

## 2.4. 原子核理論グループ

### 1. メンバ

教授 矢花 一浩

講師 橋本 幸男

研究員 稲倉 恒法

### 2. 概要

当グループは、ともにフェルミ多粒子系として共通する核子多体系としての原子核、及び電子多体系としての物質科学の分野において量子ダイナミクス計算を進展させ、原子核の構造と反応、及び物質と光の相互作用に関する研究を展開している。

### 3. 研究成果

#### 【1】原子核集団運動の理論、不安定核の構造

核子多体系としての原子核物理学の分野で、時間依存密度汎関数理論を中心とする量子多体理論を進展させ、陽子数と中性子数のアンバランスな不安定原子核の構造及び反応に関し、宇宙における元素合成過程を理解するのに必要とされる情報を得ることを視野に入れながら研究を展開している。この研究は、理化学研究所の理論グループ(中務准主任研究員のグループ)との密接な連携のもとに進めている。

(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。昨年度は現実的なSkyrme有効相互作用によるテスト計算を実行したが、今年度はより重い核種の計算を可能とするための準備と、プログラムの完成を確認する為の比較を行った。重い領域への準備としては広範な原子核の超流動性を表す対相関エネルギー汎関数の導入を行った。対相関エネルギー汎関数の導入は成功したが、重い領域を対象とする為には、より精度の良い基底状態を用意する必要がある事が分かった。プログラム完成については変形核のアイソスカラー型四重極の強度分布関数を材料に、対相関についてBCS理論よりも厳密な

HFB(Hartree-Fock-Bogoliubov)理論に基づく計算と比較した。その結果、HFB 理論に基づく計算とかなり近い計算結果を出している事が分かった。また、励起モードに依存して自己無撞着性の重要性が異なる事が分かった。現在は系統的計算への準備と重イオン反応計算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進めた。光核反応は、微視的には最も単純な集団励起モードで表現されるので、これモードから多くの原子核の性質が引き出せる。しかしながら、実験で観測されているのは安定核の一部だけであるので、これを計算する事で原子核の性質の理解が深められると共に、今後の実験の指針を与える事にもなる。更に、この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 課程にも深く関係している。一部の原子核の低励起エネルギー領域に現れるピグミー共鳴状態の有無が、元素組成の成分率に大きな影響を与えるのだが、そのピグミー共鳴状態の発現条件は不明のままである。光核反応の系統的計算を行う事で、ピグミー共鳴状態が発現する機構の解明に一筋の光を与えた。中性子過剰核ではフェルミレベルが浅くなり、緩く束縛された一粒子軌道が現れてくる。特に軌道角運動量が小さな軌道では空間的に広がった波動関数を持つ。この軌道がピグミー共鳴状態の発現に重要な役割を担っている事を示した。

(40) 原子核の三次元的回転運動の理論(橋本、堀端(青森大))

今年度はオスmium 182Os の傾斜角回転(tilted axis rotation; TAR)モードを含む励起状態について生成座標法(GCM)を用いて調べた。平均場近似では、オスmiumは prolate 変形(レモン型)をしているので、主たる回転軸が乗っている“赤道”から見て“北緯”方向と“南緯”方向に対称にクランクハートレーフォックボゴリュポフ(CHFB)解が存在する。量子力学的には、これらの対称な平均場解の間にトンネル効果で結合が生じ、北緯領域の解と南緯領域の解で縮退していたものが分離する可能性が考えられている。実験結果では、P.M.Walkerらの実験で得られたK量子数が8のバンドにおいて、基底状態のバンドとのバンド交差後の“シグネイチャ・スプリッティング”と呼ばれる現象がこのトンネリングのアイデアで説明できると期待している。GCMを用いた計算によって角運動量が $J=22$ から28の領域でエネルギー・スプリッティングが150keVから250keVという値が得られた。GCM計算の精度を上げて、波動関数の構造と一粒子運動の構造変化の関係を詰める必要がある。

