

## V. 原子核理論グループ

教授 矢花 一浩  
准教授 寺崎 順 (HPCI 戦略プログラム分野5)  
講師 橋本 幸男  
研究員 谷口 億宇 (計算科学研究センター)  
大学院生 5 名

### 【1】 時間依存密度汎関数理論 (TDDFT) による物質中の電子ダイナミクス計算

光科学のフロンティアの一つに、高強度で極めて短いパルスレーザーと物質の相互作用に関する研究分野がある。光の瞬間的な最大強度が $10^{14}\text{W}/\text{cm}^2$ 程度を越えると物質は瞬時にプラズマ化される。この光破壊プロセスは、物質を非熱的に加工する手段として注目されている。一方光破壊に近い強度では光と物質の相互作用に著しい非線形性が生じる。このような極限的なパルス光と物質の相互作用をどのように理論的に記述するのか、またどのような応用の可能性があるのかを明らかにすることが課題となっている。

我々は極限的なパルス光と物質の相互作用に対して、実験研究との密接な連携のもと、光電場により生じる電子ダイナミクスを TDDFT に基づく第一原理計算で記述し、空間的にはナノメートル以下、時間的にはフェムト秒以下で起こる素過程を明らかにすることを目標に研究を進めている。開発を進めている TDDFT に基づく電子ダイナミクス計算コードの核となるのは、与えられたパルス光電場が引き起こす単位セル中の電子軌道の時間変化の計算である。この単位セル計算から、パルス光による電子ダイナミクスを実時間・実空間で記述し、電子励起の様相を明らかにすることができる。また、この単位セル計算は、入力となる光電場に対して結晶中を流れる電流密度を求めることから、電場と分極を結び付ける (数値的な) 構成方程式とみなすことができる。我々はこの観点から、巨視的マクスウェル方程式と微視的 TDDFT 計算をマルチスケール手法で結びつけ、高強度なパルス光が物質中を伝播する様子を記述する巨視的電磁気学シミュレーション法 (Maxwell+TDDFT マルチスケールシミュレーション法) の構築に成功している。この新奇なシミュレーション法は、京コンピュータ程度の今日利用可能な最大規模の計算機を用いてのみ実行可能であり、高強度パルス光と物質の相互作用を自在に記述する手法として注目を集めている。

#### (1) 高強度パルス光と誘電体薄膜の相互作用 (李 (APRI、韓国)、佐藤、篠原、乙部 (原研)、矢花)

$\text{SiO}_2$  の薄膜及びバルク結晶に高強度パルス光が照射する場合の極限的な光応答に関し、Maxwell+TDDFT マルチスケールシミュレーションによる解析結果を論文にまとめた。通常の光学では、薄膜の厚さが光波長の  $1/2$ 、 $1/4$  等の場合に表面と裏面における反射波の干渉が起き、この干渉は多層膜ミラーなどに応用されている。本研究では、光強度が増すにつれて非線形相互作用のために干渉効果が消失する様子を明らかにした。また、パルス光から電子へのエネルギー移送により、薄膜にどのようなエネルギー分布を生じるかを明らかにし、光破壊の閾値エネルギーに対する見積もりを与えた。この計算は、京コンピュータの試験利用を用いて得られた成果である。

#### (2) 高強度パルス光により透明誘電体に生じる超高速電流の生成メカニズム (Wachter 他 (ウィーン工科大)、佐藤、矢花、トン (計科セ))

最近、透明な誘電体である  $\text{SiO}_2$  の表面に高強度パルス光を照射すると、フェムト秒程度の短い時間スケールで表面にキャリアが生じ電流が流れることが実験的に示され、注目されている。我々は、TDDFT に基づく第一原理計算により、高強度パルス光の  $\text{SiO}_2$  への照射による電流発生メカニズム

を明らかにした。計算では実験で見出されているのと同様に、光破壊に近い強度で電流発生が示された。また、パルス光の照射中のみに起こる電荷移動と光照射後も存在する電流という、異なるメカニズムによる電流発生が見られた。

(3) 光破壊メカニズムの解明と閾値予測 (佐藤、篠原、乙部 (原研)、李 (APRI、韓国)、矢花、G.F. Bertsch(Univ. Washington))

Maxwell+TDDFT マルチスケールシミュレーション法を用いると、高強度パルス光が透明な誘電体に引き起こす電子励起を求めることができる。電子励起エネルギーが物質の結合エネルギーを上回れば、アブレーション等の不可逆変化が起こると考えられることから、計算により物質の光破壊過程を記述することが可能となると考えられる。SiO<sub>2</sub>等の物質での予備的な検討を行い有望な結果が得られつつある。

