殻模型による原子核構造の記述(1)

宇都野穣

国立研究開発法人日本原子力研究開発機構・先端基礎研究センター 東京大学原子核科学研究センター

つくば不安定核セミナー、2017年3月7日



核構造の基礎

- 液滴模型 原子核の束縛エネルギーの大部 分を説明する。 $BE(N,Z) = a \downarrow V A + a \downarrow S A^2/3 +$ $a\downarrow CZ\uparrow 2/A\uparrow 1/3 + a\downarrow I(N-Z)\uparrow 2/$ $A - \delta(A)$ ここで、 $\delta(A)$ は対エネルギーで、 偶偶核では正、奇核ではゼロ、奇 奇核ではマイナス。
- 実験値を非常によく説明するが、
 「わずかな」ずれもある。

核子あたりの束縛エネルギー: 実験値とワイツゼッカー・ベーテの 公式との比較



核分裂エネルギーを説明する



アルファ崩壊から



- 東縛エネルギー全体はGeVにも達しうるが、原子核の性質自体は ほとんどの場合、MeV程度のもので決定される。
- 殻効果は、その最も重要な要素の一つである。

魔法数=閉殻構造をもつ核子数

• 原子における希ガスに対応

第一イオン化ポテンシャル



Figure 2-13 The values of the atomic ionization potentials are taken from the compilation by Moore (1949). The dots under the abscissa indicate closed shells.

T. K. Sato et al., Nature 520, 209 (2015)



原子核の魔法数



S. Raman et al. At. Data Nucl. Data Tab. 78,1 (2001)

- 束縛エネルギーにおいては原子ほどではないが、明らかな異常性
- 古典的魔法数:2,8,20,28,50,82,126,...
 - 2+準位からは、古典的魔法数でないものの片鱗も。

核子に働くポテンシャル

密度の飽和性と核力が短距離 であることから、Woods-Saxon型 の中心力 $V(r) = V \downarrow 0 [1 + \exp(r - R \downarrow 0)]$ a)]1-1で良く近似される。この解は、解 析的に解が得られる調和振動子 ポテンシャル $V(r) = M/2 \omega \downarrow 0 \uparrow 2 (r \uparrow 2 - M/2)$

 $R\downarrow012$)

をもとに議論するとわかりやすい



ポテンシャル模型の一粒子準位と魔法数

Energy (MeV)

調和振動子のエネルギー
 準位
 *E(N)=ħω↓*0 (N+3/2)

N=2n+l

縮退度 (*N*+1)(*N*+2)/2 パリティ *(*-1*)*↑*N*

スピン軌道相互作用
 λ1/r dV/dr l·s

jl > = l+1/2 jl < = l-1/2



近似的に縮退した軌道群を<mark>殻(shell)という</mark>。

実験のエネルギー準位との比較

- Koopmansの定理
 - 独立粒子近似の極限では、分離エネルギーが軌道の一粒子
 エネルギーと一致する。
- 二重閉殻核±1系での比較
 - ²⁰⁸Pbなどで実験値と計算値の
 良い対応が見られる。



二重閉殻±1系の磁気モーメント

- ー粒子波動関数|(l,1/2)*jm*)に対 する磁気モーメントは、 $\mu = \{ IgIl + 1/2 gIs, j = l + 1/2 j/$ *j*+1 [(l+1)*g*Il - 1/2 *g*Is], *j*=*l*-1/2 と書かれる。この値をシュミット値と いう。
- シュミット値は二重閉殻±1系の磁気 モーメントをある程度説明するが、jj 閉殻については、定量的にはスピ ンg因子を0.7倍程度しなくてはなら ない(後ほど)。



