

IV. 量子物性研究部門

1. メンバー

教授	矢花 一浩、大谷 実
准教授	小泉 裕康、全 暁民、佐藤 駿丞(～2025.1.31)
講師	前島 展也
助教	萩原 聡
主任研究員	長谷川 太祐 (～2025.1.31)
研究員	黒田 文彬
学生	大学院生 9 名、学類生 5 名
客員教授	小野 倫也 (神戸大学大学院工学研究科)

2. 概要

本部門では、超電導体や強相関物質、トポロジカル物質、電気化学系など、幅広い物質を対象に、量子力学に基づく第一原理計算手法を駆使してその性質を理論的に解明・予測しています。特に、電極－電解質界面の電子状態解析や光と物質の相互作用の実時間シミュレーション、さらには新機能材料の設計などを通じて、持続可能な社会に資する基礎科学と応用技術の橋渡しを目指しています。

3. 研究成果

[1] バイアス電圧を印加した表面における表面応力の第一原理計算（萩原、大谷）

我々は、有効遮蔽媒質（ESM）法を利用して電極電位に依存した表面応力を計算する手法を開発し、その応用を行った。本手法は、密度汎関数法+projector augmented-wave 法の枠組みで電子状態計算を行う第一原理計算プログラムパッケージである QMAS (Quantum MAterials Simulator)コードに実装した。適用計算には、実際の系である Al(111)表面を用いた(図(a))。表面応力の電位依存性は、表面・界面における熱力学関係式を再現した(図(b))。さらに、層分解局所応力の結果から(図(c))、金属 ESM 側の最表面層 (25 層目) では、上に凸の二次関数型の電位依存性が見られた。これは静電容量が最表面層で発現していることに対応する。表面内部の層(24～19 層目)では、局所応力は電位に対して線形に依存し、その寄与は無視できないことがわかった。したがって、最表面層に加えて表面内部の層の寄与を考えることは、巨視的表面応力を正しく計算する上で重要である。

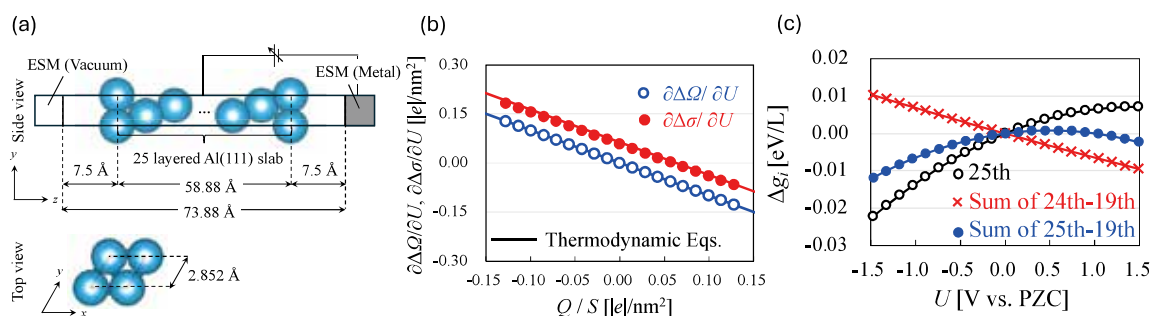


図1 (a) 計算セル。(b) 計算結果と熱力学関係式の比較。(c) 原子層分解した表面応力の電位依存性。

[2] C₂ 生成選択的な CO₂ 還元多元合金触媒探索のためのハイスループット密度汎関数 計算と証拠理論による探索最適化（黒田、大谷）

現在、我が国および諸外国は、温室効果ガスの一つである二酸化炭素の排出量と吸収量が均衡するカーボンニュートラルによる持続可能社会を目指す取り組みを行なっている。このために、「化石燃料使用により発生した CO₂を電気化学的に還元し、燃焼熱の高いエタノール C₂生成物合成燃料へ変換する（C₂ 選択的 eCO₂RR）」といった技術基盤の開発が重要となる。現在、Cu（銅）が C₂ 選択的 eCO₂RR 触媒のチャンピオン物質として知られているが、依然として選択性やエネルギー効率に課題が残されている。そのため、多元合金設計によって、より優れた触媒特性を引き出すことが重要な研究課題となっている。

そこで本研究では、第一原理に基づく密度汎関数(DFT)計算と機械学習手法である証拠理論を用い、C₂ 選択的 eCO₂RR 触媒のハイスループットスクリーニングを実施した。まず、初期のデータとして無機材料データベースである ICSD に登録された FCC および BCC 構造を持つ、三元系までの合金に対して、(100)および(110)面での CO および C の吸着エネルギーを計算し、それらの値に基づき、C₂選択性をもつ合金を推定した。さらに、そのデータを証拠理論の学習データとして、等組成四元系合金の探索とクリーニングを行った。その結果、最終的に 415 個の等組成四元系合金による有望な C₂選択的スラブを特定した。本研究で導入した証拠理論に基づくアプローチは、従来困難であったスラブ面と合金組成の膨大な組合せ空間（組合せ爆発）を回避しながら、効率的な探索を実現した点で特に有効である。また本研究は、理論計算と機械学習を融合したデータ駆動型科学の典型例とし

て、スーパーコンピュータの支援の下で、現実の触媒設計研究に適用可能なフレームワークを構築し、今後の材料開発に対して重要な指針を提供するものである。

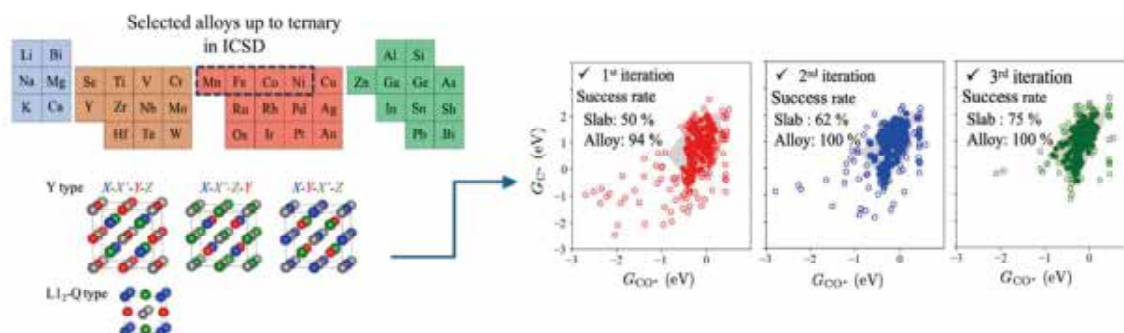


図 2 (左図) ハイスループット計算を行う元素の選択範囲とその等組成 4 元合金構造、(右図) 証拠理論に基づく等組成 4 元合金触媒探索の探索ステップごとの結果 (塗りつぶされた点は C2 選択的な eCO₂RR のスラブを示している)

