

V. 原子核理論グループ

教授 矢花一浩
講師 橋本幸男、中務 孝
准研究員 稲倉恒夫
学振研究員 林真明
大学院生 6名

【1】不安定核の構造

(1) ハロー核の3体模型による応答関数

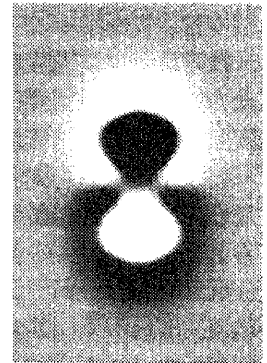
(矢花、中務、伊藤(理研))

ハロー核の特徴の一つに、数居エネルギー近傍で強いE1遷移強度を持つことが挙げられる。この強度関数は、ハロー核が2体または3体に分解するクーロン分解反応を用いて詳細に調べられている。最近、東工大のグループにより、2中性子ハロー核として有名な ${}^{11}\text{Li}$ 核に対して分解した2中性子の相対運動量分布やエネルギー分布などが精密に測定された。これらは、不安定核における中性子間の相関を調べる重要なデータとして注目されている。我々は、時間依存形式を用いて、分解過程に対するE1強度分布の解析を進めている。 ${}^{11}\text{Li}$ 核を3体模型で表現し、吸収ポテンシャルを利用してE1強度、分解2中性子のエネルギー分布、運動量分布などを計算した。芯核と中性子の相互作用はスピン軌道力を含む標準的なものを用い、2中性子間には状態依存性を適切に取り入れた相互作用を用いた。その結果、芯核と中性子間に通常の中心力ポテンシャルを用いると、実験で測定されている大きなE1強度は得られないことが分かった。現在、パリティに依存したポテンシャルの導入を用いた記述や、芯核と中性子間のエネルギー分布に対する分析などを進めている。

(2) 時間依存密度汎関数理論による電気双極子応答関数計算

(中務、矢花、江幡)

時間依存密度汎関数理論に基づく線形応答計算を、実空間・実時間形式で実行した。特に、ごく最近、低エネルギーのピグミー共鳴と呼ばれる状態が実験で観測された中性子過剰核である ${}^{26}\text{Ne}$ について解析を行い、観測結果と一致する励起エネルギー8 MeV付近にピークを確認した。基底状態はプロレート型に変形しているが、偏極の異なる $K=0$ と1の双方の強度においてピーク構造を示している。また本年度は、広い質量領域に対する系統的な計算を視野に入れ、時間依存BCS(Bardeen・Cooper・Schrieffer)理論との融合によって対相関を取り入れる形式への発展を試みた。Kohn-Sham軌道の時間発展に加えて、軌道の占有率の時間発展も同時に計算し、簡略化されたBKN(Bonche・Koonin・Negele)の汎関数を用いたテスト計算を実行した。



(3) ピグミー共鳴の構造

(稲倉、松尾(新潟大))

ピグミー共鳴は主に不安定核の低励起エネルギー領域に観測されている電気双極子モードであり、不安定核に特有な集団運動、すなわち中性子スキンとコアが相対運動するソフトダイポールモードの候補として知られている。しかしその微視的構造ははっきりしておらず、これ迄の理論計算の結果も合致していない。このピグミー共鳴を、現実的な有効核力のSkyrme相互作用を用いた乱雑位相近似(RPA)計算を行なった。巨大共鳴ほどの集団性はないものの“穏やかな”集団性を持った集団励起状態である事が確認された。重ね合わさって表現されている個々の粒子・正孔励起に分解して解析すると、緩く束縛された状態や一粒子共鳴状態が大きく関わっており、空間的に広がったこれらの状態がコヒーレントに寄与して、比較的大きな遷移強度が実現されている事が分かった。これらの集団性は変形核でも表われるが、その効果は弱まる事も明らかにした。

(4) ^{31}Mg の多粒子多空孔状態の研究

(木村)

中性子過剰の $N \sim 20$ 同位体では、中性子魔法数 $N=20$ が成立していない。この“ $N=20$ 魔法数の破れ”現象は、中性子過剰核では、従来の核物理の基礎概念さえも成り立たない場合があることを示す例として非常に有名である。この現象の理解へ向けて、現在この質量領域の原子核の励起スペクトルを網羅的に調べる実験が数多く実行、計画されている。しかしながら、この質量領域の原子核のスペクトルに関する理論的研究は、そのほとんどが基底状態と第一励起状態のみに限られており、理論研究による情報、理解が必要とされている。

本研究では、反対称化分子動力学を用い、“ $N=20$ 魔法数の破れ”現象が起こっていることが知られている ^{31}Mg の基底、励起スペクトルについて議論を行った。その結果、まず基底状態において、系の大きな変形に伴い、 $N=20$ の shell gap が消失し、魔法数が破れていることを確認した。さらに、実験で観測されている、磁気モーメントやスピンパリティを理論的に初めて再現することに成功した。その上で、励起状態のスペクトルについての理論的議論、予言を行った。魔法数の破れに伴い、 $0p_{1h}$ から $3p_{4h}$ までの様々な多粒子多空孔配位を持つ状態が、 1MeV 以下の非常に低い励起エネルギーに数多く現れることを予言した。これら多粒子多空孔状態の持つ構造は、親核 (^{31}Al) からの β 崩壊、および娘核 (^{31}Na) への β 崩壊の強度に強く反映されるため、これらの反応を観測することで、 ^{31}Mg の励起状態の構造を理解することが可能であることを提案した。

【2】原子核集団運動の理論

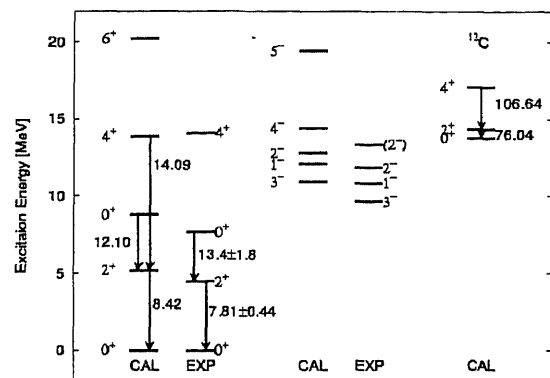
(1) 原子核基底状態・励起スペクトルに対する非経験的配位混合計算

(篠原、中務、矢花、太田(住友化学))

