

## IV. 原子核理論グループ

教授 香村俊武  
助教授 矢花一浩  
講師 宇根 司、橋本幸男  
技官 牟田 淳  
大学院生 9名

### 【1】原子核の動的集団遷移の場の理論的研究（香村俊武）

原子核をハドロン多体系として扱い、動的集団遷移の場の理論的研究を進めた。まず、有限核について定常的準安定状態を相対論的平均場理論で記述する。相対論的平均場近似の計算結果を理解するために、原子核が正エネルギー核子からなる描像で、正エネルギー核子間の中間子交換力が核子一反核子励起型の真空偏極により受ける補正を計算した。核内では真空偏極のために中間子の質量と結合定数が変化して、核子間の中間子交換力は結合定数が小さく、到達距離が長くなる。繰り込まれた真空偏極は核子密度に比例する。このため、真空偏極による中間子交換力の補正は、二核子系では極めて小さいが、核内では顕著になり、媒質効果として現れる。真空偏極補正を取り入れた中間子交換力を真空偏極関数について展開すると、補正項は斥力型の核子間有効三体、四体、五体力になる。このように核内の中間子交換力は核子-核子散乱から得られる核力と異なり、補正を受けて弱くなる。原子核内の核子間相互作用には三体力が必要であることが唱えられているが、これらの現象論における三体力の大きさと比較して、核内の中間子交換力の真空偏極効果補正が現象論から導かれた三体力と同程度の大きさであることが判った。

次に、ハドロン多体系の動的集団遷移を場の理論に基づいて定式化した。上述の準安定平均場状態で表される複数の Hartree 極値状態の間の動的集団遷移を扱う。それぞれの極値状態について、中間子の平均場が決まる。これらの状態間の遷移について、中間子の平均場が線形に変化すると考え、変化する中間子場を遷移を推進する中間子場と名づけて、これを扱う。この近似で、遷移の過程における中間子平均場が決まり、核子の一粒子状態が決まる。中間子場が変化する間に、これら核子の一粒子準位がなめらかに第二の平均場状態に変化するものと、交差して励起準位になるものがある。一般的に推進中間子場は回転対称でないので、これに共変な中間子場成分を考慮すると、これは集団遷移の過程で、推進中間子場だけでは励起してしまう準位を下げ、平均場状態にする効果がある。しかし、滑らかに平均場状態間を移行していた一粒子準位を励起する要因にもなる。このように、推進場とその共変場は集団状態遷移において、相補的な働きをする。遷移推進中間子場、共変中間子場と核子系との相互作用を取り入れた Hamiltonian を開発して、動的集団遷移の基本的かつ典型的な特性を解明した。この系は状態遷移の過程でエネルギーの高い中間状態を経るため、多体系の集団運動のトンネル現象の本質を表している。この理論を拡張して、準安定な平均場状態間の遷移において集団運動がとる道筋の領域をより広く扱うことができる。このようにして、乱雑位相近似 (RPA) 以上の高次補正項が関与する状態遷移の機構を解明した。系の状態変化の時間発展性、遷移確率や崩壊幅などの定式化を行っている。

### 【2】時間依存平均場理論による電子ダイナミクスの研究

矢花、永野（新潟大）、岩田、中務（理研）、阿部（京大）、田澤（山口大）、  
G.F. Bertsch (Univ. Washington)、A. Rubio (Univ. Valladolid)、  
C. Guet (CEA-Grenoble)

様々な物質系の性質のうちで電子ダイナミクスが本質的な役割を果たす場合には、フェルミオン多体系として共通する原子核物理で発展した概念・手法がしばしば有効である。特に、有限多電子系である原子・分子・原子クラスターでは原子核物理との相似が著しい。我々は、原子核理論分野で発展した時間依存平均場理論の実時間・実空間解法を電子系の第一原理ハミルトニアンと組み合わせることにより、多様な電子ダイナミクスに対する第一原理的なシミュレーションを行っている。今年度は以下の発展があった。

#### (1) 金属クラスターの光応答

金属クラスターの光吸収は、球形導体の表面プラズモンであるミー共鳴が支配的であり、原子核の巨大双極共鳴と類似する。これまでアルカリ金属クラスターや、炭素クラスターに現れる集団励起を調べてきた。今年度はさらに、銀クラスターの集団振動を調べ、s電子が作るプラズマ振動に対するd電子によるスクリーニングの効果を議論した。また、Na<sub>8</sub>クラスターの光吸収を例にとり、実時間法と他の方法の優劣を検討した。

