V. 原子核理論グループ

1. メンバー

教授	矢花 一浩、中務 孝
准教授	丸山 敏毅(連携大学院)
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)
研究員	Wen Kai (温 凱)
学生	大学院生 4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。原子核は、地球上において、強い相互作用が支配する有限量子多体系として特異な系と して存在しているが、宇宙においては、巨視的な原子核である中性子星が存在し、その構造と現 象の関係を微視的なアプローチで解決することも、本グループにおける重要な研究テーマと位置 付けている。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】フェルミ演算子展開による有限温度密度汎関数計算のコード開発(中務)

原子核に対する有限温度平均場理論に基づく計算は、高励起状態の記述や準位密度の計算など に応用されてきた。通常この計算の手続きは、まず一体演算子である平均場ハミルトニアンの固 有状態・固有エネルギー(1粒子エネルギー)を求め、その1粒子エネルギーのフェルミ・ディ ラック分布関数を重みとした一体密度を計算し、ハミルトニアンを再構築することを反復するこ とで、自己無撞着に状態を決定する。しかしながら、自己無撞着解に到達するまでに反復計算を 要するため、ハミルトニアンの対角化を何度も行う必要があり、球対称性(spherical symmetry) などを仮定することで対角化次元を大幅に削減した計算がほとんどである。本研究では、フェル ミ・ディラック分布関数を有限次の多項式展開する方法を用いることで、ハミルトニアンの有限 回の演算によって密度を直接構築する手法を核子多体系に初めて適用し、その有効性を確かめ た。行列・ベクトル積だけの演算で、有限温度平均場状態を決定することができ、数値的に負荷 が大きい行列対角化を避けることができる。また、分散メモリ型の並列計算にも向いている点が 長所としてあげられる。短所としては、フェルミ・ディラック関数が階段関数になるゼロ温度の 系を直接計算できない点があるが、フェルミ面にギャップがある場合には十分に低温にすること で実質ゼロ温度の計算ができ、ギャップがない場合でも有限温度からの外挿を利用するなど、こ の問題を回避することはできる。数千~数万核子に対する計算が必要となるような、有限温度中 性子星クラストの自己無撞着計算などに威力を発揮できると期待している。

【2】クォークの分子動力学への相対論的効果の導入(尾崎(M2)、丸山(連携大学院・JAEA)、 安武(千葉工大))

クォークを構成粒子とした分子動力学の開発を進めた。高エネルギーでの核-核衝突シミュレ ーションを念頭におくと、任意の慣性座標系で計算した時間発展が同一の結果となるようにする 必要がある。このために、相互作用の計算に用いる2粒子間距離を単純な相対距離から2粒子の 重心系での距離に変換して計算する方法を採用し、原子核の基底状態への適用可能性を試した。 相互作用には、カラーに依存した閉じ込めポテンシャルと1グルオン交換力およびパウリポテン シャル、カラーに依らないメソン交換力を用い、摩擦冷却法によって系の基底状態を求めた。

その結果、従来の非相対論的距離を用いたポテンシャルによる基底状態ではカラーの異なる3 つのクォークがバリオンを形成した。一方、相対論的距離を用いた計算を行ったところ、同色の クォークが直線状に並び、その線状の塊で異色のもの同士が120度の角度で交わる構造が常に現 れるという問題が明らかになった。閉じ込めポテンシャルは同色クォーク同士が離れる方向に働 くが、そのクォークの対の重心運動量が大きくなることで相対論的距離が大きくなるため、静止 系における距離が近いにもかかわらず同色クォークが線状に並ぶ構造のエネルギーが下がるとい うのが、その原因であることが分かった。クォークの分子動力学に相対論的効果を導入するため には、閉じ込めポテンシャルの形か相対論的距離の取り方に改善が必要であることを指摘した。

【3】ゲルマニウム核の3次元回転運動(橋本)

原子核の形は、多くの場合球形よりも楕円体型に変形することはよく知られている。その回転 スペクトルから内部構造の変化を理解する研究の歴史は長い。回転運動は、楕円体の主軸まわり の一様な運動として考えるのが簡単であるが、量子力学的には、回転軸が楕円体の主軸から離れ て傾いている場合も考えられる。このような、原子核のより一般的な回転運動である"斜交軸回 転運動"を、時間依存 Hartree-Fock-Bogoliubov(TDHFB)法で記述することを考える。そのため に、天頂角と方位角による原子核のエネルギーと内部構造の変化を Gogny HFB 法によって計算 することから始めた。対象は三軸非対称性(triaxial)の基底状態が期待されるゲルマニウム核同 位体とした。図1 (左)の例はゲルマニウム 64 について、三軸非対称の基底状態から主軸 *x* 軸、y軸、z軸それぞれのまわりにクランキング計算を行い角運動量ごとのエネルギーの変化を表 す。同様に図1 (右)では、角運動量 $J = 4.0 \ge J = 8.8$ の場合に、回転軸を y軸から x軸に傾 けた時のエネルギーの変化を表す。エネルギー変化の曲線にポケットが見られれば、安定な三次 元的回転運動が期待できるが、この時点ではまだポケットを見つけるには至っていない。