軽い核から重い核まで広範囲の原子核に対して、統一的な記述を与える微視的有効模型として密度汎関数計算が広く用いられているが、さまざまな側面において現在の枠組みの限界も明らかになりつつある。特に最近では、通常の Kohn-Sham 形式を超えた相関を取り入れる必要性が強く意識され、その方向への理論の拡張が模索されている。

我々は、励起スペクトルや基底状態束縛エネルギーなどにおいて重要になる長距離相関を、確率的

な方法を用いて効果的に取り入れる計算手法を開発してきた。多数のスレーター行列式を確率的に生成・選択し、パリティや角運動量について射影法を用い、最後にその選ばれた空間の中で一般化固有値問題を解き、ハミルトニアンを対角化する。本年度は Skyrme 有効相互作用を用いた現実的な計算を実行し、 ^{12}C 、 ^{16}O 、 ^{20}Ne などといった比較的軽い核を対象に、非常に高い精度で基底状態と励起状態の実験データを同時に再現できることを示した。



(2) 超重領域核の構造

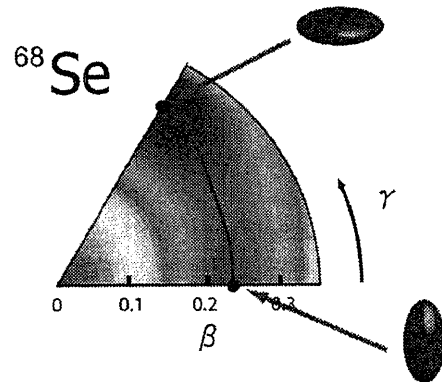
(中務、Khoo (アルゴンヌ国立研究所))

超ウラン領域の重い原子核のガンマ線分光が最近実験的に可能になり、日本の原子力研究所、米国のアルゴンヌ研究所、フィンランドのユバスキラ研究所などで行われており、超重核生成反応においても重要な原子核構造が明らかになりつつある。今回特に中性子数 $N=150$ のアイントーンである Cm, Cf, Fm, No といった原子核の低励起スペクトルが観測されたため、理論計算との比較から超ウラン領域における準粒子スペクトル構造を解析した。現象論的平均場ポテンシャル・パラメータを調整し、2準粒子状態であるアイソマーと準粒子乱雑位相近似 (QRPA) で記述される集団振動状態とを同時に再現することができることを示した。これにより、超重領域においても、標準的な Woods-Saxon ポテンシャルによる核の平均ポテンシャルの記述が非常に有効であることが明らかとなった。

(3) ゲージ固定断熱自己無撞着集団座標法 (ASCC法) による Se, Kr における変形共存現象の記述

(中務、日野原(京都大)、松尾(新潟大)、松柳(京都大))

調和近似を超える多体系の大振幅集団運動を扱える断熱自己無撞着集団座標法(ASCC法)の基礎方程式に存在するゲージ不変性を明らかにし、ゲージ固定によって数値計算の不安定性を除去することに成功した。これを質量 $A=60-80$ 領域の陽子過剰核に見られる変形共存現象に適用し、異なる形状をもつ準安定状態間のトンネル現象の解析を行った。理論から自己無撞着に得られた一次元の集団経路上において慣性能率を計算し、その変形依存性から渦なし流体に近い状態であることが明らかとなった。微視的ボーア模型による集団励起スペクトル計算に向けた量子化の処方を開発中である。



(4) 線形応答の有限振幅計算法の開発

(中務、稲倉、矢花)

時間依存密度汎関数法の線形近似では、基本となる Kohn-Sham 方程式を密度変化について1次のオーダーに近似する。このとき、エネルギー密度汎関数の2階微分(残留相互作用)が必要となり、原子核密度汎関数のような複雑な汎関数では、非常に煩雑な計算を必要とする。このため、これまで残留相互作用を一部無視する計算が一般的であった。今回我々は、Kohn-Sham ハミルトニアン の計算において、密度を構成するブラとケットの対称性を破ることで、この煩雑な残留相互作用の計算を避ける新しい方法(有限振幅法)を提唱した。これにより、通常基底状態を計算する密度汎関数(平均場)計算のプログラムをわずかに拡張するだけで自己無撞着な線形応答計算が可能となる。この方法を簡単な模型計算に適用し、有効性を確かめた。

(5) 原子核の三次元的回転運動の理論

(橋本、堀端(青森大))

