

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	Kirkham Christopher James
学生	大学院生 7 名、学類生 1 名
教授	日野 健一(学内共同研究員、物質工学域)

2. 概要

時間依存密度汎関数理論(TDDFT)に基づく物質中の電子ダイナミクスに対する第一原理シミュレーション法の開発と、それを用いたパルスレーザーと誘電体・半導体の相互作用の解明に関わる研究を進めている。本年度は、パルスレーザーにより固体中に生じる非線形分極の生成とそのアト秒科学の方法を用いた計測に対するシミュレーション、フェムト秒レーザーによる非熱加工初期過程に関わる研究を中心に行った。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とこの方法に基づく計算コード **RSPACE** の開発を行っている。開発した **RSPACE** を用いて SiC-MOSFET 開発に用いる界面の電子状態計算を行った。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、レーザー照射下における半導体(超格子)中の電子状態、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強相関電子系における光励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 $10^{14}\text{W}/\text{cm}^2$ 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。これに近い光強度では、光と物質の相互作用は著しい非線形性が生じる。この非線形性を活用した新奇な光デバイス原理の開拓が課題となっている。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第一原理計算の手法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。

この単位セル計算により、任意の光電場に対して結晶中に生じる電流密度（と時間積分した分極密度）を得ることができ、それは電場と分極を結び付ける数値的な構成関係式とみなすことができる。この観点から我々は、マクスウェル方程式と TDDFT に基づく電子ダイナミクス計算をマルチスケール手法で結びつけた新奇なシミュレーション法の開発に成功している。これは、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) ガラス中に生じる非線形分極の実時間計測とパルス光と物質の間のエネルギー移行 (A. Sommer 他 (マックス・プランク量子光学研)、佐藤 (筑波大院生)、矢花)

独マックスプランク量子光学研究所のアト秒実験グループとの共同研究である。高強度パルス光が $10\mu\text{m}$ のガラス薄膜を透過する際の光波波形的変化を、アト秒ストリーキング技術

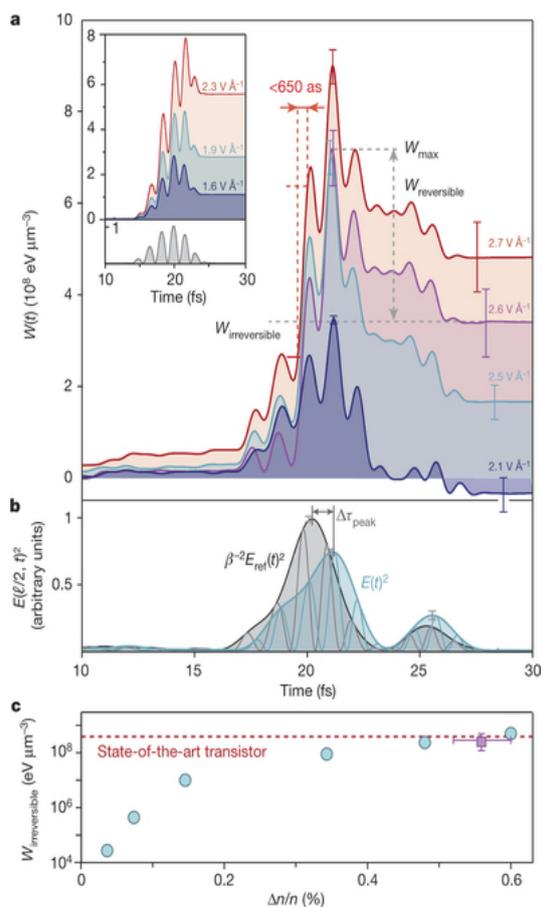


図 1 レーザーパルス光から物質電子へのエネルギー移行と対応する計算値 (インセット) 文献[1]より。

を用いて正確に測定した実験に対して、我々の第一原理マルチスケール計算による解析を行った。京コンピュータを用い、パルス光伝播を実験に正確に対応する条件で計算し、その結果を実験結果と比較した。ガラス薄膜を透過したパルス光の時間波形から、非線形分極の時間領域での振る舞いを求め、電場と非線形分極の間に時間の遅れがあることが示された。この時間の遅れは、パルス光と物質電子の間にエネルギー移行があることを示しており、エネルギー移行の時間変化を詳細に調べることが可能となった。得られた結果は、我々の理論計算と少なくとも定性的には良い一致を示すことが確認された。

この成果を大学 HP 及び独マックスプランク量子光学研究所において紹介した。

(2) メタ一般化勾配近似(GGA)汎関数及びハイブリッド汎関数を用いた電子ダイナミクス計算 (佐藤、谷口、矢花)

密度汎関数理論で用いられる最も簡単な近似である局所密度近似は、半導体や誘電体のバンドギャップを系統的に過小評価するという問題がある。光応答を記述し実験と比較する際に、このバンドギャップの過小評価は大きな問題となる。近年、バンドギャップを再現可能な汎関数がいくつか知られるようになった。一つは、運動エネルギー密度を用いたメタ GGA 汎関数であり、もう一つは非局所な交換ポテンシャルを部分的に用いるハイブリッド汎関数である。我々は、これらの汎関数を用いた電子ダイナミクス計算を試みた。

メタ GGA 汎関数を用いた場合には、軌道関数の時間発展を安定して遂行するために、予測修正法を用いることが必要であることが明らかとなった。また、バンドギャップを再現できるメタ GGA 汎関数では、ポテンシャルの表式が直接与えられエネルギー密度が未知であることから、系の励起エネルギーをどのように評価するかが課題となる。この点に関し、外場が行った仕事に着目することで計算が可能となることを示した。

ハイブリッド汎関数を用いた計算では、非局所な交換ポテンシャルの軌道関数に対する作用の計算に極めて大きな計算リソースを必要とする。我々は、GPU を搭載したスパコン HA-PACS を利用し交換ポテンシャルの計算に必要となる高速フーリエ変換を GPU で加速することにより、高速な計算が可能となることを示した。

