

V. 原子核理論グループ

メンバー

教授	矢花一浩、中務 孝
准教授	寺崎 順 (HPCI 戦略プログラム)
講師	橋本幸男
助教	日野原伸生 (国際テニユアトラック)
研究員	温 凱 (数理物質系物理学域)
学生	大学院生 6 名、学類生 2 名

1. 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。

2. 研究成果

【 1 】 高強度パルス光と誘電体の相互作用の解明

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は、光科学のフロンティアの一つとして急速に進展している。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、物質を非熱的に加工する手段として注目されている。一方この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。我々は、このような極限的なパルス光と物質の相互作用を記述する理論と計算法の開発に取り組んでいる。

我々のアプローチの根幹をなすのは、結晶の単位セルに、空間的に一様で時間とともに変化する電場が印加されたときの電子ダイナミクスに対する時間依存密度汎関数理論 (TDDFT) に基づく第一原理計算である。実時間・実空間法を用いて TDDFT の基礎方程式である時間依存コーン・シャム方程式を解くことにより、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の微視的な解像度で光と物質の相互作用を記述し理解することが可能になる。

この単位セル計算は、与えられた光電場に対して結晶中に生じる電流密度（そして電流密度を時間で積分した分極密度）を得ることができることから、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新奇な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) の開発に成功している。このシミュレーションは、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。

以下、この課題に関係した今年度の研究の中から特筆すべきものを紹介する。

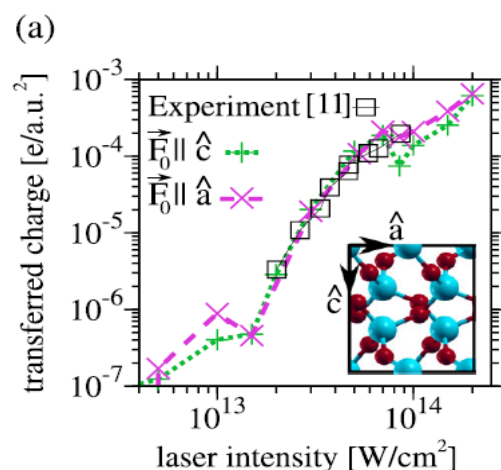
(1) レーザー光によるシリコン結晶バンドギャップ変化の実時間観測 (矢花、佐藤 (筑波大 院 生)、M. Schultze 他 (カリフォルニア大))

半導体物質中の電子は光が照射されると、一部の電子が光エネルギーを吸収し、バンドギャップを越えて束縛から解放されることにより、物質中を移動できるようになる。カリフォルニア大の実験グループは、この電子の移動する過程を典型的な半導体物質であるシリコン結晶で、アト秒パルス光を用いた実時間観測することに成功した。実験では非常に短くて強い可視領域のパルス光を照射し電子の励起を引き起こし、続いてさらに短い数十アト秒のX線パルス照射して、可視パルス光によって電子が励起する過程のスナップショットを撮影している。この実験で、シリコンのバンドギャップが光の照射後450アト秒以下の極めて短い時間で変化することが明らかになった。我々は、TDDFTによる電子ダイナミクスシミュレーションを行うことで、電子励起のメカニズムの解明に取り組み、実験に相当する条件下で量子トンネル過程による励起が主要であることを示した。また、アト秒パルスによる内殻励起を調べるために必要となる波動関数情報を提供した。

(2) 高強度パルス光を照射したガラス表面に生じる超高速電流の第一原理計算 (矢花、トン (計科セ)、佐藤、G. Wachter 他 (ウィーン工科大))

高強度なパルス光と物質の相互作用は、素過程に対する興味とともに、光の振動数をクロックとして動作する新奇なデバイス原理の開拓という観点から興味を持たれている。我々は、最近マックスプランク量子光学研究所の実験グループが観測した、高強度パルス光を照射したガラスの表面に超高速電流が生成される現象の解明を目指して、 α -SiO₂結晶に対して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を遂行した。

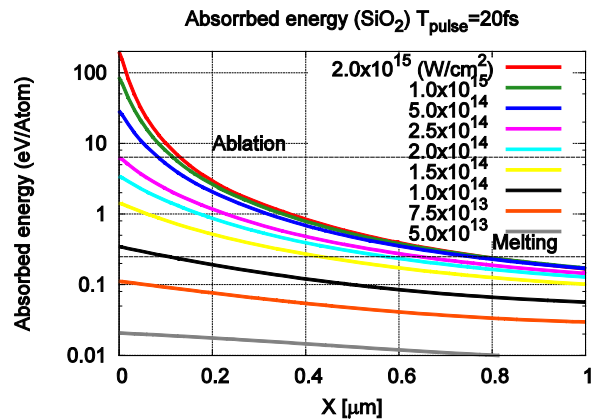
上図は、パルス光の強度を横軸に、生じた電流により移動した電荷 (分極) を縦軸に示している。図の右端は、誘電体に不可逆な壊変をもたらす強度に近いが、その直前の強度のパルス光の照射により、光の強度とともに指数関数的に増大する電流の発生が確かめられ、測定値を



良く再現している。計算によれば、移行電荷は結晶軸と光の偏光方向の角度に敏感に依存しており、電流の発生が電子構造の非等方性に強く依存していることを示唆している。また測定値はパルス光の絶対位相に敏感に依存するが、計算においても同様の依存性が確認された。

(3) フェムト秒レーザーによる光破壊の閾値強度とアブレーション深度の第一原理計算 (矢花、乙部 (原研)、篠原、佐藤、李 (APRI、韓国)、G.F. Bertsch (Univ. Washington))

