

量子分子动力学模型的发展

及其在低能重离子反应中的应用

王宁

导师: 李祝霞



联系电话: 010-69358006-8316

Email: wangning@iris.ciae.ac.cn

摘要

低能重离子核反应中超重元素的合成机制研究、近垒熔合的动力学机制、丰中子核熔合的同位旋效应研究以及中能重离子碰撞中多重碎裂研究都迫切需要一个统一的、自洽的微观动力学模型。我们经过对量子分子动力学(QMD)模型进行根本的改进,发展了一个新的、适用于低能以及中能重离子反应的统一描述的微观动力学模型。改进的量子分子动力学(ImQMD)模型能够将整个熔合反应过程中的动力学效应、同位旋效应以及弹靶质量不对称效应等比较全面地、自洽地考虑进来,从而给熔合反应的研究提供了一个新的途径。ImQMD模型有希望应用于超重合成机制的研究,同时它还能较好地描述多重碎裂过程,有可能也给中能重离子碰撞提供一个更好的理论模型。

我们对 QMD 模型进行了一系列的改进,发展了 ImQMD-I 和 ImQMD-II 模型。 其中主要的改进工作包括:(1)引入由 Skyrme 相互作用直接推导得到的表面能项、 动量相关项、表面对称能项以及库仑交换项。Skyrme 的表面能项的引入能够很好地 改进有限体系的密度分布,避免核中心的密度过高。我们通过 Thomas-Fermi 近似引 入动量相关项来改善原子核的动量分布(特别是高动量部分)以及平均场的高密度行 为。动量分布的改善使得核的稳定性得到根本的改善,单个原子核的稳定时间提高了 大约一个数量级,而且中能重离子多重碎裂过程中的中等质量碎块分布也得到了明显 改善。表面对称能项的引入对于正确描写熔合反应过程中颈部发展的同位旋效应十分 重要,有效地改善了垒下以及丰中子核熔合截面的计算结果。另外,库仑交换项对改 善核内质子的均匀分布以及单个核的稳定性是有益的。(2)采用相空间占有数约束方 法。相空间占有数约束方法是利用两体弹性散射加上泡利阻塞效应来弥补和改善 OMD 模型中核子的费米子属性(波函数的反对称化)以及短程排斥的残余相互作用。 采用这一方法以后,核的动量分布得到有效改善,特别是低动量分布更加符合真实原 子核的动量分布。(3)引入体系大小相依赖的初始波包宽度。引入这种波包宽度一方 面使得一系列轻核到重核的基态性质如结合能和方均根半径得到较大的改善,另一方 面,这种波包宽度能够改善核的表面性质,使得核的密度分布更加合理,在描写熔合

反应中有明显的改善作用。(4)调试出一套新的 ImQMD 参数。基于几组新提出并广泛运用的 Skyrme 参数 (例如 SLy7、SKM*),通过符合大量的核基态性质及一些熔合反应截面以及中能重离子多重碎裂的质量分布等,调试出适合于 ImQMD 模型的一组新的参数 (**IQ1**)。

改进的量子分子动力学(ImQMD)模型能有效地考虑核子的费米子属性使单个原子核的稳定性得到了极大的改善,能够较好地描述近垒熔合反应。ImQMD模型计算得到的一系列核的基态性质以及十多个熔合反应的激发函数(包括丰中子核熔合体系以及实验最新测量的 132Sn+64Ni 熔合体系)基本上都能与实验数据相当好地符合。我们发现熔合过程中的动态位垒与体系的入射能量、碰撞参数、体系的中子质子比(N/Z 比)以及体系的结构有着密切的关系。在一般情况下,体系的变形(拉长为长椭球并形成颈部)引起熔合过程中的动态位垒产生明显降低,从而导致垒下熔合截面增强。我们通过研究熔合反应中颈部的成长、颈部 N/Z 比的时间演化、核子转移以及颈部的核子流等颈部的动力学行为,我们发现颈部的成长与入射能量以及弹靶质量不对称性有着密切的关系。此外还发现丰中子核熔合中,颈部在成长的初始阶段形成了明显的中子流,造成反应中动力学位垒的降低,从而引起了大部分丰中子核熔合截面的增强(48Ca+48Ca例外)。我们运用 ImQMD-II 模型研究了重核熔合过程中的准裂变过程以及部分体系的复合体系分裂过程。给出了准裂变与复合体系分裂的时间尺度。发现复合体系的寿命与体系的入射能量、碰撞参数、体系大小、体系形状以及体系的中子质子比有着明显的依赖关系,进一步的分析正在进行之中。

Abstract

We have developed a new microscopic dynamical model called improved quantum molecular dynamical model (ImQMD). This model can describe the fusion process at energies near the Coulomb barrier as well as the multifragmentation process at intermediate energies in heavy-ion collision (HIC) uniformly. In fusion reaction, the dynamical effects, isospin effects and mass asymmetry effects etc. can be treated comprehensively and self-consistently in ImQMD model, which offers a new way to study fusion reaction and to explore the mechanism of synthesis of superheavy elements hopefully.

Our improvements mainly include: Updating the interaction and introducing the surface term, momentum dependent term and surface-symmetry term of Skyrme effective interaction; introducing system-size-dependent initial wave-packet width; performing the phase space occupation constraint, and proposing a new set of parameters for ImQMD model.

The ImQMD model greatly improves the fermion properties of nuclei, the momentum distribution and density distribution of ground state nuclei, and thus increase the stability time of single nucleus by an order. By using this model, the ground state properties of nuclei and the Coulomb barrier can be described very well. We have applied it to fusion reactions at near-barrier energies, and find that in most case the cross sections of fusion reactions (including some of neutron-rich nuclei reactions and that of newly measured ¹³²Sn+⁶⁴Ni fusion reaction) can be reproduced remarkably well. It is encouraged that the ImQMD model can also reproduce the charge distribution in multifragmentation.

By applying this model, the dynamical effects on fusion reactions at energies near the barrier are studied. We find that the dynamical barrier in fusion reaction is closely related to the incident energy, impact parameter, N/Z ratio as well as the structure of system. Generally speaking, the deformation of projectile and target (elongate to prolate ellipsoid) during fusion process can lower the dynamical barrier clearly and enhance the fusion cross section at subbarrier energies. We have further studied the dynamical behavior of the neck in fusion reactions, and find that the neck growth is closely related to the incident energy and mass-asymmetry and isospin of projectile and target. Through studying the neck dynamical behavior for neutron-rich nuclei fusion reactions, we have found that there exist neutron-flow (i.e. large N/Z ratio at neck region) at the early stage of fusion which cause the dynamical barrier lowering and thus enhance the fusion cross sections of most neutron-rich nuclei fusion reactions (⁴⁸Ca+⁴⁸Ca is an exception). In addition, the quasi-fission and breakup process in heavy nuclei fusion are studied by using our ImQMD-II model. The time of quasi-fission process and the dependence of lifetime of composite system on the incident energy, impact parameter, system size, shape and N/Z ratio of composite system are studied, and the further analyse is on progress.

目 录

摘 要		I
ABSTRAC	T	IV
第一章 引		1
第二章 改	z进的量子分子动力学模型(IMQMD)	7
§2.1 量 ⁻	子分子动力学模型简介	7
§2.1.1	QMD 模型的初始化	8
§2.1.2	QMD 模型的平均场	9
§2.1.3	核子核子碰撞	12
§2.2 QN	/ID 模型的首次改进(ImQMD-I)	14
§2.2.1	相互作用势的更新	14
§2.2.2	表面效应	17
§2.2.3	相空间占有数约束	20
§2.2.4	核子的波包宽度	24
§2.3 Im	QMD 模型的进一步更新(ImQMD-II)	34
§2.3.1	<i>QMD</i> 参数	35
§2.3.2	动量相关项的考虑	38
§2.3.3	对称能项的进一步完善	41
§2.3.4	ImQMD-II 模型的部分结果	44
第三章 近	至重离子熔合反应	49
§3.1 重7	离子核反应概述	49
§3.2 核	核相互作用势的理论计算	51
§3.2.1	接近势(Proximity Potential)	52
§3.2.2	半微观势 (SMP)	54
§3.2.3	静态位垒与动态位垒	58
§3.3 熔1	合截面的理论计算	61

§3.3.1	一维 WKB 方法	61
§3.3.2	改进的量子分子动力学模拟	64
§3.4 位誓	全分布	72
§3.5 颈部	部的动力学行为	82
§3.5.1	颈部研究概述	82
§3.5.2	颈部的成长	84
§3.5.3	颈部的 N/Z 比	87
§3.5.4	核子转移	89
§3.6 重构	亥的熔合过程	92
第四章 总组	结与讨论	103
讨论:		105
参考文献		106
附录(APPE	NDIX)	111
§附录 1:	QMD 模型中的 Wigner 变换	111
§附录 2:	核子的平均密度	113
§附录 3:	IMQMD 模型的相互作用势能	113
§附录 4:	IMQMD 中相互作用势能对 R 的微分	115
§附录 5:	QMD 中的动能项	117
博士期间发	表的文章	119
致 谢		120

第一章 引言

超重元素的合成是近几年核物理中最关注的话题之一,新的实验结果[1][2]表明 产生和调查所谓的"稳定岛"区域元素有一定的可能性。而这些昂贵的实验需要坚固 的理论支持,包括选用更合理的弹靶体系、入射能量、对截面更好地估计以及对蒸发 残余核清楚地鉴别等。重离子熔合反应是人工合成新元素的主要手段,因此开展熔合 反应机制的研究具有重要意义。根据壳模型预言超重岛处于 Z=114 或 120, N=184 这 个区域,如图 1.1 所示,即这个区域的中子数远远大于质子数,因此人们试图通过丰

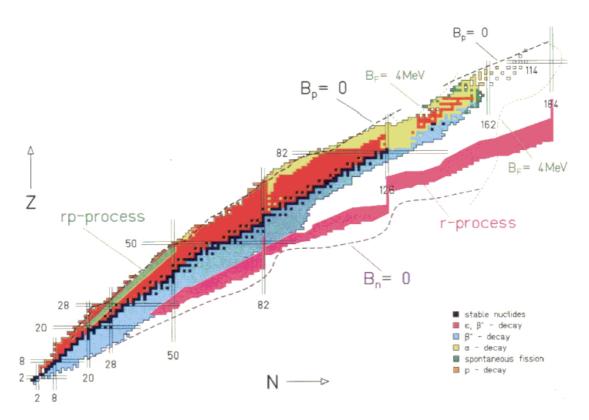


图 1.1 核素图。横坐标为中子数,纵坐标为质子数。其中黑点表示稳定核; 2、8、20 等 为理论计算的幻数,代表原子核的壳层结构。

中子体系的熔合登上超重岛,从而对丰中子重离子熔合反应机制研究尤为重要。在重 核熔合过程中,由于相互作用引起的两核的动态形变、颈部的形成、核子的转移以及 复合核的能量耗散等等动力学效应对熔合截面有一定的影响[78],因此研究这些动力 学效应对于弄清重离子熔合机制有着十分重要的作用。另外,一些实验发现的垒下熔 合截面以及丰中子核熔合反应截面都出现增强趋势,为了弄清楚截面增强的原因以及 熔合机制,进一步开展丰中子核熔合反应的动力学机制研究十分必要。

入射核和靶核相互作用的熔合的动力学系统远比复合核概念复杂。相互碰撞的核的结构特征,大变形和集体运动特征以及趋平衡过程等等,对反应过程都有很重要的影响。而在低能区这些现象表现得比较明显,例如: 当两个球形核相碰撞时,由于远程库仑排斥的作用,球形核可以变为扁球形。两个扁球核发生接触的距离比同体积的球形核要小,从而可能使得熔合位垒升高。另一方面两个核在接近过程中,库仑激发可以使核发生表面振动或转动或者极化(这些动力学行为能够对位垒产生较大的影响),而且核力也开始作用,使得动力学行为更为复杂。因此研究近垒能区的重离子熔合反应不仅对了解熔合反应机制有意义,而且对核核相互作用势以及碰撞过程的动力学提供有意义的知识。

由两个独立的核向一个复合核逐渐熔合的过程和深度非弹性散射的某些动力学行为有一定的类似之处,它们都是介于直接反应与复合核反应的中间过程[3],从作用的时间上来看,也是在两者之间的。中间复合系统介于非平衡和统计平衡之间,其各种自由度均有"弛豫"特征,即由非平衡到统计平衡过渡的特征。中子与质子之比对于核素稳定存在有重要意义,同样,中质比(N/Z)这个自由度对中间复合系统来说也是至关紧要的。当其完全弛豫时,相对于复合核"忘记"了入射粒子来说,它对入射道还有所"记忆",即保留了入射核的某些特点,这是重离子反应所特有的现象。通过研究熔合的动力学过程中的趋平衡问题,包括能量、质量以及 N/Z 比等,可以帮助人们对这种复杂系统的各种行为有更深的了解。

低能重离子的熔合过程以及重核的准裂变以及复合核裂变过程都涉及到颈部的动力学演化。裂变过程中的颈部动力学研究已经开展了好长时间[4][5],而近几年来超重元素的合成则使得熔合过程的动力学研究倍受关注。在颈部动力学研究方面出现了一些模型,一种称为宏观动力学模型[6],另一种称为双核模型[7]。宏观动力学模型认为,重系统碰撞后形成一个强烈变形的单核,这意味着熔合过程中颈部的成长非常快。而双核模型认为熔合过程是两核形成颈部后轻核的核子以及小块通过颈部逐渐向重核转移的过程。因此双核模型认为,两核在接触状态下,颈部发展是比较缓慢的。两种相互对立的模型都能对超重体系的熔合截面提供一定的信息,这也意味着熔合过

程是相当复杂的,我们了解得还很不全面,还有很多微观的动力学机制有待进一步澄清。

另一方面,在中高能重离子反应研究中,一个主要目的就是了解核物质的性质(即核态方程)。大量的原子核实验结果的积累,已得到基态核物质的一些性质如基态核物质的密度、结合能等。然而对于高温高密度核物质的性质还是知道得很少,中高能核核碰撞提供了在实验室内研究高温高密核物质的唯一途径。而实验上很难直接得到核态方程的原因在于,核物质不象其它宏观物质,我们可以给它施加一定的温度压强,然后有充足的时间来测量。原子核是微观粒子,它们反应中处于压缩状态的时间是极短的,典型的时间是30 fm/c=10-22 秒甚至更短,而且我们只能测量它终态的产物(也就是原子核经过了压缩、膨胀以及后期的退激等过程后形成的产物),如它们的电荷、质量以及能量分布等,我们需要从这些终态产物中提取出在此之前的反应过程的信息,这是相当难的[8]。理论上(如 Brücker 理论)核态方程(每核子的能量随密度以及温度的变化关系)自洽的推导仅仅在低密度极限下是可能的[9],到目前为止还没有一个可靠的描述,因此这方面的研究是非常必要的。

很显然对低能重离子熔合反应以及中高能重离子碰撞中压缩膨胀以及碎裂的过程进行微观动力学理论研究是十分有意义的,它能提供反应过程中核反应机制的许多信息。微观模拟方法其好处在于,它在研究核反应中不需要对核反应机制作特殊的假定[10]。微观动力学理论模型有好多种,例如,1)时间相关的 Hartree-Fock (TDHF) [11][12]方法。TDHF模型是一个微观的量子输运模型,是一种平均场理论。在低能熔合反应研究中,它在描述核基态性质、近全能区的熔合反应以及深度非弹反应等方面有一定的成功之处(在这个能区平均场的动力学很重要)。该模型假设反应中粒子的平均自由程比较长,平均场的集体运动比较缓慢从而可以认为它总是处于平衡态。TDHF模型所描述的垒上熔合图像非常接近于带有摩擦的经典轨道图像,由于它不能很好地描述涨落以及能量耗散,(复合核在形成过程中系统不断地将集体运动动能进行耗散从而转化为内部激发能),所以它给出的垒上熔合过程透明性过大[14],也就是弹核与靶核很可能彼此穿透对方而不能熔为一体。该模型对垒上熔合描述的失败主要是由于TDHF模型基于独立粒子近似,给出的系统涨落过小,从而集体运动动能不能很好地耗散所致[13]。2) BUU/VUU模型。Vlasov方程它是TDHF的半经典近似;

Vlasov-Uehling-Uhlenbeck(VUU)[14] 或者 Boltzmann-Uehling-Uhlenbeck(BUU)方程 [15][16]是在 Vlasov 方程的基础上考虑了两体碰撞项(作为残余相互作用)(级联模型[8][17],仅仅考虑两体碰撞项)。VUU/BUU 方程,它不仅包括了平均场而且考虑了两体碰撞项,成为研究重离子碰撞从低能到中高能的标准框架。然而 VUU/BUU 方程它基本上是单体理论,也就是单个 Slater 行列式所对应的单体分布函数在自身形成的平均场中演化,没有考虑多体关联[9]。而我们知道重离子碰撞包括很多反应道(产生各种碎块),多体关联是非常重要的,原则上说应该由许多 Slater 行列式的线性叠加来描述。当用 VUU/BUU 这种单体输运模型研究此类反应时,其平均场对所有反应道的平均作用(大量平行事件的平均)必然会平均掉涨落效应[18][19],因此它在处理涨落现象(如碎块形成)时存在一定的困难。3)分子动力学模型。分子动力学模型之所以可以用来研究这种有很多反应道的重离子反应,是因为它考虑了多体关联,这样即使是同一个初态,由于涨落的原因也能得到好多终态[10]。

量子分子动力学模型(QMD)[9][20]是一个半经典的微观动力学输运模型。它对每个核子的单粒子分布函数采用一个高斯波包来描述,既包括了平均场效应又引入了两体碰撞,因此从某种程度上来说,它部分地弥补了TDHF模型在涨落耗散上的欠缺,因此它适应的能量范围比较广。此外由于它基于多体框架能够引入涨落效应,所以它能够合理地描述碎块形成等。因此运用分子动力学模型来研究低能以及中高能重离子核反应是一个很有效的途径。QMD模型是在N个核子形成的6N维的相空间来自洽统一地描述整个反应的动力学过程。一方面它对核反应过程的描述是从一个整体的角度出发的,它考虑的自由度比较全面,包括能量自由度、弹靶质量不对称自由度以及质子中子不对称自由度等等,能直接将颈部成长与位垒变化以及熔合截面改变等有机地联系在一起,因此相对于宏观动力学模型它能给出一些更全面更细致的动力学信息,有利于将各种自由度的影响联系在一起。另一方面相对于AMD、FMD模型,QMD模型它的运算较快,适合于研究非常重的弹靶反应,因此用QMD模型来研究重离子熔合反应中的动力学机制及同位旋效应是非常有意义的而且有一定的可行性。

然而常规的 QMD 模型对于研究低能熔合反应还存在很大的困难。首先模型必须 尽可能地保证核多体系统的费米子属性得到较好的描述。由量子力学知道,费米子构 成的核系统的波函数必须是反对称化的。在反对称化分子动力学模型(AMD)[21] 以及费米子分子动力学模型 (FMD) [13]中,系统波函数是由 N 个波包构成的行列式 来表示,因此他们在描述核的基态性质以及轻核的反应方面比较成功。然而对于反对 称化波函数,计算行列式的N!项的时间演化是相当费时的,约是 N^4 的运算量。对于 非常重的弹靶熔合反应,特别是目前人们非常关注的超重元素的合成(N~300),300⁴ 的运算量已经远远超出目前的 CPU 的运算速度。因此为了换取实际可行的计算, QMD 模型忽略了波函数的反对称化,系统波函数由 N 个波包的直积来表示,这样运算量 大大简化 (N^2) 的运算量),因此它能应用于非常重系统的实际运算。为了有效地考虑 波函数的反对称化效应,一些作者基于泡利原理而引入了两体 Pauli 势来避免单体相 空间密度过大[22][23],虽然基态性质有所改善,但长时间演化后,系统的稳定性以 及基态性质都会变差。相空间占有数约束方法给出了另一种近似处理核多体中的泡利 原理的方法,该方法通过控制相空间占有数使之不超过1从而使泡利原理得以有效实 现。如何在 QMD 模型中引入泡利原理是将 QMD 模型推广到低能、中能重离子反应 的重要一步。此外由于低能熔合反应的过程比较缓慢,持续时间比较长(数千个 fm/c), 这对单个核的稳定性提出了相当高的要求。如果单个核的稳定性较差,则会发生大量 虚的粒子发射,而这种虚的粒子发射能严重地影响计算结果的正确性,因此单个核的 稳定性一定要好。常规的 QMD 模型对这两个方面都很难保证,因此目前用 QMD 模 型研究近垒重离子熔合反应还比较困难。

进一步地,为了将 QMD 模型推广到低能重离子反应,我们需要得到较好的基态核并使其保持足够长的稳定时间,这要求我们对 QMD 模型的相互作用势(平均场部分)作有效的改进。由于量子效应以及结构效应的明显影响,早期 QMD 模型所采用的部分相互作用势已经难于对低能反应进行正确描述,从而需要对其相互作用势进行进一步的调整。如何从目前广泛运用的 Skyrme 有效相互作用势出发,特别是一些最新的 Skyrme 有效相互作用如 SLy7、SKM*,调试出一套适合于 QMD 模型计算的新的相互作用势是 QMD 模型向低能、中能发展的关键一步。

常规的 QMD 模型在模拟中高能重离子碰撞中,计算得到的中等质量碎块 (IMF) 总是明显偏少。因此一般的做法是在 QMD 模拟过程后期嫁接统计衰变模型 (SMM) [24],来描述所谓的"次级衰变"过程,不过这样明显地存在着两个问题,其一,整个动力学过程的统一性和自治性受到影响,其二,SMM 模型接入的时间存在很大的

任意性,而这种不确定性对结果的影响是十分剧烈的。因此我们需要一个对整个多重碎裂过程能够统一自治描述的微观动力学模型,这便是 QMD 模型需要改进的另一个动力。

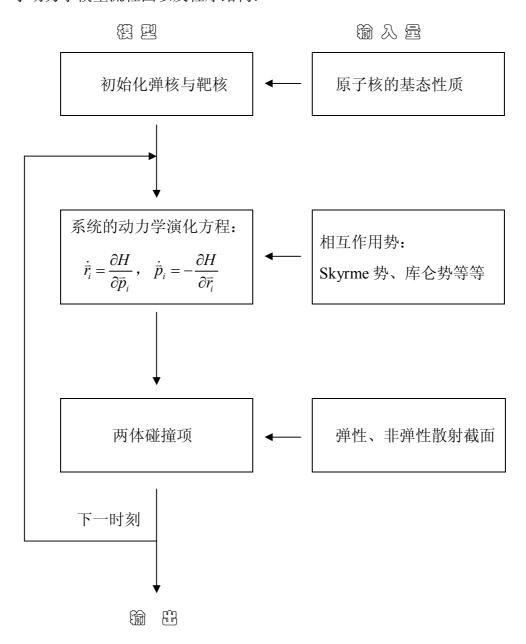
本论文的目的是发展一个适用于低能以及中能重离子反应的统一的微观动力学模型,并在此基础上应用该模型研究近全重离子熔合反应(特别是丰中子核近全熔合反应)机制及其动力学。

本文在第二章详细阐述了量子分子动力学模型的主要改进工作以及改进后的部分结果,在第三章我们应用改进的量子分子动力学模型对近垒熔合反应的动力学机制进行了研究;在第四章我们对整个工作做了总结并且对目前模型存在的问题以及下一步的目标进行讨论。最后我们在附录中给出了 ImQMD 模型中一些公式的推导。

第二章 改进的量子分子动力学模型 (ImQMD)

§2.1 量子分子动力学模型简介

为了对量子分子动力学模型的理论框架有一个整体的了解,我们首先给出量子分子动力学模型流程图以及程序结构:



下面简单地介绍一下程序的结构:

- 制造一定数目的反应事件,对每一个事件执行:
 - 。 执行一定数目的时间间隔, 在每一个时间间隔中:
 - 计算所有粒子之间的两体相互作用
 - 遵循哈密顿方程,更新每一个粒子的坐标和动量
 - 计算所有可能的碰撞,寻找碰撞的方位角分布并且检查终态是否 满足泡利原理
 - 。 打印出所有粒子的坐标和动量
- 如果统计数足够多,分析事件。

从上面的模型流程图以及模型结构可以看出,QMD模型包括三个核心部分:初始化、平均场(相互作用势)下核子的演化方程、核子核子散射。下面我们分别介绍这三部分。

§2.1.1 QMD 模型的初始化

QMD 计算的第一步工作就是初始化弹核与靶核,它对于重离子反应的动力学过程是很重要的,特别是低能熔合反应。首先,基于核的密度分布,如简单的"硬球"分布、Woods-Saxon分布或者由 Skyrme-HF 模型计算得到的基态核的密度分布,应用

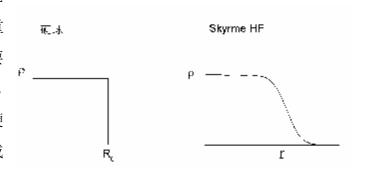


图 2.1 原子核的密度分布示意图。

Monta-Caro 随机抽样的方法得到每个核子的位置。然后,基于抽样出来的核的密度分布,由费米气体模型[31][3]采用的定域密度近似可以得到定域的费米动量 $k_F = \left(\frac{3\pi^2}{2}\rho\right)^{1/3}$,再用 Monta-Caro 方法抽样出每个核子的动量(类似于抽样"硬球"分布的坐标)。由于在 QMD 模型中,每个核子的坐标和动量都以一个高斯波包来描述,因此在抽样核子动量时,应该考虑到波包弥散的影响。QMD 模型在实际计算中

对核子动量抽样所用到的费米动量 P_F '要比费米气体模型得到的费米动量 $P_F = \hbar k_F = \hbar (3\pi^2 \rho/2)^{1/3}$ 小,其差值粗略地由动量波包的半高度宽度给出,然后再通过结合能来稍微调整。为了核子在相空间分布得比较均匀,在抽样核子坐标和动量时需 要 对核子间的 距离 以及 相空间 距离 加入一些约束,如 $\Delta r \geq 1.5 \, fm$, $\Delta r \cdot \Delta p \geq \Delta V \approx h/4$ 。最后再进一步检查初步抽样得到的核的稳定性,我们让其自身演化 600 fm/c,检查演化过程中核的基态性质,如结合能、方均根半径、密度分布、动量分布以及相空间分布等等,所有的这些性质以及它们的时间演化足够的好,并且所有的核子都能很稳定地结合在一起,没有粒子蒸发,这样的核我们认为是"好的初始核",给弹核加上一定的入射动能 E_b 并设定碰撞参数 b 就可以用来模拟重离子反应。

§2.1.2 QMD 模型的平均场

在 QMD 模型中,每个核子由一个相干态的高斯波包来表示,

$$\phi_i(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi L)^{3/4}} \exp\left[-\frac{(\vec{r} - \vec{r_i})^2}{4L} + \frac{i\vec{p_i} \cdot \vec{r}}{\hbar}\right],\tag{2.1.1}$$

其中, \bar{r}_i , \bar{p}_i 分别是第 i 个粒子在坐标和动量空间中的波包中心。通过对波函数进行 Wigner 变换(参看**附录 1**),我们就可以得到量子力学的波函数在 $\hbar \to 0$ 时所对应的经典力学中 i 粒子的相空间密度分布。

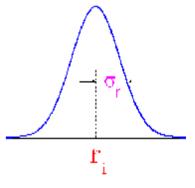


图 2.2 QMD 中核子由高 斯波包来描述

$$f_{i}(\vec{r}, \vec{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3}} \int \exp\left(\frac{-i\vec{r}_{12} \cdot \vec{p}_{12}}{\hbar}\right) \, \phi_{i}^{*} \phi_{i} d\vec{r}_{12}$$

$$= \frac{1}{(\pi\hbar)^{3}} \, \exp\left(\frac{-(\vec{r} - \vec{r}_{i})^{2}}{2L}\right) \exp\left(\frac{-(\vec{p} - \vec{p}_{i})^{2} \cdot 2L}{\hbar^{2}}\right)$$
(2.1.2)

 $\diamondsuit: L = \sigma_r^2, \quad \sigma_r \cdot \sigma_p = \hbar/2 \circ$

最后得到第i个粒子的相空间分布函数

$$f_i(\vec{r}, \vec{p}) = \frac{1}{(\pi \hbar)^3} \exp\left(\frac{-(\vec{r} - \vec{r_i})^2}{2\sigma_r^2}\right) \exp\left(\frac{-(\vec{p} - \vec{p_i})^2}{2\sigma_p^2}\right)$$
(2.1.3)

可以看出它是坐标空间与动量空间的两个相干的高斯波包形式,其中 σ_r , σ_p 分别为粒子在坐标空间和动量空间的波包宽度,它们满足最小测不准关系

$$\sigma_r \cdot \sigma_p = \hbar/2 \ . \tag{2.1.4}$$

整个核体系的相空间分布函数为所有核子的相空间分布函数的求和,

$$f(\vec{r}, \vec{p}) = \sum_{i} f_i(\vec{r}, \vec{p}) \, . \tag{2.1.5}$$

相空间分布函数是归一的,对相空间积分便是体系的总粒子数,

$$\iint f(\vec{r}, \vec{p}) d\vec{p} d\vec{r} = A \tag{2.1.6}$$

由相空间分布函数可以得到系统的密度分布和动量分布:

$$\rho(\vec{r}) = \int f(\vec{r}, \vec{p}) d\vec{p} = \frac{1}{(2\pi\sigma_r^2)^{3/2}} \sum_i \exp\left(-\frac{(\vec{r} - \vec{r_i})^2}{2\sigma_r^2}\right),$$
(2.1.7)

$$g(\vec{p}) = \int f(\vec{r}, \vec{p}) d\vec{r} = \frac{1}{(2\pi\sigma_p^2)^{3/2}} \sum_i \exp\left(-\frac{(\vec{p} - \vec{p}_i)^2}{2\sigma_p^2}\right) . \tag{2.1.8}$$

在 QMD 模型中,核子在自身产生的平均场中运动,i 粒子的坐标和动量 \bar{r}_i, \bar{p}_i 基于正则方程进行演化,

$$\dot{\vec{r}}_i = \frac{\partial H}{\partial \vec{p}_i}, \quad \dot{\vec{p}}_i = -\frac{\partial H}{\partial \vec{r}_i}$$
(2.1.9)

其中*H*是系统的哈密顿量,由模型所采用的核子-核子相互作用势所决定,当然反过来它也决定性地影响着系统的动力学演化。哈密顿量所采用的形式的繁简直接影响着模型的数值实现速度与精度。高斯形式的试探波函数使得哈密顿量的计算更为简单,从而被量子分子动力学模型所采用。

由简单的欧拉公式可以得到 i 粒子下一时刻的位置和动量,

$$\vec{r}_{i}^{l+1} = \vec{r}_{i}^{l} + \Delta t \cdot \frac{\partial H}{\partial \vec{p}_{i}}, \ \vec{p}_{i}^{l+1} = \vec{p}_{i}^{l} - \Delta t \cdot \frac{\partial H}{\partial \vec{r}_{i}},$$

$$(2.1.10)$$

从而更新粒子在相空间的位置。如果系统的H不显含时间,则体系的能量以及动量

守恒。

早期的 QMD 模型中,粒子-粒子间相互作用势包括: Skyrme 势、Yukawa 势、质子中子不对称势、动量相关势、泡利势以及库仑势:

$$V_{ii} = V_{Skv} + V_{Yuk} + V_{svs} + V_{md} + V_{Pau} + V_{Coul}$$
(2.1.11)

$$V_{Skv} = t_0 \delta(\vec{r} - \vec{r}') + t_3 \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta(\vec{r} - \vec{r}'')$$
(2.1.12)

$$V_{Yuk} = \frac{c_y \exp\left(-\gamma \mid \vec{r} - \vec{r} \mid\right)}{\mid \vec{r} - \vec{r} \mid}$$
(2.1.13)

$$V_{sys} = C_s t_i t_j \delta(\vec{r} - \vec{r}') \tag{2.1.14}$$

$$V_{md} = t_4 \ln^2 \left[t_5(\vec{p} - \vec{p}') + 1 \right] \delta(\vec{r} - \vec{r}')$$
 (2.1.15)

$$V_{Pau} = c_p \left(\frac{\hbar}{p_0 q_0}\right)^3 \exp\left[-\frac{(\vec{r} - \vec{r}')^2}{2q_0^2}\right] \exp\left[-\frac{(\vec{p} - \vec{p}')^2}{2p_0^2}\right]$$
(2.1.16)

$$V_{Coul} = \frac{e^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \tag{2.1.17}$$

其中

$$t_0,t_3,t_4,t_5,c_y,\gamma,c_s,c_p,p_0,q_0\text{ , }t_i=\begin{cases} 1,&proton\\ -1,&neutron\end{cases} 是参数。$$

总的哈密顿量

$$H = \sum_{i} \frac{P_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{i} \sum_{j} U_{ij} + \frac{1}{3} \sum_{i} \sum_{j} \sum_{k} U_{ijk}$$
 (2.1.18)

$$U_{ij} = \int \rho(\vec{r}_i) V(\vec{r}_i, \vec{r}_j) \rho(\vec{r}_j) d\vec{r}_i d\vec{r}_j$$
 (2.1.19)

$$U_{ijk} = \int \rho(\vec{r}_i)\rho(\vec{r}_j)\rho(\vec{r}_k)V(\vec{r}_i,\vec{r}_j,\vec{r}_k)d\vec{r}_id\vec{r}_jd\vec{r}_k$$
(2.1.20)

通过对两体和三体相互作用进行积分我们可以得到体系的哈密顿量。基于哈密顿量,核子通过正则方程进行演化。

早期的 QMD 模型在中高能重离子碰撞中得到了很广泛的应用,然而在研究低能 E<50MeV/u 核反应时,QMD 模型还存在很大的困难[32]。

§2.1.3 核子核子碰撞

量子分子动力学模型相对于平均场模型之所以能够更好地描述重离子碰撞中的涨落,很重要一个因素就是它考虑了两体碰撞项。随着反应入射能量的增加,强子间的碰撞几率也相应增加,碰撞项的作用也越来越重要。QMD模型中对核子核子碰撞的处理思想类似于级联模型或者BUU/VUU模型。级联模型是完全微观地处理核子核子碰撞。它将核子看成点粒子,其数值模拟程序的主要任务就是决定粒子何时发生碰撞以及碰撞到什么地方。

QMD 模型中核子碰撞部分的程序为[33]:

两核质心系变换到两体质心系⇒运动学的几何条件判断⇒反应截面判断⇒坐标系变换回原来的两核质心系⇒泡利阻塞判断。对于某一个反应事件,质心系的能量为 $\sqrt{s} = \sqrt{(E_1 + E_2)^2 - (\bar{p}_1 + \bar{p}_2)^2}$,碰撞粒子的质心速度为 $\bar{\beta} = (\bar{p}_1 + \bar{p}_2)/(E_1 + E_2)$ 。

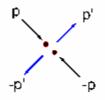


图 2.3 两体质心 系下核子核子碰 撞示意图。

在两体质心系下第一个粒子的动量为

$$\vec{p} = \gamma \left(\frac{\vec{p}_1 \cdot \vec{\beta}}{\beta} - \beta E_1 \right) \frac{\vec{\beta}}{\beta} + \left(\vec{p}_1 - \frac{\vec{p}_1 \cdot \vec{\beta}}{\beta} \frac{\vec{\beta}}{\beta} \right),$$
第二个粒子的动量为 $-\vec{p}$ 。

两体质心系下两核子间的距离为

$$\Delta r = (\vec{r_1} - \vec{r_2}) + (\gamma - 1) \left(\frac{(\vec{r_1} - \vec{r_2}) \cdot \vec{\beta}}{\beta} \right) \frac{\vec{\beta}}{\beta} \circ$$

可能发生碰撞的运动学几何条件包括:



