

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

千葉大学理学部物理学科
21S2008K 根岸颯

2025 年 2 月

目次

1	序論	3
2	理論	3
2.1	3次元極座標調和振動子	3
2.2	Woods-Saxon potential と LS 相互作用	5
2.3	seniority pairing	7
2.4	BCS 理論	8
3	手法	8
4	結果と考察	8
5	結論	8
6	付録	8
6.1	合流型超幾何関数周辺	8

1 序論

原子核における energy scale は $1\text{MeV} \simeq 10^{10}\text{K}$ 程度であり、地上でこのような熱平衡状態が実現されるとは考えられず、実際に通常扱う原子核は $T = 0$ にあると見なしても問題は生じない。しかし、恒星内部やその終焉時の極限環境下においては原子核においては有限温度の熱浴の下にあると考える事ができる。また、”核温度”と呼ばれる孤立した原子核の励起状態の統計的性質を調べるための概念も存在する。有限温度の原子核の性質も様々な場面に対して応用が期待される重要な概念である。ここでは $^{100-132}\text{Sn}$ 核を例に取り、Woods-Saxon potential と seniority model を用いた理解を試みる。

2 理論

2.1 3次元極座標調和振動子

本解析では、3次元極座標調和振動子の波動関数にスピンを含めた基底 $|i\rangle = \psi_{n\ell m}|s\rangle$ ($s = \pm 1$) を採用する。potential については中心力 potential を採用するため、角度方向の波動関数は省略する。このセクションでは主に文献 [4] を参考にした。中心力ポテンシャル $V(r)$ 内での Schrödinger 方程式は、

$$H\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}), \quad H = \frac{\mathbf{p}^2}{2M} + V(r), \quad \mathbf{p} = -i\hbar\nabla \quad (1)$$

であり、計算の結果により $r \neq 0$ のとき $\nabla^2 = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{1}{r^2} \mathbf{L}^2$ と表されるので、ハミルトニアンを書き直すと、

$$H = H_r + \frac{\hbar^2 \mathbf{L}^2}{2Mr^2}, \quad H_r = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + V(r) \quad (2)$$

であり、このように書くと分かる通り、 $[H, \mathbf{L}] = 0$ である。整理すると、 H, \mathbf{L}^2, L_z の同時固有状態が存在する。 \mathbf{L}^2, L_z の同時固有状態関数は球面調和関数 $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$ であるから、 H, \mathbf{L}^2, L_z の同時固有状態 $\psi(\mathbf{r})$ は、

$$\psi(\mathbf{r}) = R(r)Y_{\ell m}(\theta, \phi), \quad m = -\ell, -\ell+1, \dots, \ell-1, \ell \quad (3)$$

と書くことができる。このときの $R(r)$ の取り方によらず、 $\psi(\mathbf{r})$ は \mathbf{L}^2, L_z の固有状態であるから、 $\psi(\mathbf{r})$ が H の固有状態になるように $R(r)$ を決定する。 $\mathbf{L}^2 Y_{\ell m}(\theta, \phi) = \ell(\ell+1)Y_{\ell m}(\theta, \phi)$ より、 $H\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$ は

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2Mr^2} + V(r) \right) R_\ell(r) = ER_\ell(r) \quad (4)$$

と書く事ができる。式から E と $R(r)$ が決まり、 ℓ には依存するが m には依存しないことがわかる。両辺に r をかけると、 $u_\ell(r) = rR_\ell(r)$ と表せるため、

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2Mr^2} + V(r) \right) u_\ell(r) = Eu_\ell(r) \quad (5)$$

と表すことができ、これはポテンシャルが $U_\ell(r) = \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2Mr^2} + V(r)$ である $r \geq 0$ の 1次元 Schrödinger 方程式である。

調和振動子の場合には、 $V(r) = \frac{M\omega^2 r^2}{2}$ であるため、式 (5) は、

$$\left(\frac{d^2}{dq^2} - \frac{l(l+1)}{q^2} - q^2 + \frac{2E}{\hbar\omega} \right) u_\ell(q) = 0, \quad \text{ただし } q = \alpha r, \quad \alpha = \sqrt{\frac{M\omega}{\hbar}} \quad (6)$$

