

有限温度自洽半经典方程及其 虚时迭代解*

李 国 强

杭州大学物理系, 杭州, 310028

1990年3月27日收到; 1990年6月7日收到修改稿

利用 Skyrme 力和半经典近似, 推导了有限温度自洽半经典 (FTSCSC) 方程, 即通常所说的 Euler-Lagrange 方程. 利用虚时迭代方程对此方程作数值求解, 以确定热核的核子密度, 并研究其部分静态性质.

PACC: 2110; 0260; 2160J

一、引 言

原子核是一个具有特殊复杂性的量子多体系统. 首先, 人们对核子间的短程强相互作用(核力)的了解依旧十分肤浅. 其次, 由于这种强相互作用, 特别是短程的排斥芯, 使得人们无法直接利用量子微扰理论来研究核多体问题.

处理量子多体系统总是按粒子间的关联强弱来展开. 对于核的基态和低激发态而言, 如果用有效核力来等价核子间的二体关联, 那么以独立粒子近似为基础的 Hartree-Fock (HF) 方法是一个好的理论. 但利用现实核力的 HF 计算仍是十分复杂的, 为此常利用唯象的核子-核子相互作用. Skyrme 力是近 20 年来用得比较广泛和成功的一种唯象核力. 它具有零力程, 且动量和密度相关, 被用于研究原子核基态性质^[3,4]、巨共振性质^[5,6]、计算核子-核光学势^[7,8]和核-核光学势^[9,10].

在中能(每核子入射能量为十几至几十兆电子伏)重离子碰撞过程中, 部分入射动能转化为系统的内禀能量, 由此开辟了研究原子核性质的一个新领域——热核的产生、演化和衰变^[11]. 关于热核静态性质的研究在其中占有十分重要的地位. 热核有两个十分重要的特点. 首先, 由于激发, 不仅费密能级以上的状态, 甚至连续谱都有被占据的可能, 因此在有限温度的 Hartree-Fock (FTHF) 计算中, 必须计入的单粒子状态数将随温度指数上升, 使得 FTHF 计算变得相当复杂^[12]. 其次, 已有的 FTHF 计算表明, 壳效应的影响随温度升高逐渐减弱. 当 $T \geq 2.5$ MeV 时, 壳效应的影响已基本上可以忽略不计, 因此用忽略壳效应的半经典方法取代 FTHF 方法研究热核的静态性质既是十分必要, 也是非常合理的.

* 国家自然科学基金(青年科学基金)资助的课题.

文献[13,14]对 FTSCSC 方法作了比较. 从 Skyrme 力出发, 利用有限温度 Bloch 密度矩阵和 Wigner-Kirkwood 展开, 得到了自由能密度泛函. 在求解变分方程时, 曾利用四参量的费密函数将微分方程转化为代数方程, 相当于在截断的变分空间中讨论问题. 文献[15]指出这种试探密度方法的局限性. 本文将用虚时迭代方法直接求解变分方程, 以确定热核的自由能极小的状态. 在推导变分方程 (即 Euler-Lagrange 方程, 亦即 FTSCSC 方程) 时, 采取了下列近似: (1) 对动能密度泛函只计入了“冷”的密度梯度修正; (2) 忽略了熵密度泛函中的有限尺寸效应. 文献[16]论证了这些近似的合理性.

本文仍采用 Skyrme 力作为核子-核子相互作用, 并认为其参数与温度无关. 关于核力的温度依赖性, 文献[17]的研究表明, 当温度由 0 MeV 上升到 10 MeV, 核力的变化小于 5%, 因此在 FTHF 等计算中忽略核力的温度依赖性是合理的.

