Gogny力三维TDHFB理论与 ^{240}Pu 裂变动力学

佟亮¹, Hashimoto Yukio², 晏世伟^{1*}

1. 北京师范大学物理学系, 北京 100875;

2. Center for Computational Sciences, University of Tsukuba, Tsukuba 305-8571, Japan

* 联系人, E-mail: yansw@bnu.edu.cn

2019-12-24 收稿, 2020-03-28 修回, 2020-04-07 接受, 2020-04-08 网络版发表

国家自然科学基金(11675018, 11790325, 11735005)和北京市自然科学基金(1172008)资助

摘要 基于Gogny核子-核子有效相互作用, 发展了适用于描写原子核裂变过程、不包含任何对称性限制以及三维时间相关的Hartree-Fock-Bogoliubov理论计算程序(Gogny-TDHFB Code for Fission). 程序包含静态裂变势能面计算的多维度集体自由度约束HFB和裂变动力学计算的TDHFB两部分. 在 (x, y) 方向采用形变谐振子基. 在 z 方向上, 为了描述裂变直至断点和断后的极端形变, 采用Lagrange mesh方法. 利用本程序, 对 ^{240}Pu 的裂变势能路径和断点动力学过程进行了计算. 结果表明, ^{240}Pu 存在对称和非对称两条裂变路径; 三轴形变可以显著降低第一(内)裂变位垒; 对能在断裂过程中起着重要作用.

关键词 核裂变, 断点动力学, 时间相关Hartree-Fock-Bogoliubov理论, Gogny核子-核子有效相互作用

原子核裂变过程是核内核子平等参与的多维量子力学空间的大振幅集体运动, 由于涉及核结构与核动力学的相互关联, 因而成为核物理研究中最复杂且受到持续关注的过程之一. 尽管经过几代物理学家在实验和理论两方面的不断努力, 裂变过程的许多重要方面仍然没有在最基本的层面上被了解, 裂变问题仍然是核物理研究中的一个重要课题. 其复杂性涉及描述原子核的所有理论方法的几乎所有困难. 而且, 核科技应用的日益广泛和核能与利用的不断发展, 对核裂变数据的质量提出了更高的要求, 有着发展以实验结果为基础, 具有定量和预言水平的核裂变输运理论的迫切需求.

由于核裂变过程是极其复杂的核过程^[1], 对裂变问题开展扎实系统的理论和实验研究必将涉及科学和技术的诸多领域. 这不仅对澄清核裂变机制、揭示低能核动力学过程的复杂性、检验以核多体理论为基础的

核模型理论具有十分重要的意义^[2], 而且对于理解天体物理上强中子环境中重核的形成过程^[3]、超重核合成机制^[4-6]、加速器中奇特稀有元素束流的产生^[7]等具有全局性和基础性影响.

裂变现象自被发现以来, 就成为核物理领域一个兼具基础性和应用性, 并受到持续关注的重要课题. 理论上, 以Bohr和Wheeler^[8]的“核裂变机制”这一经典性文章为开端, 诸如基于Strutinsky壳修正方法的宏观-微观模型^[9-11]、随机动力学模型^[12-16]等理论方法随即出现. 近年来, 随着能量密度泛函理论快速发展^[17-20], 非相对论与相对论的微观理论方法被用于裂变路径及动力学的研究^[21-35]. 这些模型方法的提出和应用, 极大地丰富了人们对核裂变过程的认识, 成功解释了许多有重要意义的裂变现象, 在真实计算铀钚等重核裂变的质量、电荷和动能分布方面取得重大进展, 有些计算结果可与实验数据定性符合.

引用格式: 佟亮, Hashimoto Yukio, 晏世伟. Gogny力三维TDHFB理论与 ^{240}Pu 裂变动力学. 科学通报, 2020, 65: 2225–2237

Tong L, Hashimoto Y, Yan S W. 3D TDHFB theory with Gogny force and fission dynamics of ^{240}Pu (in Chinese). Chin Sci Bull, 2020, 65: 2225–2237, doi: [10.1360/TB-2019-0863](https://doi.org/10.1360/TB-2019-0863)

由于核裂变过程涉及核结构与核动力学的相互关联, 以及各种各样的多体关联和涨落效应, 因此核裂变过程十分复杂. 核裂变理论方法的建立应以核子-核子作用为出发点, 从微观量子层次上将裂变过程的核单粒子运动动力学与宏观的核大振幅集体运动动力学自洽统一起来^[36], 给出裂变核从基态到断点态集体变形形状的精确描述. 但是, 由于裂变现象仅发生于较重的元素, 对于这些元素, 精确的核多体理论描述面临极大的困难^[9].

上述模型广泛采用了绝热近似, 用以描述裂变过程直到断点, 并预言了诸如质量、电荷及动能分布等碎块特征. 这些特征的获得, 假定了在断点处颈部的突然断裂, 并忽略了来自集体与单粒子自由度之间的耦合效应. 采用绝热近似的依据是: 核裂变过程的平均时间尺度为 $20 \times 10^{-21} \sim 50 \times 10^{-21}$ s^[37], 相对于核单粒子运动, 这一时间尺度足够长, 可以把核裂变过程从整体上考虑为绝热过程, 即认为核子自由度在系统沿着由集体自由度定义的势能面上演化的过程中始终处于完全的平衡状态. 但是, 在裂变过程的后期, 系统在越过位垒之后, 接近断点的过程中会加速运动, 经历一个快速的形状变化^[21], 从而引起非绝热效应. 因此, 绝热近似在裂变过程的后期, 系统接近断点的动力学过程中是不能成立的, 非绝热效应在断点附近表现尤为突出^[21,38]. 这在很大程度上限制了绝热近似对碎块特征做出准确预言的能力, 例如, 断前的非绝热效应对碎块激发能和动能的贡献^[26,33]. 而且, 裂变核从鞍点到断点的动力学过程是裂变现象中一个十分重要的过程, 对裂变碎块的主要特征和发射的轻粒子特征起着决定性的作用. 这个复杂的物理过程是裂变物理研究的关键问题之一.

迄今为止, 多数描述裂变动力学过程的理论方法集中在裂变过程的绝热部分, 微观理论方法已经被广泛应用于研究裂变路径, 特别是时间相关的生成坐标方法(time-dependent generator coordinate method, TDGCM)和绝热时间相关的Hartree-Fock(HF)方法, 提供了描述集体自由度和内禀自由度的演化. 诸如五维势能面上的随机行走模型和布朗运动模型, 通过利用强阻尼近似这一简化, 成功描述了碎块的质量分布.

在现有处理裂变的微观理论方法中, constrained-Hartree-Fock-Bogoliubov(CHFB)方法结合TDGCM是有效方法之一. 然而, 在讨论从鞍点到断点快速的断裂动力学过程时, 如何在该方法中合理地且在数值计算中又现实可行地考虑由单粒子与集体自由度之间的耦合

所带来的非绝热效应, 依然面临极大挑战.

核子之间的对关联和超流动性在核裂变过程, 特别是核形状演化动力学过程中起着重要作用^[39-43]. 基于Skyrme能量密度泛函, TDBCS(time-dependent Bard-
een-Cooper-Schrieffer)方法结合了时间相关Hartree-Fock理论与动力学对关联^[33], 但在动力学上破坏了连续性方程^[44].

因此, 本文采用时间相关的Hartree-Fock-Bogoliubov(TDHFB)理论. TDHFB理论是一种完全微观的非绝热方法, 是描写断点动力学的一种合理选择. 与基于零程的Skyrme力的CHFB计算相比较, 在HF方法中, 当有效核子-核子相互作用采用有限力程的Gogny形式时, 粒子-粒子道与粒子-空穴道平行处理, 可以保证在整个裂变路径上, 对效应能够得到自洽且合理的考虑. 而且, 相空间能量范围的确定可由两体相互作用的高斯形式自然地引入, 不需要人为设定. 本文统一采用Gogny形式的有效核子-核子相互作用.

