

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	鷲山広平、野村昂亮（PD 学振：2017. 10 転出）、Guillaume Scamps
学生	大学院生 5 名（うち特別研究学生 1 名）

2. 概要

原子核理論グループは、大きく分けて、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するグループと、物質科学・光科学・レーザー場（強い電磁場）中における多電子ダイナミクスを研究するグループが存在する。前者では、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。後者では、時間依存密度汎関数理論に基づき、原子・分子と光、物質と強レーザー場との非摂動的な相互作用等、光科学分野の計算科学的研究を行なっている。これら 2 つの分野は、フェルミ粒子の量子多体系計算という観点で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现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、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ている。我々は、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 】元素合成アルファ過程とサブバリア核融合反応に対する微視的アプローチ（温（サリー大）、中務）

太陽よりもはるかに重い大質量星の内部では、ヘリウム原子核（アルファ粒子）を種としたアルファ過程と呼ばれる元素合成が進行すると考えられている。これらの過程は、クーロン相互作用で反発する原子核同士を融合させる反応であるが、クーロンポテンシャルの障壁を量子トンネル効果ですり抜けることで核融合を実現させている。我々は、この問題に対する微視的アプローチとして、大振幅集団運動の理論である断熱自己無撞着集団座標法(ASCC 法)を用いた手法を開発してきた。原子核一般を記述するエネルギー密度汎関数

を出発点として、何の仮定も置かずに、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。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、アルファ反応や比較的軽い核同士の核融合反応経路を決定し、その上で核融合の集団ハミルトニアンを構築する。最後に量子化を行って量子トンネル融合断面積を計算した。図1には、astrophysical S因子と呼ばれる核構造が関わる因子を示す。

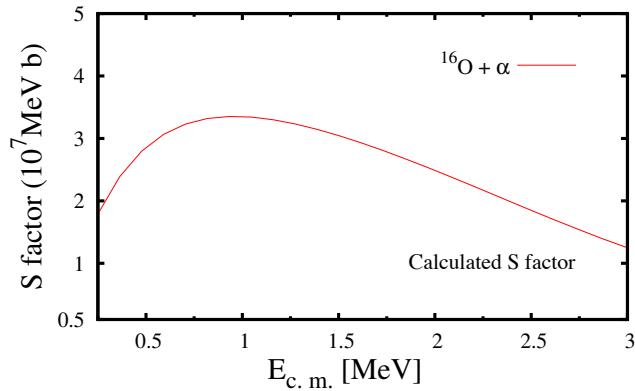


図1： $^{16}\text{O} + \alpha \rightarrow ^{20}\text{Ne}$ の核融合反応に対して計算された astrophysical S因子。
横軸は重心系での衝突エネルギーで単位は MeV。

【 2 】原子核形状の系統的計算（江幡(北大)、中務）

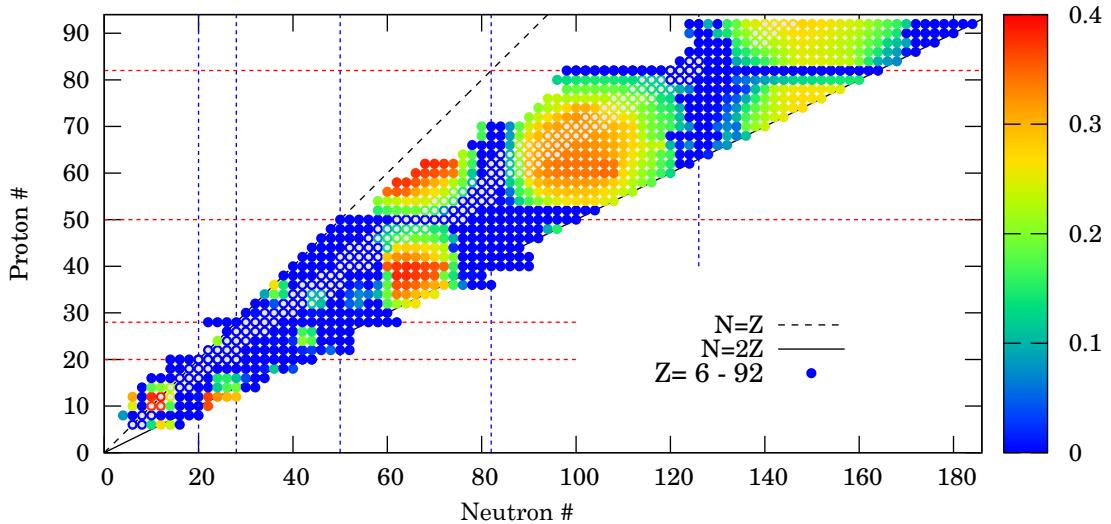


図2：原子核の四重極変形の度合いを表すパラメータ β_2 の大きさを核図表の上に色分けで図示したもの。青が球形を表し、赤は大きく変形した原子核を表している。白抜きの円で表示されたものは自然界に存在する安定核。

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。特に核図表の上で、 $84 < N < 88$ 、 $54 < Z < 70$ の領域、 $130 < N < 136$ 、 $84 < Z < 92$ の領域にはパリティ対称性を自発的に破った八重極変形が現れることが示された。これらは実験データや過去の別の手法に基づく計算と矛盾しない結果である。今回は、これらに加えて、 $130 < N < 136$ 、 $60 < Z < 70$ といった中性子過剰領域にも八重極変形が現れることを予言した（図2）。

【3】対振動状態における集団座標(倪(D2)、中務)

原子核の励起状態の中で、スピン・パリティが 0^+ の状態にはその性質が解明されていない状態が多く存在する。その鍵を握っていると考えられる対相関の集団ダイナミクスを研究するため、これまで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）を用いた研究を行ってきた。今年度は特に、集団模型の微視的導出とその量子化に関する研究を行った。対振動状態は、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）集団的状態であると解釈することができるが、現実的な原子核においては、比較的集団性が小さいため、通常の正準量子化を用いた集団模型の量子化ではうまく記述できないことが多い。この問題点を解決することを目標に、時間依存ダイナミクスのフーリエ分解、経路積分法に基づく準古典量子化などを試みて、厳密解と比較した。この結果、経路積分に基づく準古典量子化法が、弱相関から強相関、関与する粒子数の多少に関わらず全ての領域において、厳密解と近い励起エネルギーおよび2粒子遷移確率を再現することを示した（図3）。現在、この手法の拡張と現実的な系への応用を進めている。

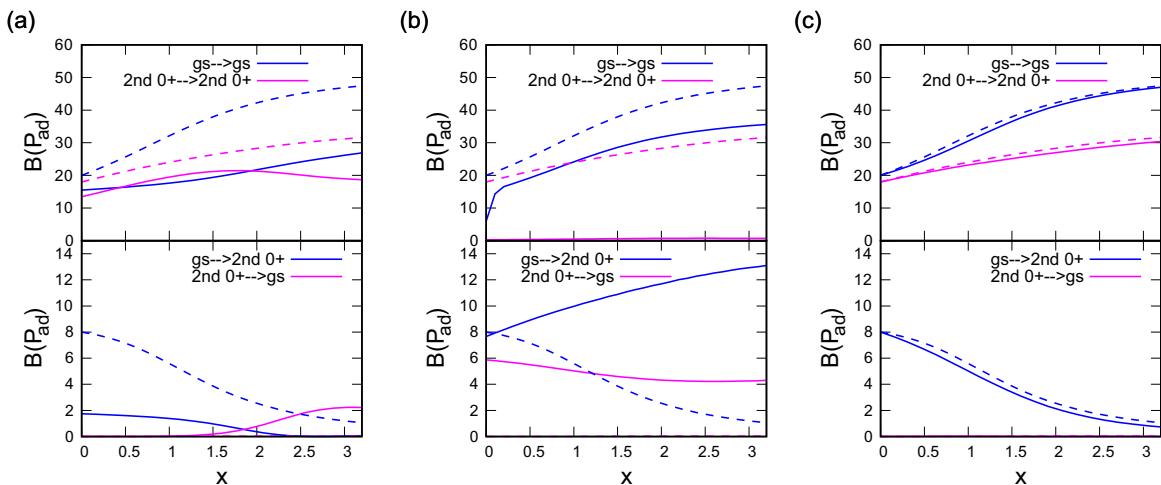


図3：対相関模型での2粒子移行反応に関する行列要素の計算（粒子数が6から8への遷移）。集団ハミルトニアンの量子化法として、(a) 正準量子化法、(b) フーリエ分解法、(c) 経路積分準古典近似法を用いた結果を示す。点線が厳密計算の結果を示している。

【4】中性子星内殻における1次元周期構造と有効質量（柏葉(D1)、中務）

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（ラザーニヤ相）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、昨年度、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。固体物理で行われているバンド計算を、自己無撞着に核子自身が作り出した周期的ポテンシャルの中での核子（陽子・中性子）の運動に応用したもので、自己無撞着な計算は世界初の成果である（図4）。様々な密度における計算を実行し、周期的ポテンシャルがもたらすプラグ散乱の効果である巨視的な有効質量を求めた。その結果、内殻中で原子核からこぼれ落ちた中性子の一部は、原子核に引きずられており、有効質量が真空中の中性子質量に比べて5%から10%程度大きくなることが分かった。この有効質量の効果は、中性子星パルサーに観測されているグリッヂの微視的メカニズムに関連して注目されている。特に、クラストに存在する超流動中性子の渦糸ダイナミクスに起源を求める解釈に対して、非常に大きな影響がある。

