

## ***Capitolul al XVII-lea***

### ***Modele de dinamică moleculară cuantică relativistă***

#### ***XVII.1. Considerații generale***

Printre modelele microscopice propuse pentru descrierea dinamicii ciocnirilor nucleare relativiste se numără și modelele de dinamică moleculară. Ca și în celelalte cazuri gradele fundamentale de libertate sunt nucleonii, ceilalți hadroni și constituenții lor: cuarcii și gluonii. Informația dinamică este conținută în spațiul fazelor pentru  $n$  corpuri. De aici vine partea de dinamică moleculară din denumirea unor astfel de modele. Așa cum s-a arătat în capitolele anterioare integrarea pe coordonatele a  $(N-1)$  particule permite obținerea unor ecuații cinetice pentru funcții de distribuție uniparticulă (modele bazate pe ecuația Vlasov și ecuația Vlasov-Uehling-Uhlenbeck, modele de cascadă intranucleară ș.a.). Dacă se integrează pe spațiul impulsurilor presupunând realizarea unui echilibru termic local se pot obține ecuațiile de mișcare hidrodinamice, ecuații macroscopice, în esență. La aceste căi de descriere a dinamicii ciocnirilor nucleare relativiste se pot adăuga cele care presupun echilibru termic global într-un volum limitat din spațiu, cu număr limitat de grade de libertate, anume modelele termice sau termodinamice. Se simțea nevoia dezvoltării unor modele care să ia în considerare cât mai multe aspecte și să fie aplicabile pe domenii de energii cât mai largi.

Modelele de dinamică moleculară cuantică combină propagarea clasică a hadronilor (dinamică moleculară) cu unele efecte cuantice. Printre efectele cuantice care se pot introduce în astfel de ciocniri se numără împrăștierea stocastică, dezintegrarea

particulelor, blocarea Pauli ș.a. Modelele de dinamică moleculară cuantică relativistă sunt extinderi ale modelelor de dinamică moleculară cuantică nerelativiste folosite pentru studiul ciocnirilor nucleare la energii pe nucleon cuprinse între 50 și 2000 A MeV [54, 169]. Între cele două variante de model există o serie de diferențe [17].

La alegerea variantei de model de dinamică moleculară cuantică trebuie avut în vedere faptul că în modelele nerelativiste rezultatele devin din ce în ce mai dependente de sistemul de referință din care se face observarea ciocnirii pe măsură ce energia fasciculului incident crește. De asemenea, pentru energii relativiste și ultrarelativiste modelele de dinamică moleculară cuantică trebuie să fie în mod explicit invariante Lorentz. De aceea, propagarea printr-un hamiltonian nerelativist în modelele de dinamică moleculară cuantică nerelativistă este înlocuită prin ecuații de mișcare invariante Lorentz în modelele de dinamică moleculară cuantică relativistă. Acest lucru este posibil deoarece hamiltonianul este o funcție scalară Lorentz în spațiul fazelor. La energii relativiste trebuie luate în considerare și numeroasele canale de reacție care pot fi deschise. În plus, trebuie avut în vedere faptul că la energii foarte mari hadronii nu mai sunt grade de libertate corespunzătoare.

Trebuie menționat faptul că în prezent unii autori au tendința de a considera că majoritatea modelelor microscopice propuse implică tratare prin prisma dinamicii moleculare cuantice, în formă nerelativistă sau relativistă [170]. De aceea, în multe cazuri tratarea modelelor de dinamică moleculară cuantică se face cu înglobarea multora dintre modelele prezentate anterior.

O altă tendință majoră în cadrul modelelor de dinamică moleculară cuantică, cu deosebire a celor pentru energii relativiste sau ultrarelativiste, este de a avea asociate coduri de calcul complexe care să permită obținerea unei informații dinamice cât mai bogate. Printre cele mai importante coduri se numără cele numite RQMD (**R**elativistic **Q**uantum **M**olecular **D**ynamics) și UrQMD (**U**ltrarelativistic **Q**uantum **M**olecular **D**ynamics) [171, 172].

