

II-2 量子多体分野原子核理論分野

1. メンバ

教授 矢花一浩

講師 橋本幸男

2. 概要

TDDFT(時間依存密度汎関数理論)によるフェルミオン多粒子系の量子ダイナミクスに関する研究を進めた。基礎方程式である時間依存コーン・シャム方程式に対する実時間・実空間計算法を発展させ、強い相互作用により束縛した物質である原子核、クーロン力で束縛した電子多体系である分子や固体など様々なフェルミ粒子多体系に対して、光と物質の相互作用に対する第一原理計算を行った。

3. 研究成果

【1】原子核集団運動の理論、不安定核の構造

(1)BCS 形式による時間依存密度汎関数理論の拡張

(江幡、中務(理研)、稲倉、橋本、矢花)

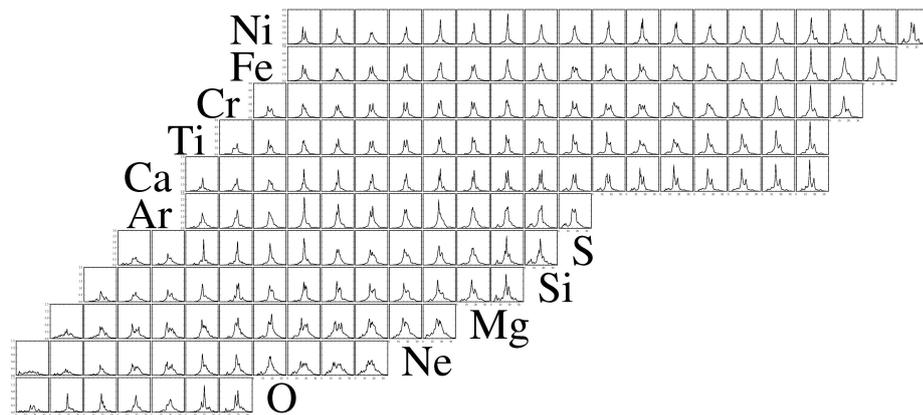
原子核を系統的に計算する為には、対相関と変形の効果を取り入れる事が重要である。我々は超伝導の理論としてよく知られたBCS(Bardeen-Cooper-Schrieffer)理論を時間依存の方法へ拡張し、三次元座標空間のメッシュ表示を用いた実時間発展のプログラム開発を行なった。重い原子核に重要な核子超流動性を取り入れた記述を可能にし、線形応答の実時間計算や重イオン反応計算などに利用する事を目的とする。昨年度には簡単なエネルギー汎関数によるテスト計算を実行したが、今年度は現実的なSkyrme有効相互作用を導入し、そのプログラムがほぼ完成した。Z=10~20の安定核のアイソベクター型双極子の強度分布関数をそのテストとして計算し、対相関の効果などを確かめた。現在はより重い核種の計算を可能とし、本格的な系統的計算への準備を行なっている。

(2)時間依存密度汎関数理論による原子核の応答関数の系統的計算

(稲倉、中務(理研)、矢花)

安定核、不安定核を分け隔てる事なく広範囲に亘って原子核の光核反応の断面積を求める系統的計算を質量数100領域まで進めた。光核反応は、元素組成が起きていると考えられている超新星爆発のr課程に深く関係しており、また放射性廃棄物をクリーンな核に効果的に変換するのに重要な役割を果たす物理量である。微視的な観点から見ると、光核反応は電気双極子モードと呼ばれる、最も単純な集団励起モードで表現される。最も単純な集団励起モードなので、このモードから多くの原子核の性質が引き出せるのだが、実験で観測されているのは安定核の一部だけであり、不安定核では皆無である。このモードを系統的に計算する事で、今後の実験の指針を与えるだけでなく、まだよく分かっていない核力の解明にフィードバックを提供する事も、この計算の目的である。これまでの計算で、幾つかの興味深い結果が得られた。以下にその幾つかを列挙す

