリアを散乱するのかは定性的な議論しかなく、詳しいことは分かっていない。SiC-MOS の移動度の向上のためには、界面の電子状態を理解し、制御する必要がある。

本年度は、SiC-MOS 界面の原子構造とキャリア散乱特性の関係を、RSPACE を用いて評価した。まず、熱酸化過程のシミュレーションをもとに、図 3 に示すような計算モデルを用いて、酸化中に現れる原子構造がキャリア散乱に与える影響を調べた。パワーデバイスによく用いられる 4H-SiC は、積層構造に関係した h 面、k 面と呼ばれる最表面層が交互に現れる。そして、h 面を最表面に持つ界面は、伝導帯端に自由電子的な振る舞いをする特徴的な準位を持ち、その電子状態は、酸化による酸素原子侵入により顕著に変わることが昨年度までの研究で分かっている。図 4 に示すように、h 面では、酸化による界面への酸素原子侵入を起因とするキャリア散乱が k 面に比べて大きいことを第一原理電気伝導計算で明らかにした。SiC/SiO₂ 界面には、格子間炭素原子やカルボニル基を原因とする界面欠陥も存在する。

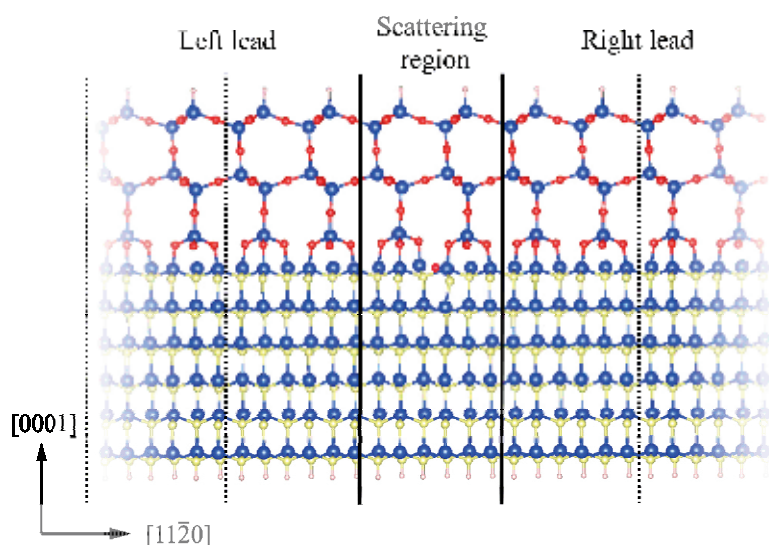


図 3: SiC/SiO₂ 界面の電気伝導特性計算モデル。文献[6]より。

図 4 に示すように、 h 面での酸素原子侵入によるキャリア散乱は、界面欠陥準位を作る界面欠陥と同程度にキャリアを散乱することが分かった。この結果は、Si デバイスでは散乱因子として考えられてこなかった欠陥準位を作らない電気的に不活性な欠陥でも、SiC デバイスでは界面欠陥準位を作る活性な欠陥と同程度にキャリアを散乱することを示すものである。

この結果は、 n チャンネル SiC-MOSFET によく使われる SiC(0001)面の電子移動度を制限するメカニズムの一つであると予想される。現在、筑波大パワエレ研・産総研の実験グループと協力して、高い移動度を実現する界面構造の探索を進めている。

