

文章编号: 1007-4627(2015)01-0024-06

利用 EQMD 模型对原子核基态性质的研究

王闪闪^{1, 2}, 曹喜光¹, 张同林^{1, 2}, 王宏伟¹, 张国强¹, 方德清¹,
钟晨¹, 马春旺², 何万兵¹, 马余刚¹

(1. 中国科学院上海应用物理研究所, 上海 201800;
2. 河南师范大学, 河南 新乡 453007)

摘要: 和中高能重离子碰撞相比, 低能重离子碰撞中的弹靶结构效应起着更为重要的作用, 因此要求输运模型能够对核的基态性质给出更合理的描述。利用扩展的量子分子动力学 (EQMD) 模型计算了从轻到重不同质量区不同同位素链的结合能及方均根半径等基态性质, 并与实验值进行了比较, 发现 EQMD 模型不仅能够非常好地重现稳定核的基态性质, 而且能够合理地描述远离 β 稳定线核的基态结合能, 因此相比于 IQMD, CoMD, ImQMD 等其他 QMD 版本, EQMD 模型对初始化核稳定性的描述也有了极大改善。这为利用微观动力学模型研究弱束缚核在低能区引起的弹性散射、融合、转移及破裂等反应机制提供了基础。

关键词: 量子分子动力学; 低能重离子碰撞; 核基态性质

中图分类号: O571.21; O571.42⁺3; O571.6 **文献标志码:** A **DOI:** 10.11804/NuclPhysRev.32.01.024

1 引言

重离子碰撞是一个复杂的时间依赖的核多体问题, 由于核多体理论的复杂性及对核力认识的不足, 同时又受限于有限的计算资源, 为了从重离子碰撞实验数据中提取核物质状态方程及核反应机制等重要物理信息, 人们发展了不同的输运理论来模拟重离子碰撞的整个动力学演化过程。最近, 随着重离子加速器技术的迅猛发展及第二代放射性束流装置的陆续建设和相继投入运行, 重离子输运理论迫切需要进一步的发展以在碰撞过程中更多地考虑弹靶量子结构效应, 比如库仑位垒附近弱束缚炮弹对融合^[1-4]、转移^[3]及破裂^[3-4]等反应机制的影响及超重核研究中的弹靶的入射道效应^[5]等。

目前应用比较广泛的输运模型有时间依赖的 Hartree Fock (TDHF) 模型^[6]、不同版本的量子分子动力学 (QMD) 模型^[7-13]、Boltzmann-Uehling-Uhlenbeck (BUU) 模型^[14]、反对称化的分子动力学 (AMD) 模型^[15]及费米子分子动力学 (FMD) 模型^[16]等。每种模型都有各自不同的适用范围, TDHF 基于平均场理论, 它能够很好地描述核的基态性质, 但对碰撞过程中的动力学涨落及能动量耗散的描述上

存在先天不足; BUU 模型在从低能到中高能重离子碰撞中有很广泛的应用, 但其基于一体理论, 没有考虑多体关联, 因此不能很好地描述碎片形成及涨落现象; AMD 模型和 FMD 模型在描述轻核基态性质以及轻核反应方面比较成功, 但对重核系统计算耗费的 CPU 时间太长, 限制了其对超重核融合机制的研究; QMD 模型的运算量比这两种模型都小很多, 但其对核基态性质的描述及稳定性较差, 限制了其在低能重离子反应中的应用, 为了利用微观输运模型研究当前库仑位垒附近的融合、破裂及转移等反应中尚未解决的一系列疑难问题, 对标准的 QMD 模型做一定的扩展是非常必要的。