る。不安定核では、巨大共鳴のピークエネルギーが 安定核の実験から得られた半経験則からずれ、そのズレには特定の一粒子軌道が関係している事が分かった。また、原子核が変形すると振動方向が長軸方向と短軸方向の二つに分かれるのだが、それぞれの巨大共鳴のピークエネルギーの差が、基底状態の変形度と深く関係している。これは過去に簡単なモデルで、示されていた事であるが、微視的な理論計算で、この事を確認した。現在、この系統的計算を実行している計算コードに、超流動性(対相関)の効果を取り入れるべく、計算コードを拡張している。



(3)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。

今年度は特にオスミウム ^{182}Os の傾斜角回転 (tilted axis rotation; TAR) と呼ばれるモードを中心に一粒子構造を調べた。角運動量を $J=12$ から $J=30$ までの範囲で TAR モードの系統性を確認し、P.M.Walker らの実験で得られた K 量子数が 8 のバンドに相当するモードであると期待される。この TAR モードは、主軸回転運動を仮定した計算では出てこないモードであり、主軸 (x 軸) まわりの回転運動に対応するイラスト線に対して、新しいタイプのイラスト線になっている。

一粒子構造では、我々の現在のモデルでは陽子の負パリティに属する準粒子が主として TAR モードに寄与

していると考えられるが、P.M.Walker らのモデルでは主たる寄与は中性子側から来ていることになる。この相違点は、モデルの refinement を今後行う中で明らかにしていく。一方、対称軸(z軸)まわりの励起モードである歳差運動では、TAR モードと異なり、中性子側の準粒子が支配的な寄与をすることになる。今後、チルト角に対する一連の内部構造の変化をまとめていく。

(4)Gogny 力を用いた時間依存 HFB コードの開発

(橋本、笹倉)

我々は、Gogny 力を用いた時間依存HFB(TDHFB)方程式を微小振幅の場合に解くことにより、QRPAに相当する計算を行うコードを開発している。目的は、Skyrme 力+ゼロレンジ対相関の計算と比較しつつ軽い不安定核から始めて不安定核の系統的な励起状態の情報を蓄積することである。酸素などの球形核の場合から始め、今年度はマグネシウムの同位体について四重極型および双極型振動運動を対象にTDHFB方程式を解いて強度関数などを求めた。Gogny 力を用いた場合、マグネシウムは質量数 $A=34$ より大きい場合はプロレート型に変形するので、今回の計算は変形状態の上でQRPAに相当する。四重極型振動(2+)の場合、低励起エネルギー部分のピークは0.9MeVに現れる。一方、実験値は0.685MeVであり、計算値は若干大きく出ている。他の同位体についても同様な傾向があり、これは基底状態の空間が狭いままであることからきていると思われる。数値的に重くなるクーロン力の適切な取り扱いとともに、基底状態の空間を広げた効率の良いコードに改良を行っている。また、今までは考慮していなかった変形核の回転運動の影響を取り入れられるように枠組みを広げる方向を検討している。

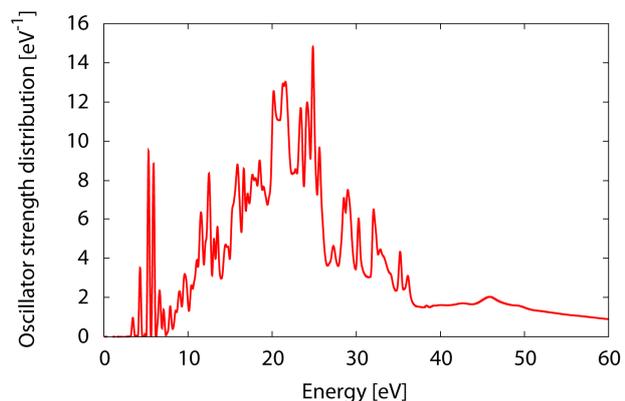
【2】時間依存密度汎関数理論による物質の光応答

(1)フラーレンの光応答計算

(川下、矢花、中務(理研)、野田(分子研)、 信定(分子研))

