

Principles of Stellar Evolution and Nucleosynthesis

chapter4 Thermonuclear reaction rate

恒星進化と元素合成の中心にあるのは熱核反応である。これまでの議論では、恒星物質 1 グラムあたりのエネルギー発生率は記号 ϵ で示されてきた。軽い原子核がより重い原子核へと融合すること（質量を犠牲にして）で運動エネルギーを放出し、それが表面から放射されるエネルギーの内部源として機能する。内部で解放されるエネルギー量が表面から放射されるエネルギー量と釣り合うという条件が、恒星構造の定常状態を決定する。

しかしながら、エネルギーを解放するまさにその反応が必然的に恒星内部の化学組成を変化させるため、その状況は真に静的なものではありえない。恒星の構造を進化させるのは、この化学組成のゆっくりとした変化なのである。もし星が有限の寿命の後にその質量の全部または一部を宇宙空間に放出した場合、星間物質の化学組成は熱核反応の残骸によって変化させられることになる。最も簡単に述べると、我々の銀河系で見つかる重元素の全部または一部が、恒星の内部でこれらと同じ核融合反応によって合成されたというのが、恒星元素合成研究者の作業仮説である。これらの理由から、熱核反応率という主題は本書の焦点である。

熱核反応率の科学を完全に理解することは、非常に困難である。それには核物理学の複雑な詳細が含まれ、その多くはまだ未解決である。恒星の反応率に対する適切な処方を確実にするためには、各反応のメカニズムを精査しなければならない。それでもなお、いくつかの基本的な物理原理はすべての熱核反応率の計算に共通しており、本章ではこれらの一般原理について述べる。

4-1 Kinematics And Energetics

粒子 a が原子核 X に衝突して原子核 Y と新しい粒子 b を生成する核反応は、次のように記号で表される。



一般的に使用される別の表記法は、次の通りである。



入射粒子または出射粒子は、多くの場合、次の反応のように光子 (γ) であることがある。

このようなすべての核反応において、全エネルギー、運動量、および角運動量は保存量である。

核反応において全線形運動量を保存する必要性から、運動学的記述は、核系の重心（より厳密に言えば運動量中心）の運動と、その重心に対する粒子の相対運動の観点で行うべきであることが示唆される。古典力学と同様に、系の全エネルギーまたは全運動量は、重心運動におけるエネルギーまたは運動量と、重心自体の運動のエネルギーまたは運動量の和として表すことができる。

運動量保存則は、とりわけ、重心の運動が反応によって変化しないことを要求する。

質量が m_1 と m_2 の非相対論的な粒子が速度 \mathbf{v}_1 と \mathbf{v}_2 で衝突するケースを考えると、重心速度

$$\mathbf{V} = \frac{m_1 \mathbf{v}_1 + m_2 \mathbf{v}_2}{m_1 + m_2} = \frac{m_1 \mathbf{v}_1 + m_2 \mathbf{v}_2}{M}$$

は保存する。また、相対速度 $\mathbf{v} = \mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2$ を用いると運動エネルギー

$$\frac{1}{2} m_1 v_1^2 + \frac{1}{2} m_2 v_2^2 = \frac{1}{2} M V^2 + \frac{1}{2} \mu v^2$$

はこのように変形でき、保存する。このとき、換算質量 μ は

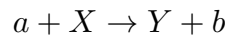
$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$

となる。

衝突によって質量欠損が生じる場合のエネルギー保存則を考える。

質量中心の運動エネルギーは反応によって変化しないため、質量中心系における運動エネルギーは、最終的な質量が初期の質量よりも小さいか大きいかに応じて、増加または減少しなければならない。

反応式



に対応するエネルギー保存則は

$$E_{aX} + (M_a + M_X)c^2 = E_{bY} + (M_b + M_Y)c^2$$

となる。ここで、 E_{aX} は a と X の質量中心系における運動エネルギーである。等式の両辺の第2項は、反応前後の静止質量の和が必ずしも厳密に等しいとは限らず、その不均衡によって運動エネルギーが放出または吸収される可能性があるという事実を表している。これはよく知られたアインシュタインの質量とエネルギーの等価性の関係である。ここで扱われる質量は、原子核 a , X , b , Y の質量です。例えば、 $C^{12}(d,p)C^{13}$ という反応例では、次のようになる。

$$E_{d,C^{12}} + [M(d \text{ nucleus}) + M(C^{12} \text{ nucleus})]c^2 = E_{p,C^{13}} + [M(p \text{ nucleus}) + M(C^{13} \text{ nucleus})]c^2$$

