



基于能量密度泛函理论研究对关联对原子核裂变过程的影响

宿阳 李泽宇 刘丽乐 陈永静 王小保

Investigation of the Impact of Pairing Correlations on the Nuclear Fission Process Based on the Energy Density Functional Theory

SU Yang, LI Zeyu, LIU Lile, CHEN Yongjing, WANG Xiaobao

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.11804/NuclPhysRev.41.2023CNPC84>

引用格式:

宿阳, 李泽宇, 刘丽乐, 陈永静, 王小保. 基于能量密度泛函理论研究对关联对原子核裂变过程的影响[J]. 原子核物理评论, 2024, 41(1):127–134. doi: 10.11804/NuclPhysRev.41.2023CNPC84

SU Yang, LI Zeyu, LIU Lile, CHEN Yongjing, WANG Xiaobao. Investigation of the Impact of Pairing Correlations on the Nuclear Fission Process Based on the Energy Density Functional Theory[J]. Nuclear Physics Review, 2024, 41(1):127–134. doi: 10.11804/NuclPhysRev.41.2023CNPC84

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

能量密度泛函中不同对关联处理方式对原子核形变描述影响的探讨

Effect of Different Pairing Correlations on the Description of Nuclear Deformations within Energy Density Functional Framework
原子核物理评论. 2020, 37(1): 26–33 <https://doi.org/10.11804/NuclPhysRev.37.2020006>

精确可解对力模型下锕系元素同位素的裂变势垒

Fission Barriers of Actinide Isotopes in the Exactly Solvable Pairing Model
原子核物理评论. 2023, 40(4): 502–510 <https://doi.org/10.11804/NuclPhysRev.40.2023013>

基于Bayesian神经网络评价核裂变产额分布

Evaluation of Fission Yields with Bayesian Neural Networks
原子核物理评论. 2020, 37(4): 918–923 <https://doi.org/10.11804/NuclPhysRev.37.2020027>

深度学习在核物理中的应用

Deep Learning for Nuclear Physics
原子核物理评论. 2020, 37(3): 720–726 <https://doi.org/10.11804/NuclPhysRev.37.2019CNPC41>

基于GEM工艺的裂变时间投影室中裂变碎片的讨论

Discussion on Fission Fragments in Fission Time Projection Chamber Based on GEM Detector
原子核物理评论. 2019, 36(2): 197–203 <https://doi.org/10.11804/NuclPhysRev.36.02.197>

超重核 ^{296}Og 的结构和 α 衰变

Structure and α Decay of Superheavy Nucleus ^{296}Og
原子核物理评论. 2023, 40(4): 511–518 <https://doi.org/10.11804/NuclPhysRev.40.2023059>

文章编号: 1007-4627(2024)01-0127-08

编辑推荐

基于能量密度泛函理论研究对关联对原子核裂变过程的影响

宿阳¹, 李泽宇¹, 刘丽乐¹, 陈永静¹, 王小保^{2,†}

(1. 中国原子能科学研究院核数据重点实验室, 中国核数据中心, 北京 102413;

2. 湖州师范学院理学院, 浙江湖州 313000)

摘要: 以²³⁹Pu的中子诱发裂变为例,系统研究了对力形式的不确定性以及对关联强度的不确定性对裂变可观测量的影响,从而揭示了对关联在裂变过程所起的作用。首先使用基于Skyrme有效核力的能量密度泛函理论(DFT)计算了²⁴⁰Pu二维形变空间中的静态裂变位能曲面,在Hartree-Fock-Bogoliubov(HFB)近似中分别使用了体积型、表面型及混合型对力,并测试了不同对力强度的影响;然后基于密度泛函的计算结果,进一步采用含时生成坐标(TDGCM)和高斯重叠近似(GOA)方法开展了²⁴⁰Pu裂变动力学计算。通过分析讨论了对力类型和对力强度变化对裂变过程中相关物理量的影响,发现对力强度的改变在原子核小形变、大形变区域均有明显影响,然而对力类型的改变主要在大形变区域会产生明显差异。原子核的大形变组态会对裂变动力学过程产生比较重要的影响。计算结果表明,不同的对力类型得到的大形变组态会有较为显著的差别,因而合适的对力类型的选取对裂变描述是比较重要的,混合对力在裂变计算中效果最佳。

