

令和 5 年 6 月 2 日現在

機関番号：12601

研究種目：若手研究

研究期間：2018～2022

課題番号：18K13549

研究課題名（和文）Ab initio nuclear Density Functional Theory with uncertainty quantification from Functional Renormalization Group in Kohn-Sham scheme

研究課題名（英文）Ab initio nuclear Density Functional Theory with uncertainty quantification from Functional Renormalization Group in Kohn-Sham scheme

研究代表者

LIANG HAOZHAO (LIANG, Haozhao)

東京大学・大学院理学系研究科（理学部）・准教授

研究者番号：50729225

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,100,000円

研究成果の概要（和文）：密度汎関数理論（DFT）は、量子多体問題において大きな成功を収めてきた。その基礎となるHohenberg-Kohnの定理は、普遍的なエネルギー密度汎関数の存在を保証する一方、そのような汎関数を得るための手法を与えてはくれない。本研究の目標は、核子自由度から出発した第一原理的原子核DFTの開発である。（1）実験データを用いた開発、（2）他の第一原理手法の応用、（3）ab initio相互作用からの開発、および（4）機械学習の応用といった戦略を主軸に、我々は新しい理論的枠組みと計算手法を提案した。これにより、核質量、ベータ崩壊半減期、殻進化とそのテンソル力効果などの正確な記述も達成された。

研究成果の学術的意義や社会的意義

宇宙における重元素の起源は、近代科学において重要でありながら未解決の基本的な問いの一つである。この問いに対する定量的な答えを得るためには、数千もの中性子過剰核の核物性に関する正確な知識が必要となる。密度汎関数法(DFT)は、現在及び将来の中性子過剰核に対し適用可能な唯一の最先端多体手法であり、本研究における原子核DFTは重元素の起源の理解に向けて重要な役割を果たし、さらに多くの進展を遂げている。異分野横断の観点においては、本研究は凝縮物理学や量子化学におけるDFT研究にも応用することが可能である。化学の研究分野へ応用した暁には、我々の日常生活に関わる新材料の開発にも貢献することが期待される。

研究成果の概要（英文）：Density Functional Theory (DFT) has achieved great success in quantum many-body problems in various fields. Its foundation Hohenberg-Kohn theorem guarantees the existence of a universal energy density functional for given inter-particle interactions but tells us no clue for getting such a functional. The goal of this project is to develop ab initio nuclear DFT by taking protons and neutrons as the basic degrees of freedom and starting from the nucleon-nucleon forces among them. Exploring the following strategies: to develop ab initio DFT (1) from experimental data, (2) from other ab initio methods, (3) from fundamental interactions, and (4) with machine learning approaches, we proposed several novel theoretical frameworks and computational setups. These new developments also achieved accurate descriptions of nuclear properties, including mass, beta-decay half-lives, shell evolution and its tensor-force effects, and so on.

研究分野：原子核理論

キーワード：原子核構造 原子核密度汎関数理論 汎関数繰り込み群法 第一原理計算 機械学習アプローチ

1 . 研究開始当初の背景

(1) In nuclear physics, Density Functional Theory (DFT) is one of the state-of-the-art methodologies and has achieved great success during the past decades. Now as well as in the near future, DFT is the only approach that is applicable to almost the whole nuclear chart, for both ground states and excited states.

(2) Nevertheless, the foundation of DFT—Hohenberg-Kohn theorem—only guarantees the existence of a universal energy density functional (EDF) for given inter-particle interactions but tells us no clue for getting such EDF. In particular, nuclear DFT is not yet derived from more fundamental theories, e.g., QCD. Basically, all of the existing nuclear EDF are phenomenological, in the sense that each of them contains around 10 or more parameters fitted to selected experimental data. As a result, there exist hundreds of different versions of nuclear EDF being widely used, and more seriously, different EDFs show similar results in the known region of the nuclear chart, however, their predictions tend to diverge from each other in the unknown region.

