

II-2. 原子核物理分野

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)
研究員	谷口 億宇、須原 唯広 (学振特別研究員)
学生	大学院生 10名

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、原子核物理学から物質科学、光科学にわたる広範な分野で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の励起・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。原子核物理学は、格子 QCD に基づく核力の計算や軽い原子核の直接計算などで素粒子物理学と結びつき、また元素の起源や星の構造を通じて宇宙物理学とも密接に関係している。本グループでは、現在このような連携を持つテーマとして、ニュートリノ質量に関係する二重ベータ崩壊行列要素の計算や、重元素合成の鍵となるトリプルアルファ反応の計算などの研究が進展中である。

当グループではまた、原子核物理学と共通する方法論を活かして、物質中の電子ダイナミクスに対し物質科学の第一原理シミュレーション法を用いた計算物質科学研究を展開している。現在は、極限的パルス光と物質の相互作用に関わる光科学研究が進展している。特に本グループが最近開発したマクスウェル方程式と時間依存密度汎関数理論を組み合わせるマルチスケール・シミュレーションの方法は、光の伝播を記述する巨視的電磁気学を、ミクロな量子論に基づく第一原理計算から記述する過去に例のないものであり、国内外の注目を集めている。

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

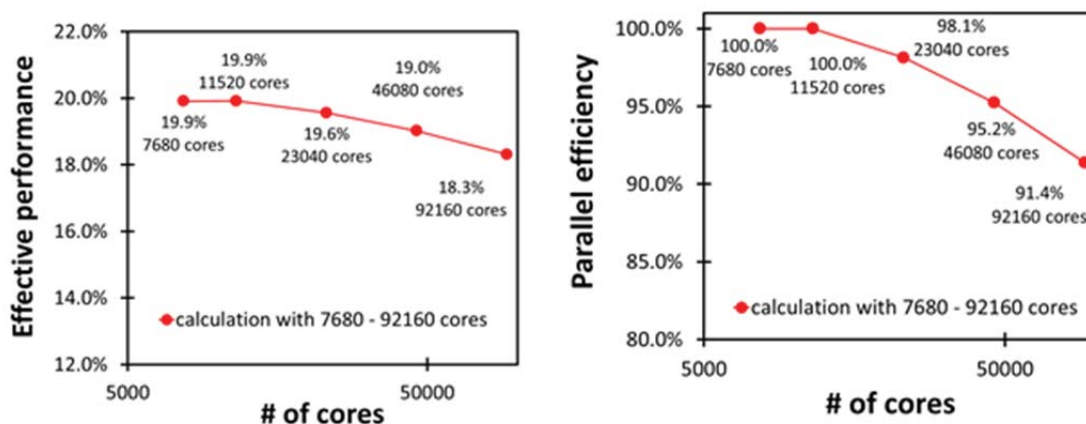
(1) 高強度パルス光と物質の相互作用を記述する第一原理マルチスケール・シミュレーション (矢花、篠原、佐藤、乙部 (原研)、G.F. Bertsch (Univ. Washington)、李 (APRI))

光とバルク物質 (結晶) との相互作用は、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を含む構成関係式で取り入れられる。ところが近年発展の著しい極限的な光科学 (短パルス極限であるアト秒科学、物質中の電場と光電場が同程度となる高強度光科学など) では、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して扱うことが許されず、巨視的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同時に結合して解くことが必要とされている。また、可視光の波長は μm 領域、電子ダイナミクスは nm 以下の空間スケールであることから、この問題はマルチスケール物理の課

題となっている。

昨年度我々は、パルス光が半導体表面に垂直に入射する場合に関して、高強度パルス光が物質中を伝播し、光電磁場から電子にエネルギーが不可逆に移行する過程を記述するマルチスケール・シミュレーション法の開発に成功した。この計算は、巨視的マクスウェル方程式を解くために用意する各巨視的格子点で、微視的電子ダイナミクスを独立に解くため、簡単な 1 次元の光伝播に対しても数千コアを要する大規模な数値計算となる。本年度の前半に、京コンピュータの試験運用を利用して、このマルチスケール・シミュレーションコードの高効率な並列化に取り組んだ。下の図は、実行効率と、強スケーリングのもとでの並列化効率を示している。ハイブリッド並列のもとで、およそ 7000 コアから 90000 コアの間で実行効率はおよそ 18-20%の高い値を示し、また 7680 コアを基準として 90000 コアを越える並列度においても並列化効率は 90%を越える値となっているなど、スケーリングに優れていることが示された。

本研究で作成した計算コードは、フェムト秒レーザーパルスと物質の相互作用を調べる上で極めて有効である。この課題に関し、本年度よりマックスプランク量子光学研究所のアト秒科学実験グループと共同研究を開始している。また、韓国 APRI、ウィーン工科大、米国バンダービルト大の理論グループとの共同研究を立ち上げつつある。



(2) 半金属 Sb のコヒーレントフォノン生成機構の解明 (篠原、佐藤、矢花、岩田 (東大)、乙部 (原研)、G.F. Bertsch (Univ. Washington))

パルス光がバルク物質 (結晶) に照射した際に見いだされる現象の一つに、巨視的な空間領域で結晶を構成する原子が一様に運動するコヒーレントフォノンがある。本年度は、半金属 Sb を対象に、コヒーレントフォノン生成のメカニズムを調べた。実験的には光学フォノンの種類に応じて異なるフォノン生成メカニズムが見いだされているが、計算の結果

は同一のメカニズム（実励起型）を示唆しており、観測事実を説明することはできなかった。また、現象論としてしばしば用いられる 2 テンソルモデルに基づく記述の正当性を理論的に調べた。

(3) パルス光により励起した半導体の誘電応答に対するポンプ・プローブ数値実験（佐藤、篠原、矢花、乙部（原研）、G.F. Bertsch (Univ. Washington)）

