

Langevin 重离子熔合裂变反应动力学

刘国兴

(中国科学院近代物理研究所 兰州 730000)

摘 要 叙述怎样用 Langevin 方程研究重离子引起的熔合裂变反应. 主要内容包括从 Fokker-Planck 方程到 Langevin 方程, 重离子熔合反应的 Langevin 描述和组合动力学统计模型(CDSM).

关键词 Langevin 方程 核摩擦 统计涨落 Monte-Carlo 轨道抽样 组合动力学统计模型

1 引 言

为了描述重离子反应, 在经典运动方程中除了摩擦力还应包括一个无规力, 正是这个无规力引起了统计涨落(即热张落). 长期以来, 一直用 Fokker-Planck 方程研究统计涨落对重离子熔合裂变反应和深部非弹性碰撞的影响. 因为用网格方法求解多维微分方程遇到了相当大的困难, 大多数研究者采用准线性近似并假设是高斯型的分布函数. 实际上, 这不是一个好的近似. 所以, 早在几十年前, Kramers^[1]就提出用 Langevin 方程研究核裂变和其它反应过程. 核被势阱俘获后经一段时间才穿过位垒, 可以计算作为时间函数的裂变几率, 研究势的形状、核温度和摩擦系数对裂变几率的影响. 采用 Langevin 方法研究核裂变和重离子反应过程的基本做法就是用解一组包括摩擦力和无规力的经典运动方程代替解 Fokker-Planck 方程, 用 Langevin 轨道抽样方法计算相关量的相空间分布函数和反应截面. Abe 等人^[2]把核裂变看作是扩散过程, 用 Langevin 方程进行了深入的研究, 指出瞬态时间 t_d 对于理解裂变与中子蒸发之间的竞争是非常重要的. 在某种意义上, 这个包括动力学张落的输运模型是唯象的. 为了再现实验数据, 进入模型中的参数是可调的, 理论模型计算与实验数据比较可以提取摩擦系数和核粘滞性. Barbosa 等人^[3]和 Frobrich 等人^[4]认为, 可将 Langevin

方程用于重离子熔合裂变反应和深部非弹性碰撞过程的研究, Frobrich 等人并且在这个领域做了大量的工作. 采用组合动力学统计模型(CDSM)计算了重离子反应自旋分布包括形变自由度的 Wilczyski 图、蒸发余核截面、裂变截面、中子与带电粒子能谱和多重性等, 同时还指出怎样由统计张落确定深部非弹性碰撞过程的时间分布和碰撞中发射的 δ 电子谱.

这里简要叙述用 Langevin 方程研究重离子熔合裂变反应, 主要内容包括从 Fokker-Planck 方程到 Langevin 方程, 重离子熔合反应的 Langevin 描述和组合动力学统计模型(CDSM). 其实, Langevin 重离子熔合裂变反应动力学的内容是很丰富的, 由于篇幅的限制, 只能叙述它的最基础部分.

2 从 Fokker-Planck 方程到 Langevin 方程^[5]

通常, 可将熟习的 Fokker-Planck 方程写成如下形式,

$$\frac{\partial}{\partial T}d(x, T) = \frac{\partial}{\partial x}[V(x)d(x, T)] + D \frac{\partial^2}{\partial x^2}d(x, T) \quad (1)$$

式中, x 定义为无量纲量, D 是扩散系数, T 是温度, 它是扩散系数 D 和作用时间 t 的函数. 非线性漂移 $V(x)$ 由势的偏微商给出, $V(x) = \partial\phi/\partial x$, 可以把 Fokker-Planck 方程转变

