

原子核の対相関

～ 副殻中での厳密解・近似解・数値解～

2009年2月

福井大学 工学部 物理工学科
平成16年度入学 37番 中根 健佑

目次

序章	2
第 1 章 原子核の構造	3
1.1 原子核の大きさと結合エネルギー	3
1.2 殻構造	5
第 2 章 第二量子化表示	11
2.1 フェルミ粒子の第二量子化表示	11
2.2 フェルミ粒子における行列要素の評価	13
2.3 粒子空孔描像	14
第 3 章 対相関	17
3.1 対相関の導入	17
3.2 セニオリティモデル	19
3.3 準スピンモデル	25
3.4 BCS 理論 (近似)	26
3.4.1 一般的な相互作用の場合	26
3.4.2 純粋な対相関力の場合	28
第 4 章 副殻の縮退がとれた場合における数値解	29
4.1 四重極変形した原子核の場合	30
4.2 回転する原子核の場合	32
第 5 章 まとめ	34
謝辞	35
参考文献	36
付録 Program list	37

序章

原子核は、強い力で結合した高密度の物体にもかかわらず、その構成粒子である陽子や中性子は、基底状態付近ではほとんど衝突せず散乱されることがない。しかし状況によっては、互いに衝突して相互作用を及ぼす。また原子核のもつ結合力は短距離力であるにもかかわらず、協力して集団運動をする。このような奇妙な性質を統一的に考えるために、様々なモデルが導入されてきたが、すべての性質、現象を説明できるものは現在のところ存在していない。しかしながら、基底状態および低励起状態の原子核に関していえば、(核子という)フェルミ粒子の有限量子多体系として記述するという研究の枠組みは、どのアプローチにも共通するものである。

本卒業研究では、原子核の対相関を例題として、この枠組みの基本的な事項に一通り触れてみたい。本格的な理論研究に進む前の準備に必要な、第二量子化という量子多体系に最適な「言語」の習得、解析的厳密解の例に触れてみることに、さらには基底を張ってハミルトニアンを対角化するという、もっとも基本的な数値解的アプローチを経験すること、以上の三点を一通り網羅する。

対相関とは、互いに時間反転の関係にある一対の、一粒子状態にある2粒子に強い引力が働いて発生する。ある温度以下で電気抵抗が零になるあの超電導状態にある金属と、類似した構造の波動関数で記述できる。

本論文では、前半部は文献 [2] と文献 [3] に、後半部は文献 [4] に基づいて対相関の厳密解・数値解について解析を行った。前半部ではこの分野における基礎的な概念を学習することに努め、後半部では文献中の諸式をより詳細に解析することでより深い理解が得られるよう努めた。また、導いた厳密解と計算機プログラムで解析した数値解の比較をし考察を行った。当初は研究する予定であった近似解については、時間の都合上プログラムを作成しての解析は行えなかったため、文献 [5] を参考にして理論の解説のみ記載することとした。今後本研究室に配属される後輩諸君の中から、近似解の数値解的研究を始め、論文中で言及した多くのやり残した課題について研究を継いでくれる人が現れることを希望している。

第1章 原子核の構造

原子核の構造は複雑だが、核子の運動がまったく無秩序というわけではない。核子の運動には、秩序立った部分と無秩序な部分が存在する。無秩序な部分も、核子はある規則に従って運動し、核全体として一つのエネルギー固有状態を作っている以上、根底から無秩序というわけではない。核子の運動には、単純な秩序に従う部分から、複雑な秩序に従う部分まで、いろいろな段階のものが混ざっているといえる。

1.1 原子核の大きさと結合エネルギー

原子核の構成要素である核子は、強い相互作用をするハドロンの仲間である。核子が有限個（1～250個）集まって束縛状態を形成した孤立系が原子核である。この系を記述するハミルトニアンは回転不変性および（弱い相互作用を無視すると）空間反転不変性を満たすので、この量子系は角運動量 I およびパリティ π の固有状態になっている。

原子核の運動エネルギーは平均するとおよそ 22MeV であり、原子核から 1 個の核子を分離するのに必要な分離エネルギーは 5～10MeV である。これらは核子自身の静止エネルギー（ $mc^2 \cong 940\text{MeV}$ ）に比べて十分小さいので、通常、原子核は核子が比較的弱く結合した非相対論的量子力学系とみなせる。核子はスピン $\frac{1}{2}$ をもつフェルミ粒子であり、低エネルギーの原子核現象においてパウリ原理が極めて重要な役割を果たす。

電子や陽子と原子核との散乱実験によって、原子核内の核子の密度分布 $\rho(r)$ （ただし r は原子核の重心から測った距離）が調べられる。電子散乱では電磁相互作用により電荷分布 $\rho_c(r)$ が、陽子散乱では強い相互作用によって陽子と中性子の寄与の和である質量の密度分布が調べられる。電荷分布の測定実験により、原子核の体積は構成核子の個数 A に比例すること、中心部の密度 $\rho(0)$ は A によらずほぼ一定値 $\rho(0) \cong 0.17\text{fm}^{-3}$ であること（ $1\text{fm}=10^{-13}\text{cm}$ ）、密度分布が $\rho(0)$ の 90% から 10% に減少する距離を表面の厚さとする、2～3fm であることが明らかになった [6]。これを密度の飽和性という。 A が小さい軽い核を除けば、表面の厚さが原子核全体の広がり比べて小さいので、 $\rho(r)$ が $\rho(0)$ の $\frac{1}{2}$ となる距離を核半径 R_0 と定義すると

$$R_0 = r_0 A^{\frac{1}{3}} \quad (r_0 \cong 1.1\text{fm}) \quad (1.1)$$

という関係がよい近似で成り立つ。

基底状態（最低エネルギーの状態）にある原子核の中では、パウリの原理により核子-核子衝突が抑制される。なぜなら、衝突後の状態がパウリ原理で許されない場合、その衝突は起こらないからである。そのため、核子の平均自由行程は核半径よりも長くなる。したがって、核子-核子相互作用の効果を「他の核子が作る平均ポテンシャル中を独立粒子運動する核子」という描像で取り扱う平均場近似を導入することができる。この近似の極端な場合として、体積 Ω の箱の中に閉じ込められたフェルミガスとして原子核を取り扱うフェルミガス模型がある。この模型では、フェルミ波数 k_F は中性子 n 、陽子 p に対して、それぞれ

$$k_F^{(n)} = \left(\frac{3\pi^2 N}{\Omega} \right)^{\frac{1}{3}}, \quad k_F^{(p)} = \left(\frac{3\pi^2 Z}{\Omega} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (1.2)$$

と書ける。ここで N は中性子数、 Z は陽子数である。 $N = Z = \frac{A}{2}$ の場合、密度 $\rho(0)$ の実験値を用いると $k_F \cong 1.36\text{fm}^{-1}$ となる。対応するフェルミエネルギーは

$$e_F = \frac{(\hbar k_F)^2}{2m} \cong 37\text{MeV} \quad (1.3)$$

であり、平均運動エネルギー $\bar{e} = \frac{3}{5}e_F$ は約 22MeV である。

中性子と陽子を統一的に記述するために、核子をアイソスピン $\frac{1}{2}$ の粒子と考え、中性子と陽子をそれぞれアイソスピンの z 成分が $+\frac{1}{2}$ および $-\frac{1}{2}$ の状態とみなす。 N 個の中性子と Z 個の陽子からなる原子核の全アイソスピンの大きさを T 、その z 成分を M_T とすると、明らかに $M_T = \frac{N-Z}{2}$ であるが、 T の値は $\frac{N+Z}{2}$ から $\frac{|N-Z|}{2}$ をとりうる。フェルミガス模型では基底状態では $T = M_T = \frac{|N-Z|}{2}$ をもち、他の T は励起状態に対応する。強い相互作用はアイソスピン空間の回転に対して不変であるから、 T を用いて原子核の様々な励起状態を分類できる。実際、この対称性を破るクーロン力の存在にもかかわらず、アイソスピンは近似的にはよい量子数である。ある状態に M_T の昇降演算子を作用させて得られる状態をその状態のアイソバリックアナログ状態と呼ぶ。昇降演算子はアイソスピンの大きさ T を変えないので、両者は同じ T をもち、 M_T のみが異なる。

中性子数 N 、陽子数 Z の原子核の基底状態の質量を $M(N, Z)$ 、中性子と陽子の質量をそれぞれ m_n 、 m_p とすると、結合エネルギー $B(N, Z)$ は

$$B(N, Z) = Nm_n c^2 + Zm_p c^2 - M(N, Z) c^2 \quad (1.4)$$

で定義される。 $B(N, Z)$ を N や Z とともに滑らかに変化する巨視的項 B_{macro} と、ゆらぎを表す微視的項 B_{micro} に分けて、

$$B(N, Z) = B_{\text{macro}}(N, Z) + B_{\text{micro}}(N, Z) \quad (1.5)$$

と書けるとする。ここで巨視的とは構成粒子数 $A = 10^1 \sim 10^2$ 程度の有限系の平均的性質あるいは集団的性質を意味する。 B_{macro} は ($A \leq 10$ の軽い核を除いて) 近似的に

$$B_{\text{macro}}(N, Z) = b_{\text{vol}}A - b_{\text{surf}}A^{\frac{2}{3}} - \frac{1}{2}b_{\text{sym}}\frac{(N-Z)^2}{A} - \frac{3}{5}\frac{(Z_e)^2}{R_c} \quad (1.6)$$

で与えられる。右辺の各項の係数はおよそ $b_{\text{vol}} \cong 16\text{MeV}$ 、 $b_{\text{surf}} \cong 17\text{MeV}$ 、 $b_{\text{sym}} \cong 50\text{MeV}$ である。

第1項は体積エネルギーと呼ばれ、結合エネルギーの主要項である。これが A に比例することは原子核の中心部の密度 $\rho(0)$ が A によらずにほぼ一定であり、体積が A に比例することと密接な関係にある。このことは結合エネルギーの飽和性と呼ばれ、密度の飽和性と合わせて、原子核の極めて重要な性質である。第2項は表面積に比例するので表面エネルギー、第3項は N と Z を等しくしようとするので対称エネルギーと呼ばれる。第4項はクーロン力を表し、 $R_c \cong 1.2A^{\frac{1}{3}}\text{fm}$ である。

一方、 B_{micro} の大きさは 15MeV 以下で、 B_{macro} に比べて小さい量であるが、核構造の理解にとっては同等に重要である。この項は2つの部分からなる。

$$B_{\text{micro}}(N, Z) = B_{\text{pair}}(N, Z) + B_{\text{shell}}(N, Z) \quad (1.7)$$

右辺の第1項は対相関エネルギーと呼ばれ、

$$B_{\text{pair}}(Z, N) \cong \begin{cases} 12A^{-\frac{1}{2}} & (N \text{ も } Z \text{ も 偶数の場合} \quad [\text{偶々核}]) \\ 0 & (A \text{ が 奇数の場合} \quad [\text{奇核}]) \\ -12A^{-\frac{1}{2}} & (N \text{ も } Z \text{ も 奇数の場合} \quad [\text{奇々核}]) \end{cases} \quad (1.8)$$

で与えられる(単位 MeV)。この項は核内の核子が(互いの間に働く引力によって)互いに対を組もうとする対相関に起源をもつ。他方、第2項は殻構造に起源をもつ殻エネルギー E_{shell} に対応する(符号は逆、 $B_{\text{shell}} = -E_{\text{shell}}$)。 E_{shell} は N の関数として特徴的な振動パターンを示している。 E_{shell} が極小となる N の値を魔法数という。同様の性質は B_{shell} の Z 依存性についても見られる。

1.2 殻構造

核子どうしの間には核力が働く。核力は到達距離は短いが非常に強い力なので、原子核の中の核子の運動はジグザグの折れ曲がったものであると思われがちである。実際、原子核物理学の初期にニールス・ボーアが提唱した液滴モデルは、そのような理論に基づいていた。しかし、原子核の基底状態や比較的低い励起状態では、核子の運動は本当はそのようなものではなかった。エネルギーの低い原子核状態では、それぞれの核子は、意外にも他の核子と激しい衝突をあまりせず、自分自身の軌道を回ろうとする傾向が強い。この一見したところ核力の性質と矛盾するような事実も、現在では量子力学的多体問題の立場から見ればそれほど不思議なことではなくなっている。このような核子の性質に重点を置いたのが独立粒子モデルである。

独立粒子モデルでは、各粒子は他の粒子がつくる平均的なポテンシャルの中を運動する。ただしここでポテンシャルというのは位置エネルギーに等しく、その下向きの勾配が力に等しくなるように決められた関数で、原子核の場合、中心を通る断面は図 1.1 で示すような形になる。

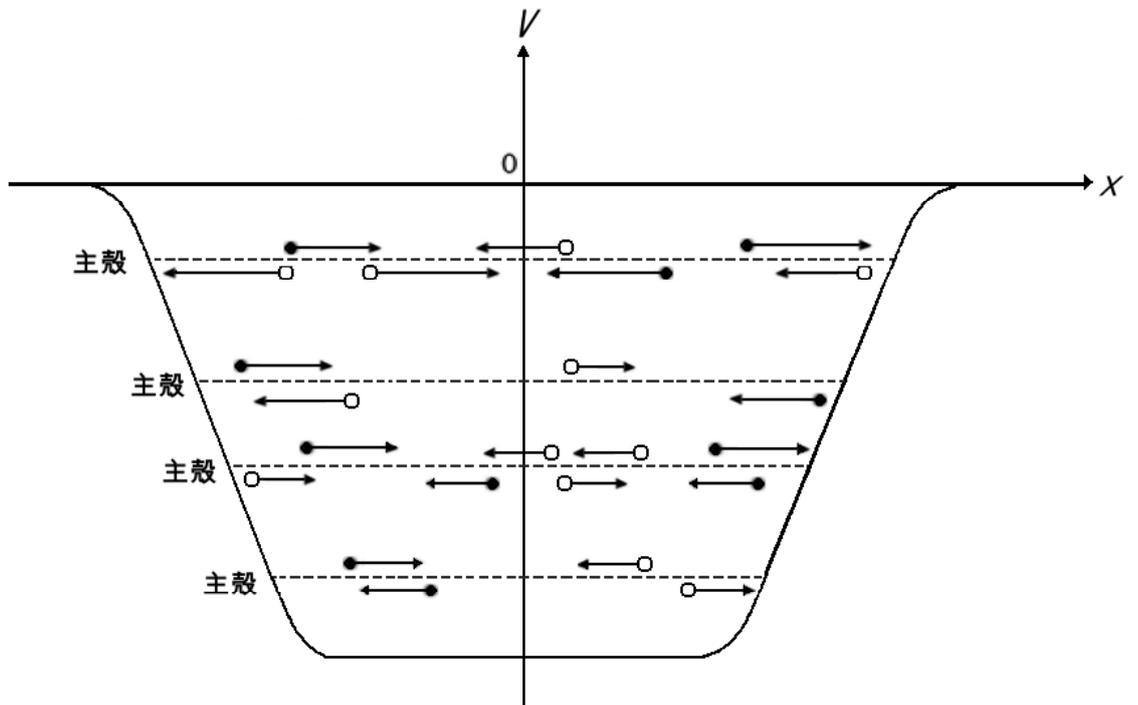


図 1.1: 独立粒子モデルにおける粒子に対するポテンシャルエネルギー

中心付近では、四方にいる核子から力を受けるため、平均的な力はほとんど零だが、それはそこでのポテンシャルエネルギーの勾配が小さいことに反映される。ところが核の表面付近では、内側にいる核子の方が多いので、そこから受ける引力が強く、核子は内側に引っ張られる。これは、ポテンシャルがそこで内側に向かって急激に落ち込むことに表れている。さらに外に出ると、核力は短距離力なので、力は急速に弱くなる。このことは、ポテンシャルが核の外で急に零に近づくことに対応している。

独立粒子モデルは、1949年に発表された M.G. メイヤー女史の論文とハクセル、イエンゼン、ジューズ氏らの共同論文によって、揺るぎない地位を確立した。彼らは、核子の受けるポテンシャルが核子の位置によるだけでなく核子の軌道角運動量とスピン角運動量の内積にも依存することを発見し、当時不思議とされていた魔法数を見事に説明した。この内積に依存する力は、「スピン・軌道力」と呼ばれ、原子核の場合、核子のスピンと軌道角運動量が同じ向きを向いているときにエネルギーを下げ、逆向きのときにエネルギーを上げる。

