

III. 量子物性研究部門

III-1 量子状態制御グループ

1. メンバ

准教授 全 暁民

准教授 小泉 裕康

助教 前島 展也

教授 日野 健一（学内共同研究員、物質工学域）

2. 概要

レーザー照射による原子・分子状態の制御、固体における光誘起相転移、超伝導状態の制御から量子ビット操作につながる量子状態の制御等に関する研究を行っている。原子・分子系では、そのダイナミクス、およびそれらの電磁場との相互作用の理解と制御を、時間依存のシュレディンガー方程式を時間発展の直接解法で解く方法で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。さらに、巨視的な量子状態を室温で達成すべく、銅酸化物超伝導の機構解明も行っている。この研究は、スピン渦超伝導理論の構築に発展し、スピン渦誘起ループ電流を量子ビットとした、量子コンピュータの開発に関する研究と広がっている。

3. 研究成果

[1] 水素原子による反陽子捕獲のヤコビ座標系を用いた精密計算（全 暁民）

反水素原子生成の成功に続いて反水素原子捕獲の実験が報告され、反陽子関係の研究がますます活発になってきている。その中で水素原子による反陽子捕獲はもっとも基本的なクローン三体系の問題でありながら、十分満足のできる精密計算がまだなされていない。陽子を頂点にとった V 座標系で量子力学的な計算が我々によってなされたが、ヤコビ座標系でないため大きなエラーがありうることが指摘された。

本研究、ヤコビ座標系を用いた精密な時間発展の計算方法を開発し、水素原子による反陽子捕獲詳細な断面積の再計算を行い、V 座標系による誤差[Mass Polarization (MP)]は図 1、2 のように、十分小さいことを確認した。

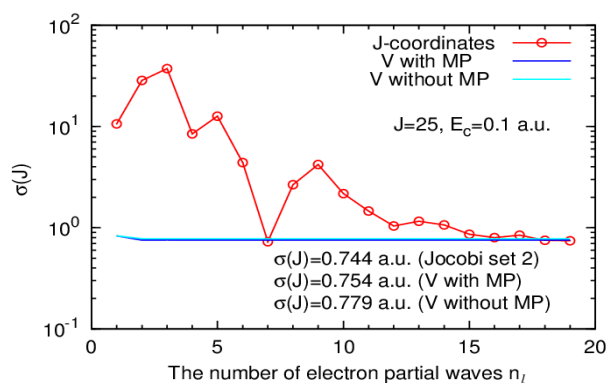


図 1 J= 2 5 ヤコビ座標系による収束性を確認

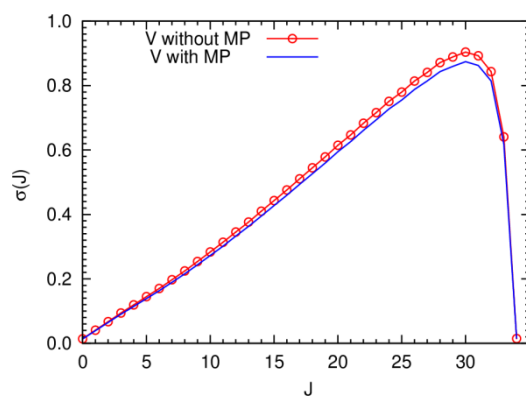


図 2. 全ての部分波に対して V 座標系による誤差

結論として、V 座標は反陽子捕獲の過程に対して十分正確であり、ヤコビ座標と比べて計算量が百分の一ほどで済む大変有効な表示であることが確認された。研究結果は Physical Review A に発表された。

[2] 強中赤外線レーザーにおける電離過程の解明 (全 暁民)

中赤外線における原子電離の実験で、強い低エネルギー電子が Nature の論文で報告された。

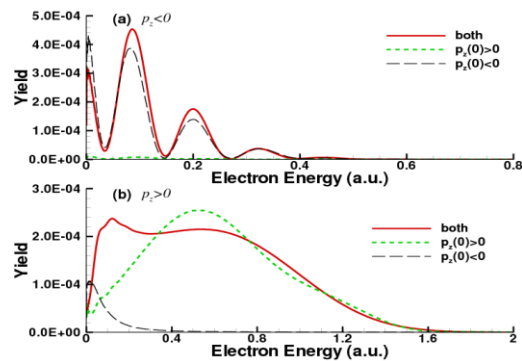


図 3. 電離電子のエネルギー分布

“Ionization Surprise”と呼ばれた現象であり、従来の実験では観測されなかった、また従来の良く使われた理論で解釈できなかった。その背景で、我々が開発した独自の計算手法で、図 3 のように、電離過程と電離された電子のレーザー中での発展に分けて、分析した。その結果、再散乱電子と直接電離した電子の干渉が強い低エネルギー電子の生成の原因であるということを解明した。この研究結果は Physical Review Letters に発表された。

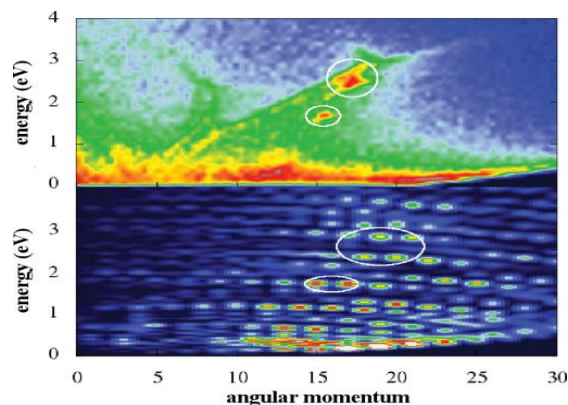


図 4. 量子と古典の計算を比べる

さらに詳しい情報を得るため、我々の量子計算と古典力学の計算を比べた。強い低エネルギー電子に対応する古典運動経路も、図 4 のように、特定の部分波を持つ電子が特定の運動エネルギーの場所に局在するというを確認して、それ以外の所には電離された電子量はかなり少ない。この現象のレーザー波長や強度との依存性もいろいろ調べた。この研究はウィーンの工科大学の理論グループと共同で行った。