になる。波動関数の境界条件などを考えれば、 $u_\ell(q) = f(q)v_\ell(q)$, $f(q) = q^{\ell+1}e^{-q^2/2}$ と置くことができ、これを用いて式 (6) を計算すれば、

$$\frac{d^2 v_\ell}{dq^2} + \frac{2}{f} \frac{df}{dq} \frac{dv_\ell}{dq} + \left(\frac{1}{f} \frac{d^2 f}{dq^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{q^2} - q^2 + \frac{2E}{\hbar\omega} \right) v_\ell = 0 \quad (7)$$

である。 $\frac{df}{dq}$ や $\frac{d^2 f}{dq^2}$ の計算自体は単純であるので代入すれば、

$$\frac{d^2 v_\ell}{dq^2} + 2 \left(\frac{\ell+1}{q} - q \right) \frac{dv_\ell}{dq} - \left(2\ell+3 - \frac{2E}{\hbar\omega} \right) v_\ell = 0 \quad (8)$$

ここで $\rho = q^2$ と変数変換を行えば、

$$\frac{d}{dq} = \frac{d\rho}{dq} \frac{d}{d\rho} = 2\sqrt{\rho} \frac{d}{d\rho}, \quad \frac{d^2}{dq^2} = 4\sqrt{\rho} \frac{d}{d\rho} \sqrt{\rho} \frac{d}{d\rho} = 4 \left(\rho \frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{1}{2} \frac{d}{d\rho} \right) \quad (9)$$

であるから、これを用いて式 (8) を書き換えれば、

$$\rho \frac{d^2 v_\ell}{d\rho^2} + \left(\ell + \frac{3}{2} - \rho \right) \frac{dv_\ell}{d\rho} - \alpha v_\ell = 0, \quad \alpha \equiv \frac{1}{2} \left(\ell + \frac{3}{2} - \frac{E}{\hbar\omega} \right) \quad (10)$$

これは、 a, b を任意定数とした合流型超幾何微分方程式

$$\left(x \frac{d}{dx^2} + (b-x) \frac{d}{dx} - a \right) w(x) = 0 \quad b \neq -n, n = 0, 1, 2, \dots \quad (11)$$

において、 $a = \alpha, b = \ell + \frac{3}{2}$ とした時の解と一致する。そのため $u_\ell(0) = 0$ を満たす解は、合流型超幾何関数 $M(a, b, x)$ を用いて

$$u_\ell(q) = C q^{\ell+1} e^{-q^2/2} M(\alpha, \ell + 3/2, q^2) \quad (12)$$

になる。このとき $\alpha = -n = 0, -1, -2, \dots$ のとき、 $u_\ell(q) \xrightarrow{q \rightarrow \infty} 0$ になるため、エネルギー固有値は、

$$E_{n\ell} = \hbar\omega \left(2n + \ell + \frac{3}{2} \right) \quad (13)$$

求めることができる。

以上のことから波動関数 $\psi_{n\ell m}$ は、

$$\psi_{n\ell m}(\mathbf{r}) = \frac{u_{n\ell}(r)}{r} Y_{\ell m}(\theta, \phi), \quad u_{n\ell}(q) = A_{n\ell} q^{\ell+1} e^{-q^2/2} M(-n, \ell + 3/2, q^2) \quad (14)$$

である。ただし、 $q = ar = \sqrt{\frac{M\omega}{\hbar}} r$ である。規格化条件は $\rho = q^2$ とすると

$$\frac{A_{n\ell}^2}{2a} \int_0^\infty d\rho \rho^{\ell+1/2} e^{-\rho} (M(-n, \ell + 3/2, \rho))^2 = 1$$

である。このときの $A_{n\ell}$ の値は、

$$A_{n\ell} = \sqrt{2a \frac{\Gamma(\ell + n + 3/2)}{n! (\Gamma^2(\ell + 3/2))}} \quad (15)$$

である。 n は $u_{n\ell}(r)$ の節 (ノード) の個数である。

今回の問題設定では球対称ポテンシャル下での粒子状態を求めているため、動径方向の波動関数である

$$u_{n\ell}(q) = \sqrt{2a \frac{\Gamma(\ell + n + 3/2)}{n!(\Gamma^2(\ell + 3/2))}} q^{\ell+1} e^{-q^2/2} M(-n, \ell + 3/2, q^2) \quad (16)$$

