

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、山田 篤志、山田 俊介、Arqum Hashmi
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) 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っているが、特に光と物質の相互作用に関係した研究に特色を有している。時間依存密度汎関数理論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、多様な物質を対象とした光物質科学分野の計算科学研究を行っている。また、界面の伝導特性に対して、第一原理計算に基づく解析を進めており、SiC/SiO₂ 界面の原子構造の特定などを行った。強相関電子系では、銅酸化物高温超伝導の超伝導機構の解明に対して、スピン渦誘起ループ電流理論を軸に行っている。この研究の副産物として、ファラデーの電磁誘導の法則が 2 つの物理法則からなることの解明に成功した。

これらの計算科学研究に加えて、独自の計算コード開発も行なっている。時間依存密度汎関数理論に基づき光と物質の相互作用を記述する汎用の第一原理光科学ソフトウェアとして、SALMON を開発し、ウェブサイト <http://salmon-tddft.jp> において公開している。また実空間差分法に基づく第一原理電子状態・伝導特性計算コード RSPACE を開発している。

3. 研究成果

- 【1】 第一原理光科学ソフトウェア SALMON の開発**（矢花、植本、山田（篤）、山田（俊）、朴[高性能計算システム研究部門]、廣川[システム情報工学研究科]、信定、野田、竹内[分子科学研究所]）

我々のグループで独自に開発してきた、時間依存密度汎関数理論に基づく固体中の電子ダイナミクス計算を対象とする第一原理計算コード ARTED と、分子科学研究所に於いて開発されてきた、ナノ物質や分子中の電子ダイナミクス計算を対象とする時間依存密度汎関数理論に基づく第一原理計算コード GCEED を統合し、SALMON (Scalable Ab-initio Light-Matter simulator for Optics and Nanoscience) と命名した (図 1)。統合に際し、一般のユ



図 1: ソフトウェア SALMON のロゴ

ーザを含めたコード利用を容易とするため、Fortran の namelist 機能を用いた入力仕様とし、実行ファイルの生成では CMake を用いたコンパイルを行うなどの作業を行なった。SALMON のウェブサイト <http://salmon-tddft.jp> を開設し、コードのダウンロード、インストール及び実行方法の説明、計算例の紹介などを整備した。また、スパコンを用いたハンズオンを含む SALMON のチュートリアルを行い、コードの利用者を拡大する取り組みを行った。コード論文を執筆し、投稿した。

SALMON の開発においては、計算科学研究センターの朴グループと密接に協力し、主として大学院生の廣川氏の貢献により KNL プロセッサや GPU においても効率的に計算が可能となるようチューニングを行なった。

- 【2】 マクスウェル方程式と時間依存密度汎関数を統合したシミュレーション法の拡張**（矢花、植本、朴[高性能計算システム研究部門]、廣川[システム情報工学研究科]、佐藤[マックスプランク物質構造動力学研究所]）

マクスウェル方程式と時間依存密度汎関数理論に基づく電子ダイナミクス計算を多階層連結したシミュレーションに関し、これまでは一次元マクスウェル方程式（薄膜透過）での計算が行われてきたが、昨年度の研究では 2~3 次元系の任意形状物質による散乱問題へ拡張を試みた。我々は、マクロ系側のマクスウェル方程式のため、2・3 次元直交座標系および軸対称円柱座標系をもちいた時間領域有限差分法 (FDTD) のソルバーを作成し、マイクロ側 TDDFT コードとマルチスケール結合が可能ないように計算コード「SALMON/ARTED」への実装作業を行った。

昨年度 4 月にスーパーコンピュータ「Oakforest-PACS」の全系（~8000 ノード）を用いたマルチスケール計算の大規模実行を試みた。

①シリコン・グラファイト薄膜への軸対称なアジマス偏光ベクトルビーム入射。

②シリコンナノ球体・ナノギャップ構造による直線偏光ビーム入射。

①では、光渦によるレーザ加工の初期過程のシミュレーションとなる。②では、ナノ構造由来の焦点集光や光電場増強をもちいた電子励起のシミュレーションとなっている。これらの模式図を図 2 に示す。

現在は、薄膜にパルス光が斜方入射する場合の理論及び計算法について検討を進めている。斜め方向ビームの入射角度依存性の評価は、表面プラズモン・メタサーフェイスなど、近年注目を集めるターゲットの解析に不可欠である。

最近では、独マックスプランク量子光学研究所のアト秒分光実験グループとも共同研究をすすめているが、アト秒ストリーキング実験による実測データが我々のマルチスケール計算によりよく説明できることがわかっている。今後、斜方入射計算の実現により、実験等によく用いられるブリュースター角入射の取扱が可能となるため、共同研究のさらなる進展が期待される。

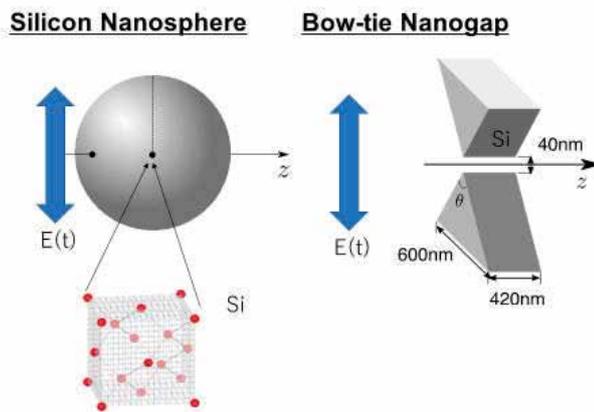


図 2：3 次元マルチスケール計算におけるモデル概要

【3】 薄膜・表面に特化した単一空間スケール上でのマクスウェル方程式と時間依存密度汎関数法の統合シミュレーション (山田(俊)、矢花)

