

筑波大学 集中講義 2025
原子核理論特講 II 「ハズオンで学ぶ核力の基礎」
— 第三回「テンソル力」 —

福井 徳朗 *†

3 March 2025

概要

核力の最も重要な非中心力であるテンソル力について学ぶ。具体的には、核子のスピン・アイソスピンを考慮して、テンソル力の基本的な性質に焦点を合わせる。また、陽子-中性子間に働くテンソル力を考え、チャンネル結合法により現実的な重陽子の記述を試みる。

目次

1 核力におけるテンソル力	1
1.1 テンソル演算子	1
1.2 双極子相互作用との類似	2
2 重陽子とテンソル力	3
2.1 重陽子の波動関数	3
2.2 反対称化	5
2.3 チャネル結合方程式	5
付録 A 球テンソル: ミニマム	9
A.1 ベクトルとテンソル積	9
A.2 テンソル積の組み替えと Wigner の $3n-j$ 記号	10
付録 B ガウス関数展開法とテンソル力の扱い	13

* 九州大学基幹教育院

† tokuro.fukui@artsci.kyushu-u.ac.jp

B.1	波動関数	14
B.2	行列要素の計算	16

1 核力におけるテンソル力

1.1 テンソル演算子

核力は非中心力のひとつであるテンソル力を含む。これは、重陽子が有限の電気四重極モーメントおよび磁気双極子モーメントを持つという実験事実からも要請されるⁱ。

中間子論に基づく、その起源は擬スカラー中間子 (π 中間子や η 中間子など) の交換およびベクトル中間子 (ρ 中間子や ω 中間子など) の交換である。テンソル力と中間子論の関係については、第四回の講義で扱う。ここでは中間子論との関係はひとまず気にせずに、テンソル力の概観を学ぼう。

さて、座標空間での局所的なポテンシャルとしてテンソル力を表すと、それは

$$v_T(\mathbf{r}) = w_T(r)S_{12}(\hat{\mathbf{r}}), \quad (1)$$

という形で与えられる。ただし、 w_T はポテンシャルの動径成分であり、 $\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{r}/r$ を引数とするテンソル演算子 S_{12} は

$$\begin{aligned} S_{12}(\hat{\mathbf{r}}) &= 3(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \hat{\mathbf{r}})(\boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \hat{\mathbf{r}}) - \boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 \\ &= 2 \left[3(\mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{r}})^2 - S^2 \right] \\ &= \sqrt{24\pi} \left[[\sigma_1(1) \otimes \sigma_1(2)]_2 \otimes Y_2(\hat{\mathbf{r}}) \right]_{00}, \end{aligned} \quad (2)$$

で与えられるⁱⁱ。ただし、 $\mathbf{S} = (\boldsymbol{\sigma}_1 + \boldsymbol{\sigma}_2)/2$ は2核子の全スピンであり、核子のスピン演算子 $\boldsymbol{\sigma}_i$ は Pauli 行列

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (3)$$

で定義されている。また、 l 階の球テンソル \mathcal{M}_{lm} と l' 階の球テンソル $\mathcal{N}_{l'm'}$ のテンソル積は以下で定義される:

$$[\mathcal{M}_l \otimes \mathcal{N}_{l'}]_{\lambda\mu} = \sum_{mm'} (lml'm'|\lambda\mu) \mathcal{M}_{lm} \mathcal{N}_{l'm'}, \quad (4)$$

ここで $(\dots|\dots)$ は Clebsch–Gordan 係数である (詳細は付録 A を参照)。

式 (2) の2つ目の等号から、テンソル演算子はスピン三重項状態 ($S = 1$ の状態) にしか作用しないことが理解できる。また、3つ目の等号から、テンソル演算子は軌道角運動量が2だけ異なる状態を結合させることが理解できる。つまり、軌道角運動量 $l = 0$ の S 波状態と軌道角運動量 $l' = 2$ の D

ⁱ これらの観測量についてはレポート問題で扱う。

ⁱⁱ これらの導出はレポート問題で扱う。

波状態間 (逆もまた然り) のテンソル演算子の行列要素が有限となることを意味するⁱⁱⁱ。詳細は第 2 節で説明する。

1.2 双極子相互作用との類似

電気双極子 \mathbf{d}_1 ともう一つの電気双極子 \mathbf{d}_2 の間に働くポテンシャルは

$$v_{\text{dd}}^{(e)}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{r^3} \left[\frac{3}{r^2} (\mathbf{d}_1 \cdot \hat{\mathbf{r}}) (\mathbf{d}_2 \cdot \hat{\mathbf{r}}) - \mathbf{d}_1 \cdot \mathbf{d}_2 \right], \quad (5)$$

で与えられ、電気双極子相互作用と呼ばれる。ただし、 \mathbf{r} は電気双極子間の距離である。同様に、2 つの磁気双極子 $\boldsymbol{\mu}_1$ と $\boldsymbol{\mu}_2$ の間にも、磁気双極子相互作用

$$v_{\text{dd}}^{(m)}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{r^3} \left[\frac{3}{r^2} (\boldsymbol{\mu}_1 \cdot \hat{\mathbf{r}}) (\boldsymbol{\mu}_2 \cdot \hat{\mathbf{r}}) - \boldsymbol{\mu}_1 \cdot \boldsymbol{\mu}_2 \right], \quad (6)$$

が作用する。これらの双極子相互作用は、式 (1) の動径成分が $w_{\text{T}}(r) = -r^{-3}$ の場合に対応している。

双極子相互作用の特徴として、双極子と \mathbf{r} の内積を含むために、相互作用が2つの双極子の幾何学的配置に強く依存することが挙げられる。具体的には、図 1 に示したように、2つの双極子が整列していたとしても、双極子と \mathbf{r} の角度によって相互作用が変化する。最も引力が強くなるのは電気双極

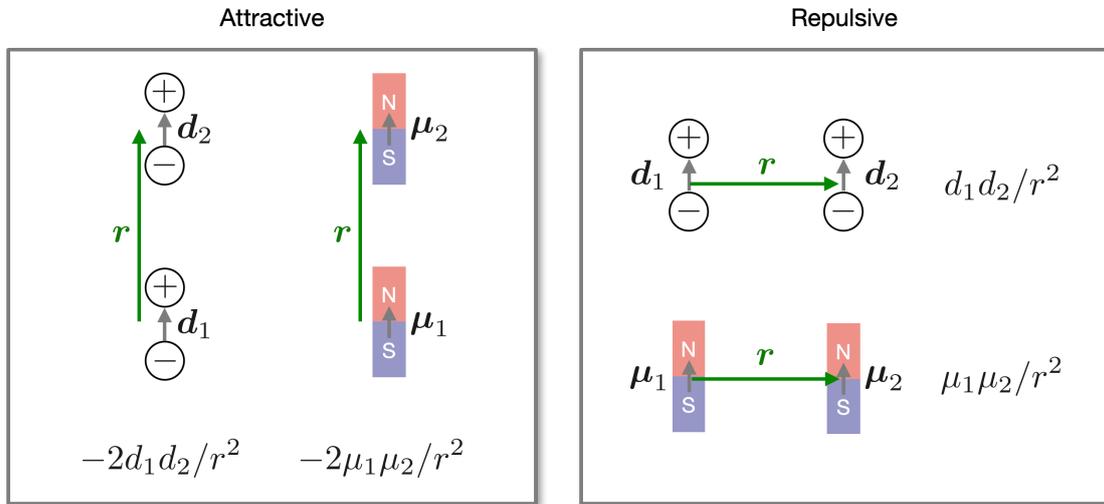


図 1 2つの電気双極子 \mathbf{d}_i および磁気双極子 $\boldsymbol{\mu}_i$ 間の相互作用の模式図。双極子と双極子間距離が平行の場合引力となるが、これらが垂直のときは斥力となる。

ⁱⁱⁱ 軌道角運動量が 0 の状態を S 波状態と呼ぶが、同じ S を用いて表現する 2 核子の合成スピンと混同しないように注意してほしい。

子と \mathbf{r} が平行の場合であり、そのときの相互作用は $-2d_1d_2/r^2$ となる。一方、電気双極子と \mathbf{r} が直角に交わる場合、相互作用は d_1d_2/r^2 となり、斥力として作用する。当然、磁気双極子相互作用についても同様である。

核力におけるテンソル力も双極子相互作用と類似の性質を持つ。すなわち、2核子のスピンの三重項状態 (スピンが揃った状態) のときのみテンソル力は働くが、その符号は、2核子のスピンと2核子間相対距離 \mathbf{r} が平行の場合に負 (引力) となり、一方でそれらが垂直の関係にある場合は正 (斥力) となる。

2 重陽子とテンソル力

以下で注目するのは、テンソル力による S 波と D 波の混合である。これを理解するには、やはり重陽子を考えるとよい。前回の講義までは、重陽子を構成する陽子と中性子間の相対軌道角運動量は $l=0$ のみを想定し、スピンとアイソスピンの自由度はあらわには扱わなかった。以下では、これらの単純化をやめ、より現実に近い重陽子の記述を目指す。

