

利用 QMD 分析中高能质子入射²⁰⁸Pb 的(p, xn) 反应双微分截面*

樊胜 李祝霞 赵志祥

(中国原子能科学研究院 北京 102413)

摘要 中高能质子入射重金属靶产生散裂中子是加速器驱动洁净核能系统的一个关键部分. 利用量子分子动力学(QMD)模型研究入射质子能量在 300MeV—1.5GeV, 散裂靶为²⁰⁸Pb 的(p, xn)核反应的双微分截面, QMD 计算结果很好再现了实验数据, 且 QMD 的计算结果明显优于 HETC 和 LAHET. QMD 在较宽的能区和核区满足加速器驱动洁净核能系统散裂靶物理计算的要求.

关键词 量子分子动力学 双微分截面 加速器驱动洁净核能系统

1 引言

利用中能质子入射重金属靶(如:铅,铋等)形成散裂中子源在核物理、材料物理、生物等方面有广泛的用途. 近几年来,利用散裂中子源作为外加中子源驱动次临界反应堆(ADS),作为可使核能大规模、可持续发展的创新技术路线在国际上形成了一个研究热点^[1-4],而散裂中子源是该系统的一个重要环节.

中能质子入射重靶,其物理过程主要是靶内的核微观反应过程和核外宏观输运过程. HETC^[5], LAHET^[6], SHIELD^[7], NMTC^[8]等程序都可以开展这方面的研究. 利用他们计算 590MeV 的质子与 Pb 反应的双微分截面和实验测量结果的比较可以发现,在 $E_n > 15\text{MeV}$ 时,计算结果比实验值偏低,而在 1.5MeV 左右,计算结果比实验测量值偏高^[9].

QMD^[10-13]理论在研究高能重离子核反应中已取得了很大的成功. 利用 QMD 来研究(p, xn)和(p, xp)反应的双微分截面,首先是由 Peilert 完成的^[14]. Peilert 未考虑质子入射经过一定时间后仍具有较高激发能的余核和碎块的统计衰变过程(SDM). Koji Niita^[15-19]等利用 QMD 并考虑了 SDM 过程,认为质子入射经过一定的时间后,仍具有较高激发能的余核和碎块通过衰变过程退激发,引入时间参数 t_{sw} ,在 0— t_{sw} 之间,利用 QMD 进行计算,在 t_{sw} 以后利用 SDM 计算. 通过对实验数据的拟合,得到这个时间开关 $t_{sw} \sim 100\text{fm}/c$. Niita 等的 QMD + SDM 引入了时间参数 t_{sw} ,而没有能从理论上对这个时间开关 t_{sw} 给出解释,同

2001-11-14 收稿

* 国家重点基础发展规划研究项目(G1999022600),国家自然科学基金(19675067)资助

时 Niita 利用的 QMD 理论的核子-核子相互作用也未能考虑核系统的对称势能.

我们的工作^[20-23]和 Peilert 以及 Koji Niita 的方法不同. 在 QMD 中, 考虑了核系统的对称势能, 而且没有人为的引入参数, 只是延长 QMD 的计算时间, 直到余核不再发射粒子为止. 在该工作中, 特别注意了靶核的初始化问题. 碰撞前静止的靶核内核子的位置、动量的初始化是非常重要的. 如果在动力学计算前, 靶核并不稳定, 则计算结果的可靠性就值得怀疑. 因此, QMD 计算之前, 初始化好了的靶核保持稳定, 即接近“真实”的基态核. 这就是要求对已完成了核内核子的初始位置和动量的核利用 QMD 计算, 使这个核随时间进行演化, 在 QMD 计算所感兴趣的时间范围内, 要求靶核的有关性质保持稳定, 并且接近“基态核”. 我们对²⁰⁸Pb 的初始化进行了认真的考虑, 计算得到了入射质子能量为 590, 800 和 1500 MeV 的 (p, xn) 反应的双微分截面, QMD 的计算结果很好地再现了实验数据, 和 HETC 以及 LAHET 的结果比较, QMD 的计算结果明显的优于 HETC 和 LAHET. QMD 在较宽的能区和核区满足加速器驱动洁净核能系统散裂靶物理计算的要求.