図 1: (左図) ゲルマニウム⁶⁴Ge のx軸、y軸、z軸まわりのクランキングによるエネルギー変化。(右図) 回転軸をy軸からx軸に傾けた時のエネルギー変化 (角運動量がJ = 4.0とJ = 8.8の場合)。

【4】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大域的な計算(日野原、Engel (ノースカロライナ大))

ニュートリノを2つ放出する二重ベータ(2vββ)崩壊は半減期が測定されているため、ニュー トリノレス二重ベータ崩壊の原子核行列要素を計算する際に用いられる中性子–陽子間の有効相 互作用を決定するために使われてきた。ベータ崩壊やガモフ・テラー巨大共鳴、スピン双極子巨 大共鳴などの二重ベータ崩壊の半減期以外の荷電交換過程を再現するように大域的に決定された 原子核密度汎関数を用いて、有限振幅法によって 2vββ 崩壊の原子核行列要素を、半減期が測定 されている 11 種類の同位体について計算した。用いた原子核密度汎関数の結合定数は 2vββ 崩壊 の半減期を合わせるように決定されていないにも関わらず、半減期から導出された原子核行列要 素値をよく再現することができた。一部の同位体では実験値と計算値の間にずれが見られるた め、2vββ 崩壊の半減期を用いることで今後さらに原子核密度汎関数を改良することができると 考えられる。また、半減期が未測定だがエネルギー的に 2vββ 崩壊が可能な 27 種類の同位体につ いても原子核行列要素値の予言を行った。



図2:原子核密度汎関数による 2vββ 崩壊の原子核行列要素の値と実験の半減期から導出された値との比較。

【5】混合基底を用いた 3 次元 Skyrme Hartree-Fock-Bogoliubov 計算コード開発(Shi(ハルビン工 業大)、日野原)

軸対称性を課さない3次元Skyrme Hartree-Fock-Bogoliubov 方程式を効率的に解くため、z方向は 有限差分基底、x,y方向には調和振動子基底を用いた混合基底による計算コードの開発を行っ た。対相関がない場合の球形核(¹⁶O, ²⁰⁸Pb)、軸対称変形核(²⁴Mg)、非軸対称変形核

(⁶⁴Ge)、また対相関を含んだ球形核(¹²⁰Sn)、軸対称変形核(³⁴Mg)、非軸対称変形核(¹¹⁰Mo)について3次元調和振動子基底コードとの結果のベンチマークを行い、非常によい一致を得た。また、調和振動子基底では計算が困難である、大きく一方向に変形した²⁴⁰Pu 核の核



図3: 混合基底 HFB で計算した²⁴⁰Pu 核分裂アイソマーの密度分布 分裂経路上での核分裂アイソマーや第一、第二核分裂障壁付近の状態の計算を行い、開発したコ ードの有用性を示した。

[6] Microscopic collective inertial masses for nuclear reaction in the presence of nucleonic effective mass (Wen、中務)

In order to understand the microscopic mechanism of nuclear fusion/fission reactions, we calculated the collective inertial mass coefficients with respect to translational, relative, and rotational motions for nuclei, along the collective reaction path self-consistently determined, 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 is investigated. The results are compared with those calculated with the cranking formulas.

The inertial masses based on the ASCC method reproduce the exact total nuclear mass for the translational motion as well as the exact reduced masses as the asymptotic values for the relative and rotational motions. In contrast, the cranking formulas fail to do so. This is due to the fact that the (local) Galilean invariance is properly restored in the ASCC method but violated in the cranking formulas. A model Hamiltonian for low-energy nuclear reaction is constructed with the microscopically derived potentials and inertial masses. The astrophysical S factors are calculated, which indicates the importance of microscopic calculation of proper inertial masses.

