

殻構造形成機構と、原子核・マイクロクラスターの変形

在田 謙一郎 (京大・基研)

1. はじめに

原子核、マイクロクラスターをはじめとする有限量子多体系の微視的ダイナミクスを議論する上で、殻構造は最も重要な側面の一つである。系を構成する個々の粒子の運動が、他の構成粒子全体によって形成される平均場の中をあたかも独立粒子のごとく運動する様な描像（独立粒子描像）が成り立つ時、この系は殻模型により記述することができる。殻構造とはこの独立粒子運動を量子化した一粒子スペクトルに見られる大局的な揺らぎ構造のことである。原子核を構成する核子は核力によって非常に強く束縛されているにも拘らず独立粒子描像が比較的よく成り立つことが知られており、殻模型は原子核の微視的理論の出発点として重要な概念となっている。

有限量子系の持つ最も顕著な特徴は、巨視的（古典的）性質と微視的（量子的）揺らぎの性質とが、系を特徴付ける上で共に重要な役割を担っているという点にある。多体系のダイナミクスを厳密に解くことは一般に非常に困難であるが、独立粒子描像が成り立つ場合は上の巨視的寄与と揺らぎとを別々に取り扱うことにより問題を簡単化することが出来る。これは、揺らぎの性質のみに着目した場合、一体場近似の枠内でかなり正確な議論が可能であることを利用して、その近似では定量的議論の難しいバルクな性質についてはより信頼性の高い現象論な扱いをするというもので、「殻補正の方法」として原子核の分野で広く用いられてきた [1]。

我々は、特に有限量子系の揺らぎの性質に関心がある。殻構造の存在は、系の存在形態を極めて多彩なものにしている。これは、以下で具体的に見るように殻構造の性質が変形など系を特徴付けるパラメータに非常に敏感であることに起因している。この研究では特に、変形パラメータを変化させていくときの一粒子スペクトルの揺らぎ、即ち殻構造の性質の変化を半古典論の手法を用いて解析する。準位密度を半古典的に評価すると、それは対応する古典系における古典周期軌道の寄与に関する和のかたちで表される（Gutzwiller トレース公式）。従って、周期軌道の性質の変化を調べることでスペクトルの性質を議論することが可能である。特に、短い周期軌道の分岐現象が、スペクトルに強い殻構造をもたらす重要な原因であることを示す。

2. 殻構造と古典周期軌道およびその分岐

Gutzwiller トレース公式は、Feynmann 経路積分の半古典的評価に基づいて導出される。準位密度は次式のように伝播関数のフーリエ変換で表される。

$$g(E) = \text{Tr} \delta(E - \hat{H}) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dt e^{iEt/\hbar} \int dq \langle q | e^{-i\hat{H}t/\hbar} | q \rangle \quad (1)$$

伝播関数を経路積分表示して積分を停留位相近似により評価すると、始点と終点とを結ぶ古典軌道からの寄与の和で表される。さらにフーリエ変換とトレース積分を停留位相近似により評価すると周期軌道からの寄与が抽出され、Gutzwiller トレース公式

$$g^{\text{cl}}(E) = \bar{g}(E) + \sum_r \sum_{n=1}^{\infty} A_{nr}(E) \cos(nS_r(E)/\hbar - (\pi/2)\mu_{nr}) \quad (2)$$

が導かれる [2,3]。ここで r, n は基本的な周期軌道およびその周回数を表す。 $S_r = \oint \mathbf{p} \cdot d\mathbf{q}$ は軌道 r に沿った作用積分、 μ_{nr} は軌道の幾何学的性質に関係する Maslov 位相と呼ばれる定数である。ここで、殻構造を議論する上での、トレース公式 (2) の構造に関して重要な点を二点指摘しておきたい。第一点は位相部分についてである。有限のエネルギー分解能 δE で見たスペクトルの大局的性質に着目しよう。このとき、(2) 式において、エネルギーを δE だけシフトしたときの位相の変化が 2π を超える項は考えなくてよい。従って、考慮すべき軌道について以下のような条件が得られる：

$$n(S(E + \delta E) - S(E)) \simeq n \frac{\partial S(E)}{\partial E} \cdot \delta E = nT_r \cdot \delta E \lesssim 2\pi\hbar, \quad (3)$$

