

SPHERICAL SHELL MODEL

河崎

2006年11月10日

1 導入

shell model は核の状態を核子の自由度で記述するのがねらい。1p1h 型では Hartree-Fock 単一粒子基底での独立粒子モデルで十分。

残留相互作用による高次の相互関係が重要になる場合には、二体残留相互作用が必要で、shell model はこれに適している。

shell model の計算は単一粒子状態の集合から始まる。前節では、単一粒子状態を Hartree-Fock 基底に変形することで、粒子間相互作用の大部分が、平均一体場に含まれることを見た。

残留相互作用は十分に弱いので、多体系の固有値問題は完備空間の小さな部分空間で実行できる。つまり低励起状態では殆どの多体系基底を無視してもそれほど正確さが失われない。

shell model の残留相互作用を得て、適切な単一粒子の記述をするためには、核子散乱のポテンシャルを変形する必要がある。

加えて、考慮すべき点が二つある。一つは自由核子と束縛された核子では相互作用が異なること。以下簡単のため、束縛核子に合った相互作用を考える。

二つ目は、shell model 空間の縮小に関する。実用の観点からは、有効空間を出来るだけ小さくするのが望ましいので、個々には非常に小さな寄与しか持たない基底を非常にたくさん排除することが必要になる。これらの小さな寄与を考慮に入れるため、残留相互作用は再規格化してこの寄与の効果を平均的な方法で考慮できるようにする。

ここまで三つのステップが出てきた。単一粒子基底を選び、活性空間を選び、有効相互作用を導く。これらは相互に密接に関係し、計算のため選んだ単一粒子基底に依存する。

この章では球対称な基底における計算を行う。

2 Selection of the shell model space

まずは shell model 空間と有効相互作用の選択を行う。多体基底が単一粒子波動関数の積でできているので、shell model 空間の選択は通常 active な単一粒子状態の数を制限することで達成される。

球対称 shell model では各核子は固有のスピン s と決まった軌道角運動量 l を持つ。 A 個の核子による多体基底状態は結合して決まった全角運動量 J の状態を形成する。

角運動量の合成には二つの異なる方法がある。

1. LS-結合機構全軌道角運動量と全スピンの結合し、全角運動量は L と S を結合して得られる。
$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$$

2. jj-結合機構個々の核子の軌道角運動量とスピンの結合し、全角運動量はそれらを結合して得られる。
$$\mathbf{J} = \sum_{i=1}^A \mathbf{j}_i$$

ハミルトニアンが座標の回転に対して普遍なので、 J は良い量子数。さらに電磁相互作用による対称性の破れを無視すれば、アイソスピン T も運動の定数になる。それ故に、異なる J および T をもつ状態間のハミルトニアンの行列要素はゼロになる。よって、特定の (J, T) を持った部分空間で別々に計算することが出来、active space の大きさを劇的に小さく出来る。

他方では、active な一粒子状態が有限でない限り J, T が与えられてもまだ A -核子状態数は無限である。有限な shell model 空間を構成するには単一粒子状態の数を少なく制限しなければならない。これには二つの方向がある。

我々は主に、基底状態の近くのいくつかの状態に関心があるので、フェルミエネルギーのすぐ下の単一粒子状態を占める粒子を励起するだけでよい。これらは活性核子またはバレンス核子である。

もし低い一粒子状態のいくつかが決して励起されないならば、それらは不活性な芯を形成し、それらは活性空間から除外できる。これらのもつハミルトニアンへの寄与は二つのパートに分けられる。

一つは単一粒子エネルギーやコア内の核子間の相互作用の寄与からなる定数項で、全束縛エネルギーを計算するとき以外はエネルギーのゼロ点の取り方により無視できる。

二つ目はバレンス核子の束縛エネルギーへの寄与。これらは無視できないが、バレンス核子の単一粒子エネルギーの定義の中に簡単に取り入れることが出来、結果として計算ではコア核子をいちいち考える必要がなくなる。

また、フェルミエネルギーより遥かに高い順位を粒子が占める状態は本質的に常に空であり、無視できる。

要約すると、単一粒子状態は3つに分割される。コア状態、空の状態、そして活性状態。shell model の狙いは単一粒子状態からなる多体基底を持つ固有値問題を、活性空間内だけで解くことである。

