

高温下复合核的热裂变速率*

贾莹 刘玲 包景东¹⁾

(北京师范大学物理系 北京 100875)

摘要 在核裂变的动力学描述中,考虑到质量随坐标的连续变化,提出了自由能有效势,导出了一个新的裂变速率公式.改进后的公式对于核温度与势能位垒高度相当的热核裂变同样适用,其结果比 Kramers 公式更接近于断点裂变速率的朗之万模拟值.

关键词 热核裂变 Kramers 公式 朗之万模拟 有效势 断点

1 引言

Kramers^[1]认为核裂变过程可以用一维亚稳态势中布朗粒子的扩散过程来描述,解准静态下的 Fokker-Planck 方程,得到了核裂变的速率公式,即著名的 Kramers 公式.但核裂变是一个非常复杂的过程,系统惯性随坐标的变化、实际势的复杂性、轻粒子蒸发以及多维情况都应加以考虑.近年来,Frøerich 等^[2,3],Wada 等^[4],Boilley 等^[5]和 Bao 等^[6,7]用朗之万方程的数值模拟计算了暂态裂变速率.结果表明,当温度高于裂变位垒的一半时,核的稳态裂变速率与常质量的 Kramers 公式^[1]和修正的 Kramers 公式^[2]结果相差较大.已有的研究^[8]表明,质量和阻尼随坐标的变化分别对于高激发能和低激发能下的裂变速率有重要的影响.对于一个热的重核的裂变过程,以 MeV 为单位的核温度可以与裂变位垒高度相当,那么就需考虑质量和阻尼随坐标的连续变化.本文提出热力学自由能虚部方法,导出了一个新的裂变速率解析公式,它不仅适用于低温情况^[9],而且对于核温度与位垒高度相当时仍然有效.

2 暂态裂变速率

核裂变的动力学过程可以用朗之万方程来描

述,关于两碎片质心距 $q(t)$ (以球形复合核半径 R_0 为单位)随时间演化为

$$\dot{q}(t) = v(t), \quad (1)$$

$$M(q)\dot{v}(t) = \frac{1}{2} \frac{\partial M(q)}{\partial q} v^2(t) - \frac{\partial V(q)}{\partial q} - \gamma(q)v(t) + g(q)\xi(t), \quad (2)$$

其中 $M(q)$ 和 $\gamma(q)$ 分别是系统沿伸长自由度 q 上的惯性和阻尼,而计算中所用到的约化阻尼 $\beta = \gamma(q)/M(q)$ 取作常数,噪声强度 $g(q) = \sqrt{k_B T M(q) \gamma(q)}$, $k_B T$ 是以 MeV 为单位的复合核温度, k_B 为玻耳兹曼常数,无规力 $\xi(t)$ 遵守 $\langle \xi(t) \rangle = 0$, $\langle \xi(t) \xi(t') \rangle = 2\delta(t - t')$.

我们用随机龙格-库塔方法和单步迭代方法相结合,求解方程(1)和(2),这样既避免了产生高阶导数,同时精度也较高.则朗之万方程组的数值解是

$$q(t + \Delta t) = q(t) + [v(t) + v^*(t)] \frac{\Delta t}{2}, \quad (3)$$

$$v(t + \Delta t) = v(t) + \frac{\Delta t}{2} [G(q(t), v(t)) + G(q^*(t), v^*(t))] + \frac{1}{2} [\tilde{g}(q(t)) + \tilde{g}(q^*(t))] \sqrt{2\Delta t} \Psi, \quad (4)$$

式中, $G(q(t), v(t)) = \frac{1}{2M(q)} \frac{\partial M(q)}{\partial q} v^2(t)$

2002-10-14 收稿

* 国家自然科学基金(10075007, 10235020)和教育部跨世纪优秀人才项目资助

1) E-mail: jdbao@bnu.edu.cn

$$\frac{1}{M(q)} \frac{\partial V(q)}{\partial q} - \frac{\gamma(q)}{M(q)} v(t),$$

$$\tilde{g}(q) = \sqrt{k_B T \gamma(q) / M(q)},$$

这里 $q^*(t)$ 和 $v^*(t)$ 为单步迭代方法的模拟解. Ψ 是均值为零, 方差是 1 的标准高斯随机数.

