

# INTRODUCTORY NUCLEAR PHYSICS

## §6-5 §6-6 §6-7

東 裕也

平成 18 年 10 月 27 日, 11 月 10 日

### §6-5 MAGIC NUMBER AND SINGLE-PARTICLE ENERGY

§4-11 では核の束縛エネルギーを  $A, N, Z$  の滑らかな関数として取り扱った。その関数と実際の値をプロットしたものを比べてみると局所的な違いがある。例えば、 $Z = 2, 8, 20, 40, 50, 82, N = 2, 8, 50, 82, 126$  などがそうであり、経験的に以下のようなことが知られている。

- 図 6-13 のようにはじめの少し励起した状態のエネルギーは近くの核におけるそれより大きい。
- 1 つの中性子や 1 つの陽子を取り除くエネルギー (4-78,79) は図 6-14 にあるように隣の偶偶核のそれより大きい。
- 電磁気的な遷移のような観察から見られるように基底状態の固有な形は球形である。

これらの  $Z, N$  は魔法数と知られている。 ${}^4\text{He}, {}^{16}\text{O}, {}^{40}\text{Ca}, {}^{90}\text{Zr}, {}^{208}\text{Pb}$  などとともに中性子数、陽子数がともに魔法数のダブルマジック核 (二重閉殻核) であるが、それらはこれらの特性が顕著である。

魔法数の存在は独立粒子模型で説明される。この模型では、核子は互いに作用せず、核内のその他全ての核子の効果は個々の核子を核に束縛する平均場で置き換えられる。核の Hamiltonian は単一粒子の項の和として、

$$\mathcal{H} = \sum_i \epsilon(i) n_i$$

ここで和は全ての粒子の状態の和としている。粒子の状態は  $\epsilon(i)$  によって表され、 $n_i$  は数演算子で単一粒子の状態  $i$  の占有を示している。魔法数の核では、単一粒

子の集団とみなしたとき、状態の集まりが全て占有されると、核の Fermi energy は大きなギャップののちょうど下になる。結果として、核を励起するには通常よりは大きなエネルギーが必要になる。魔法数の核は閉殻核と呼ばれ、全ての軌道が占有されると、核の基底状態は強く束縛され、§6 – 3 のはじめてで説明したように球形となる。

## Harmonic oscillator single-particle spectrum

単一粒子の Hamiltonian は、

$$h = -\frac{\hbar^2}{2\mu_i}\nabla_i^2 + V(\mathbf{r}_i)$$

$\mathbf{r}_i$  は核子  $i$  の座標で  $\mu_i$  は換算質量である。単一粒子のポテンシャル  $V(\mathbf{r}_i)$  を使って、核子-核子の相互作用の全ての平均的な効果を表している。さらに中心力ポテンシャルを調和振動子型として、

$$V(r_i) = \frac{1}{2}\mu_i\omega_0^2 r_i^2$$

と仮定する。 $\omega_0$  は周波数である。これは核子に対して束縛するために、ポテンシャルの最小値付近では 2 次の形に依存しなければならず、上記の形となる。三次元調和振動子の極座標における動径方向の波動関数の求め方は、後に述べる<sup>1</sup>。

等方的な三次元調和振動子のポテンシャルにたいして、各々の(主)殻は  $N$  で特徴付けられる。 $N$  とは調和振動子の数である。与えられた殻に属する状態は、

$$\epsilon_N = (N + \frac{3}{2})\hbar\omega_0 = \frac{\hbar\omega_0}{2}(3 + 2l + 4n_r)$$

で縮退し、許される軌道角運動量は、

$$l = N, N - 2, \dots, 1, 0$$

となる。

それぞれの核子は固有のスピン  $s = \frac{1}{2}$  を持っているので、状態数  $D_N$ 、つまり調和振動子の殻が適用できる中性子や陽子の最大数は、

$$D_N = 2 \sum_{\text{許される } l} (2l + 1) = 2 \sum_{k=1}^{N+1} k = (N + 1)(N + 2)$$

全ての状態数  $D_{max}$  は、調和振動子の最大数  $N_{max}$  までに対しては、すべての  $N$  の値を  $N_{max}$  まで和をとり、

$$D_{max} = \sum_{N=0}^{N_{max}} D_N = \frac{1}{3}(N_{max} + 1)(N_{max} + 2)(N_{max} + 3) \xrightarrow{N_{max} \gg 1} \frac{1}{3}(N_{max} + 2)^3$$

<sup>1</sup>Appendix1 参照。

$N_{max} = 0, 1, 2, \dots$  に対しては  $D_{max} = 2, 8, 20, 40, 70, 112, 168, \dots$  となる。調和振動子の  $\omega_0$  は核の大きさに関係する。従って核の核子数  $A$  に関係する。 $N\hbar\omega_0$  の状態での  $r^2$  の期待値は調和振動子のポテンシャルの期待値から得られる。

$$\langle \frac{1}{2} = \mu\omega_0^2 r^2 \rangle_N = \frac{1}{2}(N + \frac{3}{2})\hbar\omega_0$$

右辺の  $\frac{1}{2}$  の因子は三次元ポテンシャルの粒子に対してはポテンシャルの平均は全エネルギーの半分である<sup>2</sup>ことからきており、この関係より  $\langle r^2 \rangle_N$  は、

$$\langle r^2 \rangle_N = \frac{2}{\mu\omega_0}(N + \frac{3}{2})$$

$A$  個の核子からなる原子核の二乗平均は陽子、中性子が全ての状態を占めたときの平均で与えられて、

$$\begin{aligned} \langle R^2 \rangle &= \frac{2}{A} \sum_{N=0}^{N_{max}} D_N \langle r^2 \rangle_N \\ &= \frac{2}{A} \sum_{N=0}^{N_{max}} (N+1)(N+2)(N+\frac{3}{2}) \frac{\hbar}{\mu\omega_0} \\ &\xrightarrow{N_{max} \gg 1} \frac{2}{A} \frac{\hbar}{\mu\omega_0} \frac{1}{4} (N_{max} + 2)^4 \end{aligned}$$