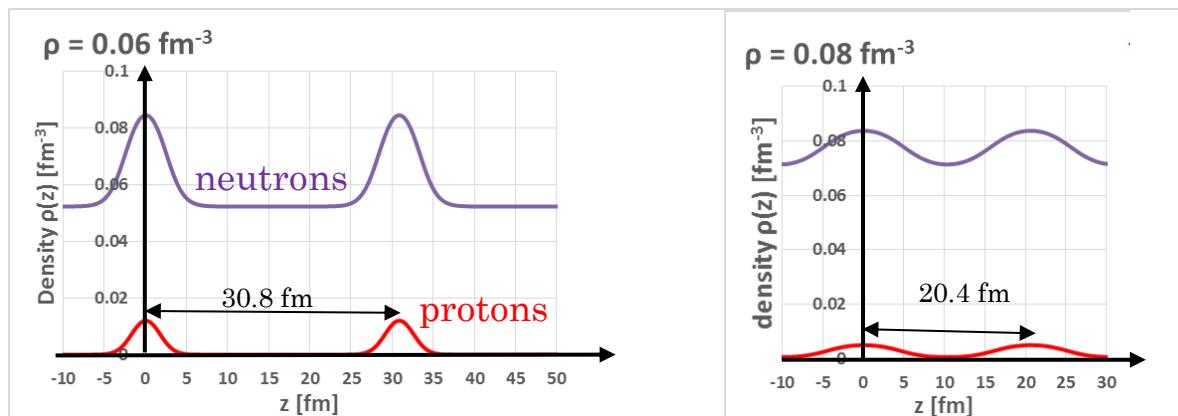


図4：中性子星インナー・クラストにおける板状の原子核が並んだスラブ相に対する密度汎関数バンド計算。左が平均核子密度 $\rho = 0.06 \text{ fm}^{-3}$ 、右が $\rho = 0.08 \text{ fm}^{-3}$ に対する結果、中性子および陽子の密度分布を板に垂直な方向をz軸としてプロット。密度が大きくなることによってスラブ間隔が小さくなり、一様な核物質に近づいていることがわかる。

【5】5次元集団模型による解析と結合チャネルへの拡張(八百板(M2)、中務)

ボーア・モッテルソンの5次元集団模型は、静的・動的な四重極変形と回転運動を記述できる模型として、原子核の低エネルギー・スペクトルに成功した模型である。様々なデータが近年蓄積されたことで、振動・回転の単純な描像では説明できない状態が多々あることが指摘されている。その中の一つが変形核におけるベータ振動状態である。E2遷移強度の非対称性や核子対移行反応などのデータから、平衡変形周りの変形度の振動という伝統的解釈に疑問が投げかけられている。我々は5次元集団模型を用いて、ベータ振動状態の性質を精査した。その結果、形状揺らぎの大きな遷移領域においては、実験データのE2強度の振る舞いは模型の予言と矛盾しないことを明らかにした。また、模型の拡張にも取り組み、5次元空

間ポテンシャルに多重シートが存在する場合を想定した結合チャネル型の集団模型を開発し、簡単な場合を例に数値解析を実行した。その結果として、断熱・透熱型のダイナミクスを記述できることを確認した。

【 6 】アイソスピン不变な原子核密度汎関数による中性子—陽子対相関(日野原、Sheikh(カシミア大)、Nazarewicz(ミシガン州立大))

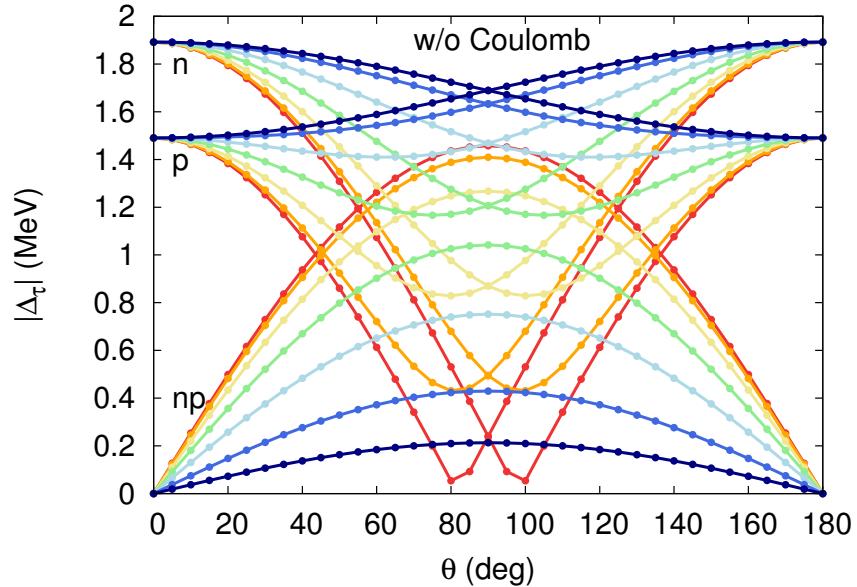


図 5: $A = 48, T = 4$ でのアイソバリックアナログ状態での対ギャップのアイソスピン回転での変化。色は最高重み状態($\theta = 0^\circ$)での相対ゲージ角に対応する。

核内の核子は基底状態ではクーパー対を形成し、対凝縮状態となっていることが多いが、中性子と陽子のフェルミエネルギーが異なることから、通常は同種粒子対が凝縮する。一方で陽子過剰不安定核のような中性子と陽子のフェルミエネルギーが近い場合においては中性子—陽子対が凝縮する可能性が議論されている。中性子—陽子対凝縮についてはこれまで簡単な模型計算による議論のみであり、原子核密度汎関数法に中性子—陽子対密度汎関数を入れたような実際的なものはなかった。中性子と陽子をアイソスピンの固有状態とし、アイソスピン回転に対して不变な局所密度による汎関数の定式化を用いて、軸対称変形を扱える原子核密度汎関数計算コード HFBTH0 への中性子—陽子対相関の実装を行った。これまでにアイソベクトル型の対相関(中性子対、陽子対、中性子—陽子対)の実装を完了した。アイソバリック・アナログ状態を、同種粒子対凝縮したアイソスピンの最高重み状態($T = T_z$)からのアイソスピン空間での回転として表現したときに、3つのアイソベクトル型の対相関がどのように出現するのかを分析した(図 5)。 $T = T_z$ での中性子対相関、陽子対相関の相対ゲージ角のとり方にアイソベクトル型中性子—陽子対相関が強く依

存するが、アイソスピン対称性のため異なった中性子—陽子対相関を持った解が無限に縮退することを示した。この縮退は、アイソスピン対称性を破る Coulomb 力の汎関数を加えることによって破れることも示した。続いて中性子—陽子対相関が存在する場合に中性子および陽子の化学ポテンシャルをラグランジュ未定乗数として決定できるようにコード開発を行った。これを用いることで陽子過剰核の基底状態での対凝縮の計算が実行可能となつた。

【 7 】巨大共鳴のベンチマーク計算(日野原、Kortelainen(ユバスキュラ大)、Nazarewicz(ミシガン州立大))

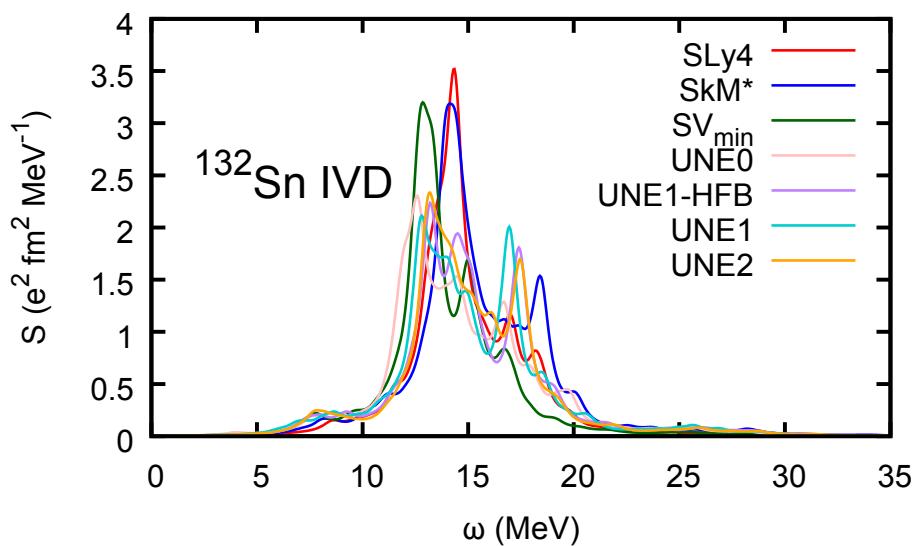


図 6： 様々な原子核密度汎関数を用いて計算した ^{132}Sn のアイソベクトル双極子巨大共鳴の強度関数。

原子核密度汎関数の結合定数は既知の基底状態の実験データや核物質の性質と整合性を持つように現象論的に決定される。米国 UNEDF プロジェクトでは多くの原子核の束縛エネルギーや荷電半径などの実験データを用いた結合定数の最適化が行われた。しかしながらアイソベクトル有効質量などの一部の結合定数は、基底状態の実験データとあまり相関がなく最適化できていない。励起状態の情報も用いることでこれらの基底状態量と相関が弱い結合定数も決定できる可能性がある。励起状態を代表する量としては、多重極巨大共鳴のピークエネルギーがあるが、まずは有限振幅法を用いて現在広く使われている原子核密度汎関数を用いたベンチマーク計算を、実験データが確立している二重閉殻 $^{40,48}\text{Ca}$, ^{56}Ni , ^{90}Zr , ^{132}Sn , ^{208}Pb で行った（図 6）。特に、UNEDF2 汎関数は多くの Skyrme EDF には入っていないテンソル密度汎関数を含んでいるため、この場合の線形応答が計算できるように有限振幅法計算コードの拡張を行った。また、効率的に結合定数を決定するために和則比によって巨大共鳴ピークエネルギーの評価を行うことが望まれるが、どの原子核のどのモードにおいて、実験データと和則比の対応がよいかの系統的な分析を行った。

