

# 重离子碰撞两体关联输运理论

## III. 半经典近似下的数值计算<sup>\*</sup>

刘 航<sup>1</sup> 左 维<sup>1</sup> 李希国<sup>1,3</sup> 刘建业<sup>1</sup> 王顺金<sup>2,4</sup>

1 (中国科学院近代物理研究所 兰州 730000)

2 (兰州大学现代物理系 兰州 730000)

3 (西北师范大学物理系 兰州 730070)

4 (西南交通大学近代物理研究所 成都 610031)

1995-12-29 收稿

### 摘 要

为了验证由相干单粒子波函数和两体关联动力学所建立的非相对论条件下的重离子碰撞两体关联输运理论的有效性, 利用没有碰撞项的量子分子动力学, 即时间相关的 Hartree-Fock 方法的半经典近似, 实现了两体关联输运理论在半经典近似下的数值计算. 计算结果表明: 这种两体关联输运理论的确能够有效地描述重离子碰撞过程中的输运和耗散过程.

**关键词** 重离子碰撞, 输运理论, 半经典近似, 量子分子动力学.

### 1 引 言

文献[1, 2]建立的重离子碰撞两体关联输运理论 TBCTT (Two-Body Correlation Transport Theory) 克服了当前诸如量子分子动力学 QMD<sup>[3]</sup>(Quantum Molecular Dynamics) 及 BUU<sup>[4]</sup>(Boltzmann-Uehling-Uhlenbeck) 等输运理论的许多不足, 能够自洽地描述在中能重离子碰撞中同时起重要作用的自洽平均场、两体碰撞和泡利原理, 因而该理论有可能对中能重离子碰撞中的输运和耗散过程给出更准确、更细致、更全面的描述. 为验证该理论的有效性, 进行数值计算是必要的. 鉴于该理论的数值计算比较复杂, 作为初步数值计算工作, 采用了没有碰撞项的 QMD 作为时间相关的 Hartree-Fock 方法 (TDHF)<sup>[5]</sup> 的半经典近似, 将它与量子多体关联动力学<sup>[6]</sup> 的有关内容联系起来, 也就是原子核中单粒子运动方程与两体关联动力学中一体密度矩阵和两体关联函数的运动方程之间的非线性耦合, 从而建立了 TBCTT 的半经典近似, 用以验证 TBCTT 的有效性. 在这一半经典近似模型中, 单粒子运动是半经典的, 但重离子碰撞和输运过程中的量子

<sup>\*</sup> 国家自然科学基金、甘肃省自然科学基金、甘肃省中青年科技基金、中国博士后基金、中国科学院基金资助.

特征及核子的统计性质在关联动力学中得以完整地保持. 碰撞中的输运和耗散过程是通过解耦合的动力学方程组而得到. 在一般 QMD 和 BUU 中必须考虑的因素如泡利原理及核子-核子碰撞截面的介质效应等都自然地包括在 TBCTT 中. 因此, TBCTT 为进一步研究热核形成和衰变的动力学性质提供了一种新途径和新方法.

## 2 两体关联输运理论(TBCTT)的半经典实现

### 2.1 组态空间的选择

建立两体关联输运理论的关键之一在于: 选择一组参数化的单粒子波函数 $\{\psi_i\}$ , 这组波函数能够较好地描述核子的动力学行为, 从而较好地显现关联动力学所包含的物理内容, 也就是为重离子碰撞的动力学过程提供一个合适的表象, 既保证相对于重离子碰撞而言表象的完备性, 又使数值计算变得可行. 有作者利用壳模型波函数与关联动力学耦合研究基于热核激发态的巨共振现象并取得成功<sup>[7]</sup>. 但是对于中高能重离子碰撞, 由于入射能量的增大, 反应机制变得复杂并导致原子核的大幅振荡甚至多重碎裂, 这时, 基于壳模型的输运理论计算就变得相当困难. 若为了简化计算而对反应机制作假设的话, 又会失掉很多重要的信息, 破坏了理论的完整性和普遍性. 所以, 有必要选择适当的组态空间, 既保证理论框架的完整, 又使数值计算可行. 当前许多比较成功的重离子碰撞输运理论, 如 MQMD<sup>[8,9]</sup>、AMD<sup>[10]</sup>、FMD<sup>[11]</sup>, 它们有一个共同的特点: 均采用复解析参数化的相干单粒子波函数来描述单核子运动状态. 从上述模型的成功经验发现, QMD 模型中的单粒子波函数是一类较好的选择. 经 Wigner 变换后的经典表象中, 核子被视为满足测不准关系的双 Gaussian 波包, 能较好地描述核子在重离子碰撞中的动力学行为. 其参数化的波函数可写为:

$$\Psi_i = \psi_{r_i} \chi_{\alpha_i},$$

$$\psi_i(\mathbf{r}, t) = \exp\left\{-\frac{(\mathbf{r}-\mathbf{r}_i)^2}{4L} + \frac{i\mathbf{p}_i \mathbf{r}}{\hbar}\right\}, \quad (1)$$

