

IV. 原子核理論グループ

教授 矢花一浩
講師 宇根 司、橋本幸男
準研究員 上田 学
大学院生 7名

【1】不安定原子核の物理、及び原子核の動的過程に関する研究 (矢花、上田)

陽子・中性子からなる核子多体系としての原子核研究は、不安定核2次ビームを用いた実験研究により新しい展開が切り拓かれている。不安定原子核に関する情報は、主に2次ビームによる反応実験から得られており、反応・構造の理論の調和した発展が重要である。不安定原子核や、関連する原子核の動的過程に関して、本年度以下の発展があった。この研究は、中務孝氏(東北大理)との密接な協力により行われている。

(i) 弱く結合した原子核を入射核とする核反応の吸収境界条件を用いる方法による記述

中性子が弱く結合した原子核を入射核とする原子核反応を三体系の散乱問題として取り扱い、入射核の分解過程を量子力学的に取り扱える三体系反応の理論を発展させた。この反応理論の特徴は (i) 吸収型境界ポテンシャルを導入することにより、分解反応などの扱いの難しい外向波連続境界条件問題を簡単に取り扱えること、及び、(ii) 実空間における散乱波動関数を離散化して表現することにより、反応過程における入射核の連続状態-連続状態のチャネル結合の効果を近似なしで完全に取り込めることである。我々のグループでは、この理論に基づいて計算コードを開発し、中性子ハロー核である ${}^8\text{Be}$ 原子核を入射核とする重イオン核反応に応用した。昨年度までに弾性散乱の角分布の再現に成功し、中性子ハロー核を入射核とするような重イオン反応では分解反応の寄与が重要であることを再確認している。本年度は分解反応に注目し、その実験データの解析を行った。その結果、分解反応断面積のスペクトル分布と角分布の解析によって中性子ハロー核の構造や励起機構、及び反応機構の情報を引き出すことができる可能性を示した。この研究は現在も継続中で、中性子のスピンを考慮することでより詳細な実験データの解析を行うことを検討している。

(2) 時間依存波束理論を用いたハロー核の融合反応

中性子過剰核の融合反応は、安定核に比べて過剰中性子による引力から断面積の増大が期待されている。ハロー核の融合反応は、中性子過剰核の特異な例であるが、中性子が反応に及ぼす効果を定量的に探る上で興味を持たれている。ハロー核の反応メカニズムに関しては、中高エネルギー領域では弱く束縛した核子の運動が原子核間の相対運動に比べて遅いため断熱近似を用いた記述が有効になる。しかし入射エネルギーが下がるにつれ時間スケールの分離がなくなり系の全ダイナミクスを動的に取り扱うことが必要になる。我々は中性子ハロー核の融合反応を、時間依存波束理論を用いて量子力学的な3体問題を厳密に解き調べてきた。計算は ${}^8\text{Be}+{}^{208}\text{Pb}$ 系で行った。反応の記述を物体固定座標系で行うことで入射パラメータが有限の場合まで計算可能となった。また波束の時間発展を動画により表現することにより反応ダイナミクスに対する理解を容易にした。計算の結果、通常予想に反してハロー中性子の付加により融合確率は減少することが示された。これは、付加中性子は傍観者として振る舞い、芯核のクーロン散乱により中性子が乖離するため、芯核の有効入射エネルギーが減少したことによると解釈される。

(3) 時間依存平均場理論による変形核・不安定核の光応答の記述

時間依存平均場理論の小振幅近似として導かれる RPA は、原子核の励起状態や応答関数の記述に成功してきたが、これまで主に球形の原子核に対して研究が行われてきた。これまで我々は、球対称性を持たない系の記述に有効な 3 次元正方格子表示を用いた RPA の解法として、グリーン関数法 (修正 Sternheimer 法)、対角化法、実時間法を、主に電子系の光応答を記述するため開発してきた。これらの手法を変形した原子核に適用する試みを進めており、特に不安定核の光応答の記述を目指した研究を進めている。