それぞれの核子には、図 1.1 のような球対称ポテンシャルとスピン・軌道力を表すポテンシャルの和が働いている。このポテンシャルの「井戸」の中につかまえられて運動している核子は、ある決まったエネルギーをもつ。それを単一粒子準位という。一つのポテンシャルにはいくつかの単一粒子準位があり、さらに一つ一つの単一粒子準位をとる単一粒子状態は一般に二つ以上ある。単一粒子準位は陽子と中性子でいくらか違い、また核種によっても少しずつ異なっているが、エネルギーを上向きにとって、大体の様子を図 1.2 に示す。記号や数字の意味は s, p, d, f, g, h, i, j は、核子の軌道角運動量がそれぞれ、 $0, 1\hbar, 2\hbar, 3\hbar, 4\hbar, 5\hbar, 6\hbar, 7\hbar$ であることを意味し、その右下の数字は、軌道角運動量とスピンを合成した角運動量の量子数 (j) である。また、記号の前の数字は単に下からの順番を意味する。次に、準位を示す線の右の括弧内の数字は $2j + 1$ であるが、陽子、中性子それぞれに対して、この数だけの互いに独立な単一粒子状態がその単一粒子準位に属している。左端の点線は、スピン・軌道力で分かれた準位の対を示している。また魔法数から魔法数までの間の集団を主殻といい、一つ一つを副殻という。図 1.2 には書いていないがパリティは軌道角運動量量子数が偶数のとき正、奇数のとき負である。図 1.2 の単一粒子準位の配列を見ると、所々に広い間隔(ギャップ)があるのが分かる。そのようなギャップより下にある単一粒子準位の総数を丸の中に書いておいた。実はこれが原子核の魔法数である。ギャップの位置がスピン・軌道力に大いに依存していることはすぐに分かる。例えば 50 の魔法数は、これは準位と準位が、強いスピン・軌道力のために、大きく離れていることによって生じている。もしスピン・軌道力がなかったら、50 は魔法数になりえなかったはずである。

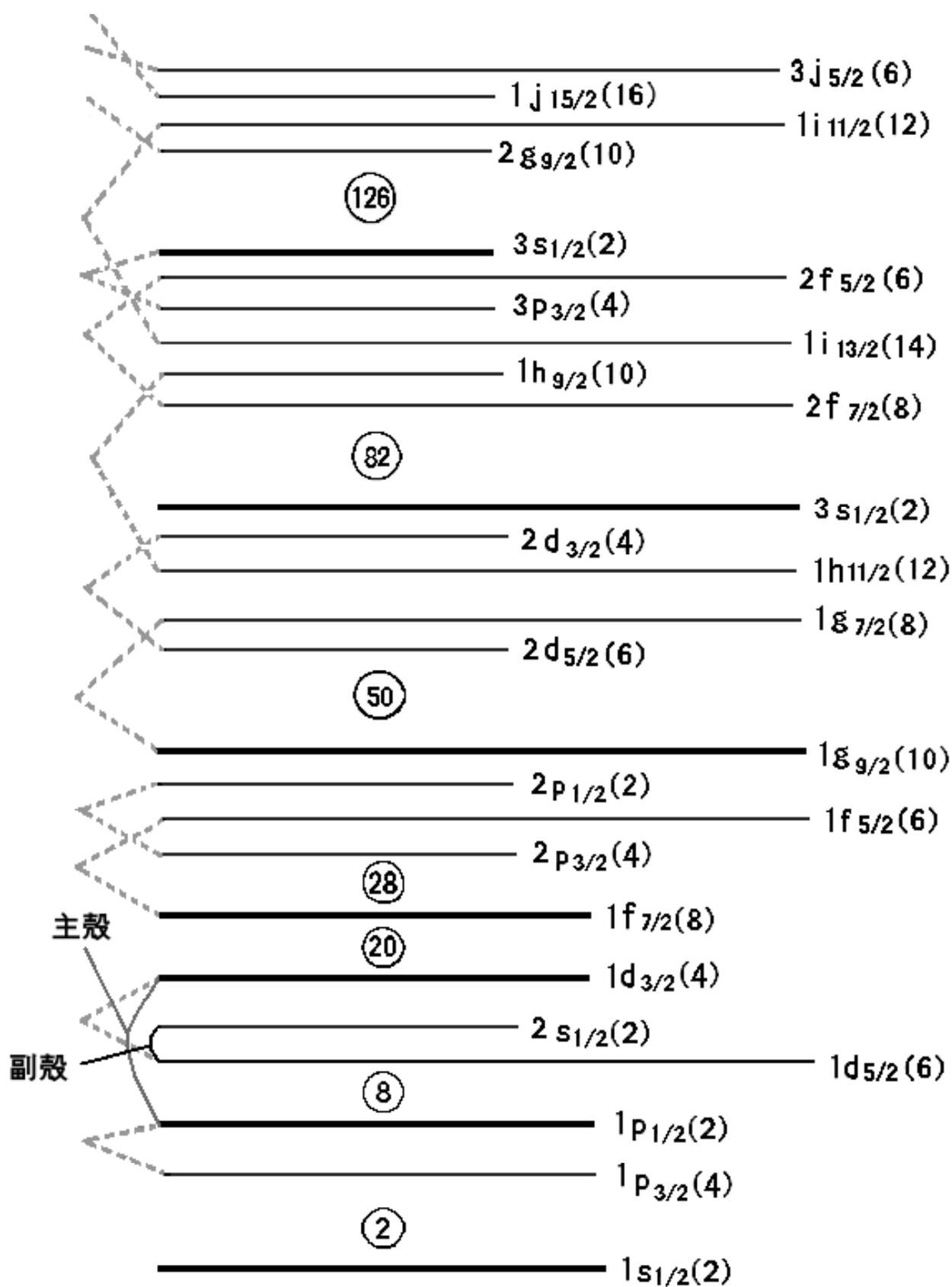


図 1.2: 原子核の単一粒子順位の大体の様子

核子はフェルミ粒子である。つまり、フェルミ・ディラック統計に従う粒子で、一つの単一粒子状態にはせいぜい一個の粒子しかはいることができない(パウリの原理)。そこで、ある決まった数の陽子を、全体のエネルギーをできるだけ低くするように単一粒子状態に入れようとすれば、一番下からすき間なく一個ずつ詰めていくことになる。中性子についても同様である。最も単純な独立粒子モデルでは、原子核の基底状態は、このように陽子と中性子をそれぞれ単一粒子状態の下の方にすき間なく詰めたもので表される。また何らかのすき間がある詰め方は、励起状態に対応する(図 1.3 を参照)。

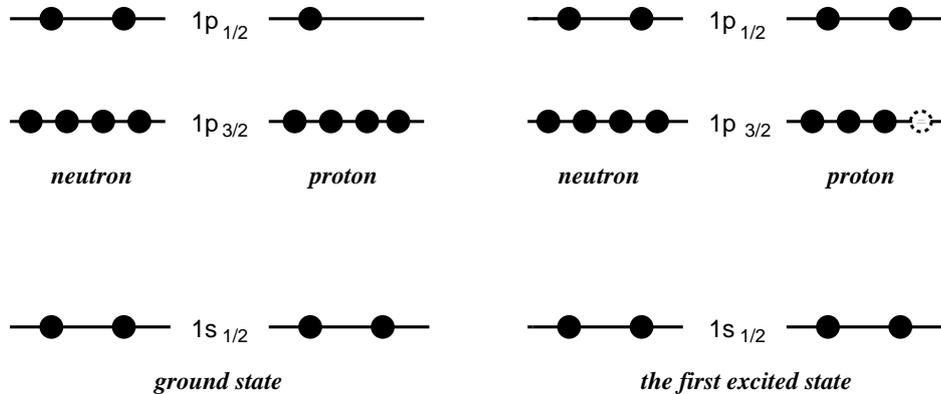


図 1.3: 単純な独立粒子モデルによる窒素 15 の基底状態と第一励起状態(単一粒子準位を示す)

ここで、陽子数が魔法数に等しいときを考える。この場合、基底状態では、陽子のギャップの下にうまく収まってしまうので、全体のエネルギーが低くなる。また、陽子を励起させようとする、ギャップを越えて上げなければならないので、大きい励起エネルギーを必要とする。中性子についても同様のことが言える。こうして、魔法数にちょうど等しい個数の陽子や中性子をもつ核種の基底状態は、それと少し陽子数や中性子数の違う各種に比べて、相対的に低いエネルギー、小さい質量をもつことになる。特に陽子数と中性子数がともに魔法数の原子核では、上で述べた性質が著しくなっている。鉛 208(質量数が 208 である鉛の同位体)などがその例である。

魔法数によって、単一粒子準位のグループ分けができる。例えば魔法数 28 と 50 の間には $2p_{3/2}$, $1f_{7/2}$, $2p_{1/2}$, $1g_{9/2}$ という四種の単一粒子準位からなるグループがある。それぞれグループの状態の空間的な密度分布は必ずしも球殻状に集まった形状をしているわけではないが、原子内の電子の運動との類推から、一つのグループは一つの殻をつくるという言い方をする。そして、各核子に共通な球形の平均ポテンシャルを使用する独立粒子モデルは、普通は殻モデルと呼ばれる。

以上のモデルを実際に使うためには、もう一つ考慮すべきことがある。例として、カルシウム 42 を考える。この核のもつ陽子 20 個は魔法数に等しく、基底状態ではギャップの下までにちょうど収まって、いわゆる閉殻をつくる。閉殻のスピンは 0、パリティは正である。これを 0^+ と表す。ところで、中性子は 22 個あり、魔法数より 2 だけ多く、これが $1f_{7/2}$ 準位に入る。この準位には八個の単一粒子状態があり、そこへの中性子の入り方によって、合成された角運動量の大きさが 0、2、4、6 の四つの場合がある。さてここに、まったく例外なしに成立する重要な規則がある。それは、合成された角運動量が 0 のとき最もエネルギーが低いということである。一般に、陽子同士、中性子同士では、二個ずつが 0 の合成角運動量、正のパリティに組んでエネルギーを下げる強い傾向があり、対相関と呼ばれている。この結果、陽子数、中性子数が共に偶数の核(偶々核)の基底状態は、例外なく 0^+ というスピン・パリティになっている。(図 1.4 を参照)

陽子と中性子のうち、一方が偶数で他方が奇数の場合(つまりは質量数が奇数の場合)偶数の方の核子は 0^+ に組むとしてよい。奇数の方は、対相関が十分強ければ、できるだけ 0^+ の対をつくり、最後に残った一個だけが残る。つまり、この一個以外の部分の角運動量とパリティは 0^+ になるので、

原子核全体のスピン・パリティは、最後に残った一つの核子の角運動量とパリティに等しいことになる。

最後の核子の角運動量とパリティは、図 1.2 の単一粒子準位スペクトルから推定することができる。ただしこの推定値の当たる確率は十分に高いとはいえない。しかし今日では、外れるときにはその原因はかなり分かっている。もっと当たる確率の高い推定も可能だが、そのためには一般に複雑な計算を必要とする。(図 1.5 を参照)

陽子数、中性子数が共に奇数の原子核(奇々核)の場合、対相関が十分に強ければ、奇々核の基底状態のスピン・パリティは、残った陽子と残った中性子の角運動量およびパリティを合成したものになるはずである。パリティの方は一義的に決まるが、スピンはある範囲内のいくつかの値が可能になり、そのうちどれが基底状態で実現されるかは非常に難しい問題である。(図 1.6 を参照)

励起状態についても、殻モデルによる研究は色々行われている。

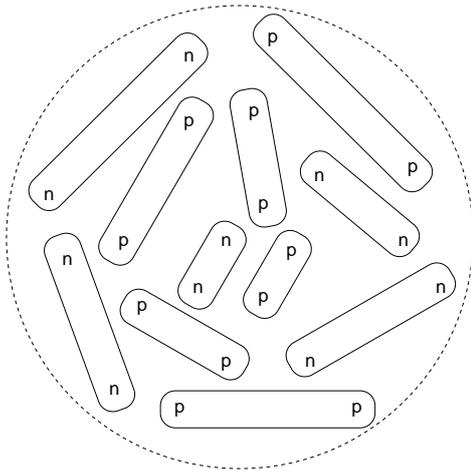


図 1.4: 偶々核(陽子数、中性子数が共に偶数)の基底状態で、すべての核子が対を組み、スピン・パリティは 0^+ になる様子を模式的に示した図(p : 陽子、 n : 中性子)

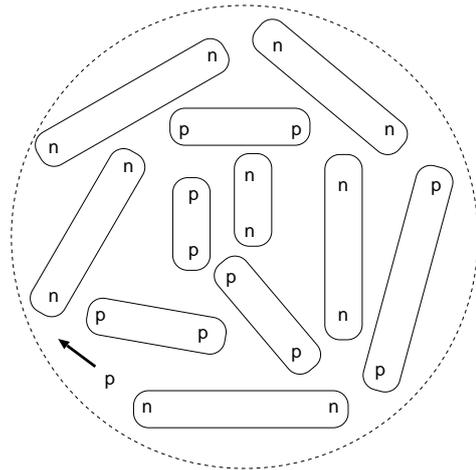


図 1.5: 質量数が奇数の核の基底状態で、1 個の核子以外は 0^+ の対を組む様子を模式的に示した図。

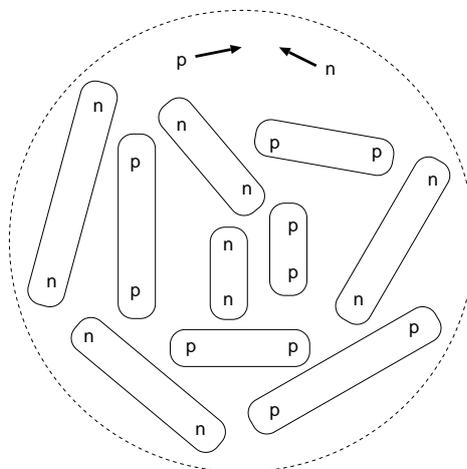


図 1.6: 奇々核(陽子数、中性子数が共に奇数)の基底状態で、2 個の核子以外は 0^+ の対を組む様子を模式的に示した図。

ところで、核子に働く力には平均ポテンシャルでは表せない部分が含まれている。そのような相互作用は残留相互作用と呼ばれている。対相関を起こす相互作用も一種の残留相互作用であるが、これはかなり特殊で、比較的簡単で有力な近似計算法 (BCS 近似) がある。しかし殻モデルの精度を上げるには、その他の残留相互作用も考慮する必要性があり、多くの研究者の努力が払われつつある。一般に、殻モデルは精度を上げると単一粒子状態の詰まり方が複雑になり、色々な詰まり方をしたものの重ね合わせによって核全体の一つのエネルギー固有状態が表されるようになる。

第2章 第二量子化表示

第二量子化という言葉は、現在、場の量子化とほとんど同じ意味で使われているが、元来は、一粒子のシュレーディンガー方程式と、同じ形をした波動方程式を満たす三次元空間における場を量子化して、多電子系の量子力学的波動関数を得る手法に対する名前である。これは主として、ソ連のV. フォックによって開発された。量子力学は、元々、電子や光が粒子と波動の二重の性質をもつことの認識から出発したのだが、シュレーディンガーの波動方程式では、光子の問題は一応先延ばしにされ、また電子に対しても多電子系を扱う場合には、波動関数は N 個の電子の座標 x_1, x_2, \dots, x_N と時間 t の関数であって、現実の三次元空間の波というイメージが消えてしまっている。この点を追求し、光にあっては光量子の性質を説明し、一方、電子のほうも、現実の三次元空間の波動から出発して、電子の波動性および多電子系の量子力学を導こうというのが、場の量子化の課題である。

2.1 フェルミ粒子の第二量子化表示

フェルミ粒子の場合、生成演算子 \hat{a}^\dagger と消滅演算子 \hat{a} の間の基本的な反交換関係は、単一準位の場合は下記のように表せる。

$$\{\hat{a}, \hat{a}\} = 0, \quad \{\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger\} = 0, \quad \{\hat{a}, \hat{a}^\dagger\} = 1 \quad (2.1)$$

ボーズ粒子の場合とは、交換関係と反交換関係という大きな違いがあるが、粒子数演算子はボーズ粒子の場合と同一の下式で定義される。

$$\hat{n} = \hat{a}^\dagger \hat{a} \quad (2.2)$$

そして次のような関係式を導くことができる。

$$[\hat{a}, \hat{n}] = [\hat{a}, \hat{a}^\dagger \hat{a}] = \hat{a} \hat{a}^\dagger \hat{a} - \hat{a}^\dagger \hat{a} \hat{a} = \hat{a} \hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a}^\dagger \hat{a} \hat{a} = \{\hat{a}^\dagger, \hat{a}\} \hat{a} = \hat{a} \quad (2.3)$$

$$[\hat{a}^\dagger, \hat{n}] = [\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger \hat{a}] = [\hat{n}, \hat{a}]^\dagger = -[\hat{a}, \hat{n}]^\dagger = -\hat{a}^\dagger \quad (2.4)$$

