

令和 6 年 6 月 6 日現在

機関番号：12102

研究種目：基盤研究(B)（一般）

研究期間：2020～2023

課題番号：20H02649

研究課題名（和文）第一原理計算が拓く多元的な極限ナノフォトニクス

研究課題名（英文）Multiply-extreme nano-photonics developed by first-principles calculation

研究代表者

矢花 一浩（Yabana, Kazuhiro）

筑波大学・計算科学研究センター・教授

研究者番号：70192789

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 13,400,000円

研究成果の概要（和文）：高強度超短パルス光とナノサイズの物質の相互作用で起こる非線形光応答や超高速電子ダイナミクスに対して、物質科学の第一原理計算に基づく電子ダイナミクスの実時間計算と光の伝搬を記述する電磁場解析の方法を組み合わせた計算手法を発展させた。この方法を用いて、薄膜及びナノ構造体とパルス光の相互作用で起こる非線形相互作用、特に高次高調波発生とその非線形光伝搬を解明した。また、金属ナノ粒子のプラズモンに現れる量子効果や非線形光応答を明らかにした。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究で発展させた理論と計算手法は、原子スケールから経験的パラメータを用いることなく非線形光応答と超高速電子ダイナミクスを調べることを可能とし、基礎と応用の両面で急速に発展する高強度超短パルスレーザーを用いた研究の発展に重要な役割を果たすものである。本研究で開発された計算コードはオープンソースソフトウェアSALMONに実装し、当該分野の研究コミュニティで自由に活用できるよう整備を進めている。

研究成果の概要（英文）：For nonlinear optical responses and ultrafast electron dynamics caused by the interaction of intense ultrashort pulsed light with nano-sized materials, we have developed a computational method that combines real-time calculations of electron dynamics based on first principles method in materials science with electromagnetic field analysis method that describes light propagation. Using this method, we have elucidated the nonlinear interactions that occur in the interaction of pulsed light with thin films and nanostructures, particularly the generation of higher harmonics and their nonlinear light propagation. In addition, quantum effects and nonlinear optical responses appearing in the plasmons of metallic nanoparticles were investigated.

研究分野：計算光物質科学

キーワード：非線形光応答 ナノフォトニクス 第一原理計算 高強度超短パルスレーザー アト秒科学 高次高調波発生 プラズモニクス

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

1. 研究開始当初の背景

本研究を開始する背景の一つは、レーザー技術の発展による極限的なパルス光と物質の相互作用の研究の急速な進展、さらに光とナノを結びつけた極限ナノフォトニクス of 展開がある。極限的なパルス光と物質の相互作用において、「極限」はパルス光と物質の諸元が 1 原子単位に近い状況での光と物質の相互作用を意味する。時間軸に関しては、1 原子単位よりも短いアト秒パルスを用いて物質中の電子の運動を実時間で観測することが可能となっている。電場強度に関しては、1 原子単位に近い高強度パルス光を用いると高次高調波発生のような著しい非線形光応答が観測され、さらに強度を上げると非熱レーザー加工などの応用に繋がる。空間サイズに関しては、微細ナノ加工技術の発展により、メタマテリアル・メタ表面や、グラフェンなどの 2 次元物質の光応答に関する研究が急速に進んでいる。ナノ物質の空間スケールには、光の波長程度と、1 原子単位に近いサブ nm サイズという 2 つがあり、光応答の非局所性や電子の量子トンネル効果をもたらす非線形性などに興味を持たれる。

本研究のもう一つの背景として、物質科学の第一原理計算と、スーパーコンピュータを用いた大規模計算の発展が挙げられる。物質科学の多くの分野で、第一原理計算は必須の役割を果たしている。電子の基底状態を対象とする密度汎関数理論を拡張したものとして、90 年代以降、電子ダイナミクスを記述する時間依存密度汎関数理論 (TDDFT=Time Dependent Density Functional Theory) が発展し、パルス光が固体や分子に生じる電子の運動を、実時間・実空間で記述する理論と計算が大きく発展している。また、計算機技術は 10 年で 1000 倍の処理能力の増大を継続しており、我が国では世界最大級のスーパーコンピュータ「富岳」の稼働が間近である。大規模計算によるシミュレーションは実験と並ぶ研究手段として発展しており、パルス光とナノ物質の光科学実験を精緻に模擬する数値実験が可能となっている。

