1　有限温度の BCS 理論の導出の概要

grand canonical 分布を用いて平衡状態を考える。(温度 T, 化学ポテンシャル μ は Const.)

グランドポテンシャル $\Omega = E - TS - \mu N$ から変分法を用いて密度 op.D を定義し、$\mathrm{Tr}\, D = 1$ という性質で、これを用いれば分配関数と密度演算子は以下のように決められる。

$$D = Z^{-1} e^{-\beta(H-\mu N)} \tag{1}$$

$$Z = \mathrm{Tr}\left[e^{-\beta(H-\mu N)}\right] \tag{2}$$

また演算子 O の期待値は、

$$\langle O \rangle = \mathrm{Tr}\, DO \tag{3}$$

である。これが HFB 近似のもとでは quasi-particle Hamiltonian $\mathrm{H}_{\mathrm{HFB}}$ が quasi-particle 真空エネルギー E_0,quasi-particle エネルギー E_i, quasi-particle creation op.$a_i^\dagger$ を使って $\mathrm{H}_{\mathrm{HFB}} = E_0 + \sum_i E_i a_i^\dagger a_i$ と表すことができることから、HFB 密度演算子と HFB 分配関数は

$$D_{\mathrm{HFB}} = Z_{\mathrm{HFB}}^{-1} \exp\left(-\beta \sum_i E_i \hat{n}_i\right) \tag{4}$$

$$Z_{\mathrm{HFB}} = \mathrm{Tr}\left[\exp\left(-\beta \sum_i E_i \hat{n}_i\right)\right] \tag{5}$$

ただし、$\hat{n}_i = a_i^\dagger a_i$。この分配関数を展開すれば、

$$Z_{\mathrm{HFB}} = \mathrm{Tr}\left[\exp\left(-\beta \sum_i E_i \hat{n}_i\right)\right] \tag{6}$$

$$= \sum_{n_i} \prod_i e^{-\beta E_i n_i} \tag{7}$$

となるが、quasi-particle 近似において $n_i = 0, 1$ であるから、$\hat{n}_i^2 = \hat{n}_i$ より、

$$Z = \prod_i \left(1 + e^{-\beta E_i}\right) \tag{8}$$

と展開できる。これを使えば密度演算子は

$$D_{\mathrm{HFB}} = Z_{\mathrm{HFB}}^{-1} \prod_i \left[e^{-\beta E_i} \hat{n}_i + (1 - \hat{n}_i)\right] \tag{9}$$

となる。ここは $n_i = 0, 1$ を主に用いた。Fermi 分布関数 $f_i = 1/(1 + e^{\beta E_i})$ を使えば、

$$D_{\mathrm{HFB}} = \prod_i \left[f_i \hat{n}_i + (1 - f_i)(1 - \hat{n}_i)\right] \tag{10}$$

ここまでは quasi-particle を使っていたので変換式 $a_i^\dagger = \sum_j (U_{ij} c_j^\dagger + V_{ij} c_j)$ から逆変換を行うことで単粒子の場合の密度とペアリングテンソルを求める。式 (3) からそれぞれ、

$$\rho_{ij} = \langle c_j^\dagger c_i \rangle = \mathrm{Tr}\, D c_j^\dagger c_i \tag{11}$$

$$t_{ij} = \langle c_j c_i \rangle = \mathrm{Tr}\, D c_j c_i \tag{12}$$

これを逆変換を行いながら $\bar{\rho}_{ij} = \langle a_j^\dagger a_i \rangle = \mathrm{Tr}\, D a_j^\dagger a_i = \delta_{ij} f_i, \bar{t}_{ij} = \langle a_j a_i \rangle = 0$ を用いて計算を進めると、

$$\rho = \tilde{U} f U^* + V^\dagger (1-f) V \tag{13}$$

$$t = \tilde{U} f V^* + V^\dagger (1-f) U \tag{14}$$

のようになる。これは $T = 0$ のときに $f = 0$ になることから普段の BCS 方程式と一致することがわかる。また、このときの粒子、空孔状態のエントロピー S と粒子数 N は

$$S = -k \sum_i [f_i \ln f_i + (1-f_i) \ln(1-f_i)] \tag{15}$$

$$N = \mathrm{Tr}\, \rho \tag{16}$$

その他の手続きは $T = 0$ のときとあまり変わらずに、Hamiltonian が、

$$H = \sum_i \epsilon_i c_i^\dagger c_i - \sum_{ij>0} G_{ij} c_i^\dagger c_{\bar{i}}^\dagger c_{\bar{j}} c_i \tag{17}$$