即ち、

$$nT_r \lesssim T_{\max} \equiv \frac{2\pi\hbar}{\delta E} \quad (4)$$

となり、分解能から不確定性関係により定まる T_{\max} にくらべて短い周期を持つ軌道のみを考慮すればよいことが分かる。トレース公式により個々の量子準位を再現することは、無限に存在する周期軌道に関する和の収束性の問題などがあって容易ではないが、有限の分解能で祖視化した大局的構造を議論するには有限個の短い軌道のみを考慮すればよく、トレース公式はこうした目的に対して非常に有効な手法を与えてくれると言われていることができるだろう。二点目は、個々の軌道の準位密度に対する寄与の大きさを表す振幅因子 A_{nr} に関する注意である。停留位相近似の下で振幅因子は一般に

$$A_{nr}(E) \propto \frac{1}{\sqrt{|\det(1 - \mathfrak{M}_r^n)|}} \quad (5)$$

という因子に比例している。ここで \mathfrak{M}_r は始点と終点とを関係付けるポアンカレ写像の線型項を表す行列（モノドロミー行列）であり、次式により定義される：

$$\mathfrak{M}_r = \frac{\partial Z_{\perp}(t_0 + T_r)}{\partial Z_{\perp}(t_0)}, \quad Z_{\perp} = (\mathbf{p}, \mathbf{q})_{\perp} \quad (6)$$

添字 “ \perp ” は周期軌道あるいは周期軌道のパラメータ族が成す位相空間上の多様体に垂直な成分であることを表す。ハミルトン力学系のシンプレクティック性からモノドロミー行列は実シンプレクティック行列であり、その固有値は一般に複素四重項 ($e^{\pm\alpha \pm i\beta}$) あるいは二重項 ($+/-)(e^{\pm a})$ (a は実または純虚数) の形で現れる。この固有値*の性質が軌道の安定性を定めている。すべての固有値が ($e^{\pm i\beta_m}$) の対を成している場合軌道は安定であり、その他の場合は不安定である。特にモノドロミー行列が二次元の場合、

$$\det(1 - \mathfrak{M}_r) = 2 - \text{Tr} \mathfrak{M}_r \quad (7)$$

が成り立ち、安定軌道は $|\text{Tr} \mathfrak{M}| \leq 2$ 、不安定軌道では $|\text{Tr} \mathfrak{M}| > 2$ であるから、トレースの値を見ることにより安定性を議論できる。モノドロミー行列が固有値 1 を持つ点（二次元の場合は $\text{Tr} \mathfrak{M} = 2$ ）において、振幅因子 (5) は発散している。この発散は物理的なものではなく、トレース

*モノドロミー行列 \mathfrak{M}_r の各成分は t_0 に依存するが、その固有値は依存しない。

研究会報告

スを計算する際に用いた停留位相近似が破綻することに起因するものである。では、この特異点において、対応する周期軌道に何が起きているのだろうか。ここで、配位空間上の点 q からエネルギー E を持って出発し、再び q に戻ってくる軌道を考え、この軌道に沿った作用積分を $S(q)$ と表す。このような軌道は、与えられた q に対して必ず存在する。この軌道が周期軌道であるための条件は始点と終点での運動量が一致することであり、Hamilton-Jacobi の方程式を用いると次のように表すことが出来る:

$$0 = p' - p = \left. \frac{\partial S(q', q; E)}{\partial q'} \right|_{q'=q} + \left. \frac{\partial S(q', q; E)}{\partial q} \right|_{q'=q} = \frac{\partial S(q)}{\partial q}. \quad (8)$$

従って、周期軌道は作用積分 $S(q)$ の停留点として定義することができる。次に作用積分を周期軌道 \bar{q} のまわりで展開しよう:

$$S(\bar{q} + \delta q) = \bar{S} + \frac{1}{2} \delta q^T \mathfrak{B} \delta q + \mathcal{O}(\delta q^2), \quad \mathfrak{B} = \frac{\partial^2 S(q)}{\partial q \partial q} \quad (9)$$

ここに表れる $(f \times f)$ 行列 \mathfrak{B} はモノドロミー行列と次のように関係している:

$$\mathfrak{B} = b - (I - a)c^{-1}(I - d), \quad \mathfrak{M} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \quad (10)$$