2. 研究の目的

本課題名にある「多元的な極限ナノフォトニクス」は、時間軸、光の強度、空間サイズの 3 つの方向に関し、1 原子単位に近いスケールで起こる新奇な光と物質の相互作用を解明することを目的とする。これを理論と計算科学の視点から捉えるとき、多階層性 (マルチスケール) の視点が重要となる。従来、光の伝搬に関しては、電磁場解析の方法が主要な計算法であった。一方、物質科学の第一原理計算の分野では、物質の光応答を特徴づける基本的な物理量 (例えば誘電関数) の計算が大きく発展してきた。しかし、これらの電磁気学と量子力学をそれぞれ独立に用いた理論と計算は、各次元が 1 原子単位に近いパルス光と物質の相互作用を記述する上で全く不十分である。極限ナノフォトニクス現象を記述するには、電子に対する量子論と光電磁場に対する電磁気学を統合した理論と計算手法が必須となる。このような背景のもと、本研究は以下の課題の解明を目指すものである。

- ・極限パルス光とナノメートルサイズの物質 (原子層・薄膜・ナノ構造体など) の相互作用において、電子と光電磁場の強い結合は、どのような新現象をもたらすのかを明らかにする。
- ・上述の現象を記述し予測するために有効な第一原理計算手法を開発する。
- ・電子と光電磁場が強く結合した現象が、原子スケールからどのように記述され理解されるのかを明らかにする。
- ・時間・空間・場の強さという 3 つの軸を自在に制御することにより、どのような応用が期待できるのかを探求する。

3. 研究の方法

本研究は、計算科学の方法を用いて、極限的なパルス光 (フェムト秒からアト秒までの超短パルス光・高強度パルス光など) と、多様なナノ構造体 (原子層や薄膜などの 2 次元物質、ナノ粒子が 2 次元的に配列したメタ表面など) の相互作用において起こるさまざまな非線形光応答現象を理解すること、特に時間・空間・場の強度の 3 つの軸を自在に操作することで可能となる特徴的な光応答を探求し、それを活かした新奇な光デバイス原理に繋がる知見を獲得することを目的としている。このため、以下に関する研究を遂行した。

- ・極限パルス光とナノ物質の相互作用において、電子と光電磁場が強く結合した現象を記述することができる理論と計算手法を整理し発展させる。
- ・原子層から数十 nm 程度までの極めて薄い薄膜と強いパルス光の相互作用を、微視的かつ定量的に理解する。特に、高次高調波の発生・伝搬に対する表面・バルク効果を明らかにする。
- ・高強度パルス光と金属ナノ粒子の相互作用に現れる量子効果と非線形光応答を解明する。さらにナノ粒子が 2 次元平面配列したメタ表面の非線形光応答の特徴を明らかにする。

これらに必要とされる数値計算は、我々が中心となり開発を進めているオープンソースソフトウェア SALMON (Scalable Ab initio Light-Matter simulator for Optics and Nanoscience) を用いて行う。本研究で新たに開発した計算方法は SALMON[1] に実装し、光科学研究者が自由に利用できる整備する。課題の遂行に必要な数値計算は、「富岳」を含むスーパーコンピュータを利用して行う。

4. 研究成果

高強度超短レーザーパルスがさまざまなナノ物質に照射して起こる現象を記述する理論と計算手法の開発、およびそれを応用した研究を展開した。以下で、(1)パルス光と物質の非線形な相互作用が主として関わる応用、(2)パルス光とナノ物質の非局所な相互作用が主として関わる応用、そして(3)理論および計算手法に関わる発展に関し、その成果を述べる。

(1) 高強度パルス光と薄膜の相互作用と高次高調波発生

我々は、高強度超短パルス光と物質の相互作用、特に著しく非線形な光の伝搬を物質科学の第一原理計算に基づき記述する理論と計算手法の開発を長年にわたり行ってきた。この計算方法を、我々はマルチスケール Maxwell-TDDFT 計算と呼ぶ。入射光が物質表面または薄膜に垂直に入射する場合については、すでに定式化と計算コードの開発が済んでいる[1]。この方法を用いて、以下に述べるような研究を行なった。

