

有限温度における Sn 核の超流動相転移解析 Woods-Saxon ポテンシャルと seniority pairing モデルの応用

根岸 颯

February 28, 2025

概要

原子核の energy scale は $1\text{MeV} \simeq 10^{10}\text{K}$ 程度であるため、地上においてこのような熱平衡状態が実現されるとは考えられず、通常扱う原子核は $T=0\text{K}$ にあるとみなしても問題は生じない。しかし、恒星内部やその終焉時等の極限環境下においての温度は 10 億 K 以上になるため、原子核は有限温度の熱浴の下にあると考えることができる。有限温度の原子核の性質は、核融合反応等への応用が期待される。ここでは、 $^{100-132}\text{Sn}$ 核を例に取り、Woods-Saxon potential と seniority pairing モデルを用いた解析を試みる。

Woods-Saxon ポテンシャル

- ▶
$$V(r) = \frac{V_0(< 0)}{1 + \exp((r - R)/a)}$$
- ▶ より現実の原子核の性質を反映。
- ▶ 原子核の密度分布と同じ形。
- ▶ パラメータ R, a は、それぞれ、原子核の半径と表面のぼやけ。

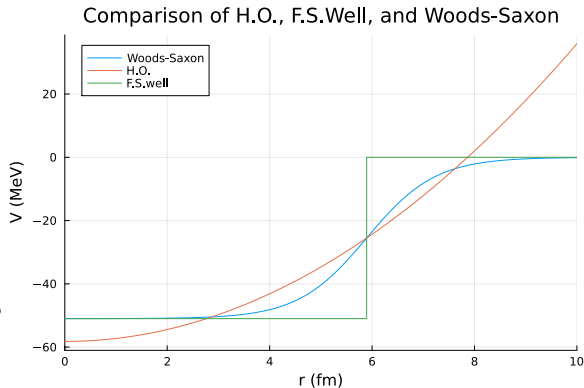


図 1:

平均場近似における単粒子 Hamiltonian

Woods-Saxon ポテンシャルを採用し、Hamiltonian を 3 次元極座標運動エネルギー $T_{\text{HO}} = \hbar\omega \left(2n + l + \frac{3}{2}\right)$ を用いて

$$H = T_{\text{HO}} + U(r) \quad (1)$$

と定義する。このときのポテンシャル $U(r)$ は、

$$U(r) = u_0 f(r) + u_{ls} r_0^2 \frac{1}{r} \frac{df(r)}{dr} \mathbf{l} \cdot \mathbf{s} + U_{\text{Coul}}(r) \frac{1 - \tau}{2} : f(r) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{r-R}{a}\right)} \quad (2)$$

である。

この Hamiltonian を対角化することで単粒子エネルギーを求める。

seniority モデルにおける Hamiltonian

残留相互作用を含めた Hamiltonian H' を数演算子 N_j , quasi-spin 演算子 S_{j+} を用いて

$$H' = \sum_j \epsilon_j N_j - g S_+ S_- \quad ; S_+ \equiv \sum_j S_{j+} , S_- \equiv (S_+)^{\dagger} \quad (3)$$

のように定める。このとき j は $N = 50 \sim 82$ を満たす軌道である。

BCS 理論

引力に対する対相関力に対しては $J = 0$ 対が多くの準位に分布し、分布の仕方が多数あるため、seniority 数 (未ペア粒子数) が低い状態で表されてしまい、独立な状態が多数存在する。これを説明する理論として超伝導を説明する理論である BCS 理論が採用される。[4] この分布のうち、最もエネルギーが低い基底状態を変分法的に求められ、この状態が"超伝導"状態となっているその基底状態はパラメータ v_k, u_k を用いて

$$|\text{BCS}\rangle = \prod_{k>0} (u_k + v_k a_k^\dagger a_k^\dagger) |0\rangle, \quad (4)$$

と表される。

BCS 方程式

BCS パラメータ v_k, u_k は、単粒子エネルギー ϵ , 化学ポテンシャル λ , ギャップ Δ を用いて、[3]

$$\left. \begin{matrix} u_k^2 \\ v_k^2 \end{matrix} \right\} = \frac{1}{2} \left(1 \pm \frac{\epsilon_k - \lambda}{\sqrt{(\epsilon_k - \lambda)^2 + \Delta_k^2}} \right) \quad (5)$$

と表される。またパラメータを決める方程式として粒子数方程式、ギャップ方程式が用いられ、

$$\Delta = g \sum_{k>0} u_k v_k \quad (6)$$

$$N = 2 \sum_{k>0} v_k^2 \quad (7)$$

有限温度 BCS 理論

熱力学的分布に従うため、Fermi 分布 $f_i = 1/(1 + \exp(\beta E_i))$ を用いて有限温度の場合に対して書き直すと、式 (6),(7) は

$$\Delta = g \sum_{k>0} u_k v_k (1 - 2f_i) \quad (8)$$

$$N = 2 \sum_{k>0} [v_k^2 + (u_k^2 - v_k^2)f_i] \quad (9)$$

のように書き直される。

手順

1. 単粒子エネルギーを求める。
2. seniority モデルを用いて pairing strength g を求める。
3. 以上を用いて有限温度 BCS 計算を行い、相転移を追う。

