

Mo

BCS

kargar@susc.ac.ir :

(دریافت مقاله: ۱۳۹۱/۸/۷؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۲/۳/۱۲)

<sup>۹۶-۹۷</sup>Mo

BCS

BCS

BCS

(SPA+RPA)

<sup>۹۶-۹۷</sup>Mo

BCS :

مسیر ایستایی (SPA) [۶] به محاسبه تابع پارش سیستم پرداخته می شود. در این روش ها به واسطه استفاده نکردن از معادله گاف، که در روش BCS به کار گرفته می شود، مقادیر غیر صفری برای پارامتر گاف در دماهای بالا به دست می آید [۷]، در صورتی که با به کارگیری روش BCS از یک دما (دمای بحرانی) به بعد پارامتر گاف صفر به دست می آید. تصحیح دیگری که جهت بهبود بخشیدن نتایج به کارگیری روش BCS در سیستم های کوچک، مانند هسته، بایستی در نظر گرفت تأثیر افت و خیزهای آماری بر شیوه محاسبه پارامتر گاف است. در فرمول بندی استاندارد BCS این پارامتر با کمینه کردن انرژی آزاد سیستم به دست می آید (معادله گاف). در سیستم کوچکی مانند هسته افت و خیزهای آماری باعث انحراف محتمل ترین مقدار این پارامتر از مقدار میانگین آن می شود. استفاده از تابع توزیع احتمال هم دما [۸ - ۹] روشی برای در

اندکی پس از حل موفقیت آمیز مسئله ابرسانایی با روش BCS [۱]، این مدل جهت بررسی خواص ترمودینامیکی هسته ها به عنوان سیستم های فرمیونی بس ذره ای که ذرات تشکیل دهنده آنان دارای خاصیت زوجیت هستند به کار گرفته شد. یکی از اشکالات روش BCS ناوردا نبودن تعداد ذرات در این روش است که در مورد یک سیستم کوچک مانند هسته که تعداد ذرات بسیار کمتر از حد ترمودینامیکی است، منجر به انحراف اساسی نتایج محاسبات از داده های تجربی می شود. جهت اعمال قید ثابت بودن تعداد ذرات در روش BCS تصحیحات گوناگونی از جمله افزودن جمله نافزونور به انرژی آزاد، روش لیکین-نوگامی [۲-۴]، یا به کارگیری روش های تصویرگر تعداد ذرات [۵] انجام شده است. در دیگر روش ها با استفاده از مفهوم انتگرال مسیر و تقریب

استفاده از مقدار میانگین این پارامتر از تابع توزیع احتمال هم‌دما،  $P(\Delta, \beta)$  استفاده می‌کنیم [۹]:

$$P(\Delta, \beta) = \frac{\exp(\Omega(\beta, \Delta))}{\int \exp(\Omega(\beta, \Delta)) d\Delta}, \quad (4)$$

که در آن  $P(\Delta, \beta)$  تابع توزیع احتمال پارامتر گاف  $\Delta$  در دمای  $\frac{1}{\beta}$  است. در نتیجه مقدار میانگین پارامتر گاف،  $\bar{\Delta}$  برابر خواهد بود با

$$\bar{\Delta} = \frac{\int \exp(\Omega(\beta, \Delta)) \Delta d\Delta}{\int \exp(\Omega(\beta, \Delta)) d\Delta} \quad (5)$$

با بهره‌گیری از این رابطه به جای رابطه گاف (۳) جهت تعیین مقدار  $\Delta$ ، روابط ترمودینامیکی حاصل تفاوت‌هایی با روابط استاندارد BCS خواهند داشت. در هر دو رویکرد با توجه به روابط بنیادی زیر

$$N = \frac{\partial \Omega}{\partial \alpha}, \quad (\alpha = \beta \lambda) \quad (6)$$

$$E = -\frac{\partial \Omega}{\partial \beta}, \quad (7)$$

$$S = \Omega - \alpha N + \beta E, \quad (8)$$

تعداد ذرات  $N$  انرژی سیستم  $E$  و آنتروپی  $S$  محاسبه می‌گردند. با استفاده از رابطه (۱) و رابطه گاف (۳) در فرمول‌بندی استاندارد [۱۰] خواهیم داشت:

$$N = \sum \left[ 1 - \frac{\epsilon_k - \lambda}{E_k} \tanh\left(\frac{1}{2} \beta E_k\right) \right], \quad (9)$$

$$E = \sum \epsilon_k \left[ 1 - \frac{\epsilon_k - \lambda}{E_k} \tanh\left(\frac{1}{2} \beta E_k\right) \right] - \frac{\Delta^2}{G}, \quad (10)$$

$$S = 2 \sum \ln[1 + \exp(-\beta E_k)] + 2 \sum \frac{\beta E_k}{1 + \exp(\beta E_k)}. \quad (11)$$

