

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、佐藤駿丞 (国際テニュアトラック、2019.5 着任)
研究員	温凱、Bharat Kumar (2019.6 着任)
学生	大学院生 3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、本グループも理論計算核データの構築とその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に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】 座標空間時間依存密度汎関数法の計算コード開発とアイソベクトル電気双極子共鳴への応用 (Shi (ハルビン工業大学) 、日野原、Schuetrumpf (GSI))

ハルビン工業大学で開発された3次元座標基底の原子核密度汎関数法計算コードを拡張し、時間依存密度汎関数法(TDDFT)計算ができるようにした。基底状態での対相関はBCS近似によって導入し、軌道波動関数の時間依存性を考慮することによって時間依存ダイナミクスへの寄与を部分的に取り込めるように実装した。新しく作られた3次元座標基底のTDDFT計算コードは同じ3次元座標空間基底のSky3DによるTDDFT計算と、軸対称を仮定した調和振動子基底原子核DFTコードHFBTHOの有限振幅法による準粒子乱雑位相近似計算とベンチマークを行った。Sky3Dとの比較ではほぼ同一の結果を得ることができた。一方でHFBTHOによる有限振幅法の計算結果との比較では、巨大共鳴のメインピークのエネルギーについては一致を得たが、調和振動子基底では連続状態を正しく表現できないことから高エネルギー側では強度関数に違いが見られた。Zr, Mo, Ru原子核のアイソベクトル型双極子巨大共鳴の系統的計算を安定核から中性子過剰核領域まで行い、基底状態変形と巨大共鳴の強度関数分布の関連を分析した。

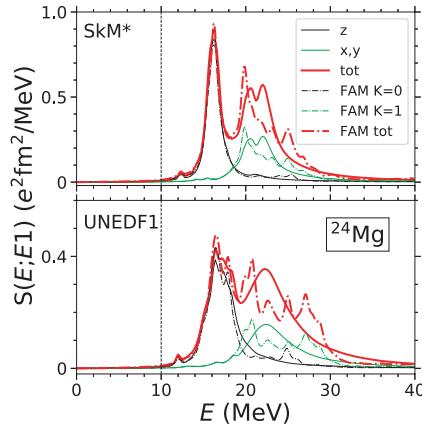


Fig. 1: TDDFT と有限振幅法による ^{24}Mg の電気双極子強度関数の計算値の比較。

[2] 陽子過剰不安定核の基底状態でのアイソベクトル型中性子-陽子対凝縮（日野原、Sheikh（カシミア大）、Dobaczewski（ヨーク大）、Nazarewicz（ミシガン州立大））

調和振動子基底の原子核 DFT 計算コード HFBTHO にアイソベクトル型中性子-陽子対相関を導入し、陽子過剰不安定核の基底状態の計算を行った。縮退がある場合も安定して解が求められるように対振幅に対して拘束条件をかけ、アイソベクトル型中性子-陽子対振幅の関数としてエネルギー等の分析を行った。アイソスピン対称な原子核密度汎関数を用いた場合、 $N=Z$ となる原子核ではアイソベクトル対相関によって自発的にアイソスピン対称性が破れ、対振幅のアイソスピン空間での向きが異なる解が縮退するため、中性子対、陽子対、中性子-陽子対の混合凝縮解の縮退が実現する。そのため基底状態の記述ではアイソスピン射影が重要となる。

アイソベクトル型対相関の 3 つの結合定数を変えたり Coulomb 力を加えたりするとアイソスピン対称性が破れ、この縮退は解ける。しかしながら Coulomb 力による対相関のアイソスピン対称性の破れの程度は非常に小さく、対相関チャネルではアイソスピン対称性は近似的に成立し、アイソスピン回転の量子ゆらぎが非常に大きくなることが示され。 $N \neq Z$ となる原子核ではアイソスピン対称な密度汎関数ではアイソベクトル型中性子-陽子対凝縮は現れず、中性子-陽子対の結合定数が大きい場合に限り凝縮解を得ることができた。

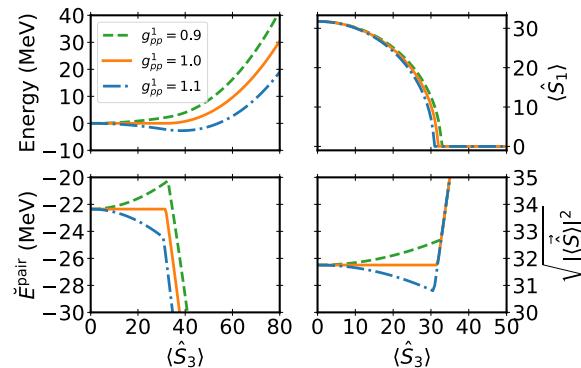


Fig. 2: アイソベクトル型中性子-陽子対振幅の関数としてのエネルギー、同種粒子対振幅、アイソベクトル対振幅の大きさ。

[3] ジルコニウム ^{90}Zr 原子核の衝突反応における相対位相の効果 (橋本、Scamps (ブリュッセル自由大))

昨年度までにおいて、我々は Gogny-TDHFB 法を用いて超流動原子核の反応における相対位相の効果を調べてきた。プログラムコードの整備と新しい計算技術の開発のために、対象は酸素 ^{20}O やカルシウム Ca などの比較的質量の小さな原子核であった。

そこで、ウラニウムやプルトニウムなどの重い原子核の性質、特に分裂の過程における超流動の効果を調べるためにプログラムの拡張と整備を進めてきた。応用を始めた例として、ジルコニウム ^{90}Zr 原子核の正面衝突のシミュレーションにおける超流動性の効果が核間ポテンシャルの違いや対応する相空間内の軌道に現れることが確認できる (Fig. 3 a))。また、プルトニウム ^{240}Pu の分裂に伴うポテンシャルエネルギーの計算から、対称性を保った四重極変形の分裂経路よりも八重極変形を伴う経路のほうがより低いエネルギーになることが確認できる (Fig. 3 b))。これらの重い原子核を対象にして超流動性に伴う位相が原子核内のエネルギー移動にもたらす動的な効果を調べることができる。

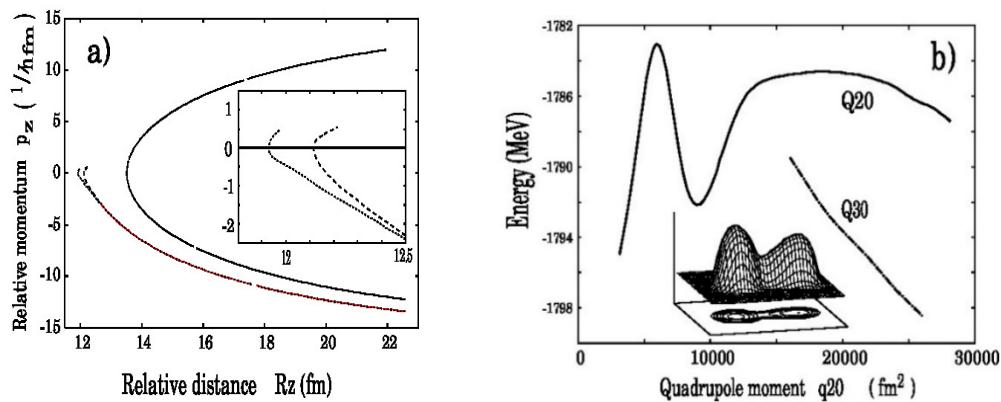


Fig. 3: a) $^{90}\text{Zr}+^{90}\text{Zr}$ の反応における相空間内の軌道。加速エネルギー 70 MeV (実線) および 84 MeV。相対位相 0 度 (点線) および 90 度 (破線)。挿入図は拡大図。b) ^{240}Pu の四重極変形を拘束条件にした HFB 計算によるエネルギー曲線。四重極変形のみ (実線) と八重極変形 (挿入図) あり (破線) の場合。

[4] GW170817 constraints on the properties of a neutron star in the presence of WIMP dark matter (Quddus (Aligarh Muslim University), Panotopoulos (IST), Kumar, Ahmad (Aligarh Muslim University), and Patra (Homi Bhabha National Institute))

My colleagues and I have considered a relatively light Weakly Interacting Massive Particle (WIMP) as a dark matter candidate with properties suggested by the results of the DAMA/LIBRA collaboration, realized for instance within the framework of the Next-to-Minimal Supersymmetric Standard Model. The dark matter (DM) particle interacts with the baryonic matter of a neutron star (NS) through Higgs bosons. The DM variables are essentially fixed using the results of the DAMA/LIBRA experiment, which are then used to build the Lagrangian density for the WIMP-nucleon interaction inside a NS. We have used the effective field theory motivated relativistic mean field (RMF) model to study the EoS in the presence of dark matter. The predicted EoS are used in the TOV equations to obtain the mass-radius relations (see Fig. 4), the moment of inertia, and effects of the tidal field on a NS. The calculated properties are compared with the corresponding data of the GW170817 event.