2.1 重陽子の波動関数

重陽子を構成する陽子と中性子の相対運動を記述する波動関数 $|\psi\rangle$ を考える。これは、陽子と中性子の相対座標を \mathbf{r} として、以下で書くことができる:

$$\psi(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \psi \rangle = \sum_{lm} \langle \mathbf{r} | R_l Y_{lm} \rangle = \sum_{lm} R_l(r) Y_{lm}(\hat{\mathbf{r}}). \quad (7)$$

ただし、 R_l は波動関数の動径成分である。一方、角度成分は球面調和関数 Y_{lm} で表され、これは相対軌道角運動量 l とその z 成分である m で指定される。

次に核子1のスピン波動関数 $\left| \chi_{\frac{1}{2}m_{\sigma_1}}^{(\sigma)} \right\rangle$ およびアイソスピン波動関数 $\left| \chi_{\frac{1}{2}m_{\tau_1}}^{(\tau)} \right\rangle$ を導入する。スピンの向き m_{σ} は $\pm 1/2$ をとる。同様にアイソスピンについても $m_{\tau} = \pm 1$ であるが、原子核物理の流儀に倣い、 $m_{\tau} = 1$ を中性子とし、 $m_{\tau} = -1$ を陽子とする^{iv}。また、スピンおよびアイソスピン波動関数は正規直交であるとする:

$$\left\langle \chi_{\frac{1}{2}m_{\sigma}}^{(\sigma)} \left| \chi_{\frac{1}{2}m'_{\sigma}}^{(\sigma)} \right\rangle = \delta_{m_{\sigma}m'_{\sigma}}, \quad \left\langle \chi_{\frac{1}{2}m_{\tau}}^{(\tau)} \left| \chi_{\frac{1}{2}m'_{\tau}}^{(\tau)} \right\rangle = \delta_{m_{\tau}m'_{\tau}}. \quad (8)$$

^{iv} 素粒子物理などでは逆の定義を用いることが多い。

これらを用いて、一般的な 2 核子の波動関数は以下のように書くことができる:

$$\begin{aligned} & \left| \psi \chi_{\frac{1}{2}m_{\sigma_1}}^{(\sigma)} \chi_{\frac{1}{2}m_{\sigma_2}}^{(\sigma)} \chi_{\frac{1}{2}m_{\tau_1}}^{(\tau)} \chi_{\frac{1}{2}m_{\tau_2}}^{(\tau)} \right\rangle \\ &= \sum_{TM_T} \left(\frac{1}{2}m_{\tau_1} \frac{1}{2}m_{\tau_2} \middle| TM_T \right) \left| \xi_{TM_T}^{(\tau)} \right\rangle \\ & \times \sum_{\substack{j l S \\ m_j m M_S}} \left(\frac{1}{2}m_{\sigma_1} \frac{1}{2}m_{\sigma_2} \middle| SM_S \right) (lm SM_S | jm_j) \left| R_l \left[Y_l \otimes \xi_S^{(\sigma)} \right]_{jm_j} \right\rangle, \end{aligned} \quad (9)$$

$$\left| \xi_{SM_S}^{(\sigma)} \right\rangle \equiv \left| \left[\chi_{\frac{1}{2}}^{(\sigma)} \otimes \chi_{\frac{1}{2}}^{(\sigma)} \right]_{SM_S} \right\rangle, \quad (10)$$

$$\left| \xi_{TM_T}^{(\tau)} \right\rangle \equiv \left| \left[\chi_{\frac{1}{2}}^{(\tau)} \otimes \chi_{\frac{1}{2}}^{(\tau)} \right]_{SM_S} \right\rangle. \quad (11)$$

ここで、系の全角運動量とその z 成分はそれぞれ j と m_j である。また、2 核子の合成スピンおよび合成アイソスピンはそれぞれ S と T であり、これらの z 成分をそれぞれ M_S と M_T とした。角運動量、スピンおよびアイソスピンの合成の重みは Clebsch-Gordan 係数 $(\dots | \dots)$ で与えられる。さらに、式 (9) の逆変換として

$$\begin{aligned} \left| \Phi_{jm_j TM_T}^S \right\rangle &= \left| \xi_{TM_T}^{(\tau)} \right\rangle \sum_l \left| R_l \left[Y_l \otimes \xi_S^{(\sigma)} \right]_{jm_j} \right\rangle \\ &= \sum_{m_{\tau_1} m_{\tau_2}} \left(\frac{1}{2}m_{\tau_1} \frac{1}{2}m_{\tau_2} \middle| TM_T \right) \\ & \times \sum_{m_{\sigma_1} m_{\sigma_2} M_S} \left(\frac{1}{2}m_{\sigma_1} \frac{1}{2}m_{\sigma_2} \middle| SM_S \right) (l, m_j - M_S, SM_S | jm_j) \\ & \times \left| \psi \chi_{\frac{1}{2}m_{\sigma_1}}^{(\sigma)} \chi_{\frac{1}{2}m_{\sigma_2}}^{(\sigma)} \chi_{\frac{1}{2}m_{\tau_1}}^{(\tau)} \chi_{\frac{1}{2}m_{\tau_2}}^{(\tau)} \right\rangle, \end{aligned} \quad (12)$$

を定義することができる。

さて、重陽子に関しては $j = 1, S = 1, T = 0$ と定まるが、軌道角運動量はテンソル力のために、 $l = 0$ と $l = 2$ が許される。実際、重陽子のスピン・パリティ j^π は 1^+ であり、これは全スピン角運動量が $j = 1$ 、そしてパリティが $\pi = (-)^l = +1$ であることと整合する。したがって、重陽子の波動関数 $|\Phi_{\text{deuteron}}\rangle$ は S 波 ($l = 0$) と D 波 ($l = 2$) の重ね合わせとして、

$$|\Phi_{\text{deuteron}}\rangle \equiv |\Phi_{1m_j 00}^1\rangle = \left| R_0 \left[Y_0 \otimes \xi_1^{(\sigma)} \right]_{1m_j} \xi_{00}^{(\tau)} \right\rangle + \left| R_2 \left[Y_2 \otimes \xi_1^{(\sigma)} \right]_{1m_j} \xi_{00}^{(\tau)} \right\rangle, \quad (13)$$

と書ける。

なお、重陽子の波動関数を $N |\Phi_{\text{deuteron}}\rangle$ として規格化すると、規格化係数 N は

$$N = \left[\sum_{l=0,2} \langle R_l | R_l \rangle \right]^{-1/2}, \quad (14)$$

として計算できる。

2.2 反対称化

一般に、Fermi 粒子である 2 核子状態は反対称化されていないといけないが、式 (13) で与えられる重陽子の波動関数は適切に反対称化されていることを示しておこう。2 体の反対称化演算子 \hat{A}_2 は

$$\hat{A}_2 = \frac{1}{2} (\mathbb{1} - \hat{P}_{12}), \quad (15)$$

で定義される。ここで $\mathbb{1}$ は恒等演算子、 \hat{P}_{12} は核子 1 と核子 2 の交換演算子である。交換演算子は座標空間の演算子 $\hat{P}_{12}^{(r)}$ 、スピン空間の演算子 $\hat{P}_{12}^{(\sigma)}$ 、アイソスピン空間の演算子 $\hat{P}_{12}^{(\tau)}$ それぞれが波動関数のそれらの成分に作用する。つまり

$$\hat{P}_{12} = \hat{P}_{12}^{(r)} \hat{P}_{12}^{(\sigma)} \hat{P}_{12}^{(\tau)}, \quad (16)$$

である。また、交換演算子を 2 回作用させると元の状態に戻るため、すなわち $(\hat{P}_{12})^2 = 1$ であるため、 \hat{A}_2 は射影演算子の冪等性 (idempotent) を持つ:

$$(\hat{A}_2)^2 = \hat{A}_2. \quad (17)$$

反対称化状態は $\sqrt{2}\hat{A}_2$ を式 (12) の 2 核子の波動関数に作用させることで計算できる:

$$\sqrt{2}\hat{A}_2 \left| \Phi_{jm_j T M_T}^S \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_l [1 - (-)^{l+S+T}] \left| R_l \left[Y_l \otimes \xi_S^{(\sigma)} \right]_{jm_j} \xi_{T M_T}^{(\tau)} \right\rangle. \quad (18)$$

先述のとおり、重陽子に対しては量子数を $S = 1, T = 0, j = 1$ と指定でき、また $l = 0$ もしくは $l = 2$ であるため、 $(-)^{l+S+T} = -1$ は常に満たされている。なお、交換演算子が式 (16) で定義されることが示すように、原子核では座標空間とスピンとアイソスピンの 3 つの空間で相補的に反対称性を保っている。そのことから、 $(-)^{l+S+T} = -1$ を一般化された Pauli 原理と呼ぶことがある。

重陽子の量子数を代入すると、式 (18) は

$$\sqrt{2}\hat{A}_2 \left| \Phi_{1m_j 00}^1 \right\rangle = \sqrt{2} \left| \Phi_{\text{deuteron}} \right\rangle, \quad (19)$$

