

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 4 月 11 日

要旨

原子核の極限環境下での性質は、核融合反応をはじめとする様々な分野において重要な研究対象であり、その中でも、超流動相から常流動相への相転移現象は中性子星の内部構造の理解において一定の役割を果たす。本研究では、陽子数が $Z = 50$ で安定している Sn 原子核の同位体における超流動相から常流動相への相転移を、Woods-Saxon ポテンシャルと seniority ペアリングモデルを用いて解析する。まず、Woods-Saxon ポテンシャルを用いて基底状態のエネルギーを計算し、次に seniority ペアリングモデルを適用することでペアリングの強さを評価した。さらに、ギャップ方程式や粒子数保存の条件を計算することで、pairing gap の温度依存性を明らかにした。解析の結果、 $^{102-130}\text{Sn}$ 核において pairing gap の値が減少し、最終的に 0 となることが確認された。これは、超流動相から常流動相への相転移であると考えられる。

目次

要旨	1
第 1 章 序論	3
1.1 研究の背景	3
1.2 研究の目的	3
1.3 本論文の構成	3
第 2 章 理論	4
2.1 WS ポテンシャル	4
2.2 seniority ペアリングモデルと対相関	5
2.3 BCS 理論	6
2.4 有限温度 BCS 理論への拡張	8
第 3 章 数値計算方法	9
3.1 単粒子ハミルトニアンの対角化	9
3.2 ペアリング強度・化学ポテンシャルの計算	10
3.3 温度依存性の計算手法	10
第 4 章 結果と考察	11
4.1 ペアリング強度、化学ポテンシャルの核子数依存性	11
4.2 超流動・常流動相転移	12
第 5 章 結論	17
5.1 本研究のまとめ	17
5.2 今後の課題	17
参考文献	18
付録 A 有限温度 BCS 理論の詳細な導出	19
付録 B 自由エネルギーとエントロピーの温度変化	21

第1章

序論

1.1 研究の背景

原子核のエネルギー スケールは MeV であり、温度との換算をすれば $k_B^{-1} \simeq 1.16 \times 10^4 \text{ K/eV}$ を用いて $1\text{MeV} \sim 10^{10}\text{K}$ であると概算できる。実際の地上ではこの温度スケールの熱平衡状態は実現しないため、通常は $T = 0\text{K}$ とみなすことができる。しかし、恒星内部や超新星爆発等の極限環境下では $T \simeq 10^9\text{K}$ 以上になるため、熱力学的な寄与を考えなければならなくなる。

1.2 研究の目的

ペアリング相関は原子核のエネルギー準位構造に大きな影響を与えており、本研究では、 $100\sim130\text{Sn}$ 核における超流動から常流動への相転移を解析することを目的とする。具体的には、Woods-Saxon ポテンシャルと seniority ペアリングモデルを用いたハミルトニアンを構築し、BCS 理論およびその有限温度拡張を適用することで、pairing gap の温度依存性を明らかにする。

1.3 本論文の構成

本論文の構成は以下のようになっている。第 2 章では、本研究の理論的な枠組みとして Woods-Saxon ポテンシャルと seniority ペアリングモデル、そして通常の BCS 理論と有限温度における BCS 理論について述べる。第 3 章では、数値計算に用いた方程式とその適用方法について詳しく説明する。第 4 章では、計算結果を示して相転移の特性について考察を行う。第 5 章では、本研究のまとめを行いそこから考えることができる結論と今後の研究の課題について述べる。

第 2 章

理論

この章では、文献 [1], [2] を参考にした。

2.1 WS ポテンシャル

核子の多体系である原子核のハミルトニアンは、相互作用を 2 核子中に限定した場合、

$$H = \sum_i \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{ij} v_{ij} \quad (2.1)$$

と表せる。ここで \mathbf{p}_i は核子 i の運動量、 v_{ij} は核子 i と j の相互作用を表す。多体問題であるため、 H の固有状態と固有値を厳密に求めるることは不可能である。そのため、多少の近似をいれる必要があるが、最も単純な近似が平均場近似である。一体ポテンシャルを V とすれば、

$$H = \sum_i \left(\frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + V_i \right) + \Delta H, \Delta H = \frac{1}{2} \sum_{ij} v_{ij} - V_{ij}$$

と書き直せるが、適当な V を選べば 2 体相互作用を十分に取り込めると考えられるため、 ΔH を無視した

$$H \simeq \sum_i \left(\frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + V_i \right) \quad (2.2)$$

で近似を行うことができる。 (2.1) のハミルトニアンは相互作用を通してそれぞれの核子間で影響を与え合う。しかし、 (2.2) では異なる核子同士を結びつける相互作用がなく、核子は一体ポテンシャル内を独立に運動しているという描像が得られる。

ポテンシャル V は Hartree-Fock 法などにより v_{ij} から導出することはできる。しかし、原子核の場合は核力が複雑であるため、適当にポテンシャルを仮定し、それが原子核の性質を説明するか調べるという現象論的方法も用いられる。いずれの方法でも、平均場近似の上では (2.2) から 1 粒子ハミルトニアンである $h = \mathbf{p}^2/2m + V$ のどの固有状態を粒子が占めるか指定することで原子核の状態を表す。このとき、Pauli 原理から、2 つの核子が同じ一粒子状態を占めることはできない。したがって、原子核の基底状態はエネルギーの最も低い 1 粒子状態から順に核子を詰めた状態となる。

一体ポテンシャル V として採用すべきかたちを考えていく。核子数 A の原子核中の V は核子が他の $A - 1$ 個の核子から受ける相互作用を平均化したものであるので、最も単純に考えれば核子密度 $\rho(r)$ を用いて、

$$V(r) \simeq \int d^3 r' v(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \rho(r')$$

と考えられる。ここで、 $v(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ は 2 つの核子がそれぞれ \mathbf{r} と \mathbf{r}' にある場合に働く核力である。ここではスピン・アイソスピン依存性は考えない。核力が近距離力であることから $v(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \simeq v_0 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ とすれば、積分を実行することができ

$$V(r) \simeq v_0 \rho(r) \quad (2.3)$$

と考えられる。核子の密度分布 ρ は Woods-Saxon 型 ($\propto 1/(1 + \exp(r - r_0))$) で与えられる。図 (2.1) に、有限井戸型ポテンシャル、調和振動子型ポテンシャル、Woods-Saxon ポテンシャルの 3 種類の比較した結果を示す。

