

УДК 539.172.17

УРАВНЕНИЕ ШРЁДИНГЕРА И КВАНТОВЫЕ УДАРНЫЕ ВОЛНЫ ПРИ ОПИСАНИИ СТОЛКНОВЕНИЙ АТОМНЫХ ЯДЕР

© 2024 г. А. Т. Дьяченко^{1,2,*}, И. А. Митропольский¹

¹Федеральное государственное бюджетное учреждение Петербургский институт ядерной физики имени Б.П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

²Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования Петербургский государственный университет путей сообщения Императора Александра I, Санкт-Петербург, Россия

* e-mail: dyachenko_a@mail.ru

Поступила в редакцию 24.11.2023

После доработки 24.03.2024

Принята к публикации 29.04.2024

Получены уравнения квантовой гидродинамики из уравнения Шрёдингера с учетом диссипации, которые в квазиклассическом пределе сводятся к традиционным уравнениям гидродинамики идеальной жидкости. Найдено аналитическое решение уравнений гидродинамики в приближении квантовых ударных волн в одномерном и двумерном случаях. Диссипативная функция может быть найдена в неравновесном подходе. Выполнено сравнение с экспериментальными данными для описания испускания протонов в столкновениях атомных ядер среднего размера промежуточных энергий.

Ключевые слова: уравнение Шрёдингера, диссипация, квантовая гидродинамика, ударные волны, тяжелые ионы, спектр испускаемых протонов

DOI: 10.31857/S0367676524080177, EDN: OPSAMU

ВВЕДЕНИЕ

Уравнения квантовой гидродинамики можно получить в соответствии с представлением Маделунга [1] для временного уравнения Шрёдингера. В квазиклассическом приближении получаются традиционные уравнение непрерывности и уравнение Эйлера. Однако эти уравнения не включают диссипацию. В них отсутствует третье уравнение для энергии. Аналогичная ситуация встречается для связи уравнения Клейна—Гордона с уравнениями квантовой релятивистской гидродинамики [2]. В настоящей работе уравнение Шрёдингера дополнено диссипативной функцией, что вместе с уравнением для сохранения энтропии приводит к замкнутой системе уравнений нерелятивистской квантовой гидродинамики идеальной жидкости. Учет отклонения от идеальной жидкости может быть проведен в соответствии с нашими работами [3–9], где было предложено неравновесное уравнение состояния.

Решение этих уравнений гидродинамики проведено в одномерном и двумерном случаях аналитически с использованием односолитонных решений и квантовых ударных волн. Это дополняет наши результаты, полученные в работе [10] как для слабой нелинейности, так и в случае нелинейных возмущений большой амплитуды для ударных волн [11]. Такое рассмотрение приводит к представлению

об образовании горячего пятна hot spot. В результате было проведено сравнение с экспериментальными данными для реакции $\text{Ne} + \text{NaF} \rightarrow \text{p} + \text{X}$ при энергии налетающих ядер Ne, равной 400 МэВ на нуклон.

Далее в разделе 1 устанавливается связь эффективного диссипативного уравнения Шрёдингера с уравнениями квантовой гидродинамики, затем в разделе 2 получены решения уравнений гидродинамики в одномерном и двумерном случаях, в разделе 3 проведено сравнение с экспериментальными данными по эмиссии протонов в столкновениях тяжелых ионов промежуточных энергий и в заключении приведены основные выводы работы.

СВЯЗЬ УРАВНЕНИЙ ГИДРОДИНАМИКИ С УРАВНЕНИЕМ ШРЕДИНГЕРА

Уравнения квантовой гидродинамики могут быть связаны с уравнением Шрёдингера (Маделунг, 1926 [1]). Однако получающиеся уравнения не содержат диссипации. Для того, чтобы ее учесть, в уравнение Шрёдингера добавим к потенциалу U диссипативную функцию $J = k \frac{I}{\rho}$, где I — тепловой член, k — показатель адиабаты, ρ — нуклонная плотность. Соответствующее уравнение Шрёдингера имеет вид

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + (U + J)\Psi, \quad (1)$$

где m — нуклонная масса, \hbar — постоянная Планка, Δ — оператор Лапласа, $\Psi = \rho^{1/2} \exp(iQ / \hbar)$ — волновая функция, а Q — фаза волновой функции.