其中  $L$  为波包宽度,  $\mathbf{r}_i$ ,  $\mathbf{p}_i$  是第  $i$  个核子的坐标、动量.  $\chi_{\alpha}$  为自旋、同位旋波函数. 为计算方便, 引入下式定义的复参数  $\mathbf{z}_i$ :

$$\mathbf{z}_i = \frac{1}{2\sqrt{L}} \mathbf{r}_i + i \frac{\sqrt{L}}{\hbar} \mathbf{p}_i. \quad (2)$$

容易证明, 这组参数化的波函数仅归一, 但不正交. 其重叠积分为:

$$d_{ij} = \langle \Psi_i | \Psi_j \rangle = \exp\{-(\text{Re}^2 \mathbf{z}_i + \text{Re}^2 \mathbf{z}_j) + \frac{1}{2} (\mathbf{z}_i^* + \mathbf{z}_j)^2\} \delta_{\alpha_i \alpha_j}, \quad (3)$$

在斜交系下表示关联动力学是不方便的, 需引入正交化手续. 约定:  $\alpha, \beta, \gamma, \delta$  等代表正交系指标,  $i, j, k, l$  等代表斜交系指标. 引入下面的变换<sup>[12]</sup>:

$$|\varphi_\alpha\rangle = \sum_i (d^{-1/2})_{i\alpha} |\psi_i\rangle, \quad (4)$$

其中

$$(d^{-1/2})_{i\alpha} = \sum_m U_{im}^+ \lambda_{mm}^{-1/2} U_{m\alpha},$$

$$\lambda_{mm} = \sum_{ij} U_{mi} d_{ij} U_{jm}^+, \quad (5)$$

因为 $\{d_{ij}\}$ 为一正定 Hermit 矩阵, (5)式中的运算是有意义的. 易证:  $\langle \varphi_\alpha | \varphi_\beta \rangle = \delta_{\alpha\beta}$ .  $\{\varphi_\alpha\}$ 为一组正交归一的波函数. 利用这组波函数的运动方程与关联动力学有关方程的耦合来建立 TBCTT 的半经典近似.

## 2.2 两体关联输运理论 (TBCTT) 在半经典近似下的运动方程

在半经典近似下,  $\{\psi_i\}$ 的时间演化由 $\{r_i, p_i\}$ 的时间演化来体现,  $\{r_i, p_i\}$ 满足 Hamilton 方程:

$$\begin{aligned} \dot{r}_i &= \{H, r_i\}, \\ \dot{p}_i &= \{H, p_i\}. \end{aligned} \quad (6)$$

这样, 得到一组随时间演化的单粒子态 $\{\psi_i\}$ , 由(4)式又得到一组随时间演化的正交归一单粒子态 $\{\varphi_\alpha\}$ . 由 $\{\varphi_\alpha\}$ 展开关联动力学中的一体密度矩阵  $\rho(11', t)$  和两体关联函数  $C_2(12, 1' 2', t)$ , 从而实现单粒子运动与关联动力学的耦合. 由文献[1]中的 (10) 式及一体密度矩阵的表象无关性可得:

$$\begin{aligned} \rho(11', t) &= \sum_{\alpha\beta} n_{\alpha\beta} \varphi_\alpha(1) \varphi_\beta^*(1') \\ &= \sum_{ij} n_{ij} \psi_i(1) \psi_j^*(1'), \end{aligned} \quad (7)$$

由(4)、(7)式可得:

$$n_{ij}(t) = \sum_{\alpha\beta} (d^{-1/2})_{i\alpha} n_{\alpha\beta}(t) (d^{-1/2})_{\beta j}^+. \quad (8)$$

这样, 可如下构造(6)式中  $H$  的平均场部分:

$$U_k(t) = \sum_{ij} n_{ij}(t) \langle ki | V(12) | kj \rangle_A, \quad (9)$$

其中  $V(12)$  为两体相互作用,  $A$  表示反对称化的矩阵元.