2 . 研究の目的

(1) The goal of this project is to develop *ab initio* nuclear DFT, i.e., the nuclear DFT from the first principle, by taking protons and neutrons as the basic degrees of freedom and starting from the nucleon-nucleon forces among them. By carrying out this project, we aim at an *ab initio* nuclear DFT with uncertainty quantification and without any uncontrollable parameters.

(2) This *ab initio* nuclear DFT plays an important role in understanding both ground-state and excited-state properties of thousands of nuclei in a consistent and predictive way. In particular, we also keep working on the topics of nuclear equation-of-state, masses, β -decay half-lives, giant and low-lying resonances, etc. These studies provide the most important nuclear inputs for understanding nucleosynthesis via the rapid-neutron-capture process, the so-called *r*-process.

(3) From the interdisciplinary point of view, by simply changing from nuclear force to Coulomb interaction, the newly developed theoretical schemes can apply not only to nuclear systems but also to atomic systems, i.e., *ab initio* DFT for condensed matter physics and quantum chemistry. Therefore, we share knowledge and techniques with various fields.

3 . 研究の方法

- (1) To develop *ab initio* DFT from experimental data
- (2) To develop *ab initio* DFT from other *ab initio* methods
- (3) To develop *ab initio* DFT from fundamental interactions
- (4) To develop *ab initio* DFT with machine learning approaches

—See below for the details of each approach.

4 . 研究成果

(1) To develop *ab initio* DFT from experimental data

In his Nobel Lecture [1], Kohn highlighted that “the practical usefulness of ground-state DFT depends entirely on whether approximations for the functional $E_{xc}[n(\mathbf{r})]$ could be found which are at the same time sufficiently simple and sufficiently accurate ... Thus if the physical density $n(\mathbf{r})$ is independently known (from experiment or—for small systems—from accurate, wave-function-based calculations) $v_{\text{eff}}(\mathbf{r})$ and hence also $v_{xc}(\mathbf{r})$ can be directly obtained from the density $n(\mathbf{r})$.” This is the so-called inverse Kohn-Sham (IKS) method proposed by Wang and Parr [2]. However, it remains an open question for decades on how to go one step further from the exchange-correlation potential $v_{xc}(\mathbf{r})$ to the exchange-correlation functional $E_{xc}[n(\mathbf{r})]$.

In our work [3], for the first time, a new way to improve EDFs by the combination of the IKS method and the density functional perturbation theory (DFPT) was proposed. We named it IKS+DFPT. In this method, a conventional known EDF is assumed to be close enough to the exact EDF and their difference is considered in the first-order DFPT. Under the assumptions, we can calculate the system ground-state energy

in two different ways, based on the first-order DFPT and the IKS method. We then end up with a functional equation for the difference between the conventional known EDF and the exact EDF.

As benchmark calculations, the ground-state density is calculated from the target (known) EDF and we attempt to reproduce it from a less accurate EDF. Noble-gas atoms and Coulomb interaction are used as test grounds. One of the main results is shown in Fig. 1. It is found that the ground-state energy becomes closer and closer to the target value as the iteration proceeds. The ground-state energies of He, Ne, Xe, and Rn are finally reproduced within 0.4%, 0.003%, 0.002%, and 0.0003% errors, respectively, compared with 28%, 8%, 2%, and 2% errors before the improvement of EDF. It is also found that the ground-state density is improved by the iterations, as shown in the figure.

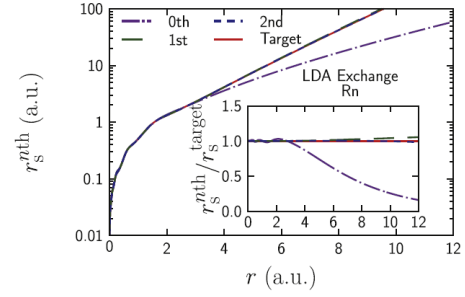


Fig. 1: Wigner-Seitz radii as functions of radial distance for Rn. Taken from Ref. [3].