計算に用いた方程式1

ポテンシャルパラメータ u_0, u_{ls} はそれぞれ、

$$r_0 = 1.27, \quad R = r_0 A^{1/3}, \quad a = 0.67 \text{ [fm]} \quad (10)$$

$$u_0 = \left(-51 + 33 \frac{N-Z}{A} \right), \quad u_{ls} = \left(22 - 14 \frac{N-Z}{A} \right) \text{ [MeV]} \quad (11)$$

以上を用いて波動関数 ψ_{nlj} を基底に用いてハミルトニアンを構成し、対角化を行う。

計算に用いた方程式2

gap Δ は、偶奇質量差から求める。 $\Delta = \frac{1}{2}(E_{g.s.}^{(N+1)} + E_{g.s.}^{(N-1)} - 2E_{g.s.}^{(N)})$ であり、基底エネルギーと結合エネルギーの関係として、 $E_{g.s.}^{(N)} = -B(N) + \text{Const.}$ を用いて計算する。ここで結合エネルギーは、

$$B(Z, N) = a_v A - a_s A^{\frac{2}{3}} - a_A \frac{(N - Z)^2}{A} - a_c \frac{Z^2}{A^{\frac{1}{3}}} + \delta \quad (12)$$

Parameter	Value
a_v	15.753
a_s	17.804
a_A	23.69
a_c	0.710
a_5	12.0

計算に用いた方程式3

化学ポテンシャル λ と pairing strength g は、BCS 方程式を用いて計算する。簡単のため、 Δ_k はすべての k に対して等しいとしている。

$$1 = \frac{g}{2} \sum_{k>0} \frac{1}{\sqrt{(\epsilon_k - \lambda)^2 + \Delta}} \quad (13)$$

$$N = \sum_{k>0} \left(1 - \frac{\epsilon_k - \lambda}{\sqrt{(\epsilon_k - \lambda)^2 + \Delta}} \right) \quad (14)$$

これを満たす λ, g の値を数値的に求める。

計算に用いた方程式 4

有限温度の場合は、 $T = 0$ の g の値を採用することで有限温度の BCS 方程式を用いる。[2]

$$1 = \frac{g}{2} \sum_{k>0} \frac{1 - 2f_i}{\sqrt{(\epsilon_k - \lambda)^2 + \Delta^2}} \quad (15)$$

$$N = \sum_{k>0} \left[1 - \frac{(\epsilon_k - \lambda)(1 - 2f_i)}{\sqrt{(\epsilon_k - \lambda)^2 + \Delta^2}} \right] \quad (16)$$

