

3.1 数值方法解薛定谔方程

薛定谔于上世纪二十年代提出了薛定谔方程，薛定谔方程的出现告诉了我们粒子在势场中的波函数的样子与粒子的波函数是如何随时间变化。虽然在一些简单的势场下可以给出解析解，但对于绝大多数情况来说，没办法的到解析解。因此，如何使用数值方法来求解薛定谔方程就变得十分重要了。在第二章中得到了在 IAV 模型下的去弹性破裂反应截面的表达式，即式 (2.6.12)，但为了得到相应截面需要得到相关的波函数。下面将从分波法开始说明，使用 Numerov 法与 Enhanced Numerov 法解束缚态与散射态的波函数。在本文中忽略自旋因素的影响。

3.1.1 质心系

对于一个两体系统薛定谔方程可以写作，

$$H_{\text{tot}}\Psi(\vec{r}_a, \vec{r}_b, t) = i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}_a, \vec{r}_b, t) \quad (3.1.1)$$

H_{tot} 为整个体系的哈密顿量，

$$H_{\text{tot}} = \frac{\vec{p}_a^2}{2m_a} + \frac{\vec{p}_b^2}{2m_b} + V(\vec{r}_a, \vec{r}_b) \quad (3.1.2)$$

这样通过分离变量，我们能够得到

$$\Psi = \Psi(\vec{r}_a, \vec{r}_b) e^{iE_{\text{tot}}t} \quad (3.1.3)$$

则两体问题的定态薛定谔方程可以写为，

$$H\Psi(\vec{r}_a, \vec{r}_b) = E_{\text{tot}}\Psi(\vec{r}_a, \vec{r}_b) \quad (3.1.4)$$

描述粒子 a 与粒子 b 的运动各需要三个自由度，则此时为了描述这个体系需要六个自由度，为了方便求解薛定谔方程，我们将两体问题的薛定谔方程转化到质心系中研究，在质心系下，运动可以看作质心的运动和两个粒子之间的相对运动。

对于质心系，质心坐标可以表示为

$$\vec{R} = \frac{\vec{r}_a m_a + \vec{r}_b m_b}{m_a + m_b} \quad (3.1.5)$$

两个质点的相对坐标可表示为

$$\vec{r} = \vec{r}_a - \vec{r}_b \quad (3.1.5)$$

质心质量为

$$M = m_a + m_b \quad (3.1.6)$$

质心系下相对运动的约化质量为

$$\mu = \frac{m_a m_b}{m_a + m_b} \quad (3.1.7)$$

与坐标与质量相识，动量也能够分成整体运动与相对运动两部分

$$\vec{P} = \vec{p}_a + \vec{p}_b \quad (3.1.8)$$

$$\vec{p} = \frac{\vec{p}_a m_b - \vec{p}_b m_a}{m_a + m_b} \quad (3.1.9)$$

这样我们可以将整体的哈密顿量写到质心系坐标下，即

$$H_{tot} = \frac{\vec{p}_a^2}{2m_a} + \frac{\vec{p}_b^2}{2m_b} + V(\vec{r}_a, \vec{r}_b) = \left[\frac{\vec{p}^2}{2\mu} + V(r) \right] + \frac{\vec{P}^2}{2M} \quad (3.1.10)$$

设总波函数可以写为相对运动波函数与整体运动波函数的直积的形式

$$\Psi = \psi(\vec{r})\phi_{CM}(\vec{R}) \quad (3.1.11)$$

这样通过分离变量法可以获得两个方程

$$\begin{aligned} \left[\frac{\vec{p}^2}{2\mu} + V(r) \right] \psi(\vec{r}) &= E\psi(\vec{r}) \\ \frac{\vec{P}^2}{2M} \phi_{CM}(\vec{R}) &= E_{CM}\phi_{CM}(\vec{R}) \end{aligned} \quad (3.1.12)$$

其中 $E_{tot} = E + E_{CM}$ 显然 ϕ_{CM} 的解为平面波，即

$$\phi_{CM}(\vec{R}) = e^{i\vec{P}\cdot\vec{R}} \quad (3.1.13)$$

3.1.2 分波法

考虑到球坐标系下的薛定谔方程能够展开成

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \psi(\vec{r}) + V(r)\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \quad (3.1.14)$$

设波函数能够写成

$$\psi(\vec{r}) = R(r)Y(\theta, \phi) \quad (3.1.15)$$

将式 (3.1.15) 带入到式 (3.1.14) 中，通过分离变量法能够得到以下径向与角向两个方程

$$\begin{aligned} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] + V(r) \right\} R_l(r) &= ER_l(r) \\ \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] Y_l(\theta, \phi) &= l(l+1)Y_l(\theta, \phi) \end{aligned} \quad (3.1.16)$$

对于每一个分波 l 都有对应的角向与径向方程，波函数 ψ 可以看作是不同分波下解的线性叠加，即 $\psi = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l C_l^m R_l(r) Y_l^m(\theta, \phi)$ ，其中角向部分的解为球谐函数 $Y_l^m(\theta, \phi)$ ，即

$$Y = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l Y_l^m(\theta, \phi) \quad (3.1.17)$$

而对于径向部分引入

$$u_l(r) = rR_l(r) \quad (3.1.18)$$

那么式 (3.1.12) 中的径向部分可以写为

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) + V(r) - E \right] u_l(r) = 0 \quad (3.1.19)$$

由此，我们可以得到两体相互作用在质心系下描述相对运动的薛定谔方程的径向方程。

3.1.3 Numerov 法

式 (3.1.19) 可以化作二阶微方程的形式，即

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + k^2(r)\right)u_l(r) = 0 \quad (3.1.20)$$

其中 $k^2(r) = \frac{2\mu}{\hbar^2}(E - V(r)) - \frac{l(l+1)}{r^2}$, 而 $u_l(r)$ 可以在 r 附近泰勒展开下列两种形式

$$u_l(r+h) = u_l(r) + hu'_l(r) + \frac{h^2}{2}u_l^{(2)}(r) + \frac{h^3}{6}u_l^{(3)}(r) + \frac{h^4}{24}u_l^{(4)}(r) + \dots \quad (3.1.21)$$

$$u_l(r-h) = u_l(r) - hu'_l(r) + \frac{h^2}{2}u_l^{(2)}(r) - \frac{h^3}{6}u_l^{(3)}(r) + \frac{h^4}{24}u_l^{(4)}(r) + \dots \quad (3.1.22)$$