【7】Adiabatic self-consistent nuclear dynamics with superfluidity (Wen、日野原、中務)

Pairing interactions among the nucleons always play important roles and bring in many interesting features to the nuclei. To understand how this superfluid property could change the microscopic dynamics of nuclear fusion/fission reactions, we launched a new study to investigate the adiabatic self-consistent collective coordinate (ASCC) in the presence of paring interactions. The ASCC method is being applied to the Hartree-Fork-Bogoliubov (HFB) model, where the introduction of quasiparticle concept could give us a more realistic picture of low-energy nuclear dynamics. Based on our knowledge and experience of the ASCC method, upon the HFBTHO code, we have translated "particle" to "quasiparticle" from the theoretical point of view. We are gradually making progress, and soon a new picture of nuclear fusion/fission dynamics is to be revealed.



Figure 4: Inertial mass M(R) for the reaction ¹⁶O +¹⁶O as a function of the relative distance R. The left panel shows the results of the ASCC method, and the right panel shows those of the perturbative (thinner curves) and nonperturbative (thicker curves) cranking formulas. Solid (red) and dashed (blue) lines indicate those of $B_3 = 0$ and 75 MeV fm⁵, respectively.

【8】光と物質の相互作用を記述する第一原理計算ソフトウェア SALMON の開発(矢花、佐藤、 山田(篤) (CCS)、竹内(CCS)、山田(俊) (CCS)、額田(CCS))

第一原理計算法の一つである TDDFT に基づき、パルス光と物質の相互作用を記述する汎用の 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 を公開し、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整理され、少なくともこの先数年間は安定して SALMON を維持発展 させる基盤が整えられている。本年度は、SALMON の開発を主要な課題とする CREST 研究の中 心部分が終了する 2022 年 3 月末に、v.2.1 を公開した。このバージョンでは、スピン軌道相互作 用の利用が可能となるとともに、OpenACC を用いた GPU 化が実装された。

また SALMON は「富岳」への対応も進めてきたが、その試用段階において全系の 1/6 を用いることにより、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実証した。その論文(Y. Hirokawa et.al, Int. J. High Performance Computing Applications 36, 182 (2022))の

出版に合わせて、2022年1月6日に筑波大学、神戸大学、科学技術振興機構が共同でプレスリ リースを行った。

SALMON の利用促進に向けた取り組みとして、SALMON により可能となる計算例や利用方法 に関するビデオを多数作成し、YouTube に掲載している。SALMON を普及する活動として、 2021 年 9 月と 2022 年 3 月に大阪大学が主催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 2022 年 1 月には高度情報科学技術研究機構のサポートのもと 京都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。

これまで SALMON の開発は、筑波大学の CREST プロジェクトメンバーが中心となり行って きたが、そのプロジェクトの中心部分が本年度末で終了することに伴い、今後は国内の様々な機 関に所属する約 10 名の研究者からなる開発者ミーティングを定期的に開催し、開発その他の活 動を行う予定である。

【9】量子流体模型に基づくプラズモニクスの記述(竹内(CCS)、矢花)

金属ナノ粒子の光応答では表面プラズモンが 重要な役割を果たす。この応答は古典電磁気学 により記述することが可能であるが、最近は古 典論では記述できない量子効果として、ナノ粒 子の表面における電子染み出しの効果や、複数 のナノ粒子が接近した時に生じるトンネル電流 の効果などが大きな関心を集めている。そのよ うな量子効果を記述するのに、TDDFT を用い た記述が有効であるが、TDDFT の計算は物質 に含まれる電子数に対応する軌道を用意する必 要があることから、計算量が物質のサイズの2 乗に比例し、サイズの大きいナノ粒子に対して 計算を行うことが困難であった。このような事 情のため、TDDFT に対する半古典近似とみな せる量子流体模型(QHT)が発展してきた。しか し QHT では、流体方程式を電子密度が非常に 小さい領域で正確に解くことが難しく、これま では線形応答に対する計算がほとんどであった。



図 5: QHT と TDDFT を用いたナノ粒子の非線 形光応答の比較。

本研究はそのような困難を克服する方策として、QHTの基礎方程式と1軌道の時間依存シュ レディンガー方程式の等価性に着目し、新たな数値解法を提案した。この方法を用いることで、 非線形応答を何ら問題なく調べることが可能になった (T. Takeuchi et.al, Optics Exp. 30, 11572 (2022))。図5に、直径が4.3nmのナノ粒子に対するQHTとTDDFTの非線形光応答の計算結果の比較を示している。(a)では単一のパルスに対する計算の結果を、横軸にパルスに含まれる振動数成分をとり比較した結果を示しており、(b)では多数のパルスに対する計算の結果を、系に加えたパルスの平均振動数に対する3次の非線形応答の比較として示している。いずれの場合も、QHTにおいて電子染み出しを適切に記述すると、非線形応答の値がTDDFTにほぼ一致することを示している。