[3] 電子・フォノン相互作用に起因する位相緩和過程の第一原理計算 (矢花)

アト秒科学など先端のレーザー科学研究が対象とするフェムト秒・アト秒時間スケールの超高速現象において問題となる緩和過程に対し、時間依存密度汎関数理論に基づく電子ダイナミクスの第一原理計算を行い、その物理的な理解を得ることを目的とする研究を進めている。数サイクルのフェムト秒光パルスやアト秒光パルスと物質の相互作用は、イオンの運動や電子間の衝突よりも短い時間スケールで起こることから、固定されたイオン配置のもとでの電子のバリスティックな運動という記述が有効であると考えられ、時間依存密度汎関数理論などの第一原理計算に基づく計算で正確な記述が可能となる。この緩和過程を記述し理解する最初のステップとして、線形光応答における電子とイオンの相互作用に起因する位相緩和過程に関する取り組みを進めた。

金属における電子とイオンの相互作用に起因する緩和過程の基本的な様相は、ドルーデ模型に現れる電子衝突時間により特徴付けられる。この過程に対し我々はこれまで、熱的な乱雑さを考慮したイオンのスーパーセル配置において線形感受率を時間領域で計算することにより、あるイオン配置をもつ単一のスーパーセル計算により 10fs 程度の緩和時間が得られることを明らかにしてきた。これは、スーパーセルに対する純粋状態計算が、位相緩和過程の情報を含むことを意味する。一方、従来行われてきた位相緩和過程の現象論的な記述では、しばしば混合状態にあるプリミティブセルの密度行列に着目した研究が行われてきた。このことから、スーパーセルとプリミティブセルの密度行列を対応づけるアンフォルディング処理を行うことが有効であるとの認識に至り、その定式化を行い数値計算のためのコード開発に取り組んだ。

[4] 斜め入射するパルス光と物質の非線形相互作用を記述する計算方法の開発（矢花）

光が平坦な物質に斜方入射して起こる現象は、電磁気学の基本的な課題である。例えば p 偏光した光は、ある入射角（ブリュスター角）で無反射となる。また金属と誘電体の界面では、表面プラズモンとの結合が起こる。これらは線形光学における現象であるが、高強度パルス光が入射し、非線形性が著しい場合にはどのような現象が起こるのかは興味深い。

昨年度、平面波が薄膜や表面に斜め入射する場合に対する電場と磁場を用いて記述するマクスウェル方程式を、時間1次元空間1次元の微分方程式として安定に解く方法を開発した。今年度はこの方法をマルチスケール Maxwell-TDDFT 計算法に導入し、斜方入射する平面波パルス光に対する計算コードの作成を行った。この方法を用いて、ギャップの小さい誘電体である Si、及び典型的な金属である Al に対して、入射パルス光の強度と入射角度、 s 及び p 偏光の場合について、反射率・吸収率の系統的な計算と分析を進めている。また、斜方入射光と、金属薄膜に発生する表面プラズモンポラリトン(SPP)との結合が起こるクレッチマン配置のもとで、入射角度に対する反射率の変化を調べた。SPP は通常の巨視的電磁気学で記述される現象であるが、開発した斜方入射マルチスケール Maxwell-TDDFT 計算法を用いると、SPP の非線形効果を調べることができる。10nm の Al 薄膜において予備的計算を行ったところ、当初予想しなかった著しい非線形が見出された。右図で、横軸が入射角、縦軸はパルス光の反射率を示す。通常の線形電磁気学で記述される弱いパルス光(10^9 W/cm^2)では、SPP との結合の効果は 42 度近辺における微細な角度変化として現れているが、強いパルス光(10^{12} W/cm^2)では、SPP との結合が 40 度付近を中心に著しい反射率の変化をもたらしている。これは、金属の示す非線形効果である可飽和吸収により光の吸収率が減少することで、SPP が顕著に表れたものと予想される。

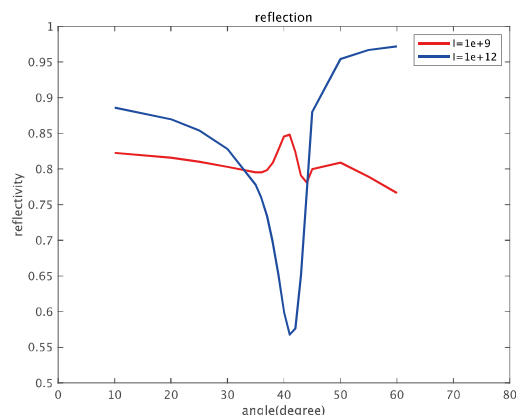


図:3 10nm の Al 薄膜を持つクレッチマン配位での光の反射率の角度依存性に対するマルチスケール Maxwell-TDDFT 計算の結果。2つの異なる強度のパルス光 (10^9 , 10^{12} W/cm^2) に対して。

[5] スピン渦誘起ループ電流を利用した量子ビット（田谷、高津、小泉）

我々は銅酸化物高温超伝導の超伝導機構としてスピン渦誘起ループ電流を電流要素とする超伝導理論を提唱している。この理論は、BCS 理論では説明出来ない銅酸化物で観測されている主な実験事実を説明する。そして、このスピン渦誘起ループ電流は量子ビットとして使用可能であると予想される。現在、スピン渦誘起ループ電流の実験による確証とそれを利用した量子コンピュータ実現の為の研究を行っている。以下最近出版された論文の結果に基づき成果を報告する（Taya, H., Takatsu, Y. & Koizumi, H. Toward the Detection of

Spin-Vortex-Induced Loop Currents in a Single Bilayer BiSrCaCuO Thin Film and Their Possible Use as Qubits: Model Calculations for Three Nano-island Architecture. J Supercond Nov Magn 38, 132 (2025). <https://doi.org/10.1007/s10948-025-06960-5>)。銅酸化物 $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ (Bi-2212) は、劈開により良質な CuO_2 2重層を取り出すことができ、それはバルクと同じ超伝導転移温度をもつ。この良質な2重層をモデル化し、スピン渦誘起ループ電流の実験による確証とそれを利用した量子コンピュータ実現の為のシミュレーションを行った。スピン渦誘起ループ電流が表面から数ナノメートル離れたところに 100mT 程度の表面垂直方向の磁場を作ることが示された。この磁場は、現在の実験能力で十分検知可能である。従って、スピン渦誘起ループ電流のパターンの変化による磁場を測定することにより、スピン渦誘起ループ電流の実験による確証が達成可能であると結論された。また、外部電流を印加することにより、異なるスピン渦誘起ループ電流の量子状態間をランダウ=ゼーナー遷移により行き来できることが示された。下図に示されているように、異なる量子状態はシーム状に交差し、このシームを跨いだ遷移により量子状態の制御が可能となる。このことは、これらの量子状態を量子ビットとして、量子コンピュータが実現できる可能性があることを示している。