高強度なパルス光を透明な誘電体に照射すると、ある強度から物質に不可逆な変化が起き、さらに強度を増すと物質表面から原子が飛散するアブレーションが起こる。フェムト秒程度の非常に短いパルス光を用いると、これらの光ダメージは、レーザーの強度を忠実に反映して局所的に進行し、光ダメージに熱拡散の様相が見られないことが知られており、非熱的レーザー加工法として注目されている。



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照射した際の、光から電子へのエネルギー移行を第一原理計算により求めることができる。上図は、京コンピュータを用い、 α -SiO₂ に対して計算を行った結果であり、横軸が物質表面からの深度、縦軸が1原子あたりの電子励起エネルギーを示している。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が起こる閾値強度やアブレーション深度を見積もることが可能となると考えられる。計算の結果、レーザーダメージの閾値強度は2倍程度以下の精度で測定値を再現し、アブレーション深度に関しては測定値である100-150nmの値を高い精度で再現することを確かめている。

【2】時間依存 Hartree-Fock 法による核子移行過程の記述 (矢花、関澤)

多核子移行反応は、核子多体系に発現する非平衡量子輸送過程としてその反応機構に興味を持たれており、また近年、多核子移行反応を用いこれまでに生成されたことのない不安定原子核を生成する可能性が盛んに議論されている。我々は、多核子移行反応の微視的反応機構を明らかにすると共に、不安定核の生成方法を予言することを目指し研究を進めてきた。昨年度までに、TDHF 法に粒子数射影法を組み合わせることにより、起こる確率の大きい移行反応過程の断面積を定量的に記述できることを明らかにした。しかし、移行する核子数が大きく、起こる確率の小さい移行反応過程については、実験値を過小評価するという問題に直面した。そこで本年度には、この実験値と食い違いを解消することを試みた。相違の原因として、励起した原

子核からの核子放出による脱励起（核子蒸発）の効果が考えられる。核子蒸発過程は、我々の数値シミュレーションで扱う時間スケールより遥かに長い時間スケールで起こる現象であり、TDHF 計算とは別に統計模型を用いた計算を行う必要がある。統計模型を利用するために、我々は粒子数射影法を応用し、生成された原子核の励起エネルギーを評価する方法を開発した。そして、核子蒸発の効果を取り入れた断面積を評価し、実験値との比較を行った。その結果、核子蒸発の効果が実験値との相違を改善することを確認したが、効果は不十分であった。このことは、TDHF 計算で扱えていない相関の影響を示唆している。

【 3 】 正準基底時間依存ハートレー・フォック・ボゴリューボフ理論による多核子ダイナミクス計算（中務、江幡（北大）、稲倉（京大））

原子核理論分野で発展が目覚ましい3次元実空間表示の時間依存ハートレーフォック法に対して、計算コストの増加をミニマムに抑えた上で、核子対凝縮と超流動ダイナミクスを扱えるように拡張した理論を、2010年に我々が提唱した。このときの論文に対して、第一著者である江幡氏（当時筑波大学大学院生・理化学研究所 JRA）が、本年度の日本物理学会若手奨励賞を受賞した。この方法を線形応答領域に応用し、原子核の応答関数の系統的計算を行い、軽い原子核から希土類領域の重い原子核まで、中性子分離エネルギーが2MeV以上のアイソトープについて電気双極子(E1)強度分布を調査した。その結果、中性子過剰核の広い領域において低エネルギーのE1ピーク（ピグミー共鳴）が現れ、その出現のメカニズムに中性子の殻効果が重要であることが分かった。また、通常、E1強度のほとんどは巨大共鳴状態に集中するため、低エネルギー領域のE1強度は大幅に弱められていることが知られているが、非常に中性子過剰な重い原子核の励起エネルギー5 MeV以下には、このE1抑制が働かない新種のピグミー共鳴が現れることを予言した。さらに、これらのピグミー共鳴の性質と中性子星の構造を決定する状態方程式との関係を精査した。

また、同じ計算手法を用いた核融合反応計算を開始し、軽い原子核に限定的ではあるが、対相関の影響に関して興味深い結果を得た。衝突エネルギーを同じにして、対相関を入れた計算と無視した計算とを比べると、対相関によって核融合が阻害されるケースがあることが分かった。さらにこの効果を確認するため、研究を続行中である。

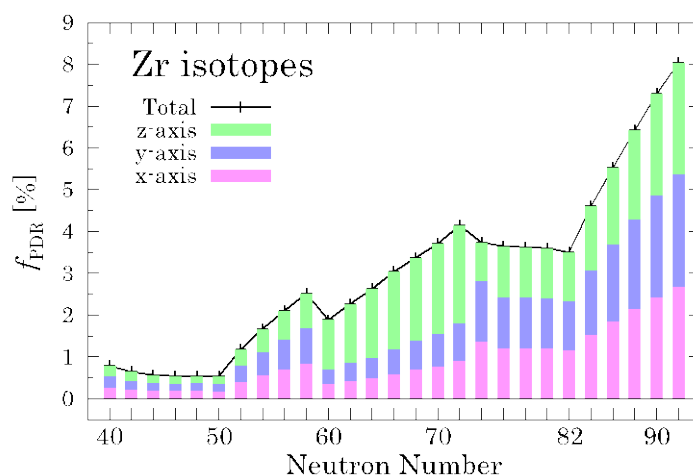


図1：Zr アイソトープの低エネルギーE1強度の割合。特定の中性子数 N=50, 60, 72, 82 で傾きが突然変化する。

【 4 】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、断熱近似型の理論が提案されているが、そのうちの 하나가、2000年に提案された断熱自己無撞着集団座標法(Adiabatic Self-consistent Collective Coordinate Method: ASCC法)である。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り、特に、過去の断熱時間依存平均場理論では不可能であった一意的な抽出ができる点が優れている。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ことを目指した研究を開始した。まず、テストとして、比較的簡単なBKN相互作用と呼ばれる有効相互作用を用いて、3次元座標表示のTDHFを基礎にしたコード開発を行い、2つのアルファ粒子の散乱・融合のミクロな機構を明らかにすることにした。拘束演算子を局所調和方程式と呼ばれる式から求め、それを拘束条件付き平均場計算に応用する。これを自己無撞着に計算し、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求める。これまでに、このようにして自己無撞着に決めた質量が遠方で換算質量に一致すること、また2つのアルファ粒子が接触した後は換算質量が大きくなり、反応速度が弱められることなどが分かっている。