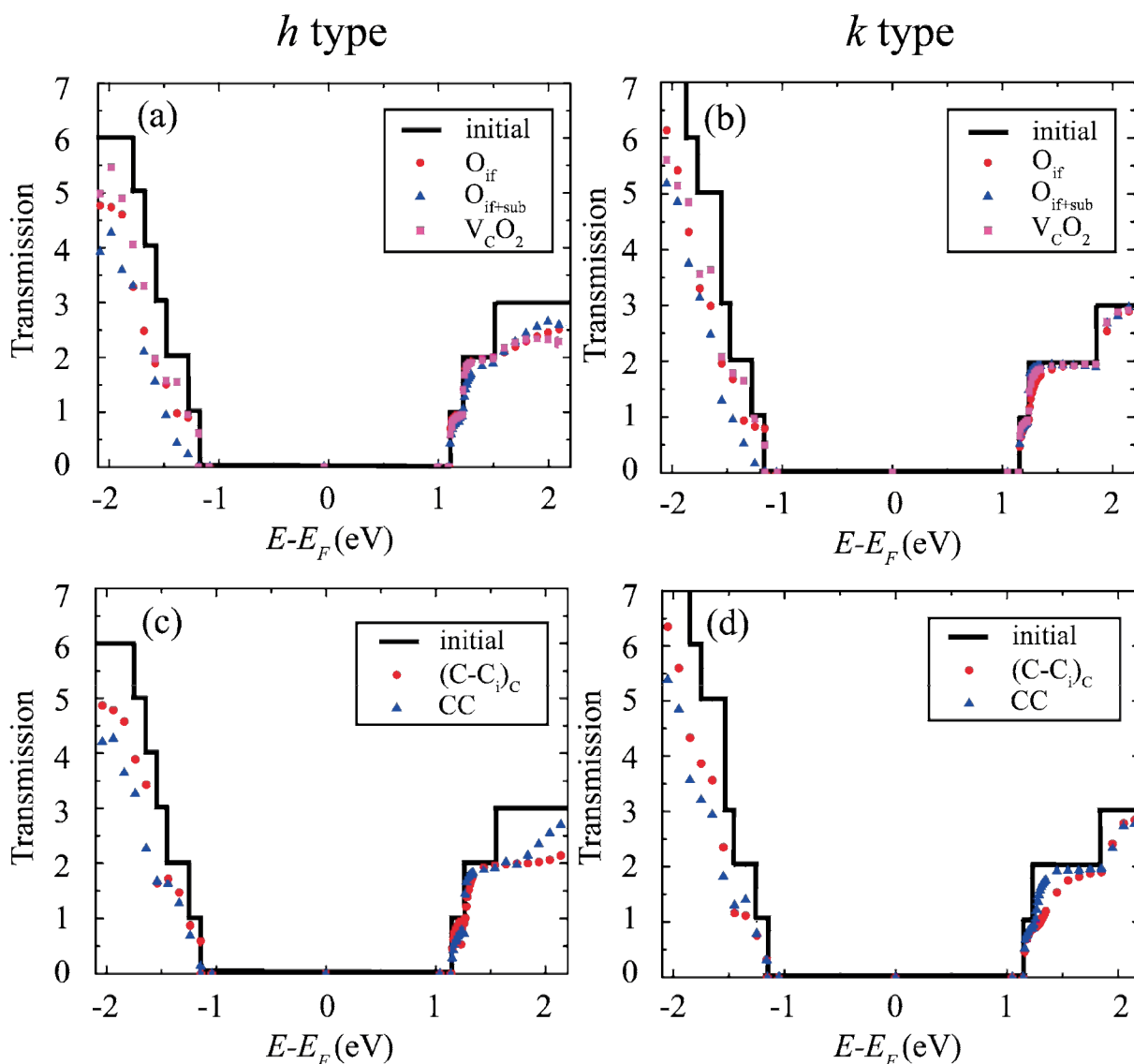


図 4 : 界面のキャリア散乱特性の比較。(a) h 面に酸素原子が侵入した界面。(b) k 面に酸素原子が侵入した界面。(c) h 面に欠陥ができた界面。(d) k 面に欠陥ができた界面。酸素侵入や欠陥生成の無い界面(initial)、酸素原子 1 個侵入(O_{if})、2 個侵入(O_{if+sub})、3 個侵入後 CO 分子放出($V_C O_2$)、格子間炭素原子欠陥($(C-C_i)_C$)、カルボニル基欠陥(CC)。透過確率の initial から減少幅が大きい界面ほどキャリアの散乱が多い。文献[6]より。

【9】銅酸化物高温超伝導体の超伝導機構解明に向けた研究(小泉)

- (1) ホールの周辺にラシュバ型スピン軌道相互作用が存在するとした場合のスピン渦誘起ループ電流の安定(小泉、若浦、森崎)

銅酸化物高温超伝導は、母物質である反強磁性絶縁体にホール（または、電子）をドーブしたときに生じる。超伝導状態でも磁性は残っており、その磁気モーメントは、母物質と同様に CuO_2 面内に寝ていると考えられる。この CuO_2 面内の磁気モーメントは遍歴電子のスピンに由来し、そのスピンモーメントはスピン渦を作り、スピン渦により、スピン渦誘起ループ電流が発生していると、我々は考えている。この面内に寝たスピンモーメントを説明するために我々は、ホールの周辺にラシュバ型スピン軌道相互作用が存在すると仮定した。

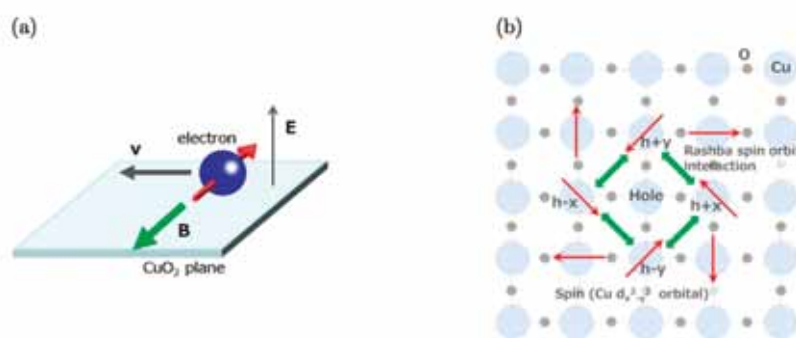


図 5 : (a)銅酸化物 CuO_2 面の Rashba 相互作用による、有効磁場 \mathbf{B}
 (b) ホールの周辺のスピン渦とスピン渦誘起ループ電流の Rashba 相互作用による安定化。
 内部電場が CuO_2 面に垂直な場合、スピンの CuO_2 面内に寝た方が安定化する。