二、FTSCSC 方程的推导

Skyrme 力的一般形式及常用参数见文献[18]. 在 Skyrme 参数与温度无关的假定下, 核能量密度 $\mathcal{H}(\mathbf{r})$ 和零温度有相同的形式, 它由核子密度 ρ_q , 动能密度 τ_q 和自旋-轨道密度 J_q 三部分组成. 对于热核, 变分对象是自由能. 为了得到自由能密度泛函 $\mathcal{F}[\rho_n, \rho_p]$, 不仅要推导动能密度泛函 $\tau_q[\rho_n, \rho_p]$ 和自旋-轨道密度泛函 $J_q[\rho_n, \rho_p]$, 而且还必须知道熵密度泛函 $\mathcal{S}_q[\rho_n, \rho_p]$. 关于这些泛函的推导见文献[13], 其中涉及大量的 Fermi-Dirac 积分 $I_\nu(y_q)$

$$I_\nu(y_q) = \int_0^\infty \frac{x^\nu}{1 + \exp(x - y_q)} dx \quad \nu > -1;$$

$$I_{\nu-1}(y_q) = \frac{1}{\nu} \frac{d}{dy} I_\nu(y_q) \quad \nu < -1. \quad (1)$$

式中简并参数 y_q 由下列积分方程 (核子数条件) 给出:

$$\rho_q(\mathbf{r}) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_q^* T}{\hbar^2} \right)^{3/2} I_{1/2}(y_q). \quad (2)$$

也就是说, y_q 通过 ρ_q 表现为空间位置 $\mathbf{r}$ 的函数.

有限温度下的动能密度泛函 $\tau_q[\rho_n, \rho_p]$ 和熵密度泛函 $\mathcal{S}_q[\rho_n, \rho_p]$ 的形式是相当复杂的. 为简单起见, 在推导 FTSCSC 方程时假定: (1) 动能密度泛函中只计入零温度的密度梯度修正; (2) 熵密度只计算到最低级的 Thomas-Fermi 近似. 这样 $\tau_q[\rho_n, \rho_p]$ 和 $\mathcal{S}_q[\rho_n, \rho_p]$ 分别为

$$\begin{aligned} \tau_q[\rho_n, \rho_p] = & \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_q^* T}{\hbar^2} \right)^{5/2} I_{3/2}(y_q) + \frac{1}{36} \frac{(\nabla \rho_q)^2}{\rho_q} \\ & + \frac{1}{3} \Delta \rho_q + \frac{1}{6} \frac{\Delta \rho_q \cdot \nabla s_q}{s_q} + \frac{1}{6} \rho_q \frac{\Delta s_q}{s_q} - \frac{1}{12} \rho_q \left(\frac{\nabla s_q}{s_q} \right)^2 \\ & + \frac{w_0^2}{8} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^2 \rho_q \frac{1}{s_q^2} (\nabla \rho + \nabla \rho_q)^2, \end{aligned} \quad (3)$$

$$\mathcal{S}_q[\rho_n, \rho_p] = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_q^* T}{\hbar^2} \right)^{3/2} \left(-y_q I_{1/2}(y_q) + \frac{5}{3} I_{3/2}(y_q) \right), \quad (4)$$

式中核子有效质量为

$$s_q = \frac{m}{m_q^*} = 1 + \frac{2m}{\hbar^2} [(g_0 + g_1\rho)\rho_q + (g_2 + g_3\rho)\rho_{-q}]. \quad (5)$$

自由能密度泛函 $\mathcal{F}[\rho_n, \rho_p] = \mathcal{H}[\rho_n, \rho_p] - T\mathcal{S}[\rho_n, \rho_p]$. 考虑到核子数给定这一约束条件, 拉格朗日泛函为

$$\mathcal{L}[\rho_n, \rho_p] = \int \{ \mathcal{H} - T(\mathcal{S}_n + \mathcal{S}_p) - \mu_n \rho_n - \mu_p \rho_p \} d\mathbf{r}. \quad (6)$$

与零温度相比, 相当于增加了一个关于温度 T 的约束条件.

