

## 半古典的一粒子ポテンシャル模型で計算した原子核の密度分布

## Nuclear density distributions calculated with a semi-classical single-particle potential model

親 松 和 浩\*

Kazuhiro OYAMATSU

## 要 旨

原子核の半古典的 Thomas-Fermi 模型を元にして一粒子ポテンシャル模型を構築し、原子核の密度分布が元の半古典計算とどの程度一致するかを  $^{208}\text{Pb}$  で検討した。一粒子ポテンシャル模型で計算した  $^{208}\text{Pb}$  の rms (二乗平均平方根) 半径は、元にした半古典的 Thomas-Fermi 模型での値と同程度だが小さくなった。中性子に対してはよく一致したが、陽子に関しては 0.1 fm 程度の有為な差となった。古典的展開点の外側に広がる核子数は全核子の約 2% とそれほど多くない。陽子密度分布の波打ちは荷電分布の実験値と比べてかなり大きく、残留相互作用による配位混合の必要が示唆される。

キーワード：半古典的原子核模型, 原子核半径, 核効果

## 1 まえおき

原子核は正の電荷を持つ陽子と電荷を持たない中性子からなる量子力学的多体系である。その大きさや束縛エネルギーはだいたい半古典的な液滴模型で記述できるが、量子力学的効果によって、元素や同位体ごとの様々な個性が生まれる。例えば陽子数  $Z=28, 50, 82$ 、中性子数  $N=28, 50, 82, 126$  である原子核の質量は近傍の原子核に比べて著しく小さくなる。これを殻効果といい、殻効果によるエネルギー変化分を殻エネルギーという。

著者はこれまで、実験室の安定原子核、不安定原子核から超新星物質や中性子星物質といった極限状況の物質までを統一的に扱える半古典的 Thomas-Fermi 模型を開発し、様々な研究に応用してきた<sup>[1][2][3][4][5][7][10][11][12][13][14]</sup>。しかし、半古典的模型では、量子力学的効果による物質の詳細な構造を記述できないため、原子核の密度汎関数模型の構築を目指して検討を進めている。

その第一段階として文献<sup>[3]</sup>では、半古典的な Thomas-Fermi (トーマス・フェルミ) 模型を拡張して、殻エネルギーを現象論的に評価する方法を提案し十分有効であることを示した。この方法は元々、高密度物質中での特異な原子核形状の存在可能性を議論するために開発されたものである<sup>[1][2]</sup>。

本研究では文献<sup>[3]</sup>と同じ手法を用いるが、殻エネルギーではなく波動関数に着目する。具体的には一粒子波動関数から原子核の密度分布を計算し、半径計算値を測定値および元にした Thomas-Fermi 計算値と比較して

\* 愛知淑徳大学人間情報学部 oyak@asu.aasa.ac.jp

どの程度自己無撞着な計算に近いかを検討し、究極的な目標である原子核の密度汎関数模型の構築につなげたい。

## 2 原子核の Thomas-Fermi 模型

質量や半径といった原子核のマクロな性質は半古典的な Thomas-Fermi 模型でよく記述できる。この研究では、不安定原子核、中性子星の超高密度物質中の原子核、核物質の経験的状態方程式に関する一連の研究<sup>[1][2][3][7][10][11][12][13][14]</sup> で用いた模型を用いる。

相互作用エネルギーの大部分は、密度が一様な核物質（陽子と中性子だけからなる仮想的な物質）のエネルギー密度で表すことができる。中性子密度  $n_n$ 、陽子密度  $n_p$ 、全核子密度  $n = n_n + n_p$  である一様核物質のエネルギー密度を  $\varepsilon(n_n, n_p)$  と書く。原子核は一様核物質と異なるので、密度の非一様性によって生じるエネルギーが加わる。本研究では、半古典的エネルギーを以下の式で近似する。

$$E_{TF}(Z, N) = \int d^3r \varepsilon(n_n(\mathbf{r}), n_p(\mathbf{r})) + F_0 \int d^3r |\nabla n(\mathbf{r})|^2 + \frac{e^2}{2} \int d^3r \int d^3r' \frac{n_p(\mathbf{r})n_p(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \quad (1)$$