(4) 高強度パルス光による物質の誘電応答変化に対する数値ポンプ・プローブ実験 (佐藤、篠原、乙部 (原研)、矢花、G.F. Bertsch (Univ. Washington))

高強度パルス光を用いた実験では、しばしばポンプ・プローブ分光と呼ばれる実験手法が用いられる。これは、一つのパルス光をハーフミラー等を用いて時間差を持つ2つのパルス光に分け、最初のパルス光が物質を励起し、2番目のパルス光により励起した物質の性質を探る方法である。本研究では、ポンプ・プローブ分光を模した第一原理シミュレーションを遂行し、パルス光により電子励起した直後の物質の誘電的性質を調べた。高強度なパルス光により誘電体中に自由キャリアが生成し、それが物質の光応答を金属的に変化させる様子を明らかにすることができた。

(5) ハイブリッド汎関数を用いた電子ダイナミクス計算のGPU並列計算 (谷口、佐藤、篠原、矢花)

光電場により物質中に引き起こされる電子ダイナミクスを定量的に調べる上で、エネルギー汎関数の適切な選択は極めて重要である。絶縁体や半導体の場合、物質の電子構造と光応答を規定する最も基本的な物理量はバンドギャップであるが、最も単純な選択肢である局所密度近似を用いると、系統的にバンドギャップが過小評価されることは良く知られている。最近、メタGGAやハイブリッド汎関数など、密度だけではなく軌道の性質を取り入れた汎関数を用いることにより、局所密度近似によるバンドギャップ過小評価の問題のかなりの部分が解決されることが分かってきた。

ハイブリッド汎関数は、バンドギャップや誘電関数の記述に著しい改善を見せるものとして近年特に注目されているが、一方で局所密度近似と比較すると、計算コストが膨大なものとなる欠点がある。我々は、計算科学研究センターに導入された超並列GPU計算機であるHA-PACSを用いて、ハイブリッド汎関数を用いた電子ダイナミクス計算の高速化を試みた。ハイブリッド汎関数を用いる場合、比較的小さいサイズの3次元複素離散フーリエ変換を非常に多数回行うことが必要となる。この作業をGPU CUDAライブラリであるcufftを用いて実装する計算コードの開発を行った。

計算の結果、Si結晶の誘電関数を再現し、さらに高強度レーザー照射によって非線形応答である多光子吸収が現れることがわかった。また、計算時間を計測した結果、GPUライブラリcufftを用いると、標準的なCPUライブラリFFTW3に比べて1ノード(CPU: 16コア、GPU: 4)あたり8倍の速度で計算できることがわかった。

## 【2】原子核の励起状態

(1) ニュートリノレス二重ベータ崩壊における原子核行列要素のQRPA計算 (寺崎)

寺崎は、準粒子乱雑位相近似(QRPA)を用いて、ニュートリノ質量を決めるためのニュートリノレス二重ベータ崩壊の原子核行列要素の計算に平成23年度以来取り組んでおり、平成25年度には前年度に大部分完成していた必要な計算コードを大規模計算用に整備する段階が完了し、<sup>150</sup>Nd-<sup>150</sup>Sm

でQRPA 多体相関の原子核行列要素への新しい機構を通じた影響を示す興味深い結果を生みつつある。

本課題は平成24 下期-25 年度の「京」を含むHPCI システム共用計算資源の利用研究課題において「京」の一般利用に採択された。また平成26 年度から3 年間科研費基盤Cに採択されることが内定した。

もしニュートリノレス二重ベータ崩壊が観測されれば、原子核行列要素の二乗と電子の位相空間因子の積(理論計算)とその崩壊の寿命(実験測定)からニュートリノ質量の期待値が求められる。原子核行列要素は、ニュートリノポテンシャルの二体相互作用行列、始状態と終状態から求めた二種類のQRPA 励起中間状態の重複行列、始状態と終状態からQRPA 励起中間状態への二つの二核子移行遷移行列の積のトレースによって求められる。

本研究の特徴は三つある。最も強調されるのは、QRPA 基底状態は準ボソンの真空状態であるという定義を採用することにより、QRPA 相関を正しく取り込んだ重複行列要素計算を行うことである。この機構によりQRPA 相関は原子核行列要素を減少させる効果をもつ。第二に、完全性近似のもとで、二核子移行を経由する仮想反応を考えていることである。この方法により、荷電変化反応に対してQRPA はあまり良い近似でないという問題を避けることができる。第三に世界的に頂上級の並列計算機を用いることにより、できる限り波動関数空間の広い、精度の高い計算を行うことである。