2 QMD 模型

QMD 模型考虑核子在平均场中的运动和二体散射的处理. 在 QMD 模型中^[10-12], 每一个核子用一个高斯型波包来描写. 对任一核子 i , 其波函数为

$$\phi_i = \frac{1}{(2\pi L)^{3/2}} \exp\left[-\frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)^2}{2L} + \frac{i}{\hbar} \mathbf{r} \cdot \mathbf{p}\right], \quad (1)$$

相空间分布函数为

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \sum_i f_i(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t), \quad (2)$$

其中

$$f_i(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \exp\left\{-\frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i(t))^2}{2L} - \frac{(\mathbf{p} - \mathbf{p}_i(t))^2}{2\sigma}\right\}, \quad (3)$$

式中 L 和 σ 分别为坐标空间和动量空间的分布宽度, 满足测不准关系.

波包的中心位置 $\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i$ 按正则方程传播:

$$\dot{\mathbf{r}} = \frac{\partial H_i}{\partial \mathbf{p}_i}, \quad \dot{\mathbf{p}} = -\frac{\partial H_i}{\partial \mathbf{r}_i}, \quad (4)$$

式中 $H_i = E_i + V_i$ 为第 i 个粒子的哈密顿量, 相互作用为

$$V_i = V^{loc} + V^{Yuk} + V^{Coul} + V^{MDI} + V^{Pauli} + V^{sym}, \quad (5)$$

$$V^{loc} = t_1 \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) + t_2 \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3), \quad (6)$$

$$V^{Yuk} = t_3 \frac{\exp\left\{\frac{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}{a}\right\}}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}, \quad (7)$$

$$V^{MDI} = t_4 \ln^2 [t_5 (\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2)^2 + 1] \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2), \quad (8)$$

$$V^{sym} = C_s c_i \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2), \quad (9)$$

$$V^{Pauli} = v_p \left(\frac{\hbar}{p_0 q_0}\right)^3 \exp\left\{-\frac{(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)^2}{2q_0^2}\right\} \exp\left\{-\frac{(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2)^2}{2p_0^2}\right\}, \quad (10)$$

式中 V^{loc} 是有效核力 (定域 Skyrme 相互作用), 包括二体相互作用和三体相互作用, V^{Yuk} 是

Yukawa 相互作用,它可以改善相互作用的表面性质,对于碎块的形成是重要的; V^{MDI} 是与动量有关的相互作用项; V^{Coul} 是通常的库仑相互作用; V^{sym} 为对称能; V^{Pauli} 是 Pauli 势; C_s 是对称能系数,在本工作中取为 $C_s = 34\text{MeV}$,参数 C_i 对于质子为 1,对于中子为 -1, t_1, t_2, t_4, t_5 是参数.

对于无穷大对称核物质,以上的相互作用可以表达为

$$U(\rho) = \alpha \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right) + \beta \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^\gamma + \delta \ln^2 \left\{ 1 + \epsilon \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^{2/3} \right\} \frac{\rho}{\rho_0}, \quad (11)$$

式中 α, β, γ 为可调参数. ρ 为核子密度. 在本工作中取 $\rho_0 = 0.16\text{fm}^{-3}$

3 计算结果

根据已抽样好的初始靶核的平均结合能、均方根半径、核内核子密度和动量分布随时间的演化以及和利用其他理论或经验公式计算的相应的结果比较,得到这个位置和动量初始化好了的核接近于“真实”的基态核. 本工作在 $0-300\text{fm}/c$ 的时间区间内,²⁰⁸Pb 平均结合能在 $7.5-9.0\text{MeV}$ 之间平滑的变化;均方根半径在 5.4fm 上下涨落. 涨落的原因是初始化好了的靶核并不完全是激发能为 0 的基态核,可能仍具有较低的激发能,如 $T = 0.5\text{MeV}$. 因此涨落是不可避免的,我们尽可能在较长的时间内保持较小的涨落. 核子密度分布也始终保持较为平滑的变化,即在 $t = 0\text{fm}/c$ 时刻的核子密度分布和在 $t = 300\text{fm}/c$ 时刻的分布基本上保持一致.