パルス光により励起した物質の誘電率は、フェムト秒程度の時間で大きく変化することが知られている。我々は、ポンプ・プローブ実験に相当する数値シミュレーションを行い、ポンプ光電場により励起した半導体にプローブ光電場を印加し、そのプローブ光電場によって生じたカレントを調べることにより、励起した物質の誘電率を調べた。その結果、誘電率の実部は、励起したキャリアが自由電子として振る舞うことを仮定したドルーデモデルにより定量的に記述されることが分かった。一方誘電率の虚部は、より複雑な振る舞いをする事が明らかになった。

(4) ハイブリッド汎関数を用いた電子ダイナミクス計算の GPU 並列計算（谷口、佐藤、篠原、矢花）

光電場により物質中に引き起こされる電子ダイナミクスを定量的に調べる上で、エネルギー汎関数の適切な選択は極めて重要である。絶縁体や半導体の場合、光応答に関わる物質の最も基本的な物理量はバンドギャップであるが、最も単純な汎関数の選択肢である局所密度近似を用いると、系統的にバンドギャップが過小評価されることが知られている。最近、メタ GGA やハイブリッド汎関数など、密度だけではなく軌道の性質を取り入れた汎関数を用いることにより、局所密度近似で問題となるバンドギャップ過小評価の問題が、大幅に改善されることが分かってきている。

ハイブリッド汎関数は、バンドギャップや誘電関数の記述を著しく改善するものとして近年特に注目されているが、局所密度近似と比較すると計算コストが膨大なものとなる欠点がある。我々は、計算科学研究センターに導入された超並列 GPU 計算機である HA-PACS を用いてハイブリッド汎関数を用いた電子ダイナミクス計算の高速化を試みた。ハイブリッド汎関数を用いる場合、非局所交換項の計算のために比較的小さいサイズの 3 次元複素離散フーリエ変換を非常に多数回行うことが必要となる。この作業を GPU の CUDA ライブラリである cufft を用いて実装する計算コードの開発を行った。その結果、同等のライブラリを用いた場合、GPU 計算は CPU 計算に比べ高い計算効率を示すことが確認できた。現在、高強度パルス光が Si 結晶に入射した場合のハイブリッド汎関数を用いた電子ダイナミクス計算を行っている。

【2】原子核の励起状態

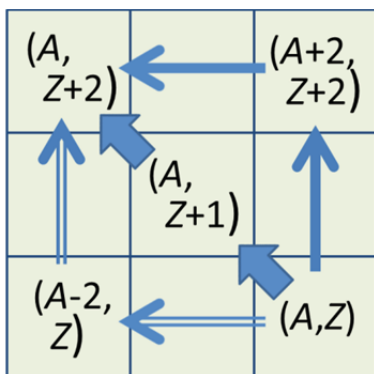
(1) 二重ベータ崩壊行列要素の QRPA 計算 (寺崎)

寺崎は、準粒子乱雑位相近似 (QRPA) を用いて、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の計算に平成 23 年度に引き続き取り組んでおり、この課題は平成 24 年度、科研費研究活動スタート支援に採択されている (2 年目)。もしこの崩壊が観測されれば、原子核行列要素の二乗と電子の位相空間因子の積 (理論計算) とその崩壊の寿命 (実験測定) からニュートリノ質量の期待値が求められる。

原子核行列要素は、ニュートリノポテンシャルの二体相互作用行列、始状態と終状態から求めた二種類の QRPA 励起中間状態の重複行列、始状態と終状態から QRPA 励起中間状態への二つの二核子移行遷移行列の積のトレースによって求められる。

本研究の特徴の一つは、下図に示すように、二核子移行を経由する反応を考えていることである。これは完全性近似のもとで可能であるが、いままで用いられたことがない。この方法により、荷電変化反応に適用した際 QRPA はあまり良い近似でないという問題を避けることができ、また、原子核行列要素の重要な部分を実験的に直接検証する可能性をもたらす。もう一つの特徴は、今まで他の人々が用いてきた方法よりもずっと精密な QRPA 状態の重複の計算方法を用いていることである。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、重複行列の特性をうまく用い、強力な並列計算機を用いれば、その常套的考え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が特筆される。平成 24 年度の進展は、以下のとおりである。

1. 平成 24 年度に開発した、QRPA 励起状態の重複の計算方法の数学的性質を詳細に調べ、かつ数値計算可能であることを二つのテストケースで示し、それらの研究結果を二編の原著論文で発表した。
2. ニュートリノポテンシャルの二体相互作用行列を計算するプログラムを開発した。この計算に必要な関数は積分可能な特異点を持つのであるが、その特異性が数値積分の精度に影響しないように工夫してある。
3. 放出される電子の位相空間因子を計算するプログラムを開発した。
4. 上記 1 と 2 で求まる重複行列と二体相互作用行列、並びに二核子移行の遷移行列を用いて、原子核行列要素を求めるプログラムを開発した。 ^{150}Sm 、 ^{150}Nd 並びにこの質量数領域の 2, 3 の原子核の Skyrme-QRPA 計算を複数の K^π について実行し、QRPA 励起状態を得た。現在質量数 150 近辺で QRPA 状態の重複計算と二体相互作用行列計算を京コンピュータ上で大規模に実行するため準備を進めている。



核図表 (縦軸: Z、横軸: N) 上でのニュートリノレス二重ベータ崩壊の経路 (対角線) と完全性近似のもとで計算上可能な二核子移行 (水平方向と鉛直方向の遷移) 経路。A は質量数。

(2) 多 Slater 行列式の重ね合わせによる ^{12}C 原子核の記述 (福岡、矢花、船木 (理研)、中務 (理研))

現実的核力から出発して、非経験的に原子核の基底状態と励起状態を計算により記述し予言することは、今日の原子核理論の最重要課題の一つとなっている。しかし、 ^{12}C より重い原子核の基底状態や、基底状態とは大きく異なる構造を持つ励起状態に対して、収束した解をえることは容易ではない。本研究で我々は、現実的な核力ではなく単純化された有効核力を用い、基底状態と励起状態に対しシュレディンガー方程式の収束した多体波動関数を求め、励起構造を解明することを目的として研究を進めている。本年度、Skyrme 力を用いて ^{12}C 原子核の基底状態と励起状態を総合的に調べ、論文にまとめた。方法論の特色として、通常基底状態を得るために用いられる虚時間計算法をさまざまなクラスター相関を持つ多体波動関数を生成するために利用し、それらを基底として多体ハミルトニアンを対角化していることが挙げられる。その結果、 ^{12}C の基底状態及び励起状態に現れる、さまざまな相関構造—殻模型的状態からクラスター状態まで—を統一的に記述し理解できることが明らかになった。