To our knowledge, this work accomplished for the first time a practical use of IKS. It paved a direct path to improving not only Coulomb EDF but also nuclear EDF when the corresponding system ground-state densities are measured accurately from experiments.

(2) To develop *ab initio* DFT from other *ab initio* methods

The understanding of nuclear EDF in terms of nucleon-nucleon interaction is one of the present frontiers in nuclear physics. As manifested by the quadrupole moment of the deuteron, the tensor force is an important component in the nucleon-nucleon interaction. In the form of the two-pion exchange, the tensor force also provides the main part of the nuclear attraction, which is taken into account by the scalar σ meson in phenomenological models. However, the role of the tensor force on the spin properties in finite nuclei is much less clear.

In the study [4], based on our previous series of works on the relativistic *ab initio* calculations with Relativistic Brueckner-Hartree-Fock theory, we pointed out that the evolution of spin-orbit splittings in neutron drops shows profound effects of the tensor forces.

One of the main results is shown in Fig. 2. It is found that the evolution of spin-orbit splittings in neutron drops shows a systematic and specific pattern due to the effects of the tensor forces. More importantly, such a pattern cannot be reproduced by any relativistic Hartree EDFs which do not contain tensor forces, while it can be well reproduced with the relativistic Hartree-Fock density functional PKO1 which includes tensor forces. This implies that the strengths of tensor forces in neutron drops can be derived from *ab initio* calculations and used as a guide for future *ab initio* derivations of nuclear EDF.

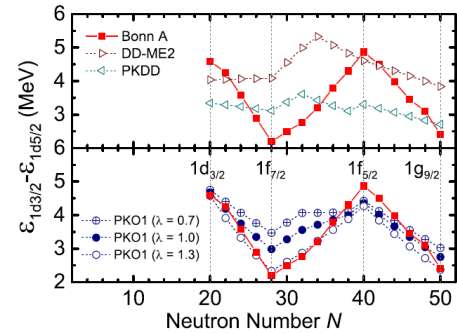


Fig. 2: Neutron spin-orbit for the 1d orbit as a function of the neutron number N . Taken from Ref. [4].

This study forms an important guide for future microscopic derivations of relativistic and nonrelativistic nuclear energy density functionals. Our further studies on this topic have been published in Refs. [5, 6, 7, 8].

(3) To develop *ab initio* DFT from fundamental interactions

DFT is a successful approach to reducing quantum many-body problems to one-body problems with the local density distribution. Due to its high accuracy with relatively low computational cost, DFT has had great success in various fields. Another successful approach to quantum many-body problems is the functional renormalization group (FRG). It is based on the one-parameter flow equation which leads to the quantum effective action at the end of the flow. The combination of DFT and FRG is one of the hot research frontiers for developing *ab initio* DFT nowadays.

In our work [9], we propose a novel optimization method of FRG in analogy with the Kohn-Sham (KS) scheme in DFT, which we call KS-FRG. The convergence of the energy density functional in KS-FRG is shown to be much faster than the un-optimized scheme. We also propose a method to estimate the truncation uncertainty in the KS-FRG.

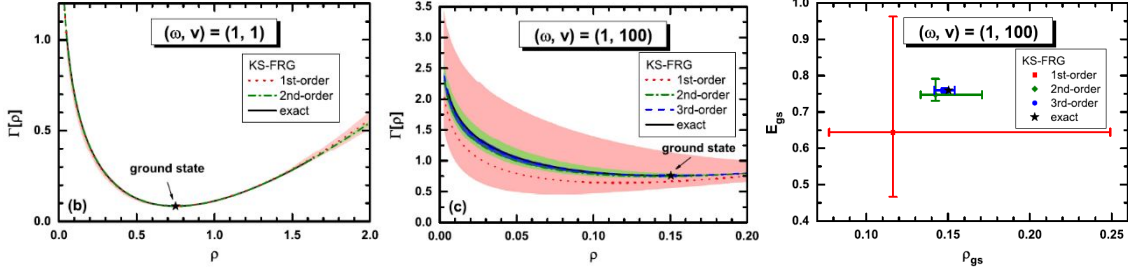


Fig. 3: Effective actions as a function of density for (left) intermediate and (middle) strong couplings and (right) ground-state energy versus ground-state density for the strong-coupling case. Taken from Ref. [9].

