

原子核の二重閉殻の謎にせまる

Approaching a mystery of doubly closed shell in nuclei

宇都野 穰

Yutaka Utsuno

重原子核反応フロンティア研究グループ

Research Group for Reactions Involving Heavy Nuclei

- ・二重閉殻核である酸素16で低い励起状態が現れるメカニズムの解明に向け、大規模殻模型計算に基づく理論研究を行いました。
- ・相関エネルギーの効果によって、殻ギャップが独立粒子描像をもとに実験値からそのまま引き出した値よりも大きく狭まることが、低い励起状態の出現に対して本質的な役割を果たすことを見いだしました。
- ・この結果は、閉殻構造に関する新しい理解をもたらすとともに、二重閉殻からの励起状態も拡張された独立粒子描像で記述できることを示すものです。



概要

原子核を構成する陽子、中性子がともに閉殻配位となる二重閉殻核では、励起状態のエネルギーが高く、閉殻構造が非常に安定であるとされています。しかし、二重閉殻核の一つである酸素16では、単純な殻構造で期待されるよりもはるかに低い励起状態が存在することが知られています。この励起状態は、閉殻配位から4核子励起する状態が主であるとされていますが、微視的核構造計算のほとんどはその励起エネルギーを2倍以上高く出してしまい、低い励起状態が現れるメカニズムが定量的に理解されていませんでした。本研究では、閉殻構造の破れにより、酸素16における殻ギャップが、独立粒子描像をもとに実験値からそのまま引き出した値よりも大きく狭まることを見だし、その効果を正しく取り入れた大規模殻模型計算によって低い励起状態の存在を自然に説明することに成功しました。このことは、原子核の基本的性質である殻構造に対する新しい見方を与えています。本成果は、Physical Review C誌に掲載されました[1]。

1. 研究の背景

我々を取りまく物質の世界では、原子を構成する電子がそれぞれ独立の量子力学的軌道を占有し、そのことが物質の多様な性質や周期律の源となることがよく知られています。原子核の世界でも原子と同様、原子核を構成する核子（陽子と中性子の総称）が原子核自身の作る平均ポテンシャルに支配

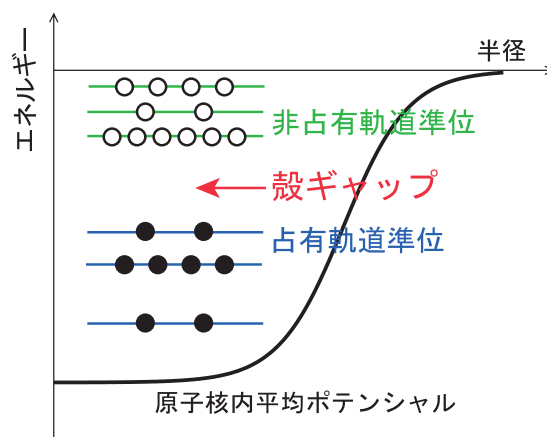


図1 閉殻構造の模式図。原子核内平均ポテンシャルによって作られる占有軌道準位と非占有軌道準位の間に大きなエネルギー差（殻ギャップ）があると、占有された粒子（黒丸）は非占有軌道の状態（白丸）へ励起するのに大きなエネルギーを要するため、特に安定になる。

され、各々異なる軌道を占有するという独立粒子描像がかなり良い近似であることが古くから知られており、それによって原子核の様々な基本的性質が理解されています。例えば、希ガス元素が化学的に極めて不活性であるのと同様、魔法数と呼ばれる特別な核子数を持つ原子核は、図1で模式的に描くような閉殻配位を取るため、原子核を励起させるのに周辺核よりも大きなエネルギーを要します。キュリー夫妻が発見したポロニウム（陽子数84）やラジウム（陽子数88）など、鉛（陽子数82）よりも多くの陽子数を持つ原子核が全てアルファ崩壊するのは、核子数82で実現する閉殻構造に起因しています。また、それらの重原子核から他でもないアルファ

粒子（ヘリウム4の原子核で、陽子2個と中性子2個の計4核子からなる）が放出されるのも、最小の魔法数2に伴う安定性によるものです。

アルファ粒子をはじめ、陽子、中性子ともに閉殻構造となる二重閉殻核すなわち二重魔法数核は特に安定になりますが、その一方、その励起状態のいくつかは単純な独立粒子描像では記述できないことがわかっています。例えば、陽子、中性子数ともに8である酸素16 (^{16}O) において励起エネルギー 6.05 MeV に現れる第一励起状態のスピン・パリティ量子数は 0^+ ですが、この量子数は単純な1核子励起状態では現れません。この状態は二重閉殻から4核子（アルファ粒子）を励起させた状態と考えられています。10 MeV 以上もの大きな殻ギャップエネルギーがあるとされているにも関わらず何故6 MeV といった低い励起状態として出現するのかというメカニズムはこれまで定量的には理解されておらず、それを解明しようというのが本研究の目的です。