(1) 在 $-\delta t/2$ 到 $\delta t/2$ 的时间间隔内,两个粒子经过了最短距离,

$$\left|\frac{\Delta \vec{r} \cdot \vec{p}}{p}\right| \le \left(\frac{p}{\sqrt{p^2 + m_1^2}} + \frac{p}{\sqrt{p^2 + m_2^2}}\right) \frac{\delta t}{2};$$

(2) 碰撞参数 $b = \sqrt{(\Delta \bar{r})^2 - \left((\Delta \bar{r} \cdot \bar{p})/p\right)^2}$ 小于核子核子碰撞总截面对应的最大碰撞参数 $b_{\text{max}} = \sqrt{\sigma_{pn}^{tot}/\pi} \approx 1.32 \, fm$,即 $b \leq b_{\text{max}}$ 。

如果发生碰撞的运动学几何条件满足,下面便进一步进行反应截面判断。对于一个碰撞,它可能是弹性碰撞或者非弹性碰撞。如果入射能量低于 150MeV/u,弹性道

占主要并且为了简单我们只考虑非相对论动力学。在非弹性散射中, π道是比较重要的, 它通常被包含在核子的Δ态中。我们主要考虑下面的一些反应道:

- $n+n \rightarrow n+n$ (a)
- $n+n \rightarrow n+\Delta$ (b)
- $n + \Delta \rightarrow n + n$ (c)
- $n + \Delta \rightarrow n + \Delta$ (d)
- $\Delta + \Delta \rightarrow \Delta + \Delta$ (e)

对于反应道(a)和(b),截面参数来自于实验结果;反应道(c)的截面是通过细致平衡原理获得;反应道(d)以及(e)与反应道(a)相同。碰撞的反应道是弹性的还是非弹性的由Monte-Carlo 抽样决定。碰撞的反应道决定后,再由 Monte-Carlo 决定散射角度。

计算出各种反应道的散射动量后,再将两体质心系变回到两核质心系,随后再进行泡利阻塞判断,计算碰撞后粒子的相空间密度,如果相空间密度不满足(详细的计算在相空间占有数约束一节中讨论),说明本次碰撞无效,从而取消这次碰撞,粒子的动量变回碰撞前的值。

需要说明的是,QMD模型中两体碰撞过程在很大程度上能够模拟核的短程排斥的残余相互作用,因此它能够弥补平均场中欠缺的涨落效应,同时能够部分地弥补QMD模型中所忽略的波函数的反对称化效应。相空间占有数约束方法正是借鉴这一优点通过核子核子弹性碰撞来改善原子核的费米子属性。同时我们还必须注意到,两体碰撞项不是自治地引入的。

§2.2 QMD 模型的首次改进(ImQMD-I)[34]

量子分子动力学模型的首次改进,我们称为 ImQMD-I(相对于第二版的更新),主要包括以下几点:(1)对常规的 QMD 模型的相互作用势进行简化,采用比较简单又广泛应用的 Skyrme 相互作用势。用 Skyrme 相互作用自洽得到的表面能项代替常规 QMD 模型中的 Yukawa 项。(2)采用相空间占有数约束方法改善原子核的费米子属性。(3)引入随体系大小相依赖地初始波包宽度。下面我们分别介绍这几点改进。

§2.2.1 相互作用势的更新

常规的 QMD 模型采用的相互作用势对低能核反应的描述有很大的困难。而我们知道 Skyrme 相互作用是一种δ形式的参数化的有效相互作用,由于它在实际计算中速度较快,而且能够很好地描述核的基态性质如结合能、方均根半径以及单粒子能级等,所以近几十年来,Skyrme-HF 模型得到了广泛地应用和发展[25][26][27][28][29][30]: 从研究低密度核物质到中子星[28]; 从研究核基态性质到液汽相变[29]; 从研究稳定线上的元素到滴线附近的元素都得到了很好的结果; 而且人们对 Skyrme 相互作用各项的理解、计算方法的完善以及参数的确定都有了很大的发展。

鉴于 Skyrme 相互作用的诸多优点,在改进的量子分子动力学(ImQMD)模型中, 我们舍弃了原有的 Yukawa 势、动量相关势以及泡利势,而是采用 Skyrme 相互作用 势中的相关项的形式。

Skyrme 相互作用势的体系的总能量写为

$$E = \langle \phi \mid T + V \mid \phi \rangle = \sum_{i=1}^{A} \langle i \mid \frac{p^{2}}{2m} \mid i \rangle + \frac{1}{2} \sum_{ij}^{A} \langle ij \mid \tilde{v}_{12} \mid ij \rangle + \frac{1}{6} \sum_{ijk}^{A} \langle ijk \mid \tilde{v}_{123} \mid ijk \rangle = \int H(\vec{r}) d\vec{r}$$

$$(2.2.1)$$

其中 $H(\vec{r})$ 是能量密度,对于质子中子对称体系并且不考虑库仑相互作用时H简化为 [25]:

$$H = \frac{\hbar^2}{2m}\tau + \frac{3}{8}t_0\rho^2 + \frac{1}{16}t_3\rho^{\sigma+2} + \frac{1}{16}(3t_1 + 5t_2)\rho\tau + \frac{1}{64}(9t_1 - 5t_2)(\vec{\nabla}\rho)^2 - \frac{3}{4}W_0\rho\vec{\nabla}\cdot\vec{J}$$
 (2.2.2)

上式右边第一项是动能项,第二、第三项是吸引项(两体项)和排斥项(三体项),被 VUU/BUU 方程以及早期的 QMD 模型所采用,后面的动量相关项、表面能项以及自旋轨道耦合项被常规的 QMD 模型所忽略。但是从 Skyrme-HF 理论我们知道这些项对于有限体系的性质是非常重要的,因此我们在改进 QMD 模型时,想尽可能多地考虑这些项。我们知道有限体系很重要的一点是它具有表面,在液滴模型的质量公式中仅仅考虑了体积能项和表面能项就能相当成功地描述核质量,可见表面效应对于有限体系是非常重要的。因此在对 QMD 模型第一次的改进中我们在 t_0 , t_3 项、对称能项以及库仑项的基础上首先引入表面能项。

系统的哈密顿量可以表示为动能与有效相互作用势能之和

$$H = T + U \tag{2.2.3}$$

其中动能为(推导参考附录5)

$$T = \langle \psi \mid \hat{T} \mid \psi \rangle = \int f(\vec{r}, \vec{p}) \frac{p^2}{2m} d\vec{r} d\vec{p} = \frac{1}{2m} \sum_{i} \left(p_i^2 + \frac{3}{2} \hbar^2 / 2\sigma_r^2 \right) = \sum_{i} \frac{p_i^2}{2m} + C$$
 (2.2.4)

动能表达式中的第二项为常数,是由动量空间的高斯波包宽度引起的,在运动方程中不起作用,因此 OMD 模型一般将其忽略。

有效相互作用势能包括短程的 Skyrme 相互作用势能以及库仑相互作用势能:

$$U = U_{loc} + U_{Coul}, \qquad (2.2.5)$$

$$U_{loc} = \int H_{doc}(\vec{r}) d\vec{r} d \qquad (2.2.6)$$

 $H_{toc}(\vec{r})$ 是我们采用的 Skyrme 相互作用势能密度,

$$H_{soc}(\vec{r}) = \frac{\alpha}{2} \frac{\rho(\vec{r})^2}{\rho_0} + \frac{\beta}{\gamma + 1} \frac{\rho(\vec{r})^{\gamma + 1}}{\rho_0^{\gamma}} + \frac{c_s}{2} \frac{\left[\rho_p(\vec{r}) - \rho_n(\vec{r})\right]^2}{\rho_0} + \frac{g_1}{2} \left(\nabla \rho(\vec{r})\right)^2$$
(2.2.7)

通过比较 $H_{soc}(\vec{r})$ 和 $H_s(\vec{r})$ 可以看出,

$$\frac{\alpha}{2} \frac{1}{\rho_0} = \frac{3}{8} t_0; \tag{2.2.8}$$

$$\frac{\beta}{\gamma + 1} \frac{1}{\rho_0^{\gamma}} = \frac{1}{16} t_3, \quad \gamma = \sigma + 1;$$
 (2.2.9)

$$\frac{g_1}{2} = \frac{1}{64} (9t_1 - 5t_2) \tag{2.2.10}$$

这样 QMD 模型引入的参数就可以和 Skyrme-HF 模型的参数相互比照参考。

运用关系式: $\langle Q \rangle_i = \int \rho_i(r) Q \, d\bar{r}$, 并且取 $\gamma = 2$, 则短程的相互作用势能表达成:

$$U_{loc} = \frac{\alpha}{2} \sum_{i} \langle \frac{\rho}{\rho_0} \rangle_i + \frac{\beta}{3} \sum_{i} \langle \frac{\rho^2}{\rho_0^2} \rangle_i + \frac{c_s}{2} \int \frac{(\rho_p - \rho_n)^2}{\rho_0} d\vec{r} + \frac{g_1}{2} \int (\nabla \rho)^2 d\vec{r}$$
 (2.2.11)

第一项是两体项,第二项是三体项,第三项是对称能项,最后一项是表面能项。由于密度分布是高斯形式,所以上式中所有的积分都能被解析地做出来。除了第二项是 N^3 项求和以外,其他三项都是 N^2 项求和。对于几百个粒子构成的系统, N^3 个项的求和是相当费时的,因此第二项被近似表达成[22]:

$$\sum_{i} \left\langle \frac{\rho^2}{\rho_0^2} \right\rangle_i \approx \sum_{i} \left\langle \frac{\rho}{\rho_0} \right\rangle_i^2 + \int \frac{g_2}{2} (\nabla \rho)^2 d\vec{r} , \qquad (2.2.12)$$

这个表达式是 N^2 项求和,其中右边第二项的形式与表面能项的形式完全相同,因此我们把两项结合在一起统称为表面能项,并且系数取为: $g_0 = g_1 + g_2$ 。

库仑势能由下面的表达式给出:

$$U_{Coul} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \int \rho_i(\vec{r}) \frac{e^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \rho_j(\vec{r}') d\vec{r} d\vec{r}'$$
 (2.2.13)

将每个核子的密度分布

$$\rho_i(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\sigma_r^2)^{3/2}} \exp\left(-\frac{(\vec{r} - \vec{r}_i)^2}{2\sigma_r^2}\right)$$
 (2.2.14)

代入上面的积分,便可得到有效相互作用势能 $U=U_{loc}+U_{coul}$ 的解析表达式(详细推导请参考**附录 3**),

$$U = U_{loc} + U_{Coul} = \frac{\alpha}{2} \sum_{i,j \neq i} \frac{\rho_{ij}}{\rho_0} + \frac{\beta}{\gamma + 1} \sum_{i,j \neq i} \left(\frac{\rho_{ij}}{\rho_0}\right)^{\gamma} + \frac{1}{2} \frac{C_s}{\rho_0} \sum_{i,j \neq i} t_{iz} t_{jz} \rho_{ij}$$

$$+ \frac{g_0}{2} \sum_{i,j \neq i} \left(\frac{3}{2\sigma_r^2} - \left(\frac{r_{ij}}{2\sigma_r^2}\right)^2\right) \rho_{ij} + \frac{e^2}{2} \sum_{i \neq j} \frac{1}{r_{ij}} erf\left(\frac{r_{ij}}{\sqrt{4\sigma_r^2}}\right) \delta_{iz} \delta_{jz}$$
(2.2.15)

上式右边第一项是两体项,第二项是三体项,第三项是对称能项,第四项是表面能项, 最后一项是库仑项。

其中:
$$\rho_{ij} = \frac{1}{(4\pi\sigma_r^2)^{3/2}} \exp\left(-\frac{(\vec{r}_i - \vec{r}_j)^2}{4\sigma_r^2}\right), \quad t_{iz} = \begin{cases} 1, & proton \\ -1, & neutron \end{cases},$$
$$r_{ij} = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|, \quad \delta_{iz} = \begin{cases} 1, & proton \\ 0, & neutron \end{cases},$$

erf(x)和 erfc(x)为误差函数和余误差函数:

$$erf(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-u^2} du$$
, $erfc(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^\infty e^{-u^2} du$ (2.2.16)

它们满足: erf(x) + erfc(x) = 1。

表 2.1 给出 ImQMD 模型采用的参数。

表 2.1 ImQMD 模型采用的参数

α(MeV)	β(MeV)	γ	g ₀ (MeVfm ⁵)	C _s (MeV)	$ ho_{ heta}(\mathit{fm}^{-3})$
-124.0	71.0	2	960.0	32.0	0.165

可以看出改进的势能只与体系的密度分布有关(除了长程的库仑势能),这对于计算机数值运算非常有利,而且在与其它模型(例如 Skyrme-HF 模型)进行比较验证方面,也变得非常简单。此外更主要的是,改进的相互作用势对于核基态性质、低能熔合反应的描述有非常明显的改善作用。

§2.2.2 表面效应

对于有限体系,表面效应显然是很重要的。一方面,在核表面区域,核子密度明显降低,密度涨落以及块的形成(低能时的熔合、裂变、核子转移以及中高能时的多重碎裂)变得比较重要;另一方面,原子核的液滴概念在宏观与微观物理中都受到很多重视,而液滴模型很成功的一点就是考虑了核的表面效应。常规的 QMD 模型对表

面项的效应的考虑采用 Yukawa 势($V_{yuk}=c_y\exp(-\gamma|\bar{r}-\bar{r}'|)/|\bar{r}-\bar{r}'|)$,这样两体相互作用使得表面的核子只受到内部核子的吸引,从而使核具有表面效应。我们对表面项直接采用 Skyrme 相互作用的势能(式 2.2.2)中的表面项,即 $U_{surfacre}=\frac{g_0}{2}\int(\nabla\rho)^2\,d\bar{r}$ [25]。从表面能项的形式可以看出,它与密度的梯度也就是核的表面直接相关。

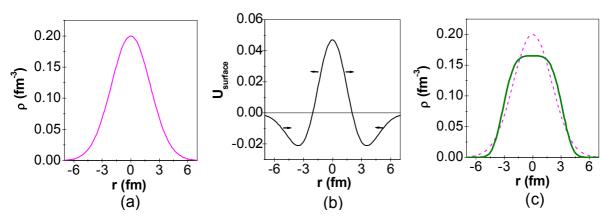
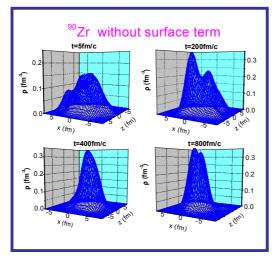


图 2.5 表面项效应的示意图。(a)Boltzmann 形式的密度分布;(b)表面能项的形状,箭头表示相应的力的方向;(c)考虑(实线)和不考虑(虚线)表面能项时核的密度分布。

图 2.5 给出了表面能效应的示意图,由于核子的位置和动量在时间演化过程中遵循的是经典的正则方程,系统的初始的密度分布会逐渐演化成经典的 Boltzmann 分布,如图 2.5(a)所示,它是一个高斯形式的分布。基于图 2.5(a)的密度分布,由表面项的定义可以得到表面能的形式,如图 2.5(b)所示,我们可以看到,中心区(也就是密度比较高的区域)的粒子在表面能项的作用下会受到一个向外的排斥力,使核子向外运动,从而防止中心区密度过高;而在表面的核子会自治地受到一个向内的引力,使表面的核子向中心靠,从而防止核表面过于弥散。这一点对于维持一个合理的密度分布以及保持其稳定性是很重要的,也是与常规 QMD 模型中采用的 Yukawa 势不同的地方。常规 QMD 模型中采用的 Yukawa 势不同的地方。常规 QMD 模型中采用的 Yukawa 势的形式是两体吸引的,因此在核表面会起到一定的表面张力的作用,但是对于中心密度过高,它是无能为力的;而我们采用的 Skyrme 表面能项不仅对核的表面有很好的效应,而且能有效地防止核中心的密度过高,另外它是从 Skyrme 相互作用直接推导出来的,这样使得在参数的确定以及数值的计算方面也更简单一些。在表面能项的作用下,核的密度分布会变得更加合理。而且更重要的一点,引入这种表面能项后,核的稳定性也得到一定的改善。



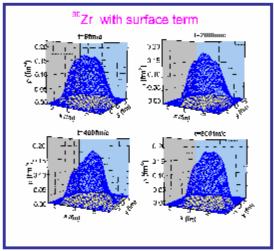


图 2.6 (左)没有考虑表面能项时基态 ⁹⁰Zr 的密度分布随时间的演化

图 2.7 (右) 考虑表面能项时基态 ⁹⁰Zr 的密度分布随时间的演化

下面我们研究表面能项在基态核的实际演化中的效果。我们比较了考虑表面项和 不考虑表面项两种情况下基态 ⁹⁰Zr 的密度分布随时间的演化,见图 2.6 和图 2.7。当 没有考虑表面能项时(见图 2.6),核的密度分布仅仅在初始一段时间内比较合理,中 心密度大约保持在常密; 而随着进一步的时间演化, 中心密度逐渐增高, 在 400fm/c 时刻,中心密度甚至超过 0.3fm⁻³; 随后,由于中心密度过高,系统变得不稳定,核 子不断向外蒸发。而当考虑表面能项时(见图 2.7),在相当长的时间内,核的密度分 布都比较合理,中心密度基本保持在常密,而且没有出现核子蒸发现象。从上面两幅 图的比较可以很明显地看出,表面项对于保持密度的合理分布以及核的稳定性都非常 有效。

另一方面,核表面弥散也是原子核的一个很重要的性质,它对于熔合位垒以及熔 合截面的影响非常之大[35]。表面能系数越大,则给出的核的表面弥散越大。

§2.2.3 相空间占有数约束

近几十年来,出现了很多半经典方法用来描述中高能重离子碰撞。如我们前面提到的单体半经典输运模型 VUU/BUU,它们不适合用来描述多重碎裂过程,这主要是由于 VUU/BUU 模型所采用的单体方法不能很好地处理多重碎裂过程中出现的很大涨落。多重碎裂需要采用更适合的处理 N 体问题的分子动力学模型来描述。量子分子动力学(QMD)模型相对于 AMD 以及 FMD 模型来说,它能够计算非常重的反应系统,这主要是 QMD 模型忽略了波函数的反对称化从而节约了大量的计算时间。然而对波函数反对称化的忽略,无疑会影响核子的费米子属性,如费米子所遵循的Fermi-Dirac 分布,而不是 Boltzmann 分布。

带有泡利阻塞效应的两体碰撞项能部分地弥补这一缺陷,然而对于基态或者低能反应,两体碰撞几乎没有或者很少。因此在 QMD 中,即使初始核的相空间分布能很好地符合 Fermi-Dirac 分布,但经典的运动方程会使得系统初始的相空间分布逐渐演化成 Boltzmann 分布。为了解决这个缺陷,很多作者引入了 Pauli 势[22][36],这种唯象的两体 Pauli 势防止自旋和同位旋相同的两个核子相互靠近。虽然 Pauli 势能给出一些好的结果如原子核的基态性质、核物质的饱和性等,但它同时也给出了一些不好的副效应,如碰撞问题中的虚的排斥等。为了避免上述的问题,M. Papa 等人提出了相空间占有数约束方法[37]。我们知道,Pauli 原理要求单个核子在 h^3 的相空间中的占有数 $\bar{f}_i \le 1$ 。在 QMD 中,因为忽略了波函数的反对称化以及一些短程排斥的残余相互作用的影响,再加上经典的运动方程,导致核子在演化过程中,有时候相空间的占有数 $\bar{f}_i > 1$,这就有悖于费米子的特性。在 QMD 模型中,两体弹性散射通过随机地改变相空间分布并且对终态进行 Pauli 阻塞检测来模拟短程排斥的残余相互作用。相空间占有数约束方法借鉴了这一思想。相空间占有数约束方法简而言之就是在时间演化中检查相空间占有数,如果 $\bar{f}_i > 1$,则进行两体弹性散射,以达到 $\bar{f}_i \le 1$ 从而满足 Pauli 原理。

相空间占有数可以表示为

$$\overline{f}_i \equiv \sum_j \delta_{\tau_i \tau_j} \delta_{s_i s_j} \int_{h^3} f_j(\vec{r}, \vec{p}) d\vec{r} d\vec{p} , \qquad (2.2.17)$$

其中 $f_i(\bar{r},\bar{p})$ 是 j 粒子处的相空间密度,

$$f_{j}(\vec{r}, \vec{p}) = \frac{1}{(\pi \hbar)^{3}} \exp\left(\frac{-(\vec{r} - \vec{r}_{j})^{2}}{2\sigma_{r}^{2}}\right) \exp\left(\frac{-(\vec{p} - \vec{p}_{j})^{2}}{2\sigma_{p}^{2}}\right),$$
 (2.2.18)

 $\delta_{\tau_i\tau_j}$, $\delta_{s_is_j}$ 是基于对同位旋和自旋的的考虑,坐标 s_i 表示核子自旋投影量子数。积分是在以 j 粒子(\bar{r}_i , \bar{p}_i)为中心,体积为 h^3 的相空间内执行的,考虑到最小测不准关系,

$$\sigma_r \cdot \sigma_p = \hbar/2 , \qquad (2.2.19)$$

则有 $h=h_r\cdot h_p=\sqrt{4\pi\sigma_r^2}\cdot\sqrt{4\pi\sigma_p^2}$,其中 $h_r=\sqrt{4\pi}\sigma_r$, $h_p=\sqrt{4\pi}\sigma_p$ 。

由相空间占有数的定义有,

$$\overline{f_{i}} = \sum_{j} \delta_{\tau_{i}\tau_{j}} \delta_{s_{i}s_{j}} \int_{h^{3}} f_{j}(\vec{r}, \vec{p}) d\vec{r} d\vec{p}$$

$$= \frac{1}{(\pi \hbar)^{3}} \sum_{j} \delta_{\tau_{i}\tau_{j}} \delta_{s_{i}s_{j}} \int_{h_{r}} \exp\left(\frac{-(\vec{r} - \vec{r}_{j})^{2}}{2\sigma_{r}^{2}}\right) d^{3}r \cdot \int_{h_{p}} \exp\left(\frac{-(\vec{p} - \vec{p}_{j})^{2}}{2\sigma_{p}^{2}}\right) d^{3}p$$

$$= \frac{1}{(\pi \hbar)^{3}} \sum_{j} \delta_{\tau_{i}\tau_{j}} \delta_{s_{i}s_{j}} \int_{h_{r}} \exp\left(\frac{-(\vec{r}_{0} - \vec{r}_{j} + \Delta \vec{r})^{2}}{2\sigma_{r}^{2}}\right) d^{3}r \cdot \int_{h_{p}} \exp\left(\frac{-(\vec{p}_{0} - \vec{p}_{j} + \Delta \vec{p})^{2}}{2\sigma_{r}^{2}}\right) d^{3}p \cdot \frac{1}{2\sigma_{r}^{2}} \int_{h_{p}} \exp\left(\frac{-(\vec{p}_{0} - \vec{p}_{j} + \Delta \vec{p})^{2}}{2\sigma_{r}^{2}}\right) d^{3}p \cdot \frac{1}{2\sigma_{r}^{2}} \int_{h_{p}} \exp\left(\frac{-(\vec{p}_{0} - \vec{p}_{j} + \Delta \vec{p})^{2}}{2\sigma_{r}^{2}}\right) d^{3}p \cdot \frac{1}{2\sigma_{r}^{2}} \int_{h_{p}} \exp\left(\frac{-(\vec{p}_{0} - \vec{p}_{j} + \Delta \vec{p})^{2}}{2\sigma_{r}^{2}}\right) d^{3}p \cdot \frac{1}{2\sigma_{r}^{2}} \int_{h_{p}} \exp\left(\frac{-(\vec{p}_{0} - \vec{p}_{j} + \Delta \vec{p})^{2}}{2\sigma_{r}^{2}}\right) d^{3}p \cdot \frac{1}{2\sigma_{r}^{2}} \int_{h_{p}} \exp\left(\frac{-(\vec{p}_{0} - \vec{p}_{j} + \Delta \vec{p})^{2}}{2\sigma_{r}^{2}}\right) d^{3}p \cdot \frac{1}{2\sigma_{r}^{2}} \int_{h_{p}} \exp\left(\frac{-(\vec{p}_{0} - \vec{p}_{j} + \Delta \vec{p})^{2}}{2\sigma_{r}^{2}}\right) d^{3}p \cdot \frac{1}{2\sigma_{r}^{2}} \int_{h_{p}} \exp\left(\frac{-(\vec{p}_{0} - \vec{p}_{j} + \Delta \vec{p})^{2}}{2\sigma_{r}^{2}}\right) d^{3}p \cdot \frac{1}{2\sigma_{r}^{2}} \int_{h_{p}} \exp\left(\frac{-(\vec{p}_{0} - \vec{p}_{j} + \Delta \vec{p})^{2}}{2\sigma_{r}^{2}}\right) d^{3}p \cdot \frac{1}{2\sigma_{r}^{2}} \int_{h_{p}} \exp\left(\frac{-(\vec{p}_{0} - \vec{p}_{j} + \Delta \vec{p})^{2}}{2\sigma_{r}^{2}}\right) d^{3}p \cdot \frac{1}{2\sigma_{r}^{2}} \int_{h_{p}} \exp\left(\frac{-(\vec{p}_{0} - \vec{p}_{j} + \Delta \vec{p})^{2}}{2\sigma_{r}^{2}}\right) d^{3}p \cdot \frac{1}{2\sigma_{r}^{2}} \int_{h_{p}} \exp\left(\frac{-(\vec{p}_{0} - \vec{p}_{j} + \Delta \vec{p})^{2}}{2\sigma_{r}^{2}}\right) d^{3}p \cdot \frac{1}{2\sigma_{r}^{2}} \int_{h_{p}} \exp\left(\frac{-(\vec{p}_{0} - \vec{p}_{j} + \Delta \vec{p})^{2}}{2\sigma_{r}^{2}}\right) d^{3}p \cdot \frac{1}{2\sigma_{r}^{2}} \int_{h_{p}} \exp\left(\frac{-(\vec{p}_{0} - \vec{p}_{j} + \Delta \vec{p})^{2}}{2\sigma_{r}^{2}}\right) d^{3}p \cdot \frac{1}{2\sigma_{r}^{2}} \int_{h_{p}} \exp\left(\frac{-(\vec{p}_{0} - \vec{p}_{j} + \Delta \vec{p})^{2}}{2\sigma_{r}^{2}}\right) d^{3}p \cdot \frac{1}{2\sigma_{r}^{2}} \int_{h_{p}} \exp\left(\frac{-(\vec{p}_{0} - \vec{p}_{j} + \Delta \vec{p})^{2}}{2\sigma_{r}^{2}}\right) d^{3}p \cdot \frac{1}{2\sigma_{r}^{2}} \int_{h_{p}} \exp\left(\frac{-(\vec{p}_{0} - \vec{p}_{j} + \Delta \vec{p})^{2}}{2\sigma_{r}^{2}}\right) d^{3}p \cdot \frac{1}{2\sigma_{r}^{2}} \int_{h_{p}} \exp\left(\frac{-(\vec{p}_{0} - \vec{p}_{j} + \Delta \vec{p})^{2}}{2\sigma_{r}^{2}}\right) d^{3}p \cdot \frac{1}$$

令: $\vec{r}_0 - \vec{r}_j = \vec{r}_1$, 则上式的积分可以写为

$$I = I_r \cdot I_p = I_x \cdot I_v \cdot I_z \cdot I_{px} \cdot I_{py} \cdot I_{pz}, \qquad (2.2.21)$$

其中,
$$I_x = \int_{-h_r}^{h_r} \exp\left(-(x_1 + \Delta x)^2/2\sigma_r^2\right) dx = \sqrt{\frac{L\pi}{2}} \left\{ erf\left(\frac{h - x_1}{\sqrt{2\sigma_r^2}}\right) + erf\left(\frac{h + x_1}{\sqrt{2\sigma_r^2}}\right) \right\}$$
。

所以相空间占有数最后表示为

$$\overline{f}_i = \sum_j \delta_{\tau,\tau_j} \delta_{s_i s_j} \frac{1}{64} f(x) f(y) f(z) \cdot F(p_x) F(p_y) F(p_z)$$
(2.2.22)

其中:
$$f(x) = \left\{ erf\left(\frac{h_r - x}{\sqrt{2\sigma_r^2}}\right) + erf\left(\frac{h_r + x}{\sqrt{2\sigma_r^2}}\right) \right\},$$
 (2.2.23)

$$F(p_x) = \left\{ erf\left(\frac{h_p - p_x}{\sqrt{2\sigma_p^2}}\right) + erf\left(\frac{h_p + p_x}{\sqrt{2\sigma_p^2}}\right) \right\}, \tag{2.2.24}$$

$$x = x_0 - x_j = x_i - x_j$$
, $p_x = p_{x_i} - p_{x_j}$

i 粒子本身的相空间密度对于相空间占有数 \overline{f}_i 的贡献 $\overline{f}_i^{\ 0} \approx 0.622$ 。

在每个时刻检查i 粒子(包括i 粒子)周围的一个小体积内的相空间占有数 \overline{f}_i 。如果 \overline{f}_i >1则执行多体弹性散射(为了节约 CPU 时间实际上是一系列两体弹性散射),从而减少相空间占有数。

对于通常的两体碰撞过程,我们需要进行 Pauli 阻塞检查,主要就是检查粒子碰撞后的状态是否违背 $\overline{f_i} \le 1$,我们把相空间分成体积为 h^3 的小格间,如果粒子 i 被散射到一处相空间已经饱和的小格间,那么就要执行 Pauli 阻塞,取消这次碰撞。Pauli 阻塞的几率为[37],

$$P_{block} = 1 - (1 - w_i)(1 - w_i), (2.2.25)$$

其中 $w_i \equiv \min\left(1, \frac{\overline{f}_i - \overline{f}_i^0}{1 - \overline{f}_i^0}\right)$ 为i粒子处的相空间"有效占有数",实际上就是减掉i粒子本身的贡献。

图 2.8 比较了基态的 ²⁰⁸Pb 在没有采用相空间约束 (左图) 和采用相空间约束 (右图) 两种情况下粒子的相空间密度分布随时间的演化情况。从图中可以看出,如果没有采用相空间约束,粒子的相空间占有数很多时候大于 1,这就有悖于核体系的费米子属性;而当引入了相空间约束后,粒子的相空间占有数基本上小于等于 1,从而使

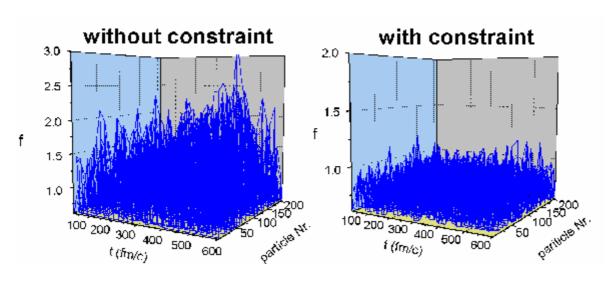


图 2.8. 不考虑 (左图) 和考虑 (右图) 相空间约束下核子的相空间密度随时间的演化。

得模型在描述费米子属性上得以满足。相空间占有数约束一方面使得 Pauli 原理得到满足,另一方面它能有效地补偿短程排斥的残余相互作用。

此外,我们还研究了相空间占有数约束方法对于动量分布的影响。对于基态以及近垒熔合反应,合理的动量分布应该是很重要的。类似于上面提到的密度分布在经典正则方程演化下而发生的改变,核初始的动量分布也会随着时间演化而发生改变,低动量的核子数会变得过多。采用相空间约束的方法后,我们发现基态的动量分布在很大程度上有所改善,特别是低动量部分。当低动量粒子数增多时,相空间占有数就会大于1,而相空间占有数约束方法所采用的两体弹性散射迫使粒子的动量进行随机改变,从而有效地防止低动量的粒子数过多。为了证实这一点,我们比较了采用相空间约束和不采用相空间约束两种情况下的²⁰⁸Pb的动量分布,如图 2.9 所示。虚线和实线分别表示当没有采用相空间约束和采用相空间约束两种情况下,基态²⁰⁸Pb的动量分布,点划线表示初始时刻的动量分布,它是基于费米气体模型抽样得到的。从图中

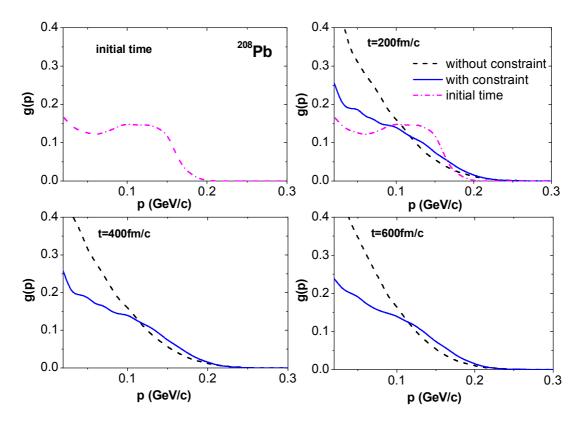


图 2.9 ²⁰⁸Pb 的动量分布的时间演化。点划线表示由相对论平均场计算得到的核的初始的动量分布;虚线和实线分别表示不考虑和考虑相空间约束时核的动量分布。

可以看出,当没有采用相空间约束时,随着时间的演化,基态核的动量分布发生改变

(向 Boltzmann 分布改变),低动量的粒子数大大增加,与初始的动量分布偏离很大。这种偏离对于熔合反应的结果无疑会产生很大的影响。而当采用相空间约束后,核的动量分布大大改善,特别是低动量部分。从图 2.8 和 2.9 我们可以看到,相空间占有数约束方法是一个能改善核动量分布的有效方法,特别是低动量部分。

动量分布的合理与否对核的稳定性有很大的影响。当没有考虑相空间约束时,一些粒子逐渐向低动量方向改变试图达到一个稳定的经典组态,由于体系的能量守恒,另外一些粒子则将获取很大的动量(高动量粒子数增多)从而克服位垒离开系统,导致"虚粒子"发射,使得系统不稳定。而考虑了相空间约束后,系统的动量分布部分改善(更加合理),这样体系处于比较稳定的状态,从而系统的稳定性也相应地得到改善。我们还应注意到,相空间约束对于低动量区域的粒子通过相空间排斥使得其分布有了很大改善,不过对于高动量区域的粒子它还是无能为力,因此还需要近一步完善模型,使得高动量区域的粒子分布也得到较大地改善。这一方面的欠缺在我们后面将要讲到的 ImQMD-II 模型中得到了很大地改进。

§2.2.4 核子的波包宽度

QMD 模型之所以区别于经典的分子动力学模型,是因为它所描述的粒子不再是经典的点粒子,而是一个高斯波包,这完全是出于对量子效应的考虑,从而称为量子分子动力学模型。高斯波包的宽度体现了粒子的相互作用力程,也体现了多体块之间的关联。在无限的核物质中,这个量的影响很小,而对于有限体系,这个量的影响却不容忽视[38]。

与平均场模型相比较,分子动力学模型采用了固定的高斯形状的单粒子波函数,而这种局域化的波包一方面对单体运动加了限制,从而不如平均场对单体动力学描述得更精确;另一方面它却引入了多体关联效应,从而能有效地描述块的形成,这也是平均场模型所不及的。各有千秋的平均场模型和分子动力学模型就单粒子波函数是应该不加约束还是应该局域化展开过很多讨论。一个主要的问题就是我们没法精确求解多体关联的所有高阶项,因此为了使这种局域化的高斯波包尽可能更精确地描述平均场,对不同的反应道或者大小不同的块(大小不同的体系以及平均场)引入一些关联

还是很必要的[39]。

严格意义上来说,波包宽度应该随体系的动力学演化而演化[13][10][40]。我们从系统的拉格朗日函数以及系统的哈密顿量出发[38]。在 QMD 模型中体系的波函数为

$$\psi = \prod_{i} \phi_{i} = \prod_{i} \frac{1}{(2\pi L)^{3/4}} \exp\left[-\frac{(\vec{r} - \vec{r_{i}})^{2}}{4L} + \frac{i\vec{p}_{i} \cdot \vec{r}}{\hbar}\right], \qquad (2.2.26)$$