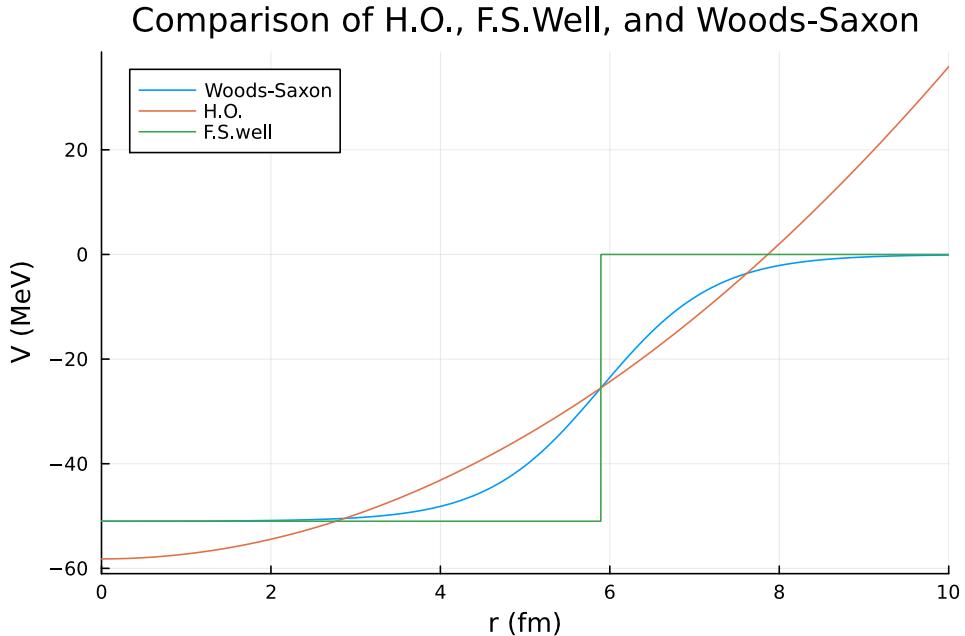


図 2.1 3 種類のポテンシャルの比較。
凡例の上から Wood-Saxon 型、調和振動子型、有限井戸型。

2.2 seniority ペアリングモデルと対相関

対相関とは、陽子-陽子および中性子-中性子間に働く短距離力によるものであり、一般に、対相関を取り込んだハミルトニアンは、

$$H = \sum_i \epsilon_i N_i - \sum_{ij>0} G_{ij} a_i^\dagger a_i^\dagger a_j^\dagger a_j \quad (2.4)$$

である。特に seniority ペアリングでは角運動量の和が 0 になるような $(m, -m)$ ペアの間で働き、ペアリングの強さを表す G はその場合のみ値を持つようになるため、基準として単粒子エネルギーのみを採用すれば、ハミルトニアンの形は、

$$H = -G \sum_{m,m'>0} a_m^\dagger a_{-m'}^\dagger a_{-m} a_m = -GS_+ S_- \quad (2.5)$$

ここで、

$$S_+ = \sum_{m>0} a_m^\dagger a_{-m}^\dagger; \quad S_- = (S_+)^{\dagger} \quad (2.6)$$

(2.6) 中の S_+, S_- は擬スピン昇降演算子と呼ばれ、擬スピン演算子はそれぞれの substate m に対して、

$$s_+^{(m)} = a_m^\dagger a_{-m}^\dagger \quad (2.7)$$

$$s_-^{(m)} = a_{-m} a_m \quad (2.8)$$

$$s_0^{(m)} = \frac{1}{2} (a_m^\dagger a_m + a_{-m}^\dagger a_{-m} - 1) \quad (2.9)$$

と定義される。このとき、 a_m^\dagger と a_m の交換関係を用いると、

$$[s_+^{(m)}, s_-^{(m)}] = 2s_0^{(m)}; \quad (2.10)$$

$$[s_0^{(m)}, s_+^{(m)}] = s_+^{(m)}; \quad (2.11)$$

$$[s_0^{(m)}, s_-^{(m)}] = -s_-^{(m)} \quad (2.12)$$

と角運動量演算子と同様の交換関係を導くことができる。

2.3 BCS 理論

1957 年に Bardeen, Cooper, Schrieffer によって電子対の概念を基礎にして超伝導を説明する BCS 理論が提唱された。この理論では、時間反転演算子 T を用いて、BCS 基底状態

$$|\text{BCS}\rangle = \prod_{k>0} (u_k + v_k a_k^\dagger a_{\bar{k}}^\dagger) |0\rangle; \quad |\bar{k}\rangle = T |k\rangle \quad (2.13)$$

を基底状態として採用する。ここで、 u_k, v_k は変分パラメータであり、

$$|u_k|^2 + |v_k|^2 = 1, \quad u_k > 0 \quad (2.14)$$

の条件を満たす。時間反転状態とは、 $|k\rangle = |n\ell jm\rangle$ のとき、 $|\bar{k}\rangle = |n\ell j-m\rangle$ が例である。電子対を記述する理論であるため、これが核子の pairing についても記述できるとして原子核に適用する。

多体系の Hamiltonian を单粒子エネルギーの行列要素 $t_{k_1 k_2}$ と、反対称化された二体相互作用の行列要素 $\bar{v}_{k_1 k_2 k_3 k_4}$ を用いて表すと、

$$H = \sum_{k_1 k_2 \leq 0} t_{k_1 k_2} a_{k_1}^\dagger a_{k_2} + \frac{1}{4} \sum_{k_1 k_2 k_3 k_4 \leq 0} \bar{v}_{k_1 k_2 k_3 k_4} a_{k_1}^\dagger a_{k_2}^\dagger a_{k_4} a_{k_3} \quad (2.15)$$

と表される。これを基に以下の議論を進める。

重要な方程式として、粒子数保存の条件から得られる

$$\langle \text{BCS} | \hat{N} | \text{BCS} \rangle = 2 \sum_{k>0} v_k^2 = N \quad (2.16)$$

を用いる。この式を基に、Hamiltonian に化学ポテンシャル λ と粒子数演算子 \hat{N} を導入し、

$$H' = H - \lambda \hat{N} \quad (2.17)$$

と定義する。

エネルギー期待値は

$$\langle \text{BCS} | H' | \text{BCS} \rangle = \sum_{k \leq 0} \left\{ (t_{kk} - \lambda) v_k^2 + \frac{1}{2} \sum_{k' \leq 0} \bar{v}_{kk'kk'} v_k^2 v_{k'}^2 \right\} + \sum_{kk' > 0} \bar{v}_{k\bar{k}k'\bar{k}'} u_k v_k u_{k'} v_{k'} \quad (2.18)$$

と計算される。これを最小化するため、変分原理を用いてパラメータ $\{u_k, v_k\}$ を決定する。

$$\delta \langle \text{BCS} | H' | \text{BCS} \rangle = 0 \quad (2.19)$$

を計算すると、最終的に BCS 方程式として

$$2\tilde{\epsilon}_k u_k v_k + \Delta_k (v_k^2 - u_k^2) = 0, \quad k > 0 \quad (2.20)$$

$$\tilde{\epsilon}_k = \frac{1}{2} \left(t_{kk} + t_{\bar{k}\bar{k}} + \sum_{k' \leq 0} (\bar{v}_{kk'kk'} + \bar{v}_{\bar{k}\bar{k}'\bar{k}\bar{k}'}) v_{k'}^2 \right) - \lambda \quad (2.21)$$

$$\Delta_k = - \sum_{k' > 0} \bar{v}_{k\bar{k}k'\bar{k}'} u_{k'} v_{k'} \quad (2.22)$$