关键词: 核裂变; 密度泛函理论; 对关联; 裂变位能曲面

中图分类号: O571.2

文献标志码: A

DOI: 10.11804/NuclPhysRev.41.2023CNPC84

0 引言

原子核裂变是指一个重原子核分裂为两个中等质量原子核同时放出2~3个中子的过程。自发现之初,核裂变对人类社会就产生了深刻影响,与国防、能源等关键应用领域紧密关联。从微观层面看,核裂变是原子核内所有核子平等参与的多维度量子力学空间的大振幅集体运动,其严格处理需要在核子-核子相互作用的层次上将裂变的各种现象统一起来理解^[1,2]。因此从微观角度去描述、理解裂变现象是一件非常困难的事,一直是核物理领域的难点问题。

近年来,随着各国超级计算机的发展,裂变微观理论在世界范围内复兴,特别是美国、德国、日本等发达国家,在裂变微观理论投入了很大力量,也取得了一系列重要成果。比如,国际上发展了时间相关超流局域密度近似(TDSLDA)算法^[3]、基于高斯重叠近似(GOA)的时间相关的生成坐标法(TDGCM)^[4]以及从微观理论出发的朗之万方程^[5]等来研究裂变动力学问题。

此外,近年来国内在微观裂变理论研究方面也取得

了较大进展,比如周善贵研究员、吕炳南研究员、李志攀教授、赵杰研究员等从协变密度泛函理论出发开展了多维位能曲面计算及裂变动力学研究^[6-10];裴俊琛教授团队基于时间依赖的HF+BCS开展了裂变动力学研究^[11];郭璐研究员基于时间依赖的HF框架下研究了熔合反应及准裂变动力学^[12],孟杰教授和赵鹏巍教授等发展了描述原子核裂变动力学过程的广义含时生成坐标方法(generalized TDGCM)^[13]等,这些工作从裂变后观测量的描述或裂变机制等角度对原子核裂变进行了研究,深化了人们对裂变机制的微观认知。

对关联对原子核裂变的影响文献中已有部分论述,如在文献^[14]讨论了对力强度的改变以及对力形式的改变,均对裂变位垒产生影响;文献^[15-16]中讨论了对力强度变化对裂变位垒、静态裂变路径的影响;文献^[7,17]讨论了对力强度变化对裂变动力学、裂变产额的影响;文献^[18]表明对力强度的改变对裂变发生的速度会产生影响,增强对力会让裂变加速;动态配对对关联对裂变过程的影响,可见文献^[11,19]。我们近些年也开展了基于密度泛函理论的裂变动力学的系统性研究,尤其是研

收稿日期: 2024-01-09; 修改日期: 2024-02-19

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(12275081); 稳定支持基础科研计划资助项目(BJ010261223282); 核数据重点实验室基金项目(JCKY2023201C153-6)

作者简介: 宿阳(1997-),男,山东高密人,研究实习生,硕士,从事粒子物理与原子核物理研究; E-mail: suyang_cndc@foxmail.com

† 通信作者: 王小保, E-mail: xbwang@zjhu.edu.cn

究了对关联对裂变静力学、裂变动力学的影响。比如,我们以中子诱发 ^{239}Pu 形成的复合核 ^{240}Pu 为例,采用零程的 Skyrme 力详细分析了对关联对 ^{240}Pu 裂变过程的影响^[20-23],包括对静态最优裂变路径、裂变位垒、对力能隙、质量张量以及裂变碎片质量和电荷分布等物理量的影响。本文将基于之前的工作,整理并回顾一下对关联在裂变相关可观测量的影响,从对力形式的不确定性和对力强度的不确定性两个角度具体阐述,从而更深入地理解对力对裂变描述的影响。

1 理论框架

在密度泛函理论中,对关联作为剩余相互作用中非常重要的一项,通常可以使用 Hartree-Fock-Bogoliubov(HFB) 方法进行处理。在基于 Skyrme 力的密度泛函理论框架中,通常使用的密度依赖的对力,形式如下式所示^[24]:

$$\hat{V}_{\text{pair}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = V_0^{(n,p)} \left[1 - \eta \frac{\rho(\mathbf{r})}{\rho_0} \right] \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (1)$$