有限量子系である原子核は様々な集団運動のモードを持っている。回転運動は、その中でも最も顕著な集団運動の例である。原子核平均場は密度分布と緊密に関係している(nuclear self-consistency)ので、原子核平均場の回転運動は内部核子によるコヒーレントな運動の現れである。原子核の回転運動の研究は主に軸対称変形をした核の主軸まわりの定常回転を対象に行われてきた。クランキング模型に基づくこの考え方は、原子核の回転スペクトルの構造とその背景にある力学について説明する上で、定性的にも定量的にも成功してきた。一方、理論的な立場からは、主軸のまわりの回転運動だけではなく、より一般的な回転運動の存在が期待されている。原子核が軸対称から離れ、三軸非対称変形をすると、“主軸まわりの定常的な回転”という基礎の上に一種のフォノンが生じたような運動モードが起こることが Bohr と Mottelson の教科書でも指摘されている。ウォブリング(wobbling)と呼ばれるこの揺動運動は回転軸が平均場の主軸から離れて才差運動のように動き出すことを意味している。本研究では、ウォブリング運動のような三次元的な回転運動が原子核において生じる力学的機構を微視的に理解することを目的としている。すなわち、原子核の三軸非対称変形と内部核子運動の self-consistency に基づく、核子の運動エネルギー、密度依存ポテンシャルエネルギー、対相関エネルギーの競合という視点からウォブリング運動の物理的な背景を明らかにしようと考えている。計算は、 $P+QQ$ 力に基づいたハートレーフォックポゴリューボフ(HFB)クランキングにより行う。対象はオスミウム $1820s$ 核である。主軸まわりのクランキングを行い、角運動量を増大させると角運動量が $J=20$ を境にして核子の整列現象が起こり(回転整列)、基底バンド(g バンド)と回転整列バンド(s バンド)の交差現象が起こる。この交差領域では、核の変形と対相関エネルギーが大きく変化する。この分岐点となる角運動量 $J=20$ の近傍で拘束条件をつけて回転軸を主軸から傾けていく。角運動量 J が 18 付近では g バンド上の状態(g 状態)からつながる状態(g 分枝)は下に凸のエネルギー曲線を描き、主軸まわりの定常回転運動がエネルギー的に最適であることがわかる。一方、 s バンド上の状態(s 状態)からつながる状態は滑らかにエネルギーが下がり約 30 度付近で最小値が存在するエネルギーカーブになることがわかる。角運動量 J が 20 を越えると g 分枝も上に凸のカーブになり、 g 状態は回転軸の傾斜について不安定であることがわかる(既に、最低エネルギー状態は s 状態である)。こうして得られた g 分枝と s 分枝の平均場状態

を利用して、ウォブリング運動モードが存在できるか否かを生成座標法 (GCM) を用いて計算した。それにより、s 分枝上の最小エネルギー状態のまわりの揺動運動が存在する確率が大きいことがわかり、これが tilted axis rotation (TAR) を表していると期待される。一方、g 状態を中心とした g 分枝上の揺動運動の存在も可能であることがわかった。現在、これらのモードの内容を理解するために、上記の3種類のエネルギーの競合を詳しく調べている。

【3】原子核のクラスター構造

(1) ^{22}Ne の分子軌道状態の研究

(木村)

Be 同位体は二つの α クラスターコアの周りを余剰中性子が、あたかもイオンの周りの電子のように運動する”分子軌道構造”を持つことが、近年理論・実験的に明らかにされた。この”分子軌道構造”は、 $N \neq Z$ の原子核に特有の新たな束縛形式、クラスター構造が存在することを示しているが、その実例は、Be 同位体以外にはまだ知られていない。

本研究では、反対称化分子動力学 (AMD) を用いて研究を行い、 ^{22}Ne において分子軌道状態が現れることを予言した。 ^{22}Ne の基底状態は、分子軌道構造を持たないものの、10MeV 程度の励起エネルギー領域に、 $\alpha+160$ クラスター芯の周りを2中性子が運動する、分子軌道構造を持つ回転帯が数多く現れることを示した。実験研究により、ほぼ同じエネルギー領域に180への α 粒子移行反応により強く生成される状態の存在が報告されており、本研究で報告した分子軌道構造に当たる状態であると考えられる。また、より励起した15MeV程度の領域には、余剰中性子が160クラスター芯の周りだけを運動する $\alpha+180$ 分子共鳴状態が現れることも確認した。この状態は、 $\alpha+180$ 弾性散乱によって近年確認された状態に対応すると考えられる。

以上の結果に基づき、 ^{22}Ne においても分子軌道構造が現れるだけでなく、余剰中性子の運動の変化に応じて様々なクラスター構造が現れることを示した。

(2) 中性子過剰F同位体の α クラスター構造の研究

(木村)

^{22}Ne において予言した分子軌道構造は、その近辺の他の同位体においても現れるのか、また余剰中性子数を増やした場合にその構造がどのように変化するかを調べるため、中性子過剰F同位体に現れる α クラスター構造をAMDを用いて系統的に研究した。

まず、 ^{21}F において、余剰中性子の運動に応じて三つの異なる分子軌道構造が現れることを予言した。すなわち、コアのクラスター構造を発達させる働きのある σ 型分子軌道を占有する中性子数(0, 1, 2)に応じて三つの回転帯が表れることを示した。これらの回転帯は ^{22}Ne に現れる分子軌道構造に非常によく似た構造を持つ。また、余剰中性子が4つになる ^{24}F や、さらに中性子数の多いF同位体においても、同様に σ 型分子軌道の占有数に応じて三つの回転帯が現れ、同位体を通して、分子軌道構造が系統的に現れることを予言した。

これら分子軌道状態の励起エネルギーは、余剰中性子数の増加に伴い非常に興味深い性質を示す。 σ 型分子軌道の占有数が0の場合は中性子数の増加に伴い励起エネルギーが徐々に増加するのに対し、 σ 型分子軌道の占有数が1もしくは2の場合には急激に励起エネルギーが減少することを明らかにした。

(3) 0同位体の α クラスター構造の研究

(古立(東京理科大)、木村、土手(KEK)、延與(京都大基研))

160は第一励起状態として $12\text{C}+\alpha$ のクラスター構造を持つことが非常によく知られているが、他の0同位体にどのようなクラスター構造が現れるのかをしらべた。酸素同位体におけるクラスター構造の存在は、いくつかの実験によりその存在が示唆されているものの、理論的研究がほとんどなされておらず、本研究がはじめての理論的研究となった。

理論的手法として、反対称化分子動力学を用い、160, 180, 200の基底状態および、正負パリティの励起状態を数多く求めることで、励起状態に表れるクラスター構造の性質を議論した。まず、160において、よく知られている $\alpha+12\text{C}$ クラスター構造がよく再現されることを確認した後、180, 200で理論的に予想されるクラスター構造の議論を行った。180では、 $14\text{C}+\alpha$ 閾値エネルギーの近傍に $14\text{C}+\alpha$ クラスター構造を持つ正