図1に、計算の概略と解析を行うことができる典型的な物理量を示す。(a)は1次元の光伝搬に対するマルチスケール計算方法を示している。(b)と(c)は、厚さ $3\mu\text{m}$ のシリコン(Si)薄膜をパルス光が伝搬する典型的な計算例を示している。パルス強度が $5 \times 10^{12} \text{ W/cm}^2$ の強い入射パルスの場合、反射パルスと透過パルスのフーリエスペクトルを(c)の挿入図に示す。反射波・透過波とも高次高調波が含まれていることが分かる。このような枠組みを用いて、固体からの高次高調波に関し、どのような厚さの薄膜から最も強い高調波が発生するのか[2]、反射波と透過波に含まれる高調波はどのように異なるのか、厚さとともにどのように高調波のスペクトルは変化するのかなどを明らかにした[3]。図1(c)の透過波のスペクトルで、およそ 20eV の振動数でシグナルが消失していることが見出される。これは、 20eV 以下のシグナルは薄膜の裏面から発生し、 20eV 以上のシグナルは薄膜の表面から発生するというメカニズムの差に起因する[3]。このような知見は、電子ダイナミクス計算と光伝搬を、マルチスケール手法を用いて連結することで初めて得られたものであり、固体からの高次高調波発生デバイスを設計する上で有用な情報を提供するものである。

さまざまな物質に高強度パルス光が照射したときの系統的な理解を得ることを目的として、金属(Al)、半金属(グラファイト)、半導体(Si)、ワイドギャップ誘電体(SiO_2)の4つの物質からなる $50\text{-}200\text{nm}$ の厚さの薄膜に、様々な強度を持つ超短パルスレーザーが入射して起こる光伝搬の第一原理計算を行った[4]。計算で得られた薄膜からの光の反射率と透過率を、入射パルスの最大強度を横軸にとり示した結果を図2に示す。弱い光の場合における誘電関数で記述される物質の個性を反映した光応答から、光電場が1原子単位に近い高強度の光で物質内の電子が瞬

(a) Multiscale Maxwell-TDDFT method

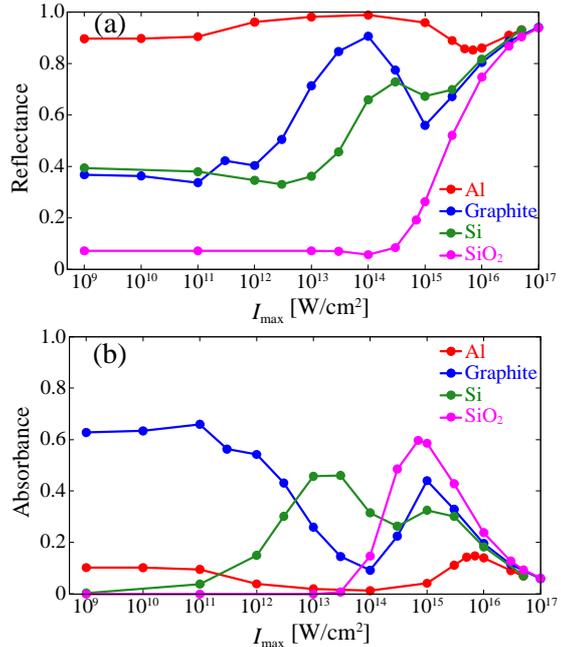
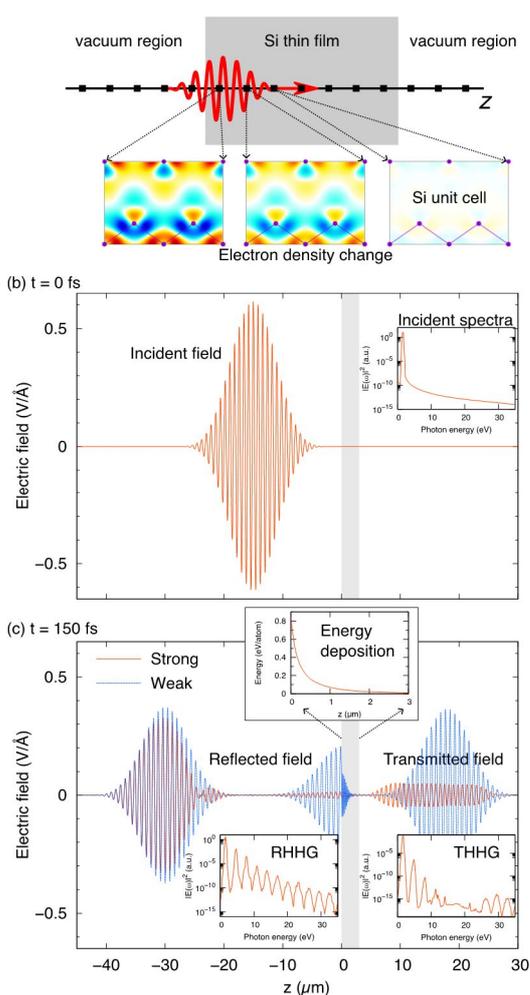


