

## V. 原子核理論グループ

### 1. メンバー

教授	矢花一浩、中務 孝
講師	橋本幸男
助教	日野原伸生（国際テニュアトラック）
研究員	温 凱（2017.1 転出）、鷲山広平、野村昂亮（PD 学振）、佐藤駿丞（PD 学振）、植本光治、Guillaume Scamps（2016.10 着任）
学生	大学院生 5 名（うち特別研究学生 1 名）、学類生 1 名

### 2. 概要

核子（陽子・中性子）の多体系である原子核の構造・反応・応答などの多核子量子ダイナミクスの研究を推進している。安定線（ハイゼンベルグの谷）から離れた放射性アイソトープの原子核の構造と反応、エキゾチックな励起状態の性質、様々な集団運動の発現機構など、未解決の謎の解明に取り組んでいる。原子核の研究は、フェルミ粒子の量子多体系計算という観点で、物質科学や光科学、冷却原子系の物理と密接なつながりをもつ。また、クォーク・グルーオンのダイナミクスを記述する格子 QCD に基づく核力の計算、軽い原子核の直接計算などが進展する中、素粒子物理学との連携も重要性が増している。ニュートリノの解明に向けたニュートリノレス二重ベータ崩壊の観測実験や、素粒子標準模型のテストに関わる実験などにも原子核理論の精密計算が不可欠とされている。また、元素の起源や星の構造にも原子核の性質は深く関わり、宇宙物理学とも密接に関係している。本部門・原子核物理分野のメンバーは、このような幅広い課題に取り組み、分野の枠を超えた研究を推進している。

### 3. 研究成果

#### 【 1 】大振幅集団運動理論を用いた核反応ダイナミクスの記述（温、中務）

線形領域を超える大振幅集団運動を扱う理論として、断熱自己無撞着集団座標法 (Adiabatic Self-consistent Collective Coordinate Method: ASCC 法) を我々は提唱しており、この理論では、少数自由度の集団空間（座標）の自己無撞着な抽出が可能である。この理論に基づいて、低エネルギーの多核子反応ダイナミクスを記述する最適な反応経路を導出する研究を実施した。虚時間発展法と有限振幅法を組み合わせた反復法を用いて、今年度は、アルファ粒子と酸素（融合核：ネオン）と、酸素・酸素（融合核：硫黄）の散乱・融合過程を記述する集団座標をマイクロに決定した。図に前者の融合反応に対して求められた密度分布の変化を示す。核反応の集団運動を支配するポテンシャルと質量パラメー

タを完全微視的に決定し、低エネルギー・サブバリア領域における融合断面積を計算することに成功した。

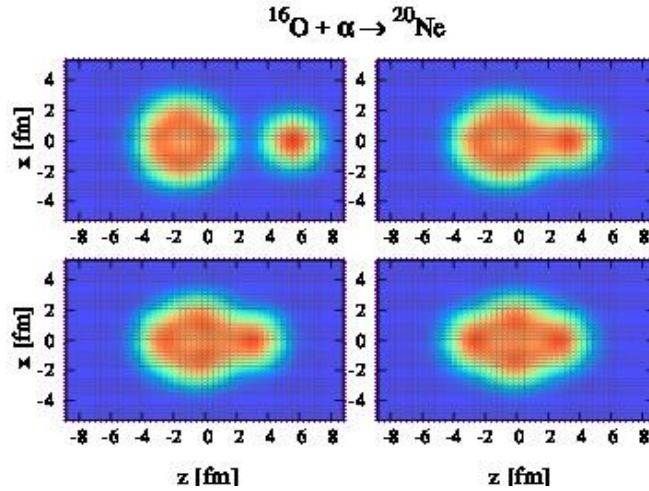


図 1:  $^{16}\text{O} + \alpha \rightarrow ^{20}\text{Ne}$  の核融合経路上の 4 点における密度分布 (x-z 平面)

【 2 】アイソスピン不変なエネルギー汎関数とアイソスピン対称性の破れ (中務、佐藤 (大阪市大)、Dobaczewski (ワルシャワ大)、Satula (ワルシャワ大))

現在主流となっている原子核のエネルギー密度汎関数は、Skyrme 形式、Gogny 形式、共変形式 (相対的) の 3 つに大別されるが、どれも陽子と中性子の密度の汎関数としてエネルギーが与えられている。しかし、陽子や中性子はアイソスピンの第 3 成分の固有状態であり、アイソスピン空間における回転に対して不変ではなく、一般にはアイソスピンが任意の方向を向いた状態、すなわち陽子と中性子が混合した状態に拡張する必要がある。これを実行するため、昨年度までに、陽子・中性子を区別せずに「核子」として扱う新しい

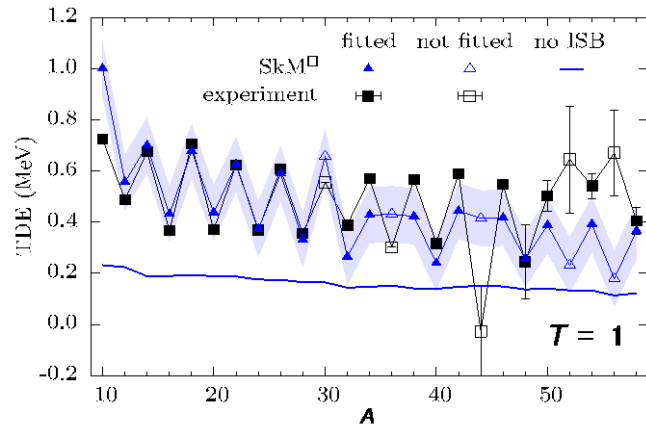


図 2 : Triple displacement energy (TDE) と呼ばれるアイソスピン対称性の破れの指標。明示的に破る項を入れない場合が実線、入れた結果が三角で示されている。

Kohn-Sham 方程式と、それに対応する非対角要素を含むエネルギー汎関数を構築し、その計算コード開発を実施した。今年度は、アイソスピン対称性の破れに関する昨年の解析をさらに詳細に実施し (図 2)、破れを記述するために新たに導入したエネルギー汎関数が、核子・核子散乱の散乱長における対称性の破れの大きさと無矛盾であることを明らかにし

た。また、いくつかの実験で測定された原子核質量のデータについて、理論計算の値と大きなズレが見つかり、再測定の必要性を提唱した。

### 【 3 】 対振動状態における集団座標(中務、侃(D1))

原子核の励起状態の中で、スピン・パリティが $0^+$ の状態には対振動状態と解釈される状態が存在する。これは、ゲージ対称性を破る秩序パラメータであるエネルギー・ギャップの大きさが揺らぐ(振動する)集団的状态であると解釈されてきた。しかし、その性質にはまだまだ未解決な点が多い。

我々は、対相関がもたらす集団的ダイナミクスを記述するため、厳密解を求めることができる対相関模型(リチャードソン模型)に対して、ASCC法を用いて集団座標を微視的・非経験的に決定した。これにより、これまで仮定されていたギャップ・パラメータを集団座標として扱うことには問題が多く、それとは全く異なる集団座標が導出されることを示した。これは、過去の多くの解析の問題点を指摘するものであり、重要な成果であると言える。

### 【 4 】 中性子星内殻における1次元周期構造の密度汎関数計算(中務、柏葉(M2))

中性子星の内殻(インナー・クラスト)と呼ばれる表面に近い領域では、中性子の海の中に原子核が周期的に配置された構造を取ると予想されている。中心に近づいていくと、やがて一様な核物質になると考えられるが、その直前には、パスタ相と呼ばれる奇妙な形の原子核が現れると考えられている。その中でも、スラブ相(ラザーニャ相)と呼ばれる板状の原子核が現れる領域があると予想されており、今回、このスラブ相に対して、厳密な境界条件を考慮した完全自己無撞着な密度汎関数計算を実行することに成功した。周期的なポテンシャルに対するブロッホ波動関数は固体のバンド計算で良く知られているが、これと同じ計算を中性子星物質スラブ相について行った。固体のバンド計算では、原子核(イオン)によって作られた周期的ポテンシャル中の電子の波動関数を求めるわけだが、原子核では周期的ポテンシャル自体、核子(陽子・中性子)の自己無撞着ポテンシャルとして与えられ、核子運動の自由度だけから自発的に現れた周期性である。これまで、このような計算を自己無撞着に行った例はなく、世界初の成果である。

### 【 5 】 対相関の精密化(日野原)

平均場近似では対相関はゲージ対称性の自発的破れをもたらし、対回転モードと呼ばれる対称性を回復させるゼロエネルギーの南部=Goldstone(NG)モードが、超伝導原子核の準粒子乱雑位相近似(QRPA)解として現れる。昨年度に我々は対回転の慣性モーメントが原子核の対相関の性質を反映する指標として優れていることを指摘した。従来の対相関の指標は対ギャップであり、これを奇核と偶核の束縛エネルギー差(OES)の実験値に対応させ、対相関の性質を議論してきた。しかし、対ギャップが実験観測量ではないことや、対ギャッ