通常の核反応では正味の電荷量は保存されることに注意すると、反応式の両辺で原子に含まれる電子の数は等しくなる。したがって、もしそうしたいのであれば、原子核の質量を原子質量で置き換えることができる。なぜなら、それによって同数の電子の静止質量が等式の両辺に加えられることになるからだ。原子核の質量を原子質量で置き換えることは、等式の両辺における電子の結合エネルギーの違いによる小さな誤差を導入する。しかし、両辺における原子の電子の総結合エネルギーの差は、原子核の質量の差に比べて非常に小さい。したがって、本書では原子質量を

使用することにするが、その際、数電子ボルト程度の誤差が質量とエネルギーの関係に導入されることを常に念頭に置くものとする。よって、式 (4-10) の代わりに、

$$E_{d,C^{12}} + [M(D^2) + M(C^{12})]c^2 = E_{p,C^{13}} + [M(H^1) + M(C^{13})]c^2$$

を得る。

ここで、質量は中性原子の質量を表す。原子質量を用いることの大きな利点は、これらが伝統的に原子質量測定実験、すなわち質量分析器で測定される量であるということだ。

核反応式の両辺で明らかに等しいもう一つの量は、核子（核子は中性子または陽子の総称です）の総数である。したがって、原子質量単位で表された正確な質量に最も近い整数値として定義される原子量は、質量とエネルギーの等価式の両辺で同じままであり続ける。

それゆえ、エネルギーバランス自体は、原子量に 1 amu（原子質量単位）の静止質量エネルギーを掛けたものを等式の両辺から差し引いても乱されることはない。その結果、質量は両辺ともに質量過剰となる。

原子質量過剰 (atomic mass excess) を次の量で定義する。

$$\Delta M_{AZ} = (M_{AZ} - AM_u)c^2 = [M_{AZ}(amu) - A]M_uc^2$$

ここで、 M_u は炭素 12 の質量の 12 分の 1 として定義される 1 原子質量単位 (amu) の質量であり、 $M_uc^2 = 931.478 \text{ MeV}$ となります。この定義を用いると、エネルギー保存則は

$$E_{aX} + (\Delta M_a + \Delta M_X) = E_{bY} + (\Delta M_b + \Delta M_Y)$$

ここで、原子質量過剰は教科書 P289 から P291 に一覧として書かれており、この数値を使うと

$$E_{d,C^{12}} + 13.1359 + 0 = E_{p,C^{13}} + 3.1246 + 7.2890$$

となるので、

$$\Delta E = E_{p,C^{13}} - E_{d,C^{12}} = 2.7223 \text{ MeV}$$

となり、反応ごとに 2.722MeV に等しい運動エネルギーの増加があることが分かる。

問題 4-4: 反応 $He^3(He^3, 2p)He^4$ によって生成されるエネルギーを計算せよ
解答:

$$E_{He^3, He^3} + 2\Delta He^3 = E_{He^4, 2p} + 2\Delta p + \Delta He^4$$

$$E_{He^3, He^3} + 2 \times 14.93134 = E_{He^4, 2p} + 2 \times 7.28899 + 2.42475$$

よって、生成されるエネルギーは 12.860MeV である

4-2 Cross section and reaction rate

エネルギー収支の式は、それぞれの核反応によって放出されるエネルギーをもたらします。そのエネルギーから、単位時間あたり、単位体積あたりに放出されるエネルギーは、簡単な計算で求めることができます。

単位時間あたりの反応数は、各原子核 X が断面積 σ を持ち、粒子 a がその領域に衝突するたびに反応が起こると仮定することで計算できる。この断面積の定義は、相対速度がどちらの粒子から見ても同じと見なされるため、実際には 2 種類の粒子間で対称であることに注意してください。