丸善出版から

シュミット値の導出

- 射影定理:任意のベクトル演算子Vlqに対し、
 α[↑] j[↑] m'Vlq αjm = α[↑] j[↑] m'J·Vαjm /j(j+1) α[↑] j[↑] m'J[↓]q αjm
- 磁気モーメントの場合、 $j\uparrow = j, m\uparrow = m = j$ 。よって $a\uparrow j\uparrow m'$ $J\downarrow q \alpha jm = a\uparrow jjJ\downarrow q = 0 \alpha jj = j\delta\downarrow \alpha d$
- $V=g\downarrow l L+g\downarrow s S$ とすると、 $J\cdot V=J\cdot (g\downarrow l L+g\downarrow s S)=(L+S)\cdot (g\downarrow l L+g\downarrow s S)$ $=g\downarrow l L12 + g\downarrow s S12 + (g\downarrow l+g\downarrow s)L\cdot S$ $=g\downarrow l L12 + g\downarrow s S12 + (g\downarrow l+g\downarrow s)(J12 - L12 - S12)/2$
- $\alpha \uparrow' jm' J \cdot V \alpha jm = g \downarrow l l(l+1) + 3/4 g \downarrow s + (g \downarrow l + g \downarrow s)$ $\{j(j+1) - l(l+1) - 3/4\}/2$

 $= \{ \blacksquare l \& j = l + 1/2 @ - l - 1 \& j = l \& j = l - 1 \& j = l = l = l \& j = l = l = l \& j = l \& j = l = l$

ー粒子模型の限界:集団性

ワイスコップ単位:電磁遷移行列 要素の典型的なオーダーとして、 一粒子状態の値をもとに単純化 された値。 $B\downarrow W(E\lambda) = (1.2)\uparrow 2\lambda/4\pi(3/$ λ +3) $12 A 12 \lambda/3 e 12 (fm) 12 \lambda$ $B\downarrow W(M\lambda) = 10/\pi (1.2)\uparrow 2\lambda - 2$ $3/\lambda+3$) $12 A (2\lambda-2)/3 \mu \sqrt{N}$ $(fm) 12\lambda - 2$



独立粒子描像の拡張

- 球形ポテンシャルにおける一粒子模型は単純すぎ、閉殻±1系以 外の核構造(基底状態など)をうまく記述できない。
 - しかし、複雑な核子多体系の出発点としては有効である。
- 拡張の方向性



それぞれの模型が、大規模計算を伴いながら不足分を補足しつつ発展している。

残留相互作用

- 例: ⁴²Caのエネルギー準位を考える。⁴⁰Caをコアとすると、2中性子系。
 - n($f_{7/2}$)² → J=0, 2, 4, 6
 - もし独立粒子描像が厳密に成り立つ なら、これらは縮退する。
- 縮退は二体相互作用があれば解 消する。

- 0+が基底状態:短距離引力を反映

 この二体力を残留相互作用 (residual interaction)あるいは有効 相互作用(effective interaction)と 呼ぶ。



配位混合

残留相互作用があれば、一般には単ースレーター行列式はシュレーディンガー方程式の解(エネルギー固有状態)にはならない。



多くのスレーター行列式が固有状態を作るのに必要となる。 これを、配位混合といい、その計算を<mark>殻模型計算</mark>という。 また、スレーター行列式は独立粒子描像(各々が無関係に運動する) を表しているのに対し、配位混合は、それぞれの核子が相関をもって いることを意味し、<mark>多体相関</mark>を取り入れているということができる。

相互作用のもつ対称性

- 角運動量
 - 空間回転不変性による。
- ・ パリティ
 - 強い相互作用のパリティ保存による。
- ・ アイソスピン
 - 近似的対称性。中性子をアイソスピン空間の上向き、陽子をアイソスピン空間の下向きとしたとき、相互作用は近似的にアイソスピン空間に対し回転不変となっている(荷電独立性)。この時、角運動量と同じように、合計アイソスピンTおよびそのz成分T_z(=(N-Z)/2)は良い量子数となる。当然、T≥|T_z|となる。
 - スピンと同じように、アイソスピン空間にてパウリ行列や昇降演算子t₁が定義される。

アイソスピン多重項

- [H, Jl±]=0より、角運動量のz成分だけが異なる状態は縮退する。
 すなわち、角運動量Jを持つ状態は、J₂=-J, -J+1, ..., Jの(2J+1)重縮退
 を持つ。
- 荷電独立性より、[H, Tl±]=0である。角運動量と全く同じように、 アイソスピンのz成分だけが異なる状態は縮退する。すなわち、ア イソスピンTを持つ状態は、T_z=-T, -T+1, ..., Tの(2T+1)重縮退を持つ。 これをアイソスピン多重項という。