を計算に用いる。ただし、 $q = ar$, $a = \sqrt{\frac{M\omega}{\hbar}}$ である。

2.2 Woods-Saxon potential と LS 相互作用

2.1 では簡単な model として調和振動子モデルを用いたが、この potential では原子核の magic number に代表される特徴的な性質を十分に記述できない。しかしながら 2 体以上の相互作用を potential に含めてしまうとやや複雑になりすぎてしまう。そのため、potential を簡単にするために、それぞれの粒子が独立に運動しているとして平均場近似を行う。この際、調和振動子モデルよりも正確に特徴を捉えることができる Woods-Saxon potential と LS(スピン軌道) 相互作用を導入する。このセクションでは主に文献 [1], [3] を参考にした。

Woods-Saxon potential は調和振動子モデルで異なる ℓ の状態が縮退しているという部分を解決した。具体形を以下に示す。

$$V_{\text{WS}}(r) = \frac{u_0}{1 + \exp((r - R)/a)}, \quad u_0 = \left(-51 + 33 \frac{N - Z}{A} \right) \quad (17)$$

ここで $a = 0.67\text{fm}$, $R = r_0 A^{1/3}$, $r_0 = 1.27\text{fm}$ である。この potential を用いることで、異なる ℓ の状態の縮退が完全に解ける。その数値計算の結果を下に示す。

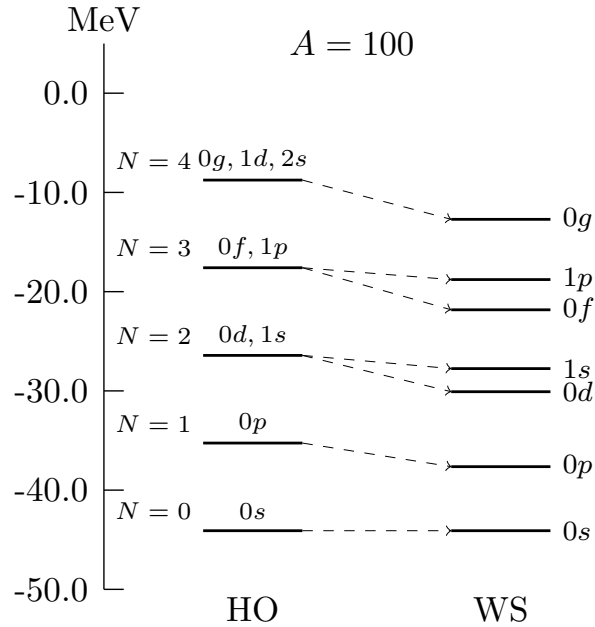


図 1 核子数 $A = 100$ のときの調和振動子 (HO) モデル (右側) と Woods-Saxon potential (WS) (左側) の比較。

ただし、 $N = 2n + \ell$ 。また $0s$ や $1p$ などは固有状態 $n\ell$ を表現していて $\ell = 0, 1, 2, \dots$ に対して s, p, d, f, g, \dots が対応する。

このポテンシャルの設定では ℓ の縮退は完全に解けているが、それぞれの核子のスピンは考慮できていない。そうした問題を解決するために 1949 年、Mayer と Jansen はそれぞれ独立に、スピン軌道力 (LS 相互作用) がポテンシャルに含まれているとすれば、様々な魔法数を説明することができることを発見した。このときに導入したポテンシャル $U(r)$ は、

$$U(r) = V(r) + \lambda_{\ell s} \frac{1}{r} \frac{\partial V}{\partial r} \boldsymbol{\ell} \cdot \mathbf{s} \quad (18)$$

と表される。ここで、 $\boldsymbol{\ell} \cdot \mathbf{s}$ について考えるが、全角運動量 $\mathbf{j} = \boldsymbol{\ell} + \mathbf{s}$ を用いれば $\mathbf{j}, \boldsymbol{\ell}, \mathbf{s}$ を用いて $2\boldsymbol{\ell} \cdot \mathbf{s} = \mathbf{j}^2 - \boldsymbol{\ell}^2 - \mathbf{s}^2$ であるから、 $\mathbf{j}^2, \boldsymbol{\ell}^2, \mathbf{s}^2$ の同時固有状態であれば H の固有状態となる。つまり波動関数は、 $|i\rangle = \psi_{n\ell m} |s\rangle$ ($s = \pm 1$) であれば良い。このとき、 $\mathbf{j}^2, \boldsymbol{\ell}^2, \mathbf{s}^2$ の固有値はそれぞれ、

$$\boldsymbol{\ell}^2 |i\rangle = \ell_i(\ell_i + 1) |i\rangle \quad \mathbf{s}^2 |i\rangle = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) |i\rangle \quad \mathbf{j}^2 |i\rangle = j_i(j_i + 1) |i\rangle \quad (19)$$

