

热核热容量和不可压缩系数的半经典计算*

李国强** 徐躬耦
(南京大学) (南京大学, 兰州大学)

摘 要

给出了定域势情形下, 有限温度半经典方法的主要公式. 由此讨论了热核的性质, 特别计算了热容量和不可压缩系数这两个重要物理量, 并分析了它们的温度依赖关系. 部分结果同有限温度 HF 计算作了比较.

一、引 言

随着中能重离子核反应实验的不断发展, 关于高激发能态原子核性质的理论研究已成为核物理的一个十分重要的前沿领域^[1,2]. 在碰撞过程中, 入射核的一部分能量转化为复合系统的内禀能量, 可以用一个内禀温度 T 来等价地描述这样的内禀激发, 所以通常又称其为热核. 研究热核的一个重要方面就是研究其各种性质同温度 T 的关系, 探讨稳定核所能达到的极限温度等.

人们很自然会想到用有限温度 HF 方法去研究热核的性质, 但随温度的升高, 计算中必须包括的组态数目指数上升, 并且连续谱将在其中起较大的作用, 从而有限温度 HF 方法将花费大量的数值计算时间^[3,4], 在实际应用中并不方便. 另一方面, 已有的有限温度 HF 方法表明, 存在一个和核大小基本无关的转折温度 $T_c \approx 2.5-3.0\text{MeV}$, 当核温度高于此转折温度时, 壳效应已不再起作用^[5]. 因此我们相信, 忽略了壳效应的半经典方法将非常适用于描述热核的性质, 能够在少得多的数值计算时间内给出和 HF 计算相一致的结果, 是一种即合理又方便的理论方法.

半经典方法在核物理中的应用近年来得到人们很大的重视, 带有 Uehling-Uhlenbeck 碰撞项的 Vlasov (VUU) 方程似乎是研究中能重离子碰撞的可行途径^[6]. 而 Brack 等人^[7,8]的工作表明, 此方法可用于计算象形变核裂变位垒这样的复杂物理量. 我们曾用此方法研究了原子核的巨共振性质, 得到了和 HF + RPA 及实验结果相符的结果^[9-11]. 我们还用此方法确定的核基态密度分布计算了核-核光学势的自旋-轨道贡献^[12]. 总之, 已有的工作表明, 零温度下的半经典方法能很好地再现原子核的平均性质和集体行为.

本文中我们将推广零温度下半经典方法到有限温度, 并用此方法讨论热核的性质, 特别是计算热核的热容量和不可压缩性系数. 为了简单起见, 我们采用了一条简化的途径, 即认为平均场 $V(\mathbf{r})$ 已经确定. 为接近实际起见, 我们取下列 Woods-Saxon 势

* 本项目受国家自然科学基金资助.

** 现在通讯地址: 杭州大学物理系.

本文于1988年4月26日收到.

第
一
二
三
四
五
六
七
八
九
十
十一
十二
十三
十四
十五
十六
十七
十八
十九
二十
二十一
二十二
二十三
二十四
二十五
二十六
二十七
二十八
二十九
三十
三十一
三十二
三十三
三十四
三十五
三十六
三十七
三十八
三十九
四十
四十一
四十二
四十三
四十四
四十五
四十六
四十七
四十八
四十九
五十
五十一
五十二
五十三
五十四
五十五
五十六
五十七
五十八
五十九
六十
六十一
六十二
六十三
六十四
六十五
六十六
六十七
六十八
六十九
七十
七十一
七十二
七十三
七十四
七十五
七十六
七十七
七十八
七十九
八十
八十一
八十二
八十三
八十四
八十五
八十六
八十七
八十八
八十九
九十
九十一
九十二
九十三
九十四
九十五
九十六
九十七
九十八
九十九
一百

其
中
其
其

$$V(r) = \frac{-V_0}{1 + \exp[(r - R_0/a)]}, \quad (1.1)$$

$$V_0 = 50 \text{ MeV}, R_0 = 1.2 A^{1/3} \text{ fm}, a = 0.51 \text{ m}.$$

显然这样的计算是非自洽的,但它能反映有限温度半经典方法的主要特点。并且由于 Woods-Saxon 势比较接近于真实的平均场,这样的计算在温度不太高时是有一定的实际意义的。