T2 = 1

$$\frac{2^{*}}{10^{*}} = \frac{2^{*}}{10^{*}} = \frac{2^{*}}{10^{*}} = \frac{2^{*}}{10^{*}} = \frac{1^{*}}{10^{*}} = \frac{1^{*}}{10$$

¹⁰B

 $T_{3} = 0$

T₃ = -1

実際は、クーロンカの ため、全体的な エネルギーシフトがある。

2核子配位の計算:⁴²Ca→⁴²ScのGT遷移を例に



Y. Fujita et al., Phys. Rev. Lett. 112, 112502 (2014).



配位混合の重要性



配位混合なしでは、"low-energy super GT state"を説明できない。



⁴²Ca→⁴²ScのGT遷移の殻模型計算

- ここでは、GXPF1Jという有効相互作用を用いて⁴²Ca(0+;T=1)と
 ⁴²Sc(1+;T=0)の波動関数を計算し、その間のGT遷移行列要素を
 求める具体的な手順を追っていく。
- ⁴²Caをpf shellの2中性子系と考えると、(J,T)=(0,1)の可能な波動
 関数は以下の4つ。



相互作用ファイルの例



(J,T)=(0,1)のハミルトニアン

J-scheme (よいJ,Tをもつ基底による表現)では、 42 Ca (J,T)=(0,1)の場合、基底数は4つ。 $h \downarrow i j = \delta \downarrow i j (\epsilon \downarrow a(i) + \epsilon \downarrow b(i)) + a(i)b(i) J = 0 T = 1 V \square c(j)d(j) J = 0 T = 1$



 $|0\downarrow1\uparrow+\rangle=0.986(f\downarrow7/2)\uparrow2+0.125(p\downarrow3/2)\uparrow2+0.051(p\downarrow1/2)\uparrow2+0.097(f\downarrow5/2)$

(J,T)=(1,0)のハミルトニアン

 $(f_{7/2})^2$ $(f_{7/2}f_{5/2})$ $(f_{5/2})^2$ $(f_{5/2}p_{3/2})$ $(p_{3/2})^2$ $(p_{3/2}p_{1/2})$ $(p_{1/2})^2$

 $\begin{array}{l} |1 l1 l+\rangle = -0.875 (f l7) l2 + 0.425 (f l7) f l5) + 0.041 (f l5) l2 - 0.067 (f l5) p l3) \\ -0.140 (p l3) l2 + 0.169 (p l3) p l1) - 0.013 (p l1) l2 \end{array}$

- *f*_{5/2}のSPEが高いにも関わらず、(f_{7/2}f_{5/2})のamplitudeは大きい。
 - 対角項*f* l5 *f* l5 *JTV* **N***f* l5 *JT* が大きな負の値。
 - 非対角項*f* ↓7 *f* ↓7 *JTV* **N***f* ↓7 *f* ↓5 *JT* の絶対値が大きい。

遷移行列要素計算

・ 始状態|*i*)=∑*k*↑ *alk* |*k*)、終状態|*f*)=∑*k*↑ *βlk* |*k*)の間の遷移
 行列要素は、

 $fO\mathbf{N}i = \sum k, k' \uparrow \equiv \alpha \downarrow k \beta \downarrow k \uparrow' \uparrow \ast k' O\mathbf{N}k$

⁴²Ca→⁴²ScのGT遷移の行列要素の詳細

T=1 J=0 n=1 --> T=0 J=1 n=1

 $\label{eq:spectrum} \mbox{ \# SPE: } -8.\ 6240 \ \ (f>) \ \ -1.\ 3829 \ \ (f<) \ \ -5.\ 6793 \ \ (p>) \ \ -4.\ 1370 \ \ (p<)$