【 8 】二重ベータ崩壊原子核行列要素の精密計算に向けて(日野原、Engel(ノースカロライナ大))

二重ベータ崩壊探索実験により電子ニュートリノの有効質量を決定するために必要な原子核行列要素の計算を、生成座標法を用いて行っている。これまでに pf 裂殻領域の軽い原子核(Ti, Cr)での中性子—陽子対相関力による原子核行列要素の抑制を系統的に調べてきたが、実験が行われている $^{48}\text{Ca} \rightarrow ^{48}\text{Ti}$ では始状態の重要な生成座標法の基底が二重閉殻となっており、これまでに基底間の重なり積分計算で用いてきた Neergård-Wüst の方法が使えない(Bogoliubov 変換に対応する行列の逆行列を計算する必要があるが、閉殻ではこの行列にゼロ固有値が存在するため)。Bogoliubov 変換の行列に Bloch-Messiah 分解を行うことで固有値を分離し、それらに非常に小さい値を加えることによってゼロ固有値の問題を回避するという最近提唱された処方(Gao et al., PLB(2014))を実装し、この問題を回避することができた。現在 ^{48}Ca の原子核行列要素の計算を進めているが、中性子—陽子対相関力のみの場合では、殻模型計算から予想されるほど行列要素が抑制されないという計算結果を得ている。

また、原子核密度汎関数法を用いた二重ベータ崩壊の行列要素を計算するために、有限振幅法を用いた定式化を行った。準粒子乱雑位相近似による行列要素の計算では、大次元の行列対角化を行う必要があるが、有限振幅法を用いることによって、反復法によって複素エネルギーを用いた応答関数を計算し、これを二重複素積分することによって効率的に計算できることを示した。遷移演算子が簡単な二重 Gamow-Teller 遷移や 2 つのニュートリノを放出する二重ベータ崩壊原子核行列要素はこの方法によって効率的に計算することができる期待される。

【 9 】超流動原子核の衝突から融合に至る過程の分析（橋本）

昨年度までの時間依存 Hartree-Fock-Bogoliubov (TDHFB) による超流動原子核同士の衝突のシミュレーション (酸素 $^{20}\text{O} + ^{20}\text{O}$)において、二つの原子核の接触から融合に至る比較的短い時間の間に對相関エネルギーが滑らかに減少するが完全にゼロにはならない、という現象がみられた。この相対距離の領域においては、巨視的な摩擦係数が急速に増大し相対運動から内部励起・核子運動へとエネルギーの流れが生まれることが考えられた。この状況にある TDHFB の波動関数の構造とエネルギーの流れの微視的な背景を理解するために、硫黄 ^{40}S を二つの ^{20}O に断熱的に分裂させる過程を考え、その途中の波動関数を参照として融合過程にある TDHFB の波動関数を調べる方法をとった。対称分裂は $z = 0$ 平面の左右の“部分系”のそれぞれの重心の間の距離を拘束条件とする HFB 計算により実行した。図 7 には、重心間距離と全エネルギー・對相関エネルギーの関係を示した。図中の黒い矢印が酸素 ^{20}O 核の衝突の時の接触から融合への重心間距離の変化範囲である。エネルギー・對相関エネルギーのカーブから、相対距離が 6 fm 付近に構造変化による“障壁”があるよう見える。今後は、これらの構造変化について TDHFB 軌道を用いて詳しく調べていく。

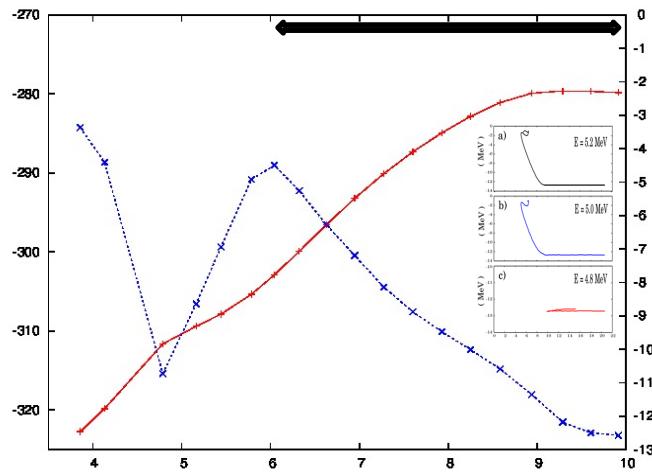


図 7：硫黄⁴⁰S を 2 個の酸素²⁰O に分裂させる拘束条件付き HFB 計算。全エネルギー（左スケール (MeV)）と対相関エネルギー（右スケール (MeV)）が分離距離 (fm) により変化する様子。

【 10 】3 次元空間上の有限振幅法の開発（鷲山、中務）

本研究の目的は、小規模数値計算で非軸対称超流動原子核の低励起状態の性質を密度汎関数法に基づく準粒子乱雑位相近似(QPRA)法で評価することである。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、陽子数・中性子数の変化に伴い基底状態や低励起状態が急激な構造変化を示す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 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 計算は球形及び軸対称変形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大次元の QRPA 行列要素の計算とその対角化を回避して外場に対する原子核の線形応答を記述する有限振幅法(FAM)が提案された。本研究では、昨年度に引き続き非軸対称変形を扱うための 3 次元空間 FAM-QRPA 計算の数値計算コードの開発を行なった。まず、先行研究の軸対称 FAM で得られた強度関数とのベンチマークを行ない本研究で開発したコードの妥当性を確認した。次に、非軸対称超流動原子核¹¹⁰Ru, ¹⁹⁰Pt のアイソスカラー型四重極応答(Q_{2K})に応用し、四重極演算子の K 量子数に対する強度関数の分離とゼロエネルギー近傍での回転の spurious mode を得た（非軸対称核の 3 軸それぞれの周りでの回転）。さらに、比較的小規模の計算時間で非軸対称核の強度関数を得た（図 8）。

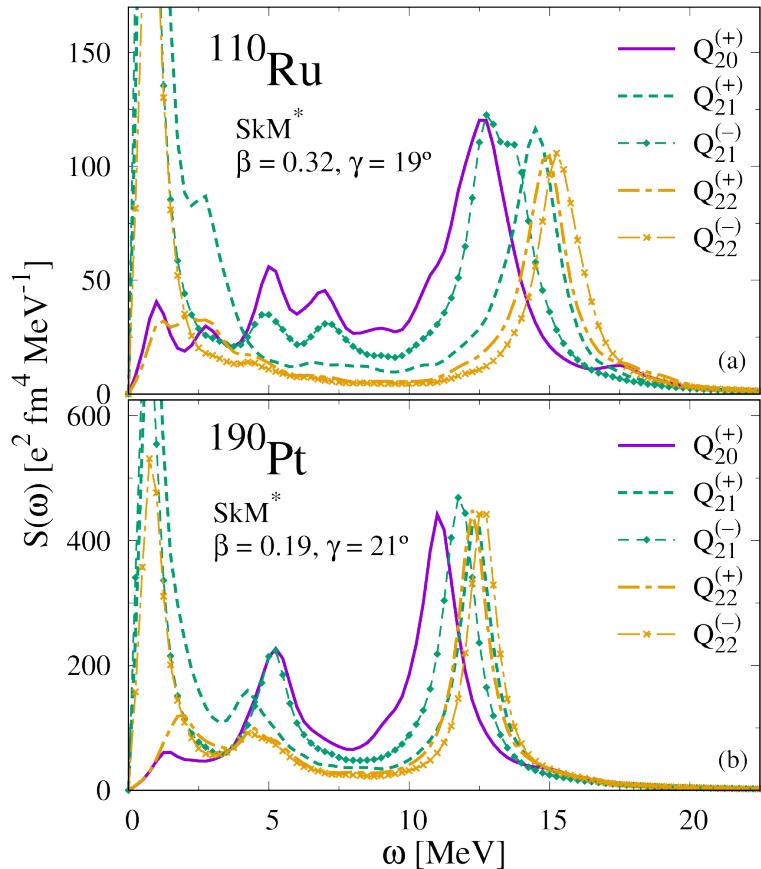


図 8：アイソスカラー型四重極(Q_{2K})外場に対する各 K 量子数に対する強度関数。

【 11 】FAM-QRPA による回転の慣性モーメントの評価（鷺山、中務）

上述した FAM-QRPA 法を用いて集団ハミルトニアンの集団質量の評価を行なった。その際、角運動量演算子を外場とした FAM-QRPA のゼロエネルギーでの強度関数が回転に対する慣性モーメントに対応することを用いた。変形核の慣性モーメントを異なる二つの手法、FAM-QRPA 法と cranking HFB 法、で同一の慣性モーメントが得られたこと、先行研究の軸対称変形核 FAM-QRPA 計算との比較、により我々の計算の妥当性を確認した。次に、 $^{106, 108}\text{Pd}$, ^{80}Se 等に対して各四重極変形度で拘束条件付の FAM-QRPA 計算を実行し、各変形度での慣性モーメントの評価を行なった。従来の密度汎関数法による四重極集団模型で用いられたクランキング法による慣性モーメントに比べて有意な増加(10–30%)が得られた。また、慣性モーメントの値が対相関のパラメータに強く依存することが分かった。