従って、(5) 式の分母に表れる因子は

$$\det(1 - \mathfrak{M}) = -\det[c] \det[\mathfrak{B}] \quad (11)$$

となり、振幅因子の発散点は作用の曲率テンソル \mathfrak{B} がゼロ固有値を持つ点に対応していることが分かる。曲率テンソルの固有値の符号が変わると、作用の停留点の数、即ち周期軌道の数に変化する。従って、振幅因子 (5) の特異点は古典周期軌道の分岐点に対応していることが分かる。この様に、古典周期軌道の分岐が量子スペクトルに重要な影響を与えることが期待される。以下でこのことをモデルを用いて数値的に検証していこう。

3. 四重極変形と八重極変形との組合せによる新しい殻構造とその半古典的理解

原子核の高スピン状態では、殻構造の効果により、長軸と短軸の比が 2:1 あるいは 3:1 といった巨大変形状態が実現されていることが近年知られるようになった。これらは「超変形核」と呼ばれ、現在の高スピン核構造分野における中心課題となっている。また、超変形状態における殻構造の特徴として、パリティの異なる準位の近似的縮退による強い八重極相関がある。我々はこれらの自由度、即ち四重極変形と八重極変形とを考慮して、次のような模型ハミルトニアンを解析を行なった:

$$H = \frac{p^2}{2M} + \sum_i \frac{M\omega_i^2 x_i^2}{2} - \lambda_{30} M\omega_0^2 [r^2 Y_{30}(\Omega)]'' \quad (12)$$

ここで、 $\omega_x = \omega_y \equiv \omega_\perp$, $\omega_0^3 = \omega_x \omega_y \omega_z$, また、ダブルプライムは括弧内の変数がダブルストレッチ座標 $x_i'' = (\omega_i/\omega_0)x_i$ で定義されていることを表す。文献 [4] では、四重極変形度を $\omega_\perp/\omega_z = 2$ に固定して量子スペクトル及び古典周期軌道の性質を八重極変形度の関数として調べ、八重極変形によって「スーパーシェル」とよばれる準位密度のうなり構造が発達するメカニズムが古典周

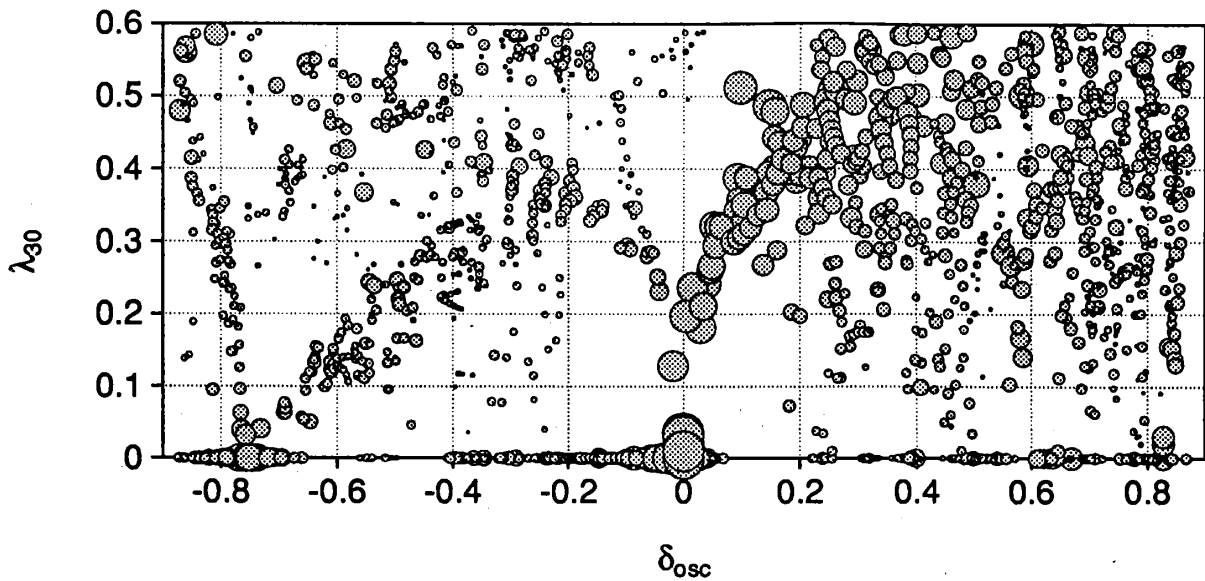


図 1. 殻構造エネルギーの極小値の分布。16 ≤ N ≤ 320 の偶数粒子数についてプロットを行なった。円の中心が極小値を与える変形度，半径が殻構造エネルギーの大きさを表す。

