

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

- ▶ 原子核のエネルギースケールは $1 \text{ MeV} \simeq 10^{10} \text{ K}$ 程度。
- ▶ 地上ではこの熱平衡状態は実現せず、通常は $T = 0 \text{ K}$ とみなせる。
- ▶ しかし、恒星内部や超新星爆発などの極限環境では $T \sim 10^9 \text{ K}$ 以上になり、有限温度の影響を受ける。
- ▶ 有限温度の原子核の性質は、核融合反応などへの応用が期待される。
- ▶ 本研究では、 $^{100-132}\text{Sn}$ 核を対象に、Woods-Saxon ポテンシャルと seniority pairing モデルを用いた解析を行う。

Woods-Saxon ポテンシャル

- ▶
$$V(r) = \frac{V_0(< 0)}{1 + \exp((r - R)/a)}$$
- ▶ より現実的な原子核の性質を反映。
- ▶ 原子核の密度分布と同じ形状を持つ。
- ▶ パラメータ：
 - ▶ R : 原子核の半径
 - ▶ a : 表面のぼやけ

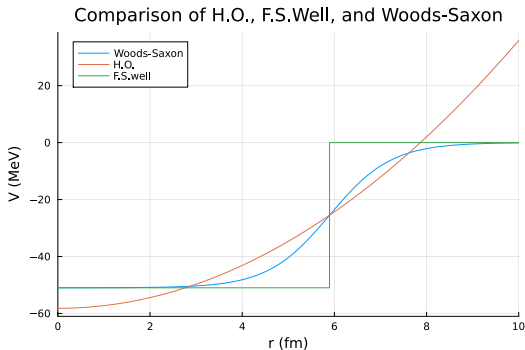


図 1: 各ポテンシャルの比較

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、単粒子 Hamiltonian を定義：

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

ここで、 T_{HO} は

$$T_{\text{HO}} = \hbar\omega \left(2n + l + \frac{3}{2} \right) \quad : \hbar\omega = 41/A^{-1/3}$$

- ▶ ポテンシャル項：

$$U(r) = u_0 f(r) + u_{ls} r_0^2 \frac{1}{r} \frac{df(r)}{dr} \mathbf{l} \cdot \mathbf{s} + U_{\text{Coul}}(r) \frac{1 - \tau}{2} - \frac{1}{2} M \omega^2 r^2$$

$$f(r) = -\frac{1}{1 + \exp\left(\frac{r-R}{a}\right)}$$

- ▶ この Hamiltonian を対角化し、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 と quasi-spin 演算子 S_{j+} を用いて定義：

$$H' = \sum_j \epsilon_j N_j - g S_+ S_-$$

ここで、

$$S_+ \equiv \sum_j S_{j+}, \quad S_- \equiv (S_+)^{\dagger}$$

- ▶ j は $N = 50 \sim 82$ を満たす軌道を指す。

BCS 理論

- ▶ 引力による対相関では、 $J = 0$ の対が多数の準位に分布。
- ▶ 多様な分布が可能なため、seniority 数（未ペア粒子数）が低い状態で表されるが、多くの独立状態が存在。
- ▶ これを説明する理論として、超伝導を記述する BCS 理論が採用される [1](池田、高田)。
- ▶ 基底状態は変分法的に求められ、超伝導状態として記述される。
- ▶ BCS 基底状態：

$$|\text{BCS}\rangle = \prod_{k>0} \left(u_k + v_k a_k^\dagger a_{\bar{k}}^\dagger \right) |0\rangle$$

BCS 方程式

- ▶ BCS パラメータ u_k, v_k は、単粒子エネルギー ϵ_k 、化学ポテンシャル λ 、ギャップ Δ を用いて表される [2](Ring, Schuck) :