定态条件 $\delta\mathcal{L}[\rho_n, \rho_p] = 0$ 相当于下列变分方程:

$$\frac{\delta\mathcal{F}}{\delta\rho_n} - \mu_n = 0, \quad (7a)$$

$$\frac{\delta\mathcal{F}}{\delta\rho_p} - \mu_p = 0. \quad (7b)$$

(7) 式即通常所说的 Euler-Lagrange 方程, 亦即 FTSCSC 方程

$$\frac{\delta}{\delta\rho_q} = \frac{\partial}{\partial\rho_q} - \nabla \frac{\partial}{\partial\nabla\rho_q} + \Delta \frac{\partial}{\partial\Delta\rho_q}. \quad (8)$$

并利用 $\mathcal{F}[\rho_n, \rho_p]$ 可以得到 FTSCSC 方程的具体形式. 推导过程中必须注意, y_q 通过 (2) 式表现为 ρ_q 的函数, 因而也必须对 ρ_q 求导. 计算中还用到下列结果:

$$\frac{\partial}{\partial\rho_q} I_{3/2}(y_q) = \frac{3}{2} I_{1/2}(y_q) \frac{\partial y_q}{\partial\rho_q},$$

以及

$$\begin{aligned} \frac{\partial s_n}{\partial\rho_n} &= \frac{2m}{\hbar^2} g_{1n}, & \frac{\partial s_n}{\partial\rho_p} &= \frac{2m}{\hbar^2} g_{2p}, \\ \frac{\partial s_p}{\partial\rho_n} &= \frac{2m}{\hbar^2} g_{2n}, & \frac{\partial s_p}{\partial\rho_p} &= \frac{2m}{\hbar^2} g_{1p}, \end{aligned}$$

式中

$$\begin{aligned} g_{1q} &= g_0 + 2g_1\rho_q + (g_1 + g_3)\rho_{-q}, \\ g_{2q} &= g_2 + 2g_3\rho_q + (g_1 + g_3)\rho_{-q}. \end{aligned}$$

最后可以得到 FTSCSC 方程的具体形式为

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{2m_n^*} \Delta\varphi_n + \left\{ \frac{9}{8} \frac{\hbar^2}{2m_n^*} \frac{\Delta\varphi_n}{\varphi_n} - \frac{\hbar^2}{9m_n^*} \frac{(\nabla\varphi_n)^2}{\varphi_n^2} \right. \\ & + T y_n + \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2mT}{\hbar^2} \right)^{5/2} (g_{1n} I_{3/2}(y_n) / s_n^{5/2} + g_{1p} I_{3/2}(y_p) / s_p^{5/2}) \\ & \left. + g_{1n} \left(\frac{1}{36} \frac{(\nabla\rho_n)^2}{\rho_n} + \frac{1}{3} \Delta\rho_n \right) + g_{2p} \left(\frac{1}{36} \frac{(\nabla\rho_p)^2}{\rho_p} + \frac{1}{3} \Delta\rho_p \right) \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{6} [2g_1((\nabla\rho_n)^2 + \rho_n\Delta\rho_n) + (g_1 + g_3)(\nabla\rho_n \cdot \nabla\rho_p + \rho_n\Delta\rho_p) \\
& + (g_1 + g_3)((\nabla\rho_p)^2 + \rho_p\Delta\rho_p) + 2g_3(\nabla\rho_n \cdot \nabla\rho_p + \rho_p\Delta\rho_n) \\
& - g_{1n}\Delta\rho_n - g_{2p}\Delta\rho_p] + \frac{2m}{\hbar^2} \frac{w_0^2}{8} \left[\frac{1}{s_n} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \frac{\rho_n}{s_n} g_{1n} - 1 \right) (2\nabla\rho_n + \nabla\rho_p)^2 \right. \\
& + \frac{2m}{\hbar^2} \frac{\rho_p}{s_p^2} g_{2n} (2\nabla\rho_p + \nabla\rho_n)^2 - \frac{4\rho_n}{s_n} (2\Delta\rho_n + \Delta\rho_p) + \frac{2\rho_p}{s_p} (2\Delta\rho_p + \Delta\rho_n) \Big] \\
& - \frac{1}{12} \frac{2m}{\hbar^2} \left[\frac{1}{s_n} \left(1 - \frac{2m}{\hbar^2} \frac{\rho_n}{s_n} g_{1n} \right) (g_{1n}\nabla\rho_n + g_{2p}\Delta\rho_p)^2 \right. \\
& - \frac{2m}{\hbar^2} \frac{\rho_p}{s_p^2} g_{2n} (g_{1p}\nabla\rho_p + g_{2n}\nabla\rho_n)^2 + \frac{\rho_n}{s_n} (4g_1g_{1n}\nabla\rho_n)^2 \\
& + 2(g_1 + g_2)g_{2p}((\nabla\rho_p)^2 - 2g_{1n}^2\Delta\rho_n + (4g_1\rho_{2p} + 2(g_1 + g_3)g_{1n})\nabla\rho_n \cdot \nabla\rho_p) \\
& + \frac{\rho_p}{s_p} (4g_3g_{2n}(\nabla\rho_n)^2 + 2(g_1 + g_3)g_{1p}(\nabla\rho_p)^2 - 2g_{2n}^2\Delta\rho_n \\
& + (4g_3g_{2n} + 2(g_1 + g_3)g_{1p})\nabla\rho_n \cdot \nabla\rho_p) \Big] + g_5\alpha^{\alpha-1}\rho_n\rho_p \\
& + 2(g_4 + g_5\rho^\alpha)\rho_n + g_7\alpha^{\alpha-1}\rho_n\rho_p + (g_6 + g_7\rho^\alpha)\rho_p \\
& + g_7(\rho_n\Delta\rho_n + \rho_p\Delta\rho_p) + g_{11}(\rho_n\Delta\rho_p + \rho_p\Delta\rho_n) \\
& + (g_8 + g_9\rho)\Delta\rho_n + (g_{10} + g_{11}\rho)\Delta\rho_p \\
& + g_{12}((\nabla\rho_n)^2 + (\nabla\rho_p)^2) - g_{12}\rho\Delta\rho_n \Big\} \varphi_n = \mu_n\varphi_n. \tag{9}
\end{aligned}$$