図1(左): 高強度なパルス光が $1\mu\text{m}$ の厚さのシリコン薄膜に垂直入射したときの光伝搬[2]に対するマルチスケール Maxwell-TDDFT 計算の概要を示す[3]。詳細は本文を参照。
 図2(上): さまざまな物質からなる $50\text{-}200\text{nm}$ の薄膜に高強度パルス光が入射したときの反射率(a)と透過率(b)を、横軸をパルスの最大強度をと示す。パルス光の振動数は 1.55eV 、パルス長は全長が 20fs [4]。

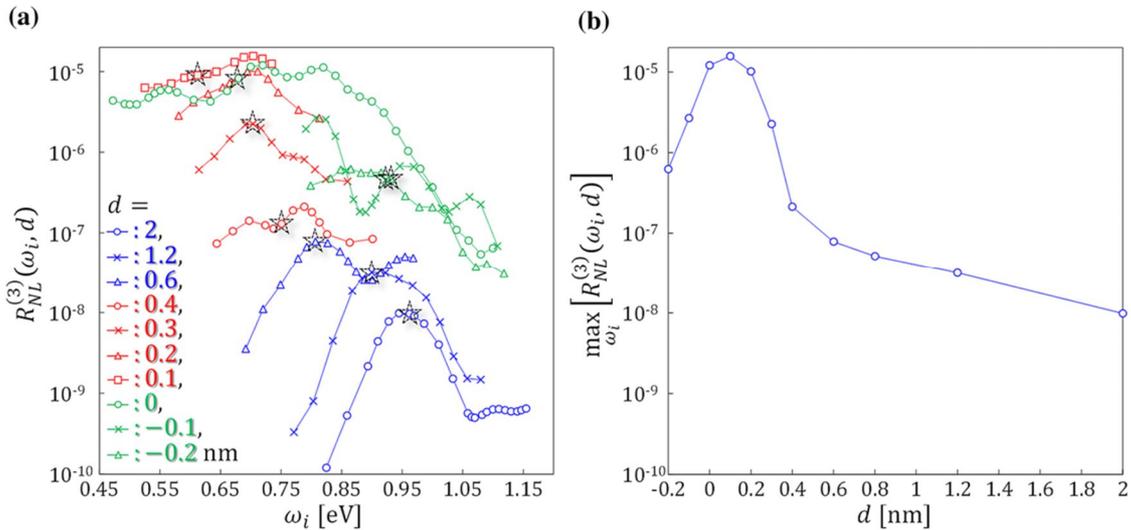


図3: プラズモニックメタ表面の3次の非線形応答。(左) ナノ粒子間の距離と基本振動数を変化させたときの、3次非線形応答の強度。(右) 左の図でナノ粒子間の距離を固定して振動数を変化させたときに最も強い3次の非線形応答を、横軸にナノ粒子間距離をとり示したものの[5]。

時に励起しプラズマ反射が主要となる場合まで、多様な非線形光応答を記述することに成功した。その過程で現れる、多光子吸収、可飽和吸収、電子が量子占有分布から古典ボルツマン分布に変化することによる吸収の変化など、多様な非線形メカニズムを明らかにした[4]。

(2) 金属ナノ粒子のプラズモンに対する量子効果と非線形光応答

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、基礎科学と応用の両面から注目を集めている。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と考えられる。

