文章编号:1007-4627(2006)04-0409-05

近垒能量下重核熔合几率的量子路径积分计算

包景东

(北京师范大学物理系,北京100875)

摘 要:针对近垒能量下经典涨落耗散模型预期的重核熔合几率比实验结果偏小的问题,发展了一 种实时间路径积分方法并用于研究重核熔合激发函数,给出了包含量子涨落效应的解析表达式。计 算了几个对称和近似对称反应系统的熔合几率,结果表明理论结果与实验值符合较好。还讨论了颈 部增长对熔合障碍的影响。

关键词:重离子熔合反应;熔合几率;路径积分;近垒;量子涨落

中图分类号: O571.6 文献标识码: A

1 引言

目前,在理论上将通过重离子熔合蒸发反应合 成超重核的反应过程分成3个阶段:(1)两碰撞核 从无穷远超越库仑势垒而相互接触;(2)从接触到 复合核形成;(3)复合核通过蒸发轻粒子冷却形成 蒸发残余核。最终的蒸发残余核截面为俘获截面、 复合核形成几率和存活几率的乘积。在著名的双核 模型和多步扩散模型中,通常假设复合核形成与衰 变互相独立^[1,2]。在上述3个阶段中,因为在第2 个阶段中存在着熔合与准裂变的竞争,物理上最为 复杂而动力学上是最值得研究的^[1-5]。当入射能量 大于库仑位垒(也称作 Bass 位垒),即能量在垒上 时,用热翻越机制研究复合核的形成;当能量在垒 下时,用量子力学 WKB 穿透机制来处理;而在近 垒能量情况下,热翻越和量子涨落共存。

众所周知,对于丰中子炮弹轰击靶核的热熔合 重离子反应,经典模型^[6]给出的熔合截面结果在近 垒能量区比实验值偏小,所以很有必要将低温量子 效应加进来。对于轻的反应系统,弹靶接触点位于 复合核的条件鞍点之内,故不需外部推动能量。从 Mo+Mo等反应系统^[1-3]开始,需要一个大于库仑 位能的外部推动能量,使重离子熔合反应的几率超 过 1/2。熔合几率等于 1/2 时所对应的反应能量与 库仑位能之差称为熔合障碍。例如 Mo+Mo 反应, 接触点距条件鞍点的势能差约为1 MeV,但熔合障碍为7 MeV。在目前的熔合反应宏观理论研究中,通常考虑两碰撞核的质心距和它们的不对称自由度来计算最终的残余核截面,而未关注熔合激发曲线随质心系能量的变化。

最近几年,我们开展了形变的靶核、同位旋依 赖性、弹靶中子交换流^[7,8]、颈部折叠效应^[9,10]、 反常扩散^[11,12]和位垒动力学回流^[13-16]等一些有关 重核和超重核热熔合反应机制的研究。但这些研究 还局限于经典框架内。考虑量子动力学最简单的途 径是量子朗之万方程,但首先要对以算符形式表述 的量子噪声实施量子平均而使其成为实数,然而势 场的非谐部分很难精确处理。我们采用的实时间路 径积分传播子方法^[17,18]非常适合于今后用蒙特卡 罗方法进行数值计算。本文考虑了几个对称和近似 对称的反应系统,给出了熔合几率的一个量子解析 表达式,分析了颈部自由度和量子涨落效应。

2 模型和量子熔合几率表达式

我们从系统加热库的量子耗散模型出发,前者 代表核形变集体运动,后者是核内禀核子的统计, 两者耦合给出系统受到的摩擦和涨落。总的拉格朗 日量表示为

^{*} 收稿日期: 2006 - 08 - 20

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(10235052); 教育部博士点专项基金资助项目(20050027001)

作者简介:包景东(1962-),男(满族),辽宁瓦房店人,教授,博士生导师,从事核理论和统计物理的研究和教学工作; E-mail:jdbao@bnu.edu.cn

$$L = \frac{p^{2}}{2m} - V(x) + \sum_{j=1}^{N} \left[\frac{p_{j}^{2}}{2m_{j}} - \frac{1}{2} m_{j} \omega_{j}^{2} \left(R_{j} - \frac{c_{j}}{m_{j} \omega_{j}^{2}} x \right)^{2} \right], \quad (1)$$