2次元物質による高次高調波発生や、非熱的な金属レーザ加工の初期過程のシミュレーションは、理学・産業両面から興味ある研究テーマである。しかしながら、金属表面や極めて薄い薄膜、2次元物質等における光・電子相互作用を考える場合、相互作用領域が極端に狭いため、上記のように電子系と光電磁場の空間スケールを分離するマルチスケールの記述は適当でないと考えられる。そこで本研究では、単一の空間スケールを用いて電子系と電磁場を同時に時間発展させる新手法を開発した。本手法においては時間依存コーン・シャム方程式とマクスウェル方程式が同じ実空間グリッド上で表現され、スラブによる光パルスの反射・透過や電子励起と発光の過程を露わに記述することができる。現在計算コードの実装を完了し、シリコン薄膜や単純金属の薄膜等を対象として計算と解析を進めている。

【4】 光電場+TDDFT+MD のシミュレーション研究に向けて、SALMON への原子核の古典分子動力学計算の機能追加（矢花、山田（篤））

これまでの SALMON は光照射に対する電子の速い応答を第一原理的に記述するソフトウェアであり原子核の自由度については凍結した近似を用いてきた。しかしながら、コヒーレントフォノンや光誘起相転移などフェムト秒の時間スケールで核の運動や構造変化が引き起こされる超高速ダイナミクスも光物性や光化学の分野において盛んに研究されており、このような現象も SALMON で扱えるようになれば大いに有効である。そこで本年度は、電子基底状態の *ab initio* 分子動力学 (MD) シミュレーション、および原子核の変位が比較的小さい場合に有効なエーレンフェスト法 (平均場法) による電子-核の相互作用を記述した MD シミュレーションを実装した (公開版 SALMON にも Trial 版のオプションとして実装)。

さらに、前述のマルチスケール法に MD 機能を実装したシミュレーション法の開発にも着手した。マルチスケール法ではポンプ-プローブ実験など、実験系をそのままシミュレーションで模倣して分光シグナルを直接的に再現できるため、光・電子・核の相互作用ダイナミクスによる複雑なプロセスの結果として得られるシグナルを詳細に検討するのに有効である。当グループでは、誘導ラマン効果とカップルしたコヒーレントフォノンのダイナミクスの記述 (図 3) と実験で得られている反射率変化を詳細に検討するための取り組みを図っている。

一方、光誘起相転移をシミュレーションで記述するための取り組みも行った。光誘起相転移では電子励起状態で構造が大きく変化するためエーレンフェスト法ではなくホッピングモデルに基づく電子-核の相互作用モデルの導入が必要である。このモデルを導入することにより、分子性結晶の励起ダイナミクスなどの記述にも幅が広がる。このようなシミュレーションを可能にするための検討として、クロコン酸結晶 (励起状態プロトン移動による高速分極反転を起こす系) に対してまずはエーレンフェスト法を用いた様々なテスト計算を行うことで、今後の SALMON に必要な計算モデルを議論した。

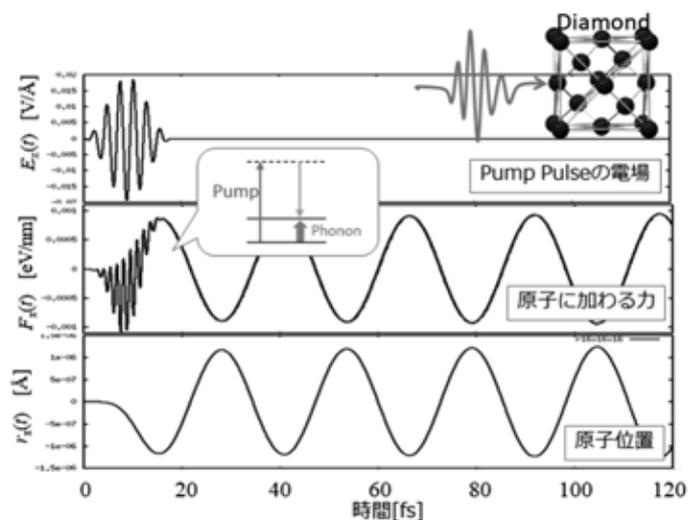


図 3 : 光電場+TDDFT+MD のシミュレーションにより得られたコヒーレントフォノン

【5】 固体高次高調波発生における光伝搬効果 (I. Floss (ウィーン工科大学)、矢花、他)

固体における高次高調波発生は、高強度パルス光を用いた新奇な光デバイス原理や、新たな X 線パルス線源を与えるものとして高い興味が持たれており、その発生メカニズムに関して活発な議論がなされている。固体中の高次高調波発生はバンド計算を取り入れた多様な電子ダイナミクス計算手法により記述が可能であるが、単純に計算すると原子の場合と異なり励起電子の波束が拡散しないために、実験で見られるようなクリアな高調波が得られないことが知られている。このため、非常に短い緩和時間を仮定した計算などが行われていた。本研究は、ウィーン工科大の大学院生である I. Floss 氏を中心になされ、固体中に発生した高次高調波が伝搬する効果を取り入れると、非常に短い緩和時間を仮定することなく、クリアな高調波が得られることを示したものであり、高次高調波の発生メカニズムに関して重要な指摘を行なったものである。

【6】 内殻電子ダイナミクスの記述に向けた試み (矢花、他)

現在活発に研究が進んであるアト秒科学では、アト秒パルス光により起こる内殻電子のダイナミクスを観測することで、サブフェムト秒の時間スケールで起こる物質中の電子ダイナミクスを調べている。これらの現象の解析では、アト秒パルス光により生じる内殻電子のダイナミクスを直接記述することが求められるが、空間的・エネルギー的に価電子と大きくスケールが異なるため、容易ではない。

内殻電子のダイナミクスを記述する方法として、我々は 2 通りの手法の検討を行っている。一つは、実空間の格子間隔を小さくすることで、現在の計算コードの範囲で記述を試みるものである。これは、マックスプランク物質構造動力学研究所の C.M. Wang 氏が中心となり共同研究を進めている。もう一つは、より小さい空間スケールの現象に適した原子基底関数を用いた記述であり、こちらは SIESTA コードをベースとして、C.D. Pemmaraju 氏を中心に共同研究を進めている。

