

科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 4 年 6 月 24 日現在

機関番号：92704

研究種目：若手研究

研究期間：2018～2021

課題番号：18K14145

研究課題名（和文）高強度光電場に駆動される電子・正孔ダイナミクスの理論研究

研究課題名（英文）Theoretical study on electron-hole dynamics driven by strong light electric field

研究代表者

篠原 康 (Shinohara, Yasushi)

日本電信電話株式会社 NTT 物性科学基礎研究所・フロンティア機能物性研究部・リサーチスペシャリスト

研究者番号：90775024

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,200,000 円

研究成果の概要（和文）：固体を念頭に置いた量子ダイナミクスシミュレーションを遂行し、高強度レーザーによる電子・正孔対ダイナミクスの理論研究を行った。照射電場の整数倍の輻射光を観測する高次高調波発生過程において、GaSe結晶においては、ギャップ超越光子はバンド間分極由来の成分が支配的であることを示し、固体媒質による超短パルス発生の可能性を探った。CsPbCl₃結晶の高次高調波発生において、電場偏光に対して極めて異方的な応答を示す輻射スペクトルは、励起効率の異方性が起源であることを示した。高強度電場下のグラフェン、GaSe結晶について、原子スケールでどのように電子・正孔対が運動しているのかを明らかにした。

研究成果の学術的意義や社会的意義

強いレーザー電場を物質に照射することで、非線形な過程でPHzよりも速い周波数の電荷振動を物質中に誘起することができる。しかし、このような分極振動は物質と光の非線形な相互作用に起因しており、そのメカニズムは十分に解明されていない。

本研究では、固体を記述する量子ダイナミクスシミュレーションを行い、強い電場に誘起される電子・正孔ダイナミクスに起因する現象を調べた。半導体、半金属といった異なる物性を示す現象毎、注目している電荷振動の速さに応じて、どのような物理的描像で、実験結果が説明できるのかを明らかにした。本研究により、PHz電荷振動をコントロールするための理論限界や研究開発指針が明瞭になった。

研究成果の概要（英文）：We perform a theoretical study of crystalline solids exposed to intense laser illumination using quantum dynamics simulations.

The high-order harmonic generation (HHG), photon energy up conversion via nonlinear light-matter interaction, in GaSe is dominated by the interband polarization contribution for photons above the bandgap. This interband dominant generation mechanism allows us to shorten the generated pulse as the radiation. HHG from CsPbCl₃ crystal shows anisotropic intensity depending on field polarization direction. Our simulation reveals the origin of the anisotropy is from the efficiency of electron excitation by the electric field. We investigate electron dynamics driven by the strong field in the atomistic scale.

研究分野：計算物質科学

キーワード：アト秒科学 高次高調波発生 第一原理計算

1 . 研究開始当初の背景

THz 帯から近赤外の波長における強い光電場発生技術が成熟し、物質に照射した際の実験的な非線形な応答の観測が盛んに報告され始めた。非線形な過程を通じて、照射光の周波数よりも速い電荷振動が物質内に誘起されたり、電場時間波形の詳細なプロファイルに鋭敏な応答を示すことが知られている。ここで見られる電荷運動の時定数は PHz を優に超えており、既存デバイスに比べて、超高速な物性制御の可能性を示唆している。一方で、非線形な物質と光の相互作用には未解明の点が多く、その理解が求められていた。

2 . 研究の目的

半導体、絶縁体はエネルギーギャップがあるため、そのギャップより小さい光子エネルギーの光(たとえば THz 光や多くの近赤外光)を導入した場合、周波数に依存した屈折率で完全に理解ができる。高強度光を導入すると、非線形過程を通じて、ギャップよりも小さい光子エネルギーの光吸収や、波長変換が起こる。こうした現象は、特に摂動理論が適用できないような高強度領域では、その定量的な評価は実験的には困難な部分が多く、さらに簡潔に説明できる描像についてもコンセンサスが得られていない。

グラフェンはフェルミ準位が隣接したバンドの端点にあり、金属的・半金属的な電子状態を持つものの、任意の光子エネルギーに対するバンド間遷移が可能で、バンド内遷移が支配的になる通常の金属とは趣が異なる。この小さなバンド間エネルギーにより、より弱い電場強度の光に対しても顕著な非線形光学応答を示すことが知られている。