为 Langevin 方程, Langevin 方程是经典运动方程,

$$\frac{dx}{dt} = h(x) + g\Gamma(t) \quad (2)$$

$g\Gamma(t)$ 是强度为 g 的高斯分布的无规力, $\Gamma(t)$ 的性质是

$$\langle \Gamma(t) \rangle = 0$$

$$\langle \Gamma(t)\Gamma(t') \rangle = 2\delta(t-t') \quad (3)$$

括号表示对整个几率分布函数的平均. 现在可寻求 Fokker-Planck 方程中的 $V(x)$ 与 D 和 Langevin 方程中的 $h(x)$ 和 g 的关系, Langevin 方程的积分形式为

$$x(t+\tau) - x(t) = \int_t^{t+\tau} \{h[x(t')] + g\Gamma(t')\} dt'$$

$$= \int_t^{t+\tau} h[x(t)] dt' + \int_t^{t+\tau} h'[x(t)] dt' \cdot \int_t^{t'} h[x(t'')] dt'' + \int_t^{t+\tau} h'(x) dt' \cdot \int_t^{t'} g\Gamma(t'') dt'' + \int_t^{t+\tau} g\Gamma(t') dt' + \dots \quad (4)$$

$$V = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{1}{\tau} \langle x(t+\tau) - x(t) \rangle = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{1}{\tau} \{h(x) \int_t^{t+\tau} dt' + h'(x)h(x) \cdot \int_t^{t+\tau} dt' \int_t^{t'} dt''\} = h(x) \quad (5)$$

$$D = \frac{1}{2} \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{1}{\tau} \langle [x(t+\tau) - x(t)]^2 \rangle = g^2 \quad (6)$$

这样, 用 Fokker-Planck 方程中的漂移项 $V(x)$ 和扩散系数 D 表达的 Langevin 方程为

$$\frac{dx}{dt} = V(x) + \sqrt{D}\Gamma(t) \quad (7)$$

在数值计算中使用如下形式,

$$x(t+\tau) - x(t) = \int_t^{t+\tau} V(x) dt' + \sqrt{D} \int_t^{t+\tau} \Gamma(t') dt' \quad (8)$$

τ 是积分的时间步长. $\hat{\Gamma}(t) = \int_t^{t+\tau} \Gamma(t') dt'$ 是一个高斯分布的无规变量叠加. $\hat{\Gamma}(t) = a\omega(t)$, $\langle \omega(t) \rangle = 0$, $\langle \omega(t^2) \rangle = 2$.

$$\langle \hat{\Gamma}\hat{\Gamma} \rangle = a^2 \langle \omega(t^2) \rangle = 2a^2 \quad (9)$$

$$\langle \hat{\Gamma}\hat{\Gamma} \rangle = \int_t^{t+\tau} dt' \int_t^{t+\tau} dt'' \langle \Gamma(t')\Gamma(t'') \rangle dt'' = 2 \int_t^{t+\tau} dt' \int_t^{t+\tau} \delta(t'-t'') dt'' = 2\tau \quad (10)$$

由方程(9)和(10)得 $a = \tau^{1/2}$. 适合于做数值积分的 LE 形式是

$$x_{n+1} - x_n = V(x_n)\tau + \sqrt{D(\tau)\omega(t)} \quad (11)$$

3 重离子熔合反应的 Langevin 描述

经典轨道模型成功地描述了重离子熔合反应的许多性质. 模型基本假设是在位垒以上弹核和靶核的熔合不受统计涨落的影响, 少数集体自由度按经典运动方程进行时间演化, 克服炮弹和靶核间的势垒, 使核接触. 耗散力使之在微观自由度和宏观自由度之间交换能量. 从非平衡统计理论得知, 核相互作用耗散过程经常伴随有统计涨落(热涨落). 在重离子反应中, 尽管统计涨落是很明显的, 但在以前的理论模型计算中没有加以考虑. 为了考察统计涨落对熔合反应的影响, 必须把导致统计涨落的一个无规力包括在运动方程中. 如果在表面摩擦模型^[6]框架内, 忽略形变自由度且不考虑电荷和质量转移, 那么包括无规力的一组 Langevin 方程是^[7]

$$r_{n+1} = r_n + P_n\tau \quad (12)$$

$$P_{n+1} = P_n + \left[-\frac{dV_N}{dr} + \frac{l^2}{\mu r^3} + \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r^2} - K_r(r)P_n \right] \tau + \sqrt{D_r(r)\tau\omega_r(t)} \quad (13)$$

$$\varphi_{n+1} = \varphi_n + \frac{l_n}{\mu r^2} \tau \quad (14)$$

$$l_{n+1} = l_n - [K_\varphi(r)l]_n \tau + \sqrt{D_\varphi(r_n)\tau\omega_\varphi(t)} \quad (15)$$