ブ、OES それぞれの定義が一意ではないこと、OES に含まれる時間反転に対して符号を変える項の理解が進んでいないことにより、対相関の詳細な性質のみを OES から抜き出すのは難しく、それゆえに対密度汎関数としては最も簡単な形と密度依存性しか考慮されておらず、対密度汎関数の精密な議論は進んでいなかった。対回転の慣性モーメントを指標に用いることで、これらの問題を回避し、理論と観測値の直接的な比較が可能となり、対密度汎関数の理解も深めることが可能となる。まずは、Skyrme 型の有効相互作用には存在するが、通常対相互作用では考慮されていない対密度の空間微分項(運動量依存項)依存性を調べた。錫と鉛同位体で対密度の空間微分項の結合定数を変えながら対回転の慣性モーメントを系統的に計算し、実験値を系統的に再現するためには、この対密度の空間微分項が重要であることを示した。将来、原子核密度汎関数の結合定数を、実験データを用いて最適化する際には、対回転の慣性モーメントが有用であると言える。

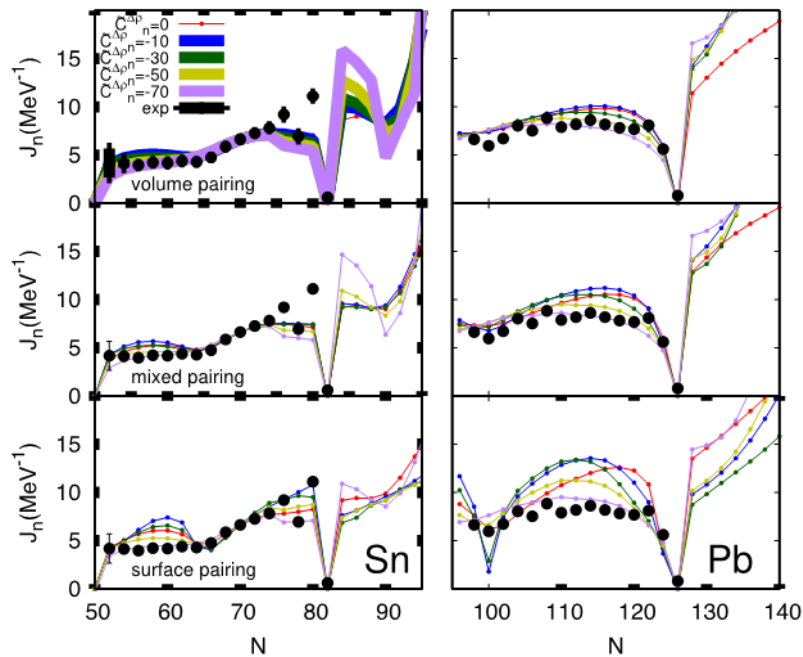


図 3 : 錫と鉛同位体での対回転の慣性モーメントの対密度の空間微分項依存性。

## 【 6 】 一般化された原子核密度汎関数での Thouless の定理の証明 (日野原)

エネルギー重率和則に関する Thouless の定理ではハミルトニアンと遷移演算子の二回交換関係によって、本来すべての励起状態の足し上げが必要となる和則を基底状態の期待値と結びつけることができるため、QRPA の計算コードのチェックや、巨大共鳴の情報の抽出に大変有用である。原子核密度汎関数理論でも Thouless の定理は有効であることは広く知られていたが、従来の定理の証明ではハミルトニアンを用いるため、ハミルトニアンが存在しない原子核密度汎関数理論の場合には厳密には定理の適用の範囲外であった。ハ

ミルトニアンとは対応がない一般化された原子核密度汎関数の場合において、Thouless の定理をハミルトニアン演算子を使うことなく証明し、定理の証明を行った。汎関数の局所ゲージ不変性が保たれている場合は従来の Thouless の定理が適用可能であるが、これが破れている場合は対称性の破れに起因する項が発生することを示した。また有限振幅法の複素積分の方法によって和則を計算し、局所ゲージ対称性が破れている場合においても拡張された定理が有効であることを数値的に示した。

## 【 7 】 超流動原子核の衝突における摩擦係数の評価（橋本）

原子核内に存在する核子（陽子・中性子）の間には、対相関と呼ばれる、2つの核子に対し組むような相関が存在することが知られている。対相関を考慮して微視的に原子核の反応を記述するために時間依存密度汎関数法（TDHFB）が用いられる。これまで、ラグランジュ格子と調和振動子基底を組み合わせたハイブリッド基底を用いた TDHFB コードを開発し、その有効性を実証した。今回、その計算コードを超流動球形原子核  $^{20}\text{O}$  同士の正面衝突  $^{20}\text{O}+^{20}\text{O}$  に応用し、微視的な計算である TDHFB 法から巨視的な摩擦項に用いられる摩擦係数を抽出し、その初期衝突エネルギー依存性を明らかにした。先行研究として TDHF に基づいた計算があるが、対相関を含んだうえでの摩擦係数の導出は本研究の結果が初めてとなる。一連の計算によって以下の結果を得た：摩擦係数は、クーロン障壁近傍 1 MeV くらいのエネルギーでの衝突の際には他のエネルギー領域に比べて大きく、同時に、移行エネルギー量も大きくなる。一方、この近傍領域を越えて衝突のエネルギーを 10 MeV にわたって増加させると、摩擦係数は急速に小さくなり衝突のエネルギーにあまり依存しないようになる。摩擦係数についての、この衝突エネルギー依存性は、定性的には以下のように理解できる：クーロン障壁近傍においては衝突速度が低下するので核間のエネルギー移動が（比較的）長い時間にわたり行われるので、強い摩擦となって現れる。一方、衝突エネルギーの増加に伴い、エネルギー移動に関わる時間が減少するので、摩擦は弱くなる。実際には、どの衝突エネルギー領域でも衝突直後から対相関エネルギーが急速に減少するので、その効果を明らかにするために、さらに精密な計算が必要である。

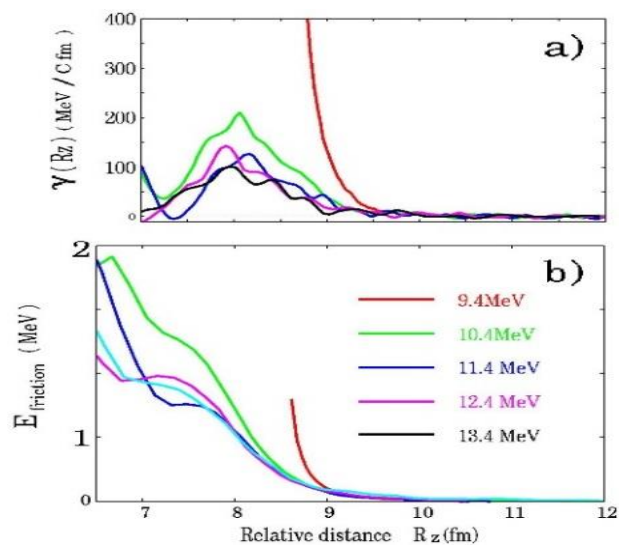


図 4 : a):酸素  $^{20}\text{O}$  原子核間の相対距離と摩擦係数、図 b):散逸したエネルギーと相対距離の関係をそれぞれ示す。

### 【 8 】 3 次元空間上の有限振幅法の開発（鷲山、中務）

質量数 100 前後の原子核では、低励起エネルギー領域で複数の変形状態が共存したり、陽子数・中性子数の変化に対し基底状態や低励起状態が急激な構造変化を示したりすることが知られている。このような原子核を大振幅集団運動の観点から理解するために我々は自己無撞着な密度汎関数法による四重極集団模型の構築を目指している。その集団ハミルトニアンに現れる集団質量を密度汎関数法に基づく準粒子乱雑位相近似(QPRA)法で評価するには非軸対称変形核に対する QRPA 計算が必要である。これが大規模数値計算となるため、これまでの QRPA 計算は軸対称原子核への応用に限られてきた。近年、大規模数値計算の要因である残留相互作用の計算及び大次元の QRPA 行列要素の計算と対角化を回避して QRPA 計算を実行できる有限振幅法が提案された。有限振幅法では、大規模数値計算となる残留相互作用の計算と QRPA 行列の対角化を露わに行なうことなく、外場に対する原子核の線形応答モードを記述する。

本研究では、昨年度に引き続き 3 次元空間上での有限振幅法 QRPA 計算の数値計算コードの開発を行なった。まず、有限振幅法より得られた強度関数と和則の分析から数値計算コードの修正を行ない、和則を満たすようにコードの改良を行なった。次に、一粒子波動関数の保持する対称性の分析からコードの計算量の削減を行い、およそ 30% 程度数値計算量を減らすことが出来た。また、非軸対称原子核  $^{110}\text{Ru}$  ( $\beta=0.31$ ,  $\gamma=20^\circ$ ) の単極応答、及び、アイソスカラー四重極応答に応用し、強度関数と和則の計算を行ない、強度関数が和則を満たすことを示し、四重極演算子のそれぞれの  $z$  成分に対する強度関数の分離を得た。今後は大振幅集団運動に対する質量パラメータ計算を行ない、集団ハミルトニアンの構築を目指す。

