

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
研究員	鷺山広平（2018.9 転出）、Guillaume Scamps（2018.12 転出） 温凱（2019.2 着任）
学生	大学院生 4名（うち特別研究学生 1名）

2. 概要

本グループでは、核子（陽子・中性子）の多体系である原子核や中性子星の構造・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、中性子星の誕生にも関わる爆発的天体現象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。さらに、原子力工学分野や応用分野との連携が重要になってきており、本グループでも 2014 年から、原子炉の高レベル廃棄物の資源化・低減化を最終目的とする ImPACT プログラムに参加し、基礎データへの理論的サポートを行ってきている。本グループのメンバーは、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。

また、フェルミ多粒子系として原子核と共通する要素をもつ多電子系としての物質科学に関し、理論と計算による研究を行っている。特に高強度レーザーパルス光と物質の相互作用で起こる超高速電子ダイナミクスに対して時間依存密度汎関数理論に基づく研究を行っており、汎用の光科学第一原理シミュレーションソフトウェア SALMON の開発とそれを応用した研究を展開している。

3. 研究成果

【1】 理論計算核データと InPACS (中務、江幡(東工大)、鷲山)

平成 29 年度、原子核の形を系統的に調査するため、エネルギー密度汎関数に BCS 理論を組み合わせた理論を 3 次元空間表示によって計算し、基底状態に現れる形状を予言した。完全自己無撞着・非制限の計算であり、全エネルギーを最小化することを条件として課した変分により、球形、軸対称性を持ったプロレート型・オブレート型変形、軸対称性を破った三軸非対称変形など、様々な形状が基底状態に出現した。今年度、これに加えて、偶核・奇核・奇々核に対して、球対称性を仮定した 1 次元 HFB 計算による核子密度分布を計算し、およそ 4,000 核種のデータを整備した。

理論計算データとして、これらに加えて、質量や半径、陽子や中性子を剥ぎ取って別の原子核に変換（核変換）するために必要なエネルギーなど、原子核物理学だけでなく様々な応用のために有益な情報をウェブ上に公開した（図 1）。この公開したサイトを、InPACS (Interactive Plot for Atomic nuclei and Computed Shapes) と名付け、平成 31 年 1 月に、筑波大において関連するプレスリリースを行った。

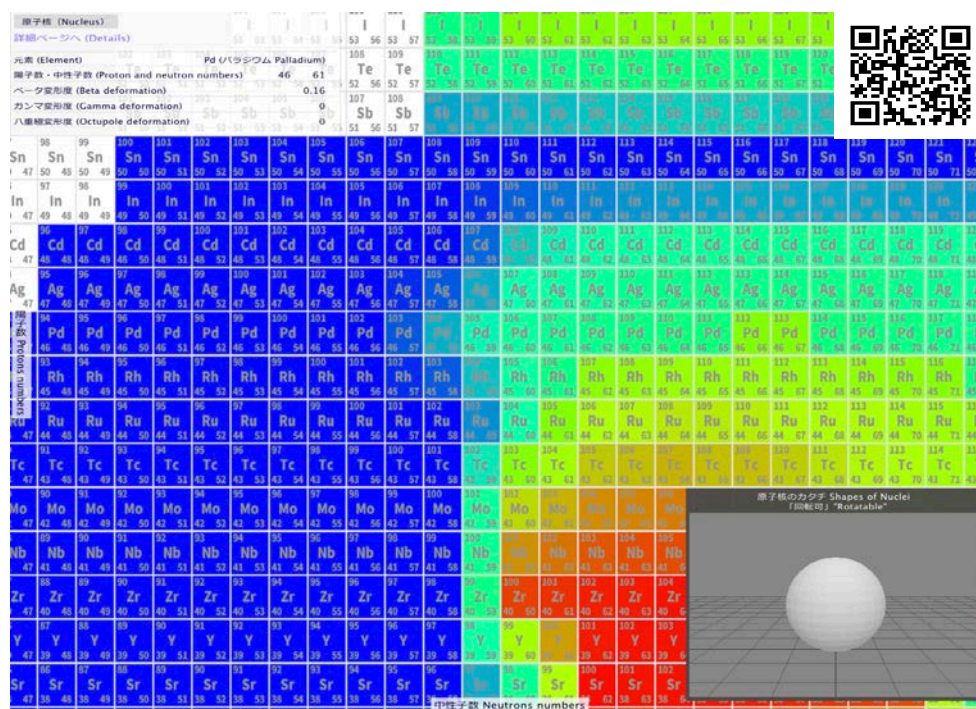


図 1: 公開したウェブサイト InPACS のスナップショット。原子核の四重極変形の度合いを表すパラメータ β_2 の大きさを、核図表を色分けで図示したもの。青が球形を表し、赤は大きく変形した原子核を表している。核種のマスをクリックすることで、その原子核の形の概略図、詳細な計算データをダウンロードできる。

【2】 時間依存平均場の新たな量子化手法と対振動集団ダイナミクス(倪(D3)、中務、日野原)

時間依存平均場理論は、原子核のダイナミクスを非経験的に記述する理論として、多くの成功をおさめてきたが、一方で、集団的量子トンネル現象が記述できないなど、問題点も知

られている。これに対して、時間依存平均場の再量子化という手法が提唱されているが、周期軌道を求める必要があり、これが困難であるために、実際にはほとんど行われていない。

また、平均場を超えた相関を取り入れる理論として、（一般化）スレーター行列式を重ね合わせる生成座標法（GCM）が有名であるが、密度依存相互作用への適用などに大きな問題があることが明らかになり、近年大きな進展が見られない。

そこで我々は、これらの問題を解決する新たな量子化の処方提唱した。多次元空間中の周期軌道を求める代わりに、はじめに可積分系となる集団部分空間を抽出し、その部分空間上で量子化を行う（図2）。可積分系の量子化は比較的容易であり、経路積分の停留位相近似を用いて、（一般化）スレーター行列式を重ね合わせとしてエネルギー固有状態を記述する。この新たな手法を原子核のスピン・パリティ 0^+ 状態の問題に応用し、鉛アイソトープの励起状態などに関する計算を実行し、手法の有用性を示した。

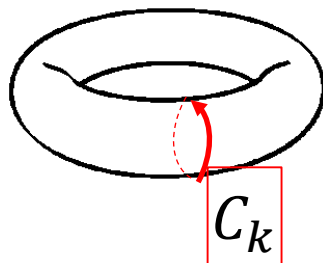


図2：集団部分空間を抜き出すことで、図のようなトラス上の独立なループ上で量子化が可能となる。

【3】 密度汎関数法による四重極集団ハミルトニアン構築に向けて（鷲山、中務）

遷移領域の原子核の中で、低励起状態に複数の変形状態が存在したり変形に対してソフトな性質を示したりするものがある。このような原子核を大振幅集団運動の観点から記述するために、原子核密度汎関数法に基づく5次元四重極集団ハミルトニアン構築と原子核低励起状態への応用を目指している。昨年度、5次元四重極集団ハミルトニアンの回転運動項の慣性モーメントの評価を行なったので、今年度は、振動運動項の集団慣性質量を評価するために局所乱雑位相近似法（Local quasi-particle random phase approximation: LQRPA）の応用を行なった。5次元四重極集団ハミルトニアンの振動慣性質量を計算するには（1）各変形度での拘束条件付き密度汎関数計算を行ない、（2）得られた状態を基にLQRPA方程式を解いて集団的な四重極低励起モードの固有解を求め、（3）得られた低励起モードの解から振動慣性質量を構成する。本研究では、巨大次元のLQRPA方程式を直接解く代わりに数値的に簡便でかつ同等な結果を与える有限振幅法を用いた。

まず、有限振幅法の枠組みで離散的な低励起モード解を得るために、有限振幅法と複素エネルギー平面での周回積分法を組み合わせた手法の実装を行なった。いくつかの変形核の離散的な低励起四重極モード解に対してベンチマーク計算を行ない、先行研究と同様の低励起状態の分光学的性質（換算遷移確率、励起エネルギー）を得た。

次に、この有限振幅法+周回積分法を四重極変形度 β のみの一次元振動慣性質量である核分裂経路の集団慣性質量計算に応用した。 ^{240}Pu の質量対称核分裂経路を四重極変形度 β の拘束条件付き密度汎関数法で計算し、各変形度で局所有限振幅法+周回積分法により集団慣性質量を四重極変形度 β の関数として求めた。得られた集団慣性質量は基底状態及び核分裂アイソマー状態では他の変形度に比べて大きな値を示した。また、変形度が変化するにつれて集団慣性質量が大きく変化する変形領域が存在することを示した。これはこの変形領域で ^{240}Pu の一粒子構造が劇的に変化していることを示唆する結果である。

【4】 3次元実空間座標を用いた HFB 計算コードの開発(柏葉(D2)、中務)

従来の方法では、HFB 理論に基づく自己無撞着な密度関数計算は基底の数の三乗 (N^3) に比例する計算コストがかかるため、調和振動子基底を用いて基底の数を減らすなどの工夫をしなければ現実的な計算時間内での計算が困難であった。しかし、近年 Krylov 部分空間法を用いた手法が提案されており、これを使うことで計算コストを N^2 に抑えることが可能となる。本研究では、Krylov 部分空間法による 3次元実空間座標を用いた HFB 計算コードの開発を行った。数値計算コードはほぼ完成し、妥当な計算時間で実行が可能であることを示した。また、Oakforest-PACS 上で高い並列性能を実現した。3次元実空間座標を採用することで、従来の方法が苦手とする大きな変形や非対称変形を含む原子核の解析が可能になる。今後は、中性子星内殻に存在するとされているパスタ原子核など、特異な形状をした原子核の構造の計算に応用する。

