

## IV. 量子物性研究部門

### 1. メンバー

|      |                                                     |
|------|-----------------------------------------------------|
| 教授   | 矢花 一浩                                               |
| 准教授  | 小泉 裕康、全 暁民                                          |
| 講師   | 前島 展也                                               |
| 助教   | 佐藤 駿丞 (2019.5～)                                     |
| 研究員  | 植本 光治、山田 篤志、山田 俊介、竹内 嵩、野田 真史、<br>Arqum Hashmi、廣川 祐太 |
| 学生   | 大学院生 7 名、学類生 3 名                                    |
| 教授   | 日野 健一(学内共同研究員、物質工学域)、<br>岡田 晋 (学内共同研究員、物理学域)        |
| 客員教授 | 小野 倫也 (神戸大学大学院工学研究科)                                |

### 2. 概要

本部門は、物質科学や物性物理学、原子分子物理学などのいくつかの分野に渡る計算科学に基づく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、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と銅酸化物高温超伝導体を量子ビットとする量子コンピュータを実現するための理論研究を行っている。

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。

昨年度末に、小野准教授が神戸大学に転出した。また本年 5 月に佐藤国際テニュアトラック助教が着任し、ハンブルクのマックスプランク物質構造動力学研究所に長期滞在し研究を行っている。

### 3. 研究成果

【1】光物質科学分野の第一原理計算ソフトウェア SALMON の開発（矢花、植本、佐藤、竹内、野田、廣川、山田(篤)、山田(俊)、朴[高性能計算システム研究部門]）

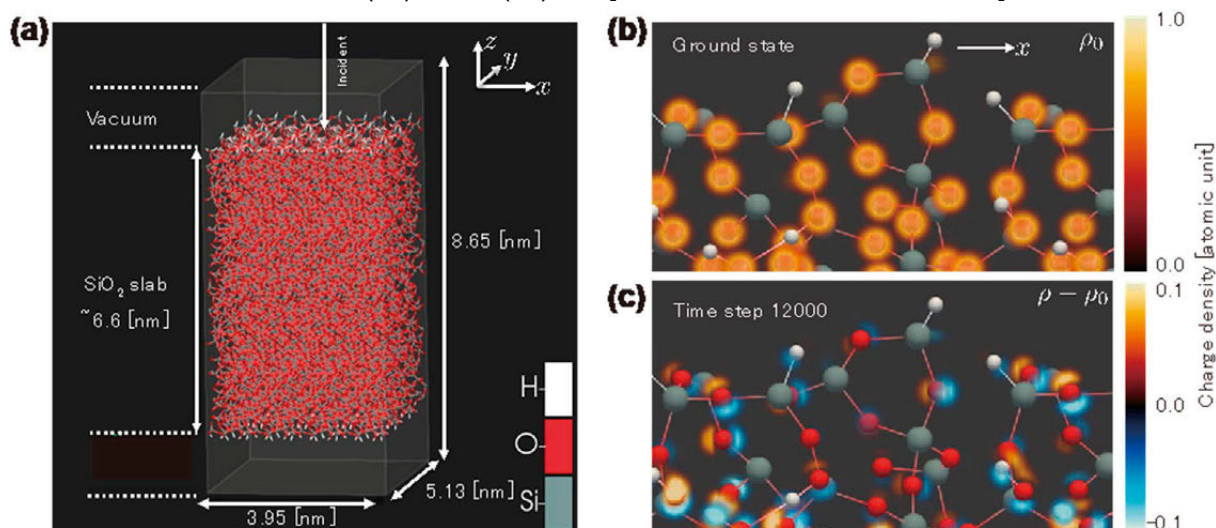


図 1：富岳において行ったガラスにパルス光を照射した際に起こる光・電子・イオンのシミュレーション。(a)はシステムの概要、(b)は基底状態における電子密度分布、(c)はパルスが照射中の電子密度の変化する様子。

パルス光と多様な物質の相互作用を、物質科学の第一原理計算手法の一つである時間依存密度汎関数理論に基づき記述する汎用のソフトウェア SALMON (Scalable Ab initio Light-Matter simulator for Optics and Nanoscience) の開発を進めている。SALMON は、分子の分極率や物質の誘電関数のような光応答関数とともに、パルス光を照射した物質内で起こる超高速現象を時間領域で計算することができ、先端の光科学実験を丸ごとシミュレーションすることができる、他に例のない特徴を持つソフトウェアである。現在ウェブページ <https://salmon-tddft.jp> を整備し公開している。本年度は、SALMON の基盤となるコードの抜本的な改良を行い、バージョン 2 の公開を目指す活動に多くの時間を費やした。2020 年度の前半には新バージョンの公開を予定している。

SALMON を普及する活動として、9 月に大阪大学が実施するコンピュテーショナル・マテリアルズ・デザインワークショップにおいて、また 11 月には RIST のサポートのもと東北大学サイバーメディアセンターにおいてハンズオンチュートリアルを実施するなどした。

【2】富岳における SALMON を用いた大規模シミュレーション（廣川、山田(篤)、山田(俊)、野田、植本、矢花、朴[高性能計算システム研究部門]）

理化学研究所計算科学研究センター（理研 R-CCS）で開発されている富岳において、大規模計算を行う準備を進め、10,000 原子を超えるサイズの系が、富岳において高い効率で計算

できることを確かめた。文部科学省より募集のあった、ゴードンベル賞へのエントリーにむけた富岳の試験利用に採択され、富岳のおよそ 1/6 のシステムである 27,648 ノードまでを用いて計算を行った。図 1 に、行った計算の概要を示す。表面を水素終端した 10,224 原子からなるアモルファス状の  $\text{SiO}_2$  のガラス薄膜に対して、光電磁場に対するマクスウェル方程式、電子に対する時間依存 Kohn-Sham 方程式、イオンに対するニュートンの運動方程式を同時に解き、パルス照射後の超高速ダイナミクスに対する計算が実行可能であることを実証した。また、13,632 原子までの系に対して、weak/strong スケーリングの性能を調べ、コードのチューニングにより、富岳における Byte/FLOPS 値から予想される限界に近い性能で計算が可能であることを示した。

### 【3】光・電子・フォノンの相互作用を記述するシミュレーションの展開（山田（篤）、矢花）

これまでに SALMON 開発プロジェクトを通じ、光・電子・原子（イオン）の三者の運動方程式を第一原理レベルでマルチスケールモデルに基づき統一的に記述する Maxwell + TDDFT + MD 法を開発してきた。特にフェムと秒パルスにより誘起される瞬間誘導ラマン散乱およびコヒーレントフォノンのポンプ・プローブ分光の詳細な解析を進めた。今年度はさらに、フォノンの典型的な時間スケール（ピコ秒）での記述を可能にするため、本計算手法の枠組みを計算化学分野における分子力場モデルへ応用した新規計算手法、すなわち、光の運動と分子動力学とを統合した Maxwell + 分極力場 MD 法、の開発に着手した。これは、Maxwell 方程式に従った光電磁波と、固体における電子分極を取り入れた分子の運動とを連立させ、時間領域の相互作用を記述する計算手法である。最初の数値計算例として、氷の薄膜に対する (I) 可視光の透過と反射、(II) 赤外吸収測定、(III) 誘導ラマン散乱測定、のシミュレーションを行った。これらは光の入射、薄膜中の光の伝搬、光-分子相互作用により生じる分子振動と光の変調、シグナル計測、といった一連の実験プロセスを模倣して再現した計算である。測定プロセスにおける光と分子の運動の詳細を明らかにすると同時に実験測定とよく一致するシグナルが得られ、新規手法の有効性を実証した。

