

核裂变过程动态模拟计算的动力学系数*

邢静如 王尚武

(应用物理系)

摘要 本文利用 (c, h, a) 三参数旋转体模型计算了形变核的相对表面能、相对库仑能及相对转动能。这些相对能量与具体核无关,具有普适性,可以用于核裂变动态过程的模拟计算。利用这些结果,计算了一些核的形变位能随三参数变化的情况,给出了裂变位垒高度,与实验结果符合较好。对 ^{235}U 的形变位能曲面作了较详细的分析,得出一些有益的结论。用 Werner-Wheeler 方法计算了形变核的惯性质量和粘滞张量随三参数变化情况,对断点线方程作了深入讨论,为核裂变动态过程的计算机模拟准备了必要的系数。

关键词 核裂变, 模拟, 形变位能, 裂变路径, 裂变位垒, 断点线, 鞍点, 断点

分类号 O571.43 O411.3

核裂变过程是一种非平衡的多体反应过程,属于大振幅的集体运动。如何对这种大振幅的集体运动作详细的动态描述,是核物理学长期研究的一大课题。

经典的裂变理论对复合核运动行为的了解,对裂变过程的定量描述,是朝两个相互独立的方向发展的。一是利用标准的液滴模型,研究复合核的静态性质^[1];二是对核裂变过程作动态描述,这种描述建立在涨落耗散动力学基础上,采用 Kramers 提出的裂变扩散模型^[2],将复合核的集体运动看成是准布朗粒子的运动。这样,就可用布朗粒子运动坐标及其共轭动量所满足的 Fokker-planck 方程或 Langevin 方程来描述核裂变过程^[3]。

过去,在求解这些方程时,并没有考虑方程中的系数与粒子运动坐标之间的变化关系,而是作为常数处理的。目前,人们正把对复合核的静态和动态描述结合起来,采用具有少数几个自由度的表面方程来描述原子核之形状,用流体力学近似导出动力学方程中与粒子运动自由度有关的系数,使得对核裂变过程作严格的动力学计算成为可能。然而,由于计算中的实际困难,迄今还没有人把比较严格的与布朗粒子运动坐标有关的动力学系数用于裂变动力学方程的严格求解。

作者准备在求解裂变动力学方程时,在方程中采用由精确的计算公式得出的与粒子运动自由度有关的系数。由于在求解动力学方程的过程中,每一步都要重新计算方程中的系数,很费机时。因此,可以把动力学方程中系数的计算与求解动力学方程分开来做,即先单独把动力学系数计算出来,制成大型数据表格存入磁盘,以后在求解动力学方程过程中,需要在某一形变状态下的动力学系数时,只需插值就可以。这样既可节省机时,又可保证精度。

* 国家自然科学基金资助项目
1991年3月15日收稿

1 描述核裂变过程的动力学方程

设 $X = \{x_1, x_2, \dots, x_s\}$ 为准布朗粒子运动的 S 个自由度, 则描述核裂变过程的动力学方程是

$$M\ddot{X} = -Z\dot{X} - \nabla U + G\Gamma(t) \quad (1)$$

其中 M —— 惯性张量, 为 $S \times S$ 矩阵; Z —— 粘滞张量, 为 $S \times S$ 矩阵; U —— 核形变位能, 为 S 个自由度的函数; G —— 噪声强度, 描写单粒子运动与集体运动的相互作用程度; $G\Gamma(t)$ —— 随机力。

方程 (1) 中的 M, Z, U, G 统称为动力学系数。

2 动力学系数的计算公式

2.1 原子核形状的描述

1972 年, M. Brack 等人^[4]利用三参数 $\{c, h, a\}$ 旋转体模型来描述核形状, 并将壳修正与液滴模型相结合, 取得了很好的结果。在柱坐标系下, 原子核的表面方程为:

$$P_i^2(z) = (1 - \frac{z^2}{c^2})(Ac^2 + Bz^2 + acz) \quad B \geq 0 \quad (2a)$$

$$P_i^2(z) = (1 - \frac{z^2}{c^2})(Ac^2 + acz)\exp(Bcz^2) \quad B < 0 \quad (2b)$$