图 1 是²⁰⁸Pb 靶的核内任意两个核子在平均场的作用下,在 $0-200\text{fm}/c$ 的时间区间内在 $x-z$ 平面的运动轨迹. 图中圆的半径就是靶核的半径, $r = 1.12A^{1/3} \cong 6.7\text{fm}$. 我们看到,核子在 $0-200\text{fm}/c$ 的时间区间内,由于费米运动,在自己的平衡位置附近振动. 在平均场作用下,当核子运动到核的表面时,由于这个核子受到其他 $(A-1)$ 个核子的作用,这个核子又被吸引回核内,而不致于从靶核内“逃逸”出来.

图 2 是一个静止的靶核²⁰⁸Pb 的核子的密度分布在 $x-z$ 平面上,在时间区间为 $0-300\text{fm}/c$ 的演化图,时间步幅为 $50\text{fm}/c$. 从图中可以看出,在 $t = 0\text{fm}/c$ 的时刻,靶核²⁰⁸Pb 保持为一个球型核,表面光滑. 由于我们所抽样好初始位置和动量的基态核,并不完全是激发能为 0 的核,这个抽样好的靶核仍可能具有很小的激发能,核内某些核子仍具有较激烈的热运动. 因此,随着时间的演化,我们发现核的表面形状发生了一些变化,在 $t = 100\text{fm}/c$ 的时刻,核的表面上有一个核子似乎要从核内逃逸出来,但由于核内另外的 $(A-1)$ 个核子

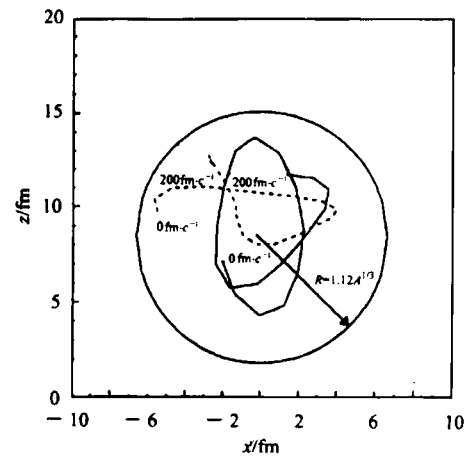


图 1 ²⁰⁸Pb 靶的核内核子在平均场的作用下,在 $0-200\text{fm}/c$ 的时间区间内在 $x-z$ 平面的运动轨迹. 实线和点线分别表示一个质子和中子.

的吸引,这个核子并未能从核内逃逸. 到 $300\text{fm}/c$,核的表面形状有一些变化,但大体上在 $0-300\text{fm}/c$ 的能量区间内,核内核子始终没有从核内逃逸出来,靶核保持为一个球形. 此时认为,这个核是稳定的,初始化是成功的.

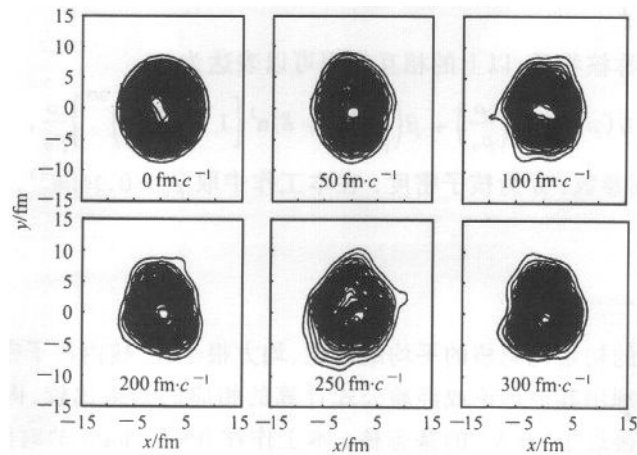


图 2 被初始化了的 ^{208}Pb 的核子密度演化图

基于对靶核以上的基态性质和结构的分析,我们得到一组在本工作中 QMD 计算所需的参数,见表 1.