結果は Physical Review A の Rapid Communications に掲載された。

[3] 短パルスー強レーザーにおける電離電子運動量分布からのレーザー情報の解析（全曉民）

短パルス強レーザーの情報、例えば強度、パルス幅、相対的な位相[Carry Envelop Phase CEP)]などを、実験的に直接得るのは極めて難しい。従来の測定方法は観測された右側と左側の出る高エネルギーと低エネルギー電子量と理論計算値を比べて、CEP を推定するものである。この方法は測定精度が良くないと指摘があった。最近観測技術の進歩に伴う、より精度が高い電子エネルギー分布の測定が可能になってきている。我々の独自の計算手法で高精度の

電子エネルギー分布（図 5）を提供でき、実験と比べると、より高精度なレーザー情報を得ることが可能になる。この研究結果は Physical Review A に掲載された。

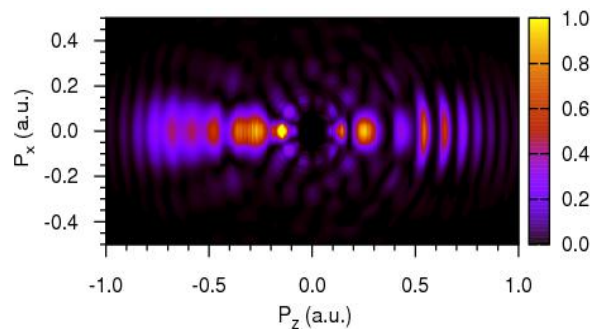


図 5. 電離された電子の運動量分布

[4] 赤外線による物質の透過率をアト秒範囲内で制御する方法の探索（全 曉民）

物質の透過率は光の物質の透過能力を表す重要な指標であり、物質の種類や物理状態によって決まるものである。いろいろな手法で透過率の制御が可能だが、短い時間内で、あるいは、フェト秒やアト秒で制御するのは難しい。我々の理論計算で、アト秒パルスレーザーと赤外線レーザーの到着時間の微小な差（フェト秒やアト秒）により、物質の透過率を制御することが可能になる。この制御方法はアメリカの共同研究者に提案して、実験により、図 6 のように実現された。この研究結果は Physical Review Letters に発表された。

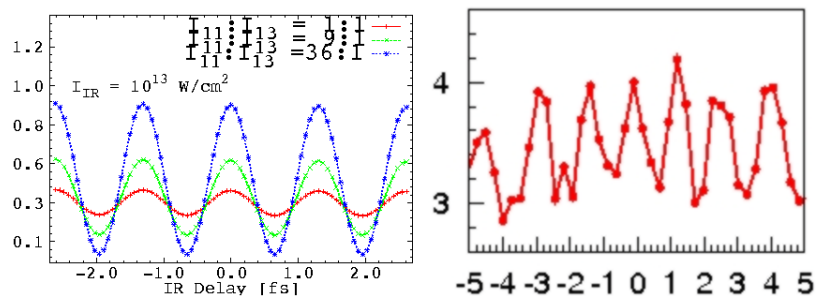


図 6. アト秒範囲内で光透過率の制御。（左）理論値、（右）観測結果。

[5] 光着衣励起子における動的Fano共鳴 (前島、日野)

物質中の電子状態に対する、強力な外場による非線形効果は量子ダイナミクスや状態のコヒーレント制御という観点から注目を集めてきた。例えば時間周期外場のもたらす非線形効果として動的局在(DL)が知られている。このDLがおこるような強い時間周期外場中の電子状態を記述する手法として、フロケ状態がある。我々は、このフロケ状態で記述される電子と正孔が束縛した光着衣励起子の形成により、半導体超格子の光学応答スペクトルがどのように影響を受けるかを調べた。得られた結果のうちで最も特筆すべき点は、DLが出現するレーザー強度領域を中心にしてファノ共鳴的な非対称ピークが光学応答スペクトルに現れることである。このファノ共鳴は強いレーザー外場によって生み出されるAC-ツェナー結合(ZC)によって、励起子状態と連続準位の間に相互作用が発生するためにおこる。またこの相互作用はレーザー外場によって制御可能なため、ファノ共鳴特有の物理パラメータもレーザーによって変化させられることが分かった。その意味で、このファノ共鳴は動的ファノ共鳴と呼ばれるものである。特にDLが起こるレーザー強度では、スペクトル形状の対称性が回復するとともに、スペクトル幅が最小になることが分かった。

また、上述の問題を数値的に解く高精度な方法としてR行列伝搬法を採用したが、この方法は計算量が極めて大きいため、並列化による計算の高速化がしばしば議論になっていた。よって我々は、R行列伝搬法を解くために有効な並列化法を提案した。鍵となるのは、セクター並列化である。R行列伝搬法においては動径方向の空間を多数のセクターに分割し、各セクター内で固有方程式を解くというプロセスが必要になる。我々の手法では、このセクターを各CPUコアごとに割り当てるという並列化法を採用した。一般の散乱問題に対するR行列伝搬法では、部分波毎の並列化に主眼が置かれているが、我々は光学応答のみに注目しているためs波しか解く必要がないという点でアルゴリズムが極めてシンプルになっている。我々は、並列化による高速化の効果についても検証を行い、CPUコア数に対して良い線形性をしめすこと、一方でコア間通信量の増大により並列化効率に頭打ちの傾向が出ることを確認した。

