

III. 量子物性研究部門

III-1. 半導体ナノ物性グループ

1. メンバー

| | |
|-----|--------------------------|
| 教授 | 白石 賢二 |
| 助教 | 神谷 克政 |
| 研究員 | Cristoph M. Puetter、洗平昌晃 |
| 学生 | 大学院生 14 名 |

2. 概要

半導体ナノ物性グループは本年度は、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・ナノテクノロジーの研究、と宇宙生命連携の研究を行った。

3. 研究成果

【1】 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 SiC 熱酸化によって C-C ボンドが界面フロントに必ず形成されることを第一原理計算によって示した。本研究成果は、熱酸化によって形成された SiC/SiO₂ 界面の特性がなぜ悪いのかという長年にわたる問題を原子レベルから世界で初めて明らかにしたもので、パワーデバイス業界から大きな注目を集めている。

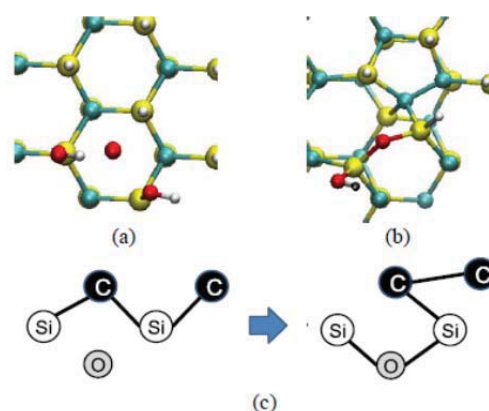


図 1: SiC の熱酸化の原子レベルの機構の模式図

【2】 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

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。昨年度我々は、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世界に先駆けて明らかにした。本年度我々は、高性能の抵抗変化型メモリの設計指針を明らか

にした。それは HfO_2 と電極の間に酸素空孔が形成されにくい Al_2O_3 層を挿入することによって、抵抗変化型目盛の ON-OFF 比が飛躍的に向上することを示し、さらに Al_2O_3 層の最適な厚さ等に関する設計も第一原理量子論によって行った。

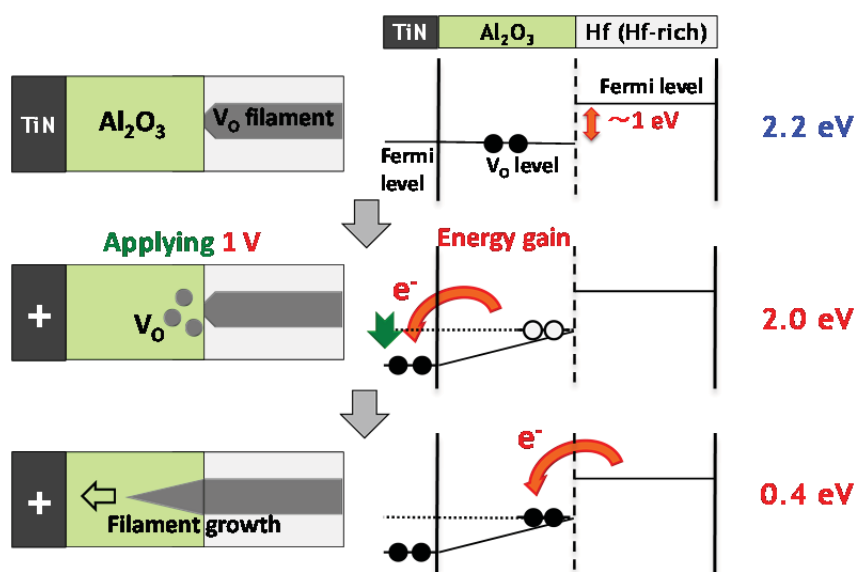


図 2 : 高性能の抵抗変化メモリ設計の指針

【3】 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昨年度に引き続いて考察した。具体的には昨年度行った 3 つのアミノ酸以外のアミノ酸の円偏光二色性の計算を行った。その結果、昨年度検討した 3 種のアミノ酸と同様に、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可能性が高いことを明らかにした。

【4】 多電子波束ダイナミクスの計算科学による検討

多電子波束ダイナミクスを時間依存ハートリーフォック近似を用いて考察し、多電子波束の特異な性質を明らかにした。その結果、電子は多くの電子から構成される波束として運動し、さらに一つの波束に含まれる電子数には限界があることも示した。



図 3 : 多電子波束による新しい伝導機構の模式図

4. 教育

博士論文

- 田中潤一 エッチングプロセスにおける気相および表面反応の研究
 鈴木輝夫 ナノスケール Si 半導体デバイスのコンポーネントレベル ESD に関する研究

修士論文

- 吉崎智浩 4H-SiC 中の点欠陥の理論的検討
 近藤大生 Q/N に富んだペプチドがつくるアミロイド線維の構造安定化機構の計算科学的解析
 田口真彦 Theoretical study on the absorption spectrum of light-harvesting antenna in photosynthesis based on time-dependent density functional theory and its application for the detection of biomarker in extrasolar planets

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

受賞

1. 長川健太：若手奨励賞（服部賞）、第 18 回ゲートスタック研究会 一材料・プロセス・評価の物理一、2013 年 1 月 26 日、口頭発表 東レ総合研修センター、静岡県。

2. ヤンムンヨン : Best Poster Paper Award, Workshop and IEEE EDS Mini-colloquium on Nanometer CMOS Technology (WIMNACT) 37 2013 年 2 月 18 日、東京工業大学、東京都
3. ヤンムンヨン:優秀発表賞, 2012 年度韓国物理学会(秋学術論文発表会),2012 年 10 月

6. 研究業績

(1) 研究論文

1. 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)
2. 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).
3. 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).
4. Yasuhiro Ebihara, Kenta Chokawa, Shigenori Kato, Katsumasa Kamiya, Kenji Shiraishi, "Intrinsic origin of negative fixed charge in wet oxidation for silicon carbide", Applied Physics Letters **100**, 212110 (3 pages) (2012).
5. Takashi Yamauchi, Moon Young Yang, Katsumasa Kamiya, Kenji Shiraishi, Takashi Nakayama, "Theoretical study of Si-based ionic switch", Applied Physics Letters **100**, 203506 (4 pages) (2012).
6. Mitsuo Shoji, Kyohei Hanaoka, Akimasa Sato, Daiki Kondo, Moon Young Yang, Katsumasa Kamiya, and Kenji Shiraishi, "Calculation of the Electron Transfer Coupling Matrix Element in Diabatic Reactions", International Journal of Quantum Chemistry, DOI: 10.1002/qua.24074 (2012).

7. Katsumasa Kamiya, Yasuhiro Ebihara, Kenta Chokawa, Shigenori Kato, and Kenji Shiraishi, "Origins of Negative Fixed Charge in Wet Oxidation for SiC", Materials Science Forum, 740-742, 409-412 (2013).
 8. Kenta Chokawa, Shigenori Kato, Katsumasa Kamiya, and Kenji Shiraishi, "A New-Type of Defect Generation at a 4H-SiC/SiO₂ interface by Oxidation Induced Compressive Strain", Materials Science Forum, 740-742, 469-472 (2013).
 9. Shigenori Kato, Kenta Chokawa, Katsumasa Kamiya, and Kenji Shiraishi, "Theoretical Study of N incorporation Effect during SiC Oxidation", Materials Science Forum, 740-742, 455-458 (2013).
 10. Taro Shiokawa, Genki Fujita, Yukihiro Takada, Satoru Konabe, Masakazu Muraguchi, Takahiro Yamamoto, Tetsuo Endoh, Yasuhiro Hatsugai, Kenji Shiraishi, "Dynamical Study of Multi-Electron Wave Packet in Nanoscale Structure", 52, 04CJ06 (2013).
 11. Katsumasa Kamiya, Moon Young Yang, Takahiro Nagata, Seong-Geon Park, Blanka Magyari-Köpe, Toyohiro Chikyow, Keisaku Yamada, Masaaki Niwa, Yoshio Nishi, and Kenji Shiraishi, "Generalized Mechanism of the Resistance Switching in Binary-Oxide-Based Resistive Random-Access Memories", Physical Review B, 87, 155201 (5 pages) (2013).
 12. Katsumasa Kamiya and Susumu Okada, "Energetics and Electronic Structures of Alkanes Adsorbed on Carbon Nanotubes", Japanese Journal of Applied Physics, 52, 04CN07 (3 pages) (2013).
 13. Kenji Shiraishi, Keita Yamaguchi, Moon Young Yang, Seong-Geon Park, Katsumasa Kamiya, Yasuteru Shigeta, Blanka Magyari-Köpe, Masaaki Niwa, and Yoshio Nishi, "Computational Study toward Micro Electronics Engineering", Proceedings of 2012 28th International Conference on Microelectronics (MIEL), 65-70 (2012).
- (2) 国際学会発表
- A) 招待講演
1. Kenji Shiraishi, Keita Yamaguchi, Moon Young Yang, Seong-Geon Park, Katsumasa Kamiya, Yasuteru Shigeta, Blanka Magyari-Köpe, Masaaki Niwa, and Yoshio Nishi,