3 Effective Hamiltonian

shell model 空間において適切なハミルトニアンは何か？この節の始めでは、Hartree-Fock の単一粒子基底と一体系と二体系のパートの和からなるハミルトニアンを考える。

一体系の部分は運動エネルギーと、原子核内の他の全ての核子との平均的な相互作用による、個々の核子に働く平均場からなる。

二体系の部分は、平均場では考慮されない核子間相互作用である残留相互作用から成る。

さらに、このハミルトニアンを変形して、shell model 空間が扱いやすい大きさに制限された時、無視された状態の効果が平均的な方法で計算で考慮されるような有効ハミルトニアンを代わりに用いる。

d次元の有限な shell model 空間への射影演算子を P とする。完備なヒルベルト空間における真のハミルトニアン H による固有値問題を

$$H\Psi_i = E_i\Psi_i \quad (1)$$

とするならば、理想的な有効ハミルトニアンは以下の条件を満たす。

$$H_{eff}P\Psi_i = E_iP\Psi_i \quad (2)$$

つまり、完備空間の真のハミルトニアンで解いた場合と同じ固有値を与えるものが有効ハミルトニアンである。一般に、縮小された shell model 空間で全ての d に付いてこの条件を満たすのは不可能だが、我々の関心は低い状態の d より遥かに少ない数の状態にしか興味が無いので問題ない。

有効ハミルトニアンは一体の部分と有効相互作用の二つの項の和で書ける。

$$H_{eff} = H_0 + V_{eff} \quad (3)$$

一体部分は Hartree-Fock の一粒子ハミルトニアンの和でかける。

$$H_0 = \sum_i h(r_i) = \sum_i \epsilon_i n_i \quad (4)$$

ϵ_i は一粒子状態のエネルギーで n_i は一粒子状態の数演算子。

式(6-86)で定義された ϵ_i はコアの核子の寄与も含まれていると理解される。実際的には ϵ_i をこの領域の一粒子状態の観測されたエネルギー順位で置き換えるのが一般的。 ϵ_i の測定は、閉殻外に核子一つを持つ原子核で、低エネルギー状態のいくつか、主に一核子もしくは一空孔が閉殻原子核の基底状態と結合することで形成されているような核において成されている。そのような状態はまさに Hartree-Fock の固有ベクトルで記述される状態であり、現実のハミルトニアンがもし Hartree-Fock の計算で用いられれば実験値と同じ固有値が得られる。

閉殻から離れた原子核では 1p1h 以外の相互関係が効いてきて Hartree-Fock はもはや良い近似ではなくなる。このために、それぞれの単一粒子状態の強さがいくつかの核状態に共有される事になる。例えば、もし一核子移行反応の spectroscopic factor から、各状態への部分的な強さが分かれば、単一粒子状態の位置が強度分布の重心をとることで得られる。このような " 実験的な " 単一粒子状態のエネルギーが得られる限り、Hartree-Fock の値の代わりにこのような測定値を使うのは良い近似となる。

以下の計算では、有効相互作用が二体の特性にとどまっていると考える。

計算の結果有効相互作用は以下のように書ける。

$$V_{eff} = V + VQ \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{1}{E - H_0} QV \right)^n \quad (5)$$

もし級数が収束するなら、望むオーダーの精度で有効相互作用が計算できる。さらに我々の選んだ基底では H_0 は対角化されるので、分母の H_0 は単独粒子エネルギーの和で置き換えられる。

しかしながら実際に級数が収束するという証明は知られていない。さらには自明でない P 空間において 3 次以上の計算を行うのは実際簡単ではない。このような困難にもかかわらず、自由核子散乱のデータをフィットする現実的なポテンシャルから始めてほしい二次まで計算すると、これを用いた shell model の結果はさまざまな実験データに一致する。

上で述べた有効相互作用を見つける手法は再規格化として知られている。というのも、完備ヒルベルト空間に対する相互作用を縮小した空間に適したものに再規格化するからである。