【 5 】アイソスピン不変なエネルギー汎関数による原子核密度汎関数計算 (中務、佐藤(理研)、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(ρ_p, ρ_n)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、陽子・中性子を区別せずに「核子」として扱う新しいKohn-Sham方程式と、それに対応する非対角要素(ρ_{pn}, ρ_{np})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。

アイソスピン不変に拡張することによる新しいパラメータの導入はなく、これまでのエネルギー汎関数のパラメータセットをそのまま利用することができる。計算コードは、ポーランド・ワルシャワ大学のグループを中心に開発されているHFODDにこの拡張を適用することにした。この研究はワルシャワ大学との共同研究で進められている。

この拡張による大きなメリットとして、荷電類似状態(アイソバリックアナログ状態)と呼ばれる状態が、自然かつ簡便な形で表現できることがあげられる。図には、質量数A=54のアイソスピンT=1の状態が示されている。左端の点(T=-1)が ^{54}Ni に、右端(T=+1)が ^{54}Fe 、真ん中(T=0)が ^{54}Co に対応する。この真ん中の ^{54}Co の状態は従来の密度汎関数で記述することが困難であった。さらに、パラメータフリーの計算で実験と非常によい一致を得ている。

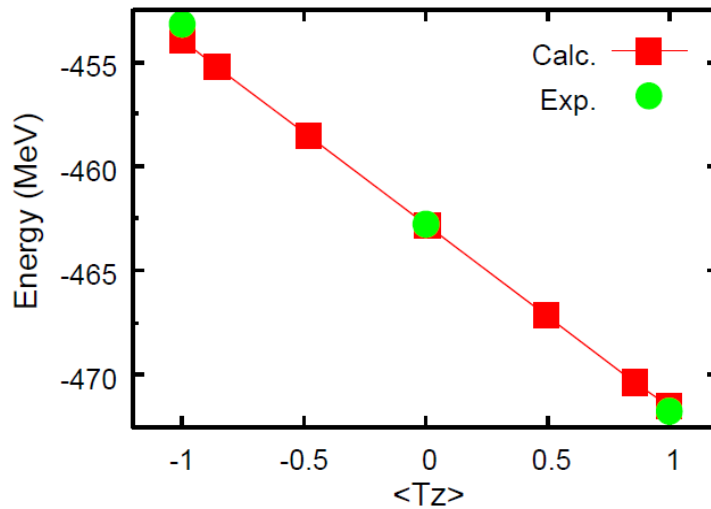


図2：A=54の同重体におけるアイソスピン T=1 三重項状態のエネルギー（左から Ni, Co, Fe に対応）。

【 6 】 原子核の二重ベータ崩壊の原子核行列要素（寺崎）

寺崎は四年前に赴任して以来ニュートリノレス二重ベータ崩壊の理論的研究を実施している。その中心的内容は、準粒子乱雑位相近似を用いたその崩壊の原子核行列要素の計算である。その崩壊が観測された場合にニュートリノの質量スケールを決定するために必要な原子核行列要素の信頼できる数値を出すことが目標である。2014年度は、 ^{150}Nd から ^{150}Sm へのニュートリノレス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 (QRPA) を用いて求め、その計算に関する論文を出版した。その計算過程で、始状態と終状態から求めた QRPA 励起状態の重複を求める必要があるが、ここで QRPA 基底状態の規格化因子の積が約 2 であり、原子核行列要素を 1/2 倍する効果があることを初めて見出した。このことは、今まで原子核行列要素を小さくするために用いられていた現象論的相互作用の方法の見直しの必要性を示しており、同じ課題を研究している研究者への影響は大きい。今までより理論的整合性の高い計算を提示したことで、信頼性の高い原子核行列要素を求めるという目標に近づいた。

【 7 】 有限振幅法を用いた和則計算（日野原、Kortelainen (Univ. Jyväskylä), Nazarewicz (Michigan State Univ.), Olsen (Michigan State Univ.))

和則は巨大共鳴などの線形応答に対する情報と関連する扱いやすい量であるため、原子核エネルギー密度汎関数の未知の結合定数を決定する際に、ダイナミクスを代表する量として有用であると考えられる。しかしながら乱雑位相近似 (QRPA) を用いて和則を計算すると、大次元の行列の対角化とそのすべての解が必要となり、さらに計算量による制限のため行列の次元を減らす近似が必須である。全自由度を扱うことが出来る有限振幅法を用い、複素エネルギー平面で励起状態に対応する極をすべて囲む複素積分を行うことによって、和則を効率よく計算する定式化を行った。全自由度が扱える小さな模型空間において QRPA の行列対角化による解と一

致することを数値的に確認し、さらに和則を与える Thouless 定理や絶縁定理の密度汎関数理論での有効性を、現実的な場合において数値的に示した。有限振幅法による本定式化はこれらの定理が使えない場合においても有効であり、複素積分の並列化によって和則を効率よく正確に計算することが可能となった。

【 8 】 二重ベータ崩壊の核行列要素 (陽子-中性子対振幅の量子ゆらぎを取り込んだ核行列要素の計算 (日野原、Engel (Univ. North Carolina)))