通常, 当布朗粒子坐标大于势能鞍点坐标, 即 $q(t) > q_b$ 时, 便认为受激复合核发生了裂变. 核裂变速率的朗之万数值模拟定义为

$$r(t) = - \frac{1}{N(t)} \frac{dN(t)}{dt},$$

其中 $N(t)$ 是 t 时刻未发生裂变的粒子数, $dN(t)$ 是 t 到 $t + dt$ 内发生裂变的粒子数. 为了统计方便起见, 选一有限时间间隔 t_s , 在 $t - t_s$ 到 t 时间内平均裂变速率为

$$r(t) = \frac{1}{t_s} \int_{t-t_s}^t \left(- \frac{1}{N(t)} \right) \frac{dN(t)}{dt} dt =$$

$$\frac{1}{t_s} [\ln(N(t)) - \ln(N(t - t_s))]. \quad (5)$$

3 热力学裂变速率公式的推导

根据热力学方法, 核裂变的稳定速率与自由能虚部之间有如下关系^[10-14]

$$r_k = - \frac{2}{\hbar} \frac{k_B T_c}{k_B T} \text{Im} F, \quad (6)$$

其中自由能 $F = k_B T \ln Z$ (Z 为配分函数), T_c 为跨越温度^[10,11], $k_B T_c = \frac{\hbar}{2\pi} \omega_r$, ω_r 为修正的势垒频率, 它由方程 $w_r^2 + \gamma_b w_r - w_b^2 = 0$ 决定. γ_b 和 w_b 分别是鞍点处的约化阻尼和势场频率, 其中

$$w_b^2 = \frac{1}{M(q_b)} |V''(q_b)|.$$

在相空间中, 玻耳兹曼平衡态下的配分函数为

$$Z = \frac{1}{N_0} \int \exp \left[- \frac{1}{k_B T} \left[\frac{1}{2M(q)} p^2(t) + V(q) \right] \right] dp dq, \quad (7)$$

这里 N_0 是一个归一化常数, 动量 $p = M(q)v$. 完成 (7) 式的动量积分后, 有

$$Z = \frac{1}{N_0} \sqrt{2\pi k_B T} \int_{-\infty}^{\infty} \sqrt{M(q)} \exp \left(- \frac{V(q)}{k_B T} \right) dq =$$

$$\frac{1}{N_0} \sqrt{2\pi k_B T} \int_{-\infty}^{q_b} \sqrt{M(q)} \exp \left(- \frac{V(q)}{k_B T} \right) dq +$$

$$\frac{1}{N_0} \sqrt{2\pi k_B T} \int_{q_b}^{\infty} \sqrt{M(q)} \exp \left(- \frac{V(q)}{k_B T} \right) dq. \quad (8)$$

当计算 (8) 式右端第二个积分时, 由于势场过鞍点后下降, 这种不稳定性导致了从 q_b 到 ∞ 的积分的发散. 为了解决这个困难, 可将积分变换为上半复平面, 即令 $q = q_b + iy$, 进而提供了一个具有虚部的复配分函数

$$Z = \frac{1}{N_1} \int_{-\infty}^{q_b} \sqrt{M(q)} \exp \left(- \frac{V(q)}{k_B T} \right) dq +$$

$$i \frac{1}{N_1} \int_0^{\infty} \sqrt{M(q_b + iy)} \exp \left(- \frac{V(q_b + iy)}{k_B T} \right) dy,$$