【5】 中性子過剰 Mo 同位体の低励起状態の分析 (Ha(ソウル国立大)、炭竈(理研)、日野原)

中性子過剰 Mo 同位体では三軸非対称 (γ) 変形が基底状態で現れる可能性やソフトな γ 振動が予言されており、理化学研究所の RIBF において $^{106,108,110}\text{Mo}$ 原子核の低励起状態が測定された。これらの原子核に対して、5次元四重極集団 Hamiltonian を CHFB+LQRPA 法を用いて構築し、四重極低励起状態の分析を行った。有効相互作用は SLy4, SkM*, SLy5+T による Skyrme-HFB の結果を再現するように Pairing-plus-quadrupole 相互作用のパラメータを決定してこれを用いた。SLy4 を用いた理論計算ではオブレート変形にエネルギー極小点が現れ、スペクトルには γ ソフトな性質が強く見られた (図3)。一方 SLy5+T を用いた計算ではプロレート変形が現れ、 $^{106,108}\text{Mo}$ では γ 振動的なスペクトルが得られ、実験とのよい一致が見られた。

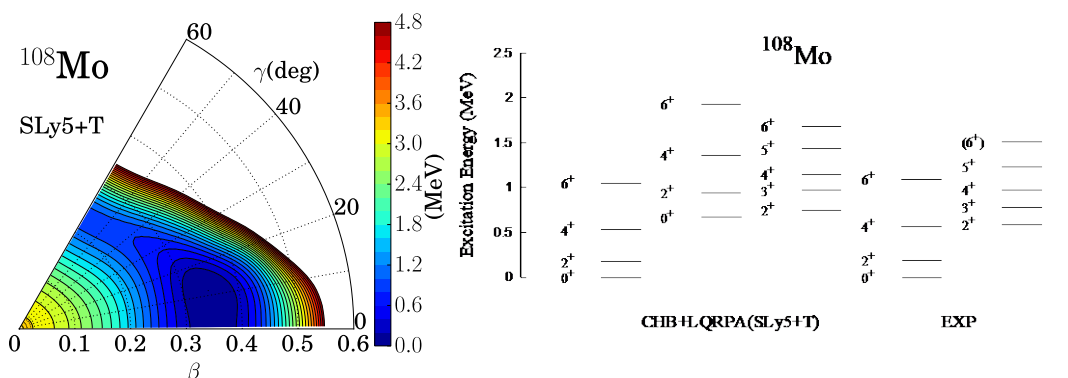


図 3 : ^{108}Mo の四重極変形ポテンシャル曲面 (左図) と CHFB+LQRPA による低励起状態のスペクトル (右図)。

【6】 有限振幅法による二重ベータ崩壊原子核行列要素の計算 (日野原、Engel(ノースカロライナ大))

ニュートリノレス二重ベータ崩壊の半減期から電子ニュートリノの有効質量を決定するためには崩壊の原子核行列要素を精密に計算する必要があるが、原子核行列要素は中性子—陽子対相関によって抑制されることが知られており、対相互作用の結合定数を決定することが行列要素の精密計算のために重要である。ニュートリノを2つ放出する二重ベータ崩壊には豊富な実験データが存在し、これを用いて中性子—陽子対相関の結合定数を決定することが可能である。二重ベータ崩壊の原子核行列要素を準粒子乱雑位相近似で計算する場合、大次元の行列対角化を行う必要があるが、有限振幅法によって応答関数を反復法で効率的に計算し、応答関数の二重複素積分によって原子核行列要素の導出が可能である定式化をこれまでにに行った。米国ノースカロライナ大学で開発された中性子—陽子チャネルの有限振幅法のコードを拡張し、二重 Gamow-Teller 遷移強度およびニュートリノを2つ放出する二重ベータ崩壊原子核行列要素計算の実装を行った。pf 殻領域の原子核に対して系統的な計算を行い、原子核行列要素の中性子—陽子対相関依存性の分析を行った (図 4)。

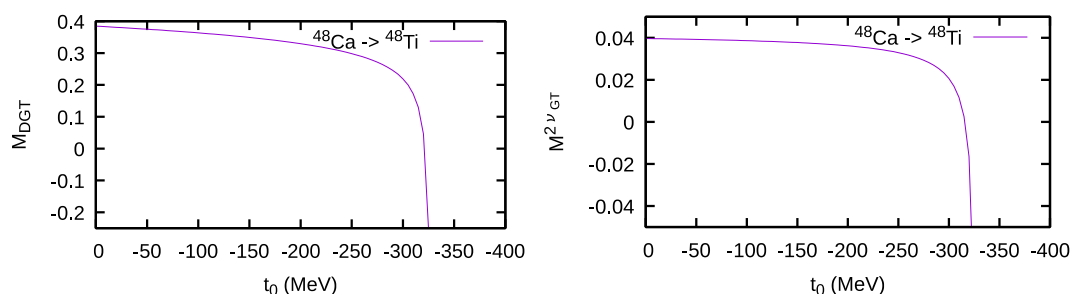


図 4 : ^{48}Ca の二重 Gamow-Teller 遷移 (左図) とニュートリノを2つ放出する二重ベータ崩壊 (右図) の原子核行列要素のアイソスカラー対相関結合定数依存性。

【7】 超流動原子核の融合過程における対相関の効果（橋本、Scamps）

今年度は、拘束条件付きハートレーフォック・ボゴリユボフ（CHFB）法により硫黄 ^{40}S を二つの酸素 ^{20}O に分離する過程のエネルギー面と一粒子波動関数のセットを得た。これは、二つの酸素 ^{20}O の正面衝突による融合過程のポテンシャルエネルギーを求めることに当たる。この CHFB 法によるエネルギー面上の点を初期条件として TDHFB 軌道を計算し、二つの酸素 ^{20}O の融合過程の TDHFB 軌道と比較した。その結果、i) 二つの酸素 ^{20}O の接触から重なりを経て減衰振動に至る過程における対相関エネルギーの変化は、CHFB 法によって求めたエネルギー面上の点を初期値とする TDHFB 軌道のものとよく似た振る舞いをする（図 5 左）、ii) また、i) の対相関エネルギーは CHFB 法による静的な対相関エネルギーの相対距離依存性に沿った変化をすることで、この領域では系の変化は断熱的であることが示唆される、iii) CHFB 法によって求めた一粒子エネルギーの分布は、相対距離の減少につれて二つの酸素 ^{20}O のものから縮退が解ける。特にフェルミ面近傍の $f_{5/2}$ 軌道の分布の散開が対相関エネルギーの滑らかな減少をもたらす、iv) 融合後の減衰振動は、TDHFB 軌道の正準軌道占有数が CHFB 軌道の軌道占有数分布（図 5 右）から時間的に変化することにより内部運動の励起エネルギーの増大をもたらすこと、などが理解された。

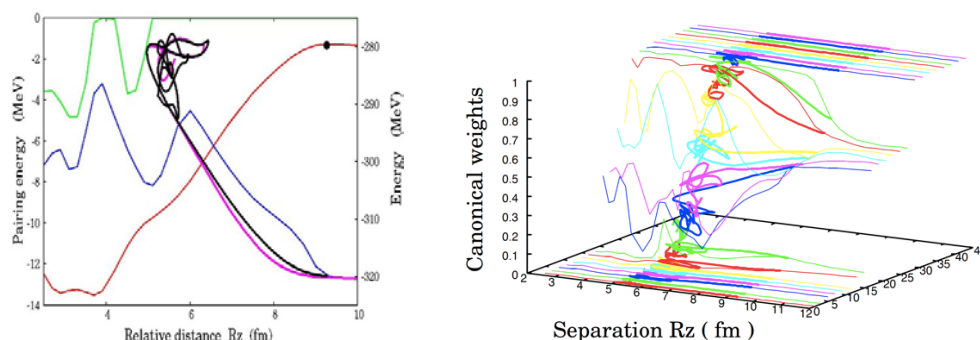


図 5：（左）CHFB による酸素 ^{20}O - 酸素 ^{20}O 間の相対距離（Rz）とエネルギー（赤）、対相関エネルギー（陽子（緑）、中性子（青））。衝突エネルギー 11.4 MeV の正面衝突 TDHFB 計算の中性子対相関エネルギー（紫）、黒丸（●）を初期条件とする TDHFB 計算の中性子対相関エネルギー（黒）。（右）左図黒線の TDHFB 軌道の正準占有数（太線）と CHFB の正準占有数（細線）の相対距離による変化。

【8】 Effect of octupole deformation on the fission of actinides (Scamps and Simenel(ANU))

Nuclear fission is a process in which a heavy nucleus split into two. Most of the actinides nuclei (Plutonium, Uranium, Curium...) fission asymmetrically with one big fragment and one small. Empirically, the heavy fragment presents on average a Xenon element (with charge number $Z=54$) independently from the initial fissioning nucleus. To understand the mechanism that determines the number of protons and neutrons in each of the two fragments has been a longstanding puzzle. It was

expected that the deformation of the fragments could play a role. Indeed, the atomic nuclei can have different shapes depending on their internal structure. Some of them are spherical, most of them are deformed like a rugby ball and a few have a pear-shaped deformation. The internal structure of the nuclei varies as a function of the number of protons and neutrons composing the nuclei. The state of the art of nuclear theory has been used to describe dynamically the fission process. This simulation of the nuclear fission uses the