(3) 動的 Franz-Keldysh 効果 (乙部 (原研)、篠原 (東大)、佐藤、矢花)

高強度なパルス光が照射している間、物質の光学的性質が極めて短い時間にどのように変化するのは、基礎物理学の観点に加え、パルス光を利用した新奇なデバイス原理の開拓に向けて高い興味を集めている。静的な強い電場を印加した時には、誘電体のバンドギャップよりも低いエネルギーで吸収が起こることが知られており、Franz-Keldysh 効果と呼ばれる。時間とともに変化する強い光電場を印加した場合に起こる光学的性質の変化は、動的 Franz-Keldysh 効果と呼ばれ、長く議論されてきた課題である。我々は、光電場の 1 周期以

下の時間スケールで、この動的 Franz-Keldysh 効果がどのように現れるかに関し、計算機シミュレーションと解析的アプローチの両方から検討を行った。

(4) 計算コード ARTED の Xeon-Phi における高速化 (廣川、朴、佐藤、矢花)

電子ダイナミクス計算で最も計算の負荷が高いのは、ハミルトニアンを軌道関数に作用する部分、特にラプラシアン作用である。実空間差分法では、これはステンシル計算となる。高性能計算システム研究部門との共同研究により、このステンシル計算部分の高速化を行った。特に超並列メニーコアマシンである COMA を用い、ARTED による電子ダイナミクス計算を高速化できることを確認した。

【2】第一原理計算コード RSPACE の開発

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 の伝導特性計算において、散乱領域の摂動グリーン関数の計算と電極の自己エネルギーの計算は、計算のボトルネックのひとつである。前者については、平成 26 年度までに数理研究グループと協力して解決法を開発した。平成 27 年度は、後者の問題に取り組んだ。後者の問題の本質は、一般化ブロッホ状態を計算する二次固有値問題用ソルバーである QZ 法は全固有値固有

ベクトルを計算するため、計算量が行列サイズの 3 乗に比例しプロセス並列化にも向かないことである。この問題を回避すべく、本研究グループで以前開発していた波動関数接合法を用いた伝導計算法のテクニックを応用し、自己エネルギーが満たすべき連分数方程式を利用して自己エネルギーを計算する方法を開発した。

この方法は、進行波と進行波の直交補空間を用いて連分数方程式を解くので、全固有値固有ベクトルの計算を必要としない。そのため、QZ 法の使用による計算速度の制約がない。開発した計算方法の精度評価のため、この方法で計算した電極自己エネルギーを用いてナノ構造の電気伝導特性を計算した結果と、従来法の厳密な方法で計算した電極自己エネルギーを用いた結果、および従来の回避法で計算した電極自己エネルギーを用いた結果の差を図 2 に示す。従来の回避法では、厳密解との差が顕著であるが、本計算手法で用いた自己エネルギーを用いると、厳密解との差は数値計算の有効数字の範囲内である。この方法は、QZ 法を用

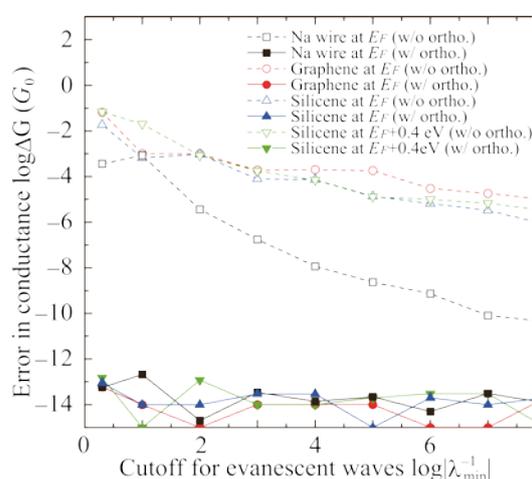


図 2 厳密解との比較。従来の回避法で計算した結果(点線)と本研究で開発した結果(実線)。文献 [13]より。

いる必要がないだけでなく、並列計算に有利な櫻井-杉浦法を活用できるため、さらなる高速化が期待できる。

【3】SiC-MOSFET 開発における界面電子状態シミュレーション

代表的な SiC-MOS 界面に用いられる SiC(0001)面は、4 回周期で SiC 原子層が積層し、h(hexagonal)面と k(cubic)面が交互に現れる。h 面の表面 3 原子層分は cubic 積層構造を持ち、k 面は hexagonal 積層構造が現れる。表面エネルギーは、h 面よりも k 面の方が低いため、表面では h 面が優位に現れることが実験的に確認されている。これに対し界面では、h 面と k 面がほぼ同じ割合で出現することが実験的に確認されている。本研究グループでは、開発した第一原理計算コード RSPACE を用いて、このような h 面、k 面と呼ばれる積層面に起因する 4H-SiC(0001)/SiO₂ 界面の電子状態の違いを調べた。SiC は、伝導帯端に floating states という特徴的な準位をもつ。この準位の波動関数は cubic 積層の領域に分布し、原子周りではなく Si に囲まれた四面体構造の内部に局在する。

電子状態計算の結果、図 3 に示すように h 面では界面第一層から floating states が現れるのに対し、k 面では界面第二層から floating states が現れることが分かった。これは、k 面では界面第二層より cubic 積層構造が始まることから説明できる。次に、熱酸化により導入される O 原子を、界面の SiC 結合の間に挿入した。図 4 に示すように、h 面では界面伝導帯端の floating states のエネルギーが増加し、界面での禁制帯幅が広がるのに対し、k 面では界面の禁制帯幅に変化がないことが分かった。結晶中の floating states は、C よりも Si の方が電気陰性度が低いので、静電ポテンシャルが低い Si に囲まれた四面体構造内部に局在する。h 面では、電気陰性度の大きい O 原子が挿入されることにより、四面体構造内部の静電ポテンシャルが上昇することで禁制帯幅が広がる。一方、k 面は界面部に floating states が現れないため、禁制帯幅の変化が小さいと説明できる。