در صورتی که در فرمول‌بندی جدید با استفاده از رابطه (۵) به جای رابطه گاف (۳) به روابط زیر می‌رسیم [۱۱]:

$$N = \sum \left[ 1 - \frac{\epsilon_k - \lambda}{E_k} \tanh\left(\frac{1}{2} \beta E_k\right) \right] + \beta \bar{\Delta} \frac{\partial \bar{\Delta}}{\partial \alpha} \left( \sum \frac{\tanh\left(\frac{1}{2} \beta E_k\right)}{E_k} - \frac{2}{G} \right), \quad (12)$$

نظر گرفتن اثرات افت و خیزها در سیستم‌های کوچک است. در این مقاله ابتدا با معرفی تابع توزیع احتمال هم‌دما [۸-۹] به محاسبه مقدار میانگین پارامتر گاف پرداخته و سپس با استفاده از این پارامتر به بازنویسی روابط مربوط به تعداد ذرات، انرژی، آنتروپی و ظرفیت گرمایی می‌پردازیم. در نهایت به بررسی و مقایسه نتایج این فرمول‌بندی با نتایج روش استاندارد BCS، مدل‌های دیگر و نیز اطلاعات تجربی در مورد هسته‌های  $^{96-97}\text{Mo}$  خواهیم پرداخت.

### BCS

اولین گام در شروع محاسبات در روش BCS نوشتن انرژی کل سیستم همراه با در نظر گرفتن قید تعداد ذرات و سپس استفاده از تبدیل بوگولیووف جهت قطری کرن تابع پتانسیل بزرگ سیستم ( $\Omega$ ) در پایه شبه ذرات است [۱۰]:

$$\Omega = -\beta \sum (\epsilon_k - \lambda - E_k) + 2 \sum \ln(1 + \exp(-\beta E_k)) - \beta \frac{\Delta^2}{G}, \quad (1)$$

که در آن،  $\epsilon_k$  انرژی تک ذره‌ای،  $E_k = \sqrt{(\epsilon_k - \lambda)^2 + \Delta^2}$  انرژی شبه ذرات،  $\lambda$  پتانسیل شیمیایی،  $\Delta$  پارامتر گاف،  $G$  شدت پتانسیل جفت شدگی بین دو ذره و  $\beta = \frac{1}{T}$  که  $T$  دمای ترمودینامیکی هسته است. در روش استاندارد BCS پارامتر گاف با بیشینه کردن آنتروپی، به عبارت دیگر تابع پتانسیل بزرگ سیستم ( $\Omega$ )، و در واقع با انتخاب محتمل‌ترین مقدار برای این پارامتر به دست می‌آید [۱۰]:

$$\frac{\partial \Omega}{\partial \Delta} = 0, \quad (2)$$

که در نتیجه رابطه گاف حاصل می‌شود [۱۰]:

$$\sum \frac{1}{E_k} \tanh\left(\frac{1}{2} \beta E_k\right) = \frac{2}{G}. \quad (3)$$

در سیستم‌های کوچک مانند هسته که تعداد ذرات بسیار کمتر از حد ترمودینامیکی است این انتخاب دارای نقایصی خواهد بود، چرا که افت و خیزهای آماری در دماهای غیر صفر باعث انحراف محتمل‌ترین مقدار این پارامتر از مقدار میانگین آن می‌شوند. بنابراین جهت در نظر گرفتن این افت و خیزها و

$$\sum \left[ \frac{\sec h^{\gamma} \left( \frac{\lambda}{\gamma} \beta E_k \right)}{E_k} \left( \frac{E_k}{\gamma} + \frac{\beta}{\gamma} \frac{\Delta}{E_k} \frac{d\Delta}{d\beta} \right) - \frac{\Delta \tanh \left( \frac{\lambda}{\gamma} \beta E_k \right)}{E_k^{\gamma}} \frac{d\Delta}{d\beta} \right] \quad (17)$$