以上各式中, P 是径向动量, r 是核的质心间距离, μ 是约化质量, $V_N(r)$ 是核势, l 是两核相对运动轨道角动量, $K_r(r) = 4.0(dV_N/dr)^2$ 是径向摩擦形状因子, 根据 Einstein 涨落耗散定理, 扩散系数 $D_r(r) = TK_r(r)$, 其中 T 是温度 ($T = \sqrt{\Delta E 8/A}$, ΔE 是沿着每条轨道损

失的能量), $K_{\varphi}(r) = 0.01(dV_N/dr)^2$ 是切向摩擦形状因子, 扩散系数 $D_{\varphi} = TK_{\varphi}(r)$, $\omega_r(t)$ 和 $\omega_{\varphi}(t)$ 是两个彼此无关的高斯分布无规变量. 如果忽略角动量耗散, 仅仅考虑径向摩擦, 图 1a) 给出了 $^{40}\text{Ar} + ^{165}\text{Ho}$ 反应, $E_{cm} = 250\text{MeV}$, $l = 100$ 作为径向距离 (r) 函数的相空间分布. 从图 1a) 看出, 在 $t_1 = 0$ 时, 分布函数呈 δ 函数形式, 在核碰撞中 $d(r, t)$ 接近最靠近距离, 由于统计涨落分布加宽; 在时间 t_2 , 分布函数开

始向外漂移产生一个肩部, 它进一步向外运动, 一部分落在势阱口袋中. 在时间 t_3 , 分布函数分为两部分, 一部分在最靠近距离处, 它已被势阱俘获, 导致核熔合. 另一部分继续向外运动, 它相当深部非弹性散射; 在时间 t_4 , 分布函数完全分为两部分. 图 1b) 给出了不同角动量的动量分布函数 $d(p, t)$. 如果忽略统计涨落, $l = 100$ 相当于全熔合反应的临界角动量, $l = 75$ 相当于熔合轨道, 而 $l = 125$ 则是纯