有効相互作用と核子間相互作用との繋がりを調べるのも価値がある。

2章では核子間相互作用はクォーク間の基本的な強い相互作用の一面であるという事から議論したが現時点で QCD の知識は核相互作用を導くには不十分であり、結果中間子交換描像プラス実験的なハードコアといった経験的な手法が用いられている。

原子核物理における現実的な相互作用は普通、核子核子散乱と他の二核子系のデータをフィットするものに取りられている。

自由核子間相互作用を核構造問題に適合させるために、自由核子と束縛核子の違いや、off-shell 効果の問題を（例えば現実的なポテンシャルを構成することで）解決しなければならない。このようなポテンシャルを用いると、Hartree-Fock 型の計算が相互作用を残留相互作用に変えるのに使えて、そして上で述べた方法で扱いやすい shell model 空間における計算のための有効相互作用に変えることができる。

核子核子ポテンシャルから有効ポテンシャルへのこの完全なプロセスは非常に複雑で実際はほんのわずかな場合しか実行できない。

ここで理解すべき重要な点は、少なくとも原理的には一連の明確な手法を通して”有効”shell model ポテンシャルと”基本的な”核子核子ポテンシャルの明確な繋がりを得ることが出来るということである。

低エネルギー QCD の計算や off-shell 効果のような、間にあるいくつかのステップがまだ解決していないにも拘らず、繋がりは存在する。

現実的な適用のために、単純化が必要であり、いくつかの半経験的な手法が shell model 有効相互作用を得るために発展している。

4 Two-body matrix elements

有限活性空間では、もしその空間における全ての独立な行列要素が得られたなら、二体演算子は完全に指定される。それ故有効相互作用 V_{eff} もまた活性空間内の全ての独立な行列要素によって定義できる。

ここで必要となる二体行列要素は、以前出てきた $V_{\alpha\beta\gamma\delta}$ とはわずかに異なる。というのは我々は決まった (J,T) を持った shell model 空間の部分空間で作業したいからである。このため決まった J と T を持った 2 粒子状態によって得られた二体行列要素の定義を用いるのが便利。この枠組みで、反対称化され、規格化された

二体行列要素は

$$W_{rstu}^{JT} \equiv \langle rsJT | V | tuJT \rangle \quad (6)$$

と書ける。r, s は粒子 1, 2 の単一粒子状態で、J, T は二つの状態が結合して出来た角運動量とアイソスピンである。これにより有効相互作用は次のように書ける。

$$V_{eff} = \sum_{rstuJT} |rsJT\rangle W_{rstu}^{JT} \langle tuJT| \quad (7)$$

核ハミルトニアンはスピンとアイソスピンにおいてスカラーなので、角運動量とアイソスピンの選択則結果として J と T において対角な行列要素のみが消えずに残る。

他の対称性も、有効相互作用の定義に必要な、独立な行列要素の数を減らすのに役立つ。
時間反転不変性より行列要素は実数かつ対称に取れる。すなわち

$$W_{rstu}^{JT} = W_{turs}^{JT} \quad (8)$$

さらに、波動関数が反対称化されているので、含まれている 2 つの単独粒子波動関数を交換しただけの違いしかない二つの波動関数は位相因子によって結び付けられる。

$$|rsJT\rangle = (-1)^{j_r+j_s-J-T} |srJT\rangle \quad (9)$$

この関係より、つぎの対称性が二体行列要素の間に存在する。

$$W_{rstu}^{JT} = (-1)^{j_r+j_s-J-T} W_{srtu}^{JT} = (-1)^{j_t+j_u-J-T} W_{rsut}^{JT} = (-1)^{j_r+j_s-j_t-j_u} W_{srut}^{JT} \quad (10)$$

これらの関係式から必要な独立な行列要素の数を減らせる。実際、適度な活性空間における行列要素の数は十分少ないので、必要な行列要素を得られたデータで fitting することで有効相互作用を実験的に決めることが出来る。

5 Semi-empirical effective interaction

有効相互作用に対する半経験的な手法の例としてカルシウム同位体が示されている。 ^{41}Ca から ^{48}Ca までは $1f_{7/2}$ 軌道のみから成る shell model 空間で近似できる。不活性な芯は ^{40}Ca の原子核で、 $1s, 1p, 1d, 2s$ を満たす 40 個の核子は、これらの軌道外へ励起されることは無い。この場合全ての活性核子は中性子である。 $1f_{7/2}$ 軌道は最大 $(2j+1) = 8$ 個の中性子が入るので、 ^{48}Ca まで来ると活性空間が完全に満たされる。