在 QMD 模型中每个核子的波函数用高斯波包表示, 整个系统的波函数表示为单核子波函数的直积, 系统在平均场中按照正则方程演化, 同时考虑了两体碰撞及 Pauli 阻塞。QMD 模型具有较宽的能量适用范围, 可以描述从每核子几十 MeV 至 GeV 能区的重离子碰撞。QMD 模型基于核多体理论, 所以它能够很好地处理碰撞过程中的多体关联、涨落及碎裂过程, 在中高能区重离子碰撞中获得了广泛的应用。但其在低能重离子碰撞方面的应用相对欠缺, 其中很重要的一个原因是标准的 QMD 模型对原子核基态性质描述方面的不

收稿日期: 2014-07-15; 修改日期: 2014-10-22

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(11305239); 中国博士后科学基金资助项目(2012M520958); 上海市科学技术委员会项目(11DZ2260700)

作者简介: 王闪闪(1988-), 女, 河南洛阳人, 从事粒子物理与原子核物理研究; E-mail: sswanghenan@126.com

通信作者: 曹喜光, E-mail: caoxiguang@sinap.ac.cn.

足。初始化得到的弹靶不是能量最小态, 其稳定性不足, 会带来大量的虚粒子发射, 不适合用来研究库仑位垒附近各种竞争的反应机制^[17]。本文利用标准 QMD 模型的一个扩展版本—扩展的量子分子动力学 (EQMD) 模型^[17–21], 详细地研究 EQMD 模型中各种核的基态性质, 为利用 EQMD 模型研究库仑位垒能区丰富的反应现象提供基础。

2 EQMD 模型简介

在标准 QMD 模型中, 初始化抽样得到的弹靶相空间样本不是处于能量最小态, 核子在基态附近随机运动从而导致虚粒子发射, 和反应时间相比, 初始化样本的稳定性不能保持足够长时间, 而充分的稳定性对中低能重离子碰撞则非常重要。如果在初始化中强制取能量最小态, 所有核子将停止运动而塌缩从而违反 Pauli 不相容原理。EQMD 模型通过两方面的改进来解决初始化的非稳定问题, 首先引入指数形式的 Pauli 势来改善对核子费米子属性的描述, 在低温区, 系统行为接近 Fermi 统计, 别的 QMD 模型通常采用的双高斯型 Pauli 势相比, 指数形式的 Pauli 势能够更好地避免虚的长程关联, 另外对由波包宽度引起的动能项进行了适当处理, 减去了零点质心动能, 然后通过摩擦冷却方法构造稳定的基态。EQMD 模型的另外一重要改进是在波函数中引入了复数的波包宽度, 实部和虚部分别对应于核子坐标空间和动量空间宽度, 每个核子的波包宽度当做一个独立动力学变量处理, 演化方程由变分原理得到^[17]。EQMD 模型的数学表达形式简要叙述如下。系统的波函数表示为所有核子波函数的直积, 第 i 个核子的波函数表示为高斯波包, 表达式为:

$$\phi_i(\mathbf{r}_i) = \left(\frac{\nu_i + \nu_i^*}{2\pi} \right)^{3/4} \exp \left[-\frac{\nu_i}{2} (\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_i)^2 + \frac{i}{\hbar} \mathbf{P}_i \cdot \mathbf{r}_i \right], \quad (1)$$

其中 \mathbf{r}_i 和 \mathbf{P}_i 分别表示第 i 个波包的位置和动量的中心, ν_i 表示波包宽度, 复数表达式为

$$\nu_i \equiv \frac{1}{\lambda_i} + i\delta_i, \quad (2)$$

其中 λ_i 和 δ_i 分别表示波包的实部和虚部, 分别对应核子的坐标和动量分布宽度。系统的哈密顿量表示为

$$H = \langle \Psi | \sum_i -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 - \hat{T}_{c.m.} + \hat{H}_{int} | \Psi \rangle \\ = \sum_i \left[\frac{\mathbf{P}_i^2}{2m} + \frac{3\hbar^2(1 + \lambda_i^2 \delta_i^2)}{4m\lambda_i} \right] - T_{c.m.} + H_{int}. \quad (3)$$