【 12 】重イオン散乱の微視的光学ポテンシャルの評価（蓑茂（阪大）、鷺山、緒方（阪大））

核子当たり数十～数百 MeV の重イオン散乱では散乱系の光学ポテンシャルの評価が重要である。これまで巨視的な現象論的光学ポテンシャルが広く使われてきたが、近年は微視的畳み込み模型（微視的模型で計算した散乱核の密度を有効相互作用で畳み込み光学ポテ

ンシャルを構築する模型) が発展している。この模型は現象論的に決定するパラメータが無く、実験データが存在しない不安定核を用いた反応に適用できる。我々はそこで使われる近似(多重散乱理論での反対称化因子および局所化の手法)を再評価した。畳み込み模型には、原子核の密度として Skyrme 型密度汎関数法を用い、有効相互作用として Melbourne g 行列を用いた。微視的模型における上記近似の妥当性を広い質量領域の核子-原子核散乱で調べた結果、核子当たり 25MeV 以上のエネルギー領域で良い近似であることを確認した。

この手法を基に、核図表の全領域の原子核に対して核子-原子核、原子核-原子核散乱の微視的光学ポテンシャル及び弹性散乱断面積を構築して、大阪大学核物理研究センターサーバー上で公開している。そこでは、入射核と標的核、入射エネルギーを指定すると微視的光学ポテンシャルと弹性散乱断面積や反応断面積が計算できる。現在、この操作をインタラクティブに行なえるウェブサイトを構築中である。

【 13 】Gogny 力に基づいた IBM ハミルトニアンによる核構造計算 (野村、Rodriguez-Guzman (クウェート大) 、Robledo (マドリード自治大))

核子多体系の微視的理論である密度汎関数理論 DFT に基づいた相互作用するボソン模型 IBM の枠組みにおいて、原子核の集団励起を記述する研究を行った。特に、Gogny 型密度汎関数を用いた DFT 平均場計算から IBM ハミルトニアンを導き、不安定核ビームを用いた実験研究において重要な、中性子過剰 Ge, Se, Kr 同位体の分光学的性質を記述した(図 9)。核子数の変化に伴う原子核形状と励起状態の遷移、いわゆる量子相転移と、異なる変形状態の共存(変形共存)状態を系統的に調べ、それらを特徴付ける励起状態エネルギー や電磁遷移などの物理量を計算した。理論的予言も行い、将来の不安定核実験のための重要な指針となりうる。

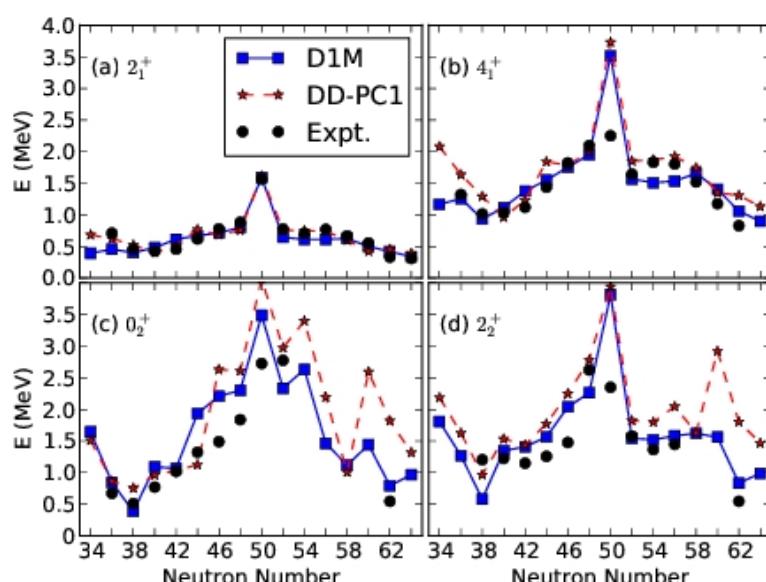


図 9：偶偶核 Kr 同位体の励起スペクトル。

【 14 】偶奇核の分光学的性質に関する研究（野村、Vretenar（ザグレブ大）、Niksic（ザグレブ大）、Rodriguez-Guzman（クウェート大）、Robledo（マドリード自治大））

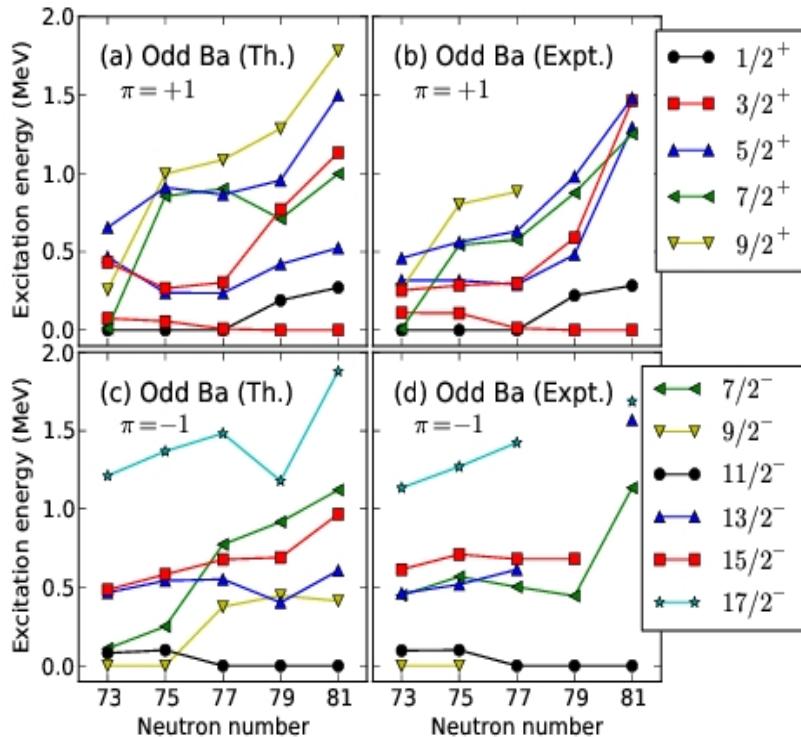


図 10：偶奇核 Ba 同位体の励起スペクトル。

上記の方法を偶奇核に拡張する研究にも取り組んだ。具体的には、偶偶核をコアとしてそれに単一核子の自由度を加え、両者の間の相互作用を DFT 計算に基づいて決定する。今年度は、Ba, Xe などの、偶偶核コアが非軸対称変形した奇核の分光学的性質、特に量子相転移の秩序変数と考えられるいくつかの物理量の計算、および八重極変形の自由度を含んだ場合（中性子過剰 Ba 同位体）の分光学的計算に取り組んだ（図 10）。偶奇核構造の理解はベータ崩壊などの基本的な崩壊過程の記述にも不可欠である。近年、これらの分光学的性質に関する多くの実験データが生み出されている一方、それらの微視的かつ系統的な記述は、特に中重核領域では理論的に非常に困難である。本研究で開発した手法は、中重領域の偶奇核構造への有力なアプローチの一つといえる。

【 15 】相互作用するボソン模型におけるニュートリノレス二重ベータ崩壊と中性子陽子対（Van Isacker（GANIL）、Engel（ノースカロライナ大）、野村）

対相關基底を用いた殻模型空間からアイソスピン自由度を取り入れた相互作用するボソン模型空間への写像によって、pf 殻領域の原子核のボソンハミルトニアンと 2 重ベータ崩壊演算子を構築し、同崩壊過程の核行列要素を計算する研究を行った。特に、ボソン模

型におけるアイソスカラー中性子陽子対の重要性を調べた。エネルギー準位の記述において中性子陽子対の効果は小さい一方、二重ベータ崩壊の行列要素の計算においては、（殻模型とコンシスティントな結果を与えるという意味で）重要な役割を持つことが分かった（図 1 1）。

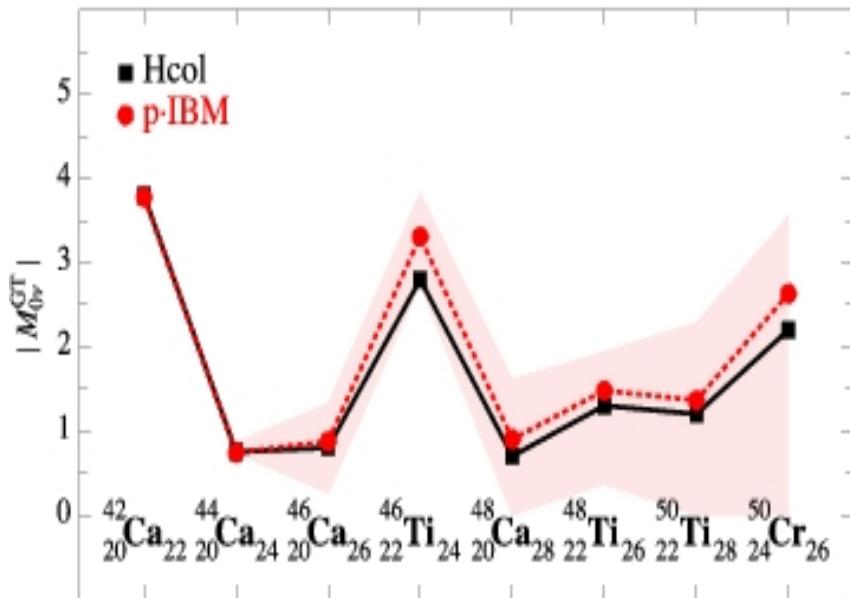


図 1 1：殻模型計算 (Hcol) とアイソスカラー中性子陽子対を含んだ IBM 計算 (p-IBM) によるニュートリノレス二重ベータ崩壊のガモフ テラー遷移行列要素。影の部分は理論的不定性を示す。

【 16 】Pair transfer study (Scamps and Hashimoto)

A beyond mean-field technique has been developed to obtain the one- and two-neutron transfer probabilities in reactions between superfluid nuclei. This method includes the complicated calculation of overlaps between different HFB states after the evolution. This calculation improves the comprehension of the nuclear Josephson effect in realistic calculations and the mechanism of pair transfer(図 1 2). This method has been tested in the reactions $^{20}\text{O}+^{20}\text{O}$ and $^{20}\text{O}+^{14}\text{O}$.

