



12. 膨張する核物質のシミュレーション

近角真平¹, 丸山敏毅², 岩本昭³,

¹ 筑波大学物理学研究科 ² 原研先端基礎研究センター ³ 原研物質科学
(99.4.30)

We study the properties of nuclear matter expanding dynamically using QMD model. For this purpose, we developed an extended periodic boundary condition prescription. To calculate EOS of the expanding nuclear matter, the liquid-gas phase transition is discussed.

I. はじめに

本研究の目的は飽和密度 ρ_0 以下核物質の動的な性質を調べることである。飽和密度以下核物質では核子が局在して安定状態を作ることが知られており、QMD を用いた安定構造の研究が行われている [1]。飽和密度の 1/10 以下の状況下では下図右のようなクラスター構造が得られる。



このようなクラスター構造は重イオン反応の Multifragmentation を連想させる。しかしながら上図はエネルギー最小の定常状態であり、動的な反応の中で現れるフラグメントではない。重イオン反応自体のシミュレーションは多くの仕事が行われている [2] が、我々は無限系である核物質の動的シミュレーションを行いたいと思う。核物質自体を運動させることができれば表面効果や衝突係数の複雑さを気にせずに議論することが可能である。

核物質は無限系であるので実際のシミュレーションは周期的境界条件を用いることになるが、通常の方法では系の密度は一定に保たなくてはならない。そこで我々は膨張無限系を扱うための拡張した周期的境界条件を考えた。以下、この新しい方法について説明する。

II. 拡張した周期的境界条件

無限系は 1 個の立方体セルとその周囲に配置する 26 個のコピーセルで構成される。膨張する無限系の場合、明らかに周囲セルは基本セルと同じではない。しかしながら膨張が一様に行われていると仮定すると基本セルの情報から周囲セルの情報を得ることができる。一様膨張では i 番目の粒子は位置 \mathbf{R}_i と運動量 \mathbf{R} について以下の関係式が成り立つ。

$$\mathbf{P}_i = h\mathbf{R}_i \quad (1)$$

ここで h は膨張の速度を決める定数である。今、中心セルの原点から \mathbf{D}_k に k 番目の周囲セルがあるとして、周囲セル原点の速度 \mathbf{V}_k を以下のように定義する。

$$\begin{aligned} M\mathbf{V}_k &= h\mathbf{D}_k \\ \frac{d\mathbf{D}_k}{dt} &= \mathbf{V}_k \end{aligned} \quad (2)$$

M は粒子の質量である。このとき k 番目周囲セルにある粒子の運動量は以下のように与えることができる。

$$\mathbf{P}_i \rightarrow \mathbf{P}_i + M\mathbf{V}_k \quad (3)$$

中心セルと周囲セルの関係は以下のようにになっている。

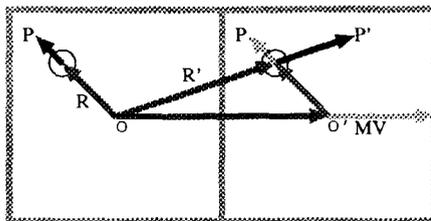


FIG. 1. 中心セルと周囲セルの関係

周囲セルについても、その静止系で見れば中心セルと全く同じ運動することがわかる。その意味でセル同士は周期性を持っている。膨張の過程ではセル間の境界もまた膨張している。粒子が(1)で与えたものとは別の運動量をもつと、粒子が境界を越えるという場合がある。全運動量が(1)で与えた集団の運動量と熱的な運動量からなると考えれば、境界を越えるのはこの熱的運動量をもつ粒子である。

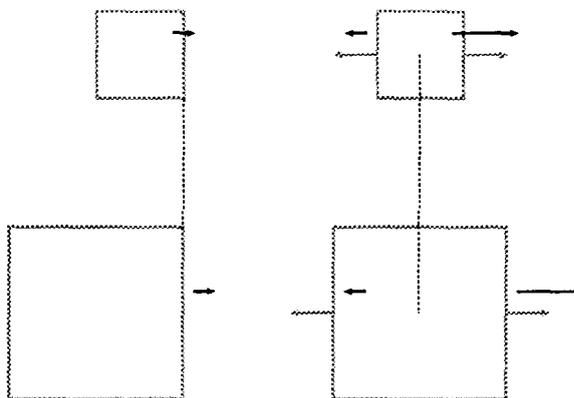


FIG. 2. 境界を越える粒子

粒子が境界を越えた場合、その粒子に適当な運動量補正を与える必要がある。補正量は左右それぞれの境界の静止系で粒子の運動量が等しくなるようにすることで与えられる。上左の図は中心セルの右境界の静止系で粒子が境界を越える様子を表している。一方、同じ粒子を中心セルの静止系で見ると上右図のようになる。(1)によると粒子がk番目のセルに入った場合与えるべき補正は以下のようにになる。

$$\mathbf{P}_i \text{ (total)} \rightarrow \mathbf{P}_i \text{ (total)} - h\mathbf{D}_k \quad (4)$$