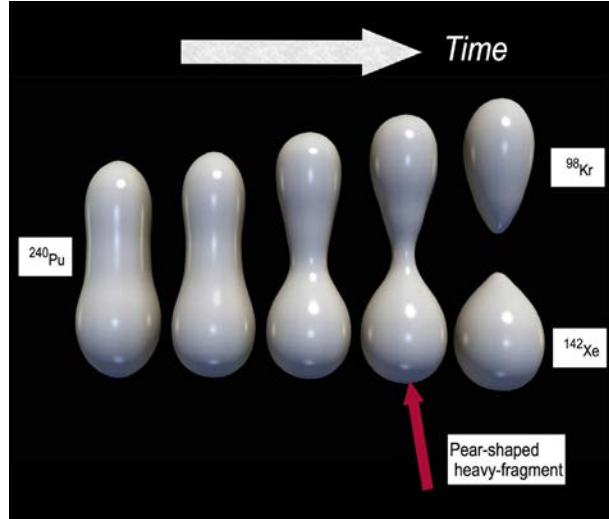


图 6 : Evolution of the fission of ^{240}Pu

quantum-mechanics to take into account the motion of the nucleons in the nuclei and uses adequate simplifications to solve the many-body problem. Using that model, in the case of the ^{240}Pu , it has been found that the fission fragments are preferably formed with a pear-shaped deformation (see figure 6). This pear-shaped deformation is due to the strong Coulomb repulsion of the two fragments. This initial deformation favours nuclei which are pear-shaped in their ground state. This is the case of the Xenon due to some internal structure effects associated with a number of proton $Z=54$. This mechanism is strong enough to strongly influence the partition of nucleons in several fissioning systems. This mechanism has been found in simulations of the fission of ^{230}Th , ^{234}U , ^{236}U , ^{246}Cm and ^{250}Cf in agreement with the experimental observations. These findings may explain in future, surprising recent observations of asymmetric fission of lighter than lead nuclei, and improve predictions of fission properties of exotic nuclei which impact the abundance of elements produced in the astrophysical processes.

【9】 Density-constraint Hartree-Fock-Bogoliubov (Scamps and Hashimoto)

A new method is developed in order to determine the Nucleus-Nucleus potential for fusion reactions for which pairing play an important role, the Density-constraint Hartree-Fock-Bogoliubov theory. Using this method, we investigate the splitting of the Nucleus-Nucleus potential with respect to different relative gauge angles (figure 7).

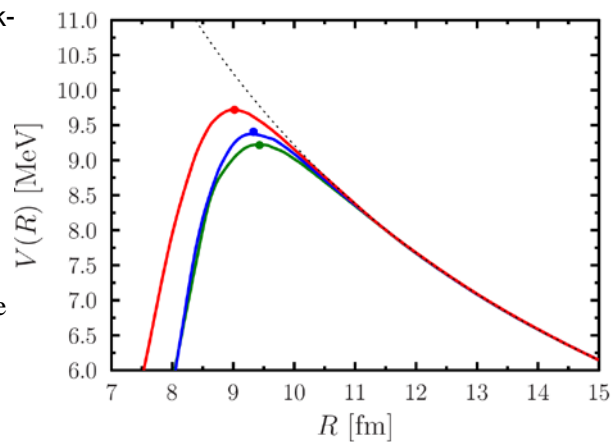


图 7 : Nucleus-Nucleus potential for the $^{20}\text{O} + ^{20}\text{O}$ reaction for 3 gauge-angle.

【10】 光科学分野の第一原理計算ソフトウェア SALMON の開発（矢花、[植本、竹内、野田、廣川、山田(篤)、山田(俊)、廣川、朴=計算科学研究センター]

パルス光と多様な物質の相互作用を物質科学の第一原理計算に基づき記述する汎用のソフトウェア SALMON の構築を進めている。これは先端の光科学実験を丸ごとシミュレーションすることができ、原子の空間スケールとアト秒の時間解像度で現象を分析することができる、他に例のない特徴を持つソフトウェアである。SALMON は、筑波大学で開発を進めていた ARTED と分子科学研究所で開発を進めていた GCEED を統合したオープンソースソフトウェアとして構築され、現在ウェブページ <https://salmon-tddft.jp> を整備し公開している。また以下で述べるように、単原子層から薄膜・表面まで記述する理論と計算法の開発、光・電子・フォノンの3者のダイナミクスを同時に記述する第一原理計算法の開発など、光科学の多様な現象に対応する取り組みを続けている。

また、理化学研究所計算科学研究センター（理研 R-CCS）で開発中のポスト京（スーパーコンピュータ富岳）への SALMON 実装を開始している。SALMON/ARTED は Knights Landing (KNL) クラスタ “Oakforest-PACS” に対し強力に最適化を行ってきたが、我々は同実装を活用することでポスト京への実装と大規模シミュレーションを円滑に遂行できると考えている。現在までに、主に SALMON/ARTED で利用されているステンシル計算について、KNL 向けの AVX-512 SIMD 命令実装をポスト京の A64FX プロセッサが採用する Scalable Vector Extension (SVE) SIMD 命令に変換、動作を確認した。本件は、理研 R-CCS が提供するポスト京シミュレータ上で性能評価を実施中である。

SALMON に関して、下で述べるハンズオンチュートリアルの実施など、その普及に務めている。大阪大学が毎年、年2回実施しているコンピュテーショナル・マテリアルズ・デザインワークショップにおいて、2018 年度から SALMON の実習を継続的に取り上げて頂いており、SALMON のチュートリアルを実施している。高度情報科学技術研究機構(RIST)が行なっている HPCI (High Performance Computing Infrastructure) 事業において、日本で開発されたオープンソースソフトウェアのうち利用の多いものを、各大学の情報基盤センターの所有するスパコンにプリインストールする利用者支援活動が行われている。SALMON は、物質科学分野の計3本のソフトウェアの一つとして、その支援対象に選ばれた。現在 SALMON は、東工大、名古屋大、九州大のスパコンにインストールされている(http://www.hpci-office.jp/pages/appli_software)。

【11】 マクスウェル方程式と時間依存密度汎関数を多階層で結合したシミュレーション法の発展（矢花、植本(計算科学研究センター)

(1) 斜法入射のマルチスケール法における取扱について

我々はこれまで、第一原理電子ダイナミクス計算と電磁界計算をハイブリッドさせた、独自のマルチスケール計算手法の開発を進めてきた。先行研究では薄膜系（一次元マクスウェル方程式）への垂直入射に制限した議論が行われてきた。一方で、「反射・屈折現象」、「境界面の表面電荷」、「表面プラズモン励起」、「（実験などでよく用いられる）Brewster 角入射」を議論する上で、任意角度入射条件（斜方入射）を取り扱えることは重要である。

今年度、我々は一次元マルチスケール計算法を斜方伝搬する電磁場を取り扱うためのフォーマリズム構築・計算コードへの実装作業をおこなった。

また、本プロジェクトに関連してマックスプランク研究所（実験）と筑波大学（計算）の共同研究を進めており、これまで SALMON コードをもちいたアト秒分光実験の計算機シミュレーションを試みてきた。（実験では）ブリュースター角度入射されたフェムト秒レーザーパルスが固体中を伝搬する過程の非線形光学効果によるパルス波形変化を観測している。本手法を実装した理論計算は実験の振る舞いをよく再現する結果を得ることに成功している。

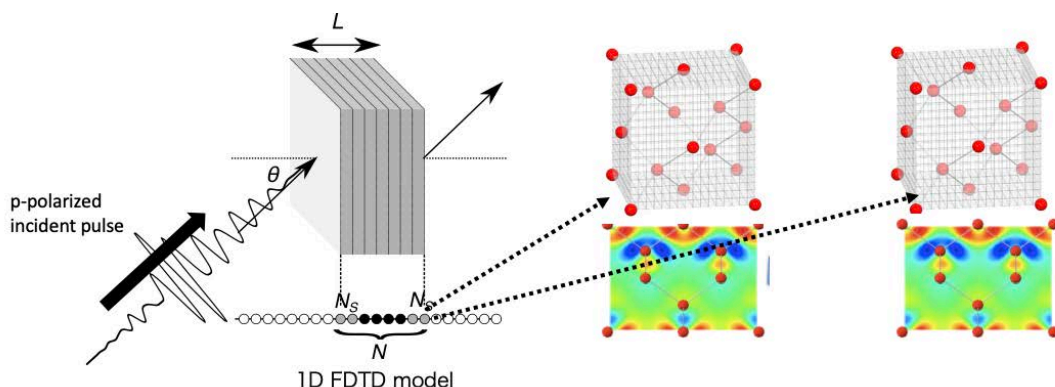


図 8：Maxwell+TDDFT マルチスケール法による、斜め方向に伝搬するレーザーパルスの光透過シミュレーションの概略図

(2) グラファイト薄膜と強レーザーパルスの相互作用の第一原理シミュレーション

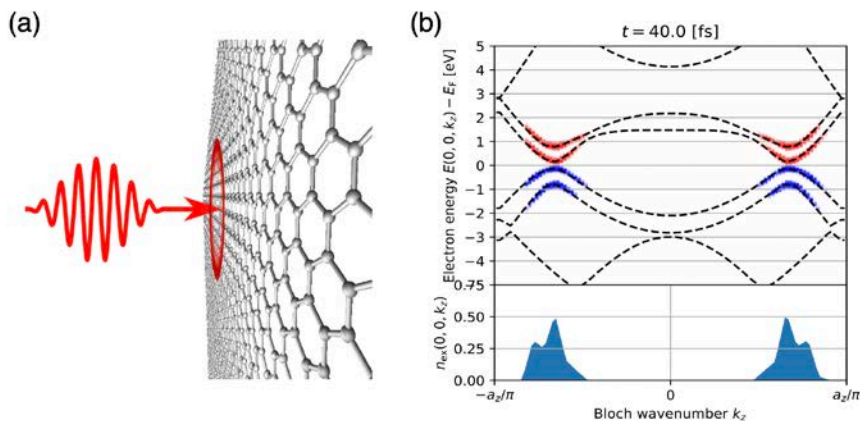


図 9：(a)計算モデル概略、(b)可飽和吸収条件下における励起電子(赤)、ホール(青)の k 空間分布

グラフェン・グラファイトなどの層状物質では、二次元的電子状態密度の存在により、巨大かつ高速な可飽和吸収（光強度依存の吸収率変化）などの特徴的な非線形光学特性の存在が知られている。本研究では、TDDFT をもちいた、グラファイト、1～4 層グラフェン、層状リン、TiS₂ 等の二次元物質の光学応答の第一原理計算から、10 フェムト秒オーダーの短時間で現れる可飽和吸収の出現を確認した。また、後述のマルチスケール計算による、グラファイト結晶内のレーザーパルス伝搬、侵入深さにあられる光強度依存性の評価を行った。