が得られる。

また、(2.14), (2.20) から、 $\tilde{\epsilon}_k, \Delta_k$ が固定された場合の $\{u_k, v_k\}$ の形式解は

$$v_k^2 = \frac{1}{2} \left[1 \pm \frac{\tilde{\epsilon}_k}{\sqrt{\tilde{\epsilon}_k^2 + \Delta_k^2}} \right] \quad (2.23)$$

$$u_k^2 = \frac{1}{2} \left[1 \pm \frac{\tilde{\epsilon}_k}{\sqrt{\tilde{\epsilon}_k^2 + \Delta_k^2}} \right] \quad (2.24)$$

と導かれる。pairing がない場合、すなわち $\Delta = 0$ のとき、占有されている軌道 ($\tilde{\epsilon}_k < 0$) では $v_k^2 = 1, u_k^2 = 0$ となるように符号を選ぶと、

$$v_k^2 = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{\tilde{\epsilon}_k}{\sqrt{\tilde{\epsilon}_k^2 + \Delta_k^2}} \right] \quad (2.25)$$

$$u_k^2 = \frac{1}{2} \left[1 + \frac{\tilde{\epsilon}_k}{\sqrt{\tilde{\epsilon}_k^2 + \Delta_k^2}} \right] \quad (2.26)$$

となる。

seniority ペアリングモデルを適用すると、单粒子エネルギーの行列要素や二体相互作用の行列要素が簡単化され、

$$t_k = t_{\bar{k}} = \epsilon_k, \quad \bar{v}_{k_1 k_2 k_3 k_4} = -G. \quad (2.27)$$

したがって、Hamiltonian H の形は

$$H = \sum_{k>0} \epsilon_k (a_k^\dagger a_k + a_{\bar{k}}^\dagger a_{\bar{k}}) - G \sum_{k'>0} a_k^\dagger a_{\bar{k}}^\dagger a_{\bar{k}'} a_{k'} \quad (2.28)$$

となる。

同様にエネルギー期待値は

$$\langle \text{BCS} | H' | \text{BCS} \rangle = 2 \sum_{k>0} \left(\tilde{\epsilon}_k v_k^2 + \frac{1}{2} G v_k^4 \right) - \frac{\Delta^2}{G} \quad (2.29)$$

と計算され、 $\tilde{\epsilon}_k$ は

$$\tilde{\epsilon}_k = \epsilon_k - \lambda - G v_k^2 \quad (2.30)$$

である。

Gv_k^2, Gv_k^4 は今回重要でないため無視する。また Δ が k に依存しなくなるため $\{u_k, v_k\}$ は

$$\begin{Bmatrix} u_k^2 \\ v_k^2 \end{Bmatrix} = \frac{1}{2} \left[1 \pm \frac{\epsilon_k - \lambda}{\sqrt{(\epsilon_k - \lambda)^2 + \Delta^2}} \right] \quad (2.31)$$

と表される。

この場合の粒子数保存条件および gap 方程式は

$$N = 2 \sum_{k>0} v_k^2 \quad (2.32)$$

$$\Delta = \frac{G}{2} \sum_{k>0} \frac{\Delta}{\sqrt{(\epsilon_k - \lambda)^2 + \Delta^2}} \quad (2.33)$$

のようになり、この 2 式を数値計算で解く。

2.4 有限温度 BCS 理論への拡張

有限温度では粒子が熱力学的分布に従うため、(2.28) の $a_k^\dagger a_k, a_{\bar{k}}^\dagger a_{\bar{k}}$ の期待値に熱力学的分布が含まれる。同様にギャップ方程式や粒子数保存条件も熱力学的分布を含む形に変化する。各方程式の導出は付録 A に示す。以下では Boltzman 定数 $k_B = 8.617333 \times 10^{-11} \text{ MeV/K}$, 逆温度 $\beta = 1/k_B T$ を用いる。

準粒子エネルギー $E_k = \sqrt{(\epsilon_k - \lambda)^2 + \Delta^2}$ 、フェルミ分布 $f_k = 1/(1 + e^{\beta E_k})$ を用いて、

$$\langle a_k^\dagger a_k \rangle = \langle a_{\bar{k}}^\dagger a_{\bar{k}} \rangle = v_k^2(1 - f_k) + u_k^2 f_k \quad (2.34)$$

$$= \frac{\epsilon_k - \lambda}{2} \left[1 - \frac{\epsilon_k - \lambda}{E_k} \tanh\left(\frac{E_k}{2k_B T}\right) \right] \quad (2.35)$$

となる。ハミルトニアンは、

$$\langle H' \rangle = \sum_{k>0} (\epsilon_k - \lambda) \left[1 - \frac{\epsilon_k - \lambda}{E_k} \tanh\left(\frac{E_k}{2k_B T}\right) \right] - \frac{\Delta^2}{G} \quad (2.36)$$

の形に書き直される。

同様にギャップ方程式や粒子数保存条件も修正されて、

$$\begin{aligned} N &= 2 \sum_{k>0} [v_k^2 + (u_k^2 - v_k^2) f_k] \\ &= \sum_{k>0} \left(1 + \frac{\epsilon_k - \lambda}{\sqrt{(\epsilon_k - \lambda)^2 - \Delta^2}} \tanh\left(\frac{E_k}{2k_B T}\right) \right) \end{aligned} \quad (2.37)$$

$$\Delta = \frac{G}{2} \sum_{k>0} \frac{\Delta}{E_k} \tanh\left(\frac{E_k}{2k_B T}\right) \quad (2.38)$$

のようになる。

式 (2.38) には自明解 $\Delta = 0$ が存在するが、非自明解が存在する範囲が超流動状態、存在しない範囲が常流動状態と考え、温度変化に対する非自明解の応答を見る。

第3章

数値計算方法

3.1 単粒子ハミルトニアンの対角化

単粒子 Hamiltonian は Woods-Saxon ポテンシャルとスピン軌道相互作用を採用し、

$$H = T_{\text{H.O.}} + U(r) \quad (3.1)$$

のように定義される。ここで $T_{\text{H.O.}}$ は調和振動子のエネルギー固有値であり、具体的な形は、

$$T_{\text{H.O.}} = \hbar\omega \left(2n + \ell + \frac{3}{2} \right), \quad \hbar\omega = 41A^{-1/3}. \quad (3.2)$$

ポテンシャル項 $U(r)$ は、

$$U(r) = u_0 f(r) + u_{ls} r_0^2 \frac{1}{r} \frac{df(r)}{dr} \mathbf{l} \cdot \mathbf{s} + U_{\text{Coul}}(r) \frac{1-\tau}{2} - \frac{1}{2} M\omega^2 r^2, \quad f(r) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{r-R}{a}\right)}. \quad (3.3)$$