则系统的拉格朗日函数以及系统的哈密顿量分别为,

$$L = \langle \psi \mid i\hbar \frac{d}{dt} - H \mid \psi \rangle = \sum_{i} \left(-\dot{\vec{r}}_{i} \vec{p}_{i} - H \right)$$
 (2.2.27)

$$H = \sum_{i} \left(\frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2m} \frac{3\hbar^2}{4L} \right) + \frac{1}{2} \sum_{ij} V_{ij}$$
 (2.2.28)

通过求解欧拉方程

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_{x}} - \frac{\partial L}{\partial q_{x}} = 0, \qquad (2.2.29)$$

(其中 q_v 表示拉格朗日函数中的自变量 \bar{r}_i, \bar{p}_i),便可得到坐标、动量的运动方程

$$\dot{\vec{r}}_i = \frac{\partial H}{\partial \vec{p}_i}, \quad \dot{\vec{p}}_i = -\frac{\partial H}{\partial \vec{r}_i}$$
(2.2.30)

可以看出坐标和动量的运动方程正是我们前面提到的经典的正则方程。

如果将高斯宽度以复数形式给出,如 EQMD 模型[41],

$$a_i \equiv \frac{1}{\lambda_i} + i\delta_i$$
, $(\frac{1}{2L} = a_i = \frac{1}{\lambda_i}$, 当 $\delta_i = 0$ 时)。则体系的拉格朗日函数可以写为,

$$L \equiv \langle \psi \mid i\hbar \frac{d}{dt} - H \mid \psi \rangle = \sum_{i} \left(-\dot{\bar{r}}_{i}\bar{p}_{i} + \frac{3}{4}\hbar\lambda_{i}\dot{\delta}_{i} - H \right), \tag{2.2.31}$$

其中

$$H = \sum_{i} \left(\frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2m} \frac{3\hbar^2 (1 + \lambda_i^2 \delta_i^2)}{2\lambda_i} \right) - T_{c.m.} + \frac{1}{2} \sum_{ij} V_{ij}$$
 (2.2.32)

通过求解欧拉方程便可以得到高斯宽度实部和虚部的演化方程:

$$\frac{3\hbar}{4}\dot{\lambda_i} = -\frac{\partial H}{\partial \delta_i}, \quad \frac{3\hbar}{4}\dot{\delta_i} = \frac{\partial H}{\partial \lambda_i}$$
(2.2.33)

这样我们便可以自治地给出随系统动力学演化的波包宽度。很显然动力学的波包宽度增加了体系哈密顿量的自由度,某种程度上来说,它给半经典的动力学模型引入了更多的量子效应。

在此简单地给出动力学波包的几个主要特点: (1) 体系能量的涨落增大。这主要是由于动力学的波包宽度比采用固定的波包宽度给体系带进了更多的涨落。**图 2.10** 比较了动力学的波包宽度以及固定波包宽度情况下 ⁹⁰Zr 的平均结合能。其中实线表示

波包宽度不变(取某一常数值)情况下 ⁹⁰Zr 的结合能随时间的演化; 叉线表示引入动力学波包宽度后 ⁹⁰Zr 的结合能随时间的演度后 ⁹⁰Zr 的结合能随时间的演化,可以看出引入动力学波包宽度不变的情况。为了专门研究动力学波包引入的涨落,我们固定核子的坐标,然后只演化核子的波包宽度,检查相应的体系结合能的演化(实心圆点表示),我们从图上可以非常清楚地

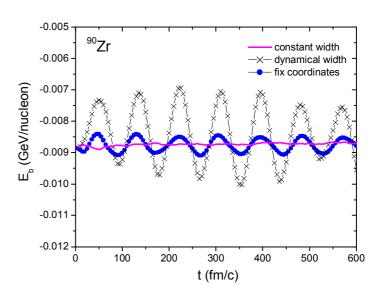


图 2.10 采用不同波包宽度时基态 ⁹⁰Zr 的结合能随时间的演化。

看到,波包宽度的动力学演化确实给系统能量带来了较大的涨落。此外比较固定核子坐标(点线)和体系自洽演化(叉线)两种动力学波包演化下能量的涨落情况,可以看出它们两者的变化趋势完全一致,仅仅幅度大小不同,从而可以知道引入动力学波包宽度后体系能量涨落的增大与动力学波包的引入有直接关系。(2)动力学波包宽度的大小与核子所在地方的核密度有一定的依赖,如同文献[10]提到,核子在核中心区域时波包宽度增大,而在表面区域波包宽度减小。图 2.11 给出了 ⁹⁰Zr 中质子和中子的波包宽度λ的演化(实心圆点表示)与核子到核质心距离(圆圈表示)的比较。从图中可以清楚地看到,核子距离质心近时(核中心区域)波包宽度λ较大;而当核子距离质心较远时(核表面区域),波包宽度较小。并且我们可以看出中子的平均波包宽度(见子图(b))要大于质子的平均波包宽度(见子图(a)),这种差别与重核中中子

密度高于质子密度这一现象应该有一定的依赖。

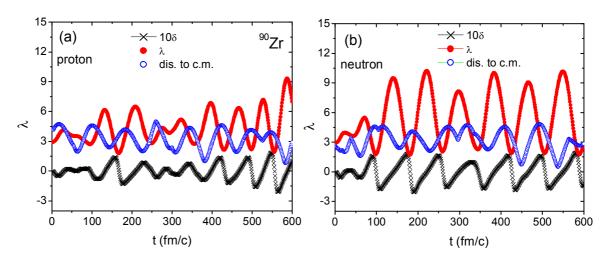


图 2.11 核子的动力学波包宽度以及距核心距离的时间演化。(a) 基态 90 Zr 的质子的波包演化;(b) 基态 90 Zr 的中子的波包演化。

动力学波包宽度给半经典的动力学模型引入更多量子效应的同时,它也给系统的稳定演化带来一定的难度。图 2.12 是动力学波包宽度对系统演化的影响。QMD 模型首先由高斯型的试探波函数 ψ 出发,通过 Wigner 变换得到系统的

密度分布 ρ ,再由密度分布可以得到系统的哈密顿量。而动力学的波包宽度 λ 则会通过方程(2.2.33)的演化反作用于系统的密度。动力学波包宽度对体系演化的这种反馈效应一方面能使得系统更自治地演化,从而引入更多的量子效应。另一方面,如果这种反馈效应稍微不合适(相互作用的高阶近似或者数值求解的精度影响)则会导致系统的稳定性变差(体系能量的涨落增大,收敛性受到很大影响)。

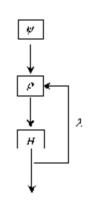


图 2.12 动力学波 包宽度对系统演化 的反馈效应。

因此,考虑动力学波包演化的 EQMD[10]模型需要对 Skyrme 相互作用中的三体项采用严格的三重循环 N^3 求解,并且体系演化 的数值求解需要很高精度,而这样则大大地降低了计算速度,出现

了类似于前面提到的 AMD 以及 FMD 的计算速度问题。因此如何在足够快地模拟反应从而统计出动力学规律与尽可能精确地考虑量子效应两者之间做出合理的权衡,是分子动力学模型应该考虑的一个很重要的方面。

为了在不增加计算量的前提下,我们定性地分析了波包宽度随系统的依赖以及对

系统的影响。首先我们来讨论波 包宽度随体系大小的依赖关系。 对于有限核体系,粒子应该被束 缚在一个有限大小的范围之内, 核体系的波函数与平均场的大小 紧密相关。而 QMD 模型中单粒 子波函数采用相干的高斯波包来 描述,因此粒子的波包宽度应该 与它们形成的平均场的大小有一 定的联系。图 2.13 给出了轻核与 重核的波包宽度与平均场的示意

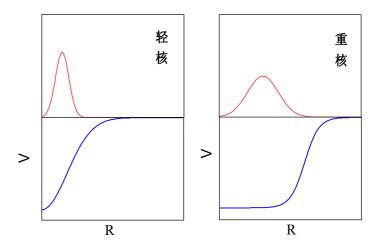


图 2.13 轻核与重核的平均场以及相应的单粒子高斯波包的比较示意图。

图。从图中我们可以看出,轻核的平均场比较窄而尖,用较窄的波包来描述更适合一些,而重核的平均场宽而平,更适合用较宽的波包来描述。

另外,在反对称化分子动力学模型(AMD)中,一些作者通过考虑波包的弥散(Diffuse)与收缩(Shrink)(AMD/DS)[39]而引入块之间的关联效应,从而使得块多重数的分布更加合理。

在常规的 QMD 中波包宽度取为常量,但是人们也注意到不同的波包宽度对于计算结果有很明显的影响。针对不同的反应体系,为了使得结果比较合理,作者采用的波包宽度也有些差别,例如,在 Ca+Ca 的反应中,波包宽度取为 $\sigma_r=1.04\,fm$,而在 Au+Au 的反应中,波包宽度取为 $\sigma_r=1.47\,fm$ [38]。有时候甚至对于相同的反应体系不同的反应能量,如研究多重碎裂和研究熔合反应,波包宽度也取得不同[37][42],这就使得计算结果的不确定性很大。我们知道,熔合反应的过程比较缓慢,要求单个核的基态性质随时间演化的稳定性比较好,因此我们研究了波包宽度对于体系稳定性的影响,见图 2.14 与图 2.15。我们研究了取两种不同波包宽度情况下基态 208 Pb 的稳定性。通过比较基态 208 Pb 在不同的波包宽度下随时间的演化情况,我们发现当波包宽度取得较小 $\sigma_r=1.04\,fm$ 时,仅仅在初始的一段时间内,核子能被约束在一起,而

随着进一步的时间演化,大约在 200fm/c 以后,核就变得不太稳定,少数的核子向外

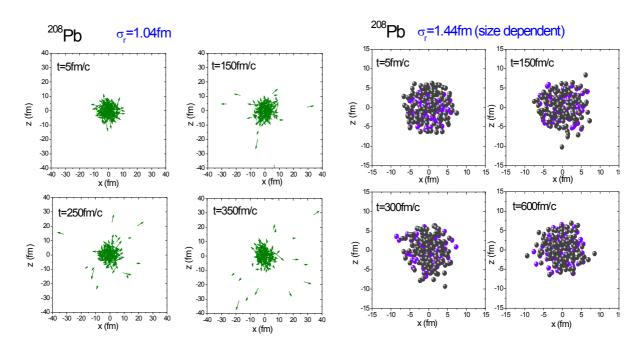


图 2.14 波包宽度较窄时基态 ²⁰⁸Pb 的核子 随时间的演化。箭头表示核子运动的方向。

图 2.15 采用随体系大小相依赖的波包宽度后,²⁰⁸Pb 的核子随时间的演化。

蒸发。到800fm/c对²⁰⁸Pb大约就有10%-20%的核子蒸发掉,这种情况显然没法研究熔合反应。

这主要是因为坐标的波包宽度和动量的波包宽度满足最小测不准关系,当坐标的波包宽度偏小时,动量的波包宽度就偏大,从而单个粒子的平均动能过大而使得核的演化变得不稳定。而如果波包宽度取由关系式(2.2.34)给出的宽度,则体系随时间演化比较稳定,在足够长的时间内没有粒子蒸发,并且核密度分布也比较合理。所以对于 Au+Au 的反应,作者将波包宽度加大为 $\sigma_r=1.47\,fm$ [38],从而使块的稳定性以及密度分布有了改善。

从上面的讨论我们知道,核子的波包宽度与核的平均场的大小存在一定的联系。因为平均场的大小基本与核半径($A^{1/3}$)呈线性关系,因为我们通过研究一系列稳定线上的核的基态性质随波包的变化,拟合了一个波包宽度随体系大小相依赖的关系式:

$$\sigma_r = 0.16 \cdot A^{1/3} + 0.49 \, fm \tag{2.2.34}$$

其中 A 是块的大小。

图 2.16 给出了波包宽度随体系大 小的变化曲线。其中曲线表示由关系 式(2.2.34)得到的波包宽度,黑点表示 文献[38]给出的大小不同的反应体系 的不同波包宽度,可以看出我们给出 随体系大小相依赖的核子波包宽度 与文献[38]采用的宽度基本一致。另 外 T.Maruyama 等人通过严格求解波 包的运动方程[10]给出了大小不同的 三个核 ¹²C、⁹³Nb 以及 ¹⁹⁷Au 的核子 的高斯宽度(实部),如图 2.17 所示。 从图中可以清楚地看到,对于大小不 同核, 其核子的高斯宽度以及同一个 核内不同地方的核子的高斯宽度是 不同的(核中心区的核子宽度较大, 而核表面区核子宽度较小)。核子的 平均高斯宽度随核体系的增大而增 大,

$$\overline{\lambda}(^{12}C) < \overline{\lambda}(^{93}Nb) < \overline{\lambda}(^{197}Au)$$
,

这与我们给出的核子波包宽度随核 体系增大而逐渐增大的趋势是完全 一致的。

引入随体系大小相依赖的初始 波包宽度以后,一系列稳定线上的 核,从 ⁶Li 到 ²⁰⁸Pb,它们的基态性质 如结合能,方均根半径,密度分布等 都能被很好地描述,而且很重要的一

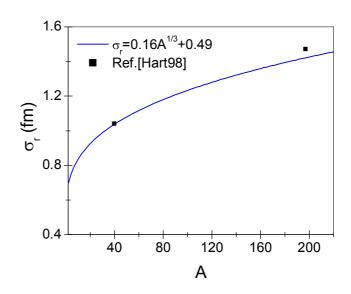


图 2.16 核子的波包宽度随体系大小的依赖。

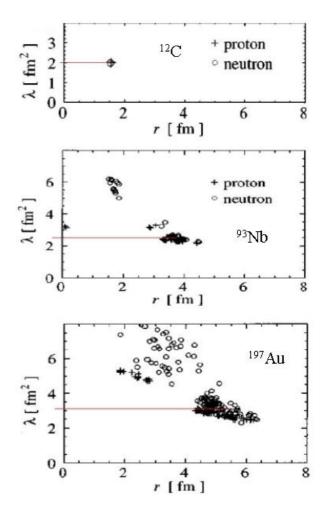


图 2.17 EQMD 模型计算出来的不同体系的核子的波包宽度。

点就是核的稳定性得到了一定的改善,核基态性质的时间演化在很长时间内都相当稳定。下表给出了改进的 QMD 模型计算的 6 Li、 16 O、 30 P、 40 Ca、 90 Zr、 108 Ag、 144 Nd、 197 Au 以及 208 Pb 的结合能和方均根半径以及与实验值和经验值的比较。方均根半径的经验值是从经验公式 $\langle r^2 \rangle^{1/2} = 0.82 A^{1/3} + 0.58$ [43]得到的。从比较结果可以看出改进的QMD 模型计算的结果与实验值以及经验值都符合得非常好。考虑到模型只有很少的几个参数,这个结果是令人相当满意的。

表 2.2 一些核的结合能及方均根半径。结合能与实验数据相比较;方均根半径与经验公式[43]相比较。

Nuclear	Binding	Energy	Mean Square Radius		
Name	QMD	Exp.	QMD	Data	
⁶ Li	5.78	5.33	2.13	2.07	
¹⁶ O	8.01	7.97	2.85	2.64	
30 P	8.32	8.35	3.35	3.12	
⁴⁰ Ca	8.55	8.55	3.54	3.38	
90 Zr	8.57	8.71	4.25	4.25	
108 Ag	8.41	8.50	4.47	4.48	
¹⁴⁴ Nd	8.25	8.27	4.84	4.87	
¹⁹⁷ Au	8.01	7.92	5.30	5.35	
²⁰⁸ Pb	7.87	7.87	5.41	5.43	

图 2.18 我们给出了 ¹⁶O、⁴⁰Ca、⁹⁰Zr 以及 ²⁰⁸Pb 的结合能及方均根半径随时间的演化。 从图中可以看出,这些核的结合能和方均根半径的时间演化都很平稳,而且能持续很 长的时间,这样就为研究熔合反应打下基础。从图中还可以看到,核越大,结合能和 方均根半径随时间演化的涨落就越小,这是因为越大的核它的平均场效应也越强。总 而言之,引入随体系大小相依赖的波包宽度以后,系统的稳定性、结合能和方均根半 径以及熔合位全都有一些改善。

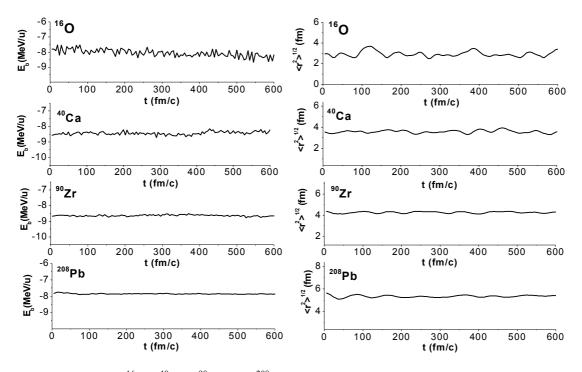


图 2.18 16 O、 40 Ca、 90 Zr 以及 208 Pb 的结合能及方均根半径随时间的演化。

此外,波包宽度之所以对无限核物质没有明显影响而对有限体系却有很大影响,是因为这种局域的波包体现了有限力程效应以及有限体系效应。波包宽度和前面提到的表面项对于核表面性质都有一定的影响,能够影响核的表面弥散,从而对熔合位垒产生影响[41]。引入随体系大小相依赖的波包宽度后,计算出来的熔合位垒有了很大的改善。

我们知道核子的波包宽度与相互作用力程直接相关,因此引入随体系大小相依赖的波包宽度不但能稳定系统,而且在某种程度上更成功地引入了涨落从而对于多重碎裂过程的描述是有利的,这也是在反对称化分子动力学模型(AMD)中,一些作者通过考虑波包的弥散(Diffuse)与收缩(Shrink)(AMD/DS)(随机地改变波包宽度[39])而引入块之间的关联效应,从而使得块多重数的分布更加合理的部分原因。

这里需要注意的一点是,我们现在引入的随体系大小相依赖的初始波包宽度,主要是针对低能重离子反应而言。在低能重离子反应中核体系不会发生剧烈改变,因此这种随体系大小相依赖的初始波包宽度实质上是一种固定波包宽度的改进,由整个体系采用相同的波包宽度变为弹核与靶核以及复合核有各自不同的核子波包宽度。由于波包宽度的改变在一定程度上会影响体系的能量守恒问题,因此在多重碎裂过程中如

何更自洽更合理地引入动态的波包宽度还需进一步研究。

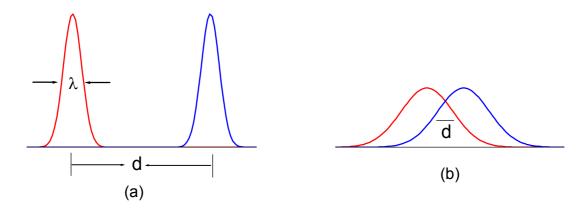


图 2.19 热力学波长与体系温度的依赖。(a) 高温时热力学波长远小于粒子间距离,可以看 成经典的点粒子; (b) 低温时热力学波长大于粒子间的距离,体系处高度简并状态。

另一方面在统计力学中我们知道体系的热力学波长与体系的温度存在一定的关 系,如图 2.19 所示。可见体系处于不同的温度时,波包的量子力学效应是不同的, 因此核子的波包宽度也应随体系温度或者激发程度的改变而改变。如何在 QMD 模型 中将这一效应考虑进来,如何通过波包宽度将体系的动力学涨落更好地体现出来,是 将来对 QMD 模型改进的一个方面。

§2.3 ImQMD 模型的进一步更新(ImQMD-II)

从前面的结果我们可以看出,ImQMD-I模型对核基态性质的描述以及核的稳定性都有所改进。在进一步的研究中我们发现:其一、在第一版的 ImQMD 模型得到的核的稳定性虽然大大改善,但是对于一些需要时间更长的熔合过程(如重体系的准裂变过程等)来说还是不够的,而且为了增加稳定性当时采取了较大的表面能系数,这样对于基态核的表面弥散会有所影响。其二、ImQMD-I采用相空间占有数约束后对于核的动量分布有较大的改善特别是低动量的核子数目大大降低,但是高动量的核子数目并没有得到有效地改善。其三、在中高能重离子碰撞的多重碎裂过程中,QMD模型计算得到的中等质量碎块总是偏少这一问题也没有得到根本的改善。此外,ImQMD-I对于非常重的体系的准裂变以及熔合裂变等过程的描述还存在一定的困难。

鉴于上述的一些问题,我们对 ImQMD-I 模型进行了进一步改进,称为 ImQMD模型的第二版(ImQMD-II)。在第二版的改进中,我们引入了动量相关项、表面对称能项以及库仑交换项,并且引入一套新的 ImQMD 参数(我们称为 IQ1 参数)。通过对 ImQMD 模型的再一次改进,ImQMD-II 模型能够大大改善上面所列举的问题。对于这些新的改进的具体讨论将在下面各节中一一讨论。

在 ImQMD-II 模型中,系统的有效相互作用势能表示为短程 Skyrme 相互作用势能加上长程的库仑相互作用势能,

$$U = U_{loc} + U_{Coul}, (2.3.1)$$

$$U_{loc} = \int H_{loc}(\vec{r}) d\vec{r} \, \iota_{\circ} \tag{2.3.2}$$

在表达式(2.2.11)的基础上引入动量相关项以及表面对称能项以后,系统的势能密度 $H_{toc}(\vec{r})$ 具体表示为,

$$H_{soc}(\vec{r}) = \frac{\alpha}{2} \frac{\rho(\vec{r})^{2}}{\rho_{0}} + \frac{\beta}{\gamma + 1} \frac{\rho(\vec{r})^{\gamma + 1}}{\rho_{0}^{\gamma}} + \frac{g_{0}}{2\rho_{0}} (\nabla \rho(\vec{r}))^{2} + g_{\tau} \frac{\rho(\vec{r})^{5/3}}{\rho_{0}^{2/3}} + \frac{C_{s}}{2\rho_{0}} (\rho(\vec{r})^{2} - \kappa_{s} (\nabla \rho(\vec{r}))^{2}) \delta^{2}$$
(2.3.3)

其中上式右边前面三项与改进的量子分子动力学模型第一版(ImQMD-I)完全相同,分别为两体项、三体项以及表面能项,第四项我们引入了动量相关项,第五项为对称能项(包括体项和表面对称能项)。对 β 项和 g_{τ} 项做简单的近似后 $\langle \rho^{\gamma} \rangle \approx \langle \rho \rangle^{\gamma}$ (我们后面会进一步讨论这个近似), $U_{loc} = \int H_{soc}(\bar{r})d\bar{r}$ 可以表示为,

$$U_{loc} = \frac{\alpha}{2} \sum_{i,j \neq i} \frac{\rho_{ij}}{\rho_0} + \frac{\beta}{\gamma + 1} \sum_{i,j \neq i} \left(\frac{\rho_{ij}}{\rho_0}\right)^{\gamma} + \frac{g_0}{2} \sum_{i,j \neq i} f_s \frac{\rho_{ij}}{\rho_0} + g_{\tau} \sum_{i,j \neq i} \left(\frac{\rho_{ij}}{\rho_0}\right)^{2/3} + \frac{C_s}{2} \sum_{i \neq j} t_i t_j \frac{\rho_{ij}}{\rho_0} (1 - \kappa_s f_s)$$
(2.3.4)

其中:
$$\rho_{ij} = \frac{1}{(4\pi\sigma_r^2)^{3/2}} \exp\left(-\frac{(\vec{r}_i - \vec{r}_j)^2}{4\sigma_r^2}\right)$$
, $t_{iz} = \begin{cases} 1, \ proton \\ -1, \ neutron \end{cases}$, $f_s = \frac{3}{2\sigma_r^2} - \left(\frac{r_{ij}}{2\sigma_r^2}\right)^2$,

$$r_{ij} = \mid \vec{r}_i - \vec{r}_j \mid 0$$

库仑相互作用势能包括直接项和这次改进引入的库仑交换项[80],

$$U_{Coul} = \frac{e^2}{2} \iint \frac{\rho_z(\vec{r})\rho_z(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r} d\vec{r}' - e^2 \frac{3}{4} \left(\frac{3}{\pi}\right)^{1/3} \int \rho_z^{4/3} d\vec{R}$$
 (2.3.5)

ImQMD-II 的参数(IQ1)列在表 2.3 中,

表 2.3 ImQMD-II 的参数

ImQMD-II	α	β	γ	g_{θ}	$oldsymbol{g}_{ au}$	C_s	Ks	$ ho_0$
参数	(MeV)	(MeV)		(MeVfm²)	(MeV)	(MeV)	(fm^2)	(fm ⁻³)
IQ1	-310.0	258.0	7/6	19.8	9.5	32.0	0.08	0.165

基于这套新的参数,ImQMD-II对于原子核基态性质、单个核的稳定性、熔合截面与核核相互作用势、中能重离子多重碎裂以及重的熔合体系的准裂变以及复合体系分裂过程等很多方面的描述都有了根本的改进。关于如何得到这套参数,以及这套参数的效应,我们将在下面的小节中讨论。

§2.3.1 QMD 参数

QMD 模型采用的是 Skyrme 相互作用,因此 QMD 参数与 Skyrme 参数之间存在

着紧密的联系,(Skyrme 参数与 QMD 参数的关系参看公式(2.2.8~2.2.10)这一节我们主要讨论常用的 QMD 参数与 Skyrme 参数的比较以及得到的对称核物质的一些性质。

表 2.4 列出常用的两套 QMD 参数以及常用的 Skyrme 参数所对应的 QMD 参数。由密度依赖指数 γ 值基本上可以将参数分为两大类,硬势(hard)和软势(soft)两种。硬势对应的 $\gamma=2$,软势对应的 $\gamma=7/6$ 。通过比较 QMD 参数与 Skyrme 相应的参数,我们可以看出,QMD 硬势参数(hard)基本上与 SI、SIII 以及 SkNF1 比较接近;而 QMD 软势参数(soft)基本上与 SkP 比较接近。由于 QMD 模型采用高斯波包来描述单粒子,与 Skyrme-HF 平均场理论有一定的差别,因此它们的参数也不完全相同。

表 2.4 ‡	常用的(OMC	参数以及	Skyrme	参数。
---------	------	-----	------	--------	-----

Parameter	α (MeV)	β (MeV)	γ	g_0 (MeVfm ²)
QMD(hard)	-124.0	71.0	2	-
QMD(soft)	-356.0	303.0	7/6	-
SI	-130.8	73.8	2	13.12
SIII	-139.6	71.4	2	20.14
SkNF1	-130.2	70.3	2	15.87
SGII	-327.3	258.0	7/6	16.32
SkM	-327.3	258.0	7/6	20.32
SkM*	-327.3	258.0	7/6	21.82
SLy7	-307.0	226.2	7/6	23.64
SLy10	-310.2	228.8	7/6	21.57
SkP	-362.8	309.6	7/6	19.84

与 QMD 硬势参数(hard)比较接近的 SIII 这套 Skyrme 参数是比较早期(1975 年)提出来的,能很好地符合球形核的基态性质,但是它的不可压缩系数($K_{\infty} \approx 380 MeV$)比实验上通过测量核多极共振得到的不可压缩系数($K_{\infty} \approx 210 MeV$)明显偏大。因此,在 80 年代初期,提出了新的 Skyrme 参数如 SkM、SGII 以及 SkM*等,主要是

降低了核的不可压缩系数,并且符合基态球形核以及变形核的一些性质。随着同位旋效应的进一步研究,E.Chabanat 等人在 1998 年提出了 SLy 一系列的 Skyrme 参数。 SLy 这几套参数着重于同位素效应的考虑,由符合稳定线上的基态核性质向远离β稳定线的核的基态性质扩展。SkM*以及 SLy7 等几套软势参数已经被反复检验并广泛应用于核结构、核反应以及核天体等各个方面的研究,是比较成功也被经常采用的几套 Skyrme 参数。

与 Skyrme 相互作用的不断更新相比,QMD 模型则基本上一直沿用早期的参数。这使得 QMD 模型在一些方面的运用(譬如对低能熔合反应以及中能重离子多重碎裂的描述)受到很大地限制,很多结果不是非常理想。我们知道在丰中子核的熔合反应中同位旋效应是相当重要的一个因素,而 1998 年新提出的 SLy 这几套参数能够非常成功地描述基态核的同位旋效应(从稳定线上的原子核一直到远离 β 稳定线的丰中子核)。SLy 的成功对于我们调试新的参数有很高的参考价值。另一方面,低能熔合反应中,体系的变形以及颈部的发展是十分重要的。而针对原子核变形(如一些重核的裂变位垒)提出的 SKM*这套参数同样有很高的参考价值。而且这几套参数都是被反复检验并经常采用的 Skyrme 参数,它们对原子核性质的描述都有很大的成功之处。

鉴于 QMD 模型在参数更新方面的迟缓,以及对一些反应描述的困难,我们基于几组新提出并广泛运用的 Skyrme 参数 (例如 SLy7、SKM*),通过符合大量原子核基态性质、熔合反应截面以及中能重离子多重碎裂的质量分布等,调试出适合于ImQMD 模型的一组新的参数,我们称为 IQ1。

与前面列出的几套 Skyrme 参数相比较,我们可以看出 $\mathbf{IQ1}$ 这套参数与新发展 Skyrme 相互作用 SLy 以及 SKM*参数比较接近。表面能系数与常用的 Skyrme 参数相 应的表面能系数(参看表 $\mathbf{2.3}$, g_0 $\mathbf{20}$ \mathbf{MeVfm}^2)也比较接近,这对于原子核表面性质 以及熔合反应截面的成功描述是很重要的。更重要的一点是, $\mathbf{IQ1}$ 这套新调试的软势 参数能够极大地改善中能重离子多重碎裂过程中的中等质量碎块(\mathbf{IMF})的分布以及 重核反应的动力学行为,而且它对近垒熔合反应的描述也是相当好。它的一些新的结果我们在后面详细介绍。

§2.3.2 动量相关项的考虑

由 Skyrme-HF 模型得到同位旋对称并且不考虑库仑相互作用时体系的势能密度 H [25]:

$$H = H_0 + H_3 + H_{surf} + H_{md} + H_{so}$$

$$= \frac{3}{8} t_0 \rho^2 + \frac{1}{16} t_3 \rho^{\sigma+2} + \frac{1}{64} (9t_1 - 5t_2) (\vec{\nabla}\rho)^2 + \frac{1}{16} (3t_1 + 5t_2) \rho \tau - \frac{3}{4} W_0 \rho \vec{\nabla} \cdot \vec{J}$$
(2.3.6)

其中, t_0 项和 t_3 项分别表示两体项和三体项, $(\bar{\nabla}\rho)^2$ 项是表面能项,我们在前面已讨论过它们的重要性, $\rho\tau$ 项是动量相关项(或者称为有效质量项), W_0 项是自旋轨道耦合项。由 Skyrme-HF 模型我们知道,动量相关项对于单粒子能级有重要的影响,而且它强烈地影响着核体系高密度的行为[28],此外从上式我们可以看到动量相关项和表面能项同时与参数 t_1 , t_2 有关,因此参数的选取已经将这两者联系在一起。此外由Fermi 气体模型我们知道,

$$\rho = \frac{2}{3\pi^2} k_F^3 , \quad \tau = \frac{3}{5} k_F^2 [25] . \tag{2.3.7}$$

从而动量相关项对密度有依赖关系:

$$H_{md} \propto \rho^{5/3} \, \circ \tag{2.3.8}$$

从这个表达式我们可以更清楚地看到动量相关项 $H_{md} \propto \rho^{5/3}$ 和三体项 $H_3 \propto \rho^{\sigma+2}$ 对于核物质的高密行为都有很大的影响;动量相关项对系统能量的贡献为

$$E_{md} = \int H_{md} d\vec{r} \propto \langle \rho^{2/3} \rangle . \tag{2.3.9}$$

由 $\langle \rho \rangle^{2/3}$ 我们不难联想到液滴模型中的表面能项 $A^{2/3}$,从而在某种程度上动量相关项和表面能项两者之间存在一定的关系(参数 t_1 , t_2 同时对两者产生影响)。

在 Skyrme 相互作用的研究中,动量相关项的影响是人们非常关注的一个方面 [44][28]。在重离子碰撞研究中人们也已经知道动量相关项对反应动力学过程有很明显的影响,因而有必要进行更加仔细的研究。动量相关项对基态核的动量分布会产生一定的影响(Skyrme-HF 模型发现动量相关性能够对单粒子能级产生明显的影响)。 为了说明这一点我们比较了考虑动量相关项(ρτ 项)和不考虑动量相关项时基态

²⁰⁸Pb 的动量分布,如**图 2.21** 所示。在 ImQMD-I 中,我们在检查基态 ²⁰⁸Pb 的动量分

布时提到过高动量区域的粒 子数偏高这一问题。从图中 可以看出,考虑动量相关项 以后,高动量的粒子数目大 大降低,从而解决了前面提 到的 QMD 模型描写单个核 的基态动量分布的高动量粒 子数偏高的问题。

下面我们再来比较一下 ImQMD-I 以及 ImQMD-II 对改善动量分布的高动量区

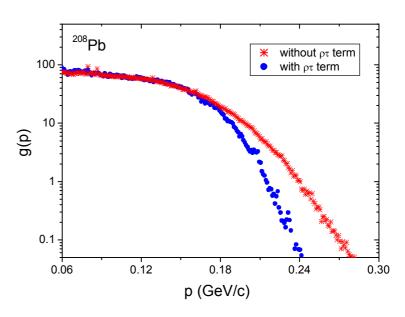


图 2.21 考虑动量相关项(实心圆点)和不考虑动 量相关项(星号)时基态²⁰⁸Pb 的动量分布比较。

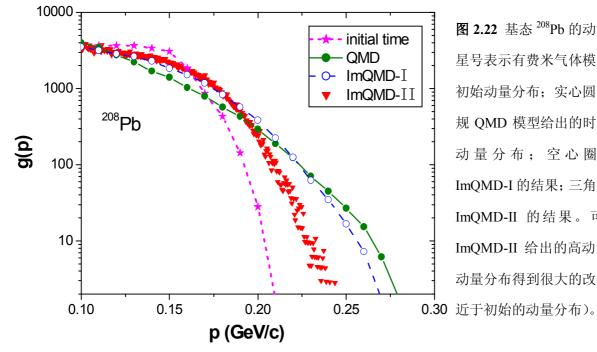


图 2.22 基态 ²⁰⁸Pb 的动量分布。 星号表示有费米气体模型得到的 初始动量分布; 实心圆点表示常 规 QMD 模型给出的时间演化中 动量分布; 空心圈线表示 ImQMD-I 的结果; 三角符号表示 ImQMD-II 的结果。可以看出 ImQMD-II 给出的高动量区域的 动量分布得到很大的改善(更接

域的贡献。图 2.22 给出几种不同的 QMD 模型计算出来的基态 208 Pb 的粒子动量分布 的比较。我们知道,原子核基态动量分布不应该有很大的弥散,而由于 QMD 模型的 过于简化(忽略掉波函数的反对称化效应以及采用经典的正则运动方程),而使得基 态 ²⁰⁸Pb 的动量分布存在弥散,这种高动量的核子导致"虚的粒子"发射,使得原子核不稳定。改进的量子分子动力学模型对这一问题有所改善(主要是通过相空间占有数约束方法改善低动量区域的动量分布),从图中可以看出 ImQMD-I 对 ²⁰⁸Pb 动量分布有所改善,而 ImQMD-II 则使得这个问题有了较大的改善,高动量区域的粒子数明显降低,从而单个核的稳定性有了显著的提高。正是由于体系的动量分布变得更加合理,从而单个核的稳定性有了本质的改变,在后面的结果中我们将会看到,ImQMD-II 模型将基态核的稳定性从原来的不到 400fm/c 提高到了 3000fm/c 以上,提高了将近一个数量级。