(41) 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)方程式を数値的に解く方法を開発・展開している。微小振幅の撃力を与えた波動関数を初期条件にした場合にはこの方法は準粒子RPAになる。今回は、振幅

が微小に限らない変形を原子核に与えたときの原子核の応答を計算した。この計算では、RPAの線形近似では取り込めない大振幅の非線形効果を扱うことになる。注目点は、大振幅振動運動になっていく際の周期と振動中心の変化、および振幅の時間変化の様子である。RPAのような線形領域の状況ではないので、“何を見ていくか”も含めて考えていく必要がある。状況が比較的わかりやすいのがチタン(Ti)52である。ここでは、球形にひとつ、prolate 変形側にひとつというように、大きく2種類の振動中心があり、拘束条件付きHFBによって大きな変形を与えられたチタン52の核は巨大共鳴領域のエネルギーに相当する高い振動数の振動運動をしつつ、その振動中心はゆっくりと緩和して最終的に2種類の振動中心のいずれかに落ち着いていく。我々は波動関数の主要成分を分析して、振動運動の低エネルギー成分が、 $p_{3/2}$  軌道内での対相関力による占有数の変動によることを示した。この例では、粒子状態の占有のされ方は断熱的であるように見える。また、初期条件での対相関の有無によって緩和していく先がいずれの振動中心になるかが決まる。緩和先の振動中心と局所平衡点との関係、また、最終的な振動振幅の決まる理由を今後理解していく。

## 【2】時間依存密度汎関数理論による物質の光応答

光と物質の相互作用、特に高強度・超短パルスレーザーと原子・分子・クラスター・固体の相互作用を、時間依存密度汎関数理論に基づく第一原理計算から解明する研究を進めている。本グループが開発した実空間・実時間計算コードを多方面に発展させており、本年度は特に固体とパルスレーザーの相互作用で生じるコヒーレントフォノンの生成機構に関し大きな進展があり、さらに電磁気学と量子力学を統合したマルチスケールシミュレーションへの展開を意識するに至った。

本研究は、海外の研究者との密接な協力により進めている。米国ワシントン大学の G.F. Bertsch 氏とは経常的に研究協力を行っている。またスペイン・サンセバスチャンの A. Rubio 氏及び同グループのメンバーと、研究協力の進め方について検討中である。

### (1) 分子の振動子強度分布の系統的計算(川下、矢花、岩田、中務(理研))

時間依存密度汎関数理論に基づく振動子強度計算を、多種の分子(2原子分子の例として、 $N_2$ ,  $O_2$ , 3原子分子として  $H_2O$ ,  $CO_2$ 、有機分子の例として  $C_2H_2$ ,  $C_2H_4$ ,  $C_6H_6$ ,  $C_{10}H_8$ 、サイズの大きい分子としてフラレーン)に対して系統的に計算し、本手法が極めて高い精度で振動子強度分布を記述することを示した。計算では実時間法を用い、吸収境界条件を課すことにより、広範な振動数領域の振動子強度分布を高い精度で求めている。さらに、振動子強度の寄与がどの軌道によるものかの分類を、実時間計算により求める方法を開発し、分析を行った。

これらの結果は、Taylor&Francis 社から出版予定の書籍「Charged Particle and Photon Interactions with Matter: Recent Advances, Applications, and Interfaces」の中の1章として発表する予定である。

(2) 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、乙部(原研)、G. F. Bertsch(ワシントン大))

我々が開発した、無限周期系に対する時間依存密度汎関数理論の枠組みを用いて、バルクSiに超短パルスレーザーを照射した際に生じるコヒーレントフォノンの生成メカニズムに関する検討を行った。コヒーレントフォノンの生成メカニズムに関して、従来、2つのメカニズムが提唱されてきた。一つは撃力的なラマン散乱過程であり、パルス光が照射中に起こる電子の一時的な励起に起因して力が発生するというメカニズムである。もう一つは実励起が起こることにより原子の平衡位置がずれることに起因して力が発生するというメカニズムである。我々の計算は、時間依存密度汎関数理論に基づく計算が上記2つのメカニズムを包含することを明確に示すものであった。コヒーレントフォノンの生成に関しては、従来の理論研究は現象論的な記述にとどまっていたが、本研究により第一原理からの記述が可能となった。