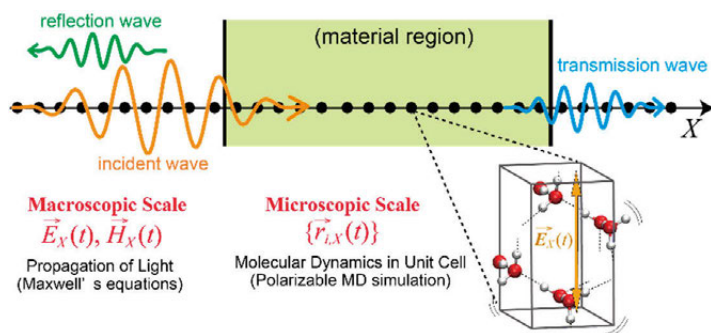


図 2: Maxwell + 分極力場 MD マルチスケールシミュレーション法の概略図

#### 【4】ナノ薄膜とパルス光の相互作用を記述する単一空間格子を用いた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)

薄膜における高次高調波発生や非熱的なレーザー加工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、2次元物質等の極めて薄い薄膜における光・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、上記のような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ル的な記述は適当でない。そこで我々は、単一の空間スケールで電子系と電磁場を結合する新たな手法の開発を進めてきた。本手法は、光電磁場のための微視的 Maxwell 方程式と電子系のための時間依存 Kohn-Sham 方程式を結合し、共通の実空間グリッド上で同時に時間発展させる第一原理計算法である。

今年度は本手法の応用として、薄膜の高次高調波発生 of 計算を行った。固体薄膜に高強度パルス光を照射した際に観測される高次高調波は、薄膜中における光伝搬の効果により、バルク中の微視的な高次高調波発生 (HHG) の信号から大きく変調を受ける。また、極めて薄い薄膜においては量子閉じ込め効果あるいは表面効果による HHG の変調が顕著になると考えられる。そのため、薄膜における HHG の包括的な理解のためには、薄膜の微視的性質と光伝播効果を同時に扱うことのできる本手法を用いて、実際に両者が HHG に対してどのような影響をもたらすのかを分析することが有用である。

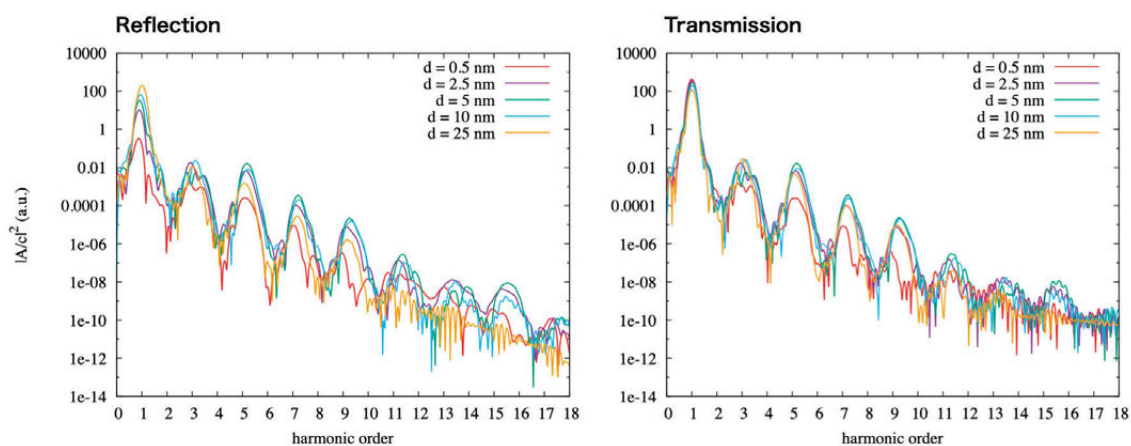


図 3: Si 薄膜 (厚さ  $d$ ) における光振動数 1.5 eV の入射光に対する反射 HHG(左)および透過 HHG(右)の膜厚依存性

#### 【5】サブ nm ギャップを持つプラズモニックメタ表面の光応答 (竹内、矢花)

金属ナノ粒子を二次元的に周期配列した薄膜であるメタ表面は、粒子の素材・形状から決まる特異かつ幅広い光物性を発現することで知られている。特に、近年では金属ナノ粒子間距離(ギャップ)が 1nm 未満のメタ表面を自己組織化により安定かつ大面積に作成できる方法が確立し、基礎科学的にも応用的にも注目を集めている。このようなサブ nm 領域では量子

効果に由来する電子輸送が現れ光物性が大きく変動するが、メタ表面の場合に電子輸送がどれほど影響を及ぼすかは知られていなかった。

そこで我々は SALMON を使い、電子輸送がメタ表面の光物性に及ぼす影響を明らかにした。図 4 はメタ表面の光吸収率に対するギャップ依存性を示す。(a)は量子効果を考慮しない従来の古典電磁気学計算から得られた結果であり、(b)は時間依存密度汎関数理論に基づく第一原理計算から得られた結果である。この結果より、両者はギャップ 0.2nm 付近までは概ね一致するものの、より短いギャップ領域では大きな違いが表れている。これは(b)ではこの領域から電子輸送の効果が現れ、金属ナノ粒子に励起したプラズモンが減衰したためである。

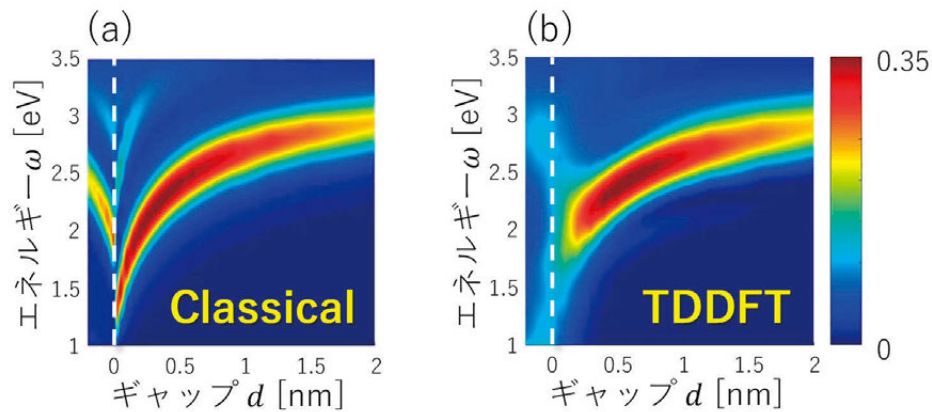


図 4： 様々なギャップ距離を持つメタ表面による光吸収率の比較

#### 【6】遷移金属におけるアト秒過渡吸収分光と光誘起電子局在現象の第一原理計算（佐藤）

我々は、時間依存密度汎関数理論に基づく第一原理計算と最先端のアト秒分光実験技術を組み合わせることにより、光が誘起する超高速な電子ダイナミクスの微視的機構の解明に取り組んでいる。本研究では、チューリッヒ工科大のアト秒実験グループとの共同研究により、近赤外フェムト秒レーザーをチタン薄膜に照射した際に誘起される固体中の超高速な電子ダイナミクスについて調べた。実験的には、赤外フェムト秒レーザーをポンプ光、極紫外アト秒レーザーをプローブ光としたアト秒過渡吸収分光実験がチタン薄膜に対して行い、フェムト秒レーザー照射によって金属チタンの M 吸収端(およそ 32eV)における吸光度がサブフェムト秒の時間スケールで増大することが明らかとなった。この超高速な金属チタンの光学特性の変調の微視的機構を解明するため、時間依存密度汎関数理論に基づく第一原理電子ダイナミクス計算により上記のアト秒ポンプ・プローブ実験を直接シミュレーションした。その結果、図 5 に示すように、レーザー励起によってチタン原子の周りに電子が局在化することが明らかとなった。さらに、時間依存密度汎関数理論計算の結果を微視的に解析することで、実験的に観測された M 吸収端における吸光度の増大は、フェムト秒レーザー励起が引き



起こす電子の局在化により物質内の遮蔽効果(local field effect)が変調されたことに起因していることが明らかとなった。

このような光によって電子の局在性、及び物質内の遮蔽効果を制御する技術は、将来の光による物性制御を実現するための基盤となるものである。本共同研究の成果は、論文 "Attosecond screening dynamics mediated by electron localization in transition metals" として Nature Physics より発表された。