$T_{c.m.}$ 和 H_{int} 分别表示虚的零点质心动能和势能:

$$T_{c.m.} = \sum_i \frac{t_i^{c.m.}}{M_i}, \quad (4)$$

$t_i^{c.m.}$ 是第 i 个波包的零点动能, 表示为

$$t_i^{c.m.} = -\frac{\langle \phi_i | \hbar^2 \nabla^2 | \phi_i \rangle}{2m} + \frac{\langle \phi_i | \hbar \nabla | \phi_i \rangle^2}{2m}, \quad (5)$$

M_i 是第 i 个波包所属碎片的“质量数”:

$$M_i = \sum_j F_{ij}, \quad (6)$$

$$F_{ij} = \begin{cases} 1 & (|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j| < a) \\ e^{-(|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j| - a)^2/b} & (|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j| \geq a), \end{cases} \quad (7)$$

其中 $a = 1.7 \text{ fm}$, $b = 4 \text{ fm}^2$ 。

系统坐标、动量及波包宽度的时间演化由时间依赖的变分原理得到

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} L dt = 0, \quad (8)$$

$$L \left(\{ \mathbf{R}_i, \mathbf{P}_i, \lambda_i, \delta_i, \dot{\mathbf{R}}_i, \dot{\mathbf{P}}_i, \dot{\lambda}_i, \dot{\delta}_i \} \right) \equiv \langle \Psi | i\hbar \frac{d}{dt} - \hat{H} | \Psi \rangle \quad (9)$$

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{R}}_i &= \frac{\partial H}{\partial \mathbf{P}_i}, & \dot{\mathbf{P}}_i &= -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{R}_i}, \\ \frac{3\hbar}{4} \dot{\lambda}_i &= -\frac{\partial H}{\partial \delta_i}, & \frac{3\hbar}{4} \dot{\delta}_i &= \frac{\partial H}{\partial \lambda_i}. \end{aligned} \quad (10)$$

系统的有效相互作用由以下四部分构成:

$$H_{int} = H_{\text{Skyrme}} + H_{\text{Coulomb}} + H_{\text{Symmetry}} + H_{\text{Pauli}}, \quad (11)$$

其中 H_{Skyrme} 是 Skyrme 势, 表示为

$$H_{\text{Skyrme}} = \frac{\alpha}{2\rho_0} \int \rho^2(\mathbf{r}) d^3r + \frac{\beta}{(\gamma+1)\rho_0^\gamma} \int \rho^{\gamma+1}(\mathbf{r}) d^3r, \quad (12)$$

密度表达式为

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_i^A \rho_i(\mathbf{r}), \quad (13)$$

$$\rho_i(\mathbf{r}) = \frac{1}{(\pi\lambda_i)^{3/2}} \exp \left[-\frac{(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)^2}{\lambda_i} \right]. \quad (14)$$

真实系统中我们排除核子自相互作用, 则 Skyrme 势表示为

$$\begin{aligned} H_{\text{Skyrme}} &= \frac{\alpha}{2\rho_0} \sum_{i,j \neq i} \int \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \rho_i(\mathbf{r}_i) \rho_j(\mathbf{r}_j) d^3r_i d^3r_j + \\ &\frac{\beta}{(\gamma+1)\rho_0^\gamma} \sum_{i,j \neq i} \int \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \rho(\mathbf{r}_j)^{\gamma-1} \times \\ &\rho_i(\mathbf{r}_i) \rho_j(\mathbf{r}_j) d^3r_i d^3r_j \equiv H_2 + H_{\gamma+1}. \end{aligned} \quad (15)$$

对称势 H_{Symmetry} 表示为

$$H_{\text{Symmetry}} = \frac{c_S}{2\rho_0} \sum_{i,j \neq i} \int [2\delta(T_i, T_j) - 1] \rho_i(\mathbf{r}) \rho_j(\mathbf{r}) d^3r, \quad (16)$$

