

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 (国際テニユアトラック)
研究員	温 凱、Bharat Kumar (2020.4 転出)
学生	大学院生 5 名、学類生 1 名

2. 概要

本グループでは、核子(陽子・中性子)の多体系である原子核や中性子星の構造・反応・応答などの多核子量子ダイナミクスの研究を推進している。安定線 (ハイゼンベルグの谷) から離れた放射性アイソトープの原子核の構造と反応、エキゾチックな励起状態の性質、様々な集団運動の発現機構など、未解決の謎の解明に取り組んでいる。原子核の研究は、フェルミ粒子の量子多体系計算という観点で、物質科学や光科学、冷却原子系の物理と密接なつながりをもつ。また、クォーク・グルーオンのダイナミクスを記述する格子 QCD に基づく核力の計算、軽い原子核の直接計算などが進展する中、素粒子物理学との連携も重要性が増している。ニュートリノの解明に向けたニュートリノレス二重ベータ崩壊の観測実験や、素粒子標準模型のテストに関わる実験などにも原子核理論の精密計算が不可欠とされている。また、元素の起源や星の構造、中性子星の誕生にも関わる爆発的天体現象にも原子核の性質は深く関わり、宇宙物理学とも密接に関係している。さらに、原子力工学分野や応用分野との連携が重要になってきており、本グループ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通する要素をもつ多電子系としての物質科学に関し、理論と計算による研究を行っている。特に高強度レーザーパルス光と物質の相互作用で起こる超高速電子ダイナミクスに対して時間依存密度汎関数理論に基づく研究を行っており、汎用の光科学第一原理シミュレーションソフトウェア SALMON の開発とそれを応用した研究を展開している。

3. 研究成果

【1】 中性子星クラスト構造に対する有限温度平均場アプローチの開発 (柏葉 (D3)、中務)

対凝縮による核子超流動性を考慮した有限温度ハートレー・フォック・ボゴリューボフ (HFB) 計算を離散化した 3 次元座標空間を基底に取るソルバーの開発を実施した。昨年度

までに、大次元行列の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、その有効性を確かめた。今年度は、このアプローチにおいて必要な代数方程式の解法や、最終的に収束した密度における準粒子状態を求める方法などにさらに改良を施した。シフト法の利用により、多数の異なる複素エネルギー点での代数方程式を一度に解くことができるが、ここにも複数のアルゴリズムを試すことで、COCR (Conjugate Orthogonal Conjugate Residual) 法を採用した。

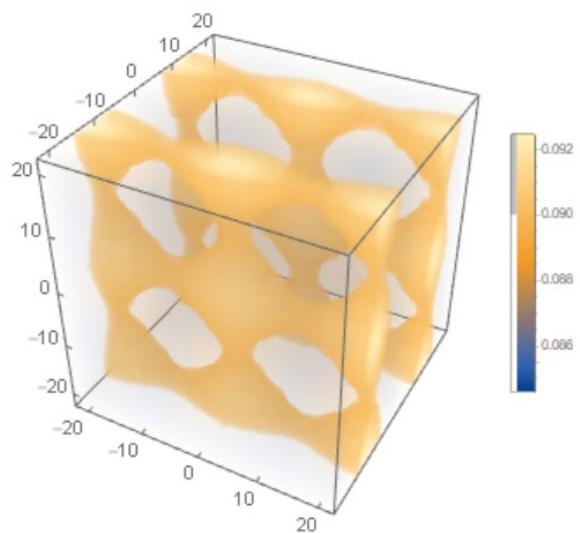


図 1 中性子化学ポテンシャルを $\mu_n = 10 \text{ MeV}$ とした場合の構造。温度 $T = 300 \text{ keV}$ 、計算に用いたセルの大きさは $(45 \text{ fm})^3$ 。

中性子星の内殻（インナー・クラスト）に対する計算を実行した。この計算により、fcc 相を出発点として中性子の化学ポテンシャルを大きくしていくと、その構造が変化し、穴の空いた板状の原子核（スイス・チーズのような構造）が出現することが予想された。計算によって出現した構造を図 1 に示す。

【1】 ^{136}Nd 核の高スピン状態における八重極相関 (C. Petrache (サクレー)、中務)

^{136}Nd の高スピン状態の研究が実験的に進められ、特に近年フィンランド・ユバスキラにおけるガンマ線検出器 JUROGAM II を用いた研究により詳細な分光学的研究が実行された。最新の実験データは、大きな角運動量をもつ高スピン状態において、負パリティの回転バンドが正パリティのバンドに遷移することが明らかにされた。通常高スピンにおいては、電気四重極遷移強度が大きいためにバンド内遷移が圧倒的に優勢であり、別のバンドに崩壊することは異常な振る舞いと言える。この実験データを理解するため、回転殻模型に基づく乱雑位相近似計算を実行した。原子核の回転を早めると、八重極相関の強さは一旦小さくなるが、回転角速度が $\omega = 400 \text{ keV}$ を超えると、再び強くなることが計算で示された。これは、基底バンドが構造を変化させて s バンドと呼ばれるバンドに変化することに伴っている (図 2)。この計算結果は、実験で観測された高スピンでのバンド間遷移が、回転にアシストされた八重極相関に起因するという可能性を示唆している。周辺核を含めた広い領域での実験的・理論的研究を現在進めている。

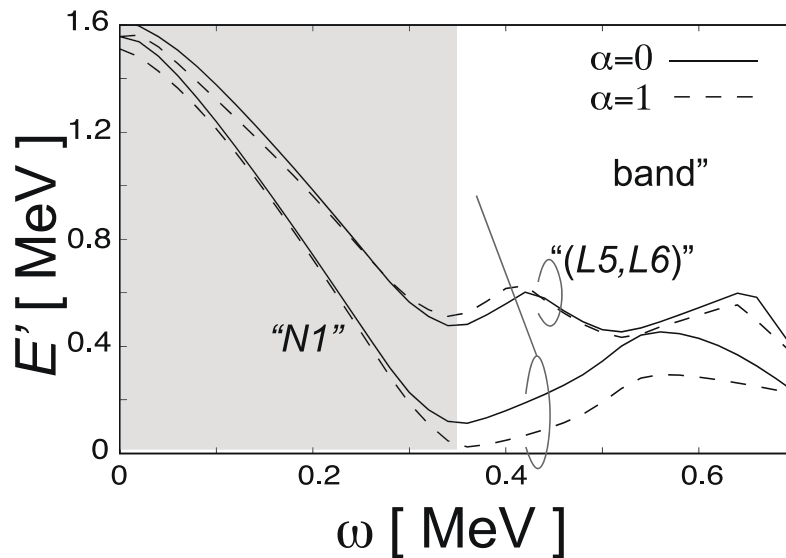


図 2 イラスト・バンド上の八重極振動状態に関する回転殻模型+準粒子乱雑位相近似計算の結果。回転角速度が $\omega = 0.35$ MeV 付近でイラスト・バンドが構造変化を起こし、振動励起状態の集団性が回復することを示唆している。

【2】 ベータ崩壊への pn 対相関効果の解析（阿部（M2）、日野原、中務）

対相関は、核内核子がペアを作ることによってエネルギーを下げる相関であり、通常は同種粒子対（陽子対、中性子対）を考える。しかし、陽子と中性子がほぼ同数の原子核では、これに加えて陽子と中性子が対を作る相関も重要となる。また、r 過程、rp 過程などの元素合成過程において重要な役割を果たすベータ崩壊は、原子核の中性子数・陽子数とその偶奇性を変えることから、対相関はベータ崩壊の性質に影響することが考えられる。本研究では、so(8)模型と呼ばれる模型を用いて、この影響を解析した。アイソスカラー型・アイソベクトル型のすべての s 波対相関を厳密に考慮するモデルとなっている。これまで、中性子数が陽子数よりも大きな原子核では、アイソスカラー型対相関の影響は小さいと考えられてきたが、この解析により、ベータ崩壊に主要な成分であるガモフ・テラー遷移は、アイソスカラー型対相関の強さに敏感であり、その強度を強めることが分かった。

