

II-2. 原子核分野

1. メンバ

教授 矢花 一浩

講師 橋本 幸男

2. 概要

当グループは、量子多粒子系のダイナミクスに対する計算科学的アプローチを主要な方法論として、原子核物理から物質科学、光科学にわたる広範な分野に対し研究を展開している。

原子核物理学では、陽子と中性子の多体系として捉えた原子核、特に陽子数と中性子数が異なる不安定原子核に対し、量子ダイナミクスの観点から研究を進めている。不安定核の構造と反応は、星の構造や元素の起源を巡り宇宙物理学に密接に関連しており、中長期的に宇宙分野と連携した活動に発展させたいと考えている。

本グループではまた、原子核物理学と共通する方法論を用い、物質科学分野において電子ダイナミクスの量子シミュレーション法に基づく研究を展開している。特に、時間依存密度汎関数理論を用いたシミュレーションに関して多くの経験と実績を有しており、本年はコヒーレントフォノンの生成機構に関する研究及び磁気円二色性に関する研究で成果を挙げるとともに、新たな取り組みとして、高強度パルス光と物質の相互作用を第一原理計算的に記述し非線形電子励起を伴う光伝播を記述することができる、マクスウェル-TDDFT マルチスケール・シミュレーション法の開発に着手した。

3. 研究成果

【1】時間依存密度汎関数理論による物質中の電子ダイナミクス計算

(1) 強パルス光の物質中伝播を記述するマルチスケール・シミュレータの開発 (矢花、杉山、篠原、乙部 (原研)、G.F. Bertsch (Univ. Washington))

固体中の光の伝播や、表面での反射などの現象は、通常は屈折率を用いて記述される。しかし、今日の光科学のフロンティアで用いられる高強度・超短パルスレーザーでは、強い光電場に起因する非線形な電子応答がもたらす様々な現象が問題となっている。このような高強度パルス光と物質の相互作用を理解するためには、従来の電磁気学の枠組みを超えたアプローチが必要とされる。

原理的には、高強度パルス光のもたらす電子ダイナミクスは時間依存シュレディンガー方程式で記述され、光電磁場は、電子の密度やカレントをソースとして持つマクスウェル方程式で記述されるため、両者を結合した方程式を解けばよい。しかし、可視光領域の光の波長が μm 程度であるのに対し、光電場が誘起する電子ダイナミクスの空間スケールは、原子サイズと同程度の nm 程度であり、異なる空間スケールの問題を扱うためマルチスケール・シミュレーション法を開発

することが必要とされる。

我々は、電子ダイナミクスに対して時間依存密度汎関数理論を用い、電子の運動を記述する時間依存コーン・シャム方程式と光電磁場の伝播を記述するマクスウェル方程式に対して、どのようにすればマルチスケール・シミュレーションが可能となるかを検討した。そして、得られた方程式系に対して摂動論を用いると、誘電率を介してマクスウェル方程式と時間依存コーン・シャム方程式が分離されることを確認した。さらに、マルチスケール・シミュレーション法のプログラムを作成し、予備的な計算を遂行し、結晶表面に電子・ホールプラズマが生成されることを確認した。

(2) 磁気円二色性の実時間計算 (李、矢花、G.F. Bertsch (Univ. Washington))

静磁場中に置かれた原子や分子の右円偏光と左円偏光に対する光吸収の差は、磁気円二色性と呼ばれる。この量に対する計算は古くから行われているが、摂動論で扱う場合は光電場と静磁場に対する2次の量になることから、複雑な計算が必要とされてきた。最近、応答関数理論を用いた枠組みなどにより、様々な量子化学手法に基づく計算が盛んに行われている。

我々はこの磁気円二色性に対し、時間依存コーン・シャム方程式の実時間解法を用いた新たなアプローチを開発した。それは、有限の強度の静磁場中で双極場による摂動を加え、非線形な時間依存コーン・シャム方程式を非線形のまま解くものである。静磁場と双極場の強度を十分弱くとることにより、2次の微小量として磁気円二色性の強度関数を得ることが可能になる。