در این مقاله پروتون‌ها و نوترون‌های هسته به عنوان دو سیستم مستقل در نظر گرفته شده‌اند. بدین ترتیب، کمیت‌هایی مانند آنتروپی کل، انرژی کل و ظرفیت گرمایی هر هسته برابر با حاصل جمع سهم پروتون‌ها و نوترون‌ها می‌باشند:

$$S = S_p + S_n, \quad E = E_p + E_n, \quad C = C_p + C_n. \quad (18)$$

در محاسبات از انرژی‌های تک ذره‌ای پتانسیل نوسانگر هماهنگ تعدیل یافته استفاده شده است که در آن پارامترهای پتانسیل نیلسون به همراه تغییر شکل چهار قطبی به کار گرفته شده‌اند [۱۲]. پارامتر تغییر شکل  $(\beta)$  و همچنین مقادیر پارامتر گاف در دمای صفر،  $\Delta$ ، برای پروتون‌ها و نوترون‌ها در هسته‌های  $^{94}\text{Mo}$  و  $^{96}\text{Mo}$  از مرجع [۷] اخذ شده‌اند. با استفاده از مقادیر  $\Delta$  در دمای صفر شدت پتانسیل جفت شدگی،  $G$ ، برای نوترون‌ها و پروتون‌ها از رابطه (۳) تعیین شده که حاصل این محاسبه به قرار زیر است:

$$G_p(^{94}\text{Mo}) = 0.70 \text{ MeV}; \quad G_n(^{94}\text{Mo}) = 0.17 \text{ MeV}, \quad (19)$$

$$G_p(^{96}\text{Mo}) = 0.15 \text{ MeV}; \quad G_n(^{96}\text{Mo}) = 0.19 \text{ MeV},$$

در هر مرحله از محاسبات انجام شده دو مورد رعایت شده است:  
۱. مقادیر پتانسیل جفت کنند،  $G$ ، در تمام دماها ثابت و مستقل از دما در نظر گرفته شده‌اند [۷ و ۱۳].

۲. جهت محاسبه توابع ترمودینامیکی در هر روش (استفاده از محتمل‌ترین مقدار یا مقدار میانگین پارامتر گاف) بایستی ثابت بودن تعداد ذرات (پروتون‌ها و نوترون‌ها)، رابطه (۹) یا (۱۲)، در هر دما برقرار باشد.

بنابراین در هر دما با حل همزمان معادله‌های (۳) و (۹) محتمل‌ترین مقادیر پارامتر گاف و پتانسیل شیمیایی سازگار را

$$E = \sum \varepsilon_k \left[ 1 - \frac{\varepsilon_k - \lambda}{E_k} \tanh \left( \frac{\lambda}{\gamma} \beta E_k \right) \right] - \frac{\Delta^{\gamma}}{G} - \left( \Delta^{\gamma} + \beta \Delta \frac{\partial \Delta}{\partial \beta} \right) \left( \sum \frac{\tanh \left( \frac{\lambda}{\gamma} \beta E_k \right)}{E_k} - \frac{\gamma}{G} \right), \quad (13)$$

$$S = \gamma \sum \ln[1 + \exp(-\beta E_k)] + \gamma \sum \frac{\beta E_k}{1 + \exp(\beta E_k)} + \beta^{\gamma} \Delta \left( \lambda \frac{\partial \Delta}{\partial \alpha} + \frac{\partial \Delta}{\partial \beta} \right) \left( \frac{\gamma}{G} - \sum \frac{\tanh \left( \frac{\lambda}{\gamma} \beta E_k \right)}{E_k} \right). \quad (14)$$

رابطه (۱۳) در مرجع [۹] نیز محاسبه شده است. می‌توان مشاهده کرد که روابط (۱۴-۱۲) در صورت برقرار بودن رابطه گاف (۳) به روابط (۱۱-۹) تبدیل می‌شوند. با توجه به استقلال تقریبی پتانسیل شیمیایی نسبت به دما در هسته‌ها، ظرفیت گرمایی در فرمول‌بندی استاندارد استفاده از رابطه (۱۱) به شکل زیر در می‌آید [۹]:

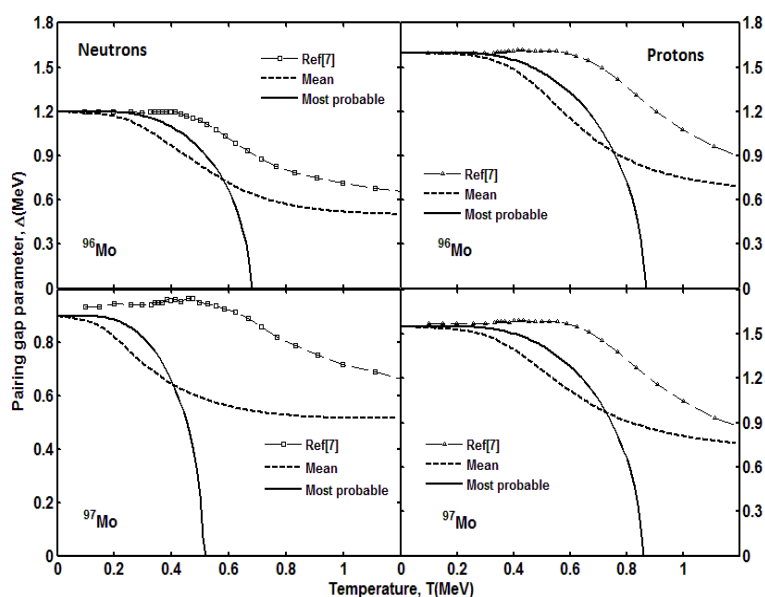
$$C = T \frac{dS}{dT} = \frac{\lambda}{\gamma} \sum \sec h^{\gamma} \left( \frac{\lambda}{\gamma} \beta E_k \right) \left[ \beta^{\gamma} E_k^{\gamma} - \beta \Delta \frac{d\Delta}{dT} \right], \quad (15)$$

که در آن

$$\frac{d\Delta}{dT} = \frac{\beta^{\gamma} \frac{\lambda}{\gamma} \sum \sec h^{\gamma} \left( \frac{\lambda}{\gamma} \beta E_k \right)}{\Delta \left( \frac{\beta}{\gamma} \sum \frac{\sec h^{\gamma} \left( \frac{\lambda}{\gamma} \beta E_k \right)}{E_k^{\gamma}} - \sum \frac{\tanh \left( \frac{\lambda}{\gamma} \beta E_k \right)}{E_k^{\gamma}} \right)}. \quad (16)$$

اما با استفاده از مقدار میانگین پارامتر گاف و با استفاده از رابطه (۱۴) عبارت زیر حاصل می‌شود [۱۱]:

$$C = -\beta \frac{dS}{d\beta} = \frac{\lambda}{\gamma} \sum \sec h^{\gamma} \left( \frac{\lambda}{\gamma} \beta E_k \right) \left[ \beta^{\gamma} E_k^{\gamma} + \beta^{\gamma} \Delta \frac{d\Delta}{d\beta} \right] - \beta \left( \gamma \beta \Delta \lambda \frac{\partial \Delta}{\partial \alpha} + \beta^{\gamma} \lambda \frac{d\Delta}{d\beta} \frac{\partial \Delta}{\partial \alpha} + \beta^{\gamma} \lambda \bar{\Delta} \frac{d}{d\beta} \frac{\partial \Delta}{\partial \alpha} + \gamma \beta \bar{\Delta} \frac{\partial \Delta}{\partial \beta} + \beta^{\gamma} \frac{d\Delta}{d\beta} \frac{\partial \Delta}{\partial \beta} + \beta^{\gamma} \bar{\Delta} \frac{d}{d\beta} \frac{\partial \Delta}{\partial \beta} \right) \times \left( \frac{\gamma}{G} - \sum \frac{\tanh \left( \frac{\lambda}{\gamma} \beta E_k \right)}{E_k} \right) + \beta^{\gamma} \bar{\Delta} \left( \lambda \frac{\partial \Delta}{\partial \alpha} + \frac{\partial \Delta}{\partial \beta} \right)$$



شکل ۱. تغییرات پارامتر گاف بر حسب دما برای نوترون‌ها (ستون سمت چپ) و پروتون‌ها (ستون سمت راست) در هسته‌های  $^{96}\text{Mo}$  و  $^{97}\text{Mo}$ . خط پر، محتمل‌ترین مقدار و خط چین مقدار میانگین و خط مربع و خط مثلث از مرجع [۷] جهت مقایسه آورده شده‌اند.