下面我们再来看看动量相关项对于中能重离子碰撞的多重碎裂产物分布的影响。 **图 2.23** 给出了 40 Ca + 40 Ca 在 E=35MeV/u 以及 Xe+Sn 在 E=50MeV/u 碰撞时,考虑动量相关项($g_{\tau}=9.5$ MeV)和不考虑动量相关项($g_{\tau}=0.0$ MeV)时计算得到的电荷分布。 从图中可以清楚地看出,没有考虑动量相关项时,计算得到的中轻质量碎块明显偏低,而考虑动量相关项后,多重碎裂的电荷分布明显得到改善,与实验结果符合得相当好。

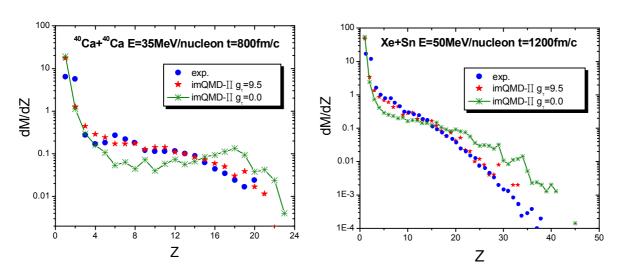


图 2.23 40 Ca+ 40 Ca 在 E=35MeV/u 以及 Xe+Sn 在 E=50MeV/u 碰撞时,考虑动量相关项 ($g_{\tau}=9.5$) 和不考虑动量相关项($g_{\tau}=0.0$)时计算得到碎块的电荷分布。

这主要是因为动量相关项 $H_{md} \propto \rho^{5/3}$ 一方面增加了核子间排斥,而且更重要的一点是,在增加排斥的同时,动量相关项也抑制高动量的粒子数目,从而大大避免了反应中一部分粒子动量过高而很快蒸发掉,而蒸发掉的粒子则带走了体系的能量使得剩余的大块没法继续碎裂,造成单个核子与大块的产额偏高而中等质量块偏少这一问题。

动量相关项的引入使这一问题得到很好的解决,中等质量碎块数目大大增加使之更加符合实验数据。

从上面的分析我们可以看出,动量相关项能够较大地改善核的动量分布(特别是高动量区域的分布),使之更加合理,从而改善原子核的稳定性。这种稳定性在熔合反应中部分地体现在能更好地描写初始核并能使其性质保持得比较好,从而低能熔合反应的熔合截面的计算更加合理。而在中能重离子多重碎裂过程中,动量相关项通过增加核子间排斥并有效抑制高动量粒子数目大大增加中等质量碎块的产额使之更加符合实验数据。因此我们可以看出动量相关项通过改善动量分布使得核反应的很多动力学行为都得到了有效地改善。

§2.3.3 对称能项的进一步完善

近几年来,随着放射性核束(RNB)装置的发展,质子、中子非常不对称的核物质性质的研究以及有限体系的同位旋效应受到人们极大的关注。实验上日益增多的数据给丰中子核物质的状态方程(EOS)提供了一些重要信息。同位旋不对称的核物质的状

态方程可以表示为[45]

$$e(\rho,\delta) = e(\rho,0) + E_{sym}(\rho)\delta^{2}$$
(2.3.10)

其中质子中子不对称度

$$\delta = (\rho_n - \rho_p)/(\rho_n + \rho_p),$$

 $e(\rho,0)$ 表示同位旋对称核物质的每粒子能量。对于核物质对称能 $E_{sym}(\rho)$ 的密度依赖形式有很多种[45][46][47],在QMD模型中我们采用了简单的密度线性依赖关系

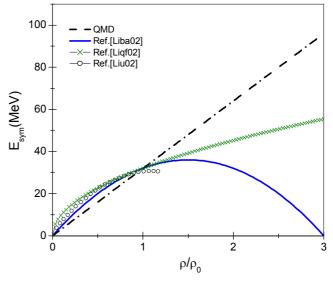


图 2.24 对称能随密度的依赖形式。

 $E_{\text{sym}}(\rho) \propto \rho/\rho_0$ 。**图 2.24** 给出了几种不同的 $E_{\text{sym}}(\rho)$ 随密度的依赖关系。从图中可以

看出,在低密度区域 $\rho \leq \rho_0$,这几种形式的差别不是很明显(特别是在核物质的饱和密度 ρ_0 附近),而在高密度区域 $\rho > \rho_0$,它们有着非常明显的差别。可以看出来它们的 $E_{sym}(\rho)$ 随密度的变化趋势要弱于线性增长。

我们现在从基本的 Skyrme 相互作用出发,给出有限核体系的对称能随密度的依赖关系。前面讲到的 Skyrme-HF 模型将系统的势能密度写为(这而没有考虑库仑相互作用),

$$H = H_0 + H_3 + H_{surf} + H_{md} + H_{so}$$
 (2.3.11)

其中 H_0 是两体项, H_3 是三体项, H_{surf} 是表面项, H_{md} 是动量相关项, H_{so} 是自旋轨道耦合项。为简单起见我们首先来考虑 H_0 , H_3 以及 H_{surf} 这三项对对称能的贡献。这三项的表达式分别写为,

$$H_0 = \frac{1}{4}t_0[(2+x_0)\rho^2 - (2x_0+1)(\rho_p^2 + \rho_n^2)], \qquad (2.3.12)$$

$$H_3 = \frac{1}{24} t_3 \rho^{\sigma} [(2 + x_3) \rho^2 - (2x_3 + 1)(\rho_p^2 + \rho_n^2)], \qquad (2.3.13)$$

$$H_{surf} = \frac{1}{32} [3t_1(2+x_1) - t_2(2+x_2)] (\vec{\nabla}\rho)^2 - \frac{1}{32} [3t_1(2x_1+1) + t_2(2x_2+1)] [(\vec{\nabla}\rho_p)^2 + (\vec{\nabla}\rho_n)^2]$$
(2.3.14)

我们由 $\delta = (\rho_n - \rho_p)/(\rho_n + \rho_p)$ 得到

$$\rho_n = \frac{1+\delta}{2}\rho, \quad \rho_p = \frac{1-\delta}{2}\rho \quad (2.3.15)$$

将它们代入上面几个表达式,则可以将体系的势能密度表达成,

$$H = H(\rho, 0) + H(\rho, \delta)$$
(2.3.16)

其中 $H(\rho,0)$ 表示同位旋对称的核体系的势能密度,

$$H(\rho,0) = A_1 \rho^2 + B_1 \rho^{\sigma+2} + C_1 (\vec{\nabla}\rho)^2$$
(2.3.17)

其中,
$$A_1 = \frac{3}{8}t_0$$
, $B_1 = \frac{1}{16}t_3$, $C_1 = \frac{9t_1 - 5t_2}{64}$ 。

 $H(\rho,\delta)$ 表示同位旋不对称的核体系的势能密度,我们取 $\sigma=1$,则得到,

$$H(\rho,\delta) = A_2 \rho^2 \delta^2 + B_2 \rho^3 \delta^2 + C_2 (\vec{\nabla}\rho)^2 \delta^2 = (A_2 \rho^2 + B_2 \rho^3 + C_2 (\vec{\nabla}\rho)^2) \delta^2$$
 (2.3.18)

其中上式右边第一项便是 QMD 模型中所采用的线性依赖项,第二项是三体相互作用的同位旋依赖性,第三项是类似于液滴模型中的表面对称能项。其中的系数分别写为,

$$A_2 = \frac{t_0}{4} \left(x_0 + \frac{1}{2} \right), \quad B_2 = -\frac{t_3}{24} \left(x_3 + \frac{1}{2} \right), \quad C_2 = -\frac{1}{64} \left(3t_1 (2x_1 + 1) + t_2 (2x_2 + 1) \right).$$

所以有限体系的对称能可以简单地表示成

$$U_{sym} = \int H(\rho, \delta) d\vec{r} \frac{C_s}{2} \sum_{i \neq j} t_i t_j \frac{\rho_{ij}}{\rho_0} \left(1 - \kappa_s f_s + \kappa - \kappa \frac{\rho_{ij}}{\rho_0} \right) . \tag{2.3.19}$$

其中 $f_s = \frac{3}{2\sigma_r^2} - \left(\frac{r_{ij}}{2\sigma_r^2}\right)^2$ 。在文献[45]中三体相互作用的对称能系数取为 $\kappa = 0.5$ 。从液

滴模型以及常用的 Skyrme 参数我们可以简单地估计出表面对称能系数大约为表面能系数的-1/8 -1/10 倍[27][44],因此表面对称能系数可以取为 $\kappa_s \approx 0.08 \, fm^2$ 。从对称

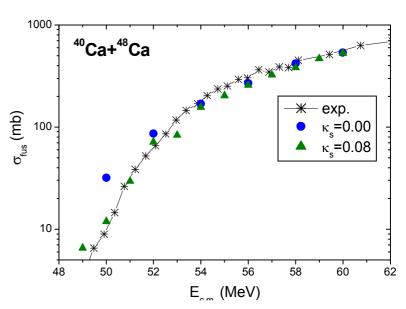


图 2.25 不同表面对称能系数下 ImQMD-II 得到的 $^{40}Ca+^{48}Ca$ 的熔合截面的比较

颈部变形较大而且颈部的中子质子比也会明显增高,这样对于熔合位垒就会产生较大的影响(后面我们还会详细讨论),而常规的 QMD 模型给出的颈部的动力学效应以及同位旋效应过强,从而垒下以及丰中子核熔合截面较实验值偏高。表面对称能项的引入对颈部这种变形较大并且同位旋不对称性较大的情况下更好地描写同位旋效应十分重要,明显地改善了原来模型中的动力学效应以及同位旋效应过强这一现象,从而使得熔合截面的计算结果得到较大地改善。

对称能的三体修正项对高密区的同位旋效应会有一定的影响。鉴于我们现在主要研究的是低能重离子反应,核子密度基本处于饱和密度附近,不少研究表明在该密度区线型依赖关系是比较合适的,所以我们暂时没有考虑对称能的三体修正项的影响 $(\kappa=0.0)$,依然采用同位旋的线性依赖关系。

§2.3.4 ImQMD-II 模型的部分结果

下面我们简单地给出 ImQMD-II 模型(基于 IQ1 这套参数)的一些新的结果。

(1)基态核的稳定性大大改善。图 2.26 分别给出了基态的 ⁹⁰Zr 和 ²⁰⁸Pb 核的每核子结合能以及方均根半径的时间演化。可以看出他们在长达 3000fm/c 的时间内都能足够平稳,没有虚粒子发射。我们知道低能熔合反应持续的时间比较长,这就要求单个核的稳定性一定要好。另外,对于非常重的熔合体系势必涉及到熔合裂变过程,这个过程的时间其他模型预言长达数千个 fm/c 以上,因此模型在足够长的时间内保持稳定是进行这方面研究的前提条件。常规的 QMD 模型对于重体系(如 ²⁰⁸Pb)的平均稳定时间小于 400fm/c。,我们第一次改进的量子分子动力学模型(ImQMD-I)可以将稳定时间提高到 600fm/c 左右; ImQMD-II 可以使得系统稳定时间大于 3000fm/c,使得系统的稳定时间提高了大约一个数量级。这对于进一步研究非常重体系的熔合过程提供了可能。

这里还要注意的一点在求核体系的方均根半径时(严格定义为 $\langle r^2 \rangle^{1/2} = \int r^2 \rho(r) d\bar{r} / \int \rho(r) d\bar{r}$,我们称为积分结果),应该注意到核子波包宽度的影响。 为了节约 CPU 时间我们可以通过核子的坐标加上波包宽度的影响来求方均根半径

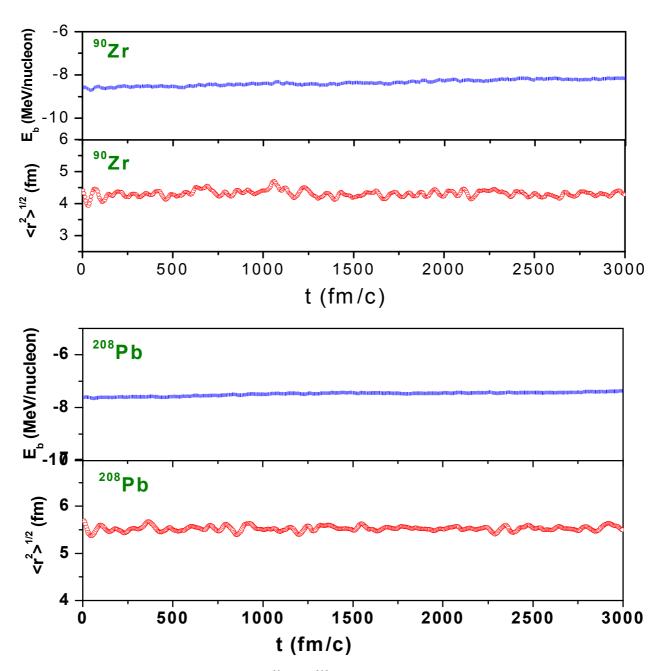


图 2.26 ImQMD-II 模型中基态的 90Zr 和 208Pb 的方均根半径和结合能随时间的演化。

$$\langle r^2 \rangle^{1/2} = \left(\sum_i \left(r_i^2 + c \sigma_i^2 \right) / N \right)^{1/2} (我们称为求和结果)。其中 r_i 为 i 粒子到质心的距离, \sigma_i$$

为 i 粒子的波包宽度,c 为修正因子,通过与积分结果比较来确定 $c\approx 2.75$ 。**表 2.5** 给出了 ImQMD-II 模型计算的 ²⁰⁸Pb、⁹⁰Zr、⁴⁰Ca 以及 ¹⁶O 的方均根半径,并给出方均根的积分结果与求和结果的比较。从表中我们可以看出 ImQMD-II 给出的方均根半径与

实验值非常接近,考虑到模型的简单性这个结果已经是相当不错的。而且我们看出求和方法得到的方均根半径与严格数值积分的结果也非常靠近,误差小于3%。而求和方法的速度要远远高于三维数值积分,因此在方均根半径的实际计算中我们可以用求和方法代替严格的三维数值积分。

	²⁰⁸ Pb	⁹⁰ Zr	⁴⁰ Ca	¹⁶ O
实验值	5.50	4.27	3.49	2.73
积分结果	5.51	4.28	3.45	2.81
求和结果	5.51	4.25	3.44	2.72

表 2.5 ImQMD-II 计算出来的 ²⁰⁸Pb、 ⁹⁰Zr、 ⁴⁰Ca 以及 ¹⁶O 的方均根半径。

(2) 低能以及中能重离子反应结果的改善。我们知道一个模型的成功与否很重要的 一点就是通过多方面的核反应来检验。在近垒重离子核反应研究中 ImOMD-II 计算出 来的核核相互作用势垒以及熔合激发函数都能与其他模型的计算结果以及实验数据 有相当好的符合。这将会在后面的章节中详细介绍。这里主要介绍一下在中高能重离 子碰撞中,ImQMD-II 模型对于碎块分布的巨大改善。常规的 QMD 模型在模拟中高 能重离子碰撞中,计算得到的中等质量碎块总是明显偏少。因此一般的做法是在 QMD 模拟过程后期嫁接统计衰变模型 (SMM),来描述所谓的"次级衰变"过程,不过这 样明显地存在着两个问题,其一,整个动力学过程的统一性和自治性受到影响,其二, SMM 模型接入的时间存在很大的任意性,而这种不确定性对结果的影响是十分剧烈 的。ImQMD-II 在描述多重碎裂的碎块形成方面有着显著的改善。图 2.27 给出了 ImQMD-II 计算出来的一些中能重离子碰撞的碎块分布以及与实验和常规 QMD 的计 算结果的比较。从图中可以看出 ImQMD-II 模型计算出来的中等质量的电荷分布有 了非常大的改善,而且对于 40 Ca 40 Ca 6 C E = 50 MeV / nucleon 的碰撞,ImQMD-II 的计算结果与实验数据符合地相当好。这主 要是因为 ImQMD-II 采用了新的核势 IQ1。另外在 ImQMD-II 中我们引入了动量相关 项 $H_{eff} \propto \rho^{5/3}$,它对于重离子碰撞的动力学有很大的影响,因此在原子核多重碎裂过 程中,它能给出比较合理的动力学行为。

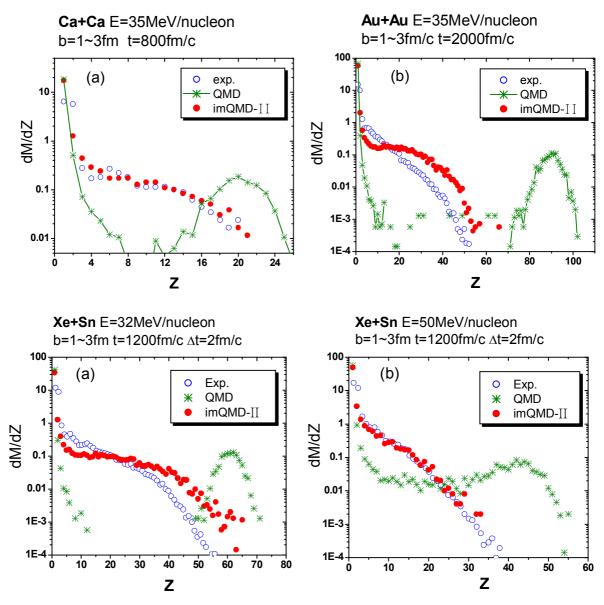


图 2.27 多重碎裂过程中碎块的电荷分布。圆圈表示实验数据; 星号表示常规的 QMD 计算结果; 实心圆点表示 ImQMD-II 的计算结果。

从**图 2.27** 中我们还应该注意到对于 Au+Au[51]在 E=35MeV/nucleon 以及 Xe+Sn[50]在 E=32MeV/nucleon 的碰撞,ImQMD-II 给出的中轻质量碎块依然比实验 值低一些。这主要是由于 ImQMD-II 在计算中为了节约 CPU 时间,对 β 项和 g_{τ} 项中 的作了简单的近似 $\langle \rho^{\gamma} \rangle$ $\langle \rho \rangle^{\gamma}$ 。我们研究了这个近似引入的误差。**图 2. 28** 给出了基态 90 Zr 随时间演化过程中 $\langle \rho^{7/6} \rangle$ 与 $\langle \rho \rangle^{7/6}$ 随时间的演化情况,可以看出在很大程度上,

两者比较接近,因此为了 大大节约 CPU 时间,我 们采用了这一近似。同时 我们也可以看出在密度 涨落较大的地方,两者略 有差别。由于涨落对中能 重离子多重碎裂过程其 相当大的作用,因此这种 近似会对结果有一定的 影响。如何在多重碎裂过 程中更好地考虑涨落效 应也是 ImQMD 模型进 一步改进的一个方面。

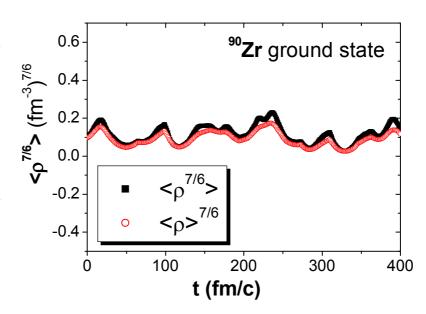


图 2.28 ImQMD-II 中 $\langle \rho^{7/6} \rangle$ 与 $\langle \rho \rangle^{7/6}$ 的时间演化的比较。

总而言之,ImQMD-II 无论对于原子核基态性质的描述,还是重离子核反应的描述都有了相当大地改善,而且很多计算结果都能与实验数据符合得非常好,说明ImQMD-II 模型对于低能以及中能重离子反应的描述在几个主要方面还是相当成功的。

第三章 近垒重离子熔合反应

§3.1 重离子核反应概述[3]

很多因素可以影响重离子核反应的过程,其中最重要的,经常起作用的因素有弹靶体系、入射能量以及碰撞参数。对给定入射能量的离子,碰撞参数决定了入射离子带进体系的相对运动角动量 $L=kb=\sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar^2}}b$ 。式中 E 为体系的相对运动动能, μ 为折合质量。对于重离子核反应,L 大到 30~50 是常有的事。通过重离子核反应,人们常常可以得到处于高自旋态的剩余核,这是重离子核反应的一个重要特点,可以用它来研究原子核的高自旋态的性质。

重离子与靶核作用时,按半经典处理,可用经典粒子碰撞的轨道图像来描述。对于能量超过库仑位垒的入射粒子,所发生反应的种类,主要决定于碰撞参数,或相应

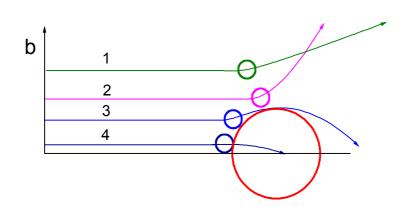


图 3.1 重离子在不同碰撞参数下的发生不同核反应的示意图。

的轨道角动量。相互作用程度随着碰撞参数 b 的由大到小,即轨道角动量 L 的由大到小,重离子与靶核的相互作用也由浅入深。按照相互作用的深浅程度,可以将重离子核反应进行分类(见图 3.1)。

碰撞参数较大时,两核之间不发生核作用,只有库仑相互作用,碰撞的轨道如图 3.1 中的轨道 1 所示,这时只能发生库仑散射(即卢瑟福散射)和库仑激发。用重核作入射粒子,可以把重的靶核激发到高自旋态,以致引起裂变(库仑裂变)。应该指出,即使在研究其他核反应时,相互作用的核也可能先受到库仑激发,因而使其他核反应受到影响。

当碰撞参数大约等于道半径 R(即两核半径之和 R_1+R_2)时,两核间可以发生核

作用,但作用时间很短,两核相切擦边而过,碰撞轨道如**图 3.1** 中的轨道 2 所示。这时两核基本上沿经典轨道运动,在擦边时两核会发生能量、角动量及粒子交换,因此主要的反应是弹性散射,非弹性散射和少数核子迁移反应(准弹性散射)。这些反应都有重离子的特点,但在基本机制方面类似于轻离子引起的直接反应,只有少数自由度受到影响(反应过程中转移了少量能量、质量和电荷)。

当碰撞参数继续减小时,两核相互作用程度加深,相切的时间加长,形成了一个具有一定寿命的双核系统,出现了一种重离子核反应所特有的反应,深度非弹性散射。深度非弹性散射过程中有相当多的核子参与了作用,大部分的相对运动动能转化为两核的内部激发能,伴随着多少不等的核子转移,但两核并未完全熔合在一起,基本上保持了原来的组成,相互作用后很快分开。它的作用轨道如图 3.1 中的轨道 3 所示。

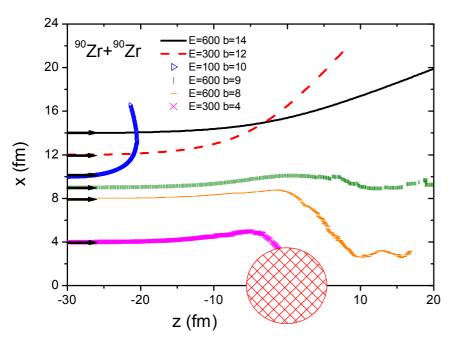


图 3.2 ImQMD-II 对 ⁹⁰Zr+⁹⁰Zr 不同核反应过程的模拟。在不同入射能量不同碰撞参数下弹核的入射轨道是不同的。

当碰撞参数进一步减小时,两核可以熔为一体,相互作用的时间足够长,致使各种自由度最后达到平衡,形成复合核,接着复合核进行衰变。这种反应称为熔合反应。有时在熔合过程中,在达到平衡以前,体系可能发射少数粒子。它的作用轨道如图3.1中的轨道4所示。

图 3.2 给 出 了 ImQMD-II 模型计算的不 同反应类型的弹核的反应

轨道。图中的能量表示质心系下体系的相互作用运动动能,单位为 MeV。从图中可以看出,当碰撞参数由大到小逐渐变化时,核力作用的程度也越来越大,核反应的类型由弹性散射、准弹性散射、深度非弹性散射逐渐向熔合反应过渡。

§3.2 核核相互作用势的理论计算

严格地讲,用两核质心距离为变量的位能函数只适用于两核密度无重叠、或仅有少量重叠的情况。弹性散射就发生在这一区域内,这种相互作用也只在这一区域内有物理意义。核-核相互作用势 $V_c(R)$ 包括人们比较熟悉的库仑相互作用势 $V_c(R)$ 以及人们不是非常熟悉的核相互作用势 $V_{N}(R)$ 。

库仑相互作用在低能重离子反应中可以起很大的作用,这是人们所熟知的。当两个核相互接近时,由于库仑场的作用,两核会发生电荷极化。如果不考虑这种极化效应,则在两核密度未发生重叠时($R > R_b$),

$$V_c(R) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{R} \, . \tag{3.2.1}$$

当密度重叠很少时,仍可采用这个公式,对于密度重叠更大的情况,则要根据重叠的电荷分布计算库仑能。作为一种粗糙的估计,可设一个较小一点的核(半径为 R_b)为点电荷,则当 $R < R_b$ 时,库仑相互作用写为,

$$V_c(R) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{R_b} \left(\frac{3}{2} - \frac{1}{2} \frac{R^2}{R_b^2} \right)$$
 (3.2.2)

这个公式比严格按照重叠密度计算的,误差不大于25%[3]。

核相互作用势比较复杂,实验上通过精确测量熔合反应以及准弹性散射的激发函数来提取位垒分布,再由位垒分布来获取核相互作用势知识。理论上人们通过各种模型来计算核相互作用势,常用的有折叠势、接近势以及半微观势等。这里我们首先简单介绍一下接近势,然后详细介绍改进的量子分子动力学模型对核核相互作用势的计算,并且与比较常用的接近势相比较。最后我们再介绍熔合反应中的静态位垒与动态位垒,以及影响动态位垒的一些因素。

§3.2.1 接近势(Proximity Potential)

人们所关心的是在离子间密度很少重叠时的相互作用,由于核力是短程力,因此这种作用是表面间的相互作用,即所谓接近势。在双折叠势法求核相互作用势中,令

$$e(x, y, R) = \iint \rho_1(x, y, z) \nu(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) \rho_2(|\vec{r}_2 - \vec{r}_{2c}|) d\vec{r}_2 dz , \qquad (3.2.3)$$

则核相互作用势可以表示为,

$$V_N(R) = \int e(x, y, R) dx dy = 2\pi \int e(\eta R) \eta d\eta$$
 (3.2.4)

其中 $\eta^2 = x^2 + y^2$ 。

现在对上式作近似。设 S_0 为两核间的最小距离,S(x,y)是两核表面上坐标为(x,y)的

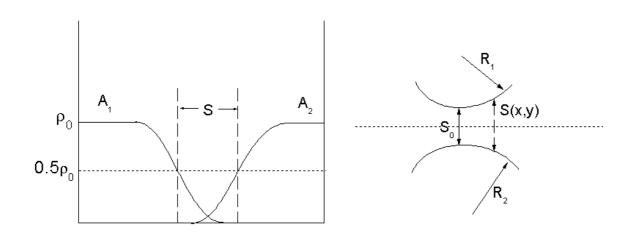


图 3.3 接近法求相互作用势示意图

两点间的距离,如图 3.3 所示,则有:

$$S(x,y) = S_0 + \left(R_1 - \sqrt{R_1^2 - \eta^2}\right) + \left(R_2 - \sqrt{R_2^2 - \eta^2}\right)$$

$$\approx S_0 + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2}\right) \eta^2$$
(3.2.5)

$$dS = \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2}\right) \eta d\eta = \frac{R_1 R_2}{R_1 + R_2} \eta d\eta$$
 (3.2.6)

将 $e(\eta,r)$ 变换成 $e(S,S_0)$,则核相互作用势写为,

$$V_N(R) = 2\pi \frac{R_1 R_2}{R_1 + R_2} \int e(S, S_0) dS$$
 (3.2.7)

设 R_{12} 为两核的半径之和 $R_{12} = R_1 + R_2$,则两核质心距离 $R = S_0 + R_{12}$ 。 $e(S, S_0)$ 需要有具体模型计算。如果能找到能量密度的密度泛函 $H(\rho)$,则有:

$$e(S, S_0) = \int (H(\rho_1 + \rho_2) - H(\rho_1) - H(\rho_2)) dz$$
(3.2.8)

如果选用 Thomas-Fermi 模型给出的密度泛函和 Seyler-Blanchard 唯象核势,则可得到:

$$V_{N}(S_{0}) = 4\pi\gamma \frac{R_{1}R_{2}}{R_{1} + R_{2}} b\Phi\left(\frac{S_{0}}{b}\right)$$
(3.2.9)

其中b为表面厚度通常取b=1fm。

在文献[52]中核电荷半径取为
$$r_i = R_{00} \left(1 - \frac{7}{2} \frac{b^2}{R_{00}^2} - \frac{49}{8} \frac{b^4}{R_{00}^4} + \cdots \right), \quad i = 1, 2$$

其中
$$R_{00}$$
 来自文献[53] $R_{00} = \sqrt{5/3} \langle r^2 \rangle^{1/2} = 1.24 A^{1/3} \left(1 + \frac{1.646}{A} - 0.191 \frac{A - 2Z}{A} \right) fm$ 。

由液滴模型知道核物质半径为 $R_i = r_i + (N/A)t_i$,中子皮为 $t = \frac{3}{2}r_0 \frac{C_s I - 1/12 \kappa Z A^{-1/3}}{Q + 9/4 C_s A^{-1/3}}$,

其中的参数分别为,核半径系数 r_0 = 1.14 fm ; 对称能系数 C_s = 32.65MeV ; 质子中子不对称度 I=(N-A)/A ; $\kappa=(3/5)(e^2/r_0)=0.757895MeV$; Q=35.4MeV 。核液滴的

表面张力系数可以由表面能系数得到 $\gamma = \frac{a_s}{4\pi r_0^2}$,表面能系数

$$a_s = 18.36 MeV - Q(t_1^2 + t_2^2)/2r_0^2$$
(3.2.10)

$$\Phi(\zeta) = \begin{cases}
-0.1353 + \sum_{n=0}^{5} \frac{c_n}{n+1} (2.5 - \zeta)^{n+1} & (0 < \zeta < 2.5) \\
-0.09551 \exp\left(\frac{2.75 - \zeta}{0.7176}\right) & (\zeta > 2.5)
\end{cases}$$
(3.2.11)

其中 $\zeta = S_0/b$, $c_0 = -0.1886$, $c_1 = -0.2628$, $c_2 = -0.15216$, $c_3 = -0.04562$,

 $c_4 = -0.069136$, $c_5 = -0.011454$ \circ

基于这些参数,接近势能够较好地给出一系列反应的熔合位垒高度 [52]。图 3.4 给出了接近势计算出来的一系列反应的熔合位垒与实验结果的比较[52]。其中方块表示轻体系的重离子反应;圆圈表示中等质量的反应;三角代表重体系的反应;星号表示从一些最新的实验测量中提取出来的平均的位垒高度。纵坐标给出实验值与接近势的计算值的

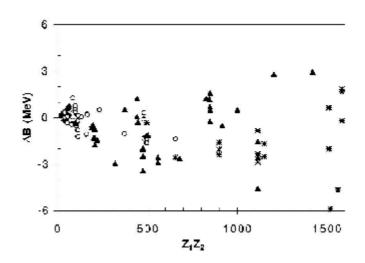


图 3.4 接近势计算出来的一系列反应的熔合位垒与实验结果的比较[52].

§3.2.2 半微观势(SMP)

半微观势是依赖于微观的核子密度和半经典的 ETF (Extended Thomas-Fermi) 方法以及能量密度来计算核核相互作用势[54]。核核相互作用势表示为

$$V(R) = E_{tot}(R) - E_1 - E_2, (3.2.12)$$

其中 E_{tot} 表示相互作用的整个体系的能量, E_1, E_2 分别表示非相互作用的弹核与靶核的能量。基于 Skyrme 相互作用势得到的核体系的能量密度 $H(\bar{r})$, E_{tot}, E_1, E_2 三者分别表示为,

$$E_{tot} = \int H \left[\rho_1(\vec{r}) + \rho_2(\vec{r}) \right] d\vec{r} \tag{3.2.13}$$

$$E_1 = \int H\left[\rho_1(\vec{r})\right] d\vec{r} \tag{3.2.14}$$

$$E_2 = \int H[\rho_2(\vec{r})] d\vec{r} \tag{3.2.15}$$

所以核核相互作用势可以由能量密度泛函来表示

$$V(R) = e(S, S_0) = \int (H(\rho_1 + \rho_2) - H(\rho_1) - H(\rho_2)) d\bar{r}$$
(3.2.16)

其中能量密度 $H(\bar{r})$ 可以表示为

$$H(\vec{r}) = \frac{\hbar^2}{2m} \tau(\vec{r}) + H_{sky}(\vec{r}) + H_{coul}(\vec{r}) . \tag{3.2.17}$$

上式右边第一项为动能项,第二项为 Skyrme 相互作用势能项,第三项为库仑项,各项的具体形式可以参见 Skyrme-HF 方法。对于动能项,由费米气体模型有

$$\langle \rho \rangle = \frac{2}{3\pi^2} k_F^3 \,, \tag{3.2.18}$$

其中, $\langle \rho \rangle$ 和 k_F 分别为体系的平均密度和费米动量。因此动能项可以简单地由平均密度来表示。

根据半微观势的思想,利用量子分子动力学模型可以计算核相互作用势。在 QMD 模型中,体系的能量包括动能、Skyrme 相互作用势能以及库仑能,

$$E = E_k + U = \sum_{i} \frac{p_i^2}{2m} + \int H_{sky}(\vec{r}) d\vec{r} + U_{coul} \circ$$
 (3.2.19)

借鉴半微观势对体系动能的处理思想,我们在 QMD 计算中,简单地将每粒子动能表示为密度的函数(其中 T_F 为体系的费米动能):

$$\overline{E}_{k} = \frac{3}{5} T_{F} = \frac{3}{5} \frac{\hbar^{2} k_{F}^{2}}{2m} = c_{k} \langle \rho \rangle^{2/3}$$
(3.2.20)

其中 c_k 3.7 $MeVfm^2$ 。这样就可以基于体系的核子密度来半微观地计算核核相互作用势。为了对动能这一近似进行检验,我们比较了基态 90 Zr 的时间演化中的每粒子动能 \bar{E}_k 和 $c_k\langle\rho\rangle^{2/3}$,如图 3.5 所示。通过比较可以看出,低温下体系的动能基本上可以由 $c_k\langle\rho\rangle^{2/3}$ 来描述。

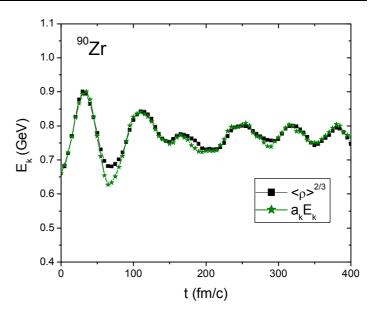


图 3.5 基态 90 Zr 的时间演化中的动能 E_k 和 $\langle \rho \rangle^{2/3}$.

