現実的核力に基づいた変分法と核物質状態方程式

早稲田大学理工学研究所（先進理工学部物理学科）
鷹野正利

I. エネルギー汎関数を用いた変分法による一様核物質の研究

田中利典（早稲田大）、山田勝美（早稲田大）

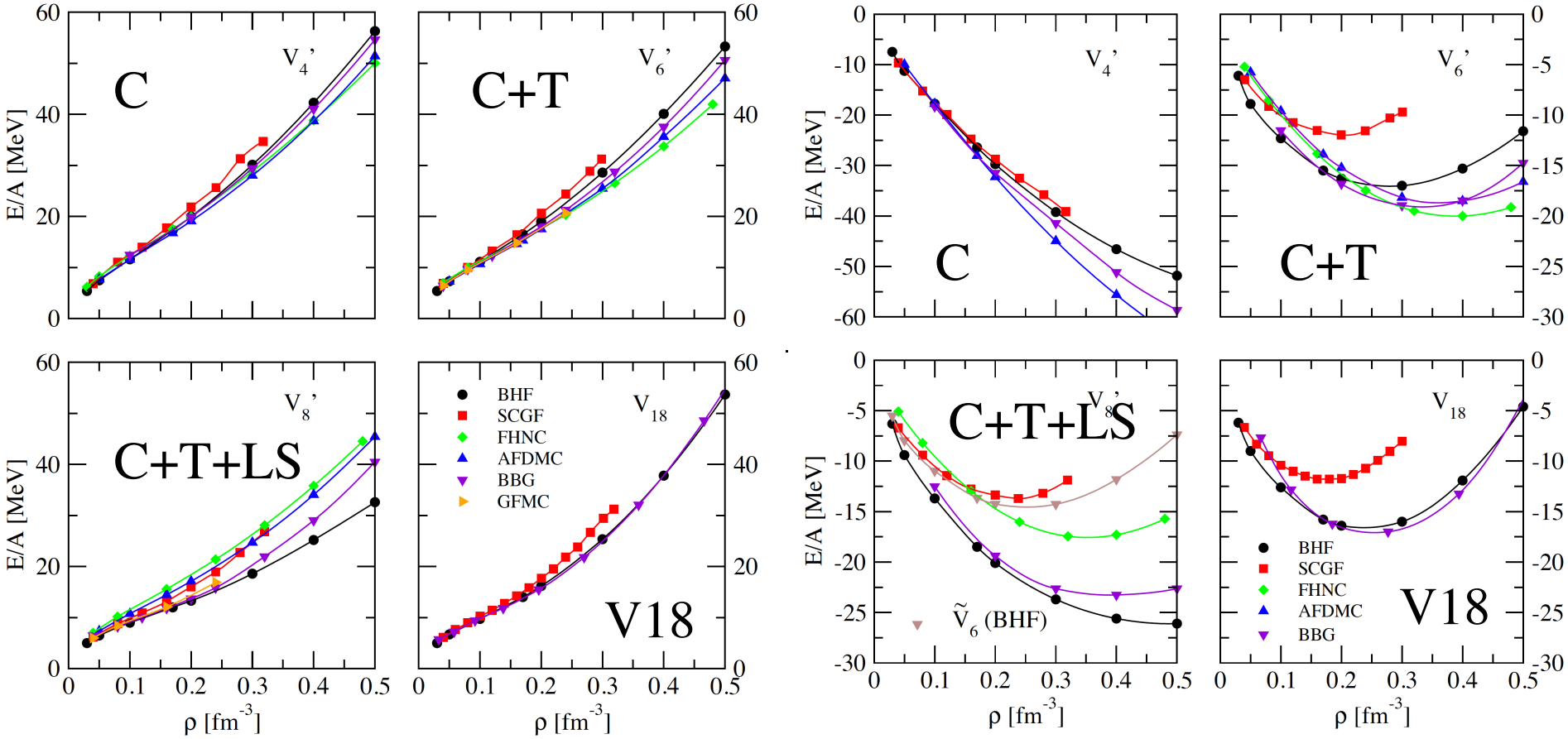
II. 現実的核力から出発したクラスター変分法に基づく超新星爆発計算用核物質状態方程式作成の研究

富樫甫（早稲田大）、山室早智子（東京理大）
中里健一郎（東京理大）、鈴木英之（東京理大）
住吉光介（沼津高専）、松古英夫（KEK）

2012. 08. 30 基研研究会「ハドロン物質の諸相と状態方程式」

一様核物質エネルギーの多体計算（2体力のみ）

M. Baldo et al., arXiv nucl-th 1207.6314



中性子物質　　対称核物質

I. エネルギー汎関数を用いた変分法の研究

現実的核力から出発した一様核物質エネルギーの変分計算

エネルギー汎関数を用いた変分法

絶対零度一様核物質エネルギーを
2体分布関数を用いて陽に表すエネルギー汎関数

⇩ Euler-Lagrange方程式を解く

十分なエネルギー最小化

2体中心力のみを考慮した場合（液体^{3}He等）：妥当な解

現状：中心力+テンソル力（v6’）　中性子物質と対称核物質

3体力（UIX斥力項）の考慮：中性子物質

核物質Hamiltonian

$$H = -\sum_{i=1}^{N} \frac{\hbar^2}{2m}\nabla_i^2 + \sum_{i<j}^{N} V_{ij}$$

N: 核子数　　m: 核子の質量

2体核力:V6' ポテンシャル

$$V_{ij} = \sum_{t=0}^{1} \sum_{s=0}^{1} \left[V_{\mathrm{C}ts}(r_{ij}) + V_{\mathrm{T}t}(r_{ij}) S_{\mathrm{T}ij} \right] P_{tsij}$$

中心力　　テンソル力

t: アイソスピン　s: スピン

P_{tsij}:スピン・アイソスピン射影演算子

エネルギー汎関数に用いる関数：2体分布関数

（中性子物質の場合）

- 動径分布関数

$$F_s(r_{12}) = \Omega^2 \sum_{spin} \int \Psi\ (x_1, x_2, \ldots, x_N) P_{s12} \Psi\ (x_1, x_2, \ldots, x_N) d\boldsymbol{r}_3 \ldots d\boldsymbol{r}_N$$

- テンソル型分布関数

$$F_{\mathrm{T}}(r_{12}) = \Omega^2 \sum_{spin} \int \Psi\ (x_1, x_2, \ldots, x_N) S_{\mathrm{T}12} \Psi (x_1, x_2, \ldots, x_N) d\boldsymbol{r}_3 \ldots d\boldsymbol{r}_N$$

Ψ: 波動関数　Ω: 体積　P_{sij}: spin 射影演算子　$S_{\mathrm{T}ij}$: テンソル演算子

補助関数

- $F_{\mathrm{C}s}(r)$: Intrinsically-Central Distribution Functions
- $g_{\mathrm{T}}(r)$: Dressed Tensor Correlation Functions

$$F_s(r) = F_{\mathrm{C}s}(r) + 8s\left[g_{\mathrm{T}}(r)\right]^2 F_{\mathrm{F}s}(r)$$

$$F_{\mathrm{T}}(r) = 16\left\{\sqrt{F_{\mathrm{C1}}(r) F_{\mathrm{F1}}(r)}\, g_{\mathrm{T}}(r) - \left[g_{\mathrm{T}}(r)\right]^2 F_{\mathrm{F1}}(r)\right\}$$

$F_{\mathrm{F}s}(r)$: Fermi気体の $F_s(r)$

エネルギー汎関数に用いる関数：構造関数

（中性子物質の場合）

$$S_{\mathrm{c1}}(k) = \frac{1}{N}\left\langle \left| \sum_{i=1}^{N} \exp\left[i\boldsymbol{k}_i \cdot \boldsymbol{r}\right] \right|^2 \right\rangle = 1 + S_1(k) + S_0(k) \geq 0$$

$$S_{\mathrm{c2}}(k) = \frac{1}{3N}\left\langle \left| \sum_{i=1}^{N} \boldsymbol{\sigma}_i \exp\left[i\boldsymbol{k}_i \cdot \boldsymbol{r}\right] \right|^2 \right\rangle = 1 + \frac{1}{3} S_1(k) - S_0(k) \geq 0$$

$$S_{\mathrm{cT1}}(k) = \frac{1}{N}\left\langle \left| \sum_{i=1}^{N} \frac{\left(\boldsymbol{\sigma}_i \cdot \boldsymbol{k}_i\right)}{k_i} \exp\left[i\boldsymbol{k}_i \cdot \boldsymbol{r}\right] \right|^2 \right\rangle = 1 + S_{\mathrm{c2}}(k) - \frac{1}{3} S_{\mathrm{T}}(k) \geq 0$$

$$S_{\mathrm{cT2}}(k) = \frac{1}{N}\left\langle \left| \sum_{i=1}^{N} \frac{\left(\boldsymbol{\sigma}_i \times \boldsymbol{k}_i\right)}{k_i} \exp\left[i\boldsymbol{k}_i \cdot \boldsymbol{r}\right] \right|^2 \right\rangle = 1 + S_{\mathrm{c2}}(k) + \frac{1}{6} S_{\mathrm{T}}(k) \geq 0$$