と書く。ここで、 $e$  は素電荷、 $n_n(\mathbf{r})$ 、 $n_p(\mathbf{r})$ 、 $n(\mathbf{r})$  は、それぞれ、点  $r$  における中性子、陽子、全核子の密度である。式(2)の第1項は一様核物質の状態方程式  $\varepsilon(n_n, n_p)$  で表される主要（バルク）項、第2項は密度の非一様性によって生じる密度勾配項、第3項は電荷密度の非一様性によって生じるクーロンエネルギー項である。密度勾配項は核力の到達距離が有限である効果を反映したもので、 $\beta$  安定核の場合、表面エネルギーの半分を与える<sup>[7]</sup>。ただし、 $m_n$  ( $m_p$ ) は中性子（陽子）質量である。

一様核物質のエネルギー密度  $\varepsilon(n_n, n_p)$  は次のように、運動エネルギー密度  $t(n_n, n_p)$  とポテンシャルエネルギー密度  $v(n_n, n_p)$  の和として表す。

$$\varepsilon(n_n, n_p) = t(n_n, n_p) + v(n_n, n_p). \quad (2)$$

運動エネルギー密度  $t(n_n, n_p)$  は自由な Fermi（フェルミ）粒子の運動エネルギー密度とする。

$$t(n_n, n_p) = \frac{3}{5} (3\pi^2)^{2/3} \left( \frac{\hbar^2}{2m_n} n_n^{5/3} + \frac{\hbar^2}{2m_p} n_p^{5/3} \right). \quad (3)$$

一様核物質のポテンシャルエネルギー密度  $v(n_n, n_p)$  は対称核物質のポテンシャルエネルギー密度  $v_s(n)$  と中性子物質のポテンシャルエネルギー密度  $v_n(n)$  を用いて表す。

$$v(n_n, n_p) = [1 - (1 - 2x)^2] v_s(n) + (1 - 2x)^2 v_n(n). \quad (4)$$

ここで、 $x = n_p / (n_n + n_p)$  は陽子の混在度である。式(4)は陽子混在度依存性に関する多体計算結果を良く再現する近似である<sup>[8]</sup>。

対称核物質 ( $x=0.5$ ) と中性子物質 ( $x=0$ ) のポテンシャルエネルギー密度には以下の関数形を用いる。

$$v_s(n) = a_1 n^2 + \frac{a_2 n^3}{1 + a_3 n}, \quad v_n(n) = b_1 n^2 + \frac{b_2 n^3}{1 + b_3 n} \quad (5)$$

結局、式(1)の  $E_{TF}$  には7つの相互作用パラメータが含まれる。それらは、一様核物質のポテンシャルエネルギー密度の  $a_1$ 、 $a_2$ 、 $a_3$ 、 $b_1$ 、 $b_2$ 、 $b_3$  と、核力の強さと到達距離の効果を表す  $F_0$  である。これらのパラメータの値は安定原子核の質量と半径を再現するように選ぶ<sup>[1][7]</sup>。ここでは典型例として文献<sup>[10]</sup> の EOS E を用い、表1にその値を示す。核物質の状態方程式（対称核物質と中性子物質の核子あたりのエネルギー  $\varepsilon(n_n, n_p)/n$ ）を図1に、飽和パラメータを表2に示す。図1から、本研究の状態方程式は第一原理多体計算の典型的な結果<sup>[9]</sup> とよく一致していることが分かる。

密度分布に関しては、陽子と中性子では独立にとるが、球対称性を仮定する。半古典的な Thomas-Fermi モデルでは古典的展開点を超えて分布することができない。そこで、簡単のため密度分布を分布範囲の半径と表面の厚みのパラメータを使った次の関数で近似する。

$$n_i(r) = \begin{cases} n_i^{\text{in}} \left[ 1 - \left( \frac{r}{R_i} \right)^{t_i} \right]^3, & r < R_i, \\ 0, & r \geq R_i. \end{cases} \quad (6)$$

ここで、 $i=n, p$  は陽子 ( $p$ ) と中性子 ( $n$ ) を区別する添字で、 $r$  は中心からの距離、 $n_i^{\text{in}}$  は中心密度、 $R_i$  は分布半径、 $t_i$  は表面の厚みを与えるパラメータである。本研究ではこれらの密度分布パラメータの値を変化させて式(1)の  $E_{TF}$  の値を最小化する。

### 3 1 粒子ポテンシャル

核子の一粒子エネルギー  $e_{SP}$  と一粒子波動関数  $\psi(r)$  は以下のシュレディンガー方程式を解いて求める。陽子に対しては

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m_p} \Delta + U(r) + V_{LS}(r) + V_C(r) \right) \psi(\mathbf{r}) = e_{SP} \psi(\mathbf{r}), \quad (7)$$