こうした物質の非線形な応答の記述には、摂動論や半古典近似に頼らない電子と正孔の量子ダイナミクス記述が不可欠である。本研究の目的は、半導体、絶縁体、及びグラフェンに対して V/nm クラスの電場振幅のパルス光が照射された時に起きる電子・正孔ダイナミクスに起因する現象を、理論シミュレーションによって評価し、そのメカニズムを解明することである。

3 . 研究の方法

固体を特徴づける結晶運動量を自由度として含む量子力学的な理論的枠組みを用いて、光電場に伴う電子ダイナミクスを調べる。その際、定常的でない時間依存の電場に伴って電子と正孔が生成する過程、そして電場に駆動される電子と正孔のダイナミクスを評価・記述するため、量子系の時間発展を直接数値的に評価する理論的枠組みを用いた。用いる理論的枠組みは、用途に応じて a) 密度汎関数理論で評価した電子状態を用いて、量子系の一体の密度行列の時間発展を評価する TD-DM-DFT 法、b) 原子軌道を用いた強束縛模型から導かれる半導体 Bloch 方程式を解く SBE-AO 法、c) 一次元の空間自由度のみを考慮する独立電子系の時間依存 Schrödinger 方程式を解く 1D-TDSE 法を用いた。多くの研究は実験家との共同研究で、実験データに現れた構造を理解するためにシミュレーションとその解釈に取り組んだ。

a) の TD-DM-DFT 法は、電子状態を第一原理計算の一つである密度汎関数理論を用いていることで、結晶の幾何学的な構造がシミュレーション結果に自動的に反映されることである。大きな計算コストを要する第一原理計算を、電子状態の求解にのみ用いていることで、時間発展についても第一原理的な時間依存密度汎関数理論と比較して 50-100 分の一程度の計算コスト削減が実現されている。

b) の SBE-AO 法では固体の電子ダイナミクスを調べるうえで元も標準的なアプローチである半導体 Bloch 方程式(SBE)を解く。本手法では SBE に必要な電子状態を原子軌道から導いたため、SBE で評価する密度行列の行列要素から、原子スケールでの電子密度をすることができる。

c) の 1D-TDSE 法は空間次元を一次元に削減することで、多くのレーザーパラメーターに対して

系統的にシミュレーションをできるようにした手法である。結晶の三次元性を大きく損なうものの、破れた反転対称性がどのように電子ダイナミクスが示す物理量に現れるのかを調べることができる。

4 . 研究成果

以下[n]で、本節末尾の本プロジェクトの n 番目の関連文献を示す。

GaSe 結晶からの高次高調波発生 [1]

高次高調波発生とは、照射電場の光子エネルギーの整数倍の光子が照射対象から輻射される現象で、照射電場の光子エネルギーに対応した周波数の整数倍の周波数の誘起分極がその起源である。この次数が二次、三次のものは半世紀以上前から知られているが、固体において 7 次の観測がされたのは 2001 年という比較的新しい現象で、その起源が近年盛んに議論されている。本研究[1]では、輻射光が固体に再吸収されてしまうような、バンドギャップよりも高い領域において、深紫外域にわたったスペクトルが実験的に観測されることを示した。さらに直線偏光の電場の向きと結晶の相対角を変えた時、その輻射光の偏光状態の様子が、低い光子エネルギーを用いて行った先行研究(K. Kaneshima, Y. Shinohara et al., Phys. Rev. Lett. **120**, 243903 (2018))のものと全く同様であり、そこに普遍性があることを示した。

TD-DM-DFT 法でシミュレーションを行って、深紫外領域の高調波発生の起源を探った。固体に誘起される分極は、占有された電子及び正孔がバンド分散に従って波数空間で運動することによって誘起されるバンド内電流由来のものと、電子と正孔の誘起するバンド間分極による種類がある。これまでの多くの研究では、固体からの高次高調波発生では、バンド内成分が主たる源であることが報告されてきた。本研究では、放射スペクトルがバンドギャップを超えている光子エネルギーでは、バンド間分極が支配的な寄与をしていることを、TD-DM-DFT 法で明らかにした。さらに、高次高調波発生を波長変換技術として捉えると、発生した輻射電場の時間波形も重要な情報となる。広い周波数に渡ったスペクトルをうまく重ね合わせることで、時間的に局在したパルスが作れば、その光を使った時間分解分光が可能となる。こうした観点で、異なる強度を照射した場合の輻射電場に比例する加速度に相当する誘起カレントの時間微分波形を調査した。この加速度の時間波形を、バンド内成分とバンド間成分に分解したところ、前者は強度に応じて緩慢な時間波形変化を生じた一方で、後者は強度に応じて顕著な時間波形変化を示した。この知見は、固体に高強度電場を照射して超短パルス電場を生成したい場合は、バンド間成分が顕著となる光子エネルギー領域が有望であることを示している。この指針に従って、短パルス生成を目指す場合には、得たいパルスの含む光子エネルギー領域よりも小さなギャップを持つ固体媒質を選定することが有望であることが分かった。