上式の三番目から四番目の等式の符号の変化は二つの \hat{a} の反交換関係のためである（実際、この等式の第二項の積は零であり、この計算では消える項を変形している）。このように私たちはそれぞれ \hat{a}^\dagger と \hat{a} とを操ることにより \hat{n} の固有値を使うことができる。即ち、生成演算子・消滅演算子は粒子数に関する昇・降演算子であることがわかる。 n は二つの値だけをとることが可能であることは $\hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger = \hat{a} \hat{a} = 0$ という事実より予想できる。実際、

$$\hat{n}^2 = \hat{a}^\dagger \hat{a} \hat{a}^\dagger \hat{a} = \hat{a}^\dagger (\{\hat{a}, \hat{a}^\dagger\} - \hat{a}^\dagger \hat{a}) \hat{a} = \hat{a}^\dagger \hat{a} - \hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger \hat{a} \hat{a} = \hat{a}^\dagger \hat{a} = \hat{n} \quad (2.5)$$

が導けるので、 \hat{n} は 1 または 0 しか固有値が持てないことがわかる。このような二つだけの状態からなる空間では真空状態は $|0\rangle$ 、一粒子状態は $|1\rangle$ となり、この演算子の作用は次式で完全に与えられる。

$$\hat{n}|0\rangle = 0, \quad \hat{a}^\dagger|0\rangle = |1\rangle, \quad \hat{a}|0\rangle = 0, \quad \hat{n}|1\rangle = |1\rangle, \quad \hat{a}^\dagger|1\rangle = 0, \quad \hat{a}|1\rangle = |0\rangle \quad (2.6)$$

ボーズ粒子の場合は行列要素は作用する対象の状態の粒子数 n を含んだ式で統一的に表すことができたが、フェルミ粒子の場合も $n = 0, 1$ の二つの状態に対して統一的に次式で表すことが可能である。

$$\hat{n}|n\rangle = n|n\rangle, \quad \hat{a}^\dagger|n\rangle = (1-n)|n\rangle, \quad \hat{a}|n\rangle = n|n-1\rangle \quad (2.7)$$

複数の単一粒子準位を有する系においては、単一粒子準位を区別する番号 i でラベルされた複数の生成・消滅演算子 \hat{a}_i と \hat{a}_i^\dagger が存在し、それらは反交換関係、

$$\{\hat{a}_i, \hat{a}_j\} = 0, \{\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger\} = 0, \{\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger\} = \delta_{ij} \quad (2.8)$$

に従う。状態は各単一粒子準位にある粒子の個数演算子

$$\hat{n}_i = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \quad (2.9)$$

の固有値 n_i によって次のように指定できる。

$$\hat{n}_i |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = n_i |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle \quad (2.10)$$

上式のすべての n_i の値は 0 または 1 に制限される。ここで、ボーズ粒子系にはなかった一つの新しい問題が出現する。上記の状態を生成演算子の積が真空状態に作用した結果として表現するとき、積中における生成演算子の出現順序が波動関数の全体の符号に影響を与えるということである。そこで定義の慣習として次式を導入する。

$$|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = \left(\hat{a}_1^\dagger\right)^{n_1} \left(\hat{a}_2^\dagger\right)^{n_2} \cdots \left(\hat{a}_i^\dagger\right)^{n_i} \cdots |0\rangle \quad (2.11)$$

これは即ち、ケットの量子数と同じ順番に演算子を配置せよという慣習である。なお、ボーズ粒子の場合に見られるような規格化因子が不要なのは、 $n = 0, 1$ のどちらの場合も $n! = 1$ であるためである。

(2.8) 式のような状態に演算子 \hat{a}_i を適用することは、生成演算子が左端から何番目にあるかに依存する符号をもたらす。もし $n_i = 0$ の状態ならば、 \hat{a}_i の適用は必ず 0 をもたらす。しかしもし $n_i = 1$ ならば、(2.8) 式は特定の位置に一つ \hat{a}_i^\dagger を含む。ここで符号を求めるために、積における \hat{a}_i と、 \hat{a}_i^\dagger の前にあるすべての生成演算子を反交換すると次式が求まる。

$$\hat{a}_i \left(\hat{a}_1^\dagger\right)^{n_1} \cdots \left(\hat{a}_{i-1}^\dagger\right)^{n_{i-1}} \hat{a}_i^\dagger \cdots |0\rangle = \sigma_i \left(\hat{a}_1^\dagger\right)^{n_1} \cdots \left(\hat{a}_{i-1}^\dagger\right)^{n_{i-1}} \hat{a}_i \hat{a}_i^\dagger \cdots |0\rangle \quad (2.12)$$

ここで符号因子 σ_i は積における \hat{a}_i^\dagger の前にある生成演算子の個数が偶数であるか奇数であるかによって決まり、次式で与えられる。

$$\sigma_i = (-1)^{\sum_{j=1}^{i-1} n_j} \quad (2.13)$$

(2.10) 式の積 $\hat{a}_i \hat{a}_i^\dagger$ は今の位置と状態 $|0\rangle$ との間にあるすべての他の生成演算子と交換できる。これはすべてのこれら演算子が \hat{a}_i と \hat{a}_i^\dagger の両方と反交換し、二重符号変化によりこれらの積と交換するためである。結局 (2.6) 式から、

$$\hat{a}_i \hat{a}_i^\dagger |0\rangle = |0\rangle \quad (2.14)$$

となり、結果として、

$$\begin{aligned} \hat{a}_i \left(\hat{a}_1^\dagger\right)^{n_1} \cdots \left(\hat{a}_{i-1}^\dagger\right)^{n_{i-1}} \hat{a}_i^\dagger \cdots |0\rangle &= \sigma_i \left(\hat{a}_1^\dagger\right)^{n_1} \cdots \left(\hat{a}_{i-1}^\dagger\right)^{n_{i-1}} \left(\hat{a}_{i+1}^\dagger\right)^{n_{i+1}} |0\rangle \\ &= \sigma_i |n_1, n_2, \dots, n_{i-1}, 0, n_{i+1}, \dots\rangle \end{aligned} \quad (2.15)$$

となる。 \hat{a}_i^\dagger についての同じ導出を行った結果をまとめると、

$$\begin{aligned} \hat{a}_i |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle &= \sigma_i n_i |n_1, \dots, n_i - 1, \dots\rangle \\ \hat{a}_i^\dagger |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle &= \sigma_i (1 - n_i) |n_1, \dots, n_i + 1, \dots\rangle \end{aligned} \quad (2.16)$$

となる。

2.2 フェルミ粒子における行列要素の評価

微視的な原子核モデルで必要となる計算で最も頻繁に遭遇するタイプの計算は、フェルミ粒子の生成演算子と消滅演算子の積の行列要素の計算である。その最も単純な場合である真空における演算子の期待値の計算方法を、以下の例について説明する。

$$M = \langle 0 | \hat{a}_i \hat{a}_j \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_n^\dagger | 0 \rangle \quad (2.17)$$

消滅しない行列要素はいかなる場合にも生成演算子と消滅演算子を等しい数だけもつ。なぜならば、右側の真空状態に生成演算子を作用させると、その後で必ず消滅演算子を作用させて元の真空状態に戻さなければ左側の真空状態との内積が零となるからである。即ち、生成された粒子は全て消滅させられなければならない。また、もし消滅演算子に余りがあるなら、それらが真空に作用することで内積を取る以前の段階で零となってしまう。

消滅演算子を真空状態に左から作用させる、または生成演算子を真空状態に右から作用させると次式のように行列要素は消える。

$$\hat{a}_i | 0 \rangle = 0, \quad \langle 0 | \hat{a}_i^\dagger = 0 \quad (2.18)$$

さて方針として上式を利用し、消滅演算子を右へ交換し、あるいは生成演算子を左へ交換することしよう。

この目的のため、フェルミ粒子の反交換関係を次の二つの単純な法則として言い換えておく。

1. 同じ型（共に生成演算子または共に消滅演算子）の二つの演算子の交換は符号を逆にする。
2. 逆の型の二つの演算子の交換は次式のように、追加の項としてクロネッカー記号が現れる。

$$\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j = -\hat{a}_j \hat{a}_i^\dagger + \delta_{ij}, \quad \hat{a}_i \hat{a}_j^\dagger = -\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i + \delta_{ij} \quad (2.19)$$

個々の交換の結果は上記のいずれかしかない。交換の過程を続けた結果、演算子を含む項の行列要素が全てゼロになれば、その時点でクロネッカー記号だけからなる項が行列要素に等しいのである。

これを (2.17) の場合に適用しよう。まず \hat{a}_l と \hat{a}_m^\dagger を交換すると、

$$M = -\langle 0 | \hat{a}_i \hat{a}_j \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_n^\dagger | 0 \rangle + \delta_{lm} \langle 0 | \hat{a}_i \hat{a}_j \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_n^\dagger | 0 \rangle \quad (2.20)$$

になる。上式の第一項において \hat{a}_l と \hat{a}_n^\dagger を交換し、さらに第二項において \hat{a}_j と \hat{a}_k^\dagger を交換すると、

$$\begin{aligned} M &= \langle 0 | \hat{a}_i \hat{a}_j \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_l | 0 \rangle - \delta_{ln} \langle 0 | \hat{a}_i \hat{a}_j \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_m^\dagger | 0 \rangle \\ &\quad - \delta_{lm} \langle 0 | \hat{a}_i \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_j \hat{a}_n^\dagger | 0 \rangle + \delta_{lm} \delta_{jk} \langle 0 | \hat{a}_i \hat{a}_n^\dagger | 0 \rangle \end{aligned} \quad (2.21)$$

が求まる。ここで、

$$\langle 0 | \hat{a}_i \hat{a}_j^\dagger | 0 \rangle = \delta_{ij} \quad (2.22)$$

である。これは、真空に粒子を生成し、次にそれを消滅する過程の遷移振幅は 1 であることを意味している。(2.21) 式において、第一項の \hat{a}_l は直接真空に作用するので零となり第一項は消える。一方で第二項において \hat{a}_j と \hat{a}_k^\dagger を交換し、第三項において \hat{a}_j と \hat{a}_n^\dagger を交換を行い、さらに (2.22) 式を適用すると

$$\begin{aligned} M &= \delta_{ln} \langle 0 | \hat{a}_i \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_j \hat{a}_m^\dagger | 0 \rangle - \delta_{ln} \delta_{jk} \langle 0 | \hat{a}_i \hat{a}_m^\dagger | 0 \rangle \\ &\quad + \delta_{lm} \langle 0 | \hat{a}_i \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_j | 0 \rangle - \delta_{lm} \delta_{jn} \langle 0 | \hat{a}_i \hat{a}_k^\dagger | 0 \rangle + \delta_{lm} \delta_{jk} \delta_{in} \end{aligned} \quad (2.23)$$

となる。上式の第三項は (2.19) 式の第一項と同様の理由で消える。さらに計算を進めると、

$$\begin{aligned} M &= -\delta_{ln} \langle 0 | \hat{a}_i \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_j | 0 \rangle + \delta_{ln} \delta_{jm} \langle 0 | \hat{a}_i \hat{a}_k^\dagger | 0 \rangle \\ &\quad - \delta_{ln} \delta_{jk} \delta_{im} - \delta_{lm} \delta_{jn} \delta_{ik} + \delta_{lm} \delta_{jk} \delta_{in} \\ &= \delta_{ln} \delta_{jm} \delta_{ik} - \delta_{ln} \delta_{jk} \delta_{im} - \delta_{lm} \delta_{jn} \delta_{ik} + \delta_{lm} \delta_{jk} \delta_{in} \end{aligned} \quad (2.24)$$

という結果を得ることができる。

上の計算例の個々のステップを思い出せば、下記のような計算の一般則が見えてくるだろう。

- 行列演算子は、反対称性に起因する符号をもつクロネッカー記号の積からなる項の和に還元される。
- クロネッカー記号の添字の組み合わせは、一つの消滅演算子と一つの生成演算子のすべての可能である組み合わせを示している。クロネッカー記号で表そうとしたとき、消滅演算子は最初の行列要素において生成演算子の前になければならない。
- 最終結果の各項の符号は、クロネッカー記号に書き換えられるような行列要素の形に元々の行列要素を再配列する場合の符号の変化だけを考慮すると導くことができる。他の演算子は消滅演算子・生成演算子というペアの前にあるか、あるいは後ろにあるかはどちらでもよく、つまりは行列要素の符号はこれに依らない。(ペアの交換を行うと、つねにプラスの符号を生成する。)

(2.17) 式の例の行列要素を振り返ってみると、クロネッカー記号の中にある添字の組み合わせはそれぞれ i, j は k, m, n で m, n は i, j, l となる。一方で l, k は、 \hat{a}_l が \hat{a}_k^\dagger の右側にあるため、それぞれ m, n, i, j としか組み合わせをもたない。このことを考慮するとより単純に最終の結果を導くことができる。ここで最終の結果の符号を考えると、例えば $\delta_{ln}\delta_{jk}\delta_{im}$ は $\hat{a}_i\hat{a}_j\hat{a}_k^\dagger\hat{a}_l\hat{a}_m^\dagger\hat{a}_n^\dagger$ から $\hat{a}_j\hat{a}_k^\dagger\hat{a}_i\hat{a}_m^\dagger\hat{a}_l\hat{a}_n^\dagger$ へ交換するのに三回の置換を必要とする。そのため必ず符号はマイナスとなる。

実際にここで得られた方法はウィックの定理の単純な場合を構成している。(正確に表現すれば、ウィックの定理は演算子の関係式であって、行列要素の関係式はウィックの定理そのものではなく、その帰結である。)ウィックの定理は真空での期待値だけでなく、より一般的な行列要素を扱えるものであるが、この方法もまた同様により複雑な状態において期待値をとるとき、わずかな修正を加えるだけで用いることが可能である。しかしながらこの論文の目的では今の結果で十分であるので、詳細な説明は控えさせていただきます。

2.3 粒子空孔描像

真空中における演算子の期待値の計算は、理論原子核物理学では本当はあまり頻繁には必要ではない。頻繁に必要な計算は原子核の基底状態における期待値である。単一粒子系では、基底状態は可能な限り最も低い単一粒子状態を占める A 核子によって与えられる。もし単一粒子のエネルギー準位の昇順に

$$\epsilon_1 < \epsilon_2 < \dots < \epsilon_A < \epsilon_{A+1} < \dots, \quad (2.25)$$

のように添字をつけると、 A 核子の系のもっともエネルギーの低い状態は、

$$|\Psi_0\rangle = \prod_{i=1}^A \hat{a}_i^\dagger |0\rangle \quad (2.26)$$

で表され、エネルギーは

$$E_0 = \sum_{i=1}^A \epsilon_i \quad (2.27)$$

で表せる。エネルギー ϵ_A (占有された準位の一粒子エネルギーのうちで最大のもの) をフェルミ準位という。基底状態における演算子 \hat{O} の期待値は次式のように書き直すことができる。

$$\langle \Psi_0 | \hat{O} | \Psi_0 \rangle = \langle 0 | \hat{a}_A \dots \hat{a}_1 \hat{O} \hat{a}_1^\dagger \dots \hat{a}_A^\dagger | 0 \rangle \quad (2.28)$$

これは単に複雑な演算子の真空期待値であるから、上で記述した方法で原理的には評価できる。しかし、演算子の個数が多すぎて、計算は実行は実際には困難である。ところが、基底状態が真空状態と数学的な類似性をもつことに気づけば、計算の単純化が可能である。類似性とは、真空状態では

$$\hat{a}_i |0\rangle = 0 \quad (\text{すべての } i \text{ に対して}) \quad (2.29)$$

であり、基底状態では

$$\begin{aligned} \hat{a}_i |0\rangle &= 0 \quad (i > A) \\ \hat{a}_i^\dagger |0\rangle &= 0 \quad (i \leq A) \end{aligned} \quad (2.30)$$

であるということである。これは添字が A 以上と A 以下とで演算子を区別して扱えば、基底状態を真空と同様に扱ってよいことを意味する。この区別のための二つの形式がある。

- 今の表記に従い、式においてどの項のどの添字がどんな値の領域をとるか示す。
- 基底状態が真空の機能を取り入れるように演算子を再定義する。

両方の表記で系の行列要素と励起状態を考えることにより、これを例証する。

最も単純な励起状態は占有された状態から占有されていない状態へ引き上げられた一粒子をもつ場合である。これらは次式のように書き直される。

$$|\Psi_{mi}\rangle = \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_i |\Psi_0\rangle \quad (2.31)$$