【3】 ^{12}C と ^{20}O の衝突におけるポテンシャルエネルギーと超流動性（橋本、晏（北京師範大））

今年度は、炭素 ^{12}C と酸素 ^{20}O の衝突におけるポテンシャルエネルギーについて超流動性の効果を調べる方法を開発してきた。昨年度から開発している密度依存 TDHFB の方法（DCTDHFB）を実際に炭素 ^{12}C と酸素 ^{20}O の融合過程に適用してふたつの原子核の間のポテンシャルエネルギーを求め、特に、対相関テンソルがポテンシャルエネルギーに引き起こす影響を調べてきた。図 3 では、TDHFB による衝突過程での密度変化を再現する “density constrained” のポテンシャル曲線と密度変化を初期状態に固定した “frozen

density” のポテンシャル曲線がほぼ同じ形で表現されている。一方、対相関テンソルも考慮した場合 “density + pairing constrained” の曲線は、距離が 9 fm 以下で浅くなる傾向が見える。今後の計算精度の向上によりポテンシャル曲線を明確にしていく。

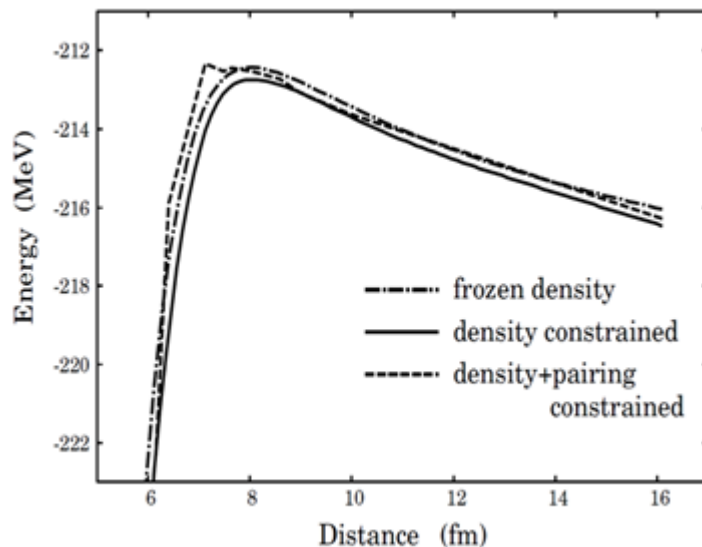


図 3 炭素 ^{12}C と酸素 ^{20}O の TDHFB 計算におけるポテンシャル曲線。一点鎖線は固定密度の参照線、実線は TDHFB の密度分布を用いたポテンシャル曲線、破線は対テンソルの効果を入れた場合のポテンシャル曲線。

【4】 KIDS 密度汎関数を用いた変形核の計算 (Gil (高麗大), 日野原、Hyun (大邱大), 吉田 (京都大))

核物質の性質を表現できるように低エネルギー少数核子系有効理論に基づいて開発された原子核密度汎関数 KIDS (Korea:IBS-Daegu-Sungkyunkwan)では核物質のほか、球形核についてその有効性が示されてきた。KIDS 密度汎関数を軸対称変形の記述が可能な原子核密度汎関数法計算コード HFBTHO に実装し、 $^{60-160}\text{Nd}$ 同位体の計算を行った。束縛エネルギー、半径、2 中性子分離エネルギー、四重極変形などを系統的に分析し、他の密度汎関数と同程度の精度で変形核も含めてこれらの基底状態での実験データを再現・予測できることを示した。また図 4 のように束縛エネルギーの実験との差は中性子過剰核側に行くにつれて大きくなるが、対称エネルギーの slope parameter の値を変えることによって、実験データとの差の同位体依存性を小さくすることができることを示した。本研究は日中韓フォーサイト事業「21 世紀の原子核物理学」の一環として韓国との共同研究によって進められた。

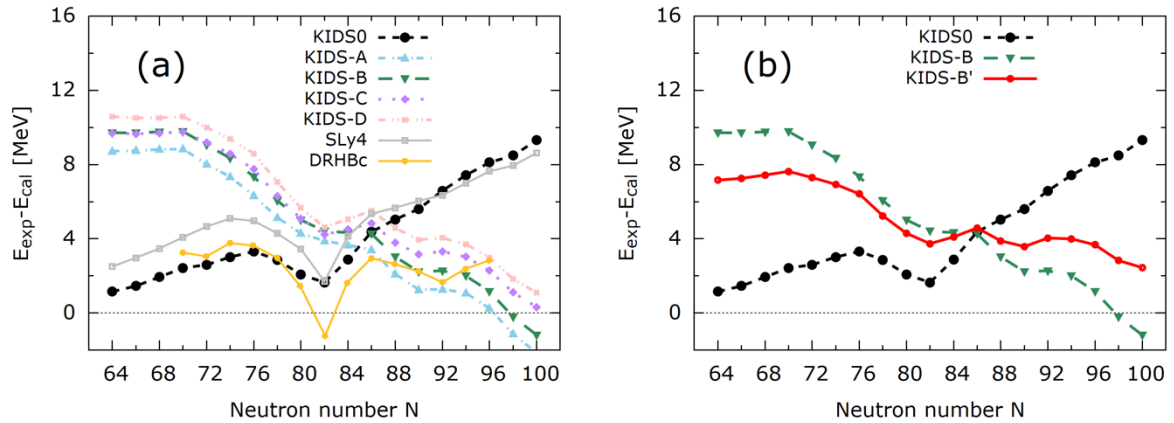


図4 Nd 同位体の基底状態エネルギーの実験値と理論値の差の同位体依存性。KIDS0 の他に核物質の状態方程式パラメータを変えた計算結果も示す。

【5】 ニュートリノを2つ放出する二重ベータ崩壊原子核行列要素の有限振幅法による効率的な計算（日野原）

ニュートリノレス二重ベータ崩壊の原子核行列要素の値の精密な評価はマヨラナニュートリノの有効質量を導出する上で重要であるが、この行列要素はアイソスカラー型の中性子—陽子対相関によって強く抑制されるため、この相関の相互作用定数を決定する必要がある。ニュートリノを2つ放出する二重ベータ崩壊は豊富に実験データがあり、ニュートリノの質量と関係するニュートリノレス二重ベータ崩壊と同様にアイソスカラー型の中性子—陽子対相関によって抑制されるため、アイソスカラー型の相互作用の決定に向け、

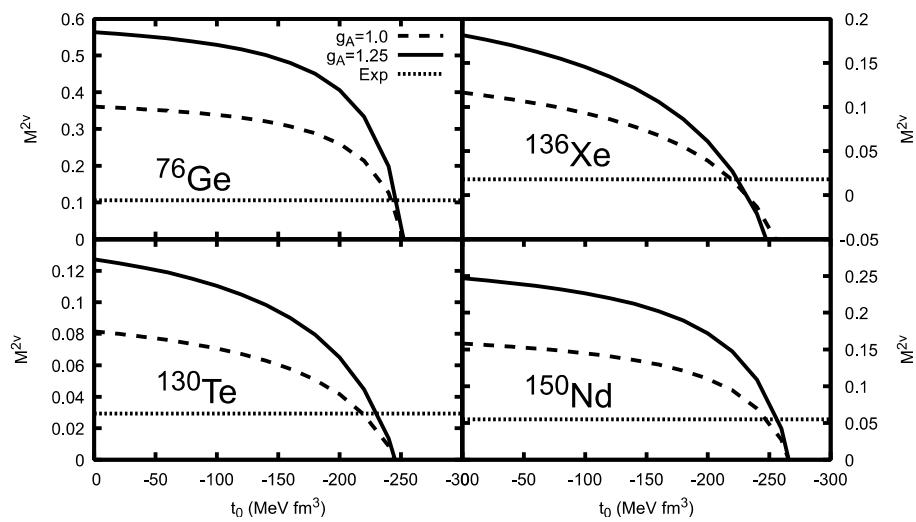


図5 ^{76}Ge , ^{130}Te , ^{136}Xe , ^{150}Nd のニュートリノを2つ放出する二重ベータ崩壊原子核行列要素のアイソスカラー対相関強度依存性。有限振幅法による計算。