有機無機ハイブリッドペロブスカイト MAPbX₃(X=Cl, Br, I)結晶からの高次高調波発生 [4,5]

本研究[4,5]では次世代太陽電池候補と考えられている、有機無機ハイブリッドペロブスカイトであるメチルアンモニウムハロゲン化鉛 MAPbX₃ (X=Cl, Br, I)結晶の高強度場応答の一例として、高次高調波発生の調査を行った。これらの物質群はスピンコートにより生成した 200nm の薄いサンプルでありながら、1 μm の GaSe よりも高い高調波強度が得られていることを示した。MAPbCl₃ について、照射電場の偏光と結晶との相対角を変えて放射強度を調べると、顕著な放射高調波の異方性を示すことを明らかにした。この異方性は照射電場の強度増大に従って、減少する。

実験的に得られたこれらの事実のメカニズムを明らかにすべく、TD-DM-DFT 法でシミュレーションを行い、解析に取り組んだ。その際、対象物質を MAPbCl₃ に絞り、メチルアンモニウムを Cs 原子に置き換えた CsPbCl₃ を対象にシミュレーションを行った。この MA の Cs 原子への置き換えにより、殆ど格子定数は変化せず、かつ価電子帯上部は Cl の p 由来の、伝導帯は Pb 由来であるため、非共鳴光に由来する電子ダイナミクスには大きく影響を与えないことが期待される。CsPbCl₃ の状態密度を密度汎関数理論で評価すると、Cs 由来の軌道は Cl 由来のものと全く混成せず、価電子帯上端から 7eV 程深い位置にすることが確認できる。シミュレーションに

より、CsPbCl₃の高調波の電場の変更方向依存性がMAPbCl₃の実験結果とよく再現していることがわかった。本研究で調べている高調波スペクトルの光子エネルギーはバンドギャップよりも小さなものである。シミュレーションの結果をバンド内成分とバンド間成分に分解すると、バンド内成分が支配的であることがわかった。これは他の物質に対して、バンドギャップ以下の高調波の主成分がバンド内のものであるという報告群とコンシステントである。TD-DM-DFT法の特徴の一つに、多くのバンドを取り入れており、Brillouin域についても三次元全ての方向にとっていることが挙げられる。バンド内成分のカレントは、部分和をとることで任意のバンドの寄与に分解することができる。その結果、CsPbCl₃の高調波は価電子帯上部のCl由来のバンド群が支配的な寄与をしていることを明らかにした。バンド内電流を考慮する時、その運動は暗に有効質量の軽い伝導帯を考慮することが多い。本研究により、直感に反する価電子帯からの支配的な高調波発生を初めて示された。CsPbCl₃が示す高調波の顕著な偏光角度依存性を明らかにするために、高調波の強度依存性が、励起効率に依存しているのか、あるいはバンド分散の急峻な変化に依存しているのかを解析した。その結果、照射電場の偏光に応じてバンド分散からの寄与はあまり角度に依存していない一方、仮想的に励起された電子の数が大きく偏光に依存して変化していることを示した。

Grapheneの光電場駆動電流の実空間解析 [2]

Grapheneに光電場の一周期に匹敵する極めて短い光パルス照射すると、その電場波形に応じてカレント(LFDC)を流れる向きをコントロールすることができる(Takuya Higuchi, Christian Heide, Konrad Ullmann, Heiko B. Weber and Peter Hommelhoff, Nature **550**, 224 (2017))。このメカニズムは波数空間におけるベクトルポテンシャルを外場とするLandau-Zener遷移過程干渉(LZS干渉)として理解されている。LZS干渉が本実験を支配している証拠として、電場波形を固定したまま電場強度を上げた時に、LFDCの向きが逆転する現象が予言され、これが実験的にも確認されている点が挙がる。