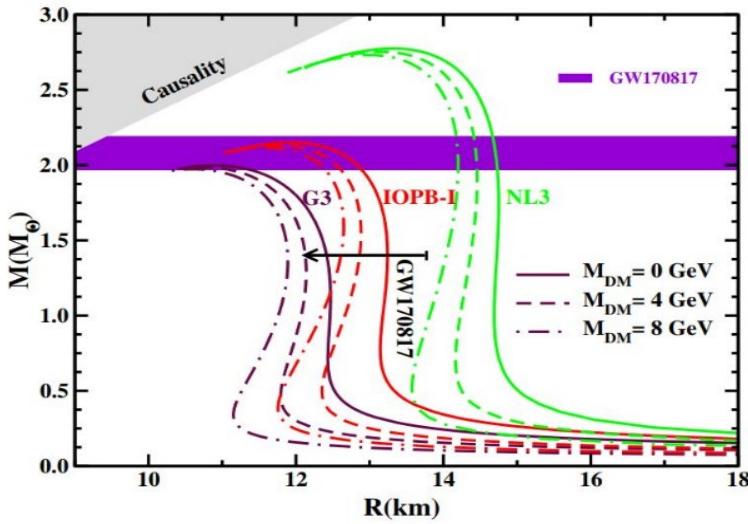


Fig. 4: Mass-radius profile for NSs in the presence of DM.

[5] Effects of Dark Matter on Nuclear and Neutron Star Matter (Das (Homi Bhabha National Institut_e), Kumar (Homi Bhabha National Institute), Kumar, Biswal (Xiamen University), 中務, Li (Xiamen University), and Patra (Homi Bhabha National Institute))

We study the DM effects on the nuclear matter (NM) parameters characterising the EoS of super dense neutron-rich nucleonic-matter. The observables of the NM, i.e. incompressibility, symmetry energy and its higher order derivatives in the presence DM for symmetric and asymmetric NM, are analysed with the help of RMF model. The calculations are also extended to β -stable matter to explore the properties of the NS. We analyse the DM effects on symmetric NM, pure neutron matter and NS matter with the help of RMF model using NL3, G3 and IOPB-I forces. The binding energy and pressure are calculated with and without considering the DM interaction with the NM systems. The influences of DM are also analysed on the symmetry energy and its different coefficients. The incompressibility and the skewness parameters are affected considerably due to the presence of DM in the NM medium. We extend the calculations to NS and find its mass, radius and the moment of inertia (see Fig. 5) for static and rotating NS with and without DM contribution. The mass of the NS considerably changes due to rapid rotation with the frequency in the mass-shedding limit. The effects of DM are found to be important for some of the NM parameters, which are crucial for the properties of astrophysical objects.

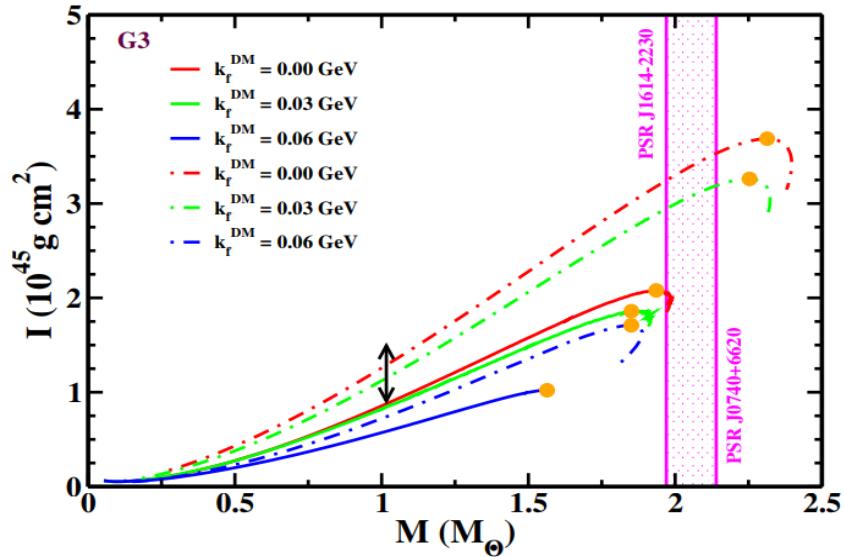


Fig. 5: Moment of inertia of the NSs in the presence of DM.

[6] Calculations of the collective inertial mass and self-consistent reaction path for low-energy nuclear reactions (温、中務)

Towards the microscopic theoretical description for large amplitude collective dynamics like fusion/fission reactions, we propose a numerical method to determine the optimal collective reaction path for nucleus-nucleus collisions, based on the adiabatic self-consistent collective coordinate (ASCC) method. At the same time, we extracted the coefficients of inertial masses for low-energy nuclear collective dynamics, which is the key ingredient for constructing the nuclear collective Hamiltonian and study the quantum mechanical features of nuclear reactions.

Under the scheme of adiabatic self-consistent collective coordinate (ASCC), we use an iterative method, combining the imaginary-time evolution and the finite amplitude method, for the solution of the ASCC coupled equations. It is applied to light reaction systems of $\alpha + \alpha \rightarrow {}^8\text{Be}$, $\alpha + {}^{16}\text{O} \rightarrow {}^{20}\text{Ne}$ and ${}^{16}\text{O} + {}^{16}\text{O} \rightarrow {}^{32}\text{S}$. We determine the collective paths, the potentials, and the inertial masses. The results are compared with other methods, such as the constrained Hartree-Fock method, Inglis's cranking formula.

The left panel on Fig. 6 shows the fusion path for the fusion reaction of ${}^{16}\text{O} + \alpha \rightarrow {}^{20}\text{Ne}$, constructed by the microscopically derived collective coordinate, which can be decoupled from other intrinsic degrees of freedom. This fusion path smoothly connects the two reacting nuclei into the ground state of ${}^{20}\text{Ne}$. The right panel shows the derived inertial mass for the same system, the results are compared with other methods. When the two nuclei are far away from each other, the reduced mass can be reproduced. We have demonstrated that the inertial mass calculated by our method is advantageous because it is self-consistent and not spoiled by the existence of the time-odd mean-field potential in the realistic energy density functional. With these results, it becomes feasible to perform ‘requantization’ of the TDHF(B), which will reveal more quantum effects and microscopic information of nuclear fusion/fission reactions.

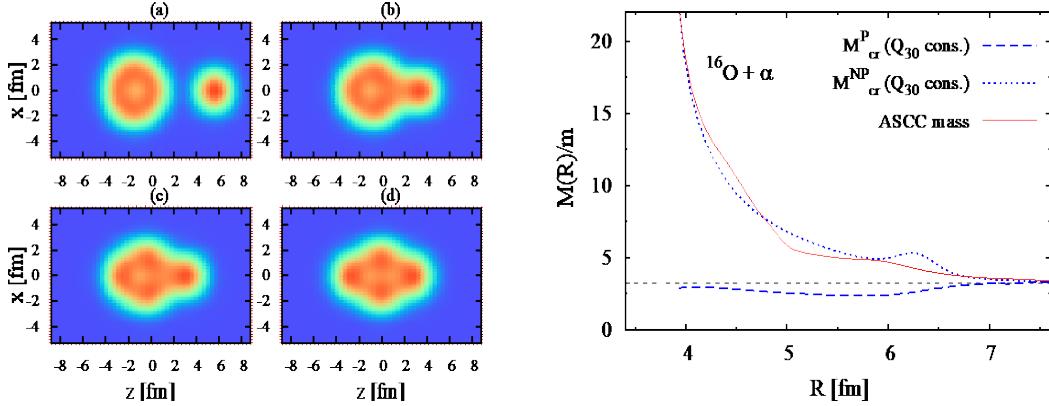


Fig. 6: (Left) Density distribution on the x-z plane at four points on the ASCC fusion reaction path of $^{16}\text{O} + \alpha \rightarrow ^{20}\text{Ne}$: (a) $R = 7.6$ fm, (b) $R = 5.2$ fm, (c) $R = 4.2$ fm, and (d) $R = 3.8$ fm corresponding to the ground state of ^{20}Ne . (Right) The ASCC inertial mass (red solid curve) in units of the nucleon mass as a function of R for the same system, compared with the cranking inertial masses based on the CHF states with constraint on octupole deformation. The non-perturbative and perturbative cranking inertial masses are shown with dotted and dashed lines, respectively.