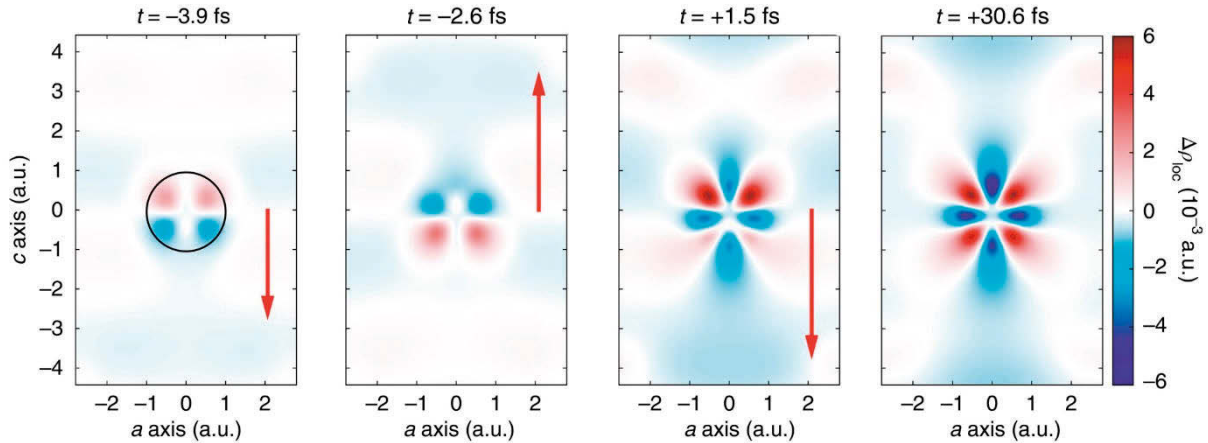


図 5: フェムト秒レーザー照射による電子密度変化ダイナミクスのスナップショット。座標原点にチタン原子が位置する。図上の時刻はフェムト秒レーザーパルスのピーク強度時刻からの差を表している。また、レーザー照射中の電場は赤矢印によって示されている。レーザー照射中は電場により電子密度に偏りが生じ、同時にレーザー励起によって電子がチタン原子付近に局在化している様子が示されている。

#### 【7】密度汎関数理論と波動関数理論を結合した高精度電子状態計算手法の検討（佐藤）

密度汎関数理論(DFT)に基づく電子状態計算は、低い計算コストでありながら一定の計算精度が得られるため、今日では幅広い分野で応用されている。しかしながら、DFT 計算の精度を系統的に向上させる方法は存在せず、その精度改善は困難を極めている。他方で、波動関数理論に基づいた計算手法は、解の探索空間を広げていくことにより系統的に計算精度を向上させることが可能であり、高精度電子状態計算が実現されている。本研究では、DFT と波動関数理論を組み合わせた電子状態計算手法の開発へ向けて、有効相互作用を持った Kohn-Sham 系への写像について数値的に解析した。通常の DFT の理論の枠組みでは、相互作用を持った量子系から相互作用を持たない仮想系(Kohn-Sham 系)への写像を介して量子系が取り扱われる。これに対して本研究では有効相互作用を持った仮想系への写像を考えることにより、(i)写像による密度汎関数の導入、及び(ii)有効相互作用を持った仮想系に対する Schrödinger

方程式の波動関数理論による求解、という二段階の過程を経ることで、DFT と波動関数理論を自然に取り入れた理論的枠組みを構築することができる。

本研究では、このようにして導入された有効相互作用する Kohn-Sham 系の厳密交換相関ポテンシャルを数値的に解析した。図 6(a)には解離した 1 次元水素分子の基底状態の電子密度が示されており、図 6(b)には対応する厳密交換相関ポテンシャルが示されている。相互作用のない Kohn-Sham 系の交換相関ポテンシャルでは解離に起因するスパイク構造が確認できるが、有効相互作用する Kohn-Sham 系ではスパイク構造の出現を抑えられている。これは、有効相互作用する Kohn-Sham 系では、電子相関の一部が波動関数理論によって取り入れられているためである。また、有効相互作用する Kohn-Sham 系の自然軌道、及びその占有数を調べることで、系の動的電子相関の大部分が DFT を介して取り入れられていることを確認した。

このような DFT と波動関数理論を組み合わせた理論的枠組みに関する知見は、二つの理論の長所を共有した効果的な電子状態計算手法を発展させるための基礎となるものである。本研究成果は、論文”Exact exchange-correlation potential of effectively interacting Kohn-Sham systems”として Physical Review A から発表されている。

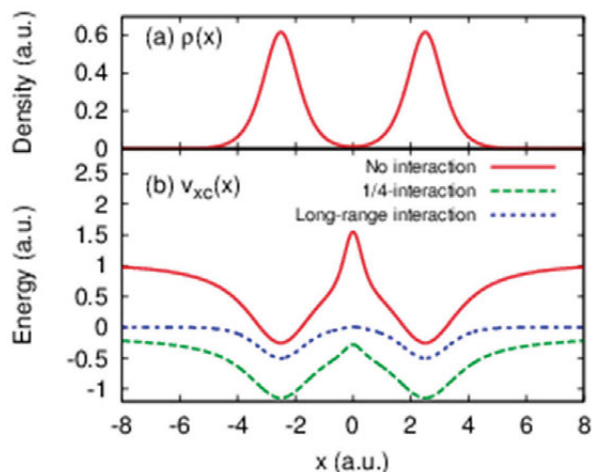


図 6: (a)解離した一次元水素分子における基底状態の電子密度。(b)対応する厳密交換相関ポテンシャル。赤実線:相互作用のない Kohn-Sham 系。緑破線:4 分の 1 に弱められたクーロン相互作用する Kohn-Sham 系。青破線:レンジ・セパレーションにより短距離相互作用が無視された Kohn-Sham 系。

## 【8】密度汎関数理論と波動関数理論を結合した高精度電子状態計算手法の検討(小泉)

銅酸化物高温超伝導の超伝導機構の解明と銅酸化物高温超伝導体を量子ビットとする量子コンピューターを実現するための理論研究を、基礎理論の構築とコンピューターによるシミュレーションを通じて行っている。超伝導機構の解明に関しては、我々が定式化した“スピン渦誘起ループ電流”を電流要素とする超伝導理論に基礎をおいたシミュレーションを行っており、特に、超伝導転移温度のドーピング依存性の解明を目標としている。また、超伝導相の高温側に存在する擬ギャップ相で観測されている各種の密度波状態、特に磁場により誘起される密度波状態に注目し、これらの状態の同定と超伝導との関係を明らかにすることも目標としている。量子ビットに関する研究では、“スピン渦誘起ループ電流量子ビット”によるエラー訂正を備えた量子コンピューターの実現を目指している。これまでこの量子ビッ

トの状態を光を使って制御する方法を研究し、実用レベルの性能が見込まれることを示してきたが、さらに、集積化に有利な外部電流を使った制御に関する研究を行っている。(小泉)

我々が銅酸化物超伝導の理論として提出している“スピン渦誘起ループ電流”を電流要素とする超伝導理論では、電子がスピンの方向をねじりながら遍歴運動することから生じるベリ-接続が安定なループ電流の源泉であるが、この、スピンの方向をねじりながら行う遍歴運動を安定化している相互作用の一つにラシュバ型のスピン軌道相互作用が存在する。この相互作用から、新規な集団スピンモードが生じることを見出した。