其中: ρ_0 是内部核子的平均密度,通常取核物质的饱和密度 0.16 fm^{-3} 。 η 是对力类型混合系数,依据对 η 的选择,可以获得不同的配对类型。通常 $\eta = 0$ 为体积对力,是没有密度依赖的对力; $\eta = 1$ 为表面对力,意味着主要在原子核表面附近存在配对; $\eta = 0.5$ 表示混合对力,表示在原子核的内部及表面均有一定的概率配对。 $V_0^{(n)}$ 和 $V_0^{(p)}$ 分别是中子和质子的对力强度,不同对力类型下 $V_0^{(n)}$ 和 $V_0^{(p)}$ 是不同的,通过拟合奇-偶质量差的三点公式得到 ^{240}Pu 的经验对能隙来调整理论计算中所使用的对力强度。我们分析了不同对力类型对原子核裂变过程的影响,分别取 $\eta = 0, 0.5, 1$ 三种情况进行分析,从而可以阐明对力形式不确定度对裂变可观测量的影响。

此外,我们也对对力强度进行一定范围内的微调,分析对力强度的变化对裂变过程描述带来的影响。主要计划在给定混合对力情况下($\eta = 0.5$),研究对力强度改变($\pm 5\%$)对原子核裂变过程的影响,即质子和中子对力强度分别取 95%, 100%, 105% 进行分析。表 1 给出了不同对力类型 η 以及不同对力强度时的 $V_0^{(n)}$ 和 $V_0^{(p)}$ 值。

表 1 不同对力强度及对力类型下中子、质子对力强度

η	对力强度	$V_0^{(n)}/\text{MeV}$	$V_0^{(p)}/\text{MeV}$
0.0	100%	-172.20	-212.60
0.5	95%	-251.99	-323.06
0.5	100%	-265.25	-340.06
0.5	105%	-278.51	-357.06
1.0	100%	-475.20	-686.90

在低能情况下,核裂变可近似描述为一个由少量集体自由度决定的缓慢绝热过程,此时可以用含时生成坐标法(TDGCM)和高斯重叠近似(GOA)方法开展动力学研究。在绝热近似下原子核的内禀核子自由度与集体形变自由度脱耦合,因此计算可分为相对独立的两步。首先基于密度泛函理论采用约束平均场方法计算原子核在不同形变下的内禀组态,得到原子核的位能曲面、质量张量、剪裂线、碎片核子数等;然后基于平均场计算得到的位能曲面、集体参量构建四极-八极形变空间的含时类薛定谔方程,求解即可得到集体波函数的动力学演化及裂变产物分布等。关于方法的详细介绍参见文献^[1]。

裂变系统的多体波函数一般表示为以下形式:

$$|\Psi(t)\rangle = \int_{\mathbf{q}} f(\mathbf{q}, t) |\Phi(\mathbf{q})\rangle d\mathbf{q}, \quad (2)$$

其中: $|\Phi(\mathbf{q})\rangle$ 是由集体变量 \mathbf{q} 组成的多体波函数。在裂变研究中,通常选取四极矩 \hat{Q}_{20} 和八极矩 \hat{Q}_{30} 作为集体变量。 $f(\mathbf{q}, t)$ 是通过求解含时类薛定谔方程得到的权重函数。在高斯重叠近似下(GOA)下,类薛定谔方程可表示为

$$i\hbar \frac{\partial g(\mathbf{q}, t)}{\partial t} = \hat{H}_{\text{coll}}(\mathbf{q})g(\mathbf{q}, t), \quad (3)$$

集体哈密顿量 $\hat{H}_{\text{coll}}(\mathbf{q})$ 表示为

$$\hat{H}_{\text{coll}}(\mathbf{q}) = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_{ij} \frac{\partial}{\partial q_i} B_{ij}(\mathbf{q}) \frac{\partial}{\partial q_j} + V(\mathbf{q}), \quad (4)$$

其中: $B_{ij}(\mathbf{q})$ 为质量张量 $M(\mathbf{q})$ 的逆, $V(\mathbf{q})$ 为集体势能,由 Skyrme 密度泛函计算的位能曲面提供。 $g(\mathbf{q}, t)$ 是集体空间中的集体波函数,包含了裂变系统的全部动力学信息。