としたときに、$E_i = E_{\bar{i}} = [(\epsilon_i - \mu)^2 + \Delta_i]^{1/2}$ を用いて、

$$u_i^2 = \frac{1}{2}(1 + \epsilon_i / E_i) \tag{18}$$

$$v_i^2 = \frac{1}{2}(1 - \epsilon_i / E_i) \tag{19}$$

これを U, V に代入してペアリングテンソルを計算すれば、

$$t_{i\bar{i}} = u_i v_i (1 - 2f_i) \tag{20}$$

$$u_i v_i = -\frac{\Delta_i}{2E_i} \tag{21}$$

$$1 - 2f_i = \tanh(1/2\beta E_i) \tag{22}$$

よって gap 方程式は $\Delta_i = -\sum_{k>0} G_{ik} t_{k\bar{k}}$ より、

$$\Delta = \frac{1}{2} \sum_{j>0} G \frac{\Delta}{E_j} \tanh(1/2\beta E_j) \tag{23}$$

これは $T = 0$ のときに $\tanh = 1$ となり一致する。^{116}Sn の時の計算結果と温度は別紙に示す。

研究名は有限温度下における Sn 核の超流動相転移解析：Woods-Saxon ポテンシャルとシニオリティペアリングモデルの応用

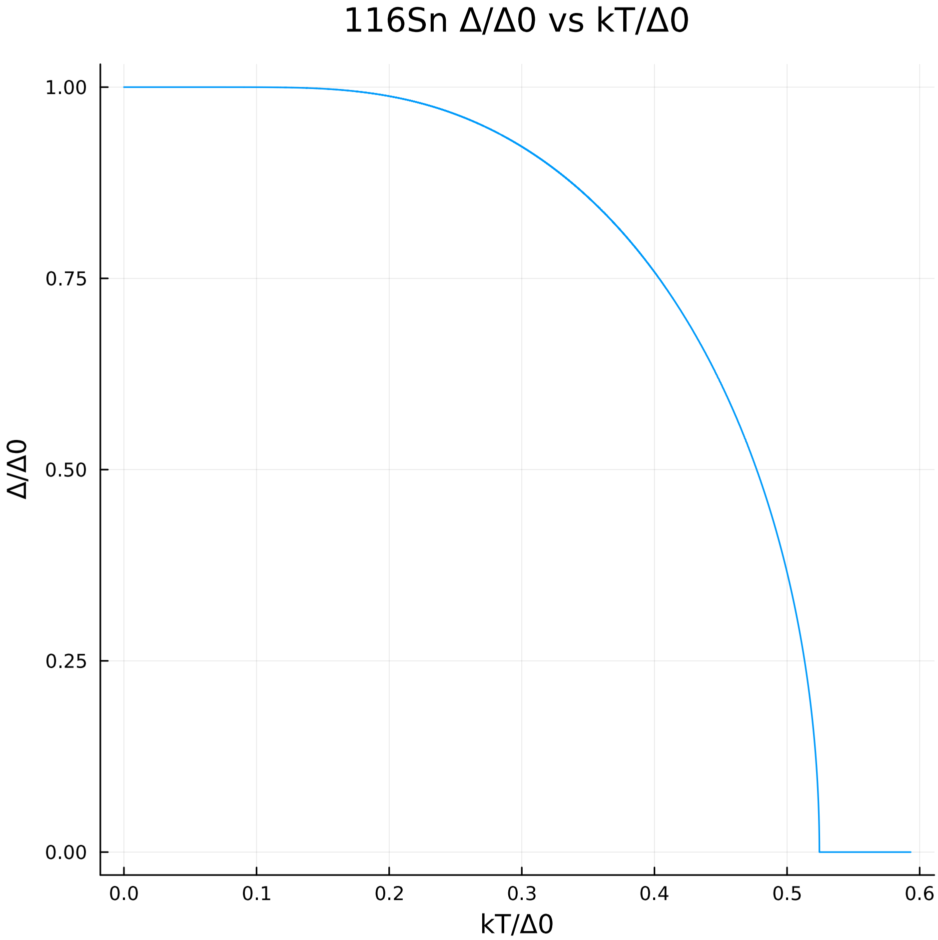

図 1　Pairing gap versus temperature in ^{116}Sn.$G = 0.116, \lambda = -9.519$MeV

$kT \simeq 0.6623[\mathrm{MeV}]$ より $T \simeq 7.69 \times 10^9[\mathrm{K}]$