其中 $B = 2h + (c-1)/2, A = c^{-3} - B/5$ 。

而 c —— 核长度之半, 以球形核半径 R_0 为单位; h —— 颈部参量, 当 c 不变时, 改变 h 会引起颈部粗细变化; a —— 代表裂变的不对称程度, $a=0$ 是对称裂变。

2.2 惯性张量 M 和粘滞张量 Z

宏观的液滴模型, 通常假定原子核为一种不可压缩的无旋流体, Werner-Wheeler^[4,5]正是在此种假设下得出了惯性张量和粘滞张量的表达式:

$$M_{ij} = \pi\rho_m \int_{-c}^c P_i^2(z) \left(A_i A_j + \frac{1}{8} P_i^2(z) \frac{\partial A_i}{\partial z} \frac{\partial A_j}{\partial z} \right) dz \quad (3)$$

$$Z_{ij} = \pi\eta_0 \int_{-c}^c P_i^2(z) \left(3 \frac{\partial A_i}{\partial z} \frac{\partial A_j}{\partial z} + \frac{1}{8} P_i^2(z) \frac{\partial^2 A_i}{\partial z^2} \frac{\partial A_j}{\partial z^2} \right) dz \quad (4)$$

$$(i, j = c, h, a)$$

其中 $\rho_m = M_0 / (\frac{4}{3}\pi R_0^3)$, 为核的质量密度; M_0 —— 原子核质量; $\eta_0 = \mathcal{L} \times 10^{-23} \text{MeV} \cdot \text{s} \cdot \text{fm}^3$; \mathcal{L} 为可调参数;

$$A_i(z, \{x\}) = \frac{1}{P_i^2(z, \{x\})} \frac{\partial}{\partial x_i} \int_{-c}^c P_i^2(z, \{x\}) dz' \quad (5)$$

$$i = c, h, a; \{x\} = \{c, h, a\}$$

2.3 原子核的形变能 ΔE

与形状有关的势能由表面能 E_s , 库仑能 E_c 以及转动能 E_r 组成。设 E_m, E_{co}, E_{ro} 分别为球形核相应的能量, 则原子核的形变能为

$$\Delta E = (E_s - E_m) + (E_c - E_{co}) + (E_r - E_{ro}) = E_m [(B_s - 1) + 2x(B_c - 1) + y(B_r - 1)] \quad (6)$$

$$\text{核的可裂变参数: } x = \frac{1}{2} E_{co} / E_m = \frac{Z^2/A}{(2a_s/a_c)(1-KI^2)} \quad (7)$$

$$\text{旋转参量}^{[6]}, y = E_{ro} / E_m = \frac{1.9249}{(1-KI^2)} \frac{l(l+1)}{A^{7/3}} \quad (8)$$

$$E_{ro} = a_r (1 - KI^2) A^{2/3}$$

而 $a_s = 17.9439 \text{MeV}, a_c = 0.7053 \text{MeV}, K = 1.7826, I = (N-Z)/A$ 为相对中子剩余, l 为转动角动量子数。

在式(6)中, B_s, B_c, B_r 分别称为核的相对表面能, 相对库仑能和相对转动能。它们的计算公式分别为^[417,1]

$$B_s = E_s/E_0 = \frac{1}{2} \int_{-c}^c \sqrt{P_i^2 \left[1 + \left(\frac{\partial P_i}{\partial x} \right)^2 \right]} dx \quad (9)$$

$$B_c = E_c/E_0 = \frac{3c^5}{8\pi} \int_{-1}^1 dz_1 \left(-\frac{z_1}{2} \frac{dP_1^2}{dz_1} + P_1^2 \right) \phi(P_1, z_1) \quad (10)$$

$$\phi(P_1, z_1) = \int_{-1}^1 dz_2 \left\{ \frac{[P_2^2 - P_1^2 - (z_1 - z_2)^2 + (z_1 - z_2) \frac{dP_2^2}{dz_2}]}{[(P_1 + P_2)^2 + (z_1 - z_2)^2]^{\frac{1}{2}}} K(k) + \sqrt{(P_1 + P_2)^2 + (z_1 - z_2)^2} E(k) \right\}$$