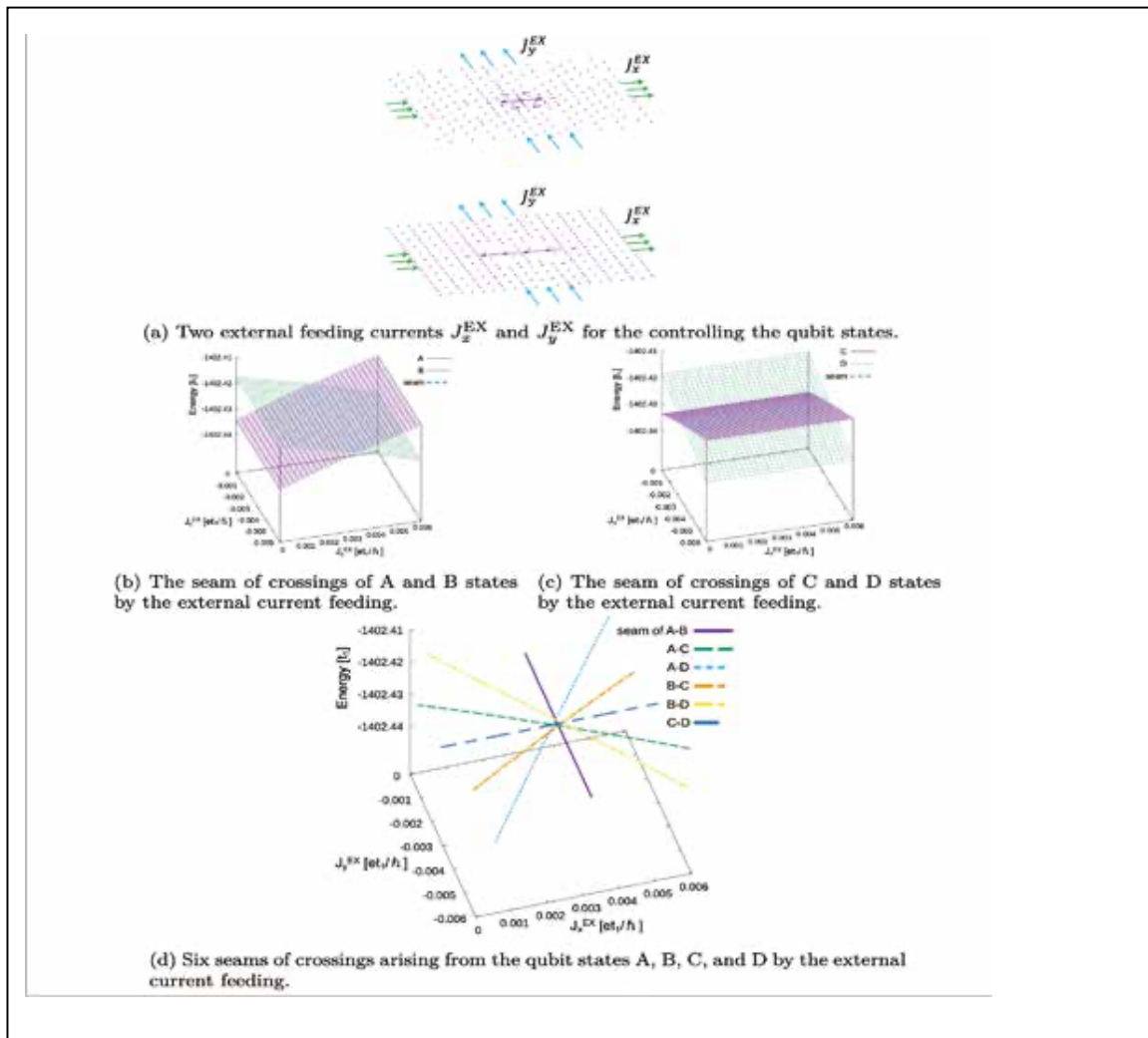


図 4. (a) 銅酸化物 Bi-2212 の薄膜 2 層による量子ビット。x 方向と y 方より外部電流を印加し、量子ビットの状態を操作する。(b) 量子ビット状態 A と B のエネルギーの変化。状態の交差するシームが存在する。(c) 量子ビット状態 C と D のエネルギーの変化。状態の交差するシームが存在する。(d) 量子ビット状態 A, B, C, D の状態が作るシームに集合。シームを利用しランダウ=ゼーナー遷移により量子状態の制御が可能。

[6] 銅酸化物高温超伝導機構解明への標準理論を超える新しい超伝導理論（小泉）

多電子波動関数から創発されるベリー接続を取り入れた、超伝導を含む電気伝導理論を構築中であるが、このベリー接続より電子に働く力を計算すると、通常のローレンツ力以外の力が表されることが示された。それら、`運動エネルギーの勾配による力’、`化学ポテンシャルの勾配による力’、`トポロジカルに保護されたループ電流を生成する力’である。特に、運動エネルギーの勾配による力は、ロンドンモーメントを作る回転電流の向心力を正しく与え

る。この向心力は BCS 理論に基づく超伝導理論は求めることができなかったものである。また、磁場中の超伝導-常伝導転移の際に界面に移動を説明する為の力のバランスも正しく与えることが示された。この力のバランスは、BCS 理論に基づく超伝導理論は求めることができなかったものである。さらに、化学ポテンシャルの勾配による力は、ポインティングベクトルに基づくエネルギーの流れを自然なものにすることが示された。これ までのローレンツ力だけによる結果では、不自然なエネルギーの流れになることが知られていた。本研究の成果は、[H. Koizumi, “Constrained Hamiltonian dynamics for electrons in magnetic field and additional forces besides the Lorentz force acting on electrons”, Hiroyasu Koizumi, J. Phys. A: Math. Theor. 57 435304 (2024), DOI 10.1088/1751-8121/ad8199]として出版した。