- "Computational Study toward Micro Electronics Engineering", 2012 28th International Conference on Microelectronics, May 13-16 2012, University of Nis, Nis, Serbia.
2. Kenji Shiraishi, Moon Young Yang, Katsumasa Kamiya, Hiroyoshi Momida, Blanka Magyari-Köpe, Takahisa Ohno, Masaaki Niwa, and Yoshio Nishi, "On-Off Switching Mechanism of Oxide Based ReRAM by Ab Initio Electronic Structure Calculations", 2nd International Workshop on Resistive RAM, October 8-9 2012, Stanford University, Stanford, USA.
 3. Kenji Shiraishi, Moon Young Yang, Katsumasa Kamiya, Blanka Magyari-Köpe, Masaaki Niwa, and Yoshio Nishi, "First Principles Guiding Principles for the Switching Process in Oxide ReRAM", 2012 IEEE 11th International Conference on Solid-State and Integrated Circuit Technology, October 29-November 1 2012, Paradise Resort Hotel, Xian, China.
 4. Katsumasa Kamiya, "On-off Switching Mechanism of Oxide Based ReRAM by First Principle Calculation", NCCAVS Thin Film Users Group, November 2012,, SEMI Global Headquarters, San Jose, USA.
 5. Kenji Shiraishi, Katsumasa Kamiya, Yasuhiro Ebihara, Kenta Chokawa, and Shigenori Kato, Atomistic investigation of SiC/SiO₂ interfaces for the SiC-MOSFET power devices, The Collaborative Conference on Crystal Growth (3CG), December 11-14 2012, Orlando, Florida, USA
 6. K. Shiraishi, T. Shiokawa, G. Fujita, Y. Takada, M. Muraguchi, T. Yamamoto, T. Endoh, Y. Hatsugai, "Theoretical study of multi-electron wave packet dynamics in semiconductor nano-structures", 2nd International Conference on Small Sciences, December 16-19 2012, Orlando, Florida
 7. Katsumasa Kamiya, "First-Principles Studies on Proton Transfer Mechanisms in Cytochrome c Oxidase", 2012 International Conference on Small Science, December 2012, Wald Disney World Swan and Dolphin, Orlando FL, USA.
 8. Blanka Magyari-Köpe, Katsumasa Kamiya, Kenji Shiraishi, and Yoshio Nishi, "Atomic-size Effects of the Conductive Filaments Formation and Rupture in Resistance Change Based Memory Devices", 2012 International Conference on Small Science, December 2012, Wald Disney World Swan and Dolphin, Orlando FL, USA.
 9. K. Shiraishi, K. Chokawa, S. Kato, C. Shinnei, and K. Kamiya, Guiding Principles toward SiC-MOSFET for Future Power Device Applications, Workshop and IEEE EDS Mini-colloquium on Nanometer CMOS Technology (WIMNACT) 37, February 18 2013, 東京工業大学、東京都

B) 一般講演

1. Taro Shiokawa, Yukihiro Takada, Young Taek Yoon, Satoru Konabe, Masakazu Muraguchi, Mitsuhiro Arikawa, Tetsuo Endoh, Yasuhiro Hatsugai, Kenji Shiraishi, “Applied Electric Field Dependence of Multi-electron Wave Packet Dynamics”, The Eighth International Nanotechnology Conference on Communication and Cooperation, May 8-11, 2012, Tsukuba, Japan.
2. Taro Shiokawa, Yukihiro Takada, Satoru Konabe, Masakazu Muraguchi, Tetsuo Endoh, Yasuhiro Hatsugai, Kenji Shiraishi, “The Effect of Coulomb Interaction in Multi-Electron Wave Packet Dynamics”, 31st International Conference on the Physics of Semiconductors, July 29-August 3, 2012, Zurich, Switzerland.
3. Yukihiro Takada, Young Taek Yoon, Taro Shiokawa, Satoru Konabe, Mitsuhiro Arikawa, Masakazu Muraguchi, Tetsuo Endoh, Yasuhiro Hatsugai, Kenji Shiraishi, “Effectiveness of Time-Dependent Hartree-Fock Approaches for Multi-Electron Wave Packet Dynamics in Nanoscale Structures”, 31st International Conference on the Physics of Semiconductors, July 29-August 3, 2012, Zurich, Switzerland.
4. Christoph M. Puetter, Satoru Konabe, Kenji Shiraishi, “Wavepacket dynamics in grapheme”, 31st International Conference on the Physics of Semiconductors, July 29-August 3, 2012, Zurich, Switzerland.
5. Taro Shiokawa, Genki Fujita, Yukihiro Takada, Satoru Konabe, Masakazu Muraguchi, Takahiro Yamamoto, Tetsuo Endoh, Yasuhiro Hatsugai, Kenji Shiraishi, “Effect of Coulomb Interaction in Electron Wave Packet Dynamics in Nanoscale Devices”, 2012 International Conference on Solid State Devices and Materials, September 25-27, 2012, Kyoto, Japan.
6. Yukihiro Takada, Taro Shiokawa, Young Taek Yoon, Satoru Konabe, Yasuhiro Hatsugai, Kenji Shiraishi Takahiro Yamamoto, “Multi-Electron Wave Packet Dynamics for Electron Transport in Classical-Quantum Crossover Regions”, IUMRS-International Conference on Electronic Materials (IUMRS-ICEM 2012), September 23-28, 2012, Pacifico Yokohama, Yokohama, Japan.

7. Taro Shiokawa, Genki Fujita, Yukihiro Takada, Satoru Konabe, Masakazu Muraguchi, Takahiro Yamamoto, Tetsuo Endoh, Yasuhiro Hatsugai Kenji Shiraishi, "Multi-Electron Wave Packet Dynamics with Long-range Coulomb Interaction", 2012 Workshop on Innovative Nanoscale Devices and Systems (WINDS 2012), December 2-7, 2012, Kohala Coast, Hawaii, USA .
 8. C. M. Puetter, S. Konabe, Y. Hatsugai, K. Shiraishi, "Semi-classical Klein tunneling with Berry curvature effects in graphene", 2012 Workshop on Innovative Nanoscale Devices and Systems (WINDS 2012), December 2-7, 2012, Kohala Coast, Hawaii, USA.
 9. Takefumi Kamioka, Hiroya Imai, Yoshinari Kamakura, Kenji Ohmori, Kenji Shiraishi, Masanori Niwa, Keisaku Yamada, Takanobu Watanabe, "Current fluctuation in sub-nano second regime in gate-all-around nanowire channels studied with ensemble Monte Carlo/molecular dynamics simulation", IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM), December. 11, 2012, San Francisco, USA.
 10. Katsumasa Kamiya, Moon Young Yang, Blanka Magyari-Köpe, Masaaki Niwa, Yoshio Nishi, and Kenji Shiraishi, "Physics in Designing Desirable ReRAM Stack Structure -Atomistic Recipes Based on Oxygen Chemical Potential Control and Charge Injection/Removal", IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM), December. 11, 2012, San Francisco, USA.
 11. C. Shinnei, K. Chokawa, K. Kamiya and K. Shiraishi, Effect of Strain to the Electronics Structures of SiC Thin Film with Various Poly Types and Suggestion of Suitable MOSFET Direction, Workshop and IEEE EDS Mini-colloquium on Nanometer CMOS Technology (WIMNACT) 37, February 18 2013, 東京工業大学、東京都
- (3) 国内学会・研究会発表
- A) 招待講演
 1. 白石賢二, 長川健太, 海老原康裕、加藤重徳、真栄力、神谷克政、第一原理計算に基づく SiC-MOSFET の設計指針、第 21 回 SiC 研究会講演会、大阪市中央公会堂、大阪府、2012 年 11 月.