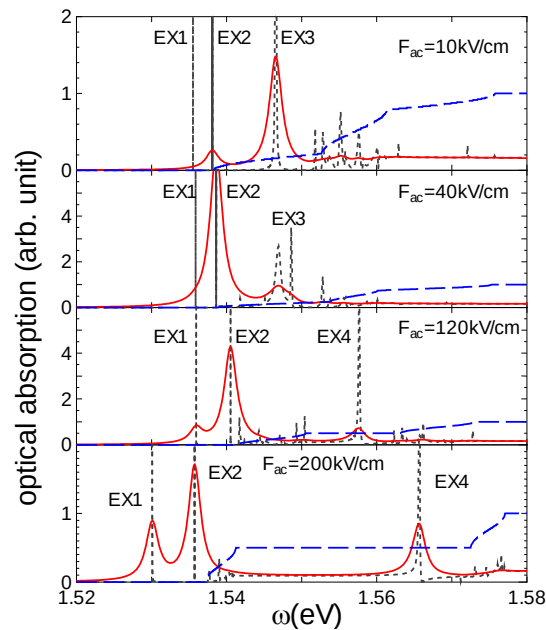


図 7. 光着衣励起子の吸収スペクトル。黒点線:自然スペクトル、赤実線:1meVの均一広がりをたたみ込んだスペクトル、青破線:状態密

[6] 擬1次元MX錯体における光誘起ダイナミクスの解析(前島、日野)

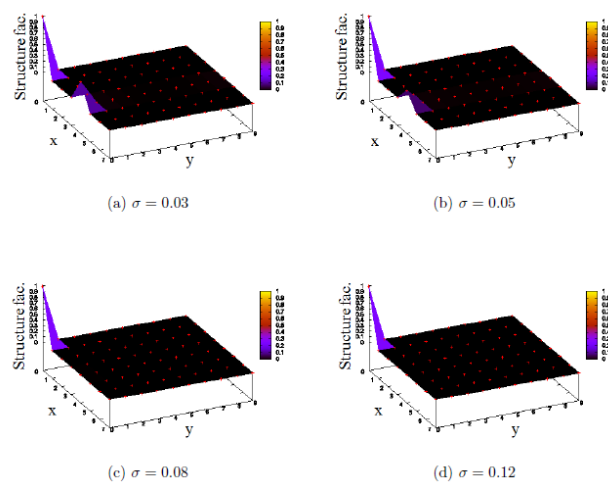


図 8. 光照射量(σ)を変えた場合の擬1次元MX錯体の構造因子。 σ の増大と共にCDW相に対応する $(\pi, 0)$ 成分が減少している。

遷移金属($M=\text{Ni, Pd, Pt}$) とハロゲン($X=\text{Cl, Br, I}$) が交互に結合した一次元ハロゲン架橋遷移金属錯体(MX 錯体) は安定状態としてMott 絶縁体およびCDW状態が観測される物質群の一つであり、Ni 錯体ではMott 状態、Pd およびPt 錯体ではCDW状態がそれぞれ安定となる

。加えて、MX 錯体では光照射により状態間の相転移が生じることが明らかにされており、CDWを基底状態にもつPd 錯体 $[\text{Pd}(\text{chxn})_2\text{Br}]\text{Br}_2$ においてはMott 絶縁体への光誘起相転移が報告されている。加えて、 $[\text{Pd}(\text{chxn})_2\text{Br}]\text{Br}_2$ は強い鎖間相互作用を持っていることが知られている。そこで本研究では、 $[\text{Pd}(\text{chxn})_2\text{Br}]\text{Br}_2$ での鎖間相互作用を含めた光誘起ダイナミクスの理論的解析を行った。その結果、まず、電荷分布などの物理量の解析から、光照射をきっかけとして鎖間相互作用を介した協力現象、すなわち光誘起相転移が起こっていることを理論的な裏付けを得た。そして光誘起相転移を起こす光照射率の閾値について、鎖間相互作用が小さい場合では、大きい場合に比べて最大で約三倍の光が必要になることがわかった。また、鎖間相互作用が無い系では協力現象が生じないことを確かめた。以上のことから、MX 錯体を考える上で、鎖間相互作用の持つ重要性を示すことができた。

[7]有機モット絶縁体R-TCNQ(R=K, Rb)におけるギャップ内状態の解析(前島、日野)

R-TCNQ(R=K, Rb)は擬一次元構造を持つ有機電荷移動錯体であり、強い電子相関のためにモット絶縁体となっている。またある有限の温度以下においてはスピンパイエルス不安定性による二量化相が実現している。この二量化相に光を照射して二量化を壊す実験的試みが以前より行われてきたが、特に最近の実験において、光照射直後に電荷移動ギャップ(～1eV)よりも低エネルギー側にギャップ内状態が出現することが見出され、その起源については未解決なままであった。

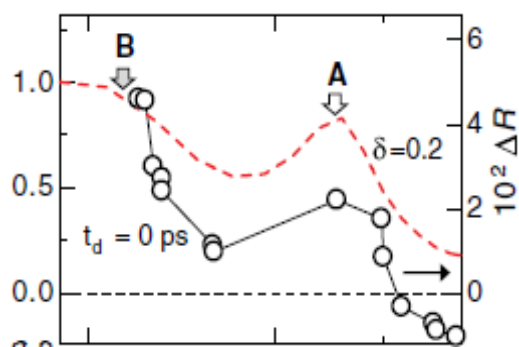


図 9. Rb-TCNQの光励起直後の光学応答スペクトル。黒実線が実験結果、赤破線がポーラロン状態を想定した場合の計算結果。

そこで我々は、R-TCNQのギャップ内状態の解析を学外実験グループと共同で行った。動的密度行列繰り込み群による計算と実験との比較の結果、電荷移動ギャップ以下の低エネルギー領域に図 9 のようなギャップ状態が出現することを確認し、実験と定量的にも一致す