本研究における議論の過程で、高強度場により非線形電子励起が強く起こる場合には、パルス光の伝播(マイクロメートルスケール)と単位胞内の電子ダイナミクス(ナノメートルスケール)を切り離して議論することができず、Maxwell方程式と時間依存Kohn-Sham方程式を結合した取扱が不可避であるとの認識が得られた。これは、高強度パルスレーザーと物質の相互作用を定量的に記述し、物質中でのパルスレーザーの伝播を記述する上で、電磁気学と量子力学を統合したマルチスケールシミュレーションが必須であることを意味しており、次世代スパコンに匹敵する超並列計算機を用いてようやく可能になる課題である。このようなマルチスケールシミュレーションにより、光絶縁破壊の記述や、固体表面とパルス光の相互作用へ展開したいと考えている。

## 4. 研究業績

### (1) 研究論文

1. Response Functions in the Continuum of Deformed Nuclei Studied with the Time-Dependent Density-Functional Calculations : Inakura Tsunenori, Nakatsukasa Takashi, Yabana Kazuhiro, *International Journal of Modern Physics E* **18** 2088-2092 (2009).
2. Systematic study of electric dipole excitations with fully self-consistent Skyrme HF plus RPA from light to mediummass nuclei: Tsunenori Inakura, Takashi Nakatsukasa, Kazuhiro Yabana, *European Physical Journal A* **42** (2009) 03.
3. Self-consistent calculation of nuclear photoabsorption cross section: Finite amplitude method with Skyrme functionals in the three-dimensional real space, Tsunenori Inakura, Takashi Nakatsukasa, Kazuhiro Yabana, *Phys. Rev. C* **80** (2009) 044301.

4. Tilted axis rotation and t-band in 182Os with the three-dimensional cranked Hartree-Fock Bogoliubov method,: Y. Hashimoto and T. Horibata, *Eur. Phys. J.* **A42**, 571-575 (2009).
5. A description of t-band in 182Os within the fully microscopic calculation,: Y. Hashimoto and T. Horibata, to appear in *INFORMATION*.
6. Quantum mechanical effects in tilted axis rotations in 182Os: Y. Hashimoto and T. Horibata, to appear in *AIP Conference Proceedings*.
7. First-principles description for coherent phonon generation in diamond: Y. Shinohara, Y. Kawashita, J.-I. Iwata, K. Yabana, T. Otobe and G.F. Bertsch, *J. Phys.: Condens. Matter*, in press.
8. A massively-parallel electronic-structure calculations based on real-space density functional theory: J.-I. Iwata, D. Takahashi, A. Oshiyama, T. Boku, K. Shiraishi, S. Okada, K. Yabana, *J. Comp. Phys.* **229** 2339-2363 (2009).
9. First principle calculation for high harmonic generation in diamond: T. Otobe, K. Yabana, J.-I. Iwata, *J. Comp. Theor. Nanoscience* **6** 2545-2549 (2009).
10. Oscillator strength distribution of C-60 in the time-dependent density functional theory: Y. Kawashita, K. Yabana, M. Noda, K. Nobusada, T. Nakatsukasa, *J. Mol. Struct. THEOCHEM* **914** 130-135 (2009).

## (2)学会発表

### (A)招待講演

1. TDDFT simulation for ultrafast dynamics in molecules and dielectrics: K. Yabana, CECAM-LighTnet workshop on Computational Challenges emerging from Next-Generation Light Sources (DESY, Hamburg, 2009.10.13-15)
2. Time-dependent density functional theory : A comparative study between nuclear and electronic systems: K. Yabana, Arctic FIDIPRO-EFES Workshop: Future Prospects of Nuclear Structure Physics (Saariselka, Finland 2009.4.20-24)
3. Real-time calculation for RPA response and nonlinear dynamics: K. Yabana, Multidisciplinary Workshop on the Random Phase Approximation (Univ. Pierre et Marie Curie, Paris, France, 2010.1.26-29)
4. Systematic calculation of electric dipole strength with Skyrme-HF plus RPA: T. Inakura, T. Nakatsukasa, K. Yabana, 7th Japan-China Joint Nuclear Physics Symposium (Univ. of Tsukuba, 2009. 11. 9-13)

