第4回 数学を楽しむ会
魔法数について

小又 志郎

2012年6月16日

概要

会員より、原子核の魔法数に興味があるとの意見をいただいたので、魔法「数」について、数学的 (というより物理的?) 側面に少し触れつつ、初歩的なお話をしたいと思います。

1 魔法数とは

観測事実: 原子核のうち、陽子数 (Z) や中性子数 (N) が

$$2, 8, 20, 28, 50, 82, 126, \ldots$$

などの原子核は特に安定で、元素の周期表における希ガス (He, Ne, Ar, Kr, Xe, Rn) に相当するように見える。これらの数を原子核における魔法数 (magic number) と呼ぶ。

元素の周期表の場合、原子における電子配置の殻構造 (shell model) によって、周期律はうまく説明された。原子核においても同様の殻構造が存在するのではないか?

- 参考 1: 元素の周期表[*1]
- 参考 2: 「図 1.2」[*2]

→ 実際、1949年に Mayer (メイヤー) および Jensen (イェンゼン) らによって提案された殻模型は、原子核の魔法数の説明に成功した。この業績により、Mayer と Jensen は1963年のノーベル物理学賞を受賞 (Wigner と同時受賞)。

原子核の殻模型のポイント:

1. 平均ポテンシャル = 中心力 + <u>スピン軌道力</u>(spin-orbit force)
2. 残留相互作用としての <u>対相関力</u>(pairing force)

ここでは特に、主要な要素であるスピン軌道力 (スピン軌道相互作用) について説明する。

2 原子の場合の復習

中心力場の近似: 第0近似としては水素原子の問題と同じ。

[*1] http://www.gen.t-kougei.ac.jp/chem/mrika/periodictable/periodictable-3.pdf
[*2] 文献 [1], p. 13

シュレディンガー方程式

$$H\psi(\boldsymbol{r}) = E\psi(\boldsymbol{r})$$

ハミルトニアン

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\triangle + V(r), \quad V(r) = -\frac{e^2}{r} \quad (\text{クーロンポテンシャル})$$

$$\begin{aligned}\triangle &= \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (\text{ラプラシアン}) \\ &= \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r + \frac{1}{r^2}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi^2}\right] \quad (\text{極座標})\end{aligned}$$

よって

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r + \frac{\boldsymbol{l}^2}{2\mu r^2} + V(r)$$

($\boldsymbol{l} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}$ は軌道角運動量演算子で、$\boldsymbol{l}^2$ の固有値は $l(l+1)$ である)

この場合、変数分離法で厳密に解ける。

エネルギー固有関数

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r)Y_l^m(\theta,\varphi)$$

ここで

$$R_{nl}(r) = \left\{\left(\frac{2}{na_0}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n\cdot(n+l)!}\right\}^{1/2} e^{-\rho/2}\rho^l L_{n-l-1}^{(2l+1)}(\rho)$$

ただし

$$\begin{aligned} n &= 1,2,3,\dots \quad (\text{主量子数}) \\ l &= 0,1,2,\dots,n-1 \quad (\text{方位量子数: s, p, d, f, g, \dots の記号で表す}) \\ m &= -l,-(l-1),\dots,l-1,l \quad (\text{磁気量子数})\end{aligned}$$

なお

$$\begin{aligned} a_0 &= \frac{\hbar^2}{\mu e^2} = 0.53\mathring{A} \quad (\text{ボーア半径}) \\ \rho &= \frac{2}{na_0}r \end{aligned}$$

また、$Y_l^m(\theta,\varphi)$ は球面調和関数である。さらに、$L_{n-l-1}^{(2l+1)}(\rho)$ はラゲールの (陪) 多項式[*3]で、ここでの定義は

$$L_n^{(\alpha)}(x) = \frac{e^x x^{-\alpha}}{n!}\frac{d^n}{dx^n}(e^{-x}x^{n+\alpha}) = \sum_{k=0}^{n}(-1)^k\binom{n+\alpha}{n-k}\frac{x^k}{k!}$$