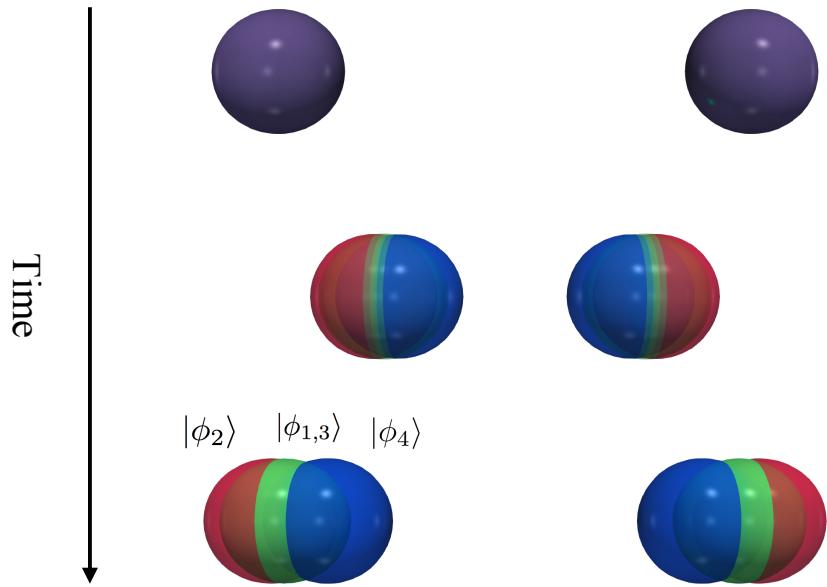


図 1 2 : Transfer reaction $^{20}\text{O}+^{20}\text{O}$, at energy below the Coulomb barrier. We can see a splitting of the trajectory due to the different initial relative gauge angle.

【 17 】 Empirical evidence of the effect of the superfluidity on fusion reaction (Scamps)

In a previous study, we showed that in the reaction between superfluid nuclei the fusion barrier depends on the relative gauge angle. In that study, I investigated the proof of this effect by making a systematic analysis of the fusion barrier on 115 reactions. A new method has been developed to determine the width of the fusion barrier (図 1 3). The dependence of the width of the fusion barrier with respect to the superfluidity of the initial fragments show that the superfluidity enhance the fluctuations of the fusion barrier. That result is coherent with the effect that have been found with the TDHFB theory.

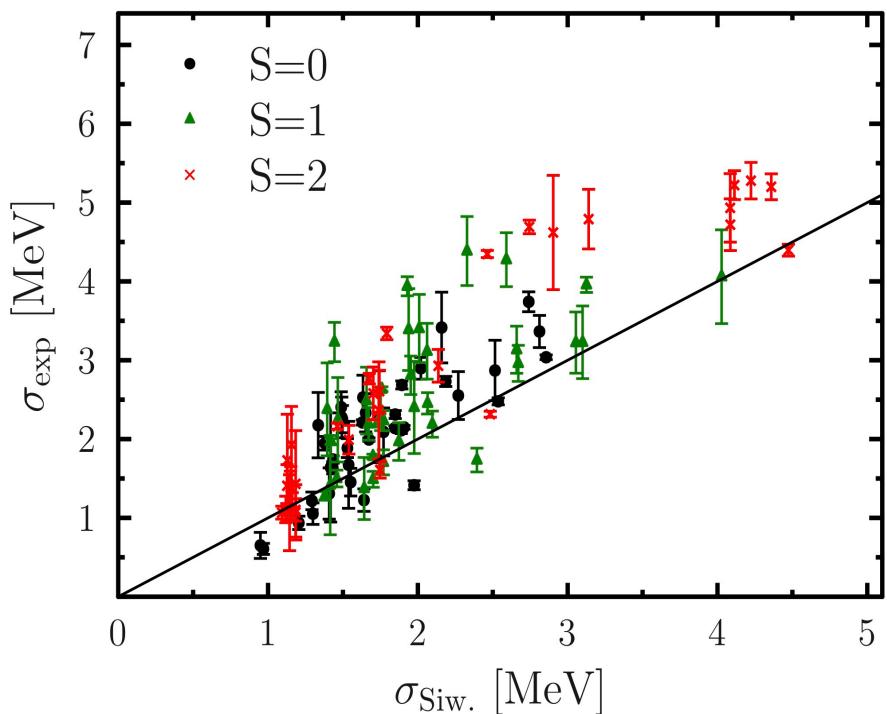
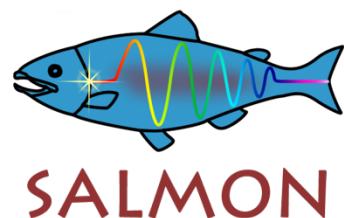


図 1 3： Comparison between the experimental width of the fusion barrier, with the result of the Siwek-Wilczynska model. The enhancement between the experimental value compared to the result of the model is expected to be due to the effect of the superfluidity for system with superfluidity ($S = 1$ and 2).

【 18 】第一原理光科学ソフトウェア SALMON の開発（矢花、[植本、山田（篤）、山田（俊）、朴=計算科学研究センター]、廣川=システム情報工学研究科、[信定、野田、竹内=分子科学研究所]）

我々のグループで独自に開発してきた、時間依存密度汎関数理論に基づく固体中の電子ダイナミクス計算を対象とする第一原理計算コード ARTED と、分子科学研究所に於いて開発してきた、ナノ物質や分子中の電子ダイナミクス計算を対象とする時間依存密度汎関数理論に基づく第一原理計算コード GCEED を統合し、SALMON (Scalable Ab-initio Light-Matter simulator for Optics and Nanoscience) と命名した。統合に際し、一般のユーザを含めたコード利用を容易とするため、Fortran の namelist 機能を用いた入力仕様とし、実行ファイルの生成では CMake を用いたコンパイルを行うなどの作業を行なった。SALMON のウェブサイト <http://salmon-tddft.jp> を開設し、コードのダウンロード、インストール及び実行方法の説明、計算例の紹介などを整備した。また、スペコンを用いたハンズオンを含む SALMON のチュートリアルを行い、コードの利用者を拡大する取り組みを行った。コード論文を執筆し、投稿した。



SALMON の開発においては、計算科学研究センターの朴グループと密接に協力し、主として大学院生の廣川氏の貢献により KNL プロセッサや GPU においても効率的に計算が可能となるようチューニングを行なった。

【 19 】マクスウェル方程式と時間依存密度汎関数を統合したシミュレーション法の拡張（矢花、[植本、山田（篤）、山田（俊）]）

SALMONにおいて、光伝搬を記述するマクスウェル方程式・時間依存密度汎関数に基づき電子ダイナミクスを記述する時間依存コーン・シャム方程式・原子核の運動を記述するエーレンフェスト流のニュートン運動方程式を組み合わせ、光電磁場・電子・原子核のダイナミクスを同時に記述する機能の多様な実装を進めた。

3次元マクスウェル方程式と電子ダイナミクス計算をマルチスケール結合することにより、超高速ナノオプティクスを記述できるようコードの拡張を行い、Oakforest-PACS の全ノード計算など、大規模計算を進めた。また、薄膜にパルス光が斜方入射する場合の理論及び計算法について、検討を進めている。

金属などの吸収の強い物質や、極めて薄い薄膜、2次元物質などでは、これまで開発を進めてきた光電磁場と電子のダイナミクスで異なる空間スケールの格子を用意するマルチスケール結合による記述は不十分であり、単一の空間スケールを用いた記述が適切となる。このような場合の計算コードの実装を進め、現在シリコン薄膜を対象としてテスト計算を進めている。

電子ダイナミクスとともに原子核のダイナミクスに対して、エーレンフェスト力を用いて記述する実装も進め、コヒーレントフォノンや誘導ラマン効果の記述を試みるとともに、光構造相転移の記述を目指している。

【 20 】固体高次高調波発生における光伝搬効果（I. Floss（ウィーン工科大）、矢花、他）

固体における高次高調波発生は、高強度パルス光を用いた新奇な光デバイス原理や、新たなX線パルス線源を与えるものとして高い興味が持たれており、その発生メカニズムに関して活発な議論がなされている。固体中の高次高調波発生はバンド計算を取り入れた多様な電子ダイナミクス計算手法により記述が可能であるが、単純に計算すると原子の場合と異なり励起電子の波束が拡散しないために、実験で見られるようなクリアな高調波が得られないことが知られている。このため、非常に短い緩和時間を仮定した計算などが行われていた。本研究は、ウィーン工科大の大学院生である I. Floss 氏を中心になされ、固体中に発生した高次高調波が伝搬する効果を取り入れると、非常に短い緩和時間を仮定することなく、クリアな高調波が得られることを示したものであり、高次高調波の発生メカニズムに関して重要な指摘を行なったものである。