このように、原子核構造は独立粒子描像を基礎に置きながらも、そこから逸脱する多彩な様相をも同時に示しており、こうした多様性を微視的に理解するというのが、現在の原子核構造理論の重要なテーマとなっています。また、近年、研究対象が中性子過剰核やハイパー核といったエキゾチック核へと広がっており、その統一的理解のためにも、従来採用されてきた常識の根拠と限界をより基本的レベルで理解する必要に迫られています。

2. 研究の経緯

本研究のポイントは殻構造にあります。私は「殻を制する者は核構造を制す」という信念のもと、中性子過剰核で知られるエキゾチックな殻構造の出現メカニズムとそれに基づく多体構造の理解に関する研究に取り組んできました。本研究も、以下に記す殻構造の常識の検討を機に始まりました。

従来、二重閉殻核 ^{16}O の占有及び非占有軌道の1粒子エネルギーは実験値で決められているとされてきました。図1から直感的に理解できるように、最も高い占有軌道の束縛エネルギーは、 ^{16}O の中性子分離エネルギー $S_n(^{16}\text{O})$ と一致し、また、最も低い非占有軌道の束縛エネルギーは ^{17}O の中性子分離エネルギー $S_n(^{17}\text{O})$ になるというものです。原子の世界では、クーブマンズの定理 [2] と呼ばれるもの

に対応し、独立粒子描像が良い極限で成り立ちます。その描像を具現化した最も単純な独立粒子模型では、殻ギャップエネルギーは、 $S_n(^{16}\text{O}) - S_n(^{17}\text{O})$ で与えられ、実験値から 11.5 MeV とされています。二重閉殻における1粒子エネルギーは、現象論的な平均場模型のパラメータを決定する際に、重要な情報となっています。

原子核では、独立粒子描像は良い近似ですが、平均ポテンシャルに取り込みきれない残留相互作用と呼ばれる、核子同士に働く二体力が無視できないことも知られています。 ^{16}O の例では、二体力によって占有軌道の核子の一部が非占有軌道に叩き上げられて閉殻構造を破ることによって、全体としてより安定化される、すなわちエネルギーが下がるというものです。核子がエネルギーの高い軌道に励起して系全体のエネルギーが下がるというのは古典力学では考えにくい概念ですが、量子力学の基本原則である重ね合わせの原理の帰結として理解されます。こうして閉殻構造を破って安定化するエネルギーは、「独立粒子＝無相関」との対比で、相関エネルギーと呼ばれています。次節で示すように、相関エネルギーが ^{16}O の二重閉殻とそこからの励起状態の理解に本質的であるというのが本研究の発見です。

相関エネルギーは、開殻核（非閉殻核）では非常に重要であることは当然認識されていましたが、閉殻核では独立粒子描像が良く成り立ち、その影響は小さいと考えられてきました。また、先ほど中性子分離エネルギーが1粒子エネルギーに対応すると書きましたが、もし相関エネルギーが ^{15}O 、 ^{16}O 、 ^{17}O で同じ値を取れば、中性子分離エネルギーに対する相関エネルギーの寄与が打ち消されてしまい、クーブマンズの定理がやはり成立します。こうしたことが、従来相関エネルギーの効果があまり考慮されてこなかった要因ではないかと考えています。

3. 研究の内容

本研究ではまず、相関エネルギーを大規模殻模型計算によって求めました。配位混合を取り入れた殻模型の特徴を簡単に表すと、「与えられた1粒子軌道セットで規定された自由度からなる量子多体問題を、量子力学に最も忠実に解く模型」であり、量子化学の配置間相互作用法（CI法）に対応するものです。量子力学的に正確なアプローチなので、物理