由文献[1]的 (5)、(6)、(10) 式和 (11) 式, 并令  $\left| \frac{\partial}{\partial t} \alpha \right\rangle = \frac{\partial}{\partial t} \varphi_\alpha$ ,  $\langle \alpha | h | \mu \rangle = \langle \alpha | t | \mu \rangle + \sum_{\beta' \gamma'} \langle \alpha \beta' | V(12) | \mu \gamma' \rangle_A$  可得:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} n_{\alpha\beta}(t) &= \sum_{\gamma} [T_{\alpha\beta\gamma}^1 + E_{\alpha\beta\gamma}^1] + \sum_{\alpha' \beta' \gamma'} [f_{\alpha' \beta' \beta \delta}(t) \langle \alpha \gamma' | V(12) | \alpha' \beta' \rangle \\ &\quad - f_{\alpha \beta' \alpha' \gamma'}(t) \langle \alpha' \gamma' | V(12) | \beta \beta' \rangle], \end{aligned} \quad (10)$$

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} f_{\alpha\beta\gamma\delta}(t) &= \sum_{\mu} [T_{\alpha\beta\gamma\delta\mu}^2 + E_{\alpha\beta\gamma\delta\mu}^2] + \sum_{\alpha' \beta' \gamma' \delta'} [B_{\alpha\beta\delta\gamma\alpha' \beta' \gamma' \delta'} \\ &\quad + P_{\alpha\beta\delta\gamma\alpha' \beta' \gamma' \delta'} + H_{\alpha\beta\delta\gamma\alpha' \beta' \gamma' \delta'}], \end{aligned} \quad (11)$$

其中

$$\begin{aligned} T_{\alpha\beta\gamma}^1(t) &= -i\hbar \left[ \left\langle \alpha \left| \frac{\partial}{\partial t} \gamma \right\rangle n_{\gamma\delta}(t) + \left\langle \frac{\partial}{\partial t} \gamma \left| \beta \right\rangle n_{\alpha\delta}(t) \right], \\ E_{\alpha\beta\gamma}^1(t) &= \langle \alpha | h | \gamma \rangle n_{\gamma\delta}(t) - \langle \gamma | h | \beta \rangle n_{\alpha\delta}(t), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
T_{\alpha\beta\gamma\delta\mu}^2(t) &= -i\hbar \left[ \left\langle \alpha \left| \frac{\partial}{\partial t} \mu \right\rangle f_{\mu\beta\gamma\delta}(t) + \left\langle \beta \left| \frac{\partial}{\partial t} \mu \right\rangle f_{\alpha\mu\gamma\delta}(t) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \left\langle \frac{\partial}{\partial t} \mu | \gamma \right\rangle f_{\alpha\beta\mu\delta}(t) + \left\langle \frac{\partial}{\partial t} \mu | \delta \right\rangle f_{\alpha\beta\gamma\mu}(t) \right], \\
E_{\alpha\beta\gamma\delta\mu}^2(t) &= \langle \alpha | h | \mu \rangle f_{\mu\beta\gamma\delta}(t) + \langle \beta | h | \mu \rangle f_{\alpha\mu\gamma\delta}(t) \\
&\quad - \langle \mu | h | \gamma \rangle f_{\alpha\beta\mu\delta}(t) - \langle \mu | h | \delta \rangle f_{\alpha\beta\gamma\mu}(t),
\end{aligned}$$

而  $B_{\alpha\beta\delta\gamma\alpha'\beta'\gamma'\delta'}$ ,  $P_{\alpha\beta\delta\gamma\alpha'\beta'\gamma'\delta'}$ ,  $H_{\alpha\beta\delta\gamma\alpha'\beta'\gamma'\delta'}$  与文献[1]中(17)式的对应项意义相同. 需要指出的是: 若  $\{\varphi_\alpha\}$  满足文献[1]中的(14)式, 即  $\{\varphi_\alpha\}$  满足 TDHF 方程, 则(10)式与(11)式中的  $\sum_\gamma (T_{\alpha\beta\gamma}^1(t) + E_{\alpha\beta\gamma}^1(t))$  和  $\sum_\mu (T_{\alpha\beta\gamma\delta\mu}^2(t) + E_{\alpha\beta\gamma\delta\mu}^2(t))$  均为零, (10)式与(11)式即为文献[1]中的(16)、(17)式.

