

核裂变速率的解析解模型及计算

冯仁发 阜益忠

(中国科学院原子能研究所)

李君清

(中国科学院近代物理研究所)

摘要

本文利用福克-普朗克方程在谐振子位场中得到的解析解形式,类比于克拉麦(Kramers)早期提出的定态理论,给出了计算裂变速率的解析解模型计算公式。以Pu²⁴⁰为例对不同粘滞系数下的裂变宽度进行了计算,观察分析了裂变宽度随时间的变化,并与跃迁态方法和定态理论的结果进行了比较。

一、引言

目前,核裂变宽度的计算仍然都是用由平衡态理论得到的Bohr-Wheeler公式进行的。它建立在鞍点态和复合核态处于瞬时热力学平衡这一假设的基础上。对于一个有粘滞性的实际核系统来讲,这一假设是不能成立的。Kramers等的工作^[1,2]指出了这一点并在准稳态近似下求解了福克-普朗克方程。近来,用输运理论对裂变动力学过程进行严格的数值解工作正在展开并不断取得进展^[3-9],但这些工作一般计算量都较大,一时难以用于实际计算工作中去。而近期的工作^[6-7]证明Kramers在鞍点附近的定态解对计算衰变速率仍是有效的。但它不能描述趋向稳定的变化过程,而福克-普朗克方程在谐振子位情况下可有解析解。它有计算简单,物理图象清晰,有利于分析核参数的作用等优点。我们设想把定态解和解析解结合起来,建立一个计算裂变速率的解析解模型,用来分析裂变过程中的物理图象和各种核参数所起的作用,为严格求解F-P方程提供依据;并把裂变过程中的中子竞争考虑进来,计算出裂变率,在与实验结果进行比较的基础上,适当调整一些可变参数,使模型完善起来,以便应用到实际计算工作中去。

二、理论模型与计算公式

1. 福克-普朗克方程的解析解

把可裂变原子核的变形运动看作布朗粒子的扩散运动,把裂变坐标X和共轭速度v

作经典变量,在两维相空间中,几率密度 $W(x, v, t)$ 服从如下形式的福克-普朗克(简写为 F-P)方程:

$$\begin{aligned}\frac{\partial W(x, v, t)}{\partial t} = & -v \frac{\partial W(x, v, t)}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial v} \left[\left(\gamma v - \frac{K(x)}{m} \right) W(x, v, t) \right] \\ & + \frac{D}{m^2} \frac{\partial^2 W(x, v, t)}{\partial v^2},\end{aligned}\quad (1)$$

这里 γ 是粘滞系数, m 是惯性张量, 扩散系数 $D = \gamma m K T$, $K T$ 是核温度, 外力

$$K(x) = -\frac{\partial V(x)}{\partial x}.$$

当 $V(x)$ 取谐振子位形式时, 方程 (1) 可有解析解.

我们取位 $V(x)$ 为谐振子位阱:

$$V(x) = \frac{1}{2} m \omega_0^2 x^2, \quad (2)$$

初始分布取如下的高斯分布:

$$W(x, v, t=0) = N \exp \left[-\frac{x^2}{a_x^2} - \frac{v^2}{a_v^2} \right], \quad (3)$$

这里 N 为归一化系数, $a_x^2 = \hbar/m\omega_0$, $a_v^2 = \hbar\omega_0/m$ 而当把 (3) 式中的速度 v 换成相应的动量 P 时, 则 $a_P^2 = m\hbar\omega_0$, $a_x \cdot a_P = \hbar$ 这正好满足测不准关系.

在上述初始条件和谐振子位阱中求解 F-P 方程(1)可以得到如下形式的解析解:

$$W(x, v, t) = \frac{1}{2\pi\sigma\tau\sqrt{1-\rho^2}} \exp \left[-\frac{1}{2(1-\rho^2)} \left(\frac{x^2}{\sigma^2} + \frac{v^2}{\tau^2} - \frac{2\rho}{\sigma\tau} xv \right) \right], \quad (4)$$

其中系数 σ^2 , τ^2 , $\rho\sigma\tau$ 分别为物理量 x^2 , v^2 和 xv 的平均值.

$$\sigma^2 = \langle x^2 \rangle, \quad \tau^2 = \langle v^2 \rangle, \quad \rho\sigma\tau = \langle xv \rangle, \quad (5)$$