(3) Gogny 力を用いた時間依存平均場計算 (橋本)

原子核の集団運動を記述する方法の中でも時間依存平均場の方法は、理論的な枠組みの展開においても、また、実際の現象に対応した定性的・定量的な説明・記述を行ううえでも中心的な役割を果たしてきた。時間依存平均場の方法の中では、時間依存ハートレーフォック (TDHF) が広く用いられている。TDHFは、スキルム有効相互作用を用いた密度汎関数理論として位置づけられ、計算機の能力向上によって核図表上の広い範囲の原子核を対象とした応用が可能になっている。TDHFは、ゼロレンジの力であるスキルム有効相互作用と3次元空間格子の組み合わせにより、計算コードがシンプルで適応範囲の広いツールとなった。最近では、中性子過剰核のダイナミクスにおける対相関の役割を研究するために、空間格子によるスキルム力+時間依存ハートレーフォックボゴリュボフ (TDHFB) の枠組みが提案されている。

一方、ゴグニー有効相互作用は、そのレンジが有限の大きさを持つことで、平均場計算に用いられる基底はもっぱら調和振動子基底であった。そこで、連続状態と束縛状態の間に対相関が働く中性子過剰核の運動を記述するうえでは空間格子が便利であることに着目し、ゴグニー有効相互作用でも空間格子を用いた平均場計算が可能な枠組みを作ることを

目指している。ゴグニー有効相互作用の場合には、ガウス型の相互作用形のおかげで対相関の働く空間に自然なカットオフが入る点がメリットである。一方、有限なレンジのために、2体相互作用の行列要素の計算に CPU 時間をとられることになる。2012 年度は、ラグランジュ格子点を利用した TDHFB のコードを作成し、酸素 ^{16}O 、 ^{20}O 、ネオン ^{20}Ne 、マグネシウム ^{34}Mg などの核において四重極型の振動運動の線形応答計算を試みた。対相関が無い系では TDHF 計算になる。 ^{16}O 、 ^{20}O 、 ^{20}Ne について HF および HFB 基底状態を求め、線形応答の計算を行い、エネルギー保存を確認した。また、強度関数が調和振動子基底による計算のものとほぼ同じになることを示した。 ^{34}Mg の四重極型線形振動の計算は現在も継続中である。エネルギー保存のための定式化に時間が掛かってしまったが、調和振動子基底を用いた場合のエネルギー保存と同程度の精度を出せるようになった。

(4) 励起状態に現れる変形状態とクラスタ相関 (谷口)

原子核は励起により多彩に構造が変化する。低励起状態では変形構造とクラスタ構造が重要である。クラスタ構造は、原子核が複数の塊に分かれて局在した、空間的な相関の強い構造である。本年度はカルシウム 42 (^{42}Ca) や硫黄同位体の低励起状態の構造の研究を行った。

^{42}Ca には変形回転帯や ^{38}Ar への α 移行反応で強く生成される構造が低励起状態に存在する。後者は α - ^{38}Ar クラスタ構造を示唆する。しかし、 ^{42}Ca について変形やクラスタ構造の両方を扱った理論的研究はなく、その詳細な構造は理解されていなかった。

谷口は様々な変形状態や α - ^{38}Ar クラスタ構造波動関数を重ね合わせてハミルトニアンを対角化することにより、実験的に発見されている変形回転帯や α 移行反応でよく生成される励起状態を再現した。また、 α 移行反応でよく生成される励起状態の上に立つ変形回転帯や、さらに別の大きく変形した変形状態 (超変形状態) が存在することを予言した。

硫黄同位体のうち陽子数と中性子数が等しい ^{32}S には、 ^{16}O - ^{16}O クラスタ構造を多く含む超変形状態が存在することが理論的に予想されている。似た構造として、ベリリウム 8 の基底状態の α - α クラスタ構造がある。ベリリウム同位体の中性子過剰核には、 α - α クラスタ構造の周りに余剰中性子が分布した構造が基底状態やその近傍に現れることが知られている。従って、硫黄同位体には、 ^{16}O - ^{16}O クラスタ構造の周りに余剰中性子が分布した超変形状態が系統的に存在することが期待される。

本年度は、 ^{35}S などの硫黄同位体の励起状態に現れる変形状態を研究した。励起状態に変形状態が存在することを予言した。その変形状態は、特に陽子密度分布が対称な括れ構造をしており、これは ^{16}O - ^{16}O クラスタ構造成分を多く含むことを示唆している。

^{42}Ca や硫黄同位体の研究結果から、変形状態はクラスタ構造成分を含むことが予想される。クラスタ構造成分は、多核子移行あるいは捕獲反応断面積と密接に関係していることが予想され、それは元素合成などにも重要である。

(5) エネルギー変分を用いた断熱核間ポテンシャルの導出と低エネルギー核融合（谷口、延与（京都大学）、須原）

核反応研究において、核間ポテンシャルは基礎となり重要である。しかし、核子間力から核間ポテンシャルを微視的に導出する手法は確立していない。そのためには核の構造変化を微視的に扱うことが必要である。

谷口や須原らは、核間距離を拘束条件としてエネルギー変分して、得られたエネルギーから各核の基底状態のエネルギーの和を引くことにより、核間ポテンシャルを導出する方法を開発した。この手法は、核間運動が核子の運動よりも遅い断熱近似に相当する。

その手法により得られた断熱核間ポテンシャルを $^{16}\text{O} + ^{16}\text{O}$, $^{16}\text{O} + ^{18}\text{O}$ 低エネルギー核融合断面積の導出に応用した。それぞれの核融合断面積の衝突エネルギーの依存性が再現され、それによりこの断熱核間ポテンシャルの妥当性が確認された。また、 $^{16}\text{O} + ^{18}\text{O}$ は $^{16}\text{O} + ^{16}\text{O}$ に比べて核融合断面積が大きくなるが、それは ^{18}O の 2 余剰中性子の構造変化に起因することがわかった。