综上, 得到了由(6)、(10)和(11)式组成的方程组, 通过(8)、(9)式, 它们构成一组耦合的非线性方程组, 是 TBCIT 在半经典近似下的基本方程. 从物理上看, 由耦合方程组得到的一体密度矩阵的展开系数  $n_{\alpha\beta}(t)$  通过(8)、(9)和(6)式而影响单粒子运动, 即  $\{r_i, p_i\}$  的运动方程是受到关联动力学影响的, 从而突破了独立粒子模型的限制. 可以看到,  $\{\psi_i\}$  这组单粒子态随时间演化着, 但各个态上是否填充粒子及组态对平均场的影响是由关联动力学中的  $n_{\alpha\beta}(t)$  决定的.

在计算中, 取如下形式的相互作用

$$V = V^{\text{loc}} + V^{\text{Yuk}} + V^{\text{Coul}} + V^{\text{sys}}, \quad (12)$$

其中  $V^{\text{loc}}$ ,  $V^{\text{Yuk}}$ ,  $V^{\text{Coul}}$ ,  $V^{\text{sys}}$  分别为 Skyrme 势, Yukawa 势, Coulomb 势和对称势. 受计算机机时的限制, 为简单起见, 关联动力学中的剩余相互作用取为 Skyrme 型的两体吸引势. 通过解 TBCIT 的基本方程, 得到单粒子波函数, 一体密度矩阵和两体关联函数的展开系数. 由(7)式得到一体密度矩阵  $\rho(1, 1', t)$ , 并由下式得到两体密度矩阵

$$\begin{aligned}
\rho_2(12, 1' 2', t) &= \{\rho(1, 1', t) \rho(2, 2', t) - \rho(1, 2', t) \rho(2, 1', t)\} \\
&\quad + C_2(12, 1' 2', t),
\end{aligned} \quad (13)$$

$C_2(12, 1' 2', t)$  的展开式见文献[1]中的(4)式. 由此可以计算任何物理量.

为计算单核子的平均位置和动量, 将  $n_{\alpha\beta}(t)$  通过  $U$  变换对角化:

$$n_{\alpha\alpha}(t) = \sum_{\alpha'\beta'} U_{\alpha\alpha'}^+ n_{\alpha'\beta'}(t) U_{\beta'\alpha}, \quad (14)$$

则:

$$\begin{aligned}
\langle r_\alpha(t) \rangle &= \sum_{\alpha'\beta'} U_{\alpha\alpha'}^+ \langle \alpha' | r | \beta' \rangle U_{\beta'\alpha}, \\
\langle p_\alpha(t) \rangle &= \sum_{\alpha'\beta'} U_{\alpha\alpha'}^+ \langle \alpha' | p | \beta' \rangle U_{\beta'\alpha},
\end{aligned} \quad (15)$$

其中

$$\begin{aligned}
\langle \alpha' | r | \beta' \rangle &= \sum_{ij} (d^{-1/2})_{\alpha'i} \langle i | r | j \rangle (d^{-1/2})_{j\beta'}, \\
\langle \alpha' | p | \beta' \rangle &= \sum_{ij} (d^{-1/2})_{\alpha'i} \langle i | p | j \rangle (d^{-1/2})_{j\beta'},
\end{aligned} \quad (16)$$