表 1 QMD 计算的参数

a/MeV	β/MeV	γ	$V^{\text{Yuk}}/\text{MeV}$	a/fm	v_p/MeV	q_0/fm	$\rho_0/\text{MeV}\cdot\text{c}^{-1}$	L/fm	ρ_0/fm^{-3}
-116	76	2	-5	1.2	17	6	60	2.0	0.168

由于初始化条件很严格,因而挑选初始化核的计算量较大. 基于计算机的 CPU 的限制,我们从 10000 个靶核中挑选出了 20 个符合要求的靶核,储存起来用于 QMD 的计算.

利用 QMD 计算了 $p+^{208}\text{Pb}$ 的 (p, xn) 反应道的双微分截面,并和实验测量数据进行了比较. 定义 $f(b, E, \Omega)$ 为碰撞参数 b , 出射粒子能量在 $E + \Delta E$ 内, 出射角度在 $\Omega + \Delta\Omega$ 内, 每一个质子在单位能量 (MeV) 和单位立体角 (sr) 内的出射粒子的多重数. 则出射粒子的双微分截面为

$$\frac{d^2\sigma}{dE d\Omega} = \int_0^{b_{\max}} 2\pi b f(b, E, \Omega) db = \sum_i 2\pi b_i f(b_i, E, \Omega) \Delta b_i, \quad (12)$$

b_{\max} 为最大的碰撞参数,考虑到核子密度的分布它的取值是略大于靶核的均方根半径.

^{208}Pb 是核子密度分布,在 r 为 $0-5\text{fm}$ 之间,核子密度的变化很平缓,而在 $5-12\text{fm}$ 之间核子密度下降很快. 因此碰撞参数 b 选取在 $0-5\text{fm}$ 之间时,入射质子在核内的运动情况基本上相近,而在 $b > 5\text{fm}$ 的区间,由于核子密度下降较快,入射质子在核内碰撞粒子的数目变化很大,对出射粒子的贡献也变化较大. 对于靶核 ^{208}Pb ,在 $r = 9\text{fm}$ 时,核子密度已很小,入射质子很容易穿过靶核. 因此在质子轰击靶核 ^{208}Pb 的 b_{\max} 取为 9fm . 在 $0-b_{\max}$ 的范围内,碰撞参数的取值在 $0-5\text{fm}$ 之间可以少取一些,而在 $5-9\text{fm}$ 的范围内,碰撞参数的取值应密集一些.

我们计算了入射质子能量为 $E_p = 590\text{MeV}$ 的 $p + {}^{208}\text{Pb}$ 的 (p, xn) 反应截面,发现在中子出射方向 $\theta_{\text{Lab}} = 30^\circ$ 时, QMD 的计算值在 高能部分较 Filges 在 KfK 的实验测量数据^[24] 偏低. 而在 $\theta_{\text{Lab}} = 90^\circ$ 和 $\theta_{\text{Lab}} = 120^\circ$ 的中子出射方向, QMD 的计算值较好地再现了实验测量数据.

图 3 是入射质子能量为 $E_p = 800\text{MeV}$ 的 $p + {}^{208}\text{Pb}$, 在出射中子方向为实验室系 $\theta_{\text{Lab}} = 15^\circ, 60^\circ, 120^\circ$ 和 150° 的 (p, xn) 反应的双微分截面的 QMD 计算值和实验测量数据的比较. QMD 的计算值很好地再现了 Amian^[25] 在 LANL 和 Ishibashi^[26] 在 KEK 的实验测量结果.