[7] 強相関物理系としての自然言語と量子コンピュータによる自然言語処理

(Hirankarn, Iqbal, 伊禮, 堀内, 小泉)

量子コンピュータのキラーアプリとして自然言語処理について研究を行っている。文は単語の集まりであるが、その意味は単語の単独の意味の寄せ集めではなく、相互に強く影響を及ぼしあった、相関の強いものとなる。これは、強相関電子系が電子個々の性質を超えた集団的な振る舞いにより種々の興味深い物性を示すことと類似している。自然言語を情報物理系と捉えれば、どちらも強相関物理系としての側面を持つ。量子情報理論では、単語を量子状態の単位とし、文をそれらがエンタングルしてできた集団的量子状態とみる。量子コンピュータ用の自然言語処理アプリとして lambeq が存在するが、我々は、この基本機能を利用し、そしてさらに高次の機能を追加し、古典コンピュータを上回る自然言語処理能力を目指したアプリの構築を目指している。特に英語以外の言語に関しての処理能力の向上を目指し、文を量子回路に書き直し、量子操作を可能とする為のリーダを開発中である。

[8] エキゾチック原子における軌道崩壊とそのダイナミクスへの影響（全）

密度汎関数理論(DFT)を用いてミュオン Ar 原子のエネルギー構造を研究し、ミュオン軌道が臨界角運動量 l_c で図 5 のように、崩壊することを発見した。時間依存シュレーディンガー方程式(TDSE)と単一活性粒子近似を用いた古典軌道モンテカルロ法(CTMC)を用いて状態指定捕獲確率を計算し、この上限値の存在を確認した。古典軌道エネルギーと主量子数の対応付けを変更することで、TDSE 法と CTMC 法で得られた状態指定ミュオン捕獲確率に妥当な一致が得られた。原子モデルポテンシャルからエキゾチック希原子の l_c を推定する簡単な方法を提案する。推定された値は DFT によって計算された値と一致した。本研究は国際共同研究結果として、科学雑誌『Physical Review Letters **134**, 193001 (2025)』に発表した。

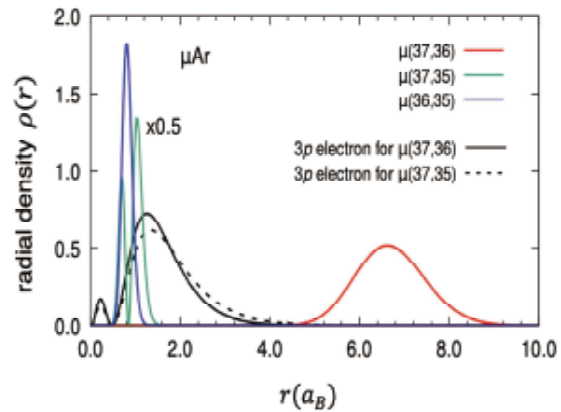


図 5: DFT によって計 $\mu\text{Ar} (n_\mu, l_\mu) = (37, 35)$ 、 $(36, 35)$ および 3p 電子軌道[実線 $(37, 36)$ または破線 $(37, 35)$ のミュオン]の動径密度。

[9] 分光学的に弱い遷移の増強（全）

量子状態間の弱い遷移は一般に実験的な検出が困難である。遷移行列要素の 2 乗でスケールリングする小さな断面積のため、分光測定は特に競合するバックグラウンド過程が存在すると失敗する。ここでは、このスケールリング則を破り、同じ励起状態へのより強いレーザー結合経路を利用することによって遷移確率を高める一般的なアプローチを紹介する。ヘリウム原子のアト秒遷移吸収分光によって、このコンセプトを実験的に実証する。基底状態 $1s2$ から弱く結合した二重励起状態 $2p3d$ と $sp2,4$ -状態への準禁制遷移が著しく増強された。単一光子で抑制された遷移の増強は、生命科学や化学科学における複雑な分子 1 のスペクトル診断から、新しい物理の探索における準安定原子核の弱い遷移の精密分光まで、広く応用が可能である。本研究は国際共同研究結果として、科学雑誌『Nature Communications』に掲載決定。

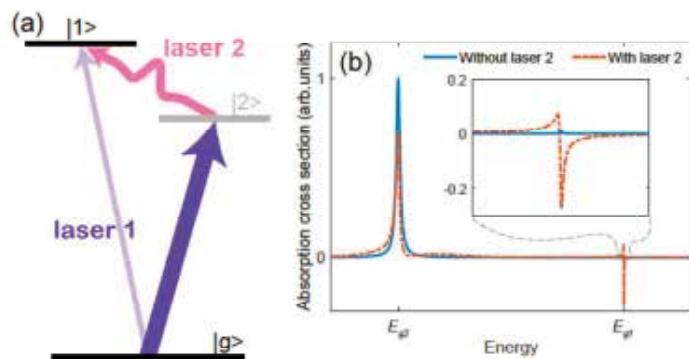


図 6: 分光学的に弱い遷移を増強する概念の概略図。

[10] レーザー誘起3次元フロケワイル半金属（前島）

通常の絶縁体に高強度レーザーを照射した場合に発現するレーザー誘起フロケトポロジカル状態について数値的解析を行った。絶縁体を記述する理論模型である3次元2バンド模型に対してレーザー電場を導入した場合に出現するフロケワイル半金属特有の物性について数値対角化法によって調べた。特に、円偏光レーザー誘起フロケワイル半金属において、Hartree-Fock (HF) 近似の範囲内で電子間相互作用の効果を取り込んだ場合のフロケ準粒子の分散曲線などの物理量の解析を行い、その結果、Hubbard 型 on-site クーロン斥力が存在する場合でもフロケ状態の親バンド(赤・青実線)やフォトンサイドバンド(黒実線)の交差によるワイル半金属状態が発現することを確認できた。加えて電子相関の無い場合ではバンド交差の無かったパラメータ領域においても新たにバンド交差が発現する場合があることを新たに見出した。

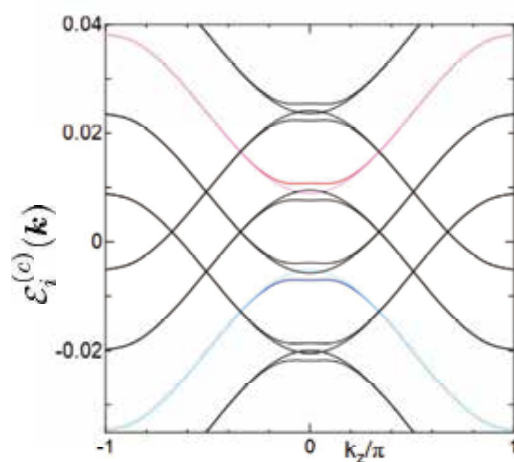


図 7: Γ -Z line ($k_x=k_y=0$) 上の分散曲線. $U/|tz|=0.5$. U は Hubbard 型 on-site クーロン斥力、 tz は z 方法の飛び移り積分、エネルギーは原子単位系(a.u.)表示