[2]では、波数空間で理解された本現象が原子スケールでどのように理解されるのかを調べた。SBE-AO法を用いることで、時間領域で解いたSBEの解から、原子軌道を通じてgraphene結晶のどの部分をLFDCが流れているのかを突き止めた。空間分解したLFDCは電場と並行なC-C間の π 軌道に沿って流れる。基本的にLFDCは空間的に同じ向きに流れているが、電場強度の増大に従って向きが反転する際に、場所に応じて符号反転する強度が異なる。従って、符号反転する強度領域では、結晶内の場所に応じてLFDCの向きが異なる可能性があり、その際にはカレントの渦構造が現れうることを示した。

GaSe結晶における極性結合 [3]

照射電場の偶数次高調波の発生を持って、結晶に反転対称性があるかないかを調べることができる。この時、偶数次高調波の電磁場の波形が実験的に得られる状況は限定的で、通常は強度のみが観測にかかることとなる。偶数次高調波の強度は、結晶の反転対称性の有無を反映した指標にはなりうるが、その媒質中の極性を持った化学結合の向きまで評価することは、通常出来ない。[3]では、光電場の一周期に匹敵する超短パルスを用いることで、電場波形を直接観測せず、強度を観測するだけで、結晶中の極性を持った化学結合の向きを特定できることを実験的に示し、そのメカニズムを明らかにした。

光電場の一周期に匹敵する超短パルスを使うと、電場が極大値を迎えるタイミングが一回のみというパルスを実現することができる。この極大値を迎えた電場の向きを結晶の極性結合と平行に取った場合と、反平行にとった場合で、高次高調波のスペクトルが顕著に異なることを示した。Se→Ga方向に極大電場をとった場合は光子エネルギーの整数倍のスペクトルが綺麗に現れる一方、逆方向に電場を向けると、整数倍の光子エネルギーに明瞭なピークを持たないブロードなスペクトルが得られる。

このスペクトル構造を理解するために、非線形ポテンシャルに拡張したLorentz模型を用いて、古典的な粒子の運動から輻射スペクトルを評価すると、実験的に得られているスペクトルがよく再現されることがわかった。これは、反転対象性の破れた系では有効分極の復元力を担うポテンシャルが平衡点周りで非対称になっており、極大電場がかかった際にある方向では急峻なポテンシャルに伴う強い復元力を感じ、逆方向に極大電場がかかった際にはなだらかなポテンシャルに伴う弱い復元力を感じることで説明ができる。この完全に古典的な模型で得た理解が、電子状態も考慮した上で量子力学的に本当に現れうるのかを確認するために、GaSeの電子状態

を模した 1D-TDSE を解いて、古典模型で得られた輻射スペクトルが現れうるのかを確認した。その結果、実験と同様に Se→Ga 方向に極大電場を取った場合にスペクトルが離散的に、逆方向の時にブロードなスペクトルになることが確認された。

関連文献

- [1] Kotaro Imasaka, [Yasushi Shinohara](#), Tomohiro Kaji, Keisuke Kaneshima, Nobuhisa Ishii, Jiro Itatani, Kenichi L. Ishikawa, and Satoshi Ashihara, *Optics Continuum* **1** (2022) 1232.
- [2] Yuya Morimoto, [Yasushi Shinohara](#), Kenichi L. Ishikawa and Peter Hommelhoff, Atomic real-space perspective of light-field-driven currents in graphene, *New J. Phys.* **24** (2022) 0333051.
- [3] Yuya Morimoto, [Yasushi Shinohara](#), Mizuki Tani, Bo-Han Chen, Kenichi L. Ishikawa, and Peter Baum, Asymmetric single-cycle control of valence electron motion in polar chemical bonds, *Optica* **3** (2021) 382.
- [4] Yasuyuki Sanari, Hideki Hirori, Tomoko Aharen, Hirokazu Tahara, [Yasushi Shinohara](#), Kenichi L. Ishikawa, Tomohito Otobe, Peiyu Xia, Nobuhisa Ishii, Jiro Itatani, Shunsuke A. Sato, and Yoshihiko Kanemitsu, Role of virtual band population for high harmonic generation in solids, *Phys. Rev. B* **102** (2020) 041125(R).
- [5] Hideki Hirori, Peiyu Xia, [Yasushi Shinohara](#), Tomohito Otobe, Yasuyuki Sanari, Hirokazu Tahara, Nobuhisa Ishi, Jiro Itatani, Kenichi L. Ishikawa, Tomoko Aharen, Masashi Ozaki, Atsushi Wakamiya, Yoshihiko Kanemitsu, High-order harmonic generation from hybrid organic–inorganic perovskites thin films, *APL Materials* **7** (2019) 041107.