となり、核の半径の二乗は  $N_{max}$  に関係している。代わりに  $\hbar\omega_0$  を用いて調和振動子のエネルギーは、

$$\hbar\omega_0 = \frac{1}{A\mu} \frac{\hbar^2}{\langle R^2 \rangle} \frac{1}{2} (N_{max} + 2)^4$$

また核子数  $A$  は

$$A = 2 \sum_{N=0}^{N_{max}} D_N \approx \frac{2}{3} (N_{max} + 2)^3$$

2 の因子は中性子、陽子を考慮したものである。これを用いて、

$$N_{max} + 2 = (\frac{3}{2}A)^{\frac{1}{3}}$$

これを用いて、

$$\begin{aligned} \hbar\omega_0 &= \frac{1}{A\mu} \frac{\hbar^2}{\langle r^2 \rangle} \frac{1}{2} (\frac{3}{2}A)^{\frac{4}{3}} \\ &= \frac{\hbar^2}{\mu^{\frac{3}{5}}(r_0 A^{\frac{1}{3}})^2} \frac{3}{4} (\frac{3}{2}A)^{\frac{1}{3}} \\ &= \frac{5}{4} (\frac{3}{2})^{\frac{1}{3}} \frac{\hbar^2}{\mu r_0^2} A^{-\frac{1}{3}} \\ &\approx 41 A^{-\frac{1}{3}} \text{ MeV} \end{aligned}$$

<sup>2</sup>virial 定理

となる。

ここで、§4-3 より、数密度  $\rho(r)$  を

$$\rho(r) = \begin{cases} \rho_0 = \frac{A}{V} (r \leq R) \\ 0 (r > R) \end{cases}$$

として、

$$A = 4\pi \int_0^\infty \rho(r)r^2 dr = \frac{4\pi}{3} R^3 \rho_0$$
$$\langle r^2 \rangle = \frac{3}{4\pi R^3 \rho_0} \int_0^\infty \rho(r)4\pi r^4 dr = \frac{3}{5} R^2$$
$$R = r_0 A^{\frac{1}{3}}$$

より、

$$\langle r^2 \rangle = \frac{3}{5} (r_0 A^{\frac{1}{3}})^2, r_0 \approx 1.2 \text{ fm}$$

を用いた。

## Spin-orbit energy

$N_{max} = 0, 1, 2, 3$  までは  $D_N = 2, 8, 20, 40$  となり、魔法数を説明できる。しかし、 $N_{max} = 4$  以上では魔法数からずれている。これを訂正するのに付加的な項が加えられる。

このずれは単一粒子のスピン-軌道エネルギーによって説明され、これは 1949 年に Mayer らによって提案された。単一粒子のスピン-軌道項の起源は核子-核子相互作用のスピン依存性にたどることができる。a をスピン-軌道相互作用の強さとし、単一粒子の Hamiltonian は

$$h((r)_i) = -\frac{\hbar^2}{2\mu_i} \nabla_i^2 + \frac{1}{2} \mu_i \omega_0^2 r_i^2 + as \cdot l$$

パラメータ a は核子数 A に依存し、観測されたエネルギーに fit することで得られる。スピン-軌道項が含まれると、単一粒子エネルギーは

$$\epsilon_{Nlj} = (N + \frac{3}{2}) \hbar \omega_0 = \begin{cases} +\frac{1}{2} al (j = l + \frac{1}{2}) \\ -\frac{1}{2} a(l + 1) (j = l - \frac{1}{2}) \end{cases}$$

$j_> \equiv l + \frac{1}{2}$  と  $j_< \equiv l - \frac{1}{2}$  の splitting は  $\frac{a(2l+1)}{2}$  であるが、2つの中心力エネルギーはスピン-軌道力の splitting によって影響されない。a < 0 に対しては、 $j_>$  のほうが単一粒子状態は低くなる。低くなる大きさは l が大きくなるにつれて増加するので、大きな l に対して  $j_>$  状態は  $\hbar \omega_0$ , つまり二つの隣り合った調和振動子の主殻のギャップに比べてエネルギーが下がる。結果として N の殻に入っている振動

子が大きな  $l$  で  $j_{>}$  状態にある  $(N-1)$  殻に近づく。(実際には  $l^2$  に依存する項を導入しても大きな  $l$  の値でより低い中心力エネルギーとなる。このようにして  $j_{<}$  状態はエネルギーが高い隣の主殻へ上がることが防がれる。) これで図 6-15 のように魔法数が説明できる。

ここで、 $Z=50$  の二重閉殻核がないのは、クーロン斥力のため  ${}^{40}\text{Ca}$  以上の核は陽子よりも中性子の数が過剰となることで安定となる。 ${}^{90}\text{Zr}$  に対して中性子過剰量は  $N-Z=10$  で、 ${}^{208}\text{Pb}$  に対しては  $N-Z=44$  となる。 $Z=50$  の安定核に対しては中性子過剰量は 10 から 20 と期待される。50 より上の次の魔法数は 82 で、 $N=82$  は、 $Z=50$  にたいしては中性子過剰量よりあまりに大きいので、二重閉殻核が作られない。その代わりに  ${}_{50}\text{Sn}$  は近くの元素よりもより安定である。安定なスズの同位体のほかの特性はまた、経験的に  $Z=50$  は魔法数のひとつでそれらの近くのものよりもより強く束縛された核をつくる。