[11] ダイヤモンドに対するアト秒過渡反射分光の第一原理計算（佐藤）

近年のレーザー技術の発展により、高強度な光によって駆動される固体中の電子ダイナミクスをアト秒の時間分解能で観測することが可能になってきた。その一方で、観測される現象の微視的機構を理解することは難しく、量子力学に基づく第一原理計算が重要な研究手法となっている。本研究では、ミラノ工科大学の実験グループとの共同研究により、ダイヤモンドに対するアト秒過渡吸収分光実験およびその第一原理計算を行い、光が誘起する過渡的光学応答とその微視的機構を解明した。その結果、これまで考えられてきた光が駆動するバンド内遷移およびバンド間遷移に加え、それらの非線形な結合効果が固体の過渡的光学応答に重要な役割を果たしていることを明らかにした。本研究成果は、論文 “Attosecond Virtual Charge Dynamics in Dielectrics” として Nature Photonics 誌に掲載されている。

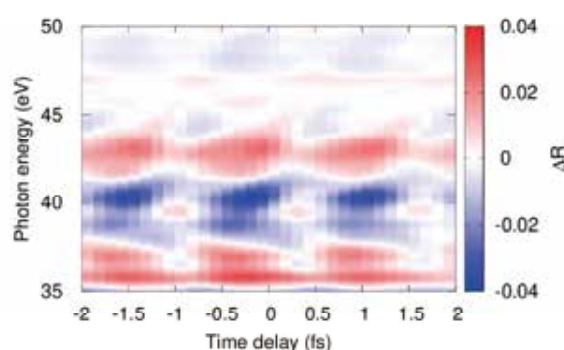


図 8: TDDFT 計算によって得られたダイヤモンドのアト秒過渡反射スペクトル。

4. 教育

1. Hirankarn Nicha, 総合理工学学位プログラム PBL (Project-based Learning) , “Quantum-enhanced Feature Spaces and Binary Classification Problems in Universal Natural Language Processing”
2. 伊禮新生アレキザンダー,卒業研究,“日本文の量子自然言語処理による二値分類”
3. 堀内 実, 卒業研究,“Quantum Natural Language Processing モデルによる日本語文 分類”
4. 田谷隼十, 修士(工学),“銅酸化物超伝導体薄膜におけるスピン渦誘起ループ電流の磁場の観測及び量子ビットへの応用に関する理論研究”
5. 笠原 杏太 (修士論文) フロケワイル半金属における光学伝導度の有効モデルによる解析
6. 荻込 剛琉 (修士論文) フロケワイル半金属における光学感受率
7. 後閑 湧志 (修士論文) 相関するフロケワイル半金属におけるフロケ状態の寿命
8. 山口 仁誠 (修士論文) フロケワイル半金属における電子間相互作用の効果

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

受賞

該当なし

外部資金

1. 大谷実、富岳成果創出加速プログラム「物理-化学連携による持続的成長に向けた高機能・長寿命材料の探索・制御」 (2023-2025) 直接経費 18,000 千円
2. 大谷実、A-STEP (育成型) 「水電解電極として世界最高活性を示す非金属触媒の技術革新」 (2022-2024)、直接経費 13,000 千円
3. 大谷実、基盤研究 S 「孤立分子・孤立軌道の特異性に基づく蓄電材料機能の革新」 (2020-2024) 直接経費 19,000 千円
4. 矢花一浩、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：22,727,000 円 (2024 年度直接経費：2,472,000 円)
5. 矢花一浩、日本学術振興会科学研究費・基盤研究 (C) 「フェムト秒パルスと物質の相互作用における緩和メカニズムの第一原理計算による解明」、2024-2027 年度、全年度直接経費：3,500,000 円 (2024 年度直接経費：700,000 円)
6. 全曉民、基盤研究 C、代表、令和 6 年、390 千円/(総額：4160 千円)、
Coherent Control of Atomic Excitation in Strong Fields
7. 佐藤駿丞、光科学技術研究振興財団研究助成金「光駆動非平衡定常状態を利用した物性制御理論の構築」 (2024) 直接経費 600 千円

8. 佐藤駿丞、科研費基盤 B「THz メタマテリアル共振器によるフォノン強結合状態の実現と物性制御への応用」 (2021-2024) 直接経費 1,600 千円
9. 前島展也、科研費:基盤研究(C)、代表、2024 年度、4,680 千円(2024 年度: 2,860 千円)、「光共鳴励起により誘起されるフロケワイル半金属の創成と物性の解明」
10. 萩原聡、科研費若手「半無限固液界面における第一原理計算手法の開発とその応用」 (2022-2026) 直接経費 2,900 千円
11. 黒田文彬、科研費若手「第一原理に基づく機械学習フェーズフィールド法の開発と構造・電池材料組織への応用」 (2023-2028) 直接経費 700 千円

知的財産権

該当なし

6. 研究業績

(1) 研究論文

A) 査読付き論文

1. A. Yamada, K. Yabana, “Interaction of intense ultrashort laser pulse with solid targets: A systematic analysis using first-principles calculations” , Phys. Rev. B 109, 245130 (2024) DOI:10.1103/physrevb.109.245130
2. Z. Ruzie, K. Yabana, A. Husakou, “Pulse compression by photoexcitation-induced dynamics of Bragg mirrors”, Phys. Rev. A 111, 043506 DOI:10.1103/PhysRevA.111.043506
3. A. Mathew, S. Kruk, S. Yamada, K. Yabana, A. Kheifets, “First_principles simulations of high-order harmonics generation in thin films of wide bandgap materials”, J. Opt. Soc. America B41, 1665 (2024). DOI: 10.1364/JOSAB.512444
4. A. Husakou, Z. Ruziev, K. Koraboev, F. Morales, M. Richter, K. Yabana, “Benchmarking of analytical photoionization models for solids using photoionization-induced reflection”, Phys. Rev. A110, 063511 (2024). DOI: 10.1103/PhysRevA.110.063511
5. M.U. Farooq, A. Hashmi, M. Tani, K. Yabana, K.L. Ishikawa, K. Huang, T. Otobe, “Strong field optical hall effect in 2D Weyl semimetal”, DOI: 10.48550/arXiv.2407.00974
6. A. Hashmi, M. Umar Farooq, M. Tani, K. Yabana, T. Otobe, K.L. Ishikawa, “Ultrafast Optical Control of Multi-Valley States in 2D SnS”, DOI: 10.48550/arXiv.2503.09092.
7. Satoshi Hagiwara, Shoji Ishibashi, and Minoru Otani, “Bias-dependent surface stress by density functional theory combined with the effective screening medium method”, Phys. Rev. B.110.155409 DOI: 10.1103/PhysRevB.110.155409