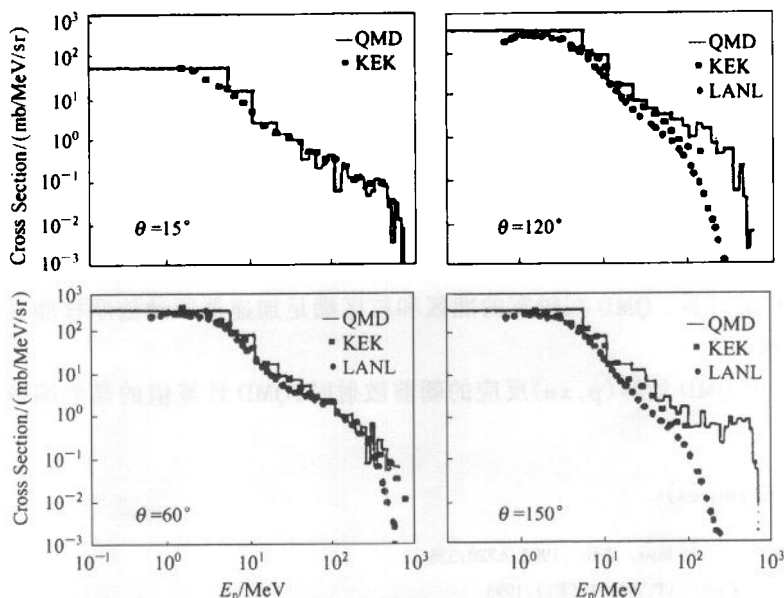


图 3 QMD 计算的 $E_p = 800\text{MeV}$ 的 $p + {}^{208}\text{Pb}$ 在出射角度 $15^\circ, 60^\circ, 120^\circ, 150^\circ$ 的双微分截面与实验结果^[25,26] 的比较

我们还计算了入射质子能量为 $E_p = 1.5\text{GeV}$ 的 $p + {}^{208}\text{Pb}$ 在出射中子方向为实验室系 $\theta_{\text{Lab}} = 15^\circ, 30^\circ, 60^\circ, 90^\circ, 120^\circ$ 和 150° 的 (p, xn) 反应的双微分截面. QMD 的计算值和 Amian^[25] 在 LANL 和 Ishibashi^[26] 在 KEK 的实验测量结果符合得很好.

不难看出,对于这几个不同入射质子能量的 $p + {}^{208}\text{Pb}$, QMD 的计算都较好地再现实验测量数据,只有在 $E_p = 590\text{MeV}$ 的 $p + {}^{208}\text{Pb}$ 的 (p, xn) 反应道,在中子出射方向 $\theta_{\text{Lab}} = 30^\circ$ 时, QMD 的计算值在 高能部分较 Filges 在 KfK 的实验测量数据偏低.

我们的计算结果与实验测量数据符合情况比利用其他程序计算的结果与实验数据符合得要 好(见图 4). HETC 计算的结果在 $E_n < 1.5\text{MeV}$ 时较实验数据偏高,而在 $E_n > 15\text{MeV}$ 的能区, HETC 的计算结果偏低于实验数据几个数量级.

4 结论和讨论

我们对²⁰⁸Pb 的初始化进行了认真的考虑,计算得到了入射质子能量 590, 800 和

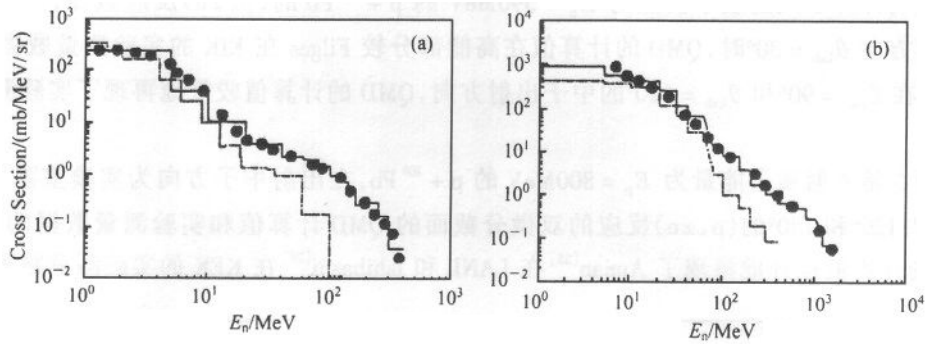


图 4 QMD, HETC 计算结果和测量^[24,26]的比较

—QMD, - - - HETC.