[7] シフト・クリロフ法による3次元座標空間表現での有限温度ハートレー・フォック・ボゴリューボフ計算（柏葉（D3）、中務）

対凝縮による核子超流動性を考慮できる(有限温度)ハートレー・フォック・ボゴリューボフ(HFB)計算では、対称性の仮定を導入して2次元以下の計算に制限する、調和振動子基底を用いて空間次元を小さく抑えるなど、フルの非制限計算はほとんど皆無であった。そこで、3次元座標空間を基底に取った3次元ソルバーの開発を実施した。通常のHFB計算では、準粒子軌道を求め、通常密度・対密度を計算する手法が採られており、HFBハミルトニアンの対角化作業が必要となるため、自己無撞着な解に到達するまでに大次元行列の対角化を何度も実行する必要がある。そこで、この行列対角化を避ける方法として、複素エネルギー面上でのグリーン関数の積分から通常密度・対密度を計算し、グリーン関数をクリロフ・アルゴリズムに基づく反復解法で求める方法を開発した。積分のためには、多数の異なる複素エネルギーでのグリーン関数を計算する必要があるが、ここにはシフト法を用いることで、ほぼエネルギー1点での計算コストで全てのエネルギー一点の結果を得ることができる。また、異なる空間点での計算を、ほとんど通信なしに実行するため、

並列化効率も非常に高く、Oakforest-PACS を用いた数値計算を実行した。

数値計算の結果として、温度による原子核の形状変化、変形共存現象の温度依存性と安定性に關

する結果を得ることができた。

また、中性子星の内殻（インナー・クラスト）において、3次元的パスタ構造をフル3次元の有限温度 HFB 計算による初めての解析を実施した。これまで予言されていない新しい相が出現する可能性を示唆する結果を得ている。

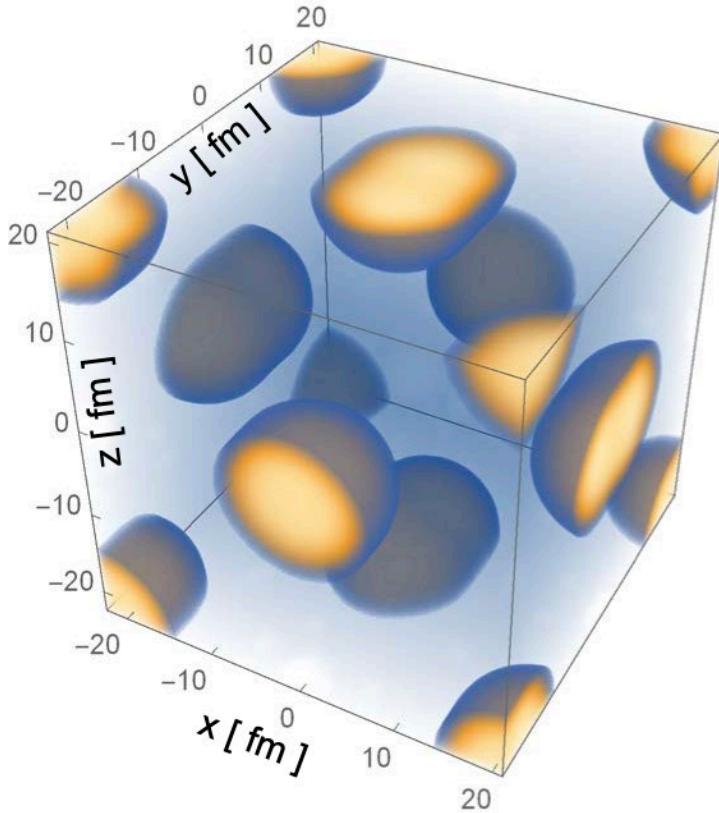


Fig. 7: 中性子星内殻における有限温度・有限密度のベータ平衡状態として得られた構造。大きく変形した Sr の原子核が出現している。

【8】遷移金属におけるアト秒過渡吸収分光と光誘起電子局在現象の第一原理計算(佐藤)

我々は、時間依存密度汎関数理論に基づく第一原理計算と最先端のアト秒分光実験技術を組み合わせることにより、光が誘起する超高速な電子ダイナミクスの微視的機構の解明に取り組んでいる。本研究では、チューリッヒ工科大のアト秒実験グループとの共同研究により、近赤外フェムト秒レーザーをチタン薄膜に照射した際に誘起される固体中の超高速な電子ダイナミクスについて調べた。実験的には、赤外フェムト秒レーザーをポンプ光、極紫外アト秒レーザーをプローブ光としたアト秒過渡吸収分光実験がチタン薄膜に対して行い、フェムト秒レーザー照射によって金属チタンの M 吸收端(およそ 32 eV)における吸光度がサブフェムト秒の時間スケールで増大することが明らかとなつた。この超高速な金属チタンの光学特性の変調の微視的機構を解明するため、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巢計算により上記のアト秒ポンプ・プローブ実験を直接シミュレーションした。その結果、Fig. 8 に示すように、レーザー励起によってチタン原子の周りに電子が局在化することが明らかとなつた。さらに、時間依存密度汎関数理論計算の結果を微視的に解析することで、実験的に観測された M 吸收端における吸光度の増大は、フェムト秒レーザー励起が引き起こす電子の局在化により物質内の遮蔽効果(local field effect)が変調されたことに起因していることが明らかとなつた。

このような光によって電子の局在性、及び物質内の遮蔽効果を制御する技術は、将来の光による物性制御を実現するための基盤となるものである。本共同研究の成果は、論文"Attosecond screening dynamics mediated by electron localization in transition metals"として Nature Physics より発表された。

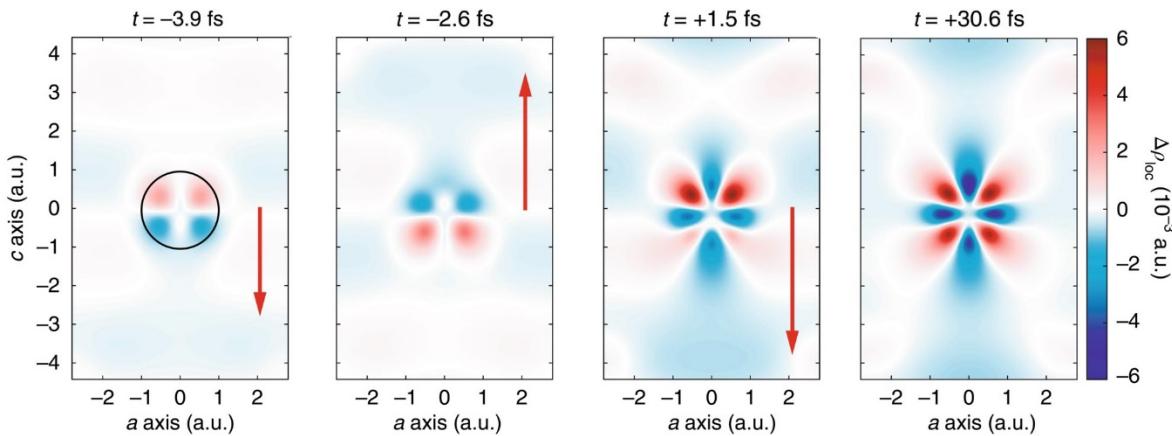


Fig. 8: フェムト秒レーザー照射による電子密度変化ダイナミクスのスナップショット。座標原点にチタン原子が位置する。図上の時刻はフェムト秒レーザーパルスのピーク強度時刻からの差を表している。また、レーザー照射中の電場は赤矢印によって示されている。レーザー照射中は電場により電子密度に偏りが生じ、同時にレーザー励起によって電子がチタン原子付近に局在化している様子が示されている。

【9】光物質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、佐藤、竹内、野田、廣川、山田（篤）、山田（俊）、朴[高性能計算システム研究部門]）