8. Fumiaki Kuroda, Masaya Ibe, and Minoru Otani, “Screening multicomponent alloys using evidence theory and high-throughput DFT calculations for C2-selective eCO₂RR”, *Journal of Physical Chemistry C* 128, 17302-17312 (2024). DOI: 10.1021/acs.jpcc.4c04180
9. Kuan-Yu Lin, Mei-Ru, Lai, Minoru Otani, Tsuyoshi Miyazaki, Jyh-Chiang Jiang, “Assessing Ni₂(dobpdc) anchoring for mitigating lithium polysulfide dissolution in lithium-sulfur batteries”, *Journal of Physical Chemistry C* 128 DOI: 10.1021/acs.jpcc.4c03165
10. H. Koizumi, “Reply to Comment on ‘Reversible superconducting-normal phase transition in a magnetic field: the energy-momentum balance including the velocity field of the Berry connection from many-body wave functions’”, *Phys. Scr.* 99, 107001 (2024). DOI: 10.1088/1402-4896/ad72a9
11. H. Koizumi, “Constrained Hamiltonian dynamics for electrons in magnetic field and additional forces besides the Lorentz force acting on electrons” , *J. Phys. A: Math. Theor.* 57, 435304 (2024). DOI: 10.1088/1751-8121/ad8199
12. H. Taya, Y. Takatsu, H. Koizumi “Toward the detection of spin-vortex-induced loop currents in a single bilayer Bi₂Sr₂CaCu₂O_{8+δ} thin film and their possible use as qubits: Model calculations for three nano-island architecture”, *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism* 38 DOI: 10.1007/s10948-025-06960-5
13. X. M. Tong, K. Tokesi, D. Kato, T. Okumura, S. Okata and T. Azuma, “Orbital Collapse in Exotic Atoms and Its Effect on Dynamics”, *Phys. Rev. Lett.* 134, 193001:1-6(2005) DOI: 10.1103/PhysRevLett.134.193001
14. N. Maeshima and K. Hino, “Multi-triplon Excitations of Hubbard Ladders with Site-dependent Potentials”, *J. Phys. Soc. Jpn.* 93, 054707 (2024). DOI : 10.7566/JPSJ.93.054707
15. R. Zhang, K. Hino, N. Maeshima, H. Yogemura, and T. Karikomi, “Laser induced surface magnetization in Floquet-Weyl semimetals”, *Phys. Rev. B* 108, 155308 (2023). DOI: 10.1103/PhysRevB.108.155308
16. Shunsuke A. Sato, Angel Rubio, “Limitations of mean-field approximations in describing shift-current and injection-current in materials”, *Phys. Rev. B* 109, 195205 (2024) DOI: 10.1103/PhysRevB.109.195205
17. Wenwen Mao, Angel Rubio, Shunsuke A. Sato, “Nonlinear Current Injection in Hexagonal Boron Nitride using Linearly Polarized Light in a Deeply Off-Resonant Regime”, *Advanced Optical Materials* 2400651 (2024) DOI: 10.1002/adom.202400651
18. Kotaro Nakagawa, Wenwen Mao, Shunsuke A. Sato, Hiroki Ago, Angel Rubio, Yoshihiko Kanemitsu, and Hideki Hirori, “Hot electron effect in high-order harmonic generation from

graphene driven by elliptically polarized light”, APL Photonics 9, 076107 (2024) DOI: 10.1063/5.0212022

19. Bethany R. de Roulet, Lorenz Drescher, Shunsuke A. Sato, Stephen R. Leone, “Initial electron thermalization in metals measured by attosecond transient absorption spectroscopy”, Phys. Rev. B 110, 174301 (2024) DOI : 10.1103/PhysRevB.110.174301
20. Alfred Zong, Sheng-Chih Lin, Shunsuke A Sato, Emma Berger, Bailey R Nebgen, Marcus Hui, BQ Lv, Yun Cheng, Wei Xia, Yanfeng Guo, Dao Xiang, Michael W Zuerch, “Core-level signature of long-range charge-density-wave order and short-range excitonic correlations probed by attosecond broadband spectroscopy”, DOI: 10.48550/ arXiv.2407.00772

B) 査読無し論文

1. 萩原聡、石橋章司、大谷実, “有効遮蔽媒質法によるバイアス電圧に依存した表面応力の第一原理的研究”, 表面技術, 76 巻 3 号 pp. 115-122 (2025).

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

1. Shunsuke A. Sato, “First-principles electron dynamics calculations for light-induced ultrafast phenomena”, ALTA 2024, 2024.05.02-04, Jeju, Korea
2. T. Takeuchi, S. Yamada, K. Yabana, “Computational Electromagnetics in Atomic Scale: First-Principles Approach”, 10th Int. Conf. On Antennas and Electromagnetic Systems (AES), Rome Italy, June 25-28, 2024.
3. T. Takeuchi, S. Yamada, K. Yabana, “Quantum Effects in Plasmonic/Nonlinear Meta-Surfaces: Development and Applications of Maxwell-TDDFT Method”, 14th Int. Conf. on Metamaterials, Photonic Crystals and Plasmonics, Toyama, Japan, July 16-19, 2024.
4. K. Yabana, “TDDFT for Nonlinear/Nonlocal Light-Matter Interaction”, One day workshop on TDDFT, ISSP, Univ. Tokyo, July 23, 2024.
5. S.A. Sato, “First-principles electron dynamics calculations for attosecond phenomena and nonlinear optics”, One day workshop on TDDFT, ISSP, Univ. Tokyo, July 23, 2024.
6. X. M. Tong, “Theory on Dynamics of Atoms in Strong Laser Field”, 32nd Summer School and International Symposium on the Physics of Ionized Gases, Belgrade, Serbia, Aug 26-30, 2024 (Plenary Talk).
7. Reintsema, T. Sato, D. R. Schmidt, K. Shimomura, P. Strasser, D. S. Swetz, T. Takahashi, S. Takeda, S. Takeshita, M. Tampo, H. Tatsuno, X. M. Tong, Y. Toyama, J. N. Ullom, S. Watanabe, S. Yamada, and T. Yamashita, “X-ray spectroscopy of highly charged muonic