One of the main results is shown in Fig. 3. By taking the zero-dimension ϕ^4 theory as an example, it is found that, in the intermediate-coupling case, an order of magnitude improvement of the accuracy of ground-state density and ground-state energy is seen by increasing the order of truncation. The third-order calculation of ground-state energy reaches $O(10^{-4})$ accuracy in KS-FRG. Even in the strong-coupling case, an order of magnitude improvement of the accuracy is achieved by increasing the order of truncation. The third-order results of ground-state density and energy reach $O(10^{-2})$ accuracy, as shown in the right panel above.

This method is a promising candidate for making systematic and fast converging calculations of the quantum many-body systems, such as the cold atoms near unitarity, nucleons in finite nuclei, and so on. Our further studies on this topic have been reported in Ref. [10]. As a step further, we are investigating the (3+1)-dimensional electron gas and finalizing the corresponding formalism and numerical codes of the EDF with the generalized gradient approximation.

(4) To develop *ab initio* DFT with machine learning approaches

On the one hand, in the past few years, developing DFT with machine learning approaches is one of the hot topics in condensed matter physics and quantum chemistry. On the other hand, in the past years, independent machine-learning studies were carried out on different nuclear observables to meet the experimental values, such as nuclear masses, charge radii, excited states, α -decay half-lives, β -decay half-lives, fission yields, etc. Therefore, machine learning for nuclear DFT is becoming one of the hot topics in nuclear physics.

In one of our recent studies [11], we designed a Kohn-Sham scheme based on a multi-task neural network for the supervised learning of nuclear shell evolution. The training set is composed of the single-particle wave functions and occupation probabilities of 320 nuclei, calculated by the Skyrme EDF.

One of the main results is shown in Fig. 4, by taking the Pb isotopes as examples, where the most neutron-rich trained nucleus is ^{202}Pb , and we extrapolate the neutron and proton densities to ^{212}Pb , ^{222}Pb , and ^{232}Pb . It is evident that the novel KS-scheme-based neural network reproduces the theoretical density distributions almost identically, even in the extrapolation of an additional 30 neutrons. In contrast, the extrapolation of the density generator (DG) by simply learning the densities (without using the idea of KS) appears an obvious deviation in ^{232}Pb . In addition, it is also found in this study that the deduced density distributions, momentum distributions, and charge radii are in good agreement with the benchmarking results for the untrained nuclei. In particular, accomplishing shell evolution leads to a remarkable improvement in the extrapolation of nuclear density. After a further charge-radius-based calibration, the network evolves a stronger predictive capability.

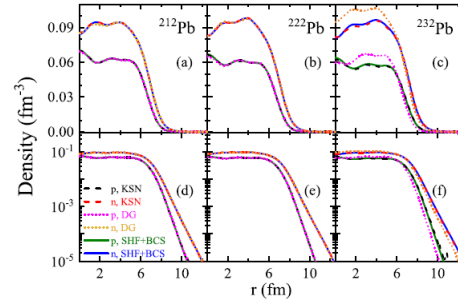


Fig. 4: Neutron and proton densities for the extrapolated nuclei ^{212}Pb , ^{222}Pb , and ^{232}Pb . Taken from Ref. [11].

This study opens the possibility to infer correlations among observables by combining experimental data for nuclear complex systems. Our studies on the relevant topics have been published in Refs. [12, 13, 14, 15].

(5) Summary

In summary, during the whole research period, we have published 27 peer-refereed papers for the above relevant topics. It also includes one invited review article in Progress in Particle and Nuclear Physics

entitled “Towards an *ab initio* covariant density functional theory for nuclear structure” [16], presenting our ideas on *ab initio* nuclear DFT for the coming decade.