中性子に対しては

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m_n} \Delta + U(r) + V_{LS}(r) \right) \psi(\mathbf{r}) = e_{SP} \psi(\mathbf{r}) \quad (8)$$

である。ここで、 $\psi(\mathbf{r})$  は一粒子波動関数である。 $U(r)$ 、 $V_{LS}(r)$ 、 $V_C(r)$  は一粒子ポテンシャルの、それぞれ、中心力、スピン軌道力、クーロン力部分であり、球対称であることを仮定した。一粒子ポテンシャル  $U(r)$ 、 $V_{LS}(r)$  は陽子と中性子では異なるが、記述の簡単のため式(7)と(8)では特に明示していない。

一様核物質中での核子の一粒子ポテンシャルは

$$U_0 = \frac{\delta v(n_n, n_p)}{\delta n_i} \quad (i=n, p), \quad (9)$$

で与えられるが、原子核では密度の非一様性を考慮する必要がある。式(1)の半古典計算ではこの効果を密度勾配項  $F_0 |\nabla n(r)|^2$  によって取り入れたが、ここでは、以下のように  $U_0$  の畳み込みを計算することによってその近傍の効果を陽に取り入れることにする。

$$U(r) = \left( \frac{1}{\pi\kappa} \right)^3 \int d^3r' U_0(\mathbf{r}') \exp\left( -\frac{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|^2}{\kappa^2} t \right). \quad (10)$$

ここで、 $\kappa$  は核力の到達距離の効果のパラメータである。

スピン軌道力ポテンシャルについては核子密度の比例する以下の表式を用いる。

$$V_{LS}(r) = \frac{1}{r} \left( \lambda_1 \frac{dn(r)}{dr} \pm \lambda_2 \frac{d}{dr} [n_n(r) - n_p(r)] \right) \mathbf{l} \cdot \mathbf{s}. \quad (11)$$

表1 経験的状態方程式と密度勾配項のパラメータの値

$a_1$ (MeV fm <sup>3</sup> )	$a_2$ (MeV fm <sup>6</sup> )	$a_3$ (fm <sup>3</sup> )	$b_1$ (MeV fm <sup>3</sup> )	$b_2$ (MeV fm <sup>6</sup> )	$b_3$ (fm <sup>3</sup> )	$F_0$ (MeV fm <sup>5</sup> )
-466.37	2193.4	3.4016	-205.73	659.70	1.5863	68.211

表2 経験的状態方程式の飽和パラメータ。 $n_0$ 、 $w_0$ 、 $K_0$ 、 $S_0$ 、 $L$  はそれぞれ対称核物質の飽和密度、飽和エネルギー、非圧縮率、対称エネルギー、対称エネルギーの密度微分パラメータである<sup>[7]</sup>。

$n_0$ (fm <sup>-3</sup> )	$w_0$ (MeV)	$K_0$ (MeV)	$S_0$ (MeV)	$L$ (MeV)
0.15983	-16.150	230.00	31.078	42.593

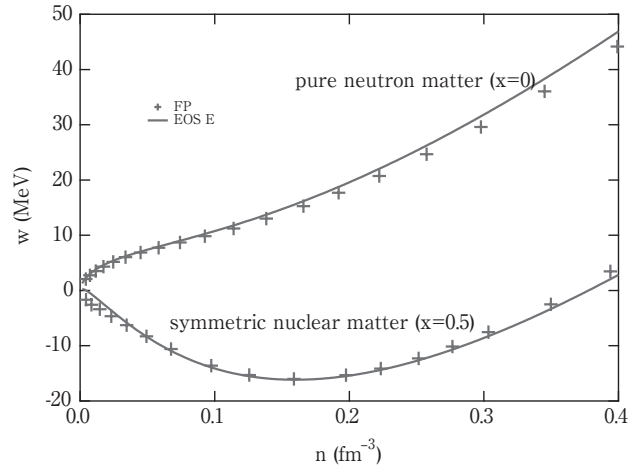


図1 対称核物質 ( $x=0.5$ ) 及び中性子物質 ( $x=0$ ) の経験的状態方程式 (1 核子あたりのエネルギー  $w=\epsilon/n$ )。実線は本研究で用いる文献<sup>[10]</sup> の EOS E である。比較のために第一原理多体計算の典型的な結果 (FP)<sup>[9]</sup> も示す。