二重ベータ崩壊の核行列要素はアイソスカラー型の陽子-中性子対相関力によって抑制されることが乱雑位相近似 (QRPA) 計算によって知られているが、この陽子-中性子対相関力は基底状態に質的な影響を与えないため、その強さについてはよくわかっていない。QRPA 計算は相転移を記述出来ないため、基底状態の四重極変形ゆらぎが大きく変形共存や変形転移状態にある場合や、アイソスカラー対凝縮相への転移状態近傍にある場合は近似が破綻する。この QRPA の問題を回避し核行列要素の相互作用依存性を明らかにするために、四重極変形度と陽子-中性子対振幅を拘束した変分によってこれらの量子ゆらぎの大きい状態をも含んだ基底を生成し、量子数射影後に重ねあわせることで、崩壊の始状態と終状態を構築した (生成座標法)。特に陽子-中性子対を自由度に取り込んだ生成座標法はこれまでに行われたことのないユニークなものである。第一の計算例として、二主殻模型空間で $^{76}\text{Ge} \rightarrow ^{76}\text{Se}$ の二重ベータ崩壊の核行列要素を評価した。生成座標法では殻模型計算より広い一粒子模型空間を用いることが出来、さらに二準粒子励起に制限される QRPA よりも豊富な多体相関を取り込むことが出来るため、適切な有効相互作用を用いることで、将来的には殻模型計算と QRPA のどちらにも含まれていない効果を議論することが期待できる。もう一つの将来計画は Skyrme 型の原子核密度汎関数に基づいて陽子-中性子対の自由度を入れた生成座標法計算を行うことで、 β 崩壊などの関連する物理量も含めた荷電交換過程の系統的な計算へと発展させることである。

【 9 】 Gogny-TDHFB による $^{20}\text{O}-^{20}\text{O}$ 正面衝突の計算 (橋本)

原子核の振る舞いを研究するうえで、時間依存平均場の方法は定性的にも定量的にも極めて有用な枠組みとなっている。原子核の基底状態近傍の状態においては対相関が重要な働きをすることが知られているので、中性子過剰核の性質を理解する目的で、TDHF の枠組みを拡張して対相関を扱えるようにした時間依存ハートレーフォックボゴリュボフ (TDHFB) の実用的な数値計算が行われるようになってきた。橋本は、調和振動子基底と空間格子としての Lagrange 格子点を組み合わせた基底を利用し、Gogny 力を用いた TDHFB を解く、という数値計算の方法を整備してきた。今年度は、 $^{20}\text{O}+^{20}\text{O}$ の衝突に応用した。ちなみに、TDHF+BCS の形式での原子核衝突の計算は存在するが、TDHFB 方程式を直接解いて原子核衝突を計算する試みは、現時点では極めて少ない。計算に必要な格子空間の選定は初期条件の設定と関係し、そのための試行錯誤に計算時間と労力を割く必要があった。実際の計算は、クーロン障壁頂上付近の軌道を 3 本 (3 個の初期エネルギー) 設定し、2.1 fm 離れた点から計算を開始した。この一連の計算により、① 障壁より上のエネルギーの軌道では融合が起こり、核子の移行量

の期待値を計算できた。② 障壁より下の軌道において、対相関の働く中性子側では、陽子側の約10倍の移行数があり、これは ^{20}O の中性子数・陽子数比である1.5よりずっと多いことがわかる。さらに、③ 障壁よりも上のエネルギーを持つ2本の軌道から、巨視的な摩擦係数を計算することができた。摩擦係数は、融合の初期に急速に増加することが示された。今後、これらの量の初期エネルギー依存性を系統的に調べていく。

【 10 】 Energy dependence of the nucleus-nucleus potential and the friction parameter in fusion reactions (温、坂田(茨城大)、Li(CIAE)、Wu(CIAE)、Zhang(CIAE)、Zhou(CAS))

Applying a macroscopic reduction procedure to the improved quantum molecular dynamics (ImQMD) model, the energy dependences of the nucleus-nucleus potential, the friction parameter, and the random force characterizing a one-dimensional Langevin-type description of the heavy-ion fusion process are investigated. Systematic calculations with the ImQMD model show that the fluctuation-dissipation relation found in symmetric head-on fusion reactions at energies just above the Coulomb barrier fades out when the incident energy increases. It turns out that this dynamical change with increasing incident energy is caused by a specific behavior of the friction parameter which directly depends on the microscopic dynamical process, i.e., on how the collective energy of the relative motion is transferred into the intrinsic excitation energy. It is shown microscopically that the energy dissipation in the fusion process is governed by two mechanisms: One is caused by the nucleon exchanges between two fusing nuclei, and the other is due to a rearrangement of nucleons in the intrinsic system. The former mechanism monotonically increases the dissipative energy and shows a weak dependence on the incident energy, while the latter depends on both the relative distance between two fusing nuclei and the incident energy. It is shown that the latter mechanism is responsible for the energy dependence of the fusion potential and explains the fading out of the fluctuation-dissipation relation.

3. 教育

1. 五嶋祐希、修士(理学)、“Gogny力を用いたHFBによる質量数 $A \leq 50$ 領域における中性子過剰原子核の構造”
2. 関澤一之、博士(理学)、“Multinucleon transfer reactions and quasifission processes in time-dependent Hartree-Fock theory”

4. 受賞、外部資金、知的財産権等

受賞

1. 日本物理学会若手奨励賞、江幡修一郎、“Canonical-basis time-dependent Hartree-Fock-Bogoliubov theory and linear response calculations”、2015年3月21日

2. 筑波大学数理物質科学研究科長賞、関澤一之、「Multinucleon transfer reactions and quasifission processes in time-dependent Hartree-Fock theory」、2015年3月25日
3. The Award for Best Project of the 2014 TALENT Course #5 “Theory for Exploring Nuclear Structure Experiments”、関澤一之、2015年12月
4. 「京」を中核とするHPCIシステム利用課題 優秀成果賞、橋本幸男、関澤一之、矢花一浩、2014年10月

