

## 7 原子核の殻模型 (Shell model of nuclei)

重い原子核に対する Schrödinger 方程式 (例えば  $A = 200$  体問題) は解けないので、平均場近似 を使う。

平均ポテンシャルの概念：原子核中の1個の核子に着目すると、その核子が他の  $A - 1$  個の核子との相互作用のため、位置  $\vec{r}$  に依存する次の「平均ポテンシャル」を感じている：

$$U(\vec{r}) = \sum_{i=1}^{A-1} \int d^3r_i V(\vec{r} - \vec{r}_i) P_i(\vec{r}_i) \quad (7.1)$$

ただし、 $V$  は核力、 $P_i(\vec{r}_i)$  は核子  $i$  を位置  $\vec{r}_i$  で見出す確率である。

$$U(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^{A-1} \quad \begin{array}{c} | \\ | \\ \text{---} V(\mathbf{r}-\mathbf{r}_i) \text{---} \\ | \\ | \\ | \\ \mathbf{r} \qquad \qquad \mathbf{r}_i \\ | \\ | \\ | \\ \mathbf{i} \end{array}$$

核力の到達距離は原子核の大きさのスケールで短い(短距離の力)ので、ここで delta 関数で近似する： $V(\vec{r} - \vec{r}_i) \rightarrow -k\delta^{(3)}(\vec{r} - \vec{r}_i)$ 。ただし、 $k > 0$  は定数である。従って、

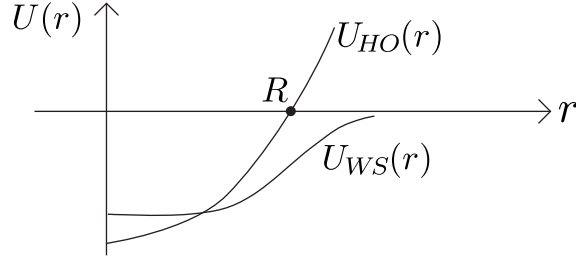
$$U(\vec{r}) \simeq -k \sum_{i=1}^{A-1} P_i(\vec{r}) = -k\rho_{A-1}(\vec{r}) \simeq -k\rho_A(\vec{r}) \quad (7.2)$$

となる。ただし、 $\rho_{A-1}(r)$  は、質量数  $A - 1$  の原子核中の核子密度分布であり、 $A$  が大きいときに  $\rho_{A-1}(r) \simeq \rho_A(r)$  が成り立つ。電子散乱の実験データから、その密度分布  $\rho_A(r)$  は Fermi 型関数であることが分かっている (第3章に参照) ので、平均ポテンシャルは次

の “Woods-Saxon” 型ポテンシャル ( $U_{WS}$ ) となる :

$$U(r) = U_{WS}(r) = \frac{-U_0}{1 + e^{(r-R)/a}}$$

$$U_0 \simeq 50\text{MeV}, \quad R = 1.1 A^{1/3} \text{ fm}$$



この Woods-Saxon 型ポテンシャルを使って、核子一個々の Schrödinger 方程式を解けばよい。それは数値計算で可能だが、式で表せない  
ので、ここで Woods-Saxon 型ポテンシャルを更に調和振動子ポテンシャル  
(harmonic oscillator potential  $U_{HO}(r)$ ) で近似する<sup>1</sup> :

$$U_{HO}(r) = -V_0 + \frac{1}{2}M\omega^2 r^2$$

ただし、図のように  $r = R$  (原子核の半径) のところで  $U_{HO}(r)$  がゼロとなるように  $\omega$  の値を決定する :

$$U_{HO}(r = R) = 0 \Rightarrow \frac{1}{2}M\omega^2 R^2 = V_0$$

$$\omega = \sqrt{\frac{2V_0}{MR^2}} \Rightarrow \hbar\omega = \sqrt{\frac{2V_0(\hbar c)^2}{(Mc^2)R^2}}$$

$$= \sqrt{\frac{2 \times 50 \times (197)^2}{940 \times (1.1 \times A^{1/3})^2}} \text{ MeV} = 58 A^{-1/3} \text{ MeV}$$

(それは経験的な値  $\hbar\omega = 41A^{-1/3} \text{ MeV}$  よりも少し大きい。)

<sup>1</sup> $M$  は核子の質量で、 $\omega$  と古典力学の「バネ定数」( $k$ ) との関係は  $\omega = \sqrt{k/M}$ .