根据以上分析, 在核裂变的微观描述上, 一个现实可行的方法是把裂变过程分为两个阶段, 即从其基态形状演化到外部裂变位垒阶段, 以及所伴随的颈部形成直到断裂及断后的动力学阶段.

考虑到第一阶段是一个相对缓慢的过程, 这一阶段用形状约束的HF方法来描写, 而动力学阶段则用TDHFB理论描写. 两个过程在鞍点和断点之间自洽连接. 而且, 绝热和非绝热过程基于相同的能量密度泛函, 不包含其他的针对具体过程的参数.

1 TDHFB理论

原子核系统的哈密顿量包含核子的动能项与核子之间的相互作用项, 具有如下形式:

$$H = \sum_{i,j} T_{ij} c_i^\dagger c_j + \frac{1}{4} \sum_{i,j,k,l} \bar{v}_{ijkl} c_i^\dagger c_j^\dagger c_l c_k, \quad (1)$$

其中, T_{ij} 是粒子基 $\{c_l^\dagger c_l\}$ 下的动能矩阵元, $\bar{v}_{ijkl}$ 是包含交换项的反对称两体相互作用矩阵元. 通过引入广义Bogoliubov变换^[45,46]

$$\begin{aligned} \beta_k^\dagger &= \sum_i (U_{ik} c_i^\dagger + V_{ik} c_i), \\ \beta_k &= \sum_i (U_{ik}^* c_i + V_{ik}^* c_i^\dagger), \end{aligned} \quad (2)$$

将粒子算符 $c_l^\dagger, c_l$ 变换为准粒子算符 $\beta_k^\dagger, \beta_k$. 当变换矩阵

U_{ik}, V_{ik} 确定后, 准粒子算符 $\beta_k^\dagger, \beta_k$ 随之确定. 定义准粒子基态波函数(HFB波函数)为

$$|\phi\rangle = \prod_k \beta_k |0\rangle, \quad (3)$$

其中, $|0\rangle$ 为粒子真空态, 对所有的 β_k 都满足以下条件:

$$\beta_k |\phi\rangle = 0. \quad (4)$$

利用HFB波函数构造广义密度矩阵

$$\mathfrak{R} = \begin{pmatrix} \rho & \kappa \\ -\kappa^* & 1 - \rho^* \end{pmatrix}, \quad (5)$$

其中, ρ 为密度矩阵, κ 为对张量, 其矩阵元在广义Bogoliubov变换下由 U_{ik}, V_{ik} 确定, 具体形式如下:

$$\begin{aligned} \rho_{ij} &= \langle \phi | c_j^\dagger c_i | \phi \rangle = (V^* V^T)_{ij}, \\ \kappa_{ij} &= \langle \phi | c_j c_i | \phi \rangle = (V^* U^T)_{ij}. \end{aligned} \quad (6)$$

我们的计算目的就是通过迭代求解下面的非线性HFB方程以确定矩阵 U 和 V :

$$\begin{pmatrix} h & \Delta \\ -\Delta^* & -h^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_k \\ V_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_k \\ V_k \end{pmatrix} E_k, \quad (7)$$

其中, h 是哈密顿量中的平均场部分, Δ 是对能部分, 其矩阵元表示为

$$\begin{aligned} h_{\alpha\beta} &= T_{\alpha\beta} + \Gamma_{\alpha\beta}, \\ \Gamma_{\alpha\beta} &= \sum_{\gamma\delta} \bar{v}_{\alpha\gamma\beta\delta} \rho_{\delta\gamma}, \\ \Delta_{\alpha\beta} &= \frac{1}{2} \sum_{\gamma\delta} \bar{v}_{\alpha\beta\gamma\delta} \kappa_{\gamma\delta}. \end{aligned} \quad (8)$$

TDHFB理论的出发点是广义密度矩阵的运动方程^[46]:

$$i\hbar \dot{\mathfrak{R}} = [\mathcal{H}, \mathfrak{R}], \quad (9)$$

其中, 用 $\mathcal{H}$ 符号简记HFB哈密顿量

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} h & \Delta \\ -\Delta^* & -h^* \end{pmatrix}. \quad (10)$$

通过求解广义密度矩阵的运动方程, 可以得到

$$\mathfrak{R}(t) = \mathcal{T} \left(e^{-\frac{i}{\hbar} \int^t d\tau \mathcal{H}(\tau)} \right) \mathfrak{R}(0) \mathcal{T} \left(e^{\frac{i}{\hbar} \int^t d\tau \mathcal{H}(\tau)} \right), \quad (11)$$

其中, $\mathcal{T}$ 为编时算符, 由方程(5)和(6)知

$$\mathfrak{R} = \begin{pmatrix} V^* \\ U^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V^T & U^T \end{pmatrix}. \quad (12)$$

于是, 可以用 U 和 V 矩阵给出形式解

$$\begin{pmatrix} V^*(t) \\ U^*(t) \end{pmatrix} = \mathcal{T} \left(e^{-\frac{i}{\hbar} \int^t d\tau \mathcal{H}(\tau)} \right) \begin{pmatrix} V^*(0) \\ U^*(0) \end{pmatrix}, \quad (13)$$

这等价于写成 U 和 V 矩阵满足薛定谔方程的形式:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} V^*(t) \\ U^*(t) \end{pmatrix} &= \mathcal{H} \begin{pmatrix} V^*(t) \\ U^*(t) \end{pmatrix}, \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} U(t) \\ V(t) \end{pmatrix} &= \mathcal{H} \begin{pmatrix} U(t) \\ V(t) \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (14)$$

此即TDHFB方程. 可以看出, TDHFB方程与TDHF方程具有非常相似的形式, 因此TDHFB方程的求解可以借鉴TDHF方程的求解策略和数值方法^[47]. TDHFB方程的形式解可以表示为

$$\begin{pmatrix} U(t_{n+1}) \\ V(t_{n+1}) \end{pmatrix} = \exp \left(-i \frac{\Delta t}{\hbar} \mathcal{H}^{n+\frac{1}{2}} \right) \begin{pmatrix} U(t_n) \\ V(t_n) \end{pmatrix}, \quad (15)$$

其中, Δt 为时间步长, $t_{n+1} = t_n + \Delta t$; $U(t_n), V(t_n)$ 为 t_n 时刻的 U, V 矩阵; $\mathcal{H}^{n+\frac{1}{2}}$ 是 t_n 到 t_{n+1} 之间的HFB哈密顿量. 在方程(15)积分的每一步, 利用Predictor-Corrector方法, 确定 $\mathcal{H}^{n+\frac{1}{2}}$, 以使系统总能量在求解过程中守恒^[47]:

$$E = \sum_{\alpha\beta} \left(T_{\alpha\beta} \rho_{\beta\alpha} + \frac{1}{2} \Gamma_{\alpha\beta} \rho_{\beta\alpha} + \frac{1}{2} \kappa_{\alpha\beta}^* \Delta_{\beta\alpha} \right). \quad (16)$$

2 程序中的数值方法

如前所述, 本程序中, 核子-核子相互作用采用有限力程的Gogny有效相互作用^[48,49]:

$$\begin{aligned} V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= V_G + V_{LS} + V_D + V_C \\ &= \sum_{i=1,2} (W_i + B_i P_\sigma - H_i P_\tau - M_i P_\sigma P_\tau) e^{-\frac{(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)^2}{\mu_i^2}} \\ &\quad + i W_0 (\boldsymbol{\sigma}_1 + \boldsymbol{\sigma}_2) \cdot \mathbf{k} \times \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \mathbf{k} \\ &\quad + t_3 (1 + P_\sigma) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \rho^a \left(\frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2} \right) \\ &\quad + e^2 \frac{\delta_{\tau_1 \tau_2}^p}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}, \end{aligned} \quad (17)$$

其中, 第一项是高斯项, P_σ 是自旋交换算符, P_τ 是同位旋交换算符. 两体矩阵元为

$$\langle \alpha\beta | e^{-\frac{(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)^2}{\mu_i^2}} | \gamma\delta \rangle, \quad (18)$$

其计算需用到谐振子波函数的性质以及分离法技

木^[50,51]. 第二项是自旋轨道耦合项, 第三项是密度依赖项, $\rho = \rho^{(p)} + \rho^{(n)}$ 是原子核的全部密度, 未考虑自旋轨道耦合项与密度依赖项在对能中的贡献. 第四项是质子之间的库仑相互作用, 只贡献在平均场 h 中. 相互作用参数选择DIS参数集^[48,49]. 在计算库仑势的两体矩阵元时, 采用如下变换:

$$\frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{d\mu}{\mu^2} e^{-\frac{(r_1 - r_2)^2}{\mu^2}}, \quad (19)$$

使其与高斯两体矩阵元具有相同的形式, 可用相同的方法处理^[50,51]. 与Skyrme HFB不同, 当核子-核子有效相互作用采用Gogny形式时, 物理空间能量的截断由上述高斯形式的两体相互作用自然引入.