α↓k β↓k1' 1* K'Ok	(f> f>)	(f< f<)	(p> p>)	(p< p<)
	+0.98606	+0. 09741	+0. 12473	+0. 05134
(f> f>) -0. 87470	-1. 60*-0. 863	+0. 00*-0. 085	+0. 00*-0. 109	+0. 00*-0. 045
	+1. 38309	+0. 00000	+0. 00000	+0. 00000
(f> f<) +0. 42476	+1. 31*+0. 419	+1. 51*+0. 041	+0. 00*+0. 053	+0. 00*+0. 022
	+0. 54839	+0. 06256	+0. 00000	+0. 00000
(f< f<) +0. 04142	+0. 00*+0. 041	+1. 20*+0. 004	+0. 00*+0. 005	+0. 00*+0. 002
	+0. 00000	+0. 00482	+0. 00000	+0. 00000
(f) −0. 06651	+0. 00*-0. 066	+0. 00*-0. 006	+0. 00*-0. 008	+0. 00*-0. 003
	+0. 00000	+0. 00000	+0. 00000	+0. 00000
(p> p>) -0. 14023	+0. 00*-0. 138	+0. 00*-0. 014	-1. 83*-0. 017	+0. 00*-0. 007
	+0. 00000	+0. 00000	+0. 03193	+0. 00000
(p> p<) +0. 16883	+0. 00*+0. 166	+0. 00*+0. 016	+1. 15*+0. 021	+1. 63*+0. 009
	+0. 00000	+0. 00000	+0. 02432	+0. 01415
(p< p<) −0. 01337	+0. 00*-0. 013	+0. 00*-0. 001	+0. 00*-0. 002	+0. 82*–0. 001
	+0. 00000	+0. 00000	+0. 00000	–0. 00056

符号がそろう

sum = 2.069 B(GT) = 4.280

2番目の1+へのGT行列要素

T=1 J=0 n=1 \rightarrow T=0 J=1 n=2

 $\label{eq:spectrum} \mbox{ \# SPE: } -8.\ 6240 \ \ (f>) \ \ -1.\ 3829 \ \ (f<) \ \ -5.\ 6793 \ \ (p>) \ \ -4.\ 1370 \ \ (p<)$

α↓ k β↓k↑ ↑* k' O k	(f> f>)	(f< f<)	(p> p>)	(p< p<)
	+0. 98606	+0. 09741	+0. 12473	+0. 05134
(f> f>) +0. 45488	-1. 60*+0. 449	+0. 00*+0. 044	+0. 00*+0. 057	+0. 00*+0. 023
	-0. 71927	+0. 00000	+0. 00000	+0. 00000
(f> f<) +0. 57481	+1. 31*+0. 567	+1. 51*+0. 056	+0. 00*+0. 072	+0. 00*+0. 030
	+0. 74212	+0. 08465	+0. 00000	+0. 00000
(f< f<) -0.02112	+0. 00*-0. 021	+1. 20*-0. 002	+0. 00*-0. 003	+0. 00*-0. 001
	+0. 00000	-0. 00246	+0. 00000	+0. 00000
(f) −0. 25242	+0. 00*-0. 249	+0. 00*-0. 025	+0. 00*-0. 031	+0. 00*-0. 013
	+0. 00000	+0. 00000	+0. 00000	+0. 00000
(p> p>) −0. 35208	+0. 00*-0. 347	+0. 00*-0. 034	-1. 83*-0. 044	+0. 00*-0. 018
	+0. 00000	+0. 00000	+0. 08018	+0. 00000
(p> p<) +0. 51721	+0. 00*+0. 510	+0. 00*+0. 050	+1. 15*+0. 065	+1. 63*+0. 027
	+0. 00000	+0. 00000	+0. 07449	+0. 04336
(p< p<) −0. 08391	+0. 00*-0. 083	+0. 00*-0. 008	+0. 00*-0. 010	+0. 82*-0. 004
	+0. 00000	+0. 00000	+0. 00000	-0. 00352

符号がそろわない

sum = 0.300 B(GT) = 0.090

コヒーレンス

• 重ね合わせは行列要素を大きくしうる。量子力学的効果。

- 簡単な例

 $|\Psi\rangle = \alpha_1 |1\rangle + \alpha_2 |2\rangle + \dots + \alpha_n |n\rangle$

行列要素に関する簡単な仮定

 $\alpha_1 = \cdots = \alpha_n \rightarrow \alpha_i = 1/\sqrt{n} \text{ and } \langle i|Q|j\rangle = q_{sp}$

そのとき

$$\langle \Psi | Q | \Psi \rangle = \sum_{i,j} \langle i | Q | j \rangle \alpha_i^* \alpha_j = q_{sp} \frac{1}{\sqrt{n}} \frac{1}{\sqrt{n}} n^2 = nq_{sp}$$