T_i 是第 i 个核子的同位旋, 在核物质极限下, 上式约化为

$$\int \frac{c_S}{2} \frac{(\rho_p - \rho_n)^2}{\rho_0} d^3r. \quad (17)$$

Pauli 势 H_{Pauli} 表示为

$$H_{\text{Pauli}} = \frac{c_P}{2} \sum_i (f_i - f_0)^\mu \theta(f_i - f_0), \quad (18)$$

其中 $f_i \equiv \sum_j \delta(S_i, S_j) \delta(T_i, T_j) |\langle \phi_i | \phi_j \rangle|^2$; θ 为单位阶跃函数。在本计算中势能采取的一套参数为 $\alpha = -124.3$ MeV, $\beta = 70.5$ MeV, $\gamma = 2.0$, $c_S = 25$ MeV, $c_P = 15$ MeV, $f_0 = 1.0$ 及 $\mu = 1.3$ 。

3 结果与讨论

由于上述 EQMD 模型对初始化的改进, 和别的版本 QMD 相比, 初始化核的稳定性有了极大的改善, 我

们初始化了从 ^{16}O 到 ^{208}Pb 等 4 种核素, 通过让其在自身平均场中自由演化来检验稳定性, 如图 1 所示, 和别的版本 QMD 模型相比, 每核子平均结合能及方均根半径的涨落减小了一个甚至两个量级以上, 且计算的结合能及方均根半径与实验值及经验公式符合得不错, 如表 1 所列。由于低能熔合反应动力学过程持续时间较长, 初始化核足够的稳定性及可忽略的涨落为研究位垒附近的熔合反应提供了必要条件。

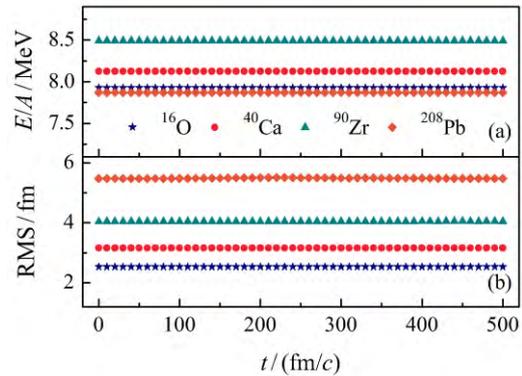


图 1 (在线彩图) ^{16}O , ^{40}Ca , ^{90}Zr 及 ^{208}Pb 4 种核素的结合能及方均根半径在自身平均场中随时间的演化

表 1 ^{16}O , ^{40}Ca , ^{90}Zr 及 ^{208}Pb 4 种核素的结合能与方均根半径与实验值及经验公式的比较*

Nuclei	$(E/A)_{\text{EQMD}}/\text{MeV}$	$(E/A)_{\text{EXP}}/\text{MeV}$	$\text{RMS-radius}_{\text{EQMD}}/\text{fm}$	$\text{RMS-radius}_{\text{Data}}/\text{fm}$
^{16}O	7.9265	7.9762	2.533	2.646
^{40}Ca	8.1240	8.5513	3.156	3.384
^{90}Zr	8.4894	8.7100	4.039	4.255
^{208}Pb	7.8688	7.8673	5.488	5.439

* 实验值取自文献[16], 方均根半径公式取自文献[17]。

为了验证 EQMD 模型对原子核基态描述的可靠性, 我们利用该模型对不同元素的同位素进行初始化, 将计算得到的结合能与方均根半径分别和实验值进行了对比。

首先我们初始化了一系列稳定核, 其结合能与实验值的比较如图 2(a) 所示。可以看出, EQMD 得到的稳定核结合能与实验值总体上符合得很好, 尤其在质量数大于 10 小于 30 的区域和质量数大于 80 时, EQMD 模型得到的结合能与实验值几乎完全符合。同时我们将初始化得到的方均根半径与方均根半径的经验公式进行了比较, 结果如图 2(b) 所示。可以看出 EQMD 模型得到的方均根半径与经验公式整体上符合得也很好, 尤其对轻核和重核, 计算值与实验值几乎完全符合, 质量数在 70 到 160 的范围内符合的程度稍微差一些, 但相对差别最大不超过 10%。由上述结合能及方均根半径的对比可知, EQMD 模型能够对稳定核基态的大块性质给出相当满意的描述。