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計9件（うち査読付論文 8件/うち国際共著 2件/うちオープンアクセス 5件）

1. 著者名 Morimoto Yuya, Shinohara Yasushi, Ishikawa Kenichi L, Hommelhoff Peter	4. 巻 24
2. 論文標題 Atomic real-space perspective of light-field-driven currents in graphene	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 New Journal of Physics	6. 最初と最後の頁 033051 ~ 033051
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1367-2630/ac5c18	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 Tani Mizuki, Otobe Tomohito, Shinohara Yasushi, Ishikawa Kenichi L.	4. 巻 104
2. 論文標題 Semiclassical description of electron dynamics in extended systems under intense laser fields	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 75157
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.104.075157	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 Morimoto Yuya, Shinohara Yasushi, Tani Mizuki, Chen Bo-Han, Ishikawa Kenichi L., Baum Peter	4. 巻 8
2. 論文標題 Asymmetric single-cycle control of valence electron motion in polar chemical bonds	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Optica	6. 最初と最後の頁 382 ~ 382
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1364/OPTICA.414213	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 Sanari Yasuyuki, Hirori Hideki, Aharen Tomoko, Tahara Hirokazu, Shinohara Yasushi, Ishikawa Kenichi L., Otobe Tomohito, Xia Peiyu, Ishii Nobuhisa, Itatani Jiro, Sato Shunsuke A., Kanemitsu Yoshihiko	4. 巻 102
2. 論文標題 Role of virtual band population for high harmonic generation in solids	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 41125
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.102.041125	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 Suzuki Takeshi, Shinohara Yasushi, Lu Yangfan, Watanabe Mari, Xu Jiadi, Ishikawa Kenichi L., Takagi Hide, Nohara Minoru, Katayama Naoyuki, Sawa Hiroshi, Fujisawa Masami, Kanai Teruto, Itatani Jiro, Mizokawa Takashi, Shin Shik, Okazaki Kozo	4. 巻 103
2. 論文標題 Detecting electron-phonon coupling during photoinduced phase transition	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 L121105
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.103.L121105	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 石川顕一、篠原康	4. 巻 48
2. 論文標題 固体高次高調波発生の理論と第一原理計算	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 レーザー研究	6. 最初と最後の頁 162-167
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 Hirori Hideki, Xia Peiyu, Shinohara Yasushi, Otobe Tomohito, Sanari Yasuyuki, Tahara Hirokazu, Ishii Nobuhisa, Itatani Jiro, Ishikawa Kenichi L., Aharen Tomoko, Ozaki Masashi, Wakamiya Atsushi, Kanemitsu Yoshihiko	4. 巻 7
2. 論文標題 High-order harmonic generation from hybrid organic/inorganic perovskite thin films	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 APL Materials	6. 最初と最後の頁 041107 ~ 041107
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5090935	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 Anzaki Ryoji, Shinohara Yasushi, Sato Takeshi, Ishikawa Kenichi L.	4. 巻 98
2. 論文標題 Gauge invariance beyond the electric dipole approximation	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Physical Review A	6. 最初と最後の頁 63410
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevA.98.063410	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 Imasaka Kotaro, Shinohara Yasushi, Kaji Tomohiro, Kaneshima Keisuke, Ishii Nobuhisa, Itatani Jiro, Ishikawa Kenichi L., Ashihara Satoshi	4. 巻 1
2. 論文標題 High harmonic generation from GaSe in a deep-UV range well above the bandgap	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Optics Continuum	6. 最初と最後の頁 1232 ~ 1232
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1364/OPTCON.451394	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 -

[学会発表] 計18件 (うち招待講演 6件 / うち国際学会 10件)