#### (2) 分子の高励起連続スペクトル

放射光を用いて測定される分子の真空紫外領域の光吸収スペクトルは TRK 和則の大部分を占めるが、イオン化エネルギーより上の連続スペクトルを計算する手法が発展していないため理論的分析が進んでいない。我々は、修正 Sternheimer 法に外向波境界条件を加えることにより連続スペクトルに対する新しい線形応答理論の開発を行った。

#### (3) イオンと原子・クラスター衝突のシミュレーション

多価イオンと中性物質の衝突でみられる多電子移行反応過程は、基底状態と大きく異なる配位で電子ダイナミクスに対する時間依存平均場理論の有効性を検証する格好の舞台である。今年度、局所密度近似によるポテンシャルの漸近的振る舞いを改善する自己相互作用補正、及び非局所な交換ポテンシャルを厳密に扱った計算を局所密度近似の結果と比較し、電荷移行断面積への影響を議論した。また、多価イオンと金属クラスターの衝突に関して、量子理論である時間依存 Kohn-Sham 方程式の結果と半古典理論である Vlasov 方程式の結果を比較し、両者の一致を示した。

#### (4) 分子の非線形応答係数

レーザーと分子の摂動的な非線形相互作用は、動的超分極率で特徴づけられる。特に1次元構造を持つ有機分子は大きな非線形係数を持ち、応用面からも期待されている。我々は、実空間法に修正 Sternheimer 法を組み合わせることにより、超分極率に対する新しい計算法を開発した。空間配位に関する収束性を容易に確認できる点で、従来の量子化学的手法と相補的な特色を持つ。

#### (5) 誘電関数の実時間計算

振動数依存誘電関数は物質の光応答を特徴づける基本的な観測量である。我々は、一様ゲージ場を用いて表面電荷の効果を表現することにより実空間で誘電関数を求める理論を定式化した。さらに Bloch 関数に対する時間依存 Kohn-Sham 方程式を実時間で解き、Lithium、Diamond を例に、第一原理ハミルトニアンを用いて誘電関数を求めるプロセスを例示した。

### 【3】原子核の回転運動 (宇根 司)

回転を半古典論的に扱うクランキング模型を射影後変分法の視点から検討する仕事を引き続き進

めている。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。単純な系について射影後変分法に基づく数値計算プログラムを開発し、予備的計算を行った。内部状態が時間反転対称性を破る効果について検討できる段階にまで到達した。

#### 【4】原子核集団運動の非線型理論（橋本幸男）

橋本は原子核の集団運動の安定性について平均場を用いた半古典論的な方法と量子論的なモデルによる方法とで調べている。いずれの方法も基本的な考え方は古典力学的な相空間の構造と量子力学的な固有状態の集合とに存在する一定の対応関係を利用して統一的な視点を得ることにある。

原子核の集団運動は時間依存平均場（TDHF）の枠組を利用して記述される。TDHF 軌道は粒子波動関数の変化を表現しその方程式は古典的な正準方程式である。この方程式は一般に非線形であり TDHF 軌道は規則的なものから乱雑なものまで含まれる。その規則・不規則転移は TDHF 相空間の構造で決定される。また、TDHF 相空間の構造は系の固有状態の内容をも反映する。

橋本は、津久間秀彦（広島大・医療情報）、坂田文彦（茨城大・理）の各氏と協力して固有状態の構造変化（安定性）を解析する方法を展開してきた。主な注目点は、古典力学との対応も考慮に入れて量子力学的な非線形共鳴状態の存在である。非線形共鳴状態には、TDHF 相空間の一連の周期軌道群が対応していることは既に確かめた。周期軌道には安定な周期軌道と不安定な周期軌道とが存在することが知られている。それに並行して固有状態の安定性を調べるために共鳴座標に対応する”共鳴基底”を導入し固有状態をこの新たな基底で表現した。これによって、共鳴固有状態の安定性を決める主要因として二点あることを発見した。第一は符号規則と呼べるもので、共鳴基底での表現において正負の符号の現れ方が規則的なものが安定であり不規則な符号の現れ方が増すほど固有状態の形が複雑化し”くずれ”ていく。第二は共鳴基底自身が複雑化し固有状態の形が崩れていくものである。後者は、複数の共鳴同士の間相互作用の結果と考えられるもので、相空間の急激な変化を表すと考えられる。この点の解析は現在進んでいる。

