

IV. 原子核理論グループ

助教授 矢花一浩
講師 宇根 司、橋本幸男
技官 上田 学
大学院生 12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

(1) 吸収境界条件を用いた不安定原子核の反応理論

上田、軽部、矢花、中務(東北大理)

として取り扱い、入射核の分解過程を量子力学的に完全に考慮した三体系反応の理論を発展させた。その方法の特徴は (i) 吸収型境界ポテンシャルを用いることにより、分解反応における外向波連続境界条件問題を簡単に取り扱えるよ

うにした。(ii) 実空間における波動関数を離散化して表すことにより、反応過程における入射核の束縛状態-連続状態の結合、及び、連続状態-連続状態の結合の効果を完全に取り込んだ。また、この理論に基づき計算コードを開発した。従来の理論による重陽子散乱の計算結果との比較を通して、開発した理論が妥当であることを確認した。さらに、典型的な中性子ハロー構造を持つベリリウム 11 原子核の弾性散乱と核力による弾性分解反応の解析を行い、分解過程が弾性散乱に大きく影響することを示した。

(2) 吸収境界条件を用いた軽い不安定核の応答関数計算

軽部、矢花、上田、中務(東北大理)

中性子ドリップ線近傍の原子核は、1-2 個の中性子群が非常に弱く束縛したハロー構造が特徴的である。これらの原子核には弱く結合した中性子群に固有の励起モード (ソフトモード) の存在が予言され、実験的には重い標的核との衝突によるクーロン励起を利用した応答関数の研究がなされている。われわれは、弱く束縛した 2 中性子を持つ原子核を 3 体模型で扱い、吸収境界条件を用いて共鳴状態や応答関数を分析した。上述の 3 体反応の場合と類似した取り扱いにより、吸収境界条件の方法が有効に働くことを確かめ、ソフトモードの性質に関する予備的検討を行った。

(3) 不安定リチウム同位体の構造関数

上田、斎藤(東北薬科大)、対馬(Univ. Georgia),
A. W. Thomas (Univ. Adelaide)

原子核内核子でのクォークの分布 (構造関数) は、単独の核子のものとは違うことが実験的に知られている (EMC 効果)。軽い中性子過剰不安定核では中性子数と陽子数が異なるばかりでなく、中性子ハローや中性子スキン等の特異な構造が形成されていることが知られている。このようなアイソスピンが非対称な、かつ、密度の異なる原子核のクォークの分布を研究することは、核物質中でのクォークの振る舞いの理解を大きく進展させると考えられる。我々のグループは、簡単な現象論的殻模型を用いて、リチウム同位体の原子核内

核子の運動量分布を計算し、それと単独核子内のクォークの運動量分布をたたみこんで原子核内における構造関数を求めた。また、リチウム同位体のクォークスピン分布についても計算を行った。その結果、同位体の EMC 効果の比を連続的に見ることにより核媒質中での中性子構造関数に対するオフシェル効果の系統的な情報を引き出せる可能性があること、及び、中性子ハロー構造を形成するような原子核の場合、EMC 効果の同位体間の差の比から実験的に中性子構造関数を決めうる可能性があることを示唆した。

(4) 超変形回転バンドの崩壊現象

上田, A. J. Sargeant (Univ. Sao Paulo), M. P. Pato (Univ. Sao Paulo),
M. S. Hussein (Univ. Sao Paulo), 滝川(東北大理)

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、その核スピンにおいて超変形状態-通常変形状態間の量子トンネル効果により、その二つの状態の混合が度合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で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。我々のグループは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た。また、変形されたガウシアン直交アンサンブルを用いて通常変形の場合での高励起状態を記述することによって量子トンネル崩壊の終状態である通常変形状態の混沌さを調節し、その超変形回転バンド崩壊の様子が混沌さの度合によりどのように変化するか検討した。その結果、急速な超変形回転バンドの崩壊は通常変形状態の混沌さだけでは説明できないことを示した。