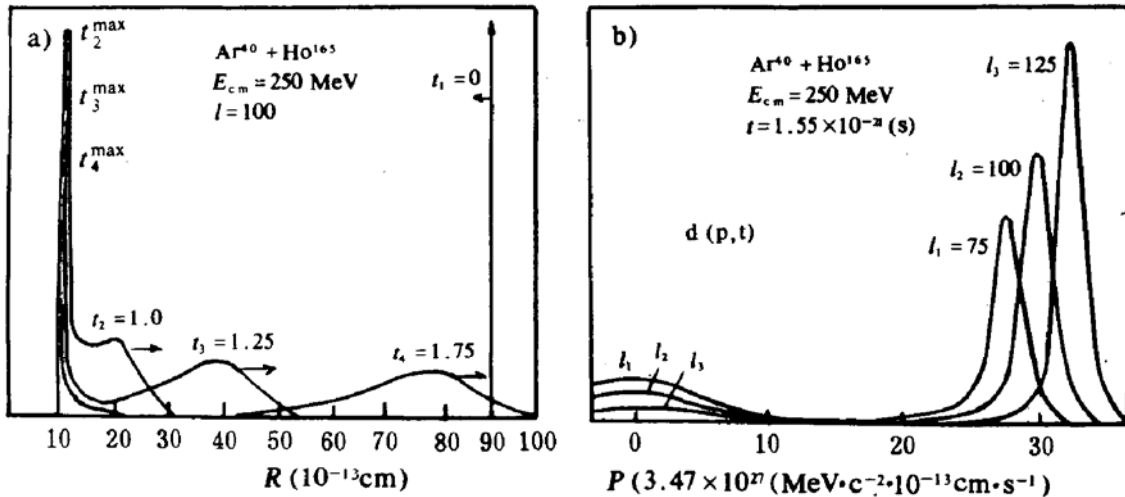


图 1 a) $^{40}\text{Ar} + ^{165}\text{Ho}$ 反应, $E_{cm} = 250\text{MeV}$, $l = 100$ 相空间分布函数 $d(r, t)$; b) 在不同角动量时动量分布函数 $d(p, t)$

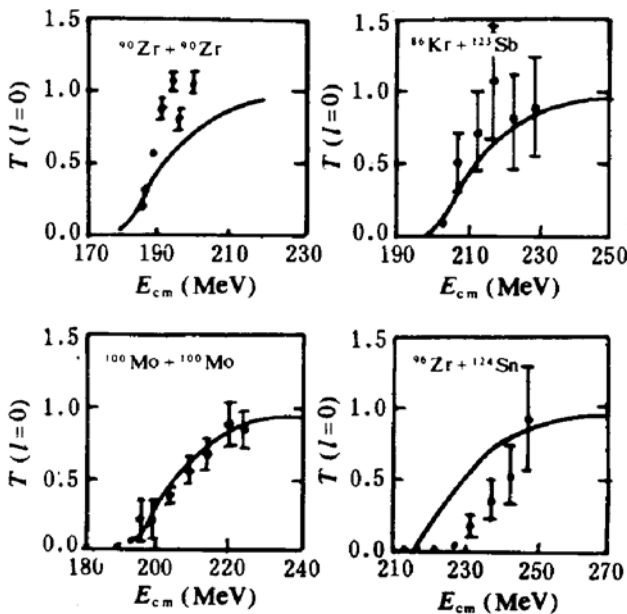


图 2 $^{100}\text{Mo} + ^{100}\text{Mo}$, $^{90}\text{Mo} + ^{90}\text{Zr}$, $^{86}\text{Kr} + ^{123}\text{Sb}$ 和 $^{96}\text{Zr} + ^{124}\text{Sn}$ 反应计算的熔合反应几率与实验数据的比较

深部非弹性散射轨道. 这就是说在经典轨道模型中, 每个 l 或者是熔合轨道或者是深部非弹性散射轨道. 但是由于统计涨落的影响完全改变了这种情况, 使每个角动量 l 的分布函数一部分相当于熔合反应而另一部分相当于深部非弹性散射.

根据方程 (12) ~ (15), 用 Monte-Carlo 轨道抽样方法计算全熔合截面,

$$\sigma_{fu} = \frac{\pi}{K^2} l_{>}^2 \frac{N_{fu}}{N_t} \quad (16)$$

选择初始角动量 $l = l_{>} x^{1/2}$, $l_{>}$ 取擦边角动量, x 是无规数 ($0 \leq x \leq 1$), N_{fu} 是熔合轨道数, N_t 是总的轨道数.

图 2 给出了 $^{90}\text{Zr} + ^{90}\text{Zr}$, $^{86}\text{Kr} + ^{123}\text{Sb}$, $^{100}\text{Mo} + ^{100}\text{Mo}$ 和 $^{96}\text{Zr} + ^{124}\text{Sn}$ 反应计算熔合几率与实验结果的比较^[9].

根据不包括统计涨落的表面摩擦模型,

从位垒反射回来的轨道是深部非弹性散射, 而越过位垒损失了它的相对运动能量并落在势阱中, 实际上不论什么时候, 只要轨道越过位垒顶部熔合反应就发生了. 由于很强的摩擦使落入势阱口袋里的轨道再也不能从中逃脱了, 但由于无规力的作用, 越过位垒以后的轨道仍然有某种几率被反射出来, 尤其在高能时轨道反散回来以前, 穿过位垒愈深, 涨落愈大. 所以熔合反应的判据不再是轨道是否越过位垒顶部了, 必须给熔合反应一个新的判据: $dV_N/dr = 2.0 \text{ MeV}/10^{-13} \text{ cm}$. 它的物理意义是核势的微商超过这个值的轨道被看作是熔合的轨道. 计算结果表明, 这个熔合反应判据能够再现重离子熔合反应的实验数据.