【7】 空間差分法に基づく第一原理電気伝導・伝導特性計算コード RSPACE の開発 (小野)

波動関数接合法を用いた電気伝導計算法では、現実的な時間内で電極の一般化ブロッホ波を計算することは困難である。そのため、進行波と緩やかに減衰もしくは増大するエバネッセント波のみを計算する方法が用いられるが、透過率の計算精度が低下することが報告されている。本年度は、連分数を用いた伝導計算に用いる自己エネルギーの計算方法の開発と連分数の物理的な意味づけ、ならびに進行波と緩やかに減衰もしくは増大するエバネッセント波のみ精度劣化を引き起こすことなく透過率を計算する方法の開発を行った。

【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/SiO₂ 界面はパワーデバイス用途で期待されているものの、キャリア移動度が低いことが実用化に向けた課題となっている。原因解明のために界面原子構造・電子状態とキャリア散乱機構の解明が必要であるが、SiC/SiO₂ 界面は Si/SiO₂ 界面よりも実験・計算データが少なく、原子構造の解明にも至っていない。本年度は、走査型透過電子顕微鏡 (STEM) 像を援用し、第一原理電子状態・伝導特性計算のモデルに用いる界面原子構造の探索を行った。まず、図 4(a)に示す実験で得られた STEM 像より、界面における原子層間隔を測定した。実験で得られたデータを用いて、界面における原子面の間隔を調べた。次に、候補となる SiO₂ の結晶多形の中から、SiC(0001)面に格子定数が概ね一致するものを選び出し、STEM 像との格子間隔の一致、界面の形成エネルギーを比較し、図 4(b)に示す原子構造を得た。STEM より、図 4(a)の D-D'部と E-E'部は原子構造が異なることが分かっている。これはそれぞれ図 4(b)の左側、右側に対応するものと考えられる。平成 30 年度は、この原子構造を用いて界面のキャリア移動特性評価を行う。

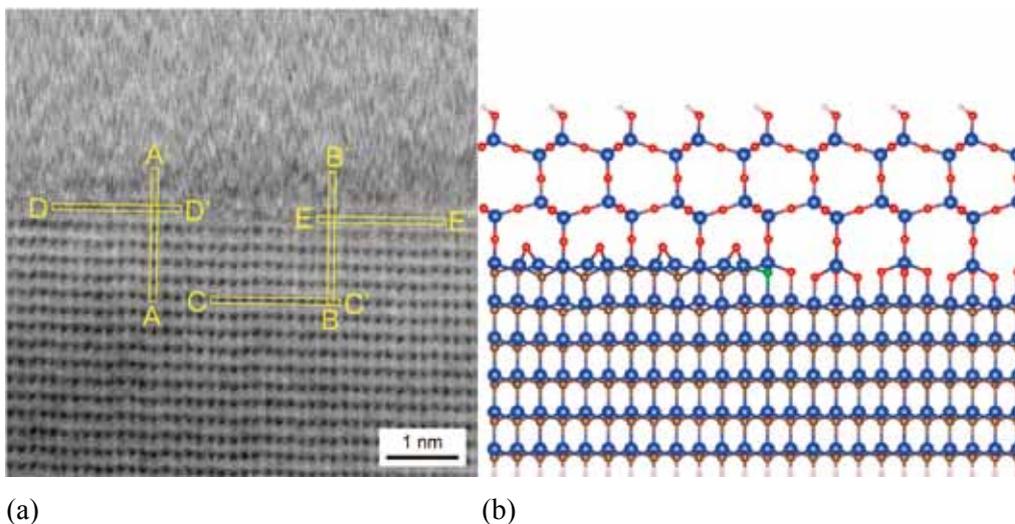


図 4 : SiC/SiO₂ 界面の STEM 像(a)と第一原理計算により得られた界面原子構造(b)。青球は Si 原子、茶球は C 原子、赤球は O 原子、緑球は N 原子、白球は H 原子である。

【9】 銅酸化物超伝導体におけるラシュバ相互作用と密度波状態（小泉、若浦）

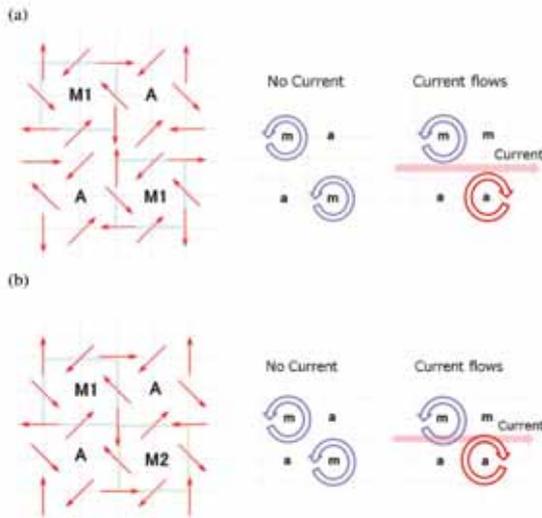


図 5: 銅酸化物 CuO_2 面に存在する 4 つのスピ
ン渦とスピ
ン渦誘起ループ電流。M1 と M2
(A) は巻き数 1 (-1) のスピ
ン渦を表す。m
(a) は、巻き数 1 (-1) のループ電流を表す。
(a) 図 ((b) 図) では、スピ
ン渦は 3×4 (3×3)
の長方形の頂点にある。

銅酸化物高温超伝導体の低ドーパ側、超伝導相の高温側に存在する擬ギャップ相に存在する密度波状態の起源について、ラシュバ相互作用に基づく説明を行った。ラシュバ相互作用は、ドーパしたホールと電荷供給層にあるドーパントの間にできた電場の CuO_2 面に垂直な成分により、スピ
ン渦誘起ループを担う電子のスピ
ンとの相互作用により生じるとするモデルを用いた。