为了研究位垒附近弱束缚核的反应机制, EQMD 模型还需要能够合理描述远离 β 稳定线核的性质比如结合能。图 3 及图 4 给出了各种轻核及中重核的不同同位素的计算值与实验值的对比。对 Li, Be, B 及 C 的同位素, 计算值比实验值大, 这些较大的差别是由平均场方法对轻核描述的固有缺陷导致的, 在各种 QMD 模型中普遍存在, 但两者之间的差别由 Li 到 C 逐渐缩小, 计算得到的结合能的同位素依赖曲线和实验值完全一致。对 N, O, F, Ne, Mg, S 及 Ca 的同位素, 计算不仅能够完全重现结合能的同位素依赖趋势, 而且绝对值和实验值符合得很好。对 Ni, Zn 及 Zr 等元素的同位素, 在丰中子一侧和实验值符合得更好一些。对于比 Zr 更重的元素, EQMD 模型能够合理地给出结合能的饱和性质, 各种同位素的结合能几乎不再依赖于同位旋不对称性, 且绝对值和实验值符合得很好。由上述可知, EQMD 模型能够合理重现从轻到重不同元素结合能的同位素依赖曲线。

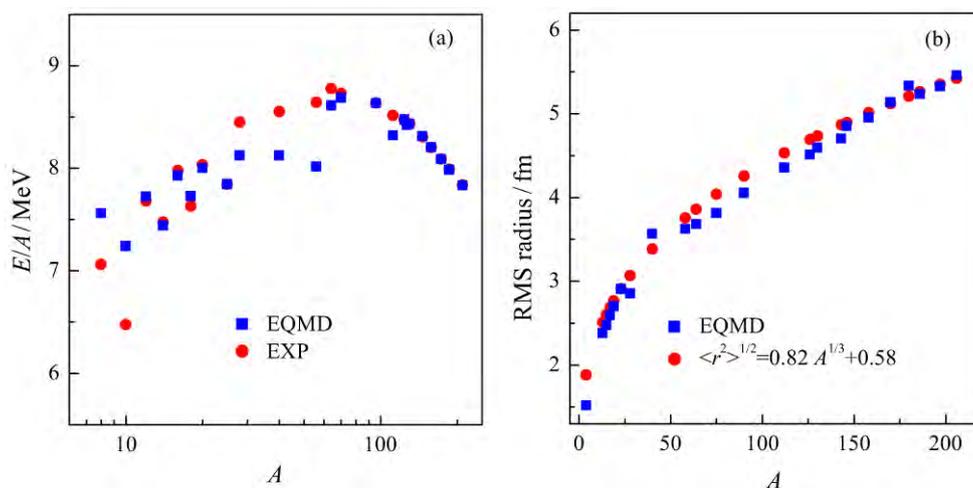


图 2 (在线彩图) 稳定核基态每核子结合能与实验值比较

(a) 稳定核基态每核子结合能与实验值比较, 蓝色方框代表 EQMD 模型计算结果, 红色圆代表实验值^[22]; (b) 稳定核基态方均根半径与经验公式比较, 蓝色方框代表 EQMD 模型计算结果, 红色圆取自经验值^[23]。