$$S_s(k) = \rho \int \left[F_s(r) - F_s(\infty)\right] \exp\left[i\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{r}\right] d\boldsymbol{r}$$

$$(s = 0, 1)$$

$$S_{\mathrm{T}}(k) = \rho \int F_{\mathrm{T}}(r)\, j_2(kr)\, d\boldsymbol{r}$$

中性子物質に対するエネルギー汎関数（中心力+テンソル力）

$$
\begin{aligned}
\frac{E}{N} = \frac{3}{5}E_{\mathrm{F}} &+ 2\pi\rho\int\left\{\left[\sum_{s=0}^{1}F_s(r)V_{\mathrm{C}s}(r)\right]+F_{\mathrm{T}}(r)V_{\mathrm{T}}(r)\right\}r^2dr \\
&+\frac{\pi\hbar^2\rho}{2m}\int\left\{\sum_{s=0}^{1}F_{\mathrm{C}s}(r)\left[\frac{1}{F_{\mathrm{C}s}(r)}\frac{dF_{\mathrm{C}s}(r)}{dr}-\frac{1}{F_{\mathrm{F}s}(r)}\frac{dF_{\mathrm{F}s}(r)}{dr}\right]^2\right\}r^2dr \\
&+\frac{2\pi\hbar^2\rho}{m}\int\left[8\left\{\left[\frac{dg_{\mathrm{T}}(r)}{dr}\right]^2+\frac{6}{r^2}\left[g_{\mathrm{T}}(r)\right]^2\right\}F_{\mathrm{F1}}(r)\right]r^2dr \\
&-\frac{\hbar^2}{16\pi^2m\rho}\int\frac{\left[S_{\mathrm{c1}}(k)-3+2S_{\mathrm{cF}}(k)\right]\left[S_{\mathrm{c1}}(k)-S_{\mathrm{cF}}(k)\right]^2}{S_{\mathrm{c1}}(k)/S_{\mathrm{cF}}(k)}k^4dk \\
&-\frac{\hbar^2}{16\pi^2m\rho}\int\sum_{n=1}^{2}n\frac{\left[S_{\mathrm{cT}n}(k)-3+2S_{\mathrm{cF}}(k)\right]\left[S_{\mathrm{cT}n}(k)-S_{\mathrm{cF}}(k)\right]^2}{S_{\mathrm{cT}n}(k)/S_{\mathrm{cF}}(k)}k^4dk+\frac{E_{\mathrm{open}}}{N}
\end{aligned}
$$

$$
\frac{E_{\mathrm{open}}}{N}=\frac{\hbar^2\rho^2}{2m}\int d\boldsymbol{r}_{12}\frac{3}{4}\left[\left[\frac{dG(r_{12})}{dr_{12}}\right]^2+\frac{1}{18}\left\{\left[\frac{dF_{\mathrm{T}}(r_{12})}{dr_{12}}\right]^2+\frac{6}{r_{12}^2}\left[F_{\mathrm{T}}(r_{12})\right]^2\right\}\right]\int d\boldsymbol{r}_{23}\left\{\left[G(r_{23})\right]^2+\frac{1}{18}\left[F_{\mathrm{T}}(r_{23})\right]^2\right\}
$$

$$
G(r)=\frac{1}{3}F_1(r)-F_0(r)-\frac{1}{3}F_{\mathrm{F1}}(r)+F_{\mathrm{F0}}(r)
$$

$S_{\mathrm{cF}}(k)$: Fermi gasの$S_{\mathrm{c}n}(k)$、　　ρ: 数密度、E_{F}: Fermi energy

エネルギー汎関数の特徴

1）ポテンシャルエネルギーについて厳密な表式

2）粒子間相関から生じる運動エネルギー：近似式

波動関数をJastrow型に仮定した場合

$$\Psi(x_1,\cdots,x_N) = Sym\left[\prod_{i<j} f_{ij}\right]\Phi_{\mathrm{F}}(x_1,\cdots,x_N)$$

Φ_{F}: Fermi気体の波動関数

$$f_{ij} = \sum_{s=0}^{1}\left[f_{\mathrm{C}s}(r_{ij})P_{sij} + f_{\mathrm{T}}(r_{ij})S_{\mathrm{T}ij}\right]$$

ハミルトニアン期待値につき、以下のクラスター項を含む。

・2体クラスター項：完全に含む

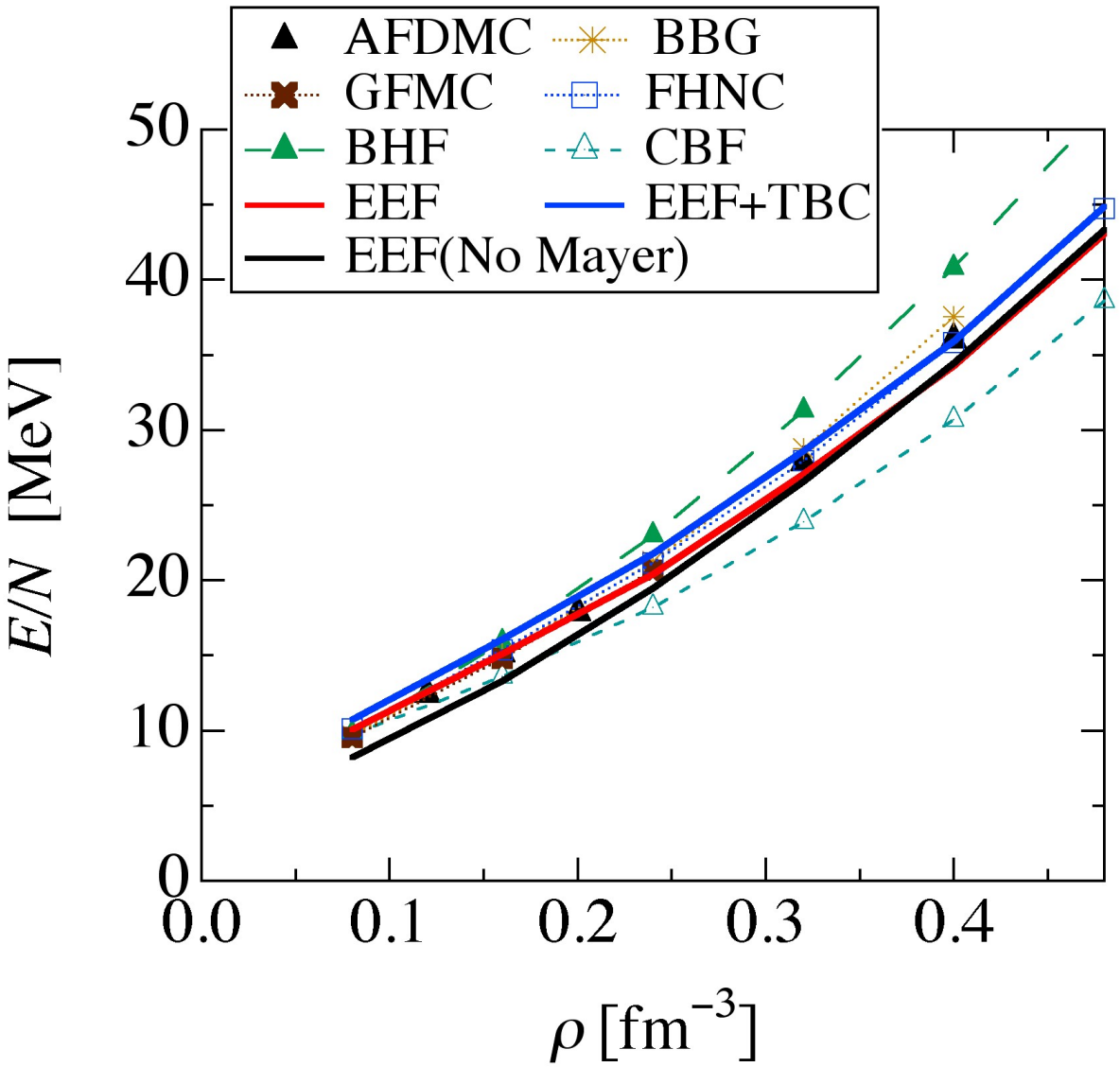
・3体クラスター項：$h_{\mathrm{C}s}(r) = f_{\mathrm{C}s}(r) - 1, f_{\mathrm{T}}(r)$ について最低次の項