この枠組みを、いくつかの小さな有機分子とC60分子に対して適用した。我々の枠組みではノルム保存擬ポテンシャルを用いるが、そのために和則が大きく破れることが見出された。また、実験値との比較では、計算結果は定性的には磁気円二色性の符号などを再現するものの、強度の絶対値に関しては数倍の差異が見出される場合が多いことが見出された。このことから、時間依存密度汎関数理論は、原子や分子の振動子強度に対して定量的に信頼できる結果を与えてきたが、磁気円二色性に対しては、得られた結果の信頼度に関し、慎重に判断することが必要であることが分かった。

(3) コヒーレントフォノンの生成機構に対する時間依存密度汎関数理論による研究 (篠原、矢花、乙部 (原研)、G.F. Bertsch (Univ. Washington))

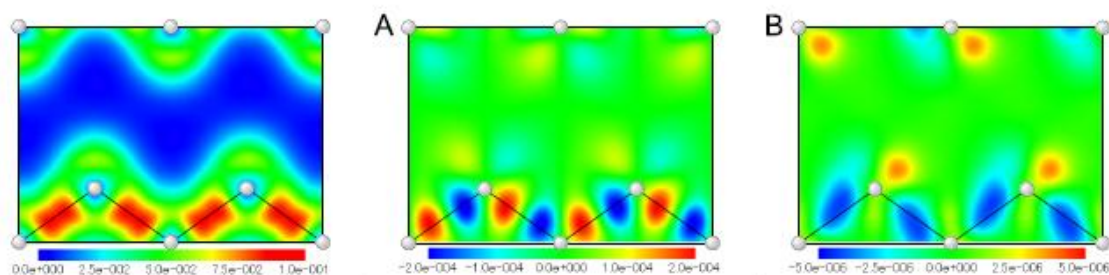
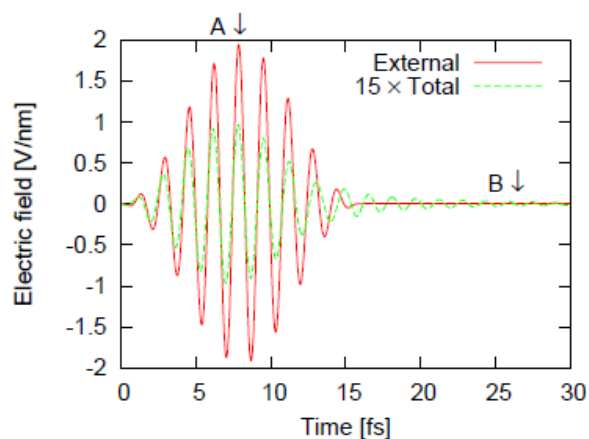
固体中の光学フォノンの振動数に比べてパルス長の短い超短パルスレーザーを照射した際に起こる現象の一つにコヒーレントフォノンがある。これまでその生成メカニズムに関し現象論に基づいて調べられてきており、ISRS (Impulsive Stimulated Raman Scattering) と DECP (Direct Excitation of Coherent Phonon) と呼ばれる2つのメカニズムの存在が議論されてきた。

我々は、時間依存密度汎関数理論に基づき、第一原理からコヒーレントフォノンの生成起源を解明することを試みた。まず、半導体であるSiを例に、異なる振動数を持つパルス光を照射した

計算結果を調べることで、時間依存密度汎関数理論が ISRS、DECP の 2 つのメカニズムを含むことが明らかになった。直接バンドギャップよりも小さい振動数のパルス光を照射したところ、パルスの照射中のみだけ起こる電子励起により力が働く ISRS 機構によるコヒーレントフォノンの生成が見出された。一方、直接バンドギャップを越える振動数のパルス光を照射した場合は、パルス照射後に実励起が起こり、パルス光が照射した後も継続して力が働く、DECP 機構によるコヒーレントフォノンの生成が見出された。このように、時間依存密度汎関数理論により第一原理からコヒーレントフォノンの記述が可能であることを初めて明らかにした。

コヒーレントフォノンの実験的測定は、Sb 等の半金属物質に対して数多く行われており、その場合にはフォノンのモードに応じて ISRS 型と DECP 型が混在するなど興味深い現象が報告されている。また、同じく半金属である Bi では極めて大きな振幅を持つコヒーレントフォノンが、その振幅の絶対値を含めて測定されている。これらに対する計算が進行中である。

図 1 : Si 結晶にパルス光を照射した場合の計算結果。右は、外部から加えた電場 (赤線) と分極を含めた全電場 (緑線)。下は電子密度を表し、左は基底状態。中央及び右は、右図の時刻 A 及び B における、基底状態からの密度変化 (赤は電子の増加、青は減少) を表す。A では電場による一時的な励起、B では実励起が見られる。



