

III-2-2 原子核分野

1. メンバー

教授 矢花 一浩

講師 橋本 幸男

准教授 寺崎 順 (HPCI 戦略プログラム分野5)

2. 概要

当グループは、フェルミオン多粒子系のダイナミクスに対する計算科学的アプローチ、特に時間依存密度汎関数理論を主要な方法論として、原子核物理から物質科学、光科学にわたる広範な分野にわたる研究を展開している。

原子核物理学では、陽子と中性子の多体系として捉えた原子核、特に陽子数と中性子数が異なる不安定原子核に対し、励起・応答・反応などの量子ダイナミクスに関する研究を進めている。不安定原子核の構造と反応は、星の構造や元素の起源をめぐる宇宙物理学に密接に関連しており、中長期的に宇宙分野と連携した活動を発展させたいと考えている。本年度より寺崎准教授が加わり(HPCI 戦略プログラム分野5による雇用)、原子核応答に関する研究が強化された。

当グループではまた、原子核物理学と共通する方法論を用い、物質科学分野において電子ダイナミクスの第一原理量子シミュレーション計算による研究を展開している。本年の主要な成果として、光と物質の相互作用を第一原理から記述する新たな枠組みである、マクスウェル+TDDFT マルチスケール・シミュレーション法の開発に成功したことを挙げることができる。これは、近年光科学分野で発展が著しい高強度超短パルスレーザーを用いた研究に密度汎関数理論に基づく第一原理計算を導入するものであり、今後様々な現象への応用を計画している。

3. 研究成果

【1】時間依存密度汎関数理論による物質中の電子ダイナミクス計算

(1) 高強度パルス光と物質の相互作用を記述する第一原理マルチスケール・シミュレータの開発(矢花、杉山、篠原、乙部(原研)、G.F. Bertsch(Univ. Washington))

光とバルク物質の相互作用は、通常は巨視的マクスウェル方程式で記述され、物質の性質は誘電率などの線形感受率を通して反映される。ところが近年発展の著しい高強度超短パルス光と物質の相互作用では、強い光電場が引き起こす非線形電子ダイナミクスのために、もはや巨視的電磁場のダイナミクスと電子のダイナミクスを分離することができず、マクスウェル方程式と時間依存シュレディンガー方程式を結合して解くことが必要とされる状況にある。また、可視光領域の光の波長が μm 程度であるのに対し光電場が誘起する電子ダイナミクスの空間スケールは原子サイズと同程度の nm 以下であることから、これはマルチスケールの問題である。

本年度我々は、電子ダイナミクスに対して時間依存密度汎関数理論を用い、電子の運動を記述する時間依存コーン・シャム方程式と巨視的光電磁場の運動を記述するマクスウェル方程式を結合して同時に解き進める、

マルチスケール・シミュレーションに取り組み、その定式化に成功し、最も単純な、バルク物質(Si 結晶)に直線偏光パルスが垂直に入射する場合について計算を行った(K. Yabana et.al, Phys. Rev. B85, 045134 (2012))。この枠組みは、弱い光電場の場合には電子ダイナミクスに摂動論を用いることで通常の誘電関数を用いた巨視的マクスウェル方程式に帰着するため、通常の物質中の電磁気学を包含するものとなっている。

本枠組みは、巨視的電磁場を記述する各巨視的格子点において微視的電子ダイナミクスを計算するというマルチスケール計算であることから、極めて大規模な超並列計算が必要となる。本年行った1次元的な光伝播では1,000コアを用いて10時間程度の計算であるが、例えばカー効果による光の自己収束やフィラメンテーションなどの興味深い非線形光学現象を記述するには2-3次元の電磁波ダイナミクスを計算する必要がある。これには10万コア以上を用いた超大規模計算の遂行が必要となるため、現在京コンピュータを用いた高効率な大規模計算に取り組んでいる。巨視的格子点に関する隣接コア間の通信量は、ベクトルポテンシャルとカレントのみ(合わせて高々48バイト)であるため、本計算コードは極めて高効率な並列化が可能となる。実際これまで行った30,000コア程度の計算においても通信コストは僅かであり、実効効率も20%程度の比較的良好な数値となることが確認されている。また、HA-PACSを用いたマルチGPU計算も予定しており、微視的電子ダイナミクスに対するGPUコードは作成済みであり、1CPUコアと比較して15倍程度の加速を確認している。今後、巨視的格子点に関しマルチGPU並列化を行った計算を予定している。