• 非対角要素があること
• 符号がそろっていること
が本質的

球形基底による展開でも、「変形」(E2行列要素が大きくなる)を出すことができる

どの程度の軌道数をあらわに取り入れるか

⁴²Caの例から /二体行列要素/一粒子エネル ギーの差 /≪1 を満たすものは小さな成分しか ないので、あらわに多体問題に 取り入れない。殻ギャップにはさ まれた軌道群をバレンス設 (valence shell) として 殻模型の 多体問題で考えることが多い。



有効相互作用、有効演算子

- ・ 殻模型計算では配位混合を取り入れているものの、実際的な限界から、その空間はかなり狭い。したがって、本来の多体問題を *H*/Ψ)=*E*/Ψ)
 - としたとき、限られた殻模型空間の固有状態|Φ)は、

$E \neq \Phi H \square \Phi$

となる。本来の多体問題のエネルギー

 $E = \Phi H leff \Phi$

を再現する相互作用を有効相互作用と呼ぶ。同様に、遷移演算子 についても、

 $\Psi \downarrow 1 \text{ Or }\Psi \downarrow 2 = \Phi \downarrow 1 \text{ Oleff } \Phi \downarrow 2$

を満たす有効演算子Oleffを考える。

有効相互作用:⁴Heを例に



M. Sakai, I. Shimodaya, Y. Akaishi, J, Hiura & H. Tanaka,

Prog. Theor. Phys. 56 (1974) 32.

赤石さんのレクチャーから

有効相互作用の種類

- 微視的
 - 生の核力(2核子力、3核子力)から微視的有効相互作用理論を介して作ら れたもの。原理的にはフィッティングパラメータなし。
 - ・ G行列(短距離相関と媒質効果を取り入れたもの)、Q box ...
 - 微視的+少数の現象論的補正というアプローチもある。KB3 (pf shell)など。
- 現象論的
 - 有効相互作用の特徴(短距離力、テンソルカなど)を捉えた関数形で表現。 それほど多くはないパラメータを含む。
 - Yukawa, Gaussian, surface delta, ..., pairing + $Q \cdot Q$ (schematic)
- (半)経験的
 - 2体行列要素(全てあるいはより少数の線形結合)をパラメータとして取り 扱い、実験データにフィットしたもの。
 - Cohen-Kurath (p shell), USD (sd shell), GXPF1 (pf shell), ...

スピン演算子

 同様のことがM1遷移やガモフテラー遷移にもあてはまる。有効ス ピンは、有馬・堀江効果と呼ばれる芯偏極効果などにより、70%程 度にクエンチすることが知られている。





有効電荷

- |*j*)=|*j*)+∑*i*,*m*,*j*↑ ↑ *a*(*j*)↓*i*,*m*|*j*,(*m*(*i*)↑−1);*j*)から、 電気的四重極演算子は *jeQ*|*j*≈*jeQ*|*j*+2∑*i*,*m*↑ *a*(*j*)↓*i*,*m* core*eQ*|*m*(*i*)↑−1
 jeQ|*j*+2*a*(*j*)*g*.*s*.*eQ*||GQR ≡*e*↓eff *jQ*||*j*
- 有効電荷は、模型空間に取り入れられていない巨大共鳴(2ħω励 起)との結合を取り入れたもの。



2ħω励起を取り入れた計算との比較

• 2ħω励起を入れると、有効電荷はほとんど必要ない。

TABLE I. Q moments $(e \, \text{fm}^2)$ and B(E2) values $(e^2 \, \text{fm}^4)$ in A = 6-10 nuclei. Cal.(A): $e_{\pi}^{\text{eff}} = e$, $e_{\nu}^{\text{eff}} = 0$; Cal.(B): $e_{\pi}^{\text{eff}} = 1.05e$, $e_{\nu}^{\text{eff}} = 0.05e$; Cal.(C): $e_{\pi}^{\text{eff}} = 1.5e$, $e_{\nu}^{\text{eff}} = 0.5e$ (b = 1.77 fm).