## Superheavy Nuclei

もっとも重いと知られている閉殻核は  ${}^{208}\text{Pb}_{126}$  である。次の安定な陽子数は 114 であり、中性子軌道にも同様の分離があるが、エネルギーギャップはより小さく経験的には、 $N=114$  で中性子の sub-shell ができていることは明らかに示されていない。 $Z=114$  はアクチノイド系列の終わりの  $Z=103$ (ローレンシウム) とあまり離れていないので、 $A=298$  ( $Z=114, N=184$ ) の「超重核」元素となって、実験室で作られる可能性がある。また、陽子数で、知られている魔法数 126 で超重核の候補として  $A=310$  で終わると考えられており、多くの実験が行われている。

## Spectroscopic notation

核物理で単一粒子の軌道は  $N, l, j$  で分類される。慣習として  $l=0, 1, 2, \dots$  を表すのに  $s, p, d, f, g, h, i, j$  等を使う。 $j$  値は文字の後の添字で示され、主殻の表記は前に付ける。主殻の  $N$  を動径方向の波動関数の節の数  $n$  でおきかえる。少なくとも  $n$  には二つの慣習があって、原点での節の数を数えるかどうかによって異なる。

## §6-6 MANY-BODY BASIS STATES

微視的な計算において主な目的は、場所やスピン、アイソスピンや他の自由度といった、独立変数として個々の核子に関連したものをを用いて、核の多体系の固有値問題を解くことである。この空間において hamiltonian  $\mathcal{H}$  はそれぞれの核子の運動エネルギーと対の核子の間における相互作用から成る。核の振る舞いはこれ

ら核子の項とそれらの間の関係より成り、A核子系のエネルギーは Schrödinger 方程式より固有値  $E_\alpha$  は

$$\mathcal{H}\Psi_\alpha(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_A) = E_\alpha\Psi_\alpha(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_A)$$

として得られる。記述を簡単にするために、核子 i に付属する全ての変数を代表して  $\mathbf{r}_i$  を用いている。

## Matrix method to solve the eigenvalue problem

A 個の粒子の系に対して基底の完全系が必要で、 $\Phi_k(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_A)$  で  $k=1, 2, \dots, D$  は Hilbert 空間における線型独立な数である。個の基底は正規直交基底であるとする。固有ベクトル  $\psi_\alpha$  はこれら D 個の基底の線形結合により表されて、

$$\Psi_\alpha(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_A) = \sum_{k=1}^D C_k^\alpha \Phi_k(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_A)$$

$C_k^\alpha$  は  $\alpha$  番目の展開係数である。展開係数を求めるには、

$$\langle \Phi_j(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_A) | \mathcal{H} | \Psi_\alpha(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_A) \rangle = E_\alpha \langle \Phi_j(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_A) | \Psi_\alpha(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_A) \rangle$$

計算をすると、

$$\begin{aligned} \langle \Phi_j | \mathcal{H} | \sum_{k=1}^D C_k^\alpha \Phi_k \rangle &= \sum_{k=1}^D \langle \Phi_j | \mathcal{H} | \Phi_k \rangle C_k^\alpha \\ &= \sum_{k=1}^D H_{jk} C_k^\alpha \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle \Phi_j | \mathcal{H} | \sum_{k=1}^D C_k^\alpha \Phi_k \rangle &= \sum_{k=1}^D E_\alpha \langle \Phi_j | \Phi_k \rangle C_k^\alpha \\ &= \sum_{k=1}^D E_\alpha \delta_{jk} C_k^\alpha \\ &= E_\alpha C_j^\alpha \end{aligned}$$

より、次の結果が得られる。

$$\sum_{k=1}^D H_{jk} C_k^\alpha = E_\alpha C_j^\alpha$$

ここで、

$$H_{jk} \equiv \langle \Phi_j(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_A) | \mathcal{H} | \Phi_k(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_A) \rangle$$

であり、行列の形にすると、

$$\begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & \cdots & H_{1D} \\ H_{21} & H_{22} & \cdots & H_{2D} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ H_{D1} & H_{D2} & \cdots & H_{DD} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1^\alpha \\ C_2^\alpha \\ \vdots \\ C_D^\alpha \end{pmatrix} = E_\alpha \begin{pmatrix} C_1^\alpha \\ C_2^\alpha \\ \vdots \\ C_D^\alpha \end{pmatrix}$$

$E_\alpha$  の値は永年方程式の根となり

$$\det \begin{vmatrix} H_{11} - E_\alpha & H_{12} & \cdots & H_{1D} \\ H_{21} & H_{22} - E_\alpha & \cdots & H_{2D} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ H_{D1} & H_{D2} & \cdots & H_{DD} - E_\alpha \end{vmatrix} = 0$$

$E_{alpha}$  が見つかり、 $C_i^\alpha$  の D 次連立方程式を解くことで展開係数が得られる。

## Single-particle basis states

多体系の基底の波動関数はひとつの粒子の波動関数  $\phi_i(\mathbf{r}_j)$  の積から作られ、fermion の反対称性を保証するために、Slater 行列式で書かれることが多い。

$$\Phi_k(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_A) = \frac{1}{\sqrt{A!}} \det \begin{vmatrix} \phi_1(\mathbf{r}_1) & \phi_1(\mathbf{r}_2) & \cdots & \phi_1(\mathbf{r}_A) \\ \phi_2(\mathbf{r}_1) & \phi_2(\mathbf{r}_2) & \cdots & \phi_2(\mathbf{r}_A) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_A(\mathbf{r}_1) & \phi_A(\mathbf{r}_2) & \cdots & \phi_A(\mathbf{r}_A) \end{vmatrix}$$