原子から固体に至る中間相とみなせる物質である C_{60} に対して、時間依存密度汎関数理論による振動子強度計算を行った。超並列計算機を用い、広大な空間領域で応答を計算することにより、可視から軟 X 線領域に至る振動子強度の全体像を明らかにした。その結果、原子の位置を固定した計算では 35eV 程度の高い励起エネルギー領域まで幅の狭い共鳴状態が現れることが明らかになった。

分子振動に関する平均化を考慮するものとして、得られたスペクトルをエネルギーについて平滑化することにより、実験で測定されている振動子強度分布を高い精度で再現することを示した。



(2) 強レーザー場中で起こる分子のクーロン爆発

(川下、矢花、中務(理研))

これまで調べてきた N_2 分子に加え、 H_2S 分子、及びフラーレン C_{60} 分子に対するクーロン爆発を調べた。 H_2S 分子のクーロン爆発過程に対する実験研究では、分解後のイオンの運動量と運動エネルギーの分布から、クーロン爆発メカニズムに関する情報が得られている。この分子に対して、時間依存密度汎関数理論に基づく計算を行った。実験では、ある強度のパルスレーザーを照射した場合の分解の様子を調べているが、計算では同じ強度のパルスレーザーを照射した場合、分子軸とレーザーの偏光方向によって、異なる個数の電子が放出されてしまう。このため、我々の計算では、分子軸と、イオン化の荷数、例えば3個の電子が放出する場合を考え、そのような終状態となるようレーザー強度を固定し、その上でイオンの運動量や運動エネルギーを調べ、実験との比較を行った。その結果、分子軸とイオン化の起こりやすさの関係については、計算と測定結果は良い相関を示した。また、爆発後のイオンの運動エネルギーと分子軸の角度についても計算と測定結果は良い相関を示している。しかし、爆発後の分子軸の角度と、レーザーの偏光方向の相関については、実験と逆の相関を持つことがわかり、今後さらに検討が必要である。

高強度超短パルスレーザーによる C_{60} 分子のクーロン爆発に至るダイナミクスについても、予備的な計算を行った。実験研究から分子振動の四重極モードの重要性が指摘されていたが、計算によれば四重極モードに加え、1重、2重結合の原子間距離が振動するモードも強く励起されることが見出された。

(3) コヒーレントフォノン生成メカニズムの解明

(篠原、川下、岩田、矢花)

結晶と高強度超短パルスレーザーの相互作用で起こる現象の一つに、コヒーレントフォノンがある。これは、光の波長程度の空間領域にわたりイオンが位相をそろえて振動をする現象である。我々は時間依存密度汎関数理論を用い、電子とイオンのダイナミクスを同時に記述し、このコヒーレントフォノン生成メカニズムに関する第一原理計算による記述を試みた。最初の例として、ダイヤモンドをとり計算を行った。実験では、結晶軸とレーザーの偏光方向について、ラマン散乱と同じ選択則が現れることが知られており、計算でも同様の選択則が得られることを確認した。また、計算では、レーザーパルスの照射中に限りイオンに力が働く瞬間誘導ラマン散乱のメカニズムを示しており、これは実験で得られているコヒーレントフォノンの位相の情報と一致している。さらに計算から得られる情報に、加えたレーザーパルスに対するコヒーレントフォノンの振幅の絶対値、レーザーから電子へのエネルギー移行(これは最終的に多くが熱的なフォノンのエネルギーとなると考えられる)と、コヒーレントフォノンへのエネルギー移行の割合などがある。後者に関しては、計算値は1:2000という結果であった。

今後の課題として、今回の計算が対象とした瞬間誘導ラマン散乱のメカニズムに加え、電子の実励起を伴う生成メカニズムを調べること、コヒーレントフォノンの振幅の絶対値が測定されている物質で、計算値を比較することなどを行う予定である。