有限振幅法によって求めた応答関数の二重複素積分によってこの原子核行列要素を効率よく計算する手法の実装を行っている。今年度は現実的なサイズの一粒子模型空間での計算のためのコードの並列化、収束性のよい積分経路の設定および離散化の方法を実装し、 ^{76}Ge , ^{130}Te , ^{136}Xe , ^{150}Nd の二重ベータ崩壊での原子核行列要素の中性子—陽子対相関依存性の先行研究との比較を行った。

[6] Calculation of the microscopically derived collective inertial masses for nuclear reactions in the presence of time-odd mean-field potential and paring interaction (Wen)

Collective inertial mass coefficients with respect to translational, relative, and rotational motions are microscopically calculated, based on the adiabatic self-consistent collective coordinate (ASCC) method. The impact of the time-odd component of the mean-field potential on the inertial masses are investigated. The results are compared with those calculated with other methods, such as the cranking formulae. The inertial masses based on the ASCC method reproduce the exact total nuclear mass for the translational motion as well as the expected asymptotic values for the relative and rotational motions, regardless of the existence of the time-odd component. On the other hand, the cranking formulae fail to do so when the time-odd components are present. The astrophysical S-factors are calculated with different inertial masses and compared with the conventional results.

At the same time, I was applying the Adiabatic Self-consistent Collective Coordinate (ASCC) method to Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB) States, in order to calculate the optimal collective motion path, as well as the collective inertial mass parameters in the presence of paring interaction, preliminary results have been obtained.

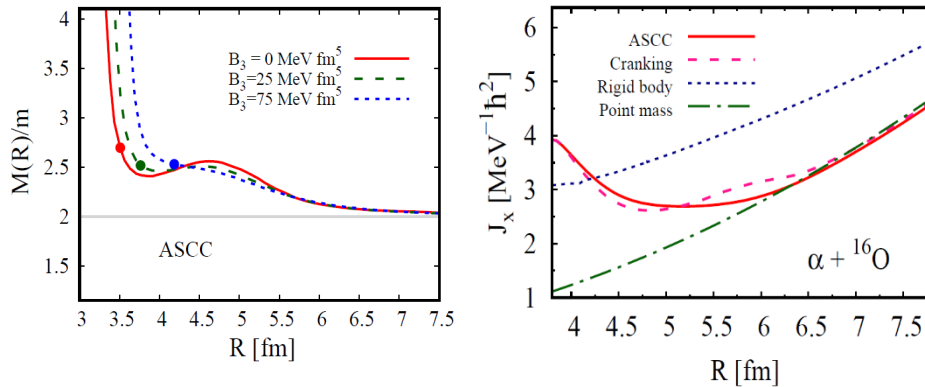


図 6 (Left panel) Inertial mass $M(R)$ of relative motion for the reaction $\alpha + \alpha$ as a function of the relative distance R , in the presence of time-odd mean-fields with different strength. (Right panel) Rotational moments of inertias calculated in different ways as a function of relative distance R , for the system $\alpha + ^{16}\text{O}$.

【7】 Warm dense matter and cooling of supernovae remnants (Kumar (HBNI), Das (HBNI), Biswal (Xiamen Univ), Kumar (CCS/NIT Rourkela), S.K. Patra (HBNI))

I recently worked with my colleague on “Investigation of the thermal effects on the nuclear matter.” This paper aims to explore the thermal properties of dense matter and the cooling mechanism of supernovae remnants through the direct Urca process. We used RMF formalism as the basic ingredient to obtain the EoS for warm dense matter and the newly born proto-neutron star. The acquired EoS has been used further to explore the various nuclear matter properties. We also extend our calculations to study neutrino emissivity (see Figure 7), responsible for cooling the newly born dense star via the direct Urca process.

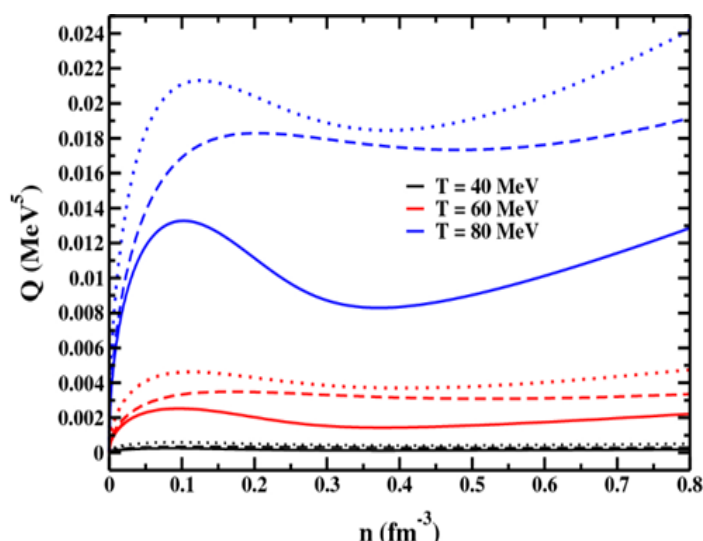


図 7 Neutrino emissivity at different temperatures as a function of nucleon density.

【8】 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、佐藤、山田(篤)、竹内、山田(俊)、廣川、朴)

パルス光と物質の相互作用を、物質科学の第一原理計算法の一つである時間依存密度汎関数理論(TDDFT)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 2017 年 6 月に v.0 を公開、同年 11 月に v.1 を公開したが、この時点では、筑波大と分子研で開発を行ってきたコードが内部に共存するものであった。2020 年 7 月に、v.2 を公開した。このバージョンで、コード内部は全面的に書き直され、孤立系(分子・ナノ粒子)から周期系(結晶)まで統一的に扱えるものとなった。これにより、少なくともこの先数年間は安定して SALMON を維持発展させる基盤を整えられた。

2021 年度より、世界一位の能力を持つ「富岳」の稼働が始まるが、SALMON はすでに富岳へ

の対応を十分と進めており、2019 年度末の段階で 10,000 原子を超える物質とパルス光の相互作用の計算が可能であることを示している。また SALMON は、過去に GPU 対応していた時期があったが現在の v.2 は GPU を利用することができない。そこで本年度、コードの維持発展が容易な OpenACC を用いた GPU 化に取り組み、時間発展計算の基本部分に関する GPU 化が完了した。来年度さらに、基底状態計算、スピン軌道力を含んだ計算、及び MPI と GPU を用いたハイブリッドな並列加速計算が可能となるよう、コードの改良を進める計画である。

SALMON の利用促進に向けた取り組みとして、ウェブページの改修を行うとともに利用方法に関するビデオを作成し、YouTube に掲載した。SALMON を普及する活動として、9 月と 3 月に大阪大学が実施するコンピュテーショナル・マテリアルズ・デザインワークショップにおいて、また 2 月には高度情報科学技術研究機構のサポートのもと大阪大学のスーパーコンピュータを用いてハンズオンチュートリアルを実施した。

【9】 グラファイトの非線形光応答(矢花、植本（神戸大工）)