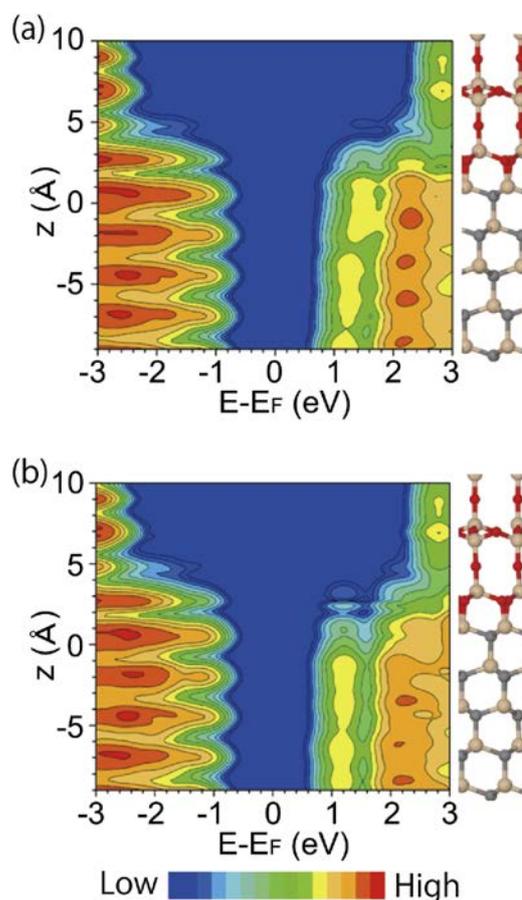


図 3 酸素導入前の局所状態密度。(a) h 面。(b) k 面。文献[12]より。

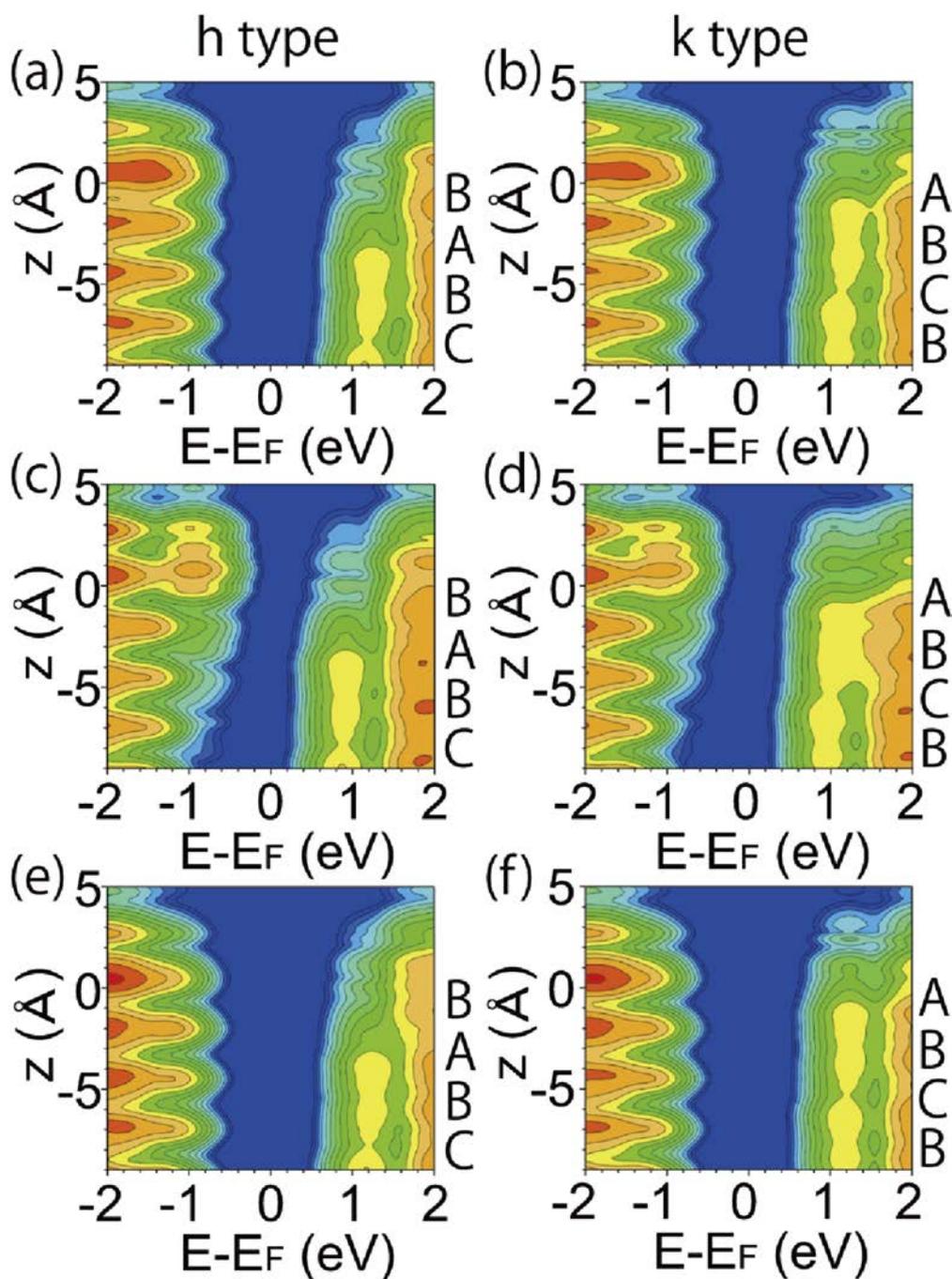


図 4 酸素導入後の局所状態密度。(a), (b) O 原子 1 個。(c), (d) O 原子 2 個。(e), (f) O 原子 3 個挿入後に CO 分子を放出。文献[12]より。