我们运用改进的量子分子 动力学模型(ImQMD-II)计算了 ⁴⁰Ca+⁴⁸Ca、⁴⁰Ca+⁹⁰Zr、¹⁶O+¹⁶O 以及 ¹⁶O+²⁰⁸Pb 反应

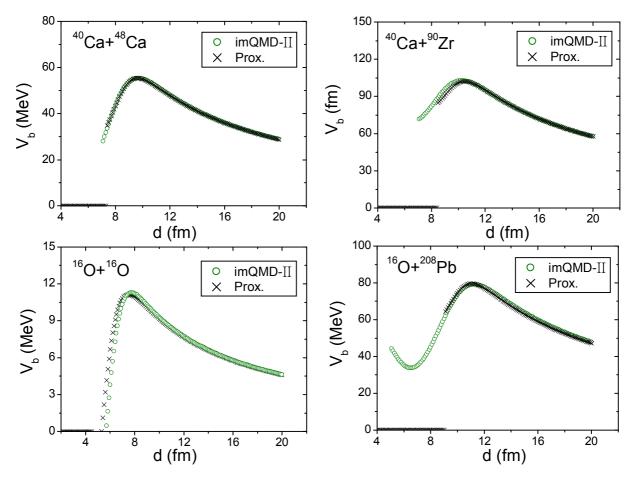


图 3.6 ImQMD-II 模型以及接近势计算出来的一系列反应的熔合位垒。

的核核相互作用势(也称为熔合位垒),并且与比较成功的接近势进行了比较,如**图** 3.6 所示。从图中我们可以发现,用 ImQMD-II 计算出来的核核相互作用势(圆圈表示)与接近势(叉线表示)计算结果非常接近,由此可见 ImQMD-II 模型对于一般的熔合反应系统的熔合位垒的描述还是比较成功。另外我们还研究了弹靶质量不对称性对熔合位垒的影响。我们计算了 ¹³¹I+¹³¹I、⁵⁴Cr+²⁰⁸Pb、³²S+²³⁰Th 以及 ¹²C+²⁵⁰Fm 四个体系的熔合位垒(它们熔合所形成的复合核都是 ²⁶²Sg),如**图** 3.7 所示。

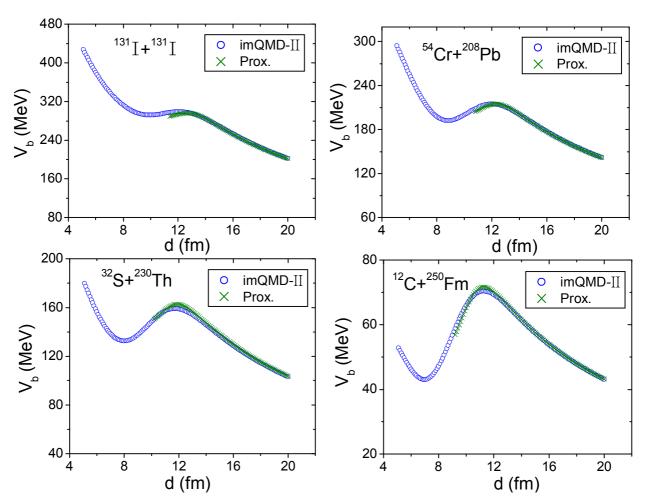


图 3.7 ImQMD-II 模型以及接近势计算出来的重核反应的熔合位垒。四个熔合体系能形成相同的复合核 ²⁶²Sg, 但是它们的弹靶质量不对称性不同。

从图中一方面可以看出,在两核密度重叠不是很大时,我们改进的 ImQMD-II 模型计算出来的熔合位垒与接近势的结果势非常接近,从而进一步验证了 ImQMD-II 模型的可靠性;在两核重叠较大时,接近势难以给出精确的结果,而由于量子分子动力学模型是基于微观的核子密度进行位垒计算,所以它能够提供更多的两核更靠近时 的位垒信息。另一方面,通过比较 ¹³¹I+¹³¹I、⁵⁴Cr+²⁰⁸Pb、³²S+²³⁰Th 以及 ¹²C+²⁵⁰Fm 这 四个体系的熔合位垒,可以清楚地看到,随着弹靶质量不对称性的增加,熔合位垒的高度逐渐降低,并且位垒里面的势谷更深,这个点暗示了质量不对称性越高,弹核越容易被俘获,(这里忽略了反应体系的 Q 值对熔合的影响),这与其他模型以及实验测量得到的熔合位垒随弹靶质量不对称性的变化趋势是一致的。

§3.2.3 静态位垒与动态位垒

在上面介绍的接近势和半微观势的方法中,都用到了两核的密度分布,那里隐含了一个假设,核的密度分布在碰撞中和碰撞前是完全相同,这种假设叫突然近似(Sudden Approx.)或冻结近似,即认为两核在碰撞过程中相互作用时间很短,不会引起核内核子轨道运动的显著变化。其实这个条件是很难满足的,但是由于核力是短程力,核子所受核内平均场的作用比受另一个核的核力作用要大得多,而库仑场又是一个变化缓慢的场,因此当两个核密度重叠很少时,可以认为两核的密度与碰撞前基本相同。这种以两核质心距离来表示的相互作用势,仅仅适合于两核密度重叠很少的情况。

如果要把作用势用到两核密度重叠比较大的情况,就一定要考虑核的密度分布受到另一个核的影响。如果这时两核的相对运动速度已经很慢,有相当长的碰撞时间(这些条件在低能重离子碰撞中常常能得到满足),则可采用绝热近似(Adiabatic Approx.)。所谓绝热近似是指在给定的两核质心的情况下,两核的密度都将调整到能量的最低点。如用能量密度泛函来表示这种相互作用势,则这两种近似的差别就很清楚。把坐标原点取在第一个核的质心,令 \bar{R} 为表示核质心的径矢, $H(\rho)$ 为能量密度和密度 ρ 的泛函,则

$$V_{N}(\vec{R}) = \int \{H \left[\rho(\vec{R})\right] - H \left[\rho_{1}(\vec{r})\right] - H \left[\rho_{2}(|\vec{r} - \vec{R}|)\right]\} d\vec{r}$$
(3.2.21)

对于突然近似,相互作用记为 V_{NS}

$$H(\rho, R) = H(\rho_1 + \rho_2)$$
 (3.2.22)

对于绝热近似,则应在保持 R 不变的条件下,用变分法求 ρ ,使 $V_N(R)$ 取极小,得 V_{NA} ,

显然有 $V_{NA} < V_{NS} \circ V_{NA}$ 为相互作用势的极小值,而 V_{NS} 差不多是最大的相互作用势。当然要固定 R,也需要两个核能保持各自的独立性,密度重叠仍然不能太大。图 3.8 给出了上述突然近似和绝热近似两种近似下的54Cr+208Pb 相互作用势的示意图。从图中可以看到,在库仑位全以外,两种位势基本相同,过了库仑位全,差

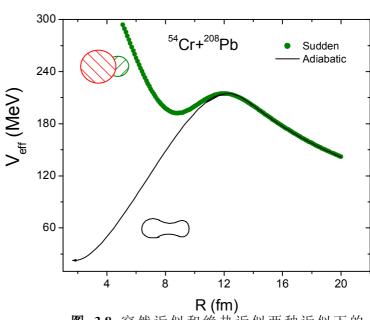


图 3.8 突然近似和绝热近似两种近似下的 54Cr+208Pb 相互作用势的示意图。

别就逐渐扩大。真正的核核相互作用势是接近于绝热近似还是接近于突然近似是人们经常争论的问题,所以怎样更精确地描述两核比较靠近时的相互作用势一直是核物理工作者非常关注的话题。

在量子分子动力学模型中,我们可以通过两种方法计算核核相互作用势,一种方法是对核密度采用突然近似(采用初始核的密度)来计算核核相互作用势,我们称为**静态位垒**(Static Barrier);另一种方法是在模拟核反应过程中,通过平均场作用下核的随时间动态演化的密度分布来计算核核相互作用势,我们称为**动态位垒**(Dynamical Barrier)。我们知道,在核反应过程中,核的动力学效应是非常重要的,特别是对于非常重的反应体系。因此运用量子分子动力学模型研究近垒核反应的动力学位垒,可以给人们提供反应过程中更多的动力学信息。

另一方面,我们知道通过实验测量得到的核反应截面的激发函数可以提取出位垒分布,也就是说实验上得到的核核相互作用势的位垒高度不是某一个唯一的值,而是具有一定的分布宽度。而通过 ImQMD 模型进行近垒核反应的动力学模拟(通过大

量的反应事件),同样可以得到位垒的分布,这样就可以对反应的动力学机制有所了解,而且在一定程度上可以和实验结果进行比较,相互验证。**图 3.9** 我们给出了 ⁴⁰Ca+⁹⁰Zr 在近垒对心碰撞下的静态位垒和动态位垒的比较。其中实心圆点表示由初始核的密度做突然近似(冻结密度)计算得到的熔合位垒,叉线表示在熔合反应的动力学模拟中(30个事件),由时间演化的动态密度计算出来的熔合位垒。可以看出在

两核相距很远时,两者的 结果比较一致,而当两核 靠近时,由于核子核子相 互作用,核的密度要发生 动力学改变,从而相应的 熔合位垒也要发生相应的 改变(不同的反应事件得 到的动态位垒不同)。通过 对大量反应事件中不同的 位垒高度做统计,就可以 得到熔合位垒的分布。

通过 ImQMD-II 模型 对一些熔合体系的动态位

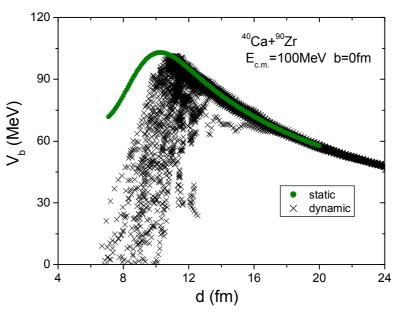


图 3.9 ⁴⁰Ca+⁹⁰Zr 在近垒对心碰撞下的静态位垒和动态位垒的比较。

全分布进行研究,我们发现熔合过程中的动态位垒与体系的入射能量、碰撞参数、体系的中子质子比(N/Z比)以及体系的结构有着密切的关系。这主要是因为核相互作用势垒与两核接触时体系的变形以及颈部的 N/Z 比有直接的联系。当入射能量较高或者碰撞参数较小或者入射道核体系的结构比较硬时,熔合过程中体系的变形(特别是体系拉长变为长椭球)不是非常明显,这时相互作用位垒不会明显降低。而如果入射能量较低或者碰撞参数较大(在熔合范围之内)或者参加反应的核比较软,则熔合过程中,体系相互作用时间比较长因而有较长的时间来调整核子分布或者核比较软时形状容易改变,体系通常变形拉长为长椭球以克服库仑位垒,这样熔合过程中的动态位垒就会产生明显降低,从而导致垒下熔合截面增强。

§3.3 熔合截面的理论计算

§3.3.1 一维 WKB 方法

核核有效相互作用势可以表示为核相互作用势、库仑相互作用势以及离心势的叠加。

$$V_{eff}(R) = V_N(R) + V_C(R) + \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{L(L+1)}{r^2}$$
(3.3.1)

可以看出在对心碰撞时(L=0),离心势不起作用,而如果碰撞的角动量比较大时,它就会增加势垒的高度并且垒高的位置也会有微小的改变,见**图 3.10**。

当入射能量接近或低于势垒时,熔合反应的几率可以当作势垒穿透来处理。穿透几率对于势垒高度 B 以及势垒的形状十分灵敏。在经典力学下,如果入射能量低于位垒高度,则穿透几率为 0,而当入射能量高于位垒时,穿透几率为 1。从而两个核在低能入射时会散开,而入射能量较高时,则会克服库仑位垒而掉入吸引势中最后形成复合核。Weisskipf[55]在 1937 年导出了当入射能量远远大于库仑位垒时熔合截面的表达式

$$\sigma_{fus}(E) = \pi R_b^2 \left(1 - \frac{B_0}{E} \right), \qquad E >> B_0$$
 (3.3.2)

其中 R_b 是位垒所在的位置,也就是在 R_b 处 $B_0 = V(R_b)$ 。

而在量子力学下,即使入射能量低于库仑位垒,也有一部分粒子穿过位垒形成熔合,也就是说,穿透几率不为 0,如**图 3.10** 所示。而即使入射能量高于库仑位垒,也由于一部分粒子散射,其穿透几率不完全等于 1。

当一个自由粒子穿过一个宽的位垒时,WKB 近似[56]基本上能够给出粒子从 r_1 到 r_2 两点的穿透几率T。

$$T = \exp\left(-2\int_{r_1}^{r_2} \sqrt{(2m/\hbar^2)(V(R) - E)} \, dR\right)$$
 (3.3.3)

熔合截面表示为

$$\sigma_{fis}(E) = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0} (2l+1) T_l(E)$$

(3.3.4)

其中 $k^2 = 2\mu E/\hbar^2$, μ 和 $T_l(E)$ 分别是系统的约化 质量和 l-分波的穿透几率(熔合几率)。在计算熔合截面的过程中,

- C.Y.Wong[57]引入了下 面的近似:
- (1)在位垒顶点处,可以将位垒的形状以一个 倒置的抛物线来近似(在

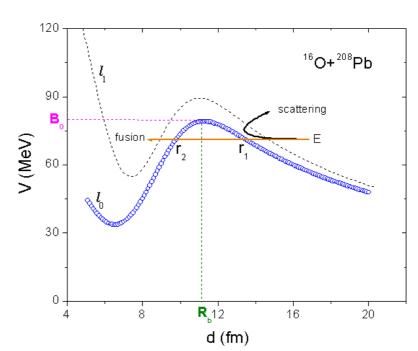


图 3.10 $^{16}\text{O}+^{208}\text{Pb}$ 的核核有效相互作用。其中轨道角动量 $l_1>l_0$ 。

 R_b 点的泰勒展开)。

$$V_l(R) \approx B - \frac{\mu \omega_l^2}{2} (R - R_l)^2 + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu R^2},$$
 (3.3.5)

其中 ω_l , R_l 分别表示 l-分波的位垒曲率以及位垒所在的位置, $\omega_l^2 = -\frac{1}{\mu} \frac{d^2 V}{dR^2}\Big|_{R=R}$.

(2) 由 Hill-Wheeler[58]公式给出相应的穿透几率,

$$T_l(E) = \left[1 + \exp\left(\frac{2\pi(B_l - E)}{\hbar\omega_l}\right)\right]^{-1},\tag{3.3.6}$$

其中, $B_{I} = V_{I}(R_{I})$ 。

(3) 作者分析了形状为扩散边势阱的势后认为可做进一步近似,

$$\hbar\omega_l \approx \hbar\omega_0, B_l \approx B_0 + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu R_b}$$
(3.3.7)

将 T_l, ω_l, B_l 代入 $\sigma_{fus}(E)$ 中,并将求和转化为积分,则有,

$$\sigma_{fus}(E) = \frac{R_b^2 \hbar \omega_0}{2E} \ln \left[1 + \exp\left(\frac{2\pi}{\hbar \omega_0} (E - B_0)\right) \right]. \tag{3.3.8}$$

如果
$$E >> B_0$$
, 便得到经典的熔合截面 $\sigma_{fus}(E) = \pi R_b^2 \left(1 - \frac{B_0}{E} \right)$ 。 (3.3.9)

其中 R_b, ω_0, B_0 都是参数,

$$R_b = 1.36(A_1^{1/3} + A_2^{1/3}) + \Delta R$$
 [59], $\Delta R = 0.0 \sim 1.0 \, fm$ (3.3.10)

$$B_0 \approx \frac{1.44Z_1Z_2}{R_b} \left(1 - \frac{a}{R_b}\right)$$
 [60]

$$\omega_0^2 = -\frac{1}{\mu} \frac{d^2 V}{dR^2} \bigg|_{R=R_0} = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{\mu R_b^2} \left(\frac{1}{a} - \frac{2}{R_b} \right) [60]$$
(3.3.12)

其中, a 为表面弥散系数, $a \approx 0.65$ 。

图 3.11 给出了一维 WKB 方法计算的 ⁴⁰Ca+⁴⁸Ca[61]、⁴⁰Ca+⁹⁰Zr[62]、⁵⁸Ni+⁵⁸Ni[63]

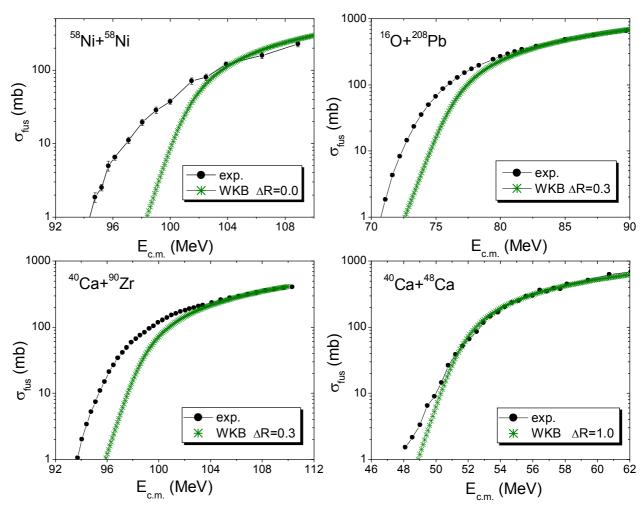


图 3.11 一维 WKB 方法计算出来的 ⁴⁰Ca+⁴⁸Ca、⁴⁰Ca+⁹⁰Zr、⁵⁸Ni+⁵⁸Ni 以及 ¹⁶O+²⁰⁸Pb 四个熔合体系的激发函数(空心圆圈)。其中实心圆点表示实验数据。

以及 $^{16}O+^{208}Pb[64]$ 四个熔合体系的激发函数,可以看出在垒上部分,一维 WKB 的计算结果基本上能与实验数据相符合。但是垒下部分则比实验数据低 $1\sim2$ 个数量级,而且势垒的参数(如 R_b)对 WKB 结果影响相当大,这对于熔合截面的理论预言造成很大的不确定性。尽管如此,由于一维 WKB 方法的简单性,它对于垒上熔合截面的初步估计还是有一定的用处,而且它也是多维位垒穿透方法的基础。

§3.3.2 改进的量子分子动力学模拟

由反应截面的定义可以知道它表示一个入射粒子同单位面积靶上一个靶核发生反应的概率,如**图 3.12** 所示。如果得到一定的入射能量和碰撞参数下的熔合几率 g(E,b),则熔合截面可以写为,

$$\sigma_{fus}(E) = 2\pi \int_0^{b_{\text{max}}} g(E, b)bdb \, o \tag{3.3.13}$$

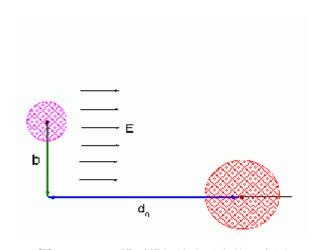


图 3.12 QMD 模型模拟熔合反应的示意图。

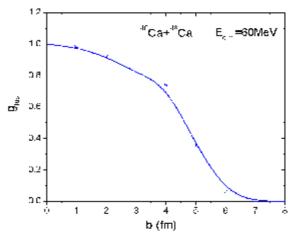


图 3.13 熔合几率随着碰撞参数的变化。

如果 g(E,b)=1,便得到经典的几何截面 $\sigma_{fus}(E)=\pi b_{max}^2=\pi R_b^2$ 。而真实的情况 g(E,b) 与入射能量与碰撞参数紧密相关。在一定入射能量下, g(E,b) 随着碰撞参数的增大 而减小,如**图 3.13** 所示。这是因为随着碰撞参数的增大,核力的作用程度逐渐减小,反应类型从熔合反应向弹性散射逐渐转变。随着能量的降低,入射粒子穿透位垒的几率迅速降低,相应的熔合几率也迅速下降。**图 3.14** 给出了 40 Ca+ 48 Ca 熔合反应中,在

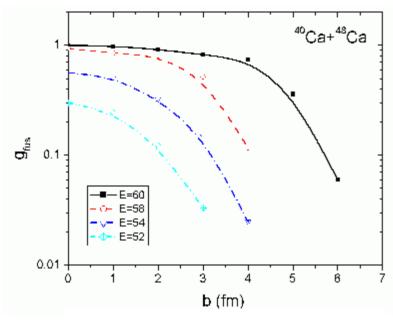


图 3.14 给出了 ⁴⁰Ca+⁴⁸Ca 熔合反应中,在四个不同入射能量下的熔合几率随碰撞参数的变化。

 $E_{c.m.}$ = 60,58,54,52MeV 四个能量点的熔合几率随碰撞参数的变化。从图中可以看出,随着入射能量的逐渐降低,熔合几率迅速下降,并且发生熔合的最大碰撞参数 b_{max} 也随着入射能量的降低而减小,垒下熔合事件主要发生在中心碰撞区(b 较小)。

运用量子分子动力学模型计算熔合截面,主要就是通过大量的模拟事件来统计出

一定入射能量下,熔合几率g(E,b)随碰撞参数的关系,然后运用公式(3.3.13)对熔合几率g(E,b)积分得到熔合截面。其主要步骤有:

- (1) 初始核的抽样。对于给定的弹核与靶核,运用蒙特卡洛随机抽样方法抽样出核 子的坐标和动量(详细过程参见前面讲到的量子分子动力学模型)。
- (2) 设置入射能量 E_0 , 碰撞 参数 b 以及入射方向 的初始距离 d_0 (见图 3.12)。我们假设在无穷 远处(没有相互作用 时)两个核处于基态,到达初始距离 $R_0 = \sqrt{d_0^2 + b^2}$ 时,两核

仍处于基态,则核反应

的入射能量应为(见图

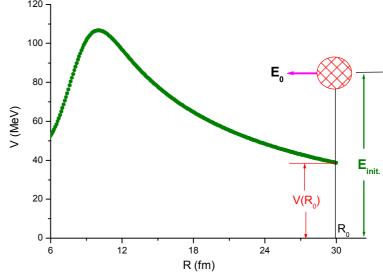


图 3.15 ImQMD-II 模拟熔合反应的入射能量设定。其中圈线表示弹靶相互作用势。

3.15) $E_{init} = E_0 + V_{Coul}(R_0)$ •

- (3) 反应事件的模拟。由量子分子动力学模型演化反应体系(每个核子的坐标和动量在自身形成的平均场中自洽演化)。计算并记录两核之间的距离、相互作用势以及其他一些感兴趣的物理量以及它们的时间演化。
- (4) 熔合的判定。在时间依赖的 Hartree-Fock(TDHF)计算中,如果两个独立的核能够克服库仑位垒熔为一体(两核距离 $d < 3 \, fm$),并且复合核在旋转一到几圈或者沿直径震荡几个来回的过程中,熔为一起的单体密度一直能够维持,则认为这样的事件是熔合事件,在我们的计算中也采用这一思想(适用于复合核不是非常重,以蒸发粒子为主的熔合反应)。实验上对这一类熔合反应的熔合截面测量(如 ⁴⁰Ca+^{90,96}Zr),主要以蒸发残余核的形成截面定义为熔合截面[62]。对于复合核较重的熔合反应,要涉及到熔合裂变过程(持续时间比较长,所以需要运行的 CPU 时间以及模型的稳定时间都相当长),目前用 ImQMD-II 模型来模拟还正处于准备阶段。

实验上对熔合激发函数的测量中,为了节约时间,通常是由高能向低能方向逐点测量 [62]。在我们的计算中同样由高能向低能逐点计算,考虑到能量越低,熔合几率越小, 为了提高统计精度,计算中则随着能量的逐步降低,模拟事件数逐渐增多。

下面给出我们最新改进的量子分子动力学模型(ImQMD-II)计算出来的 40,48 Ca+ 48 Ca[61]、 40 Ca+ 90,96 Zr[62]、 32,34 S+ 89 Y[65]、 28 Si、 35 Cl+ 92 Zr[66]以及 40 Ca+ 48 Ti[82]、 46 Ti+ 46 Ti[83]十个熔合体系的激发函数,并与实验数据进行比较,(如**图 3.16~图 3.20)**。

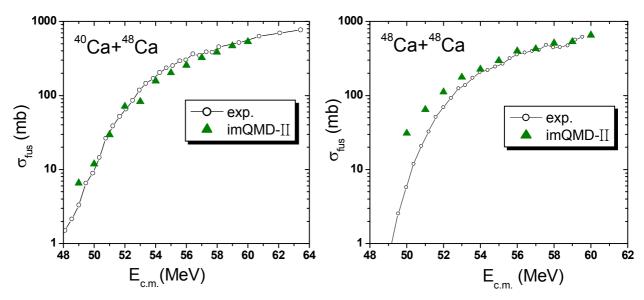


图 3.16 ImQMD-II 计算出来的 40,48 Ca+ 48 Ca 熔合激发函数(三角符号表示)与实验数据(圈 线表示)的比较。

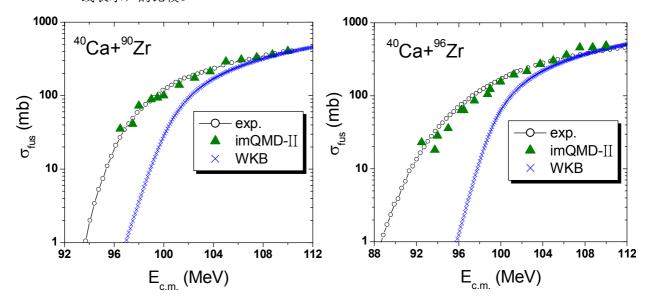


图 3.17 ImQMD-II 计算出来的 ⁴⁰Ca+^{90,96}Zr 熔合激发函数与实验数据的比较。圆圈表示实验结果,三角符号代表 ImQMD-II 计算结果,叉线表示一维 WKB 方法计算结果。

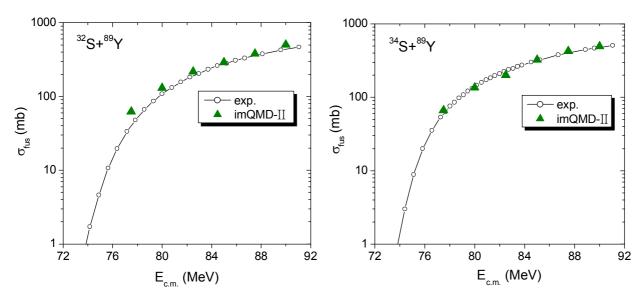


图 3.18 ImQMD-II 计算出来的 32,34 S+ 89 Y 熔合激发函数(三角符号表示)与实验数据(圈 线表示)的比较。

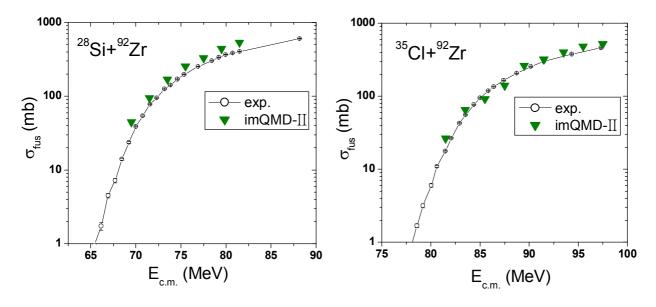


图 3.19 ImQMD-II 计算出来的 28 Si, 35 Cl+ 92 Zr 熔合激发函数(三角符号表示)与实验数据(圈线表示)的比较。

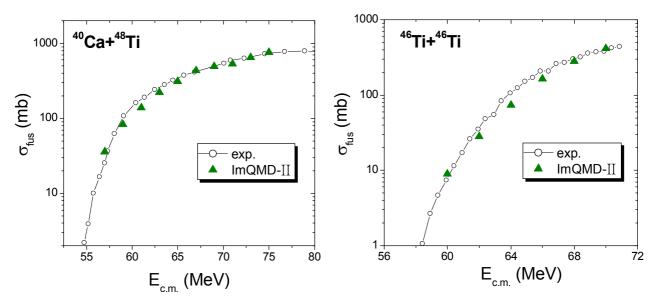


图 3.20 ImQMD-II 计算出来的 ⁴⁰Ca+⁴⁸Ti 以及 ⁴⁶Ti+⁴⁶Ti 的熔合激发函数(三角符号表示) 与实验数据(圈线表示)的比较。

通过比较我们可以看出,

改进的量子分子动力学模 型 (ImQMD-II) 计算得到 的熔合反应的激发函数, 基本上都能相当好地符合 实验数据。在这十个反应 体系中我们所采用的参数 是完全相同的,没有任何 额外的可调参数, 再考虑 到模型的简单性,这个结 果是令人非常满意的。

而且我们还能看到,对 于丰中子熔合体系 ⁴⁰Ca+⁹⁶Zr 以及 ³⁴S+⁸⁹Y, 在 没有加入任何新的参数的 情况下,ImQMD-II 也能给

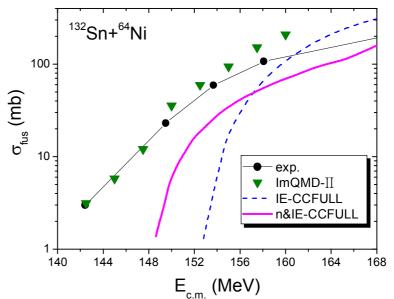


图 3.21 132Sn+64Ni 的熔合激发函数。实心黑点表示 最新的实验结果[84],虚线表示耦合道理论考虑弹 靶非弹激发的计算结果,实线表示耦合道理论考虑 弹靶非弹激发加上中子转移的计算结果, 三角符号 表示 ImQMD-II 的计算结果。

出相当满意的结果。这说明 ImQMD-II 对于丰中子熔合反应中的同位旋效应的描述是比较成功的。为了进一步说明 ImQMD-II 模型对于丰中子核熔合反应的成功描述,我们计算了最新的(2003 年)丰中子弹核与丰中子靶核的熔合反应 132 Sn+ 64 Ni 的熔合激发函数。**图 3.21** 给出了我们的 ImQMD-II 模型计算的 132 Sn+ 64 Ni 熔合激发函数与最新的实验结果[84]以及耦合道理论计算结果[84]的比较。由于实验上对这一丰中子熔合体系的复合核裂变测量存在困难,在 $E_{c.m.} \leq 160 MeV$ 能区裂变可以忽略,因此实验上认为 $E_{c.m.} \leq 160 MeV$ 能区的蒸发残余截面为熔合截面[84]。其中耦合道计算是运用 CCFULL 程序[85],考虑了各阶非线性耦合效应、弹核与靶核的非弹性激发耦合效应(虚线表示)以及中子转移效应(实线表示)得到的结果[84]。从**图 3.21** 可以看出耦合道理论的计算结果在垒下要比实验数据低 1~2 个数量级,而 ImQMD-II 模型的计算结果则与实验数据符合得非常好。这是因为耦合道理论难以将所有自由度的耦合考虑得非常全面,而改进的量子分子动力学(ImQMD-II)模型是一种自洽的微观动力学模型,它能将各种表面振动以及核子转移等动力学效应、同位旋效应以及质量不对称效应等比较全面自洽地考虑进去,因此它在描述重离子熔合时不需要对某些特殊的动力学效应做额外的考虑,这也是与耦合道理论计算熔合截面的较大差别。

我们也计算了 58Ni+58Ni 以及 64Ni+64Ni[63]的熔合截面,如图 3.22 所示。从图上

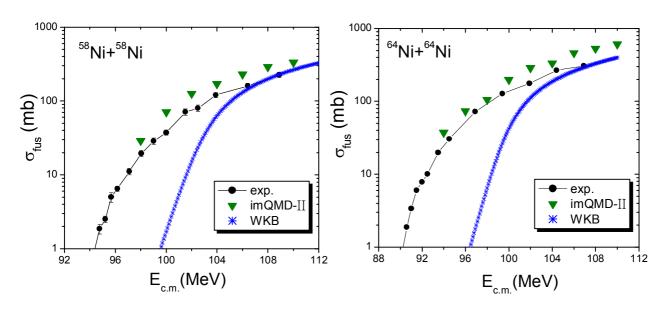


图 3.22 ImQMD-II 计算出来的 58 Ni+ 58 Ni 以及 64 Ni+ 64 Ni 熔合激发函数与实验数据的比较。实心圆点表示实验结果,三角符号代表 ImQMD-II 计算结果,叉线表示一维 WKB 方法计算结果。

一方面可以看出 ImQMD-II 模型能够自动地将丰中子熔合体系的同位旋效应很好地体现出来。这是因为 ImQMD-II 模型是从微观角度来处理体系的对称能,并且对表面对称能效应也进行了更细的考虑。另一方面我们也要看出 ImQMD-II 模型计算出来的 58Ni+58Ni 以及 64Ni+64Ni 熔合截面要较实验值偏大一些。而且前面计算的 48Ca+48Ca 的垒下部分的熔合截面也较实验值偏大一些。这是由于目前 ImQMD-II 模型还比较简单,例如没有考虑自旋轨道耦合作用以及波包宽度的动力学演化等对核结构性质有明显影响的一些更细的效应(如满壳核的壳结构效应,以及核的对效应等),所以对束缚特别紧的核如 48Ca+48Ca 反应的描述仍有一定的困难,计算得到的垒下熔合截面偏大一些。

从上面的十多个熔合激发函数的计算结果我们可以看出改进的量子分子动力学模型(ImQMD)对熔合反应截面的描述还是有很大的成功之处。特别是它能比较全面地将动力学效应、同位旋效应以及弹靶质量不对称效应等自治地考虑进来,从而给熔合反应的研究提供了一条新的途径。

§3.4 位垒分布

从熔合反应或者背角准弹性散射的激发函数(需要精确测量)中提取位垒分布,目前是实验核物理以及理论核物理研究中一个很感兴趣的方面。实验上提取出来的位垒分布一方面可以提供核核相互作用势比较精确的信息,对理论模型进行检验;另一方面熔合反应的位垒分布还能够清楚地再现熔合过程中的一些耦合作用以及动力学信息,如体系变形、中子转移等。

前面我们讲到的一维 WKB 方法对熔合截面的计算中,仅仅考虑到了相互作用的两个核的相对运动自由度(两核形状基本不变),通过单个位垒穿透来描述熔合过程。通过与实验数据的比较我们可以清楚地看出,在垒下较深的地方,一维位垒穿透的WKB 方法计算的熔合截面要比实验结果低 1~2 个数量级。另一方面对于轻的熔合体系 $25 \le Z_1 Z_2 \le 100$,一维 WKB 方法基本能够较好地描述;对于较重的熔合体系 $100 \le Z_1 Z_2 \le 1500$,仅仅能描述垒上部分($E_{c.m.} \ge 1.1 B_0$)的熔合截面,而对于垒下的

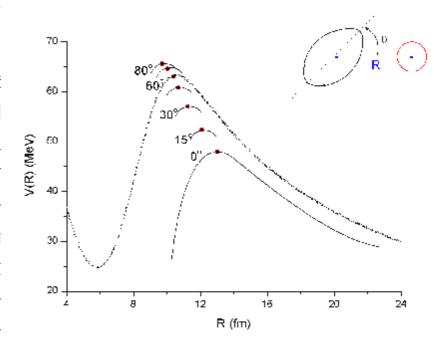


图 3.23 ¹⁶O+¹⁵⁴Sm 相互作用势的示意图。势垒形状与 静态形变的靶核的入射角度有关。

虑到多个位垒(多维位垒)存在。

这可以从静态变形核熔合反应中看出。静态变形核的核核相互作用势(位垒的高度与位置)与变形核相互作用的方向有密切的关系,如图 3.23 所示。这样核的相互作用方向便是影响位垒的一个额外的自由度,从而相互作用位垒就有一个连续的分布。基本上来说,别的自由度如弹靶转动、振动激发以及转移反应道与相对运动自由度的耦合,导致了位垒的分布 D(B)。在这些分布中一部分位垒高度要低于一维的单位垒高度,从而解释了垒下熔合截面增强的现象。基于位垒分布,总的熔合截面可以写为[79][81],

$$\sigma_{fis}(E) = \int_0^\infty \sigma_{fis}(E, B) D(B) dB \, . \tag{3.4.1}$$

其中 $\sigma_{fus}(E,B)$ 表示位全B所对应的熔合激发函数。分布D(B)是一个权重函数

$$\int_{0}^{\infty} D(B)dB = 1 {0} {3.4.2}$$

一些理论假设了位垒分布的形式,是一种连续的对称分布的矩形或者高斯形分布 [68][69]。

实验上的熔合位垒分布 $D_{fus}(E)$ 可以从熔合激发函数中提取出来[60],如**图 3.24** 所示。

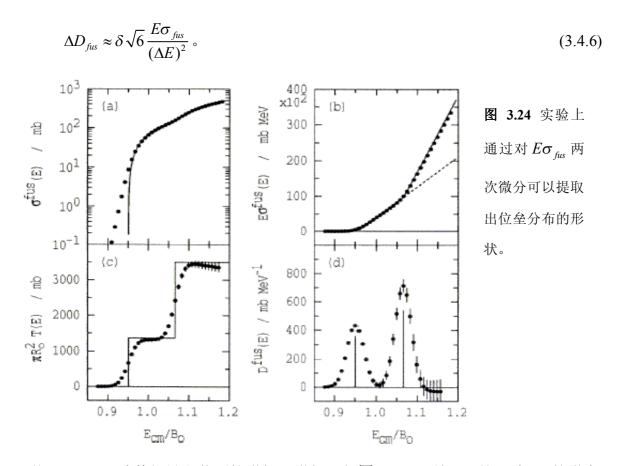
$$T(E) = \frac{1}{\pi R_b^2} \frac{d(E\sigma_{fits})}{dE},$$
(3.4.3)

$$D_{fus}(E) = \frac{dT}{dE} = \frac{1}{\pi R_b^2} \frac{d^2(E\sigma_{fus})}{dE^2} \, . \tag{3.4.4}$$