ることを確かめた。更にこれらの状態の起源がポーラロン状態およびスピン励起状態であることを明らかにした。

[8] スピン渦超伝導理論の構築 (小泉)

銅酸化物超伝導の超伝導機構を説明する為に、スピン渦誘起ループ電流を電流の最小単位とする超伝導理論を構築した。この際、これまでの AC ジョセフソン効果の導出過程に不備があることを見いだした。我々が見出した不備は原理的なものであり、今後の超伝導現象の解析に対して慎重に対処していく必要があることを意味している。

[9] スピン渦誘起ループ電流を量子ビットとした、量子コンピュータの理論的研究 (小泉)
スピン渦が誘起するループ電流の右回り、左回りを量子ビットとする量子コンピュータを提案し、その実現のための理論的研究を行っている。

(特許申請) 量子コンピュータ, 発明者 (筑波大学、小泉裕康) 国際出願番号: PCT/JP2011/063881

(特許申請) 量子コンピュータ、発明者 (筑波大学、小泉裕康) 特願 2010-142978

4. 研究業績

(1) 研究論文

1. "Mass polarization effect on the resonant energy of $\bar{p}$ -He⁺ ions and the protonium formation in low-energy antiproton-hydrogen-atom collisions", X. M. Tong and N. Toshima, Physical Review A **85** (2012) 032709:1-5.
2. "Femtosecond and Attosecond Spectroscopy in the XUV regime", A. S. Sandhu and X. M. Tong, IEEE Journal of selected topics in quantum electronics **18** (2012) 351-363.
3. "Experimental Demonstration of the Breit Interaction which Dominates the Angular Distribution of X-ray Emission in Dielectronic Recombination", Z. Hu, X. Y. Han, Y. M. Li, D. Kato, X. M. Tong, N. Nakamura, Physical Review Letters **108** (2012) 073002:1-4.
4. "Low-energy peak structure in strong-field ionization by mid-infrared

- laser-pulses: two-dimensional focusing by the atomic potential", C. Lemell, K. I. Dimitriou, X. M. Tong, S. Nagele, D. V. Kartashov, J. Burgdorfer, and S. Grafe, *Physical Review A* **85** (2012) 011403(R):1-4.
5. "Attosecond streaking in the low-energy region as a probe of rescattering", X. H. Xu, L. Y. Peng, Z. Zhang, Q. H. Gong, X. M. Tong, E. A. Pronin, and A. F. Starace, *Physical Review Letters* **107** (2011) 183001:1-5.
6. "Laser information encoded in atomic asymmetrical ionization in few-cycle laser fields", T. Tabe, N. Ono, X. M. Tong, and N. Toshima, *Physical Review A* **84** (2011) 023409:1-6.
7. "Theory and experiment on laser enabled inner-valence Auger decay of rare gas atoms", X. M. Tong, P. Ranitovic, C. W. Hogle, M. M. Murnane, H. C. Kapteyn, and N. Toshima, *Physical Review A* **84** (2011) 013405:1-8.
8. "Alignment dependent ionization of hydrogen molecules in intense laser fields", Y. J. Jin, X. M. Tong, and N. Toshima, *Physical Review A* **83** (2011) 063409:1-5.
9. "Controlling the xuv transparency of helium using two-pathway quantum interference", R. Ranitovic, X.M. Tong, C.W. Hogle, X. Zhou, Y. Liu, N. Toshima, M.M. Murnane, and H.C. Kapteyn, *Physical Review Letters* **106** (2011) 193008:1-4.
10. "Dimerization-induced spin-charge coupling in one-dimensional Mott insulators revealed by femtosecond reflection spectroscopy of Rb-tetracyanoquinodimethane salts", H. Uemura, N. Maeshima, K. Yonemitsu, and H. Okamoto, *Phys. Rev. B* **85** (2012) 125112:1-7.
11. "Parallelization of the R-matrix propagation method for the study of intense-laser-driven semiconductor superlattices", Nobuya Maeshima and Ken-ichi Hino, *Compt. Phys. Commun.* **183** (2012) 8-14.

12. "Photoexcitation-Energy-Dependent Transition Pathways from a Dimer Mott Insulator to a Metal", Kenji Yonemitsu, Satoshi Miyashita, and Maeshima Nobuya, J. Phys. Soc. Jpn. 80 (2011) 084710:1-5.
13. "Interplay between Correlated Electrons and Quantum Phonons in Charge-Ordered and Mott-Insulating Organic Compounds, Kenji Yonemitsu, Nobuya Maeshima, and Yasuhiro Tanaka", Acta Phys. Pol. A 121 (2012) 372-374.
- 14 "Spin-vortices and Spin-vortex-induced Loop Currents in the Pseudogap Phase of Cuprates", R. Hidekata and H. Koizumi, J. Supercond. Nov. Magn. 24 (2011) 2253.
15. "Spin-vortex Superconductivity", H. Koizumi, J. Supercond. Nov. Magn. 24 (2011) 1997.
16. "Magnetic Excitation Spectra from Spin-Vortices and Spin-Vortex-Induced Loop Currents in Hole-Doped Cuprates", H. Koizumi and R. Hidekata, J. Phys. Soc. Jpn. 80 (2011) SB031