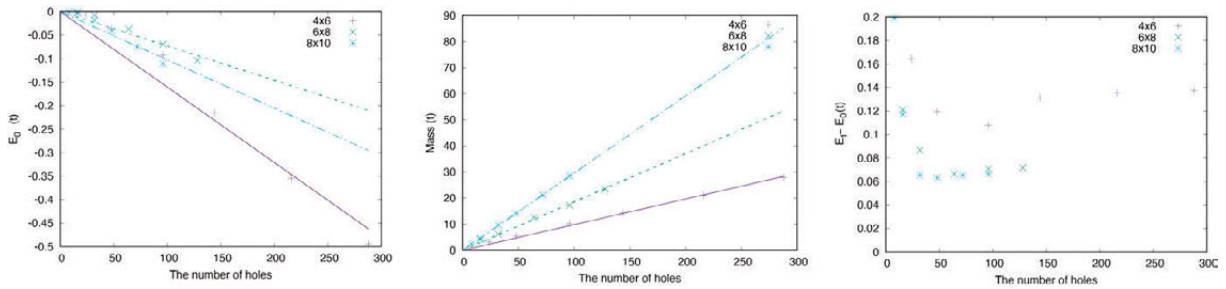


図 7: 左から、励起モードの基底状態のエネルギー、質量、基底状態と第一励起状態のエネルギー差のホール数依存性を示している。ホール数依存性は、システムの大きさへの依存性をあらわす。また、各図で示されている  $N \times M$  という記号は、x 軸方向に格子定数の  $N$  倍の長さ、y 軸方向に  $M$  倍の長さをもつタイルに、4 つのホールが存在するユニットを使い、2 次元  $\text{CuO}_2$  平面で覆った場合をあらわす。

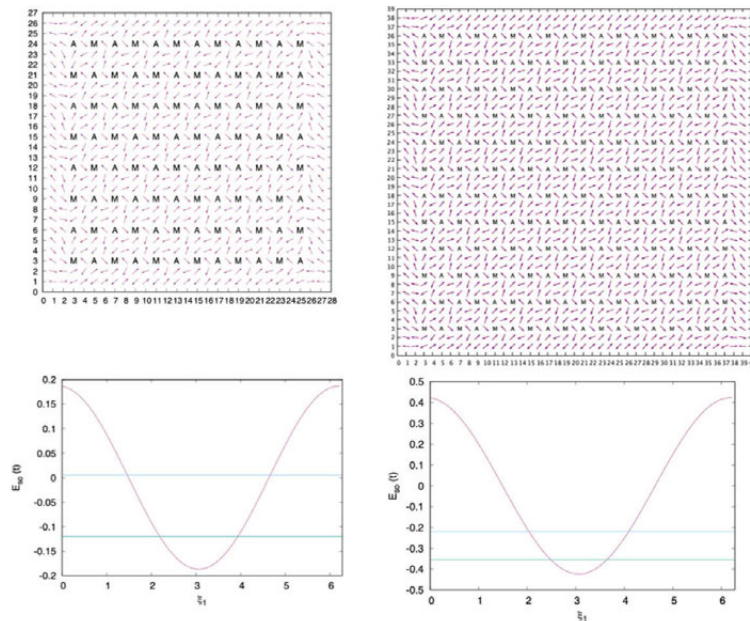


図 8:  $4 \times 6$  のタイルを使った場合のスピン渦と、ポテンシャルエネルギー  $E_{so}$  と、基底状態のエネルギーと第一励起状態のエネルギー。



図 7 にあるように、基底状態のエネルギー、質量、ともにシステムサイズに依存するが、励起エネルギーはサイズによらずに一定になることが見出された。また、一定となった励起エネルギーは 2 次元  $\text{CuO}_2$  平面を覆うタイルの大きさに依存し最適ドープ濃度に対応する  $4 \times 6$  ユニットのタイルの場合に一番大きくなることがわかった。図 8 に  $4 \times 6$  のタイルで覆った場合のスピン渦の様子と、ポテンシャルエネルギー、基底状態と第一励起状態のエネルギーの例として示す。励起エネルギーの大きさがユニットの形状に依存することは、超伝導転移温度のホール濃度依存性を説明する可能性がある。つまり、スピン渦誘起ループ電流の安定化にはスピン渦の安定化も必要であり、新規なスピン励起はスピン渦を破壊するので、このモードの励起により超伝導状態が壊れてしまう。したがって、これが起こり始める温度が超伝導転移温度を決めていることにより、超伝導転移温度のホール濃度依存性がでてくるというシナリオである。今後このシナリオの検討をおこなっていききたい。

#### 【9】ベリー接続をつかった、粒子数を完全に保存する、ボゴリューボフ・ド ジャン形式の超伝導理論の構築（小泉）

現在の超伝導の標準理論で広く使われているボゴリューボフ・ド ジャン形式の超伝導理論と我々が銅酸化物超伝導の理論として提出している“スピン渦誘起ループ電流”を電流要素とする超伝導理論とを繋ぐためには、ボゴリューボフ・ド ジャン形式の超伝導理論を、粒子数を完全に保存する形に書き換えることが必要となるが、それを達成した。この書き換えにおいて、重要な役割を果たすのが、ベリー接続である。ベリー接続を使った理論では、超伝導電流は非自明なベリー接続がもたらす集団運動となる。この集団運動に参加する電子数には揺らぎが生じるが、この揺らぎに対応する励起がボゴリューボフ・ド ジャン形式でのボゴリューボフ準粒子の生成消滅となる。つまり、オリジナルのボゴリューボフ・ド ジャン形式では、ボゴリューボフ準粒子の生成消滅は、粒子数の非保存を前提として計算する必要があるが、新しいボゴリューボフ準粒子は厳密に電子数を保存する。標準理論との接点は、非自明なベリー接続がもたらす集団運動は、電子対の形成により安定化され、新しいボゴリューボフ準粒子の生成にはエネルギーギャップが存在する点にある。また、新しい理論形式を使うと、ヘリウムの超流動に対してのボゴリューボフ理論も再現できることを示した。その上、ランダウが超流動に対して提出していた、量子化された流体力学理論も再現される。つまり、ベリー接続をつかった新しい理論は、超流動・超伝導現象を統一的に記述でき、これまでの理論を統合するものであることが示された。重要な点としてすべての計算が粒子数を完全に保存する形でできるという点があり、これは、量子ビットなどの超伝導ナノデバイスなどの粒子数保存の計算と粒子数非保存の計算に重大な違いがある可能性のある系への応用に適している。今後この形式を使い、銅酸化物高温超伝導の解明を達成したい。

## 【10】強レーザー場における原子励起と電離過程について、統一的な分析方法の開発（全）

強レーザー場における原子の励起と電離過程は二つの独立の過程であるので、別々に分析するのは従来の研究のやり方であった。一方、弱光と原子相互作用の場合は摂動論が適用されるので、量子欠損理論で、二つの過程を統一する手法はよく使われている。我々は、楕円偏光強レーザー場中の電子電離と励起過程の計算結果を分析し、図9のように、電子励起と電離過程は量子欠損理論の元で、統一した分析が可能であることが明らかになった。励起と電離過程だけではない、励起と電離過程に伴う高次高調波も統一分析ができる。その研究結果は Phys. Rev. A に発表した。

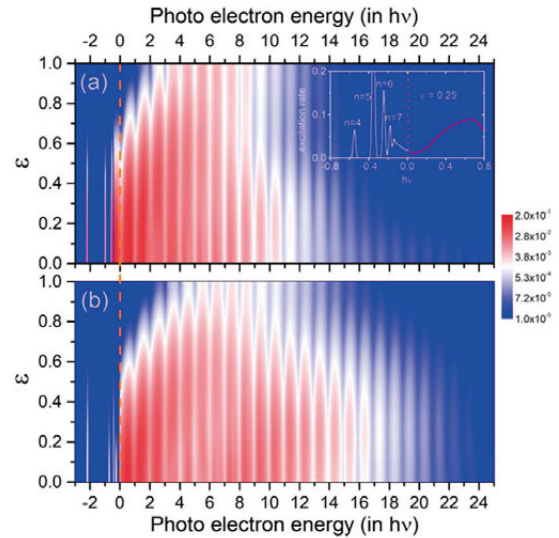


図 9: 楕円強レーザーにおける原子励起と電離確率と楕円度の関係。

## 【11】強レーザー補助の原子 X 線電離の異常な角度分布のメカニズムの解明（全）

最近、実験で強レーザー補助の原子X線電離電子の角度分布が測定された。その結果はこの分野でよく使われている強レーザー場近似の予測と異なるということが示された。強レーザー場近似の予測は図10のように、曲線ではなくて、直線である。その原因を調べるために、我々は理論計算を行った。電離された電子と親イオンとのクーロン相互作用の有無を比べて、図のように、その異常な角度分布はクーロン相互作用の影響であると明示された。その研究結果はPhys. Rev. Aに発表した。