【10】遷移金属ダイカルコゲナドの非線形光応答(Hashmi(関西光科学研究所),乙部(関西光科 学研究所)、矢花、山田(俊)(CCS)、山田(篤)(CCS))

SALMON において、軌道関数をスピンが非共線的(noncollinear)となる配位を記述できるよう拡張し、スピン軌道力を導入した。これを用いた最初の応用として、バレー自由度に関心が持たれる遷移金属ダイカルコゲナイド(TMCD)の典型的な物質である WSe₂ 単原子層の非線形光応答を調べた(A. Hashmi et.al, Phys. Rev. B105, 115403 (2022))。スピン軌道力を含めた計算は、計算量が極めて大きくなる。2021 年度から本格的に稼働したスーパーコンピュータ「富岳」を用いることで、研究を順調に進展させることが可能になった。

TMCD は円偏光パルスを用いて、*K*,*K*'バレーのどちらかを選択的に励起できることが知られている。本研究では高強度なシングルサイクルの直接偏光パルスを用いて、非線形励起過程によりバレーを選択的に励起できることを示した。図6は、横軸をシングルサイクルパルスのキャリ

アエンベロープ位相(CEP)にと り、いくつかの光強度に対して バレー非対称性を示したもので ある。バレー非対称性は CEP に敏感に依存し、また光の強度 によって符号が変化している。 k空間における励起したキャリ アの分布を調べると、節を持つ 構造が見出された。この節の存 在は、massive Dirac 模型を用 い、Landau-Zener 近似で遷移を 評価する際に現れる Stuckelberg 干渉として理解できることを示 した。



図 6: WSe₂ 単原子層に高強度な直線偏光の単一サイ クルパルスを加えたときの、*K・K*'バレー励起の非対 称性を、横軸にキャリアエンベロープ位相(CEP)をと り、いくつかの光の強度に対して示した。

【11】固体からの高次高調波発生と位相緩和効果(D. Freeman(オーストラリア国立大), A. Kheifets

固体からの高次高調波発 生、特に原子配置の熱的揺 らぎに伴う位相緩和効果に 関し、オーストラリア国立 大学の理論グループと共同 研究を行い、論文を投稿中 である(D. Freeman et.al, arXiv:2109.07693)。 図 7 に、結晶のイオン配置に熱

的な揺らぎが加わった場合 の計算例を示す。この計算 は、乱雑な揺らぎを考慮す るため、512原子からなる



単位セルを用いた電子ダイナミクス計算を行っている。左上の図は、揺らぎのない場合のカレン トを示すが、パルスの後半(100 fs 以降)には非線形効果に起因する複雑な振動が現れている。 一方、熱的な揺らぎを考慮した左下に示すカレントでは、位相緩和が考慮されたことによりカレ ントに現れる乱雑な信号が軽減されていることがわかる。右側に示すスペクトルを見ると、揺ら ぎのない場合の方が(右上)高次まで明瞭なシグナルが見られるが、一方で揺らぎを考慮した場 合(右下)には、40次を超える高次の信号は消失するが、20次程度までの低次の信号は、揺ら ぎのない場合よりもシャープになっている。このように、多数の原子を含む単位セルを考え、熱 的な揺らぎのある原子配置を考慮することにより、位相緩和の効果を定量的に分析することが可 能になった。

【12】アト秒過渡吸収分光の第一原理計算と磁性体への応用(佐藤)

本研究では、高強度な光によって励起された磁性体の光学応答がどのように変調されるのか を、時間依存密度汎関数理論(TDDFT)に基づく第一原理計算により解析した。図8(a)にTDDFT 計算により得られた固体 Co の吸収スペクトルを示す(赤線)。さらに、局所電場効果を無視した 独立粒子近似(IP)計算により得られた吸収スペクトルを青線、スピン自由度を縮退させた TDDFT 計算により得られた吸収スペクトルを緑線で示した。いずれの結果においても、57eV 付近で吸 光度の急峻な上昇が確認される。これは、Coの内殻 3p 軌道からフェルミ面への電子励起に起因 する吸収端を反映している。本研究では、レーザー励起された固体の性質を調べるために、レー ザー光によって電子系が加熱され有限電子温度状態が実現されることを仮定し、吸収スペクトル の電子温度依存性を調べた。図8(b)に、TDDFT 計算によって得られた固体 Co の吸収スペクト ル変化を示した。電子温度の上昇に伴い、吸収端付近で吸光度の急激な現象が確認できる。第一 原理計算に基づく微視的な解析を進めたところ、観測された吸光度の減少は、レーザー加熱によ って固体の磁性が消失し、内殻準位の交換分裂が減少することに起因していることが明らかとな った。この研究で明らかとなった光励起された磁性体の磁気応答と光学応答の関係を応用するこ とで、光が駆動する磁性・スピンダイナミクスを過渡吸収分光を通じて調べることが可能とな る。本研究成果は、論文"First-principles calculations for transient absorption of laser-excited magnetic materials"として Electronic Structure 誌より発表された。