其表达式分别是:

$$\begin{aligned}\langle x^2 \rangle = & \frac{D}{\gamma m^2 \omega_0^2} \left[1 - e^{-\gamma t} \left(1 + \frac{\gamma^2}{2} S^2(\omega_1, t) + \gamma S(\omega_1, t) C(\omega_1, t) \right) \right] \\ & + e^{-\gamma t} \left\{ \left(\frac{1}{2} a_x^2 \right) \left[\left(\frac{\gamma^2}{4} + \omega_1^2 \right) S^2(\omega_1, t) + \gamma S(\omega_1, t) C(\omega_1, t) + 1 \right] \right. \\ & \left. + \left(\frac{1}{2} a_v^2 \right) S^2(\omega_1, t) \right\},\end{aligned}\quad (6)$$

$$\begin{aligned}\langle v^2 \rangle = & \frac{D}{\gamma m^2} \left[1 - e^{-\gamma t} \left(1 + \frac{\gamma^2}{2} S^2(\omega_1, t) - \gamma S(\omega_1, t) C(\omega_1, t) \right) \right] \\ & + e^{-\gamma t} \left\{ \left(\frac{1}{2} a_v^2 \right) \left[\left(\frac{\gamma^2}{4} + \omega_1^2 \right) S^2(\omega_1, t) - \gamma S(\omega_1, t) C(\omega_1, t) + 1 \right] \right. \\ & \left. + \left(\frac{1}{2} a_x^2 \right) \omega_0^4 S^2(\omega_1, t) \right\},\end{aligned}\quad (7)$$

$$\begin{aligned}\langle xv \rangle = & \frac{D}{m^2} e^{-\gamma t} S^2(\omega_1, t) \\ & - e^{-\gamma t} \left\{ \omega_0^2 \left(\frac{1}{2} a_x^2 \right) \times \left[\frac{\gamma}{2} S^2(\omega_1, t) + S(\omega_1, t) C(\omega_1, t) \right] \right\}\end{aligned}$$

$$+ \left(\frac{1}{2} a_v^2 \right) \left[\frac{\gamma}{2} S^2(\omega_1, t) - S(\omega_1, t) C(\omega_1, t) \right] \}, \quad (8)$$

式中 ω_1 和 $S(\omega_1, t)$, $C(\omega_1, t)$ 在不同粘滞系数 γ 时由下列关系式决定:

$$\omega_1 = \sqrt{\left| \frac{\gamma^2}{4} - \omega_0^2 \right|},$$

$$S(\omega_1, t) = \begin{cases} \sinh(\omega_1 t)/\omega_1 & \gamma > 2\omega_0 \\ t & \gamma = 2\omega_0 \\ \sin(\omega_1 t)/\omega_1 & \gamma < 2\omega_0, \end{cases} \quad (9)$$

$$C(\omega_1, t) = \begin{cases} \cosh(\omega_1 t) & \gamma > 2\omega_0 \\ 1 & \gamma = 2\omega_0 \\ \cos(\omega_1 t) & \gamma < 2\omega_0, \end{cases} \quad (10)$$

2. 克拉麦(Kramers)的定态解

Kramers 在他开拓性的工作中^[1], 利用布朗运动的原理研究了粒子越过位垒的逃逸问题。一般解这个问题是存在一定困难的, 但当考虑一个简单的情况, 即位垒高度比热运动能量大很多($V_F \gg KT$)这个条件下, 可以把粒子越过位垒的泄漏问题看作准稳态问题来处理。这时可认为在 A 点附近的粒子达到平衡分布 (Maxwell-Boltzmann), 而在整个 x 区域并未达到平衡分布, 而在鞍点 C 之外, 粒子密度比平衡值小得多。因此, 将有一个缓慢且稳定的粒子扩散流从位阱 A 越过垒 C 而到达 B 阵(见图 1). 则 Kramers 给出 A 点附近的粒子几率分布为:

$$W_{Kr.}(x, v) = C \exp[-m(v^2 + \omega_A^2 x^2)/2KT] \quad (11)$$

和鞍点 C 附近的几率分布为^[1-2]:

$$W_{Kr.}(x, v) = C [(a - \gamma)/2\pi q]^{1/2} e^{-V_F/KT} \cdot \exp\left[-\frac{mv^2}{2KT} + \frac{m\omega_C^2 X^2}{2KT}\right] \cdot \int_{-\infty}^{\xi} \exp[-(a - \gamma)\xi^2/2q] d\xi \quad (12)$$