本理論予測は、炭素材料に対するレーザー加工のシミュレーションへの応用が期待される。
(これらの成果をまとめた論文が現在投稿準備段階にある。)

【12】 原子層を含む薄膜とパルス光の相互作用を記述する単一空間格子を用いたマクスウェル方程式と時間依存密度汎関数法の統合シミュレーション ([山田(俊)、野田=計算科学研究センター]、矢花)

薄膜における高次高調波発生や非熱的なレーザー加工のシミュレーションは、理学・産業両面から興味ある研究テーマである。しかしながら、2次元物質を含む極めて薄い薄膜における光・電子相互作用を考える場合、相互作用領域が極端に狭いため、上記のような電子系と光電磁場の空間スケールを分離するマルチスケールの記述は適当でない。そこで本研究では、単一の空間スケールで電子系と電磁場を結合する新手法を開発した。本手法は、光電磁場のための微視的 Maxwell 方程式と電子系のための時間依存 Kohn-Sham 方程式を結合し、共通の実空間グリッド上で同時に時間発展させる第一原理計算法である。光の強度や薄膜の厚さに依らず光・電子相互作用を記述できるため、本手法はこの問題における包括的な枠組みとなる。また、薄膜が薄い極限と厚い極限の場合について議論し、それぞれの場合に有効な巨視的近似法を構築した。特に、厚い極限の巨視的近似法はマルチスケール Maxwell+TDDFT 法に一致する。具体的には、例えば Si 薄膜では膜厚およそ 5nm で両近似法の結果がほぼ一致し、それよりも薄い場合は薄膜化による電子構造変化を取り入れた近似法を、厚い場合は光減衰の効果を取り入れた近似法（マルチスケール法）を採用すれば良いことがわかった。これにより、薄膜の光・電子相互作用を網羅的に記述することが可能になった。以後は本研究の手法を活用して薄膜の非調和光・電子相互作用に関する応用研究を進める予定である。

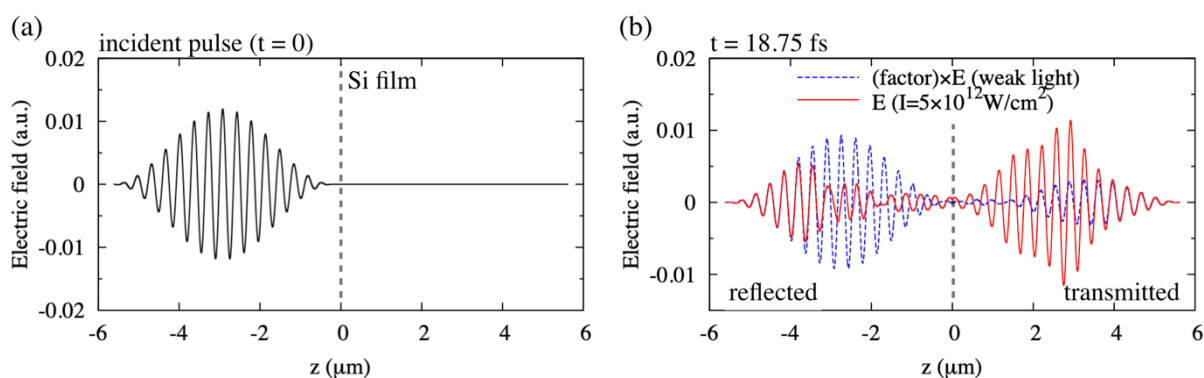


図 10：厚さ 5nm の Si 薄膜に高強度光パルス照射する微視的 Maxwell-TDDFT 計算。(a) 画面上で右向きに進む入射パルス（パルス幅 18 fs, 光振動数 $\hbar\omega=3.5$ eV, 強度 $I=5 \times 10^{12} \text{ W/cm}^2$ ）。(b) 反射波と透過波。青線は線形応答領域の結果をファクター倍したもの。パルスの後半で非線形相互作用によるパルス形状の変化が確認できる。

【13】 光電磁場・電子・格子振動を同時に記述する多階層シミュレーション法の開発と、コヒーレントフォノンのポンプ・プローブ分光への応用（山田(篤)(計算科学研究センター)、矢花)

本手法の最初の適用として、コヒーレントフォノンの生成に関わる瞬間誘導ラマン分光によるポンプ・プローブ測定シミュレーションを行った。右図に示すように、マクロスケール(一次元モデル)において時間幅 18 fs/1.55 eV (800 nm)のポンプ光および遅延時間 89.5 fs のプローブ光を真空領域から物質領域へ入射する。ここでの物質領域は 15 nm のマクログリッド 400 個からなる膜厚 6 μm のダイヤモンド結晶である。これらマクログリッド各々に対して 8 原子から成る一辺 3.567 Å のユニットセル(三次元)をミクロスケールの系(空間グリッド数 16^3 , k 点数 12^3 , LDA 汎関数)として配置し、両スケールとも時間刻み幅 0.002 fs で積分した。

バンドギャップエネルギー以下でのポンプ光との非共鳴型相互作用により原子核の振動(光学フォノン)が誘起されている様子が得られ、さらにポンプ光の伝搬に伴って位相が異なるフォノンが各点で次々と生じている、つまりコヒーレントフォノンの生成が再現された(図 5)。続くプローブ光プロセスでは、コヒーレントフォノンとの相互作用により誘導ラマン波が増幅し、透過プローブシグナルが再現された。これら一連の描像は実験プロセスの詳細を明らかにするとともに、より正確な透過シグナルの理解を与えることができた。

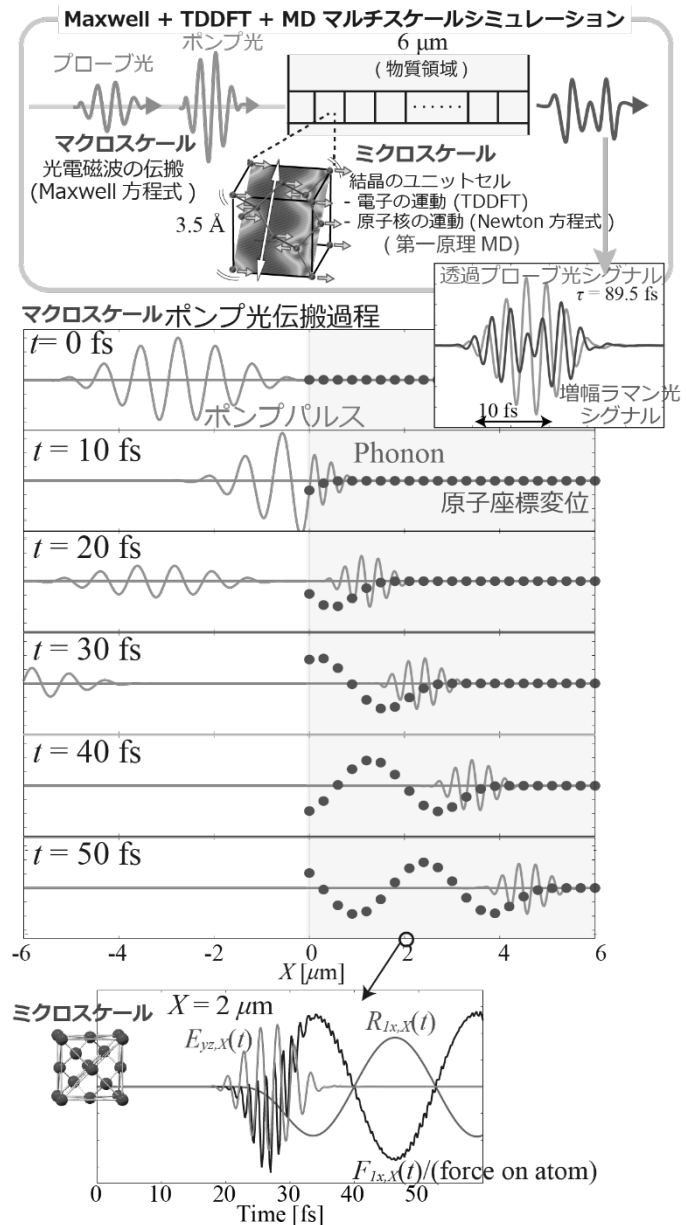


図 11： 時間依存密度汎関数理論に基づくコヒーレントフォノン生成のシミュレーション。

【14】 金属ナノ粒子が2次元配列したメタ表面の光応答 ([竹内、野田=計算科学研究センター]、矢花)

近年金属ナノ粒子を2次元配列したメタ表面が注目されている。特に、金属ナノ粒子間の距離(ギャップ)をサブ nm まで縮小させギャップでの高い光増強を利用することで、自然界では見られない高い屈折率を持つメタ表面が得られることが実験で報告され、多くの関心を集めている。本研究では TDDFT を用い、サブ nm のギャップを持つメタ表面の光物性解析を行った。また、古典電磁気学計算機能を SALMON に実装し、比較を行った。結果、古典電磁気学ではギャップが小さい程光増強が高まるのに対し、TDDFT ではギャップ 0.4nm 付近を境に金属界面間にトンネル電流が流れ、光増強が失われることを示した(図 6)。これにより、メタ表面の高屈折率化設計のための重要な指針が明らかとなった。