Поскольку

$$\Delta\Psi = \Psi \left(\frac{\partial^2 \ln \Psi}{\partial x_l \partial x_l} + \frac{\partial \ln \Psi}{\partial x_l} \frac{\partial \ln \Psi}{\partial x_l} \right), \quad (2)$$

где по повторяющимся индексам $l = 1, 2, 3$ предполагается суммирование, после подстановки (2) в (1) для $\Psi = \rho^{1/2} \exp(iQ / \hbar)$ получаем для действительной части уравнения (1)

$$-\frac{\partial Q}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \rho^{1/2}}{\rho^{1/2} \partial x_l \partial x_l} + \frac{1}{2m} \frac{\partial Q}{\partial x_l} \frac{\partial Q}{\partial x_l} + U + J. \quad (3)$$

После дифференцирования (3) с $\nabla_l = \frac{\partial}{\partial x_l}$ и обозначения поля скоростей $\vec{v} = \vec{\nabla}Q / m$ приходим к гидродинамическому уравнению Эйлера

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + v_l \frac{\partial \vec{v}}{\partial x_l} = -\frac{1}{m} \nabla(U + J - \frac{\hbar^2}{2m\rho^{1/2}} \Delta\rho^{1/2}), \quad (4)$$

которое содержит потенциал Маделунга $\frac{\hbar^2}{2m\rho^{1/2}} \Delta\rho^{1/2}$ и введенную нами диссипативную функцию J . С учетом уравнения непрерывности

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v_l)}{\partial x_l} = 0 \quad (5)$$

уравнение (4) можно привести к виду

$$\frac{\partial(m\rho\vec{v})}{\partial t} + \frac{\partial(m\rho\vec{v}v_l)}{\partial x_l} = -\rho\nabla\left(U + J - \frac{\hbar^2}{2m\rho^{1/2}} \Delta\rho^{1/2}\right). \quad (6)$$

Уравнение непрерывности (5) получается для мнимой части уравнения (1) после подстановки в него (2). Здесь, в отличие от работы [1], мы ввели дополнительно тепловой член $J = \kappa \frac{I}{\rho}$, где I — плотность тепловой энергии. Для него нужно выписать дополнительное уравнение, чтобы получить замкнутую систему уравнений. Для адиабатического движения можно написать уравнение постоянства энтропии [3]

$$\frac{\partial I}{\partial t} + v_l \frac{\partial I}{\partial x_l} + \kappa I \frac{\partial v_l}{\partial x_l} = 0, \quad (7)$$

которое, с учетом уравнения непрерывности (5) приводит к соотношению $I = I_1 \left(\frac{\rho}{\rho_1}\right)^\kappa$, где κ — показатель адиабаты, равный 3 в неравновесном случае и $\frac{5}{3}$ в равновесном случае, I_1 — независимый от ρ коэффициент.

Таким образом, дополнительно к уравнению Шрёдингера (1) с диссипативным членом, или уравнениям гидродинамики [уравнению непрерывности (5) и уравнению Эйлера (6)] должно быть добавлено уравнение (7) для теплового члена, чтобы система

уравнений была замкнутой. Неоднозначность в выборе показателя адиабаты в нашем подходе [3—9] снимается тем, что мы предложили совместно с уравнениями гидродинамики решать кинетическое уравнение для релаксационного фактора q при сохранении в процессе релаксации плотности полной энергии. При этом в процессе релаксации сохраняется плотность и плотность полной энергии. Это уравнение для функции распределения f и, тем самым, для фактора q имеет вид:

$$\frac{df}{dt} = \frac{f_0 - f}{\tau}, \quad (8)$$

где f_0 — локально равновесная функция распределения, τ — время релаксации. Решение (8) ищется для функции распределения в виде $f = f_1 q + f_0(1 - q)$, f_1 — неравновесная функция распределения, отвечающая равновесию только в продольном направлении для процесса столкновения [3]. В крайних пределах: при $q = 0$ мы имеем полностью равновесный случай, при $q = 1$ имеем предельный полностью неравновесный случай. Для показателя адиабаты κ в уравнениях (1), (6) и (7) надо подставить $\kappa = 3q + \frac{5}{3}(1 - q)$.