期軌道の安定性により理解できることを示した。また，文献 [5] では $\omega_{\perp}/\omega_z = \sqrt{3}$ にして同様の解析を行ない，有限八重極変形度において発達する殻構造と周期軌道の分岐との関連を指摘した。以下では，四重極変形度 $\delta_{osc} \equiv \frac{\omega_{\perp} - \omega_z}{(2\omega_{\perp} + \omega_z)/3}$ と八重極変形度 λ_{30} の二次元パラメータ空間上での殻構造の形成を系統的に調べ，その古典軌道の性質との関連について議論する。

系に変形をもたらす微視的な要因は殻構造であることを上で述べた。殻構造の影響を端的に表すが，次式で定義される殻構造エネルギーである：

$$\mathcal{E}_{shell} = \sum_{n=1}^N E_n - \bar{\mathcal{E}}. \quad (13)$$

右辺第二項は，第一項をスムーズ化したものであり，即ち殻構造エネルギーとは一粒子エネルギーの和から揺らぎの部分を抽出したものである。この量は，フェルミ面における準位密度が低い場合は負の大きな値を，高い場合には正の大きな値をとる。従って，フェルミ面における準位密度をできるだけ小さくするような変形を起こすことによって系が安定化するのである。図 1 は，粒子数 $N = 16 \sim 320$ の系に対して殻構造エネルギーを変形度 $(\delta_{osc}, \lambda_{30})$ の関数として計算し，変形度空間上で極小をとる点の分布をプロットしたものである。円の中心が極小値を与える変形度，半径が殻構造エネルギーの絶対値を表す。変形度 $\delta_{osc} = 0, 3/5, -3/4, (\lambda_{30} = 0)$ 付近の分布は各々，球形，プロレート超変形およびオブレート超変形状態を表す。これら以外にも，有限八重極変形度に強い殻構造を有する領域が存在するのが分かる。特に $(\delta_{osc} \simeq 0.1, \lambda_{30} \simeq 0.4)$ に顕著な分布が見られる。こうした殻構造はいかなる機構により形成されているのだろうか。

図 2 は， δ_{osc} の値を 0.1 および 0.5 に固定して， λ_{30} の値を変化させたときのスペクトルの変化を示したものである。これらは共に軸比が簡単な整数比になっていないため $\lambda_{30} = 0$ では準位は一樣に分布しているが， λ_{30} を大きくしていくとある有限八重極変形度において強い殻構造が出現しているのが分かる。

次に，準位密度のフーリエ変換を計算し，古典軌道との対応を調べてみよう。我々の系ではポテンシャルが座標に関して二次の同次式になっているので，次の様なスケール即が成り立つことが分かる：