グラファイトの単層膜であるグラフェンは光科学の分野でも様々な応用が期待されているが、その可飽和吸収特性はモード同期レーザー素子としてすでにデバイス応用がなされている。またグラファイトを用いた炭素繊維は軽量で高強度な材料となるが加工が難しく、高強度レーザーを用いたレーザー加工が有効である。このような高強度パルスレーザーとグラファイト薄膜（グラフェン多層膜）の相互作用を原子レベルから理解するため、SALMON を用いた解析を行い、その結果を論文に発表した。¹⁾この研究は、神戸大学の研究者、及び炭素材料の加工や可飽和吸収の応用に関する実験を行っている IHI 社の研究者と共同で行った。

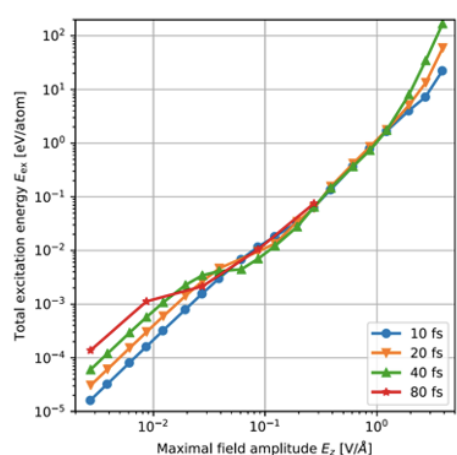


図 8 グラファイト単位セルにパルス電場を印加した時の電子励起エネルギー。

図 8 に、様々な電場強度とパルス長を持つパルス電場をグラファイトの単位セルに印加した時に起こる電子励起エネルギーを示している。電場強度が 0.01 V/Å から 1 V/Å に至る間では、電場から電子へのエネルギー移行がパルス長を長くしても増加しないことがわか

る。このようにして、SALMON を用いた第一原理計算により、グラファイトで可飽和吸収が起こる条件を非経験的に特定することに成功した。さらに光電磁場の伝搬と電子ダイナミクスを同時に解き進める計算方法を用いることで、可飽和吸収が起きる際にパルス光が内部まで強度を失わずに到達する様子を示した。このような知見は、炭素素材のレーザー加工の初期過程を理解する上で有益な情報を与えている。

【10】 時間依存密度汎関数理論における金属の光応答に対する電子-格子相互作用の影響 (山田 (篤)、矢花)

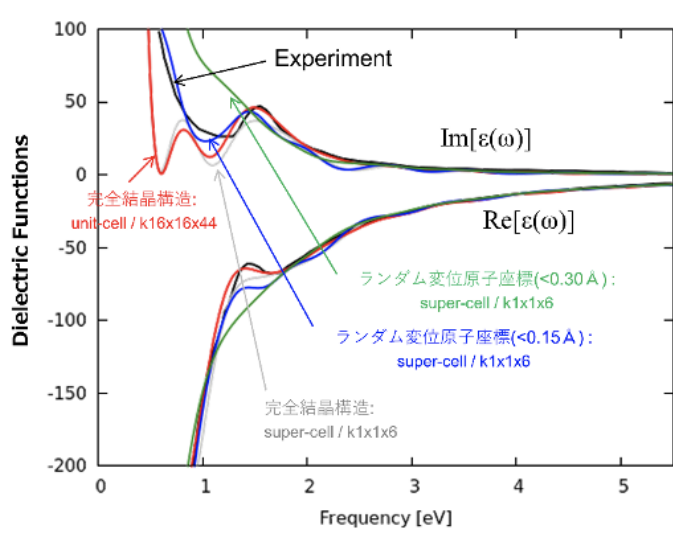


図 9 TDDFT に原子位置の変位（温度効果）を考慮して計算したアルミニウム誘電関数。

TDDFT を用いたこれまでの研究の多くはバンドギャップのある誘電体の光応答であったが、今度はアルミニウム金属に対する研究に着手し、最初の段階としてまず弱い光を用いた線形応答による誘電関数を検討した。通常は完全な結晶構造の系にデルタ関数型の電場を与えて起こる電子ダイナミクスから誘電関数を得るが、金属の $\omega=0$ eV 周辺の広い幅のスペクトルを再現することができない。金属内の古典電子モデル等によればこれは電子とイオンの衝突に由来しており、誘電関数の再現のためにはその効果を取り入れる必要がある。図 9 に示されているように、温度効果としてイオン配置を結晶構造からランダムに変位させたスーパーセルの系の計算を行うと、 $\omega=0$ 周辺の幅が再現できることが得られた。結晶構造からのランダムな変位によりバンド間遷移のエネルギーがシフトした不均一広がりによる幅広いスペクトルを再現したためである。これにより TDDFT における電子-格子の相互作用の理解が深まり、その光応答への影響を検証することができた。バンドギャップのある系や光励起後の伝導帯電子に対する計算が進行中であり、これらの比較から電子-格子相互作用の基礎的な議論を展開した。

【11】 ナノ薄膜における高次高調波発生第一原理計算 (山田 (俊)、矢花)

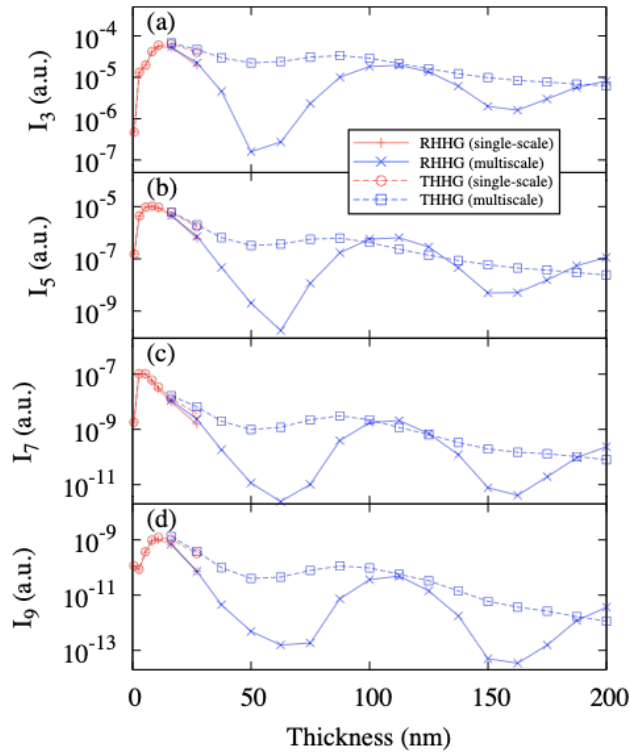


図 10 シリコン薄膜に 1.5eV のパルス光を照射した時に反射波・透過波に発生する高次高調波の膜厚依存性。

高次高調波発生は、高強度パルス光と物質の相互作用で最も興味深い非線形現象であり、アト秒科学の創生など基礎科学を発展させるとともに、コンパクトな X 線源などへの応用が期待されている。最近 10 年間は、すでに多くの研究がなされている気相物質（原子や分子）に加え、固体や 2 次元薄膜など凝縮系からの高次高調波発生に高い関心が持たれている。高密度な物質である固体からは、高強度な高次高調波の発生が期待されるが、どのような厚さの物質からどの程度の強度の高次高調波が発生するのか、また透過波と反射波に含まれる高次高調波はどのように違うのかといった基本的な性質すら良く理解されていないのが現状である。

我々は SALMON を用いて、最も単純な物質であるシリコンの薄膜からの高次高調波発生（HHG）の膜厚依存性、特に高次高調波を最大化する膜厚を調べた。³⁾ 薄膜に高強度パルス光を照射した際に観測される反射波及び透過波に含まれる高次高調波は、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 HHG 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電子状態の表面効果による HHG の変調が顕著になると考えられる。そこで我々は、電子系の表面効果と光伝搬の効果を統一的に記述可能な微視的 Maxwell-TDDFT 法を用いて Si 薄膜の HHG に関する第一原理計算を行った。さらに、表面電子状態の効果や光伝搬の効果を探るため、巨視的 Maxwell-TDDFT 法、Maxwell 方程式に対する 2 次元近似の方法などを用い、結果を比較した。図 10 に、反射波・透過波に含まれる 3 次から 9 次の高次高調波成分の膜厚依存性を示した。表面効果が重要となる膜厚の小さい領域では微視的 Maxwell-TDDFT 法（赤）、膜厚の大きい領域では表面効果を