我々はジェリウム模型を用いたTDDFT計算により、電子輸送がメタ表面の線形および非線形光応答に及ぼす影響を明らかにした[5]。図3(左)は、様々なギャップ距離のメタ表面に対し、光の振動数がプラズモン共鳴の1/3程度となる振動数領域で、3次の非線形応答の振る舞いを調べたものである。そして図3(右)は、与えられたギャップ距離に対して最も強い3次の非線形応答を結んだものである。ナノ粒子間の距離が0.2nm程度以下となり、ナノ粒子間に電流が流れることが可能になると、3次の非線形応答が著しく増大することが見出される。このように、ナノ粒子間の距離が量子効果に伴う電子の染み出しと同程度の大きさになると、トンネル機構またはオーバーバリア機構により電流が流れるようになり、その流れ始める領域で非線形応答が著しく増強することを明らかにした。

(3) 斜方入射及びナノ構造体に対する計算手法の開発

(1)で述べたように、我々は高強度超短パルス光と物質の相互作用、特に著しく非線形な光の伝搬を物質科学の第一原理計算に基づき記述する理論と計算手法の開発を長年にわたり行ない、マルチスケールMaxwell-TDDFT計算法を発展させてきた。本課題では斜方入射の場合[6]や、2次元または3次元のナノ物質にパルス光が照射する場合の定式化と計算コードの開発を行った[7]。

斜方入射に対する定式化では、一般的な物質への斜方入射が見かけ上1次元の波動方程式に類似した偏微分方程式で記述されることを用いる。これにより、これまで開発を行ってきた垂直入

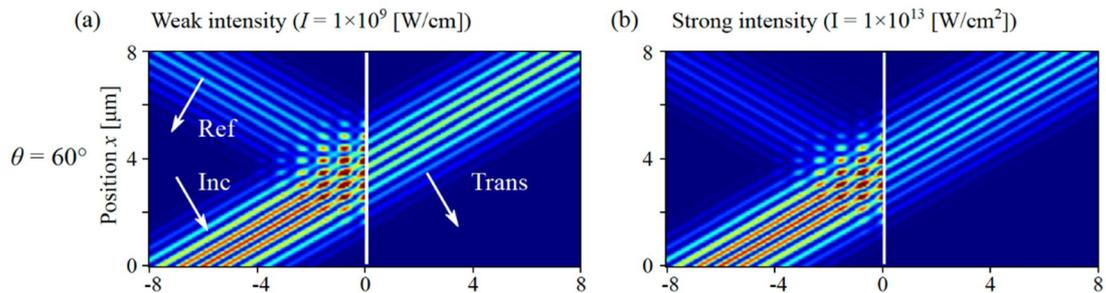


図4: 高強度なパルス光がシリコン薄膜に斜め入射する場合の光伝搬の第一原理計算[2]。左は弱い光パルスの線形伝搬、右は強い光パルスに対する非線形な伝搬の場合を示す。

射の場合から計算コストはそれほど増大することなく、斜方入射の非線形伝搬に対する計算が可能になる。ただし、ベクトルポテンシャルに対して定式化を行なうと、 p 偏光の入射で表面に分極電荷が発生することによる電場の不連続性が原因となり、そのまま偏微分方程式を解くと数値的なノイズが発生する。これを克服するため物質表面を平滑化する手法を導入した[6]。図 4 に、シリコンの薄膜にパルス光を斜方入射した時の光電場の様子を示す。左は弱い光が入射した場合、右は強い光が入射した場合である。強い光の場合は多光子吸収に伴う非線形光応答により、反射波と透過波の両方が減衰していることが分かる。

次に高強度パルス光とナノ構造体の相互作用を明らかにするために、2次元・3次元のナノ物質に対するマルチスケール計算法の開発を行なった。図 5 に、ナノ球の場合に対するこの計算方法の概略を示す。ナノ球を多数の格子点の集まりで表し、その各点で電子のダイナミクスを計算することで、ナノ球による非線形な光の伝搬を記述することが可能になる。このような多次元の場合のマルチスケール Maxwell-TDDFT 計算法はすでに開発していたが、TDDFT に基づく電子ダイナミクスに対して実時間・実空間解法を用いると計算コストが非常に大きくなり、実用的な用途で用いることが難しかった。このため、TDDFT に基づく実時間・実空間解法より精度が劣るものの、十分な数の非占有軌道を取り入れればおおよそ同等の結果が得られることが知られている半導体プロッホ方程式の方法を用いた計算法の開発を進めた[7]。今後、ナノ構造体による高次高調波発生などに応用していきたいと考えている。