原子核についての Schrödinger 方程式は、平均場近似の範囲で次のようになる：

$$\left( \sum_{i=1}^A H_i(\vec{r}_i) \right) \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_A) = E \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_A) \quad (7.3)$$

ただし、核子  $i$  についての 1 粒子ハミルトニアンは

$$H_i(\vec{r}_i) = \frac{p_i^2}{2M} + \frac{M\omega^2}{2} r_i^2 - V_0 \quad (7.4)$$

ここで波動関数  $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_A)$  は次の積で書けることを仮定する（「変数分類」の方法）：

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_A) = \psi_1(\vec{r}_1) \cdot \psi_2(\vec{r}_2) \cdot \dots \cdot \psi_A(\vec{r}_A)$$

それを (7.3) 式に代入すると、それぞれの 1 粒子波動関数は次の Schrödinger 方程式を満たせばよい：

$$\left( \frac{p_i^2}{2M} + \frac{M\omega^2}{2} r_i^2 - V_0 \right) \psi_i(\vec{r}_i) = \varepsilon_i \psi_i(\vec{r}_i) \quad (7.5)$$

ただし、原子核の全エネルギー  $E$  は、1 粒子のエネルギー  $\varepsilon_i$  の和となる：

$$E = \varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \dots + \varepsilon_A$$

結局、3次元調和振動子ポテンシャルに対する 1 粒子の Schrödinger 方程式 (7.5) を解けばよい。

この問題を 1次元の Schrödinger 方程式に帰着できる ( $\Rightarrow$  講義「量子力学 I」に参照)。なぜならば、1 粒子のハミルトニアン (7.4) を次のように書けるからである<sup>2</sup>：

$$\begin{aligned} H &= \frac{p^2}{2M} + \frac{M\omega^2}{2} r^2 = \frac{1}{2M} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + \frac{M\omega^2}{2} (x^2 + y^2 + z^2) \\ &= H_x + H_y + H_z \end{aligned}$$

<sup>2</sup>定数  $V_0$  は 1 粒子のエネルギー固有値のシフト ( $\varepsilon \rightarrow \varepsilon - V_0$ ) だけ及ぼし、波動関数に影響しないから以下の式では省略する。

従って、1 粒子の Schrödinger 方程式

$$H \psi(x, y, z) = \varepsilon \psi(x, y, z)$$

の波動関数は次の積で書ける ( $\Rightarrow$  変数分類の方法):

$$\psi(x, y, z) = X(x) \cdot Y(y) \cdot Z(z)$$

ただし、関数  $X(x), Y(y), Z(z)$  はそれぞれ  $x, y, z$  方向についての 1 次元調和振動子の Schrödinger 方程式を満たす:

$$H_x X(x) = \varepsilon_1 X(x)$$

$$H_y Y(y) = \varepsilon_2 Y(y)$$

$$H_z Z(z) = \varepsilon_3 Z(z)$$

3 次元調和振動子のエネルギー  $\varepsilon$  は 1 次元調和振動子のエネルギーの和である:

$$\varepsilon = \varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_3$$

1 次元の調和振動子の波動関数と固有値は講義「量子力学 I」で勉強した: 例えば  $x$  方向について、

$$X(x) \equiv \phi_n(x) = N_n e^{-\frac{M\omega x^2}{2\hbar}} H_n\left(\sqrt{\frac{M\omega}{\hbar}}x\right)$$

$$\varepsilon_1 \equiv \varepsilon_{1n} = \hbar\omega\left(\frac{1}{2} + n\right)$$