将式 (3.1.22) 与式 (3.1.21) 相加, 得到

$$u_l(r+h) + u_l(r-h) = 2u_l(r) + h^2u_l^{(2)}(r) + \frac{h^4}{12}u_l^{(4)}(r) + O(h^6) \quad (3.1.23)$$

这样得到二阶项 $u_l^{(2)}(r)$,

$$u_l^{(2)}(r) = \frac{u_l(r+h) + u_l(r-h) - 2u_l(r)}{h^2} - \frac{h^2}{12}u_l^{(4)}(r) + O(h^6) \quad (3.1.24)$$

将式 (3.1.20) 两边乘以算符 $(1 + \frac{d^2}{dr^2})$, 整理得到

$$u_l^{(2)}(r) + \frac{h^2}{12}u_l^{(4)}(r) + k^2(r)u_l(r) + \frac{h^2}{12}\frac{d^2}{dx^2}[k^2(r)u_l(r)] = 0 \quad (3.1.25)$$

其中 $\frac{d^2}{dx^2}[k^2(r)u_l(r)]$ 可以展开为

$$\frac{d^2}{dx^2}[k^2(r)u_l(r)] \simeq \frac{k^2(r+h)u_l(r+h) + k^2(r-h)u_l(r-h) - 2k^2u_l(r)}{h^2} \quad (3.1.26)$$

这里将式 (3.1.24) 中得到的二次项和式 (3.1.26) 带入到式 (3.1.24), 得到

$$u_l(r+h) = \frac{2\left(1 - \frac{5}{12}h^2k^2(x)\right)u_l(r) - \left(1 + \frac{1}{12}h^2k^2(r-h)\right)u_l(r-h)}{1 + \frac{1}{12}h^2k^2(r-h)} + O(h^6) \quad (3.1.27)$$

这样我们就可以把二阶微分方程问题转化为离散的递推问题, 再次观察 u_l 的形式, 即 $u_l(r) = rR(r)$, 显然若存在波函数, 那么 $R(r)$ 必然有限, 则必有 $u_l(r) = 0$ 。而在无穷远处, $u_l(r)$ 以 e 指数的形式衰减, 并且应正比于 Whittaker 函数。由此我们获得了两边的边界条件, 然后通过合理选择步长, 并利用束缚态波函数的归一化性质, 便可以得到束缚态波函数的数值解。然而值得注意的是, 对于散射态波函数并不具有归一化性质, 这时一般结合在无限远处的渐进形式得到。下面我们将介绍另外一种方法处理散射态问题。

3.1.4 Enhanced Numerov 法

本文提出的算法特别适用于对质子弹性散射数据进行光学模型拟合。相比较之前介绍的其他计算散射态, Enhanced Numerov 法在处理光学模型描述的弹性散射过程在速度上有着很大提高[35]。对于散射态, 将式 (3.1.20) 改写成,

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} - k^2(r)\right)u_l(r) = 0 \quad (3.1.28)$$

其中 $k^2(r) = \frac{2\mu}{\hbar^2}(V(r) - E) + \frac{l(l+1)}{r^2}$, 注意到 $E = \frac{k^2}{2\mu}$, 在光学模型势下可以将其写成更加简洁的形式,

$$f(x) = \left(-1 + U(r) + \frac{l(l+1)}{x^2} \right) \quad (3.1.31)$$

$$x = kr, l = 0, 1, 2, \dots$$

为推导简洁, 将一些常数并入到 $U(r)$ 中, 且 $\hbar = 1$ 。而 $y(x) = \frac{u(r)}{k^2}$ 。这与 3.1.3 节相似的, 可以将 $y(x)$ 通过泰勒展开得到[36],

$$y(x+h)(1-T(x+h)) + y(x-h)(1-T(x-h)) - (2+10T(x))y(x)$$

$$= \frac{1}{3} \sum_{m=3}^{\infty} \frac{h^{2m} y^{(2m)}(x) (2m+3)(2-m)}{(2m)!} \quad (3.1.30)$$

其中 $T(x) = \frac{f(x)h^2}{12}$, 我们假设相较于 $f(x)$ 而言 $y(x)$ 的变化更加缓慢, 即

$$f^{(m)}(x)y^{(n)}(x) \ll f^{(n)}(x)y^{(m)}(x), m > n \quad (3.1.31)$$

联想到式 (3.1.29) 可以改写成

$$y^{(2)}(x) = f(x)y(x) \quad (3.1.32)$$

在等式两边同时求多重微分, 等式右边可以由分步求导公式得到, 满足二项分布, 同时综合式 (3.1.31), 通过递推可以得到近似关系

$$y^{(2m)}(x) \approx (f(x))^m y(x) \quad (3.1.33)$$

将其代入到式 (3.1.30) 中, 这样就得到了地推关系

$$y(x+h)(1-T(x+h)) + y(x-h)(1-T(x-h)) - (2+10T(x))y(x)$$

$$= \frac{1}{3} \sum_{m=3}^{\infty} \frac{(h^2 f(x))^m y(x) (2m+3)(2-m)}{(2m)!} \quad (3.1.34)$$

不妨设

$$w(x) = (1-T(x))y(x) \quad (3.1.35)$$

并利用级数求和可以将式子改写为[36],

$$w(x+h) + w(x-h) = \left(2 \cosh \sqrt{12T(x)} \right) w(x) \quad (3.1.36)$$

对等式右边双曲余弦函数泰勒展开, 忽略高阶项, 得到

$$w(x+h) + w(x-h) = (2 + 12T(x) + 12T(x)^2)w(x) \quad (3.1.37)$$

这样我们就获得了 Enhanced Numerov 方法的离散递推关系。为了解决散射问题, 只需要在两个点 (称为匹配半径) 上, 在足够大的 x 值下, 使势 $U(r)$ 变得可以忽略不计, 对式 (3.1.32) 取正则解。然后根据适当的渐近形式 (贝塞尔函数或库仑函数) 提取相移。