## XVII.2. Baze fizice ale modelelor de dinamică moleculară cuantică relativistă

Modelele de dinamică moleculară cuantică relativistă [Relativistic Quantum Molecular Dynamics (RQMD)] sunt considerate modele microscopice de transport care descriu fenomenologia interacțiilor hadronilor la energii joase și intermediare ( $\sqrt{s} < 5$  GeV) în termenii interacțiilor dintre hadronii cunoscuți și rezonanțele lor. Pentru energii mai mari,  $\sqrt{s} > 5$  GeV, sunt permise și alte tipuri de procese. În acest domeniu de energii producerea multiplă de particule este dominată de excitarea “corzilor” (“string”-urilor) și fragmentarea lor ulterioară în hadroni. Se introduc astfel modelele de dinamică moleculară cuantică ultrarelativistă [Ultrarelativistic Quantum Molecular Dynamics (UrQMD)]. Așa cum s-a mai spus, la energii joase și intermediare ciocnirile hadron-hadron și nucleu-nucleu sunt descrise în termenii interacțiilor dintre hadronii constituienți și stările lor excitate, rezonanțele (nivele particulă și nivele cuasiparticulă), dar la energii înalte trebuie să fie luate în considerare și gradele de libertate datorate constituenților hadronilor, anume cuarcii și gluonii. Folosind termenii teoriei “corzilor” (“string”-urilor), se introduc excitațiile “corzilor” de culoare și se ia în considerare fragmentarea “corzilor” excitate în hadroni. Se consideră că cele mai frecvente ciocniri hadron-hadron sunt următoarele:  $N\pi$ ,  $\pi\pi$ ,  $\Delta\pi$ ,  $NN$ ,  $\pi\rho$ ,  $N\Delta$ ,  $\pi K$ ,  $\pi\eta$ ,  $\pi\omega$ ,  $\ddot{K}\pi$ . Cele 10 interacții descriu numai 50 % din toate ciocnirile hadron-hadron care se pot produce. De aceea, în codurile de calcul asociate modelelor de dinamică moleculară cuantică ultrarelativistă sunt incluse încă 120 de ciocniri hadron-hadron. În acest fel se pot descrie circa 90 % dintre interacțiile care au loc în ciocniri nucleare ultrarelativiste, în acord cu modelele de dinamică moleculară cuantică ultrarelativistă. Pentru a lua în considerare 99 % dintre interacțiile hadron-hadron modelate și acceptate de către codurile UrQMD sunt necesare câteva mii de combinații de interacții hadron-hadron. Deoarece pentru efectuarea calculului în modelele de dinamică moleculară cuantică și pentru utilizarea eficientă a codurilor asociate este necesară cunoașterea secțiunilor eficace pentru toate aceste procese de interacție apar limitări legate de faptul că numai o mică parte a acestor secțiuni eficace este determinată experimental. De aceea, în multe situații de interes se folosesc extrapolări, prin intermediul principiului balanței detaliate, ale unor procese de

interacție cunoscute. Toate acestea sunt necesare pentru înțelegerea dinamicii extrem de complexe a dinamicii ciocnirilor nucleare relativiste.

Modelele de dinamică moleculară cuantică pentru energii relativiste și ultrarelativiste – ca modelele microscopice de transport – folosesc propagarea covariantă a tuturor hadronilor pe traiectorii clasice în combinație cu împrăștiere binare stocastice, formarea “corzilor” de culoare și dezintegrarea rezonanțelor. Codul de calcul asociat este o soluție Monte Carlo la un set larg de de ecuații integro-diferențiale parțial cuplate pentru evoluțiile în timp a diferitelor densități în spațiul fazelor,  $f_i(x,p)$ , ale particulelor prezente la ciocniri,  $i = N, \Delta, \Lambda, \dots$

Pentru cazul nerelativist se presupune o formă Boltzmann pentru setul de ecuații integro-diferențiale:

$$\frac{df_i(x,p)}{dt} \equiv \frac{\partial p}{\partial t} \frac{\partial f_i(x,p)}{\partial p} + \frac{\partial x}{\partial t} \frac{\partial f_i(x,p)}{\partial x} + \frac{\partial f_i(x,p)}{\partial t} = St f_i(x,p) \quad , \quad (\text{III.155})$$

unde  $x$  și  $p$  sunt poziția și impulsul particulei, iar  $St f_i(x,p)$  reprezintă termenul de ciocnire sau termenul sursă al diferitelor tipuri de particule. Ele sunt legate de celalalte tipuri de particule, definite prin funcții de densitate  $f_k$ .