- atoms with transition-edge sensor microcalorimeters”, 21st Highly Charged Ions Conference, Egmond aan Zee, Netherlands, Sept 1-6, 2024 (invited talk).
8. X. M. Tong, D. Kato, T. Okumura, X. Gao, S. Okada, N. Nakamura, T. Azuma, “Theories on the Polarization of Dielectronic Recombination and Structures of Muonic Highly Charged Ions”, 21st Highly Charged Ions Conference, Egmond aan Zee, Netherlands, Sept 1-6, 2024.
 9. T. Okumura, T. Azuma, D. A. Bennett, W. B. Doriese, M. S. Durkin, J. W. Fowler, J. D. Gard, T. Hashimoto, R. Hayakawa, Y. Ichinohe, P. Indelicato, T. Isobe, S. Kanda, D. Kato, M. Katsuragawa, N. Kawamura, Y. Kino, N. Kominato, Y. Miyake, K. M. Morgan, H. Noda, G. C. O’Neil, S. Okada, K. Okutsu, N. Paul, C. D. Reintsema, T. Sato, D. R. Schmidt, K. Shimomura, P. Strasser, D. S. Swetz, T. Takahashi, S. Takeda, S. Takeshita, M. Tampo, H. Tatsuno, X. M. Tong, Y. Toyama, J. N. Ullom, S. Watanabe, S. Yamada, and T. Yamashita, “X-ray spectroscopy of highly charged muonic atoms with transition-edge sensor microcalorimeters”, 21st Highly Charged Ions Conference, Egmond aan Zee, Netherlands, Sept 1-6, 2024
 10. H. Koizumi, “Tanabe-Sugano diagram and holonomic quantum phase transition”, invited, 70 years of the Tanabe-Sugano diagrams September 10-12, 2024, Nishiwaseda campus, Waseda University, Tokyo
 11. K. Yabana, “Ab initio description for propagation and dephasing in ultrafast and nonlinear photonics”, XII Ultrafast Dynamics & Metastability and Ultrafast Bandgap Photonics Conference, Tucson, USA, 2024.9.25-27
 12. K. Yabana, “Ab initio theory and computations for nonlinear/nonlocal nano-photonics”, 2nd Conf. On Nonequilibrium and Ultrafast Quantum States, Dongguan, China, 2024.10.22-26
 13. Shunsuke A. Sato, “Quantum Electron Dynamics Calculation for Attosecond Phenomena”, The 2nd International Conference on Nonequilibrium and Ultrafast Quantum States (NUQS-2024), China, October 22-26, 2024
 14. K. Yabana, “Ab initio simulation of laser-matter interaction from microscopic to macroscopic”, Seminar at Inst. Lumiere Matiere, Univ. Lyon 1, 2024.11.5
 15. K. Yabana, “Maxwell-TDDFT simulation: method and applications”, Strong Matter-Field Interactions and Breakthrough Simulations of Future Semiconductor, Ulsan, Korea, 2024.11.14
 16. Shunsuke A. Sato, “Quantum Electron Dynamics Simulation for Attosecond Phenomena”, Strong Matter-Field Interactions and Breakthrough Simulations of Future Semiconductor, South Korea, November 14-15, 2024

17. Shunsuke A. Sato, “Time-dependent density functional theory for real-time electron dynamics in solids”, New Trends in Condensed Matter Theory 2024, Institute for Solid State Physics, University of Tokyo, December 9-11, 2024
18. M. Otani, “Multi-Scale Simulations for Interfacial Electrochemical Processes”, 12th Singapore International Chemistry Conference, Changi, Singapore, 2024.12.11
19. K. Yabana, “Ab initio simulation of laser-matter interaction from microscopic to macroscopic”, 46th Computational Materials Design Workshop, online, 2025.2.17-21.
20. K. Yabana, “Time Dependent Density Functional Theory for Extremely Nonlinear Optics”, 3rd Workshop on Density Functional Theory, RIKEN Kobe, 2025.3.25-27.

B) 一般講演

1. Satoshi Hagiwara, Shoji Ishibashi, Minoru Otani, “First-principles simulation for bias-dependence of surface stress on Al (111) surface”, The 10th International Symposium on Surface Science, ISSS-10
2. Nobuya Maeshima and Ken-ichi Hino, “Multi-triplon states of two-leg ladders with site-dependent potentials”, NFAM2024, August 5-9, 2024, Hokkaido University (poster)

(3) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

1. 佐藤駿丞、「時間依存密度汎関数理論に基づく第一原理アト秒電子ダイナミクス計算」、物性研究所スパコン共同利用・CCMS 合同研究会「計算物質科学の現在と未来」、2024.04.3-4, 東京大学柏キャンパス物性研究所
2. 大谷実、「密度汎関数法と古典溶液論のハイブリッドシミュレーションを用いて電気化学を理解する」、Quloud 入門セミナー 電池・電気化学編(ハイブリッド)、2024.05.31、Qumix 本社
3. X. M. Tong, D. Kato, T. Okumura, X. Gao, S. Okada, N. Nakamura, T. Azuma, “Polarization induced by the interference of dielectronic and radiative recombinations for highly charged ions”, 2024年9月16～19日、第79回日本物理学会 北海道大学 札幌キャンパス.
4. 奥村拓馬, 東俊行, D.A. Bennett, W.B. Doriese, M.S. Durkin, J.W. Fowler, J.D. Gard, 橋本直, 早川亮大, 一戸悠人, P. Indelicato, 磯部忠昭, 神田聡太郎, 加藤太治, 桂川美穂, 河村成肇, 木野康志, 小湊菜央, 三宅康博, K.M. Morgan, 野田博文, G.C. O'Neil, 岡田信二, 奥津賢一, N. Paul, C.D. Reintsema, 佐藤寿紀, D.R. Schmidt, 下村浩一郎, P. Strasser, C. D.S. Swetz, B. 高橋忠幸 F, 武田伸一郎, 竹下聡史, 反保元伸, 竜野秀行, X.M. Tong, 外山裕一, J.N. Ullom, B. 渡辺伸, 山田真也, 山下琢磨, “TES 型 X 線マイクロカロリメータによ