負パリティの回転帯が現れることを示した。このクラスター構造は α 移行反応実験で報告されている状態に対応すると考えた。一方 200 では二種の異なるクラスター構造を得た。すなわち、 $14C + \alpha$ クラスターコアの周りを二中性子が運動する $14C + \alpha + 2n$ の分子軌道状態が 10MeV 程度の励起エネルギーに現れ、15MeV 程度の励起エネルギー領域には $16C + \alpha$ クラスター構造が現れることを予言した。この結果は、180 から 200 へと中性子を増やすことで、16C の弱束縛性に起因して、多様な新しいクラスター構造が現れることを示しており、中性子過剰核においてクラスター構造が多様化する事を如実に示す好例である。

(4) 40Ca の通常変形、超変形状態の研究

(木村)

40Ca の基底状態は二重閉殻配位を持ち、原子核が殻構造を持つことを明らかに示す、非常によい例である。その一方で、この原子核の励起状態には、二重閉殻配位から 4 粒子が励起した”通常変形回転帯”が比較的低い励起エネルギーに現れることが知られており、その構造は十分に明らかにされていない。また、”通常変形回転帯”の数 MeV 上に 8 粒子が励起した”超変形回転帯”が存在することも、近年明らかにされ、非常に簡明な基底状態の上に、複雑な励起状態が多数存在していることが明らかになった。

本研究では、反対称化分子動力学を用いて 40Ca の励起スペクトルを調べ、40Ca の励起回転帯の構造を明らかにした。まず、”通常変形状態”は原子核で通常見られる軸対称変形ではなく、三軸非対称な変形をしていることを明らかにした。この三軸非対称変形に伴い、 $K=0+$ 回転帯だけでなく、 $K=2+$ 回転帯も同時に現れることを示した。この $K=2+$ 回転帯は、”通常変形回転帯”と同じエネルギー領域に見つかっている $2+$, $3+$, $4+$, ... 状態に対応し、観測された電磁遷移確率も非常によく再現されることがわかった。これらの結果により、観測された”通常変形回転帯”に対し、”三軸非対称な変形を持つ状態である”との理論的理解を得た。さらに、超変形状態も三軸非対称な変形を持ち、超変形状態も $K=0+$ と $2+$ の二つの回転体を持つことを予言した。 $K=0+$ 回転帯が実験的に見出された超変形回転帯に対応する一方で、 $K=2+$ 回転帯は同じエネルギー領域で観測されたいくつかの状態に対応すると考えられる。これら回転帯での電磁遷移確率に関する理論的予言を行っており、将来得られるであろう観測データとの比較が待たれる。

(5) Skyrme Hartree-Fock による軽、中重 $N=Z$ 核でのクラスター構造の探索

(木村)

sd 殻の始めまでの非常に軽い $N=Z$ 原子核においては、基底および励起状態においてクラスター構造が非常に重要な役割を果たすことはよく知られた事実であるが、それよりも重い $N=Z$ 核においてクラスター構造が果たす役割を網羅的に調べた研究は十分になされていない。また、こうしたクラスター構造の研究にはクラスターモデルが理論的手法として用いられることが多く、クラスター構造が、平均場モデルのような他の理論的枠組みでどのように記述されるのかも十分に調べられたとはいえない。

本研究では、原子核理論の分野での標準的な平均場モデルである Skyrme Hartree-Fock 模型(SHF)を用い、 $A \sim 40$ 程度までの $N=Z$ 原子核を調べ、そのクラスター構造の有無について議論を行った。8Be では、SHF でも非常に発達した 2α クラスター構造が得られ、クラスターモデルで求めた 8Be の波動関数とほぼ 100%一致した。一方で、12C では、同じ SHF でも用いる密度汎関数に依存して構造が大きく異なることが明らかになった。クラスターモデルでもとめた波動関数と 50%近く一致する汎関数もある一方、まったく異なる結果を与える(クラスターモデル波動関数との overlap が零) 汎関数も存在した。さらに、質量をまし、12C よりも重い原子核になると、基底状態にはほとんどクラスター的構造がみられなくなる。その一方、これら重い原子核の励起状態には非常に発達したクラスター構造が表れることも明らかになった。たとえば 32S の超変形状態は $16\alpha + 16\alpha$ のクラスター波動関数と非常に大きな overlap を持ち、クラスターモデルによる 32S の超変形状態の研究結果と矛盾しないことが明らかになった。

(6) 16O コアの周りでの α クラスター凝縮状態の探索

(木村)

近年、12C の励起状態 (0_2^+) は、三つの α 粒子が $0s$ 状態に凝縮したボーズ・アインシュタイン凝縮状態(BEC)であることが明らかにされた。この研究は、原子核が低励起状態においてフェルミ流体の性質を示す一方、励起状態には、(ボーズ粒子である α クラスターの形成により)ボソンガスとして振舞う状態が存在すること

を示した意味で非常に画期的な発見である。3 α のBECが存在する以上、より数の多い4 α 、5 α のBECの存在が期待されるが、粒子数が増加するに伴い、こうしたBEC状態の励起エネルギーは非常に高くなるため、実験的に確認するのが難しくなってしまう。

一方、160、40Ca コアの周りでの何個かの α 粒子のBECを考えれば、コアが供給する一体場により、こうした状態のエネルギーは $n\alpha$ 粒子のBECよりも低くなり、実験的に確認することが可能になると考えられる。

本研究では、160、40Ca コアの周りでの α 粒子のBEC状態を記述するための新しい理論的枠組みを提案するとともに、24Mg(160+2 α)、28Si(160+3 α)における160 コアの周りでの2, 3 α 粒子のBEC状態について予言、議論を行った。新しい理論的枠組みでは、まず160や40Caなどのコアの存在を仮定する。そのコアの周りに複数の α 粒子をランダムに配置することで、基底となる波動関数を多数生成する。こうして得た多数の基底波動関数を重ね合わせ、ハミルトニアンを対角化することで、 α 粒子のBEC状態を記述する。まず、コアが存在しない場合の計算を行い、12Cで確認されているBEC状態がよく再現されることを確認した。その上で、160コアを導入し、その周りでの2, 3 α 粒子のBEC状態の記述を行った。その結果、どちらの場合でも160コアの周りに α 粒子が空間的に広がった配位を持つBEC状態が現れ、そのエネルギーは160+2, 3 α 閾値エネルギー近傍であることを予言した。