単一粒子のスペクトルは無限で、多体系の状態数 D も無限である。このような無限次元の Hilbert 空間の固有値問題は解くのは非現実的である。殻モデルの主な目的のひとつは、理にかなっていて現実的な近似法を見つけることである。そのような近似法は Hilbert 空間のほんの少しの部分が考察しようとしている核状態の記述を与えるのに適していなければならない。

単一粒子の波動関数  $\phi_i(\mathbf{r}_i)$  を決めるのに、単一粒子の Hamiltonian の固有関数をとるのが便利で、

$$h(\mathbf{r}_i)\phi_k(\mathbf{r}_i) = \epsilon_k\phi_k(\mathbf{r}_i)$$

$\epsilon_k$  は単一粒子のエネルギーで、多体系の Hamiltonian は次のような形で与えられる。

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^A h(\mathbf{r}_i) + \sum_{i \neq j=1}^A V(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)$$

ここで  $V(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)$  は残留相互作用で、元々の核子-核子相互作用から最初の項に含まれた寄与を引いている。多体系の基底において  $\mathcal{H}$  の行列要素は

$$H_{jk} = \delta_{jk} \sum_{n=1}^A \epsilon_n + V_{jk}$$

第二項は、

$$V_{jk} \equiv \langle \Phi_j | \sum_{p \neq q=1}^A V(\mathbf{r}_p, \mathbf{r}_q) | \Phi_k \rangle$$

は残留相互作用の Hamiltonian への寄与である。

## Independent-particle model

我々が適用した基底において、多体系の Hamiltonian の対角要素から外れたものに寄与するのは  $V_{jk}$ 、Hamiltonian の二体部分から来る。残留相互作用が十分小さいと、二体部分が無視できるようになって、我々が選んだ基底では Hamiltonian は対角行列になる。この極限では固有値は単一粒子エネルギーの和だけとなり、多体系の固有値問題はずっと簡単になる。これは、独立粒子模型を背後とし、現実的な単一粒子 Hamiltonian を活用できた結果として、物理的に理にかなった集合を作ることができたとしたら、核構造の問題のよい近似法である。次のセクションでは Hartree-Fock 近似の目的がこれであることをみる。

実際には観察された核の特性の多くは核の特性の多くは核子間の「関係」の結果である。この場合、単一粒子状態の積のお線型結合がこれらを記述するのに必要とされる。もはや独立粒子模型はもはや適用せず、多体系の波動関数の計算に残留相互作用の効果を組みこまなければならない。

## §6-7 HARTREE-FOCK SINGLE-PARTICLE HAMILTONIAN

完備な核の Hamiltonian は (6-74) で与えられた、1つ、あるいは2つの部分の和となる。核子  $i$  の核子-核子相互作用の大部分は、 $h(\mathbf{r}_i)$  の一部分として含んだ平均場によって表される事を見た。この場合、残りの二体相互作用は二核子間の "effective potential" によって与えられ、元々の核子-核子相互作用よりずっと弱くなる。核のた多体問題への Hartree-Fock のアプローチの目的のひとつは残留相互作用が最小となるような単一粒子表示を見つけることである。

大体の場合、単一粒子状態の完備な集合はどんな計算をするにしても必要である。この議論の目的のために、このセクションの残りでは試行関数として単一粒子状態の任意の集合からはじめる。多くの場合、最終的な結果はこの選び方には無関係で、実際には調和振動子のように数学的な観点から便利な集合をとることが有益である。

## Variation of the trial wave function

二体の残留相互作用がないとき、基底状態は A 個の単一粒子の準位が最も低く占めている配置によって与えられている。A 個の核子系に対する  $|\Phi_0\rangle$  は Slater 行列式で与えられ、次のように略記する。

$$|\Phi_0\rangle = |\phi_1\phi_2\cdots\phi_A\rangle$$

もし、 $|\Phi_0\rangle$  が系の波動関数の本当の基底状態なら次の変分条件を満たす。

$$\delta \langle \phi_1\phi_2\cdots\phi_A | \mathcal{H} | \phi_1\phi_2\cdots\phi_A \rangle = 0$$

Hartree-Fock 計算の目的ははこの条件を満たす単一粒子状態の集合を見つけることである。 $\langle \delta\Phi |$  は、 $|\Phi_0\rangle$  の変分と独立ではないので上式は次の条件と等しい。

$$\langle \delta\Phi | \mathcal{H} | \Phi_0 \rangle = 0$$

多体系の波動関数を修正する方法は二つあり、この式が満たされるような単一粒子波動関数自体を修正するか、かわりに単一粒子基底は固定して、 $|\Psi_0\rangle$  に異なる A 個の単一粒子状態の積からなる微小な Slater 行列式を加えるかである。状態についての完備な集合があり、全ての考えうる変分が適用される限り、2つの方法は等価である。今回は後者のアプローチを取る。固定した単一粒子状態の基底を用いて、多体系の状態は占有されている単一粒子状態によって特定される。

インデックス  $r=1, \dots, d$  で単一粒子状態の全てをナンバリングすることで基底にラベルすることにする。A 個の多体系の状態は占有された状態のインデックスによって特定される。従って、単一粒子の和による最も低い多体系の状態は次の形で表現される。

$$|\Phi_0\rangle = |1, 2, \dots, A\rangle$$

時々、準位表現と呼ばれる。二体の相互作用が無視される極限では  $|\Phi_0\rangle$  は A 個の核子系の基底状態で Fermi energy,  $\epsilon_F$  は単一粒子状態が最も高い準位のエネルギーである。