(5) 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, A. J. Sargeant (Univ. Sao Paulo), M. P. Pato (Univ. Sao Paulo),
M. S. Hussein (Univ. Sao Paulo)

荷電粒子の熱核融合反応は星の化学的組成の進化においてきわめて重要な役割を担っている。星の進化のシミュレーションにおいて用いられる反応率は、各段階での星の内部温度におけるそのマクスウェル分布平均である。しかし、星の進化の数値計算は膨大なため、反応率を温度の関数として表す近似式が採用されることが多い。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き、非共鳴反応の場合の熱核融合率を積分の漸近展開として表現することで、より精度の高い近似式を導出する方法を開発した。また、開発した方法の共鳴反応への拡張を検討した。この方法は共鳴の幅が広い場合、及び、共鳴の位置と停留点が近い場合に有効であると考えている。

(6) 密度行列繰り込み群によるシェルモデル計算

太田, 岩田

1992 年に Steven. R. White によって開発された密度行列繰り込み群の方法は、Heisenberg-model や Hubbard-model など多体系の波動関数を精度よく求める方法として物性分野では盛んに研究されている。我々はこの方法を原子核のシェルモデル計算へ適用することを試みた。

【2】有限量子系の物質計算科学

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。電子軌道の閉殻構造が系の安定性に結びつき魔法数が現れることは、縮退したフェルミ多粒子系に固有の特徴であり、また反応や外場への応答で起こる離合集散のメカニズムは孤立系に特有の問題である。我々のグループでは、原子核理論で発展してきた時間依存平均場理論と物質科学の第一原理計算の手法を組み合わせ、特に電子励起状態や光応答などの多電子ダイナミクス現象に対する取り組みを続けている。

今年度は以下の課題に進展があった。

(1) 分子の非線形光応答

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。我々は、時間依存密度汎関数法を用いて分子の非線形分極率を効率的に計算する新しい手法を提案した。また、いくつかの分子に対して種々の交換相関ポテンシャルを用いた振動数依存分極率の結果を示し、過去の計算との比較検討から我々の方法の特徴と有効性を論じた。我々の方法の特色は、3次元座標空間を等間隔の格子点で離散化し、差分近似を用いて非線形応答を実空間で直接求める点にある。このため従来の量子化学計算などで問題となる基底関数に関する収束性の問題が無く、また計算量が分子の大きさの2乗にスケールし大きな分子の計算に適している。時間依存密度汎関数法の範囲で収束した計算の結果は、非線形分極率が交換相関ポテンシャルの選択に大変敏感であり、信頼性のある結果を得るためには適切な交換相関ポテンシャルの探求が必要とされることを示している。

(2) 強光子場中の原子・分子の光応答に関する研究

レーザーの強度が増すとともに、光に起因する多電子ダイナミクスは質的に変化する。光電場が分子内の価電子を束縛する場と同程度となる 10^{14-15} W/cm² の電場を境に、光による原子分子のイオン化メカニズムは、多光子吸収型からトンネルイオン化型へと変化する。光応答に対する時間依存密度汎関数法の発展の主要な展開方向の一つとして、このようなイオン化メカニズムの変化を、非経験的な計算を行い理論的に解明する取り組みを開始した。まずその端緒として、静的な電場中でのトンネルイオン化率の計算を行った。従来半現象論的な ADK 理論による分析がなされ、一定の成功を収めている。これに対して我々は、Kohn-Sham 方程式を外向波境界条件のもとで解いて得られるガモフ状態を求め、そのエネルギー固有値の虚部からイオン化率を評価した。その結果、トンネルイオン化率が交換相関ポテンシャルに敏感であり、自己相互作用補正を取り込むことが重要であることが示された。さらに分子のイオン化率の評価にむけて検討を進めている。