其中常数

$$N_1 = \frac{N_0}{\sqrt{2\pi k_B T}}.$$

现引入一个有效势

$$V_1(q) = V(q) - \frac{1}{2} k_B T \ln(M(q)), \quad (10)$$

并将有效势 $V_1(q)$ 在鞍点 q_b 处展开

$$V_1(q_b + iy) = V_1(q_b) + \frac{1}{2} V_1''(q_b) (iy)^2 +$$

$$\frac{1}{3} V_1^{(3)}(q_b) (iy)^3. \quad (11)$$

注意到有效势的鞍点与原势场的鞍点并不相等 (见图 2). (9) 式成为

$$Z = \frac{1}{N_1} \int_{-\infty}^{q_b} dq \exp \left(- \frac{V_1(q)}{k_B T} \right) + i \frac{1}{N_1} \exp \left(- \frac{V_1(q_b)}{k_B T} \right) \cdot$$

$$\int_0^{\infty} dy \exp \left\{ - \frac{1}{k_B T} \left[\frac{1}{2} |V_1''(q_b)| y^2 \right. \right.$$

$$\left. \left. + \frac{1}{3} i V_1^{(3)}(q_b) y^3 \right] \right\}. \quad (12)$$

对 Z 的实部和虚部分别作积分, 可得到由 (6) 式所确定的热力学裂变速率解析式:

$$r_k = \frac{2}{\hbar} k_B T_c \arctan \left(\frac{\text{Im} Z}{\text{Re} Z} \right),$$

其中

$$\text{Re} Z = \frac{1}{N_1} \int_{-\infty}^{q_b} dq \exp \left(- \frac{V_1(q)}{k_B T} \right) -$$

$$\frac{1}{N_1} \exp \left(- \frac{V_1(q_b)}{k_B T} \right) \cdot$$

$$\int_0^{\infty} dy \exp \left[- \frac{1}{2k_B T} |V_1''(q_b)| y^2 \right]$$

$$\sin \left(\frac{1}{3k_B T} V_1^{(3)}(q_b) y^3 \right),$$

$$\text{Im} Z = \frac{1}{N_1} \exp \left(- \frac{V_1(q_b)}{k_B T} \right) \cdot$$

$$\int_0^{\infty} dy \exp \left[- \frac{1}{2k_B T} |V_1''(q_b)| y^2 \right]$$

$$\cos\left(\frac{1}{3k_B T} V_1^{(3)}(q_b) y^3\right). \quad (15)$$

当温度远远低于位垒高度时, 即 $k_B T \ll V_b$, 则 $\text{Im}Z \ll \text{Re}Z$, 有

$$\begin{aligned} \text{Im} \ln Z &= \text{Im} \ln(\text{Re}Z + i\text{Im}Z) = \\ &= \text{Im} \ln[\text{Re}Z(1 + i\text{Im}Z/\text{Re}Z)] \cong \\ &= \text{Im}Z/\text{Re}Z. \end{aligned} \quad (16)$$

(14) 式的积分可以在最速下降近似下^[10-14] 通过高斯积分得到 r_k 的表达式. 在低温情况下, $\exp(-V(q)/k_B T)$ 的值对实部和虚部的积分起主要贡献的是来自 $q=0$ 和 $q=q_b$ 附近的势, 因此在 $q=0$ 和 $q=q_b$ 附近把势做二阶展开, 配分函数的实部对 q 的积分可扩展到从 $-\infty$ 到 ∞ , 虚部对 y 的积分从 0 到 ∞ , 这样本文的结果 (见 (13) 式) 就退化到了著名的 Kramers 公式:

$$r_k = \frac{1}{h} k_B T_c \sqrt{\frac{M(q_b)}{M(q_0)^2}} \exp\left(-\frac{V_b}{k_B T}\right). \quad (17)$$

4 结果与讨论

考虑一个正谐振子和一个倒置谐振子光滑连接的裂变位势, 势的形式如下:

$$V(q) = \begin{cases} 135.5q^2, & \text{当 } q > 0.122 \text{ 时,} \\ -135.5(q-0.24)^2 + 4, & \text{当 } q < 0.122 \text{ 时,} \end{cases} \quad (18)$$

势垒高度 $V_b = 4 \text{ MeV}$, 基态位置 $q_0 = 0$, 鞍点 $q_b = 0.24$.