通常情况下, 形变谐振子波函数 $\phi_\alpha(\mathbf{r}) = \phi_{n_x(\alpha)}(x) \phi_{n_y(\alpha)}(y) \phi_{n_z(\alpha)}(z)$ 作为基矢, 用于两体相互作用矩阵元(方程(18))的计算^[50]. 然而, 当这一基矢用于裂变过程计算时, 为了描述裂变核在伸长方向的超大形变, 需要调整该方向的参数 ω_z , 并适当增加该方向的 n_z 值^[52], 这会带来计算上的实际困难. 本工作中, 我们采用拉格朗日格点(Lagrange mesh, LM)函数代替沿着裂变方向(z 方向)的谐振子本征函数^[53,54], 而在(x, y)方向仍然采用谐振子波函数. 使用的拉格朗日格点基函数为

$$f_l(z) = \frac{1}{N} \frac{\sin[\pi(z - z_l)/s]}{\sin[\pi(z - z_l)/L]}, \quad (20)$$

其中 $L = Ns$, N 是沿 z 方向所选取的格点的总数, 每两个格点之间的距离为 s ; $f_l(z)$ 和 z_l 中的 $l = 1, 2, \dots, N$. LM函数具有如下两个性质:

$$f_l(z_k) = \delta_{lk}, \quad \int_{-L/2}^{L/2} f_l(z) f_k(z) dz = s \delta_{lk}. \quad (21)$$

对于某函数 $V(z)$, LM给出积分公式为

$$\int_{-L/2}^{L/2} f_l(z) V(z) f_k(z) dz = s V(z_l) \delta_{lk}. \quad (22)$$

这样, 计算积分就只需计算函数 $V(z)$ 在 z_l 格点的值即可. 这在很大程度上降低了计算上的内存需求, 减少了计算时间. 因此, 在本程序中, 实际采用两维(x, y 方向)谐振子基与一维(z 方向)拉格朗日格点作为基矢:

$$\phi_\alpha(\mathbf{r}) = \phi_{n_x(\alpha)}(x) \phi_{n_y(\alpha)}(y) f_{l(\alpha)}(z). \quad (23)$$

3 约束HFB计算

在裂变动力学的研究中, 一项关键的基础性工作

是裂变核多维集体变形坐标空间中位能曲面的精确计算, 给出各种可能的裂变路径. 而且, 能否给出合理的裂变核多维集体变形坐标空间中位能曲面也是判断微观理论框架合理性的一个重要方面.

在微观平均场理论计算中, 核形状通常由下述多级矩来描写:

$$R(\theta, \phi) = R_0 \left[1 + \sum_{\lambda=1}^{\infty} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} \alpha_{\lambda\mu} Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi) \right]. \quad (24)$$

在这样的定义下, 核形状多级矩表示为

$$Q_{\lambda\mu} = \langle \phi | \hat{Q}_{\lambda\mu} | \phi \rangle, \quad (25)$$

其中, $|\phi\rangle$ 为HFB波函数(方程(3)); $\hat{Q}_{\lambda\mu}$ 为多级矩算符:

$$Q_{\lambda\mu}(\mathbf{r}) = \alpha_{\lambda\mu} r^\lambda Y_{\lambda\mu}^*(\theta, \phi), \quad (26)$$

其中 $Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi)$ 为标准的球谐函数. 在本自洽计算中, 我们采用了文献[55]中的约定, 即对于 $\lambda > 2$, 取 $\alpha_{\lambda\mu} = 1$, 而对于 $\lambda \leq 2$, 因子 $\alpha_{\lambda\mu}$ 和 $Q_{\lambda\mu}$ 按表1给出. 注意, 在 $Q_{\lambda\mu}(\mathbf{r})$ 的定义中, 采用了球谐函数的复共轭形式. 这样的约定可以使因子 $\alpha_{\lambda\mu}$ 为实(即 $\alpha_{\lambda\mu} = \alpha_{\lambda, -\mu}$), 并且低阶 $Q_{\lambda\mu}(\mathbf{r})$ ($\lambda \leq 2$)可用坐标的简单多项式表示, 得到 $Q_{\lambda, -\mu}(\mathbf{r}) = (-1)^\mu Q_{\lambda\mu}^*(\mathbf{r})$. 在 $Q_{22}(\mathbf{r})$ 的表示中, 保留了一个 $\sqrt{3}$ 因子, 以保证 $Q_{22}(\mathbf{r})$ 的定义与Bohr-Mottelson形变参数的定义相一致:

$$\gamma = \arctan \frac{\langle Q_{22} \rangle}{\langle Q_{20} \rangle}. \quad (27)$$

形变参数 $\beta_{\lambda\mu}$ 可以由相应的多级矩得到:

$$\beta_{\lambda\mu} = \frac{4\pi}{3NR^\lambda} Q_{\lambda\mu},$$

其中, $R = r_0 A^{1/3}$ 为核半径, $r_0 = 1.2$ fm; N 为质子、中子或

表1 归一化因子 $\alpha_{\lambda\mu}$ 定义和对应的多级矩算符 $Q_{\lambda\mu}$

Table 1 Adopted definitions of the normalization factors $\alpha_{\lambda\mu}$ and the corresponding multipole moments $Q_{\lambda\mu}$

λ	μ	$\alpha_{\lambda\mu}$	$Q_{\lambda\mu}$
0	0	$\sqrt{4\pi}$	1
1	0	$\sqrt{4\pi/3}$	z
1	1	$-\sqrt{8\pi/3}$	$x - iy$
2	0	$\sqrt{16\pi/5}$	$2z^2 - x^2 - y^2$
2	1	$-\sqrt{8\pi/15}$	$zx - izy$
2	2	$\sqrt{32\pi/5}$	$\sqrt{3}(x^2 - y^2 - 2ixy)$

核子数.

研究结果表明, 仅考虑单一的集体自由度所得到的裂变位垒有时是不准确的^[9,56], 存在断点物理量的不连续问题^[57]. 本工作中, 我们考虑了 Q_{20} , Q_{22} , Q_{30} , Q_{40} 等约束, 同时固定 $Q_{10}=0$ 以使整个质心始终处于 $z=0$. 为了确定断点的位置, 还引入了颈部粒子数约束. 这里, 颈部粒子数约束通过高斯参数^[34]给出:

$$n_{\text{neck}} = \exp\left[-\left(\frac{z-z_{\text{neck}}}{a_N}\right)^2\right], \quad (28)$$

$$Q_0 = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(z) n_{\text{neck}} dz.$$

由于采用了约束 $Q_{10}=0$, z_{neck} 和 a_N 分别取为0和1 fm.