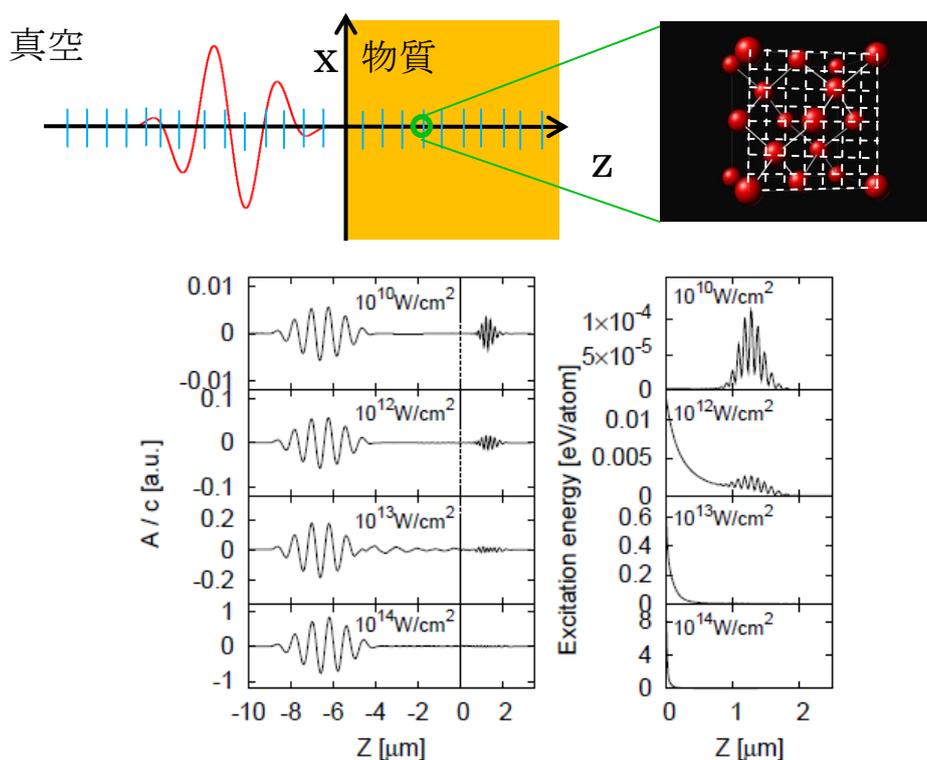


図1: (上)マルチスケール計算の模式図。巨視的電磁場を記述する物質中の各巨視的格子点毎に、結晶の単位胞を考え、微視的格子点を用いて電子ダイナミクスの計算を行う。(下)バルクSiにパルス光が入射した場合の光電場の様子と、物質内での電子励起エネルギーの分布。

(2) コヒーレントフォノンの生成機構に対する時間依存密度汎関数理論による研究(篠原、矢花、乙部(原研)、G.F. Bertsch(Univ. Washington))

固体中の光学フォノンの振動数に比べてパルス長の短い超短パルスレーザーを照射した際に起こる現象の一つにコヒーレントフォノンがある。我々は、時間依存密度汎関数理論に基づき、第一原理からコヒーレントフォノンの生成起源を解明することを試みた。これまで Si に対する解析を進め、パルス光の中心振動数と直接バンドギャップとの大小により、瞬間的誘導ラマン機構、及び共鳴ラマン機構・核平衡位置の変化による変位機構が定量的に記述されることを明らかにしてきた。

コヒーレントフォノンの実験的測定は、Sb/Bi 等の半金属物質に対して数多く行われており、本年は Sb に対する計算を進めた。実験的には、2つの光学フォノンモード(A_{1g} と E_g モード)に対して、異なる機構(瞬間誘導ラマン型と実励起型)が混在することが報告されているが、これまでの予備的解析では両方のモードに対して実励起型という結果となっている。

(3) PAW 法を用いたアト秒電子ダイナミクスの記述(佐藤、杉山、篠原、矢花)

パルス光による超高速測定の前線は、アト秒 X 線パルスを用いたアト秒(10^{-18} s)スケールの実時間計測に広がっている。この時間スケールは、古典原子模型での水素原子の電子軌道周期である1原子単位に相当しており、電子波束ダイナミクスの実時間計測を目指した実験研究が進展している。これらの実験研究では内殻電子の励起が観測の対象となっており、内殻電子の実時間ダイナミクスを記述することができる理論計算の枠組みが必要とされている。

従来我々が発展させてきた実時間・実空間計算法では擬ポテンシャルを用いているため、そのままでは内殻電子のダイナミクスを記述することができない。実空間格子表現を用いて内殻電子の波動関数を記述することができる理論として、PAW 法(Projector Augmented Wave method)が知られており、本年度この方法を我々の計算コードに導入した。試験的な計算として、簡単な分子の内殻励起(X線吸収)スペクトルに対する実時間線形応答計算を行い、従来行われていた連分数展開によるスペクトルの計算結果と一致することを確認した。現在、原子に対するフェムト秒パルスとアト秒パルスのポンプ・プローブ実験に対応する計算の検討を進めている。

【2】原子核の励起に対する時間依存平均場理論

(1) Gogny 力を用いた時間依存平均場計算(橋本)

時間依存 Hartree-Fock-Bogoliubov (TDHFB) は Skyrme 型有効核力を利用して計算が実行される場合が多い。われわれは、Gogny 型相互作用を利用した TDHFB 計算を進めてきた。ここでは、Gogny 型有効相互作用を用いた場合には基底空間のカットオフが自然に導入される点を利用している。数値計算のコードは調和振動子基底を用いている。現在は、線形応答計算と非線形緩和現象についての計算を進めている。

線形応答計算では、酸素からチタンなどの比較的小さな核の領域を対象にアイソベクトル型双極子振動とアイソスカラー型四重極振動の強度関数を蓄積している。これは、対相関を含めたより実際的な励起スペクトル