B) その他の発表

1. 塩川太郎、藤田弦暉、高田幸宏、小鍋哲、村口正和、山本貴博、遠藤哲郎、初貝安弘、白石賢二、「多電子波束を用いた円電流ダイナミクスへの電子間相互作用の効果」、日本物理学会 2012 年年会、広島大学、2012 年 3 月 26 日～29 日
2. 高田幸宏、塩川太郎、尹永択、小鍋哲、初貝安弘、白石賢二、山本貴博、「古典-量子クロスオーバー系における電子波束ダイナミクス」、第 73 回応用物理学会学術講演会、愛媛大学・松山大学、松山市、2012 年 9 月 14 日
3. 塩川太郎、藤田弦暉、高田幸宏、小鍋哲、村口正和、山本貴博、遠藤哲郎、初貝安弘、白石賢二、「次元非一様ポテンシャル中の波束ダイナミクス」、日本物理学会 2012 年秋季大会、横浜国立大学、2012 年 9 月 18 日～21 日
4. 藤田弦暉、塩川太郎、高田幸宏、小鍋哲、村口正和、山本貴博、遠藤哲郎、初貝安弘、白石賢二、「ナノ構造中の多電子波束ダイナミクスにおける電子間相互作用の効果」、日本物理学会 2012 年秋季大会、横浜国立大学、2012 年 9 月 18 日～21 日
5. 長川健太、加藤重徳、真栄力、神谷克政、白石賢二、酸化による C-C 欠陥の形成と SiC MOSFET の性能劣化の理論的考察、第 21 回 SiC 研究会講演会、2012 年 11 月、大阪市中央公会堂、大阪府。
6. 長川健太、加藤重徳、真栄力、神谷克政、白石賢二、SiC 酸化による Si-Si 結合欠陥の形成と結晶多形による違いの考察、第 21 回 SiC 研究会講演会、2012 年 11 月、大阪市中央公会堂、大阪府。
7. 真栄力、長川健太、神谷克政、白石賢二、第一原理計算を用いた結晶多形の異なる薄膜 SiC における歪みによる電子構造変化の考察、第 21 回 SiC 研究会講演会、2012 年 11 月、大阪市中央公会堂、大阪府。
8. 神谷克政、長川健太、個別討論会「SiC-MOS デバイス研究開発に関する最新動向と技術課題」、第 21 回 SiC 研究会講演会、2012 年 11 月 19～20 日、大阪市中央公会堂、大阪府。(パネル討論)
9. 長川健太、加藤重徳、真栄力、神谷克政、白石賢二、酸化により引き起こされる SiC の本質的欠陥 第 18 回 ゲートスタック研究会 -材料・プロセス・評価の物理- 2013 年 1 月 25～26 日、ニューウェルシティー湯河原、静岡県
10. 真栄力、長川健太、神谷克政、白石賢二、第一原理計算を用いた結晶多形の異なる薄膜 SiC における歪みによる電子構造変化の考察と MOSFET の最適面方位の提言、第 18 回 ゲートスタック研究会 -材料・プロセス・評価の物理-2013 年 1 月 25～26 日、ニューウェルシティー湯河原、静岡県
11. 藤田弦暉、塩川太郎、高田幸宏、小鍋哲、村口正和、山本貴博、遠藤哲郎、初

貝安弘、白石賢二、「スピン自由度を考慮した多電子波束ダイナミクスにおける電子間相互作用の効果」、日本物理学会 2013 年年会、横浜国立大学、2013 年 3 月 26 日～29 日

(4) 著書、解説記事等

7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等
8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績
9. 管理・運営

組織運営や支援業務の委員・役員の実績

10. 社会貢献・国際貢献
11. その他

海外長期滞在、フィールドワークなど

III-2. ナノ構造物性グループ

1. メンバー

准教授 岡田晋
研究員 小鍋哲、富田陽子
学生 大学院生 2 名、学類生 3 名

2. 概要

ナノスケール構造を持つ物質においては、その物性は系のサイズ、表面(端)形状等に非常に大きく依存することが知られている。このことは、他方において、既存の物質においても、物質のサイズをナノメートルオーダーとし、その形状を制御することにより、新奇物性、新機能発現を誘起させることが可能であることを示唆している。実際、興味深い物性を示す種々のナノスケール炭素物質群の合成が近年盛んになされている。例えば、有限幅のグラファイト断片（グラファイトリボン）はその端形状に依存して、端を構成する原子にスピン分極が生じる事が知られている。さらに、このリボンを丸めた有限長さのナノチューブでは、そのチューブ直径に依存して、強磁性、反強磁性磁気秩序を示す事が我々の量子論に基づく全エネルギー計算から明らかになっている。また、チューブに 5 員環と 8 員環からなるトポロジカル欠陥を導入することにより、欠陥にそって分極電子が局在しチューブ軸にそって強磁性的秩序を発現する。

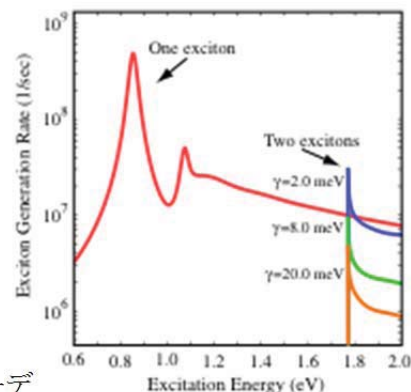
我々のグループでは、ナノサイズ炭素系（ナノチューブ、フラーレン、グラファイト）の電子物性を理論的に解析することによって、サイズ、形状が誘起する特異な電子物性発現の可能性を探索する事を目的としている。

3. 研究成果

【1】 カーボンナノチューブにおける多重励起子生成機構の解明

本論文では、単層カーボンナノチューブにおいて、多重励起子生成(一つの光子から複数個の励起子が生成されるプロセス)の微視的機構を調べた。多重励起子生成については、10 数年にわたりゼロ次元物質である量子ドット分野で注目され、現象の理論的解明が試みられてきたが、これまで未解決である。

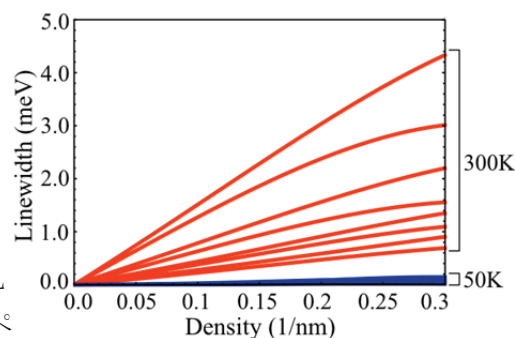
これは、理論と実験との比較が困難なことや、理論モデリングが複雑なことが原因である。本研究は、カーボンナノチューブに注目する事で、量子ドットにおける理論解析の困難を克服し、多重励起子生成の微視的機構を明らかにした(図 1)。



【2】 カーボンナノチューブにおける励起子—キャリア散乱抑制機構の解明

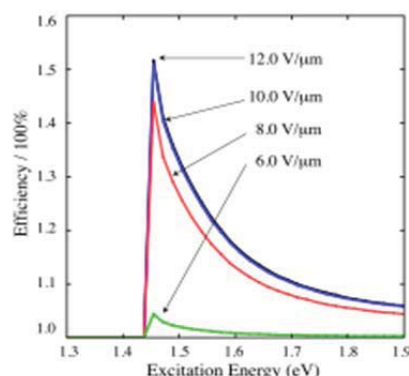
本論文では、キャリアドープした半導体カーボンナノチューブにおいて、励起子の位相緩和ダイナミクスを調べるため、励起子—キャリア弾性散乱率を計算した。その結果、低次元性に伴う多体効果により、励起子—キャリア散乱が強く抑制されることがわかった(図)。一般に、ドープした半導体では、この散乱は主要な励起子位相緩和プロセスであり、光吸収スペクトルの形状を決める。