这里, $K(k), E(k)$ 分别为第一、第二类完全椭圆积分

$$K(k) = \int_0^1 \frac{dx}{\sqrt{(1-x^2)(1-k^2x^2)}}, E(k) = \int_0^1 \sqrt{\frac{1-k^2x^2}{1-x^2}} dx$$

$$\text{模数 } k^2 = 4P_1P_2 / [(P_1+P_2)^2 + (z_1-z_2)^2], \quad (11)$$

$$P_i^2 = A + az_i + (B-A) z_i^2 - az_i^3 - Bz_i^4, \quad (i=1, 2)$$

$$B_r = J_0/J_{\perp}$$

$$\text{而 } J_{\perp}/J_0 = \frac{1}{2} J_{11}/J_0 + \frac{1}{2} c^5 \left(A + \frac{3B}{7} \right) - \frac{\alpha^2}{10} c^8, \quad J_{11}/J_0 = c^5 \left(A^2 + B^2/21 + \frac{2AB}{7} + \alpha^2/7 \right)$$

3 计算结果分析

3.1 原子核形变的惯性张量与粘滞张量的计算

由式(3), (4)可知, M_{ij} 与 Z_{ij} 是一对称矩阵, 即 $M_{ij}=M_{ji}, Z_{ij}=Z_{ji}$ 。因此, 矩阵 M 和 Z 中分别