【13】THz 光が駆動するグラフェン内の非線形電子ダイナミクスの理論的解析(佐藤)



近年のレーザー技術の発展により、高強度 THz 光とグラフェンの非線形相互作用に関する研

Created by modifying "Electron. Struct. 4 014007 (2022)" (Licensed under CC BY 4.0)

図 8:(a)第一原理計算により得られた固体 Co の吸収スペクトル。(b)電子温度上昇に伴う 固体 Co の吸収スペクトル変化。

究が精力的に進められており、高強度 THz 光が誘起する透過率上昇や高次高調波発生などの極限的な非線形光学現象が盛んに調べられている。本研究では、このような極限的な非線形現象の 微視的機構を解明するため、緩和の効果を取り入れた量子マスター方程式により、THz 光が誘起 するグラフェン内の電子ダイナミクスを解析した。グラフェン内における電子の散乱時間は THz 電場の時間スケールより短いため、THz 光を用いる代わりに定常電場の元でのグラフェンの伝導 特性を調べた。定電場 E_0 の下でグラフェンに流れる電流Jを求め、その比から実効的な伝導度 $\sigma = J/E_0$ を評価した。その結果を図9に示す。図9には異なる化学ポテンシャルに対する結果が 示されており、いずれの場合も印加する電場強度の上昇によって伝導度が減少していることが確認できる。また、化学ポテンシャルが比較的小さい場合、さらに高強度の電場を印加すること で、伝導度が上昇に転じることが分かった。グラフェンにおける非線形伝導の微視的起源を解析 したところ、高強度電場印加によって熱的キャリア、あるいはドープされたキャリアの大部分が

Brillouin zone 内で大きく移動し、伝導性を担うキャリアが枯渇することによって伝導度が低下していることが明らかとなった。また、より強電場領域においては、Zenerトンネル現象により価電子帯から伝導帯へ励起キャリアが供給されることで、伝導度が再び上昇に転じることが分かった。本研究成果は、グラフェンにおける THz 誘起非線形電子ダイナミクスの基礎的理解を発展させるものである。この研究は、Max-Planck 研究所(ハンブルク)との共同研究であり、論文 "Nonlinear electric conductivity and THz-induced charge transport in graphene"として New Journal of Physics 誌から発表された。



図9:グラフェンにおける非線形電気伝導度の電場依存性。異なる化学ポテンシャルµに 対する結果が示されている。

4. 教育

学位

 尾崎翔太 修士(理学) クォークの分子動力学における相対論的効果の導入

集中講義など

 T. Nakatsukasa, "Nuclear dynamics and energy density functional theories", Online lectures, Lanzhou University, Lanzhou, China, March 30-April 1, 2022.

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

外部資金

 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:13,200,000円(2021年度直接経費:800,000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」.

- 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:2,300,000円(2021年度直接経費(繰越):1,200,000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」.
- 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、前年度直接
 経費:3,300,000 円(2021 年度直接経費:800,000 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:1,800,000円(2021年度直接経費:900,000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:6,300,000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: 2,300,000 円(2021 年度直接経費: 500,000 円)、「Macroscopic Nuclear Dynamics with Microscopic Foundations」.
- 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(2021 年度直接経費:32,540 千円).
- 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(2021 年度直接経費: 2,320 千円).
- 9. 日本学術振興会科学研究費・基盤研究(B)、矢花一浩、2020-2023 年度、全年度直接経費:13,400 千円(2021年度直接経費:3,400千円)、「第一原理計算が拓く多元的な極限ナノフォトニク ス」.
- 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(2021 年 度直接経費:600 千円)、「光による電子構造制御の第一原理計算」.
- 日本学術振興会科学研究費・基盤研究(B)、佐藤駿丞、分担、2021-2024 年度、全年度直接 経費:17,030 千円(2021 年 度直接経費:3,000 千円)、「THzメタマテリアル共振器によ るフォノン強結合状態の実現と物性制御への応用」.
- 6. 研究業績
- (1) 研究論文
 - A) 査読付き論文