【3】原子核の反応

(1) トリプルアルファ反応率の虚時間理論(赤堀、矢花、船木(理研))

トリプルアルファ反応は、3つの α 粒子が同時に衝突して ^{12}C 原子核を生成する反応であり、元素合成や星の構造を理解する上で極めて重要な反応である。この反応率を直接実験で調べることはできないため、理論的な評価が重要となる。融合のメカニズムに関して、高温では ^{12}C の 0_2^+ 状態、いわゆる Hoyle 状態を経由した過程が主要であり、より低温では共鳴状態としてある時間存在する ^8Be 核が、第3の α 粒子と非共鳴的に衝突し生成する過程が重要となる。さらに低温では、3つの α 粒子が共鳴状態を経ることなく ^{12}C が生成される非共鳴過程(共鳴の裾を経る過程)が重要となると考えられている。この反応率に対して、最近、量子3体理論に基づいた評価がいくつかのグループによりなされた。しかしそれらの結果は、低温領域において 10^{20} を超える差異があり、反応率の理論的評価は混とんとした状況にある。

トリプルアルファ反応率を理論的に評価する上で困難となる点の一つは、3つの電荷を持つ粒子の散乱問題に対して、適切な定式化が知られていないことである。このため、3体反応の断面積や散乱振幅を求める際に、何かしらの近似が必要となる。我々はこの困難を克服する方策として、温度の逆数を虚時間とみなす光捕獲反応率に対する虚時間理論を提案した。この理論を用いると、散乱問題を解くことなく反応率を得ることが可能となるため、特にトリプルアルファ反応率の計算に適している。我々は虚時間理論に基づく計算によりトリプルアルファ反応率に関して次の結論を得た。①従来用いられてきた反応率(NACRE)が、我々の微視的な3体理論計算により高い精度で再現される。②チャンネル結合法を用いる場合、チャンネルを制約すると何十桁もの反応率の増大をもたらす危険がある。またチャンネル数に対する収束性が著しく遅い。③R 行列理論と虚時間理論を組み合わせることで、従来用いられてきた反応率(2体反応が連続して起こるプロセスを仮定)の導出がサポートされる。

現在、これらの結果を論文にまとめている。

(2) 多核子移行反応の TDHF 計算(関澤、矢花)

我々は、低エネルギー原子核衝突の周縁部で重要となる核子移行反応に対して、時間依存 Hartree-Fock 理論に基づく記述を検討している。今年度、実験的な測定がなされている系 $^{40, 48}\text{Ca}+^{124}\text{Sn}$ 、 $^{40}\text{Ca}+^{208}\text{Pb}$ 、 $^{58}\text{Ni}+^{208}\text{Pb}$ に対する TDHF 計算の結果を論文にまとめた。さらに、KISS 計画の準備段階として KEK の実験グループが行っている $^{136}\text{Xe}+^{198}\text{Pt}$ 衝突に対して、移行反応に基づく原子核生成断面積の評価を行った。

4. 教育

<学位>

1. 理学博士：

篠原 康 「Study on coherent phonon generation based on time-dependent density functional theory」

2. 理学修士：

西山了史 「Gauss 基底展開法を用いた Gogny-TDHF による軽い核の線形応答」

赤堀孝彦 「低温領域におけるトリプルアルファ反応率の虚時間法を用いた研究」

植草雅人 「ハイブリッド汎関数を用いた電子ダイナミクス計算」

高宮悠介 「Kadanoff-Baym 方程式による原子分子の光応答の研究」

<集中講義>

1. 中重原子核の構造

寺崎 順

千葉大学理学研究科、2012 年 11 月 29, 30 日

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

1. 科学研究費補助金 基盤 (B)

矢花一浩 (代表)、2011 年 4 月～2015 年 3 月、総額 16250 千円、

課題名「固体中のフェムト・アト秒電子ダイナミクスに対する第一原理計算」

2. 科学研究費補助金 新学術領域研究 (公募研究)

矢花一浩 (代表)、2011 年 4 月～2013 年 3 月、総額 3900 千円

課題名「高強度パルス光の伝播を記述するマルチスケール・シミュレータの開発」

3. 科学研究費補助金 研究活動スタート支援

寺崎順 (代表)、2011 年 8 月～2013 年 3 月、総額 2730 千円

課題名「Skyrme-QRPA を用いた二重ベータ崩壊の遷移行列要素の計算」

6. 研究業績

(1) 研究論文

1. Nonadiabatic generation of coherent phonons

Yasushi Shinohara, Shunsuke A. Sato, Kazuhiro Yabana, Tomohito Otobe, Jun-ichi Iwata,

George F. Bertsch

J. Chem. Phys. 67, 22A527 (2012), 138, 029903 (2013) Erratum.

2. Imaginary-time method for the radiative capture reaction rate

K. Yabana, Y. Funaki

Phys. Rev. C85, 055803 (2012).

3. Time-dependent Hartree-Fock calculations for multinucleon transfer processes

in $^{40,48}\text{Ca}+^{124}\text{Sn}$, $^{40}\text{Ca}+^{208}\text{Pb}$, and $^{58}\text{Ni}+^{208}\text{Pb}$ reactions

K. Sekizawa, K. Yabana

arXiv:1303.0552 [nucl-th], submitted to Phys. Rev. C.

4. Dielectric response of laser-excited silicon

S.A. Sato, K. Yabana, Y. Shinohara, T. Otobe, G.F. Bertsch,

arXiv:1303.3249 [cond-mat.mtrl-sci], submitted to Phys. Rev. B.