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。移動度を向上させるには floating states の影響を軽減させるか、(0001)面以外の結晶面で MOS 界面を作成する必要がある。現時点で、前者の方法は実現困難であるため、(0001)面と違う結晶面を用いた界面の評価を、筑波大パワエレ研・産総研の実験グループと協力して進めている。

【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

1987 年の発見以来、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が精力的に進められてきたが、未だに多くの研究者が納得する理論ができていない。標準的な超伝導理論として BCS 理論が存在するが、銅酸化物超伝導は BCS 理論では説明できず、現在の標準理論の限界が明らかになっている。さらに、銅酸化物超伝導体の発見以来、類似物質でも従来の物質科学の常識を覆す現象が見つかっており、銅酸化物超伝導の理論的解明は、超伝導だけではなく物質科学全体に大変革をもたらすと考えられている。

我々は、銅酸化物高温超伝導体の超伝導出現機構を説明するために、BCS 理論を超える新しい理論を提出している。BCS 理論は、超伝導状態の高温側の常伝導相がフェルミ液体論で説明できる電子状態であることが前提となっているが、新理論ではこの前提が必要ない。銅酸化物や類似物質などでは電子状態がフェルミ液体論で記述できないので、このことは非常に重要である。これらの物質の電気伝導では一粒子状態では記述できない集団運動が支配的である。新理論は、この集団運動としての“スピン渦誘起ループ電流”を電流の基本単位として持つ。

スピン渦誘起ループ電流は、伝導電子がスピンを回転しながら遍歴運動をすることにより生じる。この時、電子の平均場はスピン渦を持ちスピン回転の中心点は全電子波動関数の特異点となる。電子波動関数はこの特異点の周りで一価関数となる必要があり、この要請により全体運動として永久ループ電流、“スピン渦誘起ループ電流”が出現する。超伝導電流はスピン渦誘起ループ電流のネットワークが作る巨視的永久電流として説明される。

我々は新理論に基づき、スピン渦誘起ループ電流のネットワークが安定する温度を超伝導転移温度と同一視し、それを数値計算により求めた。各スピン渦の周りのスピン渦誘起ループ電流には、右回り(巻き数-1)と左回り(巻き数+1)の自由度が存在するが、計算では、簡単のため、スピン渦のネットワークはすでに安定に存在しているとし、ループ電流の右回りと左回りの自由度だけの熱揺らぎを考慮したモンテカルロ計算を行った (Okazaki et al., J. Supercond. Nov. Magn. **28**, 3221-3232 (2015))。その結果、最適ドーパ(銅原子 1 個あたりのホールドーパ量が $x=0.16$)の試料で実験結果と同程度の超伝導転移温度が得られた。このことは、新理論の確かさを示していると考えられる。しかし、図 5 に見られるように低ドーパ

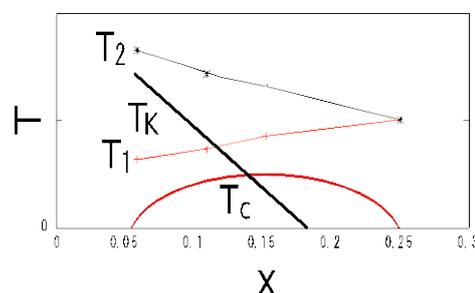


図 5 ホールドーパ量 x と各種転移温度。
 T_c は実験で得られている超伝導転移温度。
 T_K はカー効果の測定から得られた擬ギャップ相への転移温度。 T_1 と T_2 はモンテカルロ計算で得られた転移温度。 T_1 が T_c に、 T_2 が T_K 対応すると考えられる。

試料($x < 0.16$)と高ドーピング試料($x > 0.16$)では、実験とは一致しなかった。これは、スピン渦のネットワークの存在を仮定した単純化が原因であると考えられる。スピン渦のネットワークの形成過程と安定化を取り入れたより現実的なモンテカルロ計算を行うことにより、実験結果は再現可能と思われる。今回の計算ではまた、超伝導転移温度の高温側にループ電流の巻き数の総和がゼロとなる相が存在することが示された。この相は、銅酸化物超伝導体の擬ギャップ相に対応するものと考えられる。

【5】トポロジカル超伝導体の研究

トポロジカル絶縁体は、その興味深い物性により、新規なデバイス、量子コンピュータへの応用などが考えられている。我々は、トポロジカル絶縁体 Bi_2Se_3 に銅をドーピングすることにより得られる超伝導体、 $\text{Cu}_x\text{Bi}_2\text{Se}_3$ について、その渦糸状態をギンツブルグ-ランダウ方程式を解くことにより調べた (M. Tachiki and H. Koizumi, Phys. Rev. B **91**, 104505(1-5) (2015))。その結果この物質は磁性超伝導体であり、渦糸間にある適当な距離では引力が働くことを示した。これにより、磁場印加による渦糸状態への変化にはヒステリシスが生じることを予言した。また、超伝導状態はドーピングした Cu_x の島状領域の周りに発生する“スピン渦誘起ループ電流”により説明出来る可能性があることに言及した。

【6】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

我々が銅酸化物超伝導体に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る。この自由度を量子ビットとして使い量子コンピュータを作ることが可能であることが理論的に予想される (H. Wakaura, H. Koizumi, Physica C: Superconductivity and its applications **521-522**, 55-66 (2016))。この量子ビットはトポロジカルに保護された量子ビットであり、デコヒーレンスに対する耐性を持つと考えられる。我々は、この“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”について特許を取得した (米国特許 US 9,224,099 B2; 日本特許第 5910968 号)。この量子コンピュータ実現の為に制御ビットを実現しなければならないが、その際必要となる量子ビット間のカップラーについては、外部電流を使うことにより実現可能であることを理論的に示した。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、量子コンピュータの結果の読みとりに使える可能性がある。