この時のポテンシャルパラメータは、 N, Z, A をそれぞれ中性子数、陽子数、核子数として以下の表にまとめた。

表 3.1 ポテンシャルパラメータの一覧

記号	値	単位	備考
u_0	$-51 + 33(N - Z)/A$	MeV	ポテンシャルの深さ
u_{ls}	$22 - 14(N - Z)/A$	MeV	スピン軌道相互作用の強さ
r_0	1.27	fm	長さの基準
R	$r_0 A^{1/3}$	fm	原子核半径
a	0.67	fm	原子核の広がり

この Hamiltonian を極座標調和振動子基底とスピン波動関数の直積によって展開し、対角化を行うことで単粒子エネルギーを求めた。波動関数は以下に示すとおりである。

$$\psi_{nmlj}(r) = \frac{u_{n\ell}(q)}{r} \mathcal{Y}_{\ell jm}(\theta, \phi), \quad (3.4)$$

$$u_{n\ell}(q) = \sqrt{\frac{2a}{n!} \frac{\Gamma(\ell + n + 3/2)}{\Gamma^2(\ell + 3/2)}} q^{\ell+1} e^{-q^2/2} M(-n, \ell + 3/2, q^2), \quad (3.5)$$

$$\mathcal{Y}_{\ell jm}(\theta, \phi) = \pm \sqrt{\frac{\ell \pm m + 1/2}{2\ell + 1}} Y_{\ell, m-1/2}(\theta, \phi) |+\rangle + \sqrt{\frac{\ell \mp m + 1/2}{2\ell + 1}} Y_{\ell, m+1/2}(\theta, \phi) |-\rangle. \quad (3.6)$$

ここで、 $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$ は球面調和関数、 $\Gamma(n)$ はガンマ関数、 $M(\beta, \gamma, x)$ は合流型超幾何関数、 $q = ar$, $a = \sqrt{\frac{M\omega}{\hbar}}$ である。

3.2 ペアリング強度・化学ポテンシャルの計算

以降は、model space として魔法数 50 と 82 の間の軌道である $0g_{7/2}, 1d_{5/2}, 1d_{3/2}, 2s_{1/2}, 0h_{11/2}$ を用いて計算を行う。

初期値として、pairing gap Δ は文献 (Ring and Schuck [2]) に基づき $\Delta = 12 \cdot A^{-1/2}$ を採用し、化学ポテンシャル λ はこの Δ を用いて、粒子数保存の条件

$$N = \sum_{k>0} \left(1 - \frac{\epsilon_k - \lambda}{\sqrt{(\epsilon_k - \lambda)^2 + \Delta^2}} \right) \quad (3.7)$$

を数値的に解くことで求める。

得られた Δ, λ をギャップ方程式

$$1 = \frac{G}{2} \sum_{k>0} \frac{1}{\sqrt{(\epsilon_k - \lambda)^2 + \Delta^2}} \quad (3.8)$$

に代入することで、ペアリング強度 G を求める。

3.3 温度依存性の計算手法

有限温度 BCS 理論に基づき、温度の上昇に伴う化学ポテンシャル λ および pairing gap Δ の変化を求めた。ただし、ペアリング強度 G は魔法数から離れた核である ^{116}Sn 核のものを採用した。温度範囲 $k_B T = 0.0 \sim 1.0 \text{ MeV}$ に対して、まず全体を 0.05 MeV 刻みで計算し、gap が急激に変化する領域を特定した。次に、 Δ の変化が大きい領域（得られた転移温度の $\pm 0.2 \text{ MeV}$ 周辺）では、より細かい 0.005 MeV 刻みで計算を実施し、相転移点付近の詳細な振る舞いを解析した。

ギャップ方程式と粒子数保存の条件

$$N = \sum_{k>0} \left(1 + \frac{\epsilon_k - \lambda}{\sqrt{(\epsilon_k - \lambda)^2 - \Delta^2}} \tanh \left(\frac{E_k}{2k_B T} \right) \right), \quad (3.9)$$

$$\Delta = \frac{G}{2} \sum_{k>0} \frac{\Delta}{\sqrt{(\epsilon_k - \lambda)^2 - \Delta^2}} \tanh \left(\frac{E_k}{2k_B T} \right) \quad (3.10)$$

を各温度ごとに解き、収束した値を記録した。ここで $E_k = \sqrt{(\epsilon_k - \lambda)^2 - \Delta^2}$ である。

同様に、各温度でのエネルギー期待値

$$\langle H' \rangle = \sum_{k>0} (\epsilon_k - \lambda) \left[1 - \frac{\epsilon_k - \lambda}{E_k} \tanh \left(\frac{E_k}{2k_B T} \right) \right] - \frac{\Delta^2}{G} \quad (3.11)$$

を求め、これを数値微分することで比熱の温度変化を導出した。

$$C = \frac{\partial \langle H' \rangle}{\partial T} \quad (3.12)$$

第4章

結果と考察

ここでは数値計算の結果を示す。また、ペアリング相関と相転移の関連について関心があるため、計算対象の原子核から ^{100}Sn , ^{132}Sn を排した。

4.1 ペアリング強度、化学ポテンシャルの核子数依存性

$T = 0\text{K}$ の場合のペアリング強度 G と化学ポテンシャル λ の計算結果を示す。ペアリング強度の計算結果に添えた近似式 $G = 22/A$ は文献 (Baranger and Kumar [3]) から利用した。

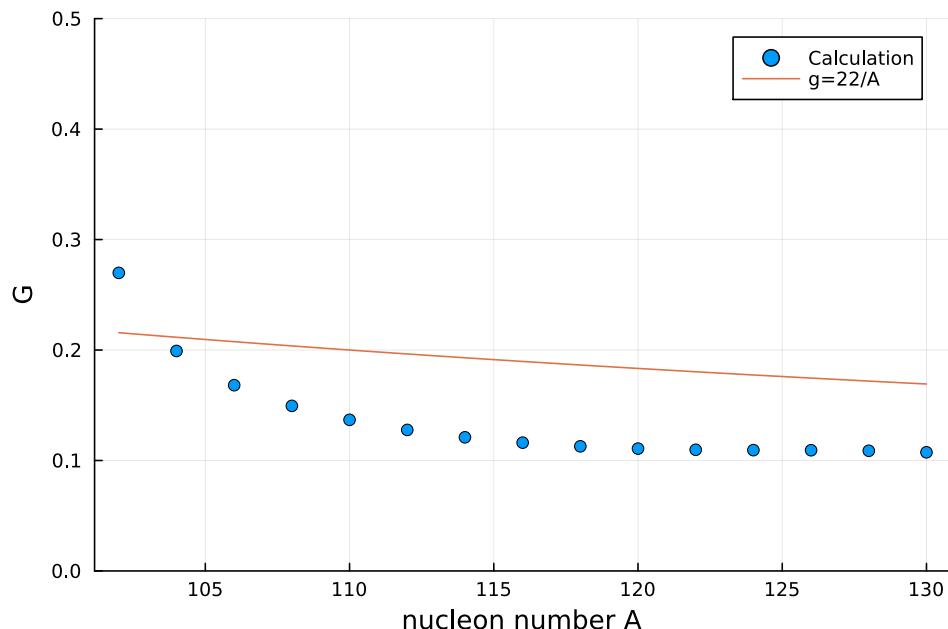


図 4.1 核子数依存したペアリング強度 G の計算結果 ($T = 0\text{K}$)。近似式 $G = 22/A$ は文献 (Baranger and Kumar [3]) から引用した。