5. Large scale calculations for cluster structure of light nuclei with Skyrme interaction

Y. Fukuoka, Y. Funaki, T. Nakatsukasa, K. Yabana

J. Phys. Conf. Ser. 436, 012012 (2013)

6. Stochastic approach to correlations beyond the mean field with the Skyrme interaction

Y. Fukuoka, T. Nakatsukasa, Y. Funaki, K. Yabana

AIP Conf. Proc. 1491, 222-225 (2012)

7. Overlap of quasiparticle random-phase approximation states for nuclear matrix elements of the neutrino-less double- β decay

J. Terasaki

Phys. Rev. C 86, 021301(R) (2012)

8. Testing Skyrme energy-density functionals with the QRPA in low-lying vibrational states of rare-earth nuclei

J. Terasaki

Prog. Theor. Phys. Suppl. no. 196 (2012) 377

9. Overlap of quasiparticle random-phase approximation states based on ground states of different nuclei: Mathematical properties and test calculations

J. Terasaki

Phys. Rev. C 87, 024316 (2013).

10. Overlap of QRPA states based on ground states of different nuclei

J. Terasaki

Acta Physica Polonica B 44, 259 (2013).

11. Computational Nuclear Quantum Many-Body Problem: The UNEDF Project

S. Bogner, A. Bulgac, J. Carlson, J. Engel, G. Fann, R.J. Furnstahl, S. Gandolfi, G. Hagen, M. Horoi, C. Johnson, M. Kortelainen, E. Lusk, P. Maris, H. Nam, P. Navratil, W. Nazarewicz, E. Ng, G.P.A. Nobre, E. Ormand, T. Papenbrock, J. Pei, S. C. Pieper, S. Quaglioni, K. Roche, J. Sarich, N. Schunck, M. Sosonkina, J. Terasaki, I. Thompson, J.P. Vary, S.M. Wild

Submitted to Computer Physics Communications

12. Linear responses in time-dependent Hartree-Fock Bogoliubov Method with Gogny interaction,

Y.Hashimoto

Eur. Phys. Joun. A 48(2012): 55.

13. Separation of a Slater Determinant Wave Function with a Neck Structure into Spatially Localized Subsystems

Y. Taniguchi and Y. Kanada-En'yo

Prog. Theor. Phys. 128, 349-362 (2012).

14. Prolate, oblate, and triaxial shape coexistence, and the lost magicity of $N = 28$ in ^{43}S

M. Kimura, Y. Taniguchi, Y. Kanada-En'yo, H. Horiuchi, and K. Ikeda

Phys. Rev. C 87, 011301(R) (2013).

15. Adiabatic internuclear potentials obtained by energy variation with the internuclear-distance constraint

Y. Taniguchi, Y. Kanada-En'yo and T. Suhara

Prog. Theor. Exp. Phys. 2013, 043D04 (2013).

16. Cluster correlations in largely deformed states

Y. Taniguchi

Jour. Phys. Conf. Ser. 436, 012055 (2013)

17. Separation of a Slater Determinant Wave Function with a Neck Structure into Spatially Localized Subsystems

Y. Taniguchi and Y. Kanada-En'yo

Few-Body Syst. DOI 10.1007/s00601-013-0623-3 (2013)

18. Cluster and deformation in C isotopes

Yoshiko Kanada-En'yo, Fumiharu Kobayashi, Tadahiro Suhara

AIP Conf. Proc. 1491, 5-9 (2012)

19. $2\alpha+t$ cluster structure in ^{11}B

Tadahiro Suhara and Yoshiko Kanada-En'yo

Few-Body Syst. (2013)

20. Cluster structures of excited states in ^{11}B

Tadahiro Suhara and Yoshiko Kanada-En'yo

accepted by IOP Conference Series (Cluster12)

21. Cluster correlation in light nuclei

Yoshiko Kanada-En'yo, Fumiharu Kobayashi, and Tadahiro Suhara

accepted by IOP Conference Series (Cluster12)

22. Three-dimensional structure of low-density nuclear matter

M.Okamoto, T.Maruyama, K.Yabana, T.Tatsumi,

Phys. Lett. B713, 284, 2012

23. Non-uniform structures in low-density nuclear matter and neutron star crust.

M.Okamoto, T.Maruyama, K.Yabana, T.Tatsumi

PoS (NIC XII) 218

24. Three-dimensional calculation of inhomogeneous nuclear matter

M.Okamoto, T.Maruyama, K.Yabana, T.Tatsumi

AIP Conf. Proc. 1484, 394 (2012)

国際会議発表

1. Ab-initio theory for intense laser pulses in solids

K. Yabana

Korean Physical Society 2012 Spring Meeting, April 25-27, 2012, Daejeon, Korea

2. Ab-initio theory for intense laser pulses in solids

K. Yabana

6th International Conference on Laser Probing, June 4-8, 2012, Paris, France

3. Real-time electron dynamics in solids under strong electromagnetic fields

K. Yabana

ISSP-CMSI International Workshop/Symposium on Material Simulation in Petaflops era (MASP2012), June 27, 2012, Tokyo, Japan

4. Time-Dependent Density Functional Theory for Electron Dynamics

K. Yabana

BERTSCHFEST, UW, Seattle, Sept. 7-9, 2012

5. Ab-initio description for the interaction of intense laser pulses with solids

K. Yabana

Frontiers in Intense Laser-Matter Interaction Theory (FILMITH), Sept. 19-21, 2012, Max Planck Institute fur Quantenoptik, Garching, Germany

6. Triple-alpha reaction rate - tunneling of three charged particles

K. Yabana

Many-body Open Quantum Systems: From Atomic Nuclei to Quantum Optics, Sept. 24-28, 2012, ECT*, Trento, Italy

7. Multi-scale first-principles approach for strong electromagnetic fields in solids

K. Yabana

Int. Symp. on Computics: Quantum Simulation and Design, Oct. 11-13, 2012, Osaka,

Japan

8. A New Theoretical Approach for Triple-alpha Reaction Rate

K. Yabana

1st Visiting NAOJ Fellow Workshop on Element Genesis and Cosmic Chemical Evolution: r-process perspective, Oct. 17-19, 2012, RIKEN Nishina Hall

9. Time-dependent density functional theory for ultrafast electron dynamics in solid

K. Yabana

Computational approaches to nuclear many-body problems and related quantum systems, Feb. 12-16, 2013, RIKEN, Wako, Japan

10. Overlap of QRPA states based on ground states of different nuclei

J. Terasaki

XLVII Zakopane Conference on Nuclear Physics, Extremes of the Nuclear Landscape, Zakopane, Poland, Aug. 27–Sep. 2, 2012.