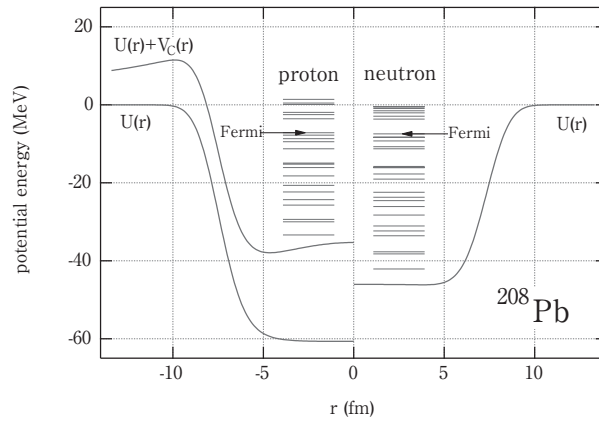


図2  $^{208}\text{Pb}$  の一粒子ポテンシャル  $U(r)$ ,  $V_c(r)$  と一粒子エネルギー  $\epsilon_{SP}$  計算値。Fermi はフェルミ準位を示す。

表3 一粒子ポテンシャルのパラメータの値

$\kappa$ (fm)	$\lambda^1$ (MeV fm <sup>5</sup> )	$\lambda^2$ (MeV fm <sup>5</sup> )
1.2232	184.00	28.203

ここで、 $\mathbf{l}$  は軌道角運動量、 $\mathbf{s}$  はスピンであり、式 (11) 中の複合の符号は陽子に対して +、中性子に対して - とする。また、 $\lambda_1$ 、 $\lambda_2$  はそれぞれスピン軌道力のアイソスカラーおよびアイソベクター成分の強さを与えるパラメータである。

一粒子ポテンシャルの 3 つのパラメータ  $\kappa$ 、 $\lambda_1$ 、 $\lambda_2$  の値は  $^{208}\text{Pb}$  の一粒子エネルギーを再現するように選ぶ。この一粒子エネルギーは隣接する原子核の質量から評価するので  $^{208}\text{Pb}$  近傍の原子核質量に合わせたことになる。表 3 にそれらの値を示し、図 2 に  $^{208}\text{Pb}$  の一粒子ポテンシャル  $U(r)$ 、 $V_c(r)$  と一粒子エネルギー計算値を示す。

#### 4 原子核の密度分布

陽子および中性子の一粒子状態の波動関数は式 (7)、(8) を解くことによって得られる。以下では、記述の簡単のため陽子と中性子の明示はしない。一粒子状態の主量子数、全角運動量、軌道角運動量を  $n, j, l$  とし、一粒子状態の波動関数を  $\phi_{n,j,l}(\mathbf{r})$  と書くと、球対称の系なので

$$\phi_{n,j,l}(\mathbf{r}) = R_{n,j,l}(r)Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (12)$$

と書くことができる。ここで、 $Y_{lm}$  は球面調和関数、 $m$  は軌道磁気量子数である。角度方向の平均を取り、密度を

$$n(r) = \sum_{n,j,l} |R_{n,j,l}(r)|^2 \quad (13)$$

で計算する。式 (13) の和は、占有する一粒子エネルギーの和が最小になるように、図 2 の Fermi 準位以下の一粒子状態について取る。

図 3 に  $^{208}\text{Pb}$  内の陽子、中性子の密度分布を示す。比較のため、Thomas-Fermi モデルでの計算値と荷電分布の実験値も併せて示した。これらの平均的な振る舞いはほぼ等しい。しかし、一粒子ポテンシャルから計算した陽子、中性子の密度分布はいずれも、簡単な関数形を仮定した Thomas-Fermi モデルの結果と比べて大きく波打っている。特に、陽子分布の波打ちは荷電分布の実験値と比べてもかなり大きい。

陽子、中性子分布を元にして平均自乗半径を計算できる。平均自乗半径の平方根  $\sqrt{\langle r^2 \rangle}$  の値を rms 半径 (rms : root-mean-square) といい、原子核の大きさの目安としてよく使われる。平均自乗半径の計算では、文献<sup>[15]</sup> の陽子構造関数  $w(r)$  を用いて計算した密度

$$\rho(r) = \int d\mathbf{r}_1 n(|\mathbf{r} + \mathbf{r}_1|) w(r_1), \quad w(r) = \frac{1}{a_p \sqrt{\pi}} e^{-(r/a_p)^2} \quad (14)$$