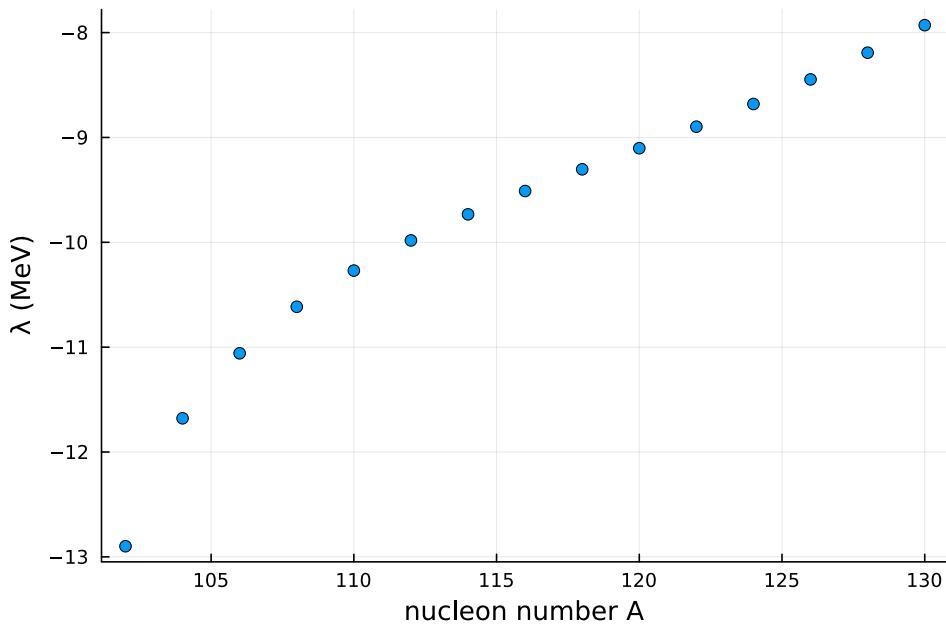


図 4.2 核子数依存した化学ポテンシャル λ の計算結果 ($T = 0$ K)。

この 2 つの計算結果から考えられることは、

1. 近似式と比較し、傾向は一致している。
2. 化学ポテンシャルが核子数に対して単調に増加している。

の 2 点が挙げられる。

1 について、これは Woods-Saxon ポテンシャルと seniority ペアリングモデルの採用することの妥当性を示していると考えられる。

2 について、化学ポテンシャルが、絶対零度における粒子の存在確率が $1/2 (= \lim_{T \rightarrow 0} \frac{1}{\exp((e-\lambda)/k_B T)+1})$ になるようなエネルギーを示していることから、妥当であると考える。

4.2 超流動・常流動相転移

前節で計算した核子に対応する化学ポテンシャルと、 ^{116}Sn のペアリング強度 G を採用した。計算結果の表示方法として、視認性を良くするために 102~130 までを 3 つにわけることにした。pairing gap Δ 、エネルギー期待値 $\langle H' \rangle$ 、比熱 C の温度変化を示し、最後に $\Delta = 0$ になった温度を表とグラフでまとめた。 x 軸と y 軸に表れる Δ_0 は、 $T = 0$ K でのギャップの値である。