11. Effects of pairing correlation in anharmonic collective vibrations

in $^{44,52}\text{Ti}$ with Gogny-TDHFB (poster)

Y.Hashimoto

The 4th International Conference on “Collective Motion in Nuclei under Extreme Conditions”, Shonan Village Center, Kanagawa, Japan, Oct. 22-26, 2012.

12. Separation of a Slater determinant wave function with a neck structure into spatially localized subsystems,

Y. Taniguchi and Y. Kanada-En'yo

The 20th International IUPAP Conference on Few-Body Problems in Physics (FB20), Fukuoka, Japan, Aug. 20-25, 2012.

13. Cluster correlations in largely deformed states

Y. Taniguchi

10th International Conference on Clustering Aspects of Nuclear Structure and Dynamics (Cluster12), Debrecen, Hungary, Sept. 24-28, 2012.

14. Cluster correlations in largely deformed states

Y. Taniguchi

Large-scale computations for nuclear alpha-particle condensation, Wako, Japan, Nov. 13-19, 2012.

15. Cluster structures of excited states in ^{11}B

T. Suhara

10th International Conference on Clustering Aspects of Nuclear Structure and Dynamics (Cluster12), Debrecen, Hungary, Sept. 24-28, 2012.

16. $2\alpha+t$ cluster structures in ^{11}B

T. Suhara

The 20th International IUPAP Conference on Few-Body Problems in Physics (FB20), Fukuoka, Japan, Aug. 20-25, 2012.

17. Real-Time TDDFT simulation for coherent phonon generation in crystalline solids

Y. Shinohara, S. A. Sato, K. Yabana, T. Otobe, J.-I. Iwata, G. F. Bertsch

APS march meeting 2013, Baltimore, USA, 2013 March 18-22 (Oral)

18. First principles calculation for electron-phonon dynamics in crystals under ultrashort laser pulses (Poster)

Y. Shinohara, S.A. Sato, K. Yabana, J.-I. Iwata, T. Otobe, G. F. Bertsch

ISD-QSD, Osaka, Japan, 2012 October 11-13

19. Coherent phonon generation in time-dependent density-functional theory (Poster)

Y. Shinohara, S.A. Sato, K. Yabana, J.-I. Iwata, T. Otobe, G.F. Bertsch

MAterial Simulation in Petaflops era (MASP2012), Kashiwa, Japan, 2012 July 12-13

20. First-principles calculation for coherent phonon generation in solids

Y. Shinohara, K. Yabana, J.-I. Iwata, T. Otobe, G.F. Bertsch

International Conference on Laser Probing, Paris, France, 2012 June 4-8

21. Theoretical investigation for coherent phonon generation studied with first-principles calculation (Poster)

Y. Shinohara, K. Yabana, J.-I. Iwata, T. Otobe, G.F. Bertsch

CLEO:2012, San Jose, USA, 2012 May 8-10

22. Non-uniform structures in low-density nuclear matter and neutron star crust

M.Okamoto, T.Maruyama, K.Yabana, T.Tatsumi

12th International Symposium on Nuclei in the Cosmos, Cairns conventional hole, Australia, Aug 5-10, 2012

23. Large scale calculations for cluster structure of light nuclei with Skyrme interaction

Y. Fukuoka, Y. Funaki, T. Nakatsukasa, K. Yabana

10th Int. Conf. Clustering Aspects of Nuclear Structure and Dynamics, Debrecen, Hungary, 24-28 Sept. 2012.

24. A fully microscopic study of multinucleon transfer processes in $^{136}\text{Xe}+^{198}\text{Pt}$: An application of the time-dependent Hartree-Fock theory

K. Sekizawa, K. Yabana

10th ASRC International Workshop, Nuclear Fission and Decay of Exotic Nuclei, Japan Atomic Energy Agency, Tokai, Japan, Mar. 21-22, 2013.

25. Time-dependent Hartree-Fock theory for multinucleon transfer processes in heavy-ion collisions

K. Sekizawa, K. Yabana

International workshop on Computational approaches to nuclear many-body problems and related quantum systems, RIKEN, Wakou, Japan, Feb. 12-16, 2013.

26. Projection method for TDHF final wave function: Analysis of multi-nucleon transfer processes

K. Sekizawa, K. Yabana

11th CNS International Summer School, RIKEN Nishina Center, Wakou, Japan, Aug. 29- Sept. 4, 2012.

27. Time-dependent density functional theory for ultrafast electron dynamics at solid surfaces (poster)

S.A. Sato, Y. Shinohara, T. Otobe, K. Yabana

Frontiers in Intense Laser-Matter Interaction Theory (FILMITH), Max Planck Institute of Quantum Optics, Munich, Germany, Sept. 19-21, 2012

28. First-principles numerical pump-probe experiments: intense laser pulses on solid (poster)

S.A. Sato, Y. Shinohara, T. Otobe, K. Yabana

MAterial Simulation in Petaflops era (MASP2012), Kashiwa library media hall, Kashiwa, Japan, July 12-13, 2012

国内学会・研究会発表

1. フェルミ多粒子系ダイナミクスの大規模計算

矢花一浩

研究会「大規模シミュレーションと数理アルゴリズム」, 2012 年 5 月 27-28 日, 東京大工学

2. 高強度超短パルス光と物質の相互作用を記述する巨視的マクスウェル方程式の第一原理計算

矢花一浩

超高速現象研究会、東京工業大学、8 月 3 日

3. 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・シミュレーション

矢花一浩

第 3 回計算物質科学イニシアティブ (CMSI) 研究会～超並列計算が拓く新しい計算物質科学～、

2012 年 12 月 3-5 日

4. 物質科学と原子核理論の接点を巡って

矢花一浩

離合集散の物理とその拡がり、2013 年 1 月 26 日 (土) 京都大学基礎物理学研究所

5. A hybrid density functional + configuration mixing approach for light nuclei

K. Yabana

GCOE interdisciplinary workshop on numerical methods for many-body correlations, Feb. 5-6, 2013, Univ. Tokyo