惯性质量作为坐标的函数为^[5] (见图 1)

$$M(q) = \frac{M(0)}{3} [2\exp(4q) + \exp(-2q)], \quad (19)$$

对于 ^{248}Cf 核, $M(0) = 376.3 \text{ h}^2/\text{MeV} \cdot \text{fm}^2$ 和

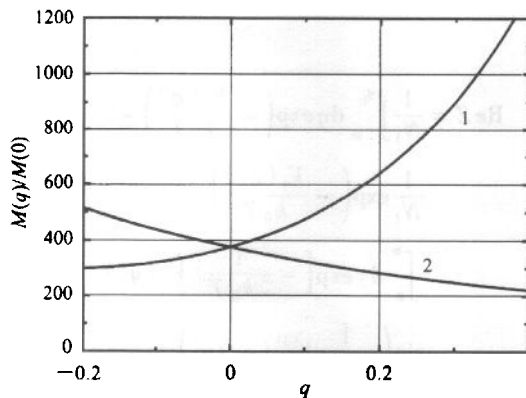


图 1 坐标依赖的惯性质量 (单位: $M(0)$)

曲线 1, 2 分别代表取 (19) 和 (20) 式时质量随坐标的变化,

其中 (20) 式中的 $\lambda = 2$.

$464.4/(k_B T)^{2.5}$. 为了显示坐标有关的惯性对 Kramers 速率的影响, 我们选择它的另外一种表达式^[6] (见图 1)

$$M(q) = \frac{M(0)}{4} [1 + 3\exp(-\lambda q)]. \quad (20)$$

在图 2 中, 有效势的鞍点坐标由下式计算:

$$\frac{\partial V_1(q)}{\partial q} = \left[V'(q) - \frac{1}{2} k_B T \frac{M'(q)}{M(q)} \right]_{q=q_b} = 0, \quad (21)$$

与原来的势 $V(q)$ 做比较, 当惯性选用 (19) 式时, 有效势的鞍点位置相对于原来的鞍点内缩, 即 $q_{1b} < q_b$; 然而对于惯性取 (20) 式时, 有效势鞍点的位置位于原来鞍点之后, 即 $q_{2b} > q_b$. 在高温下, 若考虑了惯性对坐标的依赖性, 那么裂变可以看成是粒子越过有效势的鞍点的过程.

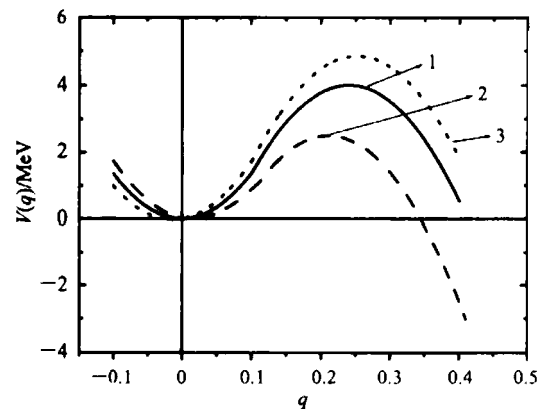


图 2 有效势的示意图

曲线 1, 2, 3 分别对应于原来势场 V 、质量取 (19) 式时的有效势和质量取 (20) 式时的有效势 V_1 .

图 3 中的各图是本文计算给出的几个典型温度下核的暂态裂变速率 (单位: 10^{21} s^{-1}) 的结果. 其中 LL 为模拟的粒子数, 时间步长取 $dt = 0.06[t]$, 而时间单位 $[t] = 10^{-21} \text{ s}$. 两曲折线是朗之万方程的数值模拟解, 其中, 上方曲线是用布朗粒子一次通过鞍点进行统计的结果; 下方的曲线为布朗粒子通过断点所定义的裂变速率的结果. 点虚直线是由 Kramers 公式得到的裂变速率, 虚直线是由修正的 Kramers 公式得到的裂变速率, 实直线是我们的理论结果. 值得注意的是, 将裂变速率分别定义为粒子一次通过鞍点或最终到达断点, 两者的差别较大. 这是由于高温意味着粒子涨落强, 粒子通过鞍点后, 在热涨落的作用下, 可能沿反方向返回鞍点, 则降低了裂变的可能性. 故在高温情况下, 复合核的裂变速率应定义在断点处.