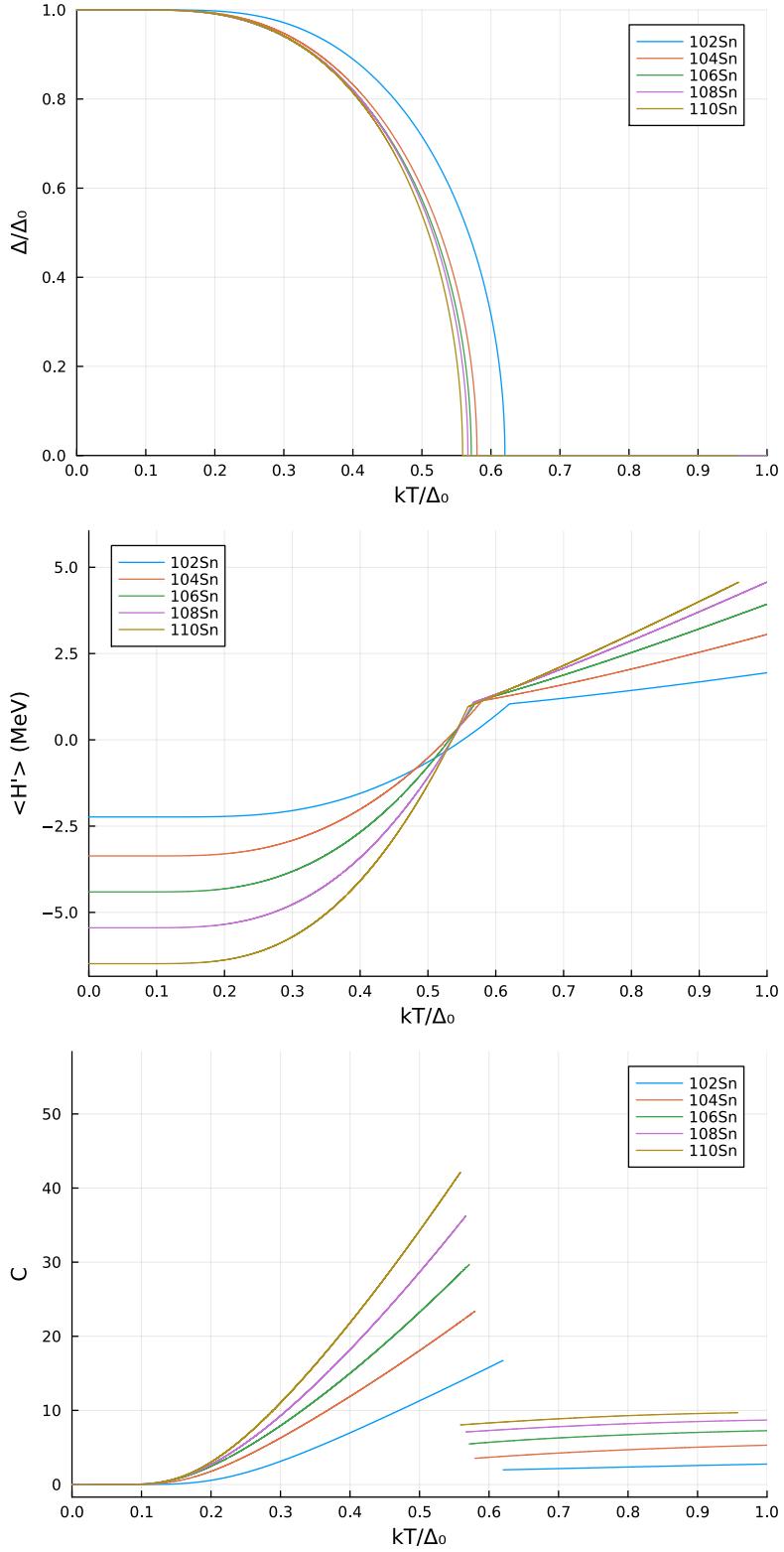


図 4.3 $^{102-110}\text{Sn}$ の中性子についての計算結果。上から pairing gap、エネルギー期待値、比熱に対する温度変化。

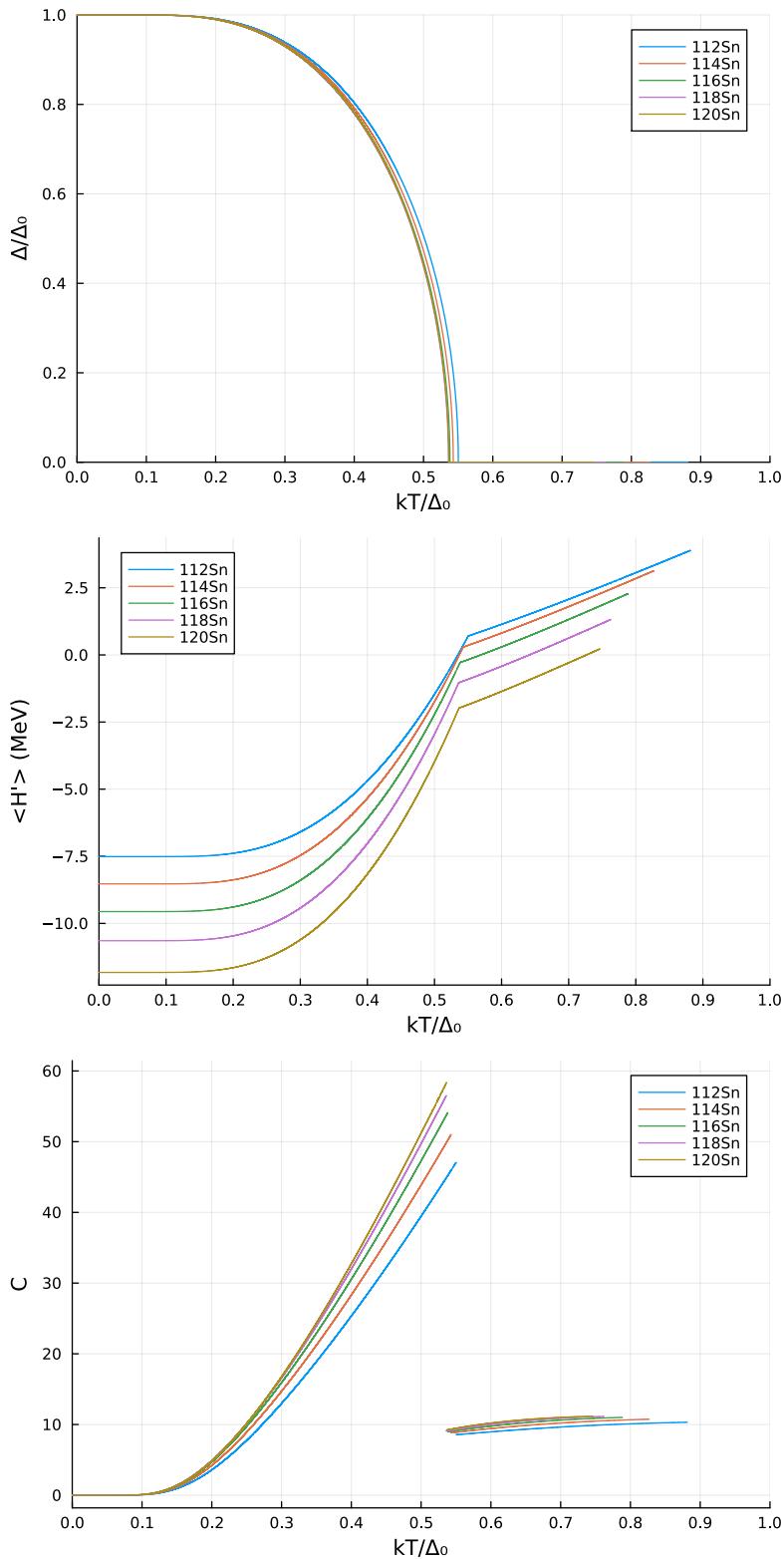


図 4.4 $^{112-120}\text{Sn}$ の中性子についての計算結果。上から pairing gap、エネルギー期待値、比熱に対する温度変化。

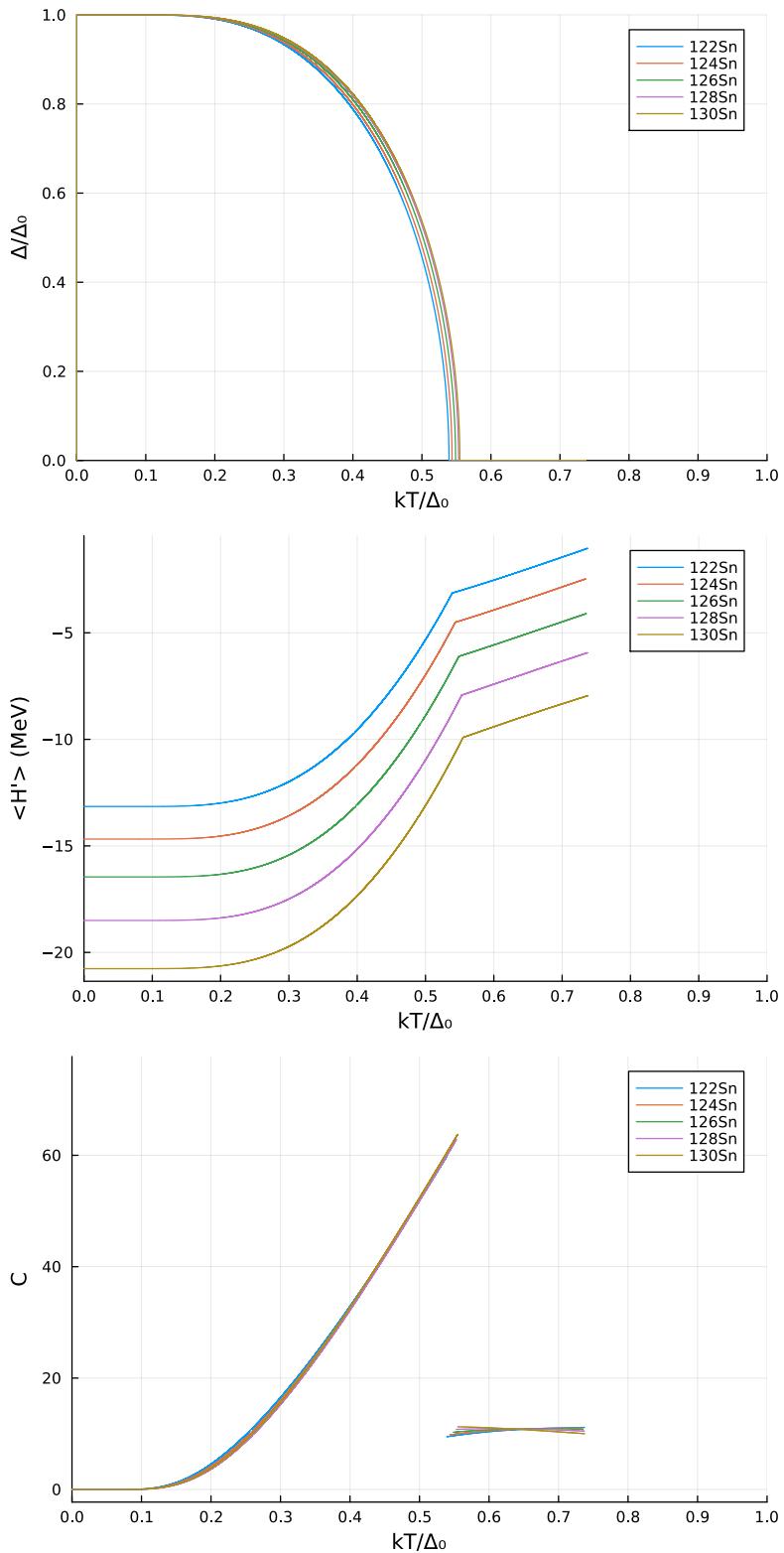


図 4.5 $^{122-130}\text{Sn}$ の中性子についての計算結果。上から pairing gap、エネルギー期待値、比熱に対する温度変化。

表 4.1 核子数と相転移温度の対応表

核子数	$k_B T_c$ (MeV)	核子数	$k_B T_c$ (MeV)	核子数	$k_B T_c$ (MeV)
102	0.30535	112	0.62420	122	0.73118
104	0.39563	114	0.65673	124	0.74009
106	0.47009	116	0.68266	126	0.74631
108	0.53269	118	0.70309	128	0.75035
110	0.58351	120	0.71904	130	0.75242

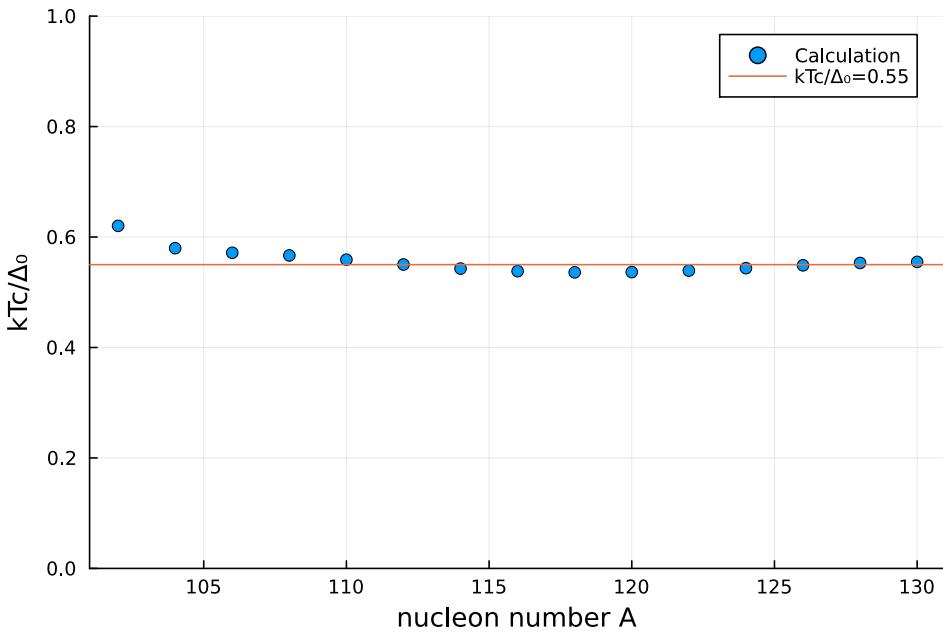


図 4.6 核子数 A に対する相転移温度 $k_B T_c$ の依存性を示すプロット。水平線 $k_B T_c/\Delta_0 = 0.55$ MeV は相転移温度の傾向を表す。

計算結果として、すべての各種において温度変化により $\Delta = 0$ になる相転移が確認できた。加えて、 $k_B T_c/\Delta_0 \simeq 0.55$ の傾向が見られる。これは BCS 理論の文献 (有本 [4]) の、 $k_B T_c/\Delta_0 = 0.566$ と近い値が得られた。 ^{102}Sn については、少し傾向から外れているものの許容範囲であると考える。この相転移は高温領域においては pairing の崩壊により、相転移が発生した。pairing gap 以外の物理量においても相転移温度付近での急激な変化が確認できた。

第5章

結論

5.1 本研究のまとめ