図 5 にラシュバ相互作用により、スピンの CuO_2 面内に寝る様子を模式的に描いてある。面内を移動する遍歴電子と面に垂直な内部電場により、有効磁場が面内に働き、スピンを面内に寝せる様子が描かれている。これにより遍歴電子がホールのまわりをまわっている状態では、 CuO_2 面内に寝たスピンモーメントをもったスピン渦が安定化される。

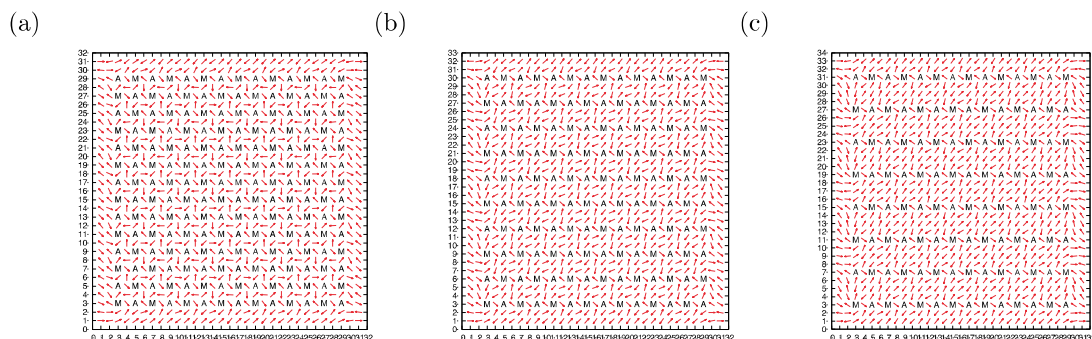


図 6 : (a)4x4 の spin-vortex-quartet (SVQ)を敷き詰めた場合のスピンの様子。ホール濃度 $x=1/4$ に相当。(b) 4x6 の spin-vortex-quartet (SVQ)を敷き詰めた場合のスピンの様子。ホ

ール濃度 $x=1/6$ に相当。(c) 4×8 の spin-vortex-quartet (SVQ) を敷き詰めた場合のスピンの様子。ホール濃度 $x=1/8$ に相当。

我々は、 CuO_2 面を、スピン渦を 4 つ含む spin-vortex-quartet (SVQ) で敷き詰めた場合を考察した。SVQ としては、 $4 \times 4, 4 \times 6, 4 \times 8$ を採用し(図 6 の(a), (b), (c) にそれぞれ対応)、モンテカルロシミュレーションを行い、超伝導転移温度を求めた。その結果、図 7 のように実験で得られているホール濃度 $x=0.16$ 付近でピークを持つ構造が得られた。同様の転移温度は、Rashba 効果を取り入れなくても得られていたが、ピーク構造は、Rashba 効果を取り入れたことにより再現された。

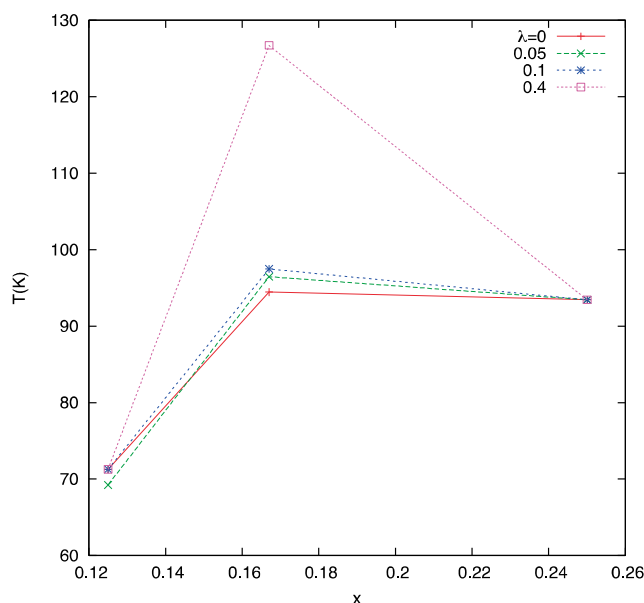


図 7 : モンテカルロシミュレーションによる求めた超伝導転移温度とホール濃度の関係。ホール濃度は、図 6 に対応。 λ は Rashba 相互作用のパラメータである。温度は、transfer integral $t=130$ meV として求めた。

(2) 銅酸化物における U(1) インスタントンの生成 (小泉)

我々は、銅酸化物高温超伝導機構としてナノサイズの安定なループ電流、“スピン渦誘起ループ電流”による超伝導生成機構を提出しているが、この理論では、銅酸化物のバルクでは、ドーパされたホールがスモールポーラロン化し、ほとんど動かないと仮定している。この時、 CuO_2 面の遍歴電子の状態は電子が移動できるサイトの数と電子数が等しい有効ハーフフィリング状態となり、1 電子状態は、占有された下部ハバードバンドと空の上部ハバードバンドからなるバンド絶縁体状態となる。“スピン渦誘起ループ電流”状態は、このバンドギャップの間に存在する。スピン渦誘起ループ電流は、遍歴電子がスピン渦をつくり、その