【2】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)

核子多体系である原子核のダイナミクスを微視的に記述する場合、超流動性を考慮した取り扱いが重要になる。超流動性を取り入れた量子ダイナミクス理論として、時間依存 Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB) 理論が知られているが、数値的な取り扱いが極めて難しく、3次元実空間差分法を用いたダイナミクスの記述は未だ成功していない。そこで我々は、正準基底表示を用いることにより、BCS 近似に基づく対相関効果を取り入れた枠組みを開発しており、この

枠組みを正準基底表示時間依存 Hartree-Fock-Bogoliubov 理論(Cb-TDHFB)と呼んでいる。昨年度までは現実的な Skyrme 有効相互作用を用いた軽い原子核に対する計算を行い、先行研究との比較を行った。その結果、より現実的に対相関を扱った HFB 理論に基づく研究と非常に近い結果を与えることが明らかになった。今年度は重い核種(^{172}Yb)における計算を行い、Cb-TDHFB は従来に比べ 1000 倍程度小さい計算コストでほぼ同等の結果を与えることが分かった。また、系統的計算を開始し、軽い核の電気双極子振動(E1)モードに対する結果を蓄積しており、対相関の E1 モードにおける対相関の効果を系統的調べている。

(2) 原子核の三次元的回転運動の理論 (橋本、堀端 (青森大))

原子核の回転運動は、さまざまな原子核集団運動の中でも最も顕著な例である。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り、その背後には、原子核平均場と密度分布が緊密に関係しているという原子核の自己無撞着性 (nuclear self-consistency) がある。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してクラッキング模型に基づいて行われている。一方、理論的な立場からは、より一般的な回転運動の存在が期待されている。たとえば、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。この運動は、ウォブリング(wobbling)と呼ばれ、回転軸が平均場の主軸から離れて才差運動のような振る舞いをする。本研究では、ウォブリング運動を含めた三次元的な回転運動が原子核においてどのように生じるかを徹視的に理解することを目的としている。

今年度は昨年度の引き続いてオスミウム ^{182}Os 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、オスミウムは prolate 変形 (レモン型) をしているため、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”方向に対称にクラックハートレーフォックボゴリュボフ (CHF B) 解が存在する。理論的なアイデアは、これらの対称な平均場解の間に量子力学的なトンネル効果のために結合が生じ、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という点である。われわれは、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 計算で得られるスプリッティングの値は約 150keV から 250keV であるが、GCM 波動関数に期待される対称性の精度が十分ではないという問題点がある。そのために、GCM 計算の基礎となる HFB 波動関数の精度を上げ、また、GCM のコードの大幅な見直しを進めている。

(3) Gogny 力を用いた時間依存 HFB コードの開発 (橋本、三藤)

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。一方、非線形効果は振幅の増大とともに重要になってくる。昨年度は、球形のチタン (Ti) 52の原子核について、軸対称変形の範囲内で大振幅振動運動の緩和現象を扱った。今年度は、非軸対称な振動も考慮した場合へと拡張したTDHFB計算を実行した。四重極型の非軸対称性振動運動の場合でも、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球形を振動中心とする大振幅の運動へと落ち着いていく。その運動においては、軸対称運動の場合と同じように、 $p3/2$ 軌道内での対相関力による占有数の変動を見ると、粒子状態の占有のされ方は断熱的であるように見える。同様な計算を、たとえばチタン44においても行い、緩和を伴う大振幅運動の際に、パリティの異なる $f7/2$ 軌道と $d3/2$ 軌道との間でも対相互作用によって粒子の占有状態の変化が起こることがわかった。その過程は断熱的と見える。一方、対相互作用の働かない変形領域においては、ハートレーフォックの局小点がポケットのようになってその近傍の軌道を一定の領域に閉じ込めることも明らかになった。これらの非線形大振幅運動の内容を、モード間結合の効果という視点から理解していくことが今後の方向である。

(4) 多 Slater 行列式の重ね合わせによる軽い原子核の記述 (福岡、船木、矢花、中務 (理研))