3.1.5 np 束缚态

1911 年, Rutherford 散射实验发现了质子 (proton, 简记为 p)。1932 年, Chadwick 通过反应 $\alpha+{}^7\text{B}\rightarrow{}^{13}\text{N}+\text{n}$ 发现了中子 (neutron, 简记为 n)。Urey 在蒸发了大量液体氢之后, 利用光谱检测的方法发现了重氢, 重氢的核即为氘核 (deuteron, 简记为 d), 通过分别测量 d、n、p 的质量我们可以得到 np 的结合能为 $2224.5 \pm 0.20\text{keV}$ 。同时氘核的束缚态也是我们需要求解的波函数之一。这里不考虑自旋轨道耦合作用, 可以将氘核简化为 np 束缚态问题。

在 np 束缚模型中, 由于中子不带电荷, 所以不存在库仑势的作用, 仅考虑核力的相互作用。这里选取 Gaussian 势模型,

$$V = V_0 e^{-\frac{r^2}{a^2}} \quad (3.1.38)$$

其中 $V_0 = -72.14\text{MeV}$, $a = 1.484\text{fm}$ 。由于核力是短程力, 我们认为在 60fm 处已经衰减接近零。所以在 0~60fm 范围内选取高斯积分法, 当 $l = 0$ 时, 利用 Numerov 法解得的径向 s 波的波函数如图 3.1 所示。

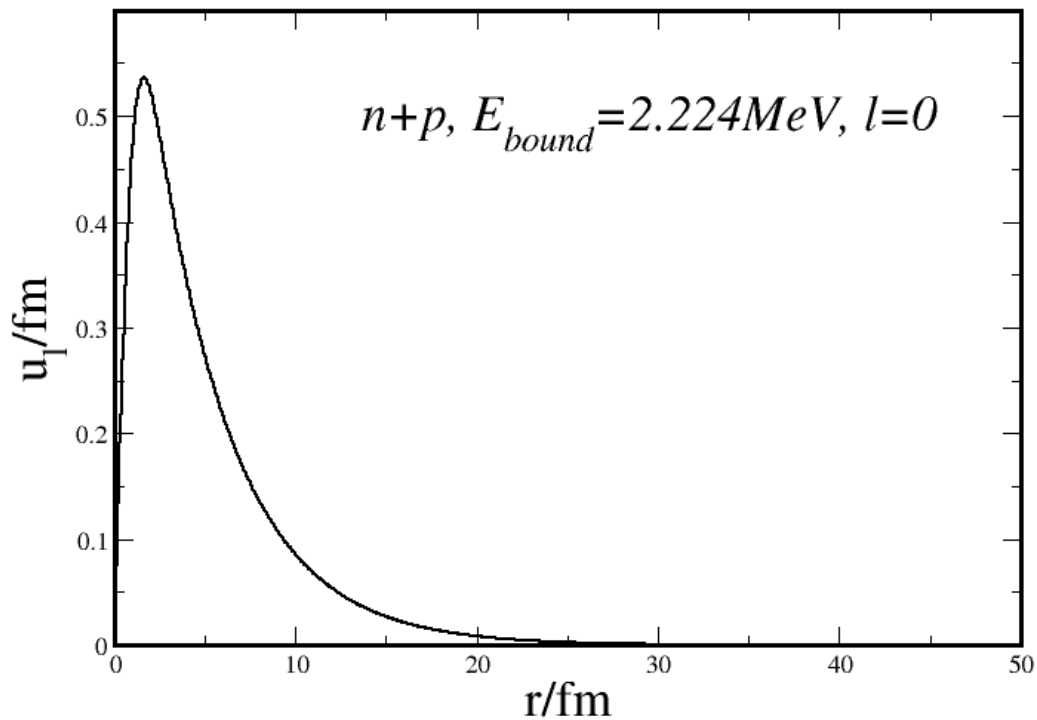


图 3.1 不考虑自旋的氘核的径向 s 波的波函数

3.1.6 求解 d 与 ${}^{62}\text{Ni}$ 的扭曲波

重新观察定义 α 反应道的扭曲波 (也就是 d+A 系统) 的薛定谔方程,

$$(K_d + U_{dA} - E_d)\chi_d^+(\vec{k}_d, \vec{r}_d) = 0 \quad (3.1.39)$$

该方程的一般解可以写成

$$\chi_d^+(\vec{k}_d, \vec{r}_d) = \frac{4\pi}{k_d r_d} \sum_{lm} i^l R_l(r_d) Y_l^m(\hat{r}) Y_l^{m*}(\hat{k}) \quad (3.1.40)$$

由式 (2.2.23) 得, 其解在无穷远处的渐进形式可以写作

$$\chi_d^+(\vec{k}_d, \vec{r}_d) \rightarrow \frac{4\pi}{k_d r_d} \sum_{\ell, m} i^\ell e^{i\sigma_\ell} F_\ell(k_d, r_d) Y_\ell^m(\hat{r}_d) Y_\ell^{m*}(\hat{k}_d) \quad (3.1.41)$$

其中 $f_\ell(k_d, r_d)$ 为库伦函数, σ_ℓ 为相移。

由于 d 与 ^{62}Ni 均是带电粒子, 这里必须考虑库仑力对模型的影响, 这里的情况比在 3.1.5 节中遇到的问题不同, 这里应考虑库仑势的作用, 注意到上式中的光学模型势在形式上包含库仑势, 图 3.2 为光学模型势 $U_{dA}(r)$ 的图像。光学势数据来自文献[34]。