< 引用文献 >

- [1] W. Kohn, *Rev. Mod. Phys.* **71**, 1253 (1999).
- [2] Y. Wang and R. G. Parr, *Phys. Rev. A* **47**, R1591 (1993).
- [3] T. Naito, D. Ohashi, and **H.Z. Liang***, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **52**, 245003 (2019).
- [4] S.H. Shen, **H.Z. Liang**, J. Meng, P. Ring, and S.Q. Zhang, *Phys. Rev. C* **97**, 054312 (2018).
- [5] Z.H. Wang, Q. Zhao, **H.Z. Liang***, and W.H. Long*, *Phys. Rev. C* **98**, 034313 (2018).
- [6] Z.H. Wang, T. Naito, **H.Z. Liang***, and W.H. Long*, *Phys. Rev. C* **101**, 064306 (2020).
- [7] Z.H. Wang, T. Naito, and **H.Z. Liang**, *Phys. Rev. C* **103**, 064326 (2021).
- [8] Z.H. Wang, T. Naito, **H.Z. Liang**, and W. H. Long, *Chin. Phys. C* **45**, 064103 (2021).
- [9] **H.Z. Liang***, Y.F. Niu*, and T. Hatsuda*, *Phys. Lett. B* **779**, 436 (2018).
- [10] H. Sakakibara, "Development of functional renormalization group and its application in one-dimensional nucleon systems" Master thesis, The University of Tokyo (2020).
- [11] Z.X. Yang, X.H. Fan, Z.P. Li, and **H.Z. Liang**, *Phys. Lett. B* **840**, 137870 (2023).
- [12] Z.M. Niu, **H.Z. Liang***, B.H. Sun, W.H. Long, and Y.F. Niu, *Phys. Rev. C* **99**, 064307 (2019).
- [13] C. Ma, Z. Li, Z. M. Niu, and **H. Z. Liang**, *Phys. Rev. C* **100**, 024330 (2019).
- [14] Z.M. Niu* and **H.Z. Liang***, *Phys. Rev. C* **106**, L021303 (2022).
- [15] F. Minato*, Z.M. Niu*, and **H.Z. Liang***, *Phys. Rev. C* **106**, 024306 (2022).
- [16] S.H. Shen, **H.Z. Liang**, W.H. Long, J. Meng, and P. Ring, *Prog. Part. Nucl. Phys.* **109**, 103713 (2019).

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計28件（うち査読付論文 27件 / うち国際共著 20件 / うちオープンアクセス 28件）