一方、平均場を用いた方法では、今川博人（D 3）、坂田文彦の各氏と共同で TDHF を拡張した枠組を作成中である。TDHF には二体相関は入っていない。そこで、集団運動の散逸現象を解析するためには二体相関を取り入れられるような拡張が必要となる。我々は時間依存密度行列の方法（TDDM）を出発点として対称性の制約の無い TDDM の定式化と数値計算法の開発を進めている。

#### 【5】TDHFと周期軌道（牟田 淳）

牟田は1998年度までは不安定核の研究を行っていたが、1999年度は前半は $\alpha$ 崩壊中の輻射の研究、1999年度後半はTDHF周期軌道を利用した励起状態の研究を行った。 $\alpha$ 崩壊中の輻射については、ポテンシャル障壁外部の制動輻射とトンネリング中の輻射が重要であるという指摘があったが、現実的なポテンシャルで計算すると、表面付近の輻射への影響も重要であり、 $\alpha$ 粒子のファクターによって結果が大きく変化することから結局核構造の問題の側面が大きいことがわかった。

TDHF周期軌道を利用した励起状態の研究においてはTDHFの時間部分をフーリエ成分に分解して解く方法を提案した。この方法はRPA方程式との対応関係がわかりやすく、またRPA方程式を越えた計算の議論もわかりやすいという利点がある。現在までに幾つかのケースについてRPA方程式を解いておりRPA方程式を越えた計算についても可能性を調べている。

## <学位>

1. 理学博士：知久季倫  
Optimized Perturbation Theory at Finite Temperature
2. 理学修士：今川博人  
原子核集団運動の散逸現象---対称性の制約のない時間依存平均場計算---
3. 理学修士：下条龍平  
射影後変分法に基づくクランキング模型の考察
4. 理学修士：太田寛史  
推進中間子場による原子核の集団状態遷移

## <発表論文>

- T. Kohmura, Y. Hashimoto, H. Ohta and M. Maruyama,  
Adiabatic mean-field model for dynamical collective state transitions of a nuclear system  
Phys. Rev. C61 (2000), #034315
- K. Yabana, G.F. Bertsch  
Time-dependent local-density approximation in real time: application  
to conjugated molecules  
Int. J. Quantum Chem. 75 (1999) 55-66.
- K. Yabana, G.F. Bertsch  
Application of the time-dependent local density approximation to  
optical activity  
Phys. Rev. A60 (1999) 1271-1279.
- K. Yabana, G.F. Bertsch  
Optical response of small silver clusters  
Phys. Rev. A60 (1999) 3809-3814.
- L. Plagne, J. Daligault, K. Yabana, T. Tazawa, Y. Abe, C. Guet  
Semiclassical versus quantal time-dependent mean-field descriptions of electron dynamics in ion-cluster  
collisions  
Phys. Rev. A61 (2000) 033201.
- K. Yabana, G.F. Bertsch  
Time dependent local density approximation: application to the collective electronic excitations in atomic  
clusters  
Proc. Int. Workshop on 'Collective Excitations in Fermi and Bose  
Systems', World Scientific (1999), 192-204.

牟田 淳

Single particle properties of nuclei on and beyond the drip line  
Soryuusiron kenkyu (1999) 99-4 (p149-147)

S. Chiku

PHYSICS OF HADRONS AND QCD  
(the APCTP-RCNP joint International School and the 1998 YITP Workshop)  
p320-p323 (1999) World Scientific.

K. Takahashi, S. Iida

Thouless energy in QCD and effects of diffusion modes on level correlations of Dirac operator  
Nuclear Physics B 573 (2000) 685-702

K. Takahashi, S. Iida

Chiral random matrix theory and effective theories of QCD  
Nuclear Physics A 670 (2000) 60-63

<口頭発表>

矢花一浩

Cluster excitation by highly charged ions  
Joint ITP/INT Workshop on Time-Dependent Density Functional Theory  
(Santa Barabala, USA, Apr. 15-17)

矢花一浩

Ion-Cluster Collisions: Theory and Experiment  
XVIth Int. Seminar on Ion-Atom Collisions  
(Uji, Japan, July 29-30, 1999)