巨視的な電流が流れていない状況では、図 5 の (a) 図の状態が、電流が流れている状況では、(b) 図の状態がラシュバ相互作用により安定となる。したがって、巨視的な電流が流れることにより、スピ
ン渦配置が変化し、整列する。これはホールの配列による密度波状態を作る。この磁場誘起密度波状態が、実験で磁場印加により発生する密度波状態と考えられる。

【10】 スピン渦誘起ループ電流を量子ビットとした量子コンピューター：surface code を実現するアーキテクチャーに関する研究（小泉、若浦）

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。スピン渦誘起ループ電流の方向を 2 準位として量子ビットを作ることができる。これまでの我々の研究で示されてきた。この 2 準位間のエネルギー差は、外部磁場や外部電流により変えることができる。また、量子ビット間の結合は外部電流の供給によりオン・オフが可能である。さらに準位間の遷移はレーザーの照射により可能である。従って、量子ゲートを実現するための量子状態の制御が可能である。現在、エラー訂正を備えた量子コンピューターの実現に向けて、どのような量子ビットを使い、どのようなアーキテクチャーを用いるかが重要な問題となっているが、スピン渦誘起ループ電流を量子ビットとして利用した量子コンピューターはエラー訂正を備えた量子コンピューターの実現に適した系であることを理論的に議論した（図 6）。

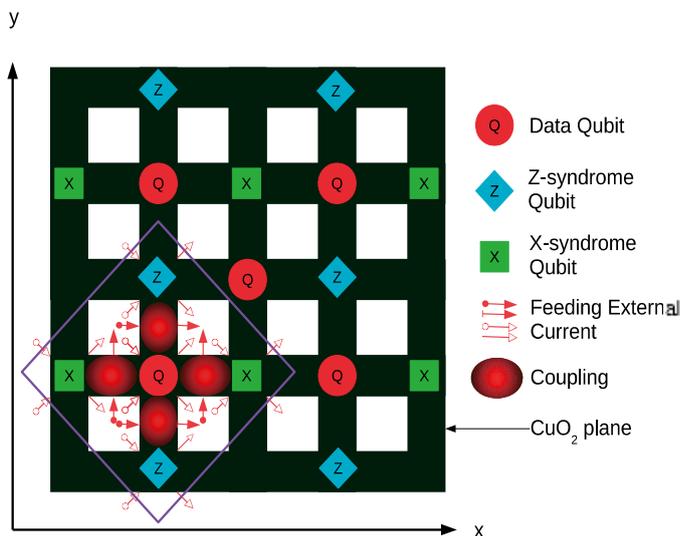


図 6：surface code を実現するスピン渦誘起ループ電流を量子ビットとする量子コンピューターのアーキテクチャー。各々の量子ビットは、4 つ組のスピン渦誘起ループ電流よりなる。Q はデータビットを表し、その周りをエラーのシンδροーム測定に利用する量子ビット X と Z が取り囲んである。量子ビット間の結合は、外部電流を供給することにより行う。図の左下に、外部電流供給により実現した、量子ビット間の結合を示してある。

【11】 ファラデーの電磁誘導の法則が 2 つの物理法則からなることの解明（小泉）

「ファラデーの電磁誘導の法則」による起電力生成は、マクスウェルの方程式を使って求める起電力生成と、ローレンツ力が原因として発生する起電力生成の、2 つからなる。つまり、2 つの異なる原理に対して同一の結果を与える。この誘導起電力を求める問題は高等学校の物理の教科書にも載っており、馴染み深い問題であるにもかかわらず、2 つの本質的に異なる方法で結果がなぜ一致するのか、これまで明らかにされていなかった（アインシュタインやファインマンなどの著名な物理学者も説明できなかった）。この問題を、電子の量子状態を表す波動関数の位相因子がもつ 2 重性、つまり、この位相因子が、1 つの見方では電子の導線に沿った方向のローレンツ力による並進運動を表し、もう 1 つの見方では電場を生む時間依存したゲージポテンシャルと見なせることを示すことにより説明した。つまり、古典電磁

気学で見られた 2 つの本質的に異なる方法での奇妙な一致は、電子の量子状態を表す波動関数の位相因子の 2 重性（並進運動とゲージポテンシャル）により繋がっていたのである。また、このことは、電磁場のゲージポテンシャルと荷電粒子の分離不可能な一体性を表していると考えられる。

【12】 中赤外線強レーザー場における Xe 原子多重電離過程の研究（トン）

最近開発した FFT により新しい時間依存密度汎関数計算方法で強レーザー場における原子多重電離過程を調べた。従来の実験結果と理論計算によって、レーザー強度を上げると、二重電離の割合も上がる。我々の計算結果によると、ある強度の領域でレーザー強度を下げると、二重電離の割合が右図のように上がる。この異常な現象をスペインの実験グループに報告して、実験でこの現象は確認された。本研究は国際共同研究の成果として、Physical Review A に発表した。

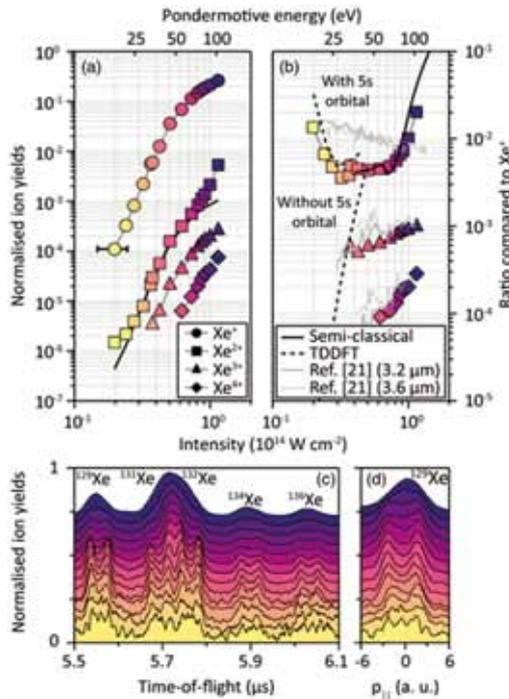


図 7：中赤外線強レーザー場における Xe 原子多重電離確率とレーザー強度の関係

【13】 2 色円偏光強レーザー場による原子電離メカニズムの解明（トン）

半古典物理の法則によって、2 色円偏光強レーザー場による原子電離確率は 2 色円偏光レーザーの偏光向に寄らずに、完全に同じである。量子力学の法則によって、我々の計算結果は 2 色レーザーの偏光が逆向きの場合は同じ偏光方向より電離確率が 10 倍大きくなる可能性があることを示した。先ず、我々の予測は正しいか、共同研究の実験グループに報告して、実験で確認された。次に、その大きな差の物理起因について、理論計算で、電離電子のエネルギーを分析して、原因を解明した。その原因は半古典力学には量子力学の選択ルールを考