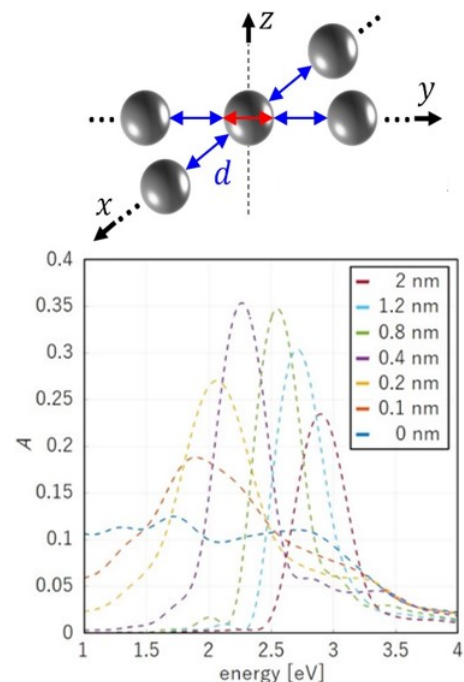


図 1 2 : メタ表面の光吸収率

4. 教育

学位

1. 倪 放 (Ni Fang) 、博士 (理学)

Requantization of time-dependent mean field for pairing collective motion in superfluid nuclei
(超流動核における対励起集団運動に対する時間依存平均場再量子化)

2. 堀川 健、修士 (理学)

長さゲージを用いた周期系の電子ダイナミクス計算

集中講義

中務 孝

「原子核の構造・反応と計算核物理学」、千葉大学、2018 年 6 月 27 – 28 日。

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

外部資金

1. JST CREST 「光・電子融合第一原理計算ソフトウェアの開発と応用」、矢花一浩、代表、2016 – 2021 年度、37,200,000 円 (H30 年度直接経費)

2. ポスト京重点課題7「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」サブ課題B「光・電子融合デバイス」、矢花一浩、分担、2016–2019年度、15,208,000円（H30年度直接経費）
3. Q-LEAP 先端レーザーイノベーション拠点「次世代アト秒レーザー光源と先端計測技術の開発」、矢花一浩、3,170,000円（H30年度直接経費）
4. 日本学術振興会科学研究費・基盤研究(B)、矢花一浩、代表、2015–2018年度、2,300,000円（H30年度直接経費）、「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」
5. 共同研究経費、株式会社IHI、矢花一浩、450,000円（H30年度直接経費）、「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」
6. 日本学術振興会科学研究費・基盤研究(B)、中務 孝、代表、2018–2021年、4,000,000円（H30年度直接経費）、「密度汎関数超並列ソルバの開発と原子核から中性子星までの統一的高精度計算」
7. 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、4,646,000円（H30年度直接経費）、「核構造計算による核反応モデルの高精度化」
8. 日本学術振興会二国間協力事業（JSPS-NSFC）、中務 孝、日本側代表、2017–2019年、1,470,000円（H30年度直接経費）、「rプロセスの謎解明に向けた核質量と寿命の研究」
9. 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、700,000円（H30年度直接経費）、「中性子-陽子対相関・対凝縮の解明」
10. 日本学術振興会科学研究費・新学術領域研究(研究領域提案型：研究領域「宇宙の歴史をひもとく地下素粒子原子核研究」)(公募研究) 日野原伸生、代表、2017–2018年、1,000,000円（H30年度直接経費）、「生成座標法による二重ベータ崩壊原子核行列要素の評価」

6. 研究業績

(1) 研究論文

A) 査読付き論文

1. M. Noda, S.A. Sato, Y. Hirokawa, M. Uemoto, T. Takeuchi, S. Yamada, A. Yamada, Y. Shinohara, M. Yamaguchi, K. Iida, I. Floss, T. Otobe, Kyung-Min Lee, K. Ishimura, T. Boku, George F. Bertsch, K. Nobusada, K. Yabana, “SALMON: Scalable Ab-initio Light-Matter simulator for Optics and Nanoscience”, *Comp. Phys. Commun.*, **235**, 356 (2019).
2. T. Otobe, Y. Shinohara, S.A. Sato, K. Yabana, “Theory for Electron Excitation in Dielectrics under an Intense Linear and Circularly Polarized Laser Fields”, *J. Phys. Soc. Jpn.* **88**, 024706 (2019).
3. A. Yamada, K. Yabana, “Energy transfer from intense laser pulse to dielectrics in time-dependent density functional theory”, *Eur. Phys. J. D* (2019) **73**: 87.

4. M. Uemoto, Y. Kuwabara, S. A. Sato, and K. Yabana, “Nonlinear polarization evolution using time-dependent density functional theory”, *J. Chem. Phys.* **150**, 094101 (2019).
5. S. Yamada, M. Noda, K. Nobusada, and K. Yabana, “Time-dependent density functional theory for interaction of ultrashort light pulse with thin materials”, *Phys. Rev. B* **98**, 245147 (2018).
6. K. Wen and T. Nakatsukasa, “Nuclear reaction path and requantization of TDDFT”, *JPS Conf. Proc.* **23**, 012024 (2018).
7. K. Washiyama and T. Nakatsukasa, “Multipole modes for triaxially deformed superfluid nuclei”, *JPS Conf. Proc.* **23**, 013012 (2018).
8. F. Ni, N. Hinohara, and T. Nakatsukasa, “Low-lying collective excited states in non-integrable pairing models based on the stationary-phase approximation to the path integral”, *Phys. Rev. C* **98**, 064327 (2018).
9. F. Ni and T. Nakatsukasa, “Comparative study of the requantization of the time-dependent mean field for the dynamics of nuclear pairing”, *Phys. Rev. C* **97**, 044310 (2018).
10. G. Scamps and C. Simenel, “Impact of pear-shaped fission fragments on mass-asymmetric fission in actinides”, *Nature* **564**, 382 (2018).
11. H. Zheng, S. Burrello, M. Colonna, D. Lacroix, and G. Scamps, “Connecting the nuclear EoS to the interplay between fusion and quasifission processes in low-energy nuclear reactions”, *Phys. Rev. C* **98**, 024622 (2018).
12. A. Yamada, K. Yabana, “Multiscale time-dependent density functional theory for a unified description of ultrafast dynamics: Pulsed light, electron, and lattice motions in crystalline solids”, *Phys. Rev. B*, accepted.
13. I. Floss, C. Lemell, K. Yabana, J. Burgdorfer, “Incorporating decoherence into solid-state time-dependent density functional theory”, *Phys. Rev. B*, accepted.
14. T. Yatsui, S. Okada, T. Takemori, T. Sato, K. Saichi, T. Ogameoto, S. Chiashi, S. Maruyama, M. Noda, K. Yabana, K. Iida, K. Nobusada, “Enhanced photo-sensitivity in a Si photodetector using a near-field assisted excitation”, *Comm. Phys.*, accepted.
15. S. Burrello, M. Colonna, D. Lacroix, X. Roca-Maza, G. Scamps, and H. Zheng, “Collective aspects of the dipole response in nuclei: an analysis from semi-classical and quantal approaches”, Accepted for publication in *Phys. Rev. C* (2019), arXiv:1807.10118.
16. Y. Kashiwaba and T. Nakatsukasa, “Self-consistent band calculation of slab phase in neutron-star crust”, submitted to *Phys. Rev. C*; Preprint arXiv:1904.10712.
17. N. Hinohara, “Energy-weighted sum rule for nuclear density functional theory”, Submitted to *Phys. Rev. C*, arXiv:1902.11105.

B) 査読無し論文

1. A. Yamada, K. Yabana, “First-Principles Electron Dynamics Simulation Study of High Intensity Laser Irradiation on Crystal Systems: Photon Energy Dependent Energy Transfer”, Proceedings of XXI International Conference on Ultrafast Phenomena 2018, **205**, 04020 (2019).
2. M. Uemoto, K. Yabana, S.A. Sato, Y. Hirokawa, T. Boku, “A first-principles simulation method for ultrafast nano-optics”, Proceedings of XXI International Conference on Ultrafast Phenomena 2018, **205**, 04023 (2019).
3. S. Yamada, M. Noda, K. Nobusada, and K. Yabana, “First-principles method for propagation of ultrashort pulsed light in thin films”, Proceedings of XXI International Conference on Ultrafast Phenomena 2018, **205**, 01003 (2019).
4. B. Buades, A. Picón, I. León, N.D. Palo, S.L. Cousin, C. Cocchi, E. Pellegrin, J. H. Martin, S. Mañas-Valero, E. Coronado, T. Danz, C. Draxl, M. Uemoto, K. Yabana, M. Schultze, S. Wall, J. Biegert, “Attosecond-resolved petahertz carrier motion in semi-metallic TiS₂”, arXiv:1808.06493.
5. 植本光治、矢花一浩、“Maxwell+TDDFT マルチスケール計算のための 斜め方向光入射の取り扱いについて”、第 29 回光物性研究会論文集、pp. 205 – 208 (2018).
6. K. Wen and T. Nakatsukasa, “Self-consistent collective motion path for nuclear fusion/fission reactions”, Proceedings of the International Conference on Nuclear Theory in the Supercomputing Era - 2016 (NTSE-2016) (Pacific National University, 2018), pp. 115 – 123.