しかし、本研究により、従来の半導体光物性の常識が相互作用効果の強いナノスケール物質では全く成り立たないことが明らかになった。



【3】 カーボンナノチューブにおける光電流の見積もり

本論文では、単層カーボンナノチューブにおいて、多重励起子生成機構による電流生成を理論的に調べた。カーボンナノチューブでは、多重励起子生成が高効率に起こることが知られているが、それがどの程度電流生成に寄与するかは明らかではなかった。本研究により、多重励起子生成に起因し電流生成も高効率に生じることがわかった(図)。



【4】 有限長カーボンナノチューブにおける特異な電界遮蔽効果

CNT は半導体デバイスとしての応用が期待されている。デバイス中においては CNT は本質的に種々の異種物質との複合構造を形成している。そのなかで、電界はデバイスの機能制御において最も重要な広義異種物質である。ここでは、CNT を用いた電界効果トランジスタにおいて考えられる電界効果として、ソースドレイン電極間に架橋された CNT の電界下における基礎物性を密度汎関数理論に基づく第一原理計算と有効媒質遮蔽モデルを用いて明らかにした。その結果、CNT のキャップ、終端水素に起因する C-C 結合の結合交代が外部電界に対する遮蔽において非常に重要な影響を及ぼす事が明らかになった。すなわち、結合長の短い 2 重結合にかかわる炭素原子において電界遮蔽が強くおこり、結合長の比較的長い単結合領域において電界遮蔽が弱い事が明らかになった。さらに、ジグザグ端を有する有限長ナノチューブにおいては、其の端近傍において異常な電界遮蔽、すなわち電界に対する過剰な遮蔽現象が生じる事が明らかになった。この事は、仮に電極からオーミックにキャリアが注入されたとしても、CNT のジグザグ端近傍においてキャリアが多重散乱を受ける事を示しており、デバイス設計において電極とのコンタクト形状の制御が非常に重要である事を明らかにしたものである。

【5】 小さいフラーレンからなる新奇ナノカーボン物質

本研究では、炭素原子数が 28 個からなる C₂₈ フラーレンに着目し、C₂₈ フラーレン多面体からなる 3 次元ネットワーク構造の安定性と電子構造を密度汎関数論に基づく第一原理計算から明らかにした。その結果、C₂₈ 多面体から形成されるダイヤモンド構造を有する新奇炭素同素体の可能性が明らかになった。また、複数個の準安定構造が存在すること、それら全てが 1eV 程度の狭いバンドギャップを有する半導体であることが明らかになった。また、それらの準安定相は圧力誘起相転移において構造転移が可能であり、圧力によるバンドギャップエンジニアリングの可能性のある新しい炭素固体相である事を示した。

【6】 2 層グラフェンの電界による電子物性制御

2 層グラフェンは面鉛直方向の電界下において有限のバンドギャップを形成する事が知られている。ここでは、外部電力を必要としない、有限ギャップを有する半導体化された 2 層グラフェン実現の方法を第一原理計算から理論的に予言した。すなわち、2 層グラフェンを上面、下面をそれぞれ正のイオン性液体と負のイオン性液体とでサンドイッチすることにより、イオン性液体間の電氣的なポテンシャル差を用いる事により 2 層グラフェンに有限のバンドギャップを誘起する事が可能となる。また、正、負のイオン性液体のイオン種の組み合わせにより、真性半導体、p 型半導体、n 型半導体と半導体のキャリアタイプの制御が可能である事を明らかにした。

4. 教育

卒業論文

- 木暮 聖太 フラーレン内包した短いカーボンナノチューブの物性」
曾根 準基 部分的に水素終端されたダイヤモンド構造(111)面における線形分散バンド」
新夕 晴奈 十重付加体フラーレンの電子構造」

集中講義

名古屋大学 理学研究科物質理学専攻(化学系) 化学特別講義 7

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

受賞

1. 日本物理学会若手奨励賞、小鍋哲、カーボンナノチューブにおける励起子多体効果の理論、2012年3月
2. MNC25 Young Author's Award, 小鍋哲、Multiple exciton generation in graphene nano-ribbon, 2012年11月

外部資金

1. 科学技術振興機構 戦略的創造研究推進事業 CREST「次世代エレクトロニクスデバイスの創出に資する革新材料・プロセス研究」、岡田晋、代表、2009年、18,500千円、計算科学によるグラファイト系材料の基礎物性解明とそのデバイス応用における設計指針の開発

6. 研究業績

(1) 研究論文

1. Satoru Konabe and Susumu Okada, "Multiple Exciton Generation by A Single Photon in Single-Walled Carbon Nanotubes", *Physical Review Letters* **108**, 227401 (2012).
2. Takuma Shiga, Satoru Konabe, Junichiro Shiomi, Takahiro Yamamoto, Shigeo Maruyama, and Susumu Okada, "Graphene-Diamond Hybrid Structure as Spin-Polarized Conducting Wire with Thermally-Efficient Heat Sinks", *Applied Physics Letters* **100**, 233101 (2012).
3. Yoshiteru Takagi and Susumu Okada, "Electronic Structure Modulation of Graphene by Metal Electrodes", *Japanese Journal of Applied Physics* **51**, 085102 (2012).
4. Ayaka Yamanaka and Susumu Okada: "Electronic Properties of Carbon Nanotubes under an Electric Field" *Applied Physics Express*, **5**, 095101 (2012).

5. Donghui Guo, Takahiro Kondo, Takahiro Machida, Keigo Iwatake, Susumu Okada, and Junji Nakamura: "Landau levels under zero magnetic field on potassium intercalated graphite" *Nature Communications*, **3**, 1068 (2012).
6. Yoshiteru Takagi and Susumu Okada: "Modulation of Electron-states of Graphite Thin Films by the Nearly Free Electron States of Metal Surfaces" *Japanese Journal of Applied Physics*, **51**, 100203 (2012).
7. Satoru Konabe and Susumu Okada: "Robustness and Fragility of Linear Dispersion Band of Bilayer Graphene under an Electric Field" *Journal of the Physical Society of Japan*, **81**, 113702 (2012).
8. Mina Maruyama and Susumu Okada: "Elemental semiconductors of fused small fullerenes: Electronic and geometric structures of C₂₈ polymers" *Journal of the Physical Society of Japan*, **81**, 114719 (2012).
9. Satoru Konabe, Kazunari Matsuda, and Susumu Okada: "Suppression of Exciton-Electron Scattering in Doped Single-Walled Carbon Nanotubes" *Physical Review Letters*, **109**, 187403 (2012).
10. Soon-Kil Joung, Toshiya Okazaki, Susumu Okada, and Sumio Iijima: "Modest Response of Metallic Single-Walled Carbon Nano-tubes to C₆₀ Encapsulation Studied by Resonance Raman Spectroscopy" *Journal of Physical Chemistry C* **116**, 23844–23850 (2012).
11. Nguyen Thanh Cuong, Minoru Otani, and Susumu Okada: "Electron-state engineering of bilayer graphene by ionic molecules" *Applied Physics Letters*, **101**, 233106 (2012).
12. Masafumi Kubota, Shigenori Hayashi, Mototsugu Ogura, Yuichiro Sasaki, Susumu Okada, and Kikuo Yamabe: "Effects of Plasma Irradiation in Arsenic Plasma Doping Using Overhang Test Structures" *Japanese Journal of Applied Physics*, **52**, 021301 (2013).
13. Nguyen Thanh Cuong, Minoru Otani, and Susumu Okada: "Absence of Edge State near the 120 deg Corner of Zigzag Graphene Nanoaribbons" *Physical Review B* **87**, 045424 (2013).
14. Rieko Moriya, Kazuhiro Yanagi, Nguyen Thanh Cuong, Minoru Otani, and Susumu Okada: "Charge Manipulation in Molecules Encapsulated Inside Single-Wall Carbon Nanotubes" *Physical Review Letters* **110**, 086801 (2013).