这里 $x \ \pi p$ 是系统坐标(即复合核形变自由度,如 果是一维问题,那么 x 就是两碰撞核的质心距)和 对应的动量, x_j 和 p_j 是内禀核子的坐标和动量。系 统所满足的经典广义 Langevin 方程为

$$m\ddot{x}(t) + \int_{0}^{t} \gamma(t-s)\dot{x}(s) \,\mathrm{d}s + V'(x) = r(t) \quad .$$
(2)

式中噪声满足: $\langle r(t) \rangle = 0 \ \pi \langle r(t) r(s) \rangle = T \gamma(t - s)$,这里 $\gamma(t-s)$ 是实时间阻尼核函数, T 是复合核 温度。

将环境坐标绝热积分消除,则系统在时刻 t 的 约化密度算符用坐标空间的实时间量子路径积分表 示为

$$\tilde{\rho}(x, y, t) = \int d\mathbf{R} \langle x \, \mathbf{R} \mid \rho(t) \mid y \, \mathbf{R} \rangle$$

$$= \int dx' dy' d\mathbf{R}' d\mathbf{Q}' d\mathbf{R} \langle x' \mathbf{R} \mid \bullet$$

$$\exp\left(-\frac{\mathrm{i}Ht}{\hbar}\right) \mid x' \mathbf{R}' \rangle \langle x' \mathbf{R}' \mid \rho(0) \mid y' \mathbf{Q}' \rangle \bullet$$

$$\langle y' \mathbf{Q}' \mid \exp\left(\frac{\mathrm{i}Ht}{\hbar}\right) \mid y' \mathbf{R}' \rangle \quad (3)$$

为了求解关于 *x* 和 *y* 耦合的经典运动方程,我们引入两个新的变量

$$X(t) = x(t) + y(t),$$

$$\xi(t) = x(t) - y(t) \quad . \tag{4}$$

假设系统的初始约化密度分布,即两重核接触态的 位型与动量分布,可用一个中心位于 *x*₀ 的高斯波 包来描写,初始平均相对动量是 *p*₀,坐标和动量涨 落宽度分别为λ 和μ,则

$$\tilde{\rho}(X_{i}, \boldsymbol{\xi}_{i}; 0) = C_{0} \exp\left(\frac{\mathrm{i}p_{0}\boldsymbol{\xi}_{i}}{\hbar}\right) \cdot \exp\left[-\frac{1}{8\lambda}(X_{i}-2x_{0})^{2}-\frac{\mu}{2\hbar^{2}}\boldsymbol{\xi}_{i}^{2}\right], \quad (5)$$

式中 C。是归一化常数。

任意时刻系统的约化密度算符通过传播子与初 态相联系,也就是

$$\tilde{
ho}(X_{\mathrm{f}}, \xi_{\mathrm{f}}; t) = \iint \mathrm{d}X_{\mathrm{i}}\mathrm{d}\xi_{\mathrm{i}}$$

$$J(X_{\rm f}, \xi_{\rm f}, t; X_{\rm i}, \xi_{\rm i}, 0)\rho(X_{\rm i}, \xi_{\rm i}; 0) \quad (6)$$

对于接触态与条件鞍点较近的重离子反应系统,可 以将复合核势能曲线在鞍点附近近似处理为一个倒 谐振子势: $V(x) = -\frac{1}{2}m\omega^2 x^2$,这里位垒 x_b 处频 率确定为 $\omega^2 = -m^{-1}V''(x_b)$ 。我们已将坐标原点选 择在复合核形变势能鞍点(即条件鞍点)。对计算有 用的是 $\xi_i = x_f - y_f = 0$ 和 $X_f = 2x_f$ 的传播子,经推 导为

$$J = J_0 \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \left[\left(K(t) + \frac{1}{4} m\beta \right) X_i \xi_i - N(t) X_f \xi_i - \frac{1}{\hbar} C(t) \xi_i^2 \right] \right\} , \qquad (7)$$