这里

$$\begin{cases} X = x - x_C \\ \xi = v - aX, \end{cases} \quad \begin{cases} q = \gamma KT/m \\ a = \frac{\gamma}{2} + \left(\left(\frac{\gamma}{2} \right)^2 + \omega_C^2 \right)^{1/2}, \end{cases} \quad (13)$$

我们引入误差函数

$$\text{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt, \quad (14)$$

并令

$$A = (a - \gamma)m/2\gamma KT, \quad (15)$$

由公式 (12) 可以得到鞍点($X = 0$)的几率分布公式为:

$$W_{Kr.}(x = X_C, v) = C e^{-V_F/KT} \cdot \exp\left[-\frac{mv^2}{2KT}\right] \cdot \left[\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \text{erf}(A^{1/2}v) \right] \quad (16)$$

这里 C 为平衡分布的归一化系数。

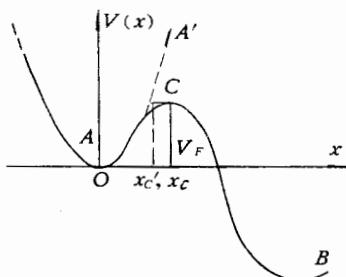


图1 光滑垒位场

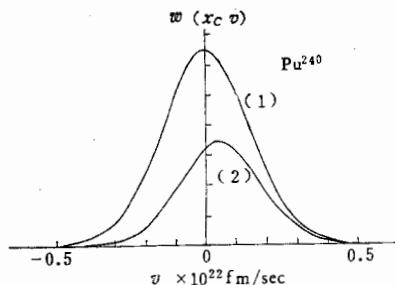


图2 鞍点上的粒子几率分布

(1) 平衡分布 (2) 定态分布

$$KT = 1.5 \text{ MeV} \quad m = 72 \text{ amu} \quad \hbar \omega_0 = 0.586 \text{ MeV} \quad \gamma = 2 \omega_0$$

我们可以看到由 Kramers 定态理论得到的鞍点上几率分布表达式(16)是由两部分组成的,一是鞍点上的平衡分布部分,另一部分是由误差函数构成的代数式

$$\left[\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \operatorname{erf}(A^{1/2}v) \right].$$

平衡分布不能提供鞍点上的裂变几率流,而误差函数的代数式的效果是改变鞍点上的几率分布函数,使正速度的粒子分布几率增加而使负速度的粒子分布几率减少(见图2)。这样就得到一个不随时间变化的稳定粒子衰变几率流,它只是裂变原子核的一些物理量(核温度 KT ,摩擦系数 γ ,扩散系数 D)的函数。

由定态分布(16)可得到衰变率^[1]为:

$$P_{K\gamma} = \frac{\omega_A}{2\pi\omega_C} \left[\left(\left(\frac{r}{2} \right)^2 + \omega_C^2 \right)^{1/2} - \frac{\gamma}{2} \right] e^{-V_F/KT}, \quad (17)$$

对粘滞性非常小($\gamma \leq \gamma_{cr}$)时, Kramers 给出衰变率公式为:

$$P_{K\gamma} = \gamma \frac{V_F}{KT} e^{-V_F/KT}, \quad (18)$$

临界粘滞性 γ_{cr} 为^[10]:

$$\gamma_{cr} = \frac{\omega_A}{2\pi \left(\frac{V_F}{KT} + \frac{\omega_A}{4\pi\omega_C} \right)}, \quad (19)$$

当 $V_F \gg KT$, ω_A 和 ω_C 相近时,由(18), (19)式可得

$$P_{K\gamma} (\gamma = \gamma_{cr}) \simeq \frac{\omega_A}{2\pi} e^{-V_F/KT}, \quad (20)$$

公式(20)的右边正是平衡态理论(跃迁态方法)的结果,这表明 Kramers 定态解的衰变率在临界粘滞性 γ_{cr} 处取极大值,它逼近跃迁态方法的结果。

3. 计算裂变速率的解析解模型

由第2节,我们知道在裂变位垒高度比热运动能量大很多($V_F \gg KT$)这个条件下,受位场 $V(x)$ 整个情况(见图1)的影响,从基态位阱 A 中一个给定的初始分布逐渐向一个稳定的分布发展,达到一个准稳定状态。Kramers 等着重研究了这个准稳态问题,给出

了基态位阱 A 点附近的几率分布(11)式和鞍点 C 附近的几率分布(12)式。但不能给出从初始分布($t = 0$)到准稳态分布($t = t_{st}$)这个随时间趋向稳定的发展过程。