【 21 】内殻電子ダイナミクスの記述に向けた試み（矢花）

現在活発に研究が進んであるアト秒科学では、アト秒パルス光により起こる内殻電子のダイナミクスを観測することで、サブフェムト秒の時間スケールで起こる物質中の電子ダイナミクスを調べている。これらの現象の解析では、アト秒パルス光により生じる内殻電

子のダイナミクスを直接記述することが求められるが、空間的・エネルギー的に価電子と大きくスケールが異なるため、容易ではない。

内殻電子のダイナミクスを記述する方法として、我々は2通りの手法の検討を行っている。一つは、実空間の格子間隔を小さくすることで、現在の計算コードの範囲で記述を試みるものである。これは、マックスプランク物質構造動力学研究所のC. M. Wang 氏が中心となり共同研究を進めている。もう一つは、より小さい空間スケールの現象に適した原子基底関数を用いた記述であり、こちらはSIESTA コードをベースとして、C. D. Pemmaraju 氏を中心に共同研究を進めている。

4. 教育

学位論文

1. 齋藤貴之、修士（理学）、
“拡張 Lagrange 未定乗数法をもちいた Hartree–Fock–Bogoliubov 法による原子核四重極・八重極変形の研究”
2. 八百板恭介、修士（理学）、
“5 次元四重極集団ハミルトニアンを用いた原子核低励起状態の解析”

集中講義

1. 矢花一浩、“超短パルス光と物質の相互作用を記述する第一原理計算—非熱レーザー加工のメカニズム解明に向けて”、光産業創生大学院大学特別講義 2017、光産業創生大学院大学、2017 年 6 月 14 日
2. 矢花一浩、“計算機シミュレーションの発展～先端分野のシミュレーション手法開発と異分野連携の実践～”、東京大学大学院工学系研究科先進原子力特別講義第三、2017 年 10 月 3 日
3. 矢花一浩、東京大学大学院理学研究科集中講義、物理化学特論 II、2017 年 12 月 7 日

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

受賞

筑波大学 BEST FACULTY MEMBER、矢花一浩、平成 30 年 2 月 19 日

外部資金

1. 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、2,300,000 円 (H29 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、H28-32年度、7,469,000円（H29年度直接経費）
3. 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、24,900,000円（H29年度直接経費）
4. 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（H29年度直接経費）
5. 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、7,106,000円（H29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」
6. 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、1,440,000円（H29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」
7. 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、2017年度直接経費700,000円、「中性子-陽子対関連・対凝縮の解明」
8. 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、2017年度直接経費1,000,000円、「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. I. Floss, C. Lemell, G. Wachter, V. Smejkal, S. A. Sato, X. M. Tong, K. Yabana, and J. Burgdörfer,
“Ab initio multiscale simulation of high-order harmonic generation in solids”, Phys. Rev. A **97**, 011401(R):1-5 (2018).
2. C.D. Pemmaraju, F.D. Vila, J.J. Kas, S.A. Sato, J.J. Rehr, K. Yabana, D. Prendergast,
“Velocity-gauge real-time TDDFT within a numerical atomic orbital basis set”, Comp. Phys. Comm. **226**, 30-38 (2018).
3. Y. Hirokawa, S. A. Sato, T. Boku, K. Yabana,
“Performance Evaluation of Large Scale Electron Dynamics Simulation under Many-core Cluster based on Knights Landing”, Proc. of the 1st International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region (HPCAsia2018), Tokyo, Jan. 2018.

4. 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, K. M. Lee, T. Boku, G. F. Bertsch, K. Nobusada, K. Yabana,
“SALMON: Scable Ab-intio Light-Matter simulator for Optics and Nanoscience”, arXiv:1804.01404.
5. S. Ebata, and T. Nakatsukasa
“Octupole deformation in the nuclear chart based on the 3D Skyrme Hartree-Fock plus BCS model”, Phys. Scr. **92**, 064005 (2017).
6. K. Wen and T. Nakatsukasa,
“Adiabatic self-consistent collective path in nuclear fusion reactions”, Phys. Rev. C **96**, 014610 (2017).
7. P. Baczyk, J. Dobaczewski, M. Konieczka, W. Satula, T. Nakatsukasa, and K. Sato,
“Isospin-symmetry breaking in masses of $N \approx Z$ nuclei”, Phys. Lett. B **778**, 178-183 (2018).
8. N. Hinohara,
“Extending pairing energy density functional using pairing rotational moments of inertia”, J. Phys. G: Nucl. Part. Phys. **45** (2018) 024004, Special Issue: emerging leaders [invited paper].
9. K. Washiyama, T. Nakatsukasa,
“Multipole modes of excitation in triaxially deformed superfluid nuclei”, Phys. Rev. C **96**, 041304(R) (2017).
10. K. Washiyama,
“Fusion hindrance in heavy systems with time-dependent Hartree-Fock”, Proceedings of International Conference on Heavy-ion Collisions at Near-Barrier Energies FUSION17; EPJ Web of Conferences **163**, 00064 (2017).
11. Y. Hirayama, M. Mukai, Y. X. Watanabe, M. Ahmed, S. C. Jeong, H. S. Jung, Y. Kakiguchi, S. Kanaya, S. Kimura, J. Y. Moon, T. Nakatsukasa, M. Oyaizu, J. H. Park, P. Schury, A. Taniguchi, M. Wada, K. Washiyama, H. Watanabe, and H. Miyatake,
“In-gas-cell laser spectroscopy of the magnetic dipole moment of the $N \sim 126$ isotope ^{199}Pt ”, Phys. Rev. C **96**, 014307 (2017).
12. K. Nomura, T. Niksic, and D. Vretenar,
“Signature of octupole correlations in neutron-rich odd-mass barium isotopes”, Phys. Rev. C **97**, 024317 (2018).
13. K. Nomura, R. Rodriguez-Guzman, and L. M. Robledo,
“Shape transitions in odd-mass γ -soft nuclei within the interacting boson-fermion model based on the Gogny energy density functional”, Phys. Rev. C **96**, 064316 (2017).

14. P. Van Isacker, J. Engel, and K. Nomura,
“Neutron-proton pairing and double-beta decay in the interacting boson model”, Phys. Rev. C **96**, 064305 (2017).
15. K. Nomura, R. Rodriguez-Guzman, Y. M. Humadi, L. M. Robledo, and H. Abusara,
“Structure of krypton isotopes within the interacting boson model derived from the Gogny energy density functional”, Phys. Rev. C **96**, 034310 (2017).
16. K. Nomura, R. Rodriguez-Guzman, and L. M. Robledo,
“Description of odd-mass nuclei within the interacting boson-fermion model based on the Gogny energy density functional”, Phys. Rev. C **96**, 014314 (2017).
17. K. Nomura, T. Niksic, and D. Vretenar,
“Shape-phase transitions in odd-mass γ -soft nuclei with mass A~130”, Phys. Rev. C **96**, 014304 (2017).
18. K. Nomura, R. Rodriguez-Guzman, and L. M. Robledo,
“Structural evolution in germanium and selenium nuclei within the mapped interacting boson model based on the Gogny energy density functional”, Phys. Rev. C **95**, 064310 (2017).
19. G. Scamps, Y. Hashimoto,
“Superfluid effects in collision between systems with small particle number”, Proceeding Fusion 17, EPJ Web Conf. **163**, 00049 (2017).
20. G. Scamps, Y. Hashimoto,
“Transfer probabilities for the reactions $^{14,20}\text{O}+^{20}\text{O}$ in terms of multiple time-dependent Hartree-Fock-Bogoliubov trajectories”, Phys. Rev. C **96**, 031602(R) (2017).
21. D. Regnier, D. Lacroix, G. Scamps, Y. Hashimoto,
“Microscopic description of pair transfer between two superfluid Fermi systems: combining phase-space averaging and combinatorial techniques”, Phys. Rev. C **97**, 034627 (2018).
22. G. Scamps,
“Empirical evidence of the effect of superfluidity on the fusion barrier”, Phys. Rev. C **97**, 044611 (2018).
23. K. Washiyama, T. Nakatsukasa,
“Multipole Modes for Triaxially Deformed Superfluid Nuclei”, JPS Conf. Proc., in press, arXiv:1803.06828.
24. K. Wen and T. Nakatsukasa,
“Nuclear reaction path and requantization of TDDFT”, JPS Conf. Proc. in press, arXiv:1802.03124.
25. F. Ni, T. Nakatsukasa,

- “Comparative study of the requantization of the time-dependent mean field for the dynamics of nuclear pairing”, Accepted for Physical Review C, arXiv:1712.02954.
26. Y. Hirokawa, T. Boku, M. Uemoto, S. A. Sato, and K. Yabana,
“Performance Optimization and Evaluation of Scalable Optoelectronics Application on Large Scale KNL Cluster”, in press.
 27. K. Nomura, R. Rodriguez-Guzman, and L. M. Robledo,
“Prolate-to-oblate shape phase transitions in neutron-rich odd-mass nuclei”, Submitted to Phys. Rev. C, arXiv:1803.07802.
 28. K. Nomura, and J. Jolie,
“Structure of even-even Cadmium isotopes from the beyond-mean-field interacting boson model”, Submitted to Phys. Rev. C, arXiv:1802.02348.