【4】強レーザー場と物質の相互作用に対する第一原理計算

(1) 誘電体の光絶縁破壊に対する第一原理シミュレーション

(矢花、中務、乙部(原研)、山極(原研)、岩田(筑波大)、G.F. Bertsch(ワシントン大))

誘電体に強レーザーパルス照射して起こる光絶縁破壊に対して、第一原理計算による取り組みを進めた。光絶縁破壊が起こるメカニズムに関しては、パルス長がピコ秒以上では、電子なだれ機構が、ピコ秒以下では多光子励起が主要なメカニズムであるとされる。我々は、多光子吸収とトンネルイオン化が含まれる時間依存コーン・シャム方程式を用いた記述を行い、 $1 \times 10^{15} \text{W/cm}^2$ の強度で時間発展を解いた解に光絶縁破壊の特徴が現れることを見出した。これは、ミクロな視点から一切経験的なパラメータを用いることなく光絶縁破壊を記述した最初の計算である。

光絶縁破壊が起こる数居強度では、外部から与えた強レーザーパルスが終えたあとも、電子のコヒーレントな振動が起こることが見出された。この振動は、入射パルスの振動数よりやや高い振動数を持つ。光絶縁破壊に伴い、超連続放射と呼ばれる白色光がしばしば見出されるが、計算で得られた電子のコヒーレント振動は、このような光放出と関連するかもしれない。

(2) コヒーレントフォノン生成メカニズムの第一原理計算

(矢花、中務、岩田(原研)、乙部(原研))

結晶に強レーザーパルス照射すると、パルス長がフォノンの周期よりも十分短い場合に、結晶全体にわたりコヒーレントな光学フォノンの振動が現れることが知られている。このコヒーレントフォノンは、パルス光の振動数がバンド間に直接遷移を起こすことが可能な場合も不可能な場合も見出されている。最近の時間分解測定の実進により、光から電子、そしてコヒーレントフォノンへとエネルギーが移行するフェムト秒スケールの様子が明らかになるようになってきた。

我々は、時間依存コーン・シャム方程式の実時間・実空間解法を用いて、このコヒーレントフォノン生成メカニズムに関する分析を行っている。具体的にはダイヤモンドに対し、バンドギャップよりはるかに低い振動数を持つパルスレーザーを用いた計算で、イオンに働く力の計算を行った。その結果、測定で見出されている選択則に一致するような力が現れることが確認された。現在、このコヒーレントフォノンを駆動すると考えられる力の分析を続けている。

(3) 強レーザー場中にある分子のイオン化過程

(川下、矢花、乙部(原研))

強い静電場のもとでのいくつかの有機分子(アセチレン、エチレン、ベンゼン)に対するトンネルイオン化率の分析を行った。自己相互作用補正を取り入れた計算により、強レーザー場のもとでのイオン化率について、第一原理計算による値を初めて示した。有機分子を形成する σ 電子、 π 電子の空間分布を反映したイオン化率が得られ

た。それらの結果は、定性的には分子 ADK 理論を用いて予測されるイオン化率に一致する。

また、時間依存コーン・シャム方程式を時間についてあらわに解くことにより、電子とイオンのダイナミクスを記述する試みを行った。実験的な観測の一つに強レーザー場中で分子が多重イオン化された後に起こるクーロン爆発がある。爆発後のフラグメントが持つ運動エネルギーを分析することによって、クーロン爆発が起きた際のイオン間距離を調べることができる。時間依存コーン・シャム方程式の計算結果は、10fs 程度のパルス長でクーロン爆発に伴う運動エネルギーが約半分となることと定性的に一致した。しかし、実験的には 10fs 以下のパルスの場合、運動エネルギーの抑制は観測されないにも関わらず、我々の計算では 60% 程度の抑制が見出された。このような様相の妥当性について、現在検討を加えている。

(4) 非線形光応答を用いた環状分子・クラスターに流れる定常電流 (信定(分子研)、矢花)

ナノサイズの物質で回路を作成する場合に、光による非線形効果を用いた電流発生の試みが検討されている。我々は、強い円偏光のパルス光を円環状の分子やクラスターに照射することによってその円環内に電流が流れることを、時間依存コーン・シャム方程式を数値的に解くことにより示した。さらに、時間に依存する摂動論を用いて、円環状電流は2次の非線形効果であることを明らかにした。現在、強い円偏光の場合に起こる3次以上の非線形効果に関する分析を検討している。

【5】多電子ダイナミクス計算の計算コード開発と新しい応用

(1) 超並列計算コードの開発 (中務、川下、矢花)

平成17年度からスタートした計算科学研究センターの PACS-CS 計画において、大規模多電子ダイナミクス計算を行うため、時間依存コーン・シャム方程式を実時間・実空間で解く計算コードに対する空間分割を用いた並列化を行った。MPI コードを作成し、並列化効率を詳細に検討し、計算コストに対する通信コストの割合を抑制することを目指した。現時点で、軌道の本数が少ない分子系で広大な空間を取り扱う問題の場合には、計算コストに対する通信コストが数分の一にまで抑制することが可能となっている。これにより、イオン化に伴う電子の放出や、再散乱に伴う高次高調波発生などを記述することが可能になると思われる。

<学位>

1. 理学博士:

篠原聡始

「A New Configuration-Mixing Approach to Correlations Beyond the Mean Field and the Complete Spectroscopy of Nuclei」

2. 理学修士:

川下洋輔

「分子の電子-イオンダイナミクスに対する時間依存密度汎関数法による記述」

<著書>

1. G. F. Bertsch, K. Yabana,

Density functional theory, in Introduction to Computational Methods in Many Body Physics, pp.123-169, Eds. M. Bonitz and D. Semkat, Rinton press Inc. (2006).