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手法の一つである時間依存密度汎関数理論に基づき記述する汎用のソフトウェア SALMON (Scalable Ab initio Light-Matter simulator for Optics and Nanoscience) の開発を進めている。SALMON は、分子の分極率や物質の誘電関数のような光応答関数とともに、パルス光を照射した物質内で起こる超高速現象を時間領域で計算することができ、先端の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る、他に例のない特徴を持つソフトウェアである。現在ウェブページ <https://salmon-tddft.jp> を整備し公開している。本年度は、SALMON の基盤となるコードの抜本的な改良を行い、バージョン 2 の公開を目指す活動に多くの時間を費やした。2020 年度の前半には新バージョンの公開を予定している。

SALMON を普及する活動として、9月に大阪大学が実施するコンピュテーション・マテリアルズ・デザインワークショップにおいて、また 11 月には RIST のサポートのもと東北大学サイバーメディアセンターにおいてハンズオンチュートリアルを実施するなどした。

【10】富岳における SALMON を用いた大規模シミュレーション（廣川、山田（篤）、山田（俊）、野田、植本、矢花、朴[高性能計算システム研究部門]）

理化学研究所計算科学研究センター（理研 R-CCS）で開発されている富岳において、大規模計算を行う準備を進め、10,000 原子を超えるサイズの系が、富岳において高い効率で計算できることを確かめた。文部科学省より募集のあった、ゴードンベル賞へのエントリーにむけた富岳の試験利用に採択され、富岳のおよそ 1/6 のシステムである 27,648 ノードまでを用いて計算を行った。Fig. 9

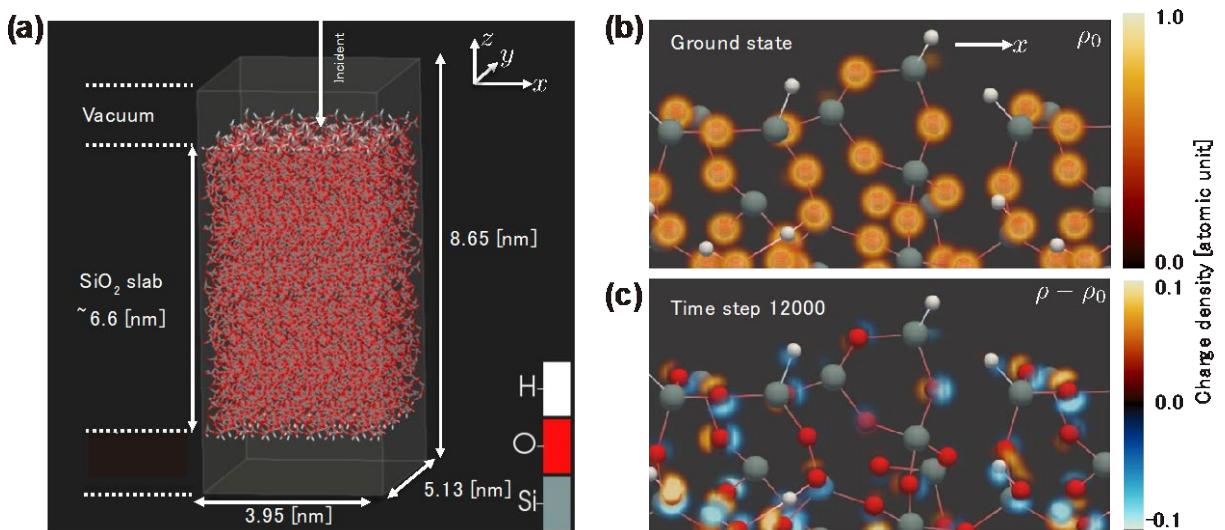


Fig.9：富岳において行ったガラスにパルス光を照射した際に起こる光・電子・イオンのシミュレーション。(a)はシステムの概要、(b)は基底状態における電子密度分布、(c)はパルスが照射中の電子密度の変化する様子。

に、行った計算の概要を示す。表面を水素終端した 10,224 原子からなるアモルファス状の SiO_2 のガラス薄膜に対して、光電磁場に対するマクスウェル方程式、電子に対する時間依存 Kohn-Sham 方程式、イオンに対するニュートンの運動方程式を同時に解き、パルス照射後の超高速ダイナミクスに対する計算が実行可能であることを実証した。また、13,632 原子までの系に対して、weak/strong スケーリングの性能を調べ、コードのチューニングにより、富岳における Byte/FLOPS 値から予想される限界に近い性能で計算が可能であることを示した。

【11】光・電子・フォノンの相互作用を記述するシミュレーションの展開（山田（篤）、矢花）

これまでに SALMON 開発プロジェクトを通じ、光・電子・原子（イオン）の三者の運動方程式を第一原理レベルでマルチスケールモデルに基づき統一的に記述する Maxwell+TDDFT+MD 法を開発してきた[1]。特にフェムと秒パルスにより誘起される瞬間誘導ラマン散乱およびコヒーレントフォノンのポンプ-プロープ分光の詳細な解析を進めた[2]。今年度はさらに、フォノンの典型的な時間スケール（ピコ秒）での記述を可能にするため、本計算手法の枠組みを計算化学分野における分子力場モデルへ応用した新規計算手法、すなわち、光の運動と分子動力学とを統合した Maxwell+ 分極力場 MD 法の開発に着手した[3]。これは、Maxwell 方程式に従った光電磁波と、固体における電子分極を取り入れた分子の運動とを連立させ、時間領域の相互作用を記述する計算手法である。最初の数値計算例として、氷の薄膜に対する(I)可視光の透過と反射、(II) 赤外吸収測定、(III) 誘導ラマン散乱測定、のシミュレーションを行った。これらは光の入射、薄膜中の光の伝搬、光-分子相互作用により生じる分子振動と光の変調、シグナル計測、といった一連の実験プロセスを模倣して再現した計算である。測定プロセスにおける光と分子の運動の詳細を明らかにすると同時に実験測定とよく一致するシグナルが得られ、新規手法の有効性を実証した。

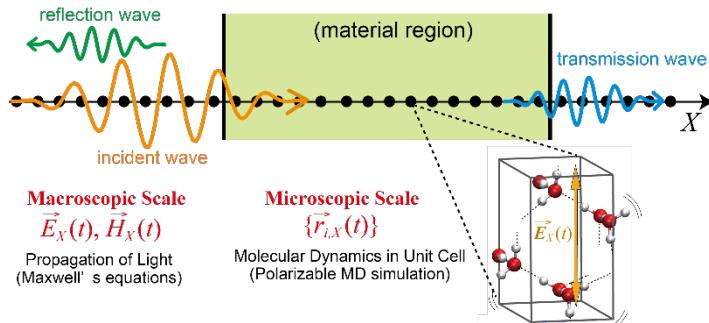


Fig. 10 : Maxwell + 分極力場 MD マルチスケールシミュレーション法の概略図

【12】ナノ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)、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次元物質等の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的な記述は適当でない。そこで我々は、単一の空間スケールで電子系と電磁場を結合する新たな手法の開発を進めてきた。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。

今年度は本手法の応用として、薄膜の高次高調波発生の計算を行った。固体薄膜に高強度パルス光を照射した際に観測される高次高調波は、薄膜中における光伝搬の効果により、バルク中の微視的な高次高調波発生 (HHG) の信号から大きく変調を受ける。また、極めて薄い薄膜においては量子閉じ込め効果あるいは表面効果による HHG の変調が顕著になると考えられる。そのため、薄膜における HHG の包括的な理解のためには、薄膜の微視的性質と光伝播効果を同時に取り扱うことのできる本手法を用いて、実際に両者が HHG に対してどのような影響をもたらすのかを分析することが有用である。