(4) パリティ射影・角運動量射影と平均場近似

空間的に孤立した系である原子核では、角運動量やパリティが良い量子数である。一方平均場近似は、しばしば系の持つ対称性を破る平均場を与える。原子核の場合、パリティを破る平均場解が得られることはまれであるが、球対称性は閉殻近傍を除く多くの核で破れている。対称性を破った平均場解から対称性を回復する手続きは射影演算子を用いる方法が古くから知られており、回転対称性の回復した計算により系の回転スペクトルや遷移強度など実験値と比較することが可能になる。Skyrme-Hartree-Fock 法など高精度の平均場解に対する射影計算が行われるようになったのは最近のことである。

我々はこれまで、パリティ射影後に平均場近似に呼応する変分を行うことにより、負パリティ励起状態に対する平均場計算を可能にし、またその枠組みを用いることでいくつかの核で顕著なクラスター構造が発現することを示してきた。本年度は、パリティ射影後変分で得られる軸対称性や鏡映対称性の破れた平均場解に対して変分後の角運動量射影を行い、正負パリティ状態の回転スペクトルの分析を始めた。軽い α 核に対して観測と定性的に一致する結果が得られつつある。

(5) 超変形回転バンドの崩壊現象

上田はサンパウロ大の研究者 (A. J. Sargeant, M. P. Pato, M. S. Hussein) 及び滝川 (東北大) と協力して超変形回転バンドの崩壊現象に関する研究を進展させた。

超変形核が形成する回転バンドでの E2 ガンマ崩壊は、その強度が低スピンの領域において数回の遷移のうちに急速に減衰する現象が系統的に見られる。これは、その核スピンの量子トンネル効果により超変形状態と通常変形状態の混合の度合いが大きくなっているためと考えられている。一方、この回転バンドの崩壊が起こる核スピンの通常変形状態の準位はカオス的になっていることが予想され、核内部状態の混沌さと量子トンネル効果との関係が注目されている。我々のグループこれまでに、複合核核反応理論に基づいて超変形核の回転バンド内 E2 ガンマ遷移強度に対するその平均値の減衰を記述する理論を開発している。この理論の大きな特徴は、変形されたガウシアン直交アンサンブルを用いることで、内部状態の混沌さの度合いを調節できることである。昨年度は、他のグループによって重要であると指摘されていた E2 ガンマ遷移強度の分散を同じ複合核反応理論に基づいて評価し、その解析的な公式を導いた。その結果、その超変形核回転バンドの遷移強度の分散は、超変形核のガンマ崩壊幅、逃げ幅、通常変形核のガンマ崩壊幅、及びその平均準位間隔よりなる 3 つのパラメータで表せることを示した。

(6) 星の内部における熱核融合反応の反応率の解析的表現

上田はサンパウロ大の研究者 (A. J. Sargeant, M. P. Pato, M. S. Hussein) と協力して、星の内部における熱核融合反応の反応率の解析的表現に関する研究を進めた。

星の化学的組成の進化をシミュレーションする場合、星を構成する荷電粒子の熱核融合反応断面積は各段階での星の内部温度におけるマクスウェル分布平均したものが用いられる。我々のグループは、停留位相

近似を一般化した一様近似に基づいて、その平均化された断面積を内部温度の解析関数として表現することを目的としている。これまでに非共鳴反応に関して公式を開発し、従来の近似式との比較を行い、我々の開発した公式の方がより正確に近い値を与えることが分かっている。昨年度は、この公式の共鳴反応への拡張を試みた。この研究は現在も継続中である。特に、共鳴の幅によって従来の近似公式がどこまで通用するのか、及び、共鳴エネルギーの位置と平均化された断面積に最も寄与する相対運動エネルギーとの位置関係に注目してこの問題に取り組んでいる。

【2】有限量子系の物質計算科学（矢花）

原子・分子・原子クラスター等の系は、孤立した量子多体系として原子核に共通する面がある。我々のグループでは、原子核理論で発展してきた概念や手法を用いて、原子・分子・クラスター等の有限サイズの物質科学に対して、多電子ダイナミクスや光応答を中心に、計算科学的な手法を意識した取り組みを行っている。本年度は以下の課題に進展があった。この研究は、岩田潤一氏（産総研）、中務孝氏（東北大理）、George Bertsch 氏（Washington 大）との密接な協力のもとに行われている。