本文第二节讨论有限温度半经典方法并给出主要公式,计算结果及讨论见于第三节,最后一节为小结。

二、方法和公式

同为零温度情况下一样, Bloch 密度矩阵及 Wigner-Kirkwood 展开是对物理量作 \hbar 展开的有效途径。文献[8]已经指出,有限温度下的 Bloch 密度矩阵 $B_T(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \beta_q)$ 和零温度下的 Bloch 密度矩阵 $B_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \beta_q)$ 有下列关系:

$$B_T(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \beta_q) = B_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \beta_q) \frac{\pi \beta_q T}{\sin(\pi \beta_q T)}. \quad (2.1)$$

其中已明确区别了质子和中子(暂不考虑质子间的库仑相互作用)。 $q = \frac{1}{2} \left(-\frac{1}{2} \right)$ 代表中子(质子)。核子密度分布同 Bloch 密度有下列关系:

$$\rho_q(\mathbf{r}, \lambda_q) = \mathcal{L}_{\beta_q \rightarrow \lambda_q}^{-1} \left[\frac{1}{\beta_q} B_T(\mathbf{r}, \beta_q) \right]. \quad (2.2)$$

其中 $\mathcal{L}_{\beta_q \rightarrow \lambda_q}^{-1}$ 表示由 β_q 到 λ_q 的逆 Laplace 变换。

对于有限温度问题,自由能和熵是两个重要物理量,它们可以由下式得到:

$$F = \int [\mathcal{F}_n(\mathbf{r}, \lambda_n) + \mathcal{F}_p(\mathbf{r}, \lambda_p)] d\mathbf{r}, \quad (2.3)$$

$$S = \int [\mathcal{S}_n(\mathbf{r}, \lambda_n) + \mathcal{S}_p(\mathbf{r}, \lambda_p)] d\mathbf{r}. \quad (2.4)$$

其中熵密度和自由能密度分别为:

$$\mathcal{F}_q(\mathbf{r}, \lambda_q) = \lambda_q \rho_q - \mathcal{L}_{\beta_q \rightarrow \lambda_q}^{-1} \left[\frac{\lambda_q}{\beta_q} B_T(\mathbf{r}, \beta_q) \right], \quad (2.5)$$

$$\mathcal{S}_q(\mathbf{r}, \lambda_q) = -\frac{\partial}{\partial T} \mathcal{F}_q(\mathbf{r}, \lambda_q) \Big|_{\rho_q = \text{const.}} \quad (2.6)$$

而核子动能密度则可由下列关系得到:

$$\begin{aligned} \mathcal{K}_q(\mathbf{r}) &= \mathcal{H}_q(\mathbf{r}) - T \mathcal{S}_q(\mathbf{r}) \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \tau_q(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) \rho_q(\mathbf{r}) - T \mathcal{S}_q(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (2.7)$$

对于定域势 $V(\mathbf{r})$, 上述各项展开到 \hbar^2 项的结果为:

$$\rho_q(\mathbf{r}) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} T \right)^{\frac{3}{2}} \left\{ I_{1/2}(y_q) + \frac{\hbar^2}{48m} \left[\frac{\Delta V}{T} I_{-3/2}(y_q) \right] \right\}$$

$$+ \frac{3}{4} \frac{(\Delta V)^2}{T^3} I_{-5/2}(y_q) \Big] \Big\}, \quad (2.8)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_q(\mathbf{r}) = & \lambda_q \rho_q - \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} T \right)^{\frac{3}{2}} \left\{ \frac{2}{3} I_{3/2}(y_q) - \frac{\hbar^2}{24m} \right. \\ & \cdot \left[\frac{\Delta V}{T} I_{-1/2}(y_q) + \frac{1}{4} \left(\frac{\nabla V}{T^2} \right) I_{-3/2}(y_q) \right] \Big\}, \quad (2.9) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_q(\mathbf{r}) = & -y_q \rho_q(\mathbf{r}) + \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} T \right)^{\frac{3}{2}} \left\{ \frac{5}{3} I_{5/2}(y_q) \right. \\ & \left. - \frac{\hbar^2}{48m} \left[\frac{\Delta V}{T^2} I_{-1/2}(y_q) - \frac{1}{4} \left(\frac{\nabla V}{T^3} \right)^2 I_{-3/2}(y_q) \right] \right\}, \quad (2.10) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \tau_q(\mathbf{r}) = & \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} T \right)^{\frac{3}{2}} \left\{ I_{3/2}(y_q) - \frac{\hbar^2}{48m} \left[5 \frac{\Delta V}{T^2} I_{-1/2}(y_q) \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{9}{4} \frac{(\nabla V)^2}{T^3} I_{-3/2}(y_q) \right] \right\}. \quad (2.11) \end{aligned}$$