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

1. K. Yabana,
“Ab-initio calculations for energy transfer from ultrafast laser pulse to dielectrics”, Ultrafast Bandgap Photonics II, SPIE Defense + Commercial Sensing, Anaheim, USA, Apr. 21, 2017.
2. K. Yabana,
“First-principles description for initial stage of femtosecond laser processing”, CLEO2017, San Jose, USA, May. 14, 2017.
3. K. Yabana,
“Maxwell + TDDFT multiscale simulation for strong pulsed-light propagation in dielectrics”, CECAM workshop on Bridging the Worlds of Electromagnetic and Quantum simulations, Tel Aviv, Israel, Jun. 19, 2017.
4. K. Yabana,
“Ab-initio simulation for dynamics of electrons and light electromagnetic fields in dielectrics”, NANO KOREA 2017 , Ilsan, Korea , Jul. 12, 2017.
5. K. Yabana,
“Real-time TDDFT simulation for interactions of ultrashort laser pulses with solids, coupling to Maxwell’s equations”, Telluride Science Research Center Workshop Excited States: Electronic structure and dynamics, Telluride, USA, Jul. 17, 2017.
6. K. Yabana,
“First-principles calculations for ultrafast energy transfer from laser to solids”, SPIE Laser Damage, Boulder, USA, Sep. 24, 2017.
7. K. Yabana,
“First-principles simulation for ultrafast optical dynamics in dielectrics”,

ITCPS2017: Inter-Institutional Meeting in Interdisciplinary Theoretical and Computational Physical Sciences, Tokyo, Japan, Oct. 24, 2017.

8. K. Yabana,
“Ab-initio simulations for ultrafast electron dynamics in solids”, Ultrafast dynamics and metastability, Washington DC, USA, Nov.13, 2017.
9. T. Nakatsukasa,
“Nuclear structure physics and time-dependent approaches”, Lecture in School cum collaboration meeting on nuclear structure and reaction, Kolkata, India, Jan. 1-22, 2018.
10. T. Nakatsukasa,
“Nuclear structure physics in RIBF”, International symposium on RI beam physics in the 21st century: 10th anniversary of RIBF, Wako, Japan, Dec. 4-5, 2017.
11. T. Nakatsukasa,
“Isospin symmetry breaking effect on nuclear mass”, KLFTP/CAS-BLTP/JINR Joint Workshop on Physics of Strong Interaction, Shenzhen, China, Nov. 26 - Dec. 1, 2017.
12. T. Nakatsukasa,
“Nuclear reaction path and requantization of TDDFT”, Ito international research center symposium “Perspectives of the physics of nuclear structure”, Tokyo, Japan, Nov. 1 - 4, 2017.
13. T. Nakatsukasa,
“Quantization of mean-field dynamics”, Huzhou-CUSTIPEN workshop on Spectroscopy and reactions of exotic nuclei, Huzhou, China, Jul. 3 - 9, 2017.
14. T. Nakatsukasa,
“Quantized TDDFT dynamics”, Interdisciplinary symposium on modern density functional theory, Wako, Japan, Jun. 19 - 23, 2017.
15. T. Nakatsukasa,
“Collective coordinate, reaction path, and inertial mass in large-amplitude nuclear collective motion”, Probing fundamental interactions by low energy excitations - Advances in theoretical nuclear physics, Stockholm, Sweden, Jun. 5 - 9, 2017.
16. N. Hinohara,
“Pairing Nambu-Goldstone modes in nuclei”, XXIV Nuclear Physics Workshop, Kazimierz Dolny, Poland, Sep. 20-24, 2017.
17. N. Hinohara,
“Application of generator coordinate method with neutron-proton pairing amplitudes to nuclear matrix elements”, MEDEX'17 (Matrix Elements for the Double beta decay EXperiments) meeting, National Technical Library, Prague, Czech Republic, May 29 - Jun. 2, 2017.
18. K. Washiyama, T. Nakatsukasa,

“Excitation modes in triaxial superfluid nuclei with finite amplitude method QRPA”,
2017 KLFTP/CAS-BLTP/JINR Joint Workshop on Physics of Strong Interaction,
Shenzhen, China, Nov. 27-30, 2017.

19. K. Nomura,
“Beyond-mean-field boson-fermion model for odd nuclei”, IVth Topical Workshop on
Modern Aspects in Nuclear Structure - The Many Facets of Nuclear Structure, Bormio,
Italy, Feb. 19-25, 2018.
20. K. Nomura,
“Beyond-mean-field boson-fermion model for odd nuclei”, Prospects on the microscopic
description of odd mass nuclei and other multi-quasiparticle excitations with beyond-
mean-field and related methods, ECT*, Trento, Italy, Sep. 25-29, 2017.
21. K. Nomura,
“Evolution of nuclear shapes in the microscopically-guided algebraic theory”, Probing
fundamental interactions by low energy excitations - Advances in theoretical physics,
Stockholm, Sweden, Jun. 5-9, 2017.
22. G. Scamps,
“Restoration of symmetry in time-dependent calculations. Josephson effect study with the
Gogny TDHFB calculation”, GANIL, Caen, Nov. 3, 2017.
23. G. Scamps,
“How to interpret the effects of the gauge angle in nuclear reactions?”, Warsaw
University of Technology, Warsaw, Poland, Nov. 15, 2017.
24. G. Scamps,
“Study of the effect of the superfluidity on the fusion barrier”, 2017 KLFTP-BLTP
workshop, Shenzhen China, Nov. 27-30, 2017.
25. G. Scamps,
“Superfluidity in fusion reactions, from TDHFB calculation to experimental evidence”,
Australian National University, Canberra Australia, Mar. 15, 2018.

B) 一般講演

1. T. Nakatsukasa,
“Isospin symmetry preserving energy density functional and its breaking effect on nuclear
mass”, China-Japan collaboration workshop on “Nuclear mass and life for unravelling
mysteries of r-process”, Tsukuba, Japan, Jun. 26-28, 2017.
2. N. Hinohara,
“Pairing rotational modes and binding-energy differences of even-even nuclei”, IIRC
symposium “Perspectives of the physics of nuclear structure”, Tokyo, Japan, Nov. 1-4,
2017.

3. N. Hinohara,
“Pair condensation and Nambu-Goldstone modes in nuclei”, Workshop on Nuclear Cluster Physics 2017 (WNCP2017), Sapporo, Japan, Oct. 25-27, 2017.
4. N. Hinohara,
“Neutron-proton pairing and double-beta decay nuclear matrix element”, Conference on Neutrino and Nuclear Physics (CNNP2017), Catania, Italy, Oct. 15-21, 2017.
5. N. Hinohara,
“Extending pairing energy density functional using pairing rotational moments of inertia”, The International Symposium on Physics of Unstable Nuclei 2017 (ISPUN17), Halong City, Vietnam, Sep. 25-30, 2017.
6. N. Hinohara,
“Generator coordinate method with neutron-proton pairing amplitudes for double-beta decay nuclear matrix elements”, XXXV Mazurian Lakes Conference on Physics, Piaski, Poland, Sep. 3-9, 2017.
7. N. Hinohara,
“Binding energy differences of even-even nuclei as pairing indicators”, China-Japan collaboration workshop on “Nuclear mass and life for unravelling mysteries of r-process”, Tsukuba, Japan, Jun. 26-29, 2017.
8. N. Hinohara,
“Nuclear matrix elements from generator coordinate method”, INT Program INT-17-2a Neutrinoless Double-beta Decay, Seattle, WA, USA, Jun. 13-Jul. 14, 2017.
9. N. Hinohara,
“Pairing energy density functional constrained using pairing rotational moments of inertia”, Probing fundamental interactions by low energy excitations -- Advances in theoretical nuclear physics, Stockholm, Sweden, Jun. 5-9, 2017.
10. K. Washiyama, T. Nakatsukasa,
“Finite amplitude method for triaxially deformed superfluid nuclei”, Interdisciplinary symposium on modern density functional theory, Wako, Japan, Jun. 19-23, 2017.
11. K. Washiyama,
“Quadrupole modes of excitation and moment of inertia in triaxially deformed superfluid nuclei”, 3rd workshop on many-body correlations in microscopic nuclear model, Sado, Japan, Sep. 4-5, 2017.
12. K. Washiyama, T. Nakatsukasa,
“Excitation modes of triaxial nuclei with finite amplitude method for QRPA”, ISPUN17, Halong, Vietnam, Sep. 25-30, 2017.

13. K. Washiyama, T. Nakatsukasa,
“Multipole modes for triaxially deformed superfluid nuclei” (poster presentation), IIRC Symposium “Perspectives of the physics of nuclear structure”, Tokyo, Japan, Nov. 1-4, 2017.
14. G. Scamps,
“Transfer probabilities for the reactions $^{14,20}\text{O}+^{20}\text{O}$ in terms of multiple Time-Dependent Hartree-Fock-Bogoliubov trajectories”, 3rd workshop on many-body correlations in microscopic nuclear model, Sado, Japan, Sep. 4-5, 2017.
15. G. Scamps,
“Restoration of symmetry in time-dependent calculations. Josephson effect study with the Gogny TDHFB calculation”, SSNET conference, Gif-sur-Yvette, France, Nov. 6-10, 2017.
16. F. Ni, T. Nakatsukasa,
“Theoretical approach for large amplitude pairing dynamics”, The 16th CNS International Summer School, Saitama, Japan, Aug. 23-29, 2017.
17. F. Ni, T. Nakatsukasa,
“Dynamics of nuclear pairing model”, Nuclear mass and life for unravelling mysteries of r-process, Tsukuba, Japan, Jun. 26-28, 2017.
18. F. Ni,
“Theoretical approach for pairing large amplitude motion”, 3rd workshop on many-body correlations in microscopic nuclear model, Sado, Japan, Sep. 4-5, 2017.
19. Y. Kashiwaba, T. Nakatsukasa,
“Self-consistent band calculation of inner crust of neutron star”, China-Japan collaboration workshop on “Nuclear mass and life for unravelling mysteries of r-process”, Tsukuba, Japan, Jun. 26-28, 2017.