(2) 学会発表

(A) 国際会議

1. "Controlling the XUV transparency using two pathway quantum interference", P. Ranitovic, X. M Tong, C. W. Hogle, X. Zhou, N. Toshima, M. M. Murnane, and H C Kapteyn, XXVII International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions (Belfast, Northern Ireland, UK, 27 July - 2 August 2011)
2. "Alignment dependent ionization of hydrogen molecules in intense laser field", Y. J. Kin, X. M. Tong, and N. Toshima, XXVII International Conference on Photonic,

Electronic and Atomic Collisions (Belfast, Northern Ireland, UK, 27July - 2 August 2011)

3. ``Information encoded in Carry Envelope Phase Dependent Ionization'', T. Tabe, N. Ono, X. M. Tong and N. Toshima, The 12th International Conference on Multiphoton Processes & The 3rd International Conference on Attosecond Physics (Hokkaido University, Sapporo, Japan, July 3-8, 2011)

4. ``Probing Floquet State Dynamics of a Strong Field Dressed He Atom Using Attosecond Pulse Trains'', N. Shivaram, H. Timmers, X. M. Tong and A. Sandhu, The 12th International Conference on Multiphoton Processes & The 3rd International Conference on Attosecond Physics (Hokkaido University, Sapporo, Japan, July 3-8, 2011)

5. ``Infrared Laser Enabled Sub-shell Auger Decay of Ar Atoms'', X. M. Tong, P. Ranitovic, M. M. Murnane, H. C. Kapteyn and N. Toshima, The 12th International Conference on Multiphoton Processes & The 3rd International Conference on Attosecond Physics (Hokkaido University, Sapporo, Japan, July 3-8, 2011)

6. ``Laser enabled Auger decay in argon atoms and dimers'', P. Ranitovic, X. M. Tong, C. W. Hogle, N. Toshima, M. M. Murnane, and H.C. Kapten, 42nd Annual Meeting of the APS Division of Atomic, Molecular and Optical Physics (Atlanta, Georgia, USA, June 13-17, 2011)

7. ``Laser-Induced Fano Resonance in Semiconductor Superlattice'', N. Maeshima and K. Hino, The 1st Annual World Congress of Nano-S&T (Oct. 23-26, 2011, Dalian, China)

8. ``Floquet Analysis of Dynamic Fractional Stark Ladders in Laser-Driven Biased Semiconductor Superlattices'', Tomohiro Karasawa, K. Hino, and N. Maeshima, The 1st Annual World Congress of Nano-S&T (Oct. 23-26, 2011, Dalian, China)

9. ``Laser-induced Fano Resonance in Semiconductor Quantum Well'', Y. Nemoto, K. Hino,

and N. Maeshima, The 1st Annual World Congress of Nano-S&T (Oct. 23-26, 2011, Dalian, China)

(B) 国内会議

1. ``水素原子による反陽子捕獲のヤコビ座標系を用いた精密計算”, 全 暁民、戸嶋 信幸 第 67 回日本物理学会、(2012 年 3 月 24 日、関西学院大学)
2. ``テラヘルツ光駆動半導体超格子における光着衣励起子の光学応答スペクトル”, 前島展也、日野健一、日本物理学会 2011 年秋季大会 (2011 年 9 月 21 日-24 日、富山大学)
3. ``擬一次元ハロゲン架橋金属錯体の光誘起ダイナミクスにおける鎖間相互作用の効果”, 齋藤陽平、前島展也、日野健一、日本物理学会 2011 年秋季大会 (2011 年 9 月 21 日-24 日、富山大学)
4. ``半導体におけるコヒーレントフォノンの多チャンネル散乱理論による解析”, 柄澤朋宏、日野健一、前島展也、日本物理学会 2011 年秋季大会 (2011 年 9 月 21 日-24 日、富山大学)
5. ``テラヘルツ波駆動ワニエ-シュタルク階段における光着衣電子の共鳴構造の解析”, 根本裕也、柄澤朋宏、日野健一、前島展也、日本物理学会 2011 年秋季大会 (2011 年 9 月 21 日-24 日、富山大学)
6. ``半導体におけるコヒーレントフォノンの生成メカニズムの理論的解析”, 柄澤朋宏、日野健一、前島展也、日本物理学会、第 67 回年次大会、(2012 年 3 月 24 日-27 日、関西学院大学)
7. ``擬一次元ハロゲン架橋金属錯体の光誘起ダイナミクスにおける鎖間相互作用の効果 II”, 齋藤陽平、前島展也、日野健一、日本物理学会、第 67 回年次大会、(2012 年 3 月 24 日-27 日、関西学院大学)
8. ``スピン渦誘起ループ電流と仮想電場による巨大ネルンスト効果の説明’’, 小泉裕康、

日本物理学会第 66 回年次大会 (2012 年 3 月 24 日-27 日 関西学院大学)

9. ``銅酸化物高温超伝導体の $x=1/8$ における巨視的電流の抑制'', 秀方遼、小泉裕康、

日本物理学会第 66 回年次大会 (2012 年 3 月 24 日-27 日 関西学院大学)

10. ``スピン渦を含む 2 次元ハバード模型における電気伝導'', 秀方遼、小泉裕康、日本

物理学会 2011 年秋季大会 (2011 年 9 月 21 日-24 日、富山大学)

11. ``スピン渦超伝導理論 I'', 小泉裕康、日本物理学会 2011 年秋季大会 (2011 年 9 月 21 日-24 日、富山大学)

III-2 計算物性グループ

1. メンバー

教授 白石 賢二

准教授 岡田 晋

助教 岩田 潤一

助教 神谷 克政

研究員 小鍋 哲

研究員 高木 祥光

研究員 Cristoph M. Puetter

2. 概要

計算物性グループは本年度は大きくわけて 2 つの大きなテーマを中心に研究を推進した。第 1 のテーマは新しい計算手法の開発、第 2 のテーマはナノ物質・ナノ材料の機能・物性解明、及び、新奇ナノ物質のデザインを目指したナノサイエンスの研究である。