在考虑以上约束的基础上, CHFB势能面通过求解CHFB方程得到:

$$\delta\langle\phi|H - \sum_{\lambda\mu} L_{\lambda\mu} \hat{Q}_{\lambda\mu}|\phi\rangle = 0, \quad (29)$$

其中 $L_{\lambda\mu}$ 为多级($\lambda\mu$)拉格朗日参数. 在本工作中, 采用augmented Lagrangian method^[58-60], 定义CHFB总能量:

$$\begin{aligned} \varepsilon'(q) = & \varepsilon(q) - \sum_{\lambda\mu} L_{\lambda\mu} (\langle\hat{Q}_{\lambda\mu}\rangle - \bar{Q}_{\lambda\mu}) \\ & + \sum_{\lambda\mu} C_{\lambda\mu} (\langle\hat{Q}_{\lambda\mu}\rangle - \bar{Q}_{\lambda\mu})^2, \end{aligned} \quad (30)$$

其中, $\varepsilon(q)$ 为平均场能量; $C_{\lambda\mu}$ 为硬度系数, $\bar{Q}_{\lambda\mu}$ 为输入参数, 在迭代过程中保持不变; 拉格朗日参数 $L_{\lambda\mu}$ 在迭代过程中按下式逐次调整:

$$L_{\lambda\mu}^{(m+1)} = L_{\lambda\mu}^{(m)} - 2C_{\lambda\mu} (\langle\hat{Q}_{\lambda\mu}\rangle^{(m)} - \bar{Q}_{\lambda\mu}), \quad (31)$$

其中, $L_{\lambda\mu}^{(m)}$ 和 $\langle\hat{Q}_{\lambda\mu}\rangle^{(m)}$ 分别为第 m 次迭代的 $L_{\lambda\mu}$ 和 $\langle\hat{Q}_{\lambda\mu}\rangle$. 对于初次迭代, $L_{\lambda\mu}^{(m)} = 0$.

根据以上理论和方法, 建立了系统的基于Gogny有效核子-核子相互作用的形状约束的静态HFB和裂变动力学TDHFB计算程序(Gogny-TDHFB Code for Fission). 本程序采用消息传递接口(message passing interface, MPI)技术和优化设计, 以适应裂变势能和核多体动力学过程的大规模计算.

4 结果及讨论

利用以上框架, 进行裂变核在轴对称形变条件下的裂变势能曲线计算, 分析裂变核各种可能的裂变模式, 并为后续的动力学计算提供初始条件. 值得指出的

是, 能否给出铜系核的双峰裂变位垒通常是检验理论模型及其计算程序的基准^[61,62]. 考虑到已有丰富的实验^[63-66]和理论^[10,67-69]数据, 而且组态混合效应(configuration mixing effect)相对较弱^[70], ^{240}Pu 可以作为讨论核裂变的基准核.

核子-核子相互作用采用Gogny D1S有效相互作用参数集^[48,49]. 形变谐振子参数按 $\hbar\omega_0 = f \frac{41}{\sqrt{A}} \text{ MeV}$ 给出.

为了获得合理的HFB基态能量, 引入唯象参数 f , 其推荐值为 $f=1.2$ ^[71]. 同时, ω 各分量取为

$$\hbar\omega_0 = \hbar(\omega_x\omega_y\omega_z)^{1/3} = 7.92 \text{ MeV}, \quad (32)$$

$$\omega_x = \omega_y, \quad q = \frac{\omega_x}{\omega_z} = 1.43. \quad (33)$$

x , y 方向谐振子基函数空间限制在 $n_x+n_y \leq 7$, 格点间距 $s=0.91 \text{ fm}$, $-17.5 \leq x, y \leq 17.5 \text{ fm}$. z 方向限制在 $-20 \leq z \leq 20 \text{ fm}$ 范围.

4.1 约束HFB势能曲线

以 ^{240}Pu 为例, 进行轴对称形变条件下CHFB的计算, 得到了 ^{240}Pu 的裂变势能曲面, 如图1所示. 实线表示在约束条件 $Q_{30}=0$ 下的对称裂变路径, 虚线是考虑了 Q_{30} 之后的非对称裂变路径. 图2给出了 Q_{20} 取不同数值时对称裂变和非对称裂变的密度分布.

从图1和2可以看出, 本文的理论框架能合理地给出铜系核的双峰裂变位垒^[61,62]. ^{240}Pu 的基态位于

图1 (网络版彩色)轴对称形变条件下 ^{240}Pu 一维绝热势能曲线. 实线表示对称裂变路径, 虚线表示非对称裂变路径, 星点表示文献[50]的计算结果. 插图是非对称裂变情况下 Q_{20} - Q_{30} 关系. $1 \text{ b}=10^{-24} \text{ cm}^2$
Figure 1 (Color online) One-dimensional adiabatic potential energy curve of ^{240}Pu under the condition of axial symmetric deformation. The solid line and the dotted line represent the symmetric fission path and the asymmetric fission path, respectively. The star point represents the results in Ref. [50]. The inset figure shows the relation of Q_{20} - Q_{30} in the case of asymmetric fission. $1 \text{ b}=10^{-24} \text{ cm}^2$

图 2 (网络版彩色)在轴对称形变条件下, ^{240}Pu 对称裂变路径(左)和非对称裂变路径(右)在 $Q_{20}=30$ b (a1, a2), 100 b (b1, b2), 200 b (c1, c2), 300 b (d1, d2), 360 b (e1, e2), 370 b (f1, f2), 380 b (g1, g2), 400 b (h1, h2) 处的密度分布

Figure 2 (Color online) ^{240}Pu density distributions of the symmetric fission path (left) and the asymmetric fission path (right) at $Q_{20}=30$ b (a1, a2), 100 b (b1, b2), 200 b (c1, c2), 300 b (d1, d2), 360 b (e1, e2), 370 b (f1, f2), 380 b (g1, g2), 400 b (h1, h2) under the condition of axial symmetric deformation

$Q_{20}\approx 30$ b 处, 基态能量 $E_{\text{g.s.}}\approx -1794.8$ MeV; 内垒、外垒和裂变同质异能态与基态间能量的差值分别表示为 E_A 、 E_B 和 E_{II} , 其数值大小在表 2 给出。图 1 中的星点是 Hilaire 和 Girod^[50] 的计算结果, 在基态和第一位垒附近与本文计算结果基本一致。对于对称裂变, 在 $Q_{20}\approx 150\sim 350$ b 范围存在一段很长的平台, 并伴随着一

表 2 轴对称形变条件下, 几种 ^{240}Pu 裂变路径中第一位垒、第二位垒和同质异能态与基态间能量的差值 E_A 、 E_B 和 E_{II} 的大小 (单位: MeV)

Table 2 Differences between numerical values of the first barrier, second barrier, homogeneous power states and the numerical value of ground state E_A , E_B and E_{II} in several ^{240}Pu fission paths under the condition of axial symmetric deformation (unit: MeV)

裂变路径	E_A	E_B	E_{II}
对称裂变路径	13.0	10.3	3.1
非对称裂变路径	11.0	8.1	4.1
三轴对称裂变路径	8.5	10.0	3.1
三轴非对称裂变路径	8.4	7.5	3.1
实验 ^[10]	6.1 ± 0.3	6.0 ± 0.5	2.1 ± 0.6

个突然的下降。这一突然的下降表明了断点的位置^[72], 两个初生碎块之间的颈部核密度消失, 核子波函数在各自所属碎块中重新分布, 导致总结合能有一个突然的下降。对于对称裂变, 在 $Q_{20}\approx 150\sim 350$ b 范围出现的势能平台与相对论平均场的计算结果是一致的^[35], 但在文献^[34]中的 Skyrme HFB 计算结果中并没有出现。

对于非对称裂变, 在 Q_{20} 小于外垒处 Q_{20} 值的形变区域内, 除了内垒高度比对称裂变的内垒高度稍低外, 结果几乎是一致的。但在外垒之外, 裂变势能单调下降, 直至断点。这一结果与 HF+BCS 计算结果定性一致^[73,74]。