 $E\sigma_{fus}$ 对能量的两次微分可以简单地表示为,

$$D_{fis}(E) \approx \frac{E\sigma_{fis}(E + \Delta E) - 2E\sigma_{fis}(E) + E\sigma_{fis}(E - \Delta E)}{(\Delta E)^2}$$
(3.4.5)

其中 ΔE 是能量步长。显然,越小的能量步长计算出来的位垒分布与解析结果越靠近,也越能反映位垒结构的敏感性。然而对于一个截面的相对不变的实验不确定性 δ ,位垒分布 $D_{fis}(E)$ 的不确定性近似表示为[67],



从而, ΔD_{fus} 随着能量和截面的增加而增加,如**图 3.24**(d)所示,并且随 ΔE 的增大而减小。

下面给出一些熔合体系的位垒分布[67]。从图 3.25 中可以看出,不同的熔合体系,

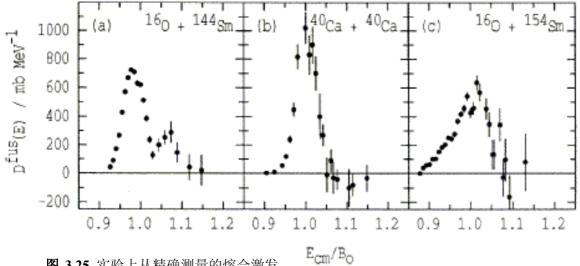


图 3.25 实验上从精确测量的熔合激发函数中提取出来的几个反应位垒分布。

其位垒分布的结构也有很大差别,**图 3.25**(a)表明 ¹⁶O+¹⁴⁴Sm 熔合体系中最低的八极振动态的耦合很重要;**图 3.25**(b)的 ⁴⁰Ca+⁴⁰Ca 的位垒分布比较接近于高斯分布,说明没有明显的耦合;**图 3.25**(c)则表明 ¹⁵⁴Sm 的基态转动对相对运动存在着明显地耦合。

量子分子动力学模型通过大量的模拟事件同样可以得到熔合截面。与实验从熔合激发函数提取位垒分布所不同的是,在 QMD 模拟熔合过程中,每个熔合事件都存在一个动态的相互作用势。对所有熔合事件中的位垒进行统计,也可以得到熔合位垒分布 D(E)。

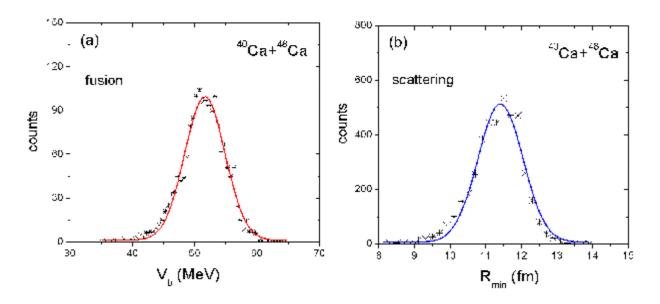


图 3.26 ⁴⁰Ca+⁴⁸Ca 熔合反应中熔合事件的位垒的分布以及散射事件中两核最小距离的分布。

图 3.26 给出了 ⁴⁰Ca+⁴⁸Ca 熔合反应中熔合事件的位垒 V_b 的分布以及散射事件(包括弹性以及非弹性散射)中两核最小距离 R_{\min} 的分布。他们基本上呈现高斯分布,这与实验从激发函数测量得到的位垒分布 D(E)有一定的相似之处。但是我们也注意到我们得到的位垒分布 D(E)的分布宽度比实验得到的位垒分布 D(E)要展宽一些,说明两者之间还是有一定的差别,见**图 3.27**。一个比较明显的差别是实验上提取的位垒分布 D(E)依赖于测量的熔合截面所在的能量范围以及能量的步长;而 ImQMD-II 得到的位垒分布 D(E) 更多地依赖于模型所采用的核子核子相互作用势。虽然 ImQMD-II

得到的位垒分布 D(E) 也 与入射能量以及碰撞参数 有关,不过即使在相同的 入射能量以及相同的碰撞 参数下,大量的熔合事件 也会给出一定宽度的位垒 分布。更多的差别还在进 一步研究之中。

虽然与实验提取的位 全分布有一定的差别,从 ImQMD-II 模型得到的熔

合位垒分布 D(E) 同样可以 看出不同熔合体系所表现出 来的熔合机制的差别。下面 我们通过位垒分布以及熔合 几率随碰撞参数的依赖来分 析丰中子体系 40Ca+96Zr 熔 合截面增强的原因。图 3.28 给出了 ⁴⁰Ca+^{90,96}Zr 熔合激 发函数的比较,很清楚地看 出,在垒下部分,丰中子体 系 ⁴⁰Ca+⁹⁶Zr 熔合截面呈现 明显的增强趋势。实验上主 要通过熔合激发函数来提取 ⁴⁰Ca+^{90,96}Zr 的位垒分布,通 过位垒分布的比较可以看出 丰中子体系熔合反应的一些

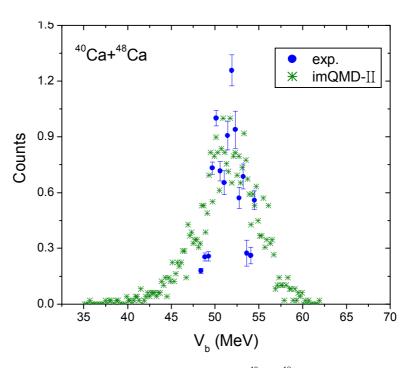


图 3.27 ImQMD-II 模型得到的 ⁴⁰Ca+⁴⁸Ca 的位垒分布。

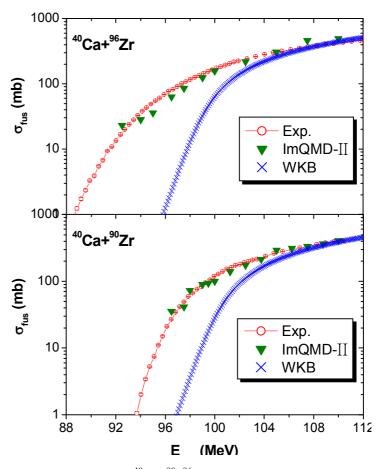


图 3.28 ⁴⁰Ca+^{90,96}Zr 的熔合激发函数。

不同的机制。图 3.29

给出了实验上从熔合截面以及准弹性散射截面提取出来的 40 Ca+ 90,96 Zr 的位垒分布[67]。从图中可以看出,丰中子熔合体系 40 Ca+ 96 Zr 的位垒分布相对于 40 Ca+ 90 Zr 的位

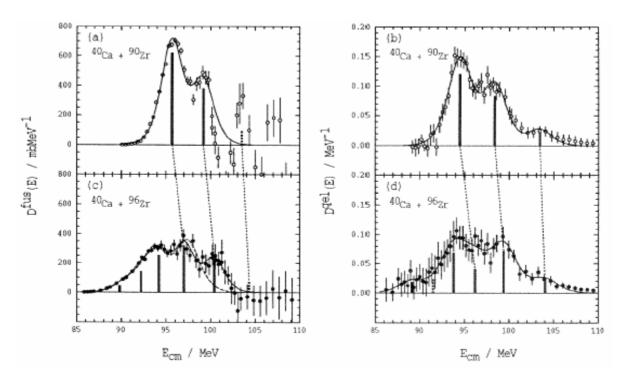


图 3.29 实验上从熔合截面以及准弹性散射截面提取出来的 40Ca+90,96Zr 的位垒分布。

垒分布要平坦一些,作者认为这与丰中子熔合反应中多中子转移有着很大的关系 [62]。另外一些作者也认为,两核熔合的早期在颈部首先产生中子流,从而使得熔合

截面增强[70]。这种效应会导致一个 比较平坦的位垒分布。

我们首先来看一看 40 Ca+ 90,96 Zr 散射事件的 R_{min} 分布,如**图 3.30** 所表示。从图中可以看出, 40 Ca+ 96 Zr 的 R_{min} 分布相对于 40 Ca+ 90 Zr 的 R_{min} 分布要偏右边一些,也就是散射距离要相对远一些,从库仑势 $V_{Coul}=Z_1Z_2e^2/R$ 可以简单地估计出 40 Ca+ 96 Zr 的熔合位垒相对于

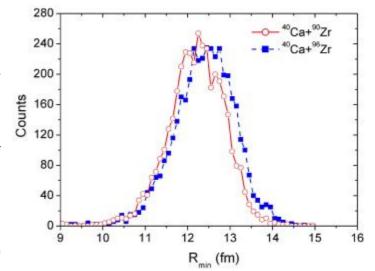


图 3.30 ImQMD-II 计算出来的 40 Ca+ 90,96 Zr 散射事件的 R_{min} 分布。

 40 Ca+ 90 Zr 的熔合位垒要低一些。另一方面,从图中还可以看出, 40 Ca+ 96 Zr 的 R_{\min} 分布要相对平坦一些,这与实验上得到的 40 Ca+ 96 Zr 的位垒分布较平坦比较一致。 40 Ca+ 96 Zr 的熔合位垒的降低以及比较平坦导致了 40 Ca+ 96 Zr 熔合截面的增强,如图 3.28 所示。为了进一步说明丰中子核熔合反应中动力学位垒的降低效应,我们还比较了 58 Ni+ 58 Ni 以及丰中子核熔合反应 64 Ni+ 64 Ni 的散射事件的 R_{\min} 分布的比较,见图 3.31a。从图中我们同样可以看出,丰中子核熔合反应 64 Ni+ 64 Ni 的散射事件中的 R_{\min} 明显偏大,这也意味着 64 Ni+ 64 Ni 的熔合位垒明显偏低,从而 64 Ni+ 64 Ni [63]的熔合截面要比非丰中子核熔合反应 58 Ni+ 58 Ni 的熔合截面明显偏大,见图 3.31b。

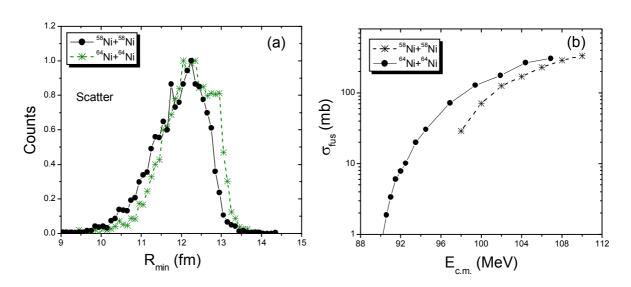


图 3.31 ImQMD-II 计算出来的 58 Ni+ 58 Ni 以及丰中子核熔合反应 64 Ni+ 64 Ni 散射事件的 R_{\min} 分布(a)以及 58 Ni+ 58 Ni 和 64 Ni+ 64 Ni 的熔合激发函数的比较(b)。

从图 3.31a 和图 3.31b 我们可以看出,丰中子核熔合截面的增强与丰中子熔合体系的动力学位垒的降低有着密切的关系。从后面的颈部动力学行为我们将会了解,由于同位旋效应,丰中子熔合体系的颈部会出现明显的中子流现象(颈部的 N/Z 比偏大以及中子转移的速度偏高),这种中子流能够充分地降低熔合体系的位垒高度,从而使得丰中子体系的熔合截面增强。这里需要注意的是,由于低能熔合反应的核结构效应比较明显,特别满壳核的壳效应能够部分地抑制同位旋效应引起的动力学位垒降低,因此双满壳核 ⁴⁸Ca 的垒下熔合截面反倒比 ⁴⁰Ca+⁴⁸Ca 的熔合截面偏低,这与双满壳核 ⁴⁸Ca 的壳结构效应(⁴⁸Ca 较 ⁴⁰Ca 结合能更大,核结合得更紧密)有一定

的关系。

另一方面碰撞参数 b 在很大程度上决定着两核相互作用的程度,通过研究熔合几率随碰撞参数的关系,可以使我们更清楚地了解到不同熔合体系在不同碰撞参数下的

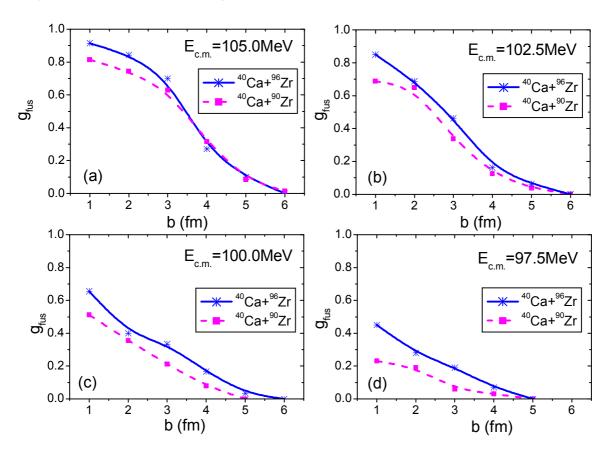


图 3.32 ⁴⁰Ca+^{90,96}Zr 两个熔合反应的熔合几率随碰撞参数变化的比较。

差别。图 3.32 给出了 40 Ca+ 90,96 Zr 这两个熔合体系在垒附近的熔合几率随碰撞参数变化的比较。从图中我们可以看出,能量较高 $E_{c.m.}=105.0$ MeV 时(图 3.32a)丰中子熔合体系 40 Ca+ 96 Zr 与非丰中子熔合体系 40 Ca+ 90 Zr 熔合几率的主要差别在中心区域 $b=1\sim3$ fm,在周边碰撞区域,它们两者的差别较小。随着入射能量的逐渐降低(图 3.32b,c,d),除了中心碰撞区有差别外,碰撞参数较大的区域丰中子熔合体系 40 Ca+ 96 Zr 的熔合几率也明显地大于非丰中子熔合体系 40 Ca+ 90 Zr 熔合几率。而从熔合截面定义 $\sigma_{fus}(E)=2\pi\int_0^{b_{max}}g(E,b)bdb$ 我们知道,熔合几率相同时,碰撞参数越大的区域对熔合截面的贡献也越大。因此在垒下能区,在碰撞参数较大区域, 40 Ca+ 96 Zr 的熔合几率比 40 Ca+ 90 Zr 熔合几率的明显偏大导致了丰中子体系 40 Ca+ 96 Zr 熔合截面的显著增强。

下面我们再来简单地讨论一下入射能量以及碰撞参数对位垒分布D(E)的影响。

图 3.33 给出了 40 Ca+96 Zr 熔合反应中不同能量区以及不同反应区的位垒分布。图 3.33(a)

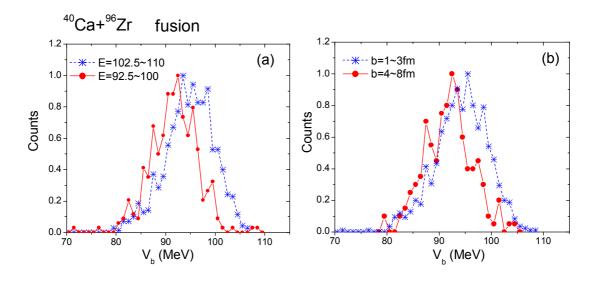


图 3.33 ⁴⁰Ca+⁹⁶Zr 熔合反应中不同能量区以及不同的碰撞参数区的位垒分布的比较。

比较了垒上区和垒下区的位垒分布,可以看出垒上熔合反应的位垒明显偏高,这主要是因为入射能量较高时,反应过程较快,从而核子密度重新调整的时间较短(有些类似于密度的突然近似),从而势垒较高。而入射能量较低时,反应速度较慢,核子有较长的时间来重新调整密度分布,使得能量处于较低状态(体系拉长为长椭球),因此势垒降低。位垒分布对碰撞参数的依赖也是一样的道理(见图 3.33b)。中心区的碰撞,熔合过程较快,而周边碰撞则更多地存在着熔合与深度非弹散射的竞争,从而熔合过程比较缓慢,体系拉长的程度更深,位垒相应也更低一些。在后面的熔合反应的颈部增长过程中,我们还会讨论到这个问题。总而言之,通过量子分子动力学模型模拟熔合反应可以使人们对熔合反应的动力学机制有更多更深的了解。

§3.5 颈部的动力学行为[71]

§3.5.1 颈部研究概述

众所周知,熔合反应中位垒高度及宽度对熔合截面有很重要的影响。而影响熔合位垒很重要的一个方面便是反应过程中两核接触时体系的形状,特别是颈部的形状。此外颈部的大小、颈部的中子质子比以及颈部的核子转移等对熔合过程也有明显的影响。特别是重的熔合体系,熔合过程中的准裂变以及复合核裂变等都与颈部的动力学演化有着直接的关系。通过颈部动力学的研究,一方面可以了解熔合过程是怎样从两个独立的核逐渐转变为一个复合核,除了大量的核子交换以外还包括相互碰撞的核的结构特征的改变以及能量、N/Z 比等趋平衡过程等等,这些对熔合过程都有很重要的影响。另一方面我们可以研究重的熔合体系中弹靶质量不对称性对颈部成长速度的影响,从而对双核模型以及单核模型就颈部成长速度的争论作一些解释。

我们首先看看熔合过程中颈部的动力学演化与熔合的动力学位垒之间的关系。我们跟踪了熔合反应过程中不同时刻反应体系的密度分布、平均单粒子势分布以及这个时刻的熔合位垒高度。图 3.34 描述了 40 Ca+ 20 Zr 熔合反应中一个典型的反应事件[72],在这个图中,纵坐标是动力学位垒 Vb,横坐标是弹核与靶核之间的距离。这儿弹核与靶核的密度分布是随时间变化的。与此同时,在子图中我们还画出了 3 个不同时刻(接触前、刚接触以及接触后)核的密度分布以及单粒子势分布。子图(1a)和(1b)给出了在熔合路径中点 1 的密度分布以及单粒子势分布。从这两个子图我们可以看出在这一时刻两个核还没有接触上(图(1a)),两核之间的势垒还比较高从而防止核子穿过势垒进行交换。在点 2 处,动力学位垒达到最大值,在这一刻密度分布(子图(2a))显示出两个核此时刚接触上,颈部开始形成,两核之间的势垒有所降低(子图(2b)),从而少量核子能够在弹靶之间穿过势垒进行交换。从图中可以看出当熔合体系穿过位垒最高点以后,体系形成的位垒则迅速下降。在点 3 处,子图(3a)和(3b)显示了此时颈部有很明显的成长,势阱中间的势垒也明显地降低,从而弹核与靶核之间的核子交换较以前更容易。复合核在此后就逐渐形成。从这幅图可以了解到熔合体系的结构沿着熔合路径的发展情况,可以看出熔合位垒与反应体系在不同时刻所形成的不同

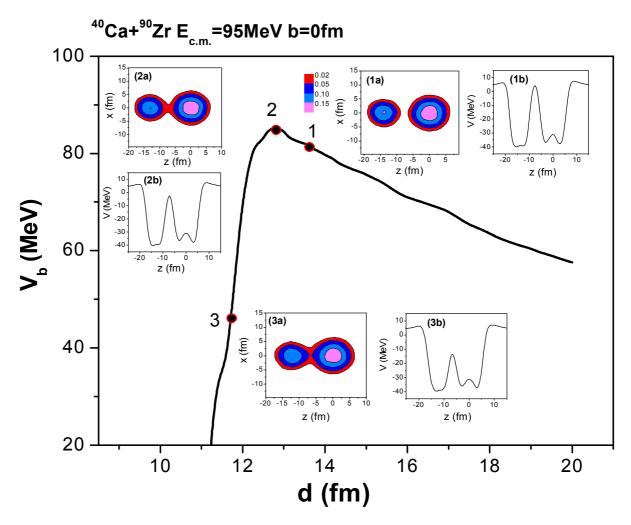


图 3.34 40 Ca+ 90 Zr 反应中一个典型熔合事件的熔合路径。图中心的曲线表示这一熔合事件的动力学位全,它是弹靶之间距离的函数。子图(1a)、(2a)、(3a)是反应体系在相应的 $V_b(d)$ 曲线上标出的不同时刻的密度分布;子图(1b)、(2b)、(3b)在各自相应时刻的单粒子势。

形状结构以及复合体系的平均单粒子势都有着密切的关系。从而通过研究颈部的动力 学行为可以得到熔合反应过程中一些更为细致的信息,如颈部的成长速度,颈部的中 子质子比,颈部的核子转移以及能量的耗散等大家非常感兴趣的问题。

§3.5.2 颈部的成长

在研究颈部动力学行为的更详细的信息之前,我们首先给出熔合反应中两个单独

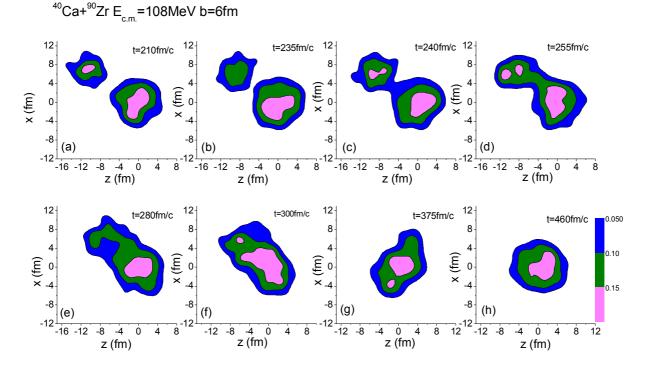


图 3.35 40 Ca+ 90 Zr 在能量为 $E_{c.m.} = 108 MeV$,碰撞参数为b = 6 fm时的一个典型的熔合事件的密度分布的时间演化。

的核从接触经过颈部成长直到复合核的形成这个动力学过程中的一些初步的信息。 **图 3.35** 给出 40 Ca+ 90 Zr 的反应系统在能量为 $E_{c.m.}=108$ MeV,碰撞参数为b=6fm 时的一个典型的熔合事件的密度分布的时间演化图。从图中可以看出,熔合过程不是两个核的密度进行简单平移的过程,它从将要接触时就发生变形,然后颈部形成,伴随着核子的交换,颈部逐渐成长,再经过不断振荡最终形成复合核。在这个时间

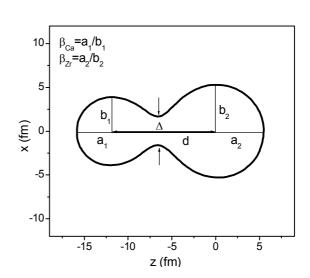


图 3.36. 颈部有关的一些物理量的定义。

演化过程中,我们给出了颈部成长的时间演化(图 3.37(a))。图 3.37 中物理量的定义 参看图 3.36。在图 3.36 中,颈部形状由密度等高线 $\rho = 0.05 \, fm^{-3}$ 给出,两核质心间的 距离为 d (图 3.37 中的 distance),颈部的宽度为 Δ (图 3.37 中的 width),体系的拉长为

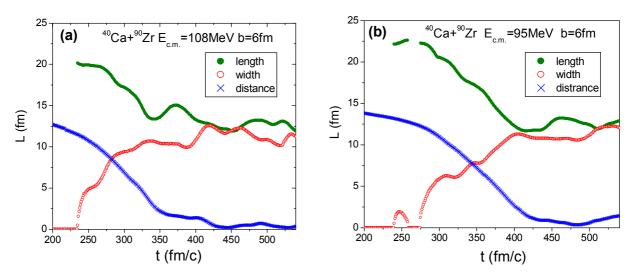


图 3.37 40 Ca+ 90 Zr 熔合反应中体系的拉长、颈部的大小、以及弹靶之间的距离随时间的演化。图(a) 对应于入射能量高于熔合位垒 $E_{c.m.}=108MeV$ 的情形;图(b) 对应于入射能量低于熔合位垒 $E_{c.m.}=95MeV$ 的情形。其中实心圆点表示体系的拉长;空心圆圈表示颈部的大小;叉线表示弹靶的距离。

 $l = a_1 + d + a_2$ (图 3.37 中的 length),弹核与靶核外围的变形分别表示为 $\beta_{Ca} = a_1/b_1, \beta_{Za} = a_2/b_2$ 。结合图 3.35 和图 3.37 我们可以看出熔合过程中的一些特点: 在颈部成长的最初阶段,颈部的宽度 Δ 在迅速成长,而体系的拉长基本保持不变;当 颈部的宽度增长到一定的程度,它增长的速度减缓,这时体系的拉长迅速变短(时间 大约从 $t=270\,\mathrm{fm/c}$ 到 $t=330\,\mathrm{fm/c}$);然后体系向球形(颈部宽度和体系拉长基本相等)演变的过程中不断旋转与振荡,以将集体运动动能转变为内部激发能。

为了更清楚地了解颈部成长时颈部核子的运动趋势以及质子、中子运动的差别, 图 3.38 给出了图 3.35 的熔合事件中颈部成长初期的核子运动。从图中我们可以看出 在颈部成长的初期,颈部的核子运动较快,并且颈部的中子数相对较多。这两点我们 将在后面详细讨论。

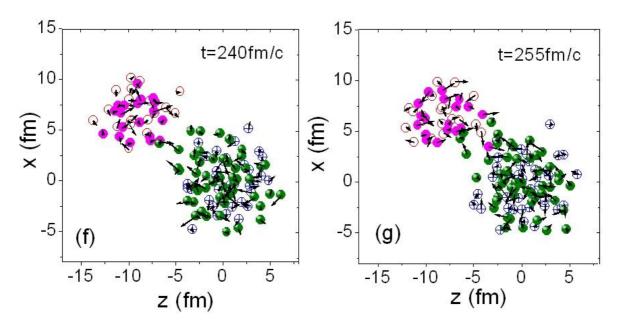


图 3.38 图 3.35 熔合事件中颈部成长初期的核子分布以及运动。其中箭头方向和大小分别表示核子的运动方向以及运动速度的大小。其中实心圆球表示弹核与靶核的中子。

下面我们讨论当入射能量较低时颈部的成长情况。**图 3.37(b)**给出了 40 Ca+ 90 Zr 的反应系统在能量为 $E_{cm}=95$ MeV,碰撞参数为b=6fm 时的一个典型的熔合事件的颈部增

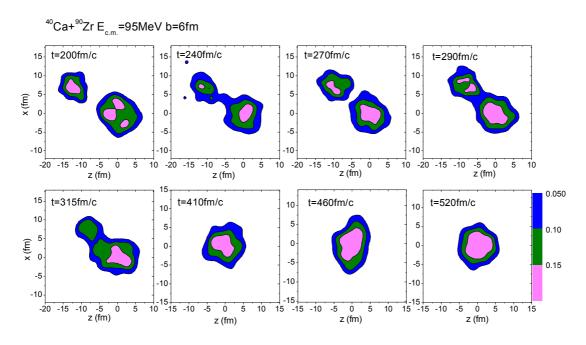


图 3.39 40 Ca+ 90 Zr 在能量为 $E_{c.m.} = 95 MeV$,碰撞参数为b = 6 fm 时的一个典型的熔合事件的密度分布的时间演化。

长的时间演化。图中我们可以看出入射能量较低时颈部的增长较慢,而且颈部成长出现振荡现象,也就是说两核接触上后由于入射能量较低两核暂时还没有完全克服库仑位垒,出现熔合与散射(类似于深度非弹性散射)之间的竞争,从而颈部出现振荡。这种状态下熔合体系通过形变、核子转移等方式不断调整它们的平均场来克服库仑位垒。等到动态熔合位垒降低以后颈部再次形成并且逐渐增长,形成熔合。这个过程的密度演化图在图 3.39 中给出。

从上面的讨论我们知道颈部的成长与入射能量有一定的依赖关系。我们还研究了重体系熔合过程中弹靶质量不对称性对颈部成长的影响。通过研究 ¹³¹I+¹³¹I 以及 ⁵⁴Cr+²⁰⁸Pb(它们所形成的复合核相同,都为 ²⁶²Sg)两个熔合体系在相同的入射能量以及相同的碰撞参数下的熔合过程的快慢,我们发现弹靶质量对称的体系的熔合速度要比质量不对称的体系的熔合速度慢很多。详细结果在后面重核熔合过程中讨论。

§3.5.3 颈部的 N/Z 比

从前面的讨论中我们知道,动态的熔合位垒与颈部的形状结构有着密切的关系。此外,

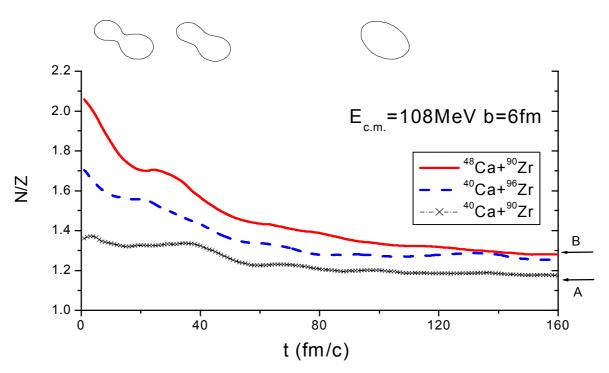


图 3. 40 ⁴⁰Ca+⁹⁰Zr、⁴⁰Ca+⁹⁶Zr 以及 ⁴⁸Ca+⁹⁰Zr 这三个熔合体系颈部的中子质子比率 随时间的演化。

它还与颈部物质的成分(即中子质子比率)有密切的关系。对于丰中子核反应,颈部的 N/Z 比是颈部形成过程中一个非常敏感的量。**图 3.40** 给出了 40,48 Ca+ 90 Zr 以及 40 Ca+ 96 Zr 三个熔合反应中颈部的 N/Z 比随时间的演化情况。在**图 3.40** 中三个反应的入射能量为 $E_{c.m.}=108$ MeV,碰撞参数为 b=6 fm,横坐标是颈部形成的时间,起始于两核接触颈部形成的时刻。纵坐标是颈部的 N/Z 比。对于 40 Ca+ 90 Zr、 40 Ca+ 96 Zr 以及 48 Ca+ 90 Zr 这三个熔合体系,它们初始的 N/Z 比分别是 1.17, 1.27, 1.30。从**图 3.40** 可以清楚的看出,在颈部形成的初始阶段,颈部的 N/Z 比要明显的高于初始核的 N/Z 比。随着颈部的成长,颈部的 N/Z 比逐渐降低,趋向于初始核的 N/Z 比。另外从**图 3.40** 也可以看出,随着反应体系中子数的增加,颈部的 N/Z 比也逐渐增加,特别是在颈部形成的初始时刻。

为什么在颈部形成的初始时刻,颈部的 N/Z 比要高于核的初始时刻的 N/Z 比?原

因主要有下面几个方面:其一,质子和中子的化学势是不同的,如图 3.41 所示。实线表示中子的化学势,虚线表示质子的化学势。从图中可以看出,中子化学势最低点 A 点对应的密度要小于质子化学势最低点 B 点对应的密度。当两个核接触后颈部开始形成时,颈部的密度大约是 0.05 fm⁻³ 至 0.10 fm⁻³。在这个密度范围内,由质子中

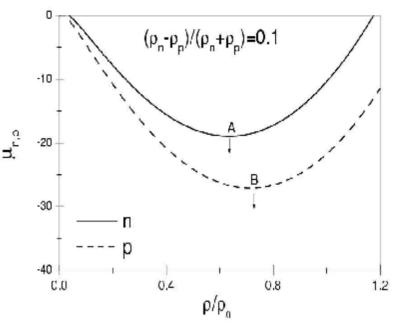


图 3.41 质子、中子化学势随密度的变化。

子化学势的差别可以看出,此刻质子受到一个向高密区域运动的力,也就是说核表面的质子会向各自的核心运动而不是向颈部运动;而此刻的中子却受到一个从高密区域向低密区域(颈部)运动的力。因此质子中子化学势的差异使得颈部形成的初始时刻中子首先向颈部运动。其二,由于库仑排斥,弹靶的质子相对于中子来说更难于相互靠近,形成颈部。为了将这一效应看得清楚一点,我们研究了 40Ca+90Zr、40Ca+96Zr

以及 ⁴⁸Ca+⁹⁰Zr 这三个熔合体系在颈部刚形成的时刻沿体系拉长方向的质子中子的密度分布。其中虚线表示质子的密度分布,实线表示中子的密度分布。

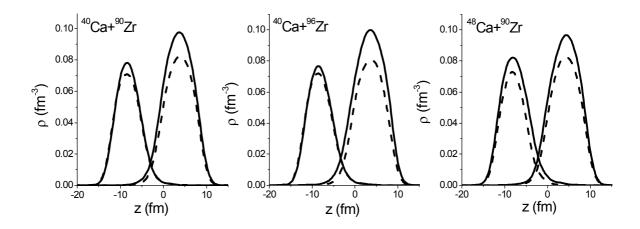


图 3. 42 ⁴⁰Ca+⁹⁰Zr、⁴⁰Ca+⁹⁶Zr 以及 ⁴⁸Ca+⁹⁰Zr 这三个熔合体系在颈部形成初期沿体系拉 长方向的密度分布。实线表示中子的密度分布;虚线表示质子的密度分布。

通过比较这三个体系颈部的密度分布可以看出,丰中子核反应 ⁴⁰Ca+⁹⁶Zr、 ⁴⁸Ca+⁹⁰Zr 颈部中子的密度分布要明显的高于质子的密度分布,特别是丰中子核(⁴⁸Ca 和 ⁹⁶Zr)的中子密度分布。这一点也能够解释图 3.42 中颈部的 N/Z 比在颈部开始形成的时刻要明显的高于反应体系初始的 N/Z 比,而且对于丰中子核反应,这一效应更加明显。与我们结论相一致的是,Stelson 通过研究熔合反应的位垒分布发现熔合反应初始阶段价中子形成的中子流是熔合截面增强的主要机制[70]。实验上从 ²⁸Si+^{112,124}Sn 的碎块形成中也发现在非对头碰撞下从颈部发射出来的 H、He 的丰中子的同位素明显偏多[73]。

§3.5.4 核子转移

颈部形成后,两核之间的核子转移是一个明显的动力学行为。我们计算了 40 Ca+ 90 Zr 和丰中子核反应 40 Ca+ 96 Zr 的颈部成长过程中核子转移的时间演化。其中入射能量为 $E_{c.m.}=108$ MeV,碰撞参数为 b=6 fm 。由于 QMD 模型能够方便地跟踪反应中所有核子的坐标和动量,因而可以分别得到不同时刻炮弹和靶穿越颈部所在切面

(见图 3.43)的核子数目。从图 3.44 可以看出随着颈部的增大,相互交换的核子数 也逐渐增多,也可以清楚地看出中子的转移数要高于质子的转移数,特别是丰中子核。这意味着在颈部成长的过程中,由于平均场中库仑排斥的影响,质子相对于中子更难