無視した巨視的 Maxwell-TDDFT 法（青）を用いている。この膜厚依存性は線形領域での透過率と概ね相関しており、前面・裏面における基本波の強度が反射・透過 HHG の強度を決定していることが明らかになった。また、高次高調波を最大化する膜厚は概ね 2 から 15nm 程度であり、Maxwell 方程式を 2 次元近似する理論を用いて、この高次高調波の強度が最大となる膜厚を、バルク伝導率の値から理解することに成功した。

【12】 サブ nm ギャップを持つプラズモニックメタ表面の非線形光学応答（竹内、矢花）

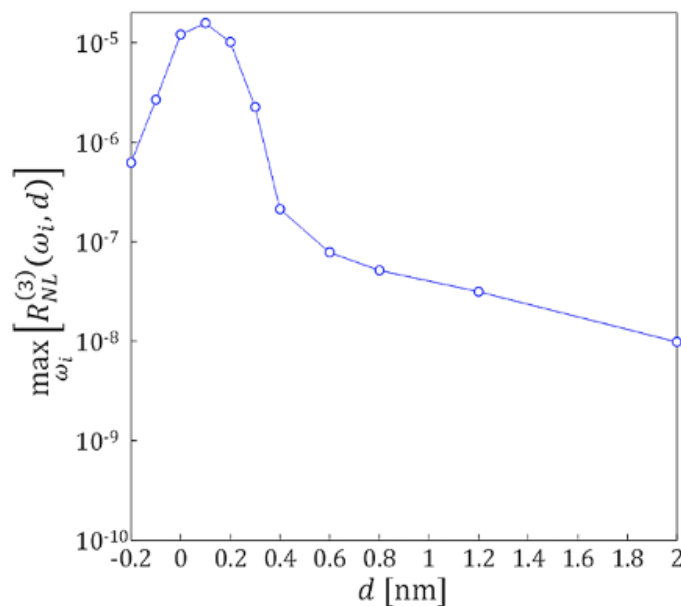


図 11 サブ nm ギャップを持つメタ表面の 3 次非線形反射率。

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。メタ表面を構成する金属ナノ粒子間の距離(ギャップ)を縮めることで、光はギャップに局在して増強し、より特異な光物性を発現する。特にこの 2-3 年、実験系で自己組織化により 1nm 以下(サブ nm)のギャップを持つメタ表面が作成され、高い非線形光学応答の発現から基礎科学的にも応用的にも注目を集めている。しかし一方、このようなサブ nm の空間スケールでは量子力学的効果が顕著に表れ、古典電磁気学だけにに基づく従来の理論計算が破綻する。そのため、サブ nm のギャップを持つメタ表面に対する理論研究は難航しており、その発現する光物性については上記の一部の実験により氷山の一角が明らかにされたのみだった。

そこで我々は SALMON を用い、量子力学的効果がメタ表面の非線形光学応答に及ぼす影響を明らかにした。図 11 では、横軸はギャップ、縦軸は 3 次の非線形反射率を示す。この図より、ギャップ 0.6nm までは単調増加することが分かる。この増加傾向は、ギャップでの強い光増強に起因するものであり、実験系の先行研究とも定性的に一致する。一方、ギャップ 0.4nm 未満の領域では、は急激に上昇し、特にピークとなるギャップ

0.1nm では 0.6nm に比べ約千倍高い が得られている。ここでの増加傾向は、ギャップでの光増強だけでは説明できず、金属ナノ粒子間を流れるトンネル電流が持つ高い非線形性に起因する。このような高い非線形効果は、光情報素子の高効率化に役立つため、応用面において大いに期待できる。本成果は国際誌 Scientific Reports 誌に掲載された。

【13】 光が誘起する超高速励起子ダイナミクスの理論的解析（佐藤）

我々は、光が固体物質中に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、ミラノ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が固体 MgF_2 に誘起する超高速な励起子のダイナミクスについて調べた。実験では、アト秒過渡反射分光と呼ばれる時間分解分光手法を固体 MgF_2 に適用することで、赤外フェムト秒レーザーが引き起こす反射スペクトルの変化を調べた。実験によって得られた過渡反射スペクトルを図 12(左部)に示した。赤外フェムト秒レーザーが固体 MgF_2 の励起子ピーク(55eV)近傍で超高速に反射スペクトルを変調していることが明らかとなった。さらに、この過渡反射スペクトルを Wannier-Mott 模型に基づく量子ダイナミクス計算により解析したところ(図 12 右部)、光が誘起する励起子ダイナミクスにおいて、(i)励起子の離散エネルギー構造(原子的描像)に由来する比較的遅いフェムト秒の光学応答と(ii)電子・正孔の連続エネルギー構造(固体的描像)に由来するに速いアト秒の光学応答が共存していることが明らかとなった。本研究により明らかとなった励起子ダイナミクスにおける「原子的な描像」と「固体的な描像」の共存は、励起子を光制御するための新しい方法論を示唆するものであり、超高速光物性制御技術の基盤となるものである。本共同研究の成果は、論文“Unravelling the intertwined atomic and bulk nature of

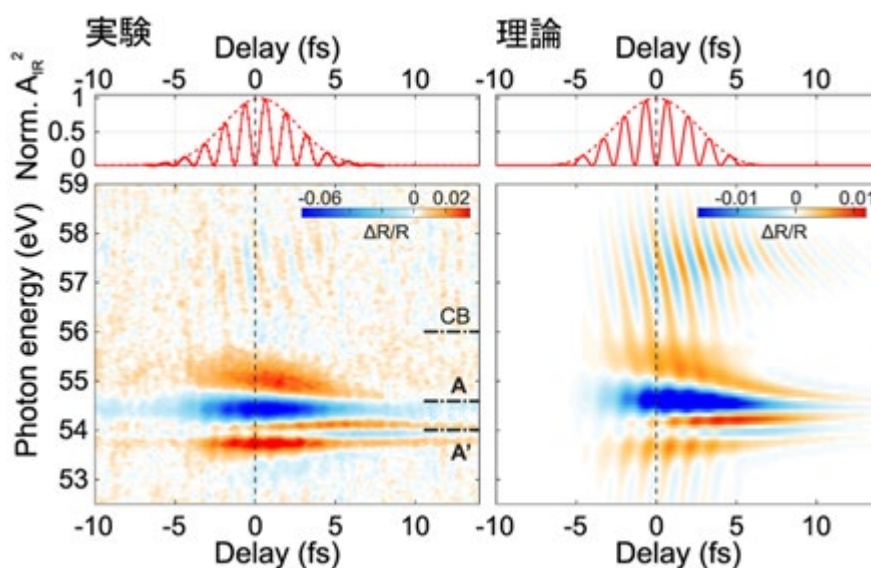


図 12 Created by modifying “Nat. Commun.12, 1021 (2021)” (Licensed under CC BY 4.0) 固体 MgF_2 に対するアト秒過渡反射スペクトル。実験に用いられたフェムト秒パルスと誘起された反射スペクトル変化(左図)、及び理論計算結果(右図)が示されている。

localised excitons by attosecond spectroscopy”として Nature Communications 誌より発表された。

【14】 グラフェンからの高次高調波発生 の理論的解析 (佐藤)