矢花一浩

Real-time TDLDA Calculation for Optical Response  
Third Int. Symp. on Theory of Atomic and Molecular Clusters  
(Berlin, Germany, Oct. 5-9, 1999)

矢花一浩

Time-dependent local density approximation for optical response of  
clusters and molecules  
2nd Korea-Japan Joint Workshop on Electronic Structure Calculations  
(Seoul, Korea, Nov. 1-3, 1999)

矢花一浩

Real-time method for optical response of clusters and molecules  
Spain-2000 Mini-workshop on Advances in First-Principles Computational  
Condensed Matter Physics (Madrid, Spain, Jan. 13-15, 2000)

矢花一浩

Real-time implementation of TDDFT  
Annual APS March Meeting 2000, symposium session on 'Calculation of  
Electronic Excitations' (Minneapolis, USA, Mar. 20-24, 2000)

岩田潤一

Dynamic hyperpolarizability calculation without basis functions  
Int. Workshop on Molecular Design of Photonic Materials  
(Takarazuka, Japan, Dec. 9-10, 1999)

橋本幸男

Overlap of Quantum Nonlinear Resonances and Bifurcation Structure of Eigenstates  
in Three-Level Model  
Workshop on Collective Excitations in Nuclei and other Finite Fermisystems  
(Dubna, June 14-24, 1999)

太田 寛史, 橋本幸男, 香村 俊武, 丸山政弘 (東北大理)

原子核の集団状態遷移の推進中間子場理論  
日本物理学会 島根大(島根県) 1999年9月25日

太田 寛史, 香村 俊武, 橋本幸男, 丸山政弘 (東北大理)

推進中間子場による原子核の集団状態遷移  
日本物理学会 近畿大(大阪府) 2000年3月31日

太田 寛史, 香村 俊武, 橋本幸男, 丸山政弘 (東北大理)

集団トンネル過程の断熱平均場模型  
「多体系の場の理論の新展開」基礎物理学研究所(京都府) 1999年12月23日

矢花一浩

「時間依存密度汎関数法による分子・クラスターの光応答の研究」  
第3回理論化学討論会、京大会館、京都、June 15-17, 1999

矢花一浩

「炭素クラスターの光応答とイオン化のダイナミクス (特別講演)」  
第17回フラーレン総合シンポジウム、長良川国際会議場、岐阜、Aug. 9-10, 1999

矢花一浩

「有限電子系の平均場理論 (講義)」  
第13回北海道原子核理論グループ研究会、長沼、北海道、Aug. 17-20, 1999

矢花一浩

「時間依存密度汎関数法による光学活性の計算」  
日本物理学会、岩手大学、盛岡、Sept. 24-27, 1999

牟田淳

$\alpha$ 崩壊中の輻射  
日本物理学会（島根大学 1999 年 9 月 24 日）

永野粒一郎

「原子-多価イオン衝突の微視的記述」  
有限量子系物理の新しい展開、京大基研、May 31-June 2, 1999

永野粒一郎

「時間依存密度汎関数法のイオン衝突への応用」  
物性研究における計算物理、東大物性研、June 14-16, 1999

永野粒一郎

「多価イオン-原子間電荷移行反応の時間依存平均場理論での記述」  
多価イオンの分光と衝突過程、宇宙科学研、Jan. 6-7, 2000

永野粒一郎

「幾つかの時間依存平均場理論による多価イオン-原子衝突の記述」  
日本物理学会、岩手大学、盛岡、Sept. 24-27, 1999

永野粒一郎

「時間依存密度汎関数法の実時空間解法のイオン衝突への応用」  
日本物理学会、岩手大学、盛岡、Sept. 24-27, 1999

岩田潤一

「時間依存密度汎関数法による動的非線形応答関数の実空間計算法」  
日本物理学会、岩手大学、盛岡、Sept. 24-27, 1999

高橋 和孝

カイラルランダム行列の理論とその応用  
KEK 田無研究会「QCD とハドロン物理--現状と今後の課題--」  
高エネルギー加速器研究機構田無分室  
1999 年 12 月 20 日

高橋 和孝、飯田 晋司(龍谷大数理情報)

Random Flux Model における有効理論  
日本物理学会 2000 年春の分科会  
関西大学  
2000 年 3 月 22 日