・4体クラスター項：$h_{\mathrm{C}s}(r), f_{\mathrm{T}}(r)$について最低次の直接項

・HNC/0近似に含まれるクラスター項

3）構造関数の必要条件を自動的に保証する。

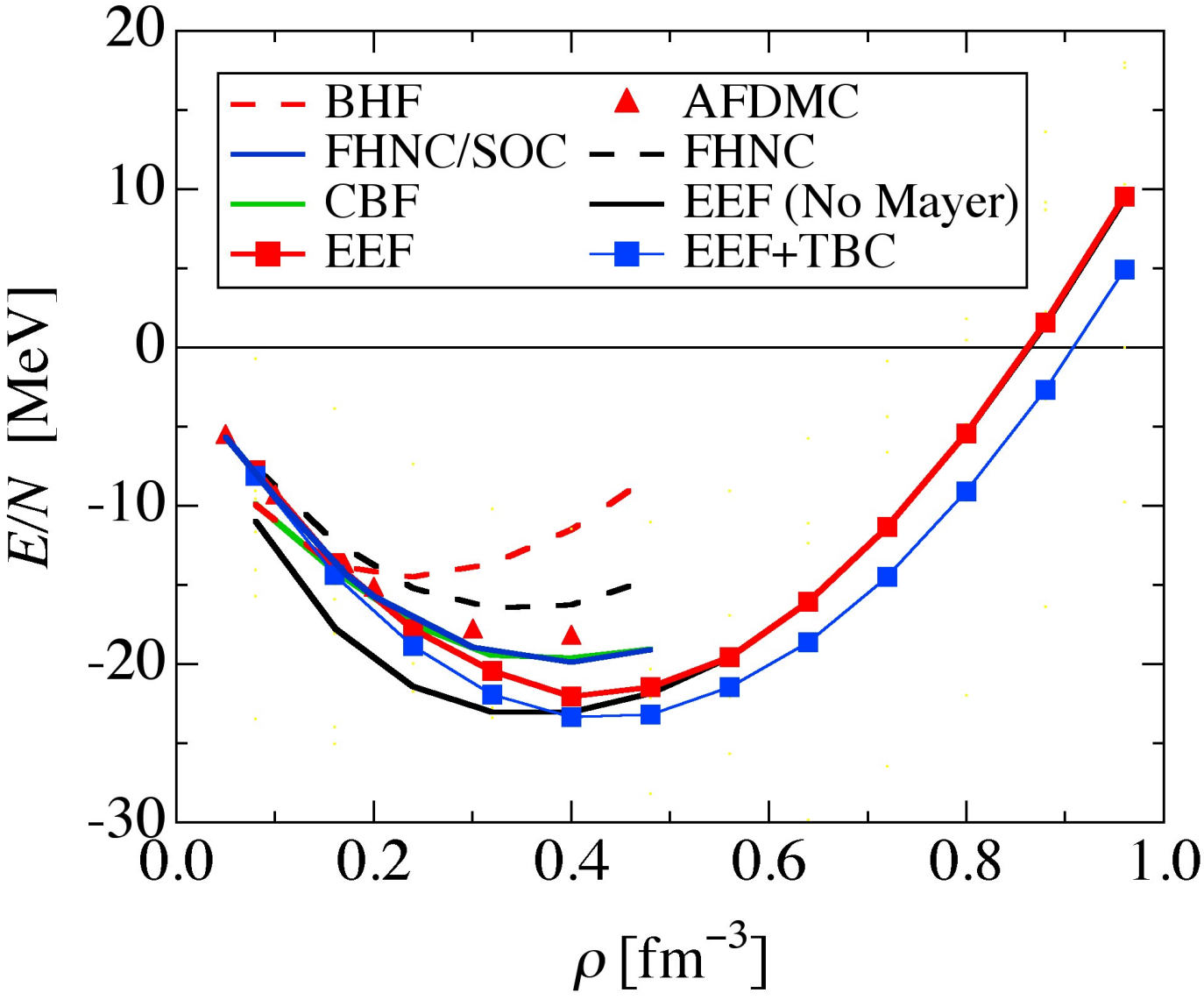
変分 **$F_{\mathrm{C}s}(r), g_{\mathrm{T}}(r)$ に対する Euler-Lagrange 方程式を解く**



V6'pot.

中性子物質の一核子当たりのエネルギー(preliminary)

GFMC: J. Carlson et al., Phys. Rev. C 68 (2003) 025802.
AFDMC: A. Salsa et al., PRC68 (2003) 024308.
BBG, BHF, FHNC, CBF: I. Bombaci et al., Phys. Lett. B609 (2005) 232.



V6'pot.

対称核物質の一核子当たりのエネルギー (preliminary)

AFDMC, FHNC/SOC: A. Lovato et al., PRC83 (2011) 054003.
BHF, FHNC, CBF: I. Bombaci et al., Phys. Lett. B609 (2005) 232.

3体力の考慮

UIX potential 斥力部分 $V^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}_j, \boldsymbol{r}_k) = U \sum_{\mathrm{cyc}} T(r_{ij})\, T(r_{jk})$

$$\boxed{\frac{E_3}{N} = \frac{\rho^2}{6} \iint d\boldsymbol{r}_{12} d\boldsymbol{r}_{23} F(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_3)\, V^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_3)}$$

$F(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_3)$: 3体分布関数

拡張したKirkwoodの仮定

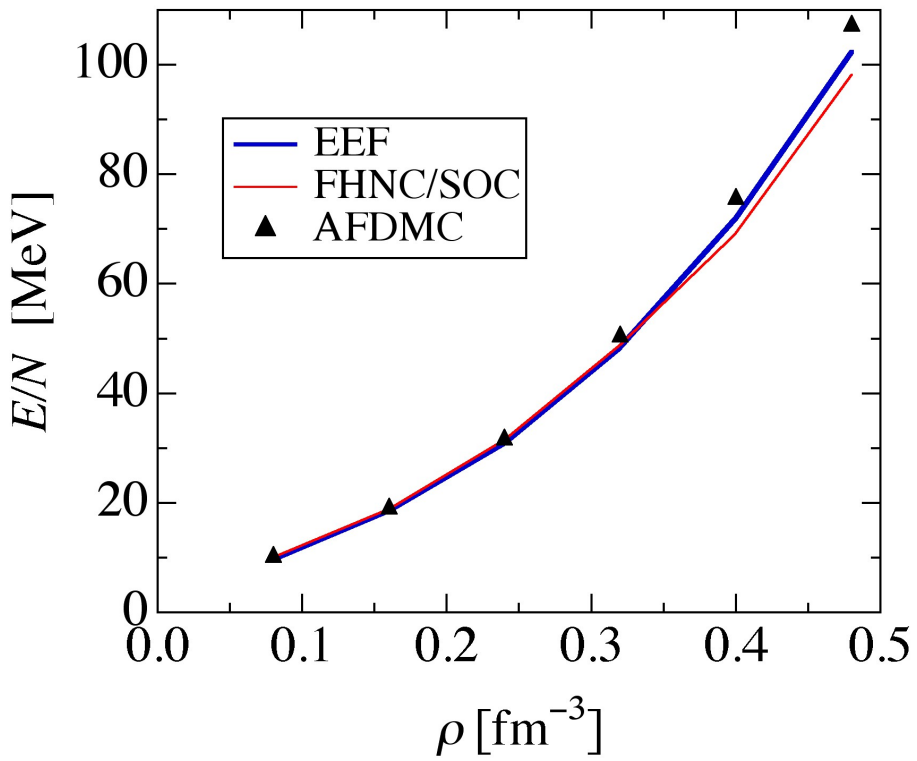
$$\boxed{F(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_3) = F(r_{12}) F(r_{23}) F(r_{31}) \frac{F_{\mathrm{F}}(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_3)}{F_{\mathrm{F}}(r_{12}) F_{\mathrm{F}}(r_{23}) F_{\mathrm{F}}(r_{31})}}$$

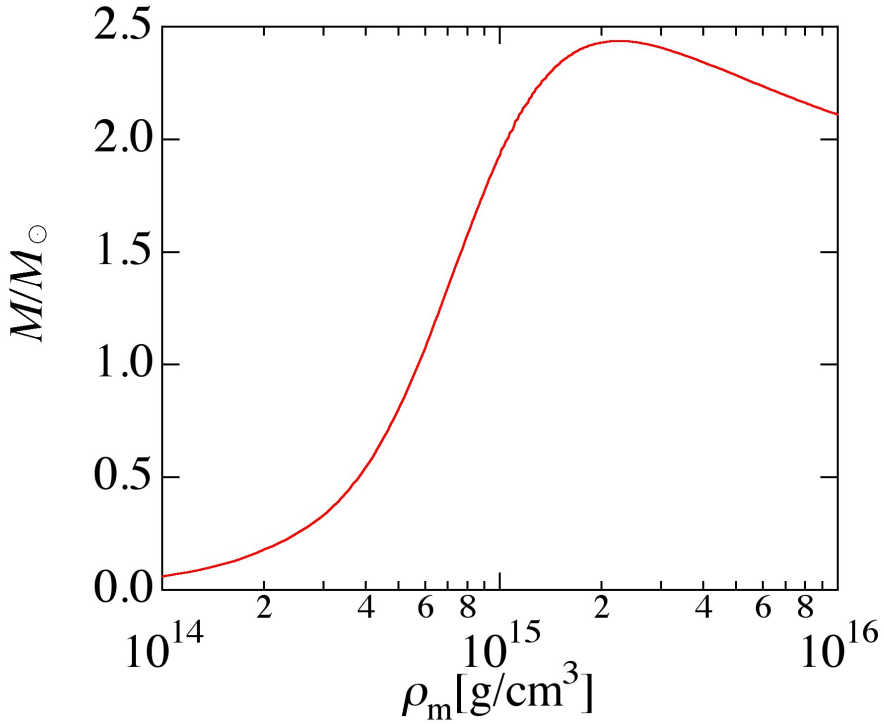
$$F(r_{12}) = \sum_{s=0}^{1} F_s(r)$$

$F_{\mathrm{F}}(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_3)$: Fermi気体の3体分布関数

3体力UIXの斥力項を考慮した中性子物質

核力ポテンシャル：2体力V6'+3体力UIX（斥力項）





中性子物質の一核子当たりのエネルギー（preliminary）

中性子物質EOSを用いた中性子星

AFDMC, FHNC/SOC: A. Lovato et al., PRC83 (2011) 054003.