6. 量子多体系の密度汎関数アプローチ

矢花一浩

素核宇宙融合レクチャーシリーズ第 8 回、2013 年 2 月 22-23 日、理化学研究所

7. Overlap of QRPA states based on ground states of different nuclei

寺崎 順

筑波大学原子核理論研究室セミナー、2012 年 5 月 11 日

8. 原子核応答の大規模計算

寺崎 順

筑波大学数理物質科学研究科 平成 24 年度定例第 8 回物理学セミナー、2012 年 10 月 31 日

9. Skyrme-QRPA for nuclear collective dynamics with HPC

吉田賢市、松尾正之、下山裕孝、広川一也、中務孝、寺崎順

筑波大学計算科学研究センター学際共同利用 平成 23 年度成果報告・平成 24 年度中間報告、
2012 年 10 月 25 日

10. 原子核の密度汎関数理論を用いた二重ベータ崩壊行列要素と基底状態の計算

寺崎 順、矢花一浩、橋本幸男、熱田貴之

筑波大学計算科学研究センター学際共同利用 平成 24 年度中間報告、2012 年 10 月 25 日

11. Nuclear transition matrix elements of neutrino-less double-beta decay for determining the neutrino mass

寺崎 順

筑波大学計算科学研究センター年次報告会、2013 年 2 月 26 日

12. 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、東京、
2013 年 3 月 5,6 日

13. ニュートリノレス二重ベータ崩壊の原子核行列要素のための QRPA 状態の重複計算

寺崎 順

日本物理学会 第 68 回年次大会、広島大学、2013 年 3 月 26-29 日

14. 変形超流動原子核における素励起モード・応答関数の計算 (ポスター)

中務孝、藏増嘉伸、数納広哉、江幡修一郎、稲倉恒法、寺崎順

平成 24 年度「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題中間報告会、
東京、2013 年、3 月 14,15 日

15. ^{35}S の負パリティ超変形状態のクラスタ相関

谷口億宇

第 68 回日本物理学会年次大会、広島大学、東広島、2013 年 3 月 26-29 日

16. p 及び sd 殻核の変形とクラスタ相関

谷口億宇

微視的有効相互作用の理論と核構造・核反応、京都大学、京都、2013 年 2 月 12-14 日.

17. ^{42}Ca における変形状態の共存と クラスタ相関

谷口億宇

日本物理学会秋季大会、京都産業大学、京都、2012 年 9 月 11-14 日.

18. sd 殻領域核の変形状態におけるクラスタ相関

谷口億宇

原子核の閾値近傍における共鳴現象と反応ダイナミクス、大阪大学、茨木、2012 年 7 月
18-20 日.

19. ^{11}B における $2\alpha+t$ クラスタ構造

須原唯広

RCNP 研究会「原子核の閾値近傍における共鳴現象と反応ダイナミクス」、2012 年 7 月 20
日

20. クラスタ・シェル競合を記述するモデルの発展

須原唯広、板垣直之

日本物理学会秋季大会、京都産業大学、京都、2012 年 9 月 11-14 日.

21. 炭素同位体におけるリニアチェイン構造

須原唯広

日本物理学会秋季大会、京都産業大学、京都、2012 年 9 月 11-14 日.

22. 現実的核力を用いたクラスター構造計算に向けて

須原唯広

原子核クラスター構造、反応研究における戦略ミーティング、理研ミニワークショップ、
2012 年 11 月 9-10 日

23. ^{16}C に現れるクラスター構造

須原唯広、延与佳子

日本物理学会 68 回年次大会、広島大学、2013 年 3 月 26 日-29 日

24. ラマン感受率の第一原理計算とコヒーレントフォノン振幅の評価

篠原康、佐藤駿丞、矢花一浩

日本物理学会 68 回年次大会、広島大学、2013 年 3 月 26 日-29 日

25. First-principles calculation for coherent phonon generation in solids (ポスター)

篠原康、佐藤駿丞、矢花一浩、乙部智仁、岩田潤一、G.F. Bertsch

テラヘルツ分光法の最先端--ここまできたテラヘルツ時間領域分光--、筑波大学
2012 年 10 月 25 日-26 日

26. 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振動数依存性の分析

篠原康、佐藤駿丞、矢花一浩、岩田潤一、乙部智仁、George F. Bertsch

日本物理学会 2012 年秋季大会、横浜国立大学、2012 年 9 月 18 日-21 日 (口頭)

27. 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振動数依存性の分析

篠原康、佐藤駿丞、矢花一浩、岩田潤一、乙部智仁、George F. Bertsch

第 73 回応用物理学会学術講演会、愛媛大学・松山大学 2012 年 9 月 11 日-14 日

28. シフト線型方程式のクリロフ部分空間法のスカラー化とその時間依存密度汎関数理論への応用(ポスター)

篠原康、矢花一浩、二村保徳、櫻井鉄也

日本応用数学会 2012 年度年会、稚内全日空ホテル 2012 年 8 月 28 日-9 月 2 日

29. コヒーレントフォノンの第一原理計算

篠原康

超高速現象研究会、東工大、8月3日

30. 原子核パスタ”と中性子星クラスト

岡本稔、丸山敏毅、矢花一浩、巽敏隆

基研研究会「ハドロン物質の諸相と状態方程式-中性子星の観測に照らして-」、
京都大学基礎物理学研究所、2012年8月30日-9月1日

31. 中性子星クラスト物質における構造と力学的性質

岡本稔、丸山敏毅、矢花一浩、巽敏隆

日本物理学会 2012 年秋季大会、京都産業大学、2012 年 9 月 11-14 日

32. Non-uniform nuclear matter in neutron star crust

岡本稔、丸山敏毅、矢花一浩、巽敏隆

Symposium on “Quarks to Universe in Computational Science (QUCS 2012) ”、奈良県
新公会堂、2012 年 12 月 13-16 日