そしてこの励起エネルギーは

$$E_{mi} - E_0 = \epsilon_m - \epsilon_i \quad (2.32)$$

と書ける。状態 $|\Psi_{mi}\rangle$ は占有されていない状態 i 、フェルミ準位の下の方の空孔、フェルミ準位の上の状態にある一粒子をもつ。このため一粒子・一空孔状態あるいは $1p1h$ 状態と呼ばれている。次に複雑な励起の型は $2p2h$ 状態であり、

$$|\Psi_{mnij}\rangle = \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_j |\Psi_0\rangle \quad (2.33)$$

のように表され、励起エネルギーは

$$E_{mnij} - E_0 = \epsilon_m + \epsilon_n - \epsilon_i - \epsilon_j \quad (2.34)$$

と表せる。一粒子演算子の期待値を考えてみると次式のように表せる。

$$\langle \Psi_0 | \sum_{ij=1}^{\infty} t_{ij} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j | \Psi_0 \rangle = \sum_{ij=1}^{\infty} t_{ij} \langle \Psi_0 | \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j | \Psi_0 \rangle \quad (2.35)$$

$j > 0$ のとき寄与は消えることは明確である。また $j \leq A$ のとき演算子は交換でき次式が導ける。

$$\langle \Psi_0 | \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j | \Psi_0 \rangle = \delta_{ij} - \langle \Psi_0 | \hat{a}_j \hat{a}_i^\dagger | \Psi_0 \rangle \quad (2.36)$$

上式の右辺の第二項は消える。便宜的にこの結果を書き換える。

$$\langle \Psi_0 | \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j | \Psi_0 \rangle = \delta_{ij} \theta_{iA} \quad (2.37)$$

記号 θ_{kl} は階段関数 (Heaviside 関数) θ に類似の記号で、次式で定義される。

$$\theta_{iA} = \begin{cases} 1 & (i \leq A) \\ 0 & (i > A) \end{cases} \quad (2.38)$$

θ_{kl} は添字 i について 1 から A までの範囲の総和を制限するために用いる。全体の行列要素は今次式のように書ける。

$$\langle \Psi_0 | \sum_{ij=1}^{\infty} t_{ij} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j | \Psi_0 \rangle = \sum_{ij=1}^{\infty} t_{ij} \delta_{ij} \theta_{iA} = \sum_{i=1}^A t_{ij} \quad (2.39)$$

即ち、全ての占有された状態について対角行列要素の合計をとればよいという、極めて簡単な結果が示せた。

もう一つの形式では、次の手順で演算子を再定義する。ここで新しい生成演算子 $\hat{\beta}_i^\dagger$ と消滅演算子 $\hat{\beta}_i$ を以下のとおり導入する。

$$\hat{\beta}_i^\dagger = \begin{cases} \hat{a}_i^\dagger & (i > A) \\ \hat{a}_i & (i \leq A) \end{cases}, \quad \hat{\beta}_i = \begin{cases} \hat{a}_i & (i > A) \\ \hat{a}_i^\dagger & (i \leq A) \end{cases} \quad (2.40)$$

フェルミ粒子の反交換関係が生成演算子と消滅演算子を完全に対等に扱っているため、これらの演算子はやはりフェルミ粒子を表す。これらの演算子にとってみれば原子核の基底状態は真空状態である。

$$\hat{\beta}_i | \Psi_0 \rangle = 0 \quad (\text{すべての } i \text{ に対して}) \quad (2.41)$$

また演算子 $\hat{\beta}_i^\dagger$ は $i \leq A$ のとき、 i 番目の一粒子状態にある粒子の消滅による空孔の生成を行う。

この枠組みにおいて $1p1h$ 状態は次式のように与えられる。

$$| \Psi_{mi} \rangle = \hat{\beta}_m^\dagger \hat{\beta}_i^\dagger | \Psi_0 \rangle \quad (m > A, i \leq A) \quad (2.42)$$

さらに $2p2h$ 状態は次式のように与えられる。

$$| \Psi_{mnij} \rangle = \hat{\beta}_m^\dagger \hat{\beta}_n^\dagger \hat{\beta}_i^\dagger \hat{\beta}_j^\dagger | \Psi_0 \rangle \quad (m, n > A, i, j \leq A) \quad (2.43)$$

上で記述した行列要素もまた演算子を書き直した後、この表記で計算できる。

$$\begin{aligned} \sum_{i,j=1}^{\infty} t_{ij} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j &= \sum_{i=1}^A \sum_{j=1}^A t_{ij} \hat{\beta}_i \hat{\beta}_j^\dagger + \sum_{i=A+1}^{\infty} \sum_{j=1}^A t_{ij} \hat{\beta}_i^\dagger \hat{\beta}_j^\dagger \\ &\quad + \sum_{i=1}^A \sum_{j=A+1}^{\infty} t_{ij} \hat{\beta}_i \hat{\beta}_j + \sum_{i=A+1}^{\infty} \sum_{j=A+1}^{\infty} t_{ij} \hat{\beta}_i^\dagger \hat{\beta}_j \end{aligned} \quad (2.44)$$

これらの演算子にとって $| \Psi_0 \rangle$ は真空であることを考慮すると、上式の第二項から最後の項は零の期待値をとることが直ちに分かる。だが一方で第一項は上で計算された結果を正確に再現する。

この第二の形式は、空孔が粒子と類似して扱える状況において特に有利となる。例として、閉核の内側の一空孔は空の殻の一粒子とまったく同様に扱える。

最後に、同じ状態の空孔の量子数と粒子の量子数がどのように関係づけられているかに簡潔に言及しておこう。空孔は粒子を破壊することにより生成されるので、すべての加法的な量子数は破壊された粒子の量子数と反対の符号を持つ。このために、準位を区別する番号 i として、このような量子数を用いる場合には、(2.40) 式の修正が必要となる。例えば、もし状態がよい角運動量 j をもつならば、磁気量子数 m について縮退した $2j + 1$ 個の状態に関する粒子生成演算子 \hat{a}_{jm}^\dagger 、($m = -j, \dots, j$) が存在するが、これらに対応した空孔生成演算子は次式のように定義されねばならない。

$$\hat{\beta}_{jm}^\dagger = (-1)^m \hat{a}_{j-m} \quad (2.45)$$

左辺の添字 m が、右辺では $-m$ になっていることに注目してほしい。なお、右辺の位相因子は Condon-Shortley の位相の慣習に合致させるために加えられたものである。

第3章 対相関

3.1 対相関の導入

今までに記述した単一粒子モデルにはいくつかの深刻な問題がある。問題の一つは球形の原子核の全角運動量について考察を行えば明白となる。この場合、単一粒子状態は良い角運動量子数をもつ。角運動量以外の量子数の全てを一文字 n で表すものとして状態 ϕ_{njm} について考える。 $m = -j \dots j$ をもった状態の組を j 殻と呼ぶことにする。 j 殻の状態は次の二つ場合のどちらかである。

- もし異なった m をもったすべての状態が充たされているならば、占有された m 個の状態の空間はいかなる回転においても不変であるため、 j 殻にある全ての核子の全角運動量は必ず零である。
- もし j 殻の一粒子状態のうちの一部の状態だけが占有されているなら、個々の核子の角運動量の結合の仕方に依存して全角運動量は様々な値をとりうる。しかしながら、エネルギーは単一粒子モデルにおいては占有された状態の単一粒子準位の和であるから、この結合の仕方に依存しない。したがって全角運動量の異なる状態が縮退することになる。この縮退は残留相互作用を考慮すれば取り除かれるであろう。

実験的には、異なった角運動量をもつ基底状態の縮退は起こらない。さらに以下の事実も分かっている。

- 偶々核では基底状態は常に零の角運動量を持つ。即ち、残留相互作用はこの（零という）特定の角運動量の状態のエネルギーを、他の角運動量を持つ状態のエネルギーより低くする。
- 偶々核は奇核よりも、より強く束縛される。
- 偶々核において基底状態と第一励起状態の間には $1 \sim 2\text{MeV}$ のエネルギー差がある（エネルギーギャップの存在）。

ただし、最後の性質は、基底状態回転帯に存在する多数の集団的回転状態は除外して述べたものである。重い核では回転励起に要するエネルギーは 100keV 以下しかない。

このように残留相互作用は、零の角運動量への結合を強く好む性質があり、対相関の理論モデルはこの性質をもつ単純なモデル相互作用により構成される。

相互作用をどのような形にすればよいかということに対するヒントを得るために、同じ j 殻にある一対の核子が、角運動量が零に組んだ場合に何が特別なのかを調べる。ここではスピンおよび波動関数の反対称化はまだ考慮しないものとする。まず、

$$\begin{aligned} \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) &= \sum_{m_1, m_2} (jm_1jm_2j|00) \psi_{m_1}(\vec{r}_1) \psi_{m_2}(\vec{r}_2) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2j+1}} \sum_m (-1)^{j-m} \psi_m(\vec{r}_1) \psi_{-m}(\vec{r}_2) \end{aligned} \quad (3.1)$$

とする。ここで $\psi_{m_1}(\vec{r}) = f(r) Y_{jm}(\Omega)$ である。これを代入しさらに計算を進めると、

$$\begin{aligned} \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) &= \frac{1}{\sqrt{2j+1}} f(r_1) f(r_2) \sum_m (-1)^{j-m} Y_{jm}(\Omega_1) Y_{j-m}(\Omega_2) \\ &= \frac{(-1)^j}{4\pi} \sqrt{2j+1} f(r_1) f(r_2) P_j(\cos \theta_{12}) \end{aligned} \quad (3.2)$$

ここで θ_{12} は Ω_1 と Ω_2 の方向の間の角度を表している。ルジャンドル多項式は引数値 1 付近でピークに達するので、二粒子確率分布は互いに近くに二つの核子を保とうとする傾向を示す。この結果はスピンと反対称性を考慮した場合でも基本的には変わらない。波動関数において射影 m と $-m$ をもった単一粒子状態は対を組んでおり、これは互いに時間反転の関係にあり、類似した確率分布をもつので、対相関は幾何学的な相関であるという主張に一定の根拠を与えている。

このように、零の角運動量になるように対をくもうとすることに関与する残留相互作用は引力的である。例えば、実際に、引力的な δ 関数相互作用はエネルギーを全角運動量 J に依存させ、とりわけ $J = 0$ の状態を最も低エネルギーにする。しかしこの相互作用は対相関のモデルを作るという目的には複雑過ぎる。もっと簡略化された相互作用として $J = 0$ の状態だけを下げよう、理想化された対相関相互作用を考える。二粒子の場合、 $J = 0$ の状態は次式で表せる。

$$|J = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2j+1}} \sum_{m=-j}^j (-1)^{j-m} |jm\rangle |j-m\rangle \quad (3.3)$$

この対を生成する演算子は次式で与えられる。

$$\hat{A}^\dagger = \frac{1}{2} \sum_{m=-j}^j (-1)^{j-m} \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_{-m}^\dagger \quad (3.4)$$

これ以降、演算子の添字 j は省略する。なお、演算子の前の因子 $\frac{1}{2}$ は規格化のためでなく、交換関係の観点から導入されたものであり、 \hat{A}^\dagger を真空に作用した結果得られる状態は規格化されていない。更なる展開として波動関数の位相を再定義することにより $(-1)^{j-m}$ の係数を消去する。ここで角運動量の固有状態を C.S 位相 (コンドン・ショートレイ位相) を用いて表し、新しい状態を導入する。

$$|m\rangle_{\text{BCS}} = \begin{cases} |m\rangle_{\text{CS}} & (m > 0) \\ (-1)^{j+m} |m\rangle_{\text{CS}} & (m < 0) \end{cases} \quad (3.5)$$

新しい位相は、超伝導のバーデン・クーパー・シュリファー理論に基づき「BCS」位相と名づける。

式 (3.4) に式 (3.6) を導入することで \hat{A}^\dagger は以下のように表せる。

$$\begin{aligned} \hat{A}^\dagger &= \frac{1}{2} \sum_{m>0} (-1)^{j-m} (\hat{a}_m^\dagger \hat{a}_{-m}^\dagger)_{\text{CS}} + \frac{1}{2} \sum_{m<0} (-1)^{j-m} (\hat{a}_m^\dagger \hat{a}_{-m}^\dagger)_{\text{CS}} \\ &= \frac{1}{2} \left(\sum_{m>0} \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_{-m}^\dagger + (-1)^{2m} \sum_{m<0} \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_{-m}^\dagger \right)_{\text{BCS}} \\ &= \frac{1}{2} \left(\sum_{m>0} \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_{-m}^\dagger + \sum_{m>0} \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_{-m}^\dagger \right)_{\text{BCS}} \\ &= \sum_{m>0} (\hat{a}_m^\dagger \hat{a}_{-m}^\dagger)_{\text{BCS}} \end{aligned} \quad (3.6)$$

ここで m は半整数であるので $(-1)^{2m} = -1$ となることに注意しなければならない。

この \hat{A}^\dagger を用いて、対相関ポテンシャルを次式のように構成してみよう。

$$\hat{V}_P = -G \hat{A}^\dagger \hat{A} = -G \sum_{m, m' > 0} \hat{a}_{m'}^\dagger \hat{a}_{-m'}^\dagger \hat{a}_{-m} \hat{a}_m \quad (3.7)$$

上式の G は強度を表し、正の定数である。総和は m の正の値についてのみとる。総和を正負すべての m の値についてとるならば、前に係数 $\frac{1}{4}$ をかけねばならない。 \hat{V}_P の定義は粒子数演算子からヒントを得たもので、零の角運動量に組む対を数えることを想定したものである。 \hat{A}^\dagger は単純な生成演算子ではないので、演算子が望んだ通りに働くか示す必要がある。反対称化された二粒子状態 $|m_1 m_2\rangle$ の空間において \hat{V}_P のスペクトルを計算する。この行列要素は

$$\langle m'_1 m'_2 | \hat{V}_P | m_1 m_2 \rangle = -G \delta_{m'_1, -m'_2} \delta_{m_1, -m_2} \quad (3.8)$$

で表せる。(実はこの結果の符号は正と負の m の順序がブラとケットで同じときのみ成立する。例えば、 $m_1, m'_1 > 0$ と $m_2, m'_2 < 0$ のときなどである。) 状態 $|m_1 m_2\rangle$ の個数は $N = \binom{2j+1}{2}$ で表される。以上により $m > 0$ では $|m - m\rangle$ の形の $\Omega = \frac{2j+1}{2}$ 状態となり、 \hat{V}_P はすべての行列要素と零の行列要素の間に $-G$ の行列要素をもつ。始めの Ω の状態のように二粒子の基底をきちんと並べることを想定し、成分 $(c_1, \dots, c_\Omega, c_{\Omega+1}, \dots, c_N)$ で表せるこの空間のベクトルは \hat{V}_P の作用により次式のように記せる。

$$\hat{V}_P \begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_\Omega \\ c_{\Omega+1} \\ \vdots \\ c_N \end{pmatrix} = -G \begin{pmatrix} C \\ \vdots \\ C \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.9)$$

上式において $C = \sum_{j=1}^{\Omega} c_j$ である。このようにして $\sum_m |m - m\rangle$ によって与えられた状態 (零の全角運動量をもつ状態) のみを $-G\Omega$ だけエネルギーを下げ、その他の状態には何の作用も及ぼさないという、欲した通りの性質をもった対ポテンシャルを見出すことができた。

3.2 セニオリティモデル

j 殻における N 粒子の場合についての前節の考察を拡張しよう。再び演算子

$$\hat{A}^\dagger = \sum_{m>0} \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_{-m}^\dagger \quad (3.10)$$

を用いる。この演算子は、真空中に作用したとき、零の全角運動量に結合した二粒子を生成する。それでは、この演算子を繰り返して真空中に適用することは単にこのような対を複数個生成するということであろうか。単純にそうとは言えない。なぜならば、例えば、演算子 $(\hat{A}^\dagger)^2$ はパウリの原理により消える $(\hat{a}^\dagger)^2$ のような項を含んでいるからである。

二粒子の場合、つまりは $N = 2$ のとき、状態 $\hat{A}^\dagger |0\rangle$ がすべての他の二粒子状態よりも低いエネルギーをもつことは既に記述した。(これを縮退といった。) N が大きな数のときの状態の構成は演算子代数のよい例である。ここでは \hat{A}^\dagger に加えて粒子数演算子

$$\hat{N} = \sum_{m>-j}^j \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m \quad (3.11)$$

も重要な役割を果たす。(ここで上式の総和は正負にわたる全ての m の値についてとられていることに留意していただきたい。) また、対ポテンシャルは

$$\hat{V}_P = -G \hat{A}^\dagger \hat{A} = -G \sum_{m, m' > 0} \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_{-m'}^\dagger \hat{a}_{-m} \hat{a}_m \quad (3.12)$$