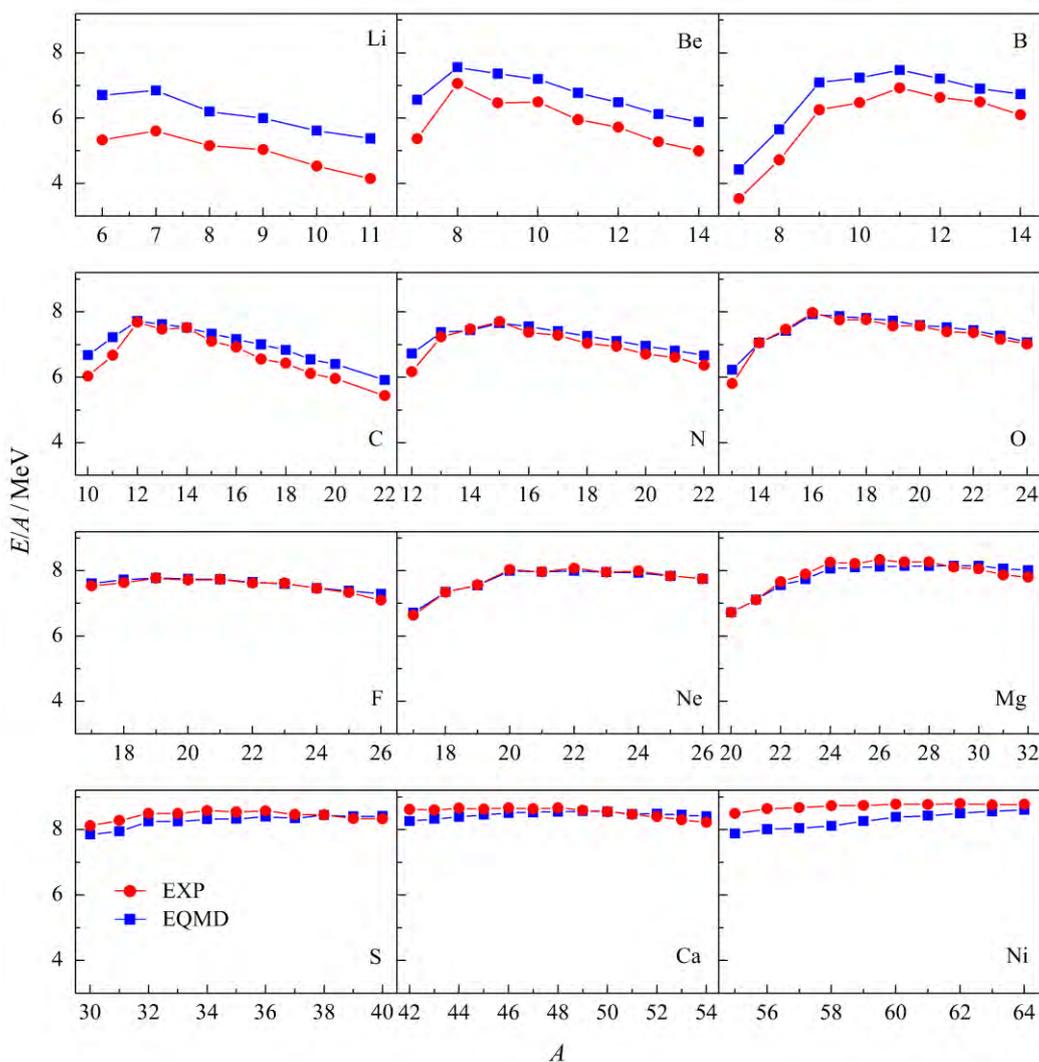


图 3 (在线彩图) EQMD 模型计算的各元素同位素的结合能与实验值的比较
蓝色方块代表 EQMD 模型计算结果, 红色圆代表实验值, 实验值取自文献^[22]。