^{40}Ca と ^{41}Ca の束縛エネルギーの差は $1f_{7/2}$ 軌道の単一粒子エネルギーを提供する。 $\epsilon_{1f_{7/2}} = -8.36\text{MeV}$ は質量超過のテーブルから得られた値。

同様の方法で、 ^{42}Ca における ^{40}Ca のコアに対する中性子 2 個の束縛エネルギーを計算できる。得られた結果 -19.84MeV は $\epsilon_{1f_{7/2}} = -8.36\text{MeV}$ の二倍の値と異なる。この差から、有効相互作用を指定するのに必要な実験的情報の一つが得られる。

^{42}Ca の基底状態が $(J, P) = (0, 1)$ なので、 ^{42}Ca の束縛エネルギーから中性子 2 個の単独粒子エネルギーの寄与を取り除くと、 $(J, P) = (0, 1)$ の二体行列要素が得られる。

$$W_{1f_{7/2}^1 1f_{7/2}^1 1f_{7/2}^1 1f_{7/2}^1}^{01} = -19.84 - (2 \times -8.36) = -3.12\text{MeV} \quad (11)$$

反対称性の要求から、 $1f_{7/2}$ 軌道の二つの中性子が結合すると $J = 0, 2, 3, 6$ にしかなれない。それ故この簡単な shell model 空間における有効相互作用の定義を完成するにはさらに3つの二体行列要素が必要になる。 ^{42}Ca において $J = 2, 3, 6$ の励起状態に $1.53, 2.76, 3.19\text{MeV}$ の励起エネルギーがそれぞれ対応する。

教科書では簡単のために余分な添え字を落としている。

これら5つの情報から $1f_{7/2}$ の中性子の shell model に対する完全な有効ハミルトニアンが得られる。即ち一つの単独粒子エネルギーと4つの二体行列要素である。

$$\epsilon = -8.36\text{MeV}, \quad W^0 = -3.12\text{MeV}, \quad W^2 = -1.59\text{MeV}$$

$$W^4 = -0.364\text{MeV}, \quad W^6 = 0.0728\text{MeV}$$

今我々は、 ^{41}Ca と ^{42}Ca から得られたこれら五つの入力から ^{43}Ca から ^{48}Ca までの $1f_{7/2}$ shell model 空間における全てのエネルギー順位を計算するという立場に立つ。(Table 6-3 参照)

^{40}Ca のコアに対する束縛エネルギーが最初の行で与えられている。表に記載されている値に加えて、 ^{47}Ca と ^{48}Ca についてそれぞれ $68.58, 80.29\text{MeV}$ と計算されるが、これらは測定値 63.99 および 73.94MeV と比べてずれている。

6つの束縛エネルギーをより詳しく見てみると、活性中性子の数が増えるに従って計算値と実験値のずれがますますひどくなるのが分かる。実際ちょっと計算してみれば、このずれが大体 $n(n-1)/2$ のファクターに比例することが示せる。これは中性子ペアの数である。

このことは、 ^{41}Ca と ^{42}Ca の差から導いた有効相互作用が少し強すぎるということの意味している。もし有効相互作用における、 ^{42}Ca の束縛エネルギーによる寄与を 0.21MeV 減らせば、全体的に観測された値により良く一致した計算値を得ることが出来る。

一方、もし差が活性中性子数に比例するならば、それは単独粒子エネルギーによるものであったであろう。

また、行列要素の定義におけるこのような全体的な変化では一般に、表に与えられた励起エネルギーは影響を受けない。

励起状態のエネルギーレベルの計算値も実験値と一緒に6-3に載せてある。明らかに、リストされたもの以上の励起状態が存在する。我々の model 空間は $1f_{7/2}$ 軌道だけに制限されているので、この空間に属する観測されたレベルのみが比較されている。原理的には、一核子移行反応によって $1f_{7/2}$ レベルを同定できる。