4 组合动力学统计模型(CDSM)^[9]

玻尔和惠勒提出的裂变统计模型非常成功地描述了低能裂变反应的性质. 模型假设裂变核所有自由度处在热平衡中, 裂变几率由核在鞍点态的几率给出, 势能面的细节并不重要. 在计算裂变和发射中子的几率时还要知道裂变位垒高度 B_f 、中子的结合能 B_n 、能级密度参数比 a_f/a_n 以及透射系数等. 为了描述热核裂变反应的性质必须在统计模型中包括动力学效应.

考虑了摩擦的 Kramers 的裂变几率表达式是^[10]

$$R_f^k = R_f \frac{\omega_k}{\omega_{sd}} \frac{\hbar \omega_{gs}}{T} \quad (17)$$

式中, $R_f = \frac{1}{2\pi\hbar\rho(E^*)} \int_0^{E^* - B_f - \epsilon} \rho(E^* - B_f - \epsilon) d\epsilon$, $\rho(E^*)$ 是复合核的能级密度, E^* 是激发能, B_f 是裂变位垒高度. 若基态和鞍点能级密度参数相同, $B_f/E^* \ll 1$, $\rho \sim \exp(2\sqrt{aE})$, $T = \sqrt{E^*/a}$, $R_f \sim T/2\pi\hbar \exp(-B_f/T)$. ω_k 是

Kramers 频率, $\omega_k = \sqrt{\omega_{sd}^2 + \beta^2/4} - \beta/2$, $\beta = \gamma/m$ 是维化摩擦系数, m 是质量参数, ω_{gs} 和 ω_{sd} 分别是在基态和鞍点态的频率. 文中处理的强阻尼运动 ($\omega_{sd}/\beta \ll 1$), Kramers 裂变几率

的极限值是

$$R_f^k = \frac{\omega_{gs}}{2\pi} \frac{\omega_{sd}}{\beta} \exp\left(-\frac{B_f}{T}\right) \quad (18)$$

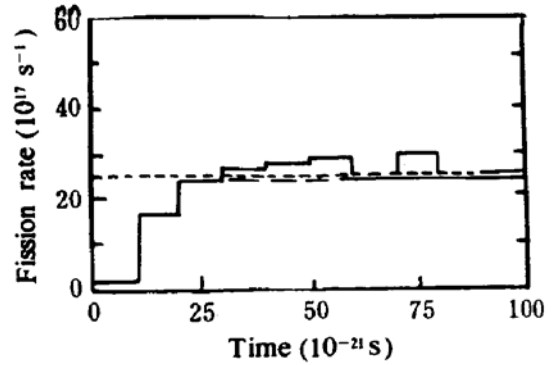


图3 裂变几率作为时间的函数. — 对于抛物线位垒由方程(19)和(20)计算的, 由方程(18)计算 Kramers 极限值

描述裂变反应动力学过程的一维 Langevin 方程是^[11]

$$\frac{dq}{dt} = \frac{1}{M\beta} \frac{dV(q)}{dq} + \frac{1}{M\beta} \sqrt{M\beta T} \Gamma(t) \quad (19)$$

式中, q 是碎片对在组合核径向方向质心距离之半, $V(q)$ 是作用势. 裂变几率由方程(19) Monte-Carlo 轨道抽样给出,

$$R_f = \frac{1}{N_f - \sum_{j=1}^i (N_f)_j} \frac{(N_f)_i}{\Delta t} \quad (20)$$