これらの特徴をもつ方法により、Skyrme エネルギー密度汎関数(SkM\*)と体積型対エネルギー密度汎関数を用いて、 $^{150}\text{Nd}$ - $^{150}\text{Sm}$ において1.89 という原子核行列要素の数値が得られた。今までに行われたいくつかの方法による計算値はおおよそ1.9-2.5の範囲にあり、本研究の値は比較的小さいといえる。また、従来のQRPA 計算では、二つのニュートリノを放出する二重ベータ崩壊のデータを再現するように陽子・中性子対エネルギー密度汎関数が導入され、この処方箋は原子核行列要素の値を減少させる効果をもつのであるが、本研究ではこの処方箋を用いていない。用いられる核がかなり中性子過剰だからである。現象論的陽子・中性子対エネルギー密度汎関数なしに、本来のQRPA 基底状態の定義によりQRPA 相関を取り入れて小さい原子核行列要素の値が得られたという点が興味深い。本研究により、30 年以上もの間未解決となっているQRPA と殻模型による原子核行列要素計算値の系統的不一致問題の突破口が開かれた可能性が高い。

寺崎は、平成24 年度以来の研究と並ぶ業務であるHPCI 戦略プログラム分野5 のユーザー支援活動にも積極的に従事した。平成25 年度は、ユーザー支援(物理にまで踏み込んだプログラム相談)の窓口ならびに連絡業務に加え、HPCI 戦略プログラムの主催または共催するふたつの研究会でユーザー支援の広報発表を行った。

## (2) 多Slater 行列式の重ね合わせによる軽い原子核のクラスター状態の記述(福岡、矢花、船木(理研)、中務(理研))

乱雑な初期配置を持つ波動関数を虚時間発展させると、基底状態へと至る過程でさまざまなクラスター状態が現れる。この過程で現れる Slater 行列式を重ね合わせ、さらにパリティ及び角運動量射影を行うことにより、軽い原子核のクラスター状態を記述することを試みている。 $^{12}\text{C}$  原子核に対しては論文を出版し、さらに $^{16}\text{O}$ 、 $^{20}\text{Ne}$  原子核に対する計算を進めた。

## (3) Gogny 力を用いた時間依存平均場計算(橋本)

原子核の集団運動を記述する方法の中でも時間依存平均場の方法は、理論的な枠組みの展開においても、また、実際の現象に対応した定性的・定量的な説明・記述を行ううえでも中心的な役割を果たしてきた。時間依存平均場の方法の中では、時間依存ハートレーフォック(TDHF)が広く用いられている。TDHFは、スキルム有効相互作用を用いた密度汎関数理論として位置づけられ、計算機の能力向上によって核図表上の広い範囲の原子核を対象とした応用が可能になっている。T

DHFは、ゼロレンジの力であるスキルム有効相互作用と3次元空間格子の組み合わせにより、計算コードがシンプルで適応範囲の広いツールとなった。最近では、中性子過剰核のダイナミクスにおける対相関の役割を研究するために、空間格子によるスキルム力+時間依存ハートレーフォックボゴリョボフ (TDHFB) の枠組みが提案されている。一方、ゴグニー有効相互作用は、そのレンジが有限の大きさを持つことで、平均場計算に用いられる基底はもっぱら調和振動子基底であった。そこで、連続状態と束縛状態の間に対相関が働く中性子過剰核の運動を記述するうえでは空間格子が便利であることに着目し、ゴグニー有効相互作用でも空間格子を用いた平均場計算が可能な枠組みを作ることを目指している。ゴグニー有効相互作用の場合には、ガウス型の相互作用形のおかげで対相関の働く空間に自然なカットオフが入る点がメリットである。一方、有限なレンジのために、2体相互作用の行列要素の計算にCPU時間をとられることになる。

2013年度は、ラグランジュ格子点を用いたTDHFBのコードにより、対相関のある球形核の代表として酸素 $^{20}\text{O}$ 、また、変形核の代表としてマグネシウム $^{34}\text{Mg}$ を対象とするHFB計算を行った。時間依存計算のために、格子間隔と基底状態のエネルギーとの関係、さらにゴグニー力に含まれる各要素(ガウス型2体力、密度依存力、LS力など)のエネルギーと格子間隔との関係を押さえた。時間依存計算においては、エネルギーと粒子数期待値を保存させる方法の開発に時間がかかったが一定の精度を出せるようになった。これによってTDHFB計算が可能になり、酸素 $^{20}\text{O}$ 、マグネシウム $^{34}\text{Mg}$ について、軸対称四重極型振動運動の強度関数を求めることができた。同時に、対相関を持つ原子核同士の衝突を扱う方法の開発を開始した。

#### (4) 励起状態に現れる変形状態とクラスタ相関 (谷口)

原子核は励起により多彩に構造が変化する。低励起状態では変形構造とクラスタ構造が重要である。クラスタ構造は、原子核が複数の塊に分かれて局在した、空間的な相関の強い構造である。本年度は $^{33-36}\text{S}$ の超変形状態の構造の研究を行った。