Заметим, что введение диссипативных членов для уравнения Шрёдингера рассматривалось ранее в работе [12] по-другому (эмпирически), не вводя плотность тепловой энергии. Добавление еще одного уравнения возникает естественно для уравнений гидродинамики, за счет закона сохранения энергии

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \frac{\partial E v_l}{\partial x_l} = -\nabla^l(v_l P), \quad (9)$$

где $E = \frac{1}{2} m\rho v^2 + e$. Это уравнение (9) можно получить из уравнений (5) и (6) после простых преобразований умножив уравнение Эйлера на скорость с учетом уравнения (7) для теплового члена, входящего в плотность энергии и давление. Здесь плотность внутренней энергии $e = e_{kin} + e_{int}$, где e_{kin} складывается из плотности энергии Ферми — движения (включая квантовые члены) и плотности тепловой энергии I , плотность энергии взаимодействия $e_{int} = \int_0^{\rho} U d\rho$. При этом давление $P = -\frac{d(e/\rho)}{d(1/\rho)}$. Уравнение (9) имеет дивергентный вид, обеспечивающий сохранение полной энергии.

РЕШЕНИЕ ВОЛНОВОГО УРАВНЕНИЯ ДЛЯ УДАРНЫХ ВОЛН

Рассмотрим вначале одномерный случай, когда уравнения (5) и (6) можно привести к виду

$$\frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} - \frac{\partial^2(\rho v^2 + P/m)}{\partial x^2} = 0. \quad (10)$$

Рассмотрим решение в виде ударной волны, распространяющейся со скоростью D . После замены $\frac{\partial}{\partial t} = -D \frac{\partial}{\partial x}$ уравнение становится обыкновенным, и для $P = K(\rho^2 - \rho_0^2) - \frac{\hbar^2}{4m} \left(\rho_{xx} - \frac{(\rho_x)^2}{\rho} \right)$ с $U = 2K(\rho - \rho_0)$ после интегрирования (10) мы получаем уравнение

$$\frac{\hbar}{2Dm(\rho - \rho_0)} \frac{d\rho}{dx} = -\sqrt{1 - \frac{\rho - \rho_0}{\rho_1 - \rho_0}}, \quad (11)$$

где ρ_1 плотность, соответствующая максимуму на ударной волне, ρ_0 — равновесная плотность, $K = mc_s^2 / (2\rho_1)$ — модуль сжатия, $c_s = D$ — скорость звука. При получении (11) выделены только главные члены и постоянные интегрирования выбраны так, чтобы производная от ρ по x обращалась в нуль при $\rho = \rho_0$ и $\rho = \rho_1$. Максимальную плотность сжатия ρ_1 и тепловой член I_1 находим (приравнявая скорость ударной волны $D = -\frac{\rho_0 v_0}{\rho_1 - \rho_0}$ скорости звука) из равенства плотности энергии для ударной волны плотности энергии налетающего ядра $\frac{1}{2} m \rho_0 v_0^2$. Решение уравнения (11) соответствует солитонному выражению:

$$\rho' = \rho_0 + 4 \frac{\rho_1 - \rho_0}{[\exp(\alpha x) + \exp(-\alpha x)]^2}, \quad (12)$$

где $\alpha = \frac{mD}{\hbar}$, имеющему ширину фронта $\frac{\hbar}{mD} \sim$ фм. Как мы делали ранее, можно найти интеграл $\rho = \frac{1}{L} \int_{l_1}^{l_2} \rho' dx_1$ (L — длина слоя, $L = l_2 - l_1$, $x \rightarrow x - x_1 \pm Dt$) от выражения (12) для распространяющейся ударной волны вправо и влево. Поскольку нам нужно сохраняющееся солитоноподобное решение, допускающее для максимума плотности в волновом уравнении решение Даламбера, как мы делали ранее в предыдущей работе [11].