1500 MeV 的 (p, xn) 反应的双微分截面, QMD 的计算结果很好地再现了实验数据. 和 HETC 以及 LAHET 的结果比较, QMD 的计算结果则基本上在所有的能区和中子出射方向均较好地再现了实验测量数据. 我们可以认为, 进行了精细化的初始靶核的 QMD 的计算明显优于 HETC 的计算. QMD 在较宽的能区和核区满足加速器驱动洁净核能系统散裂靶物理计算的要求.

但是, 利用 QMD 计算 (p, xn) 反应的朝前散射时, QMD 计算值的高能端较实验测量数据偏低.

参考文献 (References)

- 1 Bowman C D et al. Nucl. Instr. Meth., 1992, **A320**:336
- 2 Carminati R et al. CERN/AT. 93 - 47(ET), 1993
- 3 Rubbia C et al. CERN/AT. 95 - 44(ET), 1995
- 4 Arodriamonje S et al. Phys. Lett., 1995, **B348**:697
- 5 Coleman W A et al. Nucl. Sci. and Eng., 1971, **43**:353
- 6 Richard E et al. LA-UR-3014, 1989
- 7 Sobolevsky N M. NSC/DOC (96) - 15, 1996
- 8 Coleman W A et al. ORNL - 4606, 1970
- 9 DING Da-Zhao. Joint IAEA/CNRC Seminar 21st Century Nuclear Energy Development in China. 22 - 23, May, 1997, Beijing China
- 10 Hartnack C et al. Nucl. Phys., 1989, **A495**:320
- 11 Aichelin J et al. Phys. Rev., 1988, **C37**:2451
- 12 Aichelin J et al. Phys. Reports, 1991, **202**(5,6):233
- 13 Sangster T C et al. Phys. Rev., 1992, **C46**:1404
- 14 Peilert G et al. Phys. Rev., 1992, **C46**:1457
- 15 Koji Niita et al. Phys. Rev., 1995, **C52**:2620
- 16 Chadwick M B et al. Phys. Rev., 1995, **C52**:2800
- 17 Chiba S et al. Phys. Rev., 1996, **C53**:1824
- 18 Chiba S et al. Phys. Rev., 1996, **C54**:285
- 19 Chiba S et al. Phys. Rev., 1996, **C54**:3302
- 20 FAN Sheng et al. Eur. Phys. J., 2000, **A4**:61
- 21 FAN Sheng et al. Nucl. Sci. and Eng., 2001, **137**:89

- 22 FAN Sheng et al. High Energy Phys. and Nucl. Phys., 2000, 23:785(in Chinese)
(樊胜等. 高能物理与核物理, 2000, 23:785)
- 23 FAN Sheng et al. High Energy Phys. and Nucl. Phys., 2000, 24:845(in Chinese)
(樊胜等. 高能物理与核物理, 2000, 24:845)
- 24 Filges D et al. KfK-3779, 1980
- 25 Amian W B et al. Nucl. Sci. and Eng., 1992, 112:78
- 26 Ishibashi K et al. J. Nucl. Sci. and Eng., 1997, 34:259

Cross Section Calculations for Proton-Induced Reaction on ²⁰⁸Pb with Intermediate Energy up to GeV by Using Quantum Molecular Dynamics *

FAN Sheng LI Zhu-Xia ZHAO Zhi-Xiang
(China Institute of Atomic Energy, Beijing 102413, China)

Abstract The spallation neutron source induced by high energy proton-nucleus interaction is an important link for acceralator driven system. The quantum molecular dynamics (QMD) model is applied to analyze the high energy proton induced reactions on ²⁰⁸Pb. The QMD simulations of the double differential cross section of ²⁰⁸Pb (p, xn) reactions with incident energies of 590, 800 and 1500MeV are in good agreement with the experimental data, and the results of QMD calculations are better than that of HETC and LAHET.

Key words quantum molecular dynamics (QMD), double differential cross section, acceralator driven system

Received 14 November 2001

* Supported by Major State Basic Research Development Program (G1999022600), National Natural Science Foundation of China (19675067)