硫黄同位体のうち陽子数と中性子数が等しい $^{32}\text{S}$ には、 $^{16}\text{O}$ - $^{16}\text{O}$ クラスタ構造を多く含む超変形状態が存在することが理論的に予想されている。似た構造として、ベリリウム8の基底状態の $\alpha$ - $\alpha$ クラスタ構造がある。ベリリウム同位体の中性子過剰核には、 $\alpha$ - $\alpha$ クラスタ構造の周りに余剰中性子が分布した構造が基底状態やその近傍に現れることが知られている。従って、硫黄同位体には、 $^{16}\text{O}$ - $^{16}\text{O}$ クラスタ構造の周りに余剰中性子が分布した超変形状態が系統的に存在することが期待される。

$^{33-36}\text{S}$ の様々な変形構造波動関数を重ねあわせた結果、それらの核には超変形状態が系統的に存在し、それらはクラスタ描像では $160 + 160$ クラスタと、その周りに余剰中性子が $160 + 160$ 芯が作る分子軌道に入った構造と理解されることがわかった。

#### (5) エネルギー変分を用いた断熱核間ポテンシャルの導出と低エネルギー核融合 (谷口、延与 (京都大学)、須原)

核反応研究において、核間ポテンシャルは基礎となり重要である。しかし、核子間力から核間ポテンシャルを微視的に導出する手法は確立していない。そのためには核の構造変化を微視的に扱うことが必要である。

谷口や須原らは、核間距離を拘束条件としてエネルギー変分して、得られたエネルギーから各核の基底状態のエネルギーの和を引くことにより、核間ポテンシャルを導出する方法を開発した。この手法は、核間運動が核子の運動よりも遅い断熱近似に相当する。

その手法により得られた断熱核間ポテンシャルを $^{16}\text{O} + ^{16}\text{O}$ 、 $^{16}\text{O} + ^{18}\text{O}$ 低エネルギー核融合断面積の導出に応用した。それぞれの核融合断面積の衝突エネルギーの依存性が再現され、それによりこの断熱核間ポテンシャルの妥当性が確認された。また、 $^{16}\text{O} + ^{18}\text{O}$ は $^{16}\text{O} + ^{16}\text{O}$ に比べて核融合断面積が大きくなるが、それは $^{18}\text{O}$ の2余剰中性子の構造変化に起因することがわかった。

### 【3】原子核の反応

#### (1) トリプルアルファ反応率の虚時間理論 (赤堀、矢花、船木 (理研))

我々は光放出を伴う融合過程に対して新しい理論的枠組みである虚時間理論を提唱し、この理論を用いたトリプルアルファ過程の研究を行っている。トリプルアルファ過程は、電荷を持つ3粒子の散乱過程を扱う必要があること、また3体量子トンネル過程であり興味を持たれる 1GK から 0.01GK の範囲で反応率が  $10^{60}$  も変化することなどから、理論的記述は困難を極めており、最近5年間に発表された論文においても、反応率は実に低温で  $10^{26}$  に及ぶ差異がある。我々は、虚時間理論を用いることにより、容易に収束した反応率が得られることを示し、その結果は標準的な反応率として NACRE で採用されている値に極めて近いことを示した。

さらに、R 行列理論と虚時間理論を組み合わせることにより、3体ハミルトニアンに分離型近似を仮定すると、NACRE で用いられている解析式に極めて近い表式が得られることを明らかにし、経験的な反応率の表式に対する微視的根拠を与えた。数値的にも分離型近似は良い近似となっていることを示した。これらの結果を論文にまとめ、投稿中である。

#### (2) TDHF 計算による多核子移行反応の記述 (関澤、矢花)

粒子数射影の方法を用いた、多核子移行反応断面積に対する TDHF 計算の結果を論文にまとめ発表した。TDHF 計算で得られる終状態の原子核は励起しており、実験で得られている断面積とより正確な比較をするためには粒子放出の効果を取り入れる必要がある。このため、粒子数射影後の波動関数に対してエネルギー期待値を計算する方法を開発し、粒子放出効果の影響を調べた。

$^{238}\text{U}$  を含む原子核衝突では、多数の陽子が移行する過程が測定されている。この理由について、TDHF 計算により調べた。その結果、陽子移行を伴う過程は、変形核である  $^{238}\text{U}$  の変形方向と衝突軸との相対角度に強く依存することが分かった。prolate 変形した  $^{238}\text{U}$  の尖った部分が標的核にぶつかる時、ネック領域が発達し、多くの核子移行が見出される。一方、 $^{238}\text{U}$  の腹の部分に標的核がぶつかると、ネックはあまり発達せず、多くの核子が移行する過程は見出されないことが明らかとなった。