(2) 国際学会発表

A) 招待講演

B) 一般講演

1. Susumu Okada, ``Electronic structures of graphene ribbons encapsulated in carbon nanotube'', 13th International Conference on the Science and Application of Nanotubes (NT12), June 24- 29, 2012, Brisbane.
2. Nguyen Thanh Cuong, Minoru Otani, and Susumu Okada, ``Energetics and electronic structures of graphene corner edges'', 13th International Conference on the Science and Application of Nanotubes (NT12), June 24-29, 2012, Brisbane.
3. Katsumasa Kamiya and Susumu Okada, ``Energetics and Electronic Structures of Amino Acid Residues Adsorbed on Carbon Nanotubes'', 13th International Conference on the Science and Application of Nanotubes (NT12), June 24-29, 2012, Brisbane.
4. Satoru Konaba and Susumu Okada, ``Multiple exciton generation by a single photon in semiconducting single-walled carbon nanotubes'', 13th International Conference on the Science and Application of Nanotubes (NT12), June 24-29, 2012, Brisbane.
5. Ayaka Yamanaka and Susumu Okada, ``Electronic Properties of Carbon Nanotubes under the Electric Field'', 2012 International Conference on Solid State Devices and Materials (SSDM 2012), 2012 年 9 月 25 日-27 日, 国立京都国際会館, 京都市
6. Satoru Konabe and Susumu Okada, "Multiple exciton generation in single-walled carbon nanotubes", 2012 International Conference on Solid State Devices and Materials (SSDM 2012), 2012 年 9 月 25 日-27 日, 国立京都国際会館, 京都市
7. Nguyen Thanh Cuong, Minoru Otani, and Susumu Okada, "Tuning Semiconducting Property of Bilayer Graphene by Ionic Molecules", 2012 International Conference on Solid State Devices and Materials (SSDM 2012), 2012 年 9 月 25 日-27 日, 国立京都国際会館, 京都市
8. Ayaka Yamanaka and Susumu Okada, ``Electronic Properties of Carbon Nanotubes under the Electric Field'', 25th International Microprocesses and Nanotechnology Conference (MNC2012), 2012 年 10 月 30 日-11 月 2 日, 神戸メリケンパーク, 神戸市
9. Mina Maruyama and Susumu Okada, ``New Elemental Semiconductors of Fused Small Fullerenes'', 25th International Microprocesses and Nanotechnology Conference (MNC2012), 2012 年 10 月 30 日-11 月 2 日, 神戸メリケンパーク, 神戸市
10. Satoru Konabe and Susumu Okada, "Multiple Exciton Generation in Graphene Nanoribbon", 25th International Microprocesses and Nanotechnology Conference (MNC2012), 2012 年 10 月 30 日-11 月 2 日, 神戸メリケンパーク, 神戸市

11. Satoru Konabe and Susumu Okada, "Electronic Structures of Bilayer Graphene under Electric Field", 25th International Microprocesses and Nanotechnology Conference (MNC2012), 2012 年 10 月 30 日-11 月 2 日, 神戸メリケンパーク, 神戸市
12. Nguyen Thanh Cuong, Minoru Otani, and Susumu Okada, "Edge-orientation of Graphene Corner: First-principles Calculations", 25th International Microprocesses and Nanotechnology Conference (MNC2012), 2012 年 10 月 30 日-11 月 2 日, 神戸メリケンパーク, 神戸市
13. Nguyen Thanh Cuong, Minoru Otani and Susumu Okada, "Electron-state engineering of bilayer graphene by sandwiching ionic molecules", American Physical Society, March Meeting, March 18-22, 2013, Baltimore.

(3) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

1. 岡田晋, "グラファイト複合構造体の物性", ニューダイヤモンドフォーラム 平成 24 年度第 1 回研究会「ナノカーボンの最新研究」, 東京大学, 2012 年 6 月 15 日

B) その他の発表

1. 丸山実那, 岡田晋, "C₂₆ からなる二次元炭素結晶相の構造と電子状態", 第 43 回 フラレーン・ナノチューブ・グラフェン総合シンポジウム, 東北大学, 2012 年 9 月 5 日-7 日
2. 山中綾香, 岡田晋, "電界下における水素終端カーボンナノチューブの静電ポテンシャル", 第 43 回 フラレーン・ナノチューブ・グラフェン総合シンポジウム, 東北大学, 2012 年 9 月 5 日-7 日
3. 小鍋 哲, 岡田 晋, "単層カーボンナノチューブの多重励起子生成による光電流", 第 43 回 フラレーン・ナノチューブ・グラフェン総合シンポジウム, 東北大学, 2012 年 9 月 5 日-7 日
4. 小鍋 哲, 岡田 晋, "電界下における二層グラフェンの電子状態", 第 43 回 フラレーン・ナノチューブ・グラフェン総合シンポジウム, 東北大学, 2012 年 9 月 5 日-7 日
5. 富田 陽子, 岡田 晋, "トポロジカル欠陥のある六方晶系窒化ホウ素の電子構造", 第 43 回 フラレーン・ナノチューブ・グラフェン総合シンポジウム, 東北大学, 2012 年 9 月 5 日-7 日
6. Thanh Cuong Nguyen, Minoru Otani, and Susumu Okada, "Bilayer graphene sandwiched by ionic molecules: Band-gap and carrier type engineering", 第 43 回 フ

- ラーレン・ナノチューブ・グラフェン総合シンポジウム, 東北大学, 2012 年 9 月 5 日-7 日
7. 小鍋哲, 松田一成, 岡田晋, “キャリアドーピングした単層カーボンナノチューブにおける励起子位相緩和”, 日本物理学会 2012 年秋季大会, 横浜国立大学, 2012 年 9 月 19 日
 8. 丸山実那, 岡田晋, “ C_{28} をユニットとした新しい物質の安定構造と電子状態”, 日本物理学会 2012 年秋季大会, 横浜国立大学 2012 年 9 月 21 日
 9. 山中綾香, 岡田晋, “電界下におけるキャップ付きカーボンナノチューブの電子物性”, 日本物理学会 2012 年秋季大会, 横浜国立大学, 2012 年 9 月 21 日
 10. 小鍋 哲, 岡田 晋, “2 層グラフェンにおけるクーロンドラッグと励起子絶縁体”, 第 44 回 フラーレン・ナノチューブ・グラフェン総合シンポジウム, 東京大学, 2013 年 3 月 11 日-13 日
 11. 木暮 聖太, 岡田 晋, “短い CNT に内包された C_{60} のエネルギー論と電子構造”, 第 44 回 フラーレン・ナノチューブ・グラフェン総合シンポジウム, 東京大学, 2013 年 3 月 11 日-13 日
 12. 曾根 準基, 岡田 晋, “部分的に水素終端されたダイヤモンド構造(111)面における線形分散バンド”, 第 44 回 フラーレン・ナノチューブ・グラフェン総合シンポジウム, 東京大学, 2013 年 3 月 11 日-13 日
 13. 新夕 晴奈, 岡田 晋, “十重付加体フラーレンの磁性状態”, 第 44 回 フラーレン・ナノチューブ・グラフェン総合シンポジウム, 東京大学, 2013 年 3 月 11 日-13 日
 14. 山中 綾香, 岡田 晋, “平行電界によって電荷が蓄積されたキャップ付きカーボンナノチューブの電子物性”, 第 44 回 フラーレン・ナノチューブ・グラフェン総合シンポジウム, 東京大学, 2013 年 3 月 11 日-13 日
 15. 丸山 実那, 岡田 晋, “2 次元金属炭素同素体の物性”, 第 44 回 フラーレン・ナノチューブ・グラフェン総合シンポジウム, 東京大学, 2013 年 3 月 11 日-13 日
 16. 岡田 晋, 山本 貴博, “ラジカルを有するフラーレンのスピン状態”, 第 44 回 フラーレン・ナノチューブ・グラフェン総合シンポジウム, 東京大学, 2013 年 3 月 11 日-13 日
 17. 丸山実那, 岡田晋, “ C_{26} 多面体をユニットとする二次元炭素結晶相の安定構造と電子状態”, 日本物理学会第 68 回年次大会, 広島大学, 2013 年 3 月 26 日-29 日
 18. 新夕晴奈, 岡田晋, “十重付加体フラーレンの電子構造”, 日本物理学会第 68 回年次大会, 広島大学, 2013 年 3 月 26 日-29 日