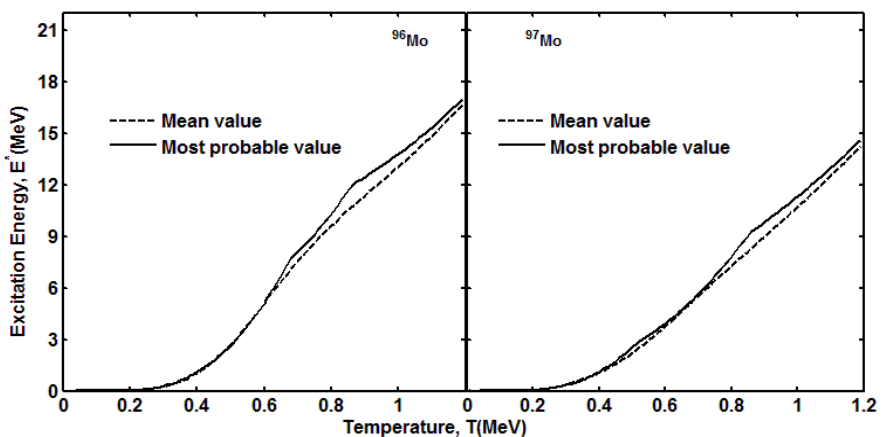
این مطلب است. با توجه به تعداد کم ذرات هسته به عنوان یک سیستم آماری، تأثیر افت وخیزهای آماری در این سیستم مانع از بروز افت ناگهانی پارامتر گاف شده است. تفاوت در پارامتر گاف نوترونی در دمای صفر هسته  $^{97}\text{Mo}$  نسبت به هسته  $^{96}\text{Mo}$  ناشی از اثر زوجیت است.

انرژی برانگیختگی کل در شکل ۲ و آنتروپی کل در شکل ۳ برای هسته‌های  $^{96-97}\text{Mo}$  رسم شده‌اند. در این شکل‌ها مشاهده می‌شود که نتایج حاصل از روش استاندارد BCS (محتمل‌ترین مقدار) در دمای بحرانی که پارامتر گاف صفر می‌شود دارای تکینگی است، در صورتی که نتایج حاصل از روش بهینه BCS (مقدار میانگین) رفتاری هموار دارند. بنابراین از شکل ۴ که ظرفیت گرمایی بر حسب دما رسم شده است مشاهده می‌شود که رفتار این کمیت با به کارگیری مقدار میانگین پارامتر گاف به رفتاری آرام تبدیل گردیده است. همچنین جهت مقایسه مقدار تجربی ظرفیت گرمایی و نتایج مرجع [۷]، (SPA+RPA) نیز رسم شده‌اند. همخوانی کیفی بسیار بهتر نتایج حاصل از مقدار میانگین پارامتر گاف با نتایج تجربی نسبت به نتایج نظری دیگر قابل مشاهده است. در محدوده دماهای بالاتر از  $T \approx 0.6\text{MeV}$