(3) 液体ヘリウム中の原子スペクトル

液体ヘリウム中に原子や分子を入れ、極低温で光吸収と発光を調べる実験研究が進展している。これらの不純物スペクトルは、ヘリウムと原子分子の相互作用を探るため、また極低温で原子クラスターの性質を探る新しい方法として期待されている。我々は、溶媒がスペクトルへ及ぼす影響を探る端緒として、液体ヘリウム中に閉じ込められたアルカリ金属原子のスペクトルに対して、液体ヘリウムに密度汎関数法を用いた分析を試みた。アルカリ金属の価電子とヘリウム原子間の斥力のため、液体ヘリウム中に半径約 6 Å 程のバブルができる。価電子の光吸収スペクトルに見られる特徴的な吸収曲線の振る舞いは、従来バブルの集団運動(半径の変動や四重極振動)によるものと解釈されてきた。これに対し我々は、密度汎関数法から得られるヘリウムの分布を用いて、ヘリウム配位の統計的なゆらぎを考慮することにより、吸収線のシフト、幅、形状が、定量的に説明されることを示した。従来のバブル集団運動モデルは、シフトと幅を同時に再現することが困難

であることが知られており、我々の仮定した統計的なヘリウム配位による擾動の考え方は、より現実に近い記述を与えていると考えられる。

(4) 炭素ナノチューブ電子構造の実空間計算

炭素ナノチューブは1方向にのみ周期構造を持ち、2方向には有限サイズのユニークな物質である。その電子構造と光応答を第一原理的に調べることを目的として、任意のカイラリティを持つ単層ナノチューブの電子構造計算が可能な実空間計算法の開発を行った。六方格子の2次元座標と動径方向の1次元座標からなる曲線座標を用い、回転と螺旋操作から波動関数の境界条件を設定することにより、任意のカイラリティを持つチューブを扱うことができる。今後光応答などの研究を進展させる予定である。

(5) C₂₀ クラスターの構造と光応答

最近クラスタービーム中でC₂₀の合成が報告されているが、その幾何学的構造に関しては、正12面体構造を持つのか、より低位の対称性を持つのかなど明らかではない。我々は光吸収スペクトルから幾何学的構造を同定する可能性について、種々の幾何学的異性体に対して時間依存密度汎関数法による応答関数の計算を行い検討した。1次元的な鎖、環構造では π 電子の特徴的な励起が見られるが、籠(フラーレン)構造では π 電子励起は分散している。対称性の高い正20面体構造では光学的に許される電子励起状態の数が少なく、より低い対称性を持つ構造では多くの電子励起状態が光吸収に寄与しより分散が大きい。幾何学的形状の異なる様々なC₂₀分子の光吸収スペクトルを提示し、今後の実験的研究への指針を与えた。

【3】原子核の回転運動 (宇根 司)

核スピンI (原子核の全角運動量)の値が大きくなると、それを担う運動形態も変化する。始めから非集団回転が存在する場合、例えば、大きなK (変形した原子核の対称軸への核スピンの射影成分)をもって始まる回転バンドー高Kバンドーでは、対称軸に垂直な集団回転によって核スピンの回転軸は変形の主軸から傾いた (tilted) 方向をとることが古典的には考えられる。克蘭キング模型をこの考え方によって3次元的に拡張することが行われてきた。この3次元克蘭キング模型を量子論で基礎づけることを試みた。角運動量射影を行って内部状態 $|\Phi\rangle$ から回転状態 $|IM\rangle$ をつくり、 $|IM\rangle$ でのハミルトニアンHの期待値を極小にすることから内部状態 $|\Phi\rangle$ を決める射影後変分法を用いる。 $|\Phi\rangle$ が強く変形し、そのK成分が主値とその前後に集中していると仮定して、近似的に $|\Phi\rangle$ を決める変分方程式を導いた。この式は通常3次元克蘭キング模型での方程式とはいくつかの点で異なっている。1) 補助条件が異なり、全角運動量演算子Jの各成分の期待値 $\langle\Phi|J|\Phi\rangle$ がIとKで与えられる。2) ダイナミカルな変分項ーハミルトニアンを含み全角運動量演算子について線形の項 $\langle\Phi|HJ|\Phi\rangle$ に関する変分一が存在する。この変分項は角速度と $\langle\Phi|J|\Phi\rangle$ の方向が平行になることを妨げる作用をする。定量的な分析は今後の課題である。