本研究では、100～130Sn核を対象に、有限温度における超流動から常流動への相転移を解析した。そのために、Woods-Saxonポテンシャルとseniorityペアリングモデルを用いたハミルトニアンを構築し、BCS理論およびその有限温度拡張を適用して数値計算を行った。

本研究の主要な結果は以下の通りである：

1. 化学ポテンシャルの振る舞いについて、核子数に対して単調に増加することが確認された。
2. 近似式と比較した結果、計算結果の傾向は一致しており、Woods-Saxonポテンシャルとseniorityペアリングモデルの適用が妥当であることが示された。
3. すべての計算対象核において、温度上昇に伴いペアリングギャップ Δ が消失する相転移が確認された。
4. 相転移温度 T_c に関して、 $k_B T_c / \Delta_0 \simeq 0.55$ の関係が得られ、BCS理論の既存研究（有本[4]）で示されている $k_B T_c / \Delta_0 = 0.566$ に近い値を示した。
5. すべての核種でギャップ消失（超流動から常流動への相転移）が発生し、ギャップ以外の物理量（エネルギー期待値、比熱）においても相転移温度付近での急激な変化が確認された。

これらの結果は、102～130Sn核における超流動状態の有限温度での振る舞いを明らかにするものであった。

5.2 今後の課題

今回の解析では、有限温度においても平均場ポテンシャルを変化させなかった。そのため、詳細な有限温度の解析が行われていないと想定されるため、有限温度の平均場近似を行うことは有意義である。加えて、BCS理論によって破れた対称性を回復するために粒子数射影、角運動量射影を行うことによる発展も考えられる。

参考文献

- [1] 倉澤治樹. 原子核物理学, 2000. 2024 年 10 月アクセス.
- [2] Peter H. Schuck Peter Ring. *The Nuclear Many-Body Problem*. Springer-Verlag Berlin and Heidelberg GmbH & Co. K, 1980.
- [3] Michel Baranger and Krishna Kumar. Nuclear deformations in the pairing-plus-quadrupole model:(ii). discussion of validity of the model. *Nuclear Physics A*, Vol. 110, No. 3, pp. 490–528, 1968.
- [4] 有本靖. 超伝導の基礎, 2022 年. 2025 年 3 月アクセス.