按定义,热容量密度为:

$$\begin{aligned} c_q(\mathbf{r}) = & T \left(\frac{\partial \mathcal{S}_q(\mathbf{r})}{\partial T} \right) \Big|_{\rho_q = \text{const}} \\ = & \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} T \right)^{\frac{3}{2}} \left\{ \frac{\lambda_q - V}{T} \left[-\frac{3}{2} I_{1/2}(y_q) \right. \right. \\ & + \frac{\hbar^2}{48m} \left[\frac{1}{2} \frac{\Delta V}{T^2} I_{-3/2}(y_q) + \frac{9}{8} \frac{(\nabla V)^2}{T^3} I_{-5/2}(y_q) \right] \Big\} \\ & + \frac{\hbar^2}{48m} \left[\frac{\Delta V}{2T^2} I_{-1/2}(y_q) - \frac{3}{8} \frac{(\nabla V)^2}{T^3} I_{-3/2}(y_q) \right] \Big\}. \quad (2.12) \end{aligned}$$

系统总热容量为:

$$C = C_n + C_p = \int \{c_n(\mathbf{r}) + c_p(\mathbf{r})\} d\mathbf{r}. \quad (2.13)$$

而单位核子热容量

$$c = \frac{C}{A}. \quad (2.14)$$

以上各式中出现的 $I_\nu(y_q)$ 是 ν 阶 Fermi-Dirac 积分,其定义为:

$$I_\nu(y_q) = \int_0^\infty \frac{x^\nu}{1 + \exp(x - y_q)} dx, \quad \nu > -1, \quad (2.15a)$$

当 $\nu < -1$ 时, $I_\nu(y)$ 则经由下列解析延拓定义:

$$I_{\nu-1}(y_q) = \frac{1}{\nu} \frac{dI_\nu(y_q)}{dy}, \quad \nu < -1. \quad (2.15b)$$

其中 y_q 是一个和核子化学势及温度 T 有关的宗量:

$$y_q = \frac{\lambda_q - V}{T}. \quad (2.16)$$

本文所讨论的另一个重要物理量是热核的不可压缩系数 K_A 。由有限核的不可压缩系数 K_A 可得到核物质的不可压缩系数 K_m , 后者在研究热核物质的状态(主要是在天体核物理领域)时有重要应用。 K_A 可通过 isoscalar 巨单极共振的激发能量 E_M 定义^[13]:

$$K_A = \frac{m}{\hbar^2} \langle r^2 \rangle E_M^2. \quad (2.17)$$

而 E_M 则可由下式计算:

$$E_M = \sqrt{\frac{m_3}{m_1}}, \quad (2.18)$$

其中强度函数矩 m_k 定义为:

$$m_k = \sum_{n \neq 0} (E_n - E_0)^k |\langle n | \hat{F} | 0 \rangle|^2. \quad (2.19)$$

由(2.18)式得到的 E_M 称为巨单极共振的 scaling 能量。

对于 isoscalar 巨单极共振, 激发算子可取为:

$$\hat{F} = \sum_{i=1}^A r_i^2$$

于是:

$$m_1 = 2A \frac{\hbar^2}{m} \langle r^2 \rangle, \quad (2.20)$$

$$m_3 = 16 \left(\frac{\hbar^2}{m} \right)^2 \left\langle \left(\frac{\hbar^2}{m} \tau + V \right) \right\rangle, \quad (2.21)$$