実際、 $2p_{3/2}$ や $2p_{1/2}$ といった他の単独粒子状態からの寄与の混合の存在が予想されるので、同定は必ずしも簡単ではない。それ故、表中の計算値と測定値との比較は、この説明的な例証に対し用いられたモデル空間の単純さを考慮して見なければならぬ。実際、我々が予期したものより一致はよい。

自明ではないが比較的簡単な例は 1p-shell である。これは ^5He から ^{16}O までの原子核で構成されている。不活性な芯は ^4He であり、陽子と中性子が二つずつ $1s_{1/2}$ を完全に満たしている。

ds-shell から始まる 1p-shell より上の全ての単独粒子状態は空である。

j-j 結合の枠組みの中で、この空間における活性軌道は $1p_{3/2}$ と $1p_{1/2}$ の二つ存在する。そしてそれ故に有効ハミルトニアンの一部分は $\epsilon_{1p_{3/2}}$ と $\epsilon_{1p_{1/2}}$ の二つの単独粒子状態で定義される。

1p-shell において許容される (J,T) の組のそれぞれに対する二粒子状態の数が Table 6-4 にある。(6-110,111) の対称性のために、与えられた (J,T) に対する二体残留相互作用を指定するのに必要な、独立な二体

行列要素の数は

$$d_{JT} = n(n+1)/2 \quad (12)$$

である。この shell model 空間における二体行列要素の数の合計は

$$\sum_{JT} d_{JT} = 15 \quad (13)$$

完全な 1p-shell の有効相互作用は、これら 17 個のパラメータから成る。

$1f_{7/2}$ の時と同様の方法で ${}^5\text{He}$ と +1 核子の原子核のエネルギー順位から 17 個のパラメータを見つけるのは不可能である。しかしながら $A = 5 \sim 16$ の原子核の全ての 1p-shell 状態が、これら 17 個のパラメータから計算できるので、我々は有効相互作用の行列要素を決定するのにこれらの原子核のいかなる 1 p-shell のデータも用いることが出来る。実際、この質量領域では 17 個以上の実験データがあり、データに最も良くフィットするパラメータの値を最小二乗法を使って推定することが出来る。

この計算は二つの目的に役立つ。

一つめは、半経験的有效ハミルトニアン背後にあるアイデアが有効であることを示すことである。行列要素の計算には高次の非線形最小二乗法が用いられるが、フィットの結果が実際のデータと良く一致していれば、shell model と有効ハミルトニアンが妥当であることを示せる。

二つ目は、17 個のパラメータを用いて同じ空間内の他の核の特性を研究できることである。

${}^{17}\text{O} \sim {}^{40}\text{Ca}$ からなる ds-shell についても同様に計算されている。 $1d_{5/2}, 1d_{3/2}, 2s_{1/2}$
この際必要なパラメータは、3つの単一粒子エネルギーと63個の二体行列要素である。

6 Examples of shell model results

微視的な shell model 計算の例をいくつか見ていく。

§ 6-1 で見たように、ある原子核の励起状態は核子の集団的な振動と理解できる。そこでは観測される特性は形状パラメータ $a_{\lambda\mu}$ の調和振動で記述されていた。

例として ${}^{62}\text{Ni}$ を見る。基底状態は 0^+ で典型的な偶偶核、第一励起状態は 2^+ で 1.17MeV。三重状態の $0^+, 2^+, 4^+$ の励起エネルギーは 2.05MeV で、第一励起エネルギーの二倍の 2.34MeV より小さい。これらの状態は、0フォノン、1フォノン、2フォノン状態に対応し、E2 遷移レート (table6-1) もこの解釈を裏付けている。

ここで ${}^{62}\text{Ni}$ を shell model で扱う。 ${}^{56}\text{Ni}$ のコアの外の6つの中性子が単一粒子軌道 $1f_{5/2}, 2p_{3/2}, 2p_{1/2}$ の shell model 空間で運動している。