1. 著者名 Yang Zu-Xing, Fan Xiao-Hua, Li Zhi-Pan, Liang Haozhao	4. 巻 840
2. 論文標題 A Kohn-Sham scheme based neural network for nuclear systems	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physics Letters B	6. 最初と最後の頁 137870
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.physletb.2023.137870	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する
1. 著者名 Fan Xiao-Hua, Yang Zu-Xing, Yin Peng, Chen Peng-Hui, Dong Jian-Min, Li Zhi-Pan, Liang Haozhao	4. 巻 834
2. 論文標題 A local-density-approximation description of high-momentum tails in isospin asymmetric nuclei	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physics Letters B	6. 最初と最後の頁 137482
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.physletb.2022.137482	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する
1. 著者名 Tajima Hiroyuki, Liang Haozhao	4. 巻 106
2. 論文標題 Role of the effective range in the density-induced BEC-BCS crossover	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review A	6. 最初と最後の頁 43308
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevA.106.043308	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Minato Futoshi, Niu Zhongming, Liang Haozhao	4. 巻 106
2. 論文標題 Calculation of beta-decay half-lives within a Skyrme-Hartree-Fock-Bogoliubov energy density functional with the proton-neutron quasiparticle random-phase approximation and isoscalar pairing strengths optimized by a Bayesian method	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review C	6. 最初と最後の頁 24306
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevC.106.024306	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Niu Z. M., Liang H. Z.	4. 巻 106
2. 論文標題 Nuclear mass predictions with machine learning reaching the accuracy required by r-process studies	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review C	6. 最初と最後の頁 L021303
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevC.106.L021303	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Guo Yixin, Tajima Hiroyuki, Liang Haozhao	4. 巻 4
2. 論文標題 Biexciton-like quartet condensates in an electron-hole liquid	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review Research	6. 最初と最後の頁 23152
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevResearch.4.023152	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Guo Yixin, Tajima Hiroyuki, Liang Haozhao	4. 巻 105
2. 論文標題 Cooper quartet correlations in infinite symmetric nuclear matter	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review C	6. 最初と最後の頁 24317
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevC.105.024317	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Naito Tomoya, Colo Gianluca, Liang Haozhao, Roca-Maza Xavier, Sagawa Hiroyuki	4. 巻 105
2. 論文標題 Toward ab initio charge symmetry breaking in nuclear energy density functionals	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review C	6. 最初と最後の頁 L021304
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevC.105.L021304	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Naito Tomoya, Colo Gianluca, Liang Haozhao, Roca-Maza Xavier	4. 巻 104
2. 論文標題 Second and fourth moments of the charge density and neutron-skin thickness of atomic nuclei	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review C	6. 最初と最後の頁 24316
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevC.104.024316	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Wang Zhiheng, Naito Tomoya, Liang Haozhao	4. 巻 103
2. 論文標題 Tensor-force effects on shell-structure evolution in N=82 isotones and Z=50 isotopes in the relativistic Hartree-Fock theory	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review C	6. 最初と最後の頁 64326
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevC.103.064326	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Wang Zhiheng, Naito Tomoya, Liang Haozhao, Long Wen Hui	4. 巻 45
2. 論文標題 Exploring effects of tensor force and its strength via neutron drops	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Chinese Physics C	6. 最初と最後の頁 64103
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1674-1137/abf036	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Accorto Giacomo, Naito Tomoya, Liang Haozhao, Niksic Tamara, Vretenar Dario	4. 巻 103
2. 論文標題 Nuclear energy density functionals from empirical ground-state densities	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review C	6. 最初と最後の頁 44304
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevC.103.044304	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Wang Zhiheng, Naito Tomoya, Liang Haozhao, Long Wen Hui	4. 巻 101
2. 論文標題 Self-consistent random-phase approximation based on the relativistic Hartree-Fock theory: Role of π -tensor coupling	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review C	6. 最初と最後の頁 64306
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevC.101.064306	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Naito Tomoya, Roca-Maza Xavier, Colo Gianluca, Liang Haozhao	4. 巻 101
2. 論文標題 Effects of finite nucleon size, vacuum polarization, and electromagnetic spin-orbit interaction on nuclear binding energies and radii in spherical nuclei	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review C	6. 最初と最後の頁 64311
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevC.101.064311	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Naito Tomoya, Akashi Ryosuke, Liang Haozhao, Tsuneyuki Shinji	4. 巻 53