II. 現実的核力から出発したクラスター変分法での、超新星爆発計算用核物質状態方程式作成

現実的核力から出発た多体計算に基づくSN-EOS作成を目指す

EOS作成方法：Shen et al.の方法を踏襲

一様核物質：クラスター変分法（2体クラスター近似）

2体力 AV18＋3体力 UIX

3体力の不定性を利用し、原子核経験値を再現

非一様核物質：Thomas-Fermi（TF）近似

Wigner-Seitz格子内の自由エネルギー密度を最小化

現状

一様相の自由エネルギーは完備

有限温度非一様相のTF計算中

II-1. 絶対零度核物質の状態方程式

The Hamiltonian: $H = H_2 + H_3$

$$H_2 = -\sum_{i=1}^{N} \frac{\hbar^2}{2m}\nabla_i^2 + \sum_{i<j}^{N} V_{ij} \quad , \qquad H_3 = \sum_{i<j<k}^{N} V_{ijk}$$

V_{ij}: The AV18 potential (isoscalar), V_{ijk}: The UIX potential

The AV18 two-body potential (Isoscalar part)

R. B. Wiringa et al., PRC **51** (1995) 38

$$V_{ij} = \sum_{t=0}^{1} \sum_{s=0}^{1} \Big[V_{\mathrm{C}ts}(r_{ij}) + V_{\mathrm{T}t}(r_{ij}) S_{\mathrm{T}ij} + V_{\mathrm{SO}t}(r_{ij}) \left(\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{L}_{ij}\right)$$

中心力　　テンソル力　　スピン軌道力

$$+ V_{\mathrm{qL}ts}(r_{ij}) \left|\boldsymbol{L}_{ij}\right|^2 + V_{\mathrm{qSO}t}(r_{ij}) \left(\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{L}_{ij}\right)^2 \Big] P_{tsij} + V_{\mathrm{corr}}$$

L2乗項　　2次のスピン軌道力

t: isospin, s: spin

Jastrow波動関数

$$\Psi(x_1,\cdots,x_N) = Sym\left[\prod_{i<j} f_{ij}\right]\Phi_{\mathrm{F}}(x_1,\cdots,x_N)$$

Φ_{F}: 絶対零度Fermi気体の波動関数　　Sym[ ]: 対称化演算子

f_{ij}: 相関関数

$$f_{ij} = \sum_{t=0}^{1}\sum_{\mu}\sum_{s=0}^{1}\left[f^{\mu}_{\mathrm{C}ts}(r_{ij}) + s\, f^{\mu}_{\mathrm{T}t}(r_{ij})S_{\mathrm{T}ij} + s\, f^{\mu}_{\mathrm{SO}t}(r_{ij})\left(\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{L}_{ij}\right)\right]P^{\mu}_{tsij}$$

- $f_{\mathrm{C}ts}{}^{\mu}$: 中心力型相関関数
- $f_{\mathrm{T}t}{}^{\mu}$: テンソル力型相関関数
- $f_{\mathrm{SO}t}{}^{\mu}$: スピン軌道力型相関関数

t : isospin　s : spin

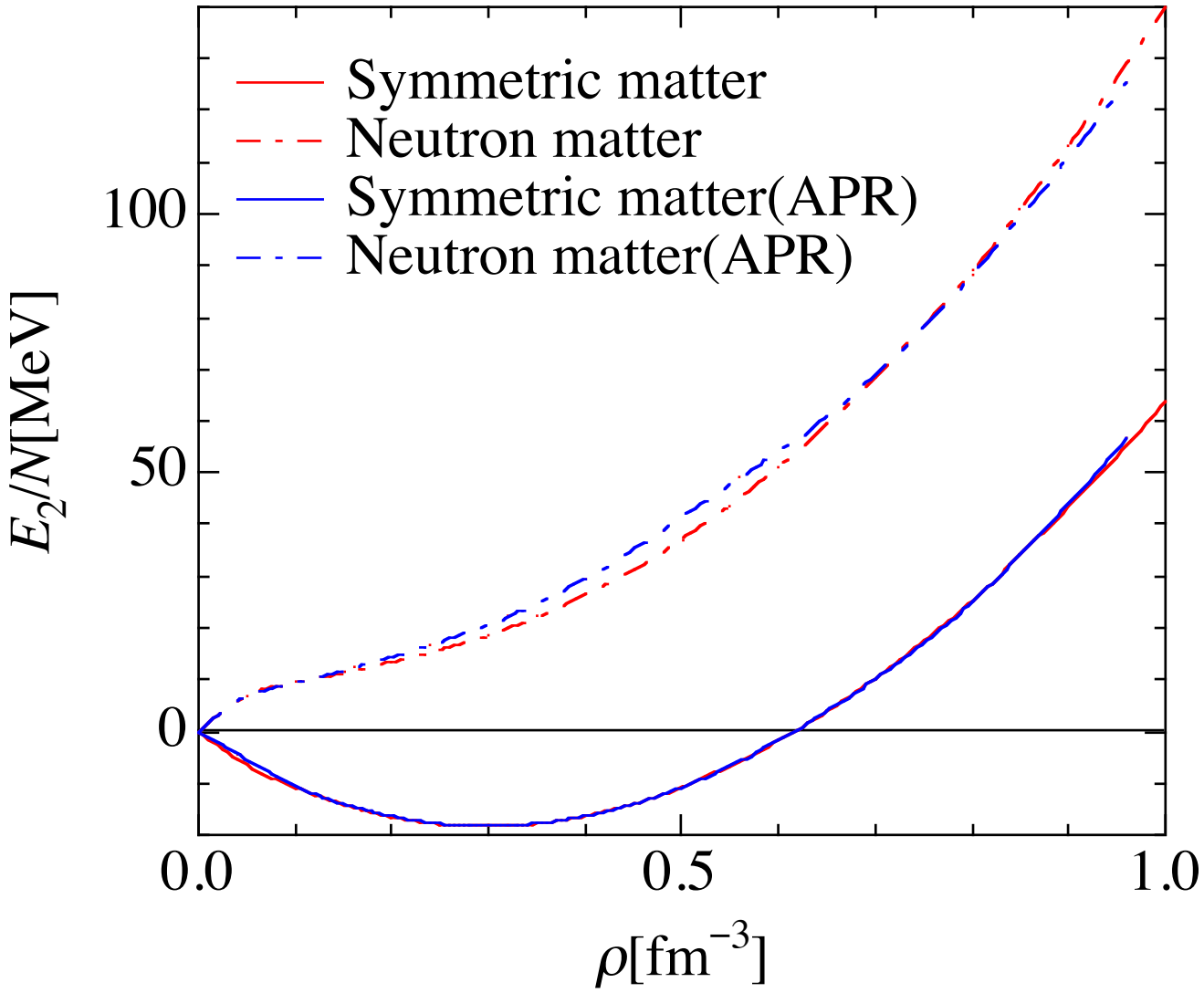
$\mu = (+, 0, -)$

for (p-p, p-n, n-n) pairs (t =1)

H_2の期待値の2体クラスター近似　　$f_{\mathrm{C}ts}{}^{\mu}, f_{\mathrm{T}t}{}^{\mu}, f_{\mathrm{SO}t}{}^{\mu}$ で最小化

拘束条件: spin-isospin依存のMayer条件

Healing distance: Akmal et al.,(APR)のFHNC計算結果を再現



$a_h = 1.76$

2体核力までを考慮した核物質の一核子当たりのエネルギー

Our results are in good agreement with those by APR

H. Kanzawa et al., NPA791(2007)232.

3体力エネルギー

The UIX potential $V_{ijk} = V_{ijk}^{2\pi} + V_{ijk}^{\mathrm{R}}$

$V_{ijk}^{2\pi}$: *two-pion exchange part*　　V_{ijk}^{R} : *repulsive part*

3体力の不定性を利用し、核物質実験値を再現する

$$\boxed{\frac{E_3}{N}(x) = \alpha \frac{E_3^{\mathrm{R}}}{N}(x) + \beta \frac{E_3^{2\pi}}{N}(x) + \gamma \rho^2 \mathrm{e}^{-\delta\rho}\left[1 - (1-2x)^2\right]}$$