从图 1 和 2 还可以看出, 裂变核从基态到外垒之间, 对称和非对称裂变路径几乎是重叠的, 而质量的非对称性主要来自于裂变核翻越外垒之后的快速下降阶段。而且, 在 $Q_{20}>350$ b, 对称势能下降到低于非对称势能。因此, 在裂变核翻越外垒之后的快速下降阶段, 必然有剧烈的核子转移, 而且非绝热性起着主要作用, 需要从微观动力学上进行仔细分析。

从约束 Q_{20} , Q_{30} 计算得到的两条裂变路径可以看出, 断点应该位于 $Q_{20}=350\sim 400$ b 之间。为了确认这一点, 我们计算了不同 Q_{20} 处的颈部粒子数 Q_0 , 结果见表 3。可以看到, 在对称裂变路径 $Q_{20}=360\sim 370$ b 之间和非对称裂变 $Q_{20}=380\sim 390$ b 之间, Q_0 明显下降, 相比对称裂变, 非对称裂变点的骤降位置较为靠后。从图 2 中观察可知, 两条路径断点的位置基本相同。

研究表明^[18,24,75~80], 三轴形变效应对内垒有显著影响, 可以降低内垒高度几个 MeV。所以, 在上述对称裂变和非对称裂变两条裂变路径的基础上, 我们又进一步考虑了三轴四极自由度 Q_{22} 的影响, 结果如图 3 和 4 所

表 3 轴对称形变条件下, 对称裂变路径和非对称裂变路径在断点附近的 Q_0 值

Table 3 Q_0 values for symmetric and asymmetric fission paths near the scission point under the condition of axial symmetric deformation

$Q_{20}(b)$	$\eta_{\text{neck,sym}}$	$\eta_{\text{neck,asym}}$
350	1.1016	1.1407
360	0.9907	1.1382
370	0.2666	1.1283
380	0.0252	0.9623
390	0.0139	0.1614
400	0.0094	0.0312

示. 对于非对称裂变, 三轴形变明显降低了内垒的高度, 但对裂变同质异能态和下降部分影响甚微. 对于对称裂变, 三轴形变除了显著降低了内垒的高度外, 对平台部分也有明显降低, 而且把断点推向更大的 Q_{22} 形变. 这是一个新的理论结果, 在所考虑的极大 Q_{22} 形变范围内, 尚没有观察到断点的形成, Q_{22} 自由度的引入使得裂变核形状颈部明显伸长, 形成了一个棒状结构(图4). 裂变核的最终形态是否有分子态的结构问题^[81]需要从微观, 特别是动力学方面进行研究.

4.2 裂变核断点动力学过程

在裂变的发生过程中, 裂变核需要克服裂变位垒. 对于这一过程的描写, 人们通常采用绝热近似的方法.

图 3 (网络版彩色)轴对称形变条件下, ^{240}Pu —维绝热势能曲线. 对称裂变路径: $Q_{30}=0, Q_{22}=0$; 三轴对称裂变路径: $Q_{30}=0, Q_{22}\neq 0$; 非对称裂变路径: $Q_{30}\neq 0, Q_{22}=0$; 三轴非对称裂变路径: $Q_{30}\neq 0, Q_{22}\neq 0$

Figure 3 (Color online) One-dimensional adiabatic potential energy curve of ^{240}Pu under the condition of axial symmetric deformation. Symmetric fission path: $Q_{30}=0, Q_{22}=0$; triaxial symmetric path: $Q_{30}=0, Q_{22}\neq 0$; asymmetric fission path: $Q_{30}\neq 0, Q_{22}=0$; triaxial asymmetric path: $Q_{30}\neq 0, Q_{22}\neq 0$

绝热近似意味着核系统集体自由度的演化非常缓慢, 使得内禀单粒子自由度始终处于平衡态. 然而, 在翻越第二位垒接近断点的过程中, 核系统会加速运动, 引起非绝热效应, 因此绝热近似在裂变后期被打破^[21,38]. 非绝热效应对合理地描写碎块特征(诸如质量、电荷及激发能分布)十分重要.

因此, 与CHFB方法结合TDGCM^[22]不同, 本文把裂变过程分为两个阶段, 即从基态形状演化到外部裂变的位垒阶段, 及其伴随的颈部形成直到断裂及断后的动力学阶段. 考虑到第一阶段是一个相对缓慢过程, 对这一阶段用形状约束的HFB方法来描写, 而对于动力学阶段, 用TDHFB理论描写. 两个过程在鞍点和断点之间自洽连接. 而且, 绝热和非绝热过程基于相同的能量密度泛函, 不包含其他的针对具体过程的参数. 类似

图 4 (网络版彩色)三轴对称裂变路径(左)和三轴非对称裂变路径(右)在 $Q_{20}=30$ b(a1, a2), 60 b(b1, b2), 100 b(c1, c2), 150 b(d1, d2), 200 b(e1, e2), 300 b(f1, f2)时的密度分布

Figure 4 (Color online) Density distributions of triaxial symmetric fission path (left) and triaxial asymmetric fission path (right) at $Q_{20}=30$ b (a1, a2), 60 b (b1, b2), 100 b (c1, c2), 150 b (d1, d2), 200 b (e1, e2), 300 b (f1, f2)

的处理方法在文献[33,44,73]中也有采用,但其方法基于TDHF结合BCS理论,并采用了单粒子态占有数冻结近似,没有考虑对动力学的影响。

在本文的动力学计算中,在外鞍点和断点之间选择 $Q_{20}=200$ b作为起始点 $t=0$,时间步长 $\Delta t=0.3$ fm/c。图5给出了不同时刻的密度分布。可以看出,从颈部明显形成($t=600$ fm/c)到两碎块完全分离($t=900$ fm/c),经历了300 fm/c的时间。

图6给出了 ^{240}Pu 非对称裂变动力学过程中各种能量的演化。需要强调的是,对能在核断裂过程($t>300$ fm/c)中起着非常重要的作用:

$$E_{\text{pair}} = \frac{1}{4} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \bar{v}_{\alpha\beta\gamma\delta} \kappa_{\alpha\beta}^* \kappa_{\gamma\delta} \quad (34)$$

同样地,图7和8给出了在外鞍点和断点之间选择 $Q_{20}=200$ b作为起始点 $t=0$,时间步长 $\Delta t=0.3$ fm/c条件下,对称裂变动力学过程中各时刻的密度分布和各种能量的演化过程。与不对称裂变过程不同,对称裂变两碎块的断裂过程发生在 $t\sim 1200$ fm/c,裂变过程持续了更长时间。而且,对能在整个动力学过程中都起着重要作用。

需要指出,就平均场微观理论计算来说,动力学计算初始点的选择对最终裂变产物的性质有着很大的影响[33,73,74]。而且,不同理论方法[33,43,74,82,83]给出不同的鞍

图5 (网络版彩色) ^{240}Pu 非对称裂变 $t=0$ (a), 150(b), 300(c), 450(d), 600(e), 750(f), 900(g), 1050(h) fm/c时刻的密度分布

Figure 5 (Color online) Density distributions of ^{240}Pu at time $t=0$ (a), 150 (b), 300 (c), 450 (d), 600 (e), 750 (f), 900 (g), 1050 (h) fm/c of asymmetric fission

图6 (网络版彩色) ^{240}Pu 非对称裂变动力学过程中,质子动能(a)、中子动能(b)、质子高斯能(c)、中子高斯能(d)、系统L-S能(e)、密度依赖能(f)、库仑能(g)和对能(h)的演化

Figure 6 (Color online) Evolution of proton kinetic energy (a), neutron kinetic energy (b), proton gauss energy (c), neutron gauss energy (d), system L-S energy (e), density dependent energy (f), coulomb energy (g) and pair energy (h) in the process of asymmetric fission dynamics of ^{240}Pu

图7 (网络版彩色) ^{240}Pu 对称裂变 $t=0$ (a), 150(b), 300(c), 450(d), 600(e), 750(f), 900(g), 1050(h), 1200(i), 1350(j) fm/c时刻的密度分布