のように表せる。これらの演算子の間に交換関係を使うだけで、 \hat{V}_P の固有値を構成することができる。理由としては \hat{V}_P は粒子数を変えないのだから、 $[\hat{N}, \hat{V}_P] = 0$ であることは明白である。他の交換関係も簡単に求めることができる。

\hat{A}^\dagger と \hat{N} の交換関係は

$$\begin{aligned}
[\hat{A}^\dagger, \hat{N}] &= \sum_{m>0, m'} [\hat{a}_m^\dagger \hat{a}_{-m}^\dagger, \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_{m'}^\dagger] \\
&= \sum_{m>0, m'} \left(\hat{a}_m^\dagger \hat{a}_{-m}^\dagger \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_{m'}^\dagger - \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_{m'}^\dagger \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_{-m}^\dagger \right) \\
&= \sum_{m>0, m'} \left(\hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_{-m}^\dagger \hat{a}_{m'}^\dagger - \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_{m'}^\dagger \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_{-m}^\dagger \right) \\
&= \sum_{m>0, m'} \left(\delta_{m', -m} \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m^\dagger - \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_{-m} - \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_{m'}^\dagger \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_{-m}^\dagger \right) \\
&= \sum_{m>0, m'} \left(\delta_{m', -m} \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m^\dagger - \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_{-m} - \delta_{mm'} \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_{-m}^\dagger + \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_{-m} \right) \\
&= \sum_{m>0} \hat{a}_{-m}^\dagger \hat{a}_m^\dagger - \sum_{m>0} \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_{-m}^\dagger \\
&= - \sum_{m>0} \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_{-m}^\dagger - \sum_{m>0} \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_{-m}^\dagger \\
&= -2\hat{A}^\dagger
\end{aligned} \tag{3.13}$$

となる。この結果は、 \hat{A}^\dagger が \hat{N} に対する昇演算子として働き、粒子数という量子数の値を 2 だけ上昇させるという事実を述べている。

$$\hat{N} \hat{A}^\dagger = \hat{A}^\dagger (\hat{N} + 2) \tag{3.14}$$

また、 \hat{A} と \hat{A}^\dagger の交換関係は

$$\begin{aligned}
[\hat{A}, \hat{A}^\dagger] &= \sum_{mm'>0} [\hat{a}_{-m} \hat{a}_m, \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_{-m'}^\dagger] \\
&= \sum_{mm'>0} \left(\hat{a}_{-m} \hat{a}_m \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_{-m'}^\dagger - \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_{-m'}^\dagger \hat{a}_{-m} \hat{a}_m \right) \\
&= \sum_{mm'>0} \left(\delta_{mm'} - \delta_{mm'} \hat{a}_{-m'}^\dagger \hat{a}_{-m} - \delta_{mm'} \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m + \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_{-m'}^\dagger \hat{a}_{-m} \hat{a}_m - \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_{-m'}^\dagger \hat{a}_{-m} \hat{a}_m \right) \\
&= \sum_{m>0} 1 - \sum_{m>0} \hat{a}_{-m}^\dagger \hat{a}_{-m} - \sum_{m>0} \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m \\
&= \sum_{m>0} 1 - \sum_{m<0} \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m - \sum_{m>0} \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m \\
&= \Omega - \hat{N}
\end{aligned} \tag{3.15}$$

である。ここで $\Omega = j - \frac{1}{2}$ は正の角運動量の射影 (m) の個数を表している。上式の結果を用いると \hat{V}_P と \hat{A}^\dagger の交換関係は

$$\begin{aligned}
[\hat{V}_P, \hat{A}^\dagger] &= -G[\hat{A}^\dagger \hat{A}, \hat{A}^\dagger] \\
&= -G\hat{A}^\dagger[\hat{A}, \hat{A}^\dagger] - G[\hat{A}^\dagger, \hat{A}^\dagger]\hat{A} \\
&= -G\hat{A}^\dagger[\hat{A}, \hat{A}^\dagger] \\
&= -G\hat{A}^\dagger(\Omega - \hat{N}) \\
&= -G(\Omega\hat{A}^\dagger - \hat{A}^\dagger\hat{N}) \\
&= -G(\Omega\hat{A}^\dagger - [\hat{A}^\dagger, \hat{N}] - \hat{N}\hat{A}^\dagger) \\
&= -G(\Omega + 2 - \hat{N})\hat{A}^\dagger
\end{aligned} \tag{3.16}$$

と表せる。この結果は \hat{A}^\dagger が粒子数に依存する量だけ \hat{V}_P の固有値をシフトさせることを意味している。同様に \hat{A}^\dagger の冪乗と \hat{V}_P との交換関係も求めることができる。

$$\begin{aligned}
[\hat{V}_P, (\hat{A}^\dagger)^\nu] &= \hat{V}_P (\hat{A}^\dagger)^\nu - (\hat{A}^\dagger)^\nu \hat{V}_P \\
&= [\hat{V}_P, \hat{A}^\dagger] (\hat{A}^\dagger)^{\nu-1} + \hat{A}^\dagger [\hat{V}_P, \hat{A}^\dagger] (\hat{A}^\dagger)^{\nu-2} + \cdots + (\hat{A}^\dagger)^{\nu-1} [\hat{V}_P, \hat{A}^\dagger] \\
&= -G \sum_{i=0}^{\nu-1} (\hat{A}^\dagger)^i (\Omega + 2 - \hat{N}) (\hat{A}^\dagger)^{\nu-i}
\end{aligned} \tag{3.17}$$

上式に $(\hat{A}^\dagger)^i \hat{N} = (\hat{N} - 2i) (\hat{A}^\dagger)^i$ を用いると、

$$\begin{aligned}
[\hat{V}_P, (\hat{A}^\dagger)^\nu] &= -G \sum_{i=0}^{\nu-1} (\Omega + 2 - \hat{N} + 2i) (\hat{A}^\dagger)^\nu \\
&= -G[\nu(\Omega + 2 - \hat{N}) + \nu(\nu - 1)] (\hat{A}^\dagger)^\nu
\end{aligned} \tag{3.18}$$

N 粒子状態に対する基底は $2j + 1 = 2\Omega$ 個の単一粒子準位に粒子を分配することにより得られる。配位は $d_N = \binom{2\Omega}{N}$ 個存在する。 $(m, -m)$ の組み合わせの全粒子における配位数は $p_N = \binom{\Omega}{\frac{N}{2}}$ で表せ、正の射影の一粒子状態に一組を分配する方法の数を意味している。 $N = 2$ のとき対になった状態は $\hat{A}^\dagger |0\rangle$ で表され、そのエネルギーは次式により決められる。

$$\hat{V}_P \hat{A}^\dagger |0\rangle = [\hat{V}_P, \hat{A}^\dagger] |0\rangle = -G(\Omega + 2 - \hat{N}) \hat{A}^\dagger |0\rangle = -G\Omega \hat{A}^\dagger |0\rangle \tag{3.19}$$

$N = 4$ のときの最も低い状態は $(\hat{A}^\dagger)^2 |0\rangle$ であろうと予想される。演算子 \hat{A}^\dagger は角運動量が零の演算子なので、その冪乗もまた、角運動量が零の演算子である。角運動量が零の演算子を真空という角運動量が零の状態に作用させた結果は、角運動量が零の状態であるから、 $(\hat{A}^\dagger)^2 |0\rangle$ の角運動量は零である。また、そのエネルギーは先ほどと同様にして、交換関係から簡単に導くことができる。

$$\begin{aligned}
\hat{V}_P (\hat{A}^\dagger)^2 |0\rangle &= [\hat{V}_P, (\hat{A}^\dagger)^2] |0\rangle \\
&= -G[2(\Omega + 2 - \hat{N}) + 2] (\hat{A}^\dagger)^2 |0\rangle \\
&= -2G(\Omega - 1) (\hat{A}^\dagger)^2 |0\rangle
\end{aligned} \tag{3.20}$$

すなわちこの状態は、エネルギーが $E = -2G(\Omega - 1)$ である固有状態である。

次に他の状態はどうなのか考える。二粒子の場合において残りの $d_N - 1$ 状態を $\hat{B}_i^{\dagger(2)} |0\rangle$, ($i = 1, \dots, d_N - 1$) と表すことにする。これらは零のエネルギーをもつということはすでに確かめたので、

$$\hat{V}_P \hat{B}_i^{\dagger(2)} |0\rangle = 0 \tag{3.21}$$

が成り立つ。この $\hat{B}_i^{\dagger(2)}$ を使って、4 粒子状態の 2 番目の集団 $\hat{A}^\dagger \hat{B}_i^{\dagger(2)} |0\rangle$ を構成することができる。これらの状態が、やはりハミルトニアン \hat{V}_P の固有状態であることが下式で示される。

$$\begin{aligned}
\hat{V}_P \hat{A}^\dagger \hat{B}_i^{\dagger(2)} |0\rangle &= [\hat{V}_P, \hat{A}^\dagger] \hat{B}_i^{\dagger(2)} |0\rangle \\
&= -G(\Omega + 2 - \hat{N}) \hat{A}^\dagger \hat{B}_i^{\dagger(2)} |0\rangle \\
&= -G(\Omega - 2) \hat{A}^\dagger \hat{B}_i^{\dagger(2)} |0\rangle
\end{aligned} \tag{3.22}$$

ここまでで、 d_2 個の 4 粒子の固有状態を具体的に構成することができた。そして、残りの全ての状態は、エネルギーが零の固有状態なのである。このことを示すには、まずポテンシャル \hat{V}_P が負定値であることに注意しなければならない。演算子が負定値であるとは、任意の状態に対するその演算子の期待値が負または零であることを意味する。 \hat{V}_P が負定値であることは、どんな $|\Psi\rangle$ に対しても、

$$\langle \Psi | \hat{V}_P | \Psi \rangle = -G \langle \Psi | \hat{A}^\dagger \hat{A} | \Psi \rangle = -G |\langle \hat{A} | \Psi \rangle|^2 \leq 0 \tag{3.23}$$

となることで示される。さて、負定値の演算子の固有値は負または零である。また、演算子の固有値の総和は、演算子のトレース(跡)に等しい。従って、これまでに導いた固有値の総和がトレースに等しければ、残りの固有値は全て零であると結論できる。固有値の総和は

$$-2G(\Omega - 1) - G(d_2 - 1)(\Omega - 2) = -G\Omega(2\Omega^2 - 5\Omega + 3) \quad (3.24)$$

である。一方で \hat{V}_P のトレースは、

$$\begin{aligned} \text{Tr}\{\hat{V}_P\} &= -G \sum_{mm'>0} \sum_i \langle \Psi_i | \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_{-m}^\dagger \hat{a}_{m'} \hat{a}_{-m'} | \Psi_i \rangle \\ &= -G \sum_{m>0} \sum_i \langle \Psi_i | \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_{-m}^\dagger \hat{a}_m \hat{a}_{-m} | \Psi_i \rangle \end{aligned} \quad (3.25)$$

である。上式の状態 $|\Psi_i\rangle$, ($i = 1, \dots, d_4$) は 4 粒子空間を張る。行列要素は、 m と $-m$ の状態対で同時に占有されているものが何対あるかを数える。ある状態対が占有されているのであれば、残りの二つの粒子は残りの $2\Omega - 2$ 状態に分配される。その分配の仕方は $\binom{2\Omega - 2}{N}$ 通りある。それゆえトレースは、

$$\begin{aligned} \text{Tr}\{\hat{V}_P\} &= -G \sum_{m>0} \binom{2\Omega - 2}{N} \\ &= -G\Omega \binom{2\Omega - 2}{N} \\ &= \frac{(2\Omega - 2)(2\Omega - 3)}{2} \\ &= -G\Omega(2\Omega^2 - 5\Omega + 3) \end{aligned} \quad (3.26)$$

である。この式は (3.24) 式に一致する。従って、他の全状態は固有値が零の固有状態である。これらの状態を $\hat{B}_i^{\dagger(4)}|0\rangle$, ($i = 1, \dots, d_4 - d_2$) で示すことにする。

ここまで考察しておけば、一般の場合について取りくむ準備が出来た。 \hat{A}^\dagger によって生成された「対」の数が特別な役割をになっているように見える。それゆえ新しい量子数 s (seniority, セニオリティ) を導入すると都合がよい。セニオリティは対を組んでいない核子の個数を意味している。今までに述べた粒子の個数が 4 個以下の場合について、固有状態の構成法とセニオリティによるラベリングを表 3.1 に整理しておく。

表 3.1: 粒子数 $N = 4$ までの固有状態とセニオリティ s

N	s	state(s)
2	0	$\hat{A}^\dagger 0\rangle$
2	2	$\hat{B}_i^{\dagger(2)} 0\rangle$
3	1	$\hat{A}^\dagger \hat{a}_m^\dagger 0\rangle$
3	3	$\hat{B}_i^{\dagger(3)} 0\rangle$
4	0	$(\hat{A}^\dagger)^2 0\rangle$
4	2	$\hat{A}^\dagger \hat{B}_i^{\dagger(2)} 0\rangle$
4	4	$\hat{B}_i^{\dagger(4)} 0\rangle$

表 3.1 の構成法を再帰的に適用することにより一般の偶数の N についての固有状態が次の形の状態となることが推測できる。

$$\begin{aligned}
s &= 0: & (\hat{A}^\dagger)^{\frac{N}{2}} \\
s &= 2: & (\hat{A}^\dagger)^{\frac{(N-2)}{2}} \hat{B}_i^{\dagger(2)} |0\rangle \\
&\vdots & \vdots \\
s &= (\text{一般の偶数}): & (\hat{A}^\dagger)^{\frac{(N-s)}{2}} \hat{B}_i^{\dagger(s)} |0\rangle
\end{aligned} \tag{3.27}$$

演算子 $\hat{B}_i^{\dagger(s)}$ は粒子数 $N = s$ の系のエネルギー固有値が零の状態を生成する演算子である。エネルギーが零の状態は、 $\hat{B}_i^{\dagger(2)}$, $\hat{B}_i^{\dagger(4)}$, \dots , $\hat{B}_i^{\dagger(s-2)}$ および \hat{A}^\dagger によって具体的に構成できるエネルギーが負の固有状態以外の状態として構成することができる。 $\hat{V}_P \hat{B}_i^{\dagger(s)} |0\rangle = 0$ であることを利用して、これらの全ての状態のエネルギーは次式で記述されることが簡単に分かる。

$$\begin{aligned}
\hat{V}_P (\hat{A}^\dagger)^{\frac{(N-s)}{2}} \hat{B}_i^{\dagger(s)} |0\rangle &= [\hat{V}_P, \hat{A}^\dagger]^{\frac{(N-s)}{2}} \hat{B}_i^{\dagger(s)} |0\rangle \\
&= -G \left[\frac{N-s}{2} (\Omega + 2 - \hat{N}) + \frac{N-s}{4} (N-s-2) \right] (\hat{A}^\dagger)^{\frac{(N-s)}{2}} \hat{B}_i^{\dagger(s)} |0\rangle \\
&= -\frac{G}{4} (N-s)(2\Omega + 2 - \hat{N} - s) (\hat{A}^\dagger)^{\frac{(N-s)}{2}} \hat{B}_i^{\dagger(s)} |0\rangle
\end{aligned} \tag{3.28}$$

従って、エネルギー固有値は

$$E_s^N = -\frac{G}{4} (N-s)(2\Omega + 2 - \hat{N} - s) \tag{3.29}$$

である。

N が奇数の値のときは、半端な 1 個の粒子をまず最初に生成しておかねばならない。例えば $s=1$ に対しては固有状態は次式で表される。

$$\left(\hat{A}^\dagger \right)^{\frac{(N-1)}{2}} \hat{a}_m^\dagger |0\rangle \quad (m = -j, \dots, +j) \tag{3.30}$$

エネルギーは交換関係だけを使って求めることができ、結果は (3.29) 式と同じである。ただ、 N と s が奇数の値をとることだけが違っている。

今まで N のより大きな値では何が起きるのかという問題は、それとなく無視してきた。帰納的な構成法は状態の数が N とともに増さなければ破綻する。これは $N = \frac{\Omega}{2}$ を越える際に起こる。パウリの原理のため、 \hat{A}^\dagger を何度も作用させて生成された状態はもはや既に得られていた状態と独立ではないのである。しかしながら、完全に満たされた殻から出発して、そこに空孔を付け加えると考えれば、おなじ方法を適用できる。もし空孔の生成演算子と消滅演算子を

$$\hat{\beta}_m^\dagger = \hat{a}_{-m} \quad , \quad \hat{\beta}_m = \hat{a}_{-m}^\dagger \tag{3.31}$$