補正項

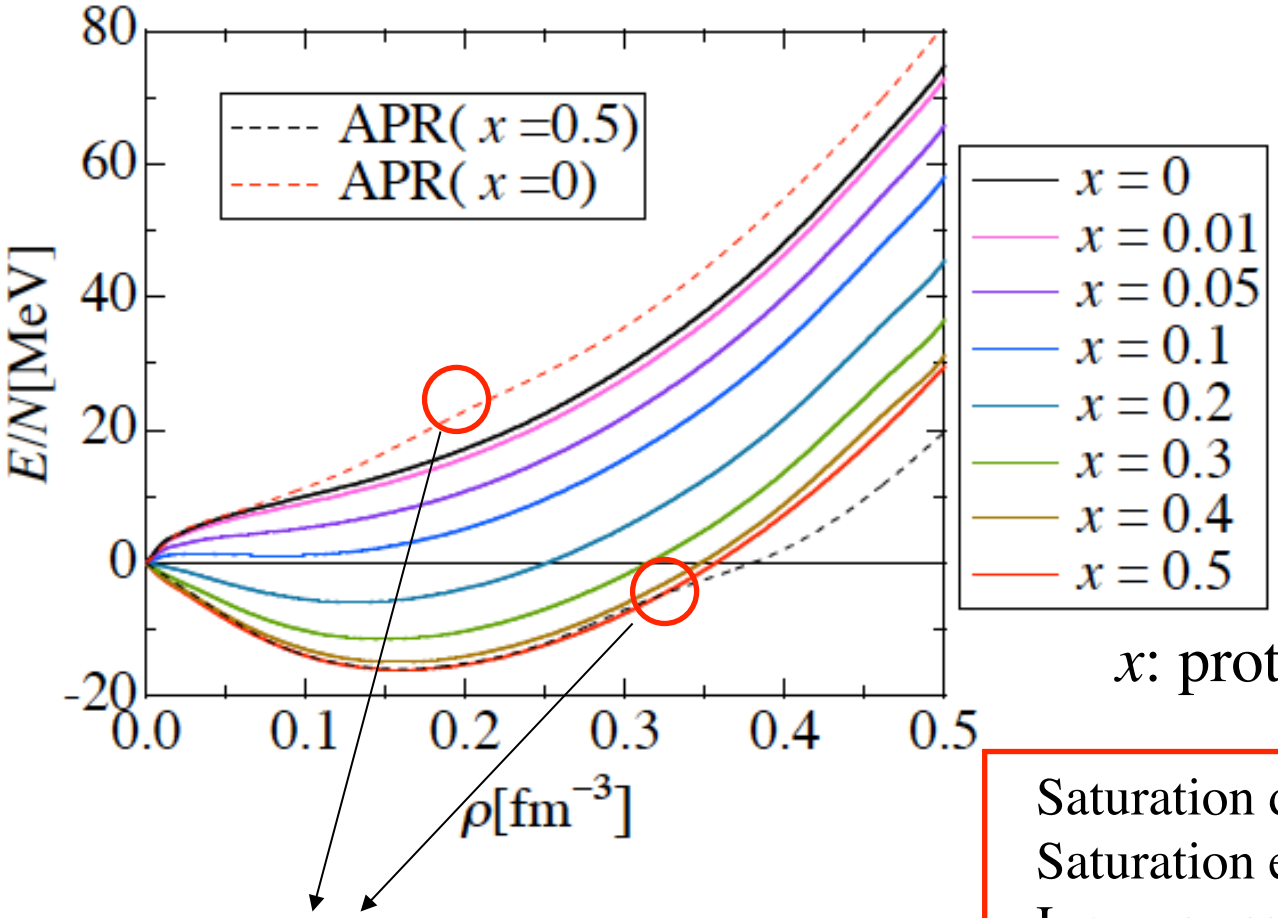
$\frac{E_3^q}{N}$: V_{ijk}^q の寄与のFermi gas期待値　$(q = 2\pi, \mathrm{R})$

Total energy $\boxed{\frac{E}{N} = \frac{E_2}{N} + \frac{E_3}{N}}$　　x: 陽子混在度

パラメター : $\alpha, \beta, \gamma, \delta$　　飽和点での経験値を再現

→　原子核のTF計算が実験値を再現するよう微調整

絶対零度非対称核物質のエネルギー

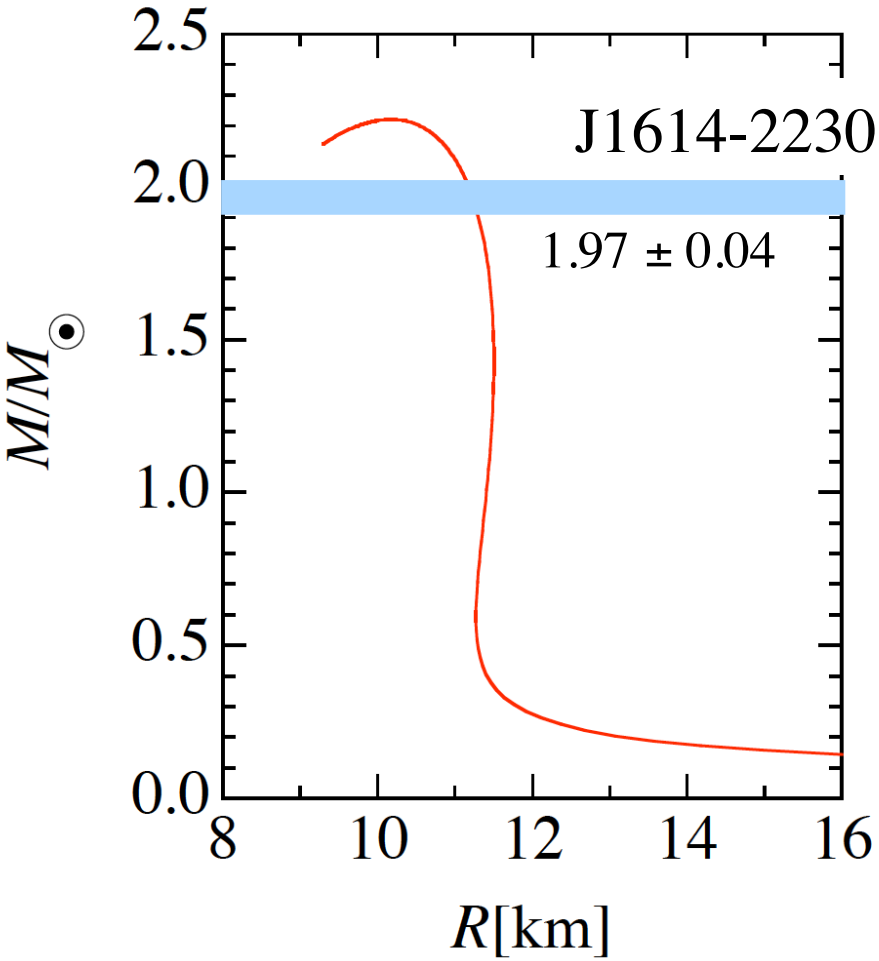


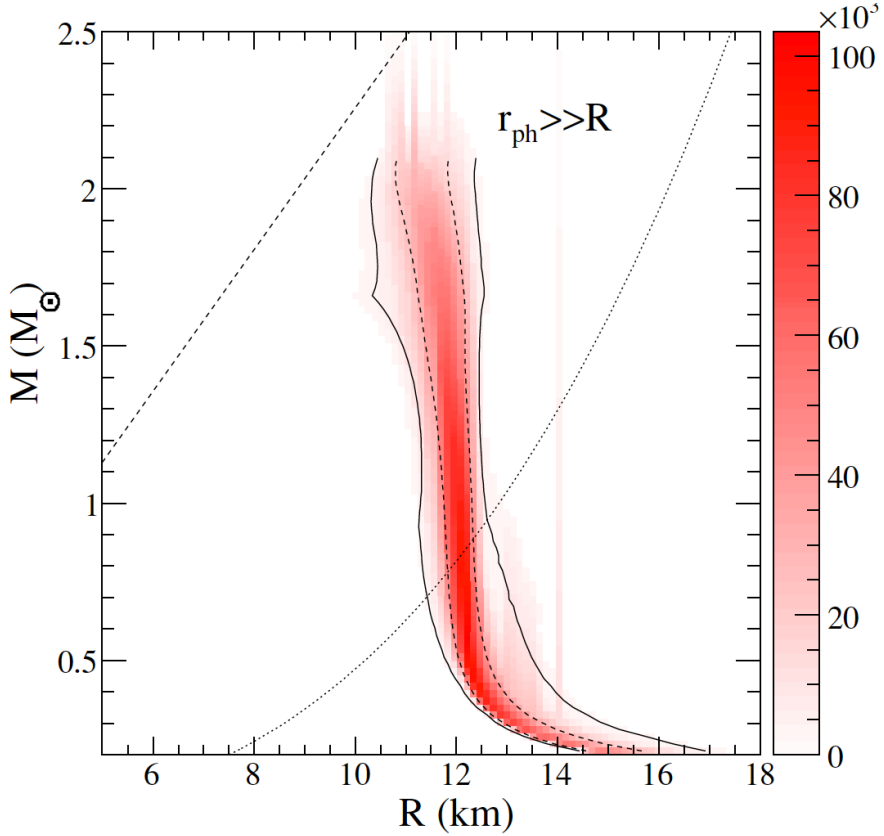
x: proton fraction

Pion condensation

Saturation density: 0.16 fm^{-3}
Saturation energy: -16.1 MeV
Incompressibility: 250 MeV
Symmetry energy: 30 MeV