式中 J_0 是一个积分常数,N(t),K(t)和C(t)是时间的函数,

$$N(t) = \frac{m\beta'}{4\sinh\left(\frac{1}{2}\beta't\right)} \exp\left(\frac{1}{2}\beta t\right) ,$$

$$K(t) = \frac{1}{4}m\beta'\cosh\left(\frac{1}{2}\beta't\right) ,$$

$$C(t) = \frac{m\beta}{2\pi} \int_{0}^{0} d\nu \nu \coth\left(\frac{\hbar\nu}{2k_{\rm B}T}\right) \sinh^{-2}\left(\frac{1}{2}\beta't\right) ,$$

$$\int_{0}^{t} \int_{0}^{t} d\tau ds \sinh\left[\frac{1}{2}\beta'(t-\tau)\right] \cos\left[\nu(t-\tau)\right] \cdot$$

$$\sinh\left[\frac{1}{2}\beta'(t-s)\right] \exp\left[\frac{\beta}{2}(\tau+s)\right] , \quad (8)$$

这里 $\beta' = \sqrt{\beta^2 + 4\omega^2}$, β 是折合阻尼系数, Ω 是 Ohmic 摩擦的截断频率。

将(5)和(7)两式代入方程(6),便可以得到任 意时刻系统的约化密度函数。因方程(6)中的两个 被积函数均是高斯型的,完成积分后,我们有

$$\tilde{\rho}(x_{\rm f}, 0; t) = C_{\rm f} \exp\left[-\frac{(x_{\rm f} - \langle x_{\rm f}(t) \rangle)^2}{2\sigma_{x_{\rm f}}^2(t)}\right], \quad (9)$$

式中

$$\langle x_{\rm f}(t) \rangle = \frac{\left[\frac{1}{4}m\beta + K(t)\right]x_{\rm 0} + \frac{1}{2}p_{\rm 0}}{N(t)} ,$$

$$\sigma_{x_{\rm f}}^{2}(t) = \frac{2C(t)\hbar + \mu + 4\lambda\left[\frac{1}{4}m\beta + K(t)\right]^{2}}{N^{2}(t)} .$$

(10)

在给定时刻,两重离子碰撞后发生熔合反应,它们 的质心距等于或小于复合形变势能鞍点所在位置, 即量子布朗粒子的鞍点通过几率就代表熔合几率, 其为

$$P(x_{0}, p_{0}; t) = \frac{\int_{0}^{\infty} \tilde{\rho}(x_{\mathrm{f}}, 0; t) \,\mathrm{d}x_{\mathrm{f}}}{\int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\rho}(x_{\mathrm{f}}, 0; t) \,\mathrm{d}x_{\mathrm{f}}}$$
$$= \frac{1}{2} \mathrm{erfc} \left[-\frac{\langle x_{\mathrm{f}}(t) \rangle}{\sqrt{2} \sigma_{x_{\mathrm{f}}}(t)} \right], \qquad (11)$$

这里 erfc 是余误差函数, 它的宗变量的渐近值为

$$\lim_{k \to \infty} \frac{\langle x_{\rm f}(t) \rangle}{\sqrt{2} \sigma_{x_{\rm f}}(t)} = \frac{\frac{1}{2} (\beta + \beta') x_0 + \frac{p_0}{m}}{\left[\frac{2\hbar\beta}{m\pi} \int_0^a \frac{\nu d\nu}{a^2 + \nu^2} \coth\left(\frac{\hbar\nu}{2k_{\rm B}T}\right) + \frac{2\mu}{m^2} + \frac{1}{2} \lambda (\beta + \beta')^2\right]^{1/2}},$$
(12)

是一个依赖于初始条件和温度的常数。

3 结果和讨论

我们用双中心核表面参数方程描述两重离子 从接触到复合核的形变。考虑两核质心距 x 和复合 核颈部参数 ϵ 为两个集体变量,后者取值范围是 0 $\leq \epsilon \leq 1$ 。这是 $\{x, \epsilon\}$ 二维问题,当 $\epsilon = 1$,两核相交处 尖锐,而 $\epsilon \neq 1$ 呈现光滑连接。惯性和粘滞参数分别 由 Werner-Wheeler 方法和墙加窗一体耗散机制计 算给出,并取作鞍点处的常数值。

图 1 显示了¹⁰⁰ Mo+¹⁰⁰ Mo 反应系统在不同的 ϵ 的形变势能曲线。图中黑实点代表接触态,其中 ϵ =1 系两个球形重离子接触态,而 $\epsilon \neq 1$ 为形变的弹 靶核组合的接触态。由此可见,出现了颈部构型的 复合核所对应的势能鞍点降低。