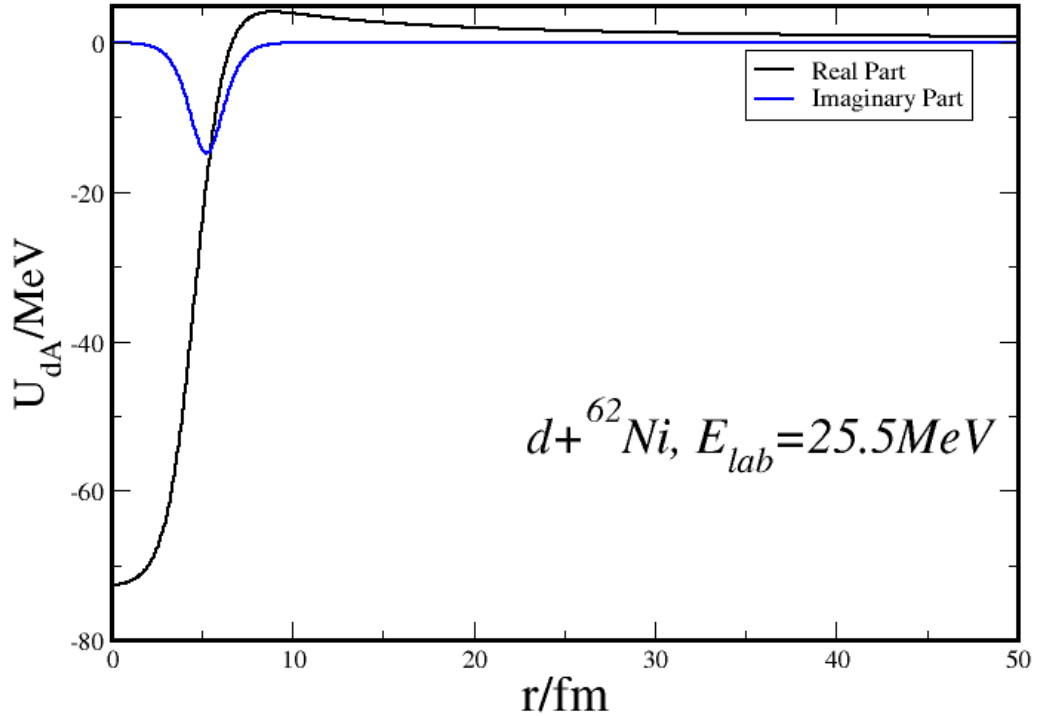


图 3.2 $d+^{62}\text{N}$ 在 $E_{\text{lab}}=25.5\text{MeV}$ 时光学势的虚部与实部

核力为短程力在原子核附近强度迅速衰减, 这就使得在核附近表现为吸引; 库仑力为长程力, 在一定距离之后势函数由库仑势占主导, 也就是表现为在较远距离上核之间相互排斥。在较远距离上排斥, 而在附近吸引, 也就意味着在中间存在着一个极值。在图 3.2 中, 不难发现在 10fm 附近就能够找到这个极值, 我们形象地称它为库仑位垒。对于无限远处我们考虑其只受库伦势的作用那么对于径向部分薛定谔方程可以写为

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2\eta k}{r} \right] u_l(k, r) = 0 \quad (3.1.42)$$

其中 $\eta = \frac{m_\alpha Z_A Z_a e^2}{(\hbar^2 k)}$ 。不妨设 $x = kr$ ，上式可以写作

$$\frac{d^2 u_l}{dx^2} + \left[1 - \frac{2\eta}{x} - \frac{l(l+1)}{x^2} \right] u_l = 0 \quad (3.1.43)$$

此方程包含两个线性无关解，其正则解称为第一类库仑函数，记作 F_l ；非正则解称为第二类库仑函数，记作 G_l [37]。另外库仑函数在无穷远处满足以下渐进形式，

$$\begin{aligned} F_\ell(kr) &\rightarrow \sin \theta_\ell \\ G_\ell(kr) &\rightarrow \cos \theta_\ell \\ \theta_\ell &= kr - \eta \ln(2kr) - \frac{\ell\pi}{2} + \sigma_\ell \end{aligned} \quad (3.1.44)$$

此时产生的相移 σ_ℓ ，称为库仑相移。将两类库仑函数进行线性组合可以得到，

$$H_l^\pm(kr) = [G_l(kr) \pm iF_l(kr)]e^{\mp i\sigma_l} \quad (3.1.45)$$

我们现在可以讨论库仑势和核（或其他短程）势的联合散射。在数值计算中，我们设匹配半径 r_α ，在匹配半径之内，粒子受到库仑势与核势的联合作用；而在匹配半径之外，核势衰减到零，也就是在渐近区域，则薛定谔方程简化为前面讨论的库仑情形。而式（3.1.43）给出了一般形式波函数在库仑波函数下的展开。将式中的 F_l 使用 H_l^\pm 代换，能够得到，

$$\chi_d^+(\vec{k}_d, \vec{r}_d) = \frac{4\pi}{k_\alpha r_\alpha} \sum_{\ell, m} i^\ell [H_\ell^-(k_d r_d) - e^{2i\sigma_l} H_\ell^+(k_d r_d)] Y_\ell^m(\hat{r}_d) Y_\ell^{m*}(\hat{k}_d) \quad (3.1.46)$$

其中 $e^{2i\sigma_l}$ 我们称之为 S 矩阵，记作 S_l 。在匹配半径处，利用波函数的连续性，我们可以求得 S 矩阵。在库仑散射等弹性散射中，粒子数守恒， S_l 的模为一。而当 S_l 的模小于一时，这意味着在散射过程中发生了吸收现象，粒子不再守恒了。例如我们计算从 0 到 30 分波的 S 矩阵模的变化，如图 3.3 所示，