На рис. 1 приведены мгновенные профили плотности столкновения одинаковых ядерных слоев-слэбов при энергии 100 МэВ/нуклон в системе центра масс в различные моменты времени. Можно видеть первоначальное сжатие с образованием hot spot и последующее разрежение в центре.

В двумерном случае можно воспользоваться приближениями работ [2, 3], проинтегрировав дивергентные уравнения по поперечной координате u для центрального столкновения ядер. В таком приближении задача становится одномерной при задании $S(x, t)$ — площади поперечного сечения. В случае свободного движения S — просто площадь поперечного сечения данной невозмущенной области ядра. В случае возмущенной области из уравнения непрерывности для ударной волны скорости D получаем

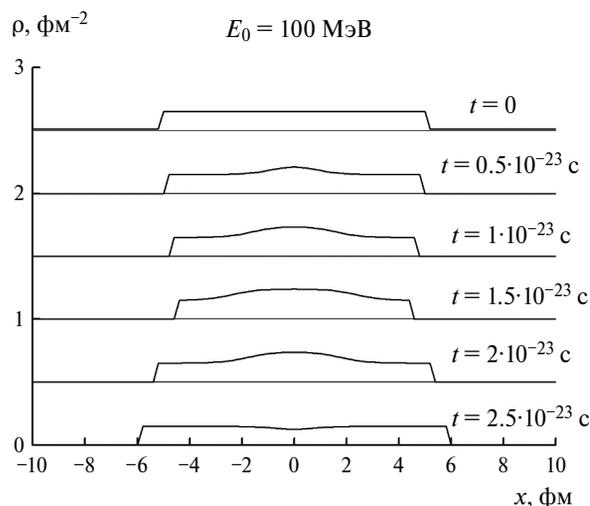


Рис. 1. Мгновенные профили столкновения ядерных слоев-слэбов при энергии $E_0 = 100$ МэВ на нуклон в различные моменты времени при $t = 0; 0.5; 1.0; 1.5; 2.0; 2.5$ в единицах времени 10^{-23} с.

после замены $\frac{\partial}{\partial t} = -D \frac{\partial}{\partial x}$ и интегрирования по скачку плотности

$$-D(\rho S - \rho_0 S_0) + (0 - \rho_0 v_0 S_0) = 0, \quad (13)$$

где $S_0 = \Omega_0 R_0^2$, $S = \Omega R^2$, телесные углы $\Omega = 2\pi$, $\Omega_0 = \pi$, поскольку для сферической ударной волны, исходящей в полусферу, $\Omega = 2\pi$, а для набегающего с одной стороны со скоростью v_0 потока вещества $\Omega_0 = 2\pi \int_0^{\pi/2} \sin \theta \cos \theta d\theta = \pi$. Кроме того, из сохранения количества вещества радиусы полусфер относятся как $R / R_0 = (\rho_0 / \rho)^{1/3}$. Отсюда для скорости сферической ударной волны получаем

$$D = -\frac{v_0}{2(\rho / \rho_0)^{1/3} - 1}. \quad (14)$$

Исходя из этого, также как в одномерном случае, приравнявая D скорости звука, а плотность энергии на ударной волне плотности энергии налетающего ядра, находим максимальную степень сжатия ρ_1 и плотность тепловой энергии I_1 . Так с помощью ударных волн можно проследить динамику столкновения ядер и в двумерном случае. Такое рассмотрение улучшает подход, проведенный в работе [3] и проведенный нами ранее в работах [10, 11] для ударной волны с изменяющимся фронтом. Поле скоростей можно определить из уравнения непрерывности, зная распределение плотности.