1. 発表者名 Kakeru Sasaki, Yasushi Shinohara, Kenichi L. Ishikawa
2. 発表標題 Theoretical study on nonlinear optical absorption of crystalline solids via two-color laser from first-principles
3. 学会等名 ICALEO (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Yasushi Shinohara
2. 発表標題 A microscopic theory for selection rules of solid-state high-harmonic generation based on time-dependent Schrodinger equation
3. 学会等名 High-brightness Sources and Light-driven Interactions Congress (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Yasushi Shinohara
2. 発表標題 Real-time ab-initio simulations for crystalline solids driven by strong laser pulse
3. 学会等名 The 22nd Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Yasushi Shinohara
2. 発表標題 Theoretical study on solid-state high harmonic generation: from a one-dimensional model to an ab-initio three-dimensional approach
3. 学会等名 Mini-Workshop on Nonlinear Response in Laser-Matter Interaction (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Yasushi Shinohara
2. 発表標題 Theoretical study on high-order harmonic generation reflecting spatiotemporal symmetries
3. 学会等名 CIAiS International Symposium 2020 (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Yasushi Shinohara
2. 発表標題 Tokyo activities on HHG Solids
3. 学会等名 Mini-Workshop & Idea-exchange Light-field driven dynamics, (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Yasushi Shinohara, Shoken Yamamura, and Kenichi L. Ishikawa
2. 発表標題 High-Harmonic Generation from Crystalline Solids under Carrier Envelope Phase Controlled Pulse
3. 学会等名 CLEO/Europe-EQEC (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 篠原康
2. 発表標題 実時間量子ダイナミクスシミュレーションで探る固体の高次高調波発生過程
3. 学会等名 一般社団法人 レーザー学会2018年度 第39回年次大会、シンポジウム：固体におけるアト秒・強光子場科学の最前線（招待講演）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Yasushi Shinohara
2. 発表標題 Electron dynamics simulation for solid-state high-harmonic generation based on first-principles theory
3. 学会等名 International Symposium on Ab Initio Electron Dynamics Simulations (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 篠原康
2. 発表標題 密度汎関数理論に基づいた電子ダイナミクスシミュレーションで探る電子状態・電子格子相互作用
3. 学会等名 計算科学による分光理論の進展 ~SPring-8との連携を目指して~ ポスト「京」重点課題 (7)サブ課題G 第9回「共通基盤シミュレーション手法」連続研究会（招待講演）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 篠原康
2. 発表標題 固体GaSeからの高次高調波発生の原子論的シミュレーション
3. 学会等名 物性研究所スパコン共同利用・CCMS合同研究会「計算物質科学の今と未来」（招待講演）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Yasushi Shinohara, Shoken Yamamura, and Kenichi L. Ishikawa
2. 発表標題 High-Harmonic Generation from Crystalline Solids under Carrier Envelope Phase Controlled Pulse
3. 学会等名 9th AWCXR (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Yasushi Shinohara
2. 発表標題 Theoretical study on high-order harmonic generation from extended systems
3. 学会等名 iSAP HAMAMATSU (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 篠原康
2. 発表標題 ポスト「京」萌芽 極限マテリアル サブ課題 C進捗報告：強光子場に駆動される非線形電子ダイナミクス
3. 学会等名 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(CDMSI)」第4回シンポジウム
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 篠原康
2. 発表標題 固体高次高調波発生の原子論的シミュレーション
3. 学会等名 第2回ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦」・「極限マテリアル」合同公開シンポジウム
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 篠原康
2. 発表標題 時間依存Wannier関数による固体電子ダイナミクスの記述
3. 学会等名 第79回応用物理学会秋季学術講演会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 篠原康
2. 発表標題 一次元模型結晶を用いたWannier関数の時間依存版への拡張
3. 学会等名 日本物理学会2018年秋季大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 篠原康、山村鐘賢、石川顕一
2. 発表標題 運動量空間軌跡模型を用いたキャリアエンベロープ位相に依存した固体高次高調波カットオフの解析
3. 学会等名 日本物理学会2018年秋季大会
4. 発表年 2018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
---------------------------	-----------------------	----

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			
ドイツ	Ludwig-Maximilians- Universitaet Muenchen	Max-Planck-Institute of Quantum Optics	Friedrich-Alexander- Universitaet	他1機関