ターゲットとなる原子核 X が数密度 N_X の一様な気体の形で存在すると仮定する。すると、粒子 a 一つ単位体積あたりの反応数 r は、 $r = \sigma(v)vN_X$ で表すことができるので、最終的に反応率の式を次のように表現できる。

$$r = \sigma(v)vN_aN_X$$

もし a と X の両方の粒子が動いている場合、 v はそれらの相対速度の大きさです。熱力学的平衡状態にある混合気体中では、ちょうど a と X がそれぞれ明確な速度スペクトルを持っているように、 a と X の粒子間には相対速度のあるスペクトルが存在します。この相対速度スペクトルを $\phi(v)$ として、 $\int \phi(v)dv = 1$ となるように規格化してあるとする。その場合、 $\phi(v)dv$ は一對の粒子の相対速度が範囲 v から $v+dv$ 内にある確率となります。これを用いて単位体積あたりの反応率を一般化すると

$$r_{a,X} = N_aN_X \langle \sigma v \rangle = N_aN_X \int_0^\infty v\sigma(v)\phi(v) dv$$

となる。恒星内部で起こる熱核反応率は、最終的には $\langle \sigma v \rangle$ の評価に行き着く。ここで、粒子 a が粒子 X と同一ではない場合にのみ正しいという、小さくも重要な補足しておく。粒子が異なる場合、反応率の係数は N_a と N_X の積 (すなわち完全二部グラフ (N_a, N_X) の辺の数) になるが、粒子が同じ場合、 $N_aC2 \approx \frac{N_a^2}{2}$ (すなわち完全グラフ K_{N_a} の辺の数) となる。

よって、因子 $\frac{1}{2}$ を加える必要があるので、反応率の式は

$$r_{a,X} = \frac{N_aN_X}{1 + \delta_{a,X}} \langle \sigma v \rangle = \frac{N_aN_X}{1 + \delta_{a,X}} \lambda_{a,X}$$

のように修正できる。ここで、 λ を粒子のペアあたりの反応率

$$\lambda = \langle \sigma v \rangle$$

とした。

核宇宙物理学における時間スケールの議論では、特定の環境における核種の平均寿命を計算すると便利ことが多い。種 a との反応に対する種 X の寿命 $\tau_a(X)$ を、特定の原因による X の存在量の変化率が次式を満たすように定義する。

$$\left(\frac{\partial N_X}{\partial t}\right)_a = -\frac{N_X}{\tau_a(X)} = -r_{a,X}$$

ここで、偏微分記号は数学的な意味を持たないことに注意する。上式を解くと、

$$\tau_a(X) = \frac{N_X}{r_{a,X}} = \frac{1}{\lambda_{a,X} N_a}$$

となる。

少し考えると、因子 $1 + \delta$ は恣意的でないことがわかる。 $a \neq X$ のとき、因子は 1 となるので変わらないが、 $a = X$ のとき、各反応は 2 つの粒子を破壊するため、

$$\left(\frac{\partial N_X}{\partial t}\right)_a = -2r_{a,a}$$

となり、再び同様の式が得られる。

問題 4-6: もし種 X がいくつかの異なる反応によって破壊されうるとき、 X の全寿命 $\tau(X)$ が次式で与えられることを示してください。

$$\frac{1}{\tau(X)} = \sum \frac{1}{\tau_i(X)}$$

中性子星の例外を除き、恒星内部の原子核は熱力学的平衡状態にあり、縮退していない。異なる種類の原子核の状態は、マクスウェル・ボルツマン分布によって個別に記述される。カノニカル分布を適用して、マクスウェル・ボルツマン分布より、粒子 1 の数密度は

$$N_1(\mathbf{v}_1)dv_{1x}dv_{1y}dv_{1z} = N_1 \left(\frac{m_1}{2\pi kT}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{m_1 v_1^2}{2kT}\right) dv_{1x}dv_{1y}dv_{1z}$$

で与えられる。

よって、

$$\begin{aligned} N_1(\mathbf{v}_1)N_2(\mathbf{v}_2)dv_1^3dv_2^3 &= \left(\frac{m_1m_2}{(2\pi kT)^2}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{m_1v_1^2 + m_2v_2^2}{2kT}\right) dv_1^3dv_2^3 \\ &= \left(\frac{m_1m_2}{(2\pi kT)^2}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{MV^2}{2kT} - \frac{\mu v^2}{2kT}\right) dv_1^3dv_2^3 \end{aligned}$$