В качестве иллюстрации полученного решения в двумерном случае на рис. 2 приведены профили плотности по оси x в различные моменты времени для центрального столкновения одинаковых ядер среднего размера при энергии 100 МэВ на нуклон

в системе центра масс. Можно видеть различие динамики в двумерном случае на этом рисунке и в одномерном случае на рис. 1. На рисунке 3 приведены в различные моменты времени по оси y границы сталкивающихся ядер для того же случая, как и на рис. 2. Изменение плотности по поперечной координате y также может быть учтено [11]. В результате такого рассмотрения можно видеть первоначальное сжатие и последующее разрежение в центре, т. е. образование hot spot — источника вторичных частиц — нуклонов. Мы сопоставили эти результаты с экспериментальными данными.

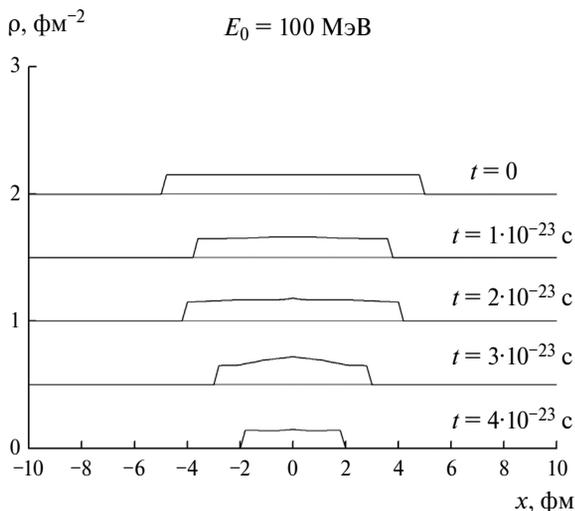


Рис. 2. Мгновенные профили столкновения одинаковых ядер (сплошные линии) при энергии $E_0 = 100$ МэВ на нуклон в различные моменты времени при $t = 0; 1; 2; 3; 4$ в единицах времени 10^{-23} с для двумерного случая.

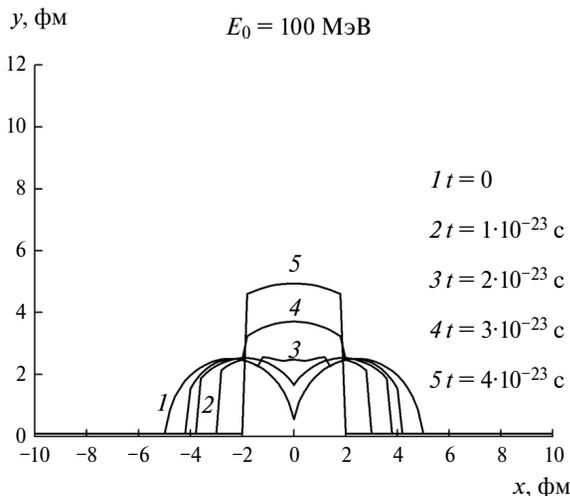


Рис. 3. Профили максимального поперечного размера ядер при энергии $E_0 = 100$ МэВ на нуклон в различные моменты времени при $t = 0; 1; 2; 3; 4$ в единицах времени 10^{-23} с.

СРАВНЕНИЕ

С ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫМИ ДАННЫМИ

В результате рассмотрения такого аналитического решения задачи центрального столкновения двух одинаковых ядер можно выделить первоначальное сжатие с образованием hot spot и затем последующее разрежение в центре взаимодействующей системы по достижении нормальной плотности. Эту область можно аппроксимировать шаром радиуса, вдвое меньшего размера системы. Из этой области происходит испускание нуклонов, поскольку среднее поле их уже не держит. Начинается процесс замораживания распределений нуклонов. При сравнении с экспериментальными данными для столкновения реальных ядер ограничимся здесь столкновением одинаковых ядер, когда взаимодействие областей перекрытия при отличном от нуля параметре удара можно аппроксимировать столкновением двух одинаковых ядер, рассмотренного в предыдущем разделе. Далее, выделяя область hot spot со своими температурой и полем скоростей, можно вычислить дифференциальное сечение испускания протонов, как мы делали раньше в работах [4, 7, 9]. При сопоставлении с экспериментальными данными заметим потенциал U взаимодействием типа Скирма $W = \alpha\rho + \beta\rho^\chi$, как мы делали в наших работах [4–9], где параметры α, β, χ определяются заданием значений нормальной плотности, энергии связи и модуля сжатия и не являются подгоночными параметрами.