3. 研究成果

【1】 グラフェンの層間相互作用による電子状態変調

グラファイトの電子状態は構成単位であるグラフェン間の相互作用により、わずかに変調されていることが知られている。すなわち、グラフェンの線形バンドがグラファイトにおいて通常の方物線のなバンド分散を有するようになる。ここでは SiO_2 上のグラフェンにおいては、局所的にバンド構造が変調され、結果として半金属のような振る舞いをすることを明らかにした。当該研究成果は国際電子デバイス会議で発表を行い世界的に注目を集め、3 件の新聞に取り上げられた。

【2】 次世代パワーデバイス材料 SiC の研究

SiC は次世代パワーデバイスとして期待されている。本研究では 10 年以上も謎として認識されていた SiC の MOSFET を Wet 酸化によって作製するときに生じる原因不明のしきい値シフト

の物理的起源を明快に明らかにした。SiC を熱酸化する際には酸化過程で C 原子が放出されると考えられる。こうして放出された C 原子は SiO₂ 中に取り込まれると、水素原子のアシストで炭酸イオンとして負に帯電することを明らかにした。水素原子は Wet 酸化において不可避に混入するものであり、Wet 酸化によるしきい値シフトは不可避であることを示している。

【4】 次世代メモリ抵抗変化型メモリの機能発現機構の電子レベルでの解明

次世代メモリとして期待される抵抗変化型メモリは酸素空孔の凝集・離散による伝導フィラメントの形成と破壊が機能発現機構と考えられている。しかしその電子レベルの理解は全く未踏の状態であった。本研究では伝導フィラメントの形成・破壊はキャリア注入をきっかけとする構造相転移であることを明らかにし、世界に先駆けて抵抗変化型メモリの電子レベルでの発現機構の提案を行うことに成功した。

【5】 星間空間によるアミノ酸の形成・破壊過程の研究

星間空間におけるアミノ酸の形成・破壊は太陽系における生命誕生につながる非常に重要な物性である。本研究では当該センターの宇宙グループ・原子核グループ・生命グループと共同して初期太陽系における L 型アミノ酸過剰発生の原因を第一原理量子論によって明らかにした。その結果、初期太陽系における真空紫外領域の円偏光照射が L 型アミノ酸過剰を引き起こすという説を提案するに至った。

【6】 大規模第一原理計算によるシリコンナノワイヤの電子構造解析

長年計算機工学グループと開発してきた RSDFT を「京」コンピュータ用にチューニングして、次世代デバイスとして注目されているシリコンナノワイヤ FET の電子状態解析を行なった。計算規模は数万原子となった。本研究は 2011 年のゴードンベル最高性能賞に輝いた。

<発表論文>

1. K. Shiraishi, K. Yamaguchi, K. Kamiya, A. Otake, and Y. Shigeta, “Guiding Principle of Highly Scalable MONOS-Type Memory”, ESC Transaction, 41-7, p71-p.78 (2011)
2. W. Feng, R. Hettiarachchi, Y. Lee, S. Sato, K. Kakushima, M. Sato, K. Fukuda, M. Niwa, K. Yamabe, K. Shiraishi, H. Iwai, and K. Ohmori, “Fundamental origin of excellent low-noise property in 3D Si-MOSFETs -Impact of charge-centroid in the channel due to quantum effect on 1/f noise-“, 2011 Technical Digest of 2011 International Electron Devices Meetings, 27.7-1-4, (2011)
3. K. Yamaguchi, A. Otake, K. Kamiya, Y. Shigeta, and K. Shiraishi, “First Principle Study of the Stability of H Atoms in SiN Layers on MONOS-Type Memories During Program/Erase Operations”, Proceeding of 2011 International Conference on Simulation of Semiconductor Processes and Devices, p.215-p.217 (2011).
4. K. Yamguchi, A. Otake, K. Kamiya, Y. Shigeta, and K. Shiraishi, "Atomistic Design of Guiding Principles for High Quality Metal–Oxide–Nitride–Oxide–Semiconductor

- Memories: First Principles Study of H and O Incorporation Effects for N Vacancies in SiN Charge Trap Layers", Jpn. J. Appl. Phys. 50, Art. No. 04DD05 (2011)
5. M. Muraguchi, Y. Sakurai, Y. Takada, Y. Shigeta, M. Ikeda, K. Makihara, S. Miyazaki, S. Nomura, K. Shiraishi, and T. Endoh, "Collective Tunneling Model in Charge-Trap-Type Nonvolatile Memory Cell", Jpn. J. Appl. Phys. 50 Art. No. 04DD04 (2011).
 6. Y. Takada, Y. T. Yoon, T. Shiokawa, S. Konabe, M. Arikawa, M. Muraguchi, T. Endoh, Y. Hatsugai, and K. Shiraishi, "Multi-Electron Wave Packet Dynamics in Applied Electric Field", Jpn. J. Appl. Phys. 51, Art. No. 02BJ01 (2012)
 7. K. Kamiya, Y. Ebihara, M. Kasu, and K. Shiraishi, "Efficient Structure for Deep-Ultraviolet Light-Emitting Diodes with High Emission Efficiency: A First-Principles Study of AlN/GaN Superlattice", Jpn. J. Appl. Phys. 51, Art. No. 02BJ11 (2012).
 8. M. Arikawa, M. Muraguchi, Y. Hatsugai, K. Shiraishi, and T. Endoh, "Role of Synthetic Ferrimagnets in Magnetic Tunnel Junctions from Wave Packet Dynamics", Jpn. J. Appl. Phys. 51, Art. No. 02BM03 (2012).
 9. Y. Ebihara, K. Kamiya, K. Shiraishi and A. A. Yamaguchi, "Intrinsic origin of the breakdown of quasi-cubic approximation in nitride semiconductors", physica status solidi (c), 8, 2279-2281, (2011)
 10. N. Umezawa and K. Shiraishi, "Theoretical model for artificial structure modulation of HfO₂/SiO_x/Si interface by deposition of a dopant material", Appl. Phys. Lett. 100, Art. No. 092904 (2012)
 11. K. Kamiya, M. Y. Yang, S.-G. Park, B. Magyari-Köpe, Y. Nishi, M. Niwa, and K. Shiraishi, "ON-OFF switching mechanism of resistive-random-access-memories based on the formation and disruption of oxygen vacancy conducting channels", Appl. Phys. Lett. 100, Art. No. 073502 (2012)
 12. K. Kamiya, Y. Ebihara, K. Shiraishi, and M. Kasu, "Structural design of AlN/GaN superlattices for deep-ultraviolet light-emitting diodes with high emission efficiency", Appl. Phys. Lett. 99, Art. No. 151108 (2011)