近年、極限的な非線形光学現象として固体からの高次高調波発生が大きな注目を集めている。高調波発生は、光が物質に照射された際に入射した光の光子エネルギーの整数倍のエネルギーを持った光が放出される現象であり、高強度領域においては極限的な光のアップコンバージョン過程として新奇な光源開発の観点から精力的に研究が進められている。本研究では、固体からの高次高調波発生 の微視的機構を解明するため、中赤外楕円偏光照射下においてグラフェンから発生する高調波を量子マスター方程式に基づく電子ダイナミクス計算により解析した。図 13(a)に、シミュレーションによって得られた 7 次高調波の発生強度の照射光楕円率依存性を示した。その結果、先行研究の実験[N. Yoshikawa, et al., Science **365**, 736 (2017)]で報告されている楕円偏光による高調波発生 の増強を再現することが出来た。さらに理論計算に基づく微視的な解析を行うことで、楕円偏光が引き起こすバンド内遷移とバンド間遷移が非線形に結合することで高次高調波発生が増強されていることが明らかとなった。また、グラフェンの化学ポテンシャルを変調することで、バンド内遷移・バンド間遷移の結合によって生じる非線形過程の干渉を制御し、高次高調波発生をさらに増強できる可能性を理論的に示した(図 13(b))。本研究成果は、固体高次高調波発生 の微視的機構の理解を発展させるとともに、その新たな増強機構を提案するものである。本共同研究の成果は、論文 “High-order harmonic generation in graphene: Nonlinear coupling of intraband and interband transitions”として Physical Review B 誌より発表された。

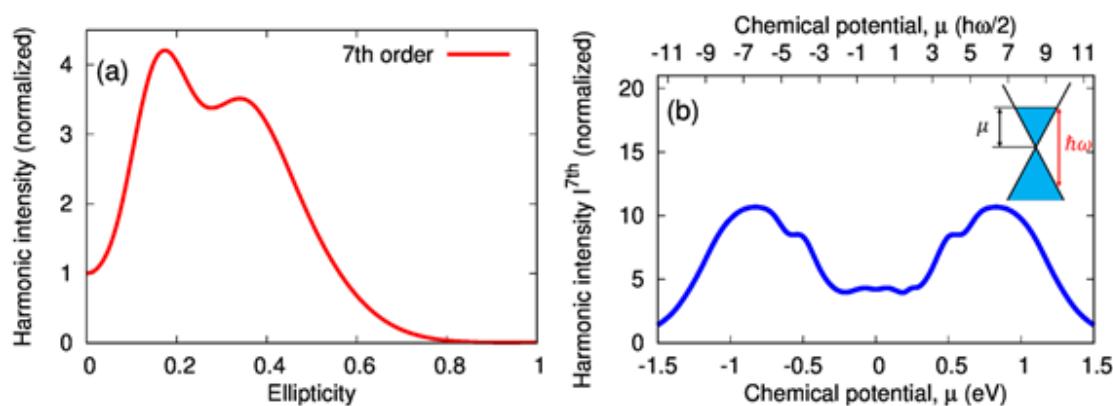


図 13 (a)グラフェンから発生する 7 次高調波強度の励起光楕円率依存性。(b)グラフェンから派生する 7 次高調波の化学ポテンシャル依存性。

4. 教育

学位

1. 阿部克、修士（理学）「ベータ崩壊強度における p - n 対相関の効果」
2. 杉浦大航、修士（理学）「1次元周期ポテンシャル模型による高次高調波発生分析」

集中講義

1. T. Nakatsukasa, “Multi-facet properties of nuclei” (Dec. 1), “Basic concepts of nuclear energy density functional theories” (Dec. 4), Lectures at Peking University, Beijing, China (Online), December 1 & 4, 2020.

5. 受賞、外部資金、知的財産等

受賞

外部資金

1. 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、全年度直接経費：13,200 千円（2020 年度直接経費：4,200 千円）、「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」.
2. 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、全年度直接経費：2,300 千円（2020 年度直接経費：1,200 千円）、「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」.
3. 日本学術振興会科学研究費・基盤研究(C)、日野原 伸生、代表、2020 - 2023 年、全年度直接経費：3,300 千円（2020 年度直接経費：900 千円）、「原子核密度汎関数理論による中性子過剰不安定核の対相関の研究」.
4. 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「地下から解き明かす宇宙の歴史と物質の進化」)(公募研究)、日野原 伸生、代表、2020 - 2021 年、全年度直接経費：1,800 千円（2020 年度直接経費：900 千円）、「有限振幅法を用いた原子核密度汎関数理論による二重ベータ崩壊行列要素計算」.
5. 日本学術振興会科学研究費・国際共同研究加速基金(国際共同研究強化(A))、日野原 伸生、代表、2020 - 2022 年、全年度直接経費：6,300 千円、「中性子-陽子対密度汎関数の最適化」.
6. 日本学術振興会科学研究費・若手研究、温 凱、代表、2020 - 2023 年、全年度直接経費：2,300 千円（2020 年度直接経費：500 千円）、「Macroscopic Nuclear Dynamics with Microscopic Foundations」.
7. 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、全年度直接経費：177,500 千円（2020 年度直接経費：35,260 千円）.

8. 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、2018 - 2027 年度、全年度直接経費：22,727 千円（2020 年度直接経費：2,170 千円）。
9. 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、2019 - 2020 年度、全年度直接経費：3,659 千円（2020 年度直接経費：2,750 千円）。
10. 日本学術振興会科学研究費・基盤研究(B)「第一原理計算が拓く多元的な極限ナノフォトニクス」、矢花一浩、2020 - 2023 年度、全年度直接経費：13,400 千円（2020 年度直接経費：4,600 千円）。
11. 日本学術振興会科学研究費・若手研究、佐藤駿丞、代表、2020 - 2023 年度、全年度直接経費：3,300 千円（2020 年度直接経費：1,300 千円）、「光による電子構造制御の第一原理計算」。

6. 研究業績

(1) 研究論文

A) 査読付き論文

1. Y. Kashiwaba, T. Nakatsukasa, “Coordinate-space solver for finite-temperature Hartree-Fock-Bogoliubov calculations using the shifted Krylov method”, *Phys. Rev. C* **101**, 045804 (2020).
2. C.M. Petrache, N. Minkov, T. Nakatsukasa, B. F. Lv, A. Astier, E. Dupont, K. K. Zheng, P. Greenlees, H. Badran, T. Calverley, D. M. Cox, T. Grahm, J. Hilton, R. Julin, S. Juutinen, J. Konki, J. Pakarinen, P. Papadakis, J. Partanen, P. Rahkila, P. Ruotsalainen, M. Sandzelius, J. Saren, C. Scholey, J. Sorri, S. Stolze, J. Uusitalo, B. Cederwall, A. Ertoprak, H. Liu, S. Guo, M. L. Liu, J. G. Wang, X. H. Zhou, I. Kuti, J. Timár, A. Tucholski, J. Srebrny, and C. Andreoiu et al., “Signatures of moderately enhanced octupole correlations at high spin in ^{136}Nd ”, *Phys. Rev. C* **102**, 014311 (2020).
3. K. Washiyama, N. Hinohara, and T. Nakatsukasa, “Finite-amplitude method for collective inertia in spontaneous fission”, *Phys. Rev. C* **103**, 014306 (2021).
4. T. Nakatsukasa, Y. Kashiwaba, F. Ni, K. Washiyama, K. Wen, N. Hinohara, “Nuclear structure and reaction with quantum shape fluctuation”, *JPS Conf. Proc.* **32**, 010024 (2020).
5. 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* **495**, 4893-4903 (2020).
6. Y. Hashimoto, “Friction coefficient in reaction $^{20}\text{O}+^{20}\text{O}$ by Gogny-TDHF method”, *INFORMATION* **23**, 233-245 (2020).