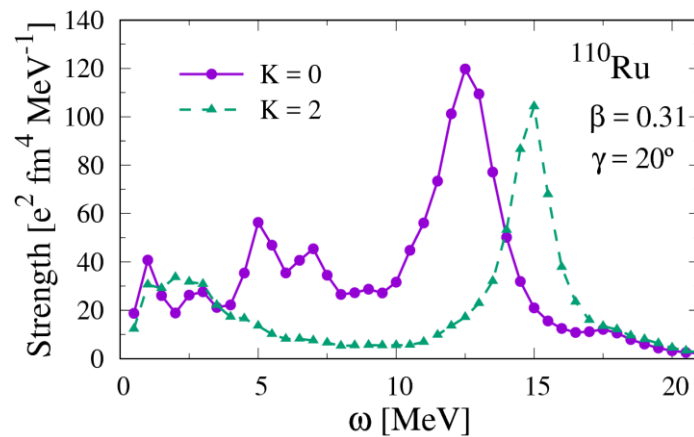


図 5：非軸対称核  $^{110}\text{Ru}$  の四重極振動に対する強度関数

### 【 9 】 重陽子—原子核全反応断面積の公式化（鷲山、養茂（阪大）、緒方（阪大））

重陽子—原子核弾性散乱は様々な分野で重要な基礎的反応過程であり、断面積評価のための汎用公式がいくつかある。それらは巨視的な反応模型を基に比較的狭いエネルギー領域に適用範囲が限られている。本研究では、広範囲のエネルギーにおける断面積の微視的な評価及びその少数パラメータによる公式化を行なった。さらに、放射線施設や医療機関などで広く用いられる粒子輸送コード PHITS にこの公式を提供する目的で研究を行な

った。全反応断面積の計算には重陽子の分解反応を考慮した連続状態離散化結合チャンネル法を採用し、重陽子—原子核間ポテンシャルは微視的な畳み込み模型を用い、原子核の密度分布は微視的な密度汎関数法で評価した。そして、この方法で得られた15の原子核に対する全反応断面積を重陽子の入射エネルギー( $10\text{MeV} < E < 1000\text{MeV}$ )、原子核の陽子数、核子数の関数で公式化した。この関数は既存の実験データを再現し、以前に提案された汎用公式よりも高精度で広範囲に適用可能な反応断面積公式を得た。この公式は粒子輸送コード PHITS にも既に組み込まれており、広く使われ始めている。

【 10 】 奇核の分光学的性質に関する研究 (野村、Vretenar (ザグレブ大学)、Niksic (ザグレブ大学) )

エネルギー密度汎関数理論と *particle-core coupling* の枠組みに基づいて、陽子・中性子いずれかが奇数の核種 (奇核) の分光学的性質を計算するための方法を新たに開発した。この方法では、偶偶核コアのポテンシャルエネルギー面、*unpaired particle* の *single-particle energy* と *occupation probability* を相対論的密度汎関数に基づいた平均場模型で計算し、それらを微視的インプットとして *particle-boson-core coupling* のハミルトニアンを決定した。軸対称変形した奇核種 Eu および Sm 同位体にこの方法を適用し、低エネルギー励起スペクトルおよび電磁遷移強度の実験値を再現することができた。希土類領域の偶偶核では、中性子数 90 近傍において球形から軸対称変形への形状相転移が良く知られているが、本研究において、*unpaired fermion* の形状相転移に与える影響を解析した。変形、励起エネルギー、電磁遷移などの物理量を計算し、それらの値が中性子数の増減によって急激に変化することを示すことで、偶偶核において見られるのと同様の形状相転移が奇核系でも発現することを明らかにした。

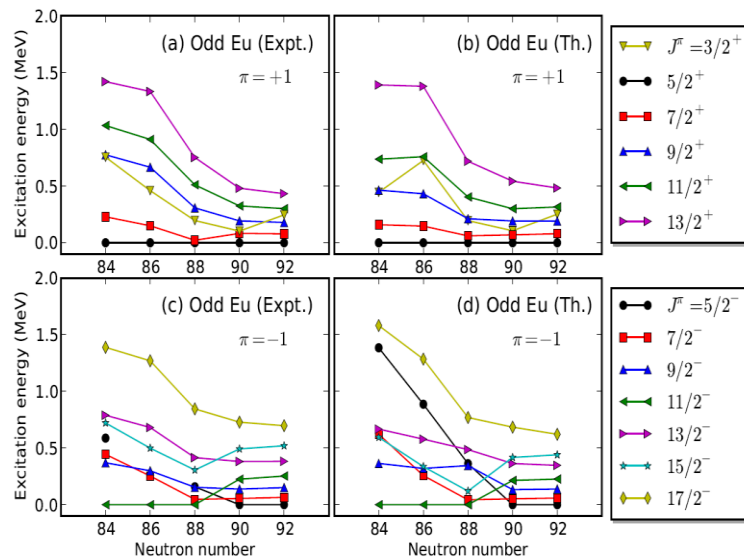


図 6 : 奇核 Eu 同位体の正負パリティ低エネルギー励起スペクトルの遷移

【 11 】 質量数 100 近傍の中性子過剰核における形状相転移と変形共存（野村、Rodriguez-Guzman（クウェート大学）、Robledo（マドリード自治大学））

Gogny 型密度汎関数に基づいて相互作用するボソン模型ハミルトニアンを導く方法を用いて、近年実験的理論的に大きな注目を集めている、質量数 100 近傍の中性子過剰 Ru, Mo, Zr, Sr 同位体における形状進化の記述を行った。この方法では、Gogny-D1M HFB 計算でまず 4 重極変形空間でのポテンシャルエネルギー面を計算し、それをボソン模型ハミルトニアンの内部固有状態での期待値に写像することで、これらの原子核の集団励起状態を記述するためのボソンハミルトニアンのパラメータを決定した。主要な結果として、Ru および Mo 原子核において gamma 不安定な構造が多く見られること、Zr および Sr においてプロレートオブレート変形共存を示唆したことである。励起エネルギーや電磁遷移強度などの分光学的性質の実験値との良い一致が得られ、実験に先駆けた理論的予言も行った。

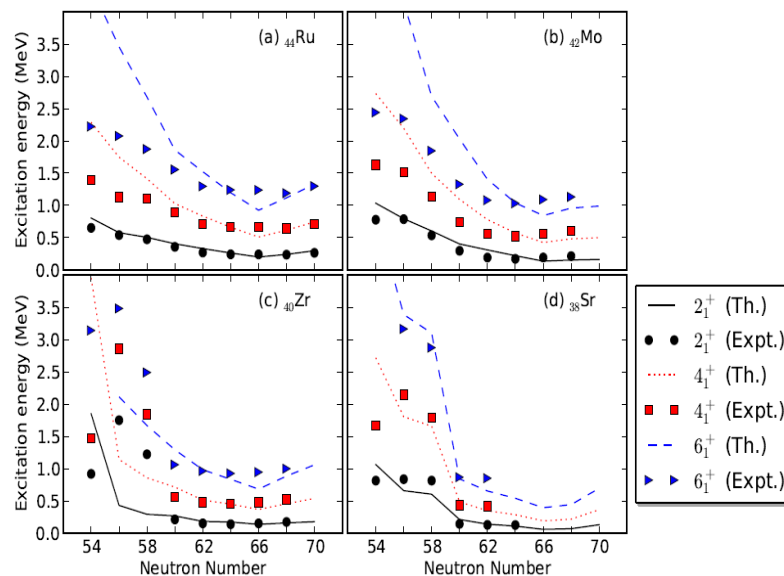


図 7 : 偶偶核 Ru, Mo, Zr, Sr 同位体の低励起 yrast 状態の遷移

【 12 】 Pair transfer probabilities obtained by projection method (Scamps, 橋本)

We developed a projection method to determine the transfer probabilities in reactions at energies lower than the barrier. This method works also for Time-dependent Hartree-Fock Bogoliubov method with two superfluid fragments. In that case, both fragments break the particle number symmetry, then we have to project on the good number of particles in both fragments. We tested this method on a simple toy model. This model improves the comprehension of the nuclear Josephson effect and the fluctuation of the fusion barrier in collisions between two superfluid fragments. One article is in preparation on that subject.