Инвариантное двойное дифференциальное сечение испускания протонов имеет вид [4, 7, 9]:

$$E \frac{d^2\sigma}{p^2 dp d\Omega} = \frac{2\pi}{(2\pi\hbar)^3} \int G(b) b db d\vec{r} \gamma(E - \vec{p}\vec{v}) f(\vec{r}, \vec{p}, t) \quad (15)$$

для функции распределения протонов в пренебрежении неравновесной компонентой

$$f(\vec{r}, \vec{p}, t) = g \left[\exp\left(\frac{\gamma(E - \vec{p}\vec{v} - \mu) + T\delta}{T} \right) + 1 \right]^{-1}, \quad (16)$$

где $g = 2$, $E = \sqrt{p^2 + m^2}$ — энергия испускаемых протонов, \vec{p} — импульс, γ — Лоренц-фактор, T — температура и μ — химический потенциал, найденные на стадии замораживания, b — параметр удара, $G(b) = \sigma_t / \sigma_g$ — фактор, учитывающий, что полное сечение областей перекрытия σ_t больше геометрического σ_g , δ — поправка на микроканоническое распределение.

В качестве иллюстрации на рис. 4 приведены двойные дифференциальные сечения испускания протонов под углами $30^\circ, 60^\circ$ и 140° для реакции $Ne + NaF \rightarrow p + X$ при энергии 400 МэВ на нуклон для налетающих ядер Ne. Можно видеть согласие с экспериментальными данными [13] и расчетами [14], проведенными по двухжидкостной гидродинамической модели. Средняя температура в наших расчетах $\langle T \rangle \approx 50$ МэВ.

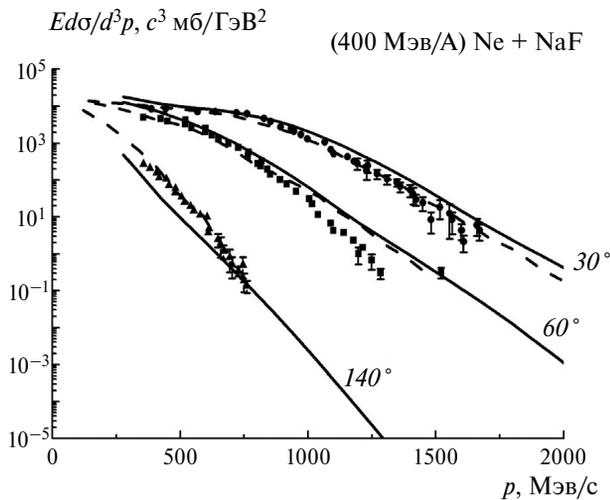


Рис. 4. Двойные дифференциальные сечения испускания протонов под углами 30° , 60° и 140° в реакции $\text{Ne} + \text{NaF} \rightarrow \text{p} + \text{X}$ при энергии 400 МэВ на нуклон для налетающих ядер Ne. Сплошные линии — результаты нашего расчета по формулам (15) и (16), штриховые линии — результаты расчетов из работы [14], точки — экспериментальные данные [13].

Здесь температура и химический потенциал находились, как обычно, по найденному значению плотности тепловой энергии и плотности на стадии «замораживания». Поле скоростей также определялось в этот момент времени.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, получены уравнения квантовой гидродинамики из введенного нами эффективного уравнения Шрёдингера с диссипацией. Диссипация описывается введением диссипативной функции в эффективный потенциал уравнения Шрёдингера. Для этой функции используется уравнение сохранения энергии. Учет неравновесных процессов производится добавлением еще кинетического уравнения для нуклонной функции. Получается замкнутая система квантовых уравнений.

Найдено решение полученных квантовых гидродинамических уравнений с помощью солитоноподобных квантовых ударных волн в одномерном и двумерном случаях. Это позволяет выделить временную эволюцию образующегося горячего пятна hot spot и рассчитать двойные дифференциальные сечения испускаемых протонов в столкновениях тяжелых ионов с учетом неравновесных процессов. Проведено сравнение с имеющимися экспериментальными данными.