研究会報告

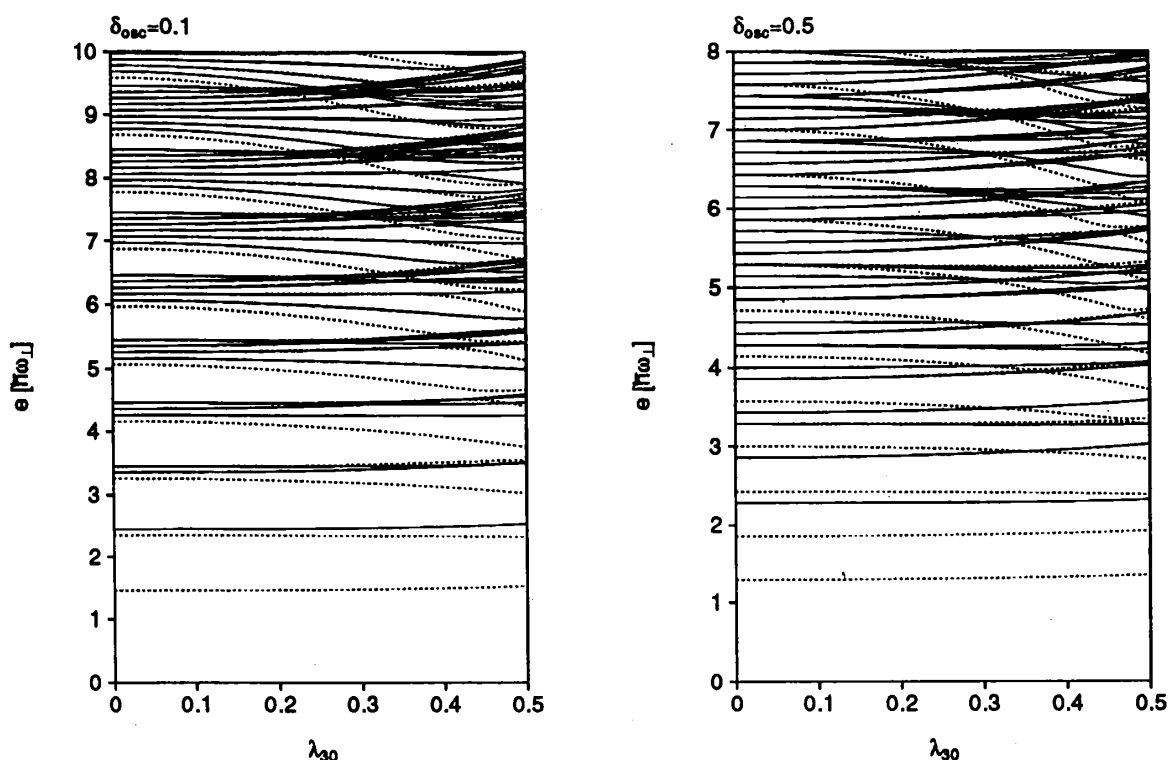


図 2. ハミルトニアン (12) の一粒子スペクトル。四重極変形を $\delta_{osc} = 0.1$ および 0.5 に固定して、八重極変形度を変えた時のスペクトルの変化を描いたもの。

$$H(\alpha p, \alpha q) = \alpha^2 H(p, q) \quad (14)$$

これを用いると、トレース公式を次のように変形することが出来る [4-6]:

$$g^{cl}(E) = \bar{g}(E) + \sum_{r,n} A_{nr} \sqrt{E} \cos(nET_r/\hbar - (\pi/2)\mu_{nr}) \quad (15)$$

この表式をふまえて準位密度のフーリエ変換を次のように定義しよう:

$$F(s) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dE \frac{e^{isE}}{\sqrt{E}} g(E) \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{E}{E_{cutoff}} \right)^2 \right] \quad (16)$$

(15) 式を代入すると,

$$F^{cl}(s) = \bar{F}(s) + \sum_{r,n} A_{nr} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\Delta s} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{s - nT_r}{\Delta s} \right)^2 \right] \quad (17)$$

となり, 古典周期軌道の周期 $s = nT_r$ にピークを持つ関数であることが分かる。ピーク幅は $\Delta s = \hbar/E_{cutoff}$ である。一方, 量子論から計算されるフーリエ変換は,

$$F^{qm}(s) = \frac{1}{2\pi\hbar} \sum_n \frac{e^{isE_n}}{\sqrt{E_n}} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{E_n}{E_{cutoff}} \right)^2 \right] \quad (18)$$