4. 研究業績

<研究論文>

1. Oscillator strength distribution of C60 in the time-dependent density functional theory
Y. Kawashita, K. Yabana, M. Noda, K. Nobusada, T. Nakatsukasa
J. Mol. Struct. THEOCHEM, in press
2. Time-dependent density-functional theory simulation for electron-ion dynamics in molecules under intense laser pulses
Y. Kawashita, T. Nakatsukasa, K. Yabana
J. Phys. Cond. Matter 21 (6) 064222 (2009/Feb/11)
3. First-principles calculation of the electron dynamics in crystalline SiO₂
T. Otobe, K. Yabana, J.-I. Iwata
J. Phys. Cond. Matter 21 (6) 064224 (2009/Feb/11)
4. Time-dependent description for nuclear reaction dynamics in the continuum
K. Yabana, T. Nakatsukasa, M. Ito
Few-Body Systems 43 (1-4) 247-253 (2008/Dec)
5. First-principles electron dynamics simulation for optical breakdown of dielectrics under and intense laser field
T. Otobe, M. Yamagiwa, J.-I. Iwata, K. Yabana, T. Nakatsukasa, G.F. Bertsch
Phys. Rev. B77 (16) 165104 (2008/Apr)
6. Time-dependent approaches for reaction and response in unstable nuclei
T.Nakatsukasa, K.Yabana, and M.Ito,
Eur. Phys. J. Special Topics 156 (2008) 249-256.
7. TDDFT approach to photoabsorption in even-even nuclei
T.Nakatsukasa, T.Inakura, and K.Yabana,
Int. J. Mod. Phys. A24, 2159-2167 (2009).
8. Stochastic approach to correlation beyond the mean field with the Skyrme interaction
T.Nakatsukasa, S.Shinohara, H.Ohta, and K.Yabana,
Proceedings of the international nuclear physics conference (INPC2007);
Nucl. Phys. A805, 347-349 (2008).
9. Systematic Study of Electric Dipole Excitations with Fully Self-consistent HF plus RPA from Light to Medium-Mass Deformed Nuclei
T. Inakura, T. Nakatsukasa, K. Yabana
proceedings of the Fifth International Conference on Exotic Nuclei and Atom Masses (EANM08), to be published in Eur. Phys. J. A

<学会発表>

(A)国際会議発表

1. TDDFT for fermionic dynamics: Coulomb vs nuclear systems
K.Yabana
JUSTIPEN-EFES-Hokudai-UNEDF meeting, July 21-25, 2008, Onuma, Japan.
2. Dynamics in dielectrics induced by ultrashort laser pulses
K. Yabana
Time-dependent density-functional theory: prospects and applications,
Benasque, Spain, Aug. 31-Sept. 15, 2008.
3. Time-dependent mean-field theory in nuclear and electronic systems
K. Yabana
6th Japan-Italy Symposium on Heavy-Ion Physics, Nov. 11-14, 2008, Tokai, Japan.
4. First-principles simulation for electron-ion dynamics in molecules and dielectrics under an Intense laser pulse
K. Yabana
COAST/CORAL Symposium on Ultrafast Intense Laser Science in Karuizawa, March 12-14, 2009, Karuizawa, Japan.
5. TDDFT simulation for electron-ion dynamics in molecules under intense laser pulse
Y. Kawashita, T. Nakatsukasa, K. Yabana
International Conference on Quantum Simulators and Design 2008, May 31 - June 3, 2008 National Museum of Emerging Science and Innovation (Miraikan), Tokyo
6. Response functions in the continuum of deformed nuclei studied with the time-dependent density-functional calculations
T.Nakatsukasa, T.Inakura, K.Yabana
Talk at Franco-Japanese Symposium "New Paradigms of Nuclear Physics"
(Paris, France, September 29-October 2, 2008).
7. Finite amplitude method and systematic studies of photoresponse in deformed nuclei
T.Nakatsukasa, T.Inakura, K.Yabana
Talk at Arctic FIDIPRO-EFES Workshop: Future Prospects of Nuclear Structure Physics
(Saariselka, Finland, April 20-24, 2009).
8. Finite amplitude method and systematic studies of photoresponse in deformed nuclei
T.Nakatsukasa, T.Inakura, K.Yabana
Talk at International Conference on "Nuclear Structure and Dynamics"
(Dubrovnik, Croatia, May 4-8, 2009).