を用いる。 $\rho(r)$  で計算した平均自乗半径  $\langle r^2 \rangle$  は、最低次の近似では、点粒子としての密度分布  $n(r)$  を用いて計算した平均自乗半径  $\langle r^2 \rangle_0$  を用いて、

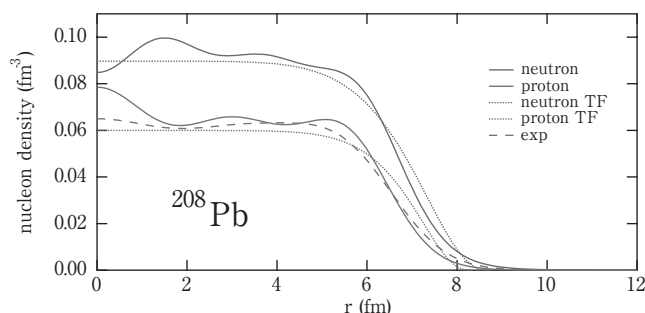


図 3  $^{208}\text{Pb}$  の一粒子状態から計算した中性子及び陽子の密度分布。TF は Thomas-Fermi モデルでの計算値、exp は荷電分布の実験値を示す。

表 4  $^{208}\text{Pb}$  内の中性子および陽子の rms 半径 (平均自乗半径の平方根)。TF は Thomas-Fermi モデルでの計算値、exp は荷電分布の実験値<sup>[6]</sup>を示す。また、中性子と陽子の平均自乗半径の差で定義される中性子スキン (neutron skin) の値もあわせて示した。

model	neutron (fm)	proton (fm)	neutron skin (fm)
present	5.64	5.44	0.20
Thomas-Fermi	5.67	5.55	0.12
exp		5.50	

表5  $^{208}\text{Pb}$  内の中性子および陽子の Fermi エネルギー ( $E_f$ )、古典的展開点の半径  $R$  とその点での密度  $n(r)$ 、古典的展開点の外側に分布する核子数  $\Delta N$ 。

nucleon	$E_f(\text{MeV})$	$R(\text{fm})$	$n(R) (\text{fm}^{-3})$	$\Delta N$
neutron	- 7.4378	8.31767	0.0045	2.3
proton	- 7.1368	7.74357	0.0050	1.7

$$\langle r^2 \rangle = \langle r^2 \rangle_0 + \frac{3}{2} a_p^2 \quad (15)$$

と書くことができる。

表4に、一粒子ポテンシャルと Thomas-Fermi モデルでの陽子、中性子分布の rms 半径の計算値を示す。2つのモデルでは中心力ポテンシャルを作る際の、核子間力の到達距離の効果の取り入れ方に違いはあるもののほぼ同じ rms 半径を与える。陽子、中性子ともに一粒子ポテンシャルは Thomas-Fermi モデルよりも小さな rms 半径を与える。モデルによる違いは中性子に対しては小さく、陽子に対しては 0.11 fm とやや大きい。ただし、荷電分布の実験値の rms 半径の値は2つの計算値の間にあるため、実験値の再現性の点では2つのモデルの優劣はない。

半古典的な Thomas-Fermi モデルと違って、一粒子ポテンシャルモデルでは量子力学的効果によって古典的展開点を超えて分布することができるため、ポテンシャルが同じであれば rms 半径は大きくなる。表4の結果はこれとは逆となり意外に感じるが、2つのモデルで核力の到達距離の扱いを変えたためポテンシャルに違いがあり、不思議ではない。表5に示すように、 $^{208}\text{Pb}$  は  $\beta$  崩壊に対して安定核なので陽子、中性子の Fermi エネルギーはほぼ等しい。陽子に対する古典的展開点の半径は小さいが、これは陽子数が中性子数に比べて小さいことを反映し、また中性子スキンの存在を示唆している。陽子、中性子のいずれも古典的展開点での密度は中心密度の約5%にあたる  $0.005 (\text{fm}^{-3})$  程度である。量子力学的効果によって古典的展開点の外側にも約2個の核子が分布する。これは核子数の約2%に当たり、量子効果の大きさの一つの目安と考えることができる。

しかし、中性子スキンの計算では2つのモデルの陽子の rms 半径の 0.1 fm の差は顕著な違いと言える。この差は半径の殻効果と考えることもできる。図3の陽子分布が荷電分布の実験値<sup>[6]</sup> と比べても大きな波打っていることから、陽子半径の殻効果は過大に評価されていると感じられる。残留相互作用による一粒子状態の配位混合を考える必要があるだろう。配位混合は密度分布を平均化し、波打ちを小さくする方向に働く。