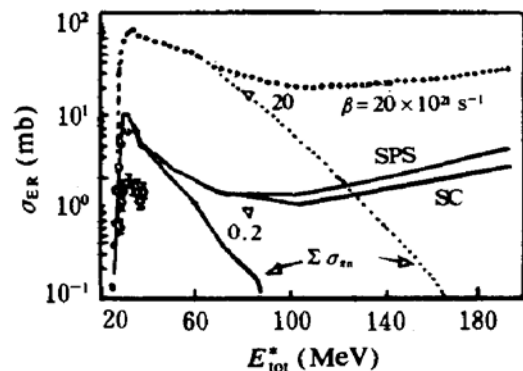


图4 测量的¹⁶O+Pb 反应蒸发余核截面 σ_{er} 与 CDSM 计算结果的比较

$(N_f)_i$ 是宽度为 Δt 第 i 时间段抽样的裂变事

件数, N_i 是总的轨道数. 图 3 给出了对于抛物线位垒用方程 (19) 和 (20) 计算的裂变几率与用方程 (18) 计算的 Kramers 极限值的比较. 在 Langevin 动力学计算中, 基态和鞍点态势的行为是谐振的, 并且从鞍点到断点经过较长的路径.

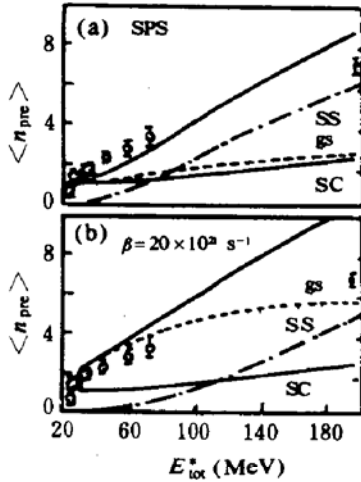


图 5 测量的 $^{16}\text{O} + \text{Pb}$ 反应的中子多重性与 CDSM 计算结果的比较

为了更满意地再现实验的裂变几率和断裂前的中子多重性, Frobrich 等人^[12] 使用坐标相关的约化摩擦系数,

$$\beta = 2.0 \times 10^{21} \text{s}^{-1} \quad q = 0.375 \sim 0.60$$

$$\beta = 30 \times 10^{21} \text{s}^{-1} \quad q = 0.60 \sim 1.20$$

$q=0.375 \sim 0.60$ 相当于裂变核从基态到开始形成颈部, β 值随核形变线性增加. 其物理解释是, 裂变核形成颈部时, 摩擦机制开始改变它的性质, 从二体摩擦到表面摩擦; 当核愈来愈拉长时, 表面摩擦起重要作用, 在断点 ($q=1.20$) 的形变类似深部非弹性碰撞情况. 由熵计算 Langevin 方程的驱动力为

$$S(q) = 2 \sqrt{a(q)[E^* - V(q)]} \quad (21)$$

E^* 是裂变核的初始激发能, $a(q)$ 是形变相关

的能级密度参数, $a(q) = a_v A + a_s A^{2/3} B_s(q)$, $B_s(q)$ 是坐标相关的表面面积. 裂变几率由下式给出

$$R_f = \frac{\omega_{gs} \omega_{sd}}{2\pi\beta} \cdot \frac{\exp[S(q_{sd}) - S(q_{gs})]}{1 + \text{erf}[(q_{sc} - q_{sd})\omega_{sd}(M/2T)^{1/2}]} \quad (22)$$

式中, $\text{erf}(x) = (2/\sqrt{\pi}) \int_0^x \exp(-t^2) dt$ 是误差函数, 基态和鞍点态的频率由熵的二次微商计算, $\omega_{gs} = \sqrt{S''_{gs} T/M}$, $\omega_{sd} = \sqrt{S''_{sd} T/M}$. 由方程 (21) 可以看出, 断点位置对裂变几率的影响是很明显的, 如果断点远离鞍点, 误差函数趋于 1, 断点与鞍点重合, 误差函数为零.