为了计算裂变碎片分布信息,还需要在位能曲面上定义剪裂线。剪裂线作为一个超曲面,将集体空间分为内、外两个区域。在内部区域,原子核保持为一个整体;而在外部区域,原子核分裂为两个碎片。统计一段时间内,剪裂线上某一面元处概率流通量为

$$F(\xi, t) = \int_{t=0}^t dt \int_{\mathbf{q} \in \xi} \mathbf{J}(\mathbf{q}, t) \cdot d\mathbf{S}, \quad (5)$$

其中概率流密度为

$$\mathbf{J}(\mathbf{q}, t) = \frac{\hbar}{2i} B(\mathbf{q}) [g^*(\mathbf{q}, t) \nabla g(\mathbf{q}, t) - g(\mathbf{q}, t) \nabla g^*(\mathbf{q}, t)]. \quad (6)$$

裂变碎片质量分布可以通过对概率流通量的积分计算得到:

$$Y(A) = C \sum_{\xi \in \mathcal{A}} \lim_{t \rightarrow +\infty} F(\xi, t), \quad (7)$$

其中： \mathcal{A} 是剪裂线上碎片质量数为 A 的全部线元集合； C 是归一化常数，用来保证碎片产额归一到 200%。

2 计算结果及分析

本工作计算 ^{240}Pu 位能曲面时，选取了四极矩 q_{20} 和八极矩 q_{30} 作为集体变量进行约束，形变空间 q_{20} 的范围是 $[0, 600 \text{ b}]$ ， q_{30} 的范围是 $[0, 60 \text{ b}^{3/2}]$ ，其变化步长分别为 $\Delta q_{20} = 2 \text{ b}$ 和 $\Delta q_{30} = 2 \text{ b}^{3/2}$ 。计算时 Skyrme 泛函参数采用裂变研究常用的 SkM* 参数 [25]。HFB 方法处理对关联时分别使用了体积型、表面型和混合型对力。另外，混合型对力时本工作还考虑了中子和质子对力强度改变 5% 时的影响。

图 1 展示了不同对力强度 (95%, 100%, 105%) 和不同对力类型下 ($\eta = 0, 0.5, 1.0$) 时 ^{240}Pu 在 (q_{20}, q_{30}) 空间的裂变位能曲面及静态最优裂变路径 (图中红线) 比较图。从图 1 可以看出，不同对力强度及不同对力类型下 ^{240}Pu 位能曲面的总体结构无明显变化，都有明显双峰裂变位垒结构，最优裂变路径均为不对称裂变；基态均出现在

$(q_{20}, q_{30}) \approx (30 \text{ b}, 0 \text{ b}^{3/2})$ 附近，把基态和同核异能态区分开的对称裂变内垒出现在 $(q_{20}, q_{30}) \approx (56 \text{ b}, 0 \text{ b}^{3/2})$ 附近；对称裂变外垒位于 $(q_{20}, q_{30}) \approx (150 \text{ b}, 0 \text{ b}^{3/2})$ 附近，其能量明显为局部极大，在其后面 $q_{20} > 200 \text{ b}$ 的区域形成对称裂变谷；非对称裂变位垒位于 $(q_{20}, q_{30}) \approx (125 \text{ b}, 8 \text{ b}^{3/2})$ 附近，其斜向上的区域为非对称裂变谷；对称裂变谷与非对称裂变谷中间由山脊状的结构 $[(q_{20}, q_{30}) \text{ 从 } (150 \text{ b}, 0 \text{ b}^{3/2}) \text{ 到 } (20 \text{ b}, 350 \text{ b}^{3/2})]$ 分开。根据裂变核拉长过程 (q_{20} 逐渐增大) 中能量下降最快的原则找出的静态最优裂变路径如图 1 红线所示，路径从基态出发，穿越对称裂变内垒来到同核异能态区域，绕开了能量较高的对称裂变外垒，翻越非对称裂变位垒后进入非对称裂变谷中，最终到达裂变剪裂线附近的区域。

不同对力强度及不同对力类型下， ^{240}Pu 对称裂变路径 (右列) 和静态最优裂变路径 (左列) 能量如图 2 所示。从图 2(a)、(c) 可以看出，不同对力强度对原子核裂变位垒的高度有着明显的影响，随着对力强度的增加，裂变内垒、对称裂变外垒及最优裂变路径上外垒的高度都在下降。然而，在越过裂变外垒的大形变区域，对称裂变路径上的原子核总能量受对力强度的影