2. K. Yabana, T. Otobe, J.-I. Iwata,
First-principles density-functional approach for many-electron dynamics under intense laser fields, Springer Series in Chemical Physics 84, pp.77-94 (2006)

<発表論文>

1. K. Yabana, T. Nakatsukasa, J.-I. Iwata, and G.F. Bertsch,
Real-time, real-space implementation of the linear response time-dependent density-functional theory,
Phys. Stat. Sol. (b)243, 1121 (18 pages) (2006)
2. K. Nobusada, K. Yabana,
Photoinduced electric currents in ring-shaped molecules by circularly polarized pulses, Phys. Rev. A75, 032518 (2007)
3. T. Otobe, K. Yabana,
Density functional calculation for tunnel ionization rate of hydrocarbon molecules,
Phys. Rev. A, in press.
4. M. Ito, K. Yabana, T. Nakatsukasa, and M. Ueda
Suppressed Fusion Cross Section for Neutron Halo Nuclei
Phys. Lett. B637 (2006) 53-57.
5. S. Shinohara, H. Ohta, T. Nakatsukasa, and K. Yabana
Configuration mixing calculation for complete low-lying spectra
with the mean-field Hamiltonian
Phys. Rev. C 74 (2006) 054315 (10 pages).
6. N. Hinohara, T. Nakatsukasa, M. Matsuo, and K. Matsuyanagi
Gauge-Invariant Formulation of Adiabatic Self-Consistent Collective Coordinate Method
Prog. Theor. Phys. 117 (2007) 451-478.
7. M. Ito, K. Yabana, T. Nakatsukasa, and M. Ueda
Fusion Reaction of Halo Nuclei: A Real-Time Wave-Packet Method for Three-Body Tunneling Dynamics
Nucl. Phys. A in press.
8. T. Nakatsukasa and K. Yabana
Real-time Skyrme TDHF dynamics of giant resonances
Nucl. Phys. A in press; Preprint: nucl-th/0610078.
9. T. Nakatsukasa, T. Inakura, and K. Yabana
Finite amplitude method for the RPA solution
submitted to Phys. Rev. C; Preprint: nucl-th/0703100.
10. T. Nakatsukasa, K. Yabana, M. Ito, and M. Ueda
Fusion Reaction of Halo Nuclei: A Real-Time Wave-Packet Method for Three-Body Tunneling Dynamics
AIP Conference Proceedings 853 (AIP Press, 2006) pp. 291-296.

- 1 1. T. Nakatsukasa, M. Ito, and K. Yabana
Nuclear dynamics in time-dependent picture
AIP Conference Proceedings 865 (AIP Press, 2006) pp. 114-119.
- 1 2. Y. Hashimoto and T. Horibata,
Stability of s-band states in the tilting calculation of ^{182}Os ,
Phys. Rev. C74(2006), 017301.
- 1 3. Y. Hashimoto and T. Horibata,
Possible excitations of the wobbling motion in ^{182}Os based on the
three-dimensional cranked HFB,
Proceedings of the fourth international Conference on information(ed. Lei Li et al.,
1-5 Aug., 2006, University College Cork, Cork, Ireland), 118-121.
- 1 4. Y. Hashimoto and T. Horibata
Wobbling motions in ^{182}Os Expected through the generator coordinate method
based on the three-dimensional cranked HFB,
INFORMATION, Vol.10(2007), 199-207.
- 1 5. Y. Hashimoto and T. Horibata,
Tilted-axis rotation and wobbling motion on 3D-CHFB states
RIKEN Accel. Prog. Rep. 40(2007)
- 1 6. M. Kimura,
Molecular-Orbitals and $\alpha+^{18}\text{O}$ molecular bands of ^{22}Ne
Phys. Rev. C75, 034312 (2007).
- 1 7. M. Kimura and H. Horiuchi
Coexistence of cluster structure and superdeformation in ^{44}Ti
Nucl. Phys. A767, 58 (2006).
- 1 8. J. A. Maruhn, M. Kimura, S. Schramm, P.-G. Reinhard, H. Horiuchi and A. Tohsaki,
 α -cluster structure and exotic states in self-consistent model for light nuclei,
Phys. Rev. C74, 044311 (2006).
- 1 9. M. Kimura,
Intruder states of ^{31}Mg and the coexistence of many particle and many hole states,
Phys. Rev. C75, 041302(R) (2007).
- 2 0. M. Kimura
Many particle and Many hole states in ^{31}Mg
Modern Physics Letters A21, 2461 (2006).
- 2 1. N. Itagaki, M. Kimura, C. Kurokawa, M. Ito and W. von. Oertzen,
 α condensed states with a core nucleus
Phys. Rev. C75, 037303(R) (2007).

- 2 2. M. Kimura, Y. Taniguchi, Y. Kanada-En'yo and H. Horiuchi
Clustering Aspects of sd-shell Nuclei studied by AMD
Journal of Physics 49, 200 (2006).
- 2 3. Y. Kanada-En'yo and M. Kimura,
Cluster aspects in p-shell and sd-shell nuclei,
Int. J. Mod. Phys. E15, 1541 (2006).
- 2 4. Y. Taniguchi, M. Kimura, Y. Kanada-En'yo and H. Horiuchi,
Coexistence of Cluster structure and mean-field type structure in Medium-weight nuclei,
Nucl. Phys. A787, 547 (2007).
- 2 5. N. Furutachi, M. Kimura, Y. Kanada-En'yo, A. Dote and S. Oryu,
Cluster structures in Oxygen isotopes
Submitted to Phys. Rev. C, arXiv:0706.0145 [nucl-th]
- 2 6. Y. Taniguchi, M. Kimura, Y. Kanada-En'yo and H. Horiuchi,
Clustering and Triaxial deformation of ^{40}Ca ,
Submitted to Phys. Rev. C.