- T. Nakatsukasa, "Self-consistent energy density functional approaches to the crust of neutron stars", EPJ Web Conf. 260, 11041 (2022).
- 2. K. Wen and T. Nakatsukasa, "Microscopic collective inertial masses for nuclear reaction in the presence of nucleonic effective mass", Phys. Rev. C **105**, 034603 (2022).
- Y. Hashimoto, "Isospin equilibration in reaction ²⁰O + ³⁴Mg by Gogny-TDHFB method", INFORMATION 24, 189 – 196 (2021).
- 4. S. Yamada and K. Yabana, "Determining the optimum thickness for high harmonic generation from nanoscale thin films: An ab initio computational study", Phys. Rev. B **103**, 155426 (2021).
- Y. Hirokawa, A. Yamada, S. Yamada, M. Noda, M. Uemoto, T. Boku, K. Yabana, "Large-scale ab initio simulation of light-matter interaction at the atomic scale in Fugaku", The International Journal of High Performance Computing Applications, 36, 182–197 (2022).
- Guillaume Duchateau, Atsushi Yamada and Kazuhiro Yabana, "Electron dynamics in α-quartz bulk induced by two-color 10-femtosecond laser pulses", Phys. Rev. A 105, 165128 (2022).
- T. Takeuchi, K. Yabana, "Numerical scheme for nonlinear optical response of metallic nanostructure: Quantum hydrodynamics theory solved by adopting effective Schrödinger equation", Optics Express 30, 11572 – 11587 (2022).
- A. Hashmi, S. Yamada, A. Yamada, K. Yabana, T. Otobe, "Nonlinear dynamics of electromagnetic field and valley polarization in WSe2 monolayer", Appl. Phys. Lett. 120, 051108 (2022).
- A. Hashmi, S. Yamada, A. Yamada, K. Yabana, T. Otobe, "Valley polarization control in WSe2 monolayer by a single-cycle laser pulse", Phys. Rev. B 105, 115403 (2022).
- Dandan Hui, Husain Alqattan, Shunsuke Yamada, Vladimir Pervak, Kazuhiro Yabana, Mohammed Th. Hassan, "Attosecond electron motion control in dielectric", Nature Photonics 16, 33 – 37 (2022).
- D. Freeman, S. Yamada, A. Yamada, K. Yabana, Anatoli Kheifets, "High order harmonic generation in semiconductors driven at near- and mid-IR wavelengths", arXiv:2109.07693.
- S.A. Sato, "First-principles calculations for attosecond electron dynamics in solids", Comput. Mater. Sci. 194, 110274 (2021)
- S. Aeschlimann, S.A. Sato, R. Krause, M. Chávez-Cervantes, U. De Giovannini, H. Hübener, S. Forti, C. Coletti, K. Hanff, K. Rossnagel, A. Rubio, I. Gierz, "Survival of Floquet–Bloch States in the Presence of Scattering", Nano Lett. 21, 5028 (2021)
- S.A. Sato, A. Rubio, "Nonlinear electric conductivity and THz-induced charge transport in graphene", New J. Phys. 23, 063047 (2021).

- S. Latini, D. Shin, S.A. Sato, C. Schäfer, U. De Giovannini, H. Hübener, A. Rubio, "The ferroelectric photo ground state of SrTiO3: Cavity materials engineering", PNAS 118 e2105618118 (2021).
- D. Shin, S. Latini, C. Schäfer, S.A. Sato, U. De Giovannini, H. Hübener, A. Rubio, "Quantum paraelectric phase of SrTiO3 from first principles", Phys. Rev. B 104, L060103 (2021).
- G. Albareda, K. Lively, S.A. Sato, A. Kelly, A. Rubio, "Conditional Wave Function Theory: A Unified Treatment of Molecular Structure and Nonadiabatic Dynamics", J. Chem. Theory Comput. 17, 7321 (2021).
- S.A. Sato, "Two-step Brillouin zone sampling for efficient computation of electron dynamics in solids", J. Phys.: Condens. Matter 34, 095903 (2021).
- U. De Giovannini, S. A.Sato, H. Hübener, A. Rubio, J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.
 "First-principles modelling for time-resolved ARPES under different pump-probe conditions", Spectrosc. Relat. Phenom. 254, 147152 (2021).
- S.A. Sato, "First-principles calculations for transient absorption of laser-excited magnetic materials", Electronic Structure, Volume 4, Number 1(2022).