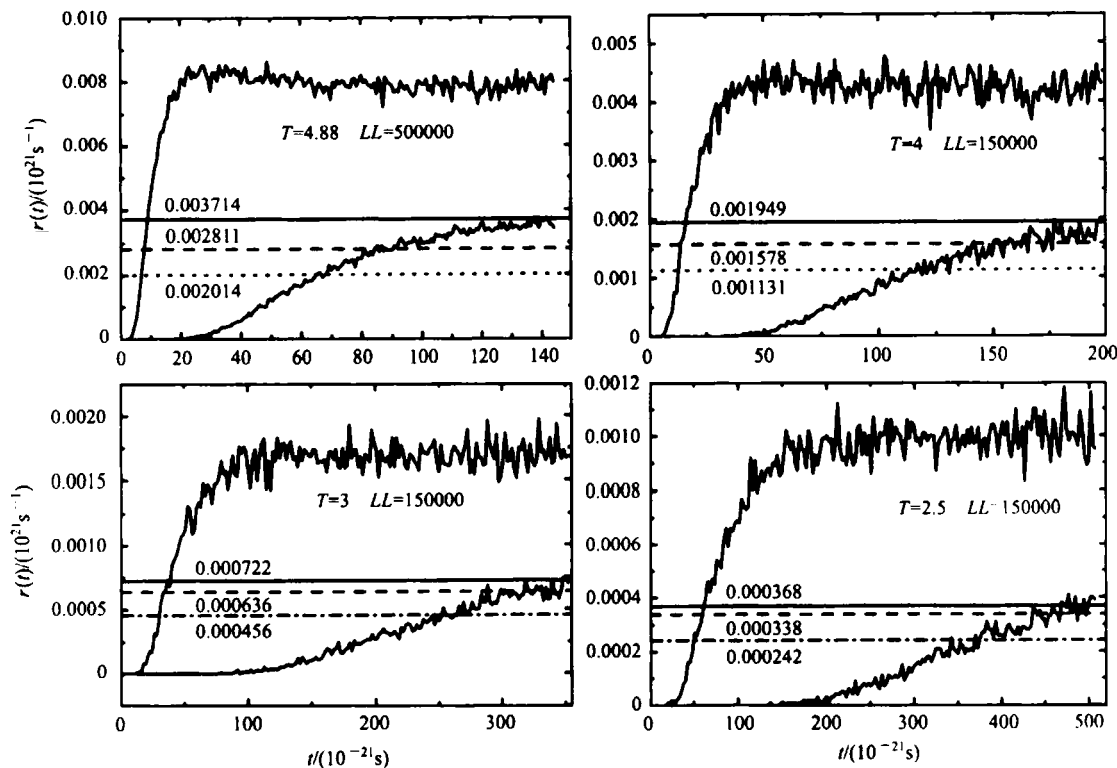


图 3 典型温度下核裂变速率的计算结果

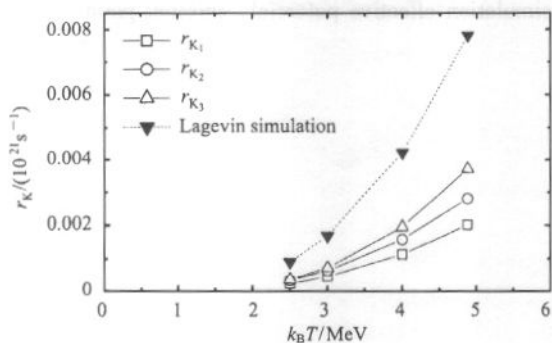


图 4 稳定裂变速率随温度的变化规律

为了更清楚地比较裂变速率公式的结果,把不同温度下用不同方法得到的稳态速率(单位: 10^{21} s^{-1}) 给在图 4 中. 由于朗之万模拟所得到的裂变速率还有微小的涨落,用下列的平均值作为稳态裂变速率的值

$$\bar{r}_k = \frac{1}{t_1 - t_0} \int_{t_0}^{t_1} r_k(s) ds, \quad (22)$$

其中 t_0 为系统由暂态进入稳态时的时刻, t_1 为模拟的最后时刻.