の系統的な計算につながるものである。より重い核の領域での系統的な計算に向けて、矢花・寺崎両氏の協力を得て数値計算コードの改良を進めている。

非線形領域では、時間に依存した対相関の効果が平均場の軌道の占有確率を変化させて複雑な振動運動が生じる。この計算は、調和振動子基底の範囲で、準位交差を含む大振幅振動運動の小規模なシミュレーションに相当する。 ^{44}Ti と ^{52}Ti についての計算からは、大振幅の振動運動は、大きく2種類に分類できると思われる。ひとつは巨大共鳴に相当する小振幅振動を載せた長周期大振幅振動であり、この場合は核子軌道のエネルギー準位の交差点において軌道の占有確率が断熱的(adiabatic)に変化する。他方は、典型的な振動周期よりもはるかに長い時定数を持つ緩和を伴う振動であり、そこでも対相関による軌道の占有確率の揺らぎが緩和を引き起こしている。これらの TDHFB 計算は、TFHF 計算(TDHF+固定占有確率)とは異なるものである。

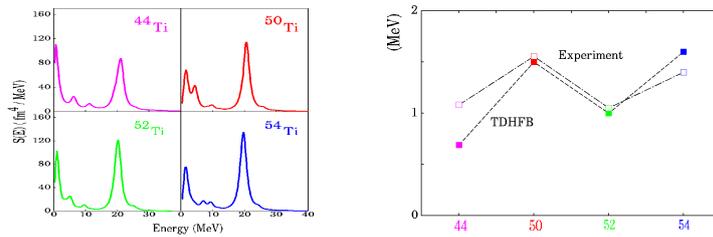


図2: チタン同位体 ($^{44,50,52,54}\text{Ti}$) のTDHFBによる強度関数(左図)と 2^+ 低励起エネルギー(右図)の値。

(2) 二重ベータ崩壊行列要素の QRPA 計算(寺崎)

寺崎は、ニュートリノ質量を決めるためのニュートリノレス二重ベータ崩壊の原子核行列要素を準粒子乱雑位相近似(QRPA)を用いて計算することを目指しており、この課題は平成23年度ならびに平成24年度の科研費研究活動スタート支援に採択されている。今年度は、この計算に必要なふたつの QRPA 励起状態の重複を、今まで他の人々に用いられてきた方法よりもずっと精密に計算する方法を開発した。寺崎は上記計算において、用いる2準粒子励起の切断が有効であること、QRPA 基底状態の生成子に関する展開が有効であることを見出した。QRPA 状態の式は複雑でそれをあらわに用いることは極力避けるのが QRPA 計算の常套的考えであったが、上記近似の有効性と数学的性質ならびに強力な並列計算機を用いれば、その考え方にこだわって計算精度を落とす必要はないということを示した点で、この研究は画期的である。用いた近似法の一つが厳密といって差し支えないくらい精度のよい結果を与えることが図に示されている。

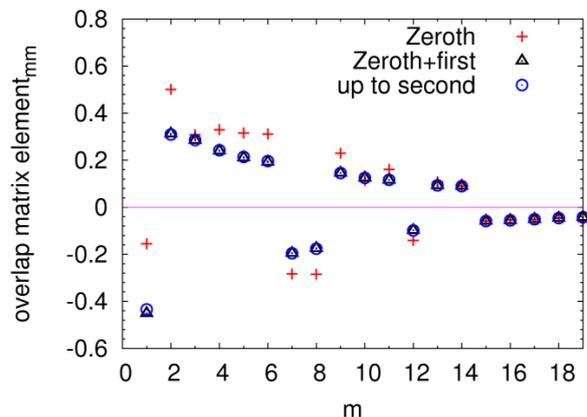


図3: ^{26}Si と ^{26}Mg の QRPA 励起状態の重複の対角行列要素を絶対値の大きい順に並べたもの。用いられている近似は QRPA 生成子に関する exponential 関数の展開で、1次までで十分であることがわかる。

【3】原子核の反応

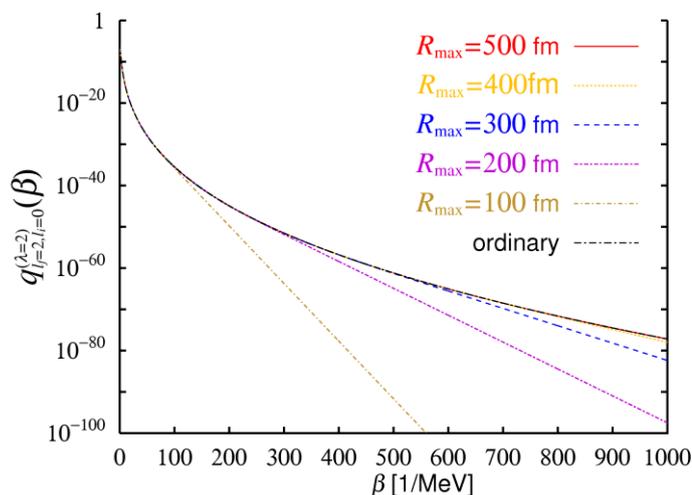
(1) 光捕獲反応率の新しい計算法(矢花、赤堀、船木(理研))

星の中で進む原子核合成は、光放出を伴う融合反応を伴う。電荷を持つ原子核どうしの反応ではクーロン障壁のために対応する断面積は指数関数的に小さく、直接的な測定は困難であるため、しばしば理論計算が重要な役割を果たす。なかでも 3α 反応による ^{12}C 核の合成は、重元素合成の起点となる重要な反応である。最近緒方(阪大 RCNP)らは、低温領域で重要となる共鳴状態を経ない直接融合反応の断面積を微視的な3体反応理論であるCDCC法を用いて計算し、従来用いられていたものと比べ20桁もの違いがあることを報告し、注目を集めている。