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

1. K. Yabana, “Ab-initio simulations for ultrashort laser-pulse irradiation on nanomaterials”, SPIE Defense + Commercial Sensing 2018, Orlando, Florida, USA, Apr. 15, 2018.
2. K. Yabana, M. Uemoto, S.A. Sato, Y. Hirokawa, T. Boku, “Ab-initio large-scale simulation for initial stage of laser damage in transparent nano-materials”, 3rd Smart Laser Processing Conference 2018, Pacifico Yokohama, Yokohama, Japan, Apr. 24 – 26, 2018.
3. K. Yabana, “Practical Aspects of TDDFT Calculations”, TDDFT School and SALMON Hands-on Seminar, Univ. Tsukuba, Tsukuba, Japan, Nov. 11 – 12, 2018.
4. K. Yabana, “First-Principles Simulations for Extreme Light-Matter Interaction”, 50th Reimei Workshop on Universal Physics in Many-Body Quantum Systems - From atoms to Quarks, Ibaraki Quantum Beam Research Center, Tokai, Japan, Dec. 12 – 14, 2018.
5. K. Yabana, “First-principles calculation for propagation of strong laser pulse with dielectrics International Symposium on Ultrafast Electronic and Structural Dynamics”, Tohoku University, Sendai, Japan, Mar. 7 – 8, 2019.
6. M. Uemoto, S. A. Sato, Y. Hirokawa, T. Boku and K. Yabana, “Maxwell+TDDFT Ab initio Multiscale Simulation and Application to Nano-optics”, International Symposium on Ab Initio Electron Dynamics Simulations 2018 (AIEDS18), Tsukuba, Japan, Nov. 16, 2018.

7. A. Yamada, K. Yabana, “Maxwell + Nonadiabatic ab initio MD Multi-Scale Simulation and Application to Impulsive Stimulated Raman Scattering Spectroscopy”, International Symposium on Ab Initio Electron Dynamics Simulations 2018 (AIEDS18), Tsukuba, Japan, Nov. 16, 2018.
8. S. Yamada, M. Noda, K. Nobusada, K. Yabana, “Microscopic and Macroscopic descriptions for interaction of ultrashort light pulse with thin materials”, International Symposium on Ab Initio Electron Dynamics Simulations 2018 (AIEDS18), Tsukuba, Japan, Nov. 16, 2018.
9. T. Nakatsukasa, “Dipole response in exotic nuclei”, ECT* workshop on Probing exotic structure of short-lived nuclei by electron scattering, Trento, Italy, Jul. 16 – 20, 2018.
10. T. Nakatsukasa, “Theories of nuclear large amplitude collective motion”, 1st APCTP-TRIUMF joint workshop on understanding nuclei from different theoretical approaches, Pohang, Korea, Sep. 14 – 19, 2018.
11. T. Nakatsukasa, “Self-consistent determination of nuclear reaction path and clustering”, ECT* workshop on indirect methods in nuclear astrophysics, Trento, Italy, Nov. 5 – 9, 2018.
12. T. Nakatsukasa, “Nuclear structure and reaction with quantum shape fluctuation”, 13th International Conference on nucleus-nucleus collisions (NN2018), Saitama, Japan, Dec. 4 – 8, 2018.
13. T. Nakatsukasa, “Self-consistent band calculation for 1D neutron-star crust”, Workshop on Nonequilibrium phenomena in superfluid systems, Warsaw, Poland, Mar. 1-3, 2019.
14. N. Hinohara, “Nuclear density functional theory for description of collective excitation”, 10th China-Japan Joint Nuclear Physics Symposium (CJNP2018), Huizhou, China, Nov. 18 – 23, 2018.
15. N. Hinohara, “Nuclear density functional theory for collective excitation”, Fifth Joint Meeting of the Nuclear Physics Divisions of the APS and the JPS (HAWAII2018), Waikoloa Village, HI, USA, Oct. 23 – 27, 2018.
16. N. Hinohara, “Application of finite-amplitude method for nuclear collective motion”, 2018 PKU-CUSTIPEN workshop on “Low-Energy Nuclear Dynamics and Effective Nuclear Interactions”, Beijing, China, Sep. 17 – 19, 2018.
17. N. Hinohara, “Collective motion in stable and unstable nuclei within nuclear density functional theory”, IX International Symposium on Exotic Nuclei (EXON-2018), Petrozavodsk, Russia, Sep. 10 – 15, 2018.
18. K. Washiyama, “Shape fluctuation and large amplitude collective motion in transitional nuclei”, New Frontiers in Nuclear Physics and Astrophysics-1, Antalya, Turkey, May 28 – Jun. 1, 2018.

B) 一般講演

1. K. Yabana, M. Uemoto, S.A. Sato, Y. Hirokawa, T. Boku, “A first-principles simulation method for ultrafast nano-optics”, XXI International Conference on Ultrafast Phenomena, Hamburg, Germany, Jul. 15 – 20, 2018 (Poster).
2. M. Uemoto and K. Yabana, “Ab-initio simulation for propagation of ultrashort laser pulse in solids” SPIE Photonics Europe, Strasbourg, France, Apr. 24, 2018.

3. M. Uemoto, S. A. Sato, Y. Hirokawa, T. Boku, K. Yabana, “Ab-initio large-scale computational approach for ultrafast dynamics in nano-structures”, EXCON2018, Nara, Japan, Jul. 9, 2018.
4. A. Yamada, K. Yabana, “First Principle Electrons Dynamics Simulation Study of High Intensity Laser Irradiation on Crystal Systems: Photon Energy Dependent Energy Transfer”, XXI International Conference on Ultrafast Phenomena, Germany Hamburg, Jul. 19, 2018 (Poster).
5. S. Yamada, M. Noda, K. Nobusada, and K. Yabana, “First-principles method for propagation of ultrashort pulsed light in thin films”, XXI International Conference on Ultrafast Phenomena, Hamburg, Germany, Jul. 19, 2018 (Poster).
6. K. Yabana, M. Uemoto, S.A. Sato, Y. Hirokawa, T. Boku, “Ab-initio multiscale simulation method for ultrafast nano-optics, 15th Int. Conf. on Near-Field Optics”, The 15th International Conference of Near Field Optics Nanophotonics and Related Techniques, Troyes, France, Aug. 26 – 31, 2018 (Poster).
7. Yamada, K. Yabana, “First-Principles Electron Dynamics Simulation Study of High Intensity Laser Irradiation on Crystal Systems: Pulse Frequency Dependent Energy Transfer”, International Symposium on Ab Initio Electron Dynamics Simulations, Tsukuba, Japan, Nov. 14, 2018 (Poster).
8. M. Uemoto, Y. Kuwabara, S. A. Sato and K. Yabana, “Spatio-Temporal Analysis of Nonlinear Optical Responses by Time-Dependent Density Functional Theory”, International Symposium on Ab Initio Electron Dynamics Simulations, Tsukuba, Japan, Nov. 14, 2018 (Poster).
9. T. Takeuchi and K. Yabana, “Optical Properties of Metallic Nanoparticle Arrays by TDDFT”, International Symposium on Ab Initio Electron Dynamics Simulations, Tsukuba, Japan, Nov. 14, 2018 (Poster).
10. S. Yamada, M. Noda, K. Nobusada, K. Yabana, “Comprehensive theoretical framework for light-matter interaction in thin materials based on TDDFT”, CSW2019, Ryogoku, Tokyo, Japan, Jan. 16, 2019 (Poster).
11. T. Takeuchi and K. Yabana, “Optical Responses of a Metasurface Consisting of Metallic Nanoparticles”, CSW2019, Ryogoku, Tokyo, Japan, Jan. 16, 2019 (Poster).
12. M. Uemoto, K. Yabana, “Large-scale ab-initio simulation for nano-optics based on time-dependent density functional theory”, The 1st R-CCS International Symposium, Kobe, Japan, Feb. 18, 2019 (Poster).
13. M. Noda, K. Iida, M. Yamaguchi, K. Ishimura, T. Yatsui, K. Nobusada and K. Yabana, “Massively-parallel first-principles calculations for near field optics: wave vector excitations in silicon”, The 1st R-CCS International Symposium, Kobe, Japan, Feb. 18, 2019 (Poster).
14. A. Yamada and K. Yabana, “Maxwell + First-Principles TDDFT-MD Multi-Scale Simulation and Application to Impulsive Stimulated Raman Scattering Spectroscopy”, APS March Meeting 2019, Boston, USA, Mar. 5, 2019.
15. M. Uemoto and K. Yabana, “Maxwell+TDDFT multiscale simulation for optical response of nanomaterials”, APS March Meeting 2019, Boston, USA, Mar. 5, 2019.