遍歴運動がスピンの回転を伴ったものであるときに生じる。このときエネルギーの最小化で求めた波動関数は座標についての多価関数となり、そのままでは、波動関数が満たすべき一価関数の条件を満たさない。波動関数の一価性の要請から、波動関数には、一価性を回復する位相因子が付け加わり、この位相因子は、トポロジカルな pure ゲージポテンシャル、‘U(1) インスタントン’ を生成する。QCD では、インスタントンによる U(1)ゲージ場の質量の起源が提案されているが、銅酸化物においても、この‘インスタントン’が U(1)ゲージ場の質量の起源と考えることができることを指摘した。

【10】銅酸化物高温超伝導体を使った量子コンピュータ実現に向けた研究（小泉）

量子コンピュータ実現のためには、量子ビットが Di Vincenzo が提出した、5つの条件 1) 初期化可能性、2) 観測可能性、3) ゲート演算の可能性、4) デコヒーレンス時間がゲート演算時間よりも十分長い、5) 集積化可能性、を満たさなければならない。スピン渦誘起ループ電流量子ビットに対して2量子ビット系という小さな系ではあるが、理論的なシミュレーションで、4)以外のすべての条件を満たし得ることが示された（若浦光、博士論文「スピン渦誘起ループ電流を量子ビットとした量子計算機に関する理論的研究」）。4)についてもスピン渦誘起ループ電流はトポロジカルに保護されていることを考えると、おそらく満たすと考えられる。しかし、今後、実験的な検証が必要である。

【11】2色円偏光強レーザー場による電離電子再散乱過程の制御（全）

強レーザー場における電子の再散乱過程は様々な物理現象（例えば、高次高調波の生成や多光子電離）の起因と見られている。線偏光レーザー場における再散乱電子の向きは1次元であるので、運動の向きは制御できない。本研究では2色円偏光レーザーの強度と偏光の向きを利用して、再散乱電子の運動を2次元平面内で図8のように制御できた。その研究結果は実験グループとの共同研究成果として Phys. Rev. A に発表した。

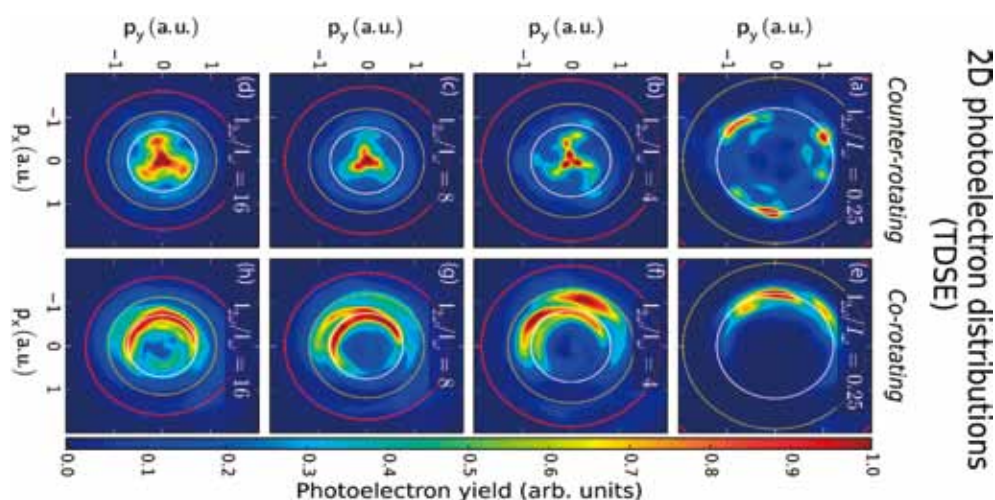


図 8 : レーザー電場偏向平面における電離電子の運動量分析とレーザー強度の関係。上の図では 2 色レーザーの偏向は下向き、下の図では 2 色レーザーの偏向は同じ方向である。

【1 2】単パルス強レーザー強度測定方法の開発 (全)

強レーザー場における物理過程は非線形過程というもので、産出量は強度に敏感に依存することがよく知られている。しかし、従来のレーザー強度測定方法は実験で測定された電離確率と簡単なモデルでの予測量とを比べて推測するので、強度の測定精度は 10%以上である。産出量のそれは数倍から数十倍でもおかしくないということである。そして、より精度の高い強度測定方法は強レーザー場研究分野の急務となっている。我々は大量な強レーザー場における水素原子電離確率を第一原理の理論計算で得て、実験結果と比べることにより、強度 2%以下の測定方法を開発した。その結果は実験グループとの共同研究成果として物理分野で有名な雑誌 Phys. Rev. Lett に発表した。

【1 3】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 (前島)