【7】赤外線レーザー場におけるヘリウム原子光吸収過程の解明

赤外線強レーザー場によって、原子光吸収能力を制御することができる。従来の理論で赤外線とアト秒パルス到着の時間遅延によって、電離確率が図 1 (a) のように赤外線の半周期で変化することになる。最近、実験で電離確率が赤外線 1 周期に 1 回 (図 1 (c)) 変化しかないと

ことも観測された。我々の理論研究で二つのメカニズムを明らかにした。一つは非共鳴過程で電離確率は半周期変化させる。もう一つは共鳴過程で電離確率は1周期に1回変化させる。図6に我々の理論結果と実験がよく一致することを示した。研究結果を物理の有名な雑誌 Physical Review Letters に発表した。

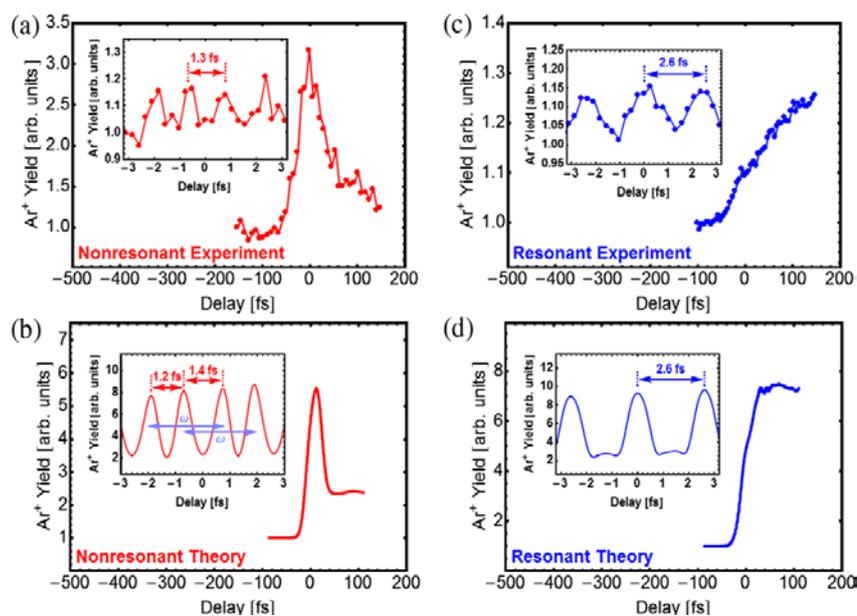


図6 赤外線強レーザー場における Ar 原子電離確率と時間差：非共鳴（左）、共鳴（右）。

【8】中赤外線レーザー場における原子電離過程

アト秒パルスレーザーの特長はパルスの半値幅が短く（数十アト秒）、不確定性原理によって、エネルギーの分解率がよくない。詳しい原子エネルギー構造を見るために、長いパルスを利用しないと行けない。我々は赤外線レーザー場を付加すると、赤外線レーザーとアト秒レーザーの時間差によって、電離信号の強さを制御できることを明らかにした。特に図7のように長い時間遅延で原子エネルギー構造の詳細を得ることを実験屋さんへ提案して、実験で実現された。共同研究結果は J. Phys. B に発表した。

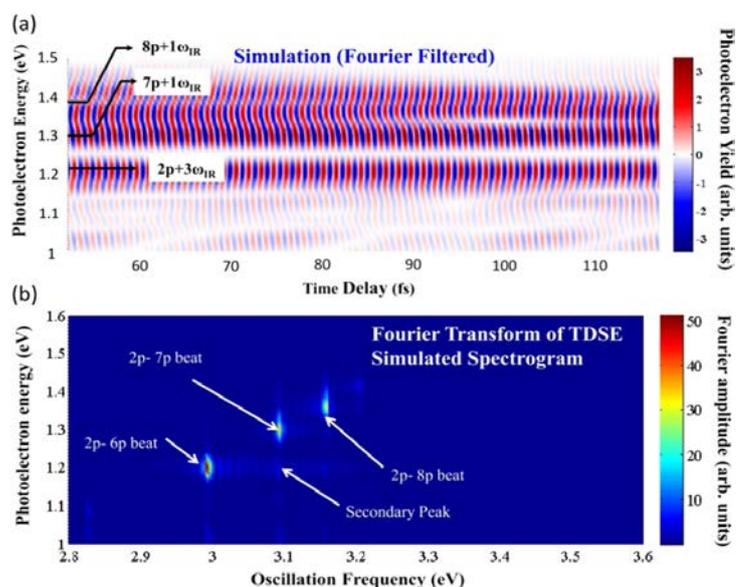


図 7 赤外線強レーザー場におけるヘリウム電子のアト秒レーザーの電離確率と時間差の関係（上）とその電離確率の Fourier 変換（下）。

【9】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

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。N 型 Si などの非極性半導体にレーザーを照射した場合過渡的なファノ共鳴現象が発現するが極性半導体では発現しないこと、両者の差異が電子-格子相互作用の違いから生じていることなどを明らかにした。また、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 では、電荷移動ギャップよりも低エネルギー領域において、観測可能な程度に大きな双極子モーメントを持つ光学活性な励起状態が存在し(図 8)、それがいわゆるドメイン壁と呼ばれる 2 つの電子相の境界と関連していることを示した。