である。これを (17) 式と比較することにより, 準位密度に対する古典軌道の寄与の大きさを知る

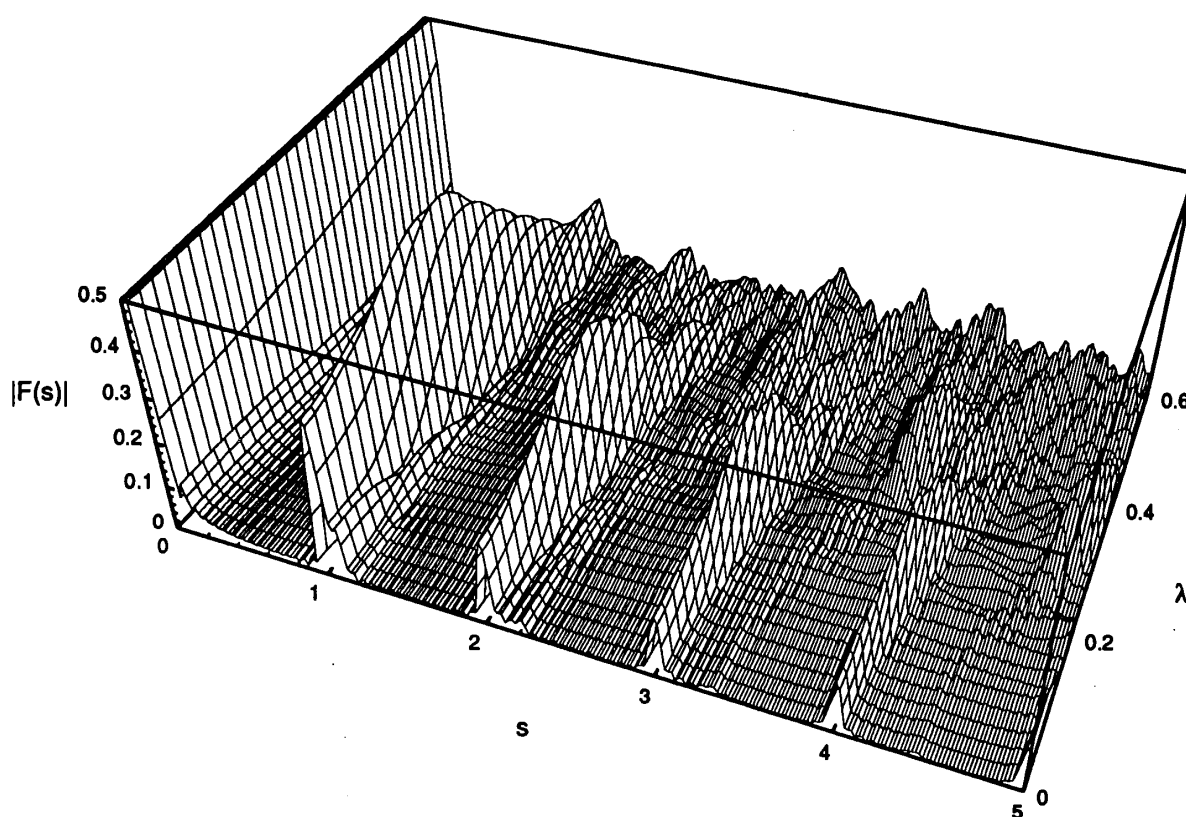


図 3. $\delta_{\text{osc}} = 0.1$ のときの準位密度のフーリエ変換 (18) の絶対値を s および λ_{30} の関数としてプロットしたもの。

ことが出来る[†]。図 3 に、 $\delta_{\text{osc}} = 0.1$ のときのフーリエ変換の絶対値 $|F(s)|$ を、八重極変形度 λ_{30} を連続的に変化させてプロットした。ピークの値は、図 4 に示した周期軌道の周期と非常に良く一致している。 $s \simeq 1$ のピークが $\lambda_{30} \simeq 0.4$ で極大を示しており、殻構造の発達はこのピークに対応する古典軌道の寄与と関係していると考えてよいだろう。前節で述べたように、古典軌道の準位密度に対する寄与の大きさを決める最も重要な性質はその安定性である。特に軌道の分岐領域において準位密度に対する寄与が重要になると考えられる。図 5 は、古典軌道のモノドロミー行列のトレースを λ_{30} の関数としてプロットしたものである。 $\text{Tr} \mathcal{M} = 2$ が分岐点に対応する。軌道 PA の場合、 $\lambda_{30} = 0.12$ で一回目の分岐を起こして新たに軌道 PR を生じ、さらに $\lambda_{30} = 0.24$ で二回目の分岐を起こして軌道 PM を生じる。フーリエピークの増大はこれらの分岐の影響であるみなされる。また、 $\delta_{\text{osc}} = 0.5$ で有限八重極変形度に見られる殻構造も、周期軌道の分岐によって説明することができる [6]。この様に、非可積分系、特に正則な運動とカオス的な運動が古典位相空間に混在した「混合系」においては、短い周期軌道の分岐が量子スペクトルの殻構造形成に重要な役割を果たしていると言うことができるだろう。