Nucleus	Quantity	$(0+2)\hbar\omega$		Exp.	0ħω
		$\overline{\operatorname{Cal.}(A)}$	$\operatorname{Cal.}(B)$		Cal.(C)
⁶ Li	$Q(1_{1}^{+})$	0.09	0.10	-0.08 ± 0.01^{a}	-1.83
	$B(E2;3^+_1 ightarrow1^+_1)$	5.95	7.21	$10.7\pm~0.8$ $^{ m b}$	8.13
1	$B(E2;2^+_1 ightarrow1^+_1)$	9.17	11.10	4.4 ± 2.3 ^b	3.93
⁷ Li	$Q([\frac{3}{2}]_{1}^{-})$	-3.79	-4.29	-4.06ª	-4.86
	$B(E2; [\frac{1}{2}]_1^- ightarrow [\frac{3}{2}]_1^-)$	13.21	17.21	15.7 ± 1.0 ^b	22.74
	$B(E2; [frac{7}{2}]_1^- ightarrow [frac{3}{2}]_1^-)$	5.96	7.83	3.42 ^b	8.53
⁸ Li	$ ilde{Q}(2^+_1)$	2.78	3.21	3.15 ± 0.05^{a}	3.24
	$B(E2;1^+_1 ightarrow2^+_1)$	3.94	5.30	75 ± 17^{d}	6.72
⁸ B	$Q(2_1^+)$	5.84	6.27	$6.83 \pm 0.21^{c,e}$	5.17
⁹ Li	$Q([\frac{3}{2}]_{1}^{-})$	-3.89	-4.36	$-3.6 \pm 0.7^{a,e}$	-5.05
⁹ Be	$Q([\frac{3}{2}]_{1}^{-})$	5.46	5.98	5.3 ± 0.3 ^a	5.36
	$B(E2; [\frac{5}{2}]_1^- \rightarrow [\frac{3}{2}]_1^-)$	26.39	32.02	27.1 ± 2.0 ^b	31.94
	$B(E2; [\frac{7}{2}]_1^- \rightarrow [\frac{3}{2}]_1^-)$	9.75	11.63	7.0 ± 3.0 ^b	10.74
¹⁰ Be	$B(E2;2^+_1 ightarrow 0^+_1)$	13.48	16.26	10.2 ± 1.0 ^b	17.38
	$B(E2;0^+_2 ightarrow 2^+_1)$	5.87	7.20	3.2 ± 1.9 ^b	0.01
¹⁰ B	$Q(3_1^+)$	9.62	10.58	8.47 ± 0.06^{a}	10.70
	$B(E2;1^+_1 ightarrow3^+_1)$	1.12	1.35	$4.13 \pm 0.06^{ m b}$	9.76
	$B(E2;1^+_2 ightarrow3^+_1)$	7.11	8.61	1.71 ± 0.26^{b}	1.35
	$B(E2;1^+_2 ightarrow 1^+_1)$	3.21	3.88	$0.83 \pm 0.40^{ m b}$	2.03
	$B(E2;3^+_2 ightarrow1^+_1)$	13.86	16.77	$20.5~\pm~~2.6$ $^{ m b}$	9.68
¹⁰ C	$B(E2;2^+_1\rightarrow 0^+_1)$	12.54	15.22	$12.3~\pm~~2.1$ ^b	15.01

H. Nakada and T. Otsuka, Phys. Rev. C 49, 886 (1994).

まとめ

- 独立粒子描像
 - 液滴模型では説明できない「小さな」ずれが原子核構造では本質的。
 - Meyer-Jensenの殻模型。
 - シュミット値、ワイスコップ値からのずれ。独立粒子模型の限界。
- 配位混合
 - 独立粒子模型から得られる重要な一粒子空間に対し、考えうる配位混合を 取り入れる。
 - 二核子配位42Ca→42ScのGT遷移例。配位混合、コヒーレンスの重要性。
 - 有効相互作用、有効演算子。模型空間外の寄与を取り込む方法。
- ・ 殻模型計算:空間を模型空間とそれ以外に分け、模型空間内の 多体問題については、可能な多体状態を全て取り入れて正確に 解く。それ以外の空間の寄与は摂動的に取り扱う。古典的な Mayer-Jensenの殻模型の知見から模型空間を構成する。