16. S. Yamada, M. Noda, K. Nobusada, and K. Yabana, “Microscopic and macroscopic Maxwell-TDDFT descriptions for light-matter interaction in thin materials”, APS March Meeting 2019, Boston, USA, Mar. 5, 2019.
17. M. Noda, K. Iida, M. Yamaguchi, K. Ishimura, T. Yatsui, K. Nobusada, K. Yabana, “Massively-parallel time-dependent density functional theory calculations for optical near-field excitations in silicon”, APS March Meeting 2019, Boston, USA, Mar. 5, 2019.
18. T. Nakatsukasa, “New scheme of MCRP-2019”, 10th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences, Tsukuba, Japan, Oct. 15 – 16, 2018.
19. T. Nakatsukasa, “Collective coordinate for pairing dynamics and requantization of TDHFB”, Fifth joint meeting of the Nuclear Physics Divisions of the APS and the JPS (HAWAII2018), Waikoloa Village, HI, USA, Oct. 23 – 27, 2018.
20. T. Nakatsukasa, “Multi-reference EDF theory alternative to GCM: Application to the pairing model”, Tsukuba-CCS workshop on “microscopic theories of nuclear structure and dynamics”, Tsukuba, Japan, Dec. 10 – 12, 2018.
21. N. Hinohara, “Finite-amplitude method for double-beta decay nuclear matrix elements”, International Symposium on Revealing the history of the universe with underground particle and nuclear research 2019, Sendai, Japan, Mar. 7 – 9, 2019 (Poster).
22. N. Hinohara, “Finite-amplitude method for double-beta decay”, Tsukuba-CCS workshop on “microscopic theories of nuclear structure and dynamics”, Tsukuba, Japan, Dec. 10 – 12, 2018.
23. N. Hinohara, “Binding-energy differences of even-even nuclei and pairing correlation”, 13th International Conference on Nucleus-Nucleus Collisions (NN2018), Saitama, Japan, Dec. 4 – 8, 2018.
24. N. Hinohara, “Energy-weighted sum rule for nuclear density functional theory”, 13th International Conference on Nucleus-Nucleus Collisions (NN2018), Saitama, Japan, Dec. 4 – 8, 2018 (Poster).
25. N. Hinohara and J. Engel, “Double-beta decay nuclear matrix element using finite-amplitude method”, Fifth Joint Meeting of the Nuclear Physics Divisions of the APS and the JPS (HAWAII2018), Waikoloa Village, HI, USA, Oct. 23 – 27, 2018.
26. N. Hinohara, “Double-beta decay nuclear matrix elements with linear and non-linear dynamics of neutron-proton pairing”, 10th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences, Tsukuba, Japan, Oct. 15 – 16, 2018 (Poster).
27. N. Hinohara, “Neutron-proton DFT”, The 4th workshop on many-body correlations in microscopic nuclear model (SADO2018), Sado, Japan, Aug. 18 – 20, 2018.
28. N. Hinohara, “Nuclear collective excitation within finite-amplitude method”, 10th international conference on Direct Reactions with Exotic Beams (DREB2018), Matsue, Japan, Jun. 4 – 8, 2018 (Poster).

29. Y. Hashimoto, “Study of structure changes in $^{40}\text{S} \rightarrow ^{20}\text{O} + ^{20}\text{O}$ by Gogny TDHFB method”, The 4th workshop on many-body correlations in microscopic nuclear model (SADO2018), Sado, Japan, Aug. 18 – 20, 2018.
30. Y. Hashimoto, “Study of ^{40}S by Gogny-TDHFB method”, Tsukuba-CCS workshop on “microscopic theories of nuclear structure and dynamics”, Tsukuba, Japan, Dec. 10 – 12, 2018.
31. K. Washiyama, “Collective Hamiltonian from Skyrme EDF”, The 4th workshop on many-body correlations in microscopic nuclear model (SADO2018), Sado, Japan, Aug. 18 – 20, 2018.
32. G. Scamps, “Dynamical effects of superfluidity on multi-nucleon transfer, fusion and fission”, “ECT* workshop on Probing exotic structure of short-lived nuclei by electron scattering”, Trento, Italy, Apr. 9 – 13, 2018.
33. G. Scamps, “Role of octupole deformed shell effects on the fission of actinides”, 2018 PKU-CUSTIPEN workshop on “Low-Energy Nuclear Dynamics and Effective Interactions”, Beijing, China, Sep. 17 – 19, 2018.
34. G. Scamps, “Role of octupole deformed shell effects on fission”, 13th International Conference on Nucleus-Nucleus Collisions (NN2018), Saitama, Japan, Dec. 4 – 8, 2018 (Poster).
35. G. Scamps, “Impact of pear-shaped fission fragments on mass-asymmetric fission”, Tsukuba-CCS workshop on “microscopic theories of nuclear structure and dynamics”, Tsukuba, Japan, Dec. 10 – 12, 2018.

C) セミナー等

1. 矢花一浩, “Ab-initio description for propagation of extreme light pulse in solids: Recent progresses”, ウィーン工科大学 (オーストリア)、2019 年 3 月 20 日.
2. 矢花一浩, “Ab-initio description for propagation of extreme light pulse in solids: Recent progresses”, グラーツ大学 (オーストリア)、2019 年 3 月 25 日.
3. 矢花一浩, “Ab-initio description for propagation of extreme light pulse in solids: Recent progresses”, マックスプランク物質構造動力学研究所 (ドイツ)、2019 年 3 月 27 日.

(3) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

1. 矢花一浩, “第一原理計算光・物質科学の創成”, 光極限第 5 回領域会議、柏の葉コンファレンスセンター、2018 年 4 月 21 日.
2. 矢花一浩, “電子ダイナミクスの第一原理計算を巡って”, 光とナノ物質の相互作用：分子科学の未来に向けて、岡崎コンファレンスセンター、2018 年 6 月 10 日.
3. 矢花一浩, “高強度超短パルス光と誘電体の相互作用を記述する第一原理計算”, BRL セミナー、NTT 物性科学基礎研究所、2018 年 8 月 20 日.

4. 矢花一浩、“誘電体の超高速光応答～第一原理計算からのアプローチ～”、レーザー学会学術講演会シンポジウム「固体におけるアト秒・強光子場科学の最前線、東海大学高輪キャンパス、2019年1月13-14日。
5. 矢花一浩、“固体超高速現象に対する数値実験手法の開発と応用”、日本光学会光波シシス研究グループ研究会「光の絶対位相制御と分光計測・物質操作への応用」、東京大学生産技術研究所、2019年2月12日。
6. 矢花一浩、物質科学分野における高強度パルス光を用いた研究の現状と展望～理論・計算物理からの視点～ 日本物理学会第74回年次大会シンポジウム「チャープパルス増幅法の恩恵」九州大学、2019年3月14-17日。
7. 中務 孝、“原子核質量と核構造・核力”、研究会「重力波観測時代のrプロセスと不安定核」、理化学研究所、和光、2018年6月20-22日。
8. 中務 孝、“Nuclear deformation and radii in heavy nuclei”、ELPH研究会「電子散乱による原子核研究」、ELPH、東北大学、仙台、2019年3月20-21日。
9. 日野原伸生、“原子核対相関と観測量”、NITEP研究会「微視的理論でつなぐ散乱観測量と核構造」、大阪市立大学梅田サテライト、大阪、2019年3月28日。
10. 日野原伸生、“二重ベータ崩壊原子核行列要素計算の現状”、「宇宙の歴史をひもとく地下素粒子原子核研究」京大・A班共催二重ベータ崩壊若手研究会、京都大学、京都、2018年11月8-9日。
11. 日野原伸生、“原子核集団現象への平均場アプローチ”、第64回原子核三者若手夏の学校、ホテルニューカネイ、長生郡白子町、2018年8月6-11日。
12. 鷲山広平、“微視的モデルでの超重元素合成反応・構造研究”、九大研究会「超重元素研究の新展開」、九州大学、福岡、2018年7月30-31日。

B) その他の発表

1. 矢花一浩、“汎用光科学第一原理計算ソフトウェア SALMON の開発と応用”、H30年度ポスト「京」重点課題（7）第3回 CDMSI 研究会、東京大学、東京、2018年7月19-20日。
2. 植本光治、矢花一浩、“第一原理電子ダイナミクス計算による ナノフォトニクスシミュレーション”、3回 CDMSI（ポスト「京」重点課題（7））シンポジウム、東京大学、東京、2018年7月19日。
3. 植本光治、矢花一浩、“第一原理電子ダイナミクス計算による半導体微細構造の斜方向光伝搬シミュレーション”、日本物理学会 2018 年秋季大会、同志社大学、京田辺、2018 年 9 月 10 日。
4. 山田俊介、野田真史、信定克幸、矢花一浩、“薄膜・表面における光伝搬の実時間第一原理シミュレーション”、日本物理学会 2018 年秋季大会、同志社大学、京田辺、2018 年 9 月 10 日。

5. 山田篤志、矢花一浩、“Maxwell + TDDFT + MD マルチスケールシミュレーションの開発および瞬間誘導ラマン分光におけるコヒーレントフォノンとシグナルの計算への適用”、分子シミュレーション討論会、産業総合研究所、つくば、2018 年 11 月 29 日。
6. 植本光治、矢花一浩、“Maxwell+TDDFT マルチスケール計算のための 斜め方向光入射の取り扱いについて”、第 29 回光物性研究会、II-51、京都大学宇治おうばくプラザ、宇治、2018 年 12 月 8 日。
7. 山田篤志、矢花一浩、“Maxwell + TDDFT + MD マルチスケールシミュレーションの開発および瞬間誘導ラマン分光におけるコヒーレントフォノンへの適用”、CREST 次世代フォトニクス領域会議、秋葉原、東京、2018 年 12 月 12 日（ポスター）。
8. 山田俊介、野田真史、信定克幸、矢花一浩、“薄膜における光・物質相互作用のための微視的および巨視的理論”、CREST 次世代フォトニクス領域会議、秋葉原、東京、2018 年 12 月 12 日（ポスター）。
9. 竹内嵩、矢花一浩、“第一原理計算による微小金属周期列の光物性解析”、CREST 次世代フォトニクス領域会議、秋葉原、東京、2018 年 12 月 12 日（ポスター）。
10. 植本光治、桑原有輝、佐藤俊介、矢花一浩、“TDDFT による非線形光学応答の時空間空間解析”、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、柏、2018 年 12 月 17 日（ポスター）。
11. 竹内嵩、矢花一浩、“時間依存密度汎関数法による微小金属周期配列の光物性解析”、第 66 回応用物理学会春季学術講演会、東京工業大学、東京、2019 年 3 月 10 日。
12. 山田篤志、矢花一浩、“Maxwell+TDDFT+MD マルチスケールシミュレーションの開発および瞬間誘導ラマン分光におけるポンププローブ分光への適用”、日本物理学会第 74 回年次大会(2019 年春季大会)、九州大学、福岡、2019 年 3 月 15 日。
13. 植本光治、矢花一浩、“Maxwell+TDDFT マルチスケール計算によるナノフォトニクスシミュレーション”、日本物理学会第 74 回年次大会(2019 年春季大会)、九州大学、福岡、2019 年 3 月 15 日。
14. 山田俊介、野田真史、信定克幸、矢花一浩、“薄膜とパルス光の相互作用に対する包括的第一原理計算方法の構築”、日本物理学会第 74 回年次大会(2019 年春季大会)、九州大学、福岡、2019 年 3 月 15 日。
15. 廣川祐太、朴泰祐、矢花一浩、“AVX-512 Intrinsic で実装されたステンシル計算の Scalable Vector Extension への展開”、第 168 回 HPC 研究会、Vol. 2019-HPC-168 No. 4、石川、2019 年 3 月 5 日。
16. 中務 孝、鷲山広平、“微視的集団模型による LLFP の核構造研究”、日本原子力学会 2018 秋の大会、岡山大学、岡山、2018 年 9 月 5-7 日。
17. 中務 孝、江幡修一郎、鷲山広平、“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 (5-5) 密度汎関数計算による核構造データ”、日本原子力学会 2019 春の年会、茨城大学、水戸、2019 年 3 月 20-22 日。