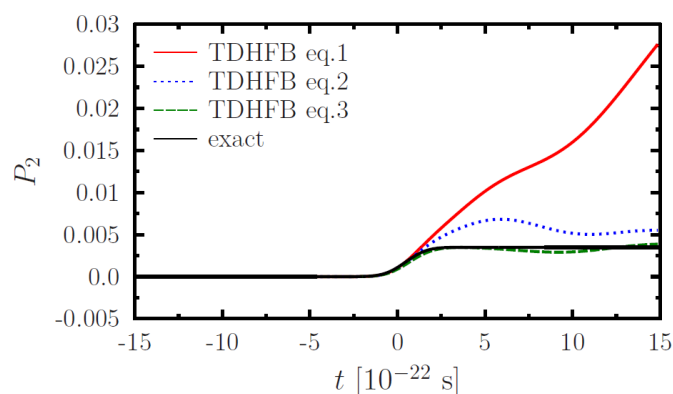


図 8 : Pair transfer probability as a function of time with several prescriptions of the TDHFB equations compared to the exact solution

**【 13 】 Effect of pair transfer on fusion reactions using coupled channel methods (Scamps、萩野 (東北大))**

We improved the phenomenological description of the transfer and fusion reaction with the coupled channel method. In a precedent study, it was shown that it was not possible to simultaneously describe the fusion cross section and the transfer probabilities. By taking into account different collective states after the neutron pair transfer in the coupling scheme, We improved the simultaneous description of the  $40\text{Ca}+96\text{Zr}$  and  $40\text{Ca}+64\text{Ni}$  experimental data.

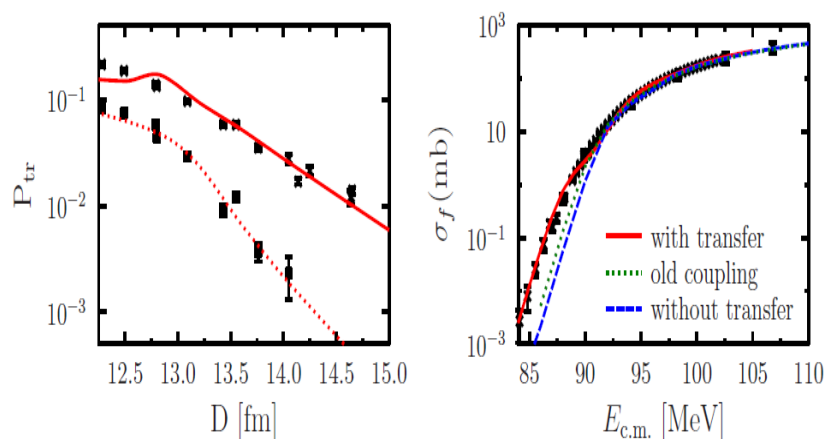


図 9. (Left) Transfer probabilities for the reaction  $40\text{Ca}+96\text{Zr}$ , the experimental data for one-neutron (crosses) and two-neutron (square) are compared to coupled-channels calculations (solid line for 1n and dotted line for 2n). (Right) : fusion cross section from the experimental data (dashed blue line) compared to the coupled-channels calculation of ref. [G. Scamps and K. Hagino, Phys. Rev. C 92, 054614 (2015)] (dotted green line) and the present calculation (solid red line)

**【 14 】 Description of the excitation energy using the time-dependent Hartree-Fock + BCS theory (Scamps, Lacroix (IPNO, CNRS/IN2P3), Rodriguez (GANIL) and Farget (GANIL))**

In collaboration with an experimental group, C. Rodriguez and F. Farget at Ganil, We developed a method to determine the excitation energy as a function of the center of mass energy in a given transfer channel. We used is the Time-dependent Hartree-Fock+BCS method to determine the transfer probabilities and the average excitation energy. The method is applied to the reaction involving a  $^{238}\text{U}$  beam on a  $^{12}\text{C}$  target, which has recently been measured at GANIL. It is shown that the excitation energy calculated with the microscopic theory compares well with the experimental observation, provided that the competition with fusion is properly taken into account.

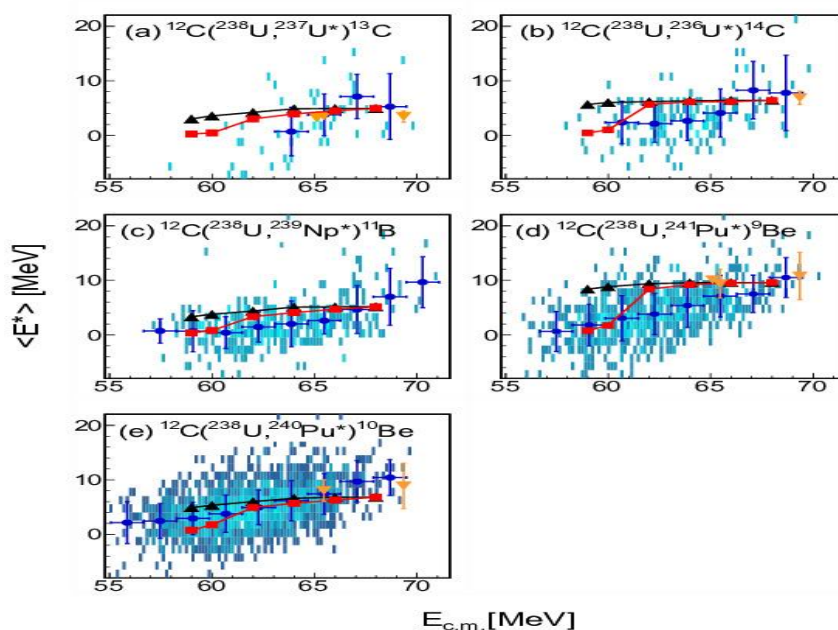


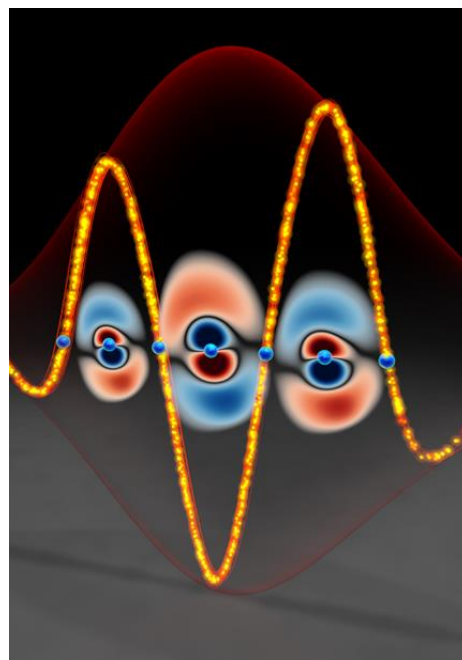
図 10: Average excitation energy as a function of the center- of-mass energy for the main channels observed experimentally: experimental data (blue dots), TDHF + BCS results (black triangles), TDHF + BCS results where the excitation energy has been shifted by 3 MeV (red squares), and the HIPSE results (orange down triangles). In the latter case, error bars correspond to the widths of the calculated distributions. The superimposed blue (gray) areas correspond to the experimental event-by-event distributions of the excitation energy.

**【 15 】 パルス光からガラスへの超高速エネルギー移行 (佐藤、矢花、A. Sommer、 M. Schultze、 F. Krausz 他 (マックスプランク量子光学研究所アト秒実験グループ) )**

我々のグループでは、時間依存密度汎関数理論 (TDDFT) に基づく電子ダイナミクスの第一原理計算と、パルス光の電磁場を記述するマクスウェル方程式を多階層で連結したシミュレーション法を独自に開発し、高強度超短パルス光と物質の相互作用に関する先端の光科学研究を展開している。本研究は、高強度超短パルスレーザーから透明物質の電子へ、

光の1周期よりも短い時間スケールでエネルギーが移行する過程を、マックスプランク量子光学研究所のアト秒科学実験グループと協力して解明したものである。

実験はFused Silica、計算は $\alpha$ クォーツ（共に $\text{SiO}_2$ ）の $10\ \mu\text{m}$ の薄膜に対して、平均振動数 $1.55\text{eV}$ の数サイクルの高強度超短パルスレーザーを照射する。測定と計算を直接比較することのできる量の一つは、薄膜を透過したパルス光の波形そのものである。実験的にはアト秒ストリーキングの方法を用いて計測され、計算では直接透過波の波形を求めることができる。破壊閾値に近い強度のパルスレーザーに対して、測定と計算は共にパルス波形の変化は小さく、両者で変化の傾向（包絡形状と位相）は定性的に一致することが示された。実験で得られたパルス波形変化から、薄膜の中央においてパルス光から物質電子へのエネルギー変化を得ることができ、これをシミュレーションの結果と比較した。その結果、ある強度領域の極めて小さい強度の範囲で、パルス光から物質電子へのエネルギー移行が急激に増大することが示された。その域値は、実験と計算で良く一致している。この結果は透明材料のレーザー加工初期過で起こる光から物質へのエネルギー移行を初めて直接捉えたものとして、注目される。



本研究の成果を含む論文 A. Sommer et. al, Nature 534, 86–90 (2016)の出版時にプレスリリースを行なった（平成28年5月20日）。

図11：左から来る黄色い光が二酸化ケイ素の原子に照射し、各原子の周りにいる電子を振動させる。この電子の動きが光波のエネルギーを吸収する。パルス光の終わりで、電子による吸収されたエネルギーは再び光波に戻る。この物質を通過した後の光波の時間波形を正確に測定し、アト秒の速さで変化する固体の電子の運動を、実時間観測することが可能になった。