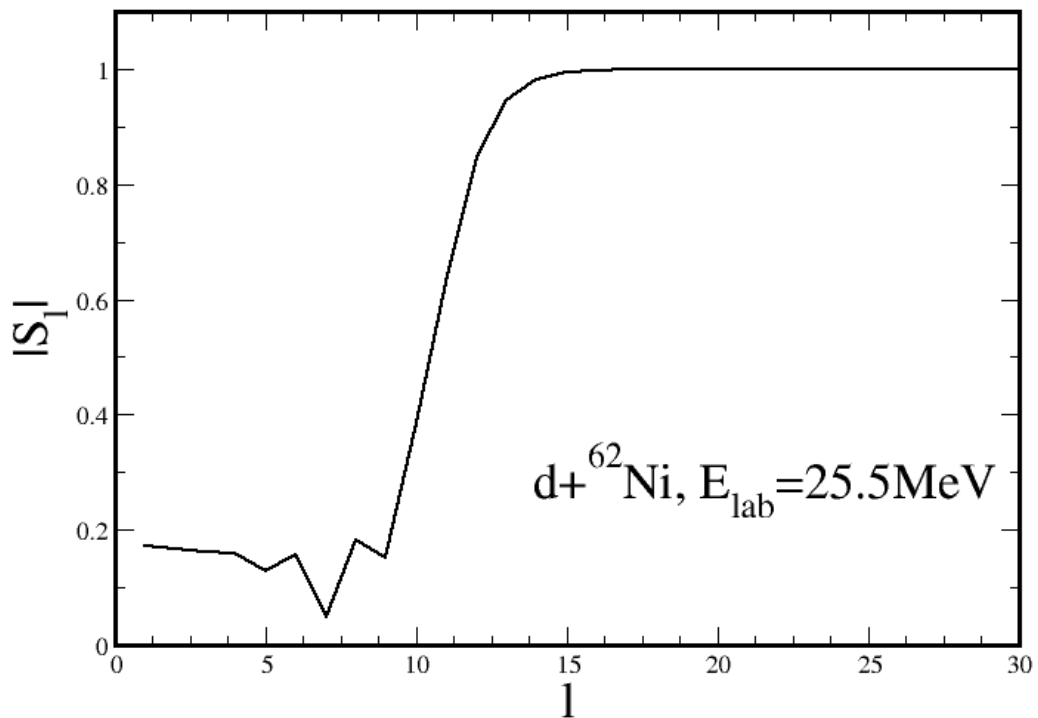


图 3.3 $l = 0 \sim 30$, S 矩阵模的变化

可以发现在分波数比较低的时候，吸收效应比较强烈；而当 $l > 15$ 时， $|S_l| \approx 1$ ，即基本上不发生吸收。这是因为存在离心势垒的作用。若将薛定谔方程中 $\frac{l(l+1)}{r^2}$ 这项合并到相互作用势中，当分波数 l 逐渐增大时，势函数逐渐升高，直到达到临界值时，入射粒子无法穿透势垒与靶核进行反应。而这时吸收就降为零。

综上所述，最后使用 Enhance Numerov 法求得，当 $l=0$ 、 $E_{\text{lab}}=25.5\text{MeV}$ 时，在匹配半径附近通过波函数连续性条件，得到 S 矩阵。设匹配半径 $r_a = 50\text{fm}$ ， $d+^{62}\text{Ni}$ 的 s 波的径向波函数，如图 3.4 所示。

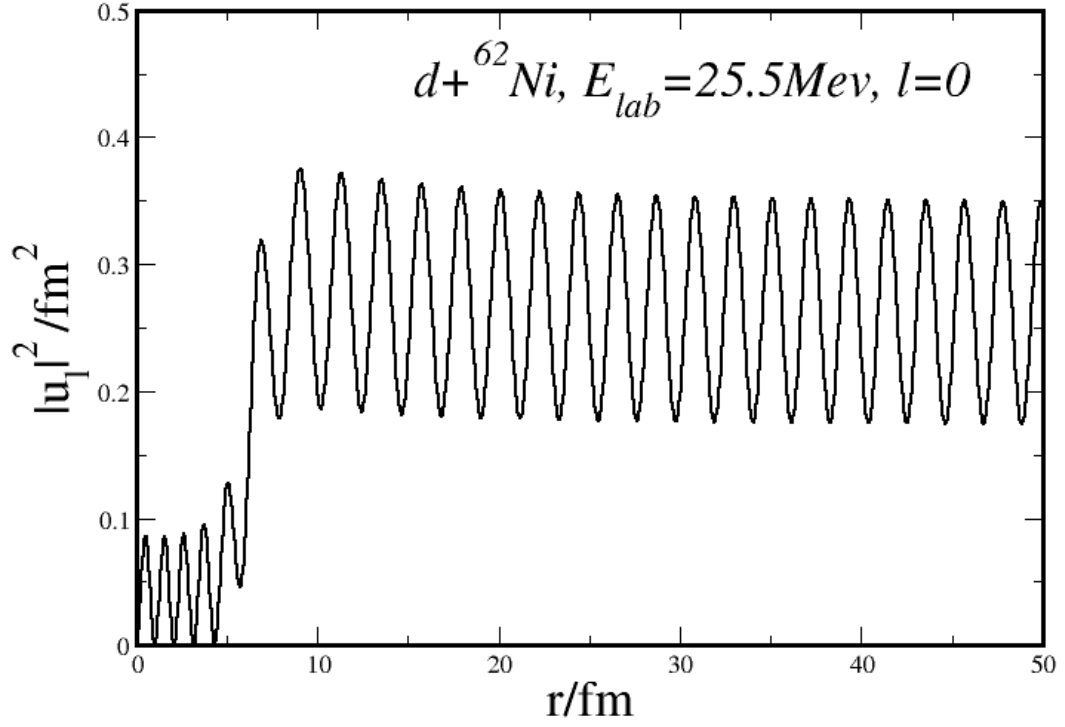


图 3.4 $l=0$ 、 $E_{lab}=25.5\text{MeV}$ 时， $d+^{62}\text{Ni}$ 的 s 波的径向波函数

3.2 去弹性散射在有限范围内的分波展开

在 2.5 节的式 (2.5.13) 中定义的源项

$$\rho(\vec{k}_b, \vec{r}_x) = \langle \vec{r}_x \chi_b^- | V_{bx} | \Psi \rangle \quad (3.2.1)$$

Ψ 依照后表象 DWBA 近似展开，可以将这个有源项展开为[38]

$$\rho_{l_x m_x; m_{bx}}(\vec{r}_x, \vec{k}_a, \vec{k}_b) \equiv \left\langle r_x Y_{l_x}^{m_x}(\hat{r}_x) \chi_b^{(-)}(\vec{r}_b, \vec{k}_b) | V_{\text{post}} | \chi_a^{(+)}(\vec{r}_a, \vec{k}_a) \varphi_a(r_{bx}) \right\rangle \quad (3.2.2)$$

其中 $V_{\text{post}} = V_{bx} + U_{bA} - U_{bB}$ 。显然不可能在无穷的范围内进行积分计算有源项。因此选择有限范围近似 (Finite Range Approximation)，在有限假设无穷远处对有源项的贡献可以忽略不计。由于三个点确定一个平面，所以描述三个粒子运动的所有相关坐标都位于同一平面上，而在一个平面内，可以用两个独立的向量来表示任何坐标。这里选取雅各比坐标表示 (具体见图 2.1)。比如选取 \vec{r}_b 与 \vec{r}_x 构造

$$\begin{aligned} \vec{r}_{bx} &= q\vec{r}_x - \vec{r}_b \\ \vec{r}_a &= (1-pq)\vec{r}_x + p\vec{r}_b \end{aligned} \quad (3.2.3)$$