慮しないことである。この研究結果は実験グループとの共同研究成果として Physical Review A に発表した。

【14】 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）

バルク Si 結晶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が形成するプラズモンと光学フォノンモードの周波数がほぼ一致するようにレーザーが照射された場合、両者の共鳴現象により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光学伝導度スペクトルにスピン励起状態のスペクトルピークが現れるという解析計算に基づく理論的予測が正しいことを数値的に確認し、更に現実の物質で重要となるパラメータ領域では、光学伝導度で観測される状態が、上記のスピン励起状態から徐々にドメイン壁的な状態へと変化していくことを示した。

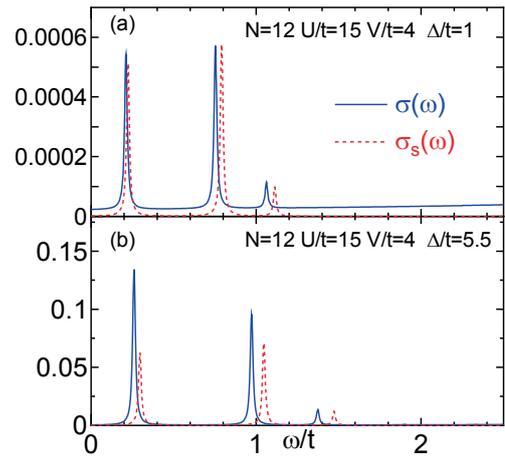


図 8: イオン性ハバード模型における光学伝導度スペクトル (青線) およびスピン励起からの寄与 (赤線)

4. 教育

博士論文

渡辺 陽平 Theoretical Study on Quantum Dynamics of Coherent Phonon Generation in the Early-Time Region

修士論文

高木 謙介 電子デバイス界面における欠陥起因の電子状態変化が伝導電子に及ぼす影響の第一原理計算による解析

张博源 HgTe/CdTe の量子井戸構造におけるフロケットポロジカル絶縁体の量子制御

卒業論文

種崎 智貴 実空間差分法に基づく一般化周期境界条件における Poisson 方程式ソルバの開発

中西 健太 グラフェン上に吸着した強磁性金属原子の電子状態

高橋 涼介	遺伝算法による二層スピン系 Honey Comb エネルギー構造の理論研究
朴 善浩	6 μm 以上の中赤外線レーザーによる X-線レーザー生成の理論研究
大塩 耕平	半導体量子井戸型トポロジカル絶縁体のエネルギーバンド解析
山本玲於奈	4 面体上のハバード模型におけるレーザー誘起フロケ状態の解析
柳松 聖吾	1 次元イオン性ハバード模型における低エネルギー励起状態の解析
真鍋 大地	銅酸化物超伝導体の超伝導転移温度に対するスピン波励起の影響

集中講義

1. 矢花一浩、"超短パルス光と物質の相互作用を記述する第一原理計算－非熱レーザー加工のメカニズム解明に向けて"、光産業創生大学院大学特別講義 2017、光産業創生大学院大学、2017 年 6 月 14 日。
2. 矢花一浩、"計算機シミュレーションの発展 ～先端分野のシミュレーション手法開発と異分野連携の実践～"、東京大学大学院工学系研究科先進原子力特別講義第三、2017 年 10 月 3 日。
3. 矢花一浩、東京大学大学院理学研究科集中講義、物理化学特論 II、2017 年 12 月 7 日。
4. 小野倫也、東京工業大学理学院化学系

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

受賞

1. 筑波大学 BEST FACULTY MEMBER、矢花一浩、2018 年 2 月 19 日
2. アメリカ物理学会のフェロー、Xiao-Min Tong、2017 年 10 月 12 日

外部資金

1. 科研費基盤研究 (B) 「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」、矢花一浩、代表、2015-2018 年度、2,300 千円 (H29 年度直接経費)
2. ポスト京重点課題 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」サブ課題 B 「光・電子融合デバイス」、矢花一浩、分担、2016-2032 年度、7,469 千円 (2017 年度直接経費)
3. JST CREST 「光・電子融合第一原理計算ソフトウェアの開発と応用」、矢花一浩、代表、2016-2021 年度、24,900 千円 (2017 年度直接経費)
4. 共同研究経費、株式会社 IHI、「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」、450 千円 (2017 年度直接経費)
5. 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、2017 年度 400 千円、「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」

6. 日本学術振興会、基盤研究 (B)、小野倫也、代表、2017 年、2,000 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」
7. 民間企業、共同研究、小野倫也、900 千円
8. 日本学術振興会、研究拠点形成事業、小野倫也、分担、2016 年、400 千円、「半導体集積デバイス向け二次元電子・スピン材料研究拠点」
9. 日本学術振興会、基盤研究 (C)、全 暁民 (トン ショウミン)、代表、2017 年、650 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」