但し、 $n = 0, 1, 2, \dots$  で、波動関数は Gauss 関数と多項式  $H_n(x)$  (Hermite 多項式) の積である。 $n$  は偶数のときに  $H_n(x)$  が偶のべきのみ、 $n$  は奇数のときに奇のべきのみをもつ。例えば、

$$H_0(x) = 1, \quad H_1(x) = 2x, \quad H_2(x) = 4x^2 - 1,$$

$$H_3(x) = 8x^3 - 12x \dots$$

即ち、 $n =$  偶数のときの波動関数のパリティが  $P = +1$ ,  $n =$  奇数のときの波動関数のパリティが  $P = -1$ . 従って、 $\phi_n(x)$  のパ

リティーは  $P = (-1)^n$  である。

結局、3次元の調和振動子の波動関数と固有値が次のようになる：

$$\psi_{n_1 n_2 n_3}(x, y, z) = \phi_{n_1}(x)\phi_{n_2}(y)\phi_{n_3}(z)$$

$$\varepsilon_n = \hbar\omega\left(\frac{3}{2} + n\right)$$

$$n = n_1 + n_2 + n_3 = 0, 1, 2, \dots : \text{principal quantum number}$$

この波動関数のパリティーは  $P = (-1)^{n_1}(-1)^{n_2}(-1)^{n_3} = (-1)^n$  である。

波動関数（状態）が  $(n_1, n_2, n_3)$  に依存するが、エネルギーが主量子数  $n = n_1 + n_2 + n_3$  のみに依存する。

「縮重度」（degeneracy）とは、同じエネルギーをもつ状態の数で定義されている。従って、エネルギー順と縮重度は次のようになる<sup>3</sup>：

		縮重度	total
$n = 3$		20	40
$n = 2$	$\overline{(200)} \quad \overline{(020)} \quad \overline{(002)} \quad \overline{(110)} \quad \overline{(011)} \quad \overline{(101)}$	12	20
$n = 1$	$\overline{(100)} \quad \overline{(010)} \quad \overline{(001)}$	6	8
$n = 0$	$\overline{(000)}$	2	2

ここ、 $(n_1 n_2 n_3)$  は状態  $\phi_{n_1}(x)\phi_{n_2}(y)\phi_{n_3}(z)$  を表している。この図は、最初の3つの「殻」を示している。即ち、原子核の殻構造は自然に現れた。満杯の殻のみをもつ原子核は特別安定である。

<sup>3</sup>核子のスピン向きは2通りがあるので、純粋の調和振動子の縮重度を2倍にした。 $n = 3$  の場合は各自で状態を記入して、縮重度 (20) を確認しないさい。

原子核の魔法数 (magic number): 特別安定な原子核の陽子の数 ( $Z$ ) および中性子の数 ( $N$ ). 例えば中性子の数 ( $N$ ) が魔法数である場合は、その原子核から 1 個の中性子を抜け出すために必要なエネルギーは、隣りのアイソトープ (中性子の数は  $N + 1$ ) の場合よりも非常に大きい。

殻模型では、「魔法数」をもつ原子核は、完全につまった核子の殻をもつ。従って、上の調和振動子の計算では、「魔法数」は次のようになる：

$$Z \text{ or } N = 2, 8, 20, 40, 70, \dots$$

しかし、実験で観測された魔法数 (特別安定な原子核の陽子の数および中性子の数)は

$$Z \text{ or } N = 2, 8, 20, 28, 50, 82, 126$$

である。

この魔法数を殻模型で説明するために、調和振動子ポテンシャルだけでなく、更に次の「スピン・軌道ポテンシャル」 (spin-orbit potential) を加える必要性がある：

$$V_{ls} = -\alpha \vec{l} \cdot \vec{s}$$

ここは  $\alpha > 0$  は定数、 $\vec{l}$ ,  $\vec{s}$  は 1 粒子の軌道角運動量とスピン演算子である。結局、 $V_{ls}$  を調和振動子のハミルトニアンに加えて、Schrödinger 方程式を解き直すことになる。