となる。これは、係数 $\sqrt{2}$ が式 (14) で定義される規格化因子 N に含まれていると考ええると、重陽子の波動関数と等価である。結論として、重陽子状態 $|\Phi_{\text{deuteron}}\rangle$ は反対称化されている。

2.3 チャネル結合方程式

S - D 混合を取り入れて Schrödinger 方程式を解く手順を示そう。相対運動の Schrödinger 方程式は以下で与えられる:

$$\left[\hat{H} - E \right] \left| \Phi_{\text{deuteron}} \right\rangle = 0, \quad (20)$$

$$\hat{H} = \hat{T}_{\text{rel}} + \hat{V}. \quad (21)$$

ここで $|\Phi_{\text{deuteron}}\rangle$ は式 (13) で定義される。また、相互作用 \hat{V} に対応するポテンシャルは

$$v(\mathbf{r}) = v_C(r) + v_T(r)\mathcal{S}_{12}(\hat{\mathbf{r}}), \quad (22)$$

のように、中心力 v_C とテンソル力 v_T を含む形を仮定しよう。

さて、前回の講義と同様、波動関数を基底展開することにより、Rayleigh–Ritz の変分法を適用しよう。すなわち、 R_l を以下のように展開する：

$$R_l(r) = \frac{u_l(r)}{r} = \sum_{i=1}^n c_i^{(l)} \varphi_i^{(l)}(r), \quad (23)$$

$$\varphi_i^{(l)}(r) = \frac{\phi_i^{(l)}(r)}{r}. \quad (24)$$

以下では一般論を展開したいため、基底関数 $\phi_i^{(l)}$ の具体形はここでは問わない^v。

S 波と D 波の結合を取り入れたチャネル結合方程式 (連立方程式) は、式 (20) に $\left\langle \varphi_i^{(l)} \left[Y_l \otimes \xi_1^{(\sigma)} \right]_{1m_j} \xi_{00}^{(\tau)} \right|$ を左からかけることで導出できる。ただし、 $l = 0$ と $l = 2$ の場合それぞれについて計算する：

$$\begin{aligned} & \sum_j \left\langle \varphi_i^{(0)} \left[Y_0 \otimes \xi_1^{(\sigma)} \right]_{1m_j} \xi_{00}^{(\tau)} \left| \hat{H} \right| \varphi_i^{(0)} \left[Y_0 \otimes \xi_1^{(\sigma)} \right]_{1m_j} \xi_{00}^{(\tau)} \right\rangle c_j^{(0)} \\ & + \sum_j \left\langle \varphi_i^{(0)} \left[Y_0 \otimes \xi_1^{(\sigma)} \right]_{1m_j} \xi_{00}^{(\tau)} \left| \hat{H} \right| \varphi_i^{(2)} \left[Y_2 \otimes \xi_1^{(\sigma)} \right]_{1m_j} \xi_{00}^{(\tau)} \right\rangle c_j^{(2)} = 0, \end{aligned} \quad (25)$$

$$\begin{aligned} & \sum_j \left\langle \varphi_i^{(2)} \left[Y_2 \otimes \xi_1^{(\sigma)} \right]_{1m_j} \xi_{00}^{(\tau)} \left| \hat{H} \right| \varphi_i^{(0)} \left[Y_0 \otimes \xi_1^{(\sigma)} \right]_{1m_j} \xi_{00}^{(\tau)} \right\rangle c_j^{(0)} \\ & + \sum_j \left\langle \varphi_i^{(2)} \left[Y_2 \otimes \xi_1^{(\sigma)} \right]_{1m_j} \xi_{00}^{(\tau)} \left| \hat{H} \right| \varphi_i^{(2)} \left[Y_2 \otimes \xi_1^{(\sigma)} \right]_{1m_j} \xi_{00}^{(\tau)} \right\rangle c_j^{(2)} = 0. \end{aligned} \quad (26)$$

さらに、ハミルトニアン \hat{H} は式 (21) で与えられるため、上記チャネル結合方程式は

$$\sum_j \left[\mathcal{T}_{ij}^{(00)} + \mathcal{V}_{ij}^{(00)} - EN_{ij}^{(00)} \right] c_j^{(0)} + \sum_j \mathcal{V}_{ij}^{(02)} c_j^{(2)} = 0, \quad (27)$$

$$\sum_j \mathcal{V}_{ij}^{(20)} c_j^{(0)} + \sum_j \left[\mathcal{T}_{ij}^{(22)} + \mathcal{V}_{ij}^{(22)} - EN_{ij}^{(22)} \right] c_j^{(2)} = 0, \quad (28)$$

と書ける。ただし、各行列要素は以下で定義される：

$$\mathcal{N}_{ij}^{(ll')} = \left\langle \varphi_i^{(l)} \left[Y_l \otimes \xi_1^{(\sigma)} \right]_{1m_j} \xi_{00}^{(\tau)} \left| \varphi_j^{(l')} \left[Y_{l'} \otimes \xi_1^{(\sigma)} \right]_{1m_j} \xi_{00}^{(\tau)} \right\rangle, \quad (29)$$

$$\mathcal{T}_{ij}^{(ll')} = \left\langle \varphi_i^{(l)} \left[Y_l \otimes \xi_1^{(\sigma)} \right]_{1m_j} \xi_{00}^{(\tau)} \left| \hat{T}_{\text{rel}} \right| \varphi_j^{(l')} \left[Y_{l'} \otimes \xi_1^{(\sigma)} \right]_{1m_j} \xi_{00}^{(\tau)} \right\rangle, \quad (30)$$

$$\mathcal{V}_{ij}^{(ll')} = \left\langle \varphi_i^{(l)} \left[Y_l \otimes \xi_1^{(\sigma)} \right]_{1m_j} \xi_{00}^{(\tau)} \left| \hat{V} \right| \varphi_j^{(l')} \left[Y_{l'} \otimes \xi_1^{(\sigma)} \right]_{1m_j} \xi_{00}^{(\tau)} \right\rangle. \quad (31)$$

^v 実際の計算では基底関数 $\phi_i^{(l)}$ にガウス関数を用いるガウス関数展開法 (Gaussian expansion method; GEM) [?] を採用する。これについては付録 B に詳述する。

これらの具体形は、基底関数を定めると計算可能となる。なお、基底関数にガウス関数を採用したときの行列要素を付録 B.2 にまとめた。

ハミルトニアン of 行列要素を

$$\mathcal{H}_{ij}^{(l')} = \mathcal{T}_{ij}^{(l')} + \mathcal{V}_{ij}^{(l')}, \quad (32)$$

で定義すれば、式 (27) と式 (28) は行列を用いて以下の形で表現できる:

$$\left[\left(\begin{array}{c} \mathcal{H}_{ij} \\ \end{array} \right) - E \left(\begin{array}{c} \mathcal{N}_{ij} \\ \end{array} \right) \right] \left(\begin{array}{c} c_j \\ \end{array} \right) = 0, \quad (33)$$

$$\mathcal{H}_{ij} = \begin{pmatrix} \mathcal{H}_{ij}^{(00)} & \mathcal{H}_{ij}^{(02)} \\ \mathcal{H}_{ij}^{(20)} & \mathcal{H}_{ij}^{(22)} \end{pmatrix}, \quad (34)$$

$$\mathcal{N}_{ij} = \begin{pmatrix} \mathcal{N}_{ij}^{(00)} & 0 \\ 0 & \mathcal{N}_{ij}^{(22)} \end{pmatrix}, \quad (35)$$

$$c_j = \begin{pmatrix} c_j^{(0)} \\ c_j^{(2)} \end{pmatrix}. \quad (36)$$

この一般化固有値問題を解くことで、固有値 E および固有ベクトル $c_j^{(l)}$ を得ることができる。

ここでテンソル力が S - D 混合を引き起こすことがわかるよう、式 (34) を変形しよう。 \hat{V} を中心力 \hat{V}_C およびテンソル力 \hat{V}_T の和として $\hat{V} = \hat{V}_C + \hat{V}_T$ と表現すると、 \mathcal{H}_{ij} はさらに具体的に書くことができる:

$$\mathcal{H}_{ij} = \begin{pmatrix} \mathcal{T}_{ij}^{(00)} + \mathcal{V}_{C;ij}^{(00)} & \mathcal{V}_{T;ij}^{(02)} \\ \mathcal{V}_{T;ij}^{(20)} & \mathcal{T}_{ij}^{(22)} + \mathcal{V}_{C;ij}^{(22)} + \mathcal{V}_{T;ij}^{(22)} \end{pmatrix}, \quad (37)$$

ただし、 $\mathcal{V}_{C;ij}^{(l')}$ ($\mathcal{V}_{T;ij}^{(l')}$) は式 (31) の \hat{V} を \hat{V}_C (\hat{V}_T) で置き換えたときの 2 体行列要素である。この表式から明らかなように、非対角項はテンソル力の行列要素 $\mathcal{V}_{T;ij}^{(l')}$ のみが現れるため、テンソル力が S 波と D 波を混合させていることがわかる。

Exercise 2.1 — テンソル力による S - D 混合を考慮して重陽子を解こう —

テンソル力による S 波状態と D 波状態の混合を取り入れて重陽子の基底状態エネルギーと波動関数を求めよう。これには前回の講義と同様、ガウス基底展開法 (Gaussian expansion method; GEM) を用いることにしよう。基底関数は S 波と D 波で共通でよく、以下としよう:

- 基底の数: $n = 20$

表 1 スピン三重項偶パリティ状態 (${}^3E-1$) に対する G3RS ポテンシャルのパラメータ [?].