計算に用いた方程式5

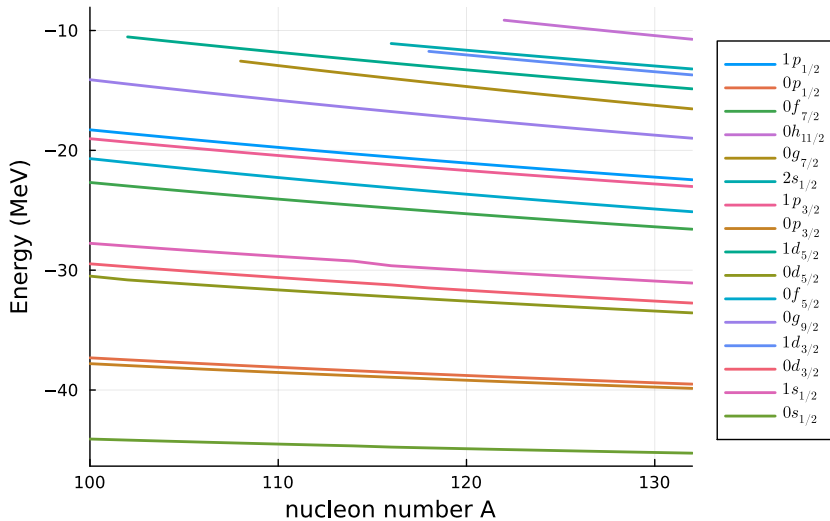
エネルギー期待値の温度変化は、

$$\langle H \rangle \quad (17)$$

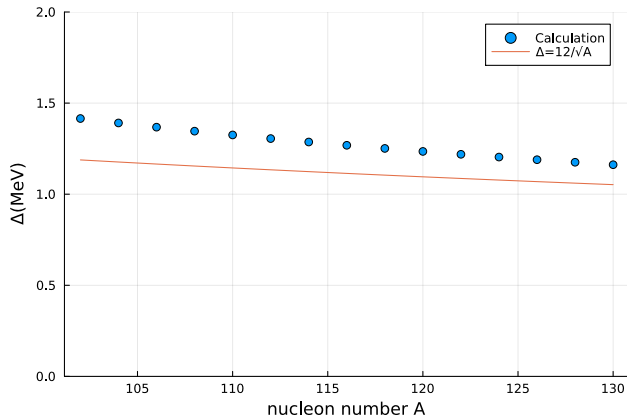
数値計算の手順

単粒子エネルギー

Energy Levels vs A



Δ と g の質量数依存性



ここで近似式 $\Delta = 12A^{-1/2}$ は文献 [1] より。

pairing gap の温度依存性

- ▶ 全核種で相転移が見られた。
- ▶ $kT/\Delta_0 \sim 0.55$ 付近の傾向が見られる。
- ▶ ^{102}Sn のみ例外的な振る舞い。
⇒ ペアが1組しか生じないため？

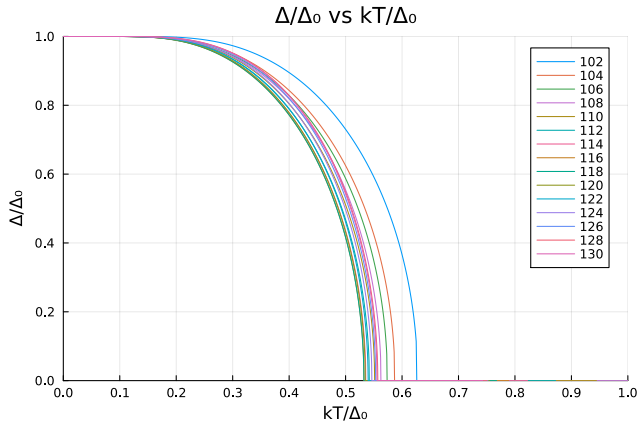


図 1:

エネルギーと比熱の温度依存性

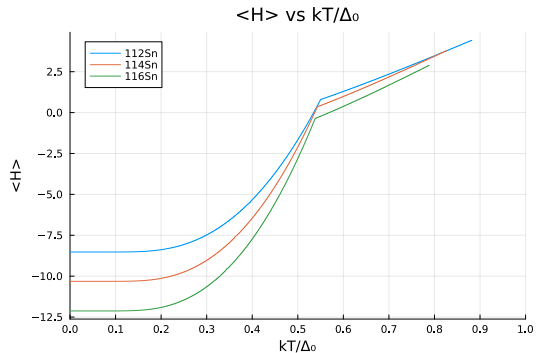


図 1:

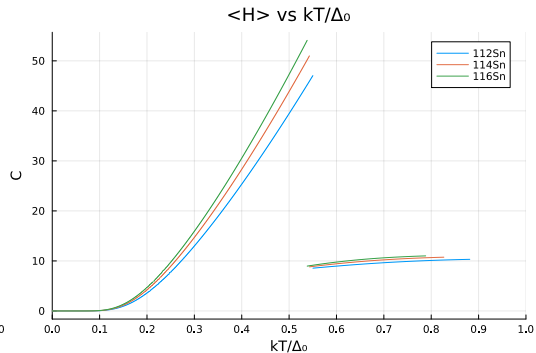


図 1:





結論

相転移は高温領域で確認できた。これはエネルギーが上昇することによる pairing の崩壊が原因だと考えられる。
比熱においても、相転移温度周辺で急激な変化が見られた。

課題

今回の解析では Woods-Saxon ポテンシャルと seniority pairing モデルを採用した。これらは計算が容易であるが、原子核が球対称であることや、同 j 殻内の pairing のみを考えていることから、実際の原子核における波動関数と相互作用を記述する上では、簡単にしすぎている部分も多く存在する。これらの課題を解決するためには、変形核にも対応できるような計算を行うのと同時に、相互作用についても Gogny 相互作用を採用するなど様々な発展が期待できる。また、今回は一粒子励起のみ考えていたが、集団励起と合わせて考えるとどのような挙動が観測されるのかということに対しても一定の興味がある。

参考文献

-  Mottelson Ben R. Bohr Aage.
原子核構造 1 単一粒子運動-.
講談社, 1979.
-  Alan L Goodman.
Finite-temperature hfb theory.
Nuclear Physics A, Vol. 352, No. 1, pp. 30–44, 1981.
-  Peter H. Schuck Peter Ring.
The Nuclear Many-Body Problem.
Springer-Verlag Berlin and Heidelberg GmbH & Co. K, 1980.
-  池田清美高田健次郎.
朝倉物理学大系 18 原子核構造論.
朝倉書店, 2002.