そのための準備として、まず調和振動子の固有状態 ( $\psi_{n_1 n_2 n_3}(x, y, z)$ ) を  $n_1, n_2, n_3$  でなく、軌道角運動量  $l\hbar$  ( $l = 0, 1, 2, \dots$ ) で現すことにする。そのために、次のことを思い出す：

1. 軌道角運動量の大きさは  $l\hbar$  のときに、状態の縮重度は  $2(2l+1)$  である。なぜならば、軌道角運動量  $l\hbar$  の向きは  $2l + 1$  通りがあり、更にスピンの向きは 2 通りがあるので、合計  $2(2l+1)$  個の状態は皆同じエネルギーをもつ。

2. 軌道角運動量  $l\hbar$  の波動関数のパリティは  $(-1)^l$  である。

それを使って、3次元の調和振動子のエネルギー順位と縮重度は次のようになることが推測できる<sup>4</sup>。

	$l=0$	$l=1$	$l=2$	$l=3$	縮重度	total
$n=3$		$\overline{3p}$		$\overline{3f}$	20	40
$n=2$	$\overline{2s}$		$\overline{2d}$		12	20
$n=1$		$\overline{1p}$			6	8
$n=0$	$\overline{0s}$				2	2

この表は、それぞれの殻 ( $n=0, 1, 2, \dots$ ) に含まれている軌道角運動量の状態を表している。例えば、 $1p$  とは、 $n=1, l=1\hbar$  の状態を表している。

以上は調和振動子ポテンシャル ( $U_{\text{HO}}$ ) についての理論だったが、もっと現実的な Woods-Saxon ポテンシャル ( $U_{\text{WS}}$ ) を使う場合はエネルギー順位は次のように変わってくる (p.2 の図に参照)：

- $r$  が小さいときに  $|U_{\text{WS}}| < |U_{\text{HO}}|$  で、逆に  $r$  が大きいときに  $|U_{\text{WS}}| > |U_{\text{HO}}|$  である。即ち、 $U_{\text{WS}}$  を使うと、原子核の中心 ( $r=0$ ) に近い軌道のエネルギーが上がり、原子核の中心から遠い軌道のエネルギーが下がってくる。
- 軌道角運動量が高いときに、遠心力の影響で軌道の半径が大きくなる。従って、 $U_{\text{WS}}$  を使うと、軌道角運動量が高い軌道のエネルギーが下がってくる。

しかし、それらの効果を入れても原子核の魔法数は説明できない (次の表に参照。)

<sup>4</sup>この表と p.5 の表では、各  $n$  のとき同じ縮重度、同じパティになることを自分で確認して下さい。

	$\ell=0$	$\ell=1$	$\ell=2$	$\ell=3$	total
$n=3$		$\overline{3p}$		$\overline{\overline{3f}}$	40
$n=2$	$\overline{2s}$		$\overline{\overline{2d}}$		20
$n=1$		$\overline{1p}$			8
$n=0$	$\overline{0s}$				2

原子核の魔法を説明するために、更に スピン・軌道 ポテンシャル (spin-orbit potential) を加える：

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2M} + U_{\text{WS}}(r) + V_{\ell s}$$

$$V_{\ell s} = -\alpha \vec{\ell} \cdot \vec{s} \quad (\alpha > 0)$$

先ず、以前勉強した角運動量について復習する：

- $\vec{\ell}$  = 軌道角運動量の演算子  
 $\vec{\ell}^2$  の固有値は  $\hbar^2 \ell(\ell+1)$  ( $\ell = 0, 1, 2, \dots$ )
- $\vec{s}$  = スピンの演算子  
 $\vec{s}^2$  の固有値は  $\hbar^2 s(s+1)$  ( $s = \frac{1}{2}$ )
- 従って、全角運動量の演算子は、