	$i = 1$	$i = 2$	$i = 3$
$v_i^{(C)}$ (MeV)	-5.0	-230.0	2000.0
$r_i^{(C)}$ (fm)	2.5	0.942	0.447
$v_i^{(T)}$ (MeV)	-7.5	-67.5	67.5
$r_i^{(T)}$ (fm)	2.5	1.2	0.447

- ガウス関数のレンジの最小値: $b_1 = 0.5$ fm
- ガウス関数のレンジの最大値: $b_n = 20.0$ fm

なお、 n , b_1 , b_n を変え、計算が収束している (基底状態エネルギーおよび波動関数がこれらのパラメータによって変化しない) ことを確かめるとよい。それでは、具体的に、以下のステップにしたがって、前回の講義で用いたプログラムを書き換えよう。

1. 付録 B.2 を参考に、まずはノルムの行列要素および運動エネルギーの行列要素の計算を改良しよう。これらは式 (B.26) と式 (B.31) で与えられる。今回は $l = 0$ の状態だけでなく $l = 2$ の状態も考慮する必要があるため、プログラムに l をあらわに取り入れる必要がある。なお、ノルムの行列要素および運動エネルギーの行列要素はともに軌道角運動量に対して対角である (つまり、これらの行列要素は $\delta_{ll'}$ を含む) 点に注意しよう。
2. 重陽子をなるべく現実的に記述するために、以下のポテンシャルを用いよう:

$$v(\mathbf{r}) = v_C(r) + v_T(r)\mathcal{S}_{12}(\hat{\mathbf{r}}), \quad (38)$$

$$v_C(r) = \sum_{i=1}^3 v_i^{(C)} \exp \left[- \left(\frac{r}{r_i^{(C)}} \right)^2 \right], \quad (39)$$

$$v_T(r) = \sum_{i=1}^3 v_i^{(T)} \exp \left[- \left(\frac{r}{r_i^{(T)}} \right)^2 \right]. \quad (40)$$

これは Gaussian three-range soft core (G3RS) ポテンシャル、あるいは提案者の名前から玉垣ポテンシャルと呼ばれる [?]. スピン三重項・アイソスピン一重項である重陽子の場合のポテンシャルのパラメータは表 1 にまとめている。なお、G3RS ポテンシャルは中心力とテンソル力の他にも、スピン軌道力やその他の非中心力も含むが、ここでは簡単のためにこれらは無視する。まず、G3RS ポテンシャルの動径成分 v_C および

v_T を r の関数としてプロットしよう。次に、G3RS ポテンシャルの 2 体行列要素を計算しよう。G3RS ポテンシャルはガウス関数の重ね合わせで表現されるため、GEM ではこの相互作用の行列要素は解析的に与えられる。このことは付録 B.2.3 で詳しく説明した。

3. 一般化固有値問題を解こう。これには、例えば Python のライブラリ `scipy.linalg.eigh` が便利である。このライブラリの入力引数は、ハミルトニアン行列とノルム行列である。詳しくは [SciPy のマニュアル](#) [?] を参照してほしい。
4. S 波の波動関数 u_0 と D 波の波動関数 u_2 を式 (23) を用いて計算し、 r の関数としてプロットしよう。さらに、 u_0 と u_2 の 2 乗を積分することで、 S 波の割合と D 波の割合をそれぞれ算出しよう。具体的には、 $\langle R_0 | R_0 \rangle$, $\langle R_2 | R_2 \rangle$ および $\langle R_0 | R_0 \rangle + \langle R_2 | R_2 \rangle$ を計算すればよい (詳しくは式 (B.9) を参照のこと)。また、運動量空間での波動関数も計算・描画しよう。
5. 2 体行列要素を詳しく調べよう。具体的には、 3S_1 の対角成分の 2 体行列要素 (中心力の 2 体行列要素 $\mathcal{V}_{C;ij}^{(00)}$), 3D_1 の対角成分の 2 体行列要素 (中心力とテンソル力の 2 体行列要素の和 $\mathcal{V}_{C;ij}^{(22)} + \mathcal{V}_{T;ij}^{(22)}$), そして 3S_1 - 3D_1 の混合を引き起こす非対角項の 2 体行列要素 (テンソル力の行列要素 $\mathcal{V}_{T;ij}^{(02)}$ および $\mathcal{V}_{T;ij}^{(20)}$) を分析すると、非対角項の 2 体行列要素が主に引力をもたらしていることが確認できるはずである。

付録 A 球テンソル: ミニマム

A.1 ベクトルとテンソル積

ここでは球テンソルあるいは規約テンソルを最小限にまとめる。より詳細な説明は、例えば文献 [?] が参考になる。まずはテンソル積の一般形を導入しておこう。 l 階の規約テンソル \mathcal{M}_{lm} と l' 階の規約テンソル $\mathcal{N}_{l'm'}$ のテンソル積は

$$[\mathcal{M}_l \otimes \mathcal{N}_{l'}]_{\lambda\mu} = \sum_{mm'} (l m l' m' | \lambda \mu) \mathcal{M}_{lm} \mathcal{N}_{l'm'}, \quad (\text{A.1})$$

で定義され、 $(\dots | \dots)$ は Clebsch–Gordan 係数である。このテンソル積は 2 つテンソルから λ 階のテンソルを新しくつくることを意味している。

次に、球テンソルと 3 次元ベクトルの関係を見ておこう。これらの演算の基礎となるのは以下の関係式である:

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = -\sqrt{3} [a_1 \otimes b_1]_{00}, \quad (\text{A.2})$$

$$(\mathbf{a} \times \mathbf{b})_\mu = -i\sqrt{2} [a_1 \otimes b_1]_{1\mu} \quad (\mu = 0, \pm 1). \quad (\text{A.3})$$

ここで \mathbf{a} と \mathbf{b} は任意の 3 次元ベクトルであり、それぞれ 1 階の規約テンソル a_{1m} と b_{1m} に対応している。より具体的には、 \mathbf{a} がスピンや微分演算子を含まない場合、これは 1 階の球面調和関数 Y_{1m} で表現できる [?]:

$$(\mathbf{a})_m = a_{1m} = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} a Y_{1m}(\hat{\mathbf{a}}). \quad (\text{A.4})$$

ただし、 $a = |\mathbf{a}|$ および $\hat{\mathbf{a}} = \mathbf{a}/a$ である。

ここでテンソル積の性質を紹介しておく。(A.1) が含む Clebsch-Gordan 係数の性質から、以下の関係式を示すことができる:

$$[\mathcal{N}_{l'} \otimes \mathcal{M}_l]_{\lambda\mu} = (-)^{l+l'-\lambda} [\mathcal{M}_l \otimes \mathcal{N}_{l'}]_{\lambda\mu}. \quad (\text{A.5})$$

さらに、双極球面調和関数 (bipolar spherical harmonics) $[Y_l(\hat{\mathbf{r}}) \otimes Y_{l'}(\hat{\mathbf{r}}')]_{\lambda\mu}$ は、引数が $\hat{\mathbf{r}} = \hat{\mathbf{r}}'$ を満たすとき一つの球面調和関数で表現できる:

$$[Y_l(\hat{\mathbf{r}}) \otimes Y_{l'}(\hat{\mathbf{r}})]_{\lambda\mu} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \frac{\hat{l}'}{\hat{\lambda}} (l0l'0|\lambda0) Y_{\lambda\mu}(\hat{\mathbf{r}}). \quad (\text{A.6})$$

ただし、 $\hat{l} = \sqrt{2l+1}$ である。以下では、テンソル積の組み替えについて簡単に説明する。

A.2 テンソル積の組み替えと Wigner の $3n$ -j 記号

A.2.1 Wigner の 6-j 記号

3 つの角運動量の合成を考える。すなわち、 \mathbf{j}_1 , \mathbf{j}_2 , および \mathbf{j}_3 の合成で全角運動量 \mathbf{j} とその z 成分 m をつくる。3 つのベクトルの結合の組み合わせは以下のように分類できる:

$$\text{(I)} \quad \mathbf{j}_1 + \mathbf{j}_2 = \mathbf{j}_{12}, \quad \mathbf{j}_{12} + \mathbf{j}_3 = \mathbf{j}, \quad (\text{A.7})$$

$$\text{(II)} \quad \mathbf{j}_2 + \mathbf{j}_3 = \mathbf{j}_{23}, \quad \mathbf{j}_1 + \mathbf{j}_{23} = \mathbf{j}, \quad (\text{A.8})$$

$$\text{(III)} \quad \mathbf{j}_1 + \mathbf{j}_3 = \mathbf{j}_{13}, \quad \mathbf{j}_{13} + \mathbf{j}_2 = \mathbf{j}. \quad (\text{A.9})$$