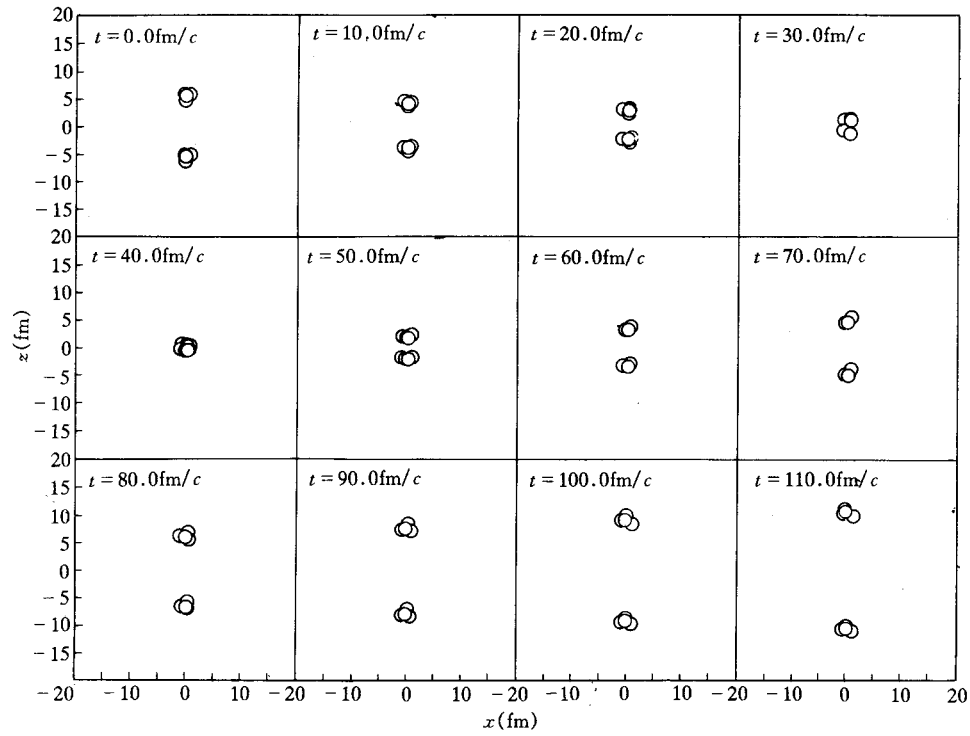


图1 没有碰撞项的QMD计算得到的  $x-z$  反应图

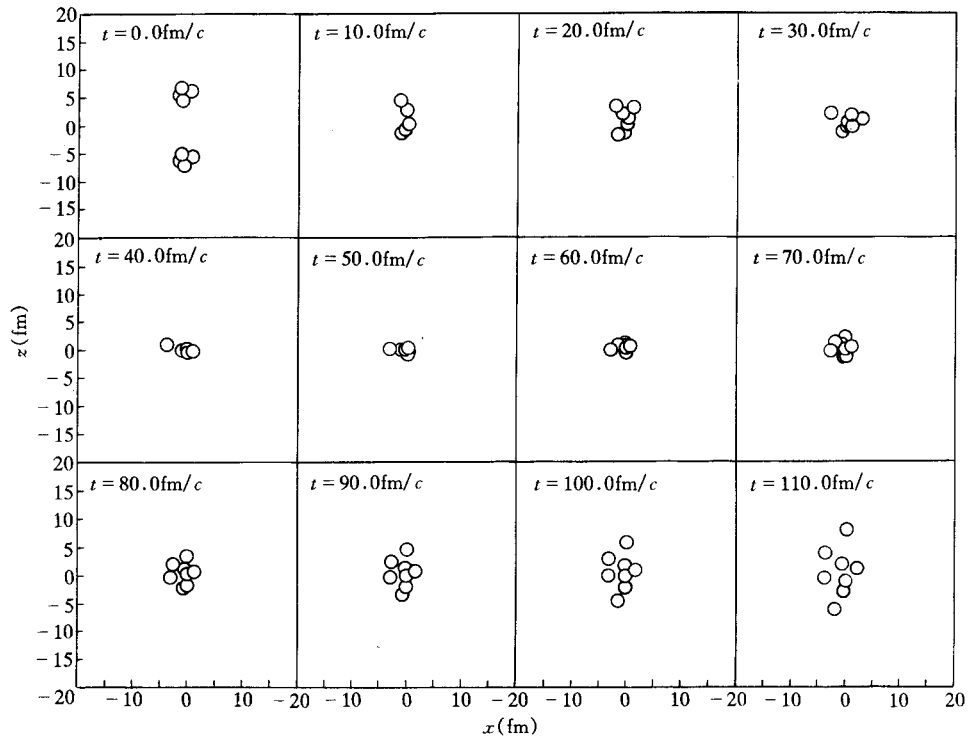


图2 TBCTT计算得到的反应图

有了  $\langle r_\alpha(t) \rangle$  和  $\langle p_\alpha(t) \rangle$ , 就可以用与 QMD 一样的方法来判断碎块和计算物理量.

### 3 计算结果和讨论

为检验 TBCTT 的有效性, 考虑到数值计算的方便性和机时的限制, 计算了在 40.0 MeV/u,  $b=0.0\text{fm}$  的条件下  ${}^4\text{He}+{}^4\text{He}$  的碰撞过程. 图 1 表示没有碰撞项的 QMD 计算得到的  $x-z$  反应平面上的核子分布. 可以看到, 两个  ${}^4\text{He}$  几乎对穿而过, 没有发生与碰撞有关的运输和耗散过程. 图 2 表示了 TBCTT 的计算结果. 可以发现, 从 50.0fm/c 开始, 碰撞系统出现了扩散的迹象. 随着时间的演化, 系统出现了由碰撞引起的运输和耗散过程, 这是重离子碰撞中的重要特点.