中性子星の質量と半径





A. W. Steiner et al., APJ722 (2010) 33

II-2. 有限温度非対称核物質の状態方程式

K. E. Schmidt and V. R. Pandharipande: Phys. Lett. 87B(1979) 11.

Free energy

$$\frac{F}{N} = \frac{E_0}{N} - T\frac{S_0}{N}$$

E_0/N : 近似的内部エネルギー
S_0/N : 近似的エントロピー

$$\frac{E_0}{N} = \frac{E_2}{N} + \frac{E_3}{N}$$

E_2: $< H_2 >$を2体クラスター近似で評価

有限温度Jastrow波動関数

$$\Psi(T) = Sym\left[\prod_{i<j} f_{ij}\right]\Phi_{\mathrm{F}}(n_{\mathrm{p}}(k), n_{\mathrm{n}}(k))$$

相関関数 f_{ij}は、絶対零度と同じ

E_3/N: Same as at 0 K

$$\frac{S_0}{N} = -\frac{k_{\mathrm{B}}}{N}\sum_{i=\mathrm{p,n}}\sum_j \left\{\left[1-n_i(k_j)\right]\ln\left[1-n_i(k_j)\right] + n_i(k_j)\ln\left[n_i(k_j)\right]\right\}$$

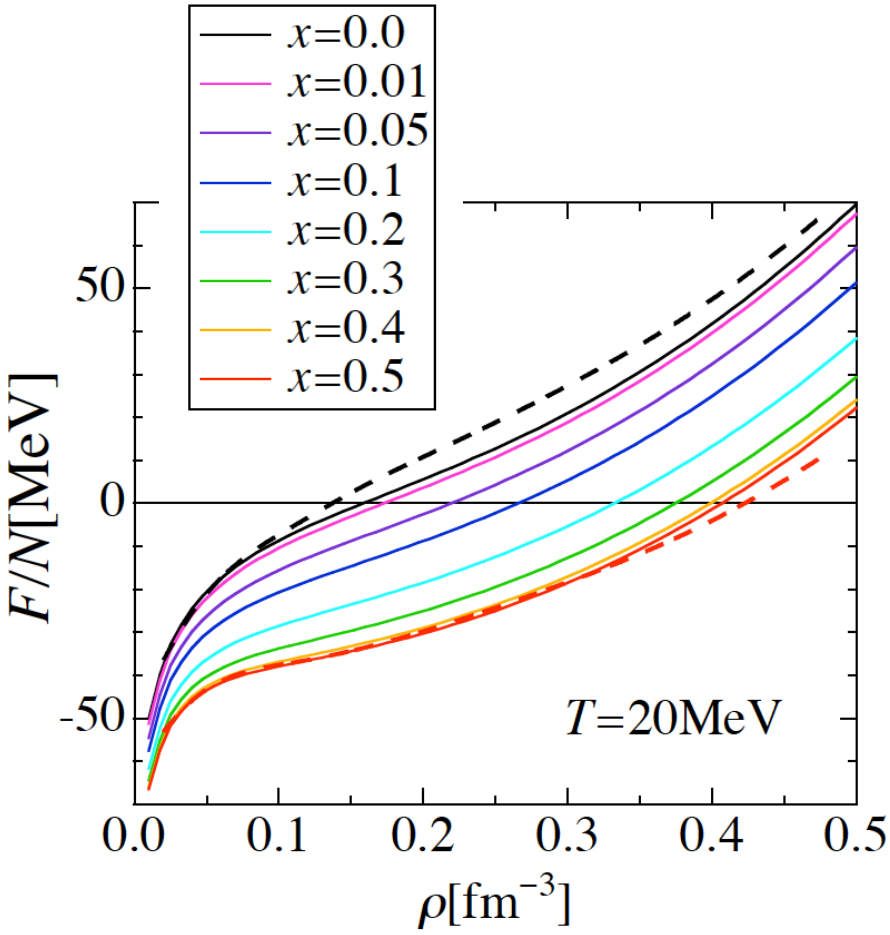
平均占有確率 $n_i(k)$

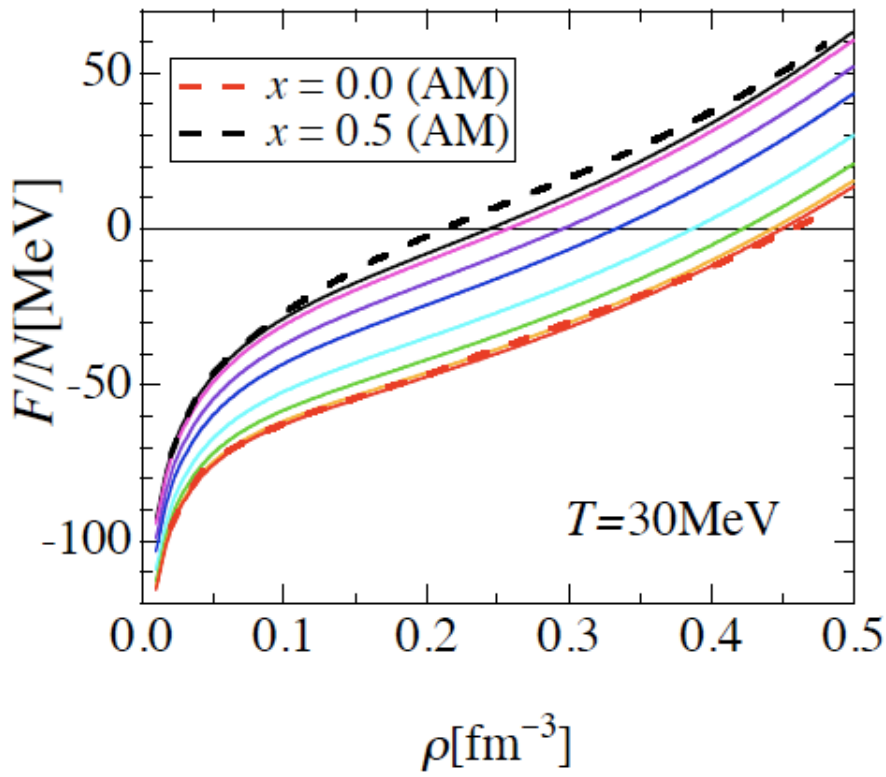
$$n_i(k) = \left\{1+\exp\left[\left[e_i(k)-\mu_i\right]/k_{\mathrm{B}}T\right]\right\}^{-1}, \quad e_i(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_i^*} \quad (i = \mathrm{p, n})$$