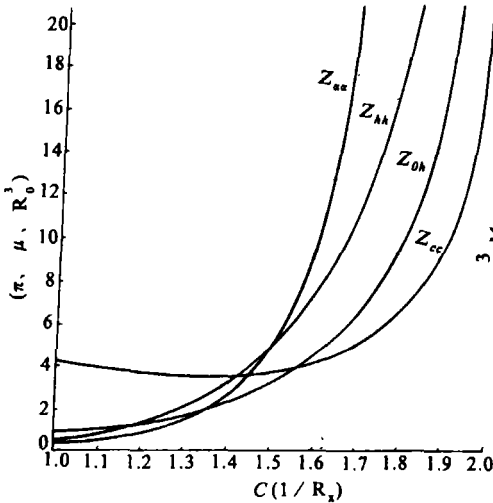


图1 $\alpha=0, h=0$ 时的 M_{ij}

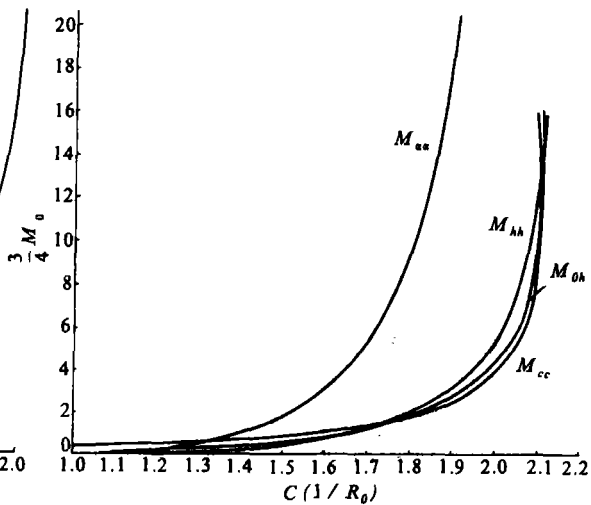


图2 $\alpha=0, h=0$ 时的 Z_{ij}

只有六个元素是独立的。作数值积分时, 采用 Gauss-Legendre 求积公式。计算时可取 $\mathcal{C}=1$ 。计算结果表明, 当 $\alpha=0$ 时, 非对角元中, 只有 M_{oh} 和 Z_{oh} 与主对角元素有相同的量级, 其余非对角元均近似为 0。在 $\alpha=0, h=0$ 时, M_{ij} 和 Z_{ij} 随 c 的变化关系曲线如图 1、2 所示。在几何断点之前, M_{ij}, Z_{ij} 都是光滑的曲线, 一旦越过几何断点 ($c \sim 2.092$) 将发生突变。这是因为断开后原子核不再是一个统一的流体,

统一描述 M_{ij} 、 Z_{ij} 的公式不再适用。从图中还可以看出，非对角元素 M_{ch} 、 Z_{ch} 不容忽视，尤其是在 $c > 1.6$ 以后。

3.2 相对表面能 B_s ，相对库仑能 B_c 和相对转动能 B_r 的计算

B_s 、 B_c 、 B_r 均是形变参量 $\{c, h, a\}$ 的函数，其中 B_r 是 (c, h, a) 的解析函数， B_s 和 B_c 随 (c, h, a) 的变化则需作数值计算。

实际计算时，取 a 的变化范围为 $[0, 0.45]$ ，步长为 0.05；取 c 的变化范围为 $[1, 2.9]$ ，步长为 0.1；取 h 的变化范围为 $[-0.3, 0.36]$ ，其中 h 在 $[-0.06, 0.06]$ 范围内步长取 0.012，其它范围内步长取 0.06。这样就形成了 $10 \times 20 \times 20 = 4000$ 个网格点。

在每一个网格点上，用 50 点高斯一切贝雪夫求积公式计算 B_s 的第一、第二类完全椭圆积分，而 B_c 的最外两重积分和 B_r 的单重积分则用 Gauss-Legendre 求积公式。计算一个网点上的 B_s 和 B_c 在 YH-1 机上需 0.4 秒的 CPU， B_s 和 B_c 的精度分别可达到 10^{-14} 和 10^{-7} ，这样，形变位能的精度可达到 10^{-3} 。

由于 B_s 、 B_c 、 B_r 与具体核无关，将 4000 个网格点上的 B_s 、 B_c 、 B_r 计算出来之后，可将它们存入磁盘。当计算任一核的形变位能时，只需要利用 (6) 式作简单的计算即可。

3.3 一些核形变位能的计算

利用前面计算出的 B_s 、 B_c 和 B_r ，计算了一些核的形变位能，并找出了裂变位垒高度 B_f ，如表 1 所示。由表可知，计算值与实验值的规律是一致的，核越重，位垒越低。

表 1 裂变位垒高度计算结果

核素	可裂变参量	裂变位垒 B_f (MeV)	
		计算结果	实验值
${}_{90}^{228}\text{Th}$	0.7581		6.792
${}_{92}^{236}\text{U}$	0.7716		5.781
${}_{94}^{240}\text{Pu}$	0.7896		4.447
${}_{89}^{221}\text{Ac}$	0.7554		6.962