となる。ヤコビアン $\frac{\partial(v_{1x}, v_{2x})}{\partial(V, v)}$ を計算すると、

$$\begin{vmatrix} \frac{\partial v_{1x}}{\partial V_x} & \frac{\partial v_{1x}}{\partial v_x} \\ \frac{\partial v_{2x}}{\partial V_x} & \frac{\partial v_{2x}}{\partial v_x} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 & \frac{m_2}{M} \\ 1 & -\frac{m_1}{M} \end{vmatrix} = -1$$

より、向き付けをすると

$$\begin{aligned} & \left(\frac{m_1 m_2}{(2\pi kT)^2} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left(-\frac{MV^2}{2kT} - \frac{\mu v^2}{2kT} \right) dv_1^3 dv_2^3 \\ &= \left(\frac{m_1 m_2}{(2\pi kT)^2} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left(-\frac{MV^2}{2kT} \right) \exp \left(-\frac{\mu v^2}{2kT} \right) dV^3 dv^3 \\ &= \left(\frac{M}{2\pi kT} \right) \left(\frac{\mu}{2\pi kT} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left(-\frac{MV^2}{2kT} \right) \exp \left(-\frac{\mu v^2}{2kT} \right) dV^3 dv^3 \end{aligned}$$

となる。この積分を実行すると、

$$\int \left(\frac{M}{2\pi kT} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left(-\frac{MV^2}{2kT} \right) d^3V = 1$$

より、反応率は

$$r = N_1 N_2 \int v \sigma(v) \left(\frac{\mu}{2\pi kT} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left(-\frac{\mu v^2}{2kT} \right) d^3v$$

となる。 $\int d^3x = \int d\theta \int d\varphi \int dr r^2 \sin \theta = 4\pi \int dr r^2$ より、

$$\phi(v)dv = \left(\frac{\mu}{2\pi kT} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left(-\frac{\mu v^2}{2kT} \right) 4\pi v^2 dv$$

となる。これらの関係を用いると、

$$\lambda = \langle \sigma v \rangle = 4\pi \left(\frac{\mu}{2\pi kT} \right)^{\frac{3}{2}} \int_0^\infty v^3 \sigma(v) \exp \left(-\frac{\mu v^2}{2kT} \right) dv$$

となる。

恒星内の熱核反応率を計算するためには、重要な反応についての $\sigma(v)$ の詳細を与える数式が必要になる。

パリティ

球面調和関数の性質

$$Y_{lm}(\pi - \theta, \pi + \phi) = (-1)^l Y_{lm}(\theta, \phi)$$

より、核子 n 個のパリティは

$$P = (-1)^{l_1 + l_2 + \dots + l_n}$$

となる。これより、閉構造ではパリティは 1 となり、閉構造の外側の情報からパリティを特定できる。

パリティ (偶/奇) を角運動量の上付き文字 (それぞれ $+/-$) で指定する標準的な表記法を用いると、 N^{13} の基底状態は、 C^{12} のコアの外側に $1p_{1/2}$ 陽子が 1 つ余分に存在するため、以下のようになる。

$$J^\pi(N^{13}) = \frac{1}{2}^-$$

複合核状態

粒子 a と X を含む反応が、複合核 W の共鳴状態を経て進行する場合、その過程を

$$a + X \rightarrow W \rightarrow b + Y$$

と考えるのが便利だ。これは、粒子 a と X の間の二体相互作用として、これら二つの粒子の相互作用を特徴づけるポテンシャル $V(r)$ によって記述される。

定常状態にある粒子対の運動は、シュレーディンガー方程式によって与えられる

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \psi + V(r)\psi = E\psi$$

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right)$$

$$L^2 |l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1) |l, m\rangle \text{ より}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 = \frac{p_r^2}{2\mu} + \frac{L^2}{2\mu r^2}$$

となる。 $\chi = rf(r)$ と置き換えると

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 \chi_l}{dr^2} + \left[\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} + V(r) - E \right] \chi_l(r) = 0$$