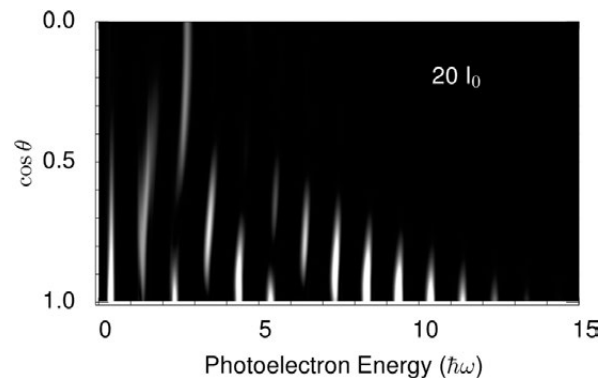


図 10 : Ar 原子の電離される電子の角度分布と光電子エネルギーの関係。

## 【12】強相関電子系における励起状態・レーザー誘起状態の研究（前島）

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電荷構造因子を厳密対角化などにより数値的に調べ、本来は電荷励起状態を観測する量である動的電荷構造因子にスピン励起状態起源のスペクトルピークが現れることを見出した。中でも 2 本足梯子系において 1 電子ポテンシャルの周期性により出現するスペクトル形状に大きな違いが現れることが分かった。特に  $\text{leg}$  方向に変調するがそれと直角方向に位相のそろった  $\text{in-phase}$  型ポテンシャルでは、スピン  $S=1$  の準粒子(triplon)を 2 つ含む 2-triplon 状態と呼ばれる連続準位帯の 1 重項状態が動的構造因子スペクトル  $N(k, \omega)$  に有限の寄与を有することを明らかにした(図 11)。これは非弾性中性子散乱実験で観測される 2-triplon の 3 重項状態のスペクトルと相補的な関係にあるものであり、梯子系のスピン励起状態に関する重要な知見を与えうると考えられる。

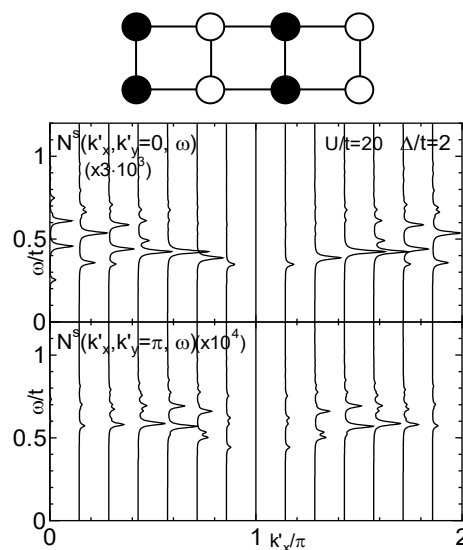


図 11 : (上) $\text{in-phase}$  型ポテンシャル、および(下)同ポテンシャルを有する 2 本足イオン性ハバード梯子模型における電荷動的構造因子  $N(k, \omega)$ 。

## 4. 教育

真鍋 大地（修士（工学））スピン渦誘起ループ電流モデルによる銅酸化物超伝導理論：波動関数一価性の束縛条件を課した計算方法の開発とラシュバスピン軌道相互作用に関する考察

大塩 耕平（修士）二次元トポロジカル絶縁体における高次高調波発生

駒木 悠平（修士）イオン性ハバードモデルにおける動的構造因子

## 5. 受賞、外部資金、知的財産権等

## 受賞

第 14 回（2020 年）日本物理学会若手奨励賞、佐藤駿丞、固体におけるアト秒電子ダイナミクス of 理論的研究、2020 年 3 月 16 日

## 外部資金

1. 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、全年度直接経費：177,500 千円（2019 年度直接経費：37,650 千円）
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、2016-2019 年度、全年度直接経費：59,547 千円（2019 年度直接経費：14,373 千円）
3. Q-LEAP 先端レーザーイノベーション拠点「次世代アト秒レーザー光源と先端計測技術の開発」、矢花一浩、分担、2018-2027 年度、全年度直接経費：22,727 千円（2019 年度直接経費：2,174 千円）
4. 科学技術振興機構、A-STEP「アイセーフ波長用高効率 Si 受光センサの開発」、矢花一浩、分担、2019-2020 年度、全年度直接経費：250 千円（2019 年度直接経費：250 千円）
5. 学術指導経費、株式会社住友金属鉱山、「ナノ粒子の光応答／光制御」、矢花一浩、2019 年度、全年度直接経費：909 千円（2019 年度直接経費：909 千円）
6. 科研費基盤（C）、山田篤志、代表、2019－2023 年度、全年度直接経費：2,100 千円（2019 年度直接経費：100 千円）
7. 科研費基盤（C）、野田真史、代表、2018-2020 年度、全年度直接経費：1,400 千円（2019 年度直接経費：100 千円）
8. 科研費若手、Arqum Hashmi、代表、2019-2020 年度、全年度直接経費：2,400 千円（2019 年度直接経費：1,300 千円）
9. 科研費基盤（C）、全曉民、代表、2016-2019 年度、全年度直接経費：3,700 千円（2019 年度直接経費：500 千円）

## 知的財産権

なし

## 6. 研究業績

### (1) 研究論文

#### A) 査読付き論文

1. Nicolas Tancogne-Dejean, Micael J. T. Oliveira, Xavier Andrade, Heiko Appel, Carlos H. Borca, Guillaume Le Breton, Florian Buchholz, Alberto Castro, Stefano Corni, Alfredo A. Correa, Umberto De Giovannini, Alain Delgado, Florian G. Eich, Johannes Flick, Gabriel Gil, Adrián Gomez, Nicole Helbig, Hannes Hübener, René Jestädt, Joaquim Jornet-Somoza, Ask



- H. Larsen, Irina V. Lebedeva, Martin Lüders, Miguel A. L. Marques, Sebastian T. Ohlmann, Silvio Pipolo, Markus Rampp, Carlo A. Rozzi, David A. Strubbe, Shunsuke A. Sato, Christian Schäfer, Iris Theophilou, Alicia Welden, Angel Rubio, "Octopus, a computational framework for exploring light-driven phenomena and quantum dynamics in extended and finite systems", *J. Chem. Phys.* **152**, 124119 (2020).
2. M. Lucchini, S.A. Sato, F. Schlaepfer, K. Yabana, L. Gallmann, A. Rubio, U. Keller, "Attosecond timing of the dynamical Franz-Keldysh effect", *J.Phys. Photonics***2**, Number 2(2020).
  3. A. Yamada, "Multiscale Coupled Maxwell's Equations and Polarizable Molecular Dynamics Simulation Based on Charge Response Kernel Model", *J. Chem. Phys.*, **152**, 094110 (2020).
  4. S. Yamada, K. Yabana, "Symmetry properties of attosecond transient absorption spectroscopy in crystalline dielectrics", *Phys. Rev. B*.**101**, 165128(2020).
  5. A. Hashmi, K. Nakanishi, T. Ono, "Graphene-based symmetric and non-symmetric magnetoresistive junctions", *J. Phys. Soc. Jpn.* **89**, 034708 (2020).
  6. K. Iida, M. Noda, "Electron transfer governed by light-matter interaction at meta-semiconductor interface", *npj Computational Materials* **6**, 5 (2020).
  7. S.A. Sato, Angel Rubio, "Exact exchange-correlation potential of effectively interacting Kohn-Sham systems", *Phys. Rev. A***101**, 012510 (2020).
  8. A. Yamada and K. Yabana, "Modulation of probe signal in coherent phonon detection revisited: Analytical and first-principles computational analyses", *arXiv:2004.09069* (2020).
  9. Yuta Hirokawa, Atsushi Yamada, Shunsuke Yamada, Masashi Noda, Mitsuharu Uemoto, Taisuke Boku, and Kazuhiro Yabana, "Ab-Initio Simulation of Light-Matter Interaction at the Atomic Scale in Fugaku", *SC20*, submitted.
  10. D. Chetty, R. D. Glover, B. A. deHarak, X. M. Tong, H. Xu, T. Pauly, N. Smith, K. R. Hamilton, K. Bartschat, J. P. Ziegel, N. Douguet, A. N. Luiten, P. S. Light, I. V. Litvinyuk, and R. T. Sang, "Observation of dynamic Stark resonances in strong-field excitation", *Phys. Rev. A***101**, 053402 (2020).
  11. W.C. Jiang, X.M. Tong, R. Pazourek, S. Nagele, and J. Burgdorfer, "Theory of bound state coherences generated by optical attosecond pulses", *Phys. Rev. A*, accepted.
  12. H. Koizumi, "Explanation of superfluidity using the Berry connection for many-body wave functions", *J. Supercond. Nov. Magn.*, (2020).
  13. H. Koizumi, "Possible Occurrence of Superconductivity by the  $\pi$ -flux Dirac String Formation Due to Spin-Twisting Itinerant Motion of Electrons", *Symmetry* **12**, 776 (2020).