9. Systematic study of electric dipole responses from Oxygen to Nickel isotopes with self-consistent Skyrme-HF plus RPA
T. Inakura, T. Nakatsukasa, K. Yabana
Hokudai-TORIJJIN-JUSTIPEN-EFES workshop and JUSTIPEN-EFES-Hokudai UNEDF meeting (Onuma Park, Hokkaido, 2008. 7. 21-25)
10. Systematic Study of Electric Dipole Excitations with Fully Self-consistent HF plus RPA from Light to Medium-Mass Deformed Nuclei
T. Inakura, T. Nakatsukasa, K. Yabana
ENAM08, The Fifth International Conference on Exotic Nuclei and Atom Masses (Ryn, Poland, 2008. 9. 7-13)
11. Systematic Study of Electric Dipole Excitations with Fully Self-Consistent Skyrme HF plus RPA from Light to Medium-Mass Deformed Nuclei
T. Inakura, T. Nakatsukasa, K. Yabana
CNS-RIKEN Joint International Symposium on "Frontier of gamma-ray spectroscopy and Perspectives for Nuclear Structure Studies (gamma08)" (RIKEN, 2008. 4. 3-5)
12. Systematic Study of Electric Dipole Excitations with Fully Self-Consistent Skyrme HF+RPA from Light to Medium-Mass Deformed Nuclei
T. Inakura, T. Nakatsukasa, K. Yabana
Nuclear Structure 2008 (MSU, Michigan, USA, 2008. 6. 3-6)
13. Nuclear mean-field dynamics and three-dimensional nuclear rotation
Y. Hashimoto,
The sixth China-Japan Crossover Science Symposium (中国鄭州, Oct. 24-28)
14. GCM description of rotational motions in 182Os (poster),
Y.Hashimoto and T. Horibata,
Nuclear structure 2008 (Jun. 3-6, Michigan state university, USA)
15. Some noticeable aspects of tilted axis rotation in 182Os (poster),
Y. Hashimoto and T. Horibata,
The fifth international conference on exotic nuclei and atomic masses(ENAM)(Sept. 7-13, 2008, Ryn, Poland)

(B)国内研究会・学会等

1. 密度汎関数理論の多彩なフロンティア
矢花一浩
「原子核物理学の展望」研究会、2008年11月26-27日、理研
2. フェムト・アト秒ダイナミクスの計算科学

矢花一浩

第2回極限コヒーレント光科学ワークショップ「極限波長 領域における光科学の新展開」、
2009年3月2-3日、東大物性研

3. TDDFT: 電子の動きを記述する量子シミュレータ

矢花一浩

ナノ統合拠点物性科学 WG 連続研究会「TDDFT: 光応答計算の基礎、応用と展開」、
2009年3月18日キャンパスイノベーションセンター東京

4. 光に起因する電子・イオンダイナミクスに対する実時間シミュレーション法の開発

矢花一浩

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と応用」
平成20年度成果報告会、2009年3月23-25日、大阪大学銀杏会館