$|\Phi_0\rangle$  の変分は Fermi energy 以下の粒子を上げることで行われる。例えば、状態  $t$  を上の状態  $k$  にというように、微小の  $|\Phi_{kt}\rangle$  の合成をする。この状態は次のように表す。

$$|\Phi_{kt}\rangle = |1, 2, \dots, t-1, t+1, \dots, A, k\rangle$$

このような状態を 1 粒子-1 正孔状態、あるいは短く 1p1h 状態という。2 粒子-2 正孔状態 (2p2h) やより複雑な励起の種類を含む変分も構成されるが、ここでは無視する。

すべての考えられる 1p1h-励起からなる任意の変分は次の形で書かれる。

$$|\delta\Phi\rangle = \sum_{kt} \eta_{kt} |\Phi_{kt}\rangle$$

ここで  $\eta_{kt}$  は変分におけるそれぞれの要素の大きさである。変分は小さなステップで行われるのを保証するため、 $|\eta_{kt}|$  はずっと小さくなければならない。この形を用いて変分条件は

$$\langle \delta\Phi | \mathcal{H} | \Phi_0 \rangle = \sum_{kt} \eta_{kt} \langle \Phi_{kt} | \mathcal{H} | \Phi_0 \rangle = 0$$

と書くことができ、これは次のようになる。

$$\langle \Phi_{kt} | \mathcal{H} | \Phi_0 \rangle = \langle \Phi_{kt} | \sum_{i=1}^A h(\mathbf{r}_i) + \sum_{i \neq j=1}^A V(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) | \Phi_0 \rangle = 0$$

演算子が作用したものの以外全ての単一粒子座標にわたった積分では、一体と二体の Hamiltonian に対する (6-80) の条件は、

$$\langle k|h|t \rangle + \sum_r \langle kr|V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|tr \rangle = 0$$

$r$  は占有された状態全てにわたる<sup>3</sup>。ここで、

$$|kr \rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \phi_k(\mathbf{r}_1) & \phi_k(\mathbf{r}_2) \\ \phi_r(\mathbf{r}_1) & \phi_r(\mathbf{r}_2) \end{vmatrix}$$

$$|tr \rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \phi_t(\mathbf{r}_1) & \phi_t(\mathbf{r}_2) \\ \phi_r(\mathbf{r}_1) & \phi_r(\mathbf{r}_2) \end{vmatrix}$$

これらの結果を用いると、二体部分の行列要素は

$$\begin{aligned} \langle kr|V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|tr \rangle &= \frac{1}{2} \{ (\langle \phi_k(\mathbf{r}_1)\phi_r(\mathbf{r}_2) | - \langle \phi_r(\mathbf{r}_1)\phi_k(\mathbf{r}_2) |) V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \\ &\quad \times (|\phi_t(\mathbf{r}_1)\phi_r(\mathbf{r}_2) \rangle - |\phi_r(\mathbf{r}_1)\phi_t(\mathbf{r}_2) \rangle) \} \\ &= \frac{1}{2} \{ (\langle \phi_k(\mathbf{r}_1)\phi_r(\mathbf{r}_2) | V | \phi_t(\mathbf{r}_1)\phi_r(\mathbf{r}_2) \rangle \\ &\quad - \langle \phi_k(\mathbf{r}_1)\phi_r(\mathbf{r}_2) | V | \phi_r(\mathbf{r}_1)\phi_t(\mathbf{r}_2) \rangle \\ &\quad - \langle \phi_r(\mathbf{r}_1)\phi_k(\mathbf{r}_2) | V | \phi_t(\mathbf{r}_1)\phi_r(\mathbf{r}_2) \rangle \\ &\quad + \langle \phi_r(\mathbf{r}_1)\phi_k(\mathbf{r}_2) | V | \phi_t(\mathbf{r}_1)\phi_r(\mathbf{r}_2) \rangle) \} \\ &= \langle \phi_k(\mathbf{r}_1)\phi_r(\mathbf{r}_2) | V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | \phi_t(\mathbf{r}_1)\phi_r(\mathbf{r}_2) \rangle \\ &\quad - \langle \phi_k(\mathbf{r}_1)\phi_r(\mathbf{r}_2) | V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | \phi_r(\mathbf{r}_1)\phi_t(\mathbf{r}_2) \rangle \end{aligned}$$

最後の等式は  $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$  についての対称な関係を用いた。

<sup>3</sup>詳しい計算は Appendix2 を参照。

## Hartree-Fock Hamiltonian

$\alpha, \beta, \dots$  を使い、元の、もしくは試行の単一粒子状態を示し、 $r, s, \dots$  で Hartree-Fock 単一粒子状態を示すことで、2つの単一粒子状態を見分ける。二体のポテンシャルはもとの基底を用いて、

$$\sum_{i,j} = \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \delta} |\alpha\beta\rangle V_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \gamma\delta|$$

であり、ここで、

$$V_{\alpha, \beta, \gamma, \delta} \equiv \langle \alpha\beta | V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | \gamma\delta \rangle$$

は反対称化され、規格化された二体の波動関数  $|\alpha\beta\rangle, |\gamma\delta\rangle$  の間の  $V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  の行列要素である。よって、(6-81) の左辺は以下ようになる。

$$h_{HF} = h + \sum_r \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \delta} \langle r | \alpha\beta \rangle V_{\alpha, \beta, \gamma, \delta} \langle \gamma\delta | r \rangle$$