Распространение данного подхода для релятивистских уравнений (построение эффективного уравнения Клейна—Гордона с диссипацией) представляет дополнительный интерес.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Madelung E. // Z. Physik. 1926. V. 40. P. 332.
2. Дьяченко А.Т. // Ядерн. физика. 2023. Т. 86 С. 428; D'yachenko A.T. // Phys. Atom. Nucl. 2023. V. 86. P. 289.
3. D'yachenko A.T., Gridnev K.A., Greiner W. // J. Physics G. 2013. V. 40. No. 3. Art. No. 085101.
4. Дьяченко А.Т., Митропольский И.А. // Ядерн. физика. 2020. Т. 83. С. 317; D'yachenko A.T., Mitropolsky I.A. // Phys. Atom. Nucl. 2020. V. 83. P. 558.
5. Дьяченко А.Т., Митропольский И.А. // Изв. РАН. Сер. физ. 2020. Т. 84. С. 508; D'yachenko A.T., Mitropolsky I.A. // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2020. V. 84. P. 391.
6. Дьяченко А.Т., Митропольский И.А. // Изв. РАН. Сер. физ. 2021. Т. 85. С. 716; D'yachenko A.T., Mitropolsky I.A. // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2021. V. 85. P. 554.
7. D'yachenko A.T., Mitropolsky I.A. // EPJ Web Conf. 2019. V. 204. No. 3. Art. No. 03018.
8. D'yachenko A.T., Mitropolsky I.A. // Phys. Atom. Nucl. 2019. V. 82. P. 1641
9. Дьяченко А.Т., Митропольский И.А. // Ядерн. физика. 2023. Т. 86 С. 285; D'yachenko A.T., Mitropolsky I.A. // Phys. Atom. Nucl. 2022. V. 85. P. 1053.
10. Дьяченко А.Т., Митропольский И.А. // Изв. РАН. Сер. физ. 2022. Т. 86. № 8. С. 1155; D'yachenko A.T., Mitropolsky I.A. // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2022. V. 86. No. 8. P. 962.
11. Дьяченко А.Т., Митропольский И.А. // Изв. РАН. Сер. физ. 2023. Т. 87. № 8. С. 1155; D'yachenko A.T., Mitropolsky I.A. // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2023. V. 87. No. 8. P. 1169.
12. Nemeth J., Barranco M., Ngö C., Tomasi E. // Z. Physik A. 1986. V. 323. P. 419.
13. Nagamiya S., Lemaire M.-C., Moeller E. et al. // Phys. Rev. C. 1981. V. 24. P. 971.
14. Мишустин И.Н., Русских В.Н., Сатаров Л.М. // Ядерн. физика. 1991. Т. 54. С. 429; Mishustin I.N., Russkikh V.N., Satarov L.M. // Sov. J. Nucl. Phys. 1991. V. 54. P. 260.

Schrödinger equation and quantum shock waves when describing collisions of atomic nuclei

A. T. D'yachenko^{1,2*}, I. A. Mitropolsky¹

¹ *B. P. Konstantinov Petersburg Nuclear Physics Institute of the National Research Center "Kurchatov Institute", Gatchina, 188300, Russia*

² *Saint Petersburg State Transport University, St. Petersburg, 190031, Russia*

**e-mail: dyachenko_a@mail.ru*

Equations of quantum hydrodynamics were obtained from the Schrödinger equation considering dissipation, which in the semiclassical limit are reduced to the traditional equations of hydrodynamics of an ideal fluid. An analytical solution to the hydrodynamic equations is found in the quantum shock wave approximation in one-dimensional and two-dimensional cases. The dissipative function can be found in the nonequilibrium approach. A comparison is made with experimental data to describe the emission of protons in collisions of medium-sized atomic nuclei of intermediate energies.

Keywords: Schrödinger equation, dissipation, quantum hydrodynamics, shock waves, heavy ions, spectrum of emitted protons