图 1 Mo+Mo反应形成的复合核的形变势能曲线 由上至下的曲线分别对应 ε=1,0,0.8,0.6,0.4,0.2。

复合核的温度由系统在鞍点处克服反应 Q 值、 形变势能以及耗散给集体自由度的动能之后的内部 剩余能量所确定。能量平衡方程为: $a_{lev}T^2 = E_{cm} + Q - V_b - E_k$,这里 E_{cm} 为两重离子质心系能量, a_{lev} 为复合核能级密度常数, V_b 为复合核的裂变势垒 高度。系统在接触态的动能根据下式求出

$$K = \frac{p_0^2}{2m} = E_{\rm cm} + Q - V_{\rm c} - a_{\rm lev} T_0^2 , \qquad (13)$$

其中, V。为接触点势能与复合核基态势能之差, T。 是由表面摩擦模型所确定的弹靶两核在接触点的初 始温度。

两重离子熔合形成复合核后,它们在反抗库仑 斥能的相向运动动能推动下,两重离子质心逐渐靠 近;同时在核表面张力作用下复合核也形成了具有 涨落构型的颈部。因此从二维势能面上来看,熔合 路径并不是沿着初始的动量方向。在熔合几率中考 虑到复合核颈部的涨落贡献,则可得到

$$P_{\text{fus}}(E_{\text{cm}}) = \int_{0}^{1} P(x_{0}, p_{0}; t \rightarrow \infty) w(\varepsilon) \cdot \delta(a\varepsilon + bx_{0} + c) d\varepsilon , \qquad (14)$$

式中最后一个 δ 函数表示接触点方程, 而颈部参数 分布被假设成如下的高斯型,

$$w(\varepsilon) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_{\varepsilon}} \exp\left[-\frac{(\varepsilon - \bar{\varepsilon})^2}{2\sigma_{\varepsilon}^2}\right] , \qquad (15)$$

其中 ε 和 σ ε 由颈部演化方程的解给出

$$\ddot{\varepsilon}(t) + \gamma_{\varepsilon}\dot{\varepsilon}(t) - \frac{1}{m_{\varepsilon}}f_{\varepsilon} = \sqrt{\frac{2\gamma_{\varepsilon}T}{m_{\varepsilon}}} r_{2}(t) , \quad (16)$$

这里 m_{ϵ} 和 γ_{ϵ} 是熔合系统沿颈部自由度方向在条件 鞍点处的惯性和粘滞系数, $r_2(t)$ 是一个独立于方程 (2)中 r(t)的高斯白噪声,满足 $\langle r_2(t) \rangle = 0$ 和 $\langle r_2(t)$ $r_2(t') \rangle = \delta(t-t')$ 。

图 2 给出了我们计算的 3 个对称和近似对称的 反应系统: ¹⁰⁰ Mo + ¹⁰⁰ Mo, ⁸⁶ Kr + ¹²³ Sb 和⁹⁶ Zr + ¹²⁴ Sn 的熔合几率随质心能量的变化,其中实验数 据分别选自文献[3—5]。一个重要的物理量是熔合 障碍,即稳态熔合几率 $P_{fus}=0.5$ 对应的能量与库 仑位垒之差。从(11)式可知,当 $\langle x_f(t \rightarrow \infty) \rangle = 0$ 时, $P_{fus}=0.5$ 。在这一点上,经典曲线和量子曲线 重合,因为波包的中心位置完全由经典运动学方程 所控制,故两者给出相同的熔合障碍。然而,量子 熔合激发曲线比经典曲线随质心能量的增长平缓。 这是因为量子效应提高了有效扩散系数,使具有较 小质心动能的两碰撞重离子在其帮助下通过熔合位 垒;而当熔合系统的相对动量较大时,量子涨落的 效果是增强了随机性而破坏了定向性,故压低了熔 合激发曲线。

在图 2 的 3 个图中,还比较了没有考虑颈部(ε =1.0)自由度的一维扩散模型^[6]的计算结果。可以 看出,一维模型得到的熔合激发曲线随质心能量增 长得很快,并且预言的熔合障碍也很小。其实,从 图 1 可知:复合核形变势能鞍点高度是颈部参数 ε 的单调减函数,即复合核颈部的出现降低了其形变 势能。在无颈部(ε=1.0)的一维扩散模型中,为保 证复合核内部内禀核子剩余激发能为非负值,从而 使复合核温度有意义,那么只有当两重离子的质心 能量超过复合核最大势垒时,熔合才开始发生,故 一维熔合激发曲线增长得很陡。