2. 論文標題 Relativistic density functional theory with finite-light-speed correction for the Coulomb interaction: a non-relativistic-reduction-based approach	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics	6. 最初と最後の頁 215002
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1361-6455/abaca6	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Guo Yixin, Liang Haozhao	4. 巻 99
2. 論文標題 Nonrelativistic expansion of Dirac equation with spherical scalar and vector potentials by similarity renormalization group	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review C	6. 最初と最後の頁 54324
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevC.99.054324	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Niu Z. M., Liang H. Z., Sun B. H., Long W. H., Niu Y. F.	4. 巻 99
2. 論文標題 Predictions of nuclear α -decay half-lives with machine learning and their impact on r-process nucleosynthesis	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review C	6. 最初と最後の頁 64307
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevC.99.064307	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Shen Shihang, Liang Haozhao, Long Wen Hui, Meng Jie, Ring Peter	4. 巻 109
2. 論文標題 Towards an ab initio covariant density functional theory for nuclear structure	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Progress in Particle and Nuclear Physics	6. 最初と最後の頁 103713
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.pnnp.2019.103713	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Guo Yixin, Liang Haozhao	4. 巻 43
2. 論文標題 Non-relativistic expansion of single-nucleon Dirac equation: Comparison between Foldy-Wouthuysen transformation and similarity renormalization group	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Chinese Physics C	6. 最初と最後の頁 114105
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1674-1137/43/11/114105	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Naito Tomoya, Ohashi Daisuke, Liang Haozhao	4. 巻 52
2. 論文標題 Improvement of functionals in density functional theory by the inverse Kohn-Sham method and density functional perturbation theory	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics	6. 最初と最後の頁 245003
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1361-6455/ab4eef	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Naito Tomoya, Akashi Ryosuke, Colo Gianluca, Liang Haozhao, Roca-Maza Xavier	4. 巻 223
2. 論文標題 Coulomb Energy Density Functionals for Nuclear Systems: Recent Studies of Coulomb Exchange and Correlation Functionals	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 EPJ Web of Conferences	6. 最初と最後の頁 1044
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1051/epjconf/201922301044	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Guo Yixin, Liang Haozhao	4. 巻 101
2. 論文標題 Nonrelativistic expansion of the Dirac equation with spherical scalar and vector potentials by a reconstituted Foldy-Wouthuysen transformation	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review C	6. 最初と最後の頁 24304
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevC.101.024304	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Naito Tomoya, Roca-Maza Xavier, Colo Gianluca, Liang Haozhao	4. 巻 99
2. 論文標題 Coulomb exchange functional with generalized gradient approximation for self-consistent Skyrme Hartree-Fock calculations	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review C	6. 最初と最後の頁 24309
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevC.99.024309	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Liang Haozhao, Niu Yifei, Hatsuda Tetsuo	4. 巻 779
2. 論文標題 Functional renormalization group and Kohn-Sham scheme in density functional theory	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Physics Letters B	6. 最初と最後の頁 436 ~ 440
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.physletb.2018.02.034	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Liang H. Z., Sagawa H., Sasano M., Suzuki T., Honma M.	4. 巻 98
2. 論文標題 Gamow-Teller transitions from high-spin isomers in N=Z nuclei	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Physical Review C	6. 最初と最後の頁 14311
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevC.98.014311	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Naito Tomoya, Akashi Ryosuke, Liang Haozhao	4. 巻 97
2. 論文標題 Application of a Coulomb energy density functional for atomic nuclei: Case studies of local density approximation and generalized gradient approximation	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Physical Review C	6. 最初と最後の頁 44319
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevC.97.044319	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Shen Shihang, Liang Haozhao, Meng Jie, Ring Peter, Zhang Shuangquan	4. 巻 97
2. 論文標題 Relativistic Brueckner-Hartree-Fock theory for neutron drops	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Physical Review C	6. 最初と最後の頁 54312
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevC.97.054312	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Wang Zhiheng, Zhao Qiang, Liang Haozhao, Long Wen Hui	4. 巻 98
2. 論文標題 Quantitative analysis of tensor effects in the relativistic Hartree-Fock theory	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Physical Review C	6. 最初と最後の頁 34313
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevC.98.034313	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