19. 近藤剛弘, Donghui Guo, 町田考洋, 鹿野大志, 鈴木哲也, 櫻井雅崇, 岩竹啓吾, 岡田晋, 中村潤児, “グラファイト表面に無磁場下で出現するランダウ準位の起源”, 日本物理学会 第 68 回年次大会、 広島大学、2013 年 3 月 26 日-29 日
20. 山中綾香, 岡田晋, “電界下における有限長 zigzag カーボンナノチューブの電子物性”, 日本物理学会第 68 回年次大会、 広島大学、2013 年 3 月 26 日-29 日
21. 曾根準基, 岡田晋, “部分的に水素終端されたダイヤモンド構造(111)面におけるディラック電子”, 日本物理学会第 68 回年次大会、 広島大学、2013 年 3 月 26 日-29 日
22. Nguyen Thanh Cuong, Minoru Otani, and Susumu Okada, “Electron-state control of multilayer MoS2 by electric field”, 日本物理学会 第 68 回年次大会、 広島大学、2013 年 3 月 26 日-29 日

(4) 著書、解説記事等

1. 日刊工業新聞、“ナノチューブ太陽電池：シリコン上回る計算 “、2012 年 5 月 30 日
2. 日刊工業新聞、“グラフェンの半導体化：シミュレーションで解明 “、2012 年 12 月 3 日

7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等
8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績
9. 管理・運営
組織運営や支援業務の委員・役員の実績
10. 社会貢献・国際貢献
11. その他
海外長期滞在、フィールドワークなど

III-3. 量子状態制御グループ

1. メンバー

准教授 全 暁民, 小泉 裕康

講師 前島 展也

学生 大学院生 7名、学類生 6名

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】強レーザー場中のヘリウム原子におけるアト秒精度での2色光電子過程の研究(全)

光電離の過程で、物質の特性を調べるのは従来よく使われる手法である。光電離或いは光吸収の能力は物質によって異なるが、弱い外場で光電離過程の制御はできない。近年、レーザー技術の進歩によって、強レーザー場による光電離過程の制御は可能になってきた。我々は強レーザー場下における原子光電離過程の計算方法を開発した。その計算方法で大規模計算を行い、原子光電離過程に対する有効的な制御方法を探索した。その結果得られたヘリウム原子の光電離と加えたレーザーの強度との関係(図1)を、アリゾナ大学の実験グループにより得られた実験結果と比較した。その結果、2色光の到着の時間差による、図2のような物質光電離過程をアト秒(10^{-15} 秒)精度での制御ができることが明らかとなった。この研究結果は *Physical Review Letters* に発表された。

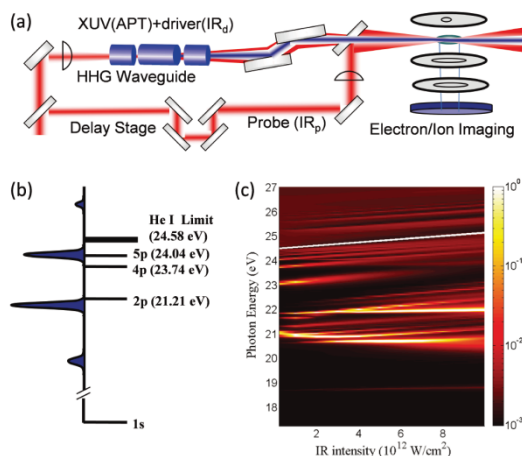
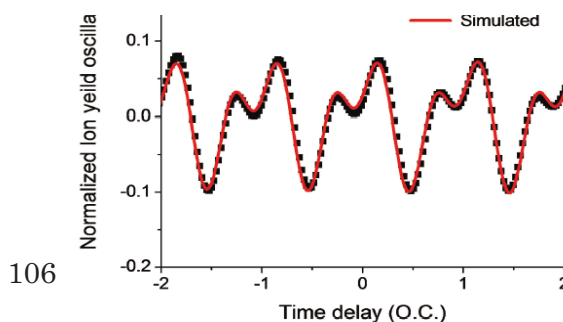


図1. 強レーザー場におけるヘリウム光電離断面積と コデータによって、2色光電離の実験概図。

図2:物質光電離確率と2色光の到着の時間差の依存性。



【2】中赤外線における原子電離過程の研究 (全)

レーザー技術の進歩により、従来よく使われた800nmの強レーザー以外でも、波長200 nmから4000nmの波長の強レーザーが利用できるようになってきた。特に、中赤外線における原子電離過程について、以前800nmの強レーザーで観測されていない様々な現象が報告されており、それらの現象は従来の理論では解釈できなかった。その理由は従来の理論計算法の計算量は波長の4.5乗に比例するので、波長が2倍になると、計算量が10倍以上となるため従来の手法では計算が極めて困難であったためである。我々は従来の手法で用いられたLength Gaugeの代わりにVelocity Gauge を採用することにより、GPUクラスタで計算できる新たな計算方法を開発した。この計算方法により、電離した電子の運動量分布と波長の関係(図3)を短波長(200 nm)から長波長(2000 nm)までの領域で系統的計算を実施し、アメリカのコロラド大学のM. Murnane 教授の実験グループによって得られた実験結果と比較研究を行った。その上で、多重散乱の寄与を初めて解明し、この結果はPhysical Review Letters に発表された。

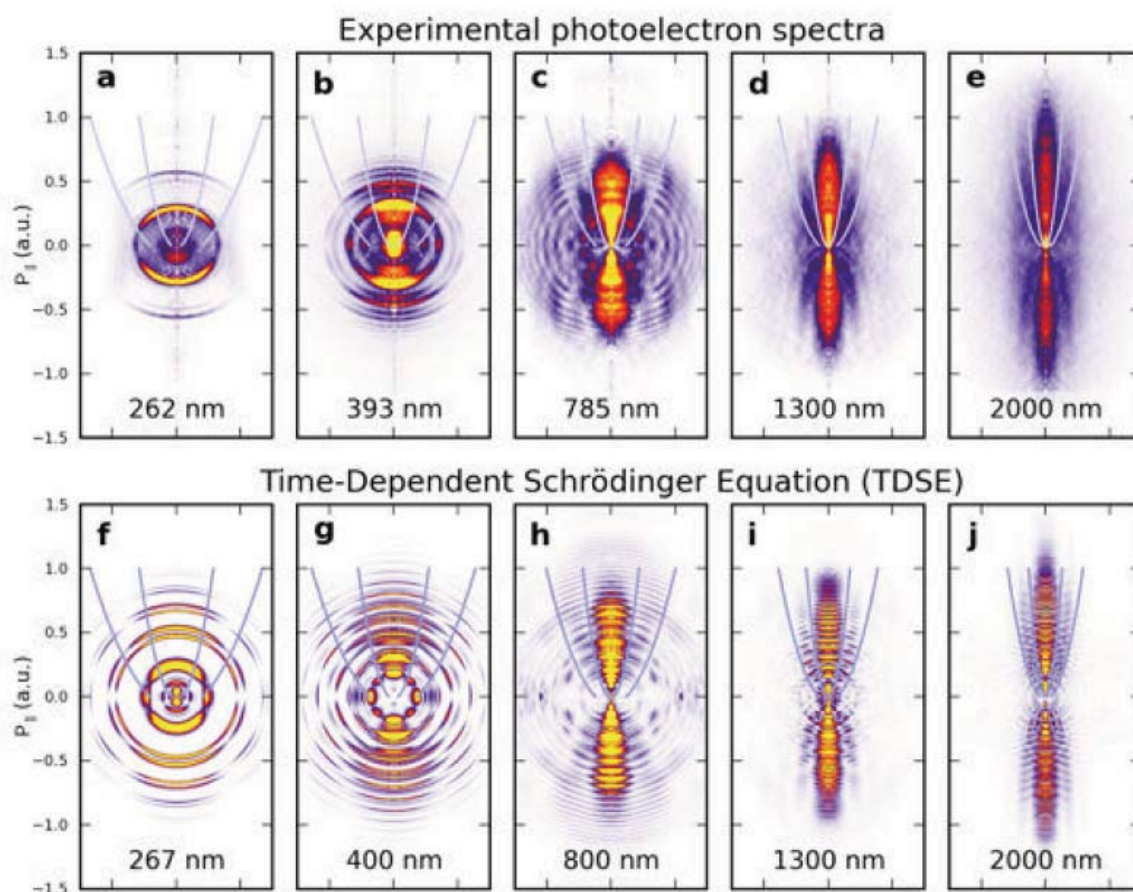


図3：強レーザー場における原子光電子の運動量分布（上：実験、下：理論）

【3】スピン渦誘起ループ電流の新たな計算方法の開発 (小泉)