其中 $p = \frac{m_b}{m_b + m_B}$ ， $q = \frac{m_a}{m_b + m_A}$ 。而对于扭曲波方程的解都有着类似于式 (3.1.38) 解，将

其带入到式 (3.2.2) 中能够得到有源项的分波展开

$$\begin{aligned} \rho_{l_x m_x; m_{bx}}(r_x, \vec{k}_a, \vec{k}_b) &= \frac{16\pi^2}{k_a k_b} r_x \sum_{l_a m_a} \sum_{l_b m_b} i^{l_a+l_b} (-1)^{l_b} Y_{l_b}^{m_b*}(\hat{k}_b) Y_{l_a}^{m_a*}(\hat{k}_a) \int d\hat{r}_x Y_{l_x}^{m_x*}(\hat{r}_x) \int d\vec{r}_b V_{\text{post}} \\ &\times \frac{R_{l_b}(r_b)}{r_b} Y_{l_b}^{m_b}(\hat{r}_b) \frac{R_{l_a}(r_a)}{r_a} Y_{l_a}^{m_a}(\hat{r}_a) \frac{R_{l_{bx}}(r_{bx})}{r_{bx}} Y_{l_{bx}}^{m_{bx}}(\hat{r}_{bx}) \end{aligned} \quad (3.2.4)$$

为方便计算, 希望 $Y_{l_{bx}}^{m_{bx}}(\hat{r}_{bx})$ 与 $Y_{l_a}^{m_a}(\hat{r}_a)$ 能够用 $Y_{l_b}^{m_b}(\hat{r}_b)$ 与 $Y_{l_x}^{m_x}(\hat{r}_x)$ 表示。使用 Moshinsky 固体谐波展开 (Moshinsky Solid-harmonic Expansion) [39],

$$\begin{aligned} Y_{l_{bx}}^{m_{bx}}(\hat{r}_{bx}) &= \sqrt{4\pi} \sum_{n=0}^{l_{bx}} \sum_{\lambda=-n}^n c(l_{bx}, n) \frac{(qr_x)^{l_{bx}-n} (-r_b)^n}{r_{bx}^{l_{bx}}} Y_{l_{bx}-n}^{m_{bx}-\lambda}(\hat{r}_x) Y_n^\lambda(\hat{r}_b) \\ &\times \langle l_{bx}-n, n, m_{bx}-\lambda, \lambda \mid l_{bx}, m_{bx} \rangle, \\ Y_{l_a}^{m_a}(\hat{r}_a) &= \sqrt{4\pi} \sum_{u=0}^{l_a} \sum_{v=-u}^u c(l_a, u) \frac{(pr_b)^{l_a-u} (1-pq)^u (r_x)^u}{r_a^{l_a}} Y_{l_a-u}^{m_a-v}(\hat{r}_b) Y_u^v(\hat{r}_x) \\ &\times \langle l_a-u, u, m_a-v, v \mid l_a, m_a \rangle, \end{aligned} \quad (3.2.5)$$

其中

$$c(x, y) = \left\{ \frac{(2x+1)!}{(2y+1)! [2(x-y)+1]!} \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (3.2.6)$$

由于相互作用势 V_{post} 是一个标量, 则通过勒让德展开, 得到

$$V_{\text{post}} \frac{R_{l_a}(r_a)}{(r_a)^{l_a+1}} \frac{R_{l_{bx}}(r_{bx})}{(r_{bx})^{l_{bx}+1}} = \sum_{T=0}^{T_{\text{max}}} (2T+1) \mathbf{q}_{l_a, l_{bx}}^T(r_b, r_x) P_T(z) \quad (3.2.7)$$

利用勒让德多项式的正交性, 可以获得 $\mathbf{q}_{l_a, l_{bx}}^T(r_b, r_x)$ 的表达式为:

$$V_{\text{post}} \frac{R_{l_a}(r_a)}{(r_a)^{l_a+1}} \frac{R_{l_{bx}}(r_{bx})}{(r_{bx})^{l_{bx}+1}} = \sum_{T=0}^{T_{\text{max}}} (2T+1) \mathbf{q}_{l_a, l_{bx}}^T(r_b, r_x) P_T(z) \quad (3.2.8)$$

综上所述, 结合参考文献[4], 得到有源项 $\rho_{l_x m_x; m_{bx}}$ 的分波展开:

$$\rho_{l_x m_x; m_{bx}}(r_x, \vec{k}_a, \vec{k}_b) = \frac{16\pi^2}{k_a k_b} \sum_{l_a l_b} \sum_l \mathfrak{Y}_{l_a l_b}^{l_x m_x m_{bx}}(\hat{k}_a, \hat{k}_b) \rho_{ll_x}^{l_a l_b}(r_x) \quad (3.2.9)$$

其中

$$\mathfrak{Y}_{l_a l_b}^{l_x m_x m_{bx}}(\hat{k}_a, \hat{k}_b) = \sum_{m_a m_b} Y_{l_a}^{m_a*}(\hat{k}_a) Y_{l_b}^{m_b*}(\hat{k}_b) \langle l_a l_{bx} m_a m_{bx} \mid l m_l \rangle \langle l l_b m_l m_b \mid l_x m_x \rangle \quad (3.2.10)$$

$$\begin{aligned} \rho_{ll_x}^{l_a l_b}(r_x) &= \sum_{nu} \sum_{\Lambda_a \Lambda_b} \sum_T i^{l_a+l_b} (-1)^{l_b+l+n+\Lambda_b-\Lambda_a} p^{l_a-u} (qr_x)^{l_{bx}-n} (r_x)^u (1-pq)^u \widehat{l_a} \widehat{-u} \widehat{l_{bx}} \widehat{-n} \widehat{n} \widehat{u} \\ &\times \frac{\widehat{l_{bx}} \widehat{\Lambda_a} \widehat{\Lambda_b} \widehat{l_a} \widehat{l_b} \widehat{T}}{\widehat{l_x} c(l_{bx}, n) c(l_a, u) \langle u, l_{bx}-n, 00 \mid \Lambda_b 0 \rangle \langle l_a-u, n, 0, 0 \mid \Lambda_a, 0 \rangle} \\ &\times \langle \Lambda_b, T, 0, 0 \mid l_x, 0 \rangle \langle \Lambda_a, l_b, 0, 0 \mid T, 0 \rangle (2l+1) \\ &\times \begin{Bmatrix} l_{bx} & l & l_a \\ n & \Lambda_a & l_a-u \\ l_{bx}-n & \Lambda_b & u \end{Bmatrix} W(l_x, \Lambda_b, l_b, \Lambda_a; T, l) \\ &\times \int dr_b R_{l_b}(r_b) (r_b)^{l_a-u+n+1} \mathbf{q}_{l_a, l_{bx}}^T(r_b, r_x). \end{aligned} \quad (3.2.11)$$