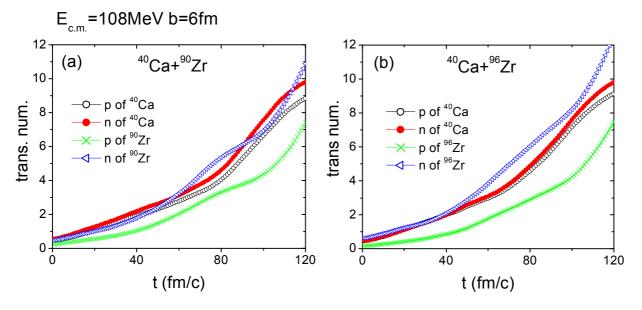


图 3.44 40 Ca+ 90 Zr (a) 和 40 Ca+ 96 Zr (b) 颈部成长过程中核子转移随时间的演化。

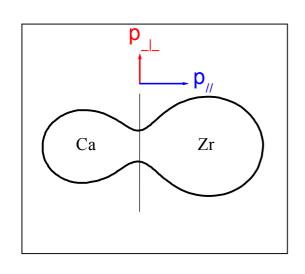


图 3.43 颈部核子转移以及平均动量计算的示意图。

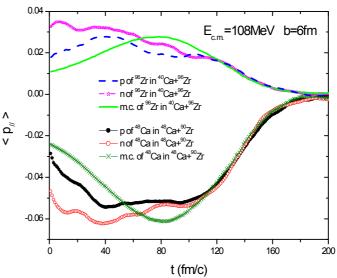


图 3.45 ⁴⁰Ca+⁹⁶Zr 和 ⁴⁸Ca+⁹⁰Zr 熔合反应中 颈部区域核子的动量沿着体系拉长方向的 分量随时间的演化。

于在两核间转移。与此同时,我们还研究了 40 Ca+ 90 Zr 这个体系中颈部区域的核子的动量沿着体系拉长方向的平均分量 $\langle P_{_{//}} \rangle$ 。它能充分地提供熔合过程中颈部的核子

与此同时我们比较了 40Ca+90Zr 和 40Ca+96Zr 这两个体系中颈部区域的核子的动量

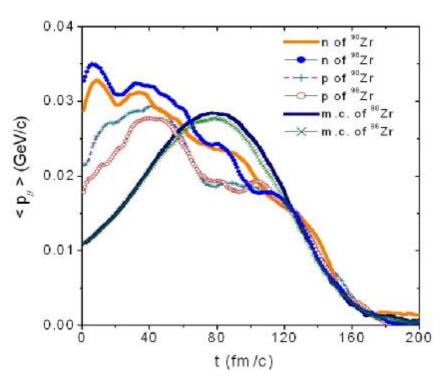


图 3.46 40 Ca+ 90 Zr 和 40 Ca+ 96 Zr 这两个体系中颈部区域的核子的动量沿着体系拉长方向的平均分量 $\langle P_{II} \rangle$ 。

沿着体系拉长方向的平均 分量 $\langle P_{II} \rangle$,如图 3.46 所示。 从图中我们可以看出,对于 丰中子熔合体系 40 Ca+ 96 Zr,由于同位旋效应 的影响,在颈部成长初期, 中子的 $\langle P_{II} \rangle$ 大于质子的 $\langle P_{II} \rangle$ 这种现象更为明显。结 合前面讲到的丰中子熔合 体系在颈部成长的初期颈 部的 N/Z 明显增大这一现 象,说明了丰中子核熔合反 应 40 Ca+ 96 Zr 在颈部成长的 初期,颈部出现了强烈的中

子流。这种中子流使得丰中子核熔合反应 ⁴⁰Ca+⁹⁶Zr 的熔合位垒降低,从而导致熔合截面增强。

§3.6 重核的熔合过程

前面我们讨论的颈部的动力学行为主要针对比较轻的熔合体系,对于非常重的熔合体系势必涉及到熔合裂变以及准裂变过程。很多模型能够简单地估计出准裂变以及熔合裂变的时间尺度,但是真正对整个反应过程进行动力学研究还是比较困难的。由于超重体系熔合过程比轻体系统更为复杂,各种动力学效应以及自由度对整个过程都会有很大的影响,宏观动力学模型通常不能将如此众多的效应以及自由度考虑得很详细。而另一方面,微观的动力学模型在计算如此巨大的熔合系统所需要的 CPU 时间则是非常巨大的。我们主要想通过 ImQMD-II 模型研究重核形成复合体系以及准裂变过程的一些动力学机制。

由复合核理论我们知道,重核熔合反应过程包括复合核的形成过程以及后期的衰

变过程, 其残余核的截面可以写为,

$$\sigma_{res} = \pi \lambda^2 \sum_{l} (2l+1) P_{fusion}^l \cdot P_{surv}^l \circ$$

其中 *P_{fusion}*, *P_{surv}* 分别表示复合核的形成以及存活几率。对于非常重的熔合体系,其复合核主要通过裂变方式以及蒸发核子进行衰变。而复合核的形成过程中除了要克服库仑位垒以外,还要受到准裂变的影响。准裂变与深度非弹散射以及熔合裂变过程比较接近,核力对它们的反应过程都有相当的影响。图 3.47 给出了弹靶质量不对称体系在深度非弹性散射、准裂变以及熔合裂变三种不同的反应类型中体系形状的时间演化[74]。从图中可以看出,对于质量不对称体系,复合核裂变经历的过程较多,也是核力作用程度最深的反应,持续的时间也较长;准裂变经历的过程仅次于复合核裂变,持续的

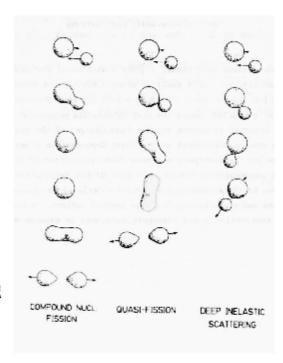


图 3.47 弹靶质量不对称体系在深度非弹性散射、准裂变以及熔合裂变三种不同的反应类型中体系形状的时间演化。

时间也次之;深度非弹性散射经历的过程以及核力作用的程度相对于其他两者较少,

反应的时间也较其他两者短一些。

由于 CPU 计算速度的限制,我们主要想通过 ImQMD-II 模型来研究重体系的复合核的形成过程(包括准裂变过程),以及复合体系分裂时间小于 6000fm/c 的一些反应的动力学机制。其中主要包括体系的入射能量、碰撞参数、体系大小以及体系的质子中子比等对准裂变以及复合体系分裂时间的影响。

我们首先来研究一下 ¹⁹⁷Au+¹⁹⁷Au 在近垒熔合反应中的准裂变过程。**图 3. 48** 给出 ¹⁹⁷Au+¹⁹⁷Au E_{cm}=610MeV b=0fm

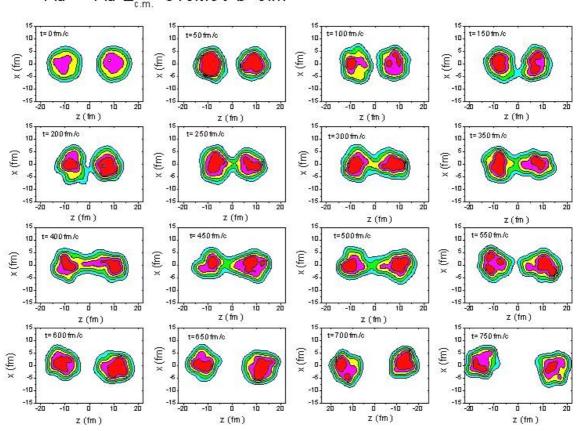


图 3.48 197 Au+ 197 Au 在 $E_{c.m.}=610 MeV$,对心碰撞情况下核子密度的时间演化情况。

了 197 Au+ 197 Au 在 $E_{c.m.} = 610 MeV$ (库仑位垒 $V_b \approx 600 MeV$),对心碰撞情况下核子密度的时间演化情况。从图中可以看出非常重的熔合体系与轻的熔合体系最大的差别就是,轻的熔合体系当两核接触上并且克服库仑位垒后主要走向熔合,而重的熔合体系

即使两核接触上并且克服库 仑位垒后,很大程度上并不能 走向熔合(库仑排斥太强), 而是发生准裂变过程。经过大量的核子交换后,体系发生裂变,两个碎片散射开。从图 3.48 可以看出 Au+Au 在近垒 对心碰撞时,准裂变过程大约要持续 400fm/c。图 3.49 给出了两核之间的距离随时间的演化情况。从图中我们发现当

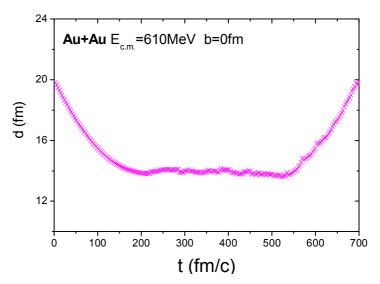


图 3.49 图 3.48 的准裂变事件中两核之间的距离随时间的演化。

两核接触形成颈部以后, 两核之间的距离基本保持不变, 而且这种状态能持续相当长

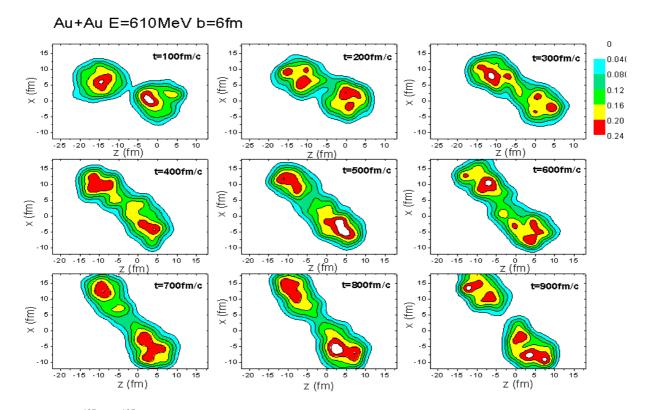


图 3.50 197 Au+ 197 Au 在 $E_{c.m.} = 610 MeV$, b = 6 fm 时,核子密度随时间的演化。 的时间大约 $400 \, \mathrm{fm/c}$,这意味着重的熔合体系所形成的颈部形状可以保持相当长的时

间。当碰撞参数增大时,体系有较大的角动量,体系发生准裂变的时间也会有所改变。

图 3. 50 给出了 197 Au+ 197 Au 在 $E_{c.m.}$ = 610 MeV, b = 6 fm 时,核子密度随时间的演化。从图中可以看出在这个碰撞参数下准裂变的时间更长,大约持续 $800 \sim 900 fm/c$ 。其他模型 [75] 以及实验数据分析 [76] 估计出这个过程的持续时间约为 $\sim 10^{-21} s$ (几百到上千个 fm/c)的数量级与我们的 ImQMD-II 计算得到的准裂变时间比较一致。当碰撞参数进一步增大时,体系主要发生深度非弹性散射以及准弹性散射,其持续时间则要比准裂变时间短一些。

下面我们来研究入射能量对重的熔合体系 197 Au+ 197 Au 的准裂变以及复合体系分裂时间的影响。上面我们看到对于 197 Au+ 197 Au 的熔合体系,在入射能量较低时,体系主要发生准裂变过程,其持续时间小于 1000fm/c。而当入射能量逐渐增高时,弹靶能靠得更近,这样体系暂时形成复合体系,随后发生分裂。**图 3.51** 和**图 3.52** 给出了 197 Au+ 197 Au 在 $E_{cm}=700$ MeV 以及 $E_{cm}=800$ MeV,b=1fm 时,一个反应事件的核密

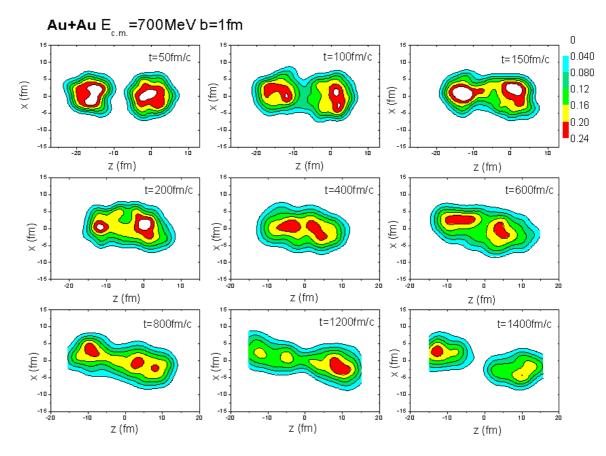


图 3.51 197 Au+ 197 Au 在 $E_{c.m.}=700 MeV$, b=1 fm 时,核子密度随时间的演化。

度随时间的演化。

从图 3.51 和图 3.52 可以看出,由于入射能量较高(高出库仑位垒约 100 到 200MeV),

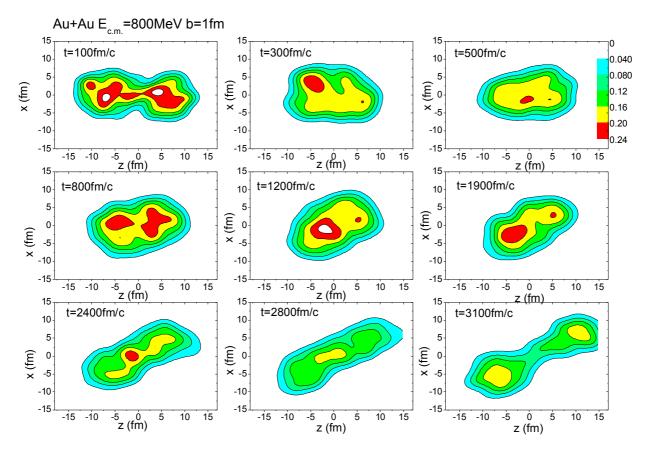


图 3.52 197 Au+ 197 Au 在 $E_{c.m.}=800 MeV$, b=1 fm 时,核子密度随时间的演化。

弹核与靶核在 $t=400\,fm/c$ 时刻基本上就暂时形成复合体。但是由于强大的库仑排斥作用,复合体系一直保持椭球形,很难向球形演变。随后这种复合体系就逐渐走向分裂。定义从形成复合体系到复合体系分裂的持续时间为复合体的寿命,由**图 3.51** 和 **3.52** 可以看出,在 $E_{c.m.}=700\sim800\,MeV$ 时, 197 Au+ 197 Au 所形成的复合体的寿命达到 $1000\sim3000\,fm/c$ 。比准裂变过程(约 $400\sim800\,fm/c$)时间长了 $4\sim5$ 倍。为了说明这一点,我们研究了不同入射能量下复合体系的方均根半径随时间的演化,如**图 3.53** 所示。 从图中我们可以看出当入射能量较低时 $E_{c.m.}=550\,MeV$,复合体系分裂较早,其寿命较短 $\tau<300\,fm/c$,体系交换的核子数较少(见子图(b)),主要发生深度非弹性散射,复合体系的最小的方均根半径也较大。当入射能量接近库仑位垒时 $E_{c.m.}=600\,MeV$,

体系能够交换较多的核子,颈部较宽(见子图(b)),最小方均根半径也较深度非弹性散射时小,复合体的寿命有所增长 $\tau \sim 800\,fm/c$,基本上属于准裂变过程。当体系入射能量较高时 $E_{c.m.} = 800\,MeV$,弹靶暂时形成复合体,最小方均根半径较小,由于强大的库仑排斥以及体系较高的激发能,复合体逐渐发生分裂,其寿命 $\tau \sim 3000\,fm/c$ 。可以看出复合体的寿命与入射能量有一定的依赖。

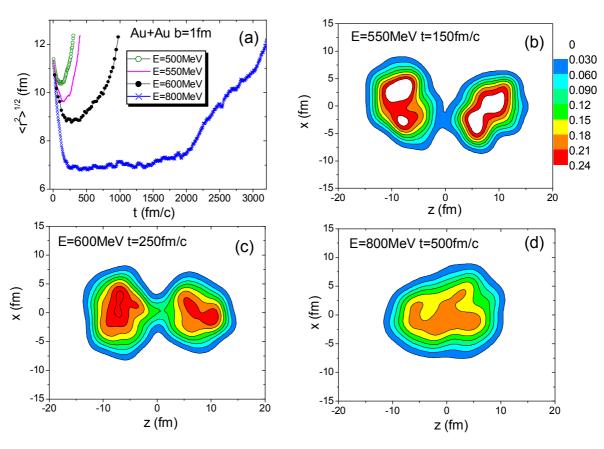


图 3.53 197Au+197Au 在不同入射能量时复合体系的方均根半径随时间的演化。 (b)、(c)、(d)分别表示不同入射能量下体系方均根半径最小时的密度分布。

我们在**表3.1**中给出 197 Au+ 197 Au 在不同入射能量下复合体的寿命 τ 以及体系的平均最小方均根半径 $\langle R^2_{min} \rangle^{1/2}$ 。通过研究不同能量下复合体的分裂,我们发现对于 Au+Au 的体系,当能量不是非常高时,体系不会发生多重碎裂,而主要是发生准裂变以及复合体系分裂过程,伴随着少许(1~2 个)的单个核子蒸发。因此我们可以通过复合体的方均根半径来观察体系形状的动力学变化。从表中我们可以看出入射能量较低或较

高时,复合体系分裂的时间都较早。这主要是因为入射能量较低时体系主要发生准裂变,其时间明显低于复合体系分裂的时间。而能量过高时,体系激发能过大,体系朝多重碎裂方向发展,体系碎裂成各种碎片。

表 3.1^{197} Au+ 197 Au 在不同入射能量下复合体的平均寿命 τ 以及体系的平均最小方均根半径 $\langle R_{\min}^2
angle^{1/2}$ 。

E _{c.m.} (MeV)	τ (fm/c)	$\langle R_{\rm min}^2 \rangle^{1/2}$ (fm)	
600	947	8.71	
700	1678	7.22	
800	2157	6.94	
1000	3252	6.71	
2500	900	-	
3000	375	-	

只有入射能量居中时,体系已经暂时形成复合体,而体系的激发能还不足以发生碎裂,这样体系便逐渐发生复合体系分裂,其分裂时间明显大于准裂变时间。而且我们还可以看出复合体系分裂的时间与体系的入射能量以及复合体系的最小方均根半径有一定的依赖关系。能量较高时,体系容易形成球形,最小方均根半径较小(但体系处于高激发状态),这样体系相对较难以分裂,其寿命较长。而如果入射能量较低时,体系不容易形成球形,最小方均根半径较大,体系易于分裂,复合体的寿命较短。

我们还研究了复合体系分裂时间与复合体的大小的依赖关系。**表 3.2** 给出了四个不同的弹靶对称的熔合体系所形成的复合体的寿命。

表 3.2 四个不同的弹靶对称的复合体的寿命。

Reactions	E _{c.m.} (MeV)	τ (fm/c)
²³² Th+ ²³² Th	800	975
¹⁹⁷ Au+ ¹⁹⁷ Au	700	1678
¹⁶² Er+ ¹⁶² Er	600	>5660
¹⁶² Er+ ²³² Th	700	1650

从表中我们可以看出较重的熔合体系 232 Th+ 232 Th 在 $E_{c.m.}$ = 800MeV 时复合体系的平均寿命 τ = 975 fm/c; 而较轻的熔合体系 162 Er+ 162 Er 在 $E_{c.m.}$ = 600MeV 时复合体系的平均寿命 τ > 5660 fm/c。这意味着越重的熔合体系所形成的复合体的寿命越短,而较轻的熔合体系所形成的复合体的寿命则大大增长,这与双中心壳模型得到的从轻到重一系列双核系统(DNS)的寿命的趋势是完全一致[77]。而且我们还注意到形成相同复合体系(A=394,Z=158)的 162 Er+ 232 Th 与 197 Au+ 197 Au 反应,在相同的入射能量下,两者所形成的复合体系的寿命基本相同。这说明了复合体系分裂过程可能部分忘记历史。

另外,我们还研究了复合体系的中子质子比对复合体的分裂时间的影响。我们比较了 197 Au+ 197 Au、 186 W+ 208 Pb、 186 Hf+ 208 Pb 以及 54 Cr+ 240 Pu 四个体系在相同的入射能量 $E_{c.m.}=700$ MeV 以及碰撞参数 b=1fm 下复合体系的寿命,见表 **3.3**。前三个体系所形成的复合体系的质量数相同(A=394),质子数逐渐减少。从表中可以看出,这四个复合体系随着体系的 N/Z 比逐渐增大,复合体系的寿命也逐渐增长。

Reactions	N/Z	$\langle R_{\rm min}^2 \rangle^{1/2}$ (fm)	τ (fm/c)
¹⁹⁷ Au+ ¹⁹⁷ Au	1.49367	7.22	1678
¹⁸⁶ W+ ²⁰⁸ Pb	1.52564	7.05	1996
¹⁸⁶ Hf+ ²⁰⁸ Pb	1.55844	6.99	2660
⁵⁴ Cr+ ²⁴⁰ Pu	2.33898	6.18	>6000

表 3.3 四个体系在入射能量 $E_{cm} = 700 MeV$ 碰撞参数 b = 1 fm 下复合体系的寿命

从上面的讨论我们可以看出,重体系的熔合过程中存在着准裂变以及复合体系分裂过程,从而其残余核的形成截面非常小。准裂变的时间要明显小于复合体系分裂的时间。复合体的寿命与入射能量、碰撞参数、体系大小、体系形状以及体系的中子质子比有着明显的依赖关系。体系越大质子数越多,库仑排斥越强,从而体系越容易分裂。此外我们可以看出复合体的 N/Z 比越大,所形成的复合体系越接近球形,其寿命

也相对越长。

下面我们进一步来讨论重体系熔合过程中弹靶质量不对称性对颈部成长的影响。 我们分析了 131 I+ 131 I 以及 54 Cr+ 208 Pb(它们所形成的复合核相同,都为 262 Sg)两个熔合体系在相同的入射能量以及相同的碰撞参数下的熔合过程的快慢。 **图 3.54** 和**图 3.55** 分别给出了 131 I+ 131 I 和 54 Cr+ 208 Pb 在 $E_{c.m.}=300$ MeV,b=4fm 的熔合过程中的密度时

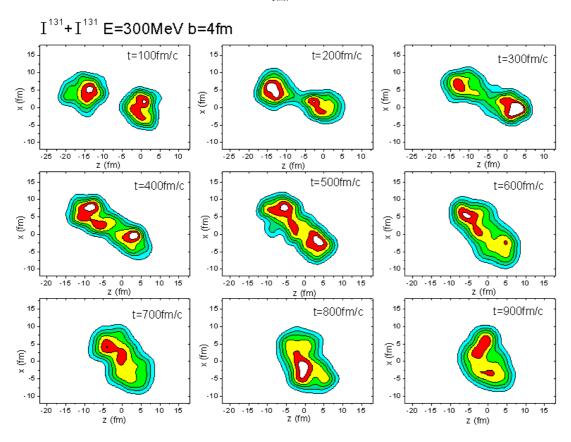


图 3.54 131 I+ 131 I 在 $E_{c.m.}=300 MeV$, b=4 fm 的熔合过程中的密度时间演化。 间演化。

从这两幅图的比较中我们不难发现,对于 131 I+ 131 I 弹核与靶核从接触到复合核基本形成需要的时间约大于 800fm/c,而对于 54 Cr+ 208 Pb 弹核与靶核从接触到复合核基本形成需要的时间仅仅需要大约 300fm/c。

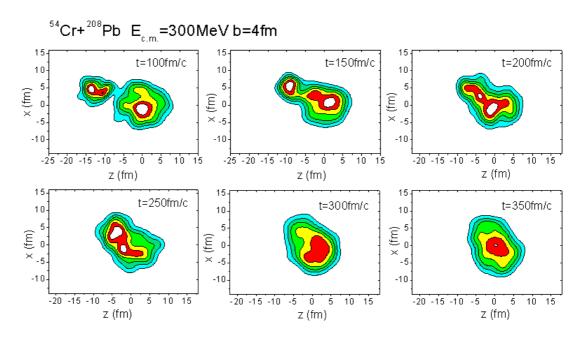


图 3.55 54 Cr+ 208 Pb 在 $E_{cm} = 300 MeV$, b = 4 fm 的熔合过程中的密度时间演化。

为了进一步说明这个问题,我们同时比较了这两个体系熔合过程中两核距离以及 复合体系的方均根半径的时间演化,如**图 3.56** 所示。从图中我们可以看出弹靶质量

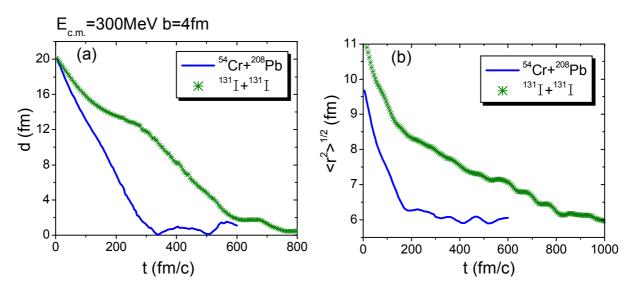


图 3.56 131 I+ 131 I 和 54 Cr+ 208 Pb 在 $E_{c.m.}=300 MeV$,b=4 fm 的熔合过程中两核距离(a)以及复合体系的方均根半径(b)的时间演化的比较。

对称体系 ¹³¹I+¹³¹I 相对于弹靶质量不对称体系 ⁵⁴Cr+²⁰⁸Pb 来说,在相同的入射能量以及碰撞参数下,前者的两核距离以及复合体系的方均根半径随时间变化相对于后者非

常慢。从图 3.56 可以看出,⁵⁴Cr+²⁰⁸Pb 在 t=200fm/c 时刻复合体系的方均根半径已经降低为 6.3 fm,也就是说体系已经接近球形。而 ¹³¹I+¹³¹I 在 t=200fm/c 时刻复合体系的方均根半径仍然非常大,约为 8.3 fm,直到 t=800 fm/c 以后复合体系的方均根半径才逐渐减小为 6.3 fm。这意味着弹靶对称的重的熔合体系的颈部成长以及达到复合体系的过程是非常缓慢的,这与双核模型预言的重体系熔合过程非常缓慢的观点是一致的。而弹靶质量非常不对称体系 ⁵⁴Cr+²⁰⁸Pb 的熔合过程则是相对较快的,这与单核模型预言的重体系熔合过程较快的观点也有些类似。由此我们可以看出,重体系熔合过程的快慢对弹靶质量不对称性有相当大的依赖。

从对重体系的熔合过程的简单模拟,我们可以看出 ImQMD-II 很有希望用来进一步研究超重元素的形成机制,这方面的工作正在进展之中。

第四章 总结与讨论

我们发展了一个改进的量子分子动力学模型(ImQMD),并运用该模型对近垒熔合反应的动力学机制进行了研究。下面我们主要从量子分子动力学模型的两次改进以及熔合反应的动力学机制三个方面对本文作出总结。

一、量子分子动力学模型的第一次改进(ImOMD-I)

- (1) 考虑了表面能项。我们直接采用了 Skyrme 有效相互作用势得到的表面能项。Skyrme 的表面能项不但能够很好地描述有限体系的表面性质而且在核中心部分能够有效地增加短程排斥力,从而避免核中心的密度过高,改善了核的密度分布以及单个核的稳定性。
- (2) 采用了相空间占有数约束方法。相空间占有数约束方法是利用两体弹性散射加上泡利阻塞效应有效地考虑 Pauli 原理,改进了 QMD 模型在这方面的不足并且增加了短程排斥的残余相互作用。采用这一方法以后,核的动量分布得到有效改善,特别是低动量的核子数目明显降低,从而提高了单个核的稳定性。
- (3) 引入了体系大小相依赖的初始波包宽度。这种波包宽度一方面使得一系列 轻核到重核的基态性质如结合能、方均根半径得到较大的改善,另一方面, 这种波包宽度能够改善核的表面性质,使得核的弥散更加合理,从而在熔 合反应中能够较好地描述熔合位垒。

采用这些改进措施以后,核的基态性质以及稳定性明显改善,而且能够很好地再现 ⁴⁰Ca+^{90,96}Zr 的熔合激发函数。

二、量子分子动力学模型的进一步改进(ImQMD-II)

此次改进直接从 Skyrme 力的能量泛函出发,进一步引入动量相关项、表面对称能项,从最新的 Skyrme 参数出发,调试出一套新的 QMD 模型参数:

(1) 引入动量相关项。我们引入 Skyrme 相互作用直接得到的动量相关项。它对于核的动量分布(特别是高动量部分)有非常大的改善作用。合理的动量分布使得单个核的稳定性时间提高了大约一个数量级。动量相关项的引入使得模型对熔合反应的描述更为成功,而且能够较好地描述非常重的熔

合体系的准裂变以及部分复合体的分裂过程。此外引入动量相关项明显地 改善了中能重离子多重碎裂过程中的中等质量碎块的电荷分布。

- (2) 引入表面对称能项以及库仑交换项。表面对称能项能够有效地避免垒下熔合以及丰中子核熔合时,颈部的动力学效应以及同位旋效应过强的现象。它能很好地改善垒下熔合以及丰中子核的熔合截面的计算结果。库仑交换项对于改善核内质子的均匀分布以及单个核的稳定性是有益的。
- (3) 调试出一套新的 ImQMD 参数。基于几组新提出并广泛运用的 Skyrme 参数(例如 SLy7、SKM*),通过符合大量的核基态性质、熔合反应截面以及中能重离子多重碎裂的质量分布等,调试出适合于 ImQMD 模型的一组新的参数(**IQ1**)。

改进后的模型(ImQMD-II)在基态核属性和单个核的稳定性、低能熔合反应的熔合截面以及熔合位垒、中能重离子多重碎裂中的碎块质量分布以及非常重体系熔合中的准裂变以及部分复合体的分裂过程等很多方面的描述都显示出很大的成功。

三、近垒重离子熔合反应的动力学机制

- (1) 用改进的量子分子动力学模型我们计算了 40,48 Ca+48 Ca、40 Ca+90,96 Zr 等十多个熔合体系的激发函数 (包括丰中子熔合体系), 其结果基本上都能相当好地重现实验数据。更重要的一点是, ImQMD-II 模型能将熔合反应中的动力学效应、同位旋效应以及弹靶质量不对称效应等比较全面、自洽地考虑进来, 从而给熔合反应的研究提供了一条新的途径。
- (2) 我们发现熔合过程中的动态位垒与体系的入射能量、碰撞参数、体系的中子质子比(N/Z比)以及体系的结构有着密切的关系。熔合过程中体系的变形(拉长为长椭球)能够导致动态位垒产生明显的降低,从而导致垒下熔合截面增强。
- (3) 通过研究熔合反应中颈部的成长、颈部的 N/Z 比、核子转移以及颈部的核子流等颈部的动力学行为,我们发现颈部的成长与入射能量以及弹靶质量不对称性有着密切的关系。此外还发现丰中子核熔合中,颈部在成长的初始阶段形成了明显的中子流,造成反应中动力学位垒的降低,引起了丰中

子核反应熔合截面的增强。

(4) 我们应用 ImQMD-II 模型研究了重核熔合过程的准裂变过程以及部分体系的复合体系分裂过程。给出了准裂变与复合体系分裂的时间尺度。发现复合体的寿命与体系的入射能量、碰撞参数、体系大小、体系形状以及体系的中子质子比有着明显的依赖关系。

讨论:

- (1) 从熔合截面的计算结果可以看出,ImQMD-II 模型对于动力学效应、同位旋效 应以及弹靶质量不对称效应等能够较好地描述,从而非常有希望用来研究超重 元素的形成机制。但是另一方面我们还要注意到,ImQMD-II 模型对于一些核 结构效应的描述还有待进一步改进(如 ⁴⁸Ca+⁴⁸Ca)。我们知道理论预言的超重 元素正是因为它们的壳效应才使他们得以存在,因此要运用 ImQMD 模型来研 究超重元素的合成,模型还需要能够较好地描述壳效应。如何在 ImQMD 模型 中考虑自旋轨道耦合项以及壳修正是下一步很重要的一个改进工作。
- (2) 随着放射性核束装置的发展以及人工合成超重元素研究的进展,丰中子核的熔合反应机制已引起人们极大的关注。从大量的熔合反应基本上可以看到,同位旋效应能够降低熔合位垒,增强熔合截面(⁴⁸Ca+⁴⁸Ca 例外, ⁴⁸Ca 这个双满壳核的较硬的结构抵消了同位旋效应引起的截面增强效应)。弄清熔合反应中的同位旋效应是今后研究的一个重要方向。譬如同位旋效应对准裂变过程以及复合体寿命的影响,同位旋效应与壳结构对熔合截面的影响等等。
- (3) 目前 ImQMD-II 模型中有一些细节问题还需要进一步完善和考虑。A) 波包宽度。波包宽度一方面能够影响有限体系的表面效应,另一方面它也能够很好地给出体系的涨落效应以及结构效应。如何在不明显影响计算速度的前提下,更自治地演化波包宽度从而更好地描述核的结构效应以及多重碎裂过程中的涨落效应,是我们需要考虑的一个问题。B) 理论计算量与实验观测量的联系。例如 ImQMD 模型计算的位垒分布与实验从熔合激发函数提取出来的位垒分布之间的联系等等。

参考文献

- [1] Yu.Ts.Oganessian, V.K.Utyonkov, etc. Phys.Rev.Lett. 83 (1999) 3154
- [2] Yu.Ts.Oganessian, A.V.Yeremin, etc. Nature (1999) 242
- [3] 胡济民,杨伯君,郑春开,《原子核理论》第一卷,原子能出版社,(1987) p.40; 胡济民,《原子核理论》第二卷,原子能出版社,(1996) pp.298
- [4] Xizhen Wu, K. Depta, et al., Nuovo Cimento 87A (1985) 309
- [5] K. T. R. Davees, A. J. Sierk, and J. R. Nix, Phys. Rev. C13 (1976) 2385
- [6] Y. Aritomo, T. Wada, M. Ohta, Y. Abe, Phys. Rev. C 59 (1999) 796
- [7] G. G. Adamjan, N. V. Antonenko, W. Scheid, and V. V. Volkov, Nucl. Phys. A627 (1997) 361
- [8] G.F.Bertsch, S.D.Gupta, Phys. Rep. (Review Section of Phys. Lett.) 160, No.4 (1988) 189
- [9] C.Hartnack, Li Zhuxia, etc. Nucl. Phys. A495 (1989) 303
- [10] Toshiki Maruyama, Koji Niita, and Akira Iwamoto, Phys. Rev. C53 (1996)297
- [11] J.A.Maruhn, R.Y.Gusson, Nucl. Phys. A270 (1976) 471
- [12] K.T.R.Davies, H.T.Feldmeier, H.Flocard, M.S.Weiss, Phys. Rev. C18 (1978) 2631
- [13] H.Felmeier and J.Schnack, Prog.Part.Nucl.Phys. 39 (1997) 393
- [14] H.Kruse, B.V.Jacak and H.Stocker, Phys.Rev. Lett. **54** (1985) 289
- [15] E.A. Uehling and G.E. Uhlenbeck, Phys. Rev. 43 (1933) 552
- [16] G.F.Bertsch, H.Kruse and S.D.Gupta, Phys. Rev. C29 (1984) 673
- [17] R.D. Williams and S.E. Koonin, Nucl. Phys. A435 (1985)844
- [18] Akrira Ono, Hisashi Horiuchi, Phys. Rev. C53 (1996) 2958
- [19] 丁大钊,陈永寿、张焕乔、原子核物理进展、上海科学技术出版社(1997)316
- [20] J. Aichelin, Phys. Rep. 202, (1991)233
- [21] A.Ono, H.Horiuchi, Toshiki Maruyama, and A.Ohnishi, Phys.Rev.Lett. **68**(1992)2898; Y.Kanada-En'yo and H.Horiuchi, Phys.Rev.C**52**(1995)647
- [22] David H.Boal and James N.Glosi, Quasiparticle model for nuclear dynamics studies: Ground-state properties, Phys.Rev.C38, (1988) 1870