<国際会議発表>

1. K. Yabana,
First-principle simulation for electron dynamics in molecules and solids under intense laser field,
Canada-Japan SRO-COAST Symposium on Ultrafast Intense Laser Science 1, 7-8 July 2006, Tokyo, Japan
2. K. Yabana,
Real-time simulation for the electron-ion dynamics in solid induced by laser field, International Workshop on First Principles Calculation of Correlated Electrons, 30 Nov-1 Dec 2006, Tokyo, Japan
3. K. Yabana,
Simulation for electron dynamics in dielectric material under intense laser pulse, The 2nd Canada-Japan SRO-COAST Symposium on Ultrafast Intense Laser Science, 5-9 March 2007, Quebec, Canada
4. K. Yabana,
First-principle simulation of electron dynamics in solid under intense pulse laser,
46th IUVSTA Workshop & 5th International Symposium on Ultrafast Surface Dynamics, 21-25 May 2006, Abashiri, Japan.
5. K. Yabana,
Time-dependent approaches for nuclear reaction and response,
2nd German-Japanese Workshop on Nuclear Structure and Astrophysics, 4-7 Oct. 2006, RIKEN, Japan.

6. K. Yabana, T. Nakatsukasa, J.-I. Iwata, T. Otobe,
Real-time simulation for the electron-ion dynamics in solid induced by laser field, International Conference on Quantum simulator and Design, 3-6 Dec. 2006, Hiroshima, Japan.
7. T. Nakatsukasa
Nuclear dynamics in time-dependent picture
Invited talk at the Sixth China-Japan Joint Nuclear Physics Symposium
Shanghai, China, May, 16 - 20, 2006.
8. T. Nakatsukasa
Time-Dependent Quantum Mechanical Approaches to Nuclear Dynamics
Talk at Opening Workshop on Japan-US Theory Institute for Physics with Exotic Nuclei (JUSTIPEN)
RIKEN, Wako, Japan, July 10-11, 2006.
9. T. Nakatsukasa
Static and Dynamic Approaches to Collective Excitations in Nuclei Far From Stability Line
Invited talk at the international conference on Nuclear Structure '06
Oak Ridge, Tennessee, USA, July 24 - 28, 2006.
10. S. Shinohara, H. Ohta, T. Nakatsukasa, K. Yabana
Nuclear Excitations Described by Randomly-Selected Multiple Slater Determinants
Talk at CISS06 student session
CNS, Wako, Japan, August 24-29, 2006.
11. T. Nakatsukasa
Convergent Configuration-Mixing Calculation for light nuclei with a mean-field Hamiltonian
Talk at 2nd German-Japanese Workshop on Nuclear Structure and Astrophysics
RIKEN, Wako, Japan, October 4-7, 2006.
12. T. Nakatsukasa and K. Yabana
Real-time Skyrme-TDHF dynamics of giant resonances
Talk at the international conference on Collective Motion in Nuclei Under Extreme Conditions
Sankt Goar, Germany, June 20 - 23, 2006.
13. T. Nakatsukasa
Complete Spectroscopy with the Skyrme Functional Beyond Mean Field
Invited talk at the international workshop Joint JUSTIPEN-LACM Meeting
Oak Ridge, Tennessee, USA, March 5-8, 2007.
14. Y. Hashimoto and T. Horibata
Possible excitations of the wobbling motion in ^{186}Os based on the three-dimensional cranked HFB
Information-MFCSIT'06 (1-5 Aug., 2006, University College Cork, Cork, Ireland).
15. T. Inakura, M. Matsuo (Niigata)
Collectivity of low-lying dipole modes in spherical Ni isotopes and deformed Fe nucleus
2nd German-Japanese Workshop on Nuclear Structure and Astrophysics, RIKEN, Oct., 4-7, 2006.

16. T. Inakura, M. Matsuo (Niigata)
Collectivity of pygmy resonance in spherical Ni isotopes and deformed Fe nucleus
International Workshop Joint JUSTIPEN-LACM meeting, Oak Ridge National Laboratory, Mar., 5-8, 2007.
17. M. Kimura,
“Molecular-Orbital and Di-Nuclei states in Ne and F isotopes.
2nd German-Japanese Workshop on Nuclear Structure and Astrophysics, 4-7 Oct. 2006, RIKEN, Japan.
18. M. Kimura,
Many particle and Many hole States in ³¹Mg
Osaka Spring Workshop on Cluster Condensation and Nucleon Correlation in Nuclei,
26-28 Apr. 2006, RCNP, Japan.
19. M. Kimura,
Three Oxygen cluster states in ⁴⁸Cr
Alpha Cluster Condensation in Nuclear Systems,
17-19 Aug, 2006, University of Munich, Munich, Germany.
20. M. Kimura,
Molecular-Orbital and Di-nuclei states in ²²Ne and F isotopes
Japanese-French Workshop on Exotic Femo Systems, 13-16 Mar 2007, GANIL, Caen, France

<国内研究会・学会等>

1. K. Yabana,
Multiphoton vs field ionization of molecules and solids by intense ultrashort pulses, TAGEN
International Symposium on Photoelectric Effects - from atoms to solids, weak vs strong fields,
19 June 2006, Sendai, Japan.
2. 矢花一浩、
高強度場中にある粒子のシミュレーション—原子核理論からのアプローチ、
日本物理学会シンポジウム、2006年9月、松山
3. 矢花一浩
有限量子系ダイナミクスへの時間依存アプローチ
原子核物理研究会「離合集散」、京大会館、2006年4月29日
4. 矢花一浩
多電子ダイナミクスに対する量子シミュレータ開発
特定領域研究「次世代量子シミュレータ・量子デザイン手法の開発」平成18年度顔合わせ会議、東京流通センター、2006年6月10日
5. 矢花一浩
多電子ダイナミクスに対する量子シミュレータ開発
特定領域研究「次世代量子シミュレータ・量子デザイン手法の開発」平成18年度成果報告会、大阪科学技術センター、2007年3月23-24日