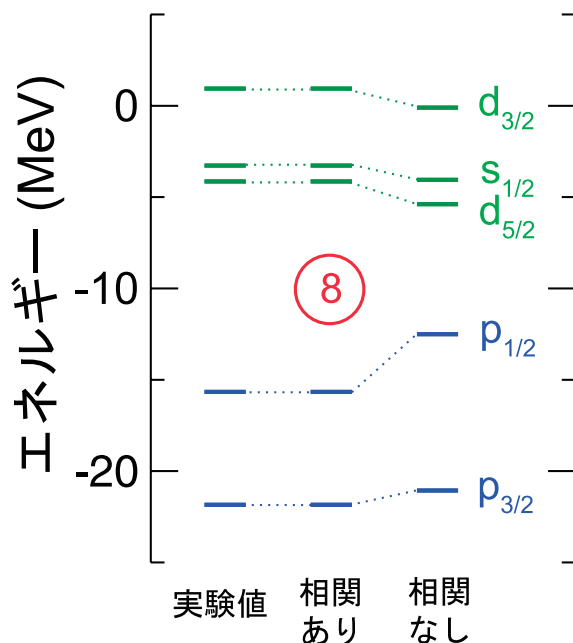


図2 二重閉殻核 ^{16}O における一粒子の状態のエネルギー準位の実験値と理論値の比較。実験値は、 ^{17}O 、 ^{15}O のエネルギー準位から引き出したもので、これを相関エネルギー込みで正しく再現する（中央）ためには、最右列の一粒子（無相関）エネルギーを採用しなくてはならない。

的に意味のある占有及び非占有軌道を選び、適切なハミルトニアン（多体状態を得るのに必要なエネルギー演算子）が与えられれば、相関エネルギーが精度良く求まります。ここでは、魔法数2から8までの占有軌道（ p 殻と呼ばれる）にいる核子が、魔法数8から20までの間の非占有軌道（ sd 殻と呼ばれる）に励起する自由度を完全に取り入れた計算を行います。計算で使われたハミルトニアンは、この質量領域でよく使われている現象論的なもの[3]で、その一粒子エネルギーは、前節で示したように独立粒子近似で ^{16}O 周辺核の中性子分離エネルギーを再現するよう与えられています。

こうして ^{16}O 周辺核の相関エネルギーを計算したところ、二重閉殻核の ^{16}O の基底状態では9.4 MeVでしたが、 ^{15}O 、 ^{17}O の基底状態ではそれぞれ7.2 MeV、8.4 MeVと ^{16}O に比べて小さくなりました（ここでは相関エネルギーを安定化されるエネルギーの量、すなわち正の値で定義する）。中性子分離エネルギーは隣り合う2つの原子核間の束縛エネルギーの差で定義されるので、相関エネルギーが加わったことによって ^{16}O の中性子分離エネルギー $S_n(^{16}\text{O})$ は $9.4 - 7.2 = 2.2$ MeV増加し、 $S_n(^{17}\text{O})$ は $9.4 - 8.4 = 1.0$ MeV減少します。従って $S_n(^{16}\text{O}) - S_n(^{17}\text{O})$ は3.2 MeV増加することになります。すなわち、独立粒子模型では殻ギャップエネルギーによるとされていた物理量 $S_n(^{16}\text{O}) - S_n(^{17}\text{O})$ のうちの約3 MeVは相関

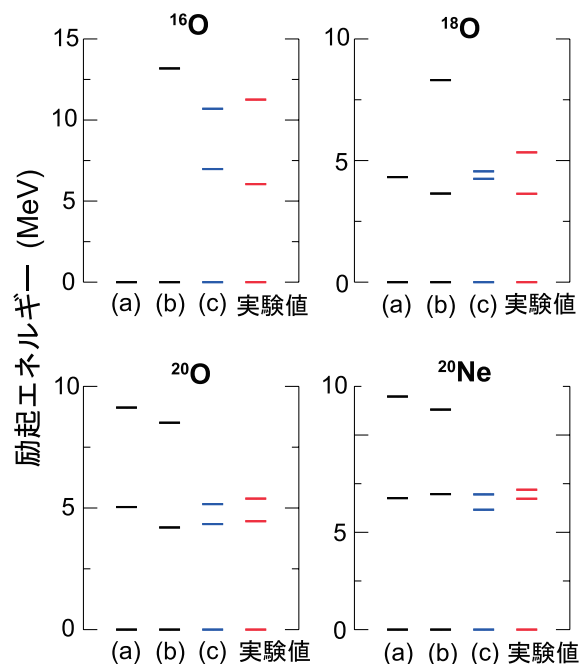


図3 $^{16,18,20}\text{O}$ 、 ^{20}Ne における下から3つの 0^+ エネルギー準位。(a) は p 殻から sd 殻への励起を取り入れない計算、(b) はその励起を取り入れるが独立粒子模型の殻ギャップを用いた計算、(c) は相関エネルギーを考慮した正しい殻ギャップを用いた計算。

エネルギーによるものであり、本当の殻ギャップエネルギーはその分だけ小さくなくてはならないのであろうと考えられます。

このことをより定量的に議論してみます。もとのハミルトニアン[3]では独立粒子近似に基づき、一粒子エネルギーが中性子分離エネルギーと同一視されており、その実験値そのものが一粒子エネルギーに代入されていました。しかし、そうすると相関エネルギーの寄与によって中性子分離エネルギーが実験値からずれてしまったので、逆に相関エネルギーを取り入れた枠組みの中で中性子分離エネルギーを再現するよう、一粒子エネルギーを決め直さなくてはならないということになります。こうして決め直した一粒子エネルギーが図2の最右列に示されています。既に予想されたように、正しい殻ギャップは、独立粒子模型によって実験値の中性子分離エネルギーからそのまま引き出されたいわゆる「実験値」よりも著しく狭まっていることがわかります。