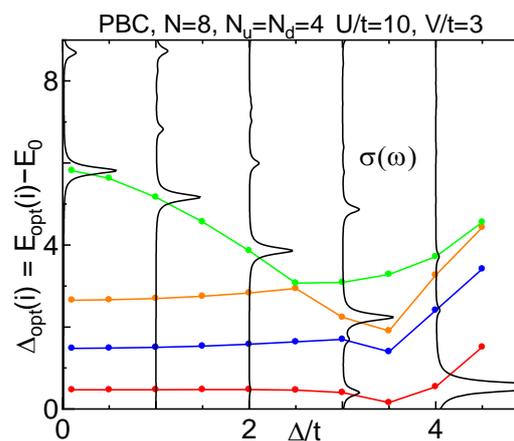


図 8 光学伝導度 $\sigma(\omega)$ と光励起状態の HOMO-LUMO ギャップ (Δ/t) 依存性

4. 教育

博士論文

- 佐藤駿丞 Time-dependent density functional theory for extremely nonlinear interactions of light with dielectrics (光と誘電体の極限的非線形相互作用に対する時間依存密度汎関数理論)
- 根本裕也 Theoretical Study of Resonance Structure in Dynamic Wannier-Stark Ladder Driven by Intense Terahertz Laser

修士論文

- 桑原有輝 時間依存密度汎関数理論による非線形分極の時空間分析
- 日高篤俊 コヒーレントフォノン生成初期過程における過渡的ファノ共鳴のレーザーパルス依存性

卒業論文

- 富永夏輝 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

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、2015 年度 4900 千円、「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. 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、2015 年度 288 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」
3. 株式会社 IHI との共同研究、2015 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」
4. 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」
5. 東京大学、委託研究、小野倫也、代表、2014 年度 6310 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」
6. 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」
7. 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」

8. 日本学術振興会、基盤研究(C)： 全 暁民 (トン ショウミン)、代表、2012 年より継続, 780 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」
9. 日本学術振興会科学研究費、若手研究(B)、前島 展也、代表、2015 年度 1170 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」
10. 日本学術振興会科学研究費、基盤研究(C)、日野 健一、代表、2015 年度 2860 千円、「コヒーレントフォノン生成機構における過渡的準粒子描像の定量的検証」

6. 研究業績

(1) 研究論文

A) 査読付き論文

1. 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*, doi:10.1038/nature17650.
2. T. Otobe, Y. Shinohara, S.A. Sato, K. Yabana, "Femtosecond time-resolved dynamical Franz-Keldysh effect", *Phys. Rev. B*93, 045124 (2016).
3. G. Wachter, S.A. Sato, C. Lemell, X.M. Tong, K. Yabana, J. Burgdoerfer, "Controlling ultrafast currents by the non-linear photogalvanic effect", *New J. Phys.* 17, 123026 (2015).
4. G. Wachter, S. Nagele, S.A. Sato, R. Pazourek, M. Wais, C. Lemell, X.-M. Tong, K. Yabana, J. Burgdoerfer, "Protocol for observing molecular dipole excitations by attosecond self-streaking", *Phys. Rev. A*92, 061403 (2015).
5. S.A. Sato, Y. Taniguchi, Y. Shinohara, K. Yabana, "Nonlinear electronic excitations in crystalline solids using meta-generalized gradient approximation and hybrid functional in time-dependent density functional theory", *J. Chem. Phys.* 143, 224116 (2015).
6. S.A. Sato, K. Yabana, Y. Shinohara, T. Otobe, K.M. Lee, G.F. Bertsch, "Time-dependent density functional theory of high-intensity, short-pulse laser irradiation on insulators", *Phys. Rev. B*92, 205413 (2015).
7. X.-M. Tong, G. Wachter, S.A. Sato, C. Lemell, K. Yabana, J. Burgdoerfer, "Application of norm-conserving pseudopotentials to intense laser-matter interactions", *Phys. Rev. A*92, 043422 (2015).

8. Y.Komatsu, M.Umemura, M.Shoji, M.Kayanuma, K.Yabana, K.Shiraishi, "Light absorption efficiencies of photosynthetic pigments: the dependence on spectral types of central stars", *International Journal of Astrobiology*, 14 (3), 505-510 (2014).
9. Y. Komatsu, M. Kayanuma, M. Shoji, K. Yabana, K. Shiraishi, M. Umemura, "Light absorption and excitation energy transfer calculations in primitive photosynthetic bacteria", *Molecular Physics*, 113 (12), 1413-1421 (2015).
10. S. Iwase, T. Hoshi, T. Ono, "Numerical solver for first-principles transport calculation based on real-space finite-difference method", *Phys. Rev. E* 91, 063305 (2015).
11. Y. Egami, S. Iwase, S. Tsukamoto, T. Ono, K. Hirose, "First-principles calculation method for electron transport based on the grid Lippmann-Schwinger equation", *Phys. Rev. E* 92, 033301 (2015).
12. C. J. Kirkham, T. Ono, "First-principles study on interlayer states at the 4H-SiC/SiO₂ interface and the effect of oxygen-related defects", *J. Phys. Soc. Jpn.* 85, 024701 (2016).
13. T. Ono, S. Tsukamoto, "Real-space method for first-principles electron transport calculations: Self-energy terms of electrodes for large systems", *Phys. Rev. B* 93, 045421 (2016).
14. C. J. Kirkham, T. Ono, "Importance of SiC Stacking to Interlayer States at the SiC/SiO₂ Interface", *Mater. Sci. Forum* 858 457 (2016)
15. Okazaki, H. Wakaura, H. Koizumi, M. Abou Ghantous, M. Tachiki, "Superconducting transition temperature of the hole-doped cuprate as the stabilization temperature of supercurrent loops generated by spin-twisting itinerant motion of electrons", *J. Supercond. Nov. Magn.* 28, 3221-3232 (2015).
16. M. Tachiki and H. Koizumi, "Vortex state of topological superconductor CuxBi2Se3", *Phys. Rev. B* 91, 104505 (2015).
17. H. Wakaura, H. Koizumi, "Possible use of spin-vortex-induced loop currents as qubits: a numerical simulation for two-qubit system", *Physica C: superconductivity and its applications* 521-522, 55-66 (2016).
18. N Shivaram, XM Tong, H Timmers and A Sandhu, "Attosecond Quantum-Beat Spectroscopy in Helium", *J. Phys. B: At. Mol. Opt.* 49 (2016) 055601:1-7.
19. V Wanie, H Ibrahim, S Beaulieu, N Thire, B Schmidt, DY Peng, AS Alnaser, I Litvinyuk, XM Tong, F Legare, "Coherent control of D₂/H₂ dissociative