【4】原子核集団運動の非線形理論 (橋本幸男)

橋本は原子核の集団運動の生成・変化・減衰の力学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。

平均場を用いた方法では、今川博人 (D3)、坂田文彦 (茨城大・理)の各氏と共同で非線形効果を取り込んだ集団運動 (回転運動+四重極型振動運動)をSkyrme力型の有効相互作用を用いたTDHF波動関数から構成する定式化を進めている。基本的な考え方は自己無撞着集団座標の方法 (SCC法)で展開されてきたアイデアを踏襲した。集団運動の振幅の増大とともに非線形性により集団運動の物理的内容が変化する。大振幅運動では、線形近似では結合しないモードとの間に“集団・非集団結合”が生じ、非集団自由度の効

果を取り込んだ集団運動を“最適に”構成しなければならない。今回の定式化では、回転運動の慣性能率と振動運動の質量パラメータに集団・非集団結合の効果がどのように反映されるかを調べることを主要な目的とした。大振幅運動に際しては、集団・非集団結合と同時に回転と振動の集団運動間結合も重要になるためである。定式化には乱雑位相近似 (RPA) に基づいた級数展開法を採用しているために、Skyrme HF + RPA の計算の実行が必要であり、その展開も進めている。

一方、津久間秀彦 (広島大・医療情報)、坂田文彦 (茨城大・理) の各氏と協力して量子力学的な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。着目点は共鳴点である。非線形系では一般に振動数は振幅に依存し、相空間の中に共鳴点がちりばめられていて、その分布が系の運動の複雑さを決定することが知られている。対応する量子力学的な系においてもその効果が期待される。すでに我々は簡単な系でこの古典・量子対応を示した。重要な点は、共鳴を引き起こす相関を取り込んだ局所的な基底系を導入して初めてこの共鳴効果を明確に示せることである。この共鳴基底を用いて、楕円点群と双曲点群とが接近している“不安定軌道”の相空間に対応する量子状態群の構造変化を視覚的に提示した。軌道の不安定性が強くなってカオスが広域で発生するようなパラメータ領域について適応できるように定式化を開発している。

<学位>

1. 理学博士:

岩田潤一

Nonlinear optical response of molecules in time-dependent density-functional theory

近角真平

Molecular Simulation of Expanding Matter and Multifragmentation

八木澤直彦

Σ^0 - Λ Mixing in QCD Sum Rules

2. 理学修士:

乙部智仁

強光子場中における原子分子のトンネルイオン化の微視的研究

軽部直人

吸収境界条件による不安定核の応答と反応

小林民季

記憶と場の量子論

<発表論文>

G. F. Bertsch, A. Schnell, and K. Yabana

Electron-Vibration Coupling in Time-Dependent Density-Functional Theory: Application to Benzene