行った。図 4 は $\eta=1$ における Excess Dos(赤線)、擬エネルギー(緑線)などの計算結果である。また、数学的操作により Excess DOS をシングルチャンネルに起因する項、多チャンネル非共鳴効果に起因する項、そして多チャンネル共鳴効果に起因する項の和として解析的に書き表すことで Excess DOS における多チャンネル効果に関して明確な議論を行った。結果として、駆動するレーザーに応じて Excess DOS における支配的な物理的寄与が変わることを示し、さらに今回の R 行列フロケ理論が従来のヒューストンモデルにおいて考慮されていた効果も内包しているより統一的な理論であることを示した。

【5】光着衣励起子における動的Fano共鳴（日野、前島）

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(図5)。

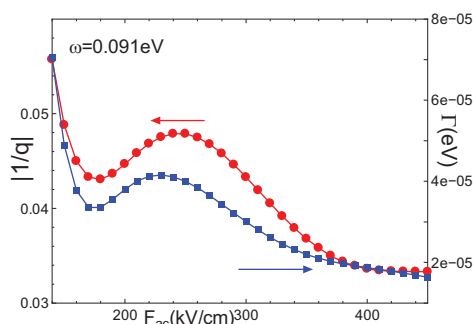


図5 ファノ共鳴ピークのスペクトル幅 Γ と非対称パラメータ q 。

【6】1次元パイエルス-ハバード模型における光誘起ギャップ内状態の解析（日野、前島）

光誘起相転移は物質に光を照射することで、相転移を起こす現象である。この現象を起こす物質に K-TCNQ などのスピンパイエルス物質がある。この物質においては、光照射直後に、電荷移動ピークより低いエネルギー領域に過渡的な吸収ピ

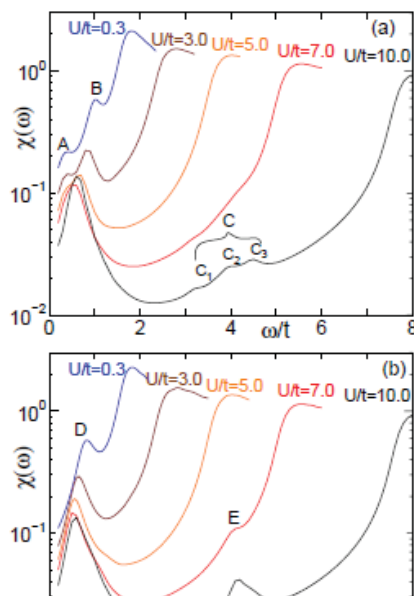


図6 (a) ポーラロン、(b)荷電ソリトン状態における光学伝導度。

ーク（ミッドギャップピーク）が観測されており、光誘起相転移現象を解明する手掛かりとして注目されている。このピークの起源を解析するため、スピンパイエルス物質の理論模型である、一次元拡張パイエルスハバード模型に対する数値的解析を行った。光照射直後の状態としてポーラロン状態およびソリトン状態を仮定し、密度行列繰り込み群を用いて光学応答関数の計算を行った。その結果、いくつかのミッドギャップ吸収ピークを見出し(図6)、さらにそれらのピークに対応する状態の詳しい解析から、ポーラロン状態、ソリトン状態における格子歪みの中心近傍での電荷励起が原因となっていることが分かった。

4. 教育

修士論文

- 海老沼 英明 銅酸化物における砂時計型磁気励起スペクトルの起源に関する理論研究
 根本 裕也 動的ワニエ・シュタルク階段における共鳴構造の不安定化と多チャンネル効果
 守家 康介 1次元スピンパイエルス系における光励起状態の理論的研究

卒業論文

- 井上 優 二原子分子の電離電子角度依存性における内殻軌道の寄与
 金澤 健太 レーザー場により電離した電子運動量分布から原子内部情報を得る方法
 岡崎 智 外部との電流のやり取りがあるスピン渦誘起ループ電流
 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
 竹中 光 2軌道縮退ハバード模型における光励起状態のスピン・軌道相関
 飛田 賢志 Wannier-Stark ladder における 2色レーザー駆動カオス散乱の時間周波数解析
 渡辺 陽一 超短パルス励起コヒーレントフォノン生成初期過程における過渡的 Fano 共鳴

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

外部資金

1. 日本学術振興会科学研究費、基盤研究(C)、全 暁民(トン ショウミン)、代表、2012年、2990千円、「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」
2. 日本学術振興会科学研究費、基盤研究(C)、全 暁民(トン ショウミン)、分担、2009年、150千円、「散乱方程式直接解法の新展開」
3. 日本学術振興会科学研究費、基盤研究(B)、全 暁民(トン ショウミン)、分担、2009年、100千円、「自動電離状態における一般化ブライト相互作用効果の研究」
4. 日本学術振興会科学研究費、基盤研究(C)、日野 健一、代表、2011年、1560千円、「超短パルス励起半導体における動的ファノ共鳴と過渡的準粒子生成」
5. 日本学術振興会科学研究費、若手研究(B)、前島 展也、代表、2011年、1040千円、「光誘起相転移初期過程における超高速ダイナミクスの量子動力学的研究」

6. 住友財団基礎科学研究助成、前島 展也、代表、2011 年、500 千円、「有機強相関電子系における光誘起テラヘルツ電荷・格子ダイナミクスの生成と制御」

知的財産権

米国特許出願 App. No.: 13/095,181, Inventor: Hiroyasu Koizumi, Quantum Computer,

6. 研究業績

(1) 研究論文

A) 査読付き論文

1. H. Timmers, N. Shivaram, X. M. Tong, and A. S. Sandhu, “Photoionization dynamics in the presence of attosecond pulse trains and strong field”, *Chem. Phys.*, **414**, 139-148 (2013).
2. C. Lemell, J. Burgdöfer, S. Gräfe, K. I. Dimitriou, D. G. Arbó, and X. M. Tong, “Classical-quantum correspondence in atomic ionization by mid-infrared pulses: multiple peak and interference structures”, *Phys. Rev. A* **87**,013421_1-9 (2013).
3. Y. J. Jin, X. M. Tong, and N. Toshima, “Anomalous alignment dependence of the third-order harmonic of H_2^+ ions in intense laser fields”, *Phys. Rev. A* **86**, 053418_1-5 (2012).
4. D. D. Hickstein, P. Ranitovic, S. Witte, X. M. Tong, Y. Huismans, P. Arpin, X. B. Zhou, B. S. Zhang, C. Y. Ding, K. E. Keister, P. Johnsson, N. Toshima, M. J. J. Vrakking, M. M. Murnane and H. C. Kapteyn, “Direct visualization of laser-driven electron multiple-scattering using velocity-map imaging”, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 073004_1-5 (2012).
5. N. Shivaram, L. H. Timmers, X. M. Tong, and A. S. Sandhu, “Measurement of the absolute timing of attosecond XUV bursts with respect to the driving field”, *Phys. Rev. A* **85**, 051802(R)_1-5 (2012).
6. N. Shivaram, H. Timmers, X. M. Tong, and A. S. Sandhu, “Attosecond-Resolved Evolution of a Laser-Dressed Helium Atom: Interfering Excitation Paths and Quantum Phases”, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 193002_1-5 (2012).
7. H. Koizumi, R. Hidekata, A. Okazaki, M. Tachiki, “Persistent current generation by the spin-vortex formation in cuprate with the single-valuedness constraint on the conduction electron wave functions”, to appear in *J. Supercond. Nov. Magn.*
8. H. Koizumi, “What is the phase variable in superconductors?: theory of superconductivity based on the spin-vortex formation”, *J. Phys. : conf. ser.* **428**, 12041_1-13 (2013).
9. Y. Nemoto, K. Hino, and N. Maeshima, “Quasienergy resonance in a dynamic Wannier-Stark ladder”, *Phys. Rev. B* **87**, 205305_1-13 (2013).
10. N. Maeshima, K. Moriya, and K. Hino, “Optical response of polarons and solitons in one-dimensional Peierls-Hubbard model”, *J. Phys. Soc. Jpn.* **81**, 104708_1-7(2012).