其中 ρ 及 τ 已由(2.8)及(2.11)式给出。

三、计算结果和讨论

从公式(2.8)–(2.11)我们可以看到, 在实际计算中涉及五个 Fermi-Dirac 积分, 即 $I_{3/2}$, $I_{1/2}$, $I_{-1/2}$, $I_{-3/2}$ 和 $I_{-5/2}$ 。其中 $I_{3/2}$, $I_{1/2}$ 和 $I_{-1/2}$ 可利用对 (2.15a) 作六十四点高斯积分直接计算, 而 $I_{-3/2}$ 和 $I_{-5/2}$ 必须利用解析延拓 (2.15b) 式计算。事实上, 当 $\nu < -1$ 时且为非整数时, $I_\nu(y)$ 可用下列级数展开:

$$I_\nu(y) = \frac{2\pi}{\sin(\pi\nu)} \sum_{k=0}^{\infty} (r_k^2 + y^2)^{\nu/2} \cos\left(\frac{1}{2}\pi\nu + \nu \arctg(y/r_k)\right),$$

其中 $r_k = \pi(2k+1)$ 。

计算表明, 对 $\nu = -\frac{3}{2}$ 求和到前 500 项, 对 $\nu = -5/2$ 求和到前 50 项, 均可达到相对精度 10^{-4} 。

核子化学势 λ_n 和 λ_p 由下列核子数条件确定:

$$N = \int \rho_n(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad Z = \int \rho_p(\mathbf{r}) d\mathbf{r},$$

化学势 λ_n 和 λ_p 出现在 Fermi-Dirac 积分 I_ν 的宗量 y_n 和 y_p 中(见(2.17)式)。

将这样确定的 λ_n 和 λ_p 代回到(2.8)–(2.11)式, 就可以计算我们感兴趣的密度分布了。

图1和2中我们分别给出了 $T = 2\text{MeV}$ 和 6MeV 时 ^{208}Pb 的质子和中子分布, 并同有限温度 HF 计算作了比较^[3]。结果表明, 当 T 较低时, 我们的结果反映了 HF 计算的平均行为; 而 T 较高时, 两种计算的结果几乎一致, 因为这时壳效应已不再起作用。同时我们也看到, 随温度升高, 核子分布向外扩散, 将占据更多的空间。

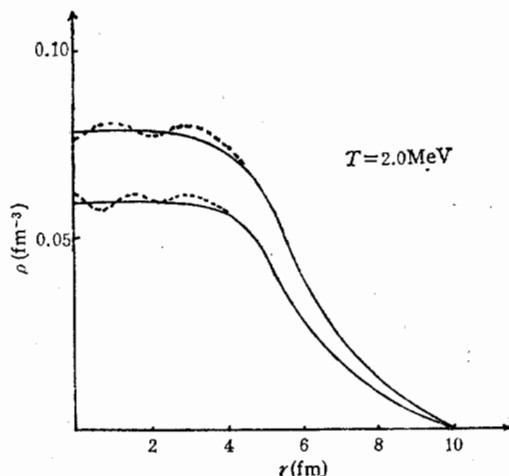


图 1
——FTSC, ---FTHF

利用(2.12)–(2.15)式, 我们计算了 ^{120}Sn 和 ^{208}Pb 的单位核子热容量。图3给出了它和 T 的关系。随温度升高, 热容量增大, 温度比较低时这种变化特别明显。利用热容量的知识, 可以分析核能级密度的性质, 如文献[14]所讨论的。图4中我们还给出了单位核子热容量随核子数 A 的变化。 A 较小时, c 随 A 急剧变化, 而 A 较大时, 这种变化将变得非常缓慢(此时考虑的是 $N = Z = 1/2A$ 的对称核)。从图3也可以得到类似的结论。

这表明粒子数不守恒的巨正则系综对于描述核子数较多 ($A \geq 80$) 的热核是合适的^[14]。

下面讨论 K_A 的计算结果。仍考虑 ^{120}Sn 和 ^{208}Pb , 结果分别在表1和表2中给出, 表中同时给出了 m_1 , m_2 , E_M 和 $\langle r^2 \rangle^{1/2}$ 的值。从表中我们可以看到, 随温度升高, K_A 逐渐变小。由于 K_A 反映了原子核的硬度 (stiffness), K_A 变小意味着核变得松散了, 也就是说其稳定性有所下降。当然, 要合理地预言核的热稳定性, 给出热核所能达到的极限温度, 必须进行自洽的半经典的计算, 简单地取平均场为温度无关的 Woods-Saxon 势只有在 T 较小时才是合理的, 不足以分析发生于较高温 ($T \approx 10\text{MeV}$) 时的核相变。