となる。

2つの粒子間の力を表すポテンシャルを完全に詳述することは不可能だが、いくつかの一般的な性

質は確信を持って述べる事ができる。核力は非常に強い引力であり、短い距離 (π 中間子のコンプトン波長、 $\hbar/m_\pi c = 1.4 \times 10^{-13}$ cm のオーダー) でのみ作用する。核子の表面が互いにその距離まで近づかない限り、核力は働かない。それより離れた距離では、ポテンシャルはクーロン斥力によるもの、すなわち $V(r) = Z_1 Z_2 e^2 / r$ となります。

ポテンシャル $V_l(r)$ は、図 4-11 のように概略的に表すことができる。このポテンシャルは、 $r > R$ においては古典的な斥力ポテンシャルです。 R は相互作用半径であり、核半径と呼ばれることもある。これは、2つの核子の半径の和に核力の到達範囲を加えたものにほぼ等しいはずで、実際には、次の式が非常に良い近似となることが分かっている。

$$R = 1.4(A_1^{1/3} + A_2^{1/3}) \times 10^{-13} \text{ cm} \quad (4-105)$$

保存則

反応の過程でエネルギー保存則、運動量保存則、角運動量保存則、パリティ保存則が成り立つ。反応 $a + X \rightarrow W$ において

$$S_X + S_a + L = J_W$$

が成立する。また、 X のパリティを $\pi(X)$ で表現すると

$$\pi(W) = \pi(a)\pi(X)(-1)^l$$

が成立する。

問題 4-30

反応 $C^{13} + p \rightarrow \gamma + N^{14}$ において、 $J^\pi(N^{14}) = 2^+$ を形成できる l の値はなんですか
パリティ保存則より、

$$\begin{aligned} \pi(N^{14}) &= \pi(C^{13})\pi(p)\pi(-1)^l \\ +1 &= (-1)(+1)(-1)^l \end{aligned}$$

よって l は奇数

角運動量保存則より

$$\hat{L} + \hat{S} = \hat{J}$$

ここで \hat{S} はスピン 1/2 の合成をしたのでスピンは 0, 1 である。

$s = 0$ のとき、取り得る j の大きさは l のみだが、 l は奇数より不適

$s = 1$ のとき、 $l + 1 \leq j \leq l - 1$ より、 $l = 1, 3$ があり得る。

さらに基本的な核の対称性が、核天体物理学において重要な応用を持っています。これまでの議

論は、同一粒子間の反応を除くすべての反応に適用可能でした。しかし、一对の同一粒子は、そのスピンに依存する、より完全で基本的な対称性に従います。一对の同一フェルミ粒子（半整数スピン）の全波動関数（空間 × スピン）は、粒子を交換すると符号が変わるという性質を持たなければなりません。この性質は完全反対称性と呼ばれます。一方、一对の同一ボース粒子の全波動関数は、粒子を入れ替えても不変でなければなりません。これは量子力学の基本法則であり、一对の同一フェルミ粒子に対する完全反対称性と、一对の同一ボース粒子に対する完全対称性です。量子統計学の中心にあるのは、この基本法則です。ここでは証明しませんが、もし2つの同一粒子のスピンと空間座標を記述する全波動関数が粒子の交換に対して対称であれば、その粒子の集団はボース・アインシュタイン統計に従い、一方、波動関数が交換に対して反対称であれば、その粒子の集団はフェルミ・ディラック統計に従います。

この原理を詳しく述べるよりも、核天体物理学にとって重要な相互作用への応用を例示します。一对の粒子に対して、全波動関数は、粒子の相対運動を記述する空間関数と、2つのスピンのベクトル結合を記述するスピン関数の積に因数分解できます。全波動関数の対称性は、空間関数の対称性とスピン関数の対称性の積に等しくなります。しかし、空間の対称性はまさに波動関数のパリティであり、一方、スピンの対称性は角運動量の結合規則によって与えられます。

例えば、陽子-陽子相互作用を考えます。この相互作用は、純粋な水素の星における最初の核反応を引き起こします。遠心力障壁のため、低エネルギー（低温度）で最も起こりやすい相互作用は、s波 ($l=0$) の陽子間のものです。その（空間）波動関数は偶数パリティを持つため、全波動関数が反対称であるためにはスピン関数が反対称でなければなりません。2つの陽子のスピン関数は、スピンの平行で全スピン $S=1$ となる場合は対称であり、スピンの反平行で全スピン $S=0$ となる場合は反対称です。したがって、2つの陽子の s 波相互作用は、反平行のスピンの、いわゆる一重項相互作用で起こらなければなりません。