$$\vec{j} = \vec{\ell} + \vec{s}$$

$\vec{j}^2$  の固有値は  $\hbar^2 j(j+1)$  となるが、 $\vec{\ell}$  と  $\vec{s}$  は平行のときに  $j = \ell + s$  で、反平行のときに  $j = \ell - s$  である。

$$\begin{array}{cc} \uparrow & \uparrow \\ \vec{\ell} & \vec{s} \\ (j = \ell + s) & \end{array} \quad \begin{array}{cc} \uparrow & \downarrow \\ \vec{\ell} & \vec{s} \\ (j = \ell - s) & \end{array}$$



従って、 $V_{ls}$  の固有値 (eigenvalue) を次のように計算できる：

$$V_{ls} = -\alpha \vec{l} \cdot \vec{s} = -\frac{\alpha}{2} (j^2 - l^2 - s^2) \Rightarrow$$

$$\text{eigenvalue} = -\hbar^2 \frac{\alpha}{2} (j(j+1) - l(l+1) - s(s+1))$$

- 平行 ( $j = l + \frac{1}{2}$ ) の場合は固有値は次のようになる：

$$-\hbar^2 \frac{\alpha}{2} \left( \left( l + \frac{1}{2} \right) \left( l + \frac{3}{2} \right) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right) = -\hbar^2 \frac{\alpha}{2} l < 0$$

- 反平行 ( $j = l - \frac{1}{2}$ ) の場合は固有値は次のようになる：

$$-\hbar^2 \frac{\alpha}{2} \left( \left( l - \frac{1}{2} \right) \left( l + \frac{1}{2} \right) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right) = \hbar^2 \frac{\alpha}{2} (l+1) > 0$$

即ち、 $j = l + \frac{1}{2}$  の軌道のエネルギーが、 $j = l - \frac{1}{2}$  よりも低くなる。この spin-orbit splitting は、 $l$  と共に大きくなる。

例えば、状態  $1p$  (即ち  $n = 1, l = 1$ ) および  $3f$  (即ち  $n = 3, l = 3$ ) の場合、 $V_{ls}$  の影響のため次の spin-orbit splitting が生じる：



そのために、エネルギー順位は次のように変わってくる：

- 軌道角運動量  $l = 0, 1, 2$  の場合は  $V_{ls}$  の影響が小さく、基本的に以前と同じ結果 ( $U_{WS}$  を使った結果) となる。従って、最初の 3 つの魔法数 2, 8, 20 は変わらない。
- 軌道角運動量  $l = 3$  の場合、 $j = l + \frac{1}{2} = 7/2$  の軌道 ( $f_{7/2}$ ) が大きく下がって、独立な「殻」を成す。 $j = 7/2$  の場合は

$j_z = -7/2, -5/2, \dots + 7/2$  という  $2j + 1 = 8$  個の状態があるので、Pauli の排他律に従ってそこで 8 個の陽子（もしくは中性子）が入れる  $\Rightarrow$  魔法数  $28 = 20 + 8$  は説明できる。

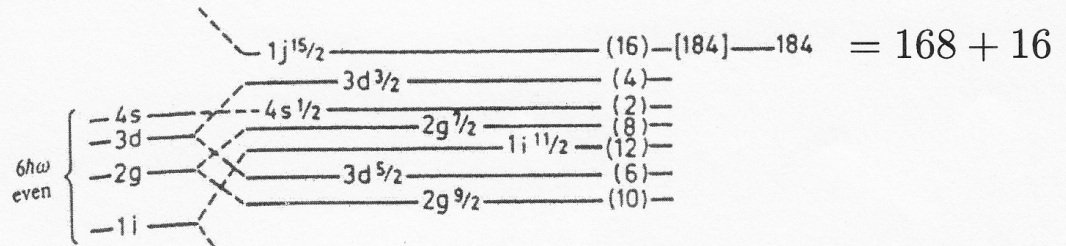
- その後、元々の殻で軌道角運動量が高い軌道はいつも大きく下がって、下の殻に埋め込まれる。そのために、魔法数 50, 82, 126 も説明できる。