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

- ▶ これらのパラメータを決定する方程式 :

$$\Delta = g \sum_{k>0} u_k v_k \quad (\text{ギャップ方程式}) \quad (1)$$

$$N = 2 \sum_{k>0} v_k^2 \quad (\text{粒子数方程式}) \quad (2)$$

有限温度 BCS 理論 1/2

文献 [3](Goodman,1981) を参考にした。

- ▶ 有限温度では、粒子は熱力学的分布に従い、Fermi 分布：

$$f_i = \frac{1}{1 + \exp(\beta E_i)}$$

を用いる。

- ▶ ペアリングテンソル t を求める式：

$$t = \tilde{U} f V^* + V^\dagger (1 - f) U \quad : U = \begin{pmatrix} u_i & 0 \\ 0 & u_i \end{pmatrix}, V = \begin{pmatrix} 0 & -v_i \\ v_i & 0 \end{pmatrix}, f = \begin{pmatrix} f_i & 0 \\ 0 & f_i \end{pmatrix}$$

有限温度 BCS 理論 2/2

- ▶ 密度行列を求める式：

$$\rho = \tilde{U} f U^* + V^\dagger (1 - f) V$$

- ▶ 以上より、BCS 方程式は以下のように修正される：

$$\Delta = g \sum_{k>0} u_k v_k (1 - 2f_k) \quad (\text{ギャップ方程式}) \quad (3)$$

$$N = 2 \sum_{k>0} [v_k^2 + (u_k^2 - v_k^2) f_k] \quad (\text{粒子数方程式}) \quad (4)$$

計算手法の概要

▶ ステップ 1: 単粒子エネルギーの計算

- ▶ Woods-Saxon ポテンシャルを用い、シュレーディンガー方程式を数値的に解く。
- ▶ 対角化により単粒子準位を求める。

▶ ステップ 2: pairing strength g の決定

- ▶ seniority モデルを用い、 g を計算。

▶ ステップ 3: 有限温度 BCS 計算

- ▶ ギャップ方程式と粒子数方程式を自己無撞着に解く。
- ▶ Fermi 分布を導入し、温度依存性を考慮。

ポテンシャルパラメータと波動関数

- ▶ 波動関数は極座標調和振動子波動関数 ψ_{nlj} を採用する。
- ▶ ポテンシャルパラメータ u_0, u_{ls} を設定し、ポテンシャルを決定する。
- ▶ パラメータ：

$$r_0 = 1.27, \quad R = r_0 A^{1/3}, \quad a = 0.67 \quad [\text{fm}] \quad (5)$$

$$u_0 = \left(-51 + 33 \frac{N-Z}{A} \right), \quad u_{ls} = \left(22 - 14 \frac{N-Z}{A} \right) \quad [\text{MeV}] \quad (6)$$

- ▶ この波動関数を基底に用い、ハミルトニアンを対角化して単粒子エネルギーを求める。

ギャップエネルギーの計算

- ▶ 偶奇質量差からギャップエネルギー Δ を求める：

$$\Delta = \frac{1}{2} \left(E_{g.s.}^{(N+1)} + E_{g.s.}^{(N-1)} - 2E_{g.s.}^{(N)} \right)$$

- ▶ 基底エネルギーと結合エネルギーの関係：

$$E_{g.s.}^{(N)} = -B(N) + \text{Const.}$$

- ▶ 結合エネルギーの表式：

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

Parameter	Value
a_v	15.56
a_s	17.23
a_A	23.285
a_c	0.697

表 1: 結合エネルギーパラメータ

化学ポテンシャルとペアリング強度

- ▶ 化学ポテンシャル λ と pairing strength g は、BCS 方程式を用いて求める。
- ▶ 簡単のため、ギャップ Δ_k はすべての k に対して等しいと仮定。

$$\Delta = \frac{g}{2} \sum_{k>0} \frac{\Delta}{\sqrt{(\epsilon_k - \lambda)^2 + \Delta^2}} \quad (7)$$

$$N = \sum_{k>0} \left(1 - \frac{\epsilon_k - \lambda}{\sqrt{(\epsilon_k - \lambda)^2 + \Delta^2}} \right) \quad (8)$$