在图 4 中, 实线 r_k 是 Kramers 裂变速率公式^[1]

的结果, 实线 r_{k_2} 是修正的 Kramers 裂变速率公式^[2] 得到的结果, 实线 r_{k_3} 是本文热力学裂变速率公式 (13) 的结果, 虚线是根据朗之万模拟布朗粒子一次通过鞍点的结果. 由此看出, 各种解析公式所给出的裂变速率更接近于朗之万模拟的断点处的稳定结果, 而不是鞍点的结果. 温度越高, 我们的结果对 Kramers 公式修正得越大. 而当温度高于势垒一半高度时, Kramers 公式已经不能很好地给出热裂变速率.

5 小结

本文考虑了核系统的惯性质量和粘滞阻尼随坐标的连续变化, 提出了一个有效势, 并根据虚自由能方法导出了稳态裂变速率公式. 此公式适用于较高温度下的热核裂变, 并与定义在断点处的裂变速率的朗之万数值模拟结果符合得较好, 而在计算高激发能下重复合核的裂变速率时, Kramers 公式所得出的结果与朗之万数值模拟的结果相差较大.

参考文献 (References)

- 1 Kramers H A. *Physica*, 1940, **7**:284
- 2 Frobrich P, Tillack G R. *Nucl. Phys.*, 1992, **A540**:251
- 3 Frobrich P. *Nucl. Phys.*, 1992, **A545**:87c
- 4 Tillack G R. *Phys. Lett.*, 1992, **B278**:403
- 5 Boilley D, Surraud E, Abe Y et al. *Nucl. Phys.*, 1992, **A540**:1892
- 6 BAO J D, ZHUO Y Z, WU X Z. *Z. Phys.*, 1995, **A354**:293
- 7 BAO J D. *Commun. Theor. Phys.*, 1995, **23**:435
- 8 BAO J D, ZHUO Y Z, WU X Z. *Z. Phys. Lett.*, 1994, **B327**:1
- 9 Weidenmuller H A, ZHANG J S. *J. Stat. Phys.*, 1984, **34**:191
- 10 Grabert H, Olschowski P, Weiss U. *Phys. Rev.*, 1987, **B36**:1931
- 11 Hanggi P, Talkner P, Brokovec M. *Rev. Mod. Phys.*, 1990, **62**:251
- 12 Takigawa N, Abe M. *Phys. Rev.*, 1990, **C41**:108
- 13 Langer J S. *Ann. Phys.*, 1967, **41**:108
- 14 Callan C G, Coleman S. *Phys. Rev.*, 1981, **D16**:1762

Thermal Fission Rate of a Compound Nucleus at High Temperatures*

JIA Ying LIU Ling BAO Jing-Dong¹⁾

(Department of Physics, Beijing Normal University, Beijing 100875, China)

Abstract Time-dependent fission rate is calculated numerically by simulating a set of Langevin equations. The results show that in the stationary limit the fission rate does not approach to those based on both Kramers formula with constant mass and modified Kramers formula, whenever the temperature is higher than a half of the fission barrier. Considering coordinate-dependent mass plays an important role in the fission rate, we proposed an effective potential, thus an improved Kramers formula is obtained, which is still valid when the temperature is increased to the same as the barrier height. The present results are in good agreement with the fission rate determined in the scission point by using Langevin simulation.

Key words thermal nuclear fission, Kramers formula, Langevin simulation effective potential, scission point

Received 14 October 2002

* Supported by National Natural Science Foundation of China (10075007, 10235020) and Project of Trans-Century Training Program Foundation for the Talents, Ministry of Education of China

1) E-mail: jdbao@bnu.edu.cn