であり、微分方程式

$$xy'' + (\alpha+1-x)y' + ny = 0$$

の解である。

[*3] ラゲールの多項式にはいくつかの異なる定義 (convention の違い) があるので注意。

エネルギー固有値

$$E_n = -\frac{e^2}{2a_0 n^2} \quad (n^2\text{重に縮退})$$

特に、基底状態は

$$E_1 = -\frac{e^2}{2a_0} = -13.6\ \mathrm{eV}$$

(n, l, m) で指定される 1 つの軌道には、2 個の電子 (スピン上向き、下向き) が入れる。すなわち、

s 軌道 $(l = 0, m = 0)$:	2 個
p 軌道 $(l = 1, m = -1, 0, 1)$:	6 個
d 軌道 $(l = 2, m = -2, -1, 0, 1, 2)$:	10 個
...	

- 参考 3: 「図 5.2」[*4]

実際の (水素以外の) 原子では、内側の電子による遮蔽の効果により、s 電子よりも p 電子、p 電子よりも d 電子. . . の受ける引力は小さく、その分エネルギーが上昇する。これにより、実際には

1s / 2s, 2p / 3s, 3p, 3d / 4s, 4p, 4d, 4f / 5s, 5p, 5d, 5f, 5g / 6s, 6p, . . .

という殻構造ではなく

1s / 2s, 2p / 3s, 3p / 4s, <u>3d</u>, 4p / 5s, <u>4d</u>, 5p / 6s, <u>4f</u>, <u>5d</u>, 6p / . . .

という殻構造になる。/ のところがちょうど周期表の右端、すなわち閉殻構造。下線を引いた軌道が、エネルギーの上昇によって、より高いエネルギーの軌道の間に割り込んだ形になっている。

3　原子核の場合

3.1　調和振動子ポテンシャル

(いちばん外側の) 核子にはたらく中心力は、原子の場合のクーロン力のような長距離力ではなく、原子核の大きさ程度の到達距離をもつ短距離力。そこでまず第 0 近似として、クーロンポテンシャルの代わりに、3 次元等方調和振動子ポテンシャル（フックの法則に従うバネの力）をとる。すなわち

$$V(r) = \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2$$

とおいて、上と同じことをやる。

この場合も、変数分離法で厳密に解ける。

エネルギー固有関数

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \varphi)$$

ここで

$$R_{nl}(r) = \left\{ \left(\sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}} \right)^3 \frac{2 \cdot n!}{\Gamma(n + l + 3/2)} \right\}^{1/2} e^{-\rho^2/2} \rho^l L_n^{(l+1/2)}(\rho)$$

(ただし、ここでの n は、原子の場合の動径量子数 $n_r = n - l - 1$ に相当することに注意。原子の場合の主量子数は、歴史的経緯もあってやや特殊な定義になっている。軌道を指定するには、ここでの場合のように、動径量子数、方位量子数、磁気量子数の組を用いるのが自然でしょう。)

[*4] 文献 [2], p. 152

エネルギー固有値

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

ここで、

$$\begin{aligned} n &= 0, 1, 2, \ldots \\ l &= 0, 1, 2, \ldots (n \text{ とは独立に、いくつでも高い値がとれる}) \end{aligned}$$

- 参考 4: 調和振動子ポテンシャルの場合のエネルギー図*5

これだけでも、魔法数の 2, 8, 20 まではうまくいくが、それ以降がうまくいかない (次は 40 になってしまう)。

3.1.1 Woods-Saxon 型ポテンシャル

なお、調和振動子ポテンシャルの場合、エネルギーは、異なる (n, l) の組合せで縮退がある。例えば、

$$\begin{aligned} &E_{10} = E_{02} \\ &E_{11} = E_{03} \\ &E_{20} = E_{12} = E_{04} \\ &\ \cdots \end{aligned}$$