- ▶ これを満たす λ, g を数値的に求める。

有限温度 BCS 方程式

- ▶ $T = 0$ の g を用い、有限温度 BCS 方程式を解く。
- ▶ ギャップ方程式と粒子数方程式：

$$\Delta = \frac{g}{2} \sum_{k>0} \Delta \frac{1 - 2f_i}{\sqrt{(\epsilon_k - \lambda)^2 + \Delta^2}} \quad (9)$$

$$N = \sum_{k>0} \left[1 - \frac{(\epsilon_k - \lambda)(1 - 2f_i)}{\sqrt{(\epsilon_k - \lambda)^2 + \Delta^2}} \right] \quad (10)$$

- ▶ ここで、Fermi 分布：

$$f_i = \frac{1}{1 + \exp(\beta E_i)}$$

エネルギー期待値の計算

- ▶ 温度変化に対するエネルギー期待値：

$$\langle H - \lambda N \rangle = \sum_{k>0} \frac{\epsilon_k - \lambda}{2} \left[1 - \frac{\epsilon_k - \lambda}{E_k} \tanh \left(\frac{E_k}{2T} \right) \right] - \frac{\Delta^2}{G},$$

$$E_k = \sqrt{(\epsilon_k - \lambda)^2 + \Delta^2}.$$

- ▶ ここでも、 v_k, u_k は BCS 方程式の解から求める。
- ▶ 比熱 C も温度依存性を評価 ($H' = H - \lambda N$)：

$$C = \frac{d\langle H' \rangle}{dT}$$

Δ の質量数依存性

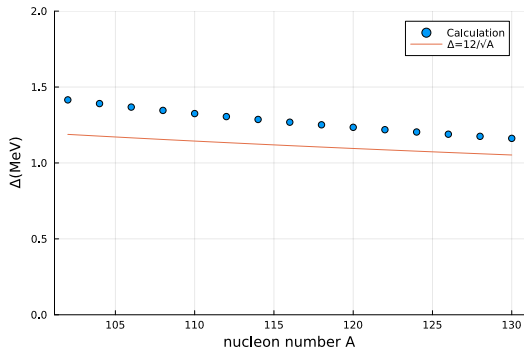


図 3: Δ と核子数 A

ここで近似式 $\Delta = 12A^{-1/2}$ は文献 [4](Bohr,Mottelson) より。

pairing gap の温度依存性

以下で用いられている Δ_0 はそれぞれの核種の gap の $T = 0$ での値である。

- ▶ 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。

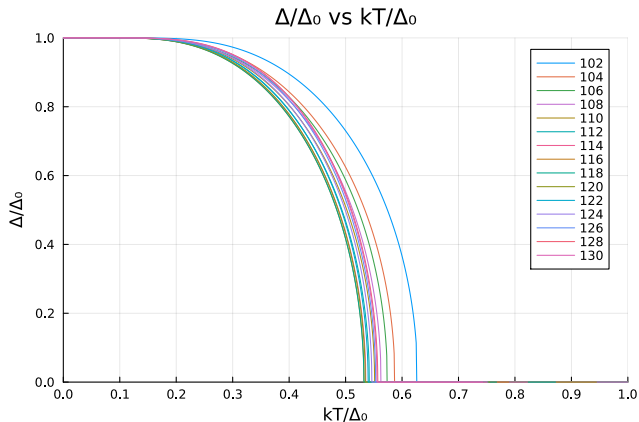


図 4: pairing gap の温度変化

エネルギーと比熱の温度依存性