半導体超格子に DC 電場および CW レーザーを照射した場合に発現する dynamical Wannier-Stark ladder (DWSL)における状態密度 (DOS) レーザー強度依存性を R-matrix 伝播法により解析した。DC 電場による Bloch 周波数 ω と CW レーザーの周波数 Ω の比 $\eta = \Omega/\omega$ が分数となる場合に、新奇な共鳴状態の発生を意味するピーク構造が状態密度に現れることを示した (図 9)。また、バルク半導体にパルスレーザーを照射した場合に出現するコヒーレントフォノン状態とそれによるコヒ

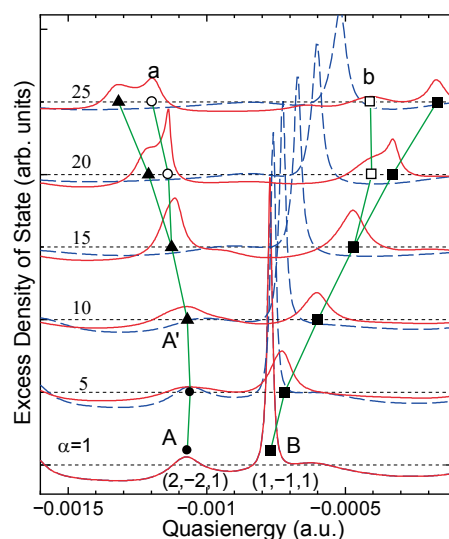


図 9 : DWSL($\eta = \Omega/\omega = 3/2$)の状態密度(DOS)に現れるピーク構造 (a,b)。

ーレント振動現象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。パルスレーザー照射により発生する光キャリアによるプラズモン状態と音響フォノンが共鳴することによる不規則な振動現象が生じることを明らかにした。また、低次元強相関電子系の理論模型の一種であるイオン性ハバード模型の動的構造因子を厳密対角化などにより数値的に調べ、本来は電荷励起状態を観測する量である動的電荷構造因子にスピン励起状態のスペクトルピークが現れることを示した。

4. 教育

博士論文

若浦 光 スピン渦誘起ループ電流を量子ビットとした量子計算機に関する理論的研究

修士論文

横井浩太 1 次元拡張イオン性ハバードモデルの低エネルギー領域における光励起状態の理論的研究

森崎 翼 銅酸化物超伝導体におけるスピン渦誘起ループ電流とラッシュバスピ軌道相互作用の効果

卒業論文

牟田純志 1 次元拡張イオン性パイエルスーハバード模型におけるスピンソリトン状態の解析

出口泰資 レーザー場中のハバード梯子模型におけるフロケ状態の解析

林田伸明 コヒーレントフォノン生成機構における初期位相のパルス条件依存性

市川大晶 遺伝算法で 2 次元スピン系 Honey Comb エネルギー構造の理論計算

飯山博紀 中赤外線レーザーによる X-線レーザー生成メカニズムの理論研究

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

【1】 受賞

1. 平成 27 年度 HPCI 優秀成果賞。「京」の一般利用課題「極限的パルス光と物質の相互作用を記述するマルチスケール第一原理計算」（研究代表：矢花）が、一万ノード以上の大規模計算において「京」の実効性能を最も引き出した課題と認定された。

【2】 外部資金

1. 科研費基盤研究(B)、矢花一浩、代表、2015-2018 年度、3300 千円（2016 年度直接経費）「第一原理計算に基づく極限パルス光と物質の相互作用の解明」
2. ポスト京重点課題 7「サブ課題 B「光・電子融合デバイス」、矢花一浩、分担、2016-2020 年度、7469 千円（2016 年度直接経費）、「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」

3. JST CREST、矢花一浩、代表、2016-2021 年度、7500 千円（2016 年度直接経費）、
「光・電子融合第一原理計算ソフトウェアの開発と応用」
4. 共同研究経費、株式会社 IHI、450 千円（2016 年度直接経費）「時間依存第一原理解析によるフェムト秒レーザーと物質との相互作用に関する研究」
5. Delta ITP funds (オランダ)、小泉裕康、2016 年度、研究代表者、21,175 ユーロ、
「Theory of high temperature superconductivity and strongly correlated system」
6. 日本学術振興会、基盤研究(C)、全曉民（トンショウミン）、代表、2016 年度、2860 千円、
「2色円偏光レーザー場における原子・分子電離過程の解明と制御」
7. 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、6630 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」
8. 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」
9. 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、2016 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」
10. 日本学術振興会、基盤研究(B)、小野倫也、代表、2016 年、3300 千円、「大規模第一原理スピン輸送シミュレーターの開発と革新的デバイス用界面構造の設計」
11. 日本学術振興会科学研究費、若手研究(B)、前島展也、代表、2016 年度、650 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. T. Nakatsukasa, K. Matsuyanagi, M. Matsuo, K. Yabana, "Time-dependent density-functional description of nuclear dynamics ",*Reviews of Modern Physics* 88, 045004 (2016).
2. 廣川祐太、朴泰祐、佐藤駿丞、矢花一浩、"電子動力学シミュレーションのステンシル計算最適化とメニーコアプロセッサへの実装"、*情報処理学会論文誌コンピューティングシステム (ACS)* Vol.9、No.4、pp.1-14 (2016).
3. M. Lucchini, S.A. Sato, A. Ludwig, J. Herrmann, M.Volkov, L.Kasmi, Y. Shinohara, K. Yabana, L. Gallmann, U. Keller, "Attosecond dynamical Franz-Keldysh effect in polycrystalline diamond", *Science* **353**, 916-919 (2016).
4. A. Sommer, E.M. Bothschafter, S.A. Sato ,C. Jakubeit, T. Latka, O. Razskazovskaya, H. Fattahi, M. Jobst, W. Schweinberger, V. Shirvanyan,