（1）強光子場中の原子・分子の光応答に関する研究

レーザー光の電場強度が価電子に働く内部電場と同程度となる 10^{13-16}W/cm^2 の領域で、外部電場と価電子の非線形な相互作用に起因する多様な電子ダイナミクスが見られる。例えばイオン化のメカニズムは、この領域で振動的な多光子吸収型からトンネルイオン化へと変化すると考えられている。我々は、時間依存密度汎関数法を用いて強光子場中の多電子ダイナミクスに対する第一原理計算を行い、定量的な理解を得ることを目標に研究を進めている。

現在、原子や分子のトンネルイオン化に対する第一原理的な計算を進めている。イオン化率の静的な扱いとして、外場中での Kohn-Sham 方程式を外向波境界条件のもとで解き Gamow 状態を得る方法、そして動的な扱いとして時間依存 Kohn-Sham 方程式を実時間であらわに解く方法を開発し、イオン化のメカニズムを調べてきた。本年度は、Gamow 状態による分析を、原子及び幾つかの 2 原子分子に対して行った。実験的にはトンネルイオン化率は物質のイオン化ポテンシャルに敏感であることが知られている。しかしイオン化ポテンシャルのみでは説明ができない現象も知られている。例えば O_2 分子はほぼ同じイオン化ポテンシャルを持つ Ar と比較してイオン化率が著しく低くその原因をめぐり議論がなされてきた。我々は微視的な計算から、 O_2 分子でのイオン化率の抑制が、主には HOMO 軌道の性質に起因することを明らかにした。すなわち O_2 分子の HOMO 軌道は反結合性 π 軌道であり、最も大きなイオン化率が期待される外場と分子軸が平行な場合に軸まわりの角運動量によりイオン化が強く抑制される。

（2）非線形分極率の実時間計算

分子の非線形分極率は光応答の基本的な観測量であるとともに、大きな非線形分極率を持つ分子の探索は応用上も重要な課題である。これまで我々は時間依存密度汎関数法を用い、分子の非線形分極率を効率的に計算するグリーン関数法に基づく新しい手法を開発してきた。この方法では、外場の次数に応じた複雑な振動展開を行うため、煩雑なコーディングが必要とされる。本年度は、そのような振動展開を経ることなく動的な非線形分極率を得るための方法として、一定振動数の外場を断熱的に印加し、誘起される分極のフーリエ成分の分析から求める方法を提案し、その有効性を簡単な分子を例に示した。また複素エネルギー面上での超分極率から得られる 2 光子吸収断面積についての分析を行った。

(3) 鎖状炭素クラスターの光吸収スペクトル

鎖状炭素クラスターの光吸収スペクトルには π 電子励起による強い光吸収が見られ、それらに対して我々は以前、1次元プラズマ振動として理解できることを提案した。最近鎖状炭素クラスターの両端に水素原子を付加したクラスターの光吸収が実験的に調べられ、水素原子の付加により励起エネルギーが大きく変化することが観測された。これに対して時間依存密度汎関数法を用いた分析を行った。鎖状炭素クラスターは、1次元物質の典型と見ることもできるが、最近そのような分子に対しては局所密度近似の精度が悪く、交換項の非局所性を正しく扱う重要性が指摘されている。電子励起を記述する交換相関ポテンシャルの理解を深める上でも、炭素クラスターの電子励起は興味を持たれる課題である。計算は、我々のグループで開発した実時間実空間法とともに GAUSSIAN98 を用いて行った。その結果、水素原子の付加により局所密度近似の妥当性が大きく変化するという興味深い結果を得た。すなわち、水素原子を両端に持たない炭素クラスターの場合には、交換ポテンシャルを局所密度近似した結果は非局所な結果と大差ない。一方、クラスターの両端に水素が付加された場合には、非局所な扱いにより励起エネルギーは局所密度近似を用いた場合に比べて紫外側に大きく変わる。交換ポテンシャルを非局所に扱うことによって、実験で観測される水素原子の付加によるスペクトルの変化を再現することができる。このような局所密度近似の妥当性の大きな変化は、炭素原子間の結合方式の変化に起源があると推定される。すなわち炭素のみのクラスターの場合には、炭素原子間の結合距離はほぼ一定で2重結合的であるのに対して、水素を付加された場合は、炭素原子間の結合が1重結合と3重結合の反復となる。この水素の付加による π 電子密度の振動が、局所密度近似の可否を決していると考えられる。