用组合动力学统计模型 (CDSM) 能够再现实验的裂变和蒸发余核截面、中子、带电粒子和 γ 射线的能谱及多重性数据^[12]. 图 4 给出了测量的 $^{16}\text{O} + \text{Pb}$ 反应蒸发余核截面 σ_{ev} 与 CDSM 计算结果的比较. 图 5 给出了 $^{16}\text{O} + \text{Pb}$ 反应测量的中子多重性与 CDSM 计算结果的比较. 图 5a) 中 SPS 表示使用一组标准参数 CDSM 计算的中子多重性. 从图 4 和图 5 可以看出, 采用 CDSM 计算的蒸发余核截面和中子多重性与实验结果很好的一致.

参 考 文 献

- 1 Kramers H A. Physica, 1940, 7: 284
- 2 Abe Y, et al. J. de Phys., 1986, C4: 329
- 3 Barbosa V C, et al. Revista Brasileira de Fisica, 1985, 15: 211
- 4 Frobrich P, et al. Nucl. Phys., 1993, A556: 281
- 5 Frobrich P, Xu S Y. Nucl. Phys., 1988, A477: 143
- 6 Gross D H E, Kalinowski H. Phys. Reports, 1978, 45C: 175
- 7 Frobrich P, Marten J. Z. Phys., 1991, A339: 171
- 8 Marten J, Frobrich P, Nucl. Phys., 1992, A545: 854
- 9 Frobrich P, et al. Nucl. Phys., 1993, A556: 281
- 10 Grange P. Nucl. Phys., 1984, A428: 37C
- 11 Mavlitov N D, et al. Z. Phys., 1992, A342: 195
- 12 Frobrich P, Gontchar I I. Nucl. Phys., 1993, A563: 326

Langevin Fluctuation-dissipation Dynamics of Fusion and Fission Reactions Induced by Heavy Ions

Liu Guoxing

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

Abstract This paper described how Langevin equation is applied to the fusion and fission reactions induced by heavy ions. It includes the transformation of a Fokker-Planck equation to a Langevin equation, Langevin description of heavy-ion induced fusion reaction and a combined dynamical statistical model.

Key Words langevin equation nuclear friction statistical fluctuation Monte-Carlo sampling of trajectories combined dynamical statistical model

(上接第36页)

在 QED 等离子体模型中, E_d 能量可以提高到 100eV, 但这仍不能说明有可能产生核反应现象. 是否存在弱耦合机制, 即 $r_s < 1$, 这需要进行进一步研究.

4 今后研究的方向

首先进一步提高注入电流密度, 关键是改进靶的冷却技术. 其次是将注入能量从目前的 100keV 扩展到超低能, 即 5keV ~ 几百 eV. 在 100keV 能区, 增加离子流密度, 继续观测异常高能带电粒子的发射. 在超低能区, 测量 D-D 反应截面, 同时观测高能带电粒子的发射. 日本东北大学正在加紧这方面准备

和研究工作. 第三对强耦合电子气多体问题, 在某种过度过程中, 是否会出现某种弱耦合现象, 需要进一步研究.

总之, 随着固体内异常核反应的研究, 需进一步弄清氦离子在超低能, 极高密度时的异常核反应现象. 这对彻底搞清冷聚变的可能性和开发新氢能源, 具有重大意义.

参 考 文 献

- 1 Takahashi A. Proc. Russian Conf. Cold Fusion, 1993
- 2 Fukai Y. Proc. ICCF3, 1992
- 3 Iida T. OKTAVIAN Report, 1993
- 4 笠木, 治郎太. 东北大学研究报告, 1994

Progress in Study of Anomalous Nuclear Reaction in Solid

Piao Yubo Wang Xuezhong

(Institute of Nuclear Research, Lanzhou University, Lanzhou 730000)

Abstract Present status and further research trend in study of anomalous nuclear reaction in solid is reviewed.

Key Words ion beam implantation multibody fusion anomalous nuclear reaction in solid cold fusion