6. 矢花一浩
有限量子多体系の量子ダイナミクス計算による研究
第5回スーパーコンピュータワークショップ、筑波大学、2006年8月30日
7. 矢花一浩
Convergent configuration mixing calculation with mean-field Hamiltonian
ミニワークショップ「原子核平均場模型の現代的展開」、会津大学、2006年10月20-21日
8. 矢花一浩
核反応と計算科学—3体核反応から多粒子系反応へ—
筑波大研究会:核反応データ解析の歩み、筑波大学加速器センター、2006年11月24日
9. 矢花一浩
TDDFTに基づく研究の現状(筑波大グループ)
TDDFT micro workshop、東大物性研、2007年1月12日
10. 矢花一浩
平均場ハミルトニアンから出発したクラスター状態の記述
核子多体系におけるクラスター現象—クラスター国際会議に向けて—、大阪大学核物理研究センター、2007年2月14-16日
11. 中務孝、矢花一浩
中性子過剰核における巨大共鳴の実時間ダイナミクス
日本物理学会秋季大会、奈良女子大学、2006年9月20-23日
12. 篠原聡始、太田寛史、中務孝、矢花一浩
乱雑な多Slater行列式の重ね合わせによる軽い核の励起構造—Skyrme力を用いた計算—
日本物理学会秋季大会、奈良女子大学、2006年9月20-23日
13. 日野原伸生、中務孝、松尾正之、松柳研一
Quadrupole pairing contribution to collective mass in shape coexisting nuclei around 68Se
日本物理学会秋季大会、奈良女子大学、2006年9月20-23日
14. 篠原聡始、太田寛史、中務孝、矢花一浩
乱雑な多Slater行列式の重ね合わせによる軽い核の励起構造—Skyrme力を用いた計算—
KEK 研究会「現代の原子核物理—多様化し進化する原子核画像—」KEK、2006年8月1-3日
15. 中務孝
超変形状態における八重極相関
RIBF ミニワークショップ「RIBFにおける γ 分光実験II」、理研、2006年10月16日
16. 中務孝
Variations Before and After Projection with the Skyrme Interaction
RIBF ミニワークショップ「gamma deformation in nuclei」、理研、2006年12月11日
17. 中務孝
Skyrme力を用いた配位混合計算

基礎研究会「原子核クラスター物理の現状と展望」、京大基研、2006年12月18-23日

18. 中務孝

光分子反応の実時間シミュレーション

宇宙空間原子分子過程研究会「形を有する量子多体系の立体衝突」、JAXA、2007年3月1日

19. 中務孝、稲倉恒法、矢花一浩

HF計算プログラムによるRPA計算

日本物理学会春季大会、首都大学東京、2007年3月25-28日

20. 篠原聡始、太田寛史、中務孝、矢花一浩

Skyrme相互作用を用いた配位混合計算による低励起状態の収束解

日本物理学会春季大会、首都大学東京、2007年3月25-28日

21. 日野原伸生、中務孝、松尾正之、松柳研一

68Se付近の変形共存核における大振幅集団運動の微視的記述

日本物理学会春季大会、首都大学東京、2007年3月25-28日

22. 稲倉恒法

中性子過剰核におけるピグミー共鳴の集団性について

KEK研究会「現代の原子核物理 -多様化し進化する原子核画像-」KEK、2006年8月1-3日

23. 稲倉恒法

Skyrme相互作用を用いたRPA計算の自己無撞着性について

日本物理学会 2006年秋季大会、奈良女子大学、2006年9月22日

24. 川下洋輔、中務孝、矢花一浩

イオンの運動を考慮した時間依存密度汎関数法による光分子反応の第一原理計算

日本物理学会 2007年春季大会、鹿児島大学、2007年3月18-21日

25. 木村真明

sd-シェル核における超変形とクラスター構造

日本物理学会秋季大会シンポジウム、奈良女子大学、2006年9月20-23日

26. 木村真明

F, Ne 同位体における分子軌道構造

日本物理学会秋季大会、奈良女子大学、2006年9月20-23日

27. 谷口億宇、木村真明、延與佳子、堀内昶

^{40}Ca に於けるクラスター構造と平均場構造の共存

日本物理学会秋季大会、奈良女子大学、2006年9月20-23日

28. 谷口億宇、木村真明、延與佳子、堀内昶

中質量核におけるクラスター構造と平均場構造の共存

日本物理学会春季大会、首都大学東京、2007年3月25-28日

29. 古立直也、木村真明

拡張したAMD波動関数を用いたHe同位体の構造研究

日本物理学会春季大会、首都大学東京、2007年3月25-28日

30. 木村真明

Island of Inversion における多粒子多空孔状態の系統的研究
日本物理学会春季大会、首都大学東京、2007年3月25-28日

31. 木村真明

Ne,F 同位体における分子軌道構造
現代の原子核物理—多様化し進化する原子核の描像—、KEK、2006年8月1-3日

32. 木村真明

Ne,F 同位体における分子軌道構造と分子構造
核子多体系におけるクラスター現象—クラスター国際会議に向けて—、大阪大学核物理研究センター、2007年2月14-16日

33. 木村真明

中重核における多粒子多空孔状態の AMD による研究
基研研究会「原子核クラスター物理の現状と展望」、京大基研、2006年12月18-23日

<非常勤講師・セミナー等>

1. 矢花一浩

強レーザー場中で起こる多電子ダイナミクスの量子シミュレーション
放射光セミナー、KEK、2006年7月28日

2. 木村真明

Island of Inversion における多粒子多空孔状態の系統的研究
大阪大学、2006年11月14日

3. M. Kimura

Molecular-Orbital and Di-Nuclei states in Ne and F isotopes.
University of Birmingham, 12, Mar. 2007., Birmingham, England.

4. M. Kimura

Molecular-Orbital and Di-Nuclei states in Ne and F isotopes.
University of Frankfurt, 20, Mar, 2007., Frankfurt, Germany.