← 有効質量

自由エネルギーを m_{p}^* と m_{n}^* について最小化

非対称核物質の自由エネルギー

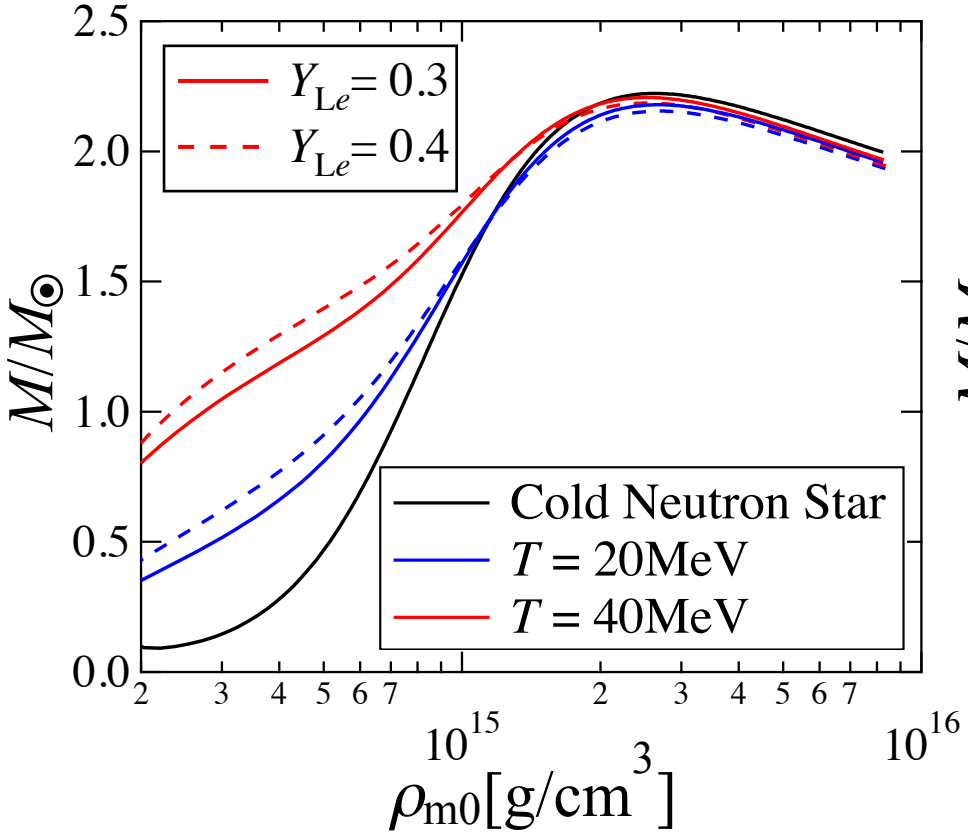




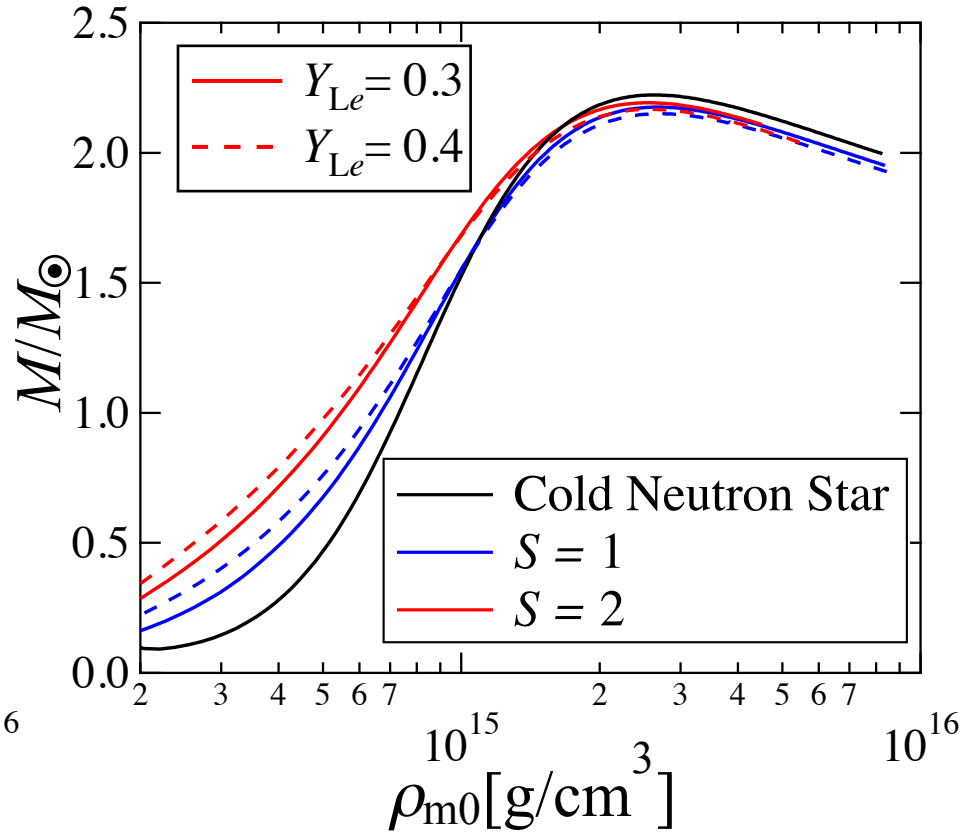
H. Togashi et al., in preparation.

AM: A. Mukherjee, PRC79(2009)045811.

原始中性子星の中心密度と質量（preliminary）



等温物質の質量と中心密度



等エントロピー物質の質量と中心密度

※ PNSのcrustのEOSはCNSの場合を代用（PTP 122(2009) 673)

H. Togashi et al., in preparation.

II-3 非一様核物質に対するThomas-Fermi計算

Wigner-Seitz格子近似: 格子当たりの自由エネルギー

$$F_{\mathrm{cell}}\left(n_{\mathrm{B}},Y_{\mathrm{p}},T\right)=\int\frac{F}{N}\left(n_p(r),n_n(r),T\right)n(r)d\boldsymbol{r}+F_0\int\left|\nabla n(r)\right|^2 d\boldsymbol{r}+E_{\mathrm{Coul}}$$

$$E_{\mathrm{Coul}}=\frac{e^2}{2}\iint\frac{\left[n_p(\boldsymbol{r})-n_e\right]\left[n_p(\boldsymbol{r}')-n_e\right]}{\left|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'\right|}d\boldsymbol{r}d\boldsymbol{r}'+\Delta E$$

n_n: 中性子数密度
n_p: 陽子数密度

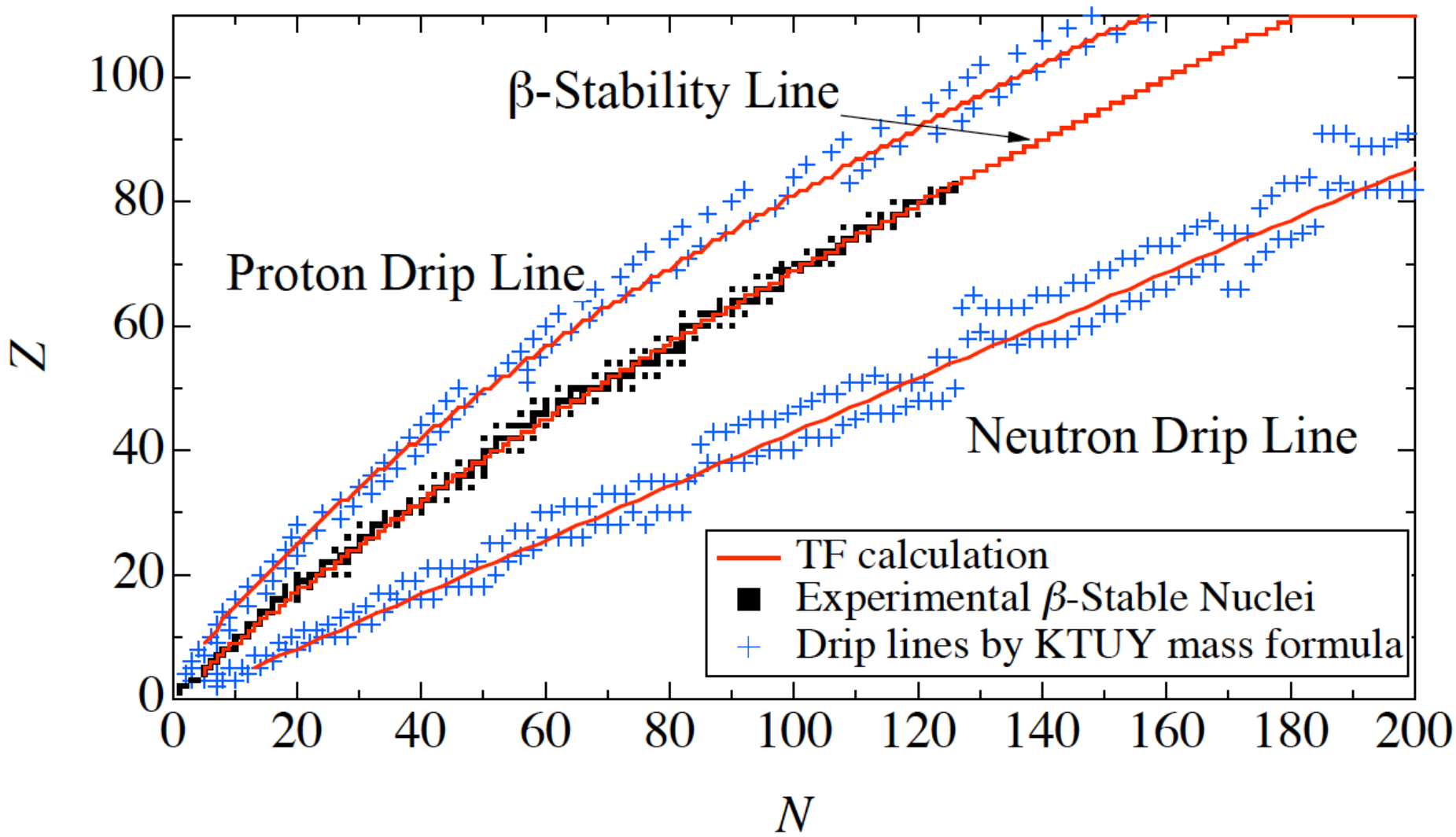
$F_0 = 68\ \mathrm{MeVfm}^5$

$$n_i(r)=\begin{cases}\left(n_i^{\mathrm{in}}-n_i^{\mathrm{out}}\right)\left[1-\left(\dfrac{r}{R_i}\right)^{t_i}\right]^3+n_i^{\mathrm{out}} & \text{for } 0\le r\le R_i\\ n_i^{\mathrm{out}} & \text{for } R_i\le r\le R_{\mathrm{Cell}}\end{cases}$$