那么从 $0 \rightarrow t_{st}$ 这一时间间隔中的变化是怎样的呢? 这是我们希望探求的问题。因为由平衡态理论(Bohr-Wheeler 公式)来计算核裂变速率时, 裂变宽度是与核的粘滞性无关的; 而用 Kramers 的定态理论来考虑时, 裂变宽度是随核的粘滞性变化的。但它只考虑了达到准稳态以后的情况, 未考虑趋向平衡这一段过程的影响, 而我们想把这一时间($0 \rightarrow t_{st}$)中的影响也考虑进来。当然严格来讲, 从 $0 \rightarrow t_{st}$ 这个趋向平衡过程中粒子几率分布的变化也是受整个位场影响的, 可以通过求解 F-P 方程(1)来得到。但由于严格求解 F-P 方程计算量比较大, 对于研究趋向平衡过程中的物理图象以及在实际计算裂变速率和计算核反应截面等方面比较复杂, 一时难以实现和应用。因此我们设想是否可以通过分析, 突出问题的主要方面, 采用模型近似来描述 $0 \rightarrow t_{st}$ 这个趋向平衡过程的变化, 使问题简化。

我们根据: 第一, 发展的初始阶段(即从基态位阱 A 中给定的一个初始分布, 发展到鞍点上有可观的几率流)主要是在基态位阱 A 中进行的。第二, 在初始时刻($t = 0$), A 点附近的分布是 δ 分布或某种高斯分布, 而达到准稳态($t = t_{st}$)时, Kramers 给出的准稳态解(11)是一个以 A 为原点的纯谐振子位阱 A' (频率为 ω_A)中的 Maxwell-Boltzmann 平衡分布。所以我们可以设想(就 A 点附近而言)从 $0 \rightarrow t_{st}$ 趋向平衡的变化服从谐振子位阱 A' 中的变化。这当然也是在 $V_F \gg KT$ 这个条件下的一种近似。第三, 鞍点 C 附近, 初始时刻几率分布为零。达到准稳态时(t_{st}), 由定态理论得到的几率分布为(16)式。它是一个与位场 $V(x)$ (位垒高度 V_F 及 C 点附近一个倒谐振子位阱 C 的频率 ω_C)及体系的物理性质(粘滞性 γ 、核温度 KT)有关的一个分布(如图 2 中的(2)), 它在鞍点上产生一个稳定的衰变几率流。但是可以看到(16)式右边前半部分 $C \cdot e^{-V_F/KT} \cdot \exp\left[-\frac{mv^2}{2KT}\right]$ 也是一个 Maxwell-Boltzmann 平衡分布。所以我们如果用谐振子位阱 A' 的福克-普朗克方程的解析解 $W(x_{C'}, v, t)$ 来代替(16)式中的平衡分布部分, 使它在鞍点处可给出分布几率为零($t = 0$), 达到准稳态($t = t_{st}$)时逼近到(16)式, 在 $t = 0 \rightarrow t_{st}$ 这个趋向平衡过程中的变化则服从这个新的分布函数(见(21)式)。

因此, 作为一种模型近似, 我们设想把 Kramers 的定态解和解析解 $W(x_{C'}, v, t)$ 结合起来则可以得到一个鞍点上新的几率分布函数, 它既能反映鞍点上粒子分布几率随时间的变化, 又能得到粒子衰变速率的定态值。我们用解析解的分布函数(公式(4))来替代定态解鞍点上的分布函数中的平衡分布部分, 得到一个解析解模型鞍点上新的分布函数是:

$$W'(x = x_C, v, t) = W(x = x_{C'}, v, t) \left[\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \operatorname{erf}(A^{1/2}v) \right] \quad (21)$$

则通过位垒的衰变速率为:

$$P' = \int_{-\infty}^{\infty} v W'(x_C, v, t) dv \quad (22)$$

为了把粘滞性很小时($\gamma \leq \gamma_c$)的情况包括进来, 引入一个修正因子 $[1 - \exp(-B(V_F/KT)\gamma)]^{1/2}$, 使衰变速率在粘滞性不很小时, 稳定到 Kramers 的定态值(公式(17)), 而当

粘滞性趋于零时,衰变速率趋于零。所以最后可以得到

$$P = [1 - \exp(-BV_F\gamma/KT)] \cdot \int_{-\infty}^{\infty} v W'(x_c, v, t) dv \quad (23)$$