外部資金

1. 科学研究費補助金・基盤研究(B)、矢花一浩(代表)、2011-2014年度、総額19500千円(2014年度3250千円)、課題名「固体中のフェムト・アト秒電子ダイナミクスに対する第一原理計算」
2. 科学研究費補助金・新学術領域研究(研究領域提案型)公募研究、矢花一浩(代表)、2013-2014年度、総額3900千円(2014年度1950千円)、課題名「光と電子のダイナミクスを記述する第一原理マルチスケールシミュレーション法の開発」
3. 日本学術振興会二国間交流事業オープンパートナーシップ共同研究(アメリカ合衆国)、矢花一浩(代表)、2013-2015年度、4960千円(2014年度2320千円)、課題名「超高速電子ダイナミクスに対する第一原理計算アプローチ」
4. 株式会社IHIとの共同研究、矢花一浩(代表)、研究題目「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」、2013年度より継続、2014年度研究経費1000千円
5. 日本学術振興会科学研究費・基盤研究(B)、中務孝、代表、2013年から継続、5,500,000円、「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」
6. 科研費・新学術領域研究(研究領域提案型)、中務孝、分担、2012年から継続1,000,000円、「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」
7. 学振・二国間交流事業(オープンパートナー)、中務孝、代表、2014年、2,484,000円、セミナー「計算核物理学の進展と展望」
8. 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(研究開発責任者)、矢花一浩、橋本幸男(研究開発参加者)、2014年、3,000,000円「核構造計算による核反応モデルの高精度化」
9. 科研費 平成26年度基盤研究C、寺崎順、研究代表者、2014年度採択、交付額(直接経費)1,300千円、課題名 QRPAを用いたニュートリノレス二重ベータ崩壊の原子核行列要素計算

5. 研究業績

- (1) 研究論文

A) 査読付き論文

1. M. Schultze, K. Ramasesha, C.D. Pemmaraju, S.A. Sato, D. Whitmore, A. Gandman, J.S. Prell, L.J. Borja, D. Prendergast, K. Yabana, D.M. Neumark, S.R. Leone, "Attosecond band-gap dynamics in silicon", *Science* 346, 1348-1352 (2014).
2. S.A. Sato, Y. Shinohara, T. Otobe, K. Yabana, "Dielectric response of laser-excited silicon at finite electron temperature", *Phys. Rev. B* 90, 174303 (8 pages) (2014).
3. G. Wachter, C. Lemell, J. Burgdoerfer, S.A. Sato, X.-M. Tong, K. Yabana, "Ab Initio Simulation of Electrical Currents Induced by Ultrafast Laser Excitation of Dielectric Materials", *Phys. Rev. Lett.* 113, 087401 (5 pages) (2014).
4. S.A. Sato, K. Yabana, "Efficient basis expansion for describing linear and nonlinear electron dynamics in crystalline solids", *Phys. Rev. B* 89, 224305 (11 pages) (2014).
5. M. Noda, K. Ishimura, K. Nobusada, K. Yabana, T. Boku, "Massively-parallel electron dynamics calculations in real-time and real-space: Toward applications to nanostructures of more than ten-nanometers in size", *J. Comput. Phys.* 265, 145-155 (2014).
6. K. Sekizawa, K. Yabana, "Particle-number projection method in time-dependent Hartree-Fock theory: Properties of reaction products", *Phys. Rev. C* 90, 064614 (2014).
7. T. Inakura, W. Horiuchi, Y. Suzuki, and T. Nakatsukasa, "Mean-field analysis of ground state and low-lying electric dipole strength in ^{22}C ", *Phys. Rev. C* 89, 064316 (2014).
8. S. Ebata, T. Nakatsukasa, and T. Inakura, "Systematic investigation of low-lying dipole modes using the canonical-basis time-dependent Hartree-Fock-Bogoliubov theory", *Phys. Rev. C* 90, 024303 (2014).
9. M. Matsuo, N. Hinohara, K. Sato, K. Matsuyanagi, T. Nakatsukasa, and K. Yoshida, "Quadrupole shape dynamics from the viewpoint of a theory of large-amplitude collective motion", *Phys. Scr.* 89, 054020 (2014).
10. T. Nakatsukasa, "Finite amplitude method in linear response TDDFT calculations", *J. Phys. Conf. Ser.* 533, 012054 (2014).
11. J. Sheikh, N. Hinohara, J. Dobaczewski, T. Nakatsukasa, W. Nazarewicz, K. Sato, "Isospin invariant Skyrme density functional approach with axial symmetry", *Phys. Rev. C* 89, 054317 (2014)
12. J. Terasaki, "Many-body correlations of quasiparticle random-phase approximation in nuclear matrix

elements of neutrinoless double- β decay”, Physical Review C, **91**, 034318 (2015).

13. J. Terasaki,
“Relation between pairing gaps and transition probabilities in $^{132,136}\text{Te}$ ”, Journal of Physics:Conference Series **533**, 012059 (2014).
14. Nobuo Hinohara and Jonathan Engel,
“Proton-neutron pairing amplitudes as a generator coordinate for double-beta decay”, Phys. Rev. C90, 031301(R) (2014).

B) 査読無し論文

1. H.Z.Liang, J. Meng, T. Nakatsukasa, Z. M. Niu, P. Ring, X. Roca-Maza, N. Van Giai, P. W. Zhao, “Nuclear charge-exchange excitations in localized covariant density functional theory”, EPJ Web Conf. 66, 02064 (2014)
2. S.Ebata, T.Nakatsukasa,
“Pairing effects in nuclear fusion reaction, J. Phys. Soc. Conf. Proc. 1, 013038 (2014)
3. K. Sekizawa, K. Yabana,
"Strong Orientation Dependence of Multinucleon Transfer Processes in $^{238}\text{U}+^{124}\text{Sn}$ Reaction", 2nd Conf. on Advances in Radioactive Isotope Science, JPS Conference Proceedings Vol. 6 (in press).
4. K. Sekizawa, K. Yabana,
"Time-dependent Hartree-Fock calculations for multi-nucleon transfer processes: Effects of particle evaporation on production cross sections", VI Int. Conf. Fusion14, EPJ Web of Conference 86, 00043 (2015).