5. フェルミ粒子系ダイナミクスの量子シミュレーション

—時間依存密度汎関数理論の最近の発展—

矢花一浩

早稲田大学武田研究室セミナー、2008年10月31日

6. フェルミ粒子系ダイナミクスの量子シミュレーション

矢花一浩

東京理科大学鈴木研究室セミナー、2008年10月8日

7. 時間依存密度汎関数理論による光応答計算

矢花一浩

第4回「計算科学による新たな知の発見・統合・創出」シンポジウム「PACS-CS システムと計算科学」2008
年4月24-25日、筑波大学計算科学研究センター

8. Electron dynamics simulation in dielectrics induced by intense and ultrashort laser pulses

K. Yabana

次世代ナノ情報機能・材料グループ成果発表会、2008年12月10-11日、
東北大学金属材料研究所

9. 時間依存密度汎関数法によるクーロン爆発過程の第一原理シミュレーション

川下洋輔、中務孝、矢花一浩

第2回分子科学討論会2008 福岡、福岡国際会議場 2008.9.24-27

10. 強レーザーパルスによる分子のクーロン爆発過程に対する第一原理シミュレーション

川下洋輔、中務孝、矢花一浩

日本物理学会第64回年次大会 立教大学、立教池袋中学・高校 2009.3.27-30

11. 実時間-実空間法による分子ダイナミクスの第一原理シミュレーション

—大規模並列計算へ向けてのアプローチ—

川下洋輔、中務孝、矢花一浩

次世代スーパーコンピューティングシンポジウム2008 MY PLAZA ホール 2008.9.16-17

12. 時間依存密度汎関数理論によるコヒーレントフォノン生成の記述
篠原康 矢花一浩 川下洋輔 岩田潤一 乙部智仁
日本物理学会第64回年次大会 (立教大学、立教池袋中学・高校 2009.3.27 - 3.30)
13. 時間依存密度汎関数理論によるコヒーレントフォノン生成の記述
篠原康 矢花一浩 川下洋輔 岩田潤一 乙部智仁
第56回応用物理学関係連合講演会 (筑波大学 2009.3.30 - 4.2)
14. Systematic study of electric dipole strength with self-consistent Skyrme-RPA calculation
稲倉恒法, 中務孝, 矢花一浩 (日本物理学会、山形大学、2008.9.20-23)
15. Gogny 力を用いた TDHFB 法による軽い核の微小振幅応答
橋本幸男
千葉大学理学部原子核理論研究室セミナー 2008年7月16日
16. ^{182}Os における傾斜角回転状態の一粒子構造
橋本幸男、堀端孝俊(日本物理学会、山形大学、2008.9.20-23)
17. ^{182}Os における TAR 状態と t バンド
橋本幸男、堀端孝俊(日本物理学会、立教大学、2009.3.27 - 3.30)
18. 軽い核における回転運動を含めた時間依存HFB計算
笹倉啓介、橋本幸男、稲倉恒法、矢花一浩 (日本物理学会、立教大学、2009.3.27 - 3.30)
19. TDHF+"BCS" approach to response functions in deformed nuclei
江幡 修一郎, 中務 孝, 稲倉 恒法, 橋本 幸男, 矢花 一浩
JUSTIPEN Presymposium (北海道大学 ,2008.07.18 - 07.25)
20. TDHF+"BCS" を用いた線形応答計算
江幡 修一郎, 中務 孝, 稲倉 恒法, 橋本 幸男, 矢花 一浩
原子核三者若手夏の学校 (国立オリンピック記念青少年総合センター 2008.08.19 - 08.24)
21. TDHF+"BCS" approach to response functions in deformed nuclei
江幡 修一郎, 中務 孝, 稲倉 恒法, 橋本 幸男, 矢花 一浩
CNS International Summer School (理研 仁科ホール,2008.8.26 - 9.1)
22. Skyrme-TDHF+BCS を用いた線形応答計算]
江幡 修一郎, 中務 孝, 稲倉 恒法, 橋本 幸男, 矢花 一浩
日本物理学会 2008 年秋季大会 (山形大学, 2008.9.20 - 9.23)
23. Skyrme-TDHF+BCS を用いた線形応答計算 II
江幡 修一郎, 中務 孝, 稲倉 恒法, 橋本 幸男, 矢花 一浩
日本物理学会 第 64 回年次大会 (立教大学, 2009.3.27 - 3.30)