と表現される。ただし $j = \ell \pm 1/2$ である。以上のことから、LS 相互作用の大きさ $V_{\ell j}$ は

$$V_{\ell j} = \frac{1}{2} \left(j(j+1) - \ell(\ell+1) - \frac{3}{4} \right) = \begin{cases} \frac{\ell}{2}, & j = \ell + \frac{1}{2} \\ -\frac{\ell+1}{2}, & j = \ell - \frac{1}{2} \end{cases} \quad (20)$$

となるから、異なるスピンの値でエネルギー固有値が分離することが確認できた。また、それぞれの状態は固有状態 $n\ell$ に付け加えて $n\ell_j$ で指定される。また、このときそれぞれの軌道に入る陽子または中性子の数は $2j+1$ 個である。例として $0s_{1/2}$ 軌道には $2(1/2) + 1 = 2$ 個、 $0g_{9/2}$ 軌道には $2(9/2) + 1 = 10$ 個の陽子または中性子が入る。

以上のことから固有状態が n, ℓ, j で指定されることが確認できた。よって Schrödinger 方程式は、

$$H |i\rangle = \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2M} + V_{\text{ws}}(\mathbf{r}) + a_{\ell s} V_{\ell j} \right) |i\rangle = E |i\rangle \quad (21)$$

と表されることがわかった。 $a_{\ell s}$ は $a_{\ell s} = 22 - 14(N - Z)/A$ として与えられる。

本研究で用いるハミルトニアン $H = \mathbf{p}^2/2M + U(r)$ で、

$$U(r) = u_0 f(r) + u_{\ell s} r_0^2 \frac{1}{r} \frac{df(r)}{dr} \boldsymbol{\ell} \cdot \mathbf{s} + U_{\text{Coul}}(r) \frac{1 - \tau}{2}, \quad f(r) = \frac{1}{1 + \exp((r - R)/a)} \quad (22)$$

ただし、 $r_0 = 1.27\text{fm}$, $R = r_0 A^{1/3}\text{fm}$, $a = 0.67\text{fm}$ であり、ポテンシャルの係数 $u_0, u_{\ell s}$ の値は $u_0 = -51 + 33(N - Z)/A$, $u_{\ell s} = 22 - 14(N - Z)/A$ を採用した [1]。 $U_{\text{Coul}}(r)$ は半径 R の一様帯電球の与える potential で近似し、アイソスピンの z 成分 τ によって陽子 ($\tau = -1$) と中性子 ($\tau = +1$) を区別する。