〈学術講演〉

1. 長川健太, 加藤重徳, 海老原康裕, 神谷克政, 白石賢二, 「4H-SiC 表面の初期酸化過程の第一原理計算による検討」、2011 年秋季 第 72 回応用物理学会学術講演会 2011 年 8 月 29~9 月 2 日 @山形大学
2. 海老原康裕、長川健太、加藤茂徳、吉崎智浩、神谷克政、白石賢二、「酸化時に形成され

- る負の固定電荷に関する理論的検討 -Intrinsic Origin of Negative Fixed Charge in Wet Oxidation for Silicon Carbide-」 SiC 及び関連ワイドギャップ半導体研究会 第 20 回講演会 2011 年 12 月 8～9 日 愛知県産業労働センター(ウインクあいち)
3. 長川健太、加藤重徳、海老原康裕、吉崎智浩、神谷克政、白石賢二、「4H-SiC 表面の初期酸化過程の第一原理計算による考察 -First Principles Analysis of Initial Oxidation Process of 4H-SiC Surfaces-」 SiC 及び関連ワイドギャップ半導体研究会 第 20 回講演会 2011 年 12 月 8～9 日 愛知県産業労働センター(ウインクあいち)
 4. 加藤重徳、海老原康裕、吉崎智浩、長川健太、神谷克政、白石賢二、「4H-SiC 表面の NO 初期酸化過程の第一原理計算による検討 -First-Principles Analysis of NO Initial Oxidation Process of 4H-SiC Surfaces-」 SiC 及び関連ワイドギャップ半導体研究会 第 20 回講演会 2011 年 12 月 8～9 日 愛知県産業労働センター(ウインクあいち)
 5. Y. Ebihara, K. Chokawa, S. Kato, K. Kamiya, and K. Shiraishi, “Theoretical Approach of Effects of Wet Oxidation to SiC Materials”, International Symposium on Surface Science –Towards Nano-, Bio-, and Green Innovation – (ISSS-6) 2011 年 12 月 11～15 日 Tokyo, Japan
 6. K.Chokawa, S. Kato, Y. Ebihara, T. Yoshizaki, K. Kamiya, and K. Shiraishi, “First Principle Analysis of the Initial Oxidation Process of 4H-SiC Surface”, International Symposium on Surface Science –Towards Nano-, Bio-, and Green Innovation – (ISSS-6) 2012 年 12 月 11～15 日 Tokyo, Japan
 7. 海老原 康裕, 長川 健太, 加藤 重徳, 吉崎 智浩, 神谷 克政, 白石 賢二、「Intrinsic Origin of Negative Fixed Charge in Wet Oxidation for Silicon Carbide」、ゲートスタック研究会 —材料・プロセス・評価の物理— (第 17 回研究会)、2012 年 1 月 20～21 日 静岡県三島市、東レ総合研修センター
 8. 長川 健太, 加藤 重徳, 海老原康裕, 吉崎 智浩, 神谷 克政, 白石 賢二、「First Principle Analysis of the Initial Oxidation Process of 4H-SiC Surfaces」、ゲートスタック研究会 —材料・プロセス・評価の物理— (第 17 回研究会)、2012 年 1 月 20～21 日 静岡県三島市、東レ総合研修センター
 9. 加藤 重徳, 海老原 康裕, 吉崎 智浩, 長川 健太, 神谷 克政, 白石 賢二、「第一原理計算による 4H-SiC 表面の初期酸化過程の考察」、ゲートスタック研究会 —材料・プロセス・評価の物理— (第 17 回研究会)、2012 年 1 月 20～21 日 静岡県東レ総合研修センター
 10. 吉崎 智浩, 海老原 康裕, 長川 健太, 加藤 重徳, 神谷 克政, 白石 賢二、「熱酸化における 4H-SiC の欠陥の理論的検討」、ゲートスタック研究会 —材料・プロセス・評価の物理— (第 17 回研究会)、2012 年 1 月 20～21 日 静岡県東レ総合研修センター
 11. 加藤重徳, 長川健太, 海老原康裕, 吉崎智浩, 白石賢二, 神谷克政、「4H-SiC 表面の NO 初期酸化過程の第一原理計算による検討」、2012 年春期 第 59 回 応用物理学関係連合後援会 2012 年 3 月 15～18 日、早稲田大学 早稲田キャンパス 早稲田中・高等学校興風館
 12. 長川健太, 加藤重徳, 海老原康裕, 吉崎智浩, 白石賢二, 神谷克政、「4H-SiC 初期酸化にお