付録 A

有限温度 BCS 理論の詳細な導出

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 $\text{op.}D$ を定義し、 $\text{Tr } D = 1$ 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。

$$D = Z^{-1} e^{-\beta(H-\mu N)} \quad (\text{A.1})$$

$$Z = \text{Tr} [e^{-\beta(H-\mu N)}] \quad (\text{A.2})$$

また演算子 O の期待値は、

$$\langle O \rangle = \text{Tr } DO \quad (\text{A.3})$$

である。これが HFB 近似のもとでは quasi-particle Hamiltonian H_{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 $\text{op.}a_i^\dagger$ を使って $H_{\text{HFB}} = E_0 + \sum_i E_i a_i^\dagger a_i$ と表すことができるところから、HFB 密度演算子と HFB 分配関数は

$$D_{\text{HFB}} = Z_{\text{HFB}}^{-1} \exp \left(-\beta \sum_i E_i \hat{n}_i \right) \quad (\text{A.4})$$

$$Z_{\text{HFB}} = \text{Tr} \left[\exp \left(-\beta \sum_i E_i \hat{n}_i \right) \right] \quad (\text{A.5})$$

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

$$Z_{\text{HFB}} = \text{Tr} \left[\exp \left(-\beta \sum_i E_i \hat{n}_i \right) \right] \quad (\text{A.6})$$

$$= \sum_{n_i} \prod_i e^{-\beta E_i n_i} \quad (\text{A.7})$$

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、

$$Z = \prod_i (1 + e^{-\beta E_i}) \quad (\text{A.8})$$

と展開できる。これを使えば密度演算子は

$$D_{\text{HFB}} = Z_{\text{HFB}}^{-1} \prod_i [e^{-\beta E_i} \hat{n}_i + (1 - \hat{n}_i)] \quad (\text{A.9})$$

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、

$$D_{\text{HFB}} = \prod_i [f_i \hat{n}_i + (1 - f_i)(1 - \hat{n}_i)] \quad (\text{A.10})$$

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

$$\rho_{ij} = \langle c_j^\dagger c_i \rangle = \text{Tr } D c_j^\dagger c_i \quad (\text{A.11})$$

$$t_{ij} = \langle c_j c_i \rangle = \text{Tr } D c_j c_i \quad (\text{A.12})$$

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

$$\rho = \tilde{U} f U^* + V^\dagger (1 - f) V \quad (\text{A.13})$$

$$t = \tilde{U} f V^* + V^\dagger (1 - f) U \quad (\text{A.14})$$

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

$$S = -k \sum_i [f_i \ln f_i + (1 - f_i) \ln(1 - f_i)] \quad (\text{A.15})$$

$$N = \text{Tr } \rho \quad (\text{A.16})$$

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

$$H = \sum_i \epsilon_i c_i^\dagger c_i - \sum_{ij > 0} G_{ij} c_i^\dagger c_i^\dagger c_j c_i \quad (\text{A.17})$$

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

$$u_i^2 = \frac{1}{2}(1 + \epsilon_i/E_i) \quad (\text{A.18})$$

$$v_i^2 = \frac{1}{2}(1 - \epsilon_i/E_i) \quad (\text{A.19})$$

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、

$$t_{i\bar{i}} = u_i v_i (1 - 2f_i) \quad (\text{A.20})$$

$$u_i v_i = -\frac{\Delta_i}{2E_i} \quad (\text{A.21})$$

$$1 - 2f_i = \tanh(1/2\beta E_i) \quad (\text{A.22})$$

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

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

これは $T = 0$ のときに $\tanh = 1$ となり一致する。

付録 B

自由エネルギーとエントロピーの温度変化

エントロピー $S = -k_B \sum_k [f_k \ln f_k + (1 - f_k) \ln(1 - f_k)]$ の計算結果を ^{116}Sn の場合について下に示す。

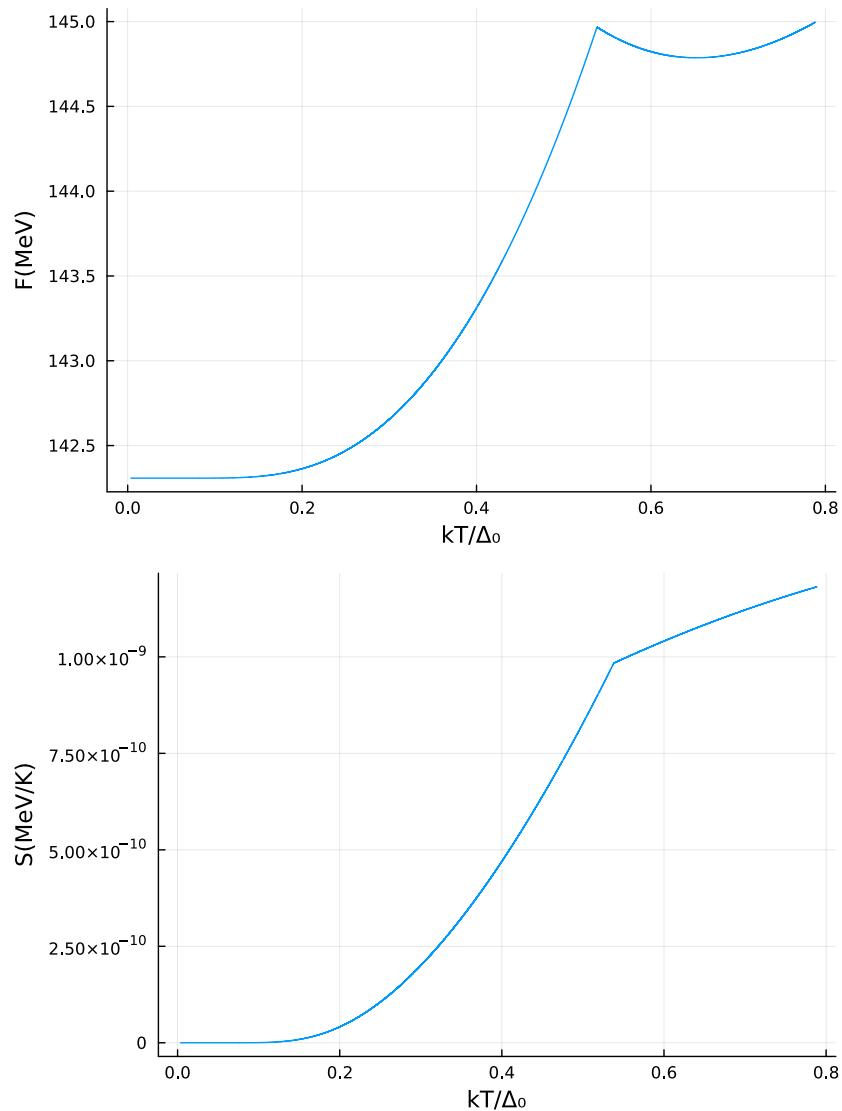


図 B.1 ^{116}Sn 核におけるエントロピー S および自由エネルギー F の温度依存性。