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

- T. Nakatsukasa, "Computational nuclear data for various applications", 2022 LBNL/CSA-Tsukuba/CCS Collaboration Meeting, Online, March 23-24, 2022.
- Kazuhiro Yabana, "Ab initio description of ultrafast dynamics in solids", CLEO Europe, Online, Jun. 21 (2021).
- Atsushi Yamada and Kazuhiro Yabana, "Electron and Phonon Dynamics in Nonlinear Optics by Multiscale First-Principles Simulation", International Conference: Advanced Laser Technologies, Online, Sep. 7 (2021).
- 4. Kazuhiro Yabana, "Time-dependent density functional theory for extremely nonlinear optics", International Conference: Advanced Laser Technologies, Online, Sep. 7 (2021).
- Kazuhiro Yabana, "Real-time TDDFT coupled with Maxwell equations for light-propagation through thin films", Theory days on New computational methods for electron dynamics Toulouse+Online Nov. 24-26, 2021.
- Kazuhiro Yabana, "Ab Initio Simulations of Ultrafast Phenomena in Solids: State of the Art and Challenges", First Int. Conf. on Scientific Opportunities with Advanced Attosecond Lasers, Dongguan, China and online Jan. 15-18, 2022.

 Shunsuke A. Sato, "Theoretical study on attosecond electron dynamics in solids", 2021 P-COE Workshop, Augst 19, 2021; DGIST Korea/Online

B) 一般講演

- T. Nakatsukasa, "Self-consistent energy density functional approaches to the crust of neutron stars", 16th International Symposium on Nuclei in the Cosmos (NIC-XVI), Online, September 21-25, 2021 (Poster).
- T. Nakatsukasa, "Cluster formation and dynamics in low-energy nuclear reaction", 13th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences, Online, October 8, 2021.
- N. Hinohara, "Systematic calculation of two-neutrino double-beta decay nuclear matrix elements with the finite-amplitude method of nuclear density functional theory", 13th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences, Online, October 8, 2021.
- K. Wen, "Adiabatic self-consistent collective coordinate (ASCC) path in nuclear fusion reactions", Workshop on "Cluster phenomena in knockout and astrophysical reactions", Online, October 14-15, 2021.
- T. Takeuchi and K. Yabana, "Large Third-Order Nonlinear Optical Effect Induced by Plasmonic Metasurface with Sub-nm Gaps", EG-P.9, CLEO/Europe-EQEC 2021, online, Jun. 25, 2021.
- S. Yamada and K. Yabana, "First-principles calculations for determining the thickness to maximize HHG efficiency of laser-irradiated nano films", CG-P.21, CLEO/Europe-EQEC 2021, online, Jun. 24, 2021.