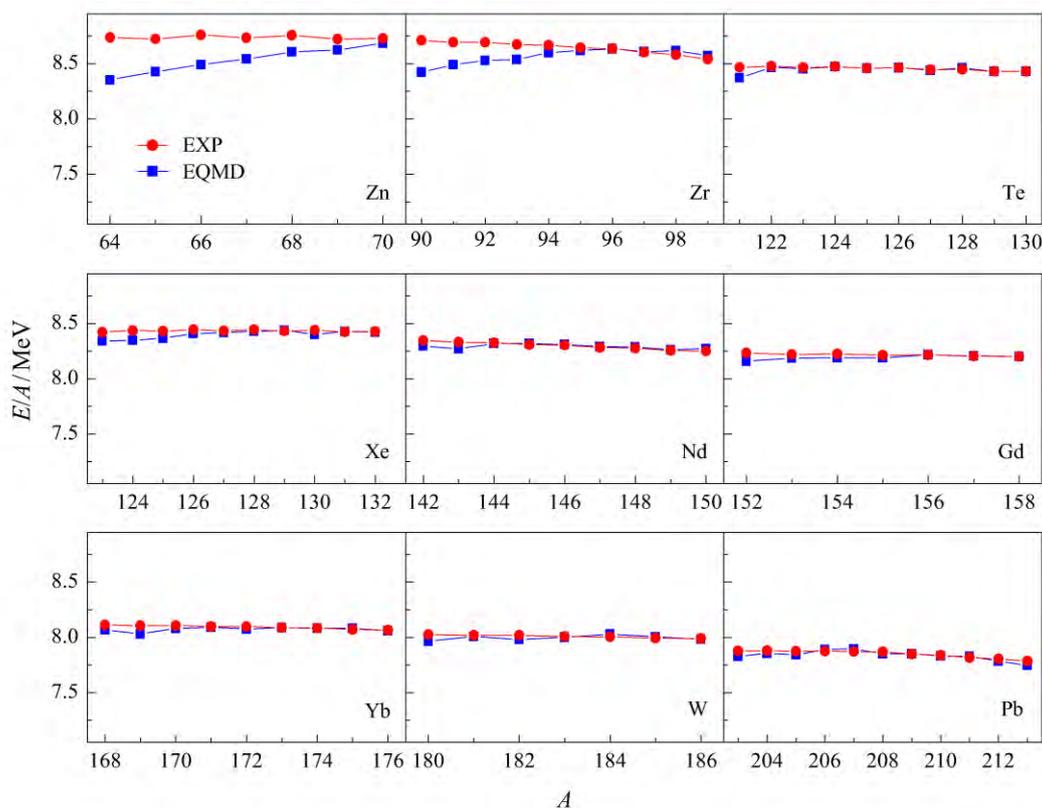


图 4 (在线彩图)EQMD 模型计算的各元素同位素的结合能与实验值的比较
蓝色方块代表 EQMD 模型计算结果, 红色圆代表实验值, 实验值取自文献[22]。

4 结论

通过上面的计算比较可以看到, EQMD 模型在描述初始化核稳定性方面有了极大的改善, 初始化核的涨落降低了一个甚至两个量级以上, 仅利用一套势参数, EQMD 模型不仅能够重现从轻到重不同质量区稳定核基态的结合能及方均根半径, 而且对大部分核, 能够给出满意的结合能对同位旋不对称的依赖关系。这为利用 EQMD 模型研究低能重离子碰撞, 比如大质量核引起的熔合反应及弱束缚核的熔合反应等提供了基础。

致谢 感谢在本文研究过程中, R. Wada 教授、陈志强研究员及黄美容博士的深入讨论。

参考文献:

- [1] BECK C, SOUZA F A, ROWLEY N, *et al.* Phys Rev C, 2003, **67**: 054602.
- [2] KEELEY N, RAABE R, ALAMANOS N, *et al.* Prog in Part and Nucl Phys, 2007, **59**: 579.
- [3] BECK C. Nucl Phys A, 2007, **787**: 251.
- [4] CANTO L F, GOMES P R S, DONANGELO R, *et al.* Phys Rep, 2006, **424**: 1.
- [5] GIARDINA G, HOFMANN S, MUMINOV A I, *et al.* Eur Phys J A, 2000, **8**: 205.
- [6] BONCHE P, KOONIN S, NEGELE J W. Phys Rev C, 1976, **13**: 1226; WASHIYAMA K, LACROIX D, AYIK S. Phys Rev C, 2009, **79**: 024609; SIMENEL C. Eur Phys J A, 2012, **48**: 152.
- [7] YAN T Z, MA Y G, CAI X Z, *et al.* Phys Lett B, 2006, **638**: 50.
- [8] CAO X G, CAI X Z, MA Y G, *et al.* Phys Rev C, 2012, **86**: 044620.
- [9] FENG Z Q. Nucl Sci Tech, 2013, **24**: 050504.
- [10] KUMAR S, MA Y G. Nucl Sci Tech, 2013, **24**: 050509.
- [11] GUO C C, SU J, ZHANG F S. Nucl Sci Tech, 2013, **24**: 050513.
- [12] WANG N, LI Z X, WU X Z. Phys Rev C, 2002, **65**: 064608.
- [13] PAPA M, MARUYAMA T, BONASERA A. Phys Rev C, 2001, **64**: 024612.
- [14] BERTSCH G F, GUPTA S D. Phys Rep, 1988, **160**: 189.
- [15] ONO A, HORIUCHI H, MARUYAMA T, *et al.* Phys Rev Lett, 1992, **68**: 2898.
- [16] FELDMEIER H, SCHNACK J. Rev Mod Phys, 2000, **72**: 655.
- [17] MARUYAMA T, NIITA K, IWAMOTO A. Phys Rev C, 1996, **53**: 297.
- [18] WADA R, HAGEL K, CIBOR J, *et al.* Phys Lett B, 1998, **422**: 6.
- [19] HE W B, MA Y G, CAO X G, *et al.* Phys Rev Lett, 2014, **113**: 032506.

- [20] HE W B, CAO X G, MA Y G, *et al.* Nucl Sci Tech, 2014, **37**: 100511. [22] WANG M, AUDI G, WAPSTRA A H, *et al.* Chin. Phys. C, 2012, **36**: 1603.
- [21] CAO X G, MA Y G, ZHANG G Q, *et al.* J Phys Conf Ser, 2014, **515**: 012023. [23] PRESTON M A, BHADURI R K. Structure of the Nucleus[M]. Boulder: Westview Press, 1993: 53.

Study of Ground State Properties of Nuclei by an Extended Quantum Molecular Dynamics Model

WANG Shanshan^{1, 2}, CAO Xiguang¹, ZHANG Tonglin^{1, 2}, WANG Hongwei¹, ZHANG Guoqiang¹,
FANG Deqing¹, ZHONG Chen¹, MA Chunwang², HE Wanbing¹, MA Yugang¹

(1. Shanghai Institute of Applied Physics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201800, China;

2. Henan Normal University, Xinxiang 453007, Henan, China)

Abstract: The structure effects of project and target in heavy ion collision at low energy is more important compared with the effects at high energy, which requires the transport model to describe the ground properties of nuclei more reasonably. In this paper, we carry out calculations of the ground state properties, such as binding energy and root mean square radius, of different isotope chains from light to heavy mass region by an extended quantum molecular dynamics (EQMD) model and compare the results with data. It is found that the EQMD model not only can reproduce ground state properties of stable nuclei very well, but also can reasonably describe the ground state binding energy of nuclei far from β stability line. Compared with other versions of QMD, EQMD model greatly improves the description of the stability of initialized nuclei. Recent investigations would serve as a starting basis for studying the reaction mechanisms of elastic scattering, fusion, transfer and breakup induced by weakly bound nuclei by the microscopic dynamical model.

Key words: quantum molecular dynamics; heavy ion collision at low energy; ground state property of nucleus

Received date: 15 Jul. 2014; **Revised date:** 22 Oct. 2014

Foundation item: National Natural Science Foundation of China (11305239); China Postdoctoral Science Foundation (2012M520958); Science and Technology Commission of Shanghai Municipality (11DZ2260700)

Corresponding author: CAO Xiguang, E-mail: caoxiguang@sinap.ac.cn.