(9) 式相当于

$$-\frac{\hbar^2}{2m_n^*} \Delta\varphi_n + U_n(\rho_n, \rho_p, T)\varphi_n = \mu_n\varphi_n. \tag{10a}$$

(9) 和 (10a) 式中的 φ_n 由下式定义:

$$\rho_n(\mathbf{r}) = \varphi_n^2(\mathbf{r}). \tag{11}$$

类似地, 对质子可引入 $\varphi_p(\mathbf{r})$, 相当的 FTSCSC 方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m_p^*} \Delta\varphi_p + U_p(\rho_n, \rho_p, T)\varphi_p = \mu_p\varphi_p. \tag{10b}$$

(10) 式和关于单粒子波函数的 HF 方程非常相似, U_n 和 U_p 相当于单粒子势, 通过它们, (10a) 和 (10b) 式互相耦合、求解 HF 方程所用的数值方法可能适用于求解 FTSCSC 方程。

三、虚时迭代方法与计算结果

虚时迭代方法是求解非线性微分方程的有效途径。在核物理学中, 此方法最初被用于求解下列时间相关 Hartree-Fock (TDHF) 方程^[11]:

$$i\hbar \frac{\partial |\phi_i(t)\rangle}{\partial t} = h(t) |\phi_i(t)\rangle. \tag{12}$$

将时间分立化, 即令 $t_n = n\Delta t$, 则 t_{n+1} 时刻 (12) 式的解可近似表示为

$$|\phi_i^{(n+1)}\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \Delta t h^{(n+\frac{1}{2})}\right) |\phi_i^{(n)}\rangle. \quad (13)$$

可以证明, (13) 式给定的变换保证演化(迭代)过程 HF 能量不变, 即 $E^{(n+1)} - E^{(n)} = 0$. 因此可以相信, 如果用虚时 $-i\Delta t$ 取代 (13) 式中的实时 Δt , 那么迭代的每一步均能使 HF 能量下降, 亦即 $E^{(n+1)} - E^{(n)} \leq 0$, 经过适当的迭代次数后能得到近似的最低能量状态. 这种求解 HF 方程的数值方法, 即为所谓的虚时迭代方法. 一般引入一个正的参数 $\lambda = \Delta t/\hbar$, 则迭代变换关系^[20]为

$$|\phi_i^{(n+1)}\rangle = \exp(-\lambda h^{(n+\frac{1}{2})}) |\phi_i^{(n)}\rangle. \quad (14)$$

这一变换是非么正的, 在进行下一次迭代前, 必须用 Schmidt 正交化方法将 $\{|\phi_i^{(n+1)}\rangle\}$ 正交化, 以得到 $\{|\phi_i^{(n+1)}\rangle\}$.