非経験的に原子核の性質を理解することは、今日の原子核理論分野における大きな目標となっている。12C 核の基底状態まで生の核力に基づいた記述が可能となっており、励起状態に現れるクラスター状態に対する非経験的な記述が大きな目標となっている。本研究では、核子間相互作用としては、幅広い核種の基底状態や応答関数を平均場模型の範囲で記述する Skyrme 相互作用を用い、乱雑な初期波動関数から虚時間法を用いて多数の Slater 行列式を生成し、それらを重ね合わせることで、与えられたハミルトニアンに対して収束した励起スペクトルの記述を行おうというものである。

12C 核に対する記述を行ったところ、励起スペクトルに関しては概ね満足のいく結果が得られたものの、 $02+$ 状態の半径は従来クラスター模型で記述されたものに比べて小さく、基底状態と大差ない結果となった。このため、本計算に用いている枠組みで、クラスター模型の波動関数を用いた計算を行った。その結果、クラスター模型波動関数では $02+$ 状態に対して大きな半径を持つ結果が得られた。しかし、クラスター模型波動関数と、乱雑な初期波動関数から生成した波動関数の両方を用いて重ね合わせたところ、 $02+$ 状態にクラスター模型波動関数はほとんど混ざらず、小さい半径となる結果が得られた。実験的には、基底状態から $02+$ 状態への遷移行列要素が得られているが、それらはクラスター模型による予測と今回の計算との中間にある。

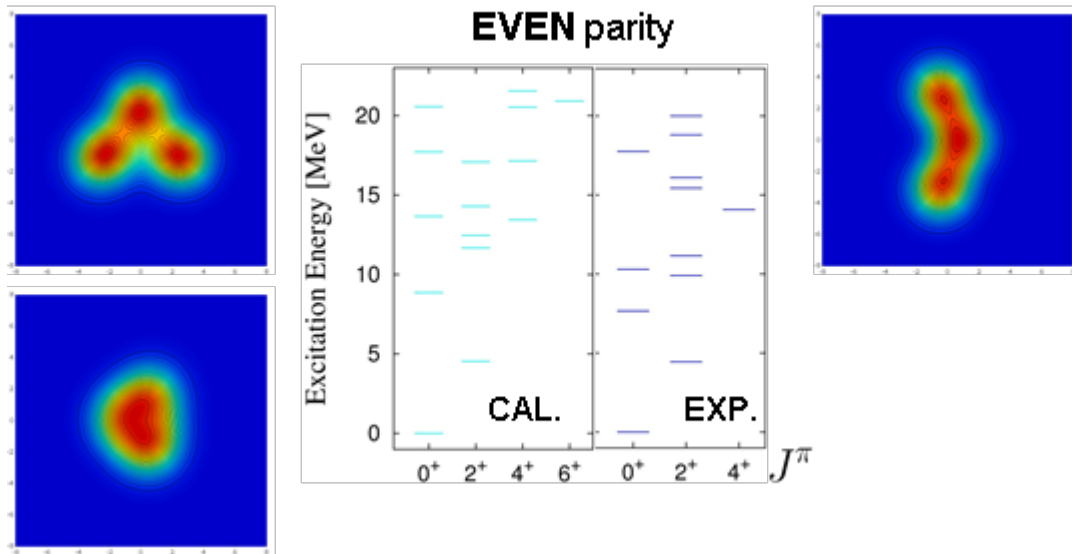


図2：多スレーター行列式の重ね合わせによる ^{12}C 原子核構造の計算。低励起領域のスペクトルが精度よく再現されるとともに、励起構造に現れる様々なクラスター構造が非経験的に記述されている。

4. 研究業績

(1) 研究論文

1. Magnetic Circular Dichroism in Real-time Time-Dependent Density Functional Theory
K.M. Lee, K. Yabana, G.F. Bertsch
J. Chem. Phys. 134, 144106 (2011).
2. Coherent phonon generation in time-dependent density functional theory
Y. Shinohara, K. Yabana, Y. Kawashita, J.-I. Iwata, T. Otobe, G.F. Bertsch
Phys. Rev. B82, 155110 (2010).
3. First-principles Calculation of Coherent Phonon Generation in Diamond
Y. Shinohara, Y. Kawashita, J.-I. Iwata, K. Yabana, T. Otobe, G.F. Bertsch,
J. Phys. Cond. Matter 22, 384212 (2010).
4. 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 (2010).
5. Canonical-basis time-dependent Hartree-Fock-Bogoliubov theory and linear-response calculations
S.Ebata, T.Nakatsukasa, T.Inakura, K.Yoshida, Y.Hashimoto, K.Yabana
Phys. Rev. C 82 (2010), 034306
6. Canonical-basis TDHFB を用いた線形応答計算
江幡 修一郎, 中務 孝, 稲倉 恒法, 吉田 賢市, 橋本 幸男, 矢花 一浩