- ionization by a mid-infrared two-color laser field", *J. Phys. B: At. Mol. Opt.* 49, 025601 (2016).
20. H Li, XM Tong, N Schirmel, G Urbasch, KJ Betsch, S. Zherebtsov, F Sussmann, A Kessel, SA Trushin, GG Paulus, KM Weitzel, MF Kling, "Intensity dependence of the dissociative ionization of DCl in few-cycle laser fields", *J. Phys. B: At. Mol. Opt.* 49, 015601 (2016).
21. G Wachter, S Nagele, SA Sato, R Pazourek, M Wais, C Lemell, XM Tong, K Yabana, and J Burgdorfer, "Protocol for observing molecular dipole excitations by attosecond self-streaking", *Phys. Rev. A* 92, 061403(R) (2015).
22. G Wachter, SA. Sato, C Lemell, XM Tong, K Yabana, and J Burgdorfer, "Controlling ultrafast currents by the nonlinear photogalvanic effect", *New J Phys.* 17, 12036 (2015).
23. XM Tong, G Wachter, SA Sato, C Lemell, K Yabana, and J Burgdorfer, "Application of norm-conserving pseudopotentials to intense laser-matter interactions", *Phys. Rev. A* 92, 043422 (2015).
24. CW Hogle, XM Tong, L Martin, MM Murnane, HC Kapteyn, P Ranitovic, "Attosecond Coherent Control of Single and Double Photoionization in Argon", *Phys. Rev. Lett.* 115, 173004 (2015).
25. XM Tong, ZM Hu, YM Li, XY Han, D Kato, H Watanabe and N Nakamura, "Mechanism of dominance of the Breit interaction in dielectronic recombination", *J. Phys. B: At. Mol. Opt.* 48, 144022 (2015).
26. F. Imoto, H. Takenaka, N. Maeshima, and K. Hino, "Spin and Orbital Correlations of a Photoexcited State of a Two-Orbital Hubbard Model", *J. Phys. Soc. Jpn.* 84, 124705 (2015).

B) 査読無し論文

なし

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

1. K. Yabana, "Time-dependent density functional theory for strong laser pulses in dielectrics", *Exploration of ultra-fast time scales using time dependent density functional theory and quantum optical control theory*, Sept. 28-Oct. 2, 2015, CECAM-HQ-EPFL, Lausanne, Switzerland.

2. K. Yabana, "Time-dependent density functional theory for extreme nonlinear optics", Psi-K 2015, Sept. 6-10, 2015, San Sebastian, Spain.
3. Shunsuke A. Sato, "Multiscale implementation of real-time TDDFT for nonlinear light-matter interactions", 5th International Workshop on Massively Parallel Programming Now in Quantum Chemistry and Physics - Toward exascale computing, November 26-27, 2015, University of Tokyo, Tokyo, Japan.
4. T. Ono, "First-Principles Calculations using Real-Space Finite-Difference Method", Advances in Modeling of Nano Materials, June 14-16, 2015, Hefei, China.
5. T. Ono, C. J. Kirkham, "Ab initio investigations for interface electronic structures of SiC-MOS", International Workshop on Dielectric Thin Films for Future Electron Devices – Science and Technology –, November 2-4, 2015, Tokyo, Japan.
6. T. Ono, "Density functional theory calculation for transport property of carbon nanostructures", EMN Meeting on Carbon Nanostructures, March 27-31, Honolulu, USA.

B) 一般講演

1. Shunsuke A. Sato , Kazuhiro Yabana, Yasushi Shinohara, Kyung-Min Lee, Tomohito Otobe, George F. Bertsch, "First-principles calculations for ultrafast laser-induced damage in dielectrics ", CLEO 2015, May 10-15, 2015, San Jose, California.
2. S. Iwase, T. Ono, "Efficient solver of the Green's function method for electronic transport calculations", Psi-k Conference 2015, September 6-10, 2015, San Sabastian, Spain.
3. T. Ono, "Transport calculation method using real-space finite-difference Green's function scheme, Psi-k Conference 2015, September 6-10, 2015, San Sabastian, Spain.
4. T. Ono, C. J. Kirkham, "First-principles electronic-structure calculation for defect at SiC(0001)/SiO₂ interface", 16th International Conference on Silicon Carbide and Related Materials, October 4-9, 2015, Sicily, Italy.
5. T. Ono, C. J. Kirkham, S. Iwase, "Electronic structure and scattering property of 4H-SiC(0001)/SiO₂ interface", APS March Meeting 2016, March 14-18, 2016, Baltimore, USA.
6. H. Wakaura, H. Koizumi, "Quantum Computation using Spin-Vortex induced loop current as qubit", the 11th International Conference on Materials &

Mechanisms of Superconductivity (M2S), August 23-28, 2015, Geneva, Switzerland.