5. Systematic calculation of electric dipole strength with Skyrme-HF plus RPA: T. Inakura, T. Nakatsukasa, K. Yabana, INTERNATIONAL SYMPOSIUM Forefronts of Researches in Exotic Nuclear, Structures ---Niigata2010--- (Niigata, 2010. 3. 1-4 )
6. Systematic calculation of E1 strength with fully self-consistent Skyrme-HF+RPA: T. Inakura, T. Nakatsukasa, K. Yabana, 10th International Symposium on Origin of Matter and Evolution of the Galaxies (OMEG10) (RCNP, 2010. 3. 8-10 )
7. Systematic calculation of electric dipole strength with Skyrme-HF plus RPA: T. Inakura, T. Nakatsukasa, K. Yabana, JUSTIPEN workshop (JIHIR, ORNL, 2010. 3. 15-17)
8. Possible mechanism of the t-band based on the fully microscopic calculation,: Yukio Hashimoto and Takatoshi Horibata, Fifth international conference on information (Kyoto Univ., Kyoto, November 6-9, 2009)
11. Intermediate amplitude collective motion in 52Ti with TDHFB: Y. Hashimoto and K. Sasakura, EFES-LIA workshop on the nuclear energy density functional method (RIKEN, February 26-27, 2010)

(B) 一般講演

1. Linear Response Calculation using Canonical-basis TDHFB with a schematic pairing functional: S. Ebata, T. Nakatsukasa, T. Inakura, Y. Hashimoto, K. Yabana, The 4th LACM-EFES-JUSTIPEN Workshop [ORNL Oak Ridge, Tennessee 2010.03.15 - 03.17]
2. Quantum mechanical effects in tilted axis rotations in 182Os: Y. Hashimoto and T. Horibata, The 7th Japan-China Joint Nuclear Physics Symposium (Univ. of Tsukuba, November 9 - 13, 2009)
3. TDHFB calculation in nuclear system: Y. Hashimoto, Non-equilibrium transport dynamics in finite quantum systems (Ibaraki Univ., December 20-21, 2009)
4. TDDFT Simulation for Electron-Phonon Dynamics in Dielectrics under Ultrashort Laser Pulse: Yasushi Shinohara, Kazuhiro Yabana, Yosuke Kawashita, Jun-ichi Iwata, Tomohito Otobe, The 3rd Theory Meets Industry International Workshop, Nov. 11-13, 2009, Nagoya, Japan
5. Real-time TDDFT simulation for light-induced electron-phonon dynamics in dielectrics: Yasushi Shinohara, Kazuhiro Yabana, Yosuke Kawashita, Jun-ichi Iwata, Tomohito Otobe, International Symposium of Electronic Structure Calculations -Theory, Correlated and Large Scale Systems and Numerical Methods-』, Dec. 7-9, 2009, Tokyo, Japan