で定義すれば、対ポテンシャルは交換の操作を使って、下記のように書き直せる。

$$\begin{aligned}
\hat{V}_P &= -G \sum_{mm' > 0} \hat{\beta}_{-m} \hat{\beta}_m \hat{\beta}_{m'}^\dagger \hat{\beta}_{-m'}^\dagger \\
&= -G \sum_{mm' > 0} \left[\hat{\beta}_{m'}^\dagger \hat{\beta}_{-m'}^\dagger \hat{\beta}_{-m} \hat{\beta}_m + \delta_{mm'} (\hat{\beta}_{-m} \hat{\beta}_{-m'}^\dagger - \hat{\beta}_{m'}^\dagger \hat{\beta}_m) \right] \\
&= -G \sum_{mm' > 0} \hat{\beta}_{m'}^\dagger \hat{\beta}_{-m'}^\dagger \hat{\beta}_{-m} \hat{\beta}_m - G(\Omega - N)
\end{aligned} \tag{3.32}$$

このように空孔を用いて表した対ポテンシャルは N だけに依存する寄与を与える項以外は粒子を用いて表した対ポテンシャルと全く同じ形をとる。

この単純化されたモデルでは隣接する原子核の基底状態の相対的な位置関係が記述できるとは思えないので、 N に依存した項は無視してよいとすると、準位構造は $N = \frac{\Omega}{2}$ に関して対称になる。ただし、エネルギーの表式において N は空孔の数 $2\Omega - N$ によりおきかえられねばならず、 s の意味は対をくんでいない空孔としなければならない。したがって、 $s \leq 2\Omega - N$ でなければならない。

この節の結果を要約すると、原子核のエネルギー準位は、単一粒子モデルにおいては、全角運動量の値に依存せず、完全に縮退する。しかし対相関相互作用があると、縮退はとけ、スペクトルはセニオリティ量子数 s によりラベルされる。最も低い状態は最も小さい s の値をもつもので、そのとき s は 0 または 1 である。次に高い状態までの距離は次式によって表せる。

$$E_{s+2}^N - E_s^N = G(\Omega - s) \quad (3.33)$$

だから偶々核における基底状態 ($S=0$) と第一励起状態の間には $G\Omega$ のエネルギーギャップが存在する。この状態のもつセニオリティは零であるから、原子核のスピンが必ず零であることは明らかである。奇核では、エネルギーギャップは $G(\Omega - 1)$ より小さい値をとる。

大きい殻における少数の粒子の極限 ($\Omega \gg N, s, i$) では、エネルギーは次式で近似できる。

$$E_s^N \approx -\frac{G}{2}(N - s)\Omega \quad (3.34)$$

即ち、個々の対が $G\Omega$ だけの寄与をする。粒子数がより大きな数のときはパウリの原理により対相関の効果は減少する。

<例： $j = \frac{7}{2}$ 殻での対相関>

(3.29) 式に $\Omega = 4$ を代入して

$$E_s^N = -\frac{G}{4}(N - s)(10 - N - s) \quad (3.35)$$

このスペクトルを図 (3.1) として示す。この図は見栄えをよくするために $N = 5$ 以降から真の値からシフトさせて粒子状態と空孔状態を対称になるようにしてある。

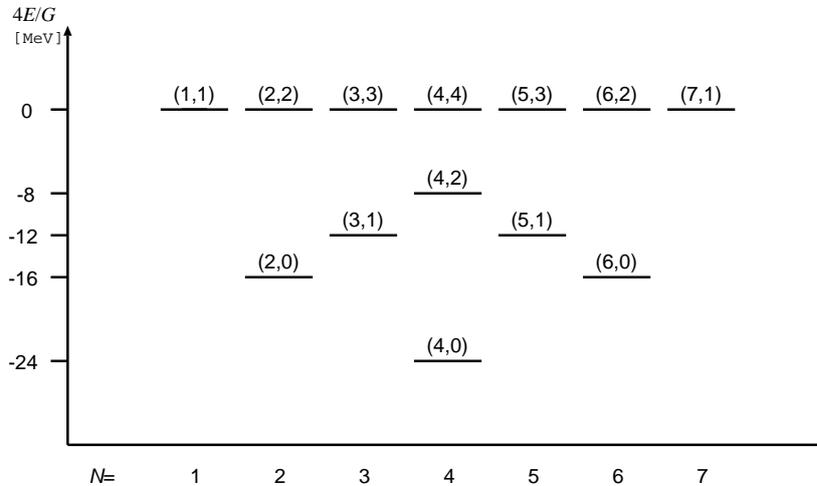


図 3.1: $j = \frac{7}{2}$ 殻でのセニオリティモデルのスペクトル (単一状態は (N, s) としてラベルされ、それぞれの N において最も高い状態はエネルギーは零である。)

3.3 準スピンモデル

先ほどの結果に勝るものではないが、よりエレガントに結果を導く方法がある。以下で定義される演算子、

$$\begin{aligned}\hat{S}_+ &= \hat{A}^\dagger = \sum_{m>0} \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_{-m}^\dagger \\ \hat{S}_- &= \hat{A} = \sum_{m>0} \hat{a}_{-m} \hat{a}_m \\ \hat{S}_0 &= \frac{1}{2} \sum_{m>0} (\hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m + \hat{a}_{-m}^\dagger \hat{a}_{-m} - 1)\end{aligned}\quad (3.36)$$

は、以下に示したとおり、

$$[\hat{S}_+, \hat{S}_-] = 2\hat{S}_0, \quad [\hat{S}_0, \hat{S}_+] = \hat{S}_+, \quad [\hat{S}_0, \hat{S}_-] = -\hat{S}_- \quad (3.37)$$

角運動量演算子 \hat{J}_+ , \hat{J}_- , \hat{J}_0 と正確に同じ交換関係を持つため準スピンという名を付けられている。これを用いて対相関ポテンシャルを次のように表現できる。

$$\hat{V}_P = -G\hat{A}^\dagger \hat{A} = -G\hat{S}_+ \hat{S}_- \quad (3.38)$$

一方で演算子 \hat{s}_0 は次のように書き直せる。

$$\hat{S}_0 = \frac{1}{2}\hat{N} - \frac{1}{2} \sum_{m>0} 1 = \frac{1}{2}(\hat{N} - \Omega) \quad (3.39)$$

角運動量演算子の二乗と同じものを準スピンについても以下のとおり定義する。

$$\hat{S}^2 = \hat{S}_+ \hat{S}_- - \hat{S}_0 + \hat{S}_0^2 \quad (3.40)$$

これを用いると、 \hat{V}_P は、

$$\hat{V}_P = -G(\hat{S}^2 - \hat{S}_0^2 + \hat{S}_0) \quad (3.41)$$

と表せる。このようにして、 \hat{V}_P の固有値は、準スピンの固有値に関連づけることができた。このような問題は角運動量に関連してよく取り扱われる。 \hat{S}^2 の固有値を $\sigma(\sigma + 1)$ とし、また (3.38) 式を使って \hat{S}^2 の固有値を表すと、

$$E_\sigma^N = -G \left[\sigma(\sigma + 1) - \frac{1}{4}(N - \Omega)^2 + \frac{1}{2}(N - \Omega) \right] \quad (3.42)$$

となる。このように形式的に問題は解けた。残る問題は、新しい量子数 σ とセニオリティ s との関係を示すことである。ここで固定された σ の状態は射影 \hat{S}_0 の異なる固有値によって区別される。演算子 \hat{S}_\pm は生成と消滅する対を表しているので、すべて同じセニオリティをもたなければならない。したがって σ は s と Ω の関数でなければならない。これは \hat{S}_0 の定義から最も低い射影 $-\sigma = \frac{1}{2}(N - \Omega)$ をもつ状態を調べることにより導くことができる。また類似の状態は次式の性質をもつ。

$$\hat{S}_- | -\sigma \rangle = \hat{A} | -\sigma \rangle = 0 \quad (3.43)$$

しかし物理的にいえばこれは状態に対が存在しないこと意味する。つまり $s = N$ である。だから σ は次式のように与えられなければならない。

$$\sigma = \frac{1}{2}(\Omega - s) \quad (3.44)$$

この結果を (3.42) 式に代入すると、(3.29) 式を得る。また類似した考え方で σ の粒子数のとれる範囲も同一として求めることができる。

3.4 BCS理論 (近似)

ある種の金属または合金の電気抵抗が、その物質に固有な温度以下で 0 になる現象を、超伝導、その状態を超伝導状態という。これは、1911 年、H.Kamerlingh-Onnes によって 4.2[K] 以下の水銀について発見され以来、1980 年代後半の高温超伝導ブームに続く長い実験的探求により様々な物質がなりうる状態であることがわかってきた。ところで、軽い核と閉殻近傍の核を除いて、ほとんどの原子核の基底状態は超伝導状態になっていると考えられている。すなわち、フェルミ面近傍の中性子和陽子がそれぞれクーバー対と呼ばれる対を形成している。原子核のクーバー対は、運動量が逆向きではなく、角運動量の方向が逆向きの核子どうしが強く相関することにより形成される。結合エネルギーの偶奇効果、偶々核と偶奇核の間の励起スペクトルの相違、変形核の慣性モーメントが剛体値の $\frac{1}{2} \sim \frac{1}{3}$ に減少しているなどの実験事実は、核が超伝導状態になっていることの反映である。BCS 理論とは、1957 年、J.Bardeen、L.N.Cooper、および J.R.Schrieffer によって提唱された超伝導の微視的理論である。ここでは、彼らの推測による超伝導体での基底状態の決定にならぬ、以下の式で偶々核の場合の波動関数がよく表される。

$$|\text{BCS}\rangle = \prod_{k>0}^{\infty} (u_k + v_k \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_{-k}^\dagger |0\rangle \quad (3.45)$$

式中の u_k 、 v_k が変分パラメータである。 k は一粒子状態のラベルであり、ゼロでない整数値をとるものとし、 k でラベルされる状態があれば、 $-k$ でラベルされる状態もあるとする。時間反転不変なハミルトニアンに対しては、状態 k と状態 $-k$ は時間反転操作によってお互いに変換される状態であるようにラベルを割り分ける。例えば、個体中の電子のような第零近似として、空間的に一様で並進対称なポテンシャルの下で運動する粒子を扱う場合は、 k を波数ベクトル、 s_z をスピンの z 成分として、状態 $|k, s_z\rangle$ と状態 $|-k, -s_z\rangle$ とが時間反転状態対となる。一方、原子核のような第零近似として空間的に局在した球対称なポテンシャルをもつ状態の場合は、全角運動量を j 、その z 成分を m として状態 $|j, m\rangle$ と $|j, -m\rangle$ が時間反転状態対となる。ただし、対を組む状態間の相対位相を必ずつけることに注意しなければならない。(3.45) 式の乗積記号 \prod の添字の k の範囲は、すべての正の値をとりうる。 u_k^2 、 v_k^2 は状態の対 $(k, -k)$ の占有確率を表す。これらに状態のノルムが依存しないように以下の条件を与える。

$$|u_k^2| + |v_k^2| = 1 \quad (3.46)$$

なお 3.4 節の執筆にあたっては文献 [5] の 3.1、3.2 節を参考にした。

3.4.1 一般的な相互作用の場合

多体系がハミルトニアン

$$\hat{H} = \sum_{k_1 k_2 \neq 0} t_{k_1 k_2} \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_2} + \frac{1}{4} \sum_{k_1 k_2 k_3 k_4 \neq 0} v_{k_1 k_2 k_3 k_4} \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_2}^\dagger \hat{a}_{k_4} \hat{a}_{k_3} \quad (3.47)$$

によって記述されると仮定する¹。試行波動関数 (3.45) 式のパラメータである u と v は、エネルギーの変分によって決定される。しかしながらこの変分は、粒子数の期待値が理想値 N に一致するべきであるという、以下の拘束条件によって制限される。

$$\langle \text{BCS} | \hat{N} | \text{BCS} \rangle = 2 \sum_{k>0} v_k^2 = N \quad (3.48)$$

この条件は、変分ハミルトニアンに項 $-\lambda \hat{N}$ を加えることにより満たすことができる。

$$\hat{H}' = \hat{H} - \lambda \hat{N} \quad (3.49)$$

¹ 上式の総和記号で $k = 0$ を除外するのは、 $K = 0$ に対応する状態がないためである。

ここで、ラグランジュ乗数 λ は、条件 (3.48) によって決定される。ここで $E = \langle \text{BCS} | \hat{H} | \text{BCS} \rangle$ とすると、

$$\lambda = \frac{dE}{dN} \quad (3.50)$$

が成り立つことが示せるので、 λ は粒子数の変化に伴うエネルギーの増加を表すことが分かる。このことから λ は化学ポテンシャル、あるいはフェルミ準位と呼ばれる。(3.45) 式、(3.47) 式から、 \hat{H}' の BCS 期待値として、

$$\langle \text{BCS} | \hat{H}' | \text{BCS} \rangle = \sum_{k \neq 0} \left((t_{kk} - \lambda) v_k^2 + \frac{1}{2} \sum_{k' \neq 0} \bar{v}_{kk'kk'} v_k^2 v_{k'}^2 \right) + \sum_{kk' > 0} \bar{v}_{kk'kk'} u_k v_k u_{k'} v_{k'} \quad (3.51)$$

を得る²。BCS 波動関数はパラメータ v_k 、そして (3.46) 式によって完全に決定されるので、変分

$$\delta \langle \text{BCS} | \hat{H}' | \text{BCS} \rangle = 0 \quad (3.52)$$

により次式を導くことができる。

$$\left(\frac{\partial}{\partial v_k} + \frac{du_k}{dv_k} \frac{\partial}{\partial u_k} \right) \langle \text{BCS} | \hat{H}' | \text{BCS} \rangle = 0 \quad (3.53)$$

上式の微分を実行することにより、方程式、

$$2\tilde{\epsilon}_k u_k v_k + \Delta_k (v_k^2 - u_k^2) = 0, \quad (k > 0) \quad (3.54)$$

を得る。上式の $\tilde{\epsilon}_k$ とギャップパラメータ Δ_k は、

$$\tilde{\epsilon}_k = \frac{1}{2} \left(t_{kk} + t_{\bar{k}\bar{k}} + \sum_{k' \neq 0} (\bar{v}_{kk'kk'} + \bar{v}_{\bar{k}\bar{k}'\bar{k}\bar{k}'}) v_{k'}^2 \right) - \lambda \quad (3.55)$$

$$\Delta_k = - \sum_{k' > 0} \bar{v}_{k\bar{k}k'\bar{k}'} u_{k'} v_{k'} \quad (3.56)$$

である。 $\tilde{\epsilon}_k$ と Δ_k の値が決まれば、(3.46) 式と (3.54) 式により、 u_k^2 と v_k^2 が以下の解を持つ。

$$v_k^2 = \frac{1}{2} \left(1 \pm \frac{\tilde{\epsilon}_k}{\sqrt{(\tilde{\epsilon}_k)^2 + (\Delta_k)^2}} \right) \quad (3.57)$$

$$u_k^2 = \frac{1}{2} \left(1 \mp \frac{\tilde{\epsilon}_k}{\sqrt{(\tilde{\epsilon}_k)^2 + (\Delta_k)^2}} \right) \quad (3.58)$$

相互作用がない場合は、 $\Delta_k = 0$ となるので占有された軌道 ($\tilde{\epsilon}_k < 0$) は、 $v_k^2 = 1$ 、 $u_k^2 = 0$ を持つ。それゆえ (3.57) 式と (3.58) 式の複合のうち基底状態の解は、

$$v_k^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\tilde{\epsilon}_k}{\sqrt{(\tilde{\epsilon}_k)^2 + (\Delta_k)^2}} \right) \quad (3.59)$$

$$u_k^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\tilde{\epsilon}_k}{\sqrt{(\tilde{\epsilon}_k)^2 + (\Delta_k)^2}} \right) \quad (3.60)$$

である。従って、変分原理 (3.52) 式は、方程式 (3.55)、(3.56) そして、(3.59)、(3.60) をもたらず。粒子数条件 (3.48) 式と共に、それらは BCS パラメータ u_k 、 v_k の計算を可能にする。

²ここで $\bar{v}_{ijkl} = v_{ijkl} - v_{ijlk}$ は反対称化行列要素と呼ばれるものである。

一般に、これらの方程式は非線形であり、そして反復的解法によって解かなければならない。方程式の性質の議論の場合、式 (3.59), 式 (3.60) を式 (3.56) に挿入して得られるいわゆるギャップ方程式

$$\Delta_k = -\frac{1}{2} \sum_{k' > 0} \bar{v}_{kk'k'\bar{k}'} \frac{\Delta_{k'}}{\sqrt{(\tilde{\epsilon}_{k'})^2 + (\Delta_{k'})^2}} \quad (3.61)$$