3α 融合反応は実験測定が不可能であるため理論による評価が極めて重要であるが、その理論計算は2つの点で困難を伴う。一つは、3つの電荷を持つ粒子の反応に関して、漸近領域における波動関数の解析形が知られておらず、従って散乱振幅(および断面積)に対する正確な定義が知られていないことである。もう一つは、クーロン障壁の存在のために、考慮する温度領域により光捕獲反応率は 10^{80} にも及ぶ変化を示すことである。このため、計算精度に対する極めて慎重な扱いが必要とされる。

我々は上述の困難を克服する枠組みとして、散乱問題を解くことなく直接温度の関数としての光捕獲反応率を計算することが可能な新たな理論である虚時間計算法を提案した。この方法では、光捕獲後の終状態(3α 反応では 2^+ 励起状態)から出発し、温度の逆数 $\beta=1/kT$ に対する虚時間発展方程式を解くことで反応率を得ることが可能である。

図4: α - ^{16}O 光捕獲反応率に対する計算。通常の計算法(ordinary)と、様々な空間領域で得られた虚時間計算法との結果を比較している。この系では、500fmの空間で解くことにより、 1000MeV^{-1} (10^7K 程度)の温度領域まで収束した結果が得られている。

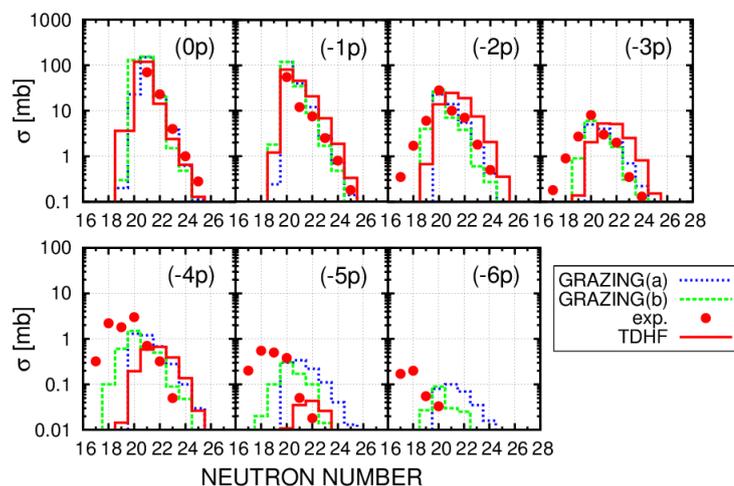


(2) 多核子移行反応のTDHF計算(関沢、矢花)

重イオン衝突反応で起こる多核子移行反応に対し、時間依存Hartree-Fock(TDHF)理論に基づく記述を試みた。最近、C. Simenelにより提案された粒子数射影の方法を用い、入射エネルギー・入射パラメータ毎に、衝突後のTDHF波動関数から核子移行確率を計算し、実験的測定がなされているいくつかの系と核子移行断面

積の比較を行った。比較的少数の核子が移行する過程に対しては、TDHF は実験結果を一定の精度で再現するが、移行核子数が大きい場合には断面積を過小評価するという結果が得られた。今後、励起状態にある TDHF 終状態波動関数からの核子放出(evaporation 効果)の検討を行う。また、KEK グループにより、多核子移行反応を用いたr過程原子核の生成実験が検討されており、中性子過剰な不安定核を生成するにはどのような原子核対、入射エネルギーで反応を行うのが適当であるかについて、検討を行う予定である。

図5: $^{40}\text{Ca}-^{124}\text{Sn}$ の衝突で起こる多核子移行反応に対する TDHF 計算の結果(赤線)と実験結果(赤丸)の比較。直接反応理論に基づく結果(青・緑線、GRAZING コード)も示している。



4. 研究業績

(1) 研究論文

- Emergence of pygmy dipole resonances: Magic Numbers and neutron skins
T. Inakura, T. Nakatsukasa, K. Yabana
Phys. Rev. C84, 021302 (2011).
- Magnetic circular dichroism in real-time time-dependent density functional theory
K.-L. Lee, K. Yabana, G.F. Bertsch
J. Chem. Phys. 134, 144106 (2011).
- Time-dependent density functional theory for strong electromagnetic fields in crystalline solids
K. Yabana, T. Sugiyama, Y. Shinohara, T. Otobe, G.F. Bertsch
Phys. Rev. B85, 045134 (2012).
- 光イオン化過程の時間依存密度汎関数理論による第一原理計算
矢花一浩
Journal of the Vacuum Society of Japan 54, 522 (2011).
- Imaginary-time method for radiative capture reaction rate
K. Yabana, Y. Funaki
Phys. Rev. C, submitted, arXiv:1202.3309
- Three dimensional structure of low-density nuclear matter
M. Okamoto, T. Maruyama, K. Yabana, T. Tatsumi
submitted to Phys. Lett. B
- Toward a Microscopic Reaction Description Based on Energy-Density-Functional Structure Models,
G. P. A. Nobre, F. S. Dietrich, J. E. Escher, I. J. Thompson, M. Dupuis, J. Terasaki, and J. Engel,
Phys. Rev. C 84 (2011) 064609