若 λ 足够小, 使得线性近似对 (13) 式成立, 那么可以证明, 对相继两次迭代有

$$\begin{aligned} E^{(n+1)} - E^{(n)} &= -2\lambda \text{Tr}(A^+ A) \leq 0, \\ A^+ &= \rho^{(n)} h^{(n+\frac{1}{2})} (1 - \rho^{(n)}). \end{aligned} \quad (15)$$

方程 (10) 可表示为

$$h[\rho_q] \phi_q = \mu_q \rho_q. \quad (16)$$

采用下列迭代:

$$\varphi^{(n+1)} = \exp(-\lambda h^{(n+\frac{1}{2})}) \phi^{(n)}. \quad (17)$$

在迭代的每一步均要求 ϕ_q 满足下列粒子数条件:

$$\int \rho_q(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \int \phi_q^2(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \begin{cases} N & q = n; \\ z & q = p. \end{cases} \quad (18)$$

对于变换 (17) 式, 可以证明^[21]

$$E^{(n+1)} - E^{(n)} = -2\lambda N [\langle (h^{(n)})^2 \rangle - \langle h^{(n)} \rangle^2] \leq 0. \quad (19)$$

也就是说, 利用 (17) 式, 经过适当次迭代, 总可以获得一个能量最低的状态. 对于处于有限温度的热核, 相当于一个自由能最小的状态.

本文只考虑球形热核, 这时 FTSCSC 方程是一维的. 考虑到迭代收敛性及计算工作量, 取 $\lambda = 0.005$, 将径向坐标 $r(0-20 \text{ fm})$ 分立化, 取网格的尺度 $\Delta r = 0.2 \text{ fm}$, 这样相当于有 100 个格点. 虚时迭代方法同样适用于形变核, 只是工作量将大为增加. 例如对三轴不对称核, 必须考虑 x, y, z 三个方向. 若认为它们的变化范围为 $0-10 \text{ fm}$, 并取 $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0.5 \text{ fm}$, 则格点数目为 $20 \times 20 \times 20 = 8000$.

研究了 4 个球形核 ^{40}Ca , ^{90}Zr , ^{120}Sn 和 ^{208}Pb 在温度 T 为 2, 4 和 6 MeV 的性质. 计算结果包括:

1. 核子密度随 T 的变化. 图 1 和图 2 给出 ^{40}Ca 和 ^{208}Pb 的总核子密度 $\rho (= \rho_n + \rho_p)$ 关于径向位置 r 和温度 T 的函数. 随 T 升高, 核子分布向外移动.

2. 核子均方根半径随 T 的变化. 核子均方根半径可由下式计算:

$$r_q = \left\{ \frac{\int r^2 \rho_q d\mathbf{r}}{\int \rho_q d\mathbf{r}} \right\}^{1/2}.$$

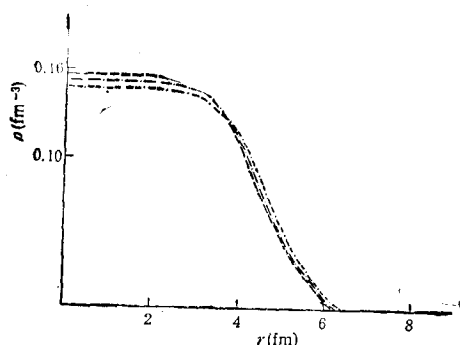


图 1 ^{40}Ca 总核子密度 ——为 $T = 2\text{MeV}$;
- - - 为 $T = 4\text{MeV}$; - · - · 为 $T = 6\text{MeV}$

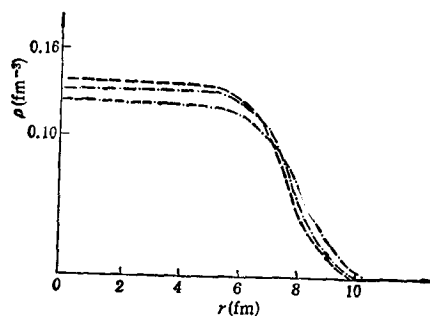


图 2 ^{208}Pb 总核子密度 图注同图 1

4 个核的 r_n 和 r_p 随 T 的变化见表 1.