14. T. Yatsui, S. Okada, T. Takemori, T. Sato, K. Saichi, T. Ogamoto, S. Chiashi, S. Maruyama, M. Noda, K. Yabana, K. Iida and K. Nobusada, "Enhanced photo-sensitivity in a Si photodetector using a near-field assisted excitation", *Communication Physics***2**, 62 (2019).
15. A. Yamada and K. Yabana, "Energy transfer from intense laser pulse to dielectrics in time-dependent density functional theory", *Euro. Phys. J. D***73**, 87 (2019).
16. A. Yamada and K. Yabana, "Multiscale time-dependent density functional theory for a unified description of ultrafast dynamics: Pulsed light, electron, and lattice motions in crystalline solids", *Phys. Rev. B***99**, 245103 (2019).
17. T. Takeuchi, M. Noda, and K. Yabana, "Operation of quantum plasmonic metasurfaces using electron transport through subnanometer gaps", *ACS Photonics* **6**, 2517 (2019).
18. I. Floss, C. Lemell, K. Yabana, and J. Burgdörfer, "Incorporating decoherence into solid-state time-dependent density functional theory", *Phys. Rev. B***99**, 224301 (2019).
19. M. Noda, K. Iida, M. Yamaguchi, T. Yatsui, K. Nobusada, "Direct wave vector excitation in an indirect band gap semiconductor of silicon with an optical near-field", *Phys. Rev. Applied* **11**, 044053 (2019).
20. S.A. Sato, P. Tang, M.A. Sentef, U. De Giovannini, H. Hübener, A. Rubio, "Light-induced anomalous Hall effect in massless Dirac fermion systems and topological insulators with dissipation", *New J. Phys.* **21**, 093005 (2019).
21. M. Volkov, S.A. Sato, F. Schlaepfer, L. Kasmi, N. Hartmann, M. Lucchini, L. Gallmann, A. Rubio, U. Keller, "Attosecondscreening dynamics mediated by electron localization in transition metals", *Nature Physics***15**, 1145-1149 (2019).
22. M. Chávez-Cervantes, G.E. Topp, S. Aeschlimann, R. Krause, S.A. Sato, M.A. Sentef, I. Gierz, "Charge density wave melting in one-dimensional wires with femtosecond subgap excitation", *Phys. Rev. Lett.* **123**, 036405 (2019).
23. S.A. Sato, J.W. McIver, M. Nuske, P. Tang, G. Jotzu, B. Schulte, H. Hübener, U. De Giovannini, L. Mathey, M.A. Sentef, A. Cavalleri, A. Rubio, "Microscopic theory for the light-induced anomalous Hall effect in graphene", *Phys. Rev. B* **99**, 214302 (2019).
24. S.A. Sato, "Photovoltaic effect from the viewpoint of time-reversal symmetry", *J. Phys. Soc. Jpn.* **88**, 115003 (2019).
25. X. Gao and X.M. Tong, "Coulomb effect on the dynamics of atoms in a strong elliptical laser field: unification of the excitation and ionization", *Phys. Rev. A***100**, 063424:1-8 (2019).
26. X.M. Tong, "Photoelectron angular distribution of atoms in pulsed XUV and IR fields", *Phys. Rev. A***99**, 043433:1-5 (2019).

27. K. Ueda, E. Sokell, S. Schippers, F. Aumayr, H. Sadeghpour, J. Burgdörfer, C. Lemell, X.M. Tong and et al., "Roadmap on photonic, electronic and atomic collision physics: I. Light-matter interaction", J. Phys. B: At., Mol. Opt. Phys. **52**, 171001 (2019).
28. Y. Komaki, Y. Iwase, S. Yanagimatsu, Y. Muta, N. Maeshima, and K. Hino, "Dynamical charge structure factor of a one-dimensional ionic hubbard Hubbard model in the low-energy region", J. Phys. Soc. Jpn. **88**, 054709 (2019).
29. Y. Watanabe, K. Hino, N. Maeshima, H. Petek, M. Hase, "Ultrafast asymmetric Rosen-Zener-like coherent phonon responses observed in silicon", Phys. Rev. B **99**, 174304 (2019).

## B) 査読無し論文

1. A. Yamada and K. Yabana, "First-principles electron dynamics simulation study of high intensity laser irradiation on crystal systems: Photon energy dependent energy transfer", EPJ Web of Conferences; **205**, 04020 (2019).
2. M. Uemoto, K. Yabana, S. A. Sato, Y. Hirokawa and T. Boku, "A first-principles simulation method for ultra-fast nano-optics", EPJ Web Conf. Volume **205**, 04023 (2019).
3. S. Yamada, M. Noda, K. Nobusada and K. Yabana, "First-principles method for propagation of ultrashort pulsed light in thin films", EPJ Web of Conferences **205**, 01003 (2019).
4. S. A. Sato, U. De Giovannini, S. Aeschlimann, I. Gierz, H. Hübener, A. Rubio, "Floquet states in dissipative open quantum systems", submitted.
5. Chang-Ming Wang, Nicolas Tancogne-Dejean, Massimo Altarelli, Angel Rubio, Shunsuke A. Sato, "Role of electron scattering on the high-order harmonic generation from solids", submitted.
6. Umberto De Giovannini, Hannes Hübener, Shunsuke A. Sato, Angel Rubio, "Direct measurement of electron-phonon coupling with time-resolved ARPES", submitted.
7. Jiaojian Shi, Edoardo Baldini, Simone Latini, Shunsuke A. Sato, Yaqing Zhang, Brandt Pein, Pin-chun Shen, Jing Kong, Angel Rubio, Nuh Gedik, Nelson, Keith, "Room Temperature Terahertz Electroabsorption Modulation by Excitons in Monolayer Transition Metal Dichalcogenides", submitted.
8. Dongbin Shin, Shunsuke A. Sato, Hannes Hübener, Umberto De Giovannini, Noejung Park, Angel Rubio, "Nonlinear phononics in 2D ferroelectric materials as dynamical amplification of electric polarization", submitted.
9. Y. Sanari, H. Hirori, T. Aharen, H. Tahara, Y. Shinohara, K. L. Ishikawa, T. Otobe, P. Xia, N. Ishii, J. Itatani, S. A. Sato, and Y. Kanemitsu, "Role of Nonlinear Virtual Population for High Harmonic Generation in Solids", submitted.

10. V. Wanie, H. Ibrahim, S. Beaulieu, N. Thiré, B. E. Schmidt, Y. Deng, A. S. Alnaser, I. V. Litvinyuk, X. M. Tong, F. Légaré, "Directional control of dissociative ionization by a two-colour laser field", EPJ Web of Conferences **205**, 09030 (2019).