(4) 電子励起状態でのFeynman-Hellman力

イオンに働く力は、電子基底状態に対してはFeynman-Hellman定理を用いて効率的に計算され、密度汎関数法と組み合わせた第一原理分子動力学計算は物質の構造を探る有力な道具となっている。ところが電子励起状態を記述する時間依存密度汎関数法では、電子励起状態でイオンに働く力に対してFeynman-Hellman定理が成立しないため、イオンに働く力の計算は煩雑になる。本年度、時間依存密度汎関数法の枠組みの中で、変分汎関数の取り方を変えてFeynman-Hellman定理の満たされる汎関数を構成する可能性について検討を行った。

【3】原子核の回転運動(宇根)

回転を半古典論的に扱うクラッキングモデルを射影後変分法の視点から検討する仕事を引き続き進めてきた。射影後変分法は、回転対称性を破った内部状態から角運動量の固有状態への射影を行って対称性を回復させた後で、内部状態について変分をとる量子論である。クラッキングモデルは時間反転対称性を破る状態を前提にしているが、その正当性を射影後変分法の視点から調べるために、単純な系について、時間反転対称性を破る内部状態を用いた射影後変分法の数値計算プログラムを開発し、その有効性について検討を加えてきた。

モデル化されたC-12の非軸対称変形の内部状態に関して時間反転対称性を破るとき、K-分布(Kは原子核に固定された座標系のz軸への角運動量成分の固有値である)が大きく変化することがわかった。時間反転対称性を破らないときは偶数値のKだけが存在しているが、破るとK=0とK=1にK-分布が集中する。このような局在化はクラッキングモデルを射影後変分法で基礎づけるとき前提されていたものである。

しかし、時間反転対称性を破らなければならない必然性はまだ得られていない。時間反転対称性を破る

ときクラッキング模型との対応が見つが、射影後変分法で求めたエネルギーと波動関数は時間反転対称性を破らないときと同じであることが計算から明らかになった。このことは見かけ上では違っている、時間反転対称性を破る描像と破らない描像とが同等である場合が存在することを示す。

このような結果がモデル化された C-12 の特殊性によるか否かを今後調べていく。

【4】原子核集団運動の非線形理論（橋本）

橋本は原子核集団運動の非線形力学の微視的理論を進めている。

大学院生の今川博人氏との研究では、Skyrme型相互作用を用いたHartree-Fock計算に基づく乱雑位相近似(RPA)の計算法が進化した。この方法では、核子の波動関数は空間格子上で表現される。通常のRPA方程式を、格子空間と占拠軌道空間の“混合表示”に書き換えることによりSkyrme型相互作用に対して適用できるようにする。今川氏のアイデアによれば、この混合表示のRPA方程式において特にゼロエネルギーモードといわれる空間対称性に関連する特別なモードを精度良く分離することができる。従来のRPA方程式の解法においてはゼロエネルギーモードの分離が困難な問題であった。この方法によって物理的な状態にゼロエネルギーモードが混合するのをできるだけ抑えることができる。また、この方法は球形核のみならず変形核に対しても適用できる点が特に優れており、画期的な方法である。この方法に基づいて、今川氏は最新の実験結果である ^{40}Ca の超変形状態の慣性能率を計算しスペクトルを再現した。さらに、回転状態上に現れる励起状態について予言することができた。これらの予言は今後の実験と突き合わせて行く予定である。

茨城大学の坂田文彦氏との研究では、原子核の非線形運動を記述するための枠組みである自己無撞着集団座標の方法(SCC法)のSkyrme型相互作用の系での定式化を進めている。この定式化ではRPAを出発点に置いているために、今川氏のアイデアはこの定式化を進める上でも重要である。RPAで求まる慣性能率は非線形性のために生じる集団・非集団運動間の結合効果により内部運動の変化につれて変化していく。また、四重極型集団運動の質量パラメータの変化も集団・非集団運動間の結合効果に基づいて微視的に説明できる。現在は、対相関を取り込むために枠組みを広げ、Hartree-Fock-Bogoliubovの枠内での定式化に拡張している。