由于已经得到有源项的形式, 将其带入式 (2.5.13), 而 $(x+A)$ 波函数可以展开为

$$\psi_{l_x m_x; m_{bx}}^0(r_x, \vec{k}_a, \vec{k}_b) = \frac{16\pi^2}{k_a k_b} \sum_{l_a l_b} \sum_t \mathfrak{R}_{l_x}^{l_a l_b}(r_x) \mathfrak{Y}_{l_a l_b}^{l_x m_x m_{bx}}(\hat{k}_a, \hat{k}_b) \quad (3.2.12)$$

其中 $\mathfrak{R}_{l_x}^{l_a l_b}(r_x)$ 为解的径向部分，其满足

$$\left[\frac{\hbar^2}{2\mu_x} \left[\frac{d^2}{dr_x^2} - \frac{l_x(l_x + 1)}{r_x^2} \right] - U_x + E_x \right] \mathfrak{R}_{l_x}^{l_a l_b}(r_x) = \rho_{l_x}^{l_a l_b}(r_x) \quad (3.2.13)$$

在 2.6 节中完成了对截面去弹性破裂反应部分的分离，即式 (2.6.12)。由此，在文献[38]中给出单举反应中去弹性破裂部分 (NEB) 的双微分截面

$$\left[\frac{d^2\sigma}{d\Omega_b dE_b} \right]_{\text{post}}^{\text{NEB}} = \frac{64\pi\mu_a\mu_b}{\hbar^4 k_a^3 k_b} \frac{1}{2l_{bx} + 1} \sum_{l_x m_x} \sum_{m_{bx}} \mathfrak{S}_{l_x m_x}^{m_{bx}}(\vec{k}_a, \vec{k}_b) \quad (3.2.14)$$

其中

$$\mathfrak{S}_{l_x m_x}^{m_{bx}}(\vec{k}_a, \vec{k}_b) = -\int dr_x W_x(r_x) \left| \sum_{l_a l_b l} \mathfrak{R}_{l_x}^{l_a l_b}(r_x) \mathfrak{Y}_{l_a l_b}^{l_x m_x m_{bx}}(\hat{k}_a, \hat{k}_b) \right|^2 \quad (3.2.15)$$

但值得注意的是，得到的截面分布是在质心系下的。与实验数据做验证时，需要将其转换到实验系下。

3.3 Ni(d,pX)反应

在本章节中，验证 IAV 模型在描述 (d, pX) 反应的有效性，我们选取 $^{62}\text{Ni}(d, pX)$ 反应进行基准测试，检测其与实验结果的一致性。正如在第 2.6 章中我们对单举破裂反应的弹性破裂 (EBU) 截面与去弹性破裂 (NEB) 截面进行分离。这里只计算去弹破裂部分 (NEB)，暂时忽略弹性破裂截面。利用式 (3.2.14) 得到单举破裂反应的弹性破裂 (EBU) 的截面。而在实验数据方面，这里参考 Pampus 与 Bisplinghoff 的实验数据[33]，在 88 英寸加速器上用氘核以 $E_{\text{lab}}=25.5\text{MeV}$ 的能量轰击 ^{27}Al 、 ^{62}Ni 、 ^{93}Nb 与 ^{191}Ta 等材质的靶板，在角度为 20° 、 30° 、 40° 、 60° 、 80° 、 120° 和 160° 处布置 ($E - \Delta E$) 硅探测器，对出射质子 p 截面的能谱与角分布进行测量。由于目标厚度和目标角度、束流电荷收集和探测器立体角的不确定性等因素，综合推导的绝对截面的总系统误差约为 15% (sd)。在大多数情况下，统计误差可以忽略不计[33]。

在第 3.2 节中完成了对在有限范围近似下去弹性破裂反应质子的双微分截面表达式的推导。对于靶核 ^{62}Ni ，计算了角度从 0 度到 180 度 (间隔为 1 度)，能量从 1MeV 到 30MeV (间隔为 1MeV) 的双微分截面。对于其中涉及的一些波函数我们在 3.1 节中完成了计算。同时使用 KD02 模型描述在不同的能量 E_p 、 E_n 下，质子-靶核与中子-靶核的相互作用。最后我们得到的质子的能量微分截面如图 3.5 所示。