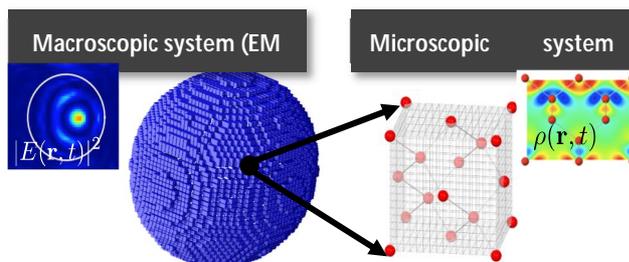


図 5: ナノ球とパルス光の相互作用を記述するマルチスケール計算法の概略。ナノ球を多数の高視点で表し、その格子点の各点で電子ダイナミクスを計算し、光伝搬を記述する。

<引用文献>

[1] M. Noda et.al, Comp. Phys. Comm. 235, 356 (2019), <https://salmon-tddft.jp>
 [2] S. Yamada, K. Yabana, Phys. Rev. B103, 155426 (2021).
 [3] S. Yamada, T. Otobe, D. Freeman, A. Kheifets, K. Yabana, Phys. Rev. B107, 035132 (2023).
 [4] A. Yamada, K. Yabana, arXiv:
 [5] T. Takeuchi, K. Yabana, Sci. Rep. 10, 21270 (2020).
 [6] M. Uemoto, K. Yabana, Opt. Exp. 30, 23664 (2022).
 [7] 木原康輝、松浦豪介、山田俊介、植本光治、第 34 回光物性研究会論文集 34, 235 (2023).

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計15件（うち査読付論文 13件 / うち国際共著 3件 / うちオープンアクセス 4件）

1. 著者名 Yamada Shunsuke, Yabana Kazuhiro, Otobe Tomohito	4. 巻 108
2. 論文標題 Subcycle control of valley-selective excitations via the dynamical Franz-Keldysh effect in a WSe ₂ monolayer	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 35404
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.108.035404	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Hashmi Arqum, Yamada Shunsuke, Yabana Kazuhiro, Otobe Tomohito	4. 巻 107
2. 論文標題 Enhancement of valley-selective excitation by a linearly polarized two-color laser pulse	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 235403
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.107.235403	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 木原康輝、松浦豪介、山田俊介、植本光治	4. 巻 34
2. 論文標題 第一原理計算による半導体ナノ構造の非線形光学効果のシミュレーション	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 第34回光物性研究会論文集	6. 最初と最後の頁 235-238
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Yamada Shunsuke, Otobe Tomohito, Freeman David, Kheifets Anatoli, Yabana Kazuhiro	4. 巻 107
2. 論文標題 Propagation effects in high-harmonic generation from dielectric thin films	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 35132
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.107.035132	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Takeuchi Takashi、Yabana Kazuhiro	4. 巻 106
2. 論文標題 Electron spill-out effect on third-order optical nonlinearity of metallic nanostructure	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review A	6. 最初と最後の頁 63517
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevA.106.063517	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Freeman David、Kheifets Anatoli、Yamada Shunsuke、Yamada Atsushi、Yabana Kazuhiro	4. 巻 106
2. 論文標題 High-order harmonic generation in semiconductors driven at near- and mid-infrared wavelengths	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 75202
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.106.075202	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Uemoto Mitsuharu、Yabana Kazuhiro	4. 巻 30
2. 論文標題 First-principles method for nonlinear light propagation at oblique incidence	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Optics Express	6. 最初と最後の頁 23664 ~ 23677
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1364/OE.460096	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Duchateau Guillaume、Yamada Atsushi、Yabana Kazuhiro	4. 巻 105
2. 論文標題 Electron dynamics in α -quartz induced by two-color 10-femtosecond laser pulses	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 165128
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.105.165128	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 木原康輝, 植本光治	4. 巻 33
2. 論文標題 第一原理計算によるIII-V族化合物半導体の非線形光学効果のシミュレーション	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 第33回光物性研究会論文集	6. 最初と最後の頁 135-138
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 S. Yamada, K. Yabana	4. 巻 103
2. 論文標題 Determining the optimum thickness for high harmonic generation from nanoscale thin films: An ab initio computational study	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 155426
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.103.155426	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 H. Hashmi, S. Yamada, A. Yamada, K. Yabana, T. Otobe	4. 巻 120
2. 論文標題 Nonlinear dynamics of electromagnetic field and valley polarization in WSe2 monolayer	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Applied Physics Letters	6. 最初と最後の頁 51108
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0077235	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 H. Hashmi, S. Yamada, A. Yamada, K. Yabana, T. Otobe	4. 巻 105
2. 論文標題 Valley polarization control in WSe2 monolayer by a single-cycle laser pulse	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 115403
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.105.115403	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 T. Takeuchi, K. Yabana	4. 巻 30
2. 論文標題 Numerical scheme for a nonlinear optical response of a metallic nanostructure: quantum hydrodynamic theory solved by adopting an effective Schrodinger equation	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Optics Express	6. 最初と最後の頁 11572-11587
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1364/OE.455639	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 T. Takeuchi, K. Yabana	4. 巻 10
2. 論文標題 Extremely large third-order nonlinear optical effects caused by electron transport in quantum plasmonic metasurfaces with subnanometer gaps	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 21270
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-020-77909-y	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 M. Uemoto, S. Kurata, N. Kawaguchi, K. Yabana	4. 巻 103
2. 論文標題 First-principles study of ultrafast and nonlinear optical properties of graphite thin films	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review. B	6. 最初と最後の頁 85433
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.103.085433	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計34件 (うち招待講演 19件 / うち国際学会 22件)