- ける Dry 酸化と Wet 酸化の相違の理論的考察」、2012 年春期 第 59 回 応用物理学関係連合後援会 2012 年 3 月 15～18 日、早稲田大学 早稲田キャンパス 早稲田中・高等学校興風館
13. 佐藤皓允, 庄司 光男, 神谷 克政, 梅村 雅之, 矢花 一浩, 白石 賢二: “星間空間におけるアミノ酸キラリティ生成機構の理論的研究”, ALMA WorkShop 「宇宙と生命」, 国立天文台 三鷹キャンパス, 2012 年 1 月 21 日
 14. 佐藤皓允, 庄司 光男, 神谷 克政, 梅村 雅之, 矢花 一浩, 白石 賢二: “星間空間における光誘起 L 型アミノ酸過剰の理論的研究”, 日本天文学会 2012 年春季年会, P224a, 龍谷大学 深草キャンパス, 2012 年 3 月 19 日～22 日
 15. <招待講演>K. Kamiya, M. Y. Yang, S.-G. Park, B. Magyari-Köpe, Y. Nishi, M. Niwa, and K. Shiraishi, “Universal Theory of ON-OFF Switching Mechanism of RRAM via VO Based Conducting Channels -Guiding Principle for Oxide Based High Quality RRAM-“, 1st International Workshop on RRAM, Leuven, Belgium, Oct. 20-21, (2011).
 16. Y. Ebihara, K. Chokawa, K. Kato, K. Kamiya, and K. Shiraishi, “Theoretical Approach of Effects of Wet Oxidation to Carbon Vacancy for 4H-SiC”, 42nd IEEE Semiconductor Interface Specialists Conference, Arlington, VA, USA, Dec. 1-3, (2011).
 17. Y. Takada, Y. T. Yoon, T. Shiokawa, S. Konabe M. Arikawa, M. Muraguchi, T. Endoh, Y. Hatsugai and K. Shiraishi, “Electron Dynamics in the Nano scale Transistor”, 2011 Asia_Pacific Workshop on Fundamentals and Applications of advanced. semiconductor devices, Daejeon, Korea, . June 29- July 1, (2011).
 18. M. Arikawa, Y. Hatsugai, K. Shiraishi and T. Endoh, “Electron dynamics in the ferromagnetic tunnel junction”, 2011 Asia_Pacific Workshop on Fundamentals and Applications of advanced. semiconductor devices, Daejeon, Korea, . June 29- July 1, (2011).
 19. <招待講演>K. Shiraishi, K. Yamaguchi, K. Kamiya, A. Otake, and Y. Shigeta, “Guiding Principle of Highly Scalable MONOS-Type Memory”, 220th Electrochemical Society Meeting, Boston, MA, USA, Oct. 9-14 (2011)
 20. W. Feng, R. Hettiarachchi, Y. Lee, S. Sato, K. Kakushima, M. Sato, K. Fukuda, M. Niwa, K. Yamabe, K. Shiraishi, H. Iwai, and K. Ohmori, “Fundamental origin of excellent low-noise property in 3D Si-MOSFETs -Impact of charge-centroid in the channel due to quantum effect on 1/f noise-“, International Electron Devices Meetings, Dec.5-7, Washington D.C. USA, (2011)
 21. <招待講演> Kenji Shiraishi, “Computational Sciences toward Developing Semiconductor Industry”, 第 21 回日本 MRS 学術シンポジウム、(2011 年 12 月 19 日～21 日、横浜)
 22. K. Yamaguchi, A. Otake, K. Kamiya, Y. Shigeta, and K. Shiraishi, “First Principle Study of the Stability of H Atoms in SiN Layers on MONOS-Type Memories During Program/Erase Operations”, 2011 International Conference on Simulation of Semiconductor Processes and Devices, Sept. 8-10, Osaka, Japan (2011).
 23. M. Arikawa, M. Muraguchi, Y. Hatsugai, K. Shiraishi, and T. Endoh, "Role of Synthetic Ferrimagnets

- in MTJs from Wave Packet Dynamics", 2011 International Conference on Solid State Devices and Materials (SSDM 2011) September 28-30, Aichi, Japan, 2011
24. K. Kamiya, M. Kasu, and K. Shiraishi, "First-Principles Study of Electronic Structures of AlN/GaN Superlattices," 2011 International Conference on Solid State Devices and Materials (SSDM 2011) September 28-30, Aichi, Japan, 2011
25. Y. Takada, Y. T. Yoon, T. Shiokawa, S. Konabe, M. Arikawa, M. Muraguchi, T. Endoh, Y. Hatsugai, and K. Shiraishi, "Multi Electron Wave Packet Dynamics in Applied Electric Fields", 2011 International Conference on Solid State Devices and Materials (SSDM 2011) September 28-30, 2011
26. <招待講演>白石賢二、「次世代 LSI 開発における計算科学の位置づけと利用方法」、日本物理学会 2011 年秋季大会シンポジウム「ナノスケール量子輸送の計算科学的研究の現状・展望と次世代スパコンへの期待」、(2011 年 9 月 21 日-24 日、富山大学)
27. <IEEE Distinguished Lecture> K. Shiraishi, "Computational Science Studies toward Future Nano-Devices", WIMNACT Workshop and IEEE EDS Mini-colloquium on Nanometer CMOS Technology 31, Jan. 30th, Tokyo Institute of Technology, Yokohama, Japan, (2012)
28. <IEEE Distinguished Lecture> K. Shiraishi, "Interface Physics and Its Approach to Modern Devices -A Computational Physics Approach-", Nov. 27, Tohoku University, Sendai, Japan (2012).