* 计算结果与徐树威等人^[9]用两参数旋转体模型计算结果一致。

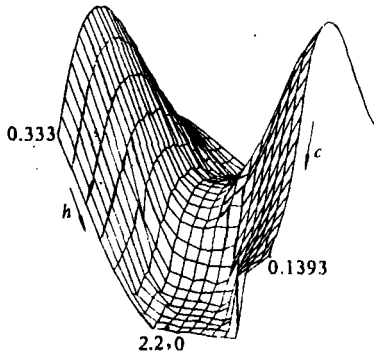


图 3 $l=0, \alpha=0, {}^{236}\text{U}$ 位能曲面

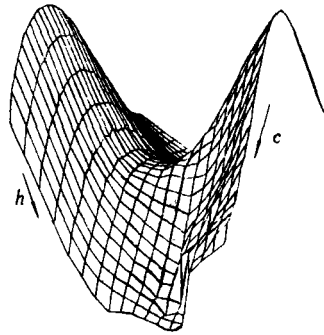


图 4 $l=0, \alpha=0.1, {}^{236}\text{U}$ 位能曲面

在图 3、图 4 画出 $l=0$ 时 $\alpha=0$ 和 $\alpha=0.1$ 的 ${}^{236}\text{U}$ 的位能曲面。曲面中的网线分别平行于 c 轴和 h 轴。 c 值由 1.0 到 2.2， h 值由 -0.33 到 0.39。从两图可见，在 $h=0$ 附近存在一条深谷。增加 h 或减少 h 时位能急剧上升，因而形成两侧的峭壁。这条深谷就是裂变路径。沿裂变路径有一突起的山峰。峰的高度即位垒高度 B_f 。对应峰顶部的形变坐标即鞍点位置。比较图 3 和图 4，可以看出， $\alpha=0.1$ 时裂变位能谷比 $\alpha=0$ 时要浅，相应的位垒也高。这表明通过 $\alpha=0.1$ 的路径裂变的可能性比 $\alpha=0$ 时要小。这说明对称裂变的可能性大些。

在图 5 绘出了²²¹Ac 的位能曲面。比较图 3 与图 5 可见，²³⁶U 的位能曲面的位能谷偏低，位垒也较低，而²²¹Ac 正好相反。这说明重原子核容易裂变。这一点与实验一致。

3.4 断点判据

文 [1] 列举了四种曾被用来作为原子核断点的判据。这里只讨论其中两种。其一是几何断点判据 $P_i(z_n)=0$ ；另一个是能量判据 $\frac{\partial^2 U}{\partial h^2}=0$ 。

任何物理量的计算过了几何断点都将失效，所以给出几何断点是很有意义的。在实际计算中真正的零是不存在的。我们根据需要认为颈部半径平方 $P_i^2(z_n) < 10^{-6}$ 时，原子核就断裂了。根据这个原则计算了几何断点。利用计算结果，用最小二乘法，得到了断点方程：

$$c = A + Bh \quad (12)$$

式中 A, B 是常数，在表 2 中给出。

表 2 几何断点方程系数

α	A		B		r^*	
	$h > 0$	$h < 0$	$h > 0$	$h < 0$	$h > 0$	$h < 0$
0	2.08044	2.08705	-1.20234	-1.85855	0.9966	0.9989
0.1	2.06626	2.08470	-1.17700	-1.70315	0.9972	0.9970
0.2	2.01982	2.02991	-1.07020	-1.78130	0.9979	0.9989
0.3	1.95738	1.95738	-0.99030	-1.85910		

* r 是 c 与 h 的相关系数。

能量判据 $\frac{\partial^2 U}{\partial h^2}=0$ 被认为是作动力学计算的最好判据^[1]。对²³⁶U 和²²¹Ac 作了计算。计算结果在图 6 中给出。从图看出， $\alpha=0$ 和 $\alpha=0.1$ 的两条断点线基本重合，且²³⁶U 和²²¹Ac 断点线也重合。在 $\alpha=0.2$ 时，²³⁶U 的断点线略低于 $\alpha=0$ 时的断点线。而²²¹Ac 在 $\alpha=0.2$ 时没有发现断点。从能量判据来看，并不是所有满足几何断点条件的核都能断裂。能量判据给出的结果只有在 $h > 0$ 的一定范围内原子核才能断裂。如 $\alpha=0, \alpha=0.1$ 时， h 在 0.05~0.2 之间才能断裂。在 $\alpha=0.2$ 时，对²³⁶U 核 h 在 0.1~0.25 之间才能发生断裂，这易于理解。几何断点是静止核形状描述的结果，与那些状态能否发生毫无关系。它