- V.S.Yakovlev, R.Kienberger, K. Yabana, N. Karpowicz, M. Schultze, F. Krausz, "Attosecond nonlinear polarization and light-matter energy transfer in solids", *Nature* **534**, 86-90 (2016).
5. S. Tsukamoto, T. Ono, K. Hirose, S. Blügel, "Self-energy matrices for electron transport calculations within the real-space finite-difference formalism", *Phys. Rev. E* **95**, 033309 (2017).
 6. S. Iwase, C. J. Kirkham, T. Ono, "Intrinsic origin of electron scattering at the 4H-SiC(0001)/SiO₂ interface", *Phys. Rev. B* **95**, 041302 (2017).
 7. T. Ono, C. J. Kirkham, S. Iwase, "First-Principles Study on Electron Conduction at 4H-SiC(0001)/SiO₂ Interface", *ECS Transactions* **75**, 121 (2016).
 8. C. J. Kirkham, T. Ono, "Importance of SiC Stacking to Interlayer States at the SiC/SiO₂ Interface", *Materials Science Forum* **858**, 457 (2016).
 9. F. P. Sturm, X. M. Tong, A. Palacios, T. W. Wright, I. Zalyubovskaya, D. Ray, N. Shivaram, F. Martin, A. Belkacem, P. Ranitovic, and Th. Weber, "Mapping and Controlling Ultrafast Dynamics of Highly Excited H₂ Molecules by VUV-IR Pump-Probe Schemes", *Phys. Rev. A* **95**, 012501:1-7 (2017).
 10. J. E. Calvert, Han Xu, A. J. Palmer, R. D. Glover, D. E. Laban, X. M. Tong, A. S. Kheifets, K. Bartschat, I. V. Litvinyuk, D. Kielpinski, and R. T. Sang, "The interaction of excited atoms and few-cycle laser pulses", *Scientific Reports* **6**, 34101 (2016).
 11. W. C. Wallace, O. Ghafur, Satya Sainadh U, J. E. Calvert, C. Khurmi, D. E. Laban, M. G. Pullen, K. Bartschat, A. N. Grum-Grzhimailo, D. Wells, H. M. Quiney, X. M. Tong, I. V. Litvinyuk, R. T. Sang, and D. Kielpinski, "Precise and Accurate Measurements of Strong-Field Photoionization and a Transferable Laser Intensity Calibration Standard", *Phys. Rev. Lett.* **117**, 053001:1-5 (2016).
 12. H. Xu, H.T. Hu, X. M. Tong, P. Liu, R. X. Li, R. T. Sang, and I. V. Litvinyuk, "Coherent control of the dissociation probability of H₂⁺ in ω - 3ω two-color fields", *Phys. Rev. A* **93**, 063416:1-5 (2016).
 13. C. A. Mancuso, D. D. Hickstein, K. M. Dorney, J. L. Ellis, E. Hasovic, R. Knut, P. Grychtol, C. Gentry, M. Gopalakrishnan, D. Zusin, F. J. Dollar, X. M. Tong, D. Milosevic, W. Becker, H. C. Kapteyn, M. M. Murnane, "Controlling electron-ion rescattering in two-color circularly polarized femtosecond laser fields", *Phys. Rev. A* **93**, 053406:1-13 (2016).

14. Yuya Nemoto, Fumitaka Ohno, Nobuya Maeshima, and Ken-ichi Hino, "Manifestation of anomalous Floquet states with longevity in dynamic fractional Stark ladder with high AC electric fields", *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* 83, 339, (2016).
15. Yohei Watanabe, Ken-ichi Hino, Muneaki Hase, and Nobuya Maeshima, "Polaronic quasiparticle picture for generation dynamics of coherent phonons in semiconductors: Transient and nonlinear Fano resonance", *Phys. Rev. B* 95, 014301 (2017).