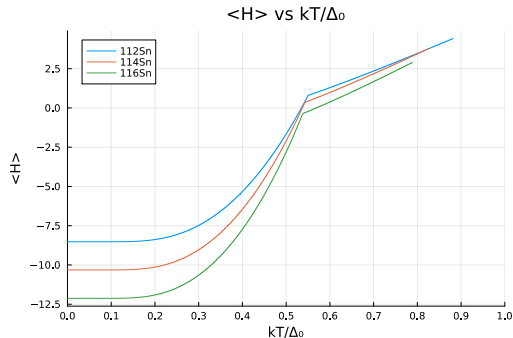


図 5: エネルギー期待値の温度変化

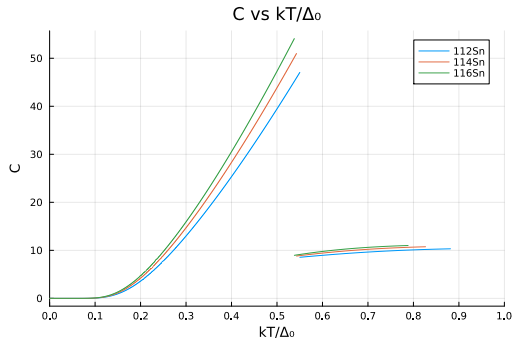


図 6: 比熱の温度変化

結論

- ▶ 高温領域で pairing gap の崩壊が確認され、**相転移** が発生。
- ▶ エネルギーが上昇すると pairing 効果が弱まり、ギャップが消失。
- ▶ **比熱の温度依存性** においても、相転移点付近で急激な変化が見られた。
- ▶ これらの結果は、超伝導の BCS 理論と類似した傾向を示している。

課題

- ▶ 本解析では Woods-Saxon ポテンシャルと seniority pairing モデルを採用。
- ▶ これらの手法は計算が容易であるが、以下の簡略化がある：
 - ▶ 原子核が球対称であると仮定
 - ▶ 同じ j 殻内の pairing のみを考慮
- ▶ より現実的な記述のため、以下の発展が期待される：
 - ▶ 変形核にも対応した計算手法の導入
 - ▶ Gogny 相互作用の採用による相互作用の改良
- ▶ また、本研究では一粒子励起のみを考慮したが、**集団励起** との関連も興味深い研究課題である。

参考文献

- [1] 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.
- [2] Peter Ring Peter H. Schuck.
The Nuclear Many-Body Problem.
Springer-Verlag Berlin and Heidelberg GmbH & Co. K, 1980.
- [3] Alan L Goodman.
Finite-temperature hfb theory.
Nuclear Physics A, Vol. 352, No. 1, pp. 30–44, 1981.
- [4] Bohr Aage Mottelson Ben R.
原子核構造 1 単一粒子運動-.
講談社, 1979.

BCS 方程式の導出

- ▶ ハミルトニアン:

$$H = 2 \sum_{k>0} (\epsilon_k - \lambda) N_k - g S_+ S_-$$

- ▶ 変分法による基底状態 (パラメータ u_k, v_k) の決定:

$$\delta \langle \text{BCS} | H | \text{BCS} \rangle = 0$$

- ▶ BCS 方程式にパラメータを代入:

$$\Delta = g \sum_{k>0} u_k v_k \tag{11}$$

$$N = 2 \sum_{k>0} v_k^2 \tag{12}$$

有限温度への拡張 1/3

グランドカノニカル分布によって温度を導入する。

▶ 自由エネルギーの定義

$$F = \langle H - \lambda N \rangle - TS$$

▶ エントロピーの表現

$$S = -k_B \sum_k [f_k \ln f_k + (1 - f_k) \ln(1 - f_k)]$$

有限温度への拡張 2/3

- ▶ Fermi 分布を考慮した方程式

$$f_k = \frac{1}{1 + \exp(\beta E_k)}$$

ここで、 $E_k = \sqrt{(\epsilon_k - \lambda)^2 + \Delta^2}$

- ▶ 温度依存性を持つ BCS 方程式

$$\Delta = g \sum_{k>0} u_k v_k (1 - 2f_k) \quad (13)$$

$$N = 2 \sum_{k>0} \left[v_k^2 + (u_k^2 - v_k^2) f_k \right] \quad (14)$$

有限温度への拡張 3/3 その1

▶ ハミルトニアンを表式

$$H' = \sum_k (\epsilon_k - \lambda) a_k^\dagger a_k$$

$$-g \sum_{kk' > 0} a_k^\dagger a_{\bar{k}'}^\dagger a_{\bar{k}} a_k$$

有限温度への拡張 3/3 その2

- ▶ 個数演算子の期待値 $\langle a_k^\dagger a_k \rangle$:

$$\langle a_k^\dagger a_k \rangle = v_k^2 + (u_k^2 - v_k^2) f_k$$

自由エネルギーとエントロピーの温度依存性

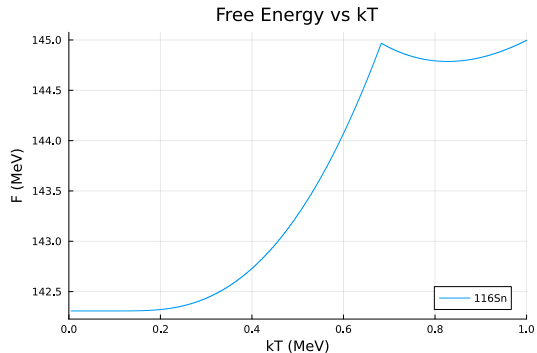


図 7: 自由エネルギーの温度変化

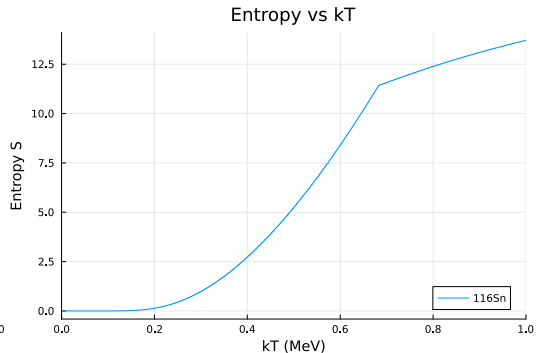


図 8: エントロピーの温度変化

他の核種における温度変化

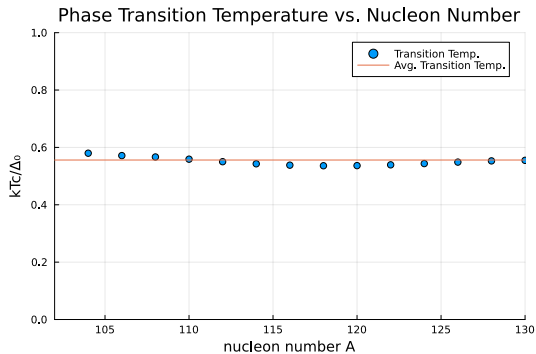


図 9: 相転移温度 $k_B T_c$ と核子数 A

全核種の相転移温度

以下にはギャップ方程式が非自明な解 $\Delta \neq 0$ が消失する温度を示す。

核種	$k_B T_C$	核種	$k_B T_C$
^{102}Sn	0.30535 MeV	^{116}Sn	0.6826 MeV
^{104}Sn	0.39563 MeV	^{118}Sn	0.70309 MeV
^{106}Sn	0.47009 MeV	^{120}Sn	0.71904 MeV
^{108}Sn	0.53269 MeV	^{122}Sn	0.73118 MeV
^{110}Sn	0.58351 MeV	^{124}Sn	0.74009 MeV
^{112}Sn	0.6242 MeV	^{126}Sn	0.74631 MeV
^{114}Sn	0.6567 MeV	^{128}Sn	0.7503 MeV
		^{130}Sn	0.75242 MeV

表 2: 核種ごとの相転移温度 $k_B T_c$