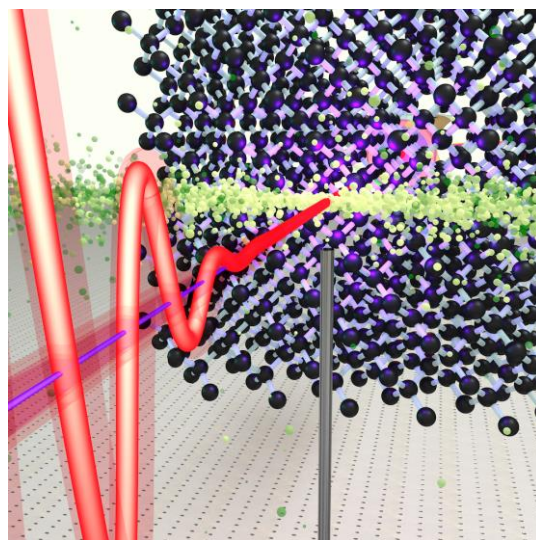
#### 【16】光サイクル以下の時間スケールで起こるダイヤモンド光応答の超高速変化（佐藤、矢花、M. Lucchini、U. Keller 他（チューリッヒ工科大学アト秒実験グループ））

電子ダイナミクスに対するTDDFT計算と光電磁場に対するマクスウェル方程式を組み合わせた第一原理計算を用い、チューリッヒ工科大学のアト秒実験グループと協力して、ダイヤモンドに数サイクルのパルス光を照射した時に、光の1サイクルよりも短い時間スケールでダイヤモンドの光応答（誘電関数）が変化することを示した。

実験と第一原理シミュレーションはともに、 $50\text{nm}$ の厚さを持つダイヤモンド薄膜に平均振動数 $1.55\text{eV}$ 、数サイクルの高強度パルス光をポンプ光として照射し、それと時間差を制御した平均振動数が $40\text{eV}$ 程度のアト秒プローブパルス照射して、ポンプ光電場がダイヤ

モンドの 40eV 近傍の領域に引き起こすプローブ光吸収率の変化を調べた。測定とシミュレーションにより、光電場の大きさに依存して吸収が変化する様子を明らかにすることができた。

シミュレーションの内容を分析することにより、この吸収率の変化が動的フランツ・ケルディッシュ効果によることがわかった。フランツ・ケルディッシュ効果は、バンドギャップを持つ誘電体に静電場を印加した時に、電子のトンネル効果によりバンドギャップ以下のエネルギーで光吸収が起こる現象である。本研究は数フェムト秒で振動する電場を照射した場合でも、それに起因する電子運動が誘電率の超高速変化をもたらすことを示したものであり、この結果は将来の光波を用いた新たなエレクトロニクスの実現に向けて、重要な基礎的知見を与えるものである。



本研究の成果を含む論文 M. Lucchini et. al, Science 353, 916-919 (2016) の出版時にプレスリリースを行なった (平成 28 年 8 月 26 日)。

図 12 : ダイヤモンドの薄膜にレーザーパルスを照射する様子。

#### 【 17 】 電子ダイナミクス計算コード ARTED の開発 (植本、佐藤、矢花、廣川、朴 (計算科学研究センター)、信定、野田 (分子科学研究所))

我々のグループで独自に開発を進めてきた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コード ARTED (Ab-initio Real-Time Electron Dynamics simulator) が多様な計算機において高速に動作するよう、アプリ開発者とシステム研究者との密接な協力によるチューニングを進めた。ARTED は、平成 26 年度の HPCI による京コンピュータの一般利用において、最も高い実効性能を持つアプリと認定され表彰された。また、筑波大学と東京大学が共同で運用を開始したメニーコアスパコン Oakforest-PACS を高効率で利用できるよう、Intel Xeon Phi の Knights Landing プロセッサに対するチューニングを進めた。

ARTED を始めとする電子ダイナミクス計算コードを整備して、光科学分野において有用な第一原理ソフトウェアを開発・応用することを目指す CREST 研究「光・電子融合第一原理計算ソフトウェアの開発と応用」(代表: 矢花一浩) が、平成 28 年 10 月よりスタートした。この課題は、分子科学研究所の信定グループとの密接な協力を予定しており、分子研ではナノ構造体における電子ダイナミクスを計算するコード GCEED を開発している。CREST 研究の開始を機会に、ARTED と GCEED を統合し、固体からナノ構造までを対象とするソフトウェア SALMON (Scalable Ab-initio Light-Matter simulator for Optics and Nanoscience) を開発することを決め、準備作業を進めた。

**【 18 】光電磁場と電子ダイナミクスを結合した超大規模計算の試み (植本、佐藤、矢花、廣川、朴 (計算科学研究センター) )**

Oakforest-PACS の試験期間に、同スパコンの全ノードを用いて ARTED による光・電子ダイナミクス超大規模計算を行う機会を得た。これまで光電磁場のマクスウェル方程式と TDDFT による電子ダイナミクス計算では、電子ダイナミクスは常に 3 次元であるが光伝播に関しては 1 次元計算に限られていた。この全ノードを使用できる機会を利用して、光電磁場を記述するマクスウェル方程式が 2 次元及び 3 次元となる場合について計算を行った。2 次元の場合には光渦を伴う入射パルス光とグラファイト、シリコン表面の相互作用を、3 次元の場合にはシリコンからなるナノピラーや平面状に配置したナノ球体とパルス光の相互作用に関する計算を行った。両者の場合とも、多数のノードを用いた場合にも高いスケールリングを示し、高効率な計算が行えることを確認した。

**【 19 】グラファイト薄膜の非線形光応答計算 (植本、矢花、蔵田、河口 (IHI 株式会社) )**

グラファイトに超短パルス光を照射した際に起こる、光から電子へのエネルギー移行を調べた。グラファイトの単層からなるグラフェンでは 2 次元バンド構造を反映し、非線形光応答の一種である可飽和吸収が顕著に現れることが知られており、すでに超短パルスレーザー発振に応用されている。我々はグラファイトに対して時間依存密度汎関数理論に基づく第一原理計算を行い、パルス電場から電子へのエネルギー移行の様子を調べた。その結果、 $10^{10}$ - $10^{12}$  W/cm<sup>2</sup> 程度の限られた強度範囲で、パルスの時間長を増してもエネルギー移行が増大しないことが見出された。このエネルギー移行の飽和現象を理解するため、印加した電場と誘起された電流の関係を調べたところ、半金属であるグラファイトでは通常はオームの法則が成立するが、飽和が起こる強度ではパルス電場が照射する途中で、オームの法則の成り立つ領域から反オーム応答へと変化する事、またより高い強度では絶縁体応答へと変化する様子が見出された。これらは、可飽和吸収現象のメカニズムの理解や、炭素材料に対する非熱レーザー加工の初期過程を理解する上で有用な知見を与えるものである。

**【 20 】固体非線形光応答の実時間・実空間分析 (植本、佐藤、矢花)**

物質の摂動的な非線形応答を調べる第一原理計算手法として、時間依存密度汎関数理論の実時間計算に基づく方法を、昨年度に引き続き検討した。結晶の単位セルに、波形が等しく強度のみ異なるパルス電場を複数照射した時の電流や電子密度変化を求め、数値的な差分により 2 次、及び 3 次の非線形応答を得る方法である。

**4. 教育**

1. 柏葉優、修士 (理学) 、 “中性子星内殻におけるスラブ相に対する完全自己無撞着計算”

**5. 受賞、外部資金、知的財産権等**

## 受賞

1. 平成 27 年度 HPCI 優秀成果賞。「京」の一般利用課題「極限的パルス光と物質の相互作用を記述するマルチスケール第一原理計算」(研究代表: 矢花)が、一万ノード以上の大規模計算において「京」の実効性能を最も引き出した課題と認定された。

## 外部資金

1. 日本学術振興会科学研究費・基盤研究(B)、中務孝、代表、2013-2015 年[期間延長]、1,763,592 円 (H28 年度直接経費)、「原子核の低エネルギー集団励起と核融合・核分裂機構の解明」
2. 科研費・新学術領域研究(研究領域提案型)、中務孝、分担、2012-2016 年、1,000,000 円 (H28 年度直接経費)、「冷却原子を用いた中性子過剰な低密度核物質の状態方程式」
3. JST ImPACT「核変換による高レベル放射性廃棄物の大幅な低減・資源化」、中務孝、課題責任者、2014-2018 年、6,000,000 円 (H28 年度)、「核構造計算による核反応モデルの高精度化」
4. 日本学術振興会科学研究費・若手研究(B)、日野原 伸生、代表、2016-2019 年、2016 年度直接経費 900,000 円、「中性子—陽子対相関・対凝縮の解明」
5. 科研費基盤研究(B)「第一原理計算に基づく極限パルス光と物質の相互作用の解明」、矢花一浩、代表、H27-30 年度、3,300,000 円 (H28 年度直接経費)
6. 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、H28-32 年度、7,469,000 円 (H28 年度直接経費)。
7. 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、H28-33 年度、7,500,000 円 (H28 年度直接経費)
8. 共同研究経費、株式会社 IHI、「時間依存第一原理解析によるフェムト秒レーザと物質との相互作用に関する研究」、450,000 円 (H28 年度直接経費)