恒星における原子核反応に対する原子核状態の効果は、障壁透過の問題と密接に関連しています。図 4-12 では、全ての共鳴が、入射粒子が相互作用できる非束縛原子核状態であることが示唆されていました。それらは a と X によって形成され、正の運動エネルギーを持って無限遠にあり、 a と X に崩壊して正の運動エネルギーを持って無限遠に戻ることができるため、非束縛状態です。共鳴状態は、 a と X が無限遠に分離した場合と比較して正のエネルギーを持っています。これらの準定常共鳴状態は比較的長い時間存在することができます。

平均寿命 τ とエネルギー幅 Γ の関係

$$\Gamma = \hbar\tau$$

が与えられる。粒子 a と X の相対運動に対する波動関数が得られたと仮定しよう。第一近似として、粒子は初め、複合核の準定常励起状態における核ポテンシャルによって束縛されていると

考える。無限遠では、外向きに進む波に対応する波動関数の指数関数的な減少が存在する。その励起状態の崩壊率（粒子放出）は次のように与えられる。

$$\begin{aligned}\lambda &= \frac{1}{\tau} = \text{崩壊する系から粒子が大きな球殻を横切る確率/秒} \\ &= \lim_{r \rightarrow \infty} v \iint_{\theta, \phi} |\psi(r, \theta, \phi)|^2 r^2 \sin \theta d\theta d\phi \\ &= \lim_{r \rightarrow \infty} v \iint_{\theta, \phi} \left| \frac{\chi_l}{r} \right|^2 |Y_l^m(\theta, \phi)|^2 r^2 \sin \theta d\theta d\phi \\ &= v |\chi_l(\infty)|^2\end{aligned}$$

相対的な角運動量 l を持つ粒子の透過因子は、この場合、次のように定義される。

$$P_l = \frac{\chi_l^*(\infty)\chi_l(\infty)}{\chi_l^*(R)\chi_l(R)}$$

これを用いて、崩壊率は次のように書くことができる。

$$\lambda = v P_l |\chi_l(R)|^2$$

したがって、崩壊率 λ は 3 つの因子の積と考えられる。

$$\lambda = (\text{無限遠での速度}) \times (\text{透過因子}) \times (\text{核半径における粒子の確率/単位 } dr)$$

無限遠での速度は、反応で解放されるエネルギーによって単純に決まる。透過因子は、核力とは無関係な波動力学計算によって十分に正確に計算できる。主な不確実性は、核表面での粒子を見出す確率という最後の因子に起因する。この不確実性は、関与する核の状態と、ポテンシャル内部の粒子密度に大きく依存する。それは、ポテンシャルの特定のモデルについてのみ計算できる。この不確実性は、通常、**無次元換算幅**と呼ばれる無次元数にまとめられる。この無次元換算幅は、核の状態に対してかなり予測可能な値をとることがわかる。この無次元換算幅を定義するという単純化された存在理由は、以下の通りである。

核の引力ポテンシャルは、核の中心近くに粒子を局在させる傾向があるが、排他原理と角運動量の組み合わせがその結論を厳密には真実ではないものになっている。しかし、ほとんどの場合、人は $|\chi_l(R)|^2$ の値がその一様確率密度の値を超えることを期待しないだろう。一様確率密度の場合、

$$\chi_l^*(R)\chi_l(R)dr = \frac{4\pi R^2 dr}{\frac{4}{3}\pi R^3} = \frac{3}{R} dr$$