ただし、調和振動子から形をずらせば、この縮退は解ける (例えば、極端な場合として、井戸形ポテンシャルでは、l が大きいほどエネルギーが低下する)。実際の観測に合わせるためには、調和振動子と井戸形の中間のような Woods-Saxon 型ポテンシャルというのが考えられており、これはポテンシャルに

$$D\boldsymbol{l}^2 \quad (D < 0 \text{ は定数})$$

という項を付け加えることに相当する。

- 参考 5: 「図 1.1」*6

しかし、これだけでは魔法数の説明はできない。

3.2 スピン軌道相互作用

そこで、ポテンシャルに、上記の中心力のほかに、

$$f_{ls}(r)(\boldsymbol{l} \cdot \boldsymbol{s})$$

というスピン軌道相互作用を加えると、原子核の殻構造が見事に説明できる、というのが Mayer と Jensen らの発見であった。ここで、$\boldsymbol{l}$, $\boldsymbol{s}$ はそれぞれ、(いちばん外側の) 核子の軌道角運動量とスピン角運動量の演算子。

ハミルトニアン

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\triangle + V(r) + f_{ls}(r)(\boldsymbol{l} \cdot \boldsymbol{s}), \quad V(r) = \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2$$

*5 文献 [2], p. 165
*6 文献 [1], p. 12

に対し、$f_{ls}(r)$ が定数ならば、シュレディンガー方程式は厳密に解けて、エネルギー固有値、固有関数が求まる。$f_{ls}(r)$ が小さければ、近似的にその固有関数が使えて、エネルギー固有値は

$$E_{nlj} = E_{nl} + \Delta E_{ls}$$

ここで

$$\boldsymbol{l} \cdot \boldsymbol{s} = \frac{1}{2}[(\boldsymbol{l}+\boldsymbol{s})^2 - \boldsymbol{l}^2 - \boldsymbol{s}^2] = \frac{1}{2}(\boldsymbol{j}^2 - \boldsymbol{l}^2 - \boldsymbol{s}^2)$$

($\boldsymbol{j} = \boldsymbol{l} + \boldsymbol{s}$ は全角運動量) に注意すると、

$$\Delta E_{ls} = \frac{1}{2}\left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}\right]\hbar^2 \langle f_{ls} \rangle$$

ただし $\langle f_{ls} \rangle$ は f_{ls} の期待値で、引力 (核子の場合) ならば $\langle f_{ls} \rangle < 0$ である。

核子のスピンは 1/2 なので、ΔE_{ls} の存在により、エネルギー準位 E_{nl} は次のように 2 つに分裂する (スピン軌道スプリッティング)。

$$\Delta E_{ls} = \begin{cases} \frac{1}{2}(l+1)\hbar^2 |\langle f_{ls} \rangle| & (j = l - 1/2) \\ -\frac{1}{2} l \hbar^2 |\langle f_{ls} \rangle| & (j = l + 1/2) \end{cases}$$

l が大きいほどこの効果が大きいことに注意。

3.2.1　原子におけるスピン軌道相互作用の起源

時間の余裕があれば、定性的説明をします。要は、中心力場 (電場) 中を電子が運動するとき、電子とともに運動する座標系から見ると、電子の位置に磁場が生じます。その磁場と電子のスピン (磁気モーメント) が相互作用して、磁気モーメントが磁場の方向を向くほうがエネルギー的に有利 (低くなる)、ということです。

この原子の場合のスピン軌道相互作用は通常、斥力として働き、上記の原子核の場合とは逆です。すなわち、$j = l - 1/2$ の準位が下側、$j = l + 1/2$ の準位が上側に現れます。このエネルギー準位の分裂がいわゆる微細構造で、「微細構造定数」

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \sim \frac{1}{137}$$

という名の由来となったものです。数学とは全然関係なかったですね、すみません。

参考文献

[1] 高田健次郎・池田清美『原子核構造論』, 朝倉物理学大系 18, 朝倉書店, 2002

[2] 猪木慶治・川合光『量子力学』(全 2 巻), 講談社サイエンティフィク, 1994