7. J. Ha, T. Sumikama, F. Browne, N. Hinohara, A. M. Bruce, S. Choi, I. Nishizuka, S. Nishimura, P. Doornenbal, G. Lorusso, P.-A. Söderström, H. Watanabe, R. Daido, Z. Patel, S. Rice, L. Sinclair, J. Wu, Z. Y. Xu, A. Yagi, H. Baba, N. Chiga, R. Carroll, F. Didierjean, Y. Fang, N. Fukuda, G. Gey, E. Ideguchi, N. Inabe, T. Isobe, D. Kameda, I. Kojouharov, N. Kurz, T. Kubo, S. Lalkovski, Z. Li, R. Lozeva, H. Nishibata, A. Odahara, Zs. Podolyák, P. H. Regan, O. J. Roberts, H. Sakurai, H. Schaffner, G. S. Simpson, H. Suzuki, H. Takeda, M. Tanaka, J. Taprogge, V. Werner, and O. Wieland, “Shape evolution of neutron-rich $^{106,108,110}\text{Mo}$ isotopes in the triaxial degree of freedom”, *Phys. Rev. C* **101**, 044311 (2020) (Editors’ Suggestion).
8. Y. Shi, N. Hinohara, and B. Schuetrumpf, “Implementation of nuclear time-dependent density-functional theory and its application to the nuclear isovector electric dipole resonance”, *Phys. Rev. C* **102**, 044325 (2020).
9. A. Kumar, H.C. Das, S.K. Biswal, B. Kumar, S.K. Patra, “Warm dense matter and cooling of supernovae remnants”, *Eur. Phys. J. C* **80**, 775 (2020).
10. A. Quddus, G. Panotopoulos, B. Kumar, S. Ahmad, and S. K. Patra, “GW170817 constraints on the properties of a neutron star in the presence of WIMP dark matter”, *J. Phys. G* **47** (2020) 095202.
11. Takashi Takeuchi, Kazuhiro Yabana, “Extremely large third-order nonlinear optical effects caused by electron transport in quantum plasmonic metasurfaces with subnanometer gaps”, *Sci. Rep.* **10**, 21270 (2020).
12. Shuta Kitade, Atsushi Yamada, Ikki Morichika, Kazuhiro Yabana, Satoshi Ashihara, “Nonlinear Shift in Phonon-Polariton Dispersion on a SiC Surface”, *ACS Photonics* **8**, 152 (2020).
13. Shunsuke Yamada, Kazuhiro Yabana, “Symmetry properties of attosecond transient absorption spectroscopy in crystalline dielectrics”, *Phys. Rev. B* **101**, 165128 (2020).
14. Bárbara Buades, Antonio Picón, Emma Berger, Iker León, Nicola Di Palo, Seth L. Cousin, Caterina Cocchi, Eric Pellegrin, Javier Herrero Martin, Samuel Mañas-Valero, Eugenio Coronado, Thomas Danz, Claudia Drax, Mitsuharu Uemoto, Kazuhiro Yabana, Martin Schultze, Simon Wall, Michael Zürich, Jens Biegert, “Attosecond state-resolved carrier motion in quantum materials probed by soft x-ray XANES”, *Appl. Phys. Rev.* **8**, 11408 (2021).
15. Atsushi Yamada, Kazuhiro Yabana, “Modulation of probe signal in coherent phonon detection revisited: Analytical and first-principles computational analyses”, *Phys. Rev. B* **101**, 214313 (2020).
16. M. Uemoto, S. Kurata, N. Kawaguchi, K. Yabana, “First-principles study of ultrafast and nonlinear optical properties of graphite thin films”, *Phys. Rev. B* **103**,

085433 (2021).

17. Chang-Ming Wang, Nicolas Tancogne-Dejean, Massimo Altarelli, Angel Rubio, and Shunsuke A. Sato, “Role of electron scattering on the high-order harmonic generation from solids”, *Phys. Rev. Res.* **2**, 033333 (2020).
18. Jiaojian Shi, Edoardo Baldini, Simone Latini, Shunsuke A. Sato, Yaqing Zhang, Brandt C. Pein, Pin-Chun Shen, Jing Kong, Angel Rubio, Nuh Gedik, and Keith A. Nelson, “Room Temperature Terahertz Electroabsorption Modulation by Excitons in Monolayer Transition Metal Dichalcogenides”, *Nano Lett.* **20**, 5214 (2020).
19. S. A. Sato, U. De Giovannini, S. Aeschlimann, I. Gierz, H. Hübener and A. Rubio, “Floquet states in dissipative open quantum systems”, *J. Phys. B* **53**, 225601 (2020).
20. Yasuyuki Sanari, Hideki Hirori, Tomoko Aharen, Hirokazu Tahara, Yasushi Shinohara, Kenichi L. Ishikawa, Tomohito Otobe, Peiyu Xia, Nobuhisa Ishii, Jiro Itatani, Shunsuke A. Sato, Yoshihiko Kanemitsu, “Role of virtual band population for high harmonic generation in solids”, *Phys. Rev. B* **102**, 041125(R) (2020).
21. Umberto De Giovannini, Hannes Hübener, Shunsuke A. Sato, Angel Rubio, “Direct measurement of electron-phonon coupling with time-resolved ARPES”, *Phys. Rev. Lett.* **125**, 136401 (2020).
22. Dongbin Shin, Shunsuke A. Sato, Hannes Hübener, Umberto De Giovannini, Noejung Park, Angel Rubio, “Dynamical amplification of electric polarization through nonlinear phononics in 2D SnTe”, *npj Computational Materials* **6**, 182 (2020).
23. M. Nuske, L. Broers, B. Schulte, G. Jotzu, S. A. Sato, A. Cavalleri, A. Rubio, J. W. McIver, L. Mathey, “Floquet dynamics in light-driven solids”, *Phys. Rev. Res.* **2**, 043408 (2020).
24. Shunsuke A. Sato, “First-principles calculations for attosecond electron dynamics in solids”, *Comput. Mat. Sci.* **194**, 110274 (2021).
25. Shunsuke A. Sato, Hideki Hirori, Yasuyuki Sanari, Yoshihiko Kanemitsu, Angel Rubio, “High-order harmonic generation in graphene: nonlinear coupling of intra and interband transitions”, *Phys. Rev. B* **103**, L041408 (2021).
26. Matteo Lucchini, Shunsuke A. Sato, Giacinto D. Lucarelli, Bruno Moio, Giacomo Inzani, Rocío Borrego-Varillas, Fabio Frassetto, Luca Poletto, Hannes Hübener, Umberto De Giovannini, Angel Rubio, Mauro Nisoli, “Unravelling the intertwined atomic and bulk nature of localised excitons by attosecond spectroscopy”, *Nat. Commun.* **12**, 1021 (2021).
27. Kevin Lively, Guillermo Albareda, Shunsuke A. Sato, Aaron Kelly, Angel Rubio, “Simulating Vibronic Spectra without Born-Oppenheimer Surfaces”, *J. Phys. Chem. Lett.* **12**, 3074–3081 (2021).

28. Wandong Yu, Cong-Zhang Gao, Shunsuke A. Sato, Alberto Castro, Angel Rubio, Baoren Wei, “Single and double charge transfer in the Ne^{2+}He collision within time-dependent density-functional theory”, *Phys. Rev. A* **103**, 032816 (2021).

B) 査読無し論文

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

1. Kazuhiro Yabana, “Performance Evaluation of Electron Dynamics Simulation in Supercomputer Fugaku”, 12th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences, Tsukuba, Japan, October 6, 2020.
2. Kazuhiro Yabana, “Multi-scale Simulation Method for Ultrafast Electron-Ion Dynamics in Dielectrics”, 2020 SSRL/LCLS Users Meeting, online, October 6, 2020.
3. Shunsuke A. Sato, “Real space and real time electron dynamics simulations for attosecond physics in solids”, APS March Meeting 2021, online, March 16, 2021.