6. 研究業績

(1) 研究論文

A) 査読付き論文

1. I. Floss, C. Lemell, G. Wachter, V. Smejkal, S. A. Sato, X. M. Tong, K. Yabana, and J. Burgdörfer, "Ab initio multiscale simulation of high-order harmonic generation in solids", *Phys. Rev. A* **97**, 011401(R):1-5 (2018).
2. C.D. Pemmaraju, F.D. Vila, J.J. Kas, S.A. Sato, J.J. Rehr, K. Yabana, D. Prendergast, "Velocity-gauge real-time TDDFT within a numerical atomic orbital basis set", *Comp. Phys. Comm.* **226**, 30-38 (2018).
3. Yuta Hirokawa, Shunsuke A. Sato, Taisuke Boku, Kazuhiro Yabana, "Performance Evaluation of Large Scale Electron Dynamics Simulation under Many-core Cluster based on Knights Landing", *Proc. of the 1st International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region (HPCAsia2018)*, Tokyo, Jan. 2018.
4. Masashi Noda, Shunsuke A Sato, Yuta Hirokawa, Mitsuharu Uemoto, Takashi Takeuchi, Shunsuke Yamada, Atsushi Yamada, Yasushi Shinohara, Maiku Yamaguchi, Kenji Iida, Isabella Floss, Tomohito Otobe, Kyung-Min Lee, Taisuke Boku, George F Bertsch, Katsuyuki Nobusada, Kazuhiro Yabana, "SALMON: Scable Ab-intio Light-Matter simulator for Optics and Nanoscience ", *arXiv:1804.01404*.
5. Yuta Hirokawa, Taisuke Boku, Mitsuharu Uemoto, Shunsuke A. Sato, and Kazuhiro Yabana, "Performance Optimization and Evaluation of Scalable Optoelectronics Application on Large Scale KNL Cluster", *in press*.
6. T. Morisaki, H. Wakaura, H. Koizumi, "Effect of Rashba Spin-Orbit Interaction on the Stability of Spin-Vortex-Induced Loop Current in Hole-Doped Cuprate Superconductors: A Scenario for the Appearance of Magnetic Field Enhanced Charge Order and Fermi Surface Reconstruction", *J. Phys. Soc. Jpn.* **86**, 104710 (2017).

7. Hiroyasu Koizumi, "Flux Rule, U(1) instanton, and superconductivity", *J. Supercond. Nov. Magn.* **30**, 3345–3349 (2017).
8. T. Morisaki, H. Wakaura, M. Abou Ghantous, H. Koizumi, "Response Current from Spin-Vortex-Induced Loop Current System to Feeding Current", *J. Phys. Soc. Jpn.* **86**, 074702 (2017).
9. H. Koizumi, "Origin of the U(1) field mass in superconductors", *Journal of Physics: Conference Series*, Vibronic Coupling and Electron-Phonon Interactions in Molecules and Crystals: XXIII International Symposium on the Jahn-Teller Effect, **833**, 012016 (2017).
10. H. Wakaura, H. Koizumi, "External current as a coupler between the spin- vortex-induced loop current qubits," *J. Phys. Commun.* **1** 055013 (2017).
11. M. G. Pullen, B. Wolter, X. Wang, X. M. Tong, M. Sclafani, M. Baudisch, H. Pires, C. D. Schröter, J. Ullrich, T. Pfeifer, R. Moshhammer, J. H. Eberly, and J. Biegert, "Transition from nonsequential to sequential double ionization in many-electron systems", *Phys. Rev. A* **96**, 033401:1-7 (2017).
12. H. Li, X. Gong, K. Lin, R. de Vivie-Riedle, X. M. Tong, J. Wu, and M. F. Kling, "Sub-cycle directional control of the dissociative ionization of H₂ in tailored femtosecond laser fields", *J. Phys. B: At. Mol. Opt.* **50**, 172001 (17pp) (2017).
13. C. A. Mancuso, K. M. Dorney, D. D. Hickstein, J. L. Chaloupka, X. M. Tong, J. L. Ellis, H. C. Kapteyn, and M. M. Murnane, "Observation of ionization enhancement in two-color circularly polarized laser fields", *Phys. Rev. A* **96**, 023402:1-10 (2017).
14. X. M. Tong, "A three-dimensional time-dependent Schrödinger equation solver: An application to hydrogen atoms in an elliptical laser field", *J. Phys. B: At. Mol. Opt.* **50**, 144004:1-6 (2017).
15. C. Khurmi, W. C. Wallace, S. Sainadh U, I. A. Ivanov, A. S. Kheifets, X. M. Tong, I. V. Litvinyuk, R. T. Sang, and D. Kielpinski, "Measuring laser carrier-envelope phase effects in the noble gases with an atomic hydrogen calibration standard", *Phys. Rev. A* **96**, 013404 (2017).
16. Kota Yokoi, Nobuya Maeshima, and Ken-ichi Hino, "Low-lying Photoexcited States of a One-Dimensional Ionic Extended Hubbard Model", *J. Phys. Soc. Jpn.* **86**, 104708 (2017).
17. Yohei Watanabe, Ken-ichi Hino, Muneaki Hase, and Nobuya Maeshima, " Irregular oscillatory patterns in the early-time region of coherent phonon generation in silicon", *Phys. Rev. B* **96**, 125204 (2017).