ここで $\mathbf{P}_i \text{ (total)}$ は集団運動量と熱的運動量の両方を含む。以上が膨張する無限系を扱うための拡張した周期的境界条件の方法である。

TABLE I. Effective interaction parameter set ($K=280$ MeV)

α (MeV)	-121.9	β (MeV)	197.3
τ	4/3	C_{s0} (MeV)	25.0
$C_{ex(1)}$ (MeV)	-258.5	$C_{ex(2)}$ (MeV)	375.6
μ_1 (MeV)	2.35	μ_2 (MeV)	0.4
V_{SF}	20.68	C_p	115.0
p_0	120.0	q_0	2.5
L (fm ²)	1.95		

III. 膨張する核物質

上記の拡張した周期的境界条件を QMD に適用し、核物質の膨張をシミュレートする。QMD 自体については論文 [1] を参照されたい。使用する Hamiltonian は以下のとおりである。

$$\begin{aligned}
 H &= \sum_{i=1}^A \frac{\mathbf{P}_i^2}{2M} + V_{\text{nucl}} + V_{\text{surface}} + V_{\text{Coulomb}} + V_{\text{Pauli}} \\
 V_{\text{nucl}} &= \frac{\alpha}{2\rho_0} \sum_{i=1}^A \langle \rho_i \rangle + \frac{\beta}{(1+\tau)\rho_0^\tau} \sum_{i=1}^A \langle \rho_i \rangle^\tau + \frac{C_{s0}}{2\rho_0} \sum_{i=1}^A \sum_{k=1}^{27} \sum_{j \neq i}^A (1 - 2|c_i - c_{j(k)}|) \rho_{ij(k)} \\
 &\quad + \frac{C_{ex(1)}}{2\rho_0} \sum_{i=1}^A \sum_{k=1}^{27} \sum_{j \neq i}^A \frac{1}{1 + \left(\frac{|\mathbf{P}_i - \mathbf{P}_j + \mathbf{P}_{\text{cell}(k)}|}{\mu_1 \hbar} \right)^2} \rho_{ij(k)} + \frac{C_{ex(2)}}{2\rho_0} \sum_{i=1}^A \sum_{k=1}^{27} \sum_{j \neq i}^A \frac{1}{1 + \left(\frac{|\mathbf{P}_i - \mathbf{P}_j + \mathbf{P}_{\text{cell}(k)}|}{\mu_2 \hbar} \right)^2} \rho_{ij(k)} \\
 V_{\text{surface}} &= \frac{V_{SF}}{2\rho_0^{5/3} L} \sum_{i=1}^A \sum_{k=1}^{27} \sum_{j \neq i}^A \int d^3 r \int d^3 r' \nabla \rho_i(\mathbf{r}) \nabla \rho_j(k)(\mathbf{r}') \\
 V_{\text{Coulomb}} &= \frac{e^2}{2} \sum_{i=1}^A \sum_{k=1}^{27} \sum_{j \neq i}^A \int d^3 r \int d^3 r' \frac{c_i c_{j(k)}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} e^{-\frac{r-r'}{r_{scr}}} \rho_i(\mathbf{r}) \rho_{j(k)}(\mathbf{r}') \\
 V_{\text{Pauli}} &= \frac{C_p}{2(q_0 p_0 / \hbar c)^3} \sum_{i=1}^A \sum_{k=1}^{27} \sum_{j=1}^A \exp \left(-\frac{|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j + \mathbf{R}_{\text{cell}(k)}|^2}{2q_0^2} - \frac{|\mathbf{P}_i - \mathbf{P}_j + \mathbf{P}_{\text{cell}(k)}|^2}{2p_0^2} \right) \delta_{\tau_i, \tau_{j(k)}} \delta_{\sigma_i, \sigma_{j(k)}} \quad (5)
 \end{aligned}$$

これらは城戸俊彦氏(原研)の研究で用いられたものと同じである。なお、QMD の衝突項は低密度核物質では重要でないの
で用いていない。

はじめに Metropolis の方法で一定密度一定温度のサンプルをつくる。研究会では初期密度として飽和密度 ρ_0 を選んだが、
この報告では $2\rho_0$ とする。コントロールパラメータはこの初期温度と膨張速度パラメータ h である。ただし、便宜上 h を以
下のように再定義しておく。

$$\mathbf{P}_i = h \frac{\mathbf{R}_i}{\rho_0^{1/3}} P_F \quad (6)$$

P_F は Fermi 運動量である。膨張はこの h によって決まる速度で平均密度が $0.05\rho_0$ になるところまで行われる。たとえば
 $h = 0.1$ の場合、所要時間は $60(\text{fm}/c)$ くらいである。各時刻では Virial 定理によって中心セル内の平均圧力が計算される。

$$P = \frac{2}{3A} \rho \sum_{i=1}^A \frac{\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{P}_i}{2} + \frac{1}{3A} \rho \sum_{i=1}^A \sum_{j=1}^A \mathbf{r}_i \cdot \mathbf{F}_{ij} \quad (7)$$