B) 一般講演

4. T. Nakatsukasa, “Quantum dynamics in nuclei and neutron stars”, 12th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences, Tsukuba, Japan, October 6, 2020 [代理発表：日野原].
5. N. Hinohara, “Calculation of double-beta decay nuclear matrix elements using QRPA”, 12th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences, Tsukuba, Japan, October 6, 2020.
6. S. Yamada, K. Yabana, “The most efficient thickness of Si nano film for high-harmonic generation”, APS March Meeting 2021, online, March 2021.
7. T. Takeuchi, K. Yabana, “Optical properties of plasmonic metasurface with sub-nm gaps - Extremely large third-order nonlinear optical effects caused by electron transports”, APS March Meeting 2021, online, March 2021.
8. T. Takeuchi, K. Yabana, “Nonlinear Optical Responses of Plasmonic Metasurface with Sub-nm Gaps Calculated by TDDFT with Jellium Model”, IEEE Photonics Conference, online, Sept. 2020.
9. T. Takeuchi, K. Yabana, “Huge 3rd-order Nonlinearity in Plasmonic Metasurface with Sub-nm Gap - Theoretical investigation based on TDDFT with Jellium Model”, The 16th international conference on Near-field Optics, Nanophotonics & Related Techniques, online, Aug. 2020.

10. Yabana Kazuhiro, Hirokawa Yuta, Yamada Atsushi, Yamada Shunsuke, Noda Masashi, Uemoto Mitsuharu, Boku Taisuke, “Large-Scale Ab Initio Calculation of Ultrafast Dynamics in Thin-Film Dielectrics”, The 22nd International Conference on Ultrafast Phenomena, online, Nov. 17, 2020.
11. Shunsuke Yamada, Kazuhiro Yabana, “Symmetry aspects of attosecond transient absorption spectroscopy in a dielectric crystal”, Tu4A.39, The 22nd International Conference on Ultrafast Phenomena, online, Nov. 17, 2020.

C) セミナー等

(3) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

1. 日野原伸生、「ニュートリノレス二重ベータ崩壊原子核行列要素計算の現状」、ニュートリノを伴わない二重ベータ崩壊とその周辺、オンライン、2021 年 2 月 12、15 日 (チュートリアル講演).
2. 日野原伸生、「Effect of pairing and deformation on nuclear charge distribution」、ELPH 研究会 C028「電子散乱による原子核研究—原子核の電荷密度・陽子・中性子の分布と半径—」、オンライン、2021 年 3 月 18、19 日.

B) その他の発表

1. 中務孝、「Microscopic collective inertial masses in nuclear reaction」、第 3 回クラスター階層領域研究会、オンライン、2020 年 5 月 18 日.
2. 中務孝、「原子核および中性子星における超流動ダイナミクス」、第 7 回「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題成果報告会、～「京」から「富岳」へ 新しい HPCI 時代に向けて～、オンライン、2020 年 11 月 29 - 30 日 (ポスター発表).
3. 日野原伸生、「有限振幅法を用いた原子核密度汎関数理論による二重ベータ崩壊行列要素計算」、第 2 回新学術「地下宇宙」領域研究会、オンライン、2020 年 6 月 2 - 3 日.
4. 日野原伸生、「2 ニュートリノ二重ベータ崩壊原子核行列要素を用いたアイソスカラー型対相関結合定数の決定」、日本物理学会 2020 年秋季大会、オンライン、2020 年 9 月 14 - 17 日.
5. 日野原伸生、「原子核密度汎関数法による対振動・対移行反応の記述」、日本物理学会 第 76 回年次大会、オンライン、2021 年 3 月 12 - 15 日.
6. 山田俊介、矢花一浩、「半導体ナノ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 2020 年秋季大会、オンライン、11pE1-2、2020 年 9 月 9 - 11 日.
7. 竹内嵩、矢花一浩、「ナノ金属球で構成されたメタ表面における 3 次非線形光学効果の増強機構」、CREST「次世代フォトニクス」第 5 回領域会議、オンライン、2020 年 12 月.

8. 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 ―電子輸送に基づく非線形性の増強―」、第 81 回応用物理学会秋季学術講演会、オンライン、2020 年 9 月。
9. 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 2020 年秋季大会、オンライン、2020 年 9 月 8 - 11 日。
10. 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 2020 年秋季大会、オンライン、2020 年 9 月 8 - 11 日。
11. 佐藤駿丞、P. Tang、M. A. Sentef、U. De Giovannini、H. Hübener、A. Rubio、「グラフェンにおける光誘起異常 Hall 効果の理論的研究」、日本物理学会第 76 回年次大会、オンライン、2021 年 3 月 12 - 15 日。

(4) 著書、解説記事等

1. 橋本幸男、「Quantum Theory of Many-Particle Systems, Nuclear Models」、La Toccata (ラ・トッカータ)、日本物理学会誌 Vol. **75**、No.11、pp.709 - 710 (2020)。

7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

【異分野間連携】

1. ニュートリノレス二重ベータ崩壊実験に関する素粒子理論、素粒子・原子核実験分野との連携。

【産学官連携】

1. 株式会社住友金属鉱山と、SALMON を用いたメタ表面の光応答に関する共同研究を行った（矢花）。

【国際連携】

1. 日中韓フォーサイト事業「21 世紀の原子核物理」2019 - 2023（中務）。
2. 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）。
3. 韓国・高麗大・大邱大と KIDS 密度汎関数を用いた変形核計算の共同研究を日中韓フォーサイト事業「21 世紀の原子核物理」の一環として実施（日野原）。
4. アト秒光科学に関し、グラーツ工科大学、マックスプランク量子光学研究所、アリゾナ大学の実験グループと共同研究を行っている（矢花）。
5. 時間依存密度汎関数理論を用いたレーザーによる物質の励起過程に関する共同研究を、ボルドー大学、オーストラリア国立大学の理論研究者と実施している。
6. 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に関

する理論と計算に関わ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行っているが、今年度はコロナ禍のため活動が休止していた。

7. 非平衡量子ダイナミクスに関し、マックスプランク物質構造ダイナミクス研究所の理論グループと共同研究を行っている(佐藤)。
8. アト秒科学に関し、チューリッヒ工科大の実験グループと共同研究を行っている(佐藤)。
9. アト秒科学に関し、ミラノ工科大の実験グループと共同研究を行っている(佐藤)。

8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

1. Organizing committee for 12th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences, Tsukuba (Online), Japan Oct. 6, 2020 (中務 [Chair]、日野原)。
2. Chair of organizing committee for RIBF Users Meeting 2020, Online, Sep. 8 - 10, 2020 (日野原)。
3. 研究会「ニュートリノを伴わない二重ベータ崩壊とその周辺」を開催、2021 年 2 月 12, 15 日(オンライン)(日野原)。

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副センター長、センター長特別補佐
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

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
理工学群物理学類 学務委員・カリキュラム委員長
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

令和2年度テニユアトラック普及・定着事業委員会委員
卓越研究員事業委員会委員

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
京都大学基礎物理学研究所・運営協議会委員
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
素粒子論奨学会運営委員・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 (Chair: 2020 年 4 月 - 2022 年 3 月)
日本物理学会理論核物理領域運営委員 (2020 年 10 月 - 2021 年 9 月)

11. その他

(プレスリリース)

1. 佐藤駿丞、「東大・京大など、 $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbCl}_3$ 単結晶にレーザーパルス照射した際広い波長範囲の光が発生する機構を解明」、日経電子版、2020 年 7 月。
2. 佐藤駿丞、「光と固体の量子力学的な相互作用による新たな光の発生機構を解明-高次高調波光の発生機構の解明に向けた新たな知見」、筑波大学他プレスリリース、2020

年 7 月 29 日.

(筑波大学広報誌 TSUKU COMM からの研究成果発信)

1. 佐藤駿丞、「光が引き起こす励起子のダイナミクスには二つの時間スケールが共存する」、TSUKU COMM, vol. 51、2021 年 4 月.