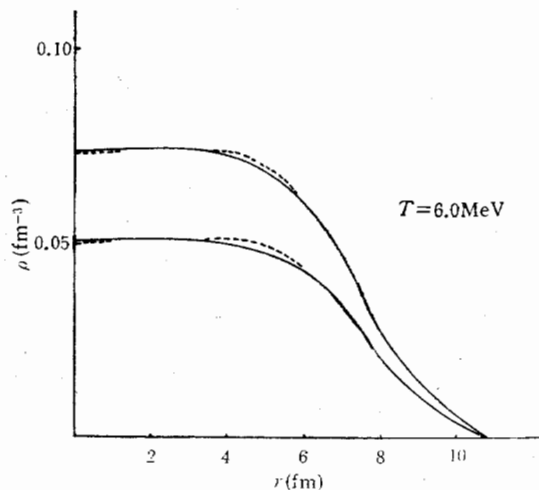


图 2
——FTSC, ---FTHF

假如只考虑体积项, 则 K_A 和 K_m 间有下列简单关系:

$$K_m = (10/7)K_A.$$

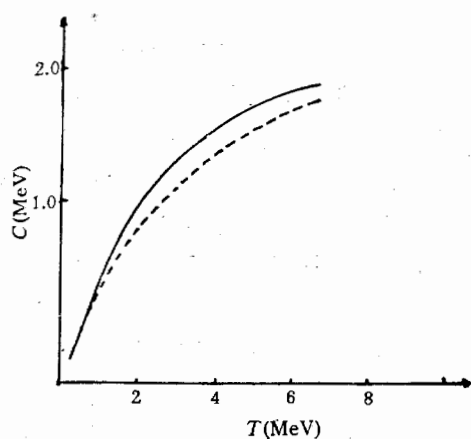


图 3

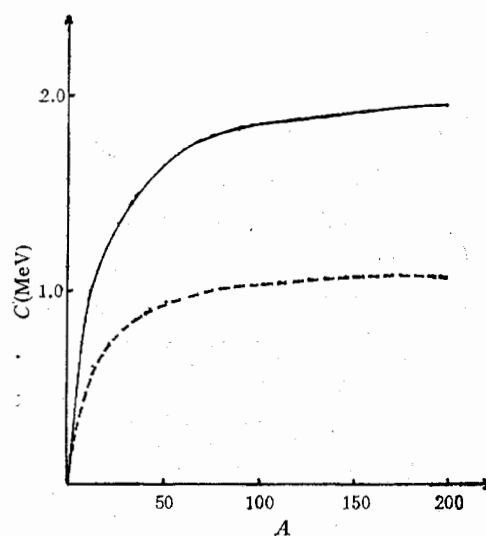
—²⁰⁸Pb, ---¹²⁰Sn

图 4

— $T = 6.0\text{MeV}$, --- $T = 2.0\text{MeV}$ 表 1 ¹²⁰Sn 的不可压缩系数

$T(\text{MeV})$	$m_1(\text{MeV} \cdot \text{fm}^4)$	$m_3(\text{MeV}^3 \cdot \text{fm}^4)$	$E_M(\text{MeV})$	$\langle r^2 \rangle^{1/2}(\text{fm})$	$K_A(\text{MeV})$
1.0	2.163×10^5	0.566×10^8	16.2	4.71	141.93
2.0	2.161×10^5	0.557×10^8	16.0	4.74	140.22
4.0	2.159×10^5	0.528×10^8	15.6	4.81	137.26
6.0	2.155×10^5	0.496×10^8	15.2	4.86	133.03