(3) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

1. 矢花一浩、
“フェルミ多粒子系ダイナミクスのシミュレーション”、「物質階層原理」第一回春合宿、御殿場高原ホテル、2017年5月12日。
2. 矢花一浩、
“量子（波動）ダイナミクスの第一原理計算と光科学フロンティアへの展開”、サイエンティフィック・システム研究会 HPC フォーラム 2017 「計算科学の新たな可能性」、日本、2017年8月30日。
3. 矢花一浩、

- “電子ダイナミクス第一原理計算と光科学への応用”、第31回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、大阪大学、2017年9月15日。
4. 矢花一浩、
“高強度パルス光と物質の相互作用—第一原理計算からのアプローチ”、「光操作の最前線」量子エレクトロニクス研究会、上智大学軽井沢セミナーハウス、2017年12月14日。
 5. 中務 孝、
“時間依存平均場再量子化と核子集団ダイナミクス”、理研シンポジウム「非平衡物理の最前線」、理化学研究所、和光、2017年12月6–8日。
 6. 日野原伸生、
“原子核密度汎関数理論による原子核構造とダイナミクス”，市大ワークショップ「原子核のダイナミクスの現状と展望」～Highlights and Outlooks on Dynamics of Atomic Nuclei～、大阪市立大学、2018年2月19–20日。
 7. 日野原伸生、
“不安定核での変形、対相関による大振幅集団運動”、RIBF理論若手放談会：エキゾチック核物理の広がり、理研神戸、2017年7月31日–8月2日。
 8. 日野原伸生、
“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”、新学術領域「宇宙の歴史をひもとく地下素粒子原子核研究」2017年領域研究会、岡山大学、2017年5月21–23日。
 9. 鶴山広平、
“原子核の形の揺らぎと大振幅集団運動”、つばめラウンジセミナー、東京工業大学、2018年1月22日。
 10. 鶴山広平、
“低励起状態における原子核形状の揺らぎと大振幅集団運動”、市大ワークショップ「原子核のダイナミクスの現状と展望」、大阪市立大学、2018年2月19–20日。

B) その他の発表

1. K. Yabana,
“Real-time time-dependent density functional theory: Basics and applications”, Surface Science Colloquium, Institute of Physics, Chinese Academy of Science, Beijing, China, Sep. 11, 2017.
2. K. Yabana,
“Ab-initio simulation for attosecond spectroscopy in solids”, CSRC seminar, Beijing, China, Sep. 12, 2017.
3. K. Yabana,

- “Ab-initio density functional simulation for nano-optics”, CCS-EPCC Workshop, 筑波大学, Dec. 7, 2017.
4. 矢花一浩、
“高強度パルス光とナノ物質との相互作用の大規模シミュレーション”、第3回 CDMSI ポスト「京」重点課題（7）シンポジウム、東京大学伊藤謝恩ホール、2017年12月5日。
 5. 矢花一浩、
“Ab-initio Density Functional Simulation for Nano-optics”, CCS-LBNL Collaborative Workshop, 筑波大学, Mar. 5, 2018.
 6. 中務 孝、
“中性子星クラストに対する自己無撞着バンド計算”、第6回「中性子星の核物質」研究会、理化学研究所、和光、2017年12月1-3日。
 7. 中務 孝、
“微視的理論を用いた断面積計算”、日本原子力学会2017秋の大会、北海道大学、札幌、2017年9月13-15日。
 8. 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10月4-5日。
 9. 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、2018年3月23-24日。
 10. 日野原伸生、
“有限原子核基底状態でのゲージ対称性の破れ”、KEK理論センター研究会『ハドロン・原子核物理の理論研究最前線2017』、高エネルギー加速器研究機構素粒子原子核研究所 KEK 理論センター、2017年11月20-22日。
 11. 日野原伸生、
“対回転の慣性モーメントを用いた対密度汎関数の精密化”、日本物理学会2017年秋季大会、宇都宮大学峰キャンパス、2017年9月12-15日。
 12. 日野原伸生、
“対相互作用の運動量依存項と関連する対相關観測量”、RCNP研究会「核子・ストレンジネス多体系におけるクラスター現象」、大阪大学核物理研究センター、2017年8月3-5日。
 13. 橋本幸男、関沢一之、矢花一浩、
“時間依存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）、第4回報告会（HPCI）、コクヨホール、2017年11月2日。
 14. 橋本幸男、
“Gogny-TDHF法による²⁰O、³⁴Mg + ²⁰Oの計算における対相關の効果”、日本物理学会第73回年次大会、東京理科大学野田キャンパス、2018年3月22-25日。
 15. 鷲山広平、

“核構造模型の高精度化と核反応との橋渡し”、ImPACT-OEDO workshop2017、理研、2017年7月13–14日.

16. 鶴山広平、
“原子核の形の揺らぎと大振幅集団運動”、RIBF理論若手放談会：エキゾチック核物理の広がり、理研神戸、2017年7月31日–8月2日.
17. 鶴山広平、中務 孝、
“有限振幅法による3次元QRPAと集団質量の計算に向けて”、日本物理学会秋季大会、宇都宮大学、2017年9月12–15日.
18. 鶴山広平、
“密度汎関数法による原子核大振幅集団運動の記述に向けて”、KEK理論センター研究会『ハドロン・原子核物理の理論研究最前線2017』、KEK、2017年11月20–22日.
19. 鶴山広平、中務 孝、
“3次元Skyrme-QRPAを用いた四重極集団ハミルトニアン慣性質量”、日本物理学会第73回年次大会、東京理科大学野田キャンパス、2018年3月22–25日.
20. 倪 放、中務 孝、
“自己無撞着な集団座標を用いた対振動状態の記述”、日本物理学会2017年秋季大会、宇都宮大学、2017年9月12–15日.
21. 倪 放、中務 孝、
“対相関による大振幅集団運動への理論的アプローチ”、RIBF理論若手放談会：エキゾチック核物理の広がり、理研神戸、2017年7月31日–8月2日.
22. 柏葉 優、中務 孝、
“3次元実空間基底を用いたパスタ原子核のHFB状態の計算手法”、新学術領域「中性子星核物質」理論班主催研究会2018、熱海ニューフジヤホテル、2018年2月20–22日.
23. 柏葉 優、中務 孝、
“3次元実空間基底におけるHFB方程式の解法”、日本物理学会第73回年次大会、東京理科大学野田キャンパス、2018年3月22–25日.

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. 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）
3. ドイツ・マックスプランク物質構造動力学研究所の理論グループと、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. フランス・IN2P3 の原子核物理グループと共同で、Nd 核の低励起スペクトルの研究（中務）
6. 日本 JSPS-中国 NSFC 二国間協力事業「R プロセスの謎解明に向けた核質量と寿命の研究」（日本側代表：中務）
7. 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）。
8. 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）
9. 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）
10. クロアチア・ザグレブ大学の Vretenar 教授と Niksic 教授との偶奇核の構造に関する共同研究（野村）
11. スペイン・マドリード自治大学 Robledo 教授およびクウェート・クウェート大学 Rodriguez-Guzman 教授との、形状相転移と変形共存、および偶奇核に関する共同研究（野村）
12. ドイツ・ケルン大学の Jolie 教授とのカドミウム同位体構造に関する共同研究（野村）
13. フランス・GANIL の Van Isacker 博士と米国・ノースカロライナ大学 Engel 教授との二重ベータ崩壊に関する共同研究（野村）

8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

1. 第一回 SALMON チュートリアルの実施、2017 年 11 月 24 日筑波大学計算科学研究中心（矢花）
2. 国際会議 Recent Progress in Many-Body Theories (RPMBT-19) (Pohang, Korea, June 25–30, 2017) のプログラム委員を務めた（中務）。
3. 国際ワークショップ China-Japan collaboration workshop on nuclear mass and life for unravelling mysteries of r-process (Tsukuba, June 26–28, 2017) の組織委員長（中務）、および組織委員（日野原）を務めた。
4. 国際会議 The 16th International Symposium on Capture Gamma-Ray Spectroscopy and Related Topics (CGS16) (Shanghai, China, September 18–22, 2017) のプログラム委員を務めた（中務）。

5. 筑波大学計算科学研究センター25周年記念シンポジウム「計算科学の発展と将来」（つくば国際会議場、2017年10月10-11日）の組織委員長を務めた（中務）。

9. 管理・運営

矢花一浩

計算科学研究センター 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 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
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
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 理論グループ副議長

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

10. 社会貢献・国際貢献

矢花一浩

平成 29 年度テニュアトラック普及・定着事業委員会委員
西宮湯川記念賞選考委員会委員長

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
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

中務 孝、橋本幸男、日野原伸生

筑波大学エクステンションプログラム FORTRAN 初級講座でミクロ世界の物理学を学ぼう、2017 年 10 月 14—15 日

11. その他

海外長期滞在

1. 野村昂亮

Faculty of Science, University of Zagreb, Croatia,
2017 年 4 月 15 日—2017 年 10 月 31 日