8. Testing Skyrme Energy-Density Functionals with the QRPA in Low-Lying Vibrational States of Rare-Earth Nuclei
J. Terasaki and J. Engel,
Phys. Rev. C 84 (2011) 014332
9. Testing Skyrme Energy-Density Functionals with the QRPA in Low-lying Vibrational States of Rare-Earth Nuclei
J. Terasaki
submitted to Progress of Theoretical Physics, Supplement.
10. Overlap of QRPA states based on ground states of different nuclei”
J. Terasaki
in preparation.
11. Linear responses in time-dependent Hartree-Fock Bogoliubov Method with Gogny interaction
Y.Hashimoto,
submitted to Eur. Phys. Jour. A

(2) 学会発表

(A) 国際会議講演等

1. Time-dependent approaches for reactions at barrier energy
K. Yabana
INT program INT-11-2d, Interface between Structure and Reactions for Rare Isotopes and Nuclear Astrophysics, INT, Univ. Washington, USA, Aug. 8- Sept. 2, 2011.
2. Real-time and real-space density functional calculation for electron dynamics in crystalline solids
K. Yabana
Int. Conf. on Computational Science, Nanyang Technological University, Singapore, Jun. 1-3, 2011.
3. Real-time TDDFT Simulation for Ultrafast Electron Dynamics in Dielectrics
K. Yabana
14th International Conference Density Functional Theory in Chemistry, Physics and Biology, Athens, Greece, 2011 Aug. 29-Sep. 2
4. Real-time TDDFT Calculation in Molecules and Solids
K. Yabana
ISTCP-VII (International Symposium on Theoretical Chemistry and Physics), Waseda Univ. Sept. 2-8, 2011.
5. Real-Time TDDFT for Molecules and Solids
K. Yabana
Dynamics and Correlations in Exotic Nuclei, YITP Kyoto Univ., Sept. 23, 2011.
6. Time-Dependent Hartree-Fock Calculation for Multi-Nucleon Transfer Reactions
K. Yabana
YIPQS Long-term Workshop Dynamics and Correlations in Exotic Nuclei (DCEN2011) One-day Workshop4, Oct. 24, 2011.
7. Time-dependent density functional theory for femtosecond electron dynamics in dielectrics
K. Yabana
The 14th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations, Univ. Tokyo, Oct.31-Nov. 2, 2011.
8. Time-Dependent Density Functional Theory for Intense Laser Pulse Propagation in Solids
K. Yabana

- 3rd Int. CQSE Workshop on Atomic, Molecular and Ultrafast Science and Technology, National Taiwan Univ., Jan. 7-8, 2012.
9. Computational Approach for Dynamics of Many-Fermion Systems – from Nuclear Physics to Optical Science -
K. Yabana
Kyoto Univ. GCOE Symposium “Links among Hierarchies”, Feb. 13-15, 2012.
 10. Tests of Skyrme Energy Density Functionals in Low-Energy Vibrational States of Rare-Earth Nuclei using QRPA
J. Terasaki,
RIBF, ULIC and CNS Symposium on Frontier of Gamma-ray Spectroscopy, June 30 – July 2, 2011, RIKEN, Wako, Japan
 11. Testing Skyrme Energy-Density Functionals with the QRPA in Low-lying Vibrational States of Rare-Earth Nuclei
J. Terasaki
YKIS2011 Symposium Frontier Issues in Physics of Exotic Nuclei, Oct. 11-15, 2011, Kyoto Univ., Kyoto, Japan
 12. Testing Skyrme energy-density functionals with the QRPA in low-lying vibrational states of rare-earth nuclei
J. Terasaki
1st Topical Workshop on Modern Aspects in Nuclear Structure, Advances in Nuclear Structure with arrays including new scintillator detectors, Feb. 22-25, 2012, Bormio, Italy
 13. Overlap of QRPA states based on ground states of different nuclei
J. Terasaki
International Molecule "Nuclear forces and neutron-rich matter", March 1-31, 2012, Yukawa Institute of Theoretical Physics, Kyoto University.
 14. Large-scale calculations of excited states of heavy nuclei
J. Terasaki
LBNL and CCS-Tsukuba Joint Workshop 2012, March 19-20, 2012, Center for Computational Sciences, University of Tsukuba
 15. Gogny-TDHFB calculation of nonlinear vibrations in $^{44,52}\text{Ti}$,
Y. Hashimoto,
YIPQS Long-term workshop Dynamics and Correlations in Exotic Nuclei (DCEN2011), Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto, Japan, 20th September - 28th October, 2011.
 16. Anharmonic oscillations in $^{44,52}\text{Ti}$ with Gogny-TDHFB (poster),
Y. Hashimoto,
YKIS2011 Symposium Frontier Issues in Physics of Exotic Nuclei (YKIS2011), Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto, Japan, 11th - 15th October, 2011.
 17. Nonlinear vibration and relaxation in Gogny-TDHFB calculation,
Y. Hashimoto,
Nuclear forces and neutron-rich matter, Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto, Japan, 2012.3.1 — 2012.3.31.
 18. Description of excited states in light nuclei with Skyrme interaction employing multiple Slater determinants
Yuta Fukuoka, Yasuro Funaki, Kazuhiro Yabana, Takashi Nakatsukasa
YIPQS Long-term workshop, Dynamics and Correlations in Exotic Nuclei (DCEN2011), Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto, Japan, 20th September - 28th October, 2011
 19. Time-dependent Hartree-Fock Theory for Multi-nucleon transfer Reactions
K. Sekizawa and K. Yabana,

10th CNS International Summer School, 26th Sep. - 1st Oct., 2011.