## 5 まとめと議論

半古典模型をもとにした原子核の殻エネルギーを計算する現象論的な手法を用いて  $^{208}\text{Pb}$  内の陽子、中性子分布を計算した。核子の一粒子状態はシュレディンガー方程式を解いて計算する。核子の一粒子ポテンシャルは半古典計算で得た陽子中性子分布から計算するが、新たに3つのパラメータが必要になる。それらは、中心力の核力の到達距離のパラメータと、スピン軌道力のアイソスカラー及びアイソベクター成分の強さのパラメータである。これらは  $^{208}\text{Pb}$  の近傍の原子核質量から決定した。

今回の一粒子ポテンシャルモデルで計算した  $^{208}\text{Pb}$  の rms 半径は、元にした Thomas-Fermi 模型での値よりもやや小さいがほぼ同じ値を再現した。特に中性子に対しては非常によい一致であった。やや小さめの値となった主たる原因は核力の到達範囲の効果を式(10)で評価するように変えたことであろう。量子力学的効果によって密度分布が古典的展開点の外側に広がり、全核子の約2%が古典的展開点の外側に分布した。これは量子効果の大きさの一つの目安である。また、元にした半古典模型の Thomas-Fermi モデルの近似の良さを測る一つの目安と考えることができるだろう。

$^{208}\text{Pb}$  の中性子スキンの値から対称エネルギーの密度依存性を決定する試みが行われている<sup>[16][17]</sup>。この目的では、2つのモデルの陽子の rms 半径計算値の 0.1 fm の差は顕著な違いとなる。この違いは陽子半径の殻効果と考えることができるが、残留相互作用による一粒子状態の配位混合の考慮するともう少し小さくなるだろう。陽子密度分布の波打ちが荷電分布の実験値と比べてもかなり大きいことから、配位混合の必要は明らかである。今回の計算に限らず、残留相互作用をどのように評価して、一粒子状態から原子核の波動関数を構築するかは、平均場計算で重要な問題であり、半径の精密な議論では注意する必要がある。

今後は、まず球形原子核で自己無撞着な計算を行えるようにしたい。その際、対相関、配位混合を取り入れて殻エネルギーを導出する手法を検討し、その後、原子核の変形を考慮できる密度汎関数法を構築を目指して歩を進めていきたい。

## 参考文献

- [1] K. Oyamatsu, Nuclear Physics A **561**, (1993) 431.
- [2] K. Oyamatsu and M. Yamada, Nuclear Physics A **578**, (1994) 181.
- [3] 親松和浩, 愛知淑徳大学現代社会研究科報告第4号 (2009) 171.
- [4] H Shen, H Toki, K Oyamatsu, K Sumiyoshi, Nuclear Physics A **637** (1998) 435.
- [5] H Shen, H Toki, K Oyamatsu, K Sumiyoshi, Progress of Theoretical Physics **100** (1998) 1013.
- [6] H. de Vries, C. W. de Jager and C. de Vries, Atomic Data and Nuclear Data Tables **36** (1987) 495.
- [7] K. Oyamatsu and K. Iida, Progress of Theoretical Physics **109**, (2003) 631.
- [8] I. E. Lagaris and V. R. Pandharipande, Nuclear Physics A **369** (1981) 470.
- [9] B. Friedman and V. R. Pandharipande, Nuclear Physics A **361** (1981) 502.
- [10] K. Oyamatsu and K. Iida, Physical Review C **75** (2007) 015801.
- [11] K. Oyamatsu and K. Iida, Physical Review C **81** (2010) 054302.
- [12] K. Oyamatsu and K. Iida, Physical Review C **82** (2010) 027301.
- [13] H. Sotani, K. Nakazato, K. Iida, K. Oyamatsu, Physical Review Letters **108** (2012) 201101.
- [14] H. Sotani, K. Nakazato, K. Iida, K. Oyamatsu, Monthly Notice of Royal Astronomical Society **428** (2013) L21.
- [15] L. R. B. Elton and A. Swift, Nuclear Physics A **94** (1967) 52.
- [16] M. B. Tsang, J. R. Stone, et al., Physical Review C **86** (2012) 015803.
- [17] 民井淳, 銭廣十三, 日本物理学会誌 **69** (2014) 6.