给出的断点包括一些实际上不能发生的点，而能量判据给出的断点位置是必经之路，正处于位能谷末端开阔处（参看图 3, 4, 5）。图 6 也给出了几何断点线。由图 6 可见，几何断点线比能量断点线高，而且²³⁶U 和²²¹Ac 的能量断点线很接近 $\alpha=0.3$ 时的几何断点线。

4 结束语

上述分析表明 (c, h, α) 三参数模型能够连续地描述形变位能、惯性质量及粘滞张量等物理量从基态

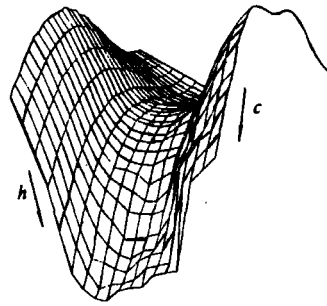


图 5 $l=0, \alpha=0$ ²²¹Ac 的位能曲面

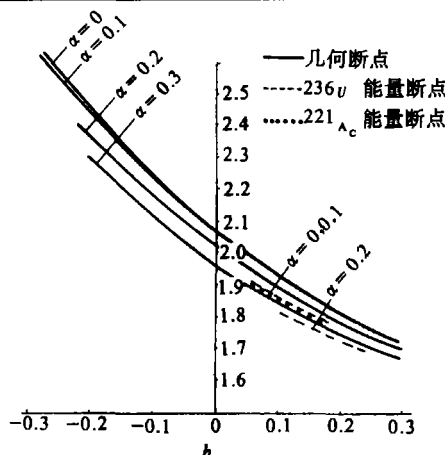


图 6 断点线图

到断点的形变过程。通过对位能曲面及等位线的研究,形象地给出了原子核的形变路径、鞍点及断点附近的特点。这为研究复合核大振幅形变运动的变化过程提供了有益的信息。由于关于 B_s , B_c , B_r , M_{ij} 和 Z_{ij} 的计算结果均以基态球形核为单位给出,与具体核性质无关。因此结果具有普适性,可用于大量原子核的计算,为求解动力学方程提供了可靠的数据。

中国原子能科学研究院卓益志、吴锡真、冯仁发同志与作者进行了有益的讨论,提出过很好的参考意见,在此深表谢意。

参 考 文 献

- 1 Bao Jing Dong, et. al. Commun. Theor. Phys. 1989, 11: 421~431
- 2 Kramers. H A Physica v11, 1940; 284
- 3 Risken H. The Fokkor—Planck Equation, Springer—Verlag, Berlin Heidelberg, New York, Tokyo, 1984
- 4 Brack M, et. al. Rev. Mod. Phys. 1972, 44: 320
- 5 Davies K T R, et. al, Phys. Rev. C1976, 13: 2385
- 6 Yuri T S. Oganessian, Ynri A. Lagave Treatise on Heavy-Ion Science, 1985, 4: 99
- 7 Davies K T R at. al. J. Compu. Phys. 1975, 18: 311~328
- 8 Möller P, Nix J R. Nucl. Phys, 1981, A361: 117~146
- 9 徐树威等, 高能物理与核物理。1990, 4 (2): 179

The Dynamical Coefficients Used in Dynamical Simulation of Nuclear Fission Process

Xing Jingru Wang Shangwu
(Department of Applied Physics)

Abstract

Based on three—parameter rotating body model, the relative surface energy, relative coulomb energy and relative rotating energy of deformed nucleus are calculated. These relative energies are all independent of any certain nucleus they might belong to and have generality. They can be used in the calculation of dynamical simulation. According to these results, the deformation potential energies of some nuclei are calculated, the calculated fission barrier heights of some nuclei are in agreement with the experimental results. The deformation potential surface of ^{236}U is drawn and analysed in detail. In addition, the inertial mass and frictional tensors are calculated by means of Werner Wheeler method. Finally, the scission point equation of the deformed nucleus is discussed.

Key words nuclear fission, simulation, deformation potential, fission path, scission point line, fission barrier, saddle point, scission point