J. Chem. Phys., 115 (2001), 4051-4054.

- Y. Ogawa, T. Kido, K. Yabana and Y. Suzuki
 Microscopic Theories for the Reactions of Halo Nuclei
 Prog. Theor. Phys. Suppl., 142 (2001) 157-204.
- J.-I. Iwata, K. Yabana and G. F. Bertsch
 Real-Space Computation of Dynamic Hyperpolarizabilities
 J. Chem. Phys. 115 (2001), 8773-8783.
- A. Castro, M.A.L. Marques, J.A. Alonso, G.F. Bertsch, K. Yabana, A. Rubio
 Can Optical Spectroscopy Directly Elucidate the Ground State of
 C₂₀?
 J. Chem. Phys. 116 (2002), 1930-1933.
- T. Nakatsukasa, K. Yabana and G.F. Bertsch
 Application of density-functional theory to line broadening:
 Cs atoms in liquid helium
 Phys. Rev. A65 (2002), 032512
- A. Muta, J.-I. Iwata, Y. Hashimoto and K. Yabana
 Solving RPA Eigenvalue Equation in Real-Space
 Prog. Theor. Phys., submitted.
- K. Yabana, M. Ueda and T. Nakatsukasa
 Absorbing boundary condition approach for breakup reactions of
 halo nuclei
 Yukawa Int. Seminar 2001 on Physics of Unstable Nuclei, Kyoto 2001 Nov.
 Prog. Theor. Phys. Suppl., in press.
- T. Nakatsukasa and K. Yabana
 3D Real-Space Calculation of the Continuum Response
 Yukawa Int. Seminar 2001 on Physics of Unstable Nuclei, Kyoto 2001 Nov.
 Prog. Theor. Phys. Suppl., in press.
- M. Ueda, K. Yabana and T. Nakatsukasa
 Absorption boundary condition approach for breakup reactions of halo nuclei
 Proceedings of the Fourth Italy-Japan Symposium on Heavy Ion Physics
 World Scientific (2002), in press
- M. Ueda, A. J. Sargeant, M. P. Pato, and M. S. Hussein
 Evaluation of effective astrophysical S factor for non-resonant reactions

Proceedings of Yukawa International Seminar 2001
Suppl. Prog. Theor. Phys. (2002), in press

A. J. Sargeant, M. S. Hussein, M. P. Pato, N. Takigawa and M. Ueda
Attenuation of the intensity within a superdeformed band
Phys. Rev. C65 (2002) 024302

K. Saito, M. Ueda, K. Tsushima and A. W. Thomas
Structure functions of unstable lithium isotopes
Nucl. Phys. A705 (June, 2002) p.119-152

T. Une
Study of Tilted Rotation Based on the Method of
Variation after Projection
Prog. Theor. Phys. 106 (2001) 941-952

F. Sakata, T. Marumori, Y. Hashimoto and S-W Yan
Nonlinear Dynamics of Nuclear Collective Motion
Prog. Theor. Phys. Suppl. 141(2001), 1-111.

Y. Hashimoto, H. Tsukuma and F. Sakata
Bifurcation Structure of Eigenstates and Periodic trajectories
in TDHF Phase Space - Interference effects in eigenstates -
in Nonequilibrium and Nonlinear Dynamics in Nuclear and Other Finite
Systems, Beijing(2001), edited by Z. Li, Ke Wu, X. Wu, E. G. Zhao and F. Sakata

F. Sakata, Y. Hashimoto, S. W. Yan, L. Guo, H. Imagawa, A. Seki and S. Fujiwara
Toward a Dynamics of Evolution of Matter - Past, Present and Future
Of the Self-consistent Collective Coordinate Method -
in Nonequilibrium and Nonlinear Dynamics in Nuclear and Other Finite
Systems, Beijing(2001), edited by Z. Li, Ke Wu, X. Wu, E. G. Zhao and F. Sakata

T. Kohmura, M. Maruyama, H. Ohta and Y. Hashimoto
Projection Operator Method for Collective Tunneling Transitions
Prog. Theor. Phys. 107(2002), 87-116.

<国際会議>

K. Yabana, M. Ueda and T. Nakatsukasa
Absorbing boundary condition approach for breakup reactions of
halo nuclei

Yukawa Int. Seminar 2001 on Physics of Unstable Nuclei, Kyoto 2001 Nov.