この結果を指針として、無次元換算幅 θ_i^2 は次のように定義される。

$$\chi_l^*(R)\chi_l(R) \equiv \theta_i^2 \frac{3}{R}$$

様々な単純なポテンシャルについて、それを計算することができ、 θ_i^2 は通常 1 よりかなり小さい値であることが経験的にわかっている。

$$0.01 < \theta_i^2 < 1$$

問題 4-37

上記の定義を用いて、状態の粒子に対する部分幅が次のように書けることを示せ。

$$\Gamma_i = \frac{3\hbar v}{R} P_l \theta_i^2 \quad (4-121)$$

Γ_i に対するこのような表現の利点は、相互作用半径 R が推定されれば、 θ_i^2 を除いて Γ_i のすべてが評価できることである。核物理学からの経験則は、多くの場合において θ_i^2 の妥当な推定値を提供する。あるいは、エネルギー v に対する Γ_i の依存性が実験的に測定できるならば、 P_l の明示的な依存性が計算できるため、 θ_i^2 を推定することができる。熱核反応率に対する共鳴の影響を考察する前に、透過因子のための表現を導出したい。

4-5 Penetration factors

粒子 a と X の相対運動の波動関数は、次のように表現できることが示されている。

$$\psi(r, \theta, \phi) = \frac{\chi_l(r)}{r} Y_l^m(\theta, \phi)$$

これは、次の微分方程式を満たす。

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V_l(r) - E \right] \chi_l(r) = 0$$

この 2 階微分方程式は、波動方程式の形をしている。

$$\frac{d^2 \chi_l}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} [E - V_l(r)] \chi_l(r) = 0$$

ここで、 $V_l(r)$ は第 l 部分波に対する実効的な動径ポテンシャルである。

$$V_l(r) = \begin{cases} \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} + \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} & r > R \\ \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} + V_e + V_{nuc} & r < R \end{cases}$$

このポテンシャルは図 4-11 に模式的に示されている。動径波動方程式の厳密な解 ($r < R$) は、核ポテンシャルがよく知られていないため不可能である。幸いなことに、透過因子は $r > R$ に対してのみ明確に定義されている比を必要とする。

透過因子の正確な解は、クーロン場におけるシュレーディンガー方程式の解析解からも導出できる。 $r > R$ の解は正則解と非正則解の線形結合である。

$$\chi_l(r) = AF_l(r) + BG_l(r) \quad (4-128)$$

このとき、

正則クーロン波関数 $F_l(r)$ は

$$F_l(0) \rightarrow 0 \quad (4-125)$$

$$F_l(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sin \left(kr - \frac{l\pi}{2} - \eta \ln 2kr + \sigma_l \right)$$

非正則クーロン波関数 $G_l(r)$ は

$$G_l(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \cos \left(kr - \frac{l\pi}{2} - \eta \ln 2kr + \sigma_l \right) \quad (4-126)$$

を満たす。これらの式において、 $k = p/\hbar$ は波数であり、 $\eta = Z_1 Z_2 e^2 / \hbar v$ であり、 σ_l は複素ガンマ関数の引数である。

$$e^{2i\sigma_l} = \frac{\Gamma(l+1+i\eta)}{\Gamma(l+1-i\eta)} \quad (4-127)$$

無限遠で外向きに進む波を要求することは、漸近形の $\chi_l(r)$ が $\exp(+ikr)$ となることを要求することと同等であるので、 $A = iB$ となる。 $\chi_l(r)$ の漸近形は $\exp(+ikr)$ となるので、透過因子は

$$P_l = \frac{|\chi_l(\infty)|^2}{|\chi_l(R)|^2} = \frac{1}{F_l^2(R) + G_l^2(R)}$$

という解析的な解で表すことができる。

WKB 法

WKB 法は、以下のタイプの微分方程式の近似的な取り扱いである。

$$\frac{d^2 y}{dx^2} = y'' = -f(x)y \quad (4-130)$$

もし $f(x)$ が定数であれば、解は明らかに正弦波または指数関数である。 $f(x)$ が定数でなくても、ゆっくりと変化する関数であれば、解は $\sin(\int \sqrt{f} dx)$ または $\exp(\pm \int \sqrt{f} dx)$ に似た解を持つことが期待される。近似解が妥当であるための特徴的な距離は $\Delta x \approx 1/\sqrt{f}$ のオーダーであるため、近似解が良いものとなるためには、距離 Δx にわたる $\Delta f(x)$ の変化が $f(x)$ 自体よりもはるかに小さい必要がある。すなわち、近似的な条件は