Figure 7 (Color online) Density distributions of ^{240}Pu at time $t=0$ (a), 150 (b), 300 (c), 450 (d), 600 (e), 750 (f), 900 (g), 1050 (h), 1200 (i), 1350 (j) fm/c of symmetric fission

图 8 (网络版彩色) ^{240}Pu 对称裂变动力学过程中, 质子动能(a)、中子动能(b)、质子高斯能(c)、中子高斯能(d)、系统 L-S 能(e)、密度依赖能(f)、库仑能(g)和对能(h)的演化

Figure 8 (Color online) Evolution of proton kinetic energy (a), neutron kinetic energy (b), proton gauss energy (c), neutron gauss energy (d), system L-S energy (e), density dependent energy (f), coulomb energy (g) and pair energy (h) in the process of asymmetric fission dynamics of ^{240}Pu

点到断点的裂变时间. 为了分析裂变过程的动力学效应, 本文中, 动力学计算的初始点选择在远离外裂变垒的位置($Q_{20}=200$ b). 对于非对称裂变, 裂变系统从这一一起始点到完全断裂经历了约 1000 fm/c 时间, 这一时间尺度应该是合理的^[33,43,74,82]. 从颈部明显形成, 到两碎片完全分离, 系统经历了约 300 fm/c 时间, 这一时间尺度与 TDHF 理论^[33,43]、TDHF+BCS 理论^[74] 和时间相关超流局域密度近似(time-dependent superfluid local density approximation, TDSLDA)理论^[83] 所给出的结果基本一致. 与绝热近似比较, 这一断裂时间很短, 不足以使裂变系统寻找到断点附近势能面的低点, 揭示出断裂过程中很强的非绝热效应.

为了分析裂变碎片的性质, 分别计算了静态和动力学非对称裂变变碎片的质量:

$$\begin{aligned} m_L^\tau &= \int d^3r \rho^\tau(\mathbf{r}) \theta(-z), \\ m_R^\tau &= \int d^3r \rho^\tau(\mathbf{r}) \theta(z). \end{aligned} \quad (35)$$

其中, $\tau=p, n$ 表示质子或中子, 下标 L 和 R 分别代表裂变产生的左子核和右子核, $\rho^\tau(\mathbf{r})$ 为质子或中子的密度:

表 4 轴对称形变条件下, CHFB 计算和 TDHFB 计算得到的裂变碎片粒子数

Table 4 The number of fission fragment particles of CHFB and TDHFB calculation under the condition of axial symmetric deformation

	N_L^p	N_L^n	N_R^p	N_R^n
CHFB 对称裂变	47.00	73.00	47.00	73.00
TDHFB 对称裂变	47.00	73.00	47.00	73.00
CHFB 非对称裂变	50.90	82.04	43.10	63.96
TDHFB 非对称裂变	52.31	82.82	41.69	63.18

$$\rho^\tau(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha\beta} \phi_\alpha^\tau \phi_\beta^{\tau*} \rho_{\alpha\beta}^\tau, \quad (36)$$

其中, $\rho_{\alpha\beta}^\tau$ 由式(6)得到.

表 4 给出了静态 CHFB 与动力学 TDHFB 计算得到的裂变碎片左子核质子数 N_L^p 、左子核中子数 N_L^n 、右子核质子数 N_R^p 、右子核中子数 N_R^n . 可以看到, 对于对称裂变, 无论是静态 CHFB 还是动力学 TDHFB, 得到的是相同的终态碎片 ^{120}Ag . 而对于非对称裂变, CHFB 得到 $^{240}\text{Pu} \rightarrow ^{132}\text{Sn} + ^{108}\text{Ru}$, TDHFB 得到 $^{240}\text{Pu} \rightarrow ^{135}\text{Te} + ^{105}\text{Mo}$. 这一结果是合理的, 因为 ^{132}Sn 是双幻核, 而动力学 TDHFB 计算结果往往与计算的初始条件(鞍点和断点之间选择的计算起始点)有关, 选择一系列起始点会给出一个质量、电荷的分布.

5 结论

作为非绝热动力学模型, TDHFB 理论可以从微观上揭示原子核裂变的微观机理, 预言未知的裂变事件和数据. 本文介绍了我们发展的三维 TDHFB 理论计算程序(Gogny-TDHFB Code for Fission), 以 ^{240}Pu 自发裂变为例, 计算了对称和非对称裂变势能曲线, 并分析了核裂变的动力学过程. 所得结果表明, 对能在核裂变过程, 特别是在断裂动力学过程中起着十分重要的作用.

而且, 断点动力学过程的分析研究对于理解裂变机制起着关键性的作用, 尚需更加深入的分析讨论. 微观上, 应该系统分析裂变核断裂前后的单粒子能级动力学, 特别是单粒子的非绝热激发机制、激发能演化等. 为了厘清非绝热机制, 有必要进一步发展密度(包括粒子密度和对张量)约束的 TDHFB 计算方法, 从而得到裂变的动力学路径和动力学势. 从对融合过程的分析来看, 在两碎片有重叠的过程中, 绝热势和动力学势

有着显著的区别. 相关工作已经在进行当中.

我们希望本文的理论方法可以为分析和理解裂变

的微观机制, 提高核数据的计算质量, 预言未知裂变事件提供有益的帮助.

参考文献

- 1 Krappe H J, Pomorski K. Theory of Nuclear Fission. Berlin: Springer, 2012
- 2 Bender M, Heenen P H, Reinhard P G. Self-consistent mean-field models for nuclear structure. *Rev Mod Phys*, 2003, 75: 121–180
- 3 Goriely S, Sida J L, Lemaître J F, et al. New fission fragment distributions and r-process origin of the rare-earth elements. *Phys Rev Lett*, 2013, 111: 242502
- 4 Hofmann S, Münzenberg G. The discovery of the heaviest elements. *Rev Mod Phys*, 2000, 72: 733–767
- 5 Morita K, Morimoto K, Kaji D, et al. Experiment on the synthesis of element 113 in the reaction $^{209}\text{Bi}(^{70}\text{Zn}, n)^{278}113$. *J Phys Soc Jpn*, 2004, 73: 2593–2596
- 6 Oganessian Y T, Utyonkov V K. Super-heavy element research. *Rep Prog Phys*, 2015, 78: 036301
- 7 Bernas M, Armbruster P, Benlliure J, et al. Fission-residues produced in the spallation reaction $^{238}\text{U} + p$ at 1 A GeV. *Nucl Phys A*, 2003, 725: 213–253
- 8 Bohr N, Wheeler J A. The mechanism of nuclear fission. *Phys Rev*, 1939, 56: 426–450
- 9 Möller P, Madland D G, Sierk A J, et al. Nuclear fission modes and fragment mass asymmetries in a five-dimensional deformation space. *Nature*, 2001, 409: 785–790
- 10 Moeller P, Sierk A J, Ichikawa T, et al. Heavy-element fission barriers. *Phys Rev C*, 2009, 79: 064304
- 11 Sobczewski A, Pomorski K. Description of structure and properties of superheavy nuclei. *Prog Particle Nucl Phys*, 2007, 58: 292–349
- 12 Fröbrich P, Gontchar I I. Langevin description of fusion, deep-inelastic collisions and heavy-ion-induced fission. *Phys Rep*, 1998, 292: 131–237
- 13 Abe Y, Ayik S, Reinhard P G, et al. On stochastic approaches of nuclear dynamics. *Phys Rep*, 1996, 275: 49–196
- 14 Liu Z H, Bao J D. Calculation of the evaporation residue cross sections for the synthesis of the superheavy element $Z=119$ via the $^{50}\text{Ti}+^{249}\text{Bk}$ hot fusion reaction. *Phys Rev C*, 2011, 84: 031602
- 15 Randrup J, Möller P. Brownian shape motion on five-dimensional potential-energy surfaces: Nuclear fission-fragment mass distributions. *Phys Rev Lett*, 2011, 106: 132503
- 16 Shen J J, Shen C W. Theoretical analysis of mass distribution of quasifission for ^{238}U -induced reactions. *Sci China-Phys Mech Astron*, 2014, 57: 453–457
- 17 Samyn M, Goriely S, Pearson J M. Further explorations of Skyrme-Hartree-Fock-Bogoliubov mass formulas. V. Extension to fission barriers. *Phys Rev C*, 2005, 72: 044316
- 18 Bürvenich T, Bender M, Maruhn J A, et al. Systematics of fission barriers in superheavy elements. *Phys Rev C*, 2004, 69: 014307
- 19 Karatzikos S, Afanasjev A V, Lalazissis G A, et al. The fission barriers in actinides and superheavy nuclei in covariant density functional theory. *Phys Lett B*, 2010, 689: 72–81
- 20 Abusara H, Afanasjev A V, Ring P. Fission barriers in actinides in covariant density functional theory: The role of triaxiality. *Phys Rev C*, 2010, 82: 044303
- 21 Dubray N, Goutte H, Delaroche J P. Structure properties of ^{226}Th and $^{256,258,260}\text{Fm}$ fission fragments: Mean-field analysis with the Gogny force. *Phys Rev C*, 2008, 77: 014310
- 22 Goutte H, Berger J F, Casoli P, et al. Microscopic approach of fission dynamics applied to fragment kinetic energy and mass distributions in ^{238}U . *Phys Rev C*, 2005, 71: 024316
- 23 Bonneau L. Fission modes of ^{256}Fm and ^{258}Fm in a microscopic approach. *Phys Rev C*, 2006, 74: 014301
- 24 Staszczak A, Baran A, Dobaczewski J, et al. Microscopic description of complex nuclear decay: Multimodal fission. *Phys Rev C*, 2009, 80: 014309
- 25 Pei J C, Nazarewicz W, Sheikh J A, et al. Fission barriers of compound superheavy nuclei. *Phys Rev Lett*, 2009, 102: 192501
- 26 Younes W, Gogny D. Nuclear scission and quantum localization. *Phys Rev Lett*, 2011, 107: 132501
- 27 Warda M, Egido J L. Fission half-lives of superheavy nuclei in a microscopic approach. *Phys Rev C*, 2012, 86: 014322
- 28 Abusara H, Afanasjev A V, Ring P. Fission barriers in covariant density functional theory: Extrapolation to superheavy nuclei. *Phys Rev C*, 2012, 85: 024314
- 29 Mirea M. Microscopic description of energy partition in fission fragments. *Phys Lett B*, 2012, 717: 252–256
- 30 Staszczak A, Baran A, Nazarewicz W. Spontaneous fission modes and lifetimes of superheavy elements in the nuclear density functional theory. *Phys Rev C*, 2013, 87: 024320
- 31 McDonnell J D, Nazarewicz W, Sheikh J A. Third minima in thorium and uranium isotopes in a self-consistent theory. *Phys Rev C*, 2013, 87: 054327