ここで A は単位セル内の粒子数で $A = 108$ としている。以下に上式を用いて計算した圧力と密度の関係を示す。

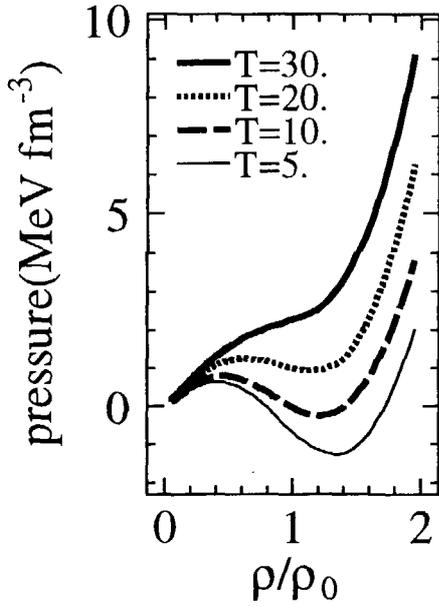


FIG. 3. $h=0.1$

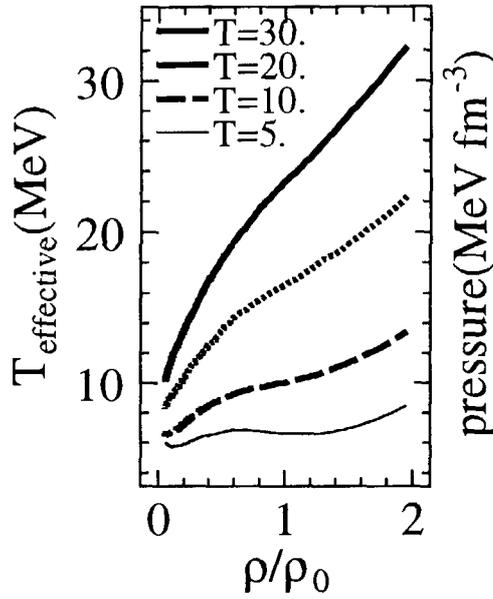


FIG. 4. $h=0.1$

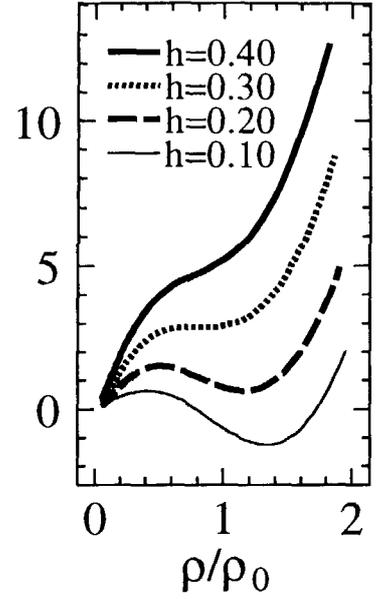


FIG. 5. $T=5 \text{ MeV}$

図3は膨張速度パラメータを $h = 0.1$ 、初期温度を $T = 5 \text{ MeV}$ から $T = 30 \text{ MeV}$ にしたものである。液相気相共存領域が $0.3\rho_0$ から $1.4\rho_0$ に存在している。共存領域は初期温度が高いほど狭くなる。これらの温度は実験的に知られている臨界温度に比べて高いが、系の有効温度は共存領域に入る段階では低くなっている。これを見るために以下のような有効温度を定義しておく。

$$T_{\text{effective}} = \frac{2}{3A} \sum_{i=1}^A \frac{\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{p}_i}{2} \quad (8)$$

これは Virial 定理の第1項にある部分である。図4にこの有効温度の変化の様子を示した。一方、図5は初期温度を 5 MeV として膨張速度パラメータを $h = 0.1$ から $h = 0.4$ 変化させたものである。膨張速度が速くなるにつれて共存領域が狭くなる様子がわかる。

IV. まとめ

以上のように拡張した周期的境界条件を用いることで動的な核物質 EOS が得られた。このような EOS がたどる path は熱平衡を仮定したモデル [3] ではわからないものであり、重イオン反応で系がたどる path に近いと考えられる。我々は表面効果を取り除ける核物質をより realistic に研究することで multifragmentation 機構などの解明を試みようとしている。

-
- [1] T. Maruyama *et al.*, "Quantum molecular dynamics approach to the nuclear matter below the saturation density," Phys. Rev. **C57**, 655 (1997) nucl-th/9705039.
 - [2] P. Finocchiaro *et al.*, "Second order phase transitions: From infinite to finite systems," Nucl. Phys. **A600**, 236 (1996) nucl-th/9512019.
 - [3] M. E. Fisher, Rep. Prog. Phys. 30 (1967) 615; Proc. International School of Physics, Enrico Fermi Course LI, Critical Phenomena, ed. M. S. Green (Academic, New York, 1971).