この計算結果が Fig.6-17 に示されているが、得られたエネルギーレベルは、データに一致して典型的な振動核の構造を示している。

次に、得られた固有ベクトルを用いて電磁気的な特性を考える。

振動核では主な電磁気的な遷移は電荷の流れによる E2 遷移である。原子核内の電流は普通陽子の運動に係るので、活性中性子の "裸の" 電荷を用いると、計算の結果が0になる。これは shell model 空間の狭さが原因である。そこで E2 遷移演算子も "再規格化" しなければならない。通常やり方としては中性子に有効電荷を与えてその大きさが E2 遷移レートと四重極モーメントにフィットするように調節する。

二つ目の例としては ^{20}Ne の低エネルギー状態 (Fig6-18) があげられている。

エネルギーレベルは E_j が本質的に、 $J=8$ まで $J(J+1)$ に比例するような回転構造を示している。

shell model 計算では ^{16}O を不活性芯として 2 陽子、2 中性子が $1d_{5/2}, 1d_{3/2}, 2s_{1/2}$ の単一粒子状態にある。(Fig6-18) のように、この計算結果もエネルギーレベルを良く表している。(Table 6-5) の E2 遷移レートの計算には有効電荷 0.5e が用いられている。

ここで大事なことは、集団現象の微視的な解釈が、非常に縮小された活性空間内の、非常に少ない数の活性中性子によって与えられたということ。

7 Effective operator

E2 遷移演算子におけるおおきな有効電荷の原因は、shell model 計算における活性核子の数が比較的少ないことに起因する。エネルギーレベルはうまくいっても、集団状態に対する E2 遷移レートに見られる大きな励起を生むには数が少ないと不十分なのである。 ^{20}Ne のような平衡状態の形の変形や、 ^{62}Ni のような形の振動は主に四重極の性質であるので、E2 遷移に対する有効電荷と真の電荷の違いが最も顕著であっても驚くことは無い。

集団現象が、不活性コアないの核子も含むような、多数の核子の運動であるので、大きな有効電荷が必要になる。また、コアの核子を含むような大きな励起でも有効電荷の形式における単純なファクターを考えるだけでよいのは興味深い。

簡単な方法での修正可能性が、演算子の再規格化の背後の基本的なアイデアである。

もう一つの簡単な有効演算子の例は、例えば電子散乱で得られる電荷形状因子 $F^2(q)$ である。

以前やったように、電荷形状因子は原子核の電荷分布のフーリエ変換である。 ^{12}C と ^{16}O の測定結果が Fig.6-19 である。

^{12}C では極小点が一つしかないが、これは 1p-shell の核の電荷分布で期待される結果である。

一方 ^{16}O では極小が二つ観測されている。単純な shell model では、 ^{16}O の基底状態は活性核子はやはり 1p-shell にある。

二つ目の極小の存在は、ds-shell への励起状態の混合の存在を意味している。

もし ^{16}O の計算を 1p-shell 空間のみでしたければ、修正因子として例えば

$$f(r) = 1 - e^{-\alpha r^2}$$

のような因子が必要。このような修正因子は電荷形状因子に対する演算子の再規格化と見なされる。

必ずしも全ての演算子が大きな再規格化を必要とするわけではない。例えば ds-shell の Gamow-Teller 遷移は特に修正されない裸の演算子で与えられる。このことは、 β 崩壊が、例えば E2 遷移のような集団的な現象ではないという事実に関係している。

shell model 空間の縮小効果に加えて、原子核内の中間子や他の自由度のために、裸の核子の値からの励起演算子の再規格化も必要になる。

核子が核内に埋め込まれると、仮想中間子の交換のような過程が自由核子の場合と異なることが期待さ

れる。

近年、このような再規格化の効果を場の理論の手法で得るといふ、原子核 shell model における興味深い発展が成されている。この方法で、原子核内の核子の振る舞いについての、より良く、より基本的な理解が得られるかもしれない。

shell model は有限な核における個々の核子の自由度に直接繋がっているため、shell model はまた他のモデルをテストするためのデータを模擬実験で得るのに使われる。

他の分野同様、データを補い、実験的に調べるのが難しい性質を調べるのに役に立つ。このような数値的な”実験”は実際の観測の代わりにはならないが、モデルや物理状態の理解のテストに便利な手段を与えてくれ、それ故原子核の知識を深める道具として役に立つ。