が有用である。

3.4.2 純粋な対相関力の場合

純粋な対相関力とは、(3.12) 式で与えた副殻中の対ポテンシャルなどを指し、原子核の対相関の説明において、非常に単純だが強力なモデルを提供する。以下では、この特別な相互作用の場合に BCS 理論の式がどのような形をとるかを示す。まずハミルトニアンは、

$$\hat{H} = \sum_{k > 0} \epsilon_k \left(\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k + \hat{a}_{\bar{k}}^\dagger \hat{a}_{\bar{k}} \right) - G \sum_{kk' > 0} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_{\bar{k}}^\dagger \hat{a}_{\bar{k}'} \hat{a}_{k'} \quad (3.62)$$

となる。 \hat{H}' の期待値 (3.50) 式は、

$$\langle \text{BCS} | \hat{H}' | \text{BCS} \rangle = 2 \sum_{k > 0} \left(\tilde{\epsilon}_k v_k^2 + \frac{1}{2} G v_k^4 \right) - \frac{\Delta^2}{G} \quad (3.63)$$

に書き換えられる。この場合、ギャップパラメータ Δ は、 k には依らない。

$$\Delta = G \sum_{k > 0} u_k v_k \quad (3.64)$$

また、 $\tilde{\epsilon}_k$ は次式によって与えられる。

$$\tilde{\epsilon}_k = \epsilon_k - \lambda - G v_k^2 \quad (3.65)$$

(3.63) 式での項 $G v_k^4$ と (3.65) 式での項 $G v_k^2$ は、しばしば無視される。なぜなら、その効果は一粒子エネルギーをシフトさせることであるが、このような関式的な相互作用を使用する場合、既に対相関を導入する前の段階で一粒子エネルギーは、現実の原子核を記述するのに適切と思われる値に設定されており、その値をさらに変更することは原子核の記述精度をむしろ低下させることになるからである。したがって、より正確に言えば、これらの項は無視されるのではなく、一粒子エネルギーの決定時にすでに考慮されているので二重には入れないことにするということである。この場合、

$$\begin{aligned} v_k^2 &= \frac{1}{2} \left(1 \pm \frac{\epsilon_k - \lambda}{\sqrt{(\epsilon_k - \lambda)^2 + \Delta^2}} \right) \\ u_k^2 &= \frac{1}{2} \left(1 \mp \frac{\epsilon_k - \lambda}{\sqrt{(\epsilon_k - \lambda)^2 + \Delta^2}} \right) \end{aligned} \quad (3.66)$$

を得ることができる。また、この式は、極限 $G \rightarrow 0$ 、すなわち $\Delta \rightarrow 0$ において、占有される準位は $v_k^2 \rightarrow 1$ となり、空いている準位は $v_k^2 \rightarrow 0$ となっていなければならないという物理的な要請を満足していることが容易に見てとれる。この場合、 v_k^2 はステップ関数であるのに対して、相互作用している場合 ($\Delta \neq 0$) はステップ関数が、少しぼやけたものになる。相互作用のために、粒子はフェルミ準位の下から上へ散乱していく。これはフェルミレベルの下に状態の部分的な減損を、上に状態の部分的な増益をもたらす。最期にギャップ方程式 (3.61) は、単純な形

$$\Delta = \frac{G}{2} \sum_{k > 0} \frac{\Delta}{\sqrt{(\epsilon_k - \lambda)^2 + \Delta^2}} \quad (3.67)$$

をとることとなる。

第4章 副殻の縮退がとれた場合における数値解

第3章で調べたハミルトニアンでは、副殻内の全一粒子準位が縮退していた。この場合は解析的な厳密解が求まった。しかし、縮退がとれた場合の厳密解は知られていない。副殻の縮退がとれたときのハミルトニアンは第二量子化表示では以下のように表記できる。

$$\hat{H} = \sum_{m=-j}^j \epsilon_{jm} \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m - G \sum_{m=\frac{1}{2}}^j \sum_{m'=\frac{1}{2}}^j \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_{-m}^\dagger \hat{a}_{-m'} \hat{a}_{m'} \quad (4.1)$$

(4.2)

第3章のハミルトニアンは、全ての ϵ_{jm} が同じ値 (=0) をとる場合にあたる。

現実の原子核では、様々な要因により副殻の縮退はとれる。例えば、原子核の形状が球形ではなく変形すれば縮退はとれる。原子核は魔法数の近傍でのみ球形であり、魔法数と魔法数の中間にある領域では変形しているのが普通である。

あるいは、原子核が大きな角運動量を持った状態では、原子核が回転していると考えられるが、原子核が回転すればやはり縮退はとれる。変形は時間反転対称性を破らないが、回転は破るという相違がある。変形下では磁気量子数が m と $-m$ の状態は縮退したままであるが、回転下では全ての縮退がとれる。

この章では四重極変形した核と回転している核の二つの場合について、計算機により厳密な数値解を求める。

計算で用いた自作のプログラムは付録として載録した。プログラムでの計算手順を説明すると、まず磁気量子数が $-j \leq m \leq j$ の $2j + 1$ 個の一粒子状態に、 N 個 ($0 \leq N \leq 2j + 1$) の粒子を入れる場合を漏れなく全て列挙して、 N 粒子の状態の完全系を張る基底をつくる。列挙のアルゴリズムは複数考えられるが、ここでは、0 から $2^{2j+1} - 1$ までの 2^{2j+1} 個の整数の2進数表現が、 $2j + 1$ 個の状態に個数を定めずに粒子を入れる方法が1対1に対応していることを利用したアルゴリズムを採用した。

なお、ハミルトニアン(相互作用)に角運動量などの保存量があることを利用して、その保存量の値ごとに N 粒子状態の空間を分割し、その分割された部分空間内でハミルトニアンの対角化を行うのが通常の方法である。その方がコンピュータの行う計算量は少ないが、本研究では、プログラミングの手間という人間の行う仕事の量を少なくすることを優先させて、保存量の存在を利用しないこととした。ただし、完全に縮退した固有ベクトルが異なる部分空間に存在するという状況は、我々の使用した行列対角化のライブラリプログラムには不得手な状況らしく、ごく稀に収束しないというエラーを表示して異常終了することがあった。その場合は入力パラメータの値を物理的には意味の全くないほど微小な量変えるだけで、速やかに固有解が求まるようになるのであった。

次に、これらの N 粒子状態の任意の2基底間のハミルトニアンの行列要素を計算する。2体演算子の部分是对角要素だけを持つ。4体演算子の部分是非対角要素にも零でないものがあるが、これらは、多体状態の占有数表示に対する生成・消滅演算子の単純な作用の仕方だけを使って、極めて平易に計算することができる。ただし、このアプローチでは、プログラミングの手間は少ないが、逆に、コンピュータの実行しなければならぬ情報処理の量は無駄に多くなっている。

最後にライブラリ [8] を利用して行列の対角化を行い固有値を求める。

求まった数値解の検討は、固有値をグラフに描いて考察を加えるだけとした。固有ベクトルの構造を、縮退した場合の厳密解と比較することも行いたかったが、時間が足りず断念した。

4.1 四重極変形した原子核の場合

四重極変形とは、核半径の異方性が角運動量の方位量子数 2 の球面調和関数で表される変形のことをいい、原子核の変形の主要な成分である。磁気量子数 m の値により、軸対称変形 ($m = 0$) と非軸対称変形 ($|m| = 2$) に分けられる。軸対称変形の場合は通常は z 軸を対称軸に一致させてとる。

なお、複数の副殻を考えると以下のような知識が役に立つ。変形一体ポテンシャル(ニルソン・ポテンシャル)は核子の角運動量が 2 だけ異なる軌道を結びつける。四重極変形は四極子モーメントの測定によって確認され、基底状態や低い励起状態で観測されている四重極変形はほとんどが軸対称であり、しかも対称軸方向に細長い回転楕円体 (prolate 形、葉巻形核) である。この傾向はニルソン・ポテンシャルによって説明できるが、核子の特性と関連させることは今後の課題である。スピンの大きい高励起状態では非軸対称変形や、対称軸方向に短い回転楕円体 (oblate 形、パンケーキ形核) になる可能性があるまた、軌道角運動量が 2 だけ異なる粒子状態が擬似的に縮退していることが殻構造の特徴であり擬スピ対称性と呼ぶ。[7]。ただし、この章で扱うモデルハミルトニアンでは一つの副殻しか考えないので、これらの興味深い事実を追求することはできない。

ここで (4.1) 式における ϵ_{jm} は軸対称な四重極変形の場合、次式で表せる。

$$\epsilon_{jm} = Q\{3m^2 - j(j+1)\} \quad (4.3)$$

上式の Q は変形の強度 (変形の度合い) を表している。 $Q > 0$ の場合が prolate 形、 $Q < 0$ の場合が oblate 形に対応する。その右側にある j と m の多項式は、期待値 $\langle jm|Y_{20}|jm\rangle$ を Wigner-Eckart 定理を用いて表す際に現れる Clebsch-Gordan 係数 $\langle jm20|jm\rangle$ に定数因子を乗じたものである。

プログラムのうち、ハミルトニアン の 2 体演算子部分の行列要素を計算する部分を (4.3) 式で与えられる一粒子準位に応じたものに変更して、いくつかの Q の値に対して、ハミルトニアン の固有値を求める計算を実行させた。 $j = \frac{13}{2}$ でも数分の時間で解は得られるが、グラフの見やすさを優先させて、 $j = \frac{7}{2}$ での結果を議論する。また、粒子の個数は $N = 4$ である。

得られた固有値をプロットしたものが、図 4.1 である。横軸は固有状態にエネルギーの低いものから順につけた番号である。縦軸は励起エネルギー (最も低いエネルギー固有値との差) を表している。図 4.2 は拡大図であり、下から 3 個の状態だけが見えている。

実線で結ばれたプラス (+) 記号 (色は赤色) は、四重極変形がない場合を表す。このときの結果が第 3 章の解析的厳密解と一致しているかどうかで、プログラムの検証ができる。数値を比較したところ非常に高い精度で一致していた。

破線で結ばれた「掛ける」(×) 記号 (色は緑色) は、変形が比較的小さい場合である ($Q = 0.2$)。この場合は、第 4 励起状態までは、 $Q = 0$ でのエネルギーと重なって見える。即ち、エネルギーギャップが同じである。これは、 $Q = 0.2$ では縮退の破れがまだ小さいため、セニオリティでラベルされる固有状態が、ほとんどそのまま固有状態として残っているのだと解釈できる。この解釈を確かめるためには、固有ベクトルを比較するとよいが、残念ながらそれを行う時間は残されていなかった。最初の励起準位が 4 重に縮退している理由についても、固有ベクトルを調べれば容易に分かるであろう。

大きい Q の値に対しては、対相関は壊れてくるはずである。これを調べるには、 $Q > 0$ での固有ベクトルを、 $Q = 0$ での固有ベクトルで展開して、その展開の振幅の分布を検討するのがよいと思われる。

ところが、エネルギーギャップは Q と共に単調に増大して行く。これは、一粒子準位の縮退が大きくとれてくることにより、粒子・空孔エネルギーが大きくなるためであると想像される。このこともまた、固有ベクトルの構造を調べれば確かめることができるだろう。

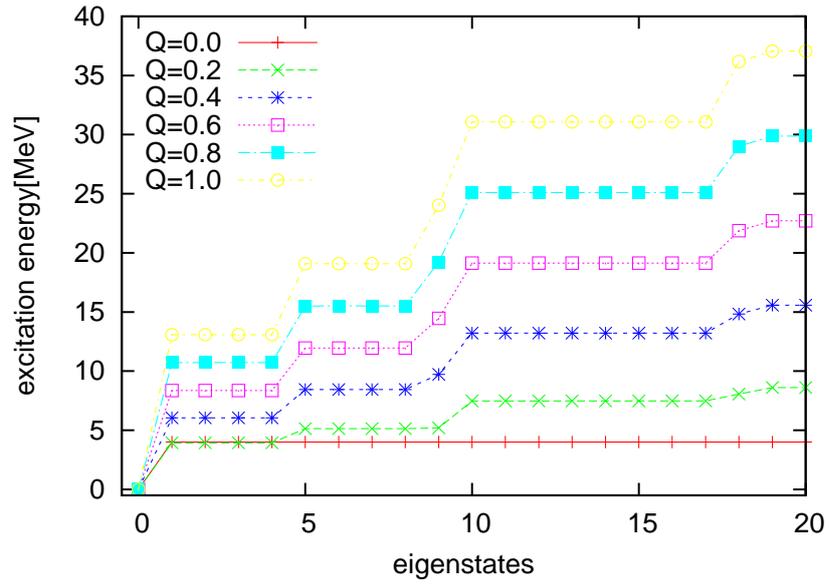


図 4.1: エネルギー固有値の四重極変形の大きさへの依存性

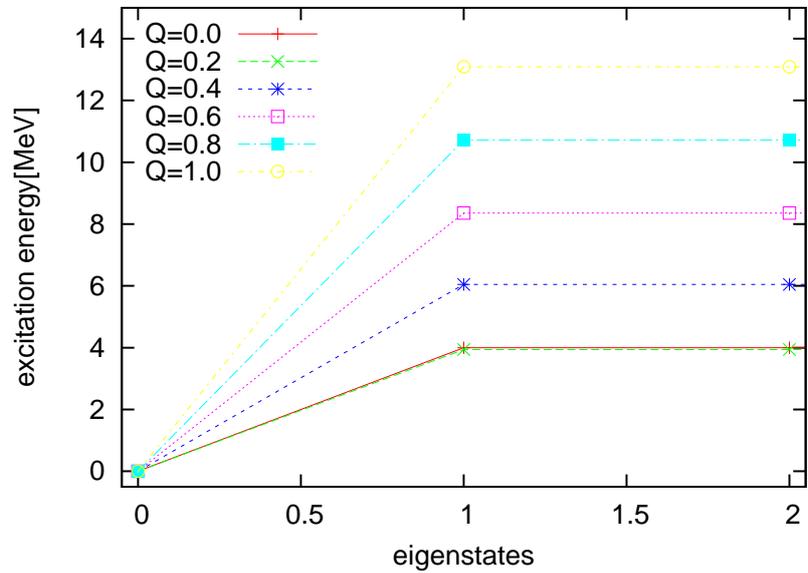


図 4.2: エネルギー固有値の四重極変形の大きさへの依存性 (拡大図)

4.2 回転する原子核の場合

静止した座標系でハミルトニアン \hat{H} で記述される系は、固定軸（以下では z 軸をこの軸に合わせてとる）の回りを一定の角速度で回転する座標系では

$$\hat{H}' = \hat{H} - \omega \hat{J}_z \quad (4.4)$$

で記述される。ここで、 ω は座標系が回転する角速度、 \hat{J}_z は系の全角運動量演算子の z 成分である。一粒子基底の準位 ϵ_{jm} を \hat{H} でなく \hat{H}' の期待値とすれば、

$$\epsilon_{jm} = \langle jm | \hat{H}' \rangle = -\omega m \quad (4.5)$$

となる。

プログラムのうち、ハミルトニアン の 2 体演算子部分の行列要素を計算する部分を (4.5) 式で与えられる一粒子準位に応じたものに修正して、いくつかの ω の値に対して、ハミルトニアン の固有値を求める計算を実行させた。四重極変形の場合と同じく、 $j = \frac{7}{2}$, $N = 4$ の場合の結果を議論する。

図 4.3 に得られた固有値を示す。横軸は固有状態の番号を、縦軸は励起エネルギーを表している。図 4.4 は拡大図である。

この図から ω の増加とともに第一励起エネルギーが下がっていくことが見て取れる。即ち、エネルギーギャップが減少していくのである。これは回転が対相関を破壊しているためと思われる。これを確かめるには、波動関数の検討が有効であろう。回転は対相関ポテンシャルで対を組む m と $-m$ の 2 状態のエネルギーを分離させる働きがある。このため、対を組むことがエネルギー的に損になるために、対相関が破壊されやすいのであろう。