るミュオニック多価イオン形成メカニズムの解明”, 2024年9月16～19日、第79回日本物理学会 北海道大学 札幌キャンパス

5. 矢花一浩, “原子スケールからみた光と物質の相互作用-実時間第一原理計算の進展-”, 強光子場科学研究懇談会 2024年度総会、東京大学理学部化学本館、2024.10.19
6. 大谷実, “電気化学界面シミュレーションで加速する材料開発: HPC の産業利用を目指して”, 第7回 HPCI コンソーシアムシンポジウム, 品川グランドセントラルタワー, 2024.10.24
7. 佐藤駿丞, “光駆動非平衡電子ダイナミクス of 理論的研究”, 第18回 物性科学領域横断研究会, 神戸大学, 11/26

B) その他の発表

1. 黒田文彬, 井部将也, 大谷実, “証拠理論とハイスループット DFT 計算による C2 選択的 eCO_2RR 多元合金の探索”, 2024年9月16～19日, 第79回日本物理学会 北海道大学 札幌キャンパス.
2. 萩原聡, 石橋章司, 大谷実, “Al(111)表面におけるバイアス電位に依存した表面応力の第一原理計算”, 2024年9月16～19日, 第79回日本物理学会 北海道大学 札幌キャンパス.
3. 矢花一浩 “高強度超短パルス光の伝搬の第一原理計算”, 光と物質・プラズマの相互作用の連結シミュレーションに関する研究会、核融合科学研究所、2024.8.6-7
4. 小泉裕康, “束縛条件つきハミルトニアンによる磁場中の電子のダイナミクスと電子に作用するローレンツ力以外の力”, 日本物理学会第79回年次大会, 9月16日-19日、北海道大学
5. 田谷隼十、小泉裕康, “3 Nano- Islands で構成される銅酸化物超伝導体薄膜の量子ビットへの応用に関する理論研究”, 日本物理学会第79回年次大会, 9月16日-19日、北海道大学
6. 高津悠斗、小泉裕康, “表面層をグラフェンとした銅酸化物 Bi2212 薄膜の量子デバイスへの応用に関する理論研究”, 日本物理学会第79回年次大会, 9月16日-19日、北海道大学
7. K. Yabana, “Oblique-incident light propagation: First-principles approach”, 16th Symp. of the CCS at U. Tsukuba, Tsukuba, Japan, 2024.10.7-8.
8. Satoshi Hagiwara, Shoji Ishibashi, Minoru Otani, “First-principles simulation for bias-dependence of surface stress on Al (111) surface”, The 10th International Symposium on Surface Science, 2024.10.24.

9. Kazuhiro Sakuramoto, Satoshi Hagiwara, Minoru Otani, “Theoretical Study on Decomposition Potentials of Carbonate Molecules used in Rechargeable Lithium-Ion Batteries”, The 10th International Symposium on Surface Science, 2024.10.24.
10. Masahiko Gen, Satoshi Hagiwara, Minoru Otani, “A Water-monomer Diffusion at the Electrified Pd (111) Surface”, The 10th International Symposium on Surface Science, 2024.10.21.
11. 佐藤駿丞、「第一原理電子ダイナミクス計算のアト秒光物理への応用」, ATTO 懇談会、オンライン、10/29
12. 佐藤駿丞、「光駆動非線形電流の平均場計算における誤差の解析」、非平衡固体物性の最前線 2024、京都大学、11/11
13. 黒田文彬、井部将也、大谷実、“証拠理論とハイスループット DFT 計算による C2 選択的 eCO₂RR 多元合金の探索”、MRS-J, 横浜、2024.12.17
14. 矢花一浩、“斜方入射計算の実装について”、2024年度SALONオンサイトミーティング、関西光量子科学研究所、2024.12.19-20.
15. 萩原聡、「富岳」材料物理化学課題・「富岳」燃料電池課題 第2回合同公開シンポジウム、オンライン、2025.03.11.
16. 小泉裕康, “オームの法則、ジュール熱、そしてプランク散逸”, 日本物理学会第2025年春季大会, 3月18日-21日、オンライン
17. 田谷隼十、小泉裕康, “銅酸化物超伝導体薄膜におけるスピン渦誘起ループ電流の磁場の観測に関する理論研究”、日本物理学会第2025年春季大会, 3月18日-21日、オンライン
18. 高津悠斗、小泉裕康, “銅酸化物Bi₂212薄膜の量子ビットなどの量子デバイスへの応用を目指した理論研究”, 日本物理学会第2025年春季大会, 3月18日-21日、オンライン
19. X. M. Tong, K. Tokesi, 加藤太治, 奥村拓馬, 岡田信二, 東俊行, “エキゾチック原子における Orbital Collapse とそのダイナミクスへの影響”, 3月18~21日、日本物理学会 2025 年春季大会
20. 小泉、日本物理会, ジャーナル, SPECIAL TOPICS: 70 Years of the Tanabe–Sugano Diagrams, J Phys. Soc, Jpn, 93 (2024) 編集委員, JPS Hoot Topics 5, 005, <https://jpsht.jps.jp/article/5-004/>

(3) 著書、解説記事等

なし

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）

なし

産学官連携

なし

国際連携・国際活動

1. 矢花：グラーツ工科大学のアト秒科学実験研究グループ、マックスボルン研究所の理論研究者、蔚山科学技術大学の理論研究者と、固体中の超高速非線形光応答に関する共同研究を実施

8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

1. 矢花：SALMON の利用に関するチュートリアルを、大阪大学コンピューテーショナル・マテリアルズ・デザイン(CMD)ワークショップにおいて、アドバンストコースとして年2回実施

9. 管理・運営

1. 大谷：計算科学研究センター運営委員会委員
：計算科学研究センター人事委員会委員
：計算科学研究センター計算科学社会実装推進室室長
：数理物質系物理学域運営委員
：理工学群物理学類学務委員
：理工学群物理学類4年生担任
2. 矢花：計算科学研究センター副センター長
計算科学研究センター運営委員会委員
計算科学研究センター人事委員会委員
計算科学研究センター先端計算科学推進室室長
計算科学研究センター共同研究委員会委員
数理物質系物理学域運営委員
物理学域だより編集委員
3. 全：総合理工学位プログラム(IDE)の運営員と学生委員会の会長
4. 前島：物性・分子工学サブプログラム数理専攻セミナー（前期）世話人
全学計算機システム、3D サテライト担当

10. 社会貢献・国際貢献

1. 大谷：一般社団法人電気化学界面シミュレーションコンソーシアム代表理事
：東京大学物性研究所附属計算物質科学研究センター運営委員会委員
2. 全：科学雑誌 The European Physical Journal D の Associate Editor
(任期：2026.12.31 まで 2年延長)
3. 萩原：日本物理学会 領域9 運営委員

11. その他

なし