18. 中務 孝、“低エネルギー核反応と量子クラスターへの非経験的アプローチ”、「量子クラスターで読み解く物質の階層構造」 キックオフシンポジウム、東京工業大学、東京、2018 年 11 月 19–20 日.
19. 中務 孝、“PJ3- 3: 核構造計算による核反応モデルの高精度化”、ImPACT プログラム「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」公開成果報告会 ―新たな選択肢の提案、未来に向けて―、品川インターシティホール、東京、2019 年 3 月 9 日 (ポスター) .
20. 日野原伸生、“原子核密度汎関数理論における和則に関する Thouless の定理”、日本物理学会第 74 回年次大会、九州大学伊都キャンパス、福岡、2019 年 3 月 14–17 日.
21. 日野原伸生、“原子核密度汎関数の決定と関連する実験データ”、RIBF 若手放談会：エキゾチック核物理の将来、理化学研究所神戸キャンパス、神戸、2019 年 2 月 18–20 日.
22. 日野原伸生、“二重ベータ崩壊と中性子―陽子対の非線形ダイナミクス”、第 5 回「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題成果報告会、THE GRAND HALL、東京、2018 年 11 月 2 日 (ポスター) .
23. 橋本幸男、“Gogny-TDHFB による ^{40}S の対称型大振幅振動運動の記述”、日本物理学会第 74 回年次大会、九州大学伊都キャンパス、福岡、2019 年 3 月 14–17 日.
24. 橋本幸男、“時間依存密度汎関数理論に基づく超流動原子核の反応機構の研究”、第 5 回「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題成果報告会、THE GRAND HALL、東京、2018 年 11 月 2 日 (ポスター) .
25. 倪 放、“断熱的自己無撞着集団座標の方法で探る原子核の新しい集団運動”、RIBF 若手放談会：エキゾチック核物理の将来、理化学研究所神戸キャンパス、神戸、2019 年 2 月 18–20 日.

(4) 著書、解説記事等

1. 矢花一浩, “レーザー加工初期過程を記述する第一原理光科学計算法”, レーザー加工学会誌 Vol. 25 No. 2, 2018, pp.3-7.
2. 乙部智仁、矢花一浩、佐藤駿丞、篠原康, “高強度短パルスレーザー照射下にある絶縁材料の第一原理計算”, J. Plasma Fusion Research Vol. 94, No. 5, 2018, pp.266-269.
3. M. Bender, A. Bulgac, T. Duguet, J.-P. Ebran, J. Engel, M. M. Forbes, M. Kortelainen, T. Nakatsukasa, N. Schunck, “Energy Density Functional Methods for Atomic Nuclei”, (IOP Publishing, Bristol, UK) 2019.

7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

【国際連携】

1. SALMON の開発に関係して、高性能計算システム研究部門との共同研究を実施 (矢花) .

2. アト秒科学に関して、マックスプランク量子光学研究所、及びバルセロナ大学と共同研究を実施（矢花）。
3. 時間依存密度汎関数理論による物質中の超高速ダイナミクスの理論的研究に関し、ウィーン工科大学と共同研究を実施（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原子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. 韓国・ソウル国立大学の大学院生 Ha 氏と理化学研究所における中性子過剰 Mo 原子核の β - γ 核分光実験に関する共同研究（日野原）。
8. 韓国・Hoseo 大学 Moon 教授と Te 原子核の低励起状態に関する共同研究（日野原）。
9. 米国・ミシガン州立大学 Wang 氏、Nazarewicz 教授らと中性子過剰 Mg 原子核の基底状態および低励起状態に関する共同研究（日野原）。

8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

1. International School and Tutorial on Time-Dependent Density Functional Theory and SALMON Hands-on Tutorial

SALMON の利用者を拡大する活動として、2017 年度に、SALMON を用いたハンズオン（スパコンを用いた実習）を含む第一回 SALMON チュートリアルを実施したが、2018 年度も継続して行なっている。2018 年度は 11 月に、以下のような国際スクール・チュートリアルを実施した。



2 日間の日程で行い、午前中のスクールでは、SALMON の背景となる理論について、国際的に著名な研究者による講義を実施し、午後は本 CREST で雇用の研究員が中心となり筑波大学のスパコンで SALMON を利用する実習を行なった。図 1 に、午前中の講義の様子を示す。主に博士後期課程の大学院生やポスドクなどの若手研究者を中心に、海外からの参加者 23 名を含む 57 名が参加した。このイベントは、SALMON の利用者拡大と国際的な認知において、大変有意義であった。

- ・ 日程：2018 年 11 月 12 日(月) ～ 13 日(火)
- ・ 場所：筑波大学計算科学研究センター 会議室 A
- ・ 参加人数：日本人 26 名、国内外国人 8 名、海外参加者 23 名 合計 57 名

2. International Symposium on Ab Initio Electron Dynamics Simulations (AIEDS2018)

国際スクール・チュートリアルに引き続く3日間の日程で、SALMONが主な対象とする電子ダイナミクス計算を主題とする国際シンポジウムを実施した。

シンポジウムでは招待講演を含めて30件の口頭発表と14件のポスター発表があり、海外からの参加者38名を含め75名が参加した。口頭発表30件のうち

SALMONを利用した発表が6件あり、SALMONがこの分野で有用であることをアピールする大変良い機会となった。



- ・日程：2018年11月14日(水)～16日(金)

- ・場所：つくば国際会議場(EPOCAL) 102 室

- ・参加人数：日本人 31 名、国内外国人 6 名、海外参加者 38 名 合計 75 名

- ・(参考)スクール及びシンポジウムの重複を除いた参加人数：日本人 38 名、国内外国人 10 名、海外参加者 39 名 合計 87 名

3. JST-CREST 研究課題進捗報告・討論会、神奈川県足柄下郡、2018 年 9 月 27 日 (矢花)。
4. 国際シンポジウム 10th China-Japan Joint Nuclear Physics Symposium (CJNP2018), (Huizhou, China, Nov. 18 - 23, 2018)の組織委員を務めた (中務).
5. 国際会議 Nuclear Theory in the Supercomputing Era – 2018 (NTSE-2018) (Daejeon, Korea, Oct. 29 - Nov. 2, 2018) の科学諮問委員を務めた (中務).
6. 筑波大学計算科学研究センター主催シンポジウム：10th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences (Tsukuba, Japan, Oct. 15 - 16, 2018) の組織委員長を務めた (中務).
7. 国際ワークショップ Recent advances in nuclear structure physics 2018 (RANSP2018) (Kyoto, Japan, Nov. 29-Dec. 3, 2018) の組織委員を務めた (日野原).
8. 国際ワークショップ Microscopic theories of nuclear structure and dynamics (Tsukuba, Japan, Dec. 10-12, 2018) の組織委員長(日野原)および組織委員(中務、橋本)を務めた.

9. 管理・運営

組織運営や支援業務の委員・役員の実績

矢花一浩

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 先端計算科学推進室長

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 量子物性研究部門長

数理物質系物理学域 運営委員
筑波大学 50 年史編纂専門委員会委員
物理学類カリキュラム委員

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 共同研究担当主幹
計算科学研究センター 共同研究委員会および共同研究運用委員会 委員長
計算科学研究センター 学際計算科学連携室員
計算科学研究センター 情報セキュリティ委員
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 理論グループ懇談会議長
最先端共同 HPC 基盤施設 大規模 HPC チャレンジ審査委員会 副委員長
HPCI コンソーシアム機関代表

日野原伸生

計算科学研究センター 先端計算科学推進室員
計算科学研究センター 情報セキュリティ委員

10. 社会貢献・国際貢献

矢花一浩

2018 年 9 月及び 2019 年 2 月に大阪大学にて開催された CMD ワークショップにおいて
SALMON のチュートリアルを実施。
平成 30 年度テニユアトラック普及・定着事業委員会委員

中務 孝

Editor for Journal of Physical Society of Japan
Editor for International Journal of Modern Physics E
JAEA タンデム専門委員会委員
JAEA 黎明研究評価委員会委員
大阪大学核物理研究センター・運営委員会委員
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

高エネルギー加速器研究機構・素粒子原子核研究所・常置人事委員会委員

高エネルギー加速器研究機構・自己評価委員会委員

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

計算基礎科学連携拠点運営委員（ポスト京重点課題9）

中村誠太郎賞選考委員

核理論委員会委員

11. その他

1. SALMONに関わる広報。プレスリリース（筑波大、分子研、東工大各 HP）、先端の光科学に役立つ第一原理計算ソフトウェア SALMON の開発、2019 年 2 月 1 日。科学新聞、先端光科学研究に貢献 第一原理計算ソフト、2019 年 2 月 22 日。
2. SALMONに関わる一般記事。実験をリアルに再現するマルチスケール シミュレーション～「光と物質の相互作用」を理解する、京算百景 Vol. 22, 2018.7.