20. Time-Dependent Hartree-Fock Theory for Multi-Nucleon Transfer Reactions
K. Sekizawa and K. Yabana,
YIPQS Long-term workshop Dynamics and Correlations in Exotic Nuclei (DCEN2011), 20th Sep. - 28th Oct., 2011
21. Three-Dimensional Calculation of Inhomogeneous Structure in Low-Density Nuclear Matter
M. Okamoto, T. Maruyama, K. Yabana, T. Tatsumi
XV.th Research workshop Nucleation Theory and Applications, Bogoliubov laboratory of Theoretical Physics, Dubna, Russia, Apr. 16-24, 2011.
22. Three-dimensional calculation of inhomogeneous nuclear matter
M. Okamoto, T. Maruyama, K. Yabana, T. Tatsumi
Future Prospects of Hadron Physics at J-PARC and Large Scale Computational Physics, J-PARC, Tokai, Ibaraki, Feb. 2-11, 2012.
23. Three-dimensional calculation of pasta structure in High and Low-density nuclear matter
M. Okamoto, T. Maruyama, K. Yabana, T. Tatsumi
The first International School for Strangeness Nuclear Physics, J-PARC and Tohoku Univ.

(B) 国内会議・研究会

1. 光捕獲熱核反応率の虚時間計算
矢花一浩
京都大学基礎物理学研究所研究会「微視的核反応理論による物理」、2011年8月1-3日
2. 電子ダイナミクスの第一原理計算－光と物質の相互作用のマイクロな記述－
矢花一浩
新学術領域研究「半導体における動的相関電子系の光科学」「コンピューティクスによる物質デザイン:複合相関と非平衡ダイナミクス」若手道場、大阪大学、2011年9月27日
3. 物質中の光伝播を記述する Maxwell-TDDFT マルチスケール・シミュレータの開発
矢花一浩
筑波大学計算科学研究センター学際共同利用 H22 成果報告・H23 中間報告会、2011年9月13日
4. パルス光の伝播を記述する Maxwell-TDDFT マルチスケール・シミュレータの開発
矢花一浩
新学術領域「コンピューティクスによる物質デザイン:複合相関と非平衡ダイナミクス」研究会、東京大学、2011年10月7-8日
5. A New Computational Approach for Radiative Capture Reaction Rate
矢花一浩
新学術科研費「素核宇融合による計算基礎科学物理学の進展研究会」、賢島、2011年12月3-5日
6. 時間依存密度汎関数法によるパルス光伝播の第一原理計算
矢花一浩
東京大学物性研究所共同利用スーパーコンピュータ成果報告会「計算科学の課題と展望」東大物性研、2012年2月20-21日
7. 高強度パルス光伝播の第一原理計算
矢花一浩、杉山健、篠原康、乙部智仁、G.F. Bertsch
第59回応用物理学関係連合講演会、早稲田大学、2012年3月15-18日
8. 時間依存密度汎関数理論によるコヒーレントフォノンの記述
矢花一浩
日本物理学会第67回年次大会シンポジウム「凝縮系における超高速現象とコヒーレント物質制御への展

開:光化学反応から光誘起相転移まで」、関西学院大学、2012 年 3 月 24-27 日

9. 密度汎関数法を用いた原子核の大規模励起状態計算
寺崎 順
計算科学コロキウム、筑波大学計算科学研究センター、2011 年 5 月 24 日
10. QRPA calculation for use on passively paralleled computers
寺崎 順
第 2 回「学際計算科学による新たな知の発見・統合・創出」シンポジウム-PACS-CS による計算科学の発展と次世代コンピューティングへの展開-、筑波大学計算科学研究センター、2011 年 9 月 12、13 日
11. 原子核応答の大規模計算
寺崎 順
日本物理学会 2011 年秋季大会、弘前、招待講演
12. 戦略プログラム分野5、ユーザー支援
寺崎 順
日本物理学会 2011 年秋季大会核理論懇談会、弘前 (2011 年 9 月 16 日-19 日)
13. ユーザー支援報告
寺崎 順
戦略プログラム分野5主催の研究会「大規模計算による原子核研究の展開-核子多体系を中心に-」
理化学研究所、和光、2011 年 1 月 25 日
14. Calculation of Transition Strength of Nuclei
寺崎 順
研究会「素核宇融合による計算基礎物理学の進展 - ミクロとマクロのかけ橋の構築 -」、合歓の郷、志摩、
2011 年 12 月 3-5 日
15. Overlap of QRPA states based on ground states of different nuclei
寺崎 順
原子核理論研究室セミナー、筑波大学数理物質系、2012 年 1 月 20 日
16. Nuclear transition matrix elements of neutrino-less double-beta decay for determining the neutrino mass
寺崎 順
計算科学研究センター年次報告会、筑波大学計算科学研究センター、2011 年 2 月 20 日
17. 原子核の密度汎関数理論の基底状態および二重ベータ崩壊行列要素への応用
寺崎 順
平成 24 年度 筑波大学計算科学研究センター学際共同利用ヒアリング、筑波大学計算科学研究センター、
2012 年 3 月 2 日
- 18 ユーザー支援活動報告
寺崎 順
HPCI 戦略プログラム分野5「物質と宇宙の起源と構造」全体シンポジウム、秋葉原コンベンションホール、東
京、2012 年 3 月 7、8 日
- 19 Skyrme 力を用いた多スレーター行列式による軽い核の励起構造計算
福岡 佑太、船木 靖郎、矢花 一浩、中務 孝
大規模計算による原子核研究の展開 - 核子多体系を中心に -、理化学研究所 RIBF 棟2階大会議室、
2012 年 1 月 24 日-25 日
20. Skyrme 力を用いた多スレーター行列式による軽い核の励起構造計算
福岡 佑太、船木 靖郎、矢花 一浩、中務 孝
RCNP 研究会「クラスターガス状態探索のための研究戦略会議」、大阪大学核物理研究センター、
2011 年 9 月 7 日-8 日