〈学位〉

1. 理学博士：

今川博人

Self-Consistent Skyrme-Hartree-Fock plus Random Phase Approximation Calculation
Of Nuclear Low-Lying States in the Mesh Representation

2. 理学修士：

表 寿憲

Floquet 状態を用いた量子系に対する条件付き変分原理

木村 真

鎖状炭素分子の電子励起状態に対する第一原理計算

◁著書▷

1. Y. Suzuki, R.G. Lovas, K. Yabana, K. Varga
Structure and Reactions of Light Exotic Nuclei
Taylor & Francis, New York, 2003. p.1-591.
2. G.F. Bertsch and K. Yabana
Density functional theory, in "Introduction to Modern Methods of quantum many-body theory and their applications", ed A. Fabrocini, S. Fantoni, and E. Krotscheck, (World Scientific, 2002),
p. 1-48.

◁発表論文▷

1. A. Muta, J.-I. Iwata, Y. Hashimoto, K. Yabana
Solving the RPA eigenvalue equation in real-space
Prog. Theor. Phys. 108 (2002) 1065.
2. M. Ueda, K. Yabana and T. Nakatsukasa,
Application of an absorbing boundary condition to nuclear breakup reactions
Phys. Rev. C67 (2003) 014606
3. H. Imagawa and Y. Hashimoto
Accurate random-phase approximation calculation of low-lying states on a three-dimensional Cartesian mesh
Phys. Rev. C67 (2003), 037302.
4. A. J. Sargeant, M. S. Hussein, M. P. Pato, N. Takigawa and M. Ueda
Energy averages and fluctuations in the decay out of superdeformed bands
Phys. Rev. C66 (2002) 064301
5. K. Saito, M. Ueda, K. Tsushima and A. W. Thomas
Structure functions of unstable lithium isotopes
Nucl. Phys. A705 (2002) p.119-152
6. K. Yabana, M. Ueda, T. Nakatsukasa
Absorbing boundary condition approach for breakup reactions of halo nuclei
Prog. Theor. Phys. Suppl. 146 (2002) 329.
7. T. Nakatsukasa, K. Yabana
3D real-space calculation of the continuum response
Prog. Theor. Phys. Suppl., 146 (2002) 447.
8. M. Ueda, K. Yabana and T. Nakatsukasa

Absorption boundary condition approach for breakup reactions of halo nuclei
Proc. of the 4th Italy-Japan symposium on heavy ion physics
"Perspective in Heavy Ion Physics" World Scientific (2002), p.69-76

9. M. Ueda, A. J. Sargeant, M. P. Pato, and M. S. Hussein
Evaluation of effective astrophysical S factor for non-resonant reactions
Proc. of Yukawa International Seminar 2001 "Physics of Unstable Nuclei"
Prog. Theor. Phys. Suppl. (2002), p.329-337
10. T. Nakatsukasa, K. Yabana
Oscillator strength distribution of C³H⁶ isomers studied with the time-dependent density
functional method in the continuum
Chem. Phys. Lett, in press.
11. K. Yabana, M. Ueda, T. Nakatsukasa
Time-dependent wave-packet approach for fusion reactions of halo nuclei
Nucl. Phys. A, in press.
12. T. Nakatsukasa, M. Ueda, K. Yabana,
Absorbing-boundary-condition method for drip-line nuclei
To be published in Proc. Int. Symp. on Frontiers of Collective Motions (World Scientific).
13. T. Nakatsukasa, K. Yabana,
Giant resonances in the deformed continuum
Eur. Phys. J. A, in press.
14. G.F. Bertsch, K. Yabana
Application of time-dependent density-functional theory to electron-ion coupling in ethylene
Israel J. Phys, submitted.
15. J.-I. Iwata, K. Yabana, G.F. Bertsch,
Real-Space Computational Methods for Linear and Nonlinear Polarizabilities
J. Comp. Methods in Sci. and Eng., submitted.