各組み合わせに対して、固有状態は

$$\begin{aligned} \left| \left[[j_1 \otimes j_2]_{j_{12}} \otimes j_3 \right]_{jm} \right\rangle &= \sum_{\substack{m_1 m_2 \\ m_3 m_{12}}} (j_1 m_1 j_2 m_2 | j_{12} m_{12}) (j_{12} m_{12} j_3 m_3 | jm) \\ &\quad \times |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle |j_3 m_3\rangle, \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

$$\begin{aligned} \left| \left[j_1 \otimes [j_2 \otimes j_3]_{j_{23}} \right]_{jm} \right\rangle &= \sum_{\substack{m_1 m_2 \\ m_3 m_{23}}} (j_2 m_2 j_3 m_3 | j_{23} m_{23}) (j_1 m_1 j_{23} m_{23} | jm) \\ &\quad \times |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle |j_3 m_3\rangle, \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

$$\begin{aligned} \left| \left[[j_1 \otimes j_3]_{j_{13}} \otimes j_2 \right]_{jm} \right\rangle &= \sum_{\substack{m_1 m_2 \\ m_3 m_{13}}} (j_1 m_1 j_3 m_3 | j_{13} m_{13}) (j_{13} m_{13} j_2 m_2 | jm) \\ &\quad \times |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle |j_3 m_3\rangle, \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

と書ける。ただし、 $|j_n m_n\rangle$ は j_n^2 と m_n の同時固有状態を表す。

Wigner の 6- j 記号 $\left\{ \begin{matrix} \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \end{matrix} \right\}$ は各固有状態間の重なり積分として定義される。具体的には

$$\begin{aligned} & \left\langle \left[[j_1 \otimes j_2]_{j_{12}} \otimes j_3 \right]_{j_m} \left| \left[j_1 \otimes [j_2 \otimes j_3]_{j_{23}} \right]_{j' m'} \right\rangle \\ &= \delta_{jj'} \delta_{mm'} (-)^{j_1+j_2+j_3+j} \hat{j}_{12} \hat{j}_{23} \left\{ \begin{matrix} j_1 & j_2 & j_{12} \\ j_3 & j & j_{23} \end{matrix} \right\}, \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

$$\begin{aligned} & \left\langle \left[[j_1 \otimes j_2]_{j_{12}} \otimes j_3 \right]_{j_m} \left| \left[[j_1 \otimes j_3]_{j_{13}} \otimes j_2 \right]_{j' m'} \right\rangle \\ &= \delta_{jj'} \delta_{mm'} (-)^{j_2+j_3+j_{12}+j_{13}} \hat{j}_{12} \hat{j}_{13} \left\{ \begin{matrix} j_2 & j_1 & j_{12} \\ j_3 & j & j_{13} \end{matrix} \right\}, \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

$$\begin{aligned} & \left\langle \left[j_1 \otimes [j_2 \otimes j_3]_{j_{23}} \right]_{j_m} \left| \left[[j_1 \otimes j_3]_{j_{13}} \otimes j_2 \right]_{j' m'} \right\rangle \\ &= \delta_{jj'} \delta_{mm'} (-)^{j_1+j+j_{23}} \hat{j}_{13} \hat{j}_{23} \left\{ \begin{matrix} j_1 & j_3 & j_{13} \\ j_2 & j & j_{23} \end{matrix} \right\}, \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

である。これを用いれば、3つの規約テンソルによるテンソル積の組み替えが 6- j 記号を使って表現できる。

また、6- j 記号は Clebsch-Gordan 係数を使って以下で定義することもできる：

$$\begin{aligned} & \sum_{m_1, m_2, m_3, m_{12}, m_{23}} (j_{12} m_{12} j_3 m_3 | j m) (j_1 m_1 j_2 m_2 | j_{12} m_{12}) \\ & \quad \times (j_1 m_1 j_{23} m_{23} | j' m') (j_2 m_2 j_3 m_3 | j_{23} m_{23}) \\ &= \delta_{jj'} \delta_{mm'} (-)^{j_1+j_2+j_3+j} \hat{j}_{12} \hat{j}_{23} \left\{ \begin{matrix} j_1 & j_2 & j_{12} \\ j_3 & j & j_{23} \end{matrix} \right\}. \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

さらに、6- j 記号は以下の三角条件を満たす必要がある：

$$|j_1 - j_2| \leq j_{12} \leq j_1 + j_2, \quad (\text{A.17})$$

$$|j_{12} - j_3| \leq j \leq j_{12} + j_3, \quad (\text{A.18})$$

$$|j_2 - j_3| \leq j_{23} \leq j_2 + j_3, \quad (\text{A.19})$$

$$|j_{23} - j_1| \leq j \leq j_{23} + j_1. \quad (\text{A.20})$$

仮にこれらの三角条件のうち一つでも破れていると、6- j 記号はゼロとなる。6- j 記号の対称性、直交性、具体形などは文献 [?] が詳しい。

なお、Racah 係数 $W(\cdots; \cdots)$ と 6- j 記号は以下の関係にある：

$$\left\{ \begin{matrix} a & b & c \\ d & e & f \end{matrix} \right\} \equiv (-)^{a+b+d+e} W(abed; cf). \quad (\text{A.21})$$

A.2.2 Wigner の 9-j 記号

次に 4 つの角運動量 j_1, j_2, j_3 , および j_4 の合成を考える。合成の方法は以下の 4 つが存在する:

$$(I) \quad j_1 + j_2 = j_{12}, \quad j_3 + j_4 = j_{34}, \quad j_{12} + j_{34} = j, \quad (A.22)$$

$$(II) \quad j_1 + j_3 = j_{13}, \quad j_2 + j_4 = j_{24}, \quad j_{13} + j_{24} = j, \quad (A.23)$$

$$(III) \quad j_1 + j_4 = j_{14}, \quad j_2 + j_3 = j_{23}, \quad j_{14} + j_{23} = j, \quad (A.24)$$

$$(IV) \quad j_1 + j_2 = j_{12}, \quad j_{12} + j_3 = j_{123}, \quad j_{123} + j_4 = j. \quad (A.25)$$

ただし、 j は全角運動量である。6-j 記号の場合と同様、 $|j_n m_n\rangle$ を用いると、各結合の順序に対応した固有状態は

$$\begin{aligned} & \left| \left[[j_1 \otimes j_2]_{j_{12}} \otimes [j_3 \otimes j_4]_{j_{34}} \right]_{jm} \right\rangle \\ &= \sum_{\substack{m_1 m_2 m_3 \\ m_4 m_{12} m_{34}}} (j_1 m_1 j_2 m_2 | j_{12} m_{12}) (j_3 m_3 j_4 m_4 | j_{34} m_{34}) (j_{12} m_{12} j_{34} m_{34} | jm) \\ & \times |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle |j_3 m_3\rangle |j_4 m_4\rangle, \end{aligned} \quad (A.26)$$

$$\begin{aligned} & \left| \left[[j_1 \otimes j_3]_{j_{13}} \otimes [j_2 \otimes j_4]_{j_{24}} \right]_{jm} \right\rangle \\ &= \sum_{\substack{m_1 m_2 m_3 \\ m_4 m_{12} m_{34}}} (j_1 m_1 j_3 m_3 | j_{13} m_{13}) (j_2 m_2 j_4 m_4 | j_{24} m_{24}) (j_{13} m_{13} j_{24} m_{24} | jm) \\ & \times |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle |j_3 m_3\rangle |j_4 m_4\rangle, \end{aligned} \quad (A.27)$$

$$\begin{aligned} & \left| \left[[j_1 \otimes j_4]_{j_{14}} \otimes [j_2 \otimes j_3]_{j_{23}} \right]_{jm} \right\rangle \\ &= \sum_{\substack{m_1 m_2 m_3 \\ m_4 m_{14} m_{23}}} (j_1 m_1 j_4 m_4 | j_{14} m_{14}) (j_2 m_2 j_3 m_3 | j_{23} m_{23}) (j_{14} m_{14} j_{23} m_{23} | jm) \\ & \times |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle |j_3 m_3\rangle |j_4 m_4\rangle, \end{aligned} \quad (A.28)$$

$$\begin{aligned} & \left| \left[\left[[j_1 \otimes j_2]_{j_{12}} \otimes j_3 \right]_{j_{123}} \otimes j_4 \right]_{jm} \right\rangle \\ &= \sum_{\substack{m_1 m_2 m_3 \\ m_4 m_{12} m_{123}}} (j_1 m_1 j_2 m_2 | j_{12} m_{12}) (j_{12} m_{12} j_3 m_3 | j_{123} m_{123}) (j_{123} m_{123} j_4 m_4 | jm) \\ & \times |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle |j_3 m_3\rangle |j_4 m_4\rangle, \end{aligned} \quad (A.29)$$