7. Y Cheng, M Chini, XM Tong, A Chew, J Biedermann, Y Wu, E Cunningham and ZH Chang, "Quantum beats in attosecond time-resolved autoionization of Krypton", 46th Annual Meeting of the APS Division of Atomic, Molecular and Optical Physics, June 8-12, 2015, Hyatt Regency, Columbus, OH, USA
8. P Ranitovic, XM Tong, D Hickstein, MM Murnane and HC Kapteyn, "Control of Attosecond Electron Diffraction by Elliptical Long-Wavelength Radiation", 46th Annual Meeting of the APS Division of Atomic, Molecular and Optical Physics, June 8-12, 2015, Hyatt Regency, Columbus, OH, USA
9. XM Tong and N Toshima, "Steering the electron motion by two counter-rotating circularly polarized laser pulses", XXIX International Conference on Photonic, Electron, and Atomic Collisions, July 22-30, 2015, Congress Centre – EI Greco, Toledo, Spain.
10. B Wolter, C Lemell, M Baudisch, MG Pullen, XM Tong, M Hemmer, A Senftleben, M Sclafani, CD Schroter, J Ullrich, R Moshhammer, J Burgdrofer, and J Beigert, "Origins of Very-Low and Zero-Energy Electron Structures in Strong-Field Ionization with Intense Mid-IR Pulses", XXIX International Conference on Photonic, Electron, and Atomic Collisions, July 22-30, 2015, Congress Centre – EI Greco, Toledo, Spain.
11. R Bello, LS Martin, CW Hogle, A Palacios, JL Sanz-Vicario, XM Tong, F Martin, MM Murnane, HC Kapteyn, and P Ranitovic, "Mapping ultrafast dynamics of highly excited D_2^+ by ultrashort XUV pump – IR probe radiation", XXIX International Conference on Photonic, Electron, and Atomic Collisions, July 22-30, 2015, Congress Centre – EI Greco, Toledo, Spain.
12. Y. Watanabe, K. Hino, M. Hase, N. Maeshima, "Quantum Generation Dynamics of Coherent Phonon in Semiconductors: Transient and Nonlinear Fano Resonance", APS March Meeting 2016, March 14-18, 2016, Baltimore, Maryland, USA.

(3) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

- ◎ 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への取り組み"、レーザー学会学術講演会第 36 回年次大会、名城大学、2016 年 1 月 9-11 日

- ◎ 小野倫也, "SiC 酸化過程と MOS 界面電子状態の第一原理シミュレーション", 応用物理学会先進パワー半導体分科会 第 1 回個別討論会 「SiC 酸化メカニズムと界面欠陥」, 2015 年 8 月 4 日, 東京.
- ◎ 小野倫也, "第一原理計算による SiC/SiO₂ 界面の電子状態とキャリア輸送特性解析", 2015 年度大阪大学産業科学研究所共同研究会, 2016 年 1 月 8 日~9 日, 岐阜.

B) その他の発表

1. 小野倫也, "実空間差分法を用いた第一原理輸送特性計算: 自己エネルギー項計算の高速化", 日本物理学会第 71 回年次大会, 2016 年 3 月 19-22 日, 東北学院大学.
2. 小泉裕康, "スピン回転遍歴運動する電子と超伝導: 銅酸化物超伝導と BCS 型超伝導の相違", 日本物理学会 2015 年秋季大会, 2015 年 9 月 16 日-19 日, 関西大学.
3. 若浦光, 岡崎智, 小泉裕康, "スピン渦誘起ループ電流を利用したカップラービット", 日本物理学会 2015 年秋季大会, 2015 年 9 月 16 日-19 日, 関西大学.
4. 小泉裕康, "BCS 超伝導体の秩序パラメーターの位相の起源: 電荷に関する超選択則に矛盾しない新しい起源", 日本物理学会第 71 回年次大会, 2016 年 3 月 19-22 日, 東北学院大学.
5. 森崎翼, 小泉裕康, "銅酸化物超伝導体における電荷秩序と $4a \times 4a$ と $4a \times 6a$ のスピン渦ユニットの安定性", 日本物理学会第 71 回年次大会, 2016 年 3 月 19-22 日, 東北学院大学.
6. 若浦光, 小泉裕康, 森崎翼, "スピン渦誘起ループ電流量子ビットのディコヒーレンス", 日本物理学会第 71 回年次大会, 2016 年 3 月 19-22 日, 東北学院大学.
7. 日野健一, 渡辺陽平, 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 I: 過渡的準粒子描像に基づく理論構築", 日本物理学会 2015 年秋季大会, 2015 年 9 月 16 日-19 日, 関西大学.
8. 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 II: 過渡的な非線形 Fano 共鳴効果の解析", 日本物理学会 2015 年秋季大会, 2015 年 9 月 16 日-19 日, 関西大学.
9. 渡辺陽平, 日高篤俊, 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 III: 過渡的非線形 Fano 共鳴のパルスレーザー依存性", 日本物理学会第 71 回年次大会, 2016 年 3 月 19-22 日, 東北学院大学.
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", 日本物理学会第 71 回年次大会, 2016 年 3 月 19-22 日, 東北学院大学.

(4) 著書、解説記事等

1. XMTong and N Toshima "Controlling Atomic Photoabsorption by Intense Lasers in the Attosecond Time Domain" Chapter 7 in Ultrafast Dynamics Driven by Intense Light Pulses Springer Series on Atomic, Optical, and Plasma Physics 86 (2016) pp 161-176. Editors Markus Kitzler and Stefanie Gräfe.
2. T. Ono, "First-principles Study on Transport Property of Nanostructures Using Real-space Finite-difference Method, Simulation", 34, 18 (2015).
3. T. Ono, S. Saito, S. Iwase, "First-principles study on oxidation of Ge and its interface electronic structures", Jpn. J. Appl. Phys., accepted.
4. 小野倫也, 塚本茂, 江上喜幸, "実空間差分法を用いた第一原理電気伝導特性計算の高速化", アンサンブル 18, 82 (2016).

7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

異分野間連携

1. 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。

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）

矢花は米国との間で、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（代表：矢花）の他、分子科学研究所、日本原子力研究開発機構が参加している。

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 博士、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・ユ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 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。
2. 2016 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、数理物質系広報委員長などを務めた。
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

1. 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