M. Ueda, K. Yabana, and T. Nakatsukasa

Absorption boundary condition approach for breakup reactions of halo nuclei

The Fourth Italy-Japan Symposium on Heavy Ion Physics

RIKEN/University of Tokyo, Japan, September 26-29, 2001

M. Ueda, A. J. Sargeant, M. P. Pato, and M. S. Hussein

Evaluation of effective astrophysical S factor for non-resonant reactions

Yukawa International Seminar 2001 Physics of Unstable Nuclei

YITP, Kyoto, Japan, November 5-10, 2001

Y. Hashimoto, H. Tsukuma and F. Sakata

Bifurcation Structure of Eigenstates and Periodic trajectories

in TDHF Phase Space - Interference effects in eigenstates -

International Conference on Nonequilibrium and Nonlinear Dynamics in Nuclear and Other Finite Systems, Beijing, China, May 21-25, 2001.

<国内研究会・学会等>

K. Yabana

Linear response calculations in real time

1st Sigma-xc workshop, 産業技術総合研究所、2001年7月

矢花一浩

密度汎関数法による光学特性の計算

第14回CAMMフォーラム8月例会本例会、東京、2001年8月

矢花一浩

原子クラスターの殻構造・形・電子励起

京都大学基研研究会「有限量子多体系の励起構造と相関効果」

2001年12月

K. Yabana

Nonlinear optical responses with TD-DFT

2nd Sigma-xc meeting, 産業技術総合研究所、2002年1月

矢花一浩

電子系の非線形ダイナミクスと平均場理論

京大基研研究会「原子核における集団運動：RPA から重イオン反応まで」
2002年3月

上田学, A. J. Sargeant, M. P. Pato, M. S. Hussein, 滝川昇
Attenuation of intensities within a superdeformed band
京大基研研究会「原子核の量子トンネル崩壊現象」
2001年7月2日-4日

上田学, 矢花一浩, 中務孝
吸収境界条件を用いる方法による分解反応の記述
理研原子核理論グループ研究会「クラスター物理と不安定核」
2001年8月30日-31日

上田学, 矢花一浩, 中務孝
吸収境界条件を用いた中性子ハロー核の分解反応の記述
理研原子核理論グループ主催研究会「不安定核の反応」
2002年1月23日-25日

上田学, 矢花一浩, 中務孝
Absorbing boundary condition approach for heavy-ion reactions of
weakly bound nuclei
京大基研研究会「原子核における集団運動：RPA から重イオン反応まで」
2002年3月22日-23日

上田学, 矢花一浩, 中務孝
吸収境界条件を用いた中性子ハロー核の分解反応の記述
日本物理学会第57回年次大会 立命館大学 2002年3月23-27日

乙部智仁, 岩田潤一, 矢花一浩
強光子場中の原子分子のイオン化率の微視的計算
日本物理学会題第57回年次大会、立命館大学、2002年3月23-27日

岩田潤一, 矢花一浩
時間依存密度汎関数法による分子の2光子吸収スペクトルの計算
日本物理学会第57回年次大会、立命館大学、2002年3月23-27日

太田寛史, 香村利武, 橋本幸男, 小林民季, 丸山政弘
四重極状態間遷移における中間状態の構造
日本物理学会第56回年次大会、中央大学、2001年3月27-30日

太田寛史

四重極状態間遷移における中間状態の構造

京大基研研究会「原子核の量子トンネル崩壊現象」 2001年7月2日-4日

橋本幸男、津久間秀彦、坂田文彦

周期軌道と波動関数の構造の変化

原子核における集団運動の微視的記述、福岡大学、2001年12月13-15日

今川博人、橋本幸男

Skyme-Hartree-Fock + RPA 計算による原子核の低励起状態の記述

原子核における集団運動の微視的記述、福岡大学、2001年12月13-15日

今川博人、橋本幸男

Skyme-Hartree-Fock + Random Phase Approximation による変形核の低励起状態の記述

日本物理学会第57回年次大会 立命館大学 2002年3月23-27日

太田寛史、岩田潤一

密度行列繰り込み群によるシェルモデル計算

日本物理学会第57回年次大会 立命館大学 2002年3月23-27日