- 32 Sadhukhan J, Mazurek K, Baran A, et al. Spontaneous fission lifetimes from the minimization of self-consistent collective action. *Phys Rev C*, 2013, 88: 064314
- 33 Simenel C, Umar A S. Formation and dynamics of fission fragments. *Phys Rev C*, 2014, 89: 031601
- 34 Schunck N, Duke D, Carr H, et al. Description of induced nuclear fission with Skyrme energy functionals: Static potential energy surfaces and fission fragment properties. *Phys Rev C*, 2014, 90: 054305
- 35 Lu B N, Zhao E G, Zhou S G. Potential energy surfaces of actinide nuclei from a multidimensional constrained covariant density functional theory: Barrier heights and saddle point shapes. *Phys Rev C*, 2012, 85: 011301
- 36 Sakata F, Marumori T, Hashimoto Y, et al. Nonlinear dynamics of nuclear collective motion. *Prog Theor Phys Suppl*, 2001, 141: 1–111
- 37 Hinde D J, Hilscher D, Rossner H, et al. Neutron emission as a probe of fusion-fission and quasifission dynamics. *Phys Rev C*, 1992, 45: 1229–1259
- 38 Rizea M, Carjan N. Dynamical scission model. *Nucl Phys A*, 2013, 909: 50–68
- 39 Barranco F, Bertsch G, Broglia R, et al. Large-amplitude motion in superfluid Fermi droplets. *Nucl Phys A*, 1990, 512: 253–274
- 40 Bertsch G F. Large amplitude collective motion. *Nucl Phys A*, 1994, 574: 169–183
- 41 Bohr A, Mottelson B R, Pines D. Possible analogy between the excitation spectra of nuclei and those of the superconducting metallic state. *Phys Rev*, 1958, 110: 936–938
- 42 Bertsch G F, Bulgac A. Comment on “Spontaneous Fission: A Kinetic Approach”. *Phys Rev Lett*, 1997, 79: 3539
- 43 Negele J W, Koonin S E, Möller P, et al. Dynamics of induced fission. *Phys Rev C*, 1978, 17: 1098–1115
- 44 Scamps G, Lacroix D, Bertsch G F, et al. Pairing dynamics in particle transport. *Phys Rev C*, 2012, 85: 034328
- 45 Ring P, Schuck P. The Nuclear Many-Body Problem. Berlin: Springer-Verlag, 1980
- 46 Blaizot J P, Ripka G. Quantum Theory of Finite Many-Body Systems. Cambridge: MIT Press, 1985
- 47 Flocard H, Koonin S E, Weiss M S. Three-dimensional time-dependent Hartree-Fock calculations: Application to $^{16}\text{O}+^{16}\text{O}$ collisions. *Phys Rev C*, 1978, 17: 1682–1699
- 48 Gogny D. Simple separable expansions for calculating matrix elements of two-body local interactions with harmonic oscillator functions. *Nucl Phys A*, 1975, 237: 399–418
- 49 Dechargé J, Gogny D. Hartree-Fock-Bogolyubov calculations with the D1 effective interaction on spherical nuclei. *Phys Rev C*, 1980, 21: 1568–1593
- 50 Girod M, Grammaticos B. Triaxial Hartree-Fock-Bogolyubov calculations with D1 effective interaction. *Phys Rev C*, 1983, 27: 2317–2339
- 51 Younes W. Gaussian matrix elements in a cylindrical harmonic oscillator basis. *Comput Phys Commun*, 2009, 180: 1013–1040
- 52 Younes W, Gogny D. Microscopic calculation of ^{240}Pu scission with a finite-range effective force. *Phys Rev C*, 2009, 80: 054313
- 53 Baye D. The Lagrange-mesh method. *Phys Rep*, 2015, 565: 1–107
- 54 Hashimoto Y. Time-dependent Hartree-Fock-Bogolyubov calculations using a Lagrange mesh with the Gogny interaction. *Phys Rev C*, 2013, 88: 034307
- 55 Varshalovich D A, Moskalev A N, Khersonskii V K. Quantum Theory of Angular Momentum. Singapore: World Scientific, 1988
- 56 Mamdouh A, Pearson J M, Rayet M, et al. Large-scale fission-barrier calculations with the ETFSI method. *Nucl Phys A*, 1998, 644: 389–414
- 57 Dubray N, Regnier D. Numerical search of discontinuities in self-consistent potential energy surfaces. *Comput Phys Commun*, 2012, 183: 2035–2041
- 58 Hestenes M R. Multiplier and gradient methods. *J Optim Theor Appl*, 1969, 4: 303–320
- 59 Fletcher R. Optimization. New York: Academic Press, 1969. 283
- 60 Staszczak A, Stoitsov M, Baran A, et al. Augmented Lagrangian method for constrained nuclear density functional theory. *Eur Phys J A*, 2010, 46: 85–90
- 61 Stone J R, Reinhard P G. The Skyrme interaction in finite nuclei and nuclear matter. *Prog Particle Nucl Phys*, 2007, 58: 587–657
- 62 Bertsch G F, Loveland W, Nazarewicz W, et al. Benchmarking nuclear fission theory. *J Phys G-Nucl Part Phys*, 2015, 42: 077001
- 63 Thierens H, de Clercq A, Jacobs E, et al. Kinetic energy and fragment mass distributions for $^{240}\text{Pu}(\text{s.f.})$, $^{239}\text{Pu}(\text{nth,f})$, and $^{240}\text{Pu}(\gamma,\text{f})$. *Phys Rev C*, 1981, 23: 2104–2113
- 64 Wagemans C, Allaert E, Deruyter A, et al. Comparison of the energy and mass characteristics of the $^{239}\text{Pu}(\text{nth,f})$ and the $^{240}\text{Pu}(\text{sf})$ fragments. *Phys Rev C*, 1984, 30: 218–223
- 65 Toraskar J, Melkonian E. Spontaneous fission of ^{240}Pu : Comparison with the slow-neutron-induced-fission of ^{239}Pu . *Phys Rev C*, 1971, 4: 1391–1398
- 66 Watt D E, Bannister F J, Laidler J B, et al. Spontaneous fission half-life of ^{240}Pu . *Phys Rev*, 1962, 126: 264–265
- 67 Flocard H, Quentin P, Vautherin D, et al. Self-consistent calculation of the fission barrier of ^{240}Pu . *Nucl Phys A*, 1974, 231: 176–188
- 68 Strutinsky V M. Shell effects in nuclear masses and deformation energies. *Nucl Phys A*, 1967, 95: 420–442