これが Hartree-Fock の Hamiltonian である。二項目は一体の平均的なポテンシャル、あるいは平均場として解釈され、核におけるその他全ての核子との (二体) 相互作用の結果となっている。この演算子の形を用いて、固有値方程式は、

$$h|t\rangle + \sum_r \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \delta} \langle r | \alpha\beta \rangle V_{\alpha, \beta, \gamma, \delta} \langle \gamma\delta | rt \rangle = \epsilon_t |t\rangle$$

$\epsilon_t$  は Hartree-Fock 単一粒子エネルギーである<sup>4</sup>。この問題の計算は一見するほど簡単ではない。 $\langle r | \alpha\beta \rangle, \langle \gamma\delta | rt \rangle$  や  $\langle kr | V | tr \rangle$  を評価するのに、演繹的な解放の知識を必要とし、それら行列要素は計算の結果の一部である Hartree-Fock 基底で求められる。計算は調和振動子の波動関数のような任意の単一粒子の波動関数の集合からはじめる。得られた答えは一次の近似のみであり、その結果を用いて再び計算することで答えを修正できる。その答えが、つじつまの合う (自己無撞着) までその過程が繰り返され、得られた答えは行列要素を評価するのに用いられた波動関数に一致する。

Hartree-Fock の計算は核の低い状態を考察するのに広範囲に用いられている。しかし、それぞれの核の波動関数は1つの Slater 行列式からなるので、限定されたスピン、アイソスピンの状態に対応していない。実験データと比較できる計算された量を用いるために決まった J と T の状態が Hartree-Fock の波動関数から射影されなければならない。我々はスピンとアイソスピンの射影の後、変分計算が行われる projected Hartree-Fock への話題の拡張や、射影をどのように行うかの技術的な詳細は立ち入らない。しかし、ここでつじつまの合った単一粒子基底は、次に議論する殻模型同様、核の基底状態の理解において重要である。

<sup>4</sup>Hartree-Fock の Hamiltonian 及び、固有値方程式については Appendix3 を参照。

## Appendix1 三次元調和振動子の極座標における動径方向の波動関数を求める

三次元調和振動子の Hamiltonian は

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m}\mathbf{p}^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\mathbf{r}^2$$

で、Schrödinger 方程式は

$$\mathcal{H}\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$$

を解くが、ここで動径方向の波動関数  $R(r)$  と球面調和関数  $Y_l^m(\theta, \varphi)$  に分け、

$$\psi(\mathbf{r}) = R(r)Y_l^m(\theta, \varphi)$$

とすることで、動径方向の式が

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}r + \frac{1}{2}m\omega^2\mathbf{r}^2 + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}\right]R = ER$$

さらに、

$$R(r) = \frac{\chi(r)}{r}$$

とすることで、

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}\chi(r) + \frac{1}{2}m\omega^2\mathbf{r}^2\frac{\chi(r)}{r} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}\frac{\chi(r)}{r} &= E\frac{\chi(r)}{r} \\ \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{2}m\omega^2\mathbf{r}^2 + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}\right]\chi(r) &= E\chi(r) \\ \left[-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{2}\nu^2\mathbf{r}^2 + \frac{l(l+1)}{2r^2}\right]\chi(r) &= \epsilon\chi(r) \end{aligned}$$

ここで、

$$\nu \equiv \frac{m\omega}{\hbar}, \quad \epsilon \equiv \frac{mE}{\hbar^2}, \quad h \equiv \left[-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{2}\nu^2\mathbf{r}^2 + \frac{l(l+1)}{2r^2}\right], \quad \xi \equiv r^2$$

と定義する。

$$\frac{d}{dr} = 2\xi^{\frac{1}{2}}\frac{d}{d\xi}, \quad \frac{d^2}{dr^2} = 4\xi\left(\frac{d}{d\xi}\right)^2 + 4\xi^{\frac{1}{2}}\frac{1}{2\xi^{\frac{1}{2}}}\frac{d}{d\xi}$$

より、

$$h = -2\xi\frac{d^2}{d\xi^2} - \frac{d}{d\xi} + \frac{\nu^2}{2}\xi + \frac{l(l+1)}{2\xi}$$

ここで解を、

$$\chi(r) = e^{-\frac{\nu}{2}\xi}\xi^\beta v(\xi), \quad \beta = \frac{1}{2} + \frac{1}{2}$$

とする。  $\frac{d\chi}{d\xi}, \frac{d^2\chi}{d\xi^2}$  を地道に計算すると、

$$\frac{1}{e^{-\frac{\nu}{2}\xi}\xi^\beta}(h\chi(r)) = -2\xi\frac{d^2v}{d\xi^2} + [2^n u\xi - (2l+3)]\frac{dv}{d\xi} + \frac{\nu}{2}(2l+3)v$$

となる。よって、

$$\nu\xi \equiv \eta$$

とすることで、

$$\begin{aligned} \left[ -2\nu\eta\frac{d^2}{d\eta^2} + \{2\eta - (2l+3)\}\nu\frac{d}{d\eta} + \frac{\nu}{2}(2l+3) \right] v &= \epsilon v \\ \left[ \eta\frac{d^2}{d\eta^2} + \left(\frac{2l+3}{2} - \eta\right)\frac{d}{d\eta} + \left(\frac{\epsilon}{2\nu} - \frac{2l+3}{4}\right) \right] v &= 0 \end{aligned}$$

これを満たす関数  $v(\xi)$  は合流型超幾何関数であり、その性質から  $\epsilon$  が満たすべき式として、

$$\frac{\epsilon}{2\nu} - \frac{2l+3}{4} = n_r, \quad (n_r = 0, 1, 2, \dots)$$

すなわち、

$$E = \frac{\hbar\omega}{2}(4n_r + 2l + 3)$$

また、Laguerre 陪多項式の公式

$$\begin{aligned} \left[ x\frac{d^2}{dx^2} + (k+1-x)\frac{d}{dx} + n \right] L_n^k(x) &= 0 \\ \int_0^\infty e^{-x} x^k L_n^k(x) L_m^k(x) dx &= \frac{\Gamma(n+k+1)}{n!} \delta_{mn} \end{aligned}$$