この方程式を数値的に解いたものを下に示す。実際に魔法数をうまく表現できていることが確かめられる。

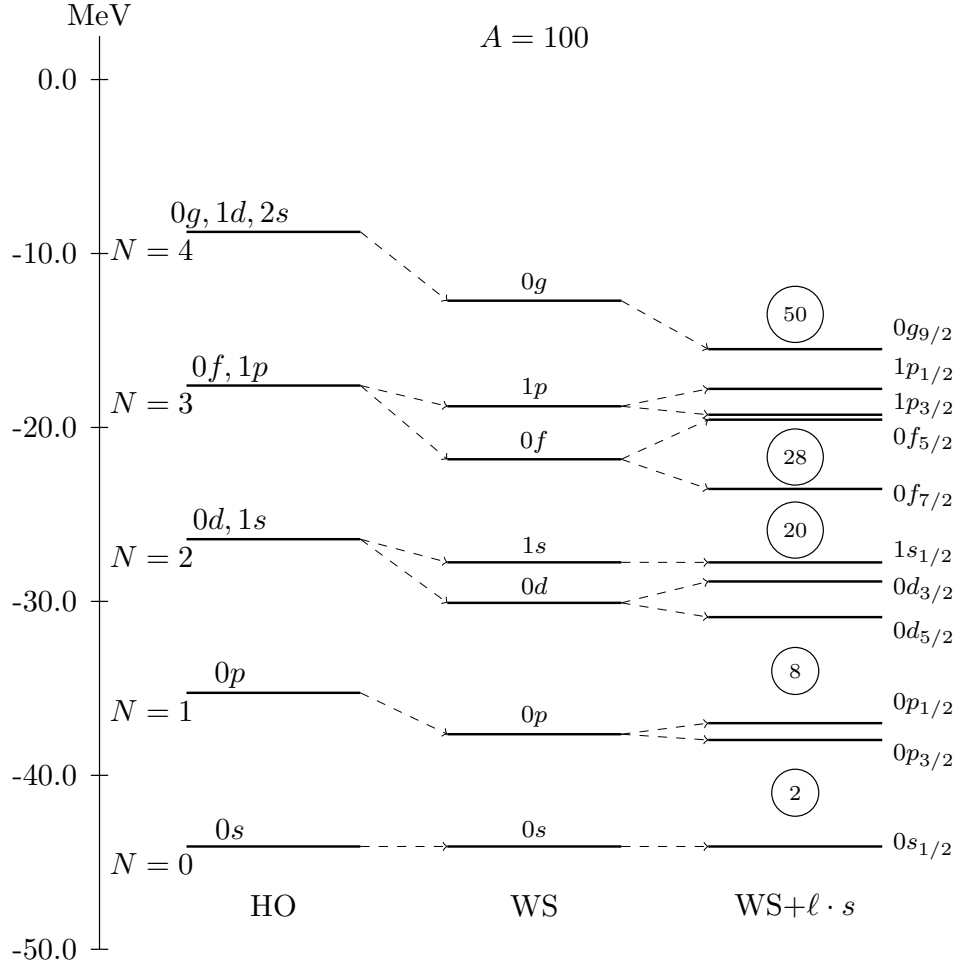


図2 核子数 $A = 100$ のときの比較。
調和振動子 (HO) モデル (右側), Woods-Saxon potential (WS) (中央), WS と LS 相互作用 (右側) の比較。

2.3 seniority pairing

ペアリング相互作用は核子間の相互作用の短距離部分によるものであり、特に seniority pairing は ($I = 0$) に結合したペアが影響を受ける最も単純なペアリングモデルの 1 つである。このセクションは [2] を参考にした。seniority pairing を採用した時のハミルトニアンは ϵ_j を (22) で求めた単粒子エネルギーとして

$$H = \sum_j \epsilon_j N_j - g S_+ S_-; \quad S_+ \equiv \sum_j S_{j+}, S_- \equiv (S_+)^{\dagger} \quad (23)$$

と与えられる。 S_{j+} は j に対する quasi-spin operator である。

quasi-spin operator は生成消滅演算子 a_j^\dagger, a_j を用いて以下のように定義され、

$$S_{j+} = a_j^\dagger a_{-j}^\dagger \quad (24)$$

$$S_{j-} = a_{-j} a_j \quad (25)$$

$$S_0 = \frac{1}{2} (a_j^\dagger a_j + a_{-j}^\dagger a_{-j} - 1) \quad (26)$$

これらは以下の角運動量交換関係を満たす。

$$[S_{j+}, S_{j-}] = 2S_0$$

$$[S_0, S_{j+}] = S_{j+}$$

$$[S_0, S_{j-}] = -S_{j-}.$$

ここではペアリングによるエネルギー変化には注目せず、BCS 理論を用いてペアリングの強さである g の値を決定し原子核の相転移について考えていく。

2.4 BCS 理論

2.4.1 絶対零度の場合

2.4.2 有限温度の場合

3 手法

4 結果と考察

5 結論

参考文献

- [1] Mottelson Ben R. Bohr Aage. 原子核構造 1 単一粒子運動-. 講談社, 1979.
- [2] Peter H. Schuck Peter Ring. *The Nuclear Many-Body Problem*. Springer-Verlag Berlin and Heidelberg GmbH & Co. K, 1980.
- [3] 倉澤 治樹. 原子核物理学, 2000. 2024 年 10 月アクセス.
- [4] 倉澤 治樹. 量子力学, 2020. 2024 年 10 月アクセス.

6 付録

6.1 合流型超幾何関数周辺