Pentru ciocniri barion-barion (BB) la energii joase se consideră schimburile de sarcină electrică, sarcină barionică, stranietate și cuadri-impuls în canalul  $t$ . Interacțiile mezon-barion (MB) și mezon-mezon (MM) sunt tratate cu luarea în cocsiderare a dezintegrării rezonanțelor (canalul de reacție  $s$ ). Pentru energii disponibile în sistemul centrului de masă mai mari de 5 GeV ( $\sqrt{s} > 5$  GeV) se ia în considerare și canalul de reacție  $t$  pentru astfel de ciocniri.

În cazul ciocnirilor nucleu-nucleu la energii înalte interacțiile “moi”, binare și ternare, dintre nucleoni pot fi descrise prin partea reală a matricii  $G$ , parte care ia în considerare mediul nuclear în care se află nucleonii. Această parte a matricii se poate aproxima printr-un potențial Skyrme dependent de densitate, nerelativist, de următoarea formă [Skyrme curs p3]:

$$V^{Sk} = \frac{1}{2!} t_1 \sum_{i \neq j} \delta(\ddot{x}_i - \ddot{x}_j) + \frac{1}{3!} t_2 \sum_{i \neq j \neq k} \delta(\ddot{x}_i - \ddot{x}_j) \delta(\ddot{x}_j - \ddot{x}_k) \quad , \quad (\text{III.156})$$

unde cu  $\ddot{x}_\alpha$  s-au notat coordonatele spațiale în spațiul fazelor cuantic. Primul termen simulează un potențial atractiv pentru interacția nucleon-nucleon, iar cel de al doilea ia în

considerare saturarea. În unele modele se introduc potențiale de tip Coulomb și potențiale Yukawa. Toate aceste potențiale permit calcularea ecuației de stare a sistemului de mai multe corpuri aflate în interacție. Calculul se poate face atât timp cât sistemul este dominat de nucleoni (nucleonii sunt “corpurile” cele mai numeroase din sistem). Potențiale de interacție menționate sunt folosite în cadrul modelelor de dinamică moleculară cuantică pentru barioni sau nucleoni cu impulsuri relative  $\Delta p < 2 \text{ GeV}/c$ .

În aceste aproximații se poate lucra pe un domeniu larg de energii, de la cele specifice SIS-18 (GSI Darmstadt, Germania), unde  $\sqrt{s} \approx 2 \text{ A GeV}$ , la cele specifice Collider-ului de Ioni Grei Relativiști (RHIC) de la Laboratorul Național Brookhaven (BNL, SUA), unde s-a atins o energie  $\sqrt{s} = 200 \text{ A GeV}$ , în vara anului 2001.

La energii foarte mari se produc particule de foarte multe tipuri, cu multiplicități uriașe (mii de particule într-un singur eveniment de ciocnire). De aceea, modelul trebuie să permită realizarea unui număr extrem de mare de reîmprăștieri ulterioare. În consecință, termenul de ciocnire include mai mult de 50 de specii de barioni și 45 de mezoni. De asemenea, au fost considerate și antiparticulele coresounzătoare. Pentru aceasta s-a folosit conjugarea de sarcină astfel încât să se asigure simetria barion-antibarion. Nu sunt considerate explicit rezonanțele mezonice foarte grele (cele cu  $m > 2 \text{ GeV}/c^2$ ).

Toate particulele care sunt produse în ciocniri hadron-hadron pot interacționa ulterior unele cu altele. În codurile de calcul asociate sunt implementate diferitele canale de dezintegrare ale nucleonilor, rezonanțele nucleonice (în principal, rezonanța  $\Delta$ ) și modurile lor de dezintegrare, hiperonii, precum și alte rezonanțe cu mase de repaus până la  $2.25 \text{ GeV}/c^2$ . Sunt incluși, de asemenea, mezonii și modurile lor de dezintegrare. La energii mai mari se ține seama de proprietatea de universalitate a hadronilor. Se introduce un model de “corzi” (“string”-uri) pentru studierea dezintegrării stărilor intermediare .