#### <学位>

##### 1. 理学博士：

岡本 稔 Three-dimensional calculation of non-uniform structures in low-density nuclear matter and neutron star by a relativistic mean field model

福岡佑太 Deformation and cluster structures in light nuclei studied with configuration mixing using Skyrme interaction

##### 2. 理学修士：

佐藤駿丞 Theoretical study on optical properties of solids excited by ultra-short laser pulses

#### <発表論文>

1. First-principles simulation of the optical response of bulk and thin-film  $\alpha$ -quartz irradiated with an ultrashort intense laser pulse

- Kyung-Min Lee, Chul Min Kim, Shunsuke A. Sato, Tomohito Otobe, Yasushi Shinohara, Kazuhiro Yabana, Tae Moon Jeong  
J. Appl. Phys. 115, 053519 (2014).
2. Low-energy E1 strength in select nuclei: Possible constraints on neutron skin and symmetry energy  
T. Inakura, T. Nakatsukasa, K. Yabana  
Phys. Rev. C88, 051305 (2013)
  3. Numerical pump-probe experiments of laser-excited silicon in nonequilibrium phase  
S.A. Sato, K. Yabana, Y. Shinohara, T. Otobe, G.F. Bertsch  
Phys. Rev. B 89, 064304 (2014).
  4. Massively-parallel electron dynamics calculations in real-time and real-space: Toward applications to nanostructures of more than ten-nanometers in size  
M. Noda, K. Ishimura, K. Nobusada, K. Yabana  
J. Comp. Phys. 265, 145 (2014).
  5. Ab-initio simulation of optical-field induced currents in dielectrics  
Georg Wachter, Christoph Lemell, Joachim Burgdörfer, Shunsuke A. Sato, Xiao-Min Tong, Kazuhiro Yabana  
arXiv:1401.4357 [cond-mat.mtrl-sci] , submitted to Phys. Rev. Lett.
  6. Imaginary-time theory for triple-alpha reaction rate  
T. Akahori, Y. Funaki, K. Yabana  
arXiv:1401-4390
  7. Computational Nuclear Quantum Many-Body Problem: The UNEDF Project  
S. Bogner, A. Bulgac, J. Carlson, J. Engel, G. Fann, R.J. Furnstahl, S. Gandolfi, G. Hagen, M. Horoi, C. Johnson, M. Kortelainen, E. Lusk, P. Maris, H. Nam, P. Navratil, W. Nazarewicz, E. Ng, G.P.A. Nobre, E. Ormand, T. Papenbrock, J. Pei, S. C. Pieper, S. Quaglioni, K. Roche, J. Sarich, N. Schunck, M. Sosonkina, J. Terasaki, I. Thompson, J.P. Vary, S.M. Wild,  
Computer Physics Communications 184, 2235 (2013)
  8. Deformation and cluster structures in  $^{12}\text{C}$  studied with configuration mixing using Skyrme interactions  
Y. Fukuoka, S. Shinohara, Y. Funaki, T. Nakatsukasa, and K. Yabana  
Phys. Rev. C 88, 014321 (2013).
  9. Time-dependent Hartree-Fock-Bogoliubov calculations using a Lagrange mesh with the Gogny interaction  
Y. Hashimoto  
Phys. Rev. C88, 034307 (2013)

10. A description of  $t$ -band in 182Os with generator coordinate method,  
Y. Hashimoto and T. Horibata,  
INFORMATION, Vol. 17, No. 2, 429 - 434 (February 2014).
11. Adiabatic internuclear potentials obtained by energy variation with the internuclear-distance constraint  
Yasutaka Taniguchi, Yoshiko Kanada-En'yo, Tadahiro Suhara  
Prog. Theor. Exp. Phys. 2013, 043D03 (2013)
12. Time-dependent Hartree-Fock calculations for multinucleon transfer processes in  $^{40}\text{Ca}+^{124}\text{Sn}$ ,  $^{40}\text{Ca}+^{208}\text{Pb}$ , and  $^{58}\text{Ni}+^{208}\text{Pb}$  reactions  
K. Sekizawa, K. Yabana  
Phys. Rev. C 88, 014614 (2013)
13. Nuclear "pasta" structures in low-density nuclear matter and properties of the neutron-star crust  
M. Okamoto, T. Maruyama, K. Yabana, T. Tatsumi  
Phys. Rev. C 88, 025801, 2013