- [23] C.Dorso, J.Randrup, Phys. Lett. B215 (1987) 611; Phys. Lett. B232 (1989) 29
- [24] A.S. Botvina et al., R. Donangelo, and K. Sneppen, Nucl. Phys. **A475** (1987) 663, A.S. Botvina, A.S. Iljinov, and I.N. Mishustin, Nucl. Phys. **A507**, (1990). 649
- [25] D. Vautherin and D.M.Brink, Phys. Rev. C5 (1972) 626
- [26] T.H.R.Skyrme, Nucl. Phys. 9(1959)615
- [27] M.Beiner, H.Flocard, Nguyen Van Giai and P. Quentin, Nucl. Phys. A238(1975)29
- [28] E.Chabanat, P. Bonche, P. Haensel, J.Meyer and R.Schaeffer, Nucl. Phys. A627 (1997)710; Nucl. Phys. A635 (1998) 231
- [29] J.Bartel and K.Bencheikh, Eur. Phys. J, A14 (2002) 179
- [30] H.Krivine, J.Treiner and O.Bohigas, Nucl. Phys. A366 (1980)155
- [31] A.Bohr and B.R.Mottelson, Nuclear Structure, Vol.II, W.A.Benjiamin, Inc., Reading, Mass., (1975) pp.137-152
- [33] 李庆峰, 重离子碰撞中的同位旋及近阈 K 产生(博士毕业论文),(2002) pp.13
- [34] Ning Wang, Zhuxia Li, Xizhen Wu, An Improved Quantum Molecular Dynamics Model and its Applications to Fusion Reaction near Barrier, Phys.Rev.C65 (2002),064608
- [35] K.Hagino, M.Dasgupta, etc., arXiv:nucl-th/0110065
- [36] Toshiki Maruyama, Koji Niita, and Akira Iwamoto, Extenstion of quantum molecular dynamics and its application to heavy-ion collisions, Phys.Rev.C53, (1996)297
- [37] Massimo Papa, Toshiki Maruyama, and Aldo Bonasera, Phys.Rev.C64 (2001) 024612
- [38][Hart98] Ch.Hartnack, Rajeev k. Puri, and J. Aichlin, Eur. Phys. J. A1 (1998) 151
- [39] Akira Ono, S.Hudan, A.Chbihi, J.D.Frankland, Phys.Rev. C66 (2002) 014603
- [40] P.Danielewicz, D.Kiderlen, arXiv:nucl-th/9712077
- [41] Toshiki Maruyama, Koji Niita, and Akira Iwamoto, Phys.Rev.C53 (1996) 297
- [42] Toshiki Maruyama, Aldo Bonasera, Massimo Papa, Sstoshi Chiba, Eur.Phys.J. **A14** (2002) 191
- [43] M. A. Preston and R. K. Bhaduri, Structure of the Nucleus (Addison-Wesley, Reading, MA), 1975, 10
- [44] J.Bartel, Ph.Quentin, M.Brack, C.Guet and H.B. Hakansson, Nucl. Phys. A386 (1982)

79

- [45][liba02] Li Bao-An, Nucl.Phys.A708(2002)365
- [46][liqf02] Qingfeng Li and Zhuxiz Li, Mod.Phys.Lett. A17 (2002) 275
- [47][liu02] T.X.Liu, X.D. Liu, etc. arXiv:nucl-ex/0210004
- [48] K.Hagel et al., Phys.Rev.C50, (1994) 2017
- [49] N.Bellaize, et al., Nucl. Phys. A709 (2002) 367-391
- [50] S.Hudan, A.Chbihi et al., Characteristics of the fragments produced in central collisions of 129Xe+ natSn from 32 to 50 AmeV, ArXiv:nucl-ex/0210029 (submitted to Phys. Rev. C)
- [51] P.Desequelles et al., Nucl. Phys. A633, (1998)547
- [52] W.D.Myers and W.J.Swiatecki, Phys.Rev.C62 (2000) 044610
- [53] B.Nerlo-Plmorska and K.Pomorski, Z.Phys.A348 (1994)169; B.Nerlo-Plmorska and B. Mach, At. Data Nucl.Data Tables 60 (1995)287
- [54] V.Yu.Denisov, W.Norenberg, Eur.Phys.J. A15 (2002) 375-388
- [55] V. Weisskopf, Phys.Rev.52, (1937)295
- [56] S.Gasiorowicz, Quntaum Physics, Wiley, New York (1974)
- [57] C.Y. Wong, Phys.Rev.Lett.31,(1973)766
- [58] D.L.Hill, J.A. Wheeler, Phys.Rev.89, (1953)1102
- [59] W. Norenberg, H.A. Weidenmuller, 重离子碰撞理论导论, 原子能院出版社, 1982。
- [60] N. Rowley, G. R.Satchler and P.H.Stelson, Phys.Lett.**B254** (1991)25
- [61] M.Trotta, A.M.Stefanini, et al, Phys.Rev.C65 (2001)011601
- [62] H. Timmers, D. Ackermann, etc., Nucl. Phys. A633, (1998) 421
- [63] M.Beckerman, Subbarrier Fusion of Atomic Nuclei, Phys.Rep.(Review section of Phys.Lett.)129, No.3 (1985)145-223
- [64]C.R.Morton,A.C.Berriman,M.Dasgupta,D.J.Hinde, and J.O.Newton, Coupled-channels Analysis of the ¹⁶O+²⁰⁸Pb Fusion Barrier Distribution, Phys.Rev.C60 (1999) 044604
- [65] A.Hukherjee, M.Dasgupta, etc. Phys. Rev. C 66 (2002)034607
- [66] J.O.Newton, C.R. Morton, etc. Phys.Rev.C64 (2001)064608

- [67] H. Timmers, Expressions of Inner Freedom, A Thesis for PhD, (1996) p.59
- [68] H.J.Krappe et al., Z. Phys. A314 (1983) 23
- [69] A.K.Mohanty, S.K.Kataria, Pramana 43 No. 4(1994) 319
- [70] Stelson P H, Phys.Lett., **B205** (1988) 190
- [71] Wang Ning, Wu Xizhen and Li Zhuxia, The development of neck in fusion reaction 40 Ca+ 90,96 Zr, Chin.Phys.Lett. (2003)
- [72] Ning Wang, Xizhen Wu, Zhuxia Li, Dynamic Study of fusion Reactions for ^{40,48}Ca+^{90, 96}Zr around the Coulomb Barrier, Phys.Rev.**C67** (2003),024604
- [73] Veselsky M, Ibbotson RW, Lafores R, etc. Phys.Rev., 2000, C62: 041605; Nucl.Phys., 2001, A681: 317
- [74]A.Gobbi, Heavy Ion Fusion Reactions, Proceedings of the TSUKUBA INTERNATIONAL SYMPOSIUM, World Scientific, (1984) p.188 。
- [75] V.N.Knodratyev, A.Bonasera, and A.Iwamoto, Phys.Rev.C61(2000)044613
- [76] A.K.Jain and N.Sharma, Phys.Rev.C24, (1981)1066
- [77] A.Diaz-Torres, G.G.Adamian, N.V.Antonenki, W.Scheid, Melting or nucleon transfer in fusion of heavy nuclei?, Phys.Lett.B481 (2000)228-235
- [78] V.I.Zagrebaev, Journal of Nuclear and Radiochemical Sicences, No.3, Vol.1 (2002) 13
- [79] N. Rowley, H. Timmers, J.R. Leigh, M. Dasgupta, D.J. Hinde, J.C. Mein, C.R. Morton & J.O. Newton, Barrier distribution from elastic scattering, Phys. Lett. B373, (1996)pp. 23-29
- [80] C.Titin-Schnaider and P.Quentin, Phys. Lett. **B49** (1974) 397
- [81] T.J.Schuck, H.Timmers, M.Dasgupta, Nucl. Phys. A712 (2002) 14-22
- [82] J.D. Bierman, P. Chan, M.P. Kelly, J.F. Liang, A.A. Sonzogni and R. Vandenbosch Fusion reactions for ⁴⁰Ca + ^{46,48,50}Ti at energies close to the Coulomb barrier Nuclear ,Physics Laboratory Annual Report, University of Washington (1995) pp.19.
- [83] A.M.Stefanini, L.Corradi, Near Barrier Fusion of ⁴⁶Ti+⁴⁶Ti, LNL Annual Report (2000) pp.42
- [84] J.F.Liang, D.Shapira, et al., Enhanced Fusion-Evaporation Cross Sections in

Neutron-Rich ¹³²Sn on ⁶⁴Ni, arXiv:nucl-ex/0304002

[85] S.Raman et al., At. Data Nucl. Tables **36** (1987) 1

附录(Appendix)

§附录 1: QMD 模型中的 Wigner 变换

在 QMD 模型中,单粒子波函数表示为,

$$\phi_i(\vec{r},t) = \frac{1}{(2\pi L)^{3/4}} \exp\left(\frac{-(\vec{r}-\vec{r}')^2}{4L}\right) \exp\left(\frac{i\vec{p}_i \cdot \vec{r}}{\hbar}\right) \tag{A1.1}$$

Wigner 变换实质上属于一种 Fourier 变换,是在 $\hbar \to 0$ 的近似下,将量子力学的波函数转化成经典力学中的相空间密度分布的一种方法。

$$f(r,p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int \exp\left(\frac{-i\vec{r}_{12} \cdot \vec{p}_{12}}{\hbar}\right) \phi_i^* \phi_i d\vec{r}_{12}$$
(A1.2)

则:
$$\vec{r} = \vec{R} + \frac{\vec{\xi}}{2}$$
, $\vec{r}' = \vec{R} - \frac{\vec{\xi}}{2}$,

$$(\vec{r} - \vec{r_i})^2 + (\vec{r}' - \vec{r_i})^2 = 2(\vec{R} - \vec{r_i})^2 + \vec{\xi}^2/2$$
(A1.4)

$$f(r,p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \frac{1}{(2\pi L)^{3/2}} \int \exp\left(\frac{-i\bar{\xi} \cdot \bar{p}_{12}}{\hbar}\right) \exp\left(\frac{-2(\bar{R} - \bar{r}_i)^2 + \bar{\xi}^2/2}{4L}\right) \exp\left(\frac{i\bar{p}_i \cdot \bar{\xi}}{\hbar}\right) d\bar{\xi}$$
(A1.5)

(A1.5)式中的积分项化为:

$$\int \exp\left(\frac{-i\vec{\xi}\cdot(\vec{p}_{12}-\vec{p}_{i})}{\hbar}\right) \exp\left(\frac{-(\vec{R}-\vec{r}_{i})^{2}}{2L}\right) \exp\left(\frac{-\xi^{2}}{8L}\right) d\vec{\xi}$$

$$= \exp\left(\frac{-(\vec{R}-\vec{r}_{i})^{2}}{2L}\right) \int \exp\left(-\frac{1}{8L}\left(\vec{\xi}+(\vec{p}_{12}-\vec{p}_{i})\frac{i\cdot 4L}{\hbar}\right)^{2}\right) \exp\left(\frac{1}{8L}\left((\vec{p}_{12}-\vec{p}_{i})\frac{i\cdot 4L}{\hbar}\right)^{2}\right) d\vec{\xi}$$

$$= \exp\left(\frac{-(\vec{R}-\vec{r}_{i})^{2}}{2L}\right) \exp\left(-\frac{2L}{\hbar^{2}}(\vec{p}_{12}-\vec{p}_{i})^{2}\right) \int \exp\left(-\frac{1}{8L}\left(\vec{\xi}+(\vec{p}_{12}-\vec{p}_{i})\frac{i\cdot 4L}{\hbar}\right)^{2}\right) d\vec{\xi}$$
(A1.6)

运用:
$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-ax^2) dx = \sqrt{\pi/a}$$

上式中的积分项为: $(8\pi L)^{3/2}$

所以:

$$f(r,p) = \frac{1}{(\pi\hbar)^3} \exp\left(\frac{-(\vec{R} - \vec{r_i})^2}{2L}\right) \exp\left(\frac{-(\vec{P} - \vec{p_i})^2 \cdot 2L}{\hbar^2}\right)$$
(A1.7)

替换 $\bar{R} \to \bar{r}, \bar{P} \to \bar{p}$ 即可得到:

$$f(r,p) = \frac{1}{(\pi\hbar)^3} \exp\left(\frac{-(\vec{r} - \vec{r_i})^2}{2L}\right) \exp\left(\frac{-(\vec{p} - \vec{p_i})^2 \cdot 2L}{\hbar^2}\right)$$
(A1.8)

$$\diamondsuit$$
: $L = \sigma_r^2$, $\sigma_r \cdot \sigma_p = \hbar/2$.

 σ_r, σ_p 分别为粒子在坐标空间和动量空间的波包宽度。

上式可化为:

$$f(r,p) = \frac{1}{(\pi\hbar)^3} \exp\left(\frac{-(\vec{r} - \vec{r}_i)^2}{2\sigma_r^2}\right) \exp\left(\frac{-(\vec{p} - \vec{p}_i)^2}{2\sigma_p^2}\right)$$
(A1.9)

体系的密度分布和动量分布可对相空间密度积分得到:

$$\rho(\vec{r}) = \int f(\vec{r}, \vec{p}) d\vec{p} = \frac{1}{(2\pi \sigma_r^2)^{3/2}} \sum_i \exp\left[-\frac{(\vec{r} - \vec{r}_i)^2}{2\sigma_r^2}\right], \tag{A1.10}$$

$$g(\vec{p}) = \int f(\vec{r}, \vec{p}) d\vec{r} = \frac{1}{(2\pi \sigma_n)^{3/2}} \sum_{i} \exp\left[-\frac{(\vec{p} - \vec{p}_i)^2}{2\sigma_n^2}\right], \tag{A1.11}$$

坐标空间和动量空间的波包宽度满足最小测不准关系:

$$\sigma_r \cdot \sigma_p = \frac{\hbar}{2} \circ$$

而且体系的粒子数要守恒:

$$\iint f(\vec{r}, \vec{p}, t) d\vec{p} d\vec{r} = A \tag{A1.12}$$

其中, A为系统的粒子数目。

§附录 2: 核子的平均密度

在 ImQMD 模型中,系统哈密顿量的计算频繁地用到体系的平均密度 $\langle \rho \rangle = \sum_{ij} \rho_{ij}$ 。

$$\rho_{ij} = \int \rho_{i}(\vec{r})\rho_{j}(\vec{r})d\vec{r}$$

$$= \frac{1}{(2\pi L_{i})^{3/2}} \frac{1}{(2\pi L_{j})^{3/2}} \int \exp\left(-\frac{(\vec{r} - \vec{r}_{i})^{2}}{2L_{i}}\right) \exp\left(-\frac{(\vec{r} - \vec{r}_{j})^{2}}{2L_{j}}\right) d\vec{r}$$
(A2.1)

这里 $\rho_i(\bar{r})$ 为单粒子的密度分布

$$\rho_i(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi L_i)^{3/2}} \exp\left(-\frac{(\vec{r} - \vec{r_i})^2}{2L_i}\right), \, \not \perp + L_i = \sigma_{r_i}^2 \, . \tag{A2.2}$$

 ρ_{ii} 中的积分项可以化为,

$$I = \int \exp\left(-\frac{(L_{i} + L_{j})r^{2} + 2(L_{i}\vec{r}_{j} + L_{j}\vec{r}_{i}) \cdot \vec{r} - (L_{i}r_{j}^{2} + L_{j}r_{i}^{2})}{2L_{i}L_{j}}\right) d\vec{r}$$

$$= \exp\left(-\frac{(\vec{r}_{i} - \vec{r}_{j})^{2}}{2(L_{i} + L_{j})}\right) \int \exp\left\{-\left(r - \frac{L_{i}\vec{r}_{j} + L_{j}\vec{r}_{i}}{L_{i} + L_{j}}\right)^{2} \frac{L_{i} + L_{j}}{2L_{i}L_{j}}\right\} d\vec{r}$$
(A2.3)

最后得到,

$$\rho_{ij} = \frac{1}{(2\pi(L_i + L_i))^{3/2}} \exp\left(-\frac{(\vec{r}_i - \vec{r}_j)^2}{2(L_i + L_i)}\right) = \frac{1}{(4\pi \bar{L})^{3/2}} \exp\left(-\frac{(\vec{r}_i - \vec{r}_j)^2}{4\bar{L}}\right)$$
(A2.4)

其中, $\overline{L} = (L_i + L_j)/2$ 。

§附录 3: ImQMD 模型的相互作用势能

ImQMD 模型的相互作用势能可以表示为,

$$U = \int H(\vec{r})d\vec{r} = U_{loc} + U_{surf} + U_{sym} + U_{coul}$$
(A3.1)

其中, $H(\vec{r})$ 表示势能密度。第一项表示 Skyrme 相互作用的两体相和三体项,我们称为短程项,第二项表示表面能项,第三项表示对称能项,最后一项为库仑相互作用势能。它们各自的具体形式为:

(1) Skyrme 短程势能:

$$U_{loc}^{(1)} = \frac{1}{2} \frac{\alpha}{\rho_0} \int \rho(\vec{r}) \rho(\vec{r}) d\vec{r} = \frac{\alpha}{2} \sum_{i,j \neq i} \frac{\rho_{ij}}{\rho_0}$$
(A3.2)

其中:
$$\rho_{ij} = \frac{1}{(4\pi L)^{3/2}} \exp\left(-\frac{(\vec{r}_i - \vec{r}_j)^2}{4L}\right)$$
 (A3.3)

$$U_{loc} = U_{loc}^{(1)} + U_{loc}^{(2)} = \frac{\alpha}{2} \sum_{i,j \neq i} \frac{\rho_{ij}}{\rho_0} + \frac{\beta}{\gamma + 1} \sum_{i,j \neq i} \left(\frac{\rho_{ij}}{\rho_0} \right)^{\gamma} = \frac{1}{2} \frac{\alpha}{\rho_0} \frac{1}{\left(4\pi L\right)^{3/2}} \sum_{i,j \neq i} \exp\left(-\frac{(\vec{r}_i - \vec{r}_j)^2}{4L} \right) + \frac{1}{3} \frac{\beta}{\rho_0^2} \frac{1}{\left(4\pi L\right)^3} \sum_{i} \left(\sum_{j} \exp\left(-\frac{(\vec{r}_i - \vec{r}_j)^2}{4L} \right) \cdot \sum_{m} \exp\left(-\frac{(\vec{r}_i - \vec{r}_m)^2}{4L} \right) \right)$$
(A3.4)

(2) 对称能:

$$U_{sym} = \frac{1}{2} \frac{c_s}{\rho_0} \int \bar{\rho}^2(\bar{r}) \delta^2 d\bar{r} = \frac{1}{2} \frac{c_s}{\rho_0} \sum_{i \ i \neq i} t_{iz} t_{jz} \rho_{ij}$$
(A3.5)

其中:
$$\delta = \frac{\rho_n - \rho_p}{\rho_n + \rho_p}$$
, $t_{iz} = \{ \begin{cases} 1 & proton \\ -1 & neutron \end{cases}$

(3) 表面能:

$$U_{surf} = \int (\nabla_{r_i} \rho_i) \cdot (\nabla_{r_j} \rho_j) d\vec{r} = \sum_{i,j \neq i} \left(\frac{3}{2L} - \left(\frac{r_{ij}}{2L} \right)^2 \right) \rho_{ij}$$
(A3.6)

推导:

$$U_{surf} = \int \frac{1}{L^2} \frac{1}{(2\pi L)^3} (\vec{r} - \vec{r}_i) (\vec{r} - \vec{r}_j) \exp\left(\frac{-(\vec{r} - \vec{r}_i)^2}{2L}\right) \exp\left(\frac{-(\vec{r} - \vec{r}_j)^2}{2L}\right) d\vec{r}$$
 (A3.7)

$$= \frac{1}{L^2} \frac{1}{(2\pi L)^3} \int \left(\left(r - \frac{r_i + r_j}{2} \right)^2 - \frac{1}{4} (\vec{r}_i - \vec{r}_j)^2 \right) \exp \left(- \left(\left(r - \frac{r_i + r_j}{2} \right)^2 + \frac{1}{4} (\vec{r}_i - \vec{r}_j)^2 \right) / L \right) d\vec{r}$$

$$= \frac{1}{L^2} \frac{1}{(2\pi L)^3} \int (a-b) \exp(-(a+b)/L) d\vec{r}$$
 (A3.9)

$$= \frac{1}{L^2} \frac{1}{(2\pi L)^3} \exp(-b/L) \left\{ \int a \exp(-a/L) d\vec{r} + \int -b \exp(-a/L) d\vec{r} \right\}$$
(A3.10)

前一积分:
$$\int_{-\infty}^{\infty} (x^2 + y^2 + z^2) \exp(-(x^2 + y^2 + z^2)/L) dx dy dz = \frac{3}{2} L^{5/2} \pi^{3/2}$$
 (A3.11)

后一积分:
$$\int_{-\infty}^{\infty} -b \exp(-(x^2 + y^2 + z^2)/L) dx dy dz = -\frac{1}{4} (\bar{r}_i - \bar{r}_j)^2 L^{3/2} \pi^{3/2}$$
 (A3.12)

所以:
$$U_{surf} = \sum_{i,j\neq i} \left(\frac{3}{2L} - \left(\frac{r_{ij}}{2L}\right)^2\right) \rho_{ij}$$
 (A3.13)

(4) 库仑能:

$$U_{coul} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \int \rho_i(\vec{r}) \frac{e^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \rho_j(\vec{r}') d\vec{r} d\vec{r}' = \frac{1.44}{2} \sum_{i \neq j} \frac{1}{r_{ij}} erf\left(\frac{r_{ij}}{\sqrt{4L}}\right)$$
(A3.14)

$$U_{yuk} = \frac{c_y}{2} \sum_{i \neq j} \frac{1}{r_{ij}} \exp(\gamma^2 L) \left\{ \exp(-\gamma r_{ij}) erfc \left(\sqrt{L}\gamma - \frac{r_{ij}}{\sqrt{4L}} \right) - \exp(\gamma r_{ij}) erfc \left(\sqrt{L}\gamma + \frac{r_{ij}}{\sqrt{4L}} \right) \right\}$$
(A3.15)

其中: $r_{ii} = |\vec{r}_i - \vec{r}_i|$

erf(x)和 erfc(x)为误差函数和余误差函数:

$$erf(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-u^2} du$$
, $erfc(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^\infty e^{-u^2} du$ (A3.16)

它们满足: erf(x) + erfc(x) = 1

并且,对库仑势 i,j 都必须是质子。

§附录 4: ImQMD 中相互作用势能对 r 的微分

在求解正则方程中, $\dot{\bar{p}}_i = -\frac{\partial H}{\partial \bar{r}_i}$,需要求解相互作用势能对 r 的微分。

(1) 库仑项:

$$U_{coul} = \frac{1.44}{2} \sum_{i \neq i} \frac{1}{r_{ii}} erf\left(\frac{r_{ij}}{\sqrt{4L}}\right)$$
(A4.1)

$$\frac{\partial U_{coul}}{\partial \vec{r}_{k}} = \left\{ -\frac{1}{r_{ij}^{2}} + \frac{r_{ij} \exp\left(-r_{ij}^{2}/4L\right)}{r_{ij}^{2}\sqrt{\pi L}} + \frac{erfc\left(r_{ij}/\sqrt{4L}\right)}{r_{ij}^{2}} \right\} \cdot \frac{\vec{r}_{ij}}{r_{ij}}$$

$$= \left\{ \frac{\exp\left(-r^{2}/4L\right)}{r\sqrt{\pi L}} - \frac{1}{r^{2}}erf\left(r/\sqrt{4L}\right) \right\} \cdot \frac{\vec{r}}{r}$$
(A4.2)

利用:
$$\partial_{\mathbf{r}}(ab) = \partial_{\mathbf{r}}ab + a\partial_{\mathbf{r}}b$$
 (A4.3)

$$\frac{\partial}{\partial r_{k}} \frac{1}{|\vec{r}_{i} - \vec{r}_{j}|} = \frac{\partial}{\partial r_{k}} \frac{1}{|\vec{r}_{k} - \vec{r}_{j}|} + \frac{\partial}{\partial r_{k}} \frac{1}{|\vec{r}_{i} - \vec{r}_{k}|} = \frac{-\vec{n}_{i}}{r_{ij}^{2}} + \frac{\vec{n}_{j}}{r_{ij}^{2}} = \frac{-\vec{n}_{ij}}{r_{ij}^{2}} = \frac{-\vec{r}_{ij}}{r_{ij}^{3}}$$
(A4.4)

其中, \vec{n}_i 是 \vec{r}_i 的单位矢量(方向), \vec{n}_{ii} 是 $\vec{r}_i - \vec{r}_i$ 的单位矢量(方向)。

以及:
$$\partial_x \operatorname{erfc}(u(x)) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \exp(-u^2(x)) \cdot \frac{d}{dx}(u(x))$$
 (A4.5)

便可推导。

(2) Skyrme 短程项:

$$U_{sky} = U_{sky}^{(1)} + U_{sky}^{(2)} = \frac{1}{2} \frac{\alpha}{\rho_0} \frac{1}{(4\pi L)^{3/2}} \sum_{i,j\neq i} \exp\left(-\frac{(\vec{r}_i - \vec{r}_j)^2}{4L}\right)$$

$$+ \frac{1}{3} \frac{\beta}{\rho_0^2} \frac{1}{(4\pi L)^3} \sum_i \left(\sum_j \exp\left(-\frac{(\vec{r}_i - \vec{r}_j)^2}{4L}\right) \cdot \sum_m \exp\left(-\frac{(\vec{r}_i - \vec{r}_m)^2}{4L}\right)\right)$$

$$\Leftrightarrow : Y_1 = \sum_{i,j\neq i} \exp\left(-\frac{(\vec{r}_i - \vec{r}_j)^2}{4L}\right), \quad Y_2 = \sum_i \left(\sum_j \exp\left(-\frac{(\vec{r}_i - \vec{r}_j)^2}{4L}\right) \cdot \sum_m \exp\left(-\frac{(\vec{r}_i - \vec{r}_m)^2}{4L}\right)\right)$$

$$\frac{\partial Y_1}{\partial \vec{r}_k} = \sum_{k,j\neq k} \frac{-2}{4L} (\vec{r}_k - \vec{r}_j) \exp\left(-\frac{(\vec{r}_k - \vec{r}_j)^2}{4L}\right) + \sum_{i,k\neq i} \frac{2}{4L} (\vec{r}_i - \vec{r}_k) \exp\left(-\frac{(\vec{r}_i - \vec{r}_k)^2}{4L}\right)$$

$$= \sum_{k,j\neq k} \frac{-1}{L} (\vec{r}_k - \vec{r}_j) \exp\left(-\frac{(\vec{r}_k - \vec{r}_j)^2}{4L}\right)$$

$$(A4.7)$$

同样:(引用上面的结果)

$$\frac{\partial Y_2}{\partial \vec{r}_k} = \sum_{k,j \neq k} \frac{-1}{L} (\vec{r}_k - \vec{r}_j) \exp\left(-\frac{(\vec{r}_k - \vec{r}_j)^2}{4L}\right) \cdot \left\{ \sum_m \exp\left(-\frac{(\vec{r}_k - \vec{r}_m)^2}{4L}\right) + \sum_m \exp\left(-\frac{(\vec{r}_j - \vec{r}_m)^2}{4L}\right) \right\}$$
(A4.8)

对称能项对坐标的微分可以参照 Skyrme 短程项中的两体项。

(3) 表面能项:

表面能项为,

$$U_{surf} = \sum_{i,j\neq i} \left(\frac{3}{2L} - \left(\frac{r_{ij}}{2L} \right)^2 \right) \rho_{ij} , \qquad (A4.9)$$

其对坐标的微分可以写为,

$$\frac{\partial U_{surf}}{\partial \vec{r}_k} = \sum_{i,j \neq i} -\left(\frac{5}{2L} - \left(\frac{r_{ij}}{2L}\right)^2\right) \frac{\vec{r}_{ij}}{L} \rho_{ij} \quad (A4.10)$$

§附录 5: QMD 中的动能项

基于相空间密度

$$f(r,p) = \frac{1}{(\pi\hbar)^3} \exp\left(\frac{-(\vec{r} - \vec{r}_i)^2}{2L}\right) \exp\left(\frac{-(\vec{p} - \vec{p}_i)^2 \cdot 2L}{\hbar^2}\right),$$
(A5.1)

系统的动能可以表示为,

$$T = \langle \psi \mid \hat{T} \mid \psi \rangle = \int f(\vec{r}, \vec{p}) \frac{p^2}{2m} d\vec{r} d\vec{p} = \int g(\vec{p}) \frac{p^2}{2m} d\vec{p} = \frac{\hbar^2}{2m} \int \tau d\vec{r}$$
 (A5.2)

$$T = \frac{1}{2m} \sum_{i} \int \left(\frac{2L}{\pi \hbar^2}\right)^{3/2} p^2 \exp\left(-(\vec{p} - \vec{p}_i)^2 \cdot 2L/\hbar^2\right) d\vec{p} . \tag{A5.3}$$

 $\Leftrightarrow \alpha = 2L/\hbar^2$

$$T = \frac{1}{2m} \left(\frac{2L}{\pi \hbar^2} \right)^{3/2} \sum_{i} \int (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) \exp(-(p_x - p_{ix})^2 \cdot \alpha) dp_x$$
 (A5.4)

$$\times \exp(-(p_y - p_{iy})^2 \cdot \alpha) dp_y \cdot \exp(-(p_z - p_{iz})^2 \cdot \alpha) dp_z$$

$$= \frac{1}{2m} \left(\frac{2L}{\pi \hbar^2} \right)^{3/2} \sum_{i} \{ \int p_x^2 \exp(-(p_x - p_{ix})^2 \cdot \alpha) dp_x \}$$

$$\cdot \int \exp(-(p_y - p_{iy})^2 \cdot \alpha) dp_y \cdot \int \exp(-(p_z - p_{iz})^2 \cdot \alpha) dp_z\} + \{y\} + \{z\}$$

利用积分:
$$\int_0^\infty x^{2n} \exp(-\alpha x^2) dx = \frac{(2n-1)!!}{2^{n+1}\alpha^n} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$$
 (A5.5)

$$\{x\} = \frac{\pi}{\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} ((p_x - p_{ix})^2 + 2p_i(p_x - p_{ix}) + p_{ix}^2) \exp(-(p_x - p_{ix})^2 \cdot \alpha) d(p_x - p_{ix})$$

$$=\frac{1}{2\alpha}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}+p_{ix}^2\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}\tag{A5.6}$$

所以:

$$T = \frac{1}{2m} \left(\frac{2L}{\pi \hbar^2} \right)^{3/2} \left(\frac{\pi}{\alpha} \right)^{3/2} \sum_{i} \left(\frac{3}{2\alpha} + (p_{ix}^2 + p_{iy}^2 + p_{iz}^2) \right) = \frac{1}{2m} \sum_{i} \left(\frac{3}{2\alpha} + p_i^2 \right)$$
(A5.7)

$$T = \frac{1}{2m} \sum_{i} \left(p_i^2 + \frac{3}{2} \hbar^2 / 2L \right)$$
 (A5.8)

其中第二项是高斯波包宽度对动能的贡献, 坐标空间的波包宽度 L 越大, 由最小测不准关系, 我们知道动量空间的波包宽度越小, 从而对动能的贡献也越小。

博士期间发表的文章

- 1. Ning Wang, Zhuxia Li, Xizhen Wu, An Improved Quantum Molecular Dynamics Model and its Applications to Fusion Reaction near Barrier, Phys.Rev.C65 (2002) 064608
- Ning Wang, Xizhen Wu, Zhuxia Li, Dynamic Study of fusion Reactions for ^{40,48}Ca+^{90,48}Ca+^{90,48}Zr around the Coulomb Barrier, Phys.Rev.C67 (2003) 024604
- 3. Wang Ning, Wu Xizhen and Li Zhuxia, The development of neck in fusion reaction $^{40}\text{Ca} + ^{90,\,96}\text{Zr}$, Chin.Phys.Lett. Vol.20. No.9 (2003) 1466
- 4、王宁,李祝霞,吴锡真, 40,48 Ca+ 90,96 Zr 近垒熔合反应的动力学研究,原子核物理 评论,Vol. **20**, No. 2(2003)121-131
- 5. Wu Xizhen, Li Zhuxia, Wang Ning, J.A.Maruhn, Statistical behaviors of quantum spectra in superheavy nuclei, Commun.Theor.Phys.**39** (2003) 597-602
- 6、王宁, 李祝霞, 用 QMD 模型研究晕核 ¹¹Be+²⁰⁸Pb 的熔合机制, 高能物理与核物理, Vol. **25**, No. **5** (2001) 399-404
- 7. Wang Ning, Li Zhuxia, Wu Xizhen, Wang Nan, Sun Xiuquan, One- and Two-Neutron Transfer Reactions in ¹¹Be+²⁰⁸Pb and Mechanism of Lowering of Fusion Barrier, Chin.Phys.Lett. Vol.**17**, No.**11** (2000) 789
- 8. Wang Nan, Li Zhuxia, Wu Xizhen, Wang Ning, Zhuo Yizhong, Sun Xiuquan, Behavior of the Lyapunov Exponent and Phase Transition in Nuclei, Chin.Phys.Lett. Vol.17, No.10 (2000) 711

致 谢

首先感谢我的导师李祝霞研究员多年来对我悉心的指导与无微不至的关怀。从硕士阶段到博士阶段李老师一直对我不断地教导与培养,从专业知识的拓宽到独立思考能力、写作与交流能力的锻炼和提高,从敬业精神与科学严谨态度的培养到生活上点点滴滴方方面面的照顾,都浸透着李老师辛勤的汗水与爱的付出。在此,谨向我的导师表示深深的祝福与由衷的感谢!

同一个研究室的吴锡真、冯仁发、施义晋、张锡珍、卓益忠、陈永寿等老师都指导过、帮助过我。吴锡真老师的平易近人、幽默开朗的性格、渊博的知识以及严谨的治学态度给我留下了很好的印象,而且吴老师对我学业的提高也付出了艰辛的劳动。张锡珍老师在一些专业知识方面给我提供过耐心的指导;冯仁发、施义晋等老师在生活上、科研上也都给我提供了不少方便。此外,刘玉红大姐开朗大方、乐于助人的性格给我留下难以忘怀的美好记忆,刘姐在生活上给了我很多帮助与关怀。在此我向各位老师表示衷心的感谢与真诚的祝福!祝愿各位老师身体健康,工作顺利!

博士期间我结识了很多同学朋友、师兄师弟、师姐师妹。他们给我生活带来了很多色彩,留下了非常美好的回忆。李庆峰师兄,无论是在学习上还是生活上都给我提供了不少帮助。张英逊、田俊龙两位师弟也给过我很多帮助,田俊龙师弟还帮我进行了部分资料的查询。刘敏师妹给我生活带来了很多欢乐,学习和生活上也给了我很多照顾与关心。我很高兴拥有这份情谊!真心地祝福他们生活快乐、学业有成!还有11室的很多同事与同学:沈彩万、高早春、吴开谡、曹天光、曹泽新、刘玲、曹李刚、陈永静、赵耀林、马云志、冯娟以及很多以前的老师、同学与朋友,他们在学业与生活上都给我提供过大量的帮助与支持。我非常高兴认识他们,祝愿他们天天开心、一切顺利!

同时我也要向院领导、所领导、研究生科的各位老师以及院内 BBS 的各位网友等表示最诚挚的谢意。他们为我攻读博士提供了很好的条件与融洽的氛围。

还有日本的 Toshiki Maruyama 博士、德国的 Michael Knaup 博士以及 V.Yu.Denisov 博士等也都在科研上帮助过我,我非常感谢他们的无私与热心!

最后我要深深地感谢我的父母及家人。感谢父母对我的养育、关爱与教导,感谢 姐姐弟弟以及亲戚朋友对我的鼓励与期盼,没有他们,就没有今天的我!祝愿我的父 母以及家人身体永远健康!