21. 多スレーター行列式の重ね合わせによる軽い核における励起状態の記述
福岡 佑太
2011 年度 原子核三者若手 夏の学校(白浜荘(滋賀県高島市) 8 月 16 日～8 月 21 日)
22. Description of Nucleon Transfer Reaction by TDHF Method
関澤一之、矢花一浩
基研研究会「微視的核反応理論による物理」、2011 年 8 月 1 日- 3 日
23. TDHF 計算による核子移行反応の記述
関澤一之、矢花一浩
2011 年度原子核三者若手夏の学校, 滋賀県高島市白浜荘, 2011 年 8 月 16 日～ 21 日
24. 多核子移行反応断面積の TDHF 計算
関澤一之、矢花一浩
日本物理学会 第 67 回年次大会、関西学院大学西宮上ヶ原キャンパス, 2012 年 3 月 24 日～27 日
25. 3アルファ融合反応の新たな計算手法
赤堀孝彦、矢花一浩、船木靖郎
研究会「大規模計算による原子核研究の展開－核子多体系を中心に－」、理化学研究所 RIBF 棟二階大会議室、2012 年 1 月 24、25
26. 低密度核物質の非一様構造による 3 次元結晶
岡本稔、丸山敏毅、矢花一浩、巽敏隆
2011 年度原子核三者若手夏の学校(白浜荘 (高島市、滋賀県)、2011 年 8 月 16 日～21 日)
27. 低密度核物質の非一様構造への系統的計算
岡本稔、丸山敏毅、矢花一浩、巽敏隆
日本物理学会秋季大会(弘前大学 (弘前市、青森県)、2011 年 9 月 16 日～19 日)
28. 構造を仮定しない計算による低密度核物質の非一様構造
岡本稔、丸山敏毅、矢花一浩、巽敏隆
素核宇宙融合による計算基礎物理学の進展研究会、合歓の郷 (三重県)、2011 年 12 月 3 日～5 日
29. 低密度原子核物質の非一様構造と中性子星のクラスター
岡本稔、丸山敏毅、矢花一浩、巽敏隆
日本物理学会第 67 回年次大会(関西学院大学 (西宮市、兵庫県)、2012 年 3 月 24 日～27 日)
30. クリロフ部分空間法を用いた TDDFT の線形応答計算
篠原康、二村保徳、矢花一浩、櫻井鉄也
日本物理学会 67 回年次大会 (関西学院大学、2012 年 3 月 24 日-27 日)
31. 第一原理計算による半金属コヒーレントフォノン生成の記述
篠原康、矢花一浩、岩田潤一、乙部智仁、G. F. Bertsch
第 59 回応用物理学関係連合講演会、(早稲田大学、早稲田中・高等学校 2012 年 3 月 15 日-3 月 18 日)
32. 時間依存密度汎関数理論による半金属コヒーレントフォノン生成の記述
篠原康、矢花一浩、乙部智仁、岩田潤一、G.F. Bertsch
日本物理学会 2011 年秋季大会 (富山大学 2011 年 9 月 21 日～24 日)
33. パルス光伝搬の Maxwell+TDDFT マルチスケールシミュレーション
杉山健、篠原康、乙部智仁、矢花一浩、G.F. Bertsch
日本物理学会 2011 年秋季大会 (富山大学 2011 年 9 月 21 日～24 日)

(C)ポスター発表

1. ARTED: Ab-initio Real-Time Electron Dynamics simulation code
矢花一浩、篠原康

第2回次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェア説明会、学士会館(東京)、2012年1月26日