<国際会議発表>

1. Multiscale description for strong electromagnetic fields in solids  
K. Yabana  
Gordin Research Conference on TDDFT, Univ. New England, Biddeford, ME, Aug. 11-16, 2013.
2. Light-matter interactions in time-dependent density functional theory  
K. Yabana  
Advances in time-dependent methods for quantum many-body systems, ECT\*, Trento, Italy, Oct. 14-18, 2013.
3. Imaginary-time theory for triple-alpha reaction rate  
K. Yabana  
12th Int. Symp. on Origin of Matter and Evolution of Galaxies (OMEG12), Tsukuba, Nov. 18-22, 2013.
4. Imaginary-time theory for triple-alpha reaction rate  
K. Yabana  
Workshop on large-scale computational methods applied to multi-particle resonances and astrophysical reaction problems in few-body systems, RIKEN, Wako, Oct. 21-25, 2013.
5. First-principles description of strong electromagnetic fields in solids  
K. Yabana  
Invited talk at focus session: Computer Simulation of Interaction of Electromagnetic fields and Nanostructures, APS Meeting 2014, Colorado Convention Center, Denver, USA, Mar. 3-7, 2014.
6. Maxwell + TDDFT multiscale simulation for strong electromagnetic fields in solids  
K. Yabana  
Quantum Dynamics Research Meeting, Vanderbilt University, Nashville, USA, Mar. 10-12, 2014.
7. Imaginary time theory for triple-alpha reaction rate

- K. Yabana  
International Molecular-type Workshop on New Correlations in Exotic Nuclei and Advances of Theoretical Models, YITP, Kyoto Univ, Mar. 10-23, 2014.
8. Relation between pairing gaps and transition probabilities in <sup>132, 136</sup>Te  
J. Terasaki  
XX International School on Nuclear Physics, Neutron Physics and Applications, September 16-21, 2013, Varna, Bulgaria
  9. Effect of QRPA correlations to nuclear matrix element of neutrinoless double-beta decay through overlap matrix  
J. Terasaki  
International molecule-type workshop on new correlations in exotic nuclei and advances of theoretical models, March 10-23, 2014, Kyoto
  10. Parallel-GPU calculation of electron dynamics using a hybrid density functional  
Y. Taniguchi, S.A. Sato, Y. Shinohara, K. Yabana  
Quantum Dynamics Research Meeting, March 10-12, 2014, Vanderbilt University, Nashville, USA
  11. Time-dependent Hartree-Fock calculations for multinucleon transfer processes  
K. Sekizawa, K. Yabana  
VI International Conference on Fusion and allied reactions around Coulomb barrier "FUSION14", Feb. 24-28, 2014, Inter University Accelerator Centre (IUAC), New Delhi, India
  12. Time-dependent Hartree-Fock calculations for multinucleon transfer processes  
K. Sekizawa, K. Yabana  
JUSTIPEN-JUSEIPEN Workshop, Dec. 9-12, 2013, RIKEN, Wako, Japan
  13. Time-dependent Hartree-Fock calculation for multinucleon transfer processes in heavy-ion reactions  
K. Sekizawa, K. Yabana  
A ECT\* Workshop on "From nuclear structure to particle-transfer reactions and back", Nov. 4-8, 2013, ECT\*, Trento, Italy
  14. Time-dependent Hartree-Fock Calculations for Nuclear Multi-nucleon Transfer Processes  
K. Sekizawa, K. Yabana  
A ECT\* Workshop on "Advances in time-dependent methods for quantum many-body systems", Oct. 14-18, 2013, ECT\*, Trento, Italy
  15. Quasi-fission Dynamics in Time-dependent Hartree-Fock Theory (ポスター)  
K. Sekizawa, K. Yabana  
12th CNS International Summer School, Aug. 28 - Sept. 3, 2013, RIKEN Nishina Center, Wako, Japan
  16. Real-time TDDFT calculation for electron dynamics in crystalline solids  
Shunsuke A. Sato  
Quantum Dynamics Research Meeting, March 10-14, 2014, Nashville, United states of America
  17. Real-time and real-space TDDFT calculation for electron dynamics in crystalline solids  
Shunsuke A. Sato,



CMSI International Symposium Satellite Meeting "Novel Electronic Structure Method", October 18-19, 2013, Tokyo, Japan

18. Maxwell + TDDFT multi-scale simulation for laser-matter interaction  
Shunsuke A. Sato, Kazuhiro Yabana,  
JSSST 2013 International Conference on Simulation Technology, September 11-13, 2013, Tokyo, Japan
19. TDDFT calculations for dielectric properties of laser-excited silicon  
S.A. Sato, K. Yabana, Y. Shinohara, T. Otobe, G.F. Bertsch,  
Gordon Research Conferences: Time-Dependent Density-Functional Theory, August 11-16, 2013, Biddeford, United States
20. First-principles calculation for dielectric properties of laser-excited Si  
S.A. Sato, K. Yabana, Y. Shinohara, T. Otobe, G.F. Bertsch,  
The 18th International Conference on Electron Dynamics in Semiconductors, Optoelectronics and Nanostructures, July 22-26, 2013, Matsue, Japan
21. Ab-initio electron dynamics simulation for laser-excited solids  
S.A. Sato, K. Yabana, Y. Shinohara, T. Otobe, G.F. Bertsch,  
The 12th Asia Pacific Physics Conference, July 14-19, 2013, Chiba, Japan
22. First-principles calculation for optically induced dense electron-hole excitations in semiconductor  
S.A. Sato, K. Yabana, Y. Shinohara, T. Otobe, G.F. Bertsch,  
Emergent Quantum Phases in Condensed Matter, June 12-14, 2013, Chiba, Japan