殻ギャップが狭まると、それを越えた励起が起こりやすい、すなわちこうした状態の励起エネルギーが下がるであろうことは容易に想像されます。図3に ^{16}O 周辺核の 0^+ の励起準位を実験値と殻模型計算による理論値と比較します。(a)は p 殻から sd 殻への励起配位を取り入れない計算で求めたもので、そ

ここに現れてこない状態が殻ギャップを超えて励起した状態ということになります。 ^{16}O について見ると、計算(a)では基底状態しか出現しません。計算(b)のように p 殻から sd 殻への励起を取り入れることによって励起状態が出現しますが、従来の計算のように独立粒子模型そのままの殻ギャップを使うと、6.05 MeVのエネルギー準位が出てきません。一方、図2最右列で示した、相関エネルギーを考慮して独立粒子模型よりも狭い殻ギャップを用いた計算(c)では、概ね正しいエネルギー準位を再現します。他の原子核も同様に、従来の計算では正しく現れてこなかった準位を系統的に再現することに成功しています。

以上の議論では、相関エネルギーが二重閉殻核 ^{16}O で最大となることが本質的でした。その原因についてはここでは議論するスペースがないので、興味がある方は論文[1]をご覧ください。また、閉殻構造出現の起源の違いによって相関エネルギーの振る舞いが異なること、すなわち、 ^{16}O のような L - S 閉殻では二重閉殻核で相関エネルギーが最大となり、 ^{56}Ni のような j - j 閉殻では二重閉殻核で相関エネルギーが最小となることも指摘しています。

4. 成果の意義と波及効果

^{16}O の第一励起状態はアルファ粒子が塊となって(アルファクラスター)励起しているとされており、従来、平均場から出発した模型では記述しにくいのではないかと考えられていました。しかし、この研究によって、十分な数の一粒子軌道のセットを取れば、その空間内で十分記述されることが示されました。すなわち、配位混合を取り入れた殻模型によって独立粒子描像を拡張すれば、原子核の様々な多体形態を統一的に理解できることが示唆されます。

相関エネルギーによって、殻ギャップが独立粒子模型を用いて引き出されたものと大きく異なるという結果は、特に質量数の大きな原子核の構造研究で主流の平均場模型(あるいは密度汎関数理論)に対して大きな影響を与えていると考えています。平均場模型では、使われるハミルトニアン(あるいはエネルギー密度汎関数)のパラメータを、いくつかの物理量を合わせることによって決定しています。二重閉殻核の一粒子エネルギーもその一つですが、 ^{16}O や ^{40}Ca では実験の一粒子エネルギーに合うハミルトニアンを構成するのが難しいとされていました[4]。本研究により、正しい一粒子エネルギーはいわゆる実験値とされてきたものとは異なることが示され、

この問題点は解決されました。

5. 今後の予定

核構造の微視的、統一的理解に向け、より質量数の大きな核の構造を記述するための方法論を開発し、それを用いて原子核の多体構造を支配している基本的原理を探究していきます。方法論に関しては、大規模殻模型計算を、標準的な直接対角化法によっては実行不可能な、一粒子軌道の自由度を多く必要とする系に対しても遂行できるよう、モンテカルロ殻模型計算と呼ばれる手法を発展させています[5]。これによって、次の二重閉殻核 ^{40}Ca で知られている、球形状態、通常変形状態、超変形状態の共存及びその閉殻構造の破れとの関係を微視的に解明するのが当面の目標です。核構造を支配する基本的原理の探究については、加速器や原子炉で人工的に生成される中性子過剰核において近年知られてきている様々なエキゾチックな性質を、安定核から中性子過剰核に至る殻構造の変化を軸に理解していこうと考えています。いずれの発展に関しても、今回の成果が一つのマイルストーンと位置づけられます。

参考文献

- [1] Y. Utsuno and S. Chiba, Phys. Rev. C **83**, 021301(R) (2011).
- [2] T. Koopmans, Physica **1**, 104 (1934). 日本語の簡単な解説として例えば、<http://ja.wikipedia.org/wiki/クーブマンズの定理>.
- [3] E.K. Warburton *et al.*, Phys. Lett. B **293**, 7 (1992).
- [4] B.A. Brown, Phys. Rev. C **58**, 220 (1998).
- [5] 最近の発展として、N. Shimizu, Y. Utsuno *et al.*, Phys. Rev. C **82**, 061305(R) (2010).