2. 高強度パルス光伝播を記述する Maxwell-TDDFT マルチスケール・シミュレーション
矢花一浩、杉山健、篠原康、乙部智仁、G.F. Bertsch
次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発公開シンポジウム、ニチイ学館神戸ポートアイランドセンター、2012年3月5-6日
3. Description of clustering states in light nuclei with Skyrme interaction superposing multiple Slater determinants (poster)
Yuta Fukuoka, Yasuro Funaki, Kazuhiro Yabana, Takashi Nakatsukasa
YKIS2011 Symposium, Frontier Issues in Physics of Exotic Nuclei (YKIS20
(Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto, Japan, 11th - 15th October, 2011)
4. Time-Dependent Hartree-Fock Theory for Multi-Nucleon Transfer Reaction
K. Sekizawa and K. Yabana
International Molecule "Nuclear forces and neutron-rich matter", 1st March - 31st March, 2012
5. Three-dimensional calculation of inhomogeneous nuclear matter
岡本稔、丸山敏毅、矢花一浩、巽敏隆
The 11th International Symposium on Origin of Matter and Evolution of Galaxies
(理化学研究所 (和光市、埼玉県)、2011年11月14日~17日)
6. Real-Time TDDFT Simulation for Coherent Phonon Generation
Yasushi Shinohara, Kazuhiro Yabana, Jun-ichi Iwata, Tomohito Otobe, George F. Bertsch
XVIth International Workshop on Quantum Systems in Chemistry and Physics, Kanazawa, Japan, 2011 Sep.
11-17
7. Coherent Phonon Generation in Real-Time TDDFT
Yasushi Shinohara, Kazuhiro Yabana, Jun-ichi Iwata, Tomohito Otobe, George F. Bertsch
14th International Conference Density Functional Theory in Chemistry, Physics and Biology, Athens,
Greece, 2011 Aug. 29-Sep. 2
8. Maxwell+TDDFT Multi-Scale Simulator Describing Propagation of High Intensity Laser Pulse
T.Sugiyama, Y.Shinohara, T.Otobe, K.Yabana, G.F.Bertsch
14th International Density Functional Theory Conference (DFT2011)
Athens, Greece, August 30-September 2, 2011
9. Development of First-Principles Maxwell + TDDFT Multi-Scale Simulator for Propagation of
High-Intensity Laser Pulse
T.Sugiyama, Y.Shinohara, T.Otobe, K.Yabana, G.F.Bertsch
The XVIth International Workshop on Quantum Systems in Chemistry and Physics (QSCP-XVI) (Ishikawa
Prefecture Museum of Art, September 11-17, 2011)
10. Development of First-Principles Maxwell + TDDFT Multi-Scale Simulator for Propagation of High-Intensity
Laser Pulse
T.Sugiyama, Y.Shinohara, T.Otobe, K.Yabana, G.F.Bertsch
The 14th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (The University of Tokyo,
October 31-November 2, 2011)

(D) その他

1. 集中講義: フェルミ多粒子系ダイナミクスの計算科学
矢花一浩
京都大学理学研究科、2011年6月8-10日
2. セミナー: 時間依存密度汎関数理論—原子核物理からレーザー科学へ—
矢花一浩

京都大学物理第二教室談話会、2011 年 6 月 10 日

3. セミナー: First-Principles Description for Quantum Electron Dynamics Induced by Intense and Ultrashort Laser Pulses
K. Yabana
Seminar at Advanced Photonics Research Institute, Gwangyu, Korea, Feb. 23, 2012.

5. 連携・国際活動・社会貢献、その他

5. 1 センター内の連携活動

- ・システム工学研究科櫻井グループと、シフト法を用いた線形方程式解法の時間依存密度汎関数理論への応用に関して共同研究を行っている。(当グループに属する博士後期課程大学院生(D2)の篠原が、デュアル学位制度のもとで行っている共同研究。)
- ・センター内の宇宙分野・生命分野の教員と共同で、宇宙アミノ酸の起源に関するテーマで研究を行っている大学院生の指導に協力している。
- ・量子物性研究部門の研究者(トン准教授、前島助教他)と計算光科学を中心に定期的にセミナーを行っている。
- ・センターに新たに導入された GPU 並列計算機 HA-PACS の利用に向けて、光と物質の相互作用に関するマルチ GPU 計算コードの準備を進めている。

5. 2 国内研究協力

- ・理化学研究所(中務准主任研究員)のグループ、新潟大学(松尾教授)のグループと、DFT に関する定期会合を開催し、一部の研究者と共同研究を進めている。
- ・分子科学研究所の信定准教授のグループと、戦略プログラム分野2での活動に基づく京コンピュータの利用を含め、電磁波と物質の時間依存密度汎関数理論に基づく第一原理計算に関して共同研究を行っている。
- ・関西光科学研究所の理論研究者(乙部研究員)と、光と物質の相互作用に関する研究協力をを行っている。

5. 3 国際研究協力

- ・米国ワシントン大学の Bertsch 教授と、光と物質の相互作用に関する計算科学研究について、長年にわたる共同研究を継続している。
- ・韓国の GIST/APRI(高等光技術研究所)と、光科学に関する共同研究を立ち上げつつある。

5. 4 社会貢献

- ・寺崎は、HPCI 戦略プログラム分野5のユーザー支援において、プログラム支援を取りまとめる役割を果たすとともに、2件のプログラム支援を行った。また、戦略プログラム分野5主催の原子核分野における大規模計算に関する研究会「大規模計算による原子核研究の展開—核子多体系を中心に—」を主催した(2012 年 1 月 24

ー25 日、於理化学研究所)。

・矢花は、HPCI 戦略プログラム分野5の活動で分野間連携を担当しており、戦略プログラム分野2と分野5の連携活動として量子系の大規模計算に関する連続研究会を組織した。

・本グループでは、実時間・実空間法に基づく時間依存コーン・シヤム方程式の数値解法を主要な方法論として用いている。同様な方法は国内外で開発が進んでいるが、本グループで最近進展させた結晶中の電子ダイナミクスを記述する計算法に関してはまだ例が少なく、計算コードの公開に向けた準備を進めている。