B) 査読無し論文

1. S.A. Sato, K. Yabana, "First-principles calculations for initial electronic excitation in dielectrics induced by intense femtosecond laser pulses", *Proc. SPIE10014, Laser-induced Damage in Optical Materials 2016*, 100141A.
2. 矢花一浩、"第一原理計算によるフェムト秒レーザ加工初期過程の解明"、第 85 回レーザ加工学会講演論文集、pp.126-129 (2016).
3. 廣川祐太、朴泰祐、佐藤駿丞、矢花一浩、"電子動力学シミュレーションのステンシル計算に対するメニーコアプロセッサ向け最適化"、2016 年ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム (HPCS2016) 論文集、2016.
4. K. Yabana, "First-principles simulation for strong and ultra-short laser pulse propagation in dielectrics,Proc", *SPIE9835, Ultrafast Bandgap Photonics*, 983504

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

1. K. Yabana, "Maxwell + TDDFT Multiscale Simulation for Attosecond Spectroscopy", 10th International Conference on Computational Physics, Cotai District, Macao, China, Jan. 16-20, 2017.
2. K. Yabana, "Maxwell + TDDFT multiscale description for interactions of intense pulsed light with dielectrics", 7th Time-Dependent Density-Functional Theory: Prospects and Applications, Benasque, Spain, Sept. 11-23, 2016.
3. K. Yabana, "Time-dependent density functional theory for interactions of intense pulsed light with dielectrics", KAIST Frontiers in DFT & Beyond Workshop, KAIST, Daejeon, Korea, Aug. 16, 2016.
4. K. Yabana, "First-principles simulation for strong and ultra-short laser pulse propagation in dielectrics ", *SPIE Defence+Security, Ultrafast Bandgap Photonics workshop*, Baltimore, USA, April 17-21, 2016.

5. T. Ono, "Density functional theory study on transport property of nanomaterials", 5th International Conference from Nanoparticles and Nanomaterials to Nanodevices and Nanosystems (IC4N), June 26-30, 2016, Porto Heli, Greece.
6. T. Ono, C. J. Kirkham, S. Iwase, "First-Principles Study on Electron Conduction at 4H-SiC(0001)/SiO₂ Interface", Pacific Rim Meeting on Electrochemical and Solid-State Science 2016, October 2-7, 2016, Honolulu, USA.
7. H. Koizumi, "Emergent singularities of wave functions and appearance of persistent motion in dynamical Jahn-Teller problems and superconductivity", XXIII international symposium on the Jahn-Teller effect, Aug. 27-Sep. 1, Tartu, Estonia.
8. H. Koizumi, "Origin of the U(1) field mass in superconductors", New trends of development fundamental and applications: problems, achievements and prospects, Nov. 11, Tashkent, Uzbekistan

B) 一般講演

1. T. Ono, C. J. Kirkham, S. Iwase, "First-principles study on carrier scattering property at 4H-SiC(0001)/SiO₂", 2016 International Conference on Solid State Devices and Materials, September 26-29, 2016, Tsukuba, Japan.
2. T. Ono, C. J. Kirkham, "First-principles study on atomic and electronic structures of 4HSiC(0001)/SiO₂ interface", APS March Meeting 2017, March 13-17, 2017, New Orleans, USA.
3. H. Koizumi, "Persistent current from spin-twisting itinerant motion of electrons", 1st international workshop SUPERHYDRIDES: Toward room temperature superconductivity, hydrides and more, May 9-10, Rome, Italy.
4. H. Koizumi, "Possible explanation of the superconducting phase transition as a topological phase transition", Leiden String Seminar, June 14, Leiden, the Netherlands.
5. X. M. Tong and N. Toshima, "Strong Field Ionization of N₂ Molecules in Two-Color Circularly Polarized Laser Field", 12th European Conference on Atoms Molecules and Photons, Sept. 5~9, 2016, Frankfurt, Germany
6. Yohei Watanabe, Ken-ichi Hino, Muneaki Hase, Nobuya Maeshima, "Quantum generation dynamics of coherent phonons: Analysis of transient Fano resonance", ICPS2016, July 31 - Augst 5, 2016, Beijing, China.
7. Yohei Watanabe, Ken-ichi Hino, Muneaki Hase, Nobuya Maeshima, "Quantum Generation Dynamics of Coherent Phonon in Semiconductors: Analysis of Pulse

Laser Dependence", APS March Meeting 2017, March 13–17, 2017; New Orleans, Louisiana, USA.

(3) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

1. 矢花一浩、"パルス光と物質の相互作用に対する第一原理計算：プログラム開発と応用"、第3回材料系ワークショップ～計算物質科学を拓く第一原理計算とその機能モジュール～、秋葉原 UDX、2017年2月23日。
2. 矢花一浩、"極限的パルス光と物質の相互作用を記述するマルチスケール第一原理計算"、第3回「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題 成果報告会、東京、2016年10月21日。
3. 矢花一浩、"第一原理計算によるフェムト秒レーザ加工初期過程の解明"、第85回レーザ加工学会講演会、大阪大学吹田キャンパス、2016年6月9-10日。