〔学会発表〕 計23件（うち招待講演 14件 / うち国際学会 12件）

1. 発表者名 Liang Haozhao
2. 発表標題 Exotic nuclear physics for astrophysics
3. 学会等名 International Workshop on Origin of Elements and Cosmic Evolution: From Big-Bang to Supernovae and Mergers (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Liang Haozhao
2. 発表標題 Towards ab initio Nuclear Density functional Theory
3. 学会等名 Summer School on Exotic Nuclei (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Liang Haozhao
2. 発表標題 Nuclear mass predictions with machine learning reaching the accuracy required by r-process studies
3. 学会等名 Workshop on combining nuclear theory and machine learning for fundamental studies and applications
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Liang Haozhao
2. 発表標題 Quantum computing for nuclear structure properties?
3. 学会等名 Workshop “Fundamentals in density functional theory” (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Liang Haozhao
2. 発表標題 Density functional theory and inverse Kohn-Sham method
3. 学会等名 Lectures on Covariant Density Functional Theory in Nuclear Physics (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Liang Haozhao
2. 発表標題 Nuclear mass predictions with machine learning towards the accuracy required by r-process studies
3. 学会等名 Workshop of RIKEN Pioneering Project: Evolution of Matter in the Universe
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Liang Haozhao
2. 発表標題 Towards systematic and consistent nuclear data inputs for astrophysical r-process with Bayesian approaches
3. 学会等名 Workshop on r-process 2020: from Stellar Alchemy to Galactic Archeology (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Liang Haozhao
2. 発表標題 DFT and Functional Renormalization Group
3. 学会等名 Lectures on Covariant Density Functional Theory in Nuclear Physics (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Liang Haozhao
2. 発表標題 The colorful world of atomic nuclei---physics frontiers and large-scale scientific facilities
3. 学会等名 2020 International School Program of Zhengzhou University (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Liang Haozhao
2. 発表標題 Towards systematic and consistent nuclear data inputs for astrophysical r-process with Bayesian approaches
3. 学会等名 Workshop on Frontiers of Nuclear Structure and Nuclear Astrophysics (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Liang Haozhao
2. 発表標題 Nuclear density functional theory: From fundamentals to frontiers
3. 学会等名 原子核三者若手夏の学校 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Liang Haozhao
2. 発表標題 Attempts to derive DFT directly from Functional Renormalization Group approaches
3. 学会等名 Gordon Research Conference: Nuclear Chemistry (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Liang Haozhao
2. 発表標題 Nuclear inputs for r-process with Bayesian approaches
3. 学会等名 YITP workshop on Nuclear physics of the r-process (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Liang Haozhao
2. 発表標題 DFT and Functional Renormalization Group
3. 学会等名 Lectures on Covariant Density Functional Theory in Nuclear Physics (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Liang Haozhao
2. 発表標題 Improvement of functionals in DFT by inverse Kohn-Sham method
3. 学会等名 The 5th Topical Workshop on Modern Aspects in Nuclear Structure (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Liang Haozhao
2. 発表標題 Possible ways towards ab initio nuclear density functionals
3. 学会等名 Workshop on new generation nuclear density functionals (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Liang Haozhao
2. 発表標題 Improvement of Functionals in DFT by IKS-DFPT
3. 学会等名 China-Japan collaboration workshop on "Nuclear mass and life for unravelling mysteries of r-process" (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Liang Haozhao
2. 発表標題 Attempts to derive nuclear EDF directly from renormalization group approaches
3. 学会等名 The 27th International Nuclear Physics Conference (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Liang Haozhao
2. 発表標題 Quantitative analysis of tensor effects in the relativistic Hartree-Fock theory
3. 学会等名 The 2nd International Workshop on Quantum Many-Body Problems in Particle, Nuclear, and Atomic Physics
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Liang Haozhao
2. 発表標題 Effects of tensor force in the relativistic scheme
3. 学会等名 Tsukuba-CCS workshop on "microscopic theories of nuclear structure and dynamics"
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Liang Haozhao
2. 発表標題 Effects of tensor force in covariant density functional theory
3. 学会等名 The 17th Chinese National Conference on Nuclear Structure (招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Liang Haozhao
2. 発表標題 Effects of tensor force in relativistic Hartree-Fock theory
3. 学会等名 Workshop on Recent Developments in Nuclear and Hadron Physics (招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Liang Haozhao
2. 発表標題 Effects of tensor force in the relativistic scheme
3. 学会等名 CUSTIPEN workshop on theory of rare nuclear decays (招待講演)
4. 発表年 2018年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8 . 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関			
イタリア	Universita degli Studi di Milano	INFN, Sezione di Milano		
中国	Anhui University	Peking University	Lanzhou University	他3機関
ドイツ	Technischen Universitat Munchen			
クロアチア	University of Zagreb			
米国	Iowa State University			
ルーマニア	ELI-NP			