素粒子論研究 119 No.1 (電子版)(p.154-161), 大振幅集団運動の微視的理論

7. Linear Response Calculation Using Canonical-Basis TDHFB with a schematic pairing functional
S.Ebata, T.Nakatsukasa, T.Inakura, Y.Hashimoto, K.Yabana
Mod. Phys. Lett. A25 (2010), 2001-2002
8. A description of t-band in 182Os within the fully microscopic calculation,
Y. Hashimoto and T. Horibata,
INFORMATION Vol. 13, 569-575(2010).
9. Quantum mechanical effects in tilted axis rotations in 182Os,
Y. Hashimoto and T. Horibata,
AIP Conference Proceedings Vol. 1235, 91-95 (2010).

(2)学会発表

(A)招待講演

1. First-principles theoretical description for many-electron dynamics induced by ultrashort laser pulses
K. Yabana, Symposium at PACIFICHEM 2010, Honolulu, U.S.A., Dec. 15-20, 2010.
2. Dynamical Role of Halo Nucleons in Nuclear Reactions
K. Yabana, Halo 2010 Symposium, Shonan Village Center, Japan, Dec. 6-9, 2010.

(B)その他の学会発表

1. Ab-initio description for laser-induced electron-phonon dynamics in dielectrics
K. Yabana, 7th Int. Symp. on Ultrashort Surface Dynamics, Brijuni Isrand, Croatia, Aug. 22-26, 2010.
2. Systematic study of E1 mode using Canonical-basis TDHFB
S. Ebata, T. Nakatsukasa, T. Inakura, K. Yoshida, Y. Hashimoto, K. Yabana, French-Japanese Symposium on Nuclear Structure Problems, RIKEN, Jan.5-8, 2011.
3. The research of E1 mode using Canonical-basis TDHFB
S. Ebata, T. Nakatsukasa, T. Inakura, K. Yoshida, Y. Hashimoto, K. Yabana, JAPAN-ITALY EFES Workshop on Correlations in Reactions and Continuum, Torino, Sept. 6-8, 2010.
4. Linear Response Calculation using Canonical-basis TDHFB with a schematic pairing functional
S. Ebata, T. Nakatsukasa, T. Inakura, Y. Hashimoto, K. Yabana, Second EMMI-EFES Workshop on Neutron-Rich Nuclei (EENEN10), RIKEN, June 16-18, 2010.
5. Nonlinear collective oscillations of light nuclei in TDHFB with Gogny force
Y. Hashimoto, Second EMMI-EFES Workshop on Neutron-Rich Exotic Nuclei (EENEN 10)
RIKEN, June 16 – 18, 2010.
6. Description of t-band in 182Os with HFB+GCM,
Y.Hashimoto, University of Aizu-JUSTIPEN-EFES symposium “Cutting-Edge Physics of Unstable Nuclei”,