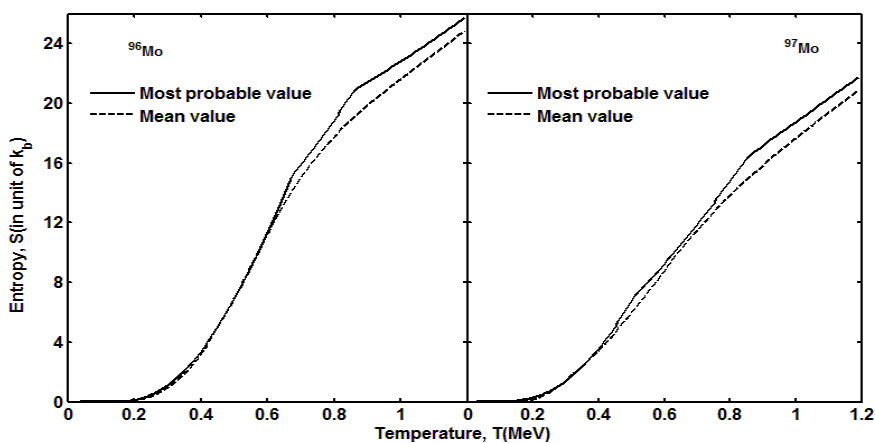
به دست آورده و با جایگذاری این مقادیر در روابط (۱۰)، (۱۱) و (۱۵) به ترتیب محتمل‌ترین مقدار انرژی برانگیختگی  $(E(T)^* = E(T) - E(0))$ ، آنتروپی و ظرفیت گرمایی محاسبه می‌گردند. جهت محاسبه مقدار میانگین کمیات ترمودینامیکی ابتدا با حل همزمان معادله‌های (۵) و (۱۲) مقدار میانگین پارامتر گاف و پتانسیل شیمیایی سازگار به دست آمده و سپس با جایگذاری در روابط (۱۳)، (۱۴) و (۱۷) به ترتیب مقادیر میانگین انرژی برانگیختگی، آنتروپی و ظرفیت گرمایی به دست می‌آید.

محتمل‌ترین مقدار و مقدار میانگین پارامتر گاف پروتون‌ها و نوترون‌ها در هسته‌های  $^{96-97}\text{Mo}$  در شکل ۱ رسم شده‌اند. همچنین نتایج مرجع [۷]، (SPA+RPA)، جهت مقایسه رسم شده‌اند.

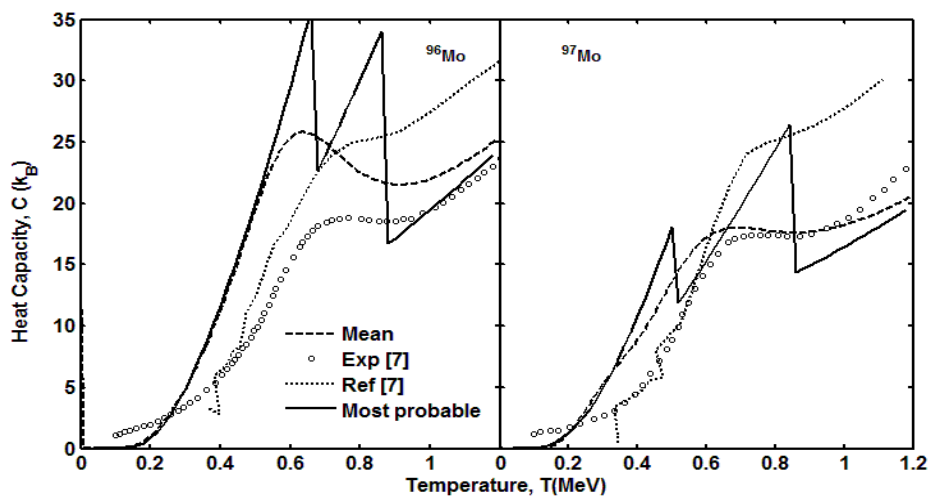
می‌توان مشاهده کرد که برخلاف پیش بینی مدل استاندارد BCS از یک دمای خاص (دمای بحرانی  $T_c$ ) به بعد پارامتر گاف صفر نشده و اثر جفت شدگی نوکلئون‌ها در دماهای بالاتر هم وجود دارد، چنانچه نتایج مرجع [۷] هم از نظر کیفی بیانگر



شکل ۲. انرژی برانگیختگی بر حسب دما در هسته‌های  $^{96}\text{Mo}$  و  $^{97}\text{Mo}$ . خطوط مانند شکل ۱ می‌باشند.



شکل ۳. آنتروپی بر حسب دما در هسته‌های  $^{96}\text{Mo}$  و  $^{97}\text{Mo}$  خطوط مانند شکل ۱ می‌باشند.



شکل ۴. ظرفیت گرمایی بر حسب دما در هسته‌های  $^{96}\text{Mo}$  و  $^{97}\text{Mo}$  نتایج مرجع [۷]، [SPA+RPA] نیز جهت مقایسه رسم شده‌اند.