6. Simulation for Fermionic Dynamics: Nuclear vs Coulombic systems: K. Yabana, YITP International Workshop on Development of Nuclear Structure Models from the Viewpoint of Nuclear Force (Kyoto Univ. 2009.5.20-22)
7. Skyrme-HF+RPA を用いた E1 励起モードの系統的計算, 稲倉恒法, 中務孝, 矢花一浩, 原子核の E1, M1 励起モードの探究と今後の戦略 (RCNP, 2009. 8. 6-7)
8. 208Pb や 132Sn などに現れる pygmy dipole resonance の性質について: 稲倉恒法, 日本物理学会 2010 年秋季大会 (山形大学, 2010.3.20-23)
9. 中重核に対する Skyrme-TDHF+"BCS" のアプローチ: 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 65 回年次大会 [岡山大学, 2010.03.20 - 03.23]
10. Linear Response Calculation using Canonical-basis TDHFB with a schematic pairing functional, 江幡 修一郎, 中務 孝, 稲倉 恒法, 橋本 幸男, 矢花 一浩 ICHOR-EFES International Symposium on New Facet of Spin-Isospin Responses (SIR2010) [東京大学 小柴ホール 2010.02.18 - 02.21]
11. Skyrme-TDHF+"BCS" を用いた線形応答計算～系統的計算を求めて～, 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 [パノラマランド木島平 2009.08.24 - 08.29]
12. 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, 原子核・ハドロン物理学 [KEK 3 号館, 2009.08.11 - 08.13]
13. Linear Response Calculation using Canonical-basis TDHFB with a schematic pairing functional, 江幡 修一郎, 中務 孝, 稲倉 恒法, 橋本 幸男, 矢花 一浩 The 10th. International Symposium on Origin of Matter and Evolution of the Galaxies (OMEG10), [RCNP 銀杏会館 2010.03.08 - 03.10]
14. Linear Response Calculation using Canonical-basis TDHFB with a schematic pairing functional, 江幡 修一郎, 中務 孝, 稲倉 恒法, 橋本 幸男, 矢花 一, INTERNATIONAL SYMPOSIUM Frontiers of Researches in Exotic Nuclear Structures (Niigata2010), [新潟十日町 ホテル BELNATIO 2010.03.01 - 03.04]
15. HFB + GCM による 182Os の t バンドの構造: 橋本幸男, 堀端孝俊, 日本物理学会第65回年会、[岡山大学, 2010.03.20 - 03.23]
16. 軸対称調和振動子基底を用いた TDHFB による軽い核の線形応答, 三藤竜也, 橋本幸男, 矢花一浩, 日本物理学会第65回年会、[岡山大学, 2010.03.20 - 03.23]
17. 第一原理電子ダイナミクス計算によるコヒーレントフォノン生成機構の解明, 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 65 回年次大会、[岡山大学, 2010.03.20 - 03.23]

18. 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機構の解明, 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 2009 年秋季大会、2009 年 9 月 25 日-28 日、熊本大学
19. 第一原理計算によるコヒーレントフォノン生成機構の解明, 篠原康、矢花一浩、川下洋輔、岩田潤一、乙部智仁, 第 70 回応用物理学会学術講演会 2009 年 9 月 8 日-11 日、富山大学
20. 実時間・実空間法による固体ダイナミクスの第一原理シミュレーション, 篠原康、矢花一浩、川下洋輔、岩田潤一、乙部智仁, 次世代スーパーコンピューティングシンポジウム 2009、2009 年 10 月 7 日-8 日、東京
21. 多核子移行反応の微視的定式化への可能性, 矢花一浩, 日本物理学会第 65 回年次大会シンポジウム「速い中性子捕獲、元素組成第3ピーク周辺の核物理、宇宙物理」、[岡山大学, 2010.03.20 - 03.22
22. 光と物質の相互作用に対する実時間第一原理計算, 矢花一浩, 東京大学物性研究所短期研究会「計算物理学」、2009 年 12 月 10-11 日

(C) その他

1. (Seminar) Description of coherent phonon generation based on first-principle calculation] Yasushi Shinohara, Kazuhiro Yabana, Yosuke Kawashita, Jun-ichi Iwata, Tomohito Otake, George F. Bertsch., 2010 年 1 月 16 日、電気通信大学小林研究室
2. (Seminar) Real-time TDDFT for linear and nonlinear optical responses, K. Yabana, Center for Theoretical Quantum Dynamics, Univ. Washington, 2009.7.17
3. 大学院集中講義, 九州大学理学研究科大学院集中講義、矢花一浩、2009 年 10 月 28-30 日
4. 一般向け講演会「ミクロな物質世界の運動ー波動力学のコンピューターシミュレーションー」矢花一浩、Public Lectures “Computer simulations of nuclear and electronic many-body systems” 新潟大学、2010 年 3 月 5 日