B) 査読無し論文

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

1. Kazuhiro Yabana, "Ab-initio calculations for energy transfer from ultrafast laser pulse to dielectrics ", Ultrafast Bandgap Photonics II, SPIE Defence + Commercial Sensing, Anaheim, USA, Apr. 21, 2017
2. Kazuhiro Yabana, "First-principles description for initial stage of femtosecond laser processing", CLEO2017, San Jose, USA, May. 14, 2017
3. Kazuhiro Yabana, "Maxwell + TDDFT multiscale simulation for strong pulsed-light propagation in dielectrics", CECAM workshop on Bridging the Worlds of Electromagnetic and Quantum simulations, Tel Aviv, Israel, Jun.19, 2017
4. Kazuhiro Yabana, "Ab-initio simulation for dynamics of electrons and light electromagnetic fields in dielectrics" , NANO KOREA 2017 , Ilsan, Korea , Jul.12, 2017
5. Kazuhiro Yabana, "Real-time TDDFT simulation for interactions of ultrashort laser pulses with solids, coupling to Maxwell's equations", Telluride Science Research Center Workshop Excited States: Electronic structure and dynamics, Telluride, USA, Jul.17, 2017
6. Kazuhiro Yabana, "First-principles calculations for ultrafast energy transfer from laser to solids", SPIE Laser Damage, Boulder, USA, Sep.24,2017
7. Kazuhiro Yabana, "First-principles simulation for ultrafast optical dynamics in dielectrics", ITCPS2017: Inter-Institutional Meeting in Interdisciplinary Theoretical and Computational Physical Sciences, Tokyo, Japan, Oct.24,2017
8. Kazuhiro Yabana, "Ab-initio simulations for ultrafast electron dynamics in solids", Ultrafast dynamics and metastability, Washington DC, USA, Nov.13,2017
9. X. M. Tong, "A New FFT based TDDFT method for isolated systems in strong field", 2nd International Conference on Matter and Radiation at Extremes, Beijing, China, Jun.26-30, 2017
10. X. M. Tong, "Ionization of Atoms and Di-Atomic Molecules in Two Color Circularly Polarized Intense Laser Fields", The 10th Asian Symposium on Intense Laser Science, American University of Sharjah, United Arab Emirates, Mar.10~13, 2018
11. Ken-ichi Hino, Yohei Watanabe, Muneaki Hase, Nobuya Maeshima, "Quantum-Mechanical Effects Induced in Coherent Phonon Generation", EMN Meeting on Terahertz 2017, Honolulu, Hawaii, USA ,Apr.1-5, 2017

B) 一般講演

1. Mitsuharu Uemoto, Kazuhiro Yabana, "Maxwell+TDDFT multiscale method for light-matter interaction: light propagation in the microscopic semiconducting crystal", Interdisciplinary

- symposium on modern density functional theory (IDFT), Riken (Wako campus), Japan, Jun.19, 2017
2. Mitsuharu Uemoto, Shintaro Kurata, Norihito Kawaguchi, Kazuhiro Yabana, "First-principles calculations for saturable absorption in graphite", CLEO2017, San Jose, USA, May 14-19, 2017
 3. S. Iwase, Y. Futamura, A. Imakura, T. Sakurai, S. Tsukamoto, and T. Ono, "Contour Integral Method to Evaluate Self-Energy Matrices for Large-Scale Electron Transport Calculations", 18th SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing, minisymposium on 'Scalable Eigenvalue Computation', March 9, 2018, Tokyo, Japan
 4. T. Ono and S. Tsukamoto, "Improvement of accuracy of wave-function-matching technique for first-principles electron-transport calculation ", APS March Meeting 2018, March 5-9, 2018, Los Angeles, USA
 5. H. Wakaura, "Quantum Error Correction using spin-vortex induced loop currents as qubits", Adiabatic quantum computing conference 2017, GranTokyo South Tower, Tokyo, June 26-29, 2017
 6. H. Koizumi, "Proposal for spin-vortex-induced loop current quantum computer", Adiabatic quantum computing conference 2017, GranTokyo South Tower, Tokyo June 26-29, 2017
 7. X. M. Tong, "A new FFT based TDDFT method for an isolated system in strong field", Physical Chemistry Colloquium, Tohoku University, Sendai, Japan, 2017. Sept. 19-20, 2017
 8. I Floss, G Wachter, C Lemell, S Sato, X. M. Tong, K Yabana, J Burgdörfer, "Simulation of High Harmonic Generation in Solids", XXX International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions, Cairns, Australia, July 26-Aug. 1, 2017
 9. X. M. Tong, S Borbely, I Brezinova, F Lackner, S Nagele, J Feist, L Nagy, K Tokesi, N Toshima, J Burgdorfer, "Energy straggling cross section for antiproton-atom collisions", XXX International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions, Cairns, Australia, July 26-Aug. 1, 2017
 10. H. Ibrahim, S. Beaulieu, V. Wanie, T. Endo, B. Wales, X. M. Tong, M.S. Schuurman, J. Sanderson and F. Légaré, "Imaging and Controlling Proton Motion in Molecules", International Conference of Computational methods in sciences and engineering 2017, Thessaloniki, Greece, April 21-25, 2017

(3) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

1. 矢花一浩、"フェルミ多粒子系ダイナミクスのシミュレーション"、「物質階層原理」第一回春合宿、御殿場高原ホテル、2017年5月12日
2. 矢花一浩、"量子（波動）ダイナミクスの第一原理計算と光科学フロンティアへの展開"、サイエンティフィック・システム研究会 HPC フォーラム 2017「計算科学の新たな可能性」、日本、2017年8月30日
3. 矢花一浩、"電子ダイナミクス第一原理計算と光科学への応用"、第31回コンピュータショナル・マテリアルズ・デザインワークショップ、大阪大学、2017年9月15日
4. 矢花一浩、"高強度パルス光と物質の相互作用—第一原理計算からのアプローチ"、「光操作の最前線」量子エレクトロニクス研究会、上智大学軽井沢セミナーハウス、2017年12月14日
5. 小野倫也、"第一原理計算と高速計算機を用いた材料探索・デバイス設計"、情報機構セミナー、東京、2017年6月13日
6. X.M.Tong、"Giant Resonances in Atoms"、シンポジウム「原子過程科学の歩みと将来」、上智大学四谷キャンパス、2017年9月10日