「魔法数」の対応関係：

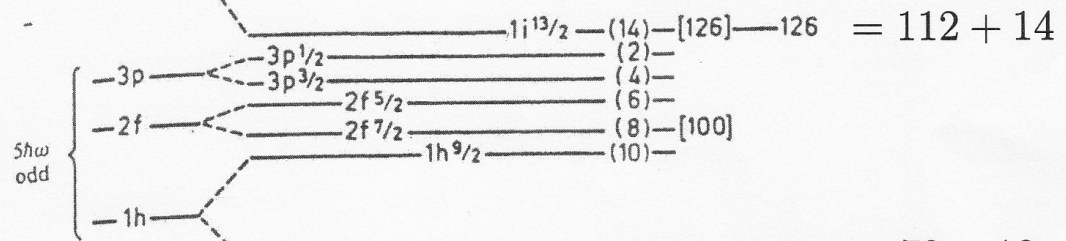
$U_{HO}$	2	8	20		40	70
$U_{HO} + V_{ls}$	2	8	20	$28 = 20+8$	$50=40+10$	$82=70+12$

次のページでは1粒子のエネルギー順位を示す。左の列は調和振動子ポテンシャルの場合、真ん中の列は Woods-Saxon 型ポテンシャルの場合、最後に Woods-Saxon 型ポテンシャルにスピン・軌道ポテンシャルに加えた場合を示す。右の列の数値は、その状態まで全部つめたときの核子の数である。

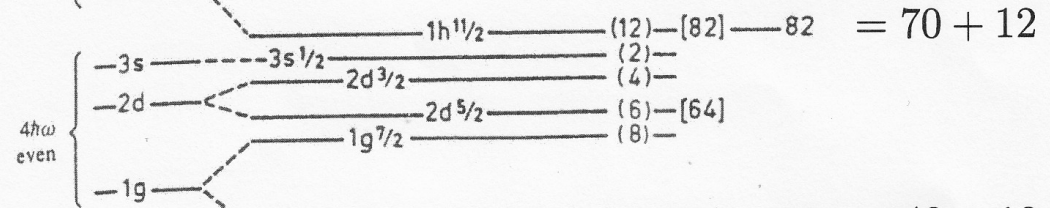
$$\underline{l = 0, 2, 4, 6}$$



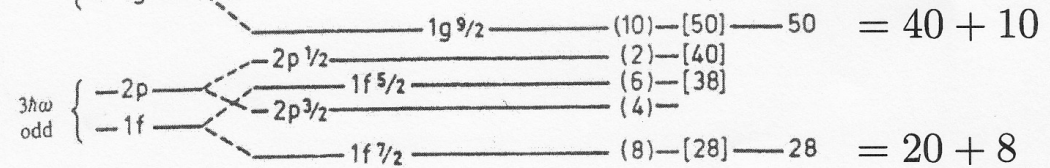
$$\underline{l = 1, 3, 5}$$



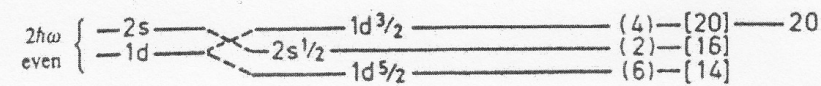
$$\underline{l = 0, 2, 4}$$



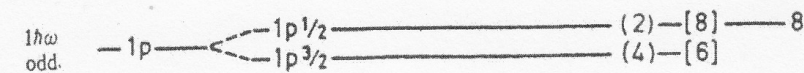
$$\underline{l = 1, 3}$$



$$\underline{l = 0, 2}$$



$$\underline{l = 1}$$



$$\underline{l = 0}$$



調和振動子

Wood-Saxon

Wood-Saxon +  $V_{ls}$