这里 B 是以 ω_A 为单位的可调参数。则裂变宽度为:

$$\Gamma_f = \hbar P \quad (24)$$

我们可以用公式(23)来计算裂变速率随时间的变化,把裂变过程中的中子竞争考虑进来,则可计算原子核的裂变率,以便与实验结果进行比较。

三、计算结果与分析比较

我们以 Pu^{240} 为例进行了数值计算,参数值选取如下: 位垒 $V_F = 6$ MeV, 核温度 $KT = 1.5$ MeV, 惯性张量 $m = 72$ amu, 取 $\omega_A = \omega_c$ 且均为 $\hbar\omega_0 = 0.586$ MeV, 鞍点坐标 $x_c = 4.49$ fm, $B = 2\pi/\omega_0$, 粘滞系数取从非常小的值 (0.0001×10^{-22} sec $^{-1}$) 到很大的值 (10×10^{-22} sec $^{-1}$) 范围中的十五个点,其中包括 $\gamma = \gamma_c = 0.00347 \times 10^{-22}$ sec $^{-1}$ 和 $\gamma = \omega_0$, $\gamma = 2\omega_0$ 等。我们观察了不同粘滞系数下裂变速率随时间的变化,并且把稳定后的裂变速率与平衡态理论(跃迁态方法)的结果以及 Kramers 定态理论的结果进行了比较。

1. 裂变速率(或宽度)在不同粘滞系数下随时间 t 的变化规律是不同的。图 3 画出了在五种不同的粘滞系数下裂变宽度 Γ_f 随时间 t 的变化曲线。当粘滞系数 $\gamma < 2\omega_0$ 时,裂变宽度随时间的变化是振荡的,振荡周期随粘滞性减小而变短,粘滞性越小,振幅随时间衰减得越慢;而当 $\gamma > 2\omega_0$ 时,裂变宽度随时间 t 增加而单调上升,且粘滞性越大,裂变宽度上升得越慢。当时间 t 足够大时(理论上 t 应趋向于 ∞),无论粘滞性多大裂变宽度都将趋向于各自的稳定值。

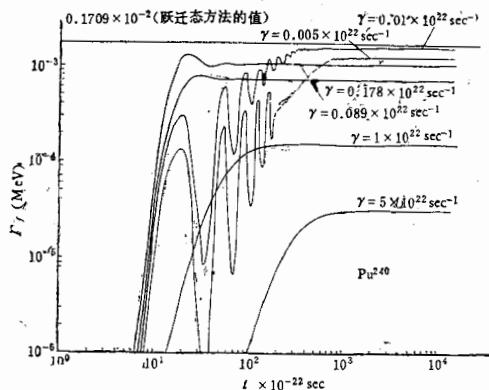


图 3 各种粘滞系数下裂变宽度 Γ_f 随时间 t 的变化曲线

$V_F = 6$ MeV $KT = 1.5$ MeV $\hbar\omega_0 = 0.586$ MeV

2. 裂变速率(或宽度)趋向稳定的速度也随粘滞性不同而不同。 $\gamma = 2\omega_0$ 时, 趋向稳定的时间最短; $\gamma < 2\omega_0$ 时, 趋向稳定的时间随粘滞性减小而增加;而 $\gamma > 2\omega_0$ 时, 趋向稳定的时间随粘滞性增加而增加。具体数值比较见表 1。

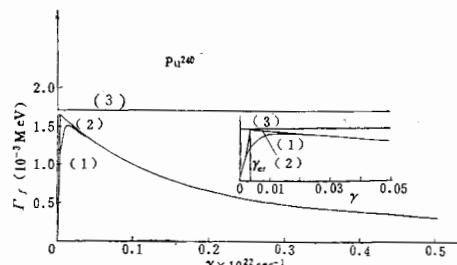
表1 各种粘滞系数 γ 下稳定时间 T_{st}^* 的值 单位: $\times 10^{22}\text{sec}^{-1}$, $T_{st}^* \times 10^{-22}\text{sec.}$ (τ)

γ	T_{st}	γ	T_{st}	γ	T_{st}
0.0001	10*	0.05	180	0.5	160
0.001	9000	0.089	100	1	250
0.00347	2000	0.1	90	2	550
0.005	1500	0.178	70	5	1200
0.01	800	0.25	100	10	4000

*: 稳定时间 T_{st} 定义为 $(\Gamma_f(\infty) - \Gamma_f(T_{st})) / \Gamma_f(\infty) < 0.1\%$.