## 6. 研究業績

### (1) 研究論文

#### A) 査読付き論文

1. A. Sommer, E. M. Bothschafter, S. A. Sato, C. Jakubeit, T. Latka, O. Razskazovskaya, H. Fattahi, M. Jobst, W. Schweinberger, V. Shirvanyan, V. S. Yakovlev, R. Kienberger, K. Yabana, N. Karpowicz, M. Schultze and F. Krausz, "Attosecond nonlinear polarization and light-matter energy transfer in solids", Nature 534, 86 (2016).
2. M. Lucchini, S. A. Sato, A. Ludwig, J. Herrmann, M. Volkov, L. Kasmi, Y. Shinohara, K. Yabana, L. Gallmann, U. Keller,

- "Attosecond dynamical Franz-Keldysh effect in polycrystalline diamond",  
Science 353, 916 (2016).
3. K. Sekizawa, K. Yabana,  
"Time-dependent Hartree-Fock calculations for multinucleon transfer and  
quasifission processes in the Ni64 +U238 reaction",  
Phys. Rev. C**93**, 054616 (2016)
  4. 廣川祐太、朴泰祐、佐藤駿丞、矢花一浩、  
"電子動力学シミュレーションのステンシル計算最適化とメニーコアプロセッ  
サへの実装"、  
情報処理学会論文誌コンピューティングシステム (ACS) Vol.9, No.4, pp.1-14  
(2016)
  5. K. Matsuyanagi, M. Matsuo, T. Nakatsukasa, K. Yoshida, N. Hinohara, and K. Sato,  
"Microscopic derivation of the Bohr– Mottelson collective Hamiltonian and its  
application to quadrupole shape dynamics",  
Phys. Scr. 91 (2016) 063014 [Invited paper].
  6. T. Nakatsukasa, K. Matsuyanagi, M. Matsuzaki, and Y. R. Shimizu  
"Quantal rotation and its coupling to intrinsic motion in nuclei",  
Phys. Scr. 91 (2016) 073008 [Invited paper].
  7. T. Nakatsukasa, K. Matsuyanagi, M. Matsuo, and K. Yabana,  
"Time-dependent density-functional description of nuclear dynamics",  
Rev. Mod. Phys. 88, (2016) 045004 [Invited paper].
  8. K. Wen and T. Nakatsukasa,  
"Self-consistent collective coordinate for reaction path and inertial mass",  
Phys. Rev. C. 94 (2016) 054618.
  9. G. Watanabe, S. Yoon, F. Dalfovo, and T. Nakatsukasa,  
"Multiple period states of the superfluid fermi gas in an optical lattice",  
J. Phys. Conf. Ser. 752 (2016) 012002.
  10. Y. Kashiwaba and T. Nakatsukasa,  
"Density functional calculations for the neutron star matter at subnormal density",  
JPS Conf. Proc. 14, (2017) 020801.
  11. K. Wen, F. Ni, and T. Nakatsukasa,  
"Nuclear reaction path and inertial mass in the self-consistent collective coordinate  
method",  
PoS(INPC2016) 211 (2017).
  12. S. Ebata, and T. Nakatsukasa  
"Octupole deformation in the nuclear chart based on the 3D Skyrme Hartree-Fock  
plus BCS model",  
Phys. Scr. in press.
  13. K. Wen and T. Nakatsukasa,  
"Adiabatic self-consistent collective path in nuclear fusion reactions",

- Phys. Rev. C, in press.
14. N. Hinohara, W. Nazarewicz,  
 “Pairing Nambu-Goldstone Modes within Nuclear Density Functional Theory”,  
 Phys. Rev. Lett. 116, 152502 (2016)
  15. Y. Hashimoto and G. Scamps,  
 Gauge angle dependence in time-dependent Hartree-Fock-Bogoliubov calculations of  
 $^{20}\text{O}+^{20}\text{O}$  head-on collisions with the Gogny interaction,  
 Phys. Rev. C 94, 014610(2016)
  16. K. Minomo, K. Washiyama, K. Ogata,  
 "Deuteron-nucleus total reaction cross sections up to 1 GeV",  
 J. Nucl. Sci. Technol. 54, 127 (2017)
  17. K. Nomura, T. Niksic, and D. Vretenar,  
 "Beyond-mean-field boson-fermion model for odd-mass nuclei",  
 Phys. Rev. C 93, 054305 (2016)
  18. K. Nomura, R. Rodriguez-Guzman, and L. M. Robledo,  
 "Structural evolution in  $A \sim 100$  nuclei within the mapped  
 interacting boson model based on the Gogny energy density functional",  
 Phys. Rev. C 94, 044314 (2016)
  19. T. Grahn, S. Stolze, D. T. Joss, R. D. Page, B. Saygi, D.  
 O'Donnell, M. Akmal, K. Andgren, L. Bianco, D. M. Cullen, A. Dewald,  
 P. T. Greenlees, K. Heyde, H. Iwasaki, U. Jakobsson, P. Jones, D. S. Judson, R. Julin,  
 S. Juutinen, S. Ketelhut, M. Leino, N. Lumley, P. J. R. Mason, O. Moller, K. Nomura,  
 M. Nyman, A. Petts, P. Peura, N. Pietralla, Th. Pissulla, P. Rahkila, P. J. Sapple,  
 J. Saren, C. Scholey, J. Simpson, J. Sorri, P. D. Stevenson, J. Uusitalo, H. Watkins,  
 and J. L. Wood,  
 "Excited states and reduced transition probabilities in  $^{168}\text{Os}$ ",  
 Phys. Rev. C 94, 044327 (2016)
  20. K. Nomura, T. Niksic, and D. Vretenar,  
 "Signatures of shape phase transitions in odd-mass nuclei",  
 Phys. Rev. C 94, 064310 (2016)
  21. T. Daniel, S. Kisyov, P. H. Regan, N. Marginean, Zs. Podolyak, R.  
 Marginean, K. Nomura, M. Rudigier, R. Mihai, V. Werner, R. J. Carroll, L. A. Gurgi,  
 A. Oprea, T. Berry, A. Serban, C. Nita, C. Sotty, R. Suvaila, A. Turturica, C.  
 Costache, L. Stan, A. Olacel, M. Boromiza, and S. Toma,  
 " $\gamma$ -ray Spectroscopy of Low-lying Excited States and Shape Competition in  $^{194}\text{Os}$ ",  
 Phys. Rev. C 95, 024328 (2017).
  22. G. Scamps, VV Sargsyan, GG Adamian, NV Antonenko, D Lacroix,  
 “Extraction of pure transfer probabilities from experimental transfer and capture  
 data”,



Phys. Rev. C **94**, pages 064606 (2016). 4 pages

23. G. Scamps, D. Bourgin, K. Hagino, F. Haas and S. Courtin,  
“Coupled-channels description of the  $^{40}\text{Ca}+^{58,64}\text{Ni}$  transfer and fusion reactions, II”  
Nuovo Cimento C 39 06.
24. G. Scamps, C. Rodríguez-Tajes, D. Lacroix, F. Farget,  
“Time-dependent mean field determination of the excitation energy in transfer  
reactions: application to the reaction  $^{238}\text{U}$  on  $^{12}\text{C}$  at 6.14 MeV/A”,  
Phys. Rev. C **95**, 024613 (2017). 7 pages
25. S. A. Sato, K. Yabana,  
”First-principles calculations for initial electronic excitation in dielectrics induced by  
intense femtosecond laser pulses”,  
Proc. SPIE 10014, Laser-Induced Damage in Optical Materials 2016, 100141A (2017).

B) 査読無し論文

1. 矢花一浩、  
“第一原理計算によるフェムト秒レーザ加工初期過程の解明”、  
第 85 回レーザ加工学会講演論文集、pp. 126-129 (2016).
2. 廣川祐太、朴泰祐、佐藤駿丞、矢花一浩、  
“電子動力学シミュレーションのステンシル計算に対するメニーコアプロセ  
ッサ向け最適化”、  
2016 年ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム  
(HPCS2016) 論文集、2016.
3. K. Yabana,  
“First-principles simulation for strong and ultra-short laser pulse propagation in  
dielectrics”,  
Proceedings, SPIE9835, Ultrafast Bandgap Photonics, 983504
4. T. Nakatsukasa,  
“Time-dependent density-functional calculation of nuclear response functions”,  
Proceedings of the International Conference on Nuclear Theory in the  
Supercomputing Era - 2014 (NTSE-2014) (Pacific National University, 2016) pp.  
15-22.
5. 柏葉 優、中務 孝、  
“低密度領域における中性子星核物質の密度汎関数計算”、  
原子核研究, Vol. 61 Supplement 1, 2016 年夏の学校特集号, pp. 35-36.