- U. Aizu, Nov. 10-13, 2010.
7. Theoretical investigation for generation of coherent phonon in bulk Si
Y. Shinohara, K. Yabana, Y. Kawashita, J.-I. Iwata, T. Otobe, G. F. Bertsch, 7-th International Symposium on Ultrafast Surface Dynamics USD7, Brijuni Islands, Croatia, Aug. 22-26, 2010.
 8. Description of Coherent Phonon Generation in Dielectrics based on Real-Time TDDFT calculation
Y. Shinohara, K. Yabana, Y. Kawashita, J.-I. Iwata, T. Otobe, G. F. Bertsch, Int. Conf. on Core Research and Engineering Science of Advanced Materials, Osaka Univ. May 30-June 4.
 9. 原子核移行反応・分解反応の視点
矢花一浩, RCNP 研究会「重イオン蓄積リングの物理」、阪大 RCNP、2010 年 9 月 24-25 日
 10. 時間依存密度汎関数理論による高強度パルス光伝播の記述
矢花一浩、篠原康、杉山健、G.F. Bertsch, 日本物理学会 2010 年秋季大会、大阪府立大学中百舌鳥キャンパス、2010 年 9 月 24 日
 11. 実時間・実空間 TDDFT 法を用いた磁気円二色性の第一原理計算
李畊旻、矢花一浩、G.F. Bertsch, 日本物理学会 2010 年秋季大会、大阪大学中百舌鳥キャンパス、2010 年 9 月 24 日
 12. TDHF による多核子移行反応の記述に向けて
矢花一浩、核反応研究会、阪大 RCNP、2010 年 8 月 2-4 日
 13. Canonical-basis TDHFB を用いた線形応答計算
江幡 修一郎、中務 孝、稲倉 恒法、吉田 賢市、橋本 幸男、矢花 一浩
「大振幅集団運動の微視的理論」研究会、京大基研、2010 年 10 月 24-26 日
 14. CbTDHFB による $A=50$ 近辺までの E1 モードの研究
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 2010 年秋季大会、九州工業大学、2010 年 9 月 11-14 日
 15. Gogny-TDHFB による原子核の非線形振動と緩和
橋本幸男、「大振幅集団運動の微視的理論」研究会、京大基研、2010 年 10 月 24-26 日
 16. HFB+GCM による指標分離の記述、
橋本幸男、堀端孝俊、日本物理学会 2010 年秋季大会、九州工業大学、2010 年 9 月 11-14 日
 17. 多スレーター行列式の重ね合わせによる 12C 励起構造の記述
福岡 佑太、船木 靖郎、矢花 一浩、中務 孝、日本物理学会 第 66 回年次大会、新潟大学、2011 年 3 月 28 日
 18. Skyrme 力を用いた多スレーター行列式による軽い核の励起状態の記述
福岡 佑太、船木 靖郎、矢花 一浩、中務 孝
日本物理学会 2010 年秋季大会、九州工業大学、2010 年 9 月 11-14 日
 19. 軸対称調和振動子基底を用いた時間依存密度汎関数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 2010 年秋季大会、九州工業大学、2010 年 9 月 11-14 日

20. TDHFB による非軸対称非線形振動の研究

三藤竜也、橋本幸男、矢花一浩、日本物理学会 2011 年年会、新潟大学、2011 年 3 月 25-28 日

21. 高強度超短パルスレーザーに誘起される誘電体の直流電流の絶対位相依存性

篠原康、乙部智仁、矢花一浩、日本物理学会 66 回年次大会、新潟大学 2011 年 3 月 25 日-28 日

22. 高強度短パルスレーザーに誘起される電子-格子ダイナミクスの第一原理計算

篠原康、乙部智仁、岩田潤一、矢花一浩、G.F. Bertsch、物性研・CMSI・次世代ナノ情報 合同研究会「計算物質科学の課題と展望」、東大物性研 2011 年 1 月 5 日-7 日

23. 時間依存密度汎関数理論による半導体コヒーレントフォノン生成の振動数依存性の分析

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 2010 年秋季大会、大阪府立大学 2010 年 9 月 23 日-26 日

24. 高強度パルス光を伝搬を記述するマルチスケール・シミュレータの開発

矢花一浩、杉山健、篠原康、乙部智仁、G.F. Bertsch

物性研・CMSI・次世代ナノ情報合同研究会「計算物質科学の課題と展望」、東大物性研、2011 年 1 月 5-7 日

25. 高強度パルス光伝搬を記述するマルチスケール第一原理シミュレータの開発

杉山健、篠原康、乙部智仁、矢花一浩、G.F. Bertsch、日本物理学会第 66 回大会、新潟大学、2011 年 3 月 25-28 日

5. 連携・国際活動・社会貢献、その他

時間依存密度汎関数理論に基づく研究で、物質科学に関してはワシントン大(Bertsch 教授)、バスク大(Rubio 教授)、分子研(信定准教授)と、原子核物理に関しては理化学研究所(中務准主任研究員)と密接な協力を行っている。

本グループでは、実時間・実空間法に基づく時間依存コーン・シャム方程式の数値解法を主要な方法論として用いている。同様な方法は国内外で開発が進んでいるが、本グループで最近進展させた結晶中の電子ダイナミクスを記述する計算法に関してはまだ例が少なく、計算コードの公開に向けた準備を進めている。