[†]即ち、 $s = nT_r$ のピークの高さから (15) 式の A_{nr} の大きさを見積もることが出来る。一般に混合系（弱いカオス系）では停留位相近似が破綻しているため、振幅因子 A_{nr} を求めることは困難である。

研究会報告

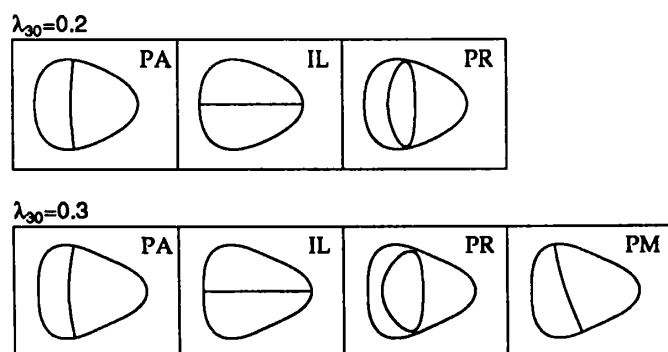
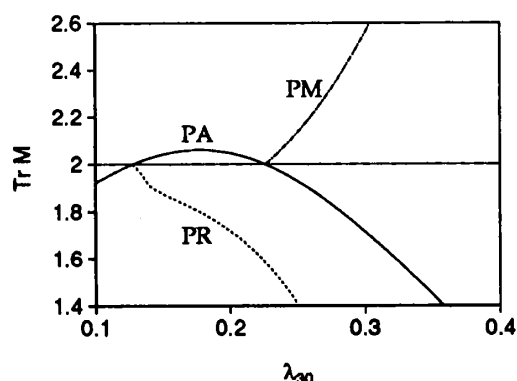
図 4. $\delta_{\text{osc}} = 0.1$ での古典周期軌道。

図 5. モノドロミー行列のトレース。

4. まとめ

我々は、有限量子系のダイナミクスを理解する上で重要な役割をもつ殻構造の性質を、対応する古典系の性質と結びつけて解析を行なった。半古典論は可積分系や強いカオス系では成功をおさめてきているが、それらの中間的な状況である混合系は未開拓で、十分な記述が成されていない。これは、強いカオス系ではよく成り立っている停留位相近似が、安定領域との境界、即ち周期軌道の分岐領域で破綻しているという困難のためである。我々は、混合系の特徴的側面であるこの分岐現象が量子スペクトルに与える影響を考察した。特に、非可積分領域に属する有限八重極変形度における顕著な殻構造の出現が周期軌道の分岐と密接な関係を有することが明らかになった。

少数自由度のカオスの研究は多くの物理学者を惹き付け、近年の計算機能力の向上ともあいまって飛躍的な発展を遂げている。これまでは二次元ビリヤード模型などのおもちゃを用いた解析が中心であったが、この理論は様々な物理系の特徴を理解する上で有用な道具たり得ると考えられる。混合系の問題などの基本的課題の解決に向けた努力とともに、物理系への応用が今後の重要な課題であり、原子核やマイクロクラスターはそうした物理を展開する上での絶好の場を提供していると言えるだろう。

参考文献

- [1] V.M. Strutinsky, Nucl. Phys. A122 (1968), 1.
M. Brack, J. Damgaard, A.S. Jensen, H.C. Pauli, V.M. Strutinsky and C. Y. Wong, Rev. Mod. Phys. 44 (1972), 320.
- [2] M.C. Gutzwiller, J. Math. Phys. 8 (1967) 1979; 12 (1971) 343;
Chaos in Quantum and Classical Mechanics, (Springer Verlag, 1990);
The Semi-classical Quantization of Chaotic Hamiltonian Systems, in: *Chaos and Quantum Physics*, Proc. Les Houches Summer School, Session LII (1989), 201.
- [3] A.M. Ozorio de Almeida, *Hamiltonian System: Chaos and Quantization*, (Cambridge University Press, 1988).
- [4] K. Arita, Prog. Theor. Phys. 90 (1993), 747;
K. Arita and K. Matsuyanagi, Prog. Theor. Phys. 91 (1994), 723.
- [5] K. Arita, Phys. Lett. 336B (1994), 279.
- [6] K. Arita and K. Matsuyanagi, Nucl. Phys. A (1995), to be published.