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

1. K. Yabana,
"Imaginary time formalism of triple-alpha reaction", PKU-CUSTIPEN Nuclear Reaction Workshop "Reactions and Spectroscopy of Unstable Nuclei", Peking Univ., China, Aug. 11-14, 2014.
2. K. Yabana,
"Cluster Structure of Light Nuclei Superposing Multiple Slater Determinants", Int. Conf. Nuclear Theory in the Supercomputing Era -2014 (NTSE-2014), Pacific National Univ. Khabarovsk, Russia, June 23-27, 2014.
3. T. Nakatsukasa,
“Mean-field calculations for IoI”, RIBF Discussion Plus!: Island of Inversion, Wako, Japan, Apr. 25, 2014.
4. T. Nakatsukasa,
“Nuclear response and equation of state”, APCTP Workshop on the intersection of cold-atomic and

- nuclear physics, Pohang, Korea, May 12-13, 2014.
5. T. Nakatsukasa,
“Nuclear structure studies with energy density functionals”, International workshop on Progress in nuclear shell-model calculations in CNS-RIKEN collaboration, Wako, Japan, Nov. 26-28, 2014.
 6. T. Nakatsukasa,
“Isospin invariant energy density functional and isobaric analogue states”, International Symposium on Physics of Unstable Nuclei 2014, Ho Chi Minh City, Vietnam, Nov. 3-8, 2014.
 7. T. Nakatsukasa,
“Time-dependent density functional calculation of nuclear response functions”, International Conference: Nuclear Theory in the Supercomputing Era – 2014, Khabarovsk, Russia, June 23-27, 2014.
 8. T. Nakatsukasa,
“Time-dependent approaches to nuclear many-body dynamics”, International Workshop on New Frontier of Numerical Methods for Many-Body Correlations, Tokyo, Japan, Feb. 18-21, 2015.
 9. J. Terasaki,
“Effects of QRPA correlations on nuclear matrix elements of neutrinoless double-beta decay through overlap matrix”, International Conference on Nuclear Theory in the Supercomputing Era (NTSE2014), Khabarovsk, Russia, June 23–27, 2014.
 10. J. Terasaki,
“Many-body correlations of QRPA in nuclear matrix elements of $0\nu\beta\beta$ decay”, EMMI Rapid Reaction Task Force on Nuclear Matrix Elements, Darmstadt, Germany, November 10–21, 2014.
 11. J. Terasaki,
“Many-body correlations of QRPA in nuclear matrix elements of $0\nu\beta\beta$ decay”, Double-beta-decay meeting, Chapel Hill, USA, March 9 and 10, 2015.
 12. N. Hinohara,
“Finite-amplitude method for low-lying collective modes and QRPA sum rules”, ICNT workshop “Physics of exotic nuclei: Theoretical advances and challenge”, RIKEN, Wako, Japan, Jun. 9-13, 2014.
 13. N. Hinohara
“Role of Fluctuations of collective coordinates in nuclear matrix elements”, Mini-collaboration meeting on double-beta decay, Univ. of North Carolina, Chapel Hill, NC, USA, Mar. 9-10, 2015.
- B) 一般講演
1. K. Yabana, "Progress in first-principles electron dynamics calculations", LAP Annual Meeting, Frauenchiemsee, Germany, Sept. 22-26, 2014.
 2. K. Yabana, "Time-resolved dynamical Franz-Keldysh effect", Seminar at Vienna Tech., Sept. 29, 2014.

3. K. Yabana, "Time-dependent density functional theory of high-intensity, short-pulse laser irradiation on dielectrics", Seminar at POSTECH, Nov. 10, 2014.
4. K. Yabana, T. Akahori, Y. Funaki, "Imaginary time approach for reaction rate of triple-alpha process", Fourth Joint Meeting of the Nuclear Physics Divisions of the American Physical Society and the Physical Society of Japan, Hilton Waikoloa Village, Hawaii, USA, Oct. 7-11, 2014.
5. J. Terasaki, "Effects of QRPA correlations on nuclear matrix elements of neutrinoless double-beta decay through overlap matrix", Neutrino Nuclear Responses for Neutrino Studies in Nuclei (NNR14), Ibaraki, Japan, November 5–6, 2014.
6. J. Terasaki, "Effect of QRPA correlations on nuclear matrix element of neutrinoless double-beta decay through overlap of QRPA states", 4th joint meeting of the APS division of nuclear physics and the PSJ, Waikoloa, USA, Oct. 7–11, 2014.
7. N. Hinohara and J. Engel, "Effect of Fluctuations of Quadrupole Deformation and Neutron-Proton Correlations on Double Beta Decay Nuclear Matrix Element", 2nd Conference on Advances in Radioactive Isotope Science (ARIS2014), Univ. of Tokyo, Jun. 1-6, 2014.
8. N. Hinohara, M. Kortelainen, W. Nazarewicz, and E. Olsen, "Low-energy Collective Modes and Sum Rules with the Complex-energy Finite-amplitude Method", (poster presentation), 2nd Conference on Advances in Radioactive Isotope Science (ARIS2014), Univ. of Tokyo, Jun. 1-6, 2014
9. N. Hinohara, "QRPA calculations using the complex-energy finite amplitude method", NUCLEI SciDAC collaboration meeting, Santa Fe, NM, USA, Jun. 15-19, 2014.
10. N. Hinohara, M. Kortelainen, W. Nazarewicz, and E. Olsen, "Finite-amplitude method for discrete collective excited states and sum rules", Fourth Joint Meeting of the Nuclear Physics Divisions of the American Physical Society and The Physical Society of Japan (HAWAII2014), Waikoloa Village, HI, USA, Oct. 7-11, 2014.
11. Shunsuke A. Sato, Kazuhiro Yabana, Yasushi Shinohara, Kyung-Min Lee, Tomohito Otobe, George F. Bertsch, "First-principles calculation for electron dynamics in dielectrics induced by intense laser pulses", APS March Meeting 2015, San Antonio, Texas, March 2–6, 2015
12. T. Akahori, Y. Funaki, K. Yabana, " $3\alpha \rightarrow {}^{12}\text{C}$ reaction rate in imaginary time theory", 3rd Int. Workshop on "State of the Art in Nuclear Cluster Physics" SOTANCP3, Kanto Gakuin Univ, Yokohama, May 26-30, 2014.
13. K. Sekizawa, K. Yabana, "Transfer dynamics in the TDHF theory deduced from particle-number projection method", ECT* Workshop on "From nuclear structure to particle-transfer reactions and