と書ける。Wigner の 9- j 記号、あるいは Fano 係数 $\begin{Bmatrix} \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \end{Bmatrix}$ は、これらの状態間の重なり積分として定義される。すなわち、

$$\begin{aligned} & \left\langle \left[[j_1 \otimes j_2]_{j_{12}} \otimes [j_3 \otimes j_4]_{j_{34}} \right]_{j_m} \left| \left[[j_1 \otimes j_3]_{j_{13}} \otimes [j_2 \otimes j_4]_{j_{24}} \right]_{j' m'} \right\rangle \\ &= \delta_{jj'} \delta_{mm'} \hat{j}_{12} \hat{j}_{13} \hat{j}_{24} \hat{j}_{34} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_{12} \\ j_3 & j_4 & j_{34} \\ j_{13} & j_{24} & j \end{Bmatrix}, \end{aligned} \quad (\text{A.30})$$

$$\begin{aligned} & \left\langle \left[[j_1 \otimes j_2]_{j_{12}} \otimes [j_3 \otimes j_4]_{j_{34}} \right]_{j_m} \left| \left[[j_1 \otimes j_4]_{j_{14}} \otimes [j_2 \otimes j_3]_{j_{23}} \right]_{j' m'} \right\rangle \\ &= \delta_{jj'} \delta_{mm'} (-)^{j_3+j_4-j_{34}} \hat{j}_{12} \hat{j}_{14} \hat{j}_{23} \hat{j}_{34} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_{12} \\ j_4 & j_3 & j_{34} \\ j_{14} & j_{23} & j \end{Bmatrix}, \end{aligned} \quad (\text{A.31})$$

$$\begin{aligned} & \left\langle \left[[j_1 \otimes j_3]_{j_{13}} \otimes [j_2 \otimes j_4]_{j_{24}} \right]_{j_m} \left| \left[[j_1 \otimes j_4]_{j_{14}} \otimes [j_2 \otimes j_3]_{j_{23}} \right]_{j' m'} \right\rangle \\ &= \delta_{jj'} \delta_{mm'} (-)^{j_3-j_4-j_{23}+j_{24}} \hat{j}_{13} \hat{j}_{14} \hat{j}_{24} \hat{j}_{23} \begin{Bmatrix} j_1 & j_3 & j_{13} \\ j_4 & j_2 & j_{24} \\ j_{14} & j_{23} & j \end{Bmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{A.32})$$

ただし、式 (A.29) の固有状態との重なり積分は 9- j 記号ではなく 6- j 記号で書けることに注意が必要である。これらの式から、4 つの規約テンソルによるテンソル積の組み替えが 9- j 記号を使って表現できる。9- j 記号の対称性、直交性、具体形などはやはり文献 [?] が詳しい。

式 (A.30) から

$$\begin{aligned} & \sum_{m_i m_{ik}} (j_1 m_1 j_2 m_2 | j_{12} m_{12}) (j_3 m_3 j_4 m_4 | j_{34} m_{34}) (j_{12} m_{12} j_{34} m_{34} | j m) \\ & \quad \times (j_1 m_1 j_3 m_3 | j_{13} m_{13}) (j_2 m_2 j_4 m_4 | j_{24} m_{24}) (j_{13} m_{13} j_{24} m_{24} | j' m') \\ &= \delta_{jj'} \delta_{mm'} \hat{j}_{12} \hat{j}_{13} \hat{j}_{24} \hat{j}_{34} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_{12} \\ j_3 & j_4 & j_{34} \\ j_{13} & j_{24} & j \end{Bmatrix}, \end{aligned} \quad (\text{A.33})$$

として 9- j 記号を定義してもよい。ただし、和の記号では $m_i \in \{m_1, m_2, m_3, m_4\}$ および $m_{ik} \in \{m_{12}, m_{13}, m_{24}, m_{34}\}$ という表記を用いた。式 (A.33) が含むそれぞれの Clebsch–Gordan 係数が 6 つの三角条件を与える。

付録 B ガウス関数展開法とテンソル力の扱い

第二回講義資料と重複する部分があるが、ガウス関数展開法 (Gaussian expansion method; GEM) [?] についてまとめておく。

B.1 波動関数

B.1.1 基底と重なり積分

動径方向の波動関数を、ガウス関数を基底として以下のように展開する:

$$\psi(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \psi \rangle = \sum_{lm} \langle \mathbf{r} | R_l Y_{lm} \rangle = \sum_{lm} R_l(r) Y_{lm}(\hat{\mathbf{r}}), \quad (\text{B.1})$$

$$R_l(r) = \frac{u_l(r)}{r} = \sum_{i=1}^n c_i^{(l)} \varphi_i^{(l)}(r), \quad (\text{B.2})$$

$$\varphi_i^{(l)}(r) = \frac{\phi_i^{(l)}(r)}{r}, \quad (\text{B.3})$$

$$\phi_i^{(l)}(r) = N_i^{(l)} r^{l+1} \exp[-\nu_i r^2]. \quad (\text{B.4})$$

なお、ガウス関数のレンジパラメータ ν_i はここでは実数とする。

まず、基底関数の重なり積分は以下のように計算できる:

$$\begin{aligned} \langle \varphi_i^{(l)} | \varphi_j^{(l)} \rangle &= \int dr \phi_i^{(l)}(r) \phi_j^{(l)}(r) \\ &= N_i^{(l)} N_j^{(l)} \int dr r^{2(l+1)} \exp[-(\nu_i + \nu_j)r^2] \\ &= N_i^{(l)} N_j^{(l)} \frac{(2l+1)!!}{2^{l+2}} \sqrt{\frac{\pi}{(\nu_i + \nu_j)^{2l+3}}}. \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

ここで、規格化因子 $N_i^{(l)}$ は $\langle \phi_i^{(l)} | \phi_i^{(l)} \rangle = 1$ という条件より、以下で与えられる:

$$N_i^{(l)} = \sqrt{\frac{2^{l+2}}{(2l+1)!!}} \left[\frac{(2\nu_i)^{2l+3}}{\pi} \right]^{\frac{1}{4}}. \quad (\text{B.6})$$

これより、式 (B.5) は

$$\langle \varphi_i^{(l)} | \varphi_j^{(l)} \rangle = (\beta_{ij})^{l+\frac{3}{2}}, \quad (\text{B.7})$$

$$\beta_{ij} = \frac{2\sqrt{\nu_i \nu_j}}{\nu_i + \nu_j} = \frac{2b_i b_j}{b_i^2 + b_j^2}, \quad (\text{B.8})$$

という形に書き換えることができる。

上記の結果を用いれば、式 (14) に出てくる重なり積分を以下のように計算できる:

$$\langle R_l | R_l \rangle = \sum_{ij} c_i^{(l)} c_j^{(l)} (\beta_{ij})^{l+\frac{3}{2}}. \quad (\text{B.9})$$

B.1.2 運動量分布

式 (7) において、軌道角運動量を指定した波動関数を以下のように定義しておく:

$$\langle \mathbf{r} | \psi_{lm} \rangle = \psi_{lm}(\mathbf{r}) = R_l(r) Y_{lm}(\hat{\mathbf{r}}). \quad (\text{B.10})$$

この表式に基づくと、運動量空間での波動関数は以下のフーリへ変換で与えられる:

$$\begin{aligned}
\tilde{\psi}_{lm}(\mathbf{k}) &= \langle \mathbf{k} | \psi_{lm} \rangle \\
&= \int d\mathbf{r} \langle \mathbf{k} | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | \psi_{lm} \rangle \\
&= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \langle \mathbf{r} | \psi_{lm} \rangle \\
&= \frac{4\pi}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{\lambda\mu} (-i)^\lambda Y_{\lambda\mu}(\hat{\mathbf{k}}) \int dr r^2 j_\lambda(kr) R_l(r) \int d\hat{\mathbf{r}} Y_{\lambda\mu}^*(\hat{\mathbf{r}}) Y_{lm}(\hat{\mathbf{k}}) \\
&= \frac{4\pi}{(2\pi)^{3/2}} (-i)^l Y_{lm}(\hat{\mathbf{k}}) \int dr r^2 j_l(kr) R_l(r). \tag{B.11}
\end{aligned}$$

ここで、

$$\mathbb{1} = \int d\mathbf{r} |\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{r}|, \tag{B.12}$$

$$\langle \mathbf{k} | \mathbf{r} \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \tag{B.13}$$

である。また、平面波は Rayleigh の公式

$$e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = 4\pi \sum_{\lambda\mu} (-i)^\lambda j_\lambda(kr) Y_{\lambda\mu}(\hat{\mathbf{k}}) Y_{\lambda\mu}^*(\hat{\mathbf{r}}), \tag{B.14}$$

によって部分波展開の形で表現している。ただし、 j_λ は球ベッセル関数である。さらに球面調和関数の直交性も用いた:

$$\int d\hat{\mathbf{r}} Y_{\lambda\mu}^*(\hat{\mathbf{r}}) Y_{lm}(\hat{\mathbf{k}}) = \delta_{\lambda l} \delta_{\mu m}. \tag{B.15}$$

さて、運動量空間での動径成分の波動関数を、式 (B.11) の球面調和関数を除いた部分として定義しよう:

$$\tilde{R}_l(k) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} (-i)^l \int dr r^2 j_l(kr) R_l(r). \tag{B.16}$$