#### <国内研究会・学会等>

1. 極限的パルス光と結晶の相互作用を記述する第一原理計算  
矢花一浩  
新学術領域「コンピューティクスによる物質デザイン：複合相関と非平衡ダイナミクス」平成25年度第一回研究会、東大武田先端知ビル、2013年7月8-9日
2. 非共鳴領域におけるトリプルアルファ反応率の理論的記述  
矢花一浩、赤堀孝彦、船木靖郎  
日本物理学会秋の分科会、高知大学朝倉キャンパス、2013年9月21日
3. 電子ダイナミクス計算と巨視的電磁気学  
矢花一浩  
第3回戦略プログラム分野2×分野5異分野交流研究会「量子多体系のダイナミクス計算—原子核から物質科学まで—」、分子科学研究所、2013年11月13-14日

4. 高強度パルス光と物質の相互作用に対する第一原理計算—フェムト秒時間スケールの電子ダイナミクス・シミュレーション—  
矢花一浩  
物性科学領域横断研究会、東京大学、2013年12月1-2日
5. 変形超流動原子核における素励起モード・応答関数の研究（ポスター）  
中務孝、藏増嘉伸、数納広哉、江幡修一郎、稲倉恒法、寺崎順  
平成25年度「京」を中核とするHPCIシステム利用研究課題中間報告会、タイム24ビル、東京、2013年10月2-3日
6. 密度汎関数理論の二重ベータ崩壊原子核行列要素への応用（ポスター）  
寺崎 順  
第5回「学際計算科学による新たな知の発展・統合・創出」シンポジウム、筑波大学、つくば、2013年11月5-6日
7. ユーザー支援のご案内  
寺崎 順  
新学術領域「素核宇宙融合による計算科学に基づいた重層的物質構造の解明」のまとめと今後を語る研究会、旅館すがわら、大崎、2013年12月20-21日
8. 分野5ユーザー支援の紹介  
寺崎順  
第9回CMSI若手技術交流会、ホテル水葉亭、熱海、2014年1月28-30日
9. Calculation of nuclear transition matrix elements of neutrinoless double-beta decay  
寺崎 順  
第9回CMSI若手技術交流会、ホテル水葉亭、熱海、2014年1月28-30日
10. ユーザー支援報告  
寺崎 順  
平成25年度HPCI戦略プログラム分野5全体シンポジウム、富士ソフトアキバプラザ、東京、2014年3月3-4日
11. Calculation of nuclear transition matrix elements of neutrinoless double-beta decay using QRPA  
寺崎 順  
平成25年度HPCI戦略プログラム分野5全体シンポジウム、富士ソフトアキバプラザ、東京、2014年3月3-4日
12. ニュートリノレス二重ベータ崩壊の原子核行列要素に対するQRPA相関の効果  
寺崎 順  
日本物理学会 第69回年次大会、東海大学、平塚、2014年3月27-30日