## (2) 国際会議発表

### A) 招待講演

1. K. Yabana, "Ab-initio theory for propagation of extreme optical pulses in solids", 2nd Int. Workshop on Ultrafast Dynamics and Metastability, Georgetown Univ., Washington DC, USA, April 15-17, 2019.
2. K. Yabana, "Ab-initio theory for propagation of strong optical pulse in solids", XXXIst Int. Conf. on Photonic, Electronic, and Atomic Collisions (ICPEAC2019), Deauville, France, 23-30, Jul., 2019.
3. K. Yabana, "Time-dependent density functional theory for solids under strong laser field", 24th Int. Workshop on Quantum Systems in Chemistry, Physics, and Biology, Odessa, Ukraine, 18-24, Aug. 2019.
4. M. Uemoto, A. Yamada, and K. Yabana, "Maxwell+TDDFT multiscale method for light-propagation in solids", 27th International Conference on Advanced Laser Technologies, Prague, Czech Republic, Sept. 2019.
5. T. Takeuchi, M. Noda, and K. Yabana, "Linear and nonlinear optical responses of plasmonic metasurface with sub-nm gaps", 27th International Conference on Advanced Laser Technologies, Prague, Czech Republic, Sept. 2019.
6. K. Yabana, "Ab-initio Simulations for Propagation of Intense and Ultrashort Optical Pulse", OptoX-Nano 2019, Okayama, Dec.3, 2019.

### B) 一般講演

1. T. Takeuchi, M. Noda, K. Yabana, "Numerical Analysis of Quantum Plasmonic Metasurface by Time-Dependent Density Functional Theory", 19th International Conference on Numerical Simulation of Optoelectronic Devices, Ottawa, Canada, Jul.8-12, 2019.
2. M. Uemoto, S. Yamada, T. Takeuchi, Y. Hirokawa and K. Yabana, "Ab-initio large-scale calculation of laser interactions with nanoscale materials", MCRP-62, 11th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences, Tsukuba, Japan, Oct. 2019.
3. M. Uemoto and K. Yabana, "Development of Multiscale First-Principles Approach for Optical Response in Nanostructure", iSPN2019, Kobe, Japan, Nov. 13, 2019.

4. T. Takeuchi, M. Noda, and K. Yabana, "Refractive index variation of quantum plasmonic metasurface with sub-nm gaps", iSPN2019, Kobe, Hyogo, Japan, Nov. 13, 2019.
5. S. Yamada, M. Noda, K. Nobusada, and K. Yabana, "First-principles study for interaction of pulsed light with thin materials", iSPN2019, Kobe, Hyogo, Japan, Nov. 13, 2019.
6. M. Noda, K. Iida, M. Yamaguchi, T. Yatsui, and K. Nobusada, "Direct wave vector excitations of silicon with optical near fields", iSPN2019, Kobe, Hyogo, Japan, Nov. 13, 2019.
7. X.M. Tong and N. Toshima, "Abnormal photoelectron angular distribution of Aratoms in pulsed XUV and IR laser fields", XXXI International Conference on photonic, electronic and atomic collision, July 23-30, 2019 Deauville, France.
8. X. Gao and X.M. Tong, "Photoabsorption of atoms in a strong elliptical laser field", XXXI International Conference on photonic, electronic and atomic collision, July 23-30, 2019 Deauville, France.
9. S. Borbely, X.M. Tong, S. Nagele, J. Feist, I. Brezinova, F. Lackner, L. Nagy, K. Tokesi and J. Burgdorfer, "Energy loss of p and p in He: electron correlation effects", XXXI International Conference on photonic, electronic and atomic collision, July 23-30, 2019 Deauville, France.
10. D. Manabe, H. Koizumi, "Supercurrent generation by spin-twisting itinerant motion of electrons in a model for cuprate superconductors", International Conference on Frontiers of Correlated Electron Sciences, (Tokyo, Japan, May 29–31, 2019).
11. H. Koizumi, D. Manabe, "Appearance of a novel collective spin excitation in cuprate superconductors due to Rashba spin-orbit interaction and spin-twisting itinerant motion of electrons" Spectroscopies in Novel Superconductors 2019, (Tokyo, Japan, June 16–21, 2019).
12. H., D. Manabe, "Appearance of spontaneous current feeding state by Rashba spin-orbit interaction", 7th European conference on molecular magnetism (Firenze, Italy, September 15-19, 2019).
13. Yuhei Komaki, Nobuya Maeshima, and Ken-ichi Hino, "Dynamical Charge Structure Factor of the 1D Ionic Hubbard Model", FSP2019: FRONTIERS OF STATISTICAL PHYSICS, The University of Tokyo, June 7-8, 2019.

### (3) 国内学会・研究会発表

#### A) 招待講演

1. 矢花一浩, "大規模計算による光電磁場・電子・フォノンの第一原理シミュレーション", 第6回大型実験施設とスーパーコンピュータとの連携利用シンポジウム-物質構造の階層性とフォノン物性の理解-, 東京秋葉原 UDX, 2019年9月17日.



## B) その他の発表

1. 植本光治、"SALMON コードによる応用研究について"、JST-CREST 研究課題 + ポスト「京」サブ課題 + Q-LEAP 進捗報告・討論会「光・電子融合系の第一原理計算」、QST 関西光科学研究所、2019 年 4 月
2. 植本光治、"TDDFT による第一原理電子ダイナミクス計算とナノフォトニクスへの適用に向けて"、光量子科学連携研究機構 (UTripl) セミナー、2019 年 7 月 1 日.
3. 植本光治、"固体物質の光学応答第一原理計算～RNN による誘電応答学習の提案～"、MI<sup>2</sup>I・元素戦略・ポスト京・計算物質科学コンソ・合同 Working、2019 年 7 月 20 日.
4. 矢花一浩、"第一原理計算に基づく光科学ソフトウェア SALMON の開発と応用"、ポスト「京」重点課題（7）第 5 回シンポジウム、東京大学、2019 年 8 月 9 日
5. 植本光治、山田篤、矢花一浩、"大規模計算をもちいた極限パルス光・固体物質相互作用の第一原理シミュレーション"、ポスト「京」重点課題 7 第 5 回シンポジウム、文京区本郷、2019 年 8 月 9 日.
6. 野田真史、"第一原理計算によるシリコンの波数励起"、ポスト「京」重点課題 7 第 5 回シンポジウム、文京区本郷、2019 年 8 月 9 日.
7. 廣川祐太、植本光治、野田真史、矢花一浩、"A64FX プロセッサに対する電子動力学アプリケーション SALMON のコデザイン"、ポスト「京」重点課題 7 第 5 回シンポジウム、文京区本郷、2019 年 8 月 9 日.
8. 佐藤 駿丞、M. Volkov, F. Schlaepfer, L. Kasmi, N. Hartmann, M. Lucchini, L. Gallmann, U. Keller, A. Rubio, "チタン薄膜に対するアト秒過渡吸収分光の第一原理的解析", 日本物理学会 2019 年秋季大会、岐阜大学、2019 年 9 月 10 日.
9. 植本光治、蔵田真太郎、河口紀仁、矢花一浩、"第一原理計算によるパルス光とグラフィット薄膜の相互作用"、日本物理学会 2019 年秋季大会、岐阜、2019 年 9 月 12 日.
10. 山田俊介、矢花一浩、"結晶対称性と時間分解動的 Franz-Keldysh 効果の関係：理論と第一原理計算"、日本物理学会 2019 年秋季大会、岐阜、2019 年 9 月 10 日.
11. 竹内嵩、野田真史、矢花一浩、"サブ nm ギャップを有するプラズモニックメタ表面の屈折率変動機構の解明"、第 80 回応用物理学会秋季学術講演会、北海道、2019 年 9 月.
12. 山田篤志、矢花一浩、"マルチスケールシミュレーションで直接的に再現したコヒーレントフォノンに対するポンププローブ分光シグナルの解析"、第 13 回分子科学討論会、名古屋、2019 年 9 月 17 日.
13. 矢花一浩、竹内嵩、野田真史、"サブ nm ギャップを有するプラズモニックメタ表面の屈折率変動機構の解明"、第 80 回応用物理学会秋季学術講演会、北海道大学札幌キャンパス、2019 年 9 月 18 日.