33. 実空間格子での Gogny 相互作用を用いた計算

福岡佑太、船木靖郎、矢花一浩、中務孝

日本物理学会 2012 年秋季大会、京都産業大学、2012 年 9 月 11-14 日

34. Skyrme 力を用いたスレーター行列式の重ね合わせによる軽い核の記述： ^{16}O と ^{20}Ne

福岡佑太、船木靖郎、矢花一浩、中務孝

日本物理学会 第 68 回年次大会、広島大学東広島キャンパス、2013 年 3 月 26-29 日

35. TDHF 計算による核子移行反応の系統的分析

関澤一之、矢花一浩

日本物理学会 第 68 回年次大会、広島大学東広島キャンパス、2013 年 3 月 26-29 日

36. 射影演算子を用いた核子移行 TDHF 波動関数の分析

関澤一之、矢花一浩

日本物理学会 2012 年秋季大会、京都産業大学、2012 年 9 月 11-14 日

37. 時間依存平均場計算に基づく核子移行反応による生成核種波動関数の分析

関澤一之、矢花一浩

2012 年度原子核三者若手夏の学校、2012 年 8 月 2-7 日

38. 密度汎関数理論に基づく原子核ダイナミクスの研究 (ポスター)

関澤一之、矢花一浩、橋本幸男

平成 24 年度「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題中間報告会、イイノカンファレンスセンター、2012 年 3 月 15 日

39. 時間依存平均場計算に基づく核子移行反応による生成核種波動関数の分析 (ポスター)

関澤一之、矢花一浩

2012 年度原子核三者若手夏の学校、2012 年 8 月 2-7 日

40. 熱核融合反応率の虚時間計算

矢花一浩、船木靖郎

日本物理学会 2012 年秋季大会、京都産業大学、2012 年 9 月 11-14 日

41. 虚時間法を用いた 3α 融合反応率の計算

赤堀孝彦、矢花一浩、船木靖郎

日本物理学会 2012 年秋季大会、京都産業大学、2012 年 9 月 11-14 日

42. 虚時間法を用いた 3α 融合反応の研究

赤堀孝彦、矢花一浩、船木靖郎

日本物理学会 第 68 回年次大会、広島大学、2013 年 3 月 26 日~29 日

43. 超高速誘電応答変化に対する第一原理ポンププローブ数値実験

佐藤 駿丞、篠原康、乙部智仁、矢花一浩、George F. Bertsch

日本物理学会 第 68 回年次大会、広島大学、2013 年 3 月 26 日~29 日

44. パルス光による電子ホールプラズマ生成の第一原理計算

佐藤 駿丞、篠原 康、乙部智仁、矢花一浩

2012 年 秋季 第 73 回応用物理学会学術講演会、愛媛 松山大学、2012 年 9 月 11 日~14 日

45. パルス光による固体表面の超高速誘電関数変化の第一原理計算(ポスター)

佐藤 駿丞、篠原康、乙部智仁、矢花一浩、George F. Bertsch

計算物質科学研究センター(CCMS)・元素戦略プロジェクト 合同研究会「計算物性物理学の新展開」 東京大学物性研究所、2013 年 1 月 10 日~11 日

(4) その他の発表

<セミナー>

1. First principles calculation of electron dynamics under strong electromagnetic fields

K. Yabana

Univ. Vienna, Sept. 14, 2012

2. Ab-initio simulations of intense pulse propagation in SiO₂

K. Yabana

Max-Planck Institute for Quantum Optics, Garching, Germany, Mar. 13, 2013

3. Time-dependent density functional theory for electron dynamics in solids under strong electromagnetic fields

K. Yabana

Technische Universitat Vienna, Mar. 15, 2013

7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

1. 計算科学研究センター内異分野間連携

- 量子物性研究部門の全暁民准教授と、パルスレーザーと物質の相互作用に関し、ウーレン工科大を交えた共同研究について準備を始めた。(矢花)
- 星間空間における光誘起 L 型アミノ酸過剰の理論的研究に関し、生命科学研究部門、宇宙分野との連携研究に参加。(矢花)
- 超並列 GPU 計算機 HA-PACS の利用に関し、センターの先端計算科学推進室に参画し、電子ダイナミクス計算を GPU 化した計算コードを作成し研究を進めた。(矢花、谷口)

2. 国際連携・国際活動

- アト秒光科学に関する F. Krausz 教授、V. Yakovlev 研究員(独マックスプランク量子光学研究所実験・理論グループ)との共同研究。ルードヴィヒ・マクシミリアン大学ミュンヘン客員教授(矢花)

- 電子ダイナミクスの計算科学的アプローチに関して、G.F. Bertsch 教授（米国ワシントン大学）との共同研究の継続、K. Varga 准教授（米国バンダービルト大学）と共同研究に関する打ち合わせを始める。（矢花）
- 電子ダイナミクスの計算科学的アプローチに関して、K.-M. Lee 研究員（韓国 APRI）との共同研究。（矢花）

8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

- HPCI 戦略プログラム分野 5 と分野 2 の共催による異分野交流研究会を、量子モンテカルロ計算をテーマに 2012 年 5 月 30 日東京大学物性研究所で開催。

9. 管理・運営

- KEK 大型シミュレーション研究推進委員（矢花）
- APCTP 日本委員会委員（原子核分野）（矢花）
- 核理論委員会委員（矢花）

10. 社会貢献・国際貢献

- HPCI 戦略プログラム分野 5 のユーザー支援において、プログラム支援をとりまとめる役割を果たしている（寺崎）。
- 企業研究会 CAMM フォーラムにおける講演「光科学のフロンティアと第一原理計算」、矢花一浩、2013 年 1 月 11 日、アイビーホール。
- 朝日カルチャーセンターでの一般向け講演「原子核物理学が解き明かす元素の起源」、矢花一浩、スーパーコンピュータが解き明かす宇宙と物質の起源、2012 年 8 月 25 日
- European Physical Journal A 誌の編集委員（矢花）

11. その他

特になし