图 2 ¹⁰⁰ Mo+¹⁰⁰ Mo, ⁸⁶ Kr+¹²³ Sb, ⁹⁶ Zr+¹²⁴ Sn 的熔合几率随质心能量的变化 。为实验数据, — 和 … 分别为二维量子和经典计算结果, … 为一维经典计算结果。

4 小结

本文分析了重离子熔合反应三阶段的接触态到 形成复合核这一中间过程的特点,着重研究了量子 涨落和颈部自由度对重核熔合激发函数曲线和熔合 障碍的影响。结果表明:在低能情况下,量子噪声 帮助熔合系统越过条件鞍点;相反,当两重离子的 相对运动动能较大时,量子涨落破坏了系统运动的 定向性。另一方面,考虑复合核颈部的增长和涨落, 则给出一个较大的熔合障碍。这些结论符合重核熔 合几率随质心能量缓慢增长的实验结果。

只要传播子的时间间隔选得足够短,人们能合

参考文献。

- [1] 赵恩广,李君清, Scheid W. 原子核物理评论, 2005, **22**(4): 315.
- [2] Abe Y, Boilley D, Kosenko G, et al. Prog Theor Phys Spull, 2002, 146: 104.
- [3] Schmidt K H, Morawek W. Rep Prog Phys, 1991, 54: 949.
- [4] Reisdorf W. J Phys, 1994, G20: 1 297.
- [5] Quint A B, Reisdorf W, Schmidt K H, et al. Z Phys, 1993,

理地采取局域简谐近似,这样就可以应用到任意形 变势能曲面,从而将目前的重核熔合几率的解析处 理推广到超重区域。系统的约化密度可以一步一步 地传播,从而体现时间有关的过程,将复合核的形 成看成一个预平衡过程,进而使入射道和衰变道联 系起来。进一步的工作正在开展之中。

致谢 作者感谢与卓益忠、赵恩广、刘祖华、吴锡 真、李君清、Y. Abe 和 D. Boilley 等教授进行过的 有益讨论。

A346: 119.

- [6] Aguiar C E, Barbosa V C, Donangelo R. Nucl Phys, 1990,
 A517: 205.
- [7] 刘祖华,包景东.中国科学,2006,G36:437.
- [8] Liu Z H, Bao J D. Chin Phys Lett, 2004, 21: 1 491; 2005,
 22: 3 044; 2006, 23: 1 437.
- [9] Bao J D, Boilley D. Nucl Phys, 2002, A707: 47.

- [10] Boilley D, Abe Y, Bao J D. Euro Phys J, 2003, A18: 627.
 [11] Bao J D, Zhuo Y Z. Phys Rev, 2003, C67: 064 606.
- [12] Bao J D. J Chem Phys, 2006, **124**: 114 103.
- [13] Bao J D, Jia Y. Phys Rev, 2004, C69: 027 602.
- [14] 包景东. 原子核物理评论, 2005, 22(4): 370.
- [15] 刘 玲,吕 坤,包景东.高能物理与核物理,2004,28:

854.

- [16] 贾 莹,包景东.高能物理与核物理,2006,30:868.
- [17] Calderia A O, Leggett A J. Physica, 1983, A121: 587; Calderia A O, Leggett A J. Ann Phys (NY), 1983, 149: 374.
- [18] Grabert H, Schramm P, Ingold G L. Phys Rep, 1988, 168: 115.

Quantum Path Integral Approach to Fusion Probability of Heavy Nuclei at Sub-barrier Energies^{*}

BAO Jing-dong

(Department of Physics, Beijing Normal University, Beijing 100875, China)

Abstract: A real time path integral approach is developed in order to work out a correct solution to a problem for the smaller result of the fusion probability of heavy nuclei based on the classical diffusion model at sub-barrier energies. An analytical expression for the quantum fusion probability is proposed, which contains the quantum fluctuation effect. The fusion probabilities of several symmetrical and approximate symmetrical systems are calculated, the theoretical results are in agreement with the experimental data. The influence of the neck length and its fluctuation upon the fusion hindrance is discussed.

Key words: heavy-ion fusion reaction; fusion probability; path integral; sub-barrier; quantum fluctuation

^{*} Foundation item: National Natural Science Foundation of China (10235020); Doctoral Fund of Ministry of Education of China (20050027001)