◀ 国際会議 ▶

1. T. Otobe, K. Yabana, J.-I. Iwata
Density functional calculation for tunneling ionization rates of atoms and molecules
International Workshop on Photoionization, Spring8, Hyogo, Aug.22-26, 2002.
2. T. Otobe, K. Yabana, J.-I. Iwata
First principle calculation for tunneling ionization rate of atoms and molecules

第11回 JST シンポジウム「強光子場における分子制御」
日本科学未来館（東京都江東区）、2002年9月9-10日

3. Manabu Ueda, Kazuhiro Yabana, and Takashi Nakatsukasa
Reactions of one-neutron halo nuclei
INT workshop on Reaction Theory for Nuclear Far from Stability
(Institute for Nuclear Theory, Seattle, USA, September 16-20, 2002)
4. K. Yabana
Time-dependent wave packet approach for fusion reactions of halo nuclei
Int. Symp. on Physics of Unstable Nuclei, Halong Bay, Vietnam, 2002年11月

〈国内研究会・学会等〉

1. 矢花一浩
不安定核研究で拓がる核構造の物理
筑波大学加速器センター「元素合成・不安定核ワークショップ」2002年7月3日
2. 矢花一浩
時間依存密度汎関数法：多電子ダイナミクスの第一原理計算（招待講演）
日本物理学会2002年秋季大会、中部大学（愛知県春日井市）、2002年9月6-9日
3. 矢花一浩
時間依存波動理論を用いた不安定核の融合反応
CNS-RIKEN 研究会「少数系・不安定核における連続状態とその展望」2003年2月20-22日
4. 矢花一浩
多スレーター行列式を用いた核構造理論
「相互作用と核構造模型」研究会、KEK、2003年3月10-11日
5. 矢花一浩
3体核反応への計算科学アプローチ
宇宙核物理ワークショップ「天体核反応研究の戦略」理化学研究所、2003年3月13-14日
6. 赤井吉郎、斎藤晋、岩田潤一、矢花一浩
カイラル型カーボンナノチューブの電子構造
日本物理学会2003年年会、東北大学（仙台市）、2003年3月28-31日
7. 信定克幸、矢花一浩
貴金属クラスターの非線形光学応答
日本物理学会2003年年会、東北大学（仙台市）、2003年3月28-31日

8. 太田寛史、矢花一浩、中務孝
 パリティ射影後の変分による負パリティ状態の平均場計算
 日本物理学会 2003 年年会、東北学院大学 (仙台市)、2003 年 3 月 28-31 日

9. 乙部智仁、矢花一浩、岩田潤一
 強光子場中における分子のイオン化率の微視的計算
 日本物理学会 2002 年秋季大会、中部大学 (愛知県春日井市)、2002 年 9 月 6-9 日

10. 乙部智仁、矢花一浩、岩田潤一
 強光子場中におけるイオン化率の微視的計算
 分子構造討論会、神戸国際会議場、2002 年 10 月 1-4 日

11. 乙部智仁、矢花一浩、岩田潤一
 強光子場中におけるイオン化率の微視的計算
 東大物性研短期研究会「物性研究における計算物理」、2002 年 11 月 6-8 日

12. 乙部智仁、矢花一浩、岩田潤一
 強光子場中における原子分子のトンネルイオン化率の微視的計算
 宇宙科学研究所研究会「強い場における原子分子過程—強光子場と強クーロン場—」
 2003 年 1 月 6-7 日

13. 今川博人、橋本幸男
 Skyrme-Hartree-Fock + Random Phase Approximation による原子核の低励起状態の記述
 日本物理学会 2002 年秋季大会 立教大学 2002 年 9 月 13-16 日

14. 上田学、矢花一浩、中務孝(東北大)
 Absorbing Boundary Condition Approach to Three-body Reactions
 KEK 研究会「少数粒子系物理学の現状と今後の展望」KEK 2002 年 5 月 24-26 日

15. 上田学
 吸収境界条件を用いる方法による ^{11}Be 分解反応の記述
 CNS-RIKEN 研究会「少数系・不安定核における連続状態とその展望」2003 年 2 月 20-22 日

16. 上田学、矢花一浩、中務孝
 吸収境界条件を利用する方法による $^{11}\text{Be}+^{12}\text{C}$ 分解反応の記述
 日本物理学会 2003 年年会、東北学院大学 (仙台市)、2003 年 3 月 28-31 日