- back II", ECT*, Trento, Italy, Nov. 10-14, 2014.
14. K. Sekizawa, K. Yabana, "Strong orientation dependence of multinucleon transfer processes in $^{238}\text{U}+^{124}\text{Sn}$ reaction", The 4th Joint Meeting of the Nuclear Physics Division of the APS and the JPS, Hilton Waikoloa Village, Hawaii, USA, Oct. 7-11, 2014.
 15. K. Sekizawa, K. Yabana, "Time-dependent Hartree-Fock Calculation for Multinucleon Transfer Processes", The 2nd conference on Advances in Radioactive Isotope Science "ARIS2014", ITO International Research Center, Tokyo, Japan, 1-6 June, 2014

(3) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

1. 矢花一浩、"トリプルアルファ反応率の量子力学計算"、第27回理論懇シンポジウム「理論天文学・宇宙物理学と境界領域」、国立天文台三鷹キャンパス、2014年12月24-26日
2. 矢花一浩、"透明材料におけるアブレーション初期過程の第一原理計算"、第15回光量子科学研究シンポジウム、原研関西光科学研究所、2014年11月13-14日
3. 中務 孝、"原子核密度汎関数理論の概要"、サマースクール「クォークから超新星爆発まで」、京都大学基礎物理学研究所、京都、2014年7月24日

B) その他の発表

1. 矢花一浩、"光駆動電子ダイナミクスの第一原理計算"、「限界光駆動系のコンセプトとめざす学理」研究会、京大化研、2014年8月22日
2. 矢花一浩、"超高速光電子ダイナミクスの第一原理計算"、「先端物質科学と限界光駆動」、京大吉田キャンパス北部構内益川ホール、2015年1月10-11日
3. 矢花一浩、"フェムト秒レーザーと物質の相互作用に対する第一原理量子ダイナミクス計算"、京大工学部三浦研セミナー、2015年1月15日
4. 矢花一浩、"量子多体問題と密度汎関数理論の考え方"、サマースクール「クォークから超新星爆まで」-基礎物理の理想への挑戦-、京大基研、2014年7月24日
5. 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、2015年3月26日
6. K. Sekizawa, K. Yabana, "Time-dependent Hartree-Fock calculations for multi-nucleon transfer and quasi-fission processes", A seminar at the ANU, Australian National University, Canberra, Australia, July 21, 2014.
7. K. Sekizawa, K. Yabana, "Time-dependent Hartree-Fock calculations for multinucleon transfer processes", 262th Sendai Nuclear Science Colloquium, Tohoku University, Sendai, Miyagi, Japan, April 15, 2014.

8. 関澤一之、矢花一浩、“射影演算子を用いた核子移行 TDHF 波動関数の分析 II”、日本物理学会 第 70 回年会、早稲田大学、東京都新宿区、2015 年 3 月 21 日-24 日
9. 関澤一之、矢花一浩、“原子核ダイナミクスの微視的シミュレーション”、第 6 回「学際計算科学による新たな知の発見・統合・創出」シンポジウム -HA-PACS と COMA による計算科学の発展と、分野融合への取り組み-、筑波大学大学会館 国際会議室、茨城県つくば市、2014 年 10 月 21 日 (火) - 22 日 (水)
10. 橋本幸男、“ラグランジュ格子を用いた Gogny-TDHF による $^{20}\text{O}+^{20}\text{O}$ の計算”、日本物理学会第 70 回年次大会 (2015 年 3 月 21 日-24 日、早稲田大学早稲田キャンパス)
11. 佐藤 駿丞, 李畊旻, 篠原康, 乙部智仁, 矢花一浩, ” レーザー加工における初期過程の第一原理的解析”, 第 75 回応用物理学会秋季学術講演会, 北海道大学札幌キャンパス, 2014 年 9 月 17 日-20 日
12. 佐藤 駿丞, 矢花一浩, 篠原康, 乙部智仁, 李畊旻, G. F. Bertsch, “第一原理計算によるレーザー損傷閾値及び深さの解析”, 第 6 2 回応用物理学会春季学術講演会, 東海大学, 2015 年 3 月 11 日-14 日
13. 佐藤 駿丞, 矢花一浩, 篠原康, 乙部智仁, 李畊旻, G. F. Bertsch, “レーザー損傷閾値及びアブレーション深さの第一原理的解析”, 日本物理学会 第 70 回年次大会, 早稲田大学, 2015 年 3 月 21 日-24 日
14. 橋本幸男、矢花一浩、関澤一之、“密度汎関数理論に基づく原子核ダイナミクスの研究”、第 1 回「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題 成果報告会、コクヨホール、東京都港区、2014 年 10 月 31 日 (金)

(4) 著書、解説記事等

- 1) K. Yabana, Y. Shinohara, T. Otobe, J.-I. Iwata, G.F. Bertsch, "First-Principles Calculations for Laser Induced Electron Dynamics in Solids - Time-Dependent Density-Functional Theory for laser matter interactions", Advances in Multi-Photon Processes and Spectroscopy, Vol. 21, pp. 209-244, Eds. S.H. Lin, A.A. Villaeys, Y. Fujimura, World Scientific (2014).
- 2) 日野原 伸生, “ノースカロライナ大学チャペルヒル校 (海外通信)”, 原子核研究、第 59 巻 1 号(2014 年 9 月発行) pp. 14-15.

6. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

【国際連携】

1. 米国との間で、超高速電子ダイナミクスに対する第一原理計算アプローチをテーマとする共同研究を平成 25 年度より推進している。米国はバンダービルト大学及びワシントン大学 (米国側代表はバンダービルト大学の K. Varga 准教授)、日本側は筑波大学の他、分子

- 科学研究所、日本原子力研究開発機構（日本側代表は矢花）が参加している。
2. アト秒科学に関し、マックスプランク量子光学研究所の実験グループ (F. Krausz 教授、M. Schultze 研究員、他)、チューリッヒ工科大学の実験グループ (U. Keller 教授、他) と国際共同研究を推進 (矢花)。
 3. ウィーン工科大学の理論グループ (J. Burgdoerfer 教授、及びそのグループメンバー) と、実時間電子ダイナミクス計算コード ARTED を用いた国際共同研究を推進 (矢花)。
 4. 筑波大学計算科学研究センター量子物性部門とともに宇宙・原子核物理研究部門にも所属し、両分野において時間依存密度汎関数理論に基づく実時間・実空間解法を用いた多フェルミオン系ダイナミクスの研究を推進 (矢花)。
 5. 筑波大学計算科学研究センター高性能計算システム研究部門の朴、及び大学院生の廣川と、実時間電子ダイナミクス計算コード ARTED のメニーコアシステムを用いた加速に関して共同研究 (矢花)。
 6. 日本学術振興会二国間交流事業オープンパートナー・セミナー (代表：中務) の支援により、米国ロスアラモス国立研究所の Joe Carlson 氏を中心とする理論核物理研究者等とハワイにおいて共同セミナーを開催した (2014 年 10 月) (中務)。
 7. ポーランド・ワルシャワ大学の原子核理論グループと共同で、オープンソースコード HFODD をアイソスピン不変なエネルギー密度汎関数へ適用する拡張に取り組んでいる (中務)。
 8. 韓国・APCTP およびイタリア・トレント大学の冷却原子系理論グループと、1 次元周期ポテンシャル中のフェルミ粒子系の超流動状態に関する共同研究を行っている (中務)。
 9. 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)。
 10. 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. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

1. 国際会議 2nd International Conference on Advances in Radioactive Isotope Science (Tokyo, June 1-6, 2014) の組織委員を務めた (中務)。
2. 国際 ICNT ワークショップ Physics of exotic nuclei: Theoretical advances and challenges (RIKEN, June 9-13, 2014) の組織委員長を務めた (中務)。
3. HPCI 戦略プログラム 5 共催の国際ワークショップ Advances and perspectives in computational nuclear physics (Waikoloa, HI, USA, Oct. 5-7, 2014) の組織委員長を務めた (中務)。
4. 第 13 回国際サマースクール CNSSS14 (RIKEN, Aug. 21-27, 2014) の組織委員を務めた (中務)。

8. 管理・運営

矢花一浩

物理学専攻・物理学域

物理学専攻長、物理学域長、カリキュラム委員会委員、学生支援対応チーム

数理物質系・数理物質科学研究科

系長室員、運営委員会委員、広報委員長、人事委員会委員、施設安全管理委員会委員、

大学教員業績評価委員会委員、情報環境委員会委員

計算科学研究センター

共同研究担当主幹、量子物性研究部門長、運営委員会委員、運営協議会委員、人事委員会委員、共同研究委員長、共同研究運用委員長、先端計算科学推進室長、研究企画室委員

学外

核理論委員会委員、KEK 大型シミュレーション研究推進委員会委員、日本原子力研究開発機構客員研究員

中務孝

計算科学研究センター 宇宙・原子核物理研究部門 原子核物理分野リーダー

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 共同研究委員会委員

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 図書委員長

理化学研究所・中務原子核理論研究室 准主任研究員（兼務）

京都大学・基礎物理学研究所 運営協議会委員

核理論委員会委員

日本物理学会 第 67-70 期代議員

理化学研究所 RI ビームファクトリー 国際プログラム諮問委員会 (NP-PAC) 委員

雑誌「原子核研究」編集委員

寺崎 順

文部科学省 HPCI 戦略プログラム分野 5「物質と宇宙の起源と構造」中の計算機ユーザーのプログラミング支援活動において連絡係を務めた。

9. 社会貢献・国際貢献

矢花一浩

Associate Editor for European Physical Journal A

中務 孝

理化学研究所一般公開(2014. 4. 19)において講演「量子力学と原子核」

カナダ・TRIUMF 国際プログラム諮問委員会 (SAP-EEC) 委員

Editor for Journal of Physical Society of Japan
Editor for International Journal of Modern Physics E

10. その他

海外長期滞在

- 1) 日野原 伸生, Univ. North Carolina at Chapel Hill, NC, USA, 2014年6月
20日～2014年8月25日
- 2) 日野原 伸生, National Superconducting Cyclotron Laboratory,
Michigan State Univ., East Lansing, MI, USA, 2014年8月27日～2015年
3月31日(次年度に継続)