今、座標空間での動径波動関数を式 (B.2) のようにガウス基底で展開している。このとき、球ベッセル関数の具体形

$$j_0(z) = \frac{\sin(z)}{z}, \tag{B.17}$$

$$j_2(z) = \left(\frac{3}{z^3} - \frac{1}{z} \right) \sin(z) - \frac{3 \cos(z)}{z^2}, \tag{B.18}$$

より、式 (B.16) が含む積分は、以下の2つの場合について計算すればよい:

$$\int dr r^2 j_0(kr) R_0(r) = \sum_i c_i^{(0)} N_i^{(0)} \int dr r^2 \frac{\sin(kr)}{kr} e^{-\nu_i r^2}, \tag{B.19}$$

$$\int dr r^4 j_2(kr) R_2(r) = \sum_i c_i^{(2)} N_i^{(2)} \int dr r^2 \left[\left(\frac{3}{z^3} - \frac{1}{z} \right) \sin(z) - \frac{3 \cos(z)}{z^2} \right] e^{-\nu_i r^2}. \tag{B.20}$$

これらの積分は解析的に計算でき [?],

$$\int_0^\infty dr r^2 \frac{\sin(kr)}{kr} e^{-\nu_i r^2} = \frac{1}{4\nu_i} \sqrt{\frac{\pi}{\nu_i}} e^{-\frac{k^2}{4\nu_i}}, \quad (\text{B.21})$$

$$\int dr r^2 \left[\left(\frac{3}{z^3} - \frac{1}{z} \right) \sin(z) - \frac{3 \cos(z)}{z^2} \right] e^{-\nu_i r^2} = \sqrt{\frac{\pi}{2(2\nu_i)^7}} k^2 e^{-\frac{k^2}{4\nu_i}}. \quad (\text{B.22})$$

$$(\text{B.23})$$

ただし、 $z = kr$ として変数変換している。以上より、運動量空間での動径波動関数として以下を得る:

$$\tilde{u}_0(k) = k \tilde{R}_0(k) = \sum_i (2\nu_i)^{-3/2} c_i^{(0)} N_i^{(0)} k e^{-\frac{k^2}{4\nu_i}}, \quad (\text{B.24})$$

$$\tilde{u}_2(k) = k \tilde{R}_2(k) = - \sum_i (2\nu_i)^{-7/2} c_i^{(2)} N_i^{(2)} k^3 e^{-\frac{k^2}{4\nu_i}}. \quad (\text{B.25})$$

B.2 行列要素の計算

B.2.1 ノルムの行列要素

式 (29) のノルム行列要素は (B.7) を用いると、

$$\begin{aligned} \mathcal{N}_{ij}^{(l'l')} &= \left\langle \varphi_i^{(l)} \left[Y_l \otimes \xi_1^{(\sigma)} \right]_{1m_j} \xi_{00}^{(\tau)} \left| \varphi_j^{(l')} \left[Y_{l'} \otimes \xi_1^{(\sigma)} \right]_{1m_j} \xi_{00}^{(\tau)} \right\rangle \\ &= \left\langle \varphi_i^{(l)} \left| \varphi_j^{(l')} \right\rangle \delta_{ll'} \\ &= (\beta_{ij})^{l+\frac{3}{2}} \delta_{ll'}, \end{aligned} \quad (\text{B.26})$$

と計算できる。ただし β_{ij} は式 (B.8) で定義される。

B.2.2 運動エネルギーの行列要素

式 (30) は

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_{ij}^{(l'l')} &= \left\langle \varphi_i^{(l)} \left[Y_l \otimes \xi_1^{(\sigma)} \right]_{1m_j} \xi_{00}^{(\tau)} \left| \hat{T}_{\text{rel}} \left| \varphi_j^{(l')} \left[Y_{l'} \otimes \xi_1^{(\sigma)} \right]_{1m_j} \xi_{00}^{(\tau)} \right\rangle, \right. \\ &= -\frac{\hbar^2}{2\mu} \int dr \phi_i^{(l)}(r) \left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \phi_j^{(l)}(r) \delta_{ll'}, \end{aligned} \quad (\text{B.27})$$

と書き直すことができる。

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dr^2} \phi_j^{(l)}(r) &= N_j^{(l)} \frac{d^2}{dr^2} [r^{l+1} \exp(-\nu_j r^2)] \\ &= \left[\frac{l(l+1)}{r^2} - 2\nu_j(2l+3) + 4\nu_j^2 r^2 \right] \phi_j^{(l)}(r), \end{aligned} \quad (\text{B.28})$$

であることから、式 (B.27) は

$$\mathcal{T}_{ij}^{(l'l')} = \frac{\hbar^2 \nu_j}{2\mu} \left[2(2l+3) \left\langle \varphi_i^{(l)} \left| \varphi_j^{(l)} \right\rangle - 4\nu_j \left\langle \varphi_i^{(l)} \left| r^2 \left| \varphi_j^{(l)} \right\rangle \right\rangle \right] \delta_{ll'}, \quad (\text{B.29})$$

となる。ここで、第一項の $\langle \varphi_i^{(l)} | \varphi_j^{(l)} \rangle$ は式 (B.5) で与えられる。一方、第二項については、以下のよう計算できる:

$$\begin{aligned} \langle \varphi_i^{(l)} | r^2 | \varphi_j^{(l)} \rangle &= N_i^{(l)} N_j^{(l)} \int dr r^{2(l+2)} \exp[-(\nu_i + \nu_j) r^2] \\ &= N_i^{(l)} N_j^{(l)} \frac{(2l+3)!!}{2^{l+3}} \sqrt{\frac{\pi}{(\nu_i + \nu_j)^{2l+5}}} \\ &= \frac{2l+3}{2(\nu_i + \nu_j)} (\beta_{ij})^{l+\frac{3}{2}}. \end{aligned} \quad (\text{B.30})$$

ただし、式 (B.6) および式 (B.8) を用いた。結局、運動エネルギーの行列要素は以下の形に帰着する:

$$\mathcal{T}_{ij}^{(l'l')} = \frac{\hbar^2}{\mu} (2l+3) \frac{\nu_i \nu_j}{\nu_i + \nu_j} (\beta_{ij})^{l+\frac{3}{2}} \delta_{ll'}. \quad (\text{B.31})$$

B.2.3 2体行列要素 —ガウス型ポテンシャル—

式 (31) の2体行列要素は、相互作用 \hat{V} に対応するポテンシャル v が相対座標に関して \mathbf{r} のみの関数として書ける局所ポテンシャルだと仮定すると、

$$\mathcal{V}_{ij}^{(l'l')} = \int d\mathbf{r} \langle \varphi_i^{(l)} [Y_l \otimes \xi_1^{(\sigma)}]_{1m_j} \xi_{00}^{(\tau)} | \mathbf{r} \rangle v(\mathbf{r}) \langle \mathbf{r} | \varphi_j^{(l')} [Y_{l'} \otimes \xi_1^{(\sigma)}]_{1m_j} \xi_{00}^{(\tau)} \rangle, \quad (\text{B.32})$$

となる。ここでは、重陽子を想定しており、スピン三重項、アイソスピン一重項のみを考慮する。式 (B.32) が含むポテンシャル v にガウス関数を用いて表現できる G3RS ポテンシャル [?] の中心力部分とテンソル力部分を採用しよう:

$$v(\mathbf{r}) = v_C(r) + v_T(r) \mathcal{S}_{12}(\hat{\mathbf{r}}), \quad (\text{B.33})$$

$$v_C(r) = \sum_{i=1}^3 v_i^{(C)} \exp \left[- \left(\frac{r}{r_i^{(C)}} \right)^2 \right], \quad (\text{B.34})$$

$$v_T(r) = \sum_{i=1}^3 v_i^{(T)} \exp \left[- \left(\frac{r}{r_i^{(T)}} \right)^2 \right]. \quad (\text{B.35})$$

テンソル演算子 \mathcal{S}_{12} は式 (2) で定義される。また、今必要とする各パラメータは表 1 に示してある。

G3RS ポテンシャルを用いると、2体行列要素は

$$\begin{aligned} \mathcal{V}_{ij}^{(l'l')} &= \langle \xi_{00}^{(\tau)} | \xi_{00}^{(\tau)} \rangle N_i^{(l)} N_j^{(l')} \\ &\times \left[\sum_{k=1}^3 v_k^{(C)} \int dr r^{l+l'+2} e^{-(\nu_i + \nu_j + \nu_k^{(C)}) r^2} \int d\hat{\mathbf{r}} [Y_l(\hat{\mathbf{r}}) \otimes \xi_1^{(\sigma)}]_{1m_j}^* [Y_{l'}(\hat{\mathbf{r}}) \otimes \xi_1^{(\sigma)}]_{1m_j} \right. \\ &\left. + \sum_{k=1}^3 v_k^{(T)} \int dr r^{l+l'+2} e^{-(\nu_i + \nu_j + \nu_k^{(T)}) r^2} \int d\hat{\mathbf{r}} [Y_l(\hat{\mathbf{r}}) \otimes \xi_1^{(\sigma)}]_{1m_j}^* \mathcal{S}_{12}(\hat{\mathbf{r}}) [Y_{l'}(\hat{\mathbf{r}}) \otimes \xi_1^{(\sigma)}]_{1m_j} \right], \end{aligned} \quad (\text{B.36})$$