我们知道一个体系的粘滞性是该体系集体运动自由度与单粒子自由度之间耦合程度的表征。粘滞性越大，单粒子态趋向热平衡越快。随着粘滞性的增加，速度方向上的扩散加快而坐标方向上的扩散变慢。而粒子分布几乎在坐标和速度两个方向上的扩散互相关联在一起决定了整个体系趋向平衡的过程。所以在单一谐振子位阱中，当粘滞系数 $\gamma = 0.178 \times 10^{22}\text{sec}^{-1}$ (即为 $2\omega_0$) 时，速度分布和坐标分布几乎同时达到稳定且所需时间 T_{st} 最短。当 $\gamma < 2\omega_0$ 时，虽然坐标方向的扩散随 γ 减小而加快，但速度方向的扩散却随 γ 减小而变慢，而速度方向的扩散又破坏了坐标方向的稳定，从而使裂变速率产生周期振荡而逐渐趋向稳定，使稳定时间随粘滞性减小而增加。在 $\gamma > 2\omega_0$ 时，速度方向的扩散随 γ 增加而加快，但由于坐标方向的扩散随 γ 增加而变慢，而使整个体系趋向稳定的时间随 γ 增加而增加。这也说明了，裂变过程中，复合核态与鞍点态之间并不能达到瞬时热力学平衡，而是有一个与体系的粘滞性等参数有关的趋向平衡的过程。

3. 裂变宽度稳定值与粘滞系数 γ 的关系。我们把平衡态理论(跃迁态方法)，Kramers 的定态理论和我们这里的解析解模型裂变速率计算公式(23)得到了裂变宽度稳定值随粘滞系数 γ 的变化曲线画在图4中。我们可以看到除很小的区域 ($\gamma < 0.03$) 外，解析解模型得到的结果与 Kramers 的定态结果是一致的，当 $\gamma \rightarrow 0$ 时，裂变宽度都趋近于零。而在 $\gamma < 0.03$ 这个小粘滞性范围内，我们的结果与文献[6]对 Kramers 的结果有类似的修正，即裂变宽度极大值比 Kramers 的结果略小且向粘滞性大的方向偏移。

图4 裂变宽度稳定值 Γ_f 随粘滞系数 γ 的变化曲线

(1) 解析解模型结果 (2) Kramers 定态解结果 (3) 跃迁态方法结果

$$V_F = 6\text{MeV} \quad KT = 1.5\text{MeV} \quad \hbar\omega_0 = 0.586\text{MeV}$$

考虑裂变过程中发射中子的竞争，核裂变几率的计算工作正在进行之中。我们设想在与实验结果比较的基础上，进一步完善模型，以发扬它计算简便、物理图象清晰的长处，

应用到核裂变研究和实际的计算工作中去。

参 考 文 献

- [1] H. A. Kramers, *Physica*, **7** (1940), 284.
- [2] S. Chandrasekhar, *Rev. Mod. Phys.*, **15** (1943), I.
- [3] P. Grange, H. C. Pauli and H. A. Weidenmuller, *Phys. Lett.*, **88B** (1979), 9; *Z. Physik*, **A296** (1980), 107.
- [4] K. Pomorski and H. Hofmann, *J. Physique*, **42** (1981), 381.
- [5] J. R. Nix and A. Sierk, to be published.
- [6] F. Scheuter and H. Hofmann, to be published.
- [7] H. Hofmann and J. R. Nix, to be published.
- [8] 吴锡真等,“高能物理与核物理”待发表。
- [9] 吴锡真,卓益忠,“高能物理与核物理”,**4**(1980), 113.
- [10] 卓益忠, J. R. Nix 的私人通讯
- [11] P. B. Visscher, *Phys. Rev., B* Vol. **13** (1976), 3272; Vol. **14** (1976), 347.

ANALYTICAL MODEL FOR THE CALCULATION OF FISSION RATE

FENG REN-FA ZHUO YI-ZHONG

(Institute of Atomic Energy, Academia Sinica)

LI JUN-QING

(Institute of Modern Physics, Academia Sinica)

ABSTRACT

Based on an analysis of Kramers' stationary solution, by means of the analytical solution of the Fokker-Planck equation in a harmonical potential, we propose a simple model for the calculation of the fission rates. As an example we compute the time evolution of the fission widths of Pu^{240} for various finite friction values and compared our results with the corresponding ones based on Kramers' formula for a large and small frictions and the transition state method.