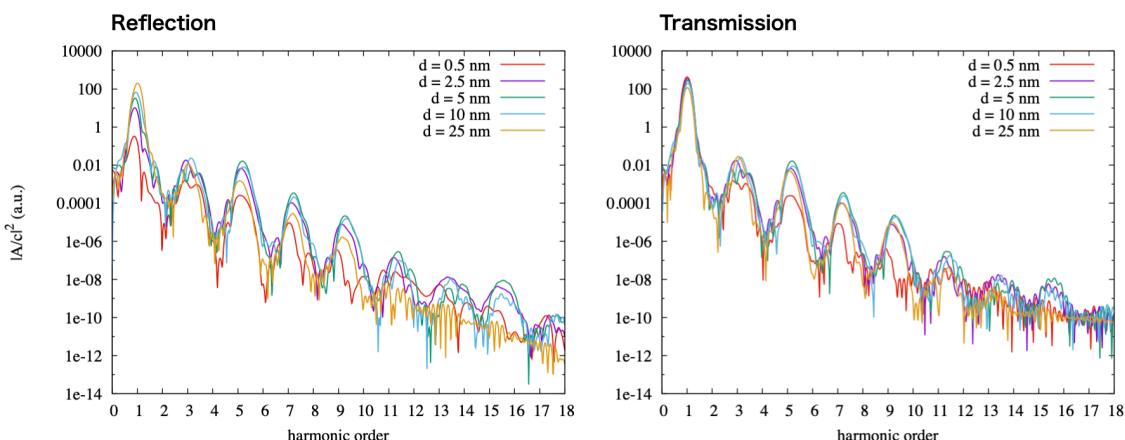


Fig. 11: Si 薄膜 (厚さ d) における光振動数 1.5 eV の入射光に対する反射 HHG(左)および透過 HHG(右)の膜厚依存性

【13】サブ nm ギャップを持つプラズモニックメタ表面の光応答(竹内、矢花)

金属ナノ粒子を二次元的に周期配列した薄膜であるメタ表面は、粒子の素材・形状から決まる特異かつ幅広い光物性を発現することで知られている。特に、近年では金属ナノ粒子間距離(ギャップ)

が 1nm 未満のメタ表面を自己組織化により安定かつ大面積に作成できる方法が確立し、基礎科学的にも応用的にも注目を集めている。このようなサブ nm 領域では量子効果に由来する電子輸送が現れ光物性が大きく変動するが、メタ表面の場合に電子輸送がどれほど影響を及ぼすかは知られていなかった。

そこで我々は SALMON を用い、電子輸送がメタ表面の光物性に及ぼす影響を明らかにした。Fig. 12 はメタ表面の光吸収率に対するギャップ依存性を示す。(a)は量子効果を考慮しない従来の古典電磁気学計算から得られた結果であり、(b)は時間依存密度汎関数理論に基づく第一原理計算から得られた結果である。この結果より、両者はギャップ 0.2nm 付近までは概ね一致するものの、より短いギャップ領域では大きな違いが表れている。これは(b)ではこの領域から電子輸送の効果が現れ、金属ナノ粒子に励起したプラズモンが減衰したためである。

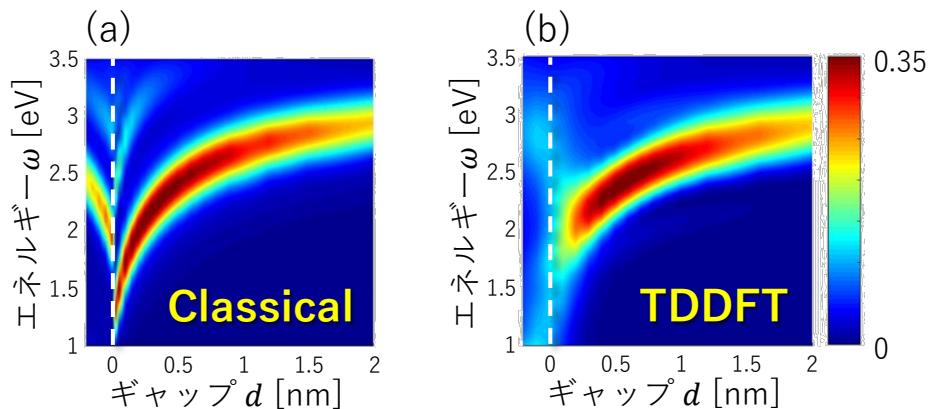


Fig. 12: 光吸収率の比較

4. 教育 学位

集中講義

5. 受賞、外部資金、知的財産等

受賞

- 第 14 回(2020 年) 日本物理学会 若手奨励賞、佐藤駿丞.
- Asian Nuclear Physics Association & AAPPS-DNP Award for young scientist, Kai Wen, Aug. 27, 2019.

外部資金

- 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、37,650,000 円（2019 年度直接経費）.
- 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、14,373,000 円（2019 年度直接経費）.
- 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、分担、2,174,000 円（2019 年度直接経費）.
- 科学技術振興機構、A-STEP 「アイセーフ波長用高効率 Si 受光センサの開発」、矢花一浩、分担、2019 年度、250,000 円（2019 年度直接経費）.
- 共同研究経費、株式会社住友金属鉱山、「ナノ粒子の光応答／光制御」、矢花一浩、909,000 円（2019

年度直接経費）。

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、4,200,000 円 (2019 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. 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「量子クラスターで読み解く物質の階層構造」)(公募研究)、中務 孝、代表、2019 - 2020 年、1,100,000 円 (2019 年度直接経費)「量子クラスター出現機構と低エネルギー核反応の非経験的記述」。
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、1,500,000 円 (2019 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、600,000 円 (2019 年度直接経費)、「中性子-陽子対相関・対凝縮の解明」。

6. 研究業績

(1) 研究論文

A) 査読付き論文

1. S. Yamada, K. Yabana, "Symmetry properties of attosecond transient absorption spectroscopy in crystalline dielectrics", *Phys. Rev. B* **101**, 165128 (2020).
2. T. Yatsui, S. Okada, T. Takemori, T. Sato, K. Saichi, T. Ogamoto, S. Chiashi, S. Maruyama, M. Noda, K. Yabana, K. Iida and K. Nobusada, "Enhanced photo-sensitivity in a Si photodetector using a near-field assisted excitation", *Communication Physics* **2**, 62 (2019).
3. A. Yamada and K. Yabana, "Energy transfer from intense laser pulse to dielectrics in time-dependent density functional theory", *Euro. Phys. J. D* **73**, 87 (2019).
4. A. Yamada and 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* **99**, 245103 (2019).
5. T. Takeuchi, M. Noda, and K. Yabana, "Operation of quantum plasmonic metasurfaces using electron transport through subnanometer gaps", *ACS Photonics* **6**, 2517 (2019).
6. I. Floss, C. Lemell, K. Yabana, and J. Burgdörfer, "Incorporating decoherence into solid-state time-dependent density functional theory", *Phys. Rev. B* **99**, 224301 (2019).
7. Y. Kashiwaba, T. Nakatsukasa, "Self-consistent band calculation of slab phase in neutron-star crust", *Phys. Rev. C* **100**, 035804 (2019).
8. K. Wen and T. Nakatsukasa, "Collective inertial masses in nuclear reactions", *Front. Phys.* **8**, 16 (2020) [Invited paper].
9. G. Scamps and Y. Hashimoto, "Density-constrained time-dependent Hartree-Fock-Bogoliubov method", *Phys. Rev. C* **100**, 024623 (2019).
10. N. Hinohara, "Energy-weighted sum rule for nuclear density functional theory", *Phys. Rev. C* **100**, 024310 (2019).
11. Nicolas Tancogne-Dejean, Micael J. T. Oliveira, Xavier Andrade, Heiko Appel, Carlos H. Borca, Guillaume Le Breton, Florian Buchholz, Alberto Castro, Stefano Corni, Alfredo A. Correa, Umberto De Giovannini, Alain Delgado, Florian G. Eich, Johannes Flick, Gabriel Gil, Adrián Gomez, Nicole Helbig, Hannes Hübener, René Jestädt, Joaquim Jornet-Somoza, Ask H. Larsen, Irina V. Lebedeva, Martin Lüders, Miguel A. L. Marques, Sebastian T. Ohlmann, Silvio Pipolo, Markus Rampp, Carlo A. Rozzi, David A. Strubbe, Shunsuke A. Sato, Christian Schäfer, Iris Theophilou, Alicia Welden, Angel Rubio, "Octopus, a computational framework for exploring