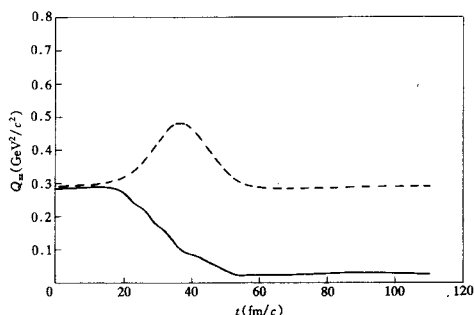


图3 动量四极矩  $Q_{zz}$  的时间演化

—— TBCTT, - - - 没有碰撞项的 QMD.

图 3 显示了碰撞系统动量四极矩  $Q_{zz}$  的时间演化.  $Q_{zz} = \langle 2p_z^2 - p_x^2 - p_y^2 \rangle$  用来描述系统是否热化并趋于平衡. 对于没有碰撞项的 QMD, 末态时 (110.0fm/c)  $Q_{zz}$  的值与初始时一样, 没有出现  $z$  方向集体动能的耗散. 而对 TBCTT, 末态时  $Q_{zz}$  几乎为零, 说明  $z$  方向的集体动能由于碰撞而耗散. 这也是重离子碰撞中的重要特征. 从这些数据可以看出 TBCTT 在描述重离子碰撞动力学方面是有效的. 这种描述基于完整的两体关联动力学, 因而是精确可靠的.

更进一步的工作, 如 TDHF 方法与关联动力学的耦合, 对碰撞动力学的系统研究与 QMD 和 BUU 模型结果的比较等, 目前正在进展中.

对李祝霞教授提供的 QMD 计算程序, M. Tohyama 教授提供的极具参考价值的 TDDM 程序, 沈彭年教授在数值计算中给予的帮助表示感谢.

### 参 考 文 献

- [1] 刘建业等, 高能物理与核物理, **20**(1996)1007.
- [2] 李希国等, 高能物理与核物理, **21**(1997)
- [3] J. Aichelin *et al.*, *Phys. Rev.*, **C37**(1988)2451.
- [4] G. F. Bertsch *et al.*, *Phys. Rep.*, **160**(1988)189.
- [5] S. E. Koonin, *Prog. Part. Nucl. Phys.*, **4**(1980)283.
- [6] S. J. Wang *et al.*, *Ann. Phys.*, **158**(1985)328; 王顺金、左维、郭华, 物理学进展, **16**(1996)99.
- [7] M. Gong *et al.*, *Z. Phys.*, **A335**(1990)153.
- [8] 刘航、刘建业等, 高能物理与核物理, **19**(1995)1040.
- [9] Liu Jianye, Zhang Shaoguang, *Z. Phys.*, **A348** (1994)31.

- [10] A. Ono *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **68**(1992)2898.  
[11] Feldemeir, *Nucl. Phys.*, **A515**(1990) 147.  
[12] P. O. Lowdin, *Phys. Rev.*, **97**(1955)1474.

## Two – Body Correlation Transport Theory for Heavy Ion Collision III. Numerical Study for Semiclassical Approximation

Liu Hang<sup>1</sup>   Zuo Wei<sup>1</sup>   Li Xiguo<sup>1,3</sup>   Liu Jianye<sup>1</sup>   Wang Shunjin<sup>2,4</sup>

1 (*Institute of Modern Physics, The Chinese Academy of Sciences, Lanzhou 730000*)

2 (*Department of Modern Physics, Lanzhou University, Lanzhou 730000*)

3 (*Department of Physics, Northwest Normal University, Lanzhou 730070*)

4 (*Institute of Modern Physics, South west Jiaotong University, Chengdu 610031*)

Received 29 December 1995

### Abstract

In order to demonstrate the usefulness of Two Body Correlation Transport Theory (TBCTT), by using the Quantum Molecular Dynamics (QMD) without collision term, the numerical study for the semiclassical approximation of TBCTT is carried out. The calculation results show that the TBCTT can well describe the transport and dissipative process in heavy ion collisions.

**Key words** heavy ion collision, transport theory, semiclassical approximation, quantum molecular dynamics.