$(i=p,n)$

各バリオン数密度 n_{B}, 陽子混在度 Y_{p}, 温度 T について、
自由エネルギー密度を最小化

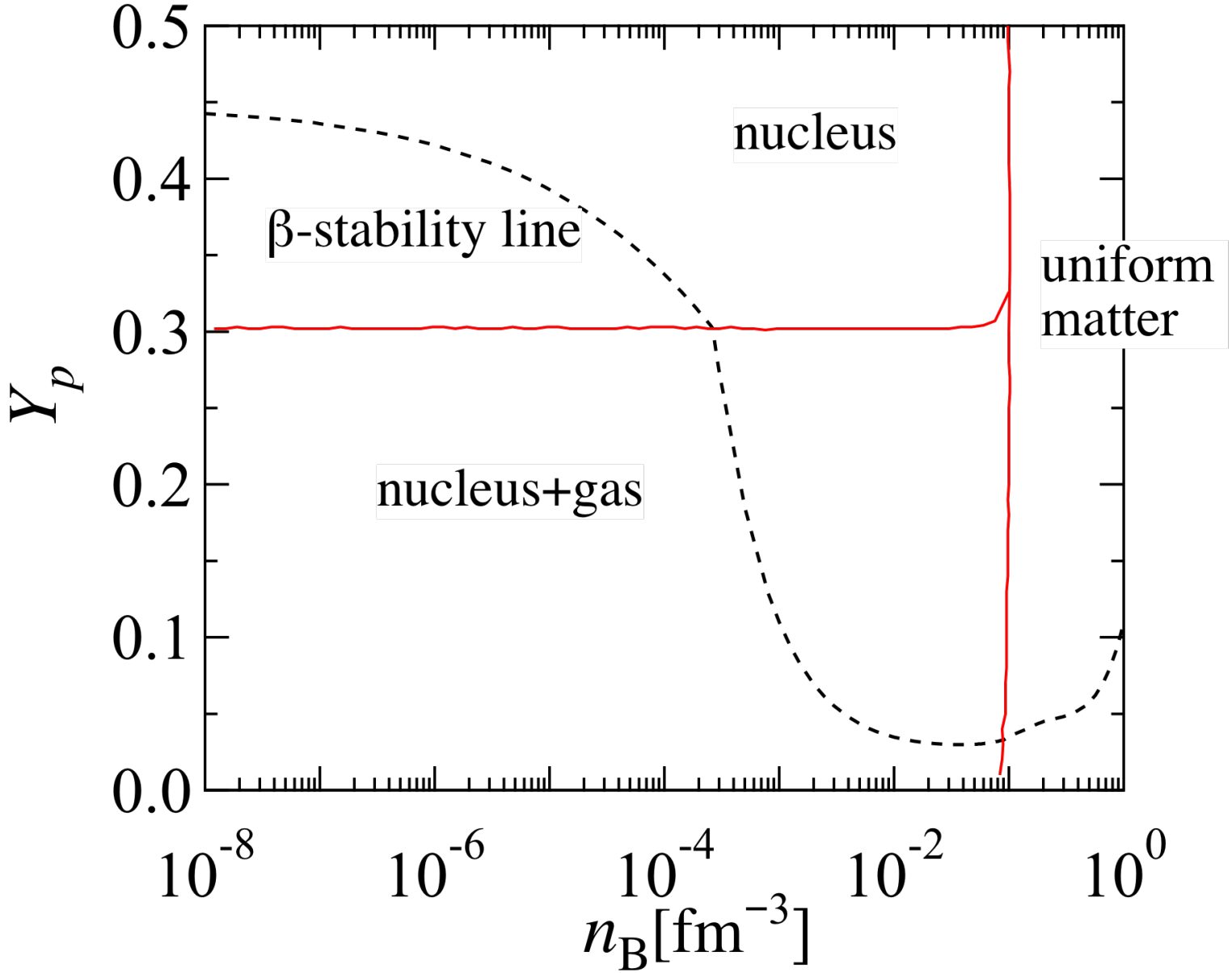
The β-stability line and Drip lines

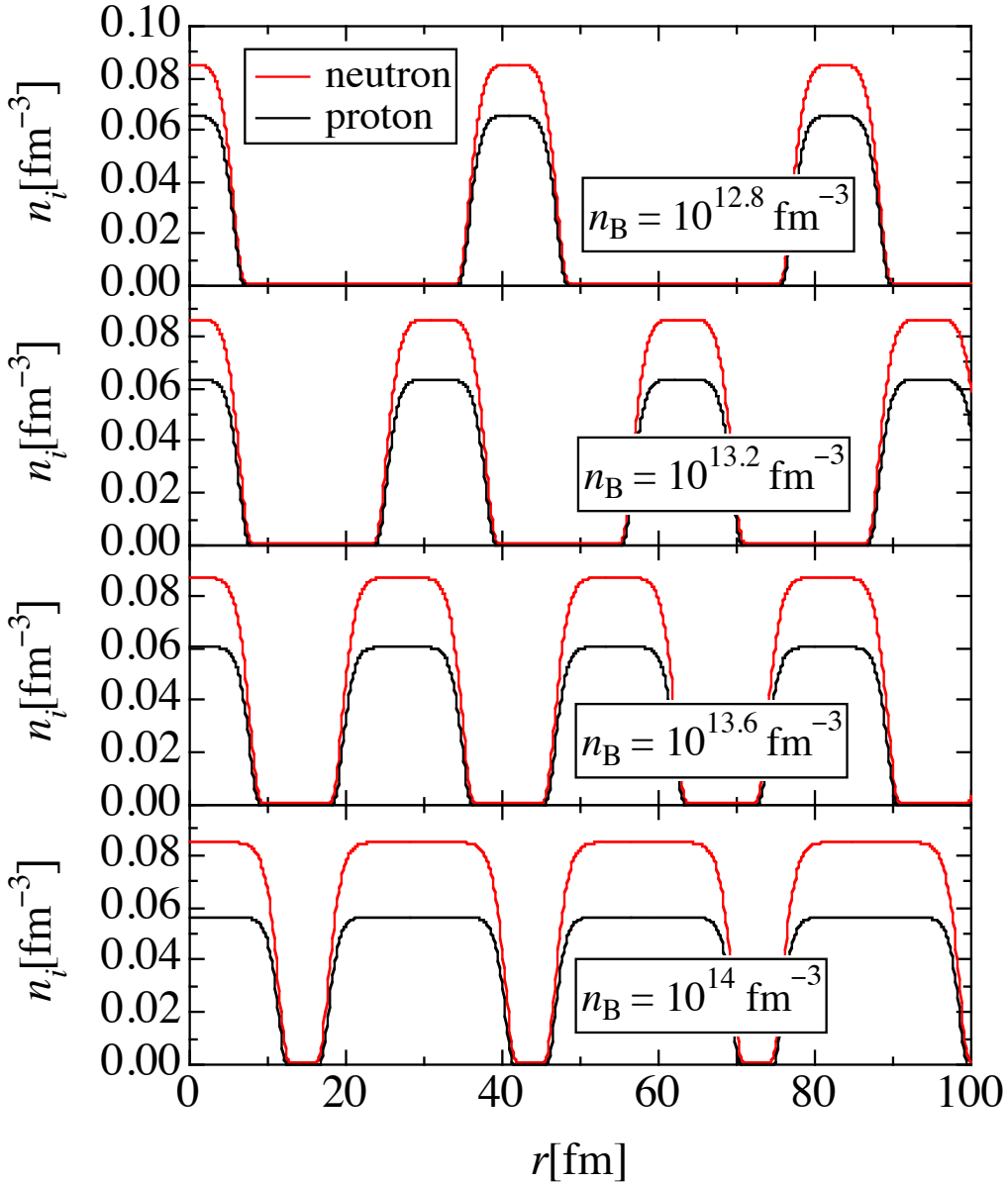


Kanzawa et al., Prog. Theor. Phys. 122(2009) 673.

KTUY (Koura et al.) : PTP113(2005)305.

絶対零度核物質の相図（preliminary）





$Y_p = 0.398$
$T = 4.78$ MeV

有限温度非一様核物質TF計算例(preliminary)

まとめ

I. エネルギー汎関数を用いた変分法の研究

2体力：v6’（中心力+テンソル力）

3体力：v6’ + UIX斥力項（中性子物質）

妥当な解

課題

核力：LS力、高次のL依存性、3体力2π交換項 等への拡張
有限温度核物質、非対称核物質等への拡張、など

II. 現実的核力から出発したクラスター変分法での、超新星爆発計算用核物質状態方程式作成

一様核物質EOS：（原始）中性子星
非一様核物質EOS: 絶対零度相図、有限温度核物質TF計算進行中

課題

TF計算収束性（一様相データ）、α粒子の取り扱い、
SN-EOSテーブル完成を目指す