14. 山田篤志、矢花一浩、"極限的パルス光とバルク物質の相互作用に対する第一原理計算"、第6回「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題成果報告会、品川、2019 年 11 月 1 日.
15. 山田篤志、"CRK 分極モデルを用いた Maxwell + MD マルチスケールシミュレーションの開発"、第 33 回分子シミュレーション討論会、名古屋、2019 年 12 月 9 日.
16. 竹内嵩、矢花一浩、"サブ nm ギャップを有するプラズモニックメタ表面の非線形光学応答解析 —ジェリウム模型を適用した時間依存密度汎関数理論による検討—"、第 67 回応用物理学会秋季学術講演会、2020 年 3 月 13 日(現地開催中止、予稿のみ).
17. 山田篤志、"デルを用いた Maxwell + MD マルチスケールシミュレーションの開発および分光測定系への適用"、日本物理学会第 75 回年次大会、名古屋大学、2020 年 3 月(現地開催中止、予稿のみ)
18. 山田俊介、矢花一浩、"薄膜における高次高調波発生の第一原理計算"、日本物理学会第 75 回年次大会、名古屋大学、2020 年 3 月(現地開催中止、予稿のみ).
19. 廣川 祐太、野田 真史、山田 俊介、山田 篤志、朴 泰祐、矢花一浩、"電子動力学アプリケーション SALMON のスーパーコンピュータ「富岳」に向けた最適化と性能評価"、第 173 回 HPC 研究会、札幌、2020 年 3 月(現地開催中止、予稿のみ)
20. 佐藤駿丞、"固体におけるアト秒電子ダイナミクス of 理論的研究"、日本物理学会年次大会、3 月 16-19 日
21. 佐藤駿丞、廣理英基、佐成晏之、金光義彦、Angel Rubio、"グラフェンにおける高次高調波発生の理論的解析"、日本物理学会年次大会、3 月 16-19 日
22. 真鍋大地、小泉裕康、"銅酸化物高温超伝導体における Rashba 相互作用から生じる新奇な集団スピン励起モード"、日本物理学会 2019 年秋季大会、岐阜大学、2019 年 9 月 10-13 日.
23. 小泉裕康、真鍋大地、"銅酸化物における自発的外部電流供給状態と超伝導"、日本物理学会 2019 年秋季大会、岐阜大学、2019 年 9 月 10-13 日.
24. 小泉裕康、"銅酸化物高温超伝導体を使った量子ビットの提案"、分野横断ワークショップ「量子コンピュータ研究開発の現在とこれから」、理化学研究所、2020 年 1 月 29 日.
25. 石岡大樹、小泉裕康、"銅酸化物超伝導の超伝導転移温度に対する新規なスピン励起の影響"、日本物理学会第 75 回年次大会 (3 月 16 日-19 日、インターネット公開) .
26. 小泉裕康、"多体波動関数より得られるベリー接続による、超流動性の説明"、日本物理学会第 75 回年次大会 (3 月 16 日-19 日、インターネット公開) .
27. 張博源、前島展也、日野健一、"レーザー駆動半導体量子井戸におけるフロケットポロジカル絶縁体 II"、日本物理学会 2019 年秋季大会、岐阜大学、2019 年 9 月 10-13 日.

28. 前島展也, 駒木悠平, 日野健一, "イオン性ハバード模型における低エネルギー励起状態 II", 日本物理学会 2019 年秋季大会、岐阜大学、2019 年 9 月 10-13 日.
29. 張博源、前島展也、日野健一、"フロケットポロジカル絶縁体におけるレーザー誘起バンド反転とエッジ状態"、日本物理学会第 75 回年次大会 (3 月 16 日-19 日、インターネット公開) .
30. 前島展也, 駒木悠平, 日野健一, "イオン性ハバード模型における低エネルギー励起状態 III", 日本物理学会第 75 回年次大会 (3 月 16 日-19 日、インターネット公開)

#### (4) 著書、解説記事等

### 7. 異分野間連携・産学官連携・国際連携・国際活動等

#### 異分野間連携 (センター内外)

1. 光科学ソフトウェア SALMON の開発にあたり、高性能計算システム研究部門の朴グループと密接な研究協力を行なっている。

#### 産学官連携

1. 株式会社住友金属鉱山に対して、SALMON を用いた光科学計算に関して学術指導を行った。来年度は共同研究に発展する予定である (矢花)。
2. 科学技術振興機構の A-STEP 経費により、「アイセーフ波長用高効率 Si 受光センサの開発」に関して、東京大学工学系研究科の八井准教授を中心として、筑波大の矢花、浜松ホトニクスを交えた研究を行った。

#### 国際連携・国際活動

1. アト秒光科学に関し、グラーツ工科大学 (オーストリア・グラーツ)、マックスプランク量子光学研究所 (ドイツ・ガルヒング)、及びバルセロナ大学 (スペイン) の実験グループと共同研究を行っている (矢花)。
2. 時間依存密度汎関数理論を用いた光と物質の相互作用に関する共同研究をウィーン工科大学 (オーストリア) の理論グループと行っている (矢花)。
3. H2020-MSCA-RISE (欧州の国際交流プロジェクト) による光と物質の相互作用の理論と計算に関わる国際ネットワーク形成プロジェクト ATLANTIC に基づく国際共同研究を、今年度より開始した。この枠組み、及び関連するプロジェクトで、以下の研究者がセンターに長期滞在した (矢花)。
  - (1) Tzevta Apostolova ソフィア大学 (ブルガリア) 6/14-7/12
  - (2) Thibault Derrien プラハ大学 (チェコ) 6/13-7/12

(3) François M.G.J. Coppens、 Laboratoire Physique Théorique (LPT)UNIVERSITÉ  
TOULOUSE III - Paul Sabatier (フランス) 9/16-12/15

(4) Anton Husakou、 Max Born Institute of Berlin (ドイツ)、10/10-11/11

(5) Guillaume Dechateau、 ボルドー大学 (フランス) 、10/27-11/8

4. Vanderbilt 大学 (米国) より、Justin Michael Malave 氏 (大学院生) が長期滞在し、研究交流を行った(6/17-8/13) (矢花)。
5. 強レーザー場における原子過程について、ウィーン工科大学の理論グループと共同研究を行っている。(全)
6. 楕円偏光強レーザー場における原子過程について、グリフィス大学の実験グループと共同研究を行っている。(全)
7. 国際テニユアトラック助教としてマックスプランク研究所物質構造ダイナミクス研究所(ドイツ・ハンブルク)の Angel Rubio 教授のグループに長期滞在し、光誘起超高速現象の第一原理的解析、及び第一原理計算コード Octopus の開発等の共同研究を行っている(佐藤)。
8. アト秒光科学に関して、チューリッヒ工科大学(スイス)、及びミラノ工科大(イタリア)の実験グループと共同研究を行っている(佐藤)。
9. 高強度 THz 分光に関して、マサチューセッツ工科大学の実験グループと共同研究を行っている(佐藤)。

## 8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

なし

## 9. 管理・運営

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

小泉：

(学内) 筑波大学全学計算機システム 3D サテライト管理, TIB チームリーダー

前島：

(センター内) 計算科学研究センター共同利用委員

(学内) 応用理工学類 e ラーニング委員

## 10. 社会貢献・国際貢献

矢花：

- ・平成31年度テニユアトラック普及・定着事業委員会委員。

小泉：

- ・ヤーン・テラー効果に関する国際会議、ステアリングコミッティー委員

## 11. その他

全：2019年4月1日～2019年9月27日、サバティカルで台湾国立大学、ウィーン工科大学、グリフィス大学に滞在し、強レーザー場に関する共同研究を行った。サバティカル中の研究成果として、ウィーン工科大学との共著論文一件が発表され、もう一件が掲載決定された。グリフィス大学との共著論文も一件発表された。