B) その他の発表

1. 矢花一浩、"JST-CREST 研究課題の目標と計画"、JST-CREST 研究課題キックオフ+ポスト「京」サブ課題進捗報告合同ミーティング「光・電子融合系の第一原理計算」、三宮、2017年1月4-5日。
2. K. Yabana, "TDDFT in solids for electron dynamics induced by ultrashort laser pulses", Seminar at Max-Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter, Hamburg, Germany, November 4, 2016.
3. 植本光治、佐藤駿丞、矢花一浩、"Maxwell+TDDFT マルチスケール第一原理計算による二次元光伝播シミュレーションの試み"、日本物理学会第72回年次大会、大阪大学豊中キャンパス、2017年3月17-20日。
4. 高木謙介、小野倫也、岩瀬滋、"第一原理計算による $\text{HfO}_2/\text{SiO}_2/\text{Si}$ 界面における酸素空孔欠陥に起因したリーク電流の評価"、日本物理学会 2016 年秋季大会、2016 年 9 月 13 日～17 日、金沢大学。
5. 岩瀬滋、小野倫也、"波動関数接合法による第一原理輸送特性計算手法の開発"、日本物理学会 2016 年秋季大会、2016 年 9 月 13 日～17 日、金沢大学。
6. 岩瀬滋、小野倫也、"第一原理計算による熱酸化 SiO_2/SiC 界面の界面原子構造、電子状態、電子輸送特性の解析"、日本物理学会第72回年次大会、2017年3月17日～20日、大阪大学。
7. 高木謙介、小野倫也、"第一原理計算による $\text{HfO}_2/\text{SiO}_2/\text{Si}$ 界面における酸素空孔欠陥に起因したリーク電流の評価"、第64回応用物理学会春季学術講演会、2017年3月14日～17日、パシフィコ横浜。

8. 小泉裕康、"銅酸化物超伝導体における $U(1)$ ゲージ場の質量の起源"、日本物理学会第 72 回年次大会、大阪大学豊中キャンパス、2017 年 3 月 17 日～20 日。
9. 渡辺陽平、日野健一、長谷宗明、前島展也、"コヒーレントフォノン生成量子ダイナミクスにおけるパルスレーザー依存性"、2016 年秋季大会（金沢大）2016 年 9 月 13 日-16 日。
10. 横井浩太、前島展也、日野健一、"1 次元拡張イオン性ハバード模型の低エネルギー領域における光励起状態 II"、2016 年秋季大会（金沢大）2016 年 9 月 13 日-16 日。

(4) 著書、解説記事等

1. 矢花一浩、佐藤駿丞、篠原康、乙部智仁、"高強度超短パルスレーザーと誘電体の相互作用を記述する第一原理計算"、固体物理 Vol.52 No.3 pp.139-148 (2017)。
2. 矢花一浩、"第一原理計算によるレーザー加工初期過程解明"、レーザー研究 Vol.44 No.12 pp.789-793 (2016)。
3. Y. Egami, S. Tsukamoto, T. Ono, "First-principles calculation method and its applications for two-dimensional materials", Quantum Matter 6, 4 (2017)。
4. T. Ono, S. Saito, S. Iwase, "First-principles study on oxidation of Ge and its interface electronic structures", Jpn. J. Appl. Phys. 55, 08PA01 (2016)。

7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

【異分野間連携】

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と、電子ダイナミクスの第一原理計算プログラム ARTED の開発において共同研究を行なっている。小野は、高性能計算システム研究部門の櫻井と、第一原理電子状態・電気伝導特性計算コード RSPACE の高速アルゴリズム開発に関して共同研究を行っている。

【国際連携】

1. ドイツマックスプランク量子光学研究所のアト秒科学実験グループと、高強度パルスレーザーと固体の相互作用に関する共同研究（矢花）
2. スイスチューリッヒ工科大学のアト秒科学実験グループと、高強度パルスレーザーと固体の相互作用に関する共同研究（矢花）
3. オーストリアウィーン工科大学の理論グループと、電子ダイナミクスの計算科学的な研究に関する共同研究（矢花）
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。
5. 強レーザー場における原子分子過程に関する国際共同研究

全は強レーザー場における原子分子動的過程に関し、アメリカのコロラド大学の実験グループ (Murnane and Kapteyn 教授) と国際共同研究を推進している。

8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

小野は、2016 年 9 月大阪大学にて開催された CMD ワークショップのアドバンストコースで、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。2017 年 3 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. 矢花は計算科学研究センター 量子物性研究部門主任、運営委員会委員、人事委員会委員、運営協議会委員、共同研究主幹、先端計算科学推進室長数理物質系物理学域 運営委員会委員を務めた。
2. 小泉は 全学計算機システム運営委員会 3D サテライトを担当した。
3. 全は中国事務所の運営委員、留学後援会の理事を担当した。
4. 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委員会において、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

1. 矢花は、京都大学基礎物理学研究所運営協議会委員、テニュアトラック普及・定着事業委員会委員、核理論委員会委員、高エネルギー加速器研究機構大型シミュレーション研究推進委員会委員を務めた。
2. 小野は、ポスト「京」プロジェクト重点課題 7 「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」の産学官連携担当として、ワークショップを開催した。

11. その他

小泉は、サバティカルを以下のように取った。

滞在場所 ライデン大学 ローレンツ理論物理学研究所 (オランダ、ライデン)

期間 4 月 21-10 月 21 日 (現地時間)