B) その他の発表

1. Kazuhiro Yabana, "Real-time time-dependent density functional theory: Basics and applications", Surface Science Colloquium, Institute of Physics, Chinese Academy of Science, Beijing, China, Sep.11,2017
2. Kazuhiro Yabana, "Ab-initio simulation for attosecond spectroscopy in solids", CSRC seminar, Beijing, China, Sep.12,2017
3. Kazuhiro Yabana, "Ab-initio density functional simulation for nano-optics", CCS-EPCC Workshop, 筑波大学, Dec.7,2017
4. 矢花一浩、"高強度パルス光とナノ物質との相互作用の大規模シミュレーション"、第3回 CDMSI ポスト「京」重点課題（7）シンポジウム、東京大学伊藤謝恩ホール、2017年12月5日
5. 矢花一浩、"Ab-initio Density Functional Simulation for Nano-optics"、CCS-LBNL Collaborative Workshop、筑波大学、2018年3月5日
6. 植本光治、佐藤駿丞、廣川祐太、朴泰祐、矢花一浩、"ナノ構造体に対する高強度パルス光励起ダイナミクスの大規模計算"、第2回 CDMSI (ポスト「京」重点課題(7)) 研究会、東京大学、2017年12月5日
7. 植本光治、佐藤駿丞、廣川祐太、朴泰祐、矢花一浩、"半導体3次元ナノ構造の高強度光パルス伝搬に関する第一原理マルチスケール計算"、日本物理学会秋期大会、岩手大学、2017年9月21日

8. 植本光治、佐藤駿丞、廣川祐太、朴泰祐、矢花一浩、"半導体 3 次元ナノ構造の高強度光パルス伝搬に関する第一原理マルチスケール計算"、第 3 回 CDMSI (ポスト「京」重点課題 (7)) シンポジウム、東京大学、2017 年 7 月 11 日
9. 植本光治、佐藤駿丞、廣川祐太、朴泰祐、矢花一浩、"Maxwell+TDDFT マルチスケール第一原理計算 (III)～3 次元ナノ構造と斜方向光入射～"、日本物理学会春季大会、東京理科大、2018 年 3 月 22 日
10. 山田篤志、Daniel Neuhauser、Renaud Vallée、"分子制御に基づく光伝搬経路スイッチと光電場増強の機能をもつナノ構造フォトニクスデバイスのシミュレーション開発"、第 65 回応用物理学会春季学術講演会、東京、2018 年 3 月 17 日
11. 山田篤志、矢花一浩、"光・電子融合第一原理シミュレーションソフトウェア SALMON の開発～光誘起相転移ダイナミクスの研究に向けて～"、CREST 領域会議、東京、2017 年 12 月 21 日
12. 山田俊介、野田真史、信定克幸、矢花一浩、"高強度パルス光と金属表面の相互作用を記述する第一原理計算の試み"、日本物理学会第 73 回年次大会、東京理科大学野田キャンパス、2018 年 3 月 22 日
13. 小野倫也、"第一原理計算による窒化処理後の SiC/SiO₂ 界面構造探索価"、第 78 回応用物理学会秋季学術講演会、2017 年 9 月 5 日～8 日、福岡国際会議場
14. 高木謙介、小野倫也、"HfO₂/SiO₂ 界面における酸素空孔欠陥が及ぼすリーク電流の第一原理計算"、2017 年 9 月 5 日～8 日、福岡国際会議場
15. 岩瀬滋、二村保徳、今倉暁、櫻井鉄也、塚本茂、小野倫也、"周回積分法を用いた電極の自己エネルギーの計算方法の提案と第一原理伝導計算への応用"、日本物理学会第 73 回年次大会、2018 年 3 月 22 日～25 日、東京理科大学
16. 小泉裕康、"An effort toward fully fault-tolerant quantum computing", CCS-LBNL Workshop、筑波大学、2017 年 3 月 5 日～6 日
17. 小泉裕康、"U(1)インスタントン形成による超伝導の発現と電圧の量子化"、日本物理学会秋季大会、2017 年 9 月 21 日-24 日、岩手大学
18. 小泉裕康、"磁場誘起電荷秩序とフェルミ一面の再構成についての理論的考察"、高温超伝導フォーラム第 5 回会合、岩手大学工学部テクノホール、2017 年 9 月 24 日
19. 小泉裕康、"Flux rule, U(1)インスタントン、超伝導"、日本物理学会第 73 回年次大会、2018 年 3 月 22 日～25 日、東京理科大学
20. 林田信明、渡辺陽平、日野健一、長谷宗明、前島展也、"半導体コヒーレントフォノン生成のパルスレーザー依存性"、日本物理学会 2017 年秋季大会 (岩手大) 2017 年 9 月 21 日-24 日

21. 出口泰資、前島展也、日野健一、"ジグザグハバード梯子模型のフロケ状態"、日本物理学会 2017 年秋季大会 (岩手大) 2017 年 9 月 21 日-24 日
22. 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初期時間領域における異常振動型の発現"、日本物理学会 2017 年秋季大会 (岩手大) 2017 年 9 月 21 日-24 日
23. 前島展也、柳松聖吾、牟田純志、日野健一、"1 次元イオン性ハバード模型の動的構造因子"、日本物理学会 2017 年秋季大会 (岩手大) 2017 年 9 月 21 日-24 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

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. 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研究に関する共同研究 (矢花)
3. ドイツマックスプランク物質構造動力学研究所の理論グループと、電子ダイナミクスの計算科学的研究に関する共同研究 (矢花)

8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

1. 矢花 第一回 SALMON チュートリアルの実施、2017 年 11 月 24 日筑波大学計算科学研究センター(矢花)
2. 小野 2017 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。2018 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 (センター内) 計算科学研究センター運営委員会委員、人事委員会委員、運営協議会委員、先端計算科学推進室長、共同研究委員会委員、量子物性研究部門長 (学内) 物理学域運営委員、筑波大学 50 年史編纂専門委員会委員、物理学類カリキュラム委員
2. 小泉 応用理工学類、入試実施委員 (副)、筑波大学全学計算機システム、3D サテライト管理

3. トン 中国事務所運営員会委員、筑波大学と中国科学技術大学の連絡員
4. 前島 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
平成 29 年度テニユアトラック普及・定着事業委員会委員
西宮湯川記念賞選考委員会委員長
2. 小野
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。
3. トン
International Conference on Photonic, Electronic, and Atomic Collision の国際運営員として、2017 年第 30 回国際会議に関する投稿論文の審査とプログラムの準備などを担当した。

11. その他

なし