- 69 Rodriguez-Guzmán R, Robledo L M. Microscopic description of fission in neutron-rich plutonium isotopes with the Gogny-D1M energy density functional. *Eur Phys J A*, 2014, 50: 142
- 70 Bender M, Heenen P H, Bonche P. Microscopic study of ^{240}Pu : Mean field and beyond. *Phys Rev C*, 2004, 70: 054304
- 71 Dudek J, Szymański Z, Werner T. Woods-Saxon potential parameters optimized to the high spin spectra in the lead region. *Phys Rev C*, 1981, 23: 920–925
- 72 Lemaître J F, Panebianco S, Sida J L, et al. New statistical scission-point model to predict fission fragment observables. *Phys Rev C*, 2015, 92: 034617
- 73 Scamps G, Simenel C, Lacroix D. Superfluid dynamics of ^{258}Fm fission. *Phys Rev C*, 2015, 92: 011602
- 74 Scamps G, Simenel C. Impact of pear-shaped fission fragments on mass-asymmetric fission in actinides. *Nature*, 2018, 564: 382–385
- 75 Möller P, Sierk A J, Ichikawa T, et al. Heavy-element fission barriers. *Phys Rev C*, 2009, 79: 064304
- 76 Larsson S E, Ragnarsson I, Nilsson S G. Fission barriers and the inclusion of axial asymmetry. *Phys Lett B*, 1972, 38: 269–273
- 77 Bender M, Rutz K, Reinhard P G, et al. Potential energy surfaces of superheavy nuclei. *Phys Rev C*, 1998, 58: 2126–2132
- 78 Staszczak A, Dobaczewski J, Nazarewicz W. Self-consistent study of fission barriers of even-even superheavy nuclei. In: Goutte H, Faust H, Fioni G, et al, eds. 3rd International Workshop on Nuclear Fission and Fission-Product Spectroscopy, AIP Conference Proceedings. New York: American Institute of Physics, 2005. 93–102
- 79 Delaroche J P, Girod M, Goutte H, et al. Structure properties of even-even actinides at normal and super deformed shapes analysed using the Gogny force. *Nucl Phys A*, 2006, 771: 103–168
- 80 Lu B N, Zhao J, Zhao E G, et al. Multidimensionally constrained relativistic mean field model and applications in actinide and transfermium nuclei. *Phys Scr*, 2014, 89: 054028
- 81 Umar A S, Maruhn J A, Itagaki N, et al. Microscopic study of the triple- α reaction. *Phys Rev Lett*, 2010, 104: 212503
- 82 Davies K T R, Sierk A J, Nix J R. Effect of viscosity on the dynamics of fission. *Phys Rev C*, 1976, 13: 2385–2403
- 83 Bulgac A, Magierski P, Roche K J, et al. Induced fission of ^{240}Pu within a real-time microscopic framework. *Phys Rev Lett*, 2016, 116: 122504

Summary for “Gogny力三维TDHFB理论与 ^{240}Pu 裂变动力学”

3D TDHFB theory with Gogny force and fission dynamics of ^{240}Pu

Liang Tong¹, Yukio Hashimoto² & Shiwei Yan^{1*}

¹ Department of Physics, Beijing Normal University, Beijing 100875, China;

² Center for Computational Sciences, University of Tsukuba, Tsukuba 305-8571, Japan

* Corresponding author, E-mail: yansw@bnu.edu.cn

Nuclear fission is one of the most complex processes in nuclear physics, involving a strong interplay between nuclear structure and dynamics, as well as various many-body correlations and fluctuation effects. Systematically theoretical and experimental research on the fission problems is of great significance to clarify the fission mechanism, reveal the complexity of low-energy nuclear dynamics, and test the nuclear model theory based on the nuclear many-body theory. However, despite the huge theoretical effort pursued by several generations of physicists, many crucial facets of this process are still not understood at a fundamental level, warranting further exploration of its dynamics. This is more so when viewed from the microscopic theoretical point of view.

In the subject of study on nuclear fission, scission dynamics represents one of the most challenging problems in many-body theory as it plays a crucial role for determining the main properties of fission fragments and the emitted light particles. In the scission and post-scission processes, the fragments can experience a rapid change in shape and thus trigger the non-adiabatic effects coming from couplings between collective and intrinsic degrees of freedom. Therefore, from microscopic point of view, a reasonable description of the entire fission process could be achieved with an adiabatic model describing the slow evolution across the barrier, followed by a non-adiabatic treatment of the scission and post-scission dynamics.

In this paper, with the aid of the nuclear mean-field model and Gogny effective nucleon-nucleon interaction, a three-dimensional Cartesian mesh code of time-dependent Hartree-Fock-Bogoliubov theory (Gogny-TDHFB Code for Fission) has been developed for solving the static and/or dynamic equations with isolated or periodic boundary conditions and no further symmetry assumptions. In contrast with the Skyrme HFB, the particle-hole channel and the particle-particle channel are treated on an equal footing in the HFB calculations with the Gogny interaction (Gogny HFB). The code consists of two parts: One is the constrained HFB for calculating the adiabatic fission potential energy surface in the multi-dimensional collective phase space, the other is TDHFB for studying the dynamical process of nuclear fission.

In order to describe the extremely large deformation of nuclei in the direction of fission, the basis functions in the spatial grid points of the Lagrange mesh are introduced with respect to the direction of the z -axis, and the deformation harmonic oscillator eigenfunctions are used as the basis functions in the (x, y) directions. In the calculation of multi-dimensional potential energy surfaces, the constraints are imposed on expectation values of the multi-pole moments Q_{lm} and the augmented Lagrangian method (ALM) is exploited for multi-constrained calculations. A parallel interface using the message passing interface (MPI) library has been implemented for large-scale calculations on massively parallel computers.

Under the help of Gogny-TDHFB Code for Fission and by mainly focusing on the scission process, various aspects including the nuclear fission processes, the multi-dimensional potential energy surface, the configuration of scission point, more importantly, the non-adiabatic dynamics in the course of deformation from saddle to scission and also in post-scission are microscopically investigated in order to make clarification on the fission mechanisms, the nature of scission and some other basic problems. As an example, the spontaneous fission process of ^{240}Pu has been studied. The results on the non-adiabatic dynamics in the course of deformation from saddle to scission and also in post-scission show that the pairing correlation plays crucial roles in the scission dynamics of nuclear fission.

nuclear fission, dynamics of scission, time-dependent Hartree-Fock-Bogoliubov theory, Gogny effective nucleon-nucleon interaction

doi: [10.1360/TB-2019-0863](https://doi.org/10.1360/TB-2019-0863)