11. N. Maeshima and K. Hino, “Dynamical Fano resonance of an exciton in laser-driven semiconductor superlattices”, Phys. Rev. B **85**, 205305_1-9(2012).

B) 査読無し論文

1. S. Sugano, Y. Tanabe, and H. Koizumi. “Historical remarks on the birth of the ligand field diagram and the advent of laser”, J. Phys. : conf. ser. **428**, 12024_1-4 (2013).

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

1. Z. Hu, X. Han, Y. Li, D. Kato, X. M. Tong, H. Watanabe, and N. Nakamura, “Angular Distribution of X-ray Emission in Dielectronic Recombination”, 16th International Conference on Physics of Highly Charged Ions, September 2-7 2012, Heidelberg, Germany.
2. S. Sugano, Y. Tanabe, H. Koizumi, “Historical remarks on the birth of the ligand field diagram and the advent of laser”, XXIst International Symposium on the Jahn-Teller Effect, August 28, 2012, Tsukuba, Japan.
3. H. Koizumi, “What is the phase variable in superconductors?: theory of superconductivity based on the spin-vortex formation”, XXIst International Symposium on the Jahn-Teller Effect, August 31, 2012, Tsukuba, Japan.

B) 一般講演

1. X. M. Tong and N. Toshima, “Protonium formation in low-energy antiproton-hydrogen-atom collision --A case study in the V-coordinates with the mass polarization term”, International Conference on Many Particle Spectroscopy of Atoms, Molecules”, Clusters and Surfaces, August 27 -- September 1, 2012, Berlin, Germany.
2. Y. J. Jin, X. M. Tong, and N. Toshima, “Anomalous alignment dependence of the third order harmonics from H_2^+ ions in intense laser fields”, International Conference on Many Particle Spectroscopy of Atoms, Molecules, Clusters and Surfaces, August 27 -- September 1, 2012, Berlin, Germany.
3. Ranitovic, W. Petters, A. Spencer, L. Martin, D. Jonas, X. M. Tong, M. Murnane, and H. Kapteyn, “Ultrafast Dynamics of Ozone Exposed to Ionizing Radiation”, 43rd Annual Meeting of the APS Division of Atomic, Molecular and Optical Physics, June 4-8, 2012, Orange County, California.
4. N. Shivaram, H. Timmers, X. M. Tong, and A. Sandhu, “Quantum Interferences in Helium ionization in the Presence of Attosecond Pulses and Strong Laser Fields”, 43rd Annual Meeting of the APS Division of Atomic, Molecular and Optical Physics, June 4-8, 2012, Orange County, California.

5. R. Hidekata and H. Koizumi, "Spin-vortex-induced loop currents in the cuprate; a possible application to quantum computers", XXIst International Symposium on the Jahn-Teller Effect, August 27, 2012, Tsukuba, Japan.
 6. Y. Nemoto, N. Maeshima, and K. Hino, "Significance of Decay Mechanism into Continuum in Dynamical Wannier-Stark Ladder", ICPS 2012, July 29 - August 3, 2012, Zurich, Switzerland.
 7. N. Maeshima, K. Yamada, and K. Hino, "Laser-induces Fano resonance in semiconductor superlattice" ICPS 2012, July 29 - August 3, 2012, Zurich, Switzerland.
 8. N. Maeshima, K. Yamada, and K. Hino, "Laser-controlled excitonic Fano resonance in semiconductor superlattice", EXCON2012, Groningen, the Netherlands, July 1 - 6, 2012.
 9. K. Moriya, N. Maeshima, and K. Hino, "Dynamical properties of photogenerated polarons and solitons in one-dimensional dimerized Mott insulators", EXCON2012, Groningen, the Netherlands, July 1 - 6, 2012.
 10. Y. Nemoto, N. Maeshima, and K. Hino, "Destabilization of Dynamic Wannier-Stark ladder", EXCON2012, Groningen, the Netherlands, July 1 - 6, 2012.
- (3) 国内学会・研究会発表
- A)招待講演
- B)その他の発表
1. 小泉裕康, "スピン渦超伝導理論と BCS 理論の融合: 擬ギャップ相理解の為の考察", 日本物理学会 2012 年秋季大会. 横浜国立大学, 2012 年 9 月
 2. 海老沼英明, 秀方遼, 小泉裕康, "スピン渦誘起ループ電流のホール位置最適化", 日本物理学会 2012 年秋季大会, 横浜国立大学, 2012 年 9 月
 3. 小泉裕康, "スピン渦超伝導理論: 波動関数の一価性と超伝導", 日本物理学会第 68 回年次大会, 広島大学, 2013 年 3 月
 4. 鈴木紀之, 小泉裕康, 秀方遼, "スピン渦誘起ループ電流における磁場について", 日本物理学会第 68 回年次大会. 広島大学, 2013 年 3 月
 5. 若浦光, 秀方遼, 鈴木紀之, 小泉裕康, "スピン渦誘起ループ電流の電流方向の変換", 日本物理学会第 68 回年次大会, 広島大学, 2013 年 3 月
 6. 岡崎智, "外部からの電流のやりとりがあるスピン渦誘起ループ電流", 日本物理学会第 68 回年次大会, 広島大学, 2013 年 3 月
 7. 根本裕也, 渡辺陽平, 前島展也, 日野健一, "超短パルス照射半導体におけるコヒーレントフォノン生成のファノ-アンダーソン模型", 日本物理学会第 68 回年次大会, 広島大学, 2013 年 3 月

8. 竹中光, 前島展也, 日野健一, "2 軌道縮退ハバード模型における光励起状態のスピン・軌道相関", 日本物理学会第 68 回年次大会, 広島大学, 2013 年 3 月
9. 守家康介, 前島展也, 日野健一, "一次元パイエルスハバード模型における光照射後の時間発展", 日本物理学会第 68 回年次大会, 広島大学, 2013 年 3 月

(6) 著書、解説記事等

7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

1. 計算科学研究センターの先端計算科学推進室の活動に参画し、超並列 GPU 計算機 HA-PACS を用いた光科学の研究を推進した。(全)
2. 国際共同研究
 - (a) アメリカ コロラド大学 Kapteyn-Murnane 実験グループとの間で中赤外線レーザー場下における原子電離過程に関する国際共同研究を行った。(全)
 - (b) アメリカ アリゾナ大学 A.S. Sandhu 教授の実験グループとの間で強レーザー場下における原子状態制御に関する国際共同研究を行った。(全)
 - (c) オーストリア ウィーン工科大学 J. Burgdorfer 教授の理論グループとの間で中赤外線レーザー場下における原子電離メカニズムの解明に関する国際共同研究を行った。(全)

8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

1. XXIst International Symposium on the Jahn-Teller Effect (August 26-31, 2012, University of Tsukuba, University Hall, Tsukuba, Japan) 組織委員長 (小泉)、プロシーディング編集長 (小泉)

9. 管理・運営

1. XXIst International Symposium on the Jahn-Teller Effect, 組織委員会委員 (小泉)
2. International Symposium on the Jahn-Teller Effect Steering Committee 委員 (小泉)
3. 計算科学研究センター大規模一般利用調整委員 (前島)

10. 社会貢献・国際貢献

11. その他

海外長期滞在、フィールドワークなど