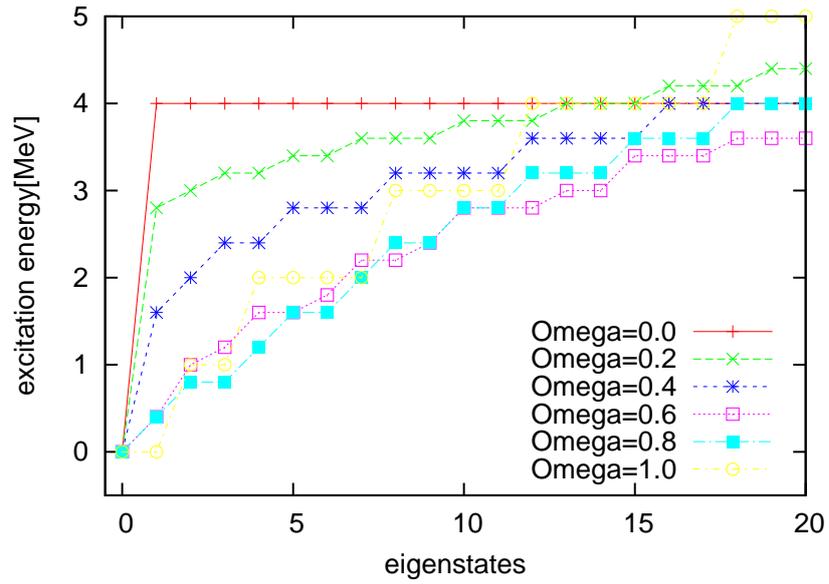


図 4.3: エネルギー固有値の回転角速度 ω への依存性

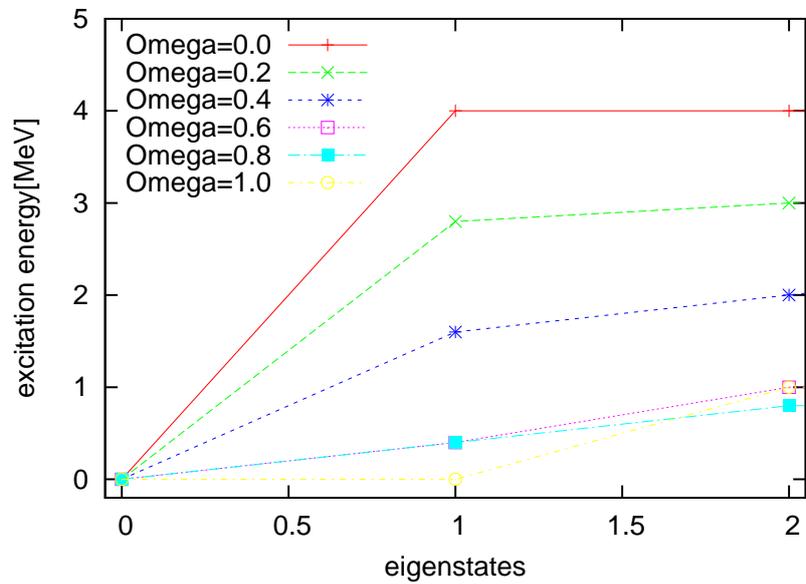


図 4.4: エネルギー固有値の回転角速度 ω への依存性 (拡大図)

第5章 まとめ

本論文では、まず、原子核の基本的な性質を概観したあと、量子多体系の取り扱いに不可欠な第二量子化表示について参考文献 [4] に準じて詳細な解説を行った。

次に、球形の原子核中で縮退した副殻が部分的に占有された場合に、図式的なハミルトニアンである対相互作用を仮定して、そのときに生じる対相関を複数の観点から調べることで、量子多体系研究の基本的なアプローチの練習課題とした。

まず、縮退のある場合の解析的厳密解の導出の全ステップを一段一段自分で確かめた上で、論文中に詳細な導出過程を記した。「角運動量 0 に組まない粒子対の個数」という意味をもつセニオリティ量子数で厳密な固有状態がラベルされるということが言えるのだが、ここで重要なことは、フェルミ粒子の多体系では、波動関数の反対称化により個々の粒子を区別することが原理的にできないので、 N 個の粒子から特定の 2 個を選び出して、角運動量 0 に組ませるという操作を文字通りに行うことは不可能だということである。それにも拘らず、演算子代数だけを使って具体的に構成できた固有状態を表す数式が、あたかも個々の粒子を区別して行う操作が可能であるとして解釈したくなるような形をしているのである。このコメントが理解できることを目標に第二量子化表示について卒業研究の 1 年間の大半をかけて学習を続けたのである。

次に、副殻の縮退がとれた場合について考察した。この場合の厳密解はあまり知られていないため、BCS 近似がよく使われる。この近似について、理論の紹介を行った。BCS 方程式は数値的に解く必要があるが、同じ研究室の過去の卒業研究で結果が議論されているので、本研究では数値解を求めることはしなかった。

最後に副殻の縮退がとれた場合の厳密な数値解を、C 言語でプログラムを自作して求めた。 $2j + 1$ 次元の一粒子状態空間に N 個のフェルミ粒子が入っている場合に、 N 体状態の完全系を張り、その完全系の任意の 2 つの基底状態間で、2 体および 4 体演算子からなる第二量子化表示のハミルトニアンの行列要素を計算し、得られた行列をライブラリプログラムを利用して数値的に対角化したのである。掲載した結果は $j = \frac{7}{2}$, $N = 4$ の場合に絞ったが、作成したプログラムは他の j, N の場合も取り扱える設計になっている。

縮退のとれ方として 2 つの場合を考えた。一つは原子核が四重極変形した場合である。この場合は、 $(m, -m)$ 対の縮退が保たれるので対相関は壊れにくく、エネルギーギャップも失われにくいことが分かった。もう一つは原子核が回転している場合である。この場合は、時間反転対称性の破れにより対相関が壊れやすく、エネルギーギャップは回転角速度の増加と共に速やかに減少することが示せた。

謝辞

本研究を行うにあたり、ご指導を頂いた田嶋直樹先生、鈴木敏夫先生、林明久先生に厚く御礼申し上げます。特に田嶋先生には最初から最後まで丁寧なご指導を賜り感謝の念に堪えません。また、卒業論文作成にあたり同じ研究室の山田昌平氏、杉本宏行氏には多くの助言を頂き、有難うございました。最後になりましたが、理工学科の諸先生方に対しましても、日頃の御指導に感謝し、謝辞の言葉と致します。

参考文献

- [1] J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer, *Phys. Rev.* 108, 1175 (1957)
- [2] 市村宗武・坂田文彦・松柳研一、岩波講座 9 原子核の理論 (岩波書店、東京、1993)
- [3] 山田勝美、原子核はなぜ壊れるのか～放射性崩壊の謎～ (丸善、東京、1987)
- [4] Walter Greiner and Joachim A. Maruhn、「NUCLEAR MODELS」(Springer-Verlag, Berlin, 1995)
- [5] 鈴木紀史、核子系のアイソスカラー対相関、福井大学大学院工学研究科物理工学専攻修士論文 (2002)
- [6] B. Frois and C. N. Papanicolas : *Ann. Rev. Nucl. Part. Sci.* 37 (1987) 133
- [7] 物理学辞典編集委員会、物理学辞典 (培風館、東京、1984)
- [8] 奥村晴彦、C 言語による最新アルゴリズム事典 (技術評論社、1991)
ライブラリは <http://oku.edu.mie-u.ac.jp/~okumura/algo/> で公開されている。

付録 Program list

数値的対角化により、第 4 章でとりあげた二つの場合についての固有値を求めるプログラムを下記に示す。配列の扱いは文献 [8] に従った。対角化ライブラリには文献 [8] の QR 法によるもの（名称”eigen.c”）を利用した。

```
/*
sjp.c : single-j pairing
  sjp1a.c (sjp ver.1a) : 2009/1/24
*/
#include <stdio.h>
#include <math.h>
#include <stdlib.h>
#include "eigen.c"
#include "imatutil.c"

double E_k=0;

int prepareBase(int nOrb, int N, int nBase, imatrix oc);
int printBase(int nOrb, int nBase, imatrix oc);
int printOc(int occ[]);
int printPair(int occ[]);
int QaudDef(double strength, vector spe);
int Rotation(double strength, vector spe);
double hamiltonianMatrixElement(int a, int b);
double hamiltonianMatrixElement_Fast(int a, int b);
double factorial(int k);

int J; //J=2j, j=(正の半奇数)
int N; //粒子数, 0<=N<=2
int Omg; //Omega:
int nOrb; //the number of orbitals =2*Omg, 一粒子軌道の個数
int nBase; // the number of basis states for N particles in a j shell
imatrix oc; // occupation numbers for basis states
double G=1.0; //残留 2 体相互作用の強さ ( 引力は正 )
vector spe; // single-particle energy levels

int main(){
  matrix h; // Hamiltonian
  vector energy; // energy eivenvalues of the N particle system
  vector work; // work space for eigen
  int i,j;
  double he;
  double potStrength; // strength of quadrupole potential/Corilis field

  printf("# J(=2j)=");
  J=7; //scanf("%d",&J);
  printf("#      j=%d/2¥n",J);

  if(J%2==0 || J<0)
```

```

{
    fprintf(stdout,"ERROR:J=%d must be odd and positive !¥n",J,N);
    exit(1);
}
Omg=(J+1)/2;
nOrb=2*Omg;

printf("# N=");
N=4; //scanf("%d",&N);
printf("#      N=%d¥n",N);

if(N<0 || N>nOrb)
{
    fprintf(stdout,"ERROR:N=%d must be in [0..%d] ¥n",N,nOrb);
    exit(1);
}

spe=new_vector(nOrb);
printf("# Potential Strength ");
scanf("%lf",&potStrength);
QaudDef(potStrength,spe);//四重極変形(回転楕円体形)
//Rotation(potStrength,spe);//回転

nBase=factorial(nOrb)/(factorial(N)*factorial(nOrb-N));
printf("# j=%d/2 Omega=%d #orbitals=%d N=%d #basis=%d¥n"
,J,Omg,nOrb,N,nBase);

oc=new_imatrix(nBase,nOrb);
prepareBase(nOrb,N,nBase,oc);
// printBase(nOrb,nBase,oc);

h=new_matrix(nBase,nBase);
for(i=0;i<nBase;i++){
    for(j=0;j<=i;j++){
        he=hamiltonianMatrixElement(i,j);
        h[i][j]=he;
        h[j][i]=he;
    }
}

energy = new_vector(nBase);
work = new_vector(nBase);
if (eigen(nBase, h, energy, work) == EXIT_FAILURE){
    printf("# diagonalization not converged. ¥n");
}
printf("# eigen values: ¥n");

int nprint=10000; if(nprint>nBase) nprint=nBase;
for(i=0;i<nprint;i++){
    printf("%d %10.6f %d¥n",i,energy[i],N);
}
}

int QaudDef(double strength, vector spe){
    int k;
    double m,j;

```

```

printf("# quadrupole potential strength=%f\n",strength);
j=J*0.5;
for(k=0;k<n0rb;k++){
    if(k<0mg){
        m=k+0.5;
    }
    else{
        m=-((k-0mg)+0.5);
    }
    spe[k]=strength*(3*m*m-j*(j+1));
}
for(k=0;k<n0rb;k++){
    printf("# e[%3d]=%f\n",k,spe[k]);
}
}

int Rotation(double strength, vector spe){
    int k;
    double m,j;

    printf("# angular velocity of rotation=%f\n",strength);
    j=J*0.5;
    for(k=0;k<n0rb;k++){
        if(k<0mg){
            m=k+0.5;
        }
        else{
            m=-((k-0mg)+0.5);
        }
        spe[k]=-strength*m;
    }
    for(k=0;k<n0rb;k++){
        printf("# e[%3d]=%f\n",k,spe[k]);
    }
}

int prepareBase(int n0rb, int N, int nBase, imatrix oc){
    unsigned int i,imax=0,iw;
    int k; // index for the single-particle orbitals =[0..n0rb-1]
    int b=0; //index for the basis states = [0..nBase-1]
    int sum;

    int i9;

    for(k=0;k<n0rb;k++)imax= (imax<<1) | 0x01;
    // printf("n0rb=%d,nBase=%d,imax=%u\n",n0rb,nBase,imax);

    for(i=0;i<=imax;i++){
        iw=i;
        sum=0;
        for(k=0;k<n0rb;k++){
            sum+=iw & 0x01;
            iw>>=1;
        }
        if(sum==N){
            if(b>=nBase){
                fprintf(stdout,"prepareBase: nBase=%d too small.\n",nBase);
            }
        }
    }
}

```

```

        exit(1);
    }
    iw=i;
    for(k=0;k<n0rb;k++){
        oc[b][k]=iw & 0x01;
        iw>>=1;
    }
    b++;
}
}
if(b != nBase){
    fprintf(stdout,"prepareBase: nBase =%d != b= %d¥n",nBase,b);
    exit(1);
}
}

int printBase(int n0rb, int nBase, imatrix oc){
    int b,k;
    printf("printBase: n0rb=%d nBase=%d¥n",n0rb,nBase);
    for(b=0;b<nBase;b++){
        printf("%5d: ",b);
        print0c(oc[b]);
        printf("¥n");
    }
}

int print0c(int occ[]){
    int k;

    for(k=0;k<n0rb;k++){
        printf("%1d",occ[k]);
    }
}

int printPair(int occ[]){
    int k,kbar;

    for(k=0;k<0mg;k++){
        kbar=k+0mg;
        if(occ[k]==0 && occ[kbar]==0) printf("0");
        if(occ[k]==1 && occ[kbar]==0) printf("u");
        if(occ[k]==0 && occ[kbar]==1) printf("d");
        if(occ[k]==1 && occ[kbar]==1) printf("P");
    }
}

double hamiltonianMatrixElement(int a, int b){
    int bra[32];
    int ket[32];

    int k,k1,k2,k1bar,k2bar;
    double sum=0.0;
    double m;

    if(n0rb>32) exit(1);

    for(k=0;k<n0rb;k++){

```

```

        bra[k]=oc[a][k];
        ket[k]=oc[b][k];
    }

    for(k=0;k<n0rb;k++){
        if(bra[k]!=ket[k]) goto TwoBodyPartVanish;
    }
    for(k=0;k<n0rb;k++){
        if(ket[k]==1) sum+=spe[k];
    }
    TwoBodyPartVanish:;

    for(k1=0;k1<0mg;k1++){
        k1bar=k1+0mg; // time-reversal partner of orbital k1
        for(k2=0;k2<0mg;k2++){
            k2bar=k2+0mg; // time-reversal partner of orbital k2
            for(k=0;k<n0rb;k++){
                ket[k]=oc[b][k];
            }
            if(ket[k1]==0) continue;
            ket[k1]=0; // action of annihilation operator a_{k1}
            if(ket[k1bar]==0) continue;
            ket[k1bar]=0; // action of annihilation operator a_{k1bar}
            if(ket[k2bar]==1) continue;
            ket[k2bar]=1; // action of creation operator a^{\dagger}_{k2bar}
            if(ket[k2]==1) continue;
            ket[k2]=1; // action of creation operator a^{\dagger}_{k2}
            for(k=0;k<n0rb;k++){
                if(bra[k]!=ket[k]) goto Vanish; //if bra and (operated ket) is orthogonal
            }
            sum+=-G;
        }
        /*
        printPair(bra); printf(" ");
        printPair(ket); printf(" ");
        printPair(oc[b]); printf(" \n");
        */
        Vanish:;
    }
}

// printf(" me=%f \n",sum);
return sum;
}

double hamiltonianMatrixElement_Fast(int a, int b){
    int bra[32];
    int ket[32],ket1[32];

    int k,k1,k2,k1bar,k2bar;
    double sum=0.0;

    if(n0rb>32) exit(1);

    for(k=0;k<n0rb;k++){
        bra[k]=oc[a][k];
        ket[k]=oc[b][k];

```

```

}

for(k1=0;k1<0mg;k1++){
  for(k=0;k<n0rb;k++){
    ket1[k]=oc[b][k];
  }
  if(ket1[k1]==0) continue;
  ket1[k1]=0; // action of annihilation operator a_{k1}
  k1bar=k1+0mg; // time-reversal partner of orbital k1
  if(ket1[k1bar]==0) continue;
  ket1[k1bar]=0; // action of annihilation operator a_{k1bar}
  for(k2=0;k2<0mg;k2++){
    for(k=0;k<n0rb;k++){
      ket[k]=ket1[k];
    }
    k2bar=k2+0mg; // time-reversal partner of orbital k2
    if(ket[k2bar]==1) continue;
    ket[k2bar]=1; // action of creation operator a^{\dagger}_{k2bar}
    if(ket[k2]==1) continue;
    ket[k2]=1; // action of creation operator a^{\dagger}_{k2}
    for(k=0;k<n0rb;k++){
      if(bra[k]!=ket[k]) goto Vanish; //if bra and (operated ket) is orthogonal
    }
    sum+=-G;
    Vanish::;
  }
}
return sum;
}

double factorial(int k){ //factorial(階乗)
  if(k==0){
    return 1;
  }
  else{
    return k*factorial(k-1);
  }
}

```