表 1 核子均方根半径随温度的变化(单位为 fm)

T (MeV)	^{40}Ca		^{90}Zr		^{120}Sn		^{208}Pb	
	r_n	r_p	r_n	r_p	r_n	r_p	r_n	r_p
2	3.36	3.40	4.29	4.21	4.81	4.62	5.69	5.54
4	3.55	3.58	4.45	4.37	4.95	4.75	5.81	5.67
6	3.84	3.86	4.70	4.61	5.19	5.01	6.02	5.88

所有计算中均用了 Skyrme 力. 本工作的目的主要是寻找一种求解 FTSCSC 方程的数值方法, 从而避免由于采用试探密度所导致的不足.

- [1] T. H. R. Skyrme, *Phil. Mag.*, **1**(1956), 1043.
- [2] T. H. R. Skyrme, *Nucl. Phys.*, **9**(1959), 615.
- [3] D. Vautherin, D. M. Brink, *Phys. Rev.*, **C5**(1972), 626.
- [4] Li Guoqiang *et al.*, *Commun. Theor. Phys.*, **12**(1989), 157.
- [5] Li Guoqiang, Xu Gongou, *J. Phys. G*, **14**(1988), 1387.
- [6] 李国强、徐躬耦, 高能物理与核物理, **13**(1989), 544; 642.
- [7] Ge Lingxian *et al.*, *Nucl. Phys.*, **A459**(1986), 77.
- [8] 施建青、李国强、高琴, 物理学报, **39**(1990), 24.
- [9] Li Guoqiang, Xu Gongou, *Nucl. Phys.*, **A492**(1989), 340.
- [10] 李国强等, 物理学报, **38**(1989), 534; *Acta Physica Sinica*, **38** (1989), 211.
- [11] E. Suraud, Ch. Gregoire, B. Tamain, *Prog. Part. Nucl. Sci.*, **23**(1989), 357.
- [12] P. Bonche *et al.*, *Nucl. Phys.*, **A427**(1984), 278; **A436**(1985), 265.
- [13] 李国强、徐躬耦, 物理学报, **38**(1989), 1413.
- [14] Li Guoqiang, Xu Gongou, *Commun. Theor. Phys.*, **12**(1989), 33.
- [15] E. Suraud, *Nucl. Phys.*, **A462**(1987), 107.
- [16] J. Nemeth *et al.*, *Z. Phys.*, **A323**(1986), 49.
- [17] A. Lejeune *et al.*, *Nucl. Phys.*, **A453**(1986), 198.
- [18] Li Guoqiang, *Commun. Theor. Phys.*, **13**(1990), No.4.
- [19] H. Flocard *et al.*, *Phys. Rev.*, **C17**(1978), 1682.
- [20] K. T. R. Davies *et al.*, *Nucl. Phys.*, **A342**(1980), 111.
- [21] S. Levit, *Phys. Lett.*, **139B**(1984), 147.

FINITE TEMPERATURE SELF-CONSISTENT SEMICLASSICAL EQUATION AND ITS IMAGINARY TIME STEP SOLUTION

LI GUO-QIANG

Department of Physics, Hangzhou University, Hangzhou, 310028

(Received 27 March 1990; revised manuscript received 7 June 1990)

ABSTRACT

The finite temperature self-consistent semiclassical equation is derived with the utilization of Skyrme force and semiclassical approximation. This equation is solved numerically by employing the imaginary time step method. The nucleon densities of some hot spherical nuclei are determined and the RMS radii are calculated.

PACC: 2110; 0260; 2160J