$$\Delta f(x) \approx \frac{f'(x)}{\sqrt{f(x)}} \ll |f(x)|$$

この考えのもと、Eq. (4-130) の解を $y(x) = e^{i\phi(x)}$ の形で探してみよう。 $f(x)$ の符号はまだ特定されていない。試行解を Eq. (4-130) に代入すると、

$$i\phi'' - (\phi')^2 + f(x) = 0 \quad (4-132)$$

が得られる。

解を得るためには、 $\phi(x)$ がゆっくりと変化しなければならないと仮定しなければならない。これにより、 ϕ'' の項を無視できるほど小さいと暫定的に捨てることができる。この仮定の妥当性は、解が得られた後にチェックされなければならない。このステップが行われると、 $\phi' \approx \pm \sqrt{f(x)}$ となり、 ϕ' の導関数は $\phi'' \approx \pm f'/2\sqrt{f}$ となる。Eq. (4-132) から、 ϕ'' の項の無視は、 $|\phi''| \ll |f(x)|$ の場合にのみ有効であることがわかる。この条件は、Eq. (4-131) と同等である。 $\phi(x)$ は以下のようにすることで、より正確に指定できる。

$$\phi'(x) = \pm \sqrt{f(x)} + \eta(x) \quad (4-133)$$

これを Eq.(4-132) に代入すると

$$\pm \frac{i}{2} \frac{f'}{\sqrt{f}} + i\eta' \mp 2\eta\sqrt{f} - \eta^2 = 0$$

となる。ここで、

$$|\eta^2 - i\eta'| \ll \left| \frac{f'}{2\sqrt{f}} \right|$$

という条件を加えると

$$\eta(x) = \frac{i}{4} \frac{f'(x)}{f(x)}$$

これを Eq.(4-133) に代入して積分をすることで、

$$\phi(x) = \pm \int \sqrt{f(z)} dz + i \ln |f(x)|^{\frac{1}{4}}$$

よって、

$$y(x) = e^{i\phi} \approx A|f(x)|^{\frac{1}{4}} \exp \left[\pm i \int^x \sqrt{f(z)} dz \right]$$

という近似的な解が得られる。

しかし、 $f(x)$ が 0 に近い点では近似条件が使えないので、この解は不正確になる。よって、 $f(x) > 0$ の領域の解 $y_+(x)$ と $f(x) < 0$ の領域の解 $y_-(x)$ を別に考える必要がある。 $f(x_0) = 0$ として、無限遠で外向き波としての接続を考えると

$$(i) y_+(x) = A f(x)^{-\frac{1}{4}} \exp \left(i \int_{x_0}^x \sqrt{f} dx \right) \quad \begin{matrix} x \gg x_0 \\ f(x) > 0 \end{matrix} \quad (4-140)$$

は、次のように変換されます。

$$(ii) y_-(x) = A e^{i\pi/4} |f(x)|^{-\frac{1}{4}} \exp \left(- \int_x^{x_0} \sqrt{|f(x)|} dx \right) \quad \begin{matrix} x \ll x_0 \\ f(x) < 0 \end{matrix} \quad (4-141)$$

WKB 法の実践

シュレディンガー方程式は

$$\chi_l''(r) + f(r)\chi_l(r) = 0 \quad (4-142)$$

であった。ここで、 $f(r)$ は

$$f(r) = \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[E - \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \right] \quad (4-143)$$

である。 $f(r)$ は、図 4-12 に示されている $r = R_c$ で符号を変える。WKB 接続公式により、

$$\chi_l(r \gg R_c) = A [E - V_l(r)]^{-\frac{1}{4}} \exp \left[i \int_{R_c}^r \sqrt{f(r)} dr \right] \quad (4-144)$$

$$\chi_l(R < r \ll R_c) = A e^{i\pi/4} [V_l(r) - E]^{-\frac{1}{4}} \exp \left[- \int_r^{R_c} \sqrt{-f(r)} dr \right] \quad (4-145)$$

となる。すると、WKB 近似による透過因子の値は

$$P = \frac{\chi_l^*(\infty)\chi_l(\infty)}{\chi_l^*(R)\chi_l(R)} = \sqrt{\frac{V_l(R) - E}{E}} \exp \left[- \frac{2\sqrt{2\mu}}{\hbar} \int_R^{R_c} \sqrt{V_l(r) - E} dr \right] \quad (4-146)$$