این روش را بر پایه این انتخاب به عنوان جایگزین مقادیر حاصل از معادله گاف، مقدار میانگین پارامتر گاف، ارائه کرده‌ایم. با استفاده از طیف انرژی مدل نیلسون به بررسی کمیت‌های ترمودینامیکی هسته‌های  $^{96-97}\text{Mo}$  با به کارگیری روش BCS استاندارد و روش بهینه BCS پرداخته‌ایم. انرژی برانگیختگی، آنروپی، و ظرفیت گرمایی کل هسته‌های مورد مطالعه محاسبه گردیدند. همخوانی بهتر نتایج حاصل از روش بهینه BCS نسبت به نتایج حاصل از به کارگیری روش BCS استاندارد را نشان داده‌ایم. مقایسه نتایج حاصله از روش بهینه BCS با روش‌های نظری دیگر نیز نشان دهنده بهینه شدن روش BCS با استفاده از مقدار میانگین پارامتر گاف است. همچنین، ظهور یک قله در ظرفیت گرمایی به وضوح دیده می‌شود، که تطابق نسبی با نتایج تجربی داشته و به عنوان علامت گذار از فاز جفت شده به فاز معمولی در هسته‌ها شناخته شده است [۱۴ و ۱۵].

این نتایج همخوانی کمی بهتری با داده‌های تجربی نسبت به نتایج روش SPA+RPA دارند [۷]. همچنین قله‌ای که در نتایج نیمه تجربی ظرفیت گرمایی در هر دو هسته دیده می‌شود در  $^{97}\text{Mo}$  با دقت بسیار خوب و در هسته  $^{96}\text{Mo}$  با دقت کمتر باز تولید شده‌اند. این قله‌ها در نتایج حاصل از روش استاندارد BCS و نتایج مرجع [۷]، (SPA+RPA)، یا به این شکل مشاهده نمی‌شوند و یا انحراف بسیار بیشتری از نتایج تجربی دارند. تفاوت‌های نتایج حاصله در انرژی، آنروپی و ظرفیت گرمایی هسته  $^{96}\text{Mo}$  در مقایسه با هسته  $^{97}\text{Mo}$  از جمله تفاوت دمایی بحرانی نوترونی و کمتر بودن ظرفیت گرمایی  $^{97}\text{Mo}$  در مقایسه با ظرفیت گرمایی  $^{96}\text{Mo}$  به دلیل اثر زوجیت است.

در این پژوهش با استفاده از توزیع احتمال هم‌دما به محاسبه مقدار میانگین پارامتر گاف در روش BCS پرداخته و فرمول‌بندی

9. L G Moretto, *Phys. Lett. B* **40** (1972) 1.
10. L G Moretto, *Nucl. Phys. A* **185** (1972) 145.
11. Z Kargar and V Dehghani, *J. Phys. G* **40** (2013) 045108.
12. S G Nilsson *et al.*, *Mat. Fys. Medd. K. Dan. Vidensk. Selsk.* **32** (1961) 16.
13. K Kaneko and M Hasegawa, *Phys. Rev. C* **72** (2005) 024307.
14. R Rossignoli, N Canosa, and P Ring, *Rev. Lett.* **80** (1998) 1853.
15. A Schiller, A Bjerne, M Guttormsen, M Hjorth-Jensen, F Ingebretsen, E Melby, S Messelt, J Rekstad, S Siem, and S W Ødegård, *Phys. Rev. C* **63** (2001) 021306.
1. J Bardeen, L N Cooper, and J R Schrieffer, *Phys. Rev.* **108** (1957) 1175.
2. H J Lipkin, *Ann. Phys.* **9** (1960) 272.
3. Y Nogami, *Phys. Rev. B* **313** (1964) 134.
4. H C Pradhan, Y Nogami, and J Law, *Nucl. Phys. A* **201** (1973) 357.
5. K Esashika, H Nakada, and K Tanabe, *Phys. Rev. C* **72** (2005) 044303.
6. K Kaneko and A Shiller, *Phys. Rev. C* **76** (2007) 064306.
7. K Kaneko, M Hasegawa, U Agvaanluvsan, E Algin, R Chankova, M Guttormsen, A C Larsen, G E Mitchell, J Rekstad, A Schiller, S Siem, and A Voinov, *Phys. Rev. C* **74** (2006) 024325.
8. L D Landau and E M Lifshitz, "Statistical Physics", Addison and Wesley (1966) 348.