1. 発表者名 植本 光治、木原 康輝、松浦 豪介、山田 俊介
2. 発表標題 シリコンナノ構造による高調波発生シミュレーション II
3. 学会等名 第71回応用物理学会春季学術講演会
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 植本光治
2. 発表標題 第一原理電子ダイナミクス計算の非線形ナノフォトニクスシミュレーション
3. 学会等名 レーザー学会学術講演会第44回年次大会
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 G. Matsuura, K. Kihara, S. Yamada, M. Uemoto
2. 発表標題 Simulation of harmonic generation in silicon nanocylinder
3. 学会等名 JAIST International symposium on Nano-Materials for Novel Devices (国際学会)
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 M. Uemoto, K. Yabana
2. 発表標題 First-principles electromagnetics simulation for nonlinear nanophotonics: method and applications
3. 学会等名 9th International Conference on Antennas and Electromagnetic Systems (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 木原康輝、松浦豪介、山田俊介、植本光治
2. 発表標題 第一原理計算による半導体ナノ構造の非線形光学効果のシミュレーション
3. 学会等名 第34回光物性研究会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 松浦 豪介、木原 康輝、植本 光治
2. 発表標題 シリコンナノ構造による高調波発生シミュレーション
3. 学会等名 第84回応用物理学会秋季学術講演会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 矢花一浩
2. 発表標題 アト秒科学と第一原理電子ダイナミクス計算
3. 学会等名 レーザー学会学術講演会第44回年次大会（招待講演）
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 Yabana Kazuhiro
2. 発表標題 Development of first-principles computational method for nonlinear/nonlocal nano photonics
3. 学会等名 13th Int. Conf. on Advanced Materials and Devices（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Yabana Kazuhiro
2. 発表標題 Computational optical science at the atomic scale - First-principles approach -
3. 学会等名 34th IUPAP Conference on Computational Physics（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Yabana Kazuhiro
2. 発表標題 Propagation of extreme pulsed light - First-principles computational study -
3. 学会等名 10th Int. Symp. on Ultrafast Dynamics & Ultrafast Bandgap Photonics (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Atsushi Yamada, Shunsuke Yamada, Kazuhiro Yabana
2. 発表標題 Nonlinear propagation of high-intensity pulsed light - First-principles calculations -
3. 学会等名 CLE02023 (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Yabana Kazuhiro
2. 発表標題 Maxwell-TDDFT simulation for high-field propagation dynamics
3. 学会等名 Optica Incubator on On-Chip High-Field Nanophotonics (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Yabana Kazuhiro
2. 発表標題 First-principles calculations of ultrafast dynamics in solids
3. 学会等名 15th Asia Pacific Physics Conference (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Yabana Kazuhiro
2. 発表標題 TDDFT for extreme optics: nonlinearity and nonlocality
3. 学会等名 9th Workshop on TDDFT: Prospects and Applications (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Yabana Kazuhiro
2. 発表標題 Time-dependent density functional theory for extreme nonlinear optics
3. 学会等名 23rd Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Yabana Kazuhiro
2. 発表標題 Propagation and energy transfer of intense and ultrashort laser pulse in solids: First-principles computational approach
3. 学会等名 SPIE Photonics West, LAMOM XXVIII (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 矢花一浩
2. 発表標題 高強度パルス光の伝搬とエネルギー移行の第一原理計算
3. 学会等名 レーザー学会学術講演会第43回年次大会 (招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 矢花一浩
2. 発表標題 フェムト秒レーザーから物質へのエネルギー移行過程に対する第一原理計算
3. 学会等名 令和5年電気学会全国大会（招待講演）
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 木原康輝、植本光治
2. 発表標題 第一原理計算によるIII-V族化合物半導体の非線形光学効果のシミュレーション