表 2 ²⁰⁸Pb 的不可压缩系数

$T(\text{MeV})$	$m_1(\text{MeV} \cdot \text{fm}^4)$	$m_3(\text{MeV}^3 \cdot \text{fm}^4)$	$E_M(\text{MeV})$	$\langle r^2 \rangle^{1/2}(\text{fm})$	$K_A(\text{MeV})$
1.0	5.396×10^5	1.073×10^8	14.1	5.57	150.37
2.0	5.389×10^5	1.024×10^8	13.8	5.60	145.59
4.0	5.384×10^5	0.931×10^8	13.1	5.71	136.40
6.0	5.380×10^5	0.721×10^8	11.5	5.86	110.71

则由 ²⁰⁸Pb 的 K_A , 我们得到 $T = 1.0\text{MeV}$ 时, 核物质的不可压缩系数 $K_m \approx 210\text{MeV}$, 它和零温度情形下核物质不可压缩系数的典型值 220MeV 比较接近。

四、小 结

本文在给定定域势的情况下,用有限温度半经典(FTSC)方法研究了热核的性质.首先推导了核子分布,自由能密度,熵密度及动能密度的 \hbar 展开,利用 Woods-Saxon 势对这些密度进行了计算,由此计算了热核的热容量和不可压缩系数.结果表明:单位核子热容量随 T 增大而增大,说明温度越高,核越不容易被激发;不可压缩系数随 T 增大而逐渐变小,说明随温度升高,核的稳定性将有所下降.由此可预见必定存在一个临界温度 T_c ,当核温度高于 T_c 时,稳定的有限核将不复存在.由于我们采用了给定平均场的非自洽方法,还不能合理地计算此临界温度.

必须指出的是,我们进行这一工作的目的是双重的.一方面我们希望通过这一简单的定域势情形,弄清有限温度半经典计算的主要特点,特别是探索 Fermi-Dirac 积分的数值计算方法,以便为有限温度自洽的半经典(FTSCSC)方法作准备.同时我们也认为,在 T 不是很大时, Woods-Saxon 势同实际的平均场还是比较接近的.由此分析的一些物理量和得到的一些结论仍有其合理性,同有限温度 Hartvee-Fock (FTHF) 计算的比较也证实了这一点.

参 考 文 献

- [1] B. Borderie et al., *Z. Phys.*, **A321**(1985), 703.
- [2] J. Bartel et al., *Phys. Lett.*, **152B**(1985), 29.
- [3] P. Bonche et al., *Nucl. Phys.*, **A427**(1984), 278.
- [4] P. Bonche et al., *Nucl. Phys.*, **A346**(1985), 265.
- [5] M. Prakash et al., *Nucl. Phys.*, **A370**(1981), 30.
- [6] C. Gregoire et al., *Nucl. Phys.*, **A465**(1987), 317.
- [7] M. Brack et al., *Phys. Rep.*, **123**(1985), 272.
- [8] Semiclassical Method in Nucl. Phys., Ed. R. W. Hasse et al., Grenoble, France, 1984, Pc6—15.
- [9] 扩展 Skyrme 力的自洽半经典计算与原子核静态及 isoscalar 巨共振性质,高能物理与核物理,待发表.
- [10] 扩展 Skyrme 力的自洽半经典计算与原子核 isovector 巨共振性质,高能物理与核物理,待发表.
- [11] 原子核巨共振宽度的自洽半经典计算,高能物理与核物理,待发表.
- [12] Li Guo-qiang, Xu gong-ou, *Phys. Rev.*, **C38**(1988).
- [13] J. Treiner et al., *Nucl. Phys.*, **A372**(1981), 253.
- [14] S. Hiroshi, *Phys. Rev.*, **36**(1987), 785.

SEMICLASSICAL CALCULATION OF HEAT CAPACITY AND INCOMPRESSIBILITY OF HOT NUCLEI

LI GUOQIANG

(Physics Department of Nanjing University, Nanjing)

XU GONGOU

*(Physics Department of Nanjing University, Nanjing)
(Modern Physics Department of Lanzhou University, Lanzhou)*

ABSTRACT

The main formulae of finite temperature semiclassical method are presented for a local potential. The properties of hot nuclei, especially the heat capacity and incompressibility, are calculated and discussed. Some results are compared with finite temperature HF ones.