また、Rodrigues の公式を用いて Laguerre 陪多項式を書くと、

$$L_n^k(x) = \frac{e^x x^{-k}}{n!} \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x} x^{n+k})$$

$R(r)$  は以下のようにかける。

$$R_{n_r l}(r) = A_{n_r l} r^l \exp\left(-\frac{1}{2}\nu^2 r^2\right) L_{n_r}^{l+\frac{1}{2}}(\nu^2 r^2) \quad A_{n_r l} : \text{規格化定数}$$

次に規格化定数を求める。

$$\nu^2 r^2 \equiv x$$

と変形すると、

$$r = \sqrt{\frac{x}{\nu^2}}, \quad dr = \frac{1}{\nu} \frac{1}{2\sqrt{2}} dx$$

なので、

$$A_{n_r l}^2 \int_0^\infty r^{2l} \exp(-\nu^2 r^2) L_{n_r}^{l+\frac{1}{2}}(\nu^2 r^2) L_{n_r}^{l+\frac{1}{2}}(\nu^2 r^2) r^2 dr = 1$$

$$A_{n_r l}^2 \int_0^\infty \left(\frac{x}{\nu^2}\right)^{l+1} \exp(-x) (L_{n_r}^{l+\frac{1}{2}}(x))^2 \frac{1}{\nu} \frac{1}{2\sqrt{2}} dx = 1$$

$$A_{n_r l}^2 \frac{1}{2\nu^{2l+3}} \int_0^\infty x^{l+\frac{1}{2}} \exp(-x) (L_{n_r}^{l+\frac{1}{2}}(x))^2 dx = 1$$

$$A_{n_r l}^2 \frac{1}{2\nu^{2l+3}} \frac{\Gamma(n_r + l + \frac{3}{2})}{n!} = 1$$

$$A_{n_r l} = \sqrt{\frac{2\nu^{2l+3} n!}{\Gamma(n_r + l + \frac{3}{2})}}$$

よって、三次元調和振動子の極座標における動径方向の波動関数は

$$R_{n_r l}(r) = \sqrt{\frac{2\nu^{2l+3} n!}{\Gamma(n_r + l + \frac{3}{2})}} r^l \exp\left(-\frac{1}{2}\nu^2 r^2\right) L_{n_r}^{l+\frac{1}{2}}(\nu^2 r^2)$$

となる。ここで注意すべきなのは、本書の表 6-2 の  $R_{nl}$  では、

$$n = n_r + 1$$

となっている。

参考文献

猪木慶治, 川合光 ; 量子力学 I, 講談社サイエンティフィク

高田健次郎, 池田清美 ; 原子核構造論, 朝倉物理学体系

George B.Arffen,Hans J.Weber ; MATHEMATICAL Methods for Physics, ELSEVIER ACADEMIC PRESS

## Appendix2 (6-81) の導出

### 第1項目

$$\begin{aligned}
 |\Psi_{kt}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{A!}} \sum_{\sigma \in S_N} \text{sgn}(\sigma) \phi_1(\mathbf{r}_{\sigma(1)}) \cdots \phi_{t-1}(\mathbf{r}_{\sigma(t-1)}) \phi_k(\mathbf{r}_{\sigma(t)}) \phi_{t+1}(\mathbf{r}_{\sigma(t+1)}) \cdots \phi_A(\mathbf{r}_{\sigma(A)}) \\
 &= \frac{1}{\sqrt{A!}} \sum_{\sigma \in S_N} (-1)^{t-1} \text{sgn}(\sigma) \phi_k(\mathbf{r}_{\sigma(1)}) \phi_1(\mathbf{r}_{\sigma(2)}) \cdots \phi_{t-1}(\mathbf{r}_{\sigma(t)}) \phi_{t+1}(\mathbf{r}_{\sigma(t+1)}) \cdots \phi_A(\mathbf{r}_{\sigma(A)})
 \end{aligned}$$

同様に、

$$\begin{aligned}
 |\Psi_0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{A!}} \sum_{\rho \in S_N} \text{sgn}(\rho) \phi_1(\mathbf{r}_{\rho(1)}) \cdots \phi_{t-1}(\mathbf{r}_{\rho(t-1)}) \phi_k(\mathbf{r}_{\rho(t)}) \phi_{t+1}(\mathbf{r}_{\rho(t+1)}) \cdots \phi_A(\mathbf{r}_{\rho(A)}) \\
 &= \frac{1}{\sqrt{A!}} \sum_{\rho \in S_N} (-1)^{t-1} \text{sgn}(\rho) \phi_k(\mathbf{r}_{\rho(1)}) \phi_1(\mathbf{r}_{\rho(2)}) \cdots \phi_{t-1}(\mathbf{r}_{\rho(t)}) \phi_{t+1}(\mathbf{r}_{\rho(t+1)}) \cdots \phi_A(\mathbf{r}_{\rho(A)})
 \end{aligned}$$

よって、これを計算すると、

$$\begin{aligned}
 \langle \Psi_{kt} | \sum_{i=1}^A h(\mathbf{r}_i) | \Psi_0 \rangle &= \frac{1}{A!} \sum_{\sigma \in S_N} \sum_{\rho \in S_N} \int (-1)^{t-1} \text{sgn}(\sigma) \{\phi_k(\mathbf{r}_{\sigma(1)}) \cdots\}^* \left( \sum_{i=1}^A h(\mathbf{r}_i) \right) \\
 &\quad \times (-1)^{t-1} \text{sgn}(\rho) \{\phi_t(\mathbf{r}_{\rho(1)}) \cdots\} d\mathbf{r}_1 \cdots d\mathbf{r}_A
 \end{aligned}$$