- light-driven phenomena and quantum dynamics in extended and finite systems”, J. Chem. Phys. **152**, 124119 (2020).
12. Matteo Lucchini, Shunsuke A. Sato, Fabian Schlaepfer, Kazuhiro Yabana, Lukas Gallmann, Angel Rubio, Ursula Keller, “Attosecond timing of the dynamical Franz–Keldysh effect”, J. Phys. Photonics **2**, 025001 (2020).
 13. Shunsuke A. Sato, Angel Rubio, “Exact exchange-correlation potential of effectively interacting Kohn-Sham systems”, Phys. Rev. A **101**, 012510 (2020).
 14. Shunsuke A. Sato, “Photovoltaic Effect from the Viewpoint of Time-reversal Symmetry”, J. Phys. Soc. Jpn. **88**, 115003 (2019).
 15. S. A. Sato, P. Tang, M. A. Sentef, U. De Giovannini, H. Hübener, A. Rubio, “Light-induced anomalous Hall effect in massless Dirac fermion systems and topological insulators with dissipation”, New J. Phys. **21**, 093005 (2019).
 16. M. Volkov, S. A. Sato, F. Schlaepfer, L. Kasmi, N. Hartmann, M. Lucchini, L. Gallmann, A. Rubio, U. Keller, “Attosecond screening dynamics mediated by electron localization in transition metals”, Nature Physics **15**, 1145 (2019).
 17. S. A. Sato, J. W. McIver, M. Nuske, P. Tang, G. Jotzu, B. Schulte, H. Hübener, U. De Giovannini, L. Mathey, M. A. Sentef, A. Cavalleri, A. Rubio, “Microscopic theory for the light-induced anomalous Hall effect in graphene”, Phys. Rev. B **99**, 214302 (2019).
 18. M. Chávez-Cervantes, G.E. Topp, S. Aeschlimann, R. Krause, S.A. Sato, M.A. Sentef, I. Gierz, “Charge density wave melting in one-dimensional wires with femtosecond subgap excitation”, Phys. Rev. Lett. **123**, 036405 (2019).
 19. S. Burrello, M. Colonna, G. Colò, D. Lacroix, X. Roca-Maza, G. Scamps, and H. Zheng, “Interplay between low-lying isoscalar and isovector dipole modes: A comparative analysis between semiclassical and quantum approaches”, Phys. Rev. C **99**, 054314 (2019).
 20. A. Quddus, G. Panopoulos, B. Kumar, S. Ahmad, and S. K. Patra, “GW170817 constraints on the properties of a neutron star in the presence of WIMP dark matter”, JPS Conf. Proc. **31**, 011053 (2020).
 21. B. Kumar, “Neutron skins of heavy nuclei and tidal deformability of neutron star”, JPS Conf. Proc. **31**, 011052 (2020).
 22. A. Yamada and K. Yabana, “Modulation of probe signal in coherent phonon detection revisited: Analytical and first-principles computational analyses”, arXiv:2004.09069 (2020).
 23. Yuta Hirokawa, Atsushi Yamada, Shunsuke Yamada, Masashi Noda, Mitsuharu Uemoto, Taisuke Boku, and Kazuhiro Yabana, “Ab-Initio Simulation of Light-Matter Interaction at the Atomic Scale in Fugaku”, SC20, submitted.
 24. Y. Kashiwaba, T. Nakatsukasa, “S Coordinate-space solver for finite-temperature Hartree-Fock-Bogoliubov calculations using the shifted Krylov method”, Phys. Rev. C accepted.
 25. T. Nakatsukasa, Y. Kashiwaba, F. Ni, K. Washiyama, K. Wen, N. Hinohara, “Nuclear structure and reaction with quantum shape fluctuation”, JPS Conf. Proc., accepted.
 26. H.C. Das, A. Kumar, B. Kumar, S.K. Biswal, T. Nakatsukasa, A. Li, and S.K. Patra, “Effects of dark matter on the nuclear and neutron star matter”, MNRAS, accepted.
 27. J. Ha, T. Sumikama, F. Browne, N. Hinohara, A. M. Bruce, et al., “Shape evolution of neutron-rich $^{106,108,110}\text{Mo}$ isotopes in the triaxial degree of freedom”, Phys. Rev. C, accepted.

B) 査読無し論文

1. A. Yamada and K. Yabana, "First-principles electron dynamics simulation study of high intensity laser irradiation on crystal systems: Photon energy dependent energy transfer", EPJ Web of Conferences; **205**, 04020 (2019).
2. M. Uemoto, K. Yabana, S. A. Sato, Y. Hirokawa and T. Boku, "A first-principles simulation method for ultra-fast nano-optics", EPJ Web Conf. Volume **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", EPJ Web of Conferences **205**, 01003 (2019).
4. N. Hinohara, "Efficient QRPA calculation for two-neutrino double-beta decay nuclear matrix element", AIP Conf. Proc. **2165**, 020010 (2019).
5. S. A. Sato, U. De Giovannini, S. Aeschlimann, I. Gierz, H. Hübener, A. Rubio, "Floquet states in dissipative open quantum systems", submitted.
6. Chang-Ming Wang, Nicolas Tancogne-Dejean, Massimo Altarelli, Angel Rubio, Shunsuke A. Sato, "Role of electron scattering on the high-order harmonic generation from solids", submitted.
7. Umberto De Giovannini, Hannes Hübener, Shunsuke A. Sato, Angel Rubio, "Direct measurement of electron-phonon coupling with time-resolved ARPES", submitted.
8. Jiaojian Shi, Edoardo Baldini, Simone Latini, Shunsuke A. Sato, Yaqing Zhang, Brandt Pein, Pin-chun Shen, Jing Kong, Angel Rubio, Nuh Gedik, Nelson, Keith, "Room Temperature Terahertz Electroabsorption Modulation by Excitons in Monolayer Transition Metal Dichalcogenides", submitted.
9. Dongbin Shin, Shunsuke A. Sato, Hannes Hübener, Umberto De Giovannini, Noejung Park, Angel Rubio, "Nonlinear phononics in 2D ferroelectric materials as dynamical amplification of electric polarization", submitted.
10. Y. Sanari, H. Hirori, T. Aharen, H. Tahara, Y. Shinohara, K. L. Ishikawa, T. Otobe, P. Xia, N. Ishii, J. Itatani, S. A. Sato, and Y. Kanemitsu, "Role of Nonlinear Virtual Population for High Harmonic Generation in Solids", submitted.

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

1. K. Yabana, "Ab-initio theory for propagation of extreme optical pulses in solids", 2nd Int. Workshop on Ultrafast Dynamics and Metastability, Georgetwon Univ., Washington DC, USA, April 15 - 17, 2019.
2. K. Yabana, "Ab-initio theory for propagation of strong optical pulse in solids", XXXIst Int. Conf. on Photonic, Electronic, and Atomic Collisions (ICPEAC2019), Deauville, France, 23 - 30, July, 2019.
3. K. Yabana, "Time-dependent density functional theory for solids under strong laser field", 24th Int. Workshop on Quantum Systems in Chemistry, Physics, and Biology, Odessa, Ukraine, 18 - 24, Aug. 2019.
4. M. Uemoto, A. Yamada, and K. Yabana, "Maxwell+TDDFT multiscale method for light-propagation in solids", 27th International Conference on Advanced Laser Technologies, Prague, Czech Republic, Sept. 2019.
5. T. Takeuchi, M. Noda, and K. Yabana, "Linear and nonlinear optical responses of plasmonic metasurface with sub-nm gaps", 27th International Conference on Advanced Laser Technologies, Prague, Czech Republic, Sept. 2019.
6. K. Yabana, "Ab-initio Simulations for Propagation of Intense and Ultrashort Optical Pulse",

OptoX-Nano 2019, Okayama, Dec. 3, 2019.

7. T. Nakatsukasa, “Energy density functional approach to nuclear dynamics”, XVII Workshop on Nuclear Physics, Havana, Cuba, Apr. 1 - 5, 2019.
8. T. Nakatsukasa, “Collective motion, GCM, and requantization of time-dependent mean field”, Nuclear Physics Symposium “Challenges in theory of heavy nuclei”, York, UK, July 17 - 20, 2019.
9. T. Nakatsukasa, “Self-consistent description of the inner crust of neutron stars”, Microscopic Approaches to Nuclear Structure and Reactions, Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore, CA, USA, Nov. 12 - 15, 2019.
10. T. Nakatsukasa, “Green’s function method for nuclear structure theory”, Workshop on new generation nuclear density functionals, Peking, China, Nov. 18 - 22, 2019.
11. N. Hinohara, “Efficient QRPA calculation for two-neutrino double-beta decay nuclear matrix element”, Matrix Elements for the Double beta decay Experiments (MEDEX'19) Czech National Library of Technology, Prague, Czech Republic, May 27 - 31, 2019.
12. N. Hinohara, “Neutron-proton pairing in nuclear density functional theory”, Nuclear Physics Symposium “Challenges in theory of heavynuclei”, York, UK, July 17 - 20, 2019.
13. N. Hinohara, “Isovector pairing and nuclear mass”, RIBF Week 2019, Wako, Japan, Sept. 2 - 4, 2019.
14. N. Hinohara, “Isovector pairing energy density functional and pairing collective motion”, Microscopic Approaches to Nuclear Structure and Reactions, Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore, CA, USA, Nov. 12 - 15, 2019.