La folosirea codurilor de simulare asociate modelelor de dinamică moleculară cuantică trebuie luat în considerare faptul că pentru modelele microscopice de transport trebuie luate ca date de intrare fundamentale tipurile de particule considerate și secțiunile eficace pentru interacții hadron-hadron, dependente de energia de ciocnire. Secțiunile eficace totale sunt interpretate geoimetric. O ciocnire între doi hadroni se realizează dacă distanța minimă dintre cele două particule,  $d$ , este în următoarea relație de legătură cu secțiunea

eficace totală pentru interacția considerată,  $\sigma_{tot}$ , anume:  $d < \sqrt{\frac{\sigma_{tot}}{\pi}}$ . În codurile de simulare UrQMD secțiunea eficace totală,  $\sigma_{tot}$ , depinde de izospiniile particulelor care se ciocnesc, de aromele lor și de energia disponibilă în sistemul centrului de masă. Secțiunile eficace parțiale pot fi utilizate pentru a calcula ponderile relative pentru diferite canale de reacție care se pot deschide în ciocnirea considerată, la o anumită energie. În aceste calcule trebuie avut în vedere că numai o mică parte din toate secțiunile eficace hadronice a fost măsurată în experimente.

Hadronii sunt “obiecte” dinamice. Ei provin din spațiul configurațiilor Fock cu dimensiuni spațiale foarte diferite. La energii foarte mari configurațiile de cuarci și gluoni ale hadronilor incidenti pot fi considerate fixate (“înghețate”) datorită dilatării timpului (dilatarea Lorentz a timpului). De asemenea, la aceste energii, datorită lungimii de coerență mari (peste două unități) se poate aplica optica de culoare geometrică. “Obiectele” mici produse în procese de interacție tare, cu transferuri mari de impuls,  $Q^2$ , au, de aceea, secțiuni eficace de interacție reduse. În procese de interacție tare cu valori moderate ale transferului de impuls  $Q^2$  astfel de “obiecte” compacte care reprezintă o superpoziție coerentă de stări proprii al hamiltonian-ului specific Cromodinamicii cuantice ar putea să câștige în dimensiuni. Atunci când configurația de cuarci și gluoni este mare este posibil să se producă o creștere a secțiunii eficace de interacție a hadronilor cu mediul nuclear.

În funcție de varianta de model sau de cod de simulare asociat unui model de dinamică moleculară cuantică pot fi introduse și alte ipoteze. Datorită codurilor de simulare asociate modelele de acest tip se apropie cel mai mult de ceea ce se invocă la începutul acestei părți a cursului, anume o teorie de mai multe corpuri, cuantică, relativistă, cu luarea în considerare a gradelor de libertate subnucleonice. De aceea, în prezent, acest cod de simulare este unul dintre cele mai folosite pentru studierea dinamicii ciocnirilor nucleare relativiste și ultrarelativiste.

### XVII.3. Predicții ale modelelor de dinamică moleculară cuantică și comparații cu rezultatele experimentale

Modelele de dinamică moleculară pot da informații dintre cele mai diferite asupra dinamicii ciocnirilor nucleare relativiste. Cantitatea și calitatea acestor informații depinde de ipotezele inițiale folosite, de domeniul de energie considerat, geometria ciocnirii – incluzând aici și parametrul de ciocnire și gradul de simetrie dintre numerele de masă ale nucleelor care se ciocnesc – de calitatea codului de simulare asociat.

Printre problemele de interes cărora modelele de dinamică moleculară au încercat să dea răspunsuri se numără: *stoparea nucleară, termalizarea, densitatea nucleară și evoluțiile lor temporale*, precum și *analiza semnalelor experimentale posibile ale formării plasmei de cuarci și gluoni*.

În etapa actuală a dezvoltării Fizicii nucleare relativiste cea mai interesantă direcție de utilizare a modelelor de dinamică nucleară este cea a analizei semnalelor experimentale ale formării plasmei de cuarci și gluoni [173-178]. Despre unele din ele se va discuta la cursul de *Stări anormale și tranziții de fază în materia nucleară* (anul V INPE Masterat).