3. 学会等名 第33回光物性研究会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 植本光治、木原康輝
2. 発表標題 非線形ナノフォトニクスのための第一原理シミュレーション
3. 学会等名 第70回応用物理学会春季学術講演会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 K. Yabana
2. 発表標題 Ab initio description of ultrafast dynamics in solids
3. 学会等名 CLEO Europe（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 K. Yabana
2. 発表標題 Time-dependent density functional theory for extremely nonlinear optics
3. 学会等名 International Conference: Advanced Laser Technologies (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 K. Yabana
2. 発表標題 Real-time TDDFT coupled with Maxwell equations for light-propagation through thin films
3. 学会等名 Theory days on New computational methods for electron dynamics (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 矢花一浩
2. 発表標題 フェムト秒レーザーから物質への エネルギー移行の第一原理計算
3. 学会等名 レーザー学会東京支部セミナー (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 K. Yabana
2. 発表標題 Ab Initio Simulations of Ultrafast Phenomena in Solids: State of the Art and Challenges
3. 学会等名 First Int. Conf. on Scientific Opportunities with Advanced Attosecond Lasers (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 T. Takeuchi, K. Yabana
2. 発表標題 Huge 3rd-order Nonlinearity in Plasmonic Metasurface with Sub-nm Gap - Theoretical investigation based on TDDFT with Jellium Model
3. 学会等名 The 16th international conference on Near-field Optics, Nanophotonics & Related Techniques (Online) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 竹内高、矢花一浩
2. 発表標題 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 電子輸送に基づく非線形性の増強
3. 学会等名 第81回応用物理学会秋季学術講演会 (オンライン)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 山田俊介、矢花一浩
2. 発表標題 半導体ナノ薄膜における高次高調波発生の第一原理計算
3. 学会等名 日本物理学会2020年秋季大会 (オンライン)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Kazuhiro Yabana
2. 発表標題 Performance Evaluation of Electron Dynamics Simulation in Supercomputer Fugaku
3. 学会等名 12th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Kazuhiro Yabana
2. 発表標題 Multi-scale Simulation Method for Ultrafast Electron-Ion Dynamics in Dielectrics
3. 学会等名 2020 SSRL/LCLS Users Meeting (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Yabana Kazuhiro, Hirokawa Yuta, Yamada Atsushi, Yamada Shunsuke, Noda Masashi, Uemoto Mitsuharu, Boku Taisuke
2. 発表標題 Large-Scale Ab Initio Calculation of Ultrafast Dynamics in Thin-Film Dielectrics
3. 学会等名 The 22nd International Conference on Ultrafast Phenomena, online, (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Shunsuke Yamada, Kazuhiro Yabana
2. 発表標題 Symmetry aspects of attosecond transient absorption spectroscopy in a dielectric crystal
3. 学会等名 The 22nd International Conference on Ultrafast Phenomena, online, (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 S. Yamada and K. Yabana
2. 発表標題 The most efficient thickness of Si nano film for high-harmonic generation
3. 学会等名 APS March Meeting 2021, online, (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 T. Takeuchi and K. Yabana
2. 発表標題 Optical properties of plasmonic metasurface with sub-nm gaps - Extremely large third-order nonlinear optical effects caused by electron transports
3. 学会等名 APS March Meeting 2021, online, (国際学会)
4. 発表年 2021年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	植本 光治 (Uemoto Mitsuharu) (90748500)	神戸大学・工学研究科・助教 (14501)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------