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

1. K. Yabana,  
“Maxwell + TDDFT Multiscale Simulation for Attosecond Spectroscopy”, 10th  
International Conference on Computational Physics,  
Cotai District, Macao, China, Jan. 16-20, 2017.
2. K. Yabana,  
“Maxwell + TDDFT multiscale description for interactions of intense pulsed light with  
dielectrics”,  
7th Time-Dependent Density-Functional Theory: Prospects and Applications,  
Benasque, Spain, Sept. 11-23, 2016.
3. K. Yabana,  
“Time-dependent density functional theory for interactions of intense pulsed light with  
dielectrics”,  
KAIST Frontiers in DFT & Beyond Workshop,  
KAIST, Daejeon, Korea, Aug. 16, 2016.
4. K. Yabana,  
“First-principles simulation for strong and ultra-short laser pulse propagation in  
dielectrics”,  
SPIE Defence+Security, Ultrafast Bandgap Photonics workshop,  
Baltimore, USA, April 17-21, 2016.
5. T. Nakatsukasa,  
“Time-dependent density-functional theory and linear response theory”,  
Lecture in SERC School on Modern Microscopic Approaches in Nuclear Physics,  
Srinagar, India, May 17-June 6, 2016.
6. T. Nakatsukasa,  
“Microscopic determination of reaction path, potential, and inertial mass”,  
ECT\* workshop on Towards consistent approaches for nuclear structure and reactions,  
Trento, Italy, June 6 - 10, 2016.
7. T. Nakatsukasa,  
“Nuclear reaction path and inertial mass in the self-consistent collective coordinate  
method”,  
International Nuclear Physics Conference (INPC2016),  
Adelaide, Australia, Sep. 11 – 16, 2016.
8. T. Nakatsukasa,  
“Nuclear reaction as large-amplitude collective motion”,  
Heavy-Ion Accelerator Symposium on Fundamental and Applied Sciences  
(HIAS2016),  
Canberra, Australia, Sep. 18 - 20, 2016.

9. K. Nomura,  
"Shape coexistence in the microscopically guided interacting boson model",  
8th Workshop on Quantum Phase Transitions in Nuclei and Many-Body Systems,  
Prague, Czech Republic, 6-9 June 2016.
10. K. Nomura,  
"Nuclear shapes and excitations in the microscopically-guided algebraic theory",  
Shapes and Symmetries in Nuclei: from Experiment to Theory,  
Gif-sur-Yvette, France, 7-11 November 2016.
11. K. Wen,  
"The Inertial Mass and Collective Path in Nuclear Fusion/Fission Reactions",  
International Conference Nuclear Theory in the Supercomputing Era – 2016  
(NTSE-2016),  
Pacific National University, Khabarovsk, Russia, September 19–23, 2016.
12. G. Scamps  
"Gauge angle dependency in fusion and transfer reactions, restoration of broken  
symmetries in dynamical calculation",  
IPNO, Orsay, France, 16 March 2017.
13. G. Scamps  
"Microscopic description of the transfer and fusion reactions including pairing  
correlations",  
FUSION17 conference,  
Hobart, Australia, 20-24 February 2017.
14. G. Scamps  
"Simultaneous description of multi-nucleon transfer and fusion reactions with the  
coupled channel method",  
LENRT workshop,  
Canberra, Australia, 15-17 February 2017.
15. G. Scamps  
"Josephson effect in nuclear reactions, effect of the restoration of the gauge angle  
symmetry in mean-field dynamics",  
CCS-RIKEN joint workshop,  
Tsukuba, Japan, 12-16 December 2016.
16. G. Scamps  
"Microscopic description of the transfer reaction including pairing correlations",  
HIAS Symposium,  
Canberra, Australia, 18-20 September 2016.

17. G. Scamps

“Description of multi-nucleon transfer and fusion reactions with the coupled channel method”,

INPC conference,

Adelaide, Australia, 11-16 September 2016.

18. S. A. Sato ,

"First-principles simulation for attosecond spectroscopy of solids",

EMN Meeting on Ultrafast 2016 ,

Melbourne, Australia, Oct. 10-14, 2016

B) 一般講演

1. T. Nakatsukasa,

“Microscopic determination of reaction path and inertial mass”,

International workshop on Recent Progresses in Nuclear Structure Physics 2016 (NSP2016),

Kyoto, Japan, Dec. 5-23, 2016.

2. N. Hinohara,

“FAM Applications Towards EDF Optimization”,

NUCLEI SciDAC 2016 Project Meeting, Argonne National Laboratory,

Argonne, IL, USA, Jun. 6-9, 2016.

3. N. Hinohara,

“Nuclear collective excitation modes within finite-amplitude method” (poster presentation) ,

14th International Symposium on Nuclei in the Cosmos XIV (NIC-XIV),

Toki Messe, Niigata, Japan, Jun. 19-24, 2016.

4. N. Hinohara and W. Nazarewicz,

“Pairing rotations in ground states of open-shell even-even deformed nuclei”,

Direct Reactions with Exotic Beams (DREB2016),

Saint Mary’s University, Halifax, Canada, Jul. 11-15, 2016.

5. N. Hinohara and W. Nazarewicz,

“Binding energy differences of even-even nuclei as pairing indicators”,

Nuclear Structure 2016 (NS2016),

Knoxville, TN, USA, Jul. 24-29, 2016.

6. N. Hinohara,

“Neutron-proton superfluid DFT”,

DOE topical collaboration meeting “Nuclear Theory for Double-Beta Decay and Fundamental Symmetries”,

Facility for Rare Isotope Beams, Michigan State University,

- East Lansing, MI, USA, Aug. 1-2, 2016.
7. N. Hinohara and W. Nazarewicz,  
“Pairing Nambu-Goldstone modes and binding-energy differences of even-even nuclei”  
(poster presentation),  
International Nuclear Physics Conference (INPC2016),  
Adelaide Convention Center, Adelaide, Australia, Sep. 11-16, 2016.
  8. N. Hinohara,  
“New pairing observable: binding energy differences of even-even nuclei”,  
First Tsukuba-CCS-RIKEN joint workshop on microscopic theories of nuclear structure  
and dynamics,  
RIKEN Nishina Center and Center for Computational Sciences,  
Tsukuba, Japan, Dec. 12-16, 2016.
  9. N. Hinohara,  
“Recent theoretical developments of finite-amplitude method for QRPA”,  
Recent Progresses in Nuclear Structure Physics (NSP2016),  
Kyoto, Japan, Dec. 5-23, 2016.
  10. Y. Hashimoto,  
“Gogny-TDHFB calculation of  $200 + 200$  head-on collision”,  
First Tsukuba-CCS-RIKEN joint workshop,  
Tsukuba, Japan, Dec. 12-16, 2016
  11. K. Washiyama, Takashi Nakatsukasa,  
"Multipole modes of deformed superfluid nuclei with the finite amplitude method in  
three-dimensional coordinate space",  
SSNET Workshop 2016,  
Gif-sur-Yvette, France, Nov.7-11, 2016
  12. K. Washiyama, Takashi Nakatsukasa,  
"Finite amplitude method for QRPA in three-dimensional coordinate",  
First Tsukuba-CCS-RIKEN joint workshop on microscopic theories of nuclear  
structure and dynamics,  
Wako & Tsukuba, Japan, Dec.12-16, 2016
  13. K. Washiyama,  
"Fusion hindrance in heavy systems with time-dependent Hartree-Fock",  
International Conference on heavy-ion collisions at near-barrier energies  
(FUSION17),  
Hobart, Australia, Feb. 20-24, 2017
  14. K. Washiyama,  
"Present status of three-dimensional finite-amplitude-method QRPA",

2nd workshop on many-body correlations in microscopic nuclear model,  
Sado, Japan, Aug.21-23, 2016.

15. Shunsuke A. Sato , Kazuhiro Yabana, Yasushi Shinohara, Kyung-Min Lee,  
Tomohito Otobe, George F. Bertsch,  
"First-principles calculations for initial electronic excitations in dielectrics induced by  
intense femtosecond laser pulses",  
SPIE Laser Damage 2016,  
Boulder, Colorado, United States, Sep.25-28, 2016
16. F. Ni, T. Nakatsukasa,  
"Self-consistent Collective Coordinate in Richardson model",  
First Tsukuba-CCS-RIKEN joint workshop,  
Tsukuba, Japan, Dec. 12-16, 2016.
17. F. Ni,  
"Pairing dynamics in Richardson model",  
NIC-XIV School 2016,  
Niigata, Japan, June 13-17, 2016
18. F. Ni,  
"Collective coordinates in Richardson model",  
2nd workshop on many-body correlations in microscopic nuclear model,  
Sado, Japan, Aug.21-23, 2016.
19. Y. Kashiwaba, T. Nakatsukasa,  
"Density functional calculations for the neutron star matter at subnormal density",  
2nd workshop on many-body correlations in microscopic nuclear model,  
Sado, Japan, Aug.21-23, 2016.
20. T. Saito,  
"Numerical calculation of giant quadrupole resonance",  
2nd workshop on many-body correlations in microscopic nuclear model,  
Sado, Japan, Aug.21-23, 2016.
21. K. Yaoita,  
"Coriolis effect for vibrational bands in transitional nuclei",  
2nd workshop on many-body correlations in microscopic nuclear model,  
Sado, Japan, Aug.21-23, 2016.