$i=1$  で  $\rho = \sigma$  の時しか積分は残らず、

$$\begin{aligned}
 \langle \Psi_{kt} | \sum_{i=1}^A h(\mathbf{r}_i) | \Psi_0 \rangle &= \frac{1}{A!} \sum_{\rho \in S_N} \int \{\phi_k(\mathbf{r}_{\rho(1)}) \cdots\}^* h(\mathbf{r}_1) \{\phi_t(\mathbf{r}_{\rho(1)}) \cdots\} d\mathbf{r}_{\rho(1)} \cdots d\mathbf{r}_{\rho(A)} \\
 &= \int \phi_k^*(\mathbf{r}) h(\mathbf{r}) \phi_t(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\
 &= \langle k|h|t \rangle
 \end{aligned}$$

### 第2項目

$$\langle \sum_{i \neq j=1}^A (V(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)) \rangle = A(A-1) \langle V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \rangle$$

$$\begin{aligned}
\langle \Psi_{kt} | \sum_{i \neq j=1}^A (V(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) | \Psi_0 \rangle &= \frac{A(A-1)}{A!} \sum_{\sigma \in S_N} \sum_{\rho \in S_N} \int (-1)^{t-1} \text{sgn}(\sigma) \{ \phi_k(\mathbf{r}_{\sigma(1)}) \cdots \}^* V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \\
&\quad \times \text{sgn}(\rho) \{ \phi_t(\mathbf{r}_{\rho(1)}) \cdots \} d\mathbf{r}_1 \cdots d\mathbf{r}_A \\
&= \frac{1}{(A-2)!} \sum_{\sigma \in S_N} \sum_{\rho \in S_N} \int (-1)^{t-1} \text{sgn}(\sigma) \{ \phi_k(\mathbf{r}_{\sigma(1)}) \cdots \}^* V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \\
&\quad \times \text{sgn}(\rho) \{ \phi_t(\mathbf{r}_{\rho(1)}) \cdots \} d\mathbf{r}_1 \cdots d\mathbf{r}_A
\end{aligned}$$

$\sigma(1) \in \{1,2\}, \sigma(2) \in \{1,2\}$  でないと積分は0で、 $k, t$  以外の変数について、 $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$  以外のものは同じ  $\mathbf{r}_i$  でないと積分しても0になる。その場合の数は  $(A-2)(A-3) \cdots 3$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2} \sum_r \sum_{\sigma \in S_2} \sum_{\rho \in S_2} \text{sgn}(\sigma) \text{sgn}(\rho) \int \phi_k^*(\mathbf{r}_{\sigma(1)}) \phi_r^*(\mathbf{r}_{\sigma(r)}) V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \\
&\quad \times \phi_t(\mathbf{r}_{\rho(1)}) \phi_r(\mathbf{r}_{\rho(r)}) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \\
&= \sum_r \langle kr | V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | tr \rangle
\end{aligned}$$

以上より (6-81) が導かれる。

## Appendix3 (6-85),(6-86) について

規格化されている条件として

$$\begin{aligned} (\langle \Phi_0 | + \langle \delta\Phi |)(|\delta\Phi\rangle + |\Phi_0\rangle) &= 1 \\ \langle \Phi_0 | \Phi_0\rangle + \langle \delta\Phi | \Phi_0\rangle + \langle \Phi_0 | \delta\Phi\rangle &= 1 \\ \langle \delta\Phi | \Phi_0\rangle + \langle \Phi_0 | \delta\Phi\rangle &= 0 \end{aligned}$$

となつて、 $\langle \delta\Phi | \Phi_0\rangle = 0$  を考える。この束縛条件を考えるので、未定乗数  $\epsilon_t$  として、

$$\begin{aligned} \langle \delta\Phi | \mathcal{H} | \Phi_0\rangle - \langle \delta\Phi | \Phi_0\rangle &= 0 \\ \sum \eta_{kt} \langle \Phi_{kt} | (\mathcal{H} | \phi_0\rangle - \epsilon_t | \phi_0\rangle) &= 0 \\ \sum \eta_{kt} \langle \Phi_{kt} | \left( \sum_{i=1}^A h(\mathbf{r})_i + \sum_{i \neq j=1}^A \right) V(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) - \epsilon_t | \phi_0\rangle &= 0 \\ \sum \eta_{kt} \{ \langle k | h | t\rangle + \sum_r \langle kr | V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | tr\rangle - \epsilon_t \langle k | t\rangle \} &= 0 \end{aligned}$$

任意の  $\eta_{kt}$  で成り立つには、

$$\begin{aligned} \langle k | h | t\rangle + \sum_r \langle rk | V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | rt\rangle - \epsilon_t \langle k | t\rangle &= 0 \\ \langle k | h | t\rangle + \langle k | \left( \sum_r \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \delta} \langle r | \alpha\beta\rangle V_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \gamma\delta | rt\rangle \right) &= \epsilon_t \langle k | t\rangle \end{aligned}$$

より (6-86) が得られる。また、左辺が  $\langle k | h_{HF} | t\rangle$  として、(6-85) となる。

(6-83) のように  $k$  についての座標を固定して考えることができるが、 $t$  の座標について積分する項も出てくる。これが、Hartree-Fock 方程式と Hartree 方程式の違いであり、これは反対称性を波動関数に課して、Slater 行列式の形にしたところに由来している。