13. Lagrange 格子を用いた Gogny-TDHFB による線形応答計算  
橋本幸男  
日本物理学会 2013 年秋季大会 (高知大学朝倉キャンパス、2013 年 9 月 20 日-23 日)
14. Study of t-band in 182Os with cranked three-dimensional Hartree-Fock-Bogoliubov method  
Y. Hashimoto and T. Horibata,  
The Sixth International Conference on Information (May 8 - 11, 2013, Hotel Arcadia Ichigaya, Tokyo, Japan)
15. S 同位体の励起状態の変形の発達とクラスタ構造  
谷口億宇  
日本物理学会年次大会, 2014 年 3 月 27-30 日, 東海大学
16. ハイブリッド汎関数による電子ダイナミクスの並列 GPU 計算  
谷口億宇, 佐藤駿丞, 篠原康, 矢花一浩  
日本物理学会秋季大会, 2013 年 9 月 25-28 日, 徳島大学
17. 硫黄同位体の超変形状態とクラスタ相関  
谷口億宇  
日本物理学会秋季大会, 2013 年 9 月 20-23 日, 高知大学
18. sd 及び pf 殻領域における超変形状態とクラスタ相関  
谷口億宇  
RCNP 研究会「核子・ハイペロン多体系におけるクラスター現象」, 2013 年 7 月 26-27 日, KGU 関内メディアセンター
19. 238U を伴う多核子移行反応過程の TDHF 計算  
関澤一之, 矢花一浩  
日本物理学会 第 69 回年次大会, 東海大学湘南キャンパス, 神奈川県平塚市, 2014 年 3 月 27-30 日
20. TDHF 計算による多核子移行反応の研究  
関澤一之, 矢花一浩  
第 3 回 HPCI 戦略プログラム 分野 2×分野 5 異分野交流研究会  
“量子多体系のダイナミクス計算 -原子核から物質科学まで-”,  
自然科学研究機構 分子科学研究所, 愛知県岡崎市, 2013 年 11 月 13 日-14 日
21. 密度汎関数理論に基づく原子核ダイナミクスの研究 (ポスター)  
関澤一之, 矢花一浩, 橋本幸男  
平成 25 年度「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題 中間報告会, タイム 24 ビル, 東京都江東区, 2013 年 10 月 2 日-3 日
22. 準核分裂ダイナミクスの TDHF 計算  
関澤一之, 矢花一浩  
日本物理学会 2013 年秋季大会, 高知大学朝倉キャンパス, 高知県高知市, 2013 年 9 月 20 日-23 日

23. 時間依存平均場理論による多核子移行反応の研究 (口頭及びポスター)  
関澤一之, 矢花一浩  
2013 年度三者若手夏の学校, ホテルたつき, 愛知県蒲郡市, 2013 年 8 月 4 日-9 日
24. 時間依存平均場計算による多核子移行反応の研究  
関澤一之, 矢花一浩  
原子核研究・2013 年夏の学校特集号, Vol. 58, Suppl. 2, pp. 45-47, 2014 年 1 月
25. パスタ構造と中性子星クラスト物質の力学的性質  
岡本稔、丸山敏毅、矢花一浩、巽敏隆  
日本物理学会 2013 年秋季大会、高知大学、2013 年 9 月 20 - 23 日
26. “原子核パスタ” と中性子星クラスト  
岡本稔、丸山敏毅、矢花一浩、巽敏隆  
原子核研究 4 月、基研研究会「ハドロン物理の諸相と状態方程式 - 中性子星の観測に照らして -」報告集、pp. 17-20、2013 年
27. レーザー加工現象における初期過程の第一原理計算  
佐藤 駿丞、李畊旻、篠原康、乙部智仁、矢花一浩  
日本物理学会 第 69 回年次大会、東海大学 2014 年 3 月 27 日-30 日
28. Theoretical study on optical properties of dielectrics near optical break-down  
Shunsuke A. Sato  
第 14 回光量子科学シンポジウム,  
日本原子力研究開発機構, 関西光科学研究所 2013 年 11 月 14 日-15 日
29. 様々な密度汎関数を用いた固体中の電子ダイナミクス計算  
佐藤 駿丞、篠原康、谷口億宇、矢花一浩  
日本物理学会 2013 年秋季大会、徳島大学 2013 年 9 月 25 日-28 日

#### <集中講義>

東京工業大学集中講義「物性物理学特論第九」

矢花一浩

2013 年 6 月 26 日、7 月 3 日、10 日

#### <セミナー>

1. トリプルアルファ反応率の虚時間理論  
矢花一浩  
東工大量子物理学ナノサイエンス第 7 4 回セミナー、2013 年 7 月 3 日
2. 物質中を伝播する高強度パルス光の理論的記述  
矢花一浩

東工大量子物理学ナノサイエンス第75回セミナー、2013年7月10日

3. First-principles theory of a strong electromagnetic field in solids  
K. Yabana  
Seminar at CNR S3, Modena, Italy, Oct. 21, 2013.
4. First-principles theory of a strong electromagnetic field in solids  
K. Yabana  
Seminar at Vanderbilt University, Nashville, USA, Dec. 9, 2013.
5. First-principles theory of a strong electromagnetic field in solids  
K. Yabana  
Seminar at Molecular Foundry, LBNL, USA, Dec. 12, 2013.
6. Cluster correlations in deformed states  
Y. Taniguchi  
RIKEN, Nov. 6, 2013
7. TDHF 計算による多核子移行反応の研究  
関澤一之, 矢花一浩  
第916回九大原子核セミナー, 九州大学箱崎キャンパス, 福岡県福岡市, 2014年3月3日
8. Time-dependent Hartree-Fock calculations for multinucleon transfer processes  
K. Sekizawa, K. Yabana  
A seminar at INFN-LNL, Oct. 22, 2013, Legnaro, Padova, Italy

<一般対象の講演>

教員免許状更新講習「物質の起源と量子の世界」

矢花一浩

筑波大学、2013年7月28日