(3) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

- 中務孝、「パルサー・グリッチ機構解明に向けた有限温度非一様核物質と大規模並列計算」、京都大学原子核理論研究室コロキウム、京大理学部物理学教室+Zoom、2021年12月 17日.
- 日野原伸生、「2νββ崩壊原子核行列要素の原子核密度汎関数理論による計算」、新学術「地 下宇宙」2021 年領域研究会、オンライン、2021年5月19-21日.
- 3. 矢花一浩、「フェムト秒レーザーから物質へのエネルギー移行の第一原理計算」レーザー学 会東京支部セミナー 東海大学+オンライン 2021 年 12 月 17 日.
- B) その他の発表
- 1. 中務孝、「フェルミ演算子展開法による中性子星クラスト計算」、日本物理学会2021年秋季 大会、オンライン、2021年9月14-17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8回HPCIシステム利用 研究課題成果報告会、オンライン、2021年10月28-29日(ポスター発表).
- 3. 中務孝、日野原伸生、「核内における局所的アルファ粒子生成指標」、日本物理学会第77回 年次大会、オンライン、2022年3月15-19日.
- 5. 鷲山広平、日野原伸生、中務孝、「FAM-QRPAに基づく四重極集団模型による遷移領域核の記述」、日本物理学会第77回年次大会、オンライン、2022年3月15-19日.
- 丸山敏毅、尾崎翔太、安武伸俊、「Quarkの分子動力学における相対論的効果の導入」、日本物理学会第77回年次大会、オンライン、2022年3月15-19日.
- 7. 日野原伸生、「有限振幅法による2ニュートリノ二重ベータ崩壊原子核行列要素の系統的計算」、日本物理学会2021年秋季大会、オンライン、2021年9月14-17日.
- 8. 日野原伸生、「対回転慣性モーメントの全核種計算」、日本物理学会第77回年次大会、オン ライン、2022年3月15-19日.
- 9. 飯田崇史、伏見賢一、吉野将生、鎌田圭、細川佳志、中島恭平、日野原伸生、水越彗太、 「PIKACHU実験によるGd-160の二重ベータ崩壊探索」、日本物理学会第77回年次大会、オ ンライン、2022年3月15-19日.
- 吉野将生、飯田崇史、鎌田圭、伏見賢一、細川佳志、中島恭平、日野原伸生、水越彗太、吉 川彰、「GAGG、HR-GAGG、GFAG シンチレータにおける波形弁別性能の比較分析」、第69 回応用物理学会春季学術講演会、青山学院大学相模原キャンパス+オンライン、2022 年3月 22-26 日.
- 11. 山田篤志、矢花一浩、「低ー高強度短パルス光照射に対する金属・半導体・絶縁体の光学応 答変化の第一原理計算に基づく解析」、日本物理学会、オンライン、2021 年 9 月 23 日.
- 12. D. Freeman、山田俊介、山田篤志、A. Kheifets、矢花一浩、「半導体からの高次高調波発生の 第一原理計算:パルス形状・原子配置依存性に関する分析」、日本物理学会 2021 年秋季大会 (オンライン)、2021 年 9 月 23 日.
- 13. 竹内嵩、矢花一浩、「金属ナノ構造の非線形光学応答解析 —有効 Schrödinger 方程式に基づく数値解析法の開発—」、第82回応用物理学会秋季学術講演会(オンライン)、2021年9月
 12日.
- 14. 吉田智大、竹内嵩、矢花一浩、「ランダムメタ表面の光学応答の FDTD 法に基づく解析」、 第 69 回応用物理学会春季学術講演会、オンライン、2022 年 3 月 24 日.
- 15. 佐藤駿丞, M. Lucchini, G.D. Lucarelli, B. Moio, G. Luca Dolso, G. Inzani, R. Borrego-Varillas, F. Frassetto, L. Poletto, H. Hübener, U. De Giovannini, M. Nisoli, A. Rubio, 「固体 MgF2 におけるア

ト秒励起子ダイナミクスの理論的解析」,日本物理学会第 2021 年秋季大会(オンライン)、2021 年 9 月 23 日.

- 16. Shunsuke A. Sato、「Theoretical study on nonlinear transport in graphene under optical-driving and dissipation」、日本物理学会第 77 回年次大会(オンライン)、2022 年 3 月 19 日.
- 17. 佐藤駿丞、「レーザー励起された磁性体の過渡光学応答第一原理計算」、日本物理学会第77 回年次大会(オンライン)、2022 年 3 月 15 日.

(4) 著書、解説記事等

 K. Yabana, T. Takeuchi, M. Uemoto, A. Yamada, S. Yamada, "Ab initio computational approach for nanophotonics based on time-dependent density functional theory", Progress in Nanophhotoonics 6, pp 103-133, (2021), Springer International Publishing.

7. 異分野間連携·産学官連携·国際連携·国際活動等

異分野間連携

- 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。
- 2. 光科学第一原理ソフトウェア SALMON の開発にあたり、CCS 高性能計算システム研究部門 の朴教授、額田教授と研究協力(矢花、他).

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学術指導を行った (矢花).

国際連携・国際活動

- 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. 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).
- 3. 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).
- 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(矢花).
- 5. 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(矢花).

8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

SALMONの利用に関するチュートリアルを、大阪大学コンピュテーショナル・マテリアルズ・デザイン(CMD)ワークショップにおいて、アドバンストコースとして年2回実施した。また、高度情報科学技術研究機構の支援のもと、京都大学学術メディア総合センターにおいてハンズオンチュートリアルを実施した(矢花).

9. 管理·運営

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 全学教育課程委員会委員 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

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

中務 孝

Editor for European Physical Journal A Editor for International Journal of Modern Physics E JAEA タンデム専門委員会委員 JAEA-ASRC 国際評価委員会委員 素粒子論奨学会運営委員・中村誠太郎賞選考委員 HPCI システムの利用研究課題選定レビュアー 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

矢花一浩(プレスリリース)、"「富岳」を用いた1万超の原子を含むナノ物質の超高速光応答シミュレーションに成功"、筑波大学、神戸大学、科学技術振興機構(2022.1.6).