$^{62}\text{Ni}(d,pX)@25.5\text{MeV}$

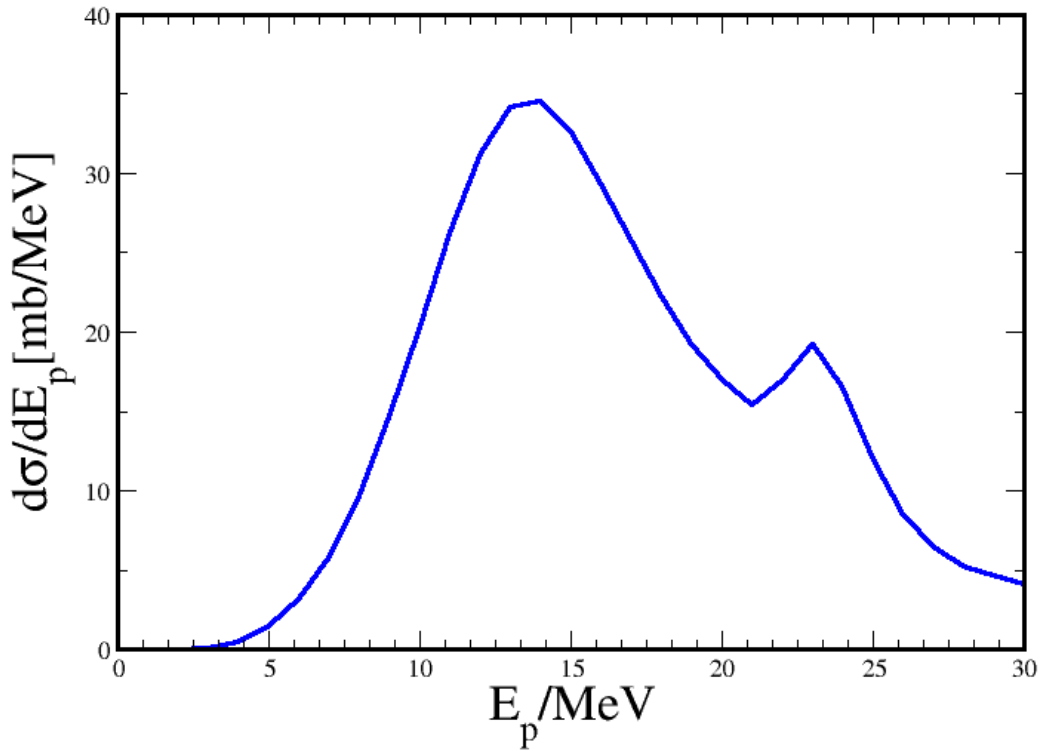


图 3.5: $^{62}\text{Ni}(d, pX)$ 在 $E_{\text{lab}}=25.5\text{MeV}$ 能量下，出射质子的能量微分截面去弹性破裂（NEB）贡献部分

除了高能离散峰，截面的能谱具有连续、范围广的特点。在截面的低能范畴，复合核反应机制占主导地位。而随着能量的上升平衡前发射机制在截面中的占比逐渐增加[33]。从我们计算得到能谱中，不难发现质子能量微分截面大致上是一个钟形曲线，其峰值约为氘核入射能量的一半，在参考文献[35]指出，这些低能质子主要是来自复合核反应，其次是蒸发和预平衡过程。但在 23MeV 附近还存在一个峰，这对应的其实是高能离散峰，这是由于虽然单粒子的能级是分立的，但对于重核来说能级密度比较高，所以在进行理论计算的时候，选取布莱特-维格纳分布将这些分离的能级变成连续的。在文献[40]中也得到了类似的结果。

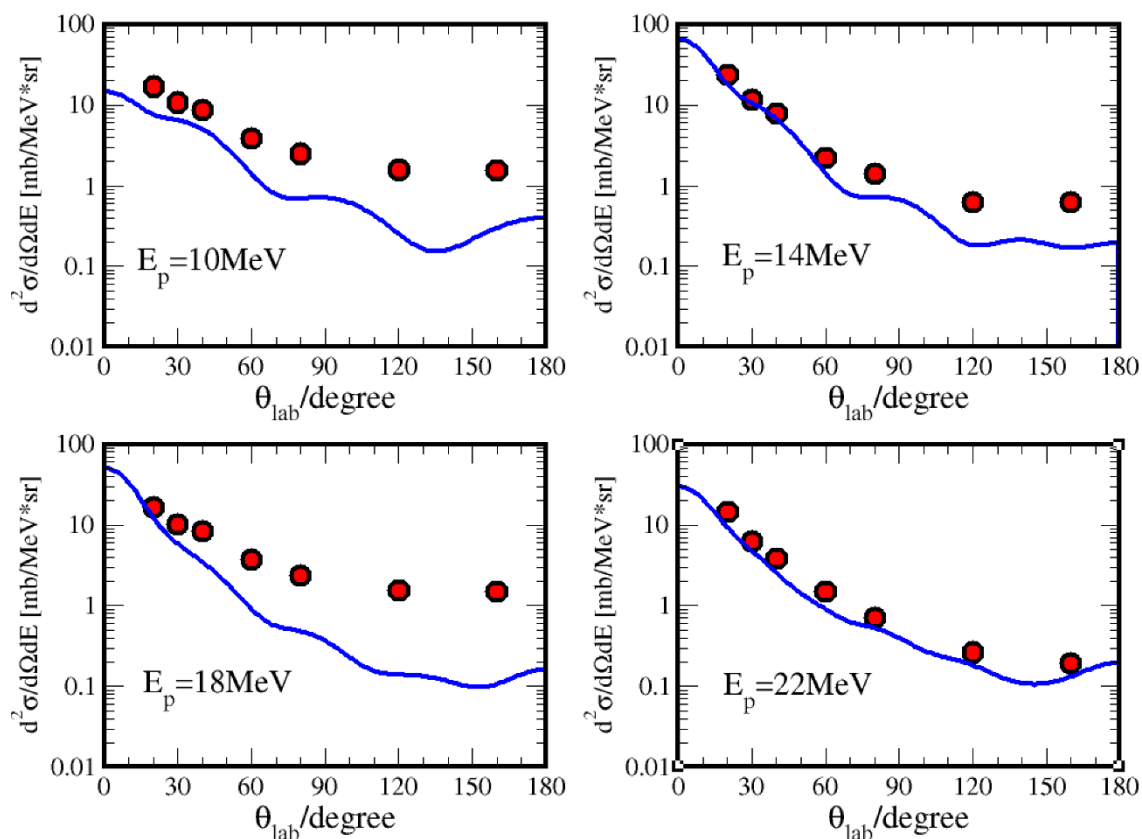


图 3.6: $^{62}\text{Ni}(d,pX)$ 的质子出射能量 $E_p=10$ 、 14 、 18 与 22MeV 时的双截面随角度变化的图像，其中入射氘核能量 $E_{\text{lab}}=25.5\text{MeV}$ ，其中蓝线为去弹性破裂（NEB）的截面，红点为 Pampus 实验获得的总反应截面[33]。

由于计算的只是去弹性破裂（NEB）的截面，并没有考虑弹性破裂（EBU）截面的贡献，所以在图 3.6 中，实验获得的总反应截面均高于我们计算的结果。总体上看，在前角区 EBU 能够较好的再现实验的数据的形状与大小，而在后角区只能大致反应双微分截面变化的趋势。需要注意的是，在最大角度下，横截面非常小，其他反应道（如聚变+蒸发过程）也可能起作用。可以判断，除最小角度外，单举破裂反应截面主要由 NEB 贡献决定的。这与参考文献[16,33]得到的结论一致。