B) 一般講演

1. T. Takeuchi, M. Noda, K. Yabana, “Numerical Analysis of Quantum Plasmonic Metasurface by Time-Dependent Density Functional Theory”, 19th International Conference on Numerical Simulation of Optoelectronic Devices, Ottawa, Canada, July 8 - 12, 2019.
2. M. Uemoto, S. Yamada, T. Takeuchi, Y. Hirokawa and K. Yabana, “Ab-initio large-scale calculation of laser interactions with nanoscale materials”, MCRP-62, 11th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences, Tsukuba, Japan, Oct. 2019.
3. M. Uemoto and K. Yabana, “Development of Multiscale First-Principles Approach for Optical Response in Nanostructure”, iSPN2019, Kobe, Japan, Nov. 13, 2019.
4. T. Takeuchi, M. Noda, and K. Yabana, “Refractive index variation of quantum plasmonic metasurface with sub-nm gaps”, iSPN2019, Kobe, Hyogo, Japan, Nov. 13, 2019.
5. S. Yamada, M. Noda, K. Nobusada, and K. Yabana, “First-principles study for interaction of pulsed light with thin materials”, iSPN2019, Kobe, Hyogo, Japan, Nov. 13, 2019.
6. T. Nakatsukasa, “Summary and discussion”, China-Japan Collaboration Workshop on “Nuclear Mass and Life for Unraveling Mysteries of R-process”, Beijing, China, Oct. 9 - 13, 2019.
7. Y. Hashimoto, “Study of structure and reaction mechanism of superfluid nuclei based on the density functional theory”, 11th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences, Tsukuba, Japan, Oct. 15, 2019 (Poster).
8. N. Hinohara, “Pairing rotation and pairing energy density functional”, Nuclear Structure and Dynamics (NSC2019) Centro Culturale Don Orione Artigianelli, Venice, Italy, May 13 - 17, 2019.
9. N. Hinohara, “Isovector neutron-proton pairing condensation in proton-rich unstable nuclei”, 5th workshop on many-body correlations in microscopic nuclear models (SADO2019), Sado, Japan,

Sept. 5 - 6, 2019.

10. N. Hinohara, “Isovector pairing and nuclear binding energy”, China-Japan Collaboration Workshop on “Nuclear Mass and Life for Unraveling Mysteries of R-process”, Beijing, China, Oct. 9 - 13, 2019.
11. N. Hinohara, “FAM-QRPA calculation for double-beta decay nuclear matrix elements”, 11th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences, Tsukuba, Japan, Oct. 15, 2019 (Poster).
12. K. Wen, “Optimal collective coordinate in nuclear collective dynamics”, The 18th CNS International Summer School (CNSSS19), Center for Nuclear Study, University of Tokyo, Tokyo, Japan, Aug. 20 - 27, 2019.
13. K. Wen, “Adiabatic self-consistent collective motion path”, 5th workshop on many-body correlations in microscopic nuclear models (SADO2019), Sado, Japan, Sept. 5 - 6, 2019.
14. K. Wen, “Microscopic simulations for nuclear fusion reactions”, China-Japan Collaboration Workshop on “Nuclear Mass and Life for Unraveling Mysteries of R-process”, Beijing, China, Oct. 9 - 13, 2019.
15. B. Kumar, “Neutron skins of heavy nuclei and tidal polarizability of neutron star”, The 15th International Symposium on Origin of Matter and Evolution of Galaxies (OMEG15), Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto University, Kyoto, Japan, July 2 - 5, 2019 (Poster).
16. A. Quddus, G. Panotopoulos, B. Kumar, “GW170817 constraints on the properties of a neutron star in the presence of WIMP dark matter”, The 15th International Symposium on Origin of Matter and Evolution of Galaxies (OMEG15), Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto University, Kyoto, Japan, July 2 - 5, 2019 (Poster).
17. B. Kumar, “New effective interactions IOPB-I and G3”, The 18th CNS International Summer School (CNSSS19), Center for Nuclear Study, University of Tokyo, Tokyo, Japan, Aug. 21 - 27, 2019.
18. B. Kumar, “Neutron star astrophysics from gravitational waves and nuclear theory”, 5th workshop on many-body correlations in microscopic nuclear models (SADO2019), Sado, Japan, Sept. 5 - 6, 2019.
19. B. Kumar, “Tidal deformability for neutron and hyperon stars”, Quark and Compact Star 2019 (QCS2019), Busan, Korea, Sept. 26 - 29, 2019 (Poster).
20. B. Kumar, “GW170817: Constraints on the moment of inertia PSR J0737-3039A”, Centenary Celebration Conference on Nuclear Structure and Nuclear Reaction, Aligarh, India, Mar. 2 - 4, 2020 (Poster).

C) セミナー等

1. N. Hinohara, “Neutron-proton pairing in nuclear density functional theory”, NSCL Theory Seminar, NSCL/FRIB Michigan State University, East Lansing, MI, USA, Jan. 14, 2020.
2. S. A. Sato, “Ab-initio electron dynamics simulation for attosecond physics in solids”, Seminar at the Vienna University of Technology, Aug. 5, 2019.
3. S. A. Sato, “First-principles electron dynamics simulation for attosecond science in solids”, Seminar at the University of Tokyo, Sept. 24, 2019.
4. S. A. Sato, “Ab-initio electron dynamics simulations for attosecond science in solids”, Seminar at the University of Graz, Dec. 13, 2019.
5. B. Kumar, “Tidal deformability, and new relativistic models IOPB-I and G3”, Hadron theory

group at University of Tokyo, Japan, July 23, 2019.

6. B. Kumar, "Relativistic models (G3 and IOPB-I) of the neutron-star matter equation of states", Kyungpook National University, Daegu, South Korea, Sept. 24, 2019.
7. B. Kumar, "Constraints on the moment of inertia of neutron-star/pulsars from GW170817", Seminar at Physical Research Laboratory, Ahmedabad, India, Feb. 27, 2020.

(3) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

1. 矢花一浩、「大規模計算による光電磁場・電子・フォノンの第一原理シミュレーション」、第6回大型実験施設とスーパーコンピュータとの連携利用シンポジウム-物質構造の階層性とフォノン物性の理解、東京秋葉原 UDX、2019年9月17日。
2. 中務孝、「中性子星内殻シミュレーションとパルサー・グリッジ」、シミュレーションによる宇宙の基本法則と進化の解明に向けて (QUCS 2019)、京都大学、京都、2019年12月16-19日。
3. 日野原 伸生、「二重ベータ崩壊原子核行列要素の核構造計算」、ELPH セミナー、東北大学電子光学研究センター、仙台、2019年9月12日。

B) その他の発表

1. 矢花一浩、「第一原理計算に基づく光科学ソフトウェア SALMON の開発と応用」、ポスト「京」重点課題（7）第5回シンポジウム、東京大学、2019年8月9日
2. 植本光治、山田篤、矢花一浩、「大規模計算をもちいた極限パルス光・固体物質相互作用の第一原理シミュレーション」、ポスト「京」重点課題7第5回シンポジウム、文京区本郷、2019年8月9日。
3. 廣川祐太、植本光治、野田真史、矢花一浩、「A64FX プロセッサに対する電子動力学アプリケーション SALMON のコデザイン」、ポスト「京」重点課題7第5回シンポジウム、文京区本郷、2019年8月9日。
4. 植本光治、藏田真太郎、河口紀仁、矢花一浩、「第一原理計算によるパルス光とグラファイト薄膜の相互作用」、日本物理学会2019年秋季大会、岐阜、2019年9月12日。
5. 山田俊介、矢花一浩、「結晶対称性と時間分解動的 Franz-Keldysh 効果の関係：理論と第一原理計算」、日本物理学会2019年秋季大会、岐阜、2019年9月10日。
6. 竹内嵩、野田真史、矢花一浩、「サブ nm ギャップを有するプラズモニックメタ表面の屈折率変動機構の解明」、第80回応用物理学会秋季学術講演会、北海道、2019年9月。
7. 山田篤志、矢花一浩、「マルチスケールシミュレーションで直接的に再現したコヒーレントフォノンに対するポンプープローブ分光シグナルの解析」、第13回分子科学討論会、名古屋、2019年9月17日。
8. 矢花一浩、竹内嵩、野田真史、「サブ nm ギャップを有するプラズモニックメタ表面の屈折率変動機構の解明」、第80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、2019年9月18日。
9. 山田篤志、矢花一浩、「極限的パルス光とバルク物質の相互作用に対する第一原理計算」、第6回「京」を中心とする HPCI システム利用研究課題成果報告会、品川、2019年11月1日。
10. 竹内嵩、矢花一浩、「サブ nm ギャップを有するプラズモニックメタ表面の非線形光学応答解析—ジエリウム模型を適用した時間依存密度汎関数理論による検討—」、第67回応用物理学会秋季学術講演会、2020年3月13日(現地開催中止、予稿のみ)。
11. 山田俊介、矢花一浩、「薄膜における高次高調波発生の第一原理計算」、日本物理学会第75回年次大会、名古屋大学、2020年3月(現地開催中止、予稿のみ)。