(3) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

1. 矢花一浩、  
“パルス光と物質の相互作用に対する第一原理計算：プログラム開発と応用”、  
第3回材料系ワークショップ～計算物質科学を拓く第一原理計算とその機能モジュール～、  
秋葉原 UDX、2017年2月23日
2. 矢花一浩、  
“極限的パルス光と物質の相互作用を記述するマルチスケール第一原理計算”、  
第3回「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題 成果報告会、  
東京、2016年10月21日
3. 矢花一浩、  
“第一原理計算によるフェムト秒レーザ加工初期過程の解明”、  
第85回レーザ加工学会講演会、  
大阪大学吹田キャンパス、2016年6月9-10日
4. 中務 孝、  
“原子核の形と対称性の破れ”、  
日本物理学会科学セミナー、  
東京大学駒場キャンパス、東京、2016年8月20-21日

B) その他の発表

1. 矢花一浩、  
“JST-CREST 研究課題の目標と計画”、  
JST-CREST 研究課題キックオフ+ポスト「京」サブ課題進捗報告合同ミーティング  
「光・電子融合系の第一原理計算」、  
三宮、2017年1月4-5日
2. K. Yabana,  
”TDDFT in solids for electron dynamics induced by ultrashort laser pulses”,  
Seminar at Max-Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter ,  
Hamburg, Germany, November 4, 2016
3. 中務 孝、  
“核構造計算による核反応モデルの高精度化”、  
ImPACT 藤田プログラム全体会議、  
JST 別館、東京、2016年10月13-14日
4. 中務 孝、  
“核構造計算による核反応モデルの高精度化”、  
ImPACT 藤田プログラム全体会議、  
JST 別館、東京、2017年3月24-25日
5. 日野原 伸生、  
“偶々核の束縛エネルギー差と対回転モード”、  
日本物理学会 2016 年秋季大会、  
宮崎大学、2016年9月21-24日.

6. 日野原 伸生、  
“二重ベータ崩壊の原子核行列要素と中性子陽子対の非線形ゆらぎ”、  
千葉大学原子核理論セミナー、  
千葉大学西千葉キャンパス、2016年11月24日。
7. 日野原 伸生、  
“対相関と二重束縛エネルギー差”、  
研究会「クラスター・平均場の両側面からみる原子核構造の多様性とそのダイナミクス」、  
大阪市立大学杉本キャンパス、2017年1月19-20日。
8. 日野原 伸生, Markus Kortelainen, Witold Nazarewicz,  
“原子核エネルギー密度汎関数の最適化に向けた巨大共鳴の効率的評価”、  
日本物理学会第72回年次大会、  
大阪大学豊中キャンパス、2017年3月17-20日。
9. 橋本幸男、  
“Gogny-TDHFB法による $200+200$ の計算における摩擦係数について”、  
日本物理学会第72回年次大会、  
大阪大学豊中キャンパス、2017年3月17-20日。
10. 鷺山広平、中務孝、  
“3次元有限振幅法QRPAの非軸対称原子核への応用”、  
日本物理学会秋季大会、  
宮崎大学、2016年9月21-24日
11. 鷺山広平、中務孝、  
“3次元QRPAに対する有限振幅法の開発と応用”、  
日本物理学会年次大会、  
大阪大学豊中キャンパス、2017年3月17-20日
12. 植本光治、佐藤駿丞、矢花一浩、  
“Maxwell+TDDFT マルチスケール第一原理計算による二次元光伝播シミュレーションの試み”、  
日本物理学会第72回年次大会、  
大阪大学豊中キャンパス、2017年3月17-20日
13. 佐藤 駿丞、篠原康、矢花一浩  
“固体に対するアト秒過渡吸収分光の第一原理計算”、  
日本物理学会 第72回年次大会、  
大阪大学豊中キャンパス、2017年3月17-20日
14. 倪放、中務孝、



“対相関ダイナミクスを記述する集団座標”、  
クラスター・平均場の両側面からみる原子核構造の多様性とそのダイナミクス、  
大阪市立大学、2017年1月

15. 倪放、中務孝、  
“0+対励起状態を記述する集団座標と四重極相関”、  
日本物理学会 2016 年秋季大会、  
宮崎大学、2016 年 9 月
16. 柏葉 優、中務 孝、  
“中性子星内殻におけるスラブ相に対する完全自己無撞着計算”、  
日本物理学会春季第 72 回年次大会、  
大阪大学、2017 年 3 月 17-21 日
17. 八百板 恭介、中務 孝、  
“5 次元四重極集団ハミルトニアンを用いた回転バンド間 E2 遷移の研究”、  
日本物理学会第 72 回年次大会、  
大阪大学豊中キャンパス、2017 年 3 月 17-20 日

#### (4) 著書、解説記事等

1. 矢花一浩、佐藤駿丞、篠原 康、乙部智仁、  
“高強度超短パルスレーザーと誘電体の相互作用を記述する第一原理計算”、  
固体物理 Vol. 52 (2017).
2. 矢花一浩、“第一原理計算によるレーザー加工初期過程解明”、レーザー研究  
Vol.44 No.12 pp.789-793 (2016)
3. Noboru Takigawa, Kouhei Washiyama,  
"Fundamentals of Nuclear Physics",  
Springer Japan (2017)

## 7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

### 【国際連携】

1. ドイツマックスプランク量子光学研究所のアト秒科学実験グループと、高強度パルスレーザーと固体の相互作用に関する共同研究（矢花）
2. スイスチューリッヒ工科大学のアト秒科学実験グループと、高強度パルスレーザーと固体の相互作用に関する共同研究（矢花）
3. オーストリアウィーン工科大学の理論グループと、電子ダイナミクスの計算科学的  
研究に関する共同研究（矢花）
4. ポーランド・ワルシャワ工科大学の原子核理論グループと共同で、実空間 TDHFB  
計算（中務）

5. 米国ノースカロライナ大学の Engel 教授と二重ベータ崩壊の核行列要素に関する共同研究 (日野原)。
6. 米国ミシガン州立大学 Nazarewicz 教授およびフィンランド・ユバスキュラ大学の Kortelainen 研究員と原子核密度汎関数の諸問題に関する共同研究 (日野原)
7. 米国 SciDAC project "Nuclear Computational Low-Energy Initiative (NUCLEI)", 外国人共同研究者として参加 (日野原)
8. クロアチア・ザグレブ大学の理論グループと、奇核の構造に関する共同研究(野村)
9. スペインマドリード自治大学およびクウェート大学と、形状相転移と変形共存に関する共同研究(野村)
10. 英国サリー大学、ドイツケルン大学をはじめとした、欧州の複数の研究機関の実験グループと、中重核分光に関する共同研究 (野村)

## 8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

1. 国際会議 Nuclear Structure 2016 (NS2016) Conference (Knoxville, TN, USA, July 24-29, 2016)の国際諮問委員を務めた (中務)。
2. 国際ワークショップ Tsukuba-CCS-RIKEN joint workshop on microscopic theories of nuclear structure and dynamics (Wako and Tsukuba, December 12-16, 2016)の組織委員を務めた (矢花、中務、橋本、日野原 (委員長))。

## 9. 管理・運営

矢花一浩

計算科学研究センター 量子物性研究部門 部門主任  
 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 運営協議会委員  
 計算科学研究センター 共同研究主幹  
 計算科学研究センター 先端計算科学推進室長  
 数理物質系物理学域 運営委員会委員

中務孝

計算科学研究センター 原子核物理研究部門 部門主任  
 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 運営協議会委員  
 計算科学研究センター 共同研究委員会委員  
 計算科学研究センター 学際計算科学連携室員  
 数理物質系物理学域 運営委員会委員  
 数理物質系物理学域 原子核理論グループ長  
 数理物質系物理学域 評価委員

## 10. 社会貢献・国際貢献

矢花一浩

京都大学基礎物理学研究所運営協議会委員  
テニユアトラック普及・定着事業委員会委員  
核理論委員会委員  
高エネルギー加速器研究機構大型シミュレーション研究推進委員会委員

中務 孝

高校生対象模擬授業、2016. 8. 1、筑波大学計算科学研究センター  
JAEA タンデム専門委員会委員  
JAEA 黎明研究評価委員会委員  
Editor for Journal of Physical Society of Japan  
Editor for International Journal of Modern Physics E  
核理論委員会委員  
日本物理学会 理論核物理領域・領域代表  
高エネルギー加速器研究機構・素粒子原子核研究所・運営会議議員  
雑誌「原子核研究」編集委員  
計算基礎科学連携拠点運営委員（ポスト京重点課題）

## 11. その他

海外長期滞在

1. 日野原 伸生, National Superconducting Cyclotron Laboratory,  
Michigan State Univ., East Lansing, MI, USA, 2016年4月1日～8月30日
2. 野村昂亮  
University of Zagreb, Croatia, 2016年4月1日～2017年3月31日