と書ける。ただし、 $\nu_k^{(X)} = [r_k^{(X)}]^{-2}$ である ($X = C, T$)。

まず、式 (8) から、スピンとアイソスピンに関する重なり積分は以下となる：

$$\langle \xi_{1M_S}^{(\sigma)} | \xi_{1M'_S}^{(\sigma)} \rangle = \delta_{M_S M'_S}, \quad (\text{B.37})$$

$$\langle \xi_{00}^{(\tau)} | \xi_{00}^{(\tau)} \rangle = 1. \quad (\text{B.38})$$

次に中心力部分の角度積分も実行でき、

$$\begin{aligned} & \int d\hat{\mathbf{r}} \left[Y_l(\hat{\mathbf{r}}) \otimes \xi_1^{(\sigma)} \right]_{1m_j}^* \left[Y_{l'}(\hat{\mathbf{r}}) \otimes \xi_1^{(\sigma)} \right]_{1m_j} \\ &= \sum_{\substack{mm' \\ M_S M'_S}} (lm1M_S|1m_j) (l'm'1M'_S|1m_j) \langle \xi_{1M_S}^{(\sigma)} | \xi_{1M'_S}^{(\sigma)} \rangle \int d\hat{\mathbf{r}} Y_l(\hat{\mathbf{r}})^* Y_{l'}(\hat{\mathbf{r}}) \\ &= \delta_{ll'}, \end{aligned} \quad (\text{B.39})$$

を得る。ただし、球面調和関数の直交性を用いた。最後にテンソル力部分の角度積分は、Wigner-Eckart の定理を用いて以下のように計算できる：

$$\begin{aligned} & \int d\hat{\mathbf{r}} \left[Y_l(\hat{\mathbf{r}}) \otimes \xi_1^{(\sigma)} \right]_{1m_j}^* \mathcal{S}_{12}(\hat{\mathbf{r}}) \left[Y_{l'}(\hat{\mathbf{r}}) \otimes \xi_1^{(\sigma)} \right]_{1m_j} \\ &= \sqrt{24\pi} \left\langle \left[Y_l \otimes \xi_1^{(\sigma)} \right]_{1m_j} \left| \left[[\sigma_1(1) \otimes \sigma_1(2)]_2 \otimes Y_2(\hat{\mathbf{q}}) \right]_{00} \right| \left[Y_{l'} \otimes \xi_1^{(\sigma)} \right]_{1m_j} \right\rangle \\ &= \sqrt{8\pi} (1m_j 00|1m_j) \langle (l1)1 || (22)0 || (l'1)1 \rangle \\ &= 3\sqrt{8\pi} \begin{Bmatrix} l & 1 & 1 \\ l' & 1 & 1 \\ 2 & 2 & 0 \end{Bmatrix} \langle Y_l || Y_2 || Y_{l'} \rangle \left\langle \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 2 \end{pmatrix} 1 \left\| \begin{pmatrix} 11 \end{pmatrix} 2 \right\| \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 2 \end{pmatrix} 1 \right\rangle \\ &= 2\sqrt{6} \hat{l} l' (l0l'0|20) \begin{Bmatrix} l & l' & 2 \\ 1 & 1 & 1 \end{Bmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{B.40})$$

ここで $\hat{l} = \sqrt{2l+1}$ であり、また、式 (2) を使った。さらに $\begin{Bmatrix} \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \end{Bmatrix}$ および $\begin{Bmatrix} \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \end{Bmatrix}$ はそれぞれ

Wigner の 6-j 記号および 9-j 記号である。以上の計算により、(B.36) は以下のように書き換えることができる：

$$\begin{aligned} \mathcal{V}_{ij}^{(l'l')} &= N_i^{(l)} N_j^{(l')} \left[\delta_{ll'} \sum_{k=1}^3 v_k^{(C)} \int dr r^{2l+2} e^{-(\nu_i + \nu_j + \nu_k^{(C)})r^2} \right. \\ &\quad \left. + 2\sqrt{6} \hat{l} l' (l0l'0|20) \begin{Bmatrix} l & l' & 2 \\ 1 & 1 & 1 \end{Bmatrix} \sum_{k=1}^3 v_k^{(T)} \int dr r^{l+l'+2} e^{-(\nu_i + \nu_j + \nu_k^{(T)})r^2} \right]. \end{aligned} \quad (\text{B.41})$$

式 (B.40) は l と l' を定めると解析的に計算できる。実際、許される l と l' の組み合わせは $l+l' = 0, 2, 4$ しかなく、それぞれの場合で式 (B.40) は

$$2\sqrt{6} \hat{l} \hat{l}' (l0l'0|20) \begin{Bmatrix} l & l' & 2 \\ 1 & 1 & 1 \end{Bmatrix} = \begin{cases} 0 & (l+l'=0), \\ 2\sqrt{2} & (l+l'=2), \\ -2 & (l+l'=4), \end{cases} \quad (\text{B.42})$$

となる。すると、2体行列要素はさらに具体的に書くことができる。行列として表すと、

$$\mathcal{V}_{ij} = \begin{pmatrix} \mathcal{V}_{ij}^{(00)} & \mathcal{V}_{ij}^{(02)} \\ \mathcal{V}_{ij}^{(20)} & \mathcal{V}_{ij}^{(22)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} N_i^{(0)} N_j^{(0)} W_{ij}^{(C1)} & 2\sqrt{2} N_i^{(0)} N_j^{(2)} W_{ij}^{(T1)} \\ 2\sqrt{2} N_i^{(2)} N_j^{(0)} W_{ij}^{(T1)} & N_i^{(2)} N_j^{(2)} [W_{ij}^{(C2)} - 2W_{ij}^{(T2)}] \end{pmatrix}, \quad (\text{B.43})$$

を得る。ただし、

$$W_{ij}^{(C1)} = \sum_{k=1}^3 v_k^{(C)} \int dr r^2 e^{-(\nu_i + \nu_j + \nu_k^{(C)})r^2}, \quad (\text{B.44})$$

$$W_{ij}^{(C2)} = \sum_{k=1}^3 v_k^{(C)} \int dr r^6 e^{-(\nu_i + \nu_j + \nu_k^{(C)})r^2}, \quad (\text{B.45})$$

$$W_{ij}^{(T1)} = \sum_{k=1}^3 v_k^{(T)} \int dr r^4 e^{-(\nu_i + \nu_j + \nu_k^{(T)})r^2}, \quad (\text{B.46})$$

$$W_{ij}^{(T2)} = \sum_{k=1}^3 v_k^{(T)} \int dr r^6 e^{-(\nu_i + \nu_j + \nu_k^{(T)})r^2}, \quad (\text{B.47})$$

である。ここで $\nu = \nu_i + \nu_j + \nu_k^{(X)}$ とおくと、 $W_{ij}^{(C1)}$, $W_{ij}^{(C2)}$, $W_{ij}^{(T1)}$, $W_{ij}^{(T2)}$ が含む積分は

$$\int dr r^{2\kappa} e^{-\nu r^2} = \frac{(2\kappa-1)!!}{2^{\kappa+1}} \sqrt{\frac{\pi}{\nu^{2\kappa+1}}} \quad (\kappa = 1, 2, 3), \quad (\text{B.48})$$

とまとめて表現できる。これより、以下を得る:

$$W_{ij}^{(C1)} = \frac{\sqrt{\pi}}{4} \sum_{k=1}^3 v_k^{(C)} (\nu_i + \nu_j + \nu_k^{(C)})^{-3/2}, \quad (\text{B.49})$$

$$W_{ij}^{(C2)} = \frac{15\sqrt{\pi}}{16} \sum_{k=1}^3 v_k^{(C)} (\nu_i + \nu_j + \nu_k^{(C)})^{-7/2}, \quad (\text{B.50})$$

$$W_{ij}^{(T1)} = \frac{3\sqrt{\pi}}{8} \sum_{k=1}^3 v_k^{(T)} (\nu_i + \nu_j + \nu_k^{(T)})^{-5/2}, \quad (\text{B.51})$$

$$W_{ij}^{(T2)} = \frac{15\sqrt{\pi}}{16} \sum_{k=1}^3 v_k^{(T)} (\nu_i + \nu_j + \nu_k^{(T)})^{-7/2}. \quad (\text{B.52})$$

参考文献

- [1] E. Hiyama, Y. Kino, and M. Kamimura, *Prog. Part. Nucl. Phys.* **51**, 223 (2003).
- [2] R. Tamagaki, *Prog. Theor. Phys.* **39**, 91 (1968).
- [3] The SciPy community, `scipy.linalg.eigh`, <https://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/generated/scipy.linalg.eigh.html>.
- [4] D. A. Varshalovich, A. N. Moskalev, and V. K. Khersonskii, *Quantum Theory of Angular Momentum* (WORLD SCIENTIFIC, 1988).
- [5] Wolfram Research, Inc., *Mathematica*, Version 12.0.0.0, Champaign, IL (2002).