12. 廣川 祐太、野田 真史、山田 俊介、山田 篤志、朴 泰祐、矢花一浩、「電子動力学アプリケーション SALMON のスーパーコンピュータ「富岳」に向けた最適化と性能評価」、第 173 回 HPC 研究会、札幌、2020 年 3 月(現地開催中止、予稿のみ)
13. 中務孝、「Nuclear clusters in low-energy nuclear reaction and neutron-star crust」、第二回クラスター階層領域研究会、2019 年 5 月 31 日 - 6 月 1 日。
14. 関澤一之 (課題代表: 中務孝)、「時間依存密度汎関数理論による原子核反応」、第 6 回「京」を中心とする HPCI システム利用研究課題 成果報告会、品川、東京、2019 年 11 月 1 日(ポスター発表)。
15. 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 6 回「京」を中心とする HPCI システム利用研究課題 成果報告会、品川、東京、2019 年 11 月 1 日(ポスター発表)。
16. 日野原伸生、「二重ベータ崩壊原子核行列要素と中性子-陽子対相関」、大学院理学研究科・物理学第二教室、原子核理論セミナー、京都大学、京都、2019 年 4 月 17 日。
17. 日野原伸生、「有限振幅法を用いた 2 ニュートリノ二重ベータ崩壊原子核行列要素の計算」、日本物理学会 2019 年秋季大会、山形大学小白川キャンパス、山形、2019 年 9 月 17 - 19 日。
18. 日野原伸生, Javid Sheikh, Jacek Dobaczewski, Witold Nazarewicz, 「Skyrme 型密度汎関数へのアイソベクトル型中性子-陽子対相関の導入」、日本物理学会第 75 回年次大会(現地開催中止)、名古屋大学東山キャンパス、名古屋、2020 年 3 月 16 - 19 日。
19. 佐藤 駿丞, M. Volkov, F. Schlaepfer, L. Kasmi, N. Hartmann, M. Lucchini, L. Gallmann, U. Keller, A. Rubio, 「チタン薄膜に対するアト秒過渡吸収分光の第一原理的解析」、日本物理学会 2019 年秋季大会、岐阜大学、2019 年 9 月 10 - 13 日。
20. 佐藤駿丞, 廣理英基, 佐成晏之, 金光義彦, Angel Rubio, 「グラフェンにおける高次高調波発生の理論的解析」、日本物理学会第 75 回年次大会(現地開催中止)、名古屋大学東山キャンパス、名古屋、2020 年 3 月 16 - 19 日。
21. 佐藤駿丞、「固体におけるアト秒電子ダイナミクスの理論的研究」、日本物理学会第 75 回年次大会(現地開催中止)、名古屋大学東山キャンパス、名古屋、2020 年 3 月 16 - 19 日。

(4) 著書、解説記事等

1. T. Nakatsukasa and N. Schunck, “Chapter 6: Large-amplitude collective motion” in Book “Energy density functional methods for atomic nuclei”, IOP Publishing, Bristol, UK, 2019.
2. 中務孝、academist Journal (オンライン) 研究コラム「原子核のかたちはまんまるではない」 URL: <https://academist-cf.com/journal/?p=10868>
3. 中務孝、江幡修一郎、鷺山広平、サイエンスよみもの「原子核のかたちから核図表を見る」、日本原子力学会学会誌、Vol. 61, pp. 610 - 615.
4. 日野原伸生、「二重ベータ崩壊原子核行列要素と中性子-陽子対相関」、原子核研究 Vol. 64 No. 2 pp. 102 - 113 (2020).

7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

【異分野間連携】

1. 光科学ソフトウェア SALMON の開発にあたり、高性能計算システム研究部門の朴グループと密接な研究協力をを行なっている。

【産学官連携】

1. 株式会社住友金属鉱山に対して、SALMON を用いた光科学計算に関して学術指導を行った。来年度は共同研究に発展する予定である (矢花)。

2. 科学技術振興機構の A-STEP 経費により、「アイセーフ波長用高効率 Si 受光センサの開発」に関して、東京大学工学系研究科の八井准教授を中心として、筑波大の矢花、浜松ホトニクスを交えた研究を行った（矢花）。

【国際連携】

1. アト秒光科学に関し、グラーツ工科大学（オーストリア・グラーツ）、マックスプランク量子光学研究所（ドイツ・ガルヒング）、及びバルセロナ大学（スペイン）の実験グループと共同研究を行っている（矢花）。
2. 時間依存密度汎関数理論を用いた光と物質の相互作用に関する共同研究をウィーン工科大学（オーストリア）の理論グループと行っている（矢花）。
3. H2020-MSCA-RISE (欧州の国際交流プロジェクト) による光と物質の相互作用の理論と計算に関する国際ネットワーク形成プロジェクト ATLANTIC に基づく国際共同研究を、今年度より開始した。この枠組み、及び関連するプロジェクトで、以下の研究者がセンターに長期滞在した（矢花）。
 - (1) Tzvetta Apostolova ソフィア大学（ブルガリア） 6/14-7/12
 - (2) Thibault Derrien ブラハ大学（チェコ） 6/13-7/12
 - (3) François M.G.J. Coppens、 Laboratoire Physique Théorique (LPT)
UNIVERSITÉ TOULOUSE III - Paul Sabatier (フランス) 9/16-12/15
 - (4) Anton Husakou、 Max Born Institute of Berlin (ドイツ)、 10/10-11/11
 - (5) Guillaume Dechateau、 ポルドー大学 (フランス)、 10/27-11/8
4. Vanderbilt 大学（米国）より、Justin Michael Malave 氏（大学院生）が長期滞在し、研究交流を行った（6/17-8/13）（矢花）。
5. 二国間協力事業 JSPS-NSFC「R プロセスの謎解明に向けた核質量と寿命の研究」2017 - 2019（日本側代表：中務）。
6. 日中韓フォーサイト事業「21世紀の原子核物理」2019-2023（中務）。
7. 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）。
8. 米国・ミシガン州立大学 Nazarewicz 教授と中性子-陽子対相関の共同研究（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. 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）。
11. 光が誘起する非平衡電子ダイナミクスの理論的研究に関し、マックスプランク物質構造ダイナミクス研究所と共同研究を実施（佐藤）。
12. アト秒科学に関して、チューリッヒ工科大学、及びミラノ工科大学と共同研究を実施（佐藤）。
13. 高強度 THz 光の下での励起子ダイナミクスの研究に関し、マサチューセッツ工科大学との共同研究を実施（佐藤）。

8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

1. 二国間協力事業 JSPS-NSFC「R プロセスの謎解明に向けた核質量と寿命の研究」2017 - 2019, のサマリー・ミーティング China-Japan Collaboration Workshop on “Nuclear Mass and Life for Unraveling Mysteries of R-process” (Institute of Theoretical Physics, Beijing, China, Oct. 10 – 12, 2019) を開催（日本から 14 名、中国から 18 名）（中務）。
2. 日中韓フォーサイト事業「21世紀の原子核物理」(JSPS/NRF/NSFC A3 Foresight Program “Nuclear Physics in the 21th Century”) Joint Kickoff Meeting, Kobe, Dec. 6 - 7, 2019) を開催（中

務).

3. International advisory and Program committee for Recent Progress in Many-Body Theories (RPMBT-20) Conference, Toulouse, France, Sept. 9 - 13, 2019 (中務)
4. Chair of organizing committee for 11th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences, Tsukuba, Japan, Oct. 15, 2019 (中務) .

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

平成 31 年度テニュアトラック普及・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

日野原伸生

RIBF UEC 委員 (Vice Chair)

11. その他