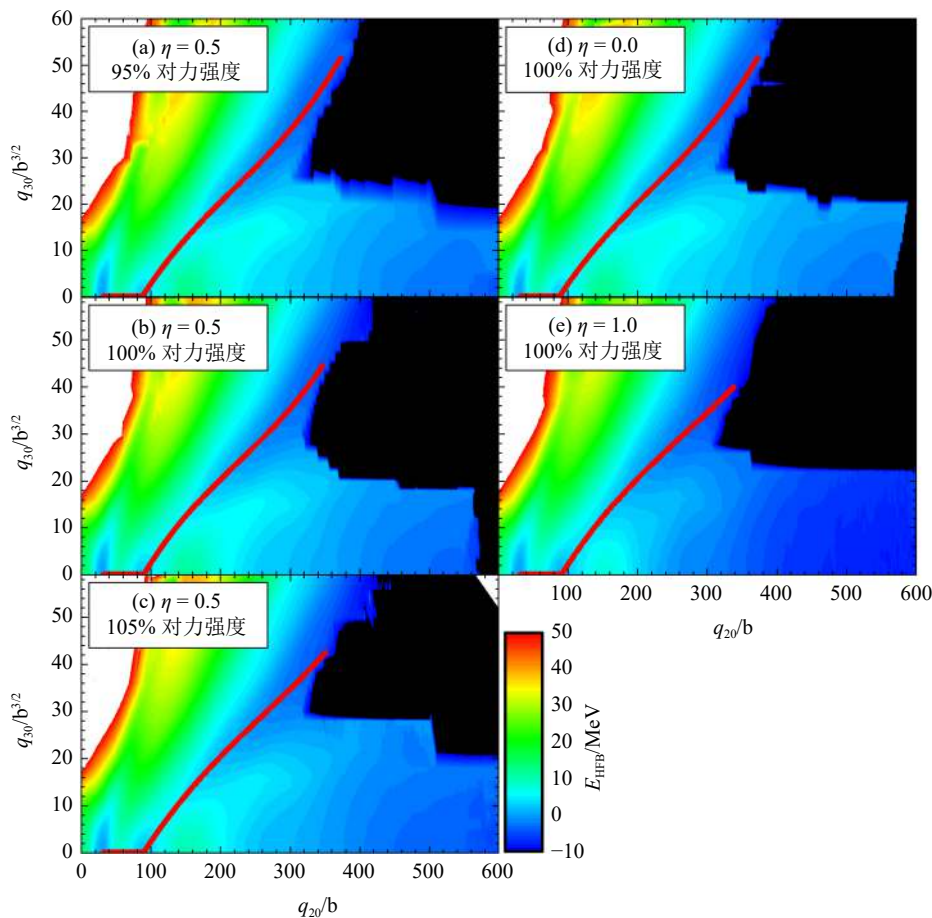


图 1 不同对力强度及不同对力类型的 ^{240}Pu 裂变位能曲面及静态最优裂变路径，相对于基态 (在线彩图)

响较大，对力强度改变 5% 使得能量近似等幅度地变化，但是在非对称裂变路径上(最优裂变路径)的能量改变量比较小。图 2(b)、(d) 展示了不同对力类型对两条裂变路径上能量的影响。对于体积对力和混合对力，也就是 $\eta = 0$ 和 0.5 时，能量变化差异不大，主要是在位垒附近可以看出差异。对力类型的改变，比对力强度改变 5% 的影响要小得多。但是当 $\eta = 1$ 时，也就是表面对力类型的情况下，在两条裂变路径上能量都有明显的下降，特别是在对称裂变道的大形变区域，差别非常明显，其影响效果明显比对力强度改变 5% 要大。

表 2 总结了不同对力强度和对力类型下，基态、同核异能态能量以及裂变内、外垒高度，并与实验值^[26-27]及模型计算推荐值^[28]的比较，并同时给出了每种状态

对应的四极矩和八极矩。由于本工作中使用的形变集体坐标空间未考虑裂变核的三轴形变，因此裂变位垒的高度会高于实验值，尤其是裂变内垒的高度。

图 3 是静态最优裂变路径上不同对力强度及不同对力类型的对力能隙。不同对力强度下，中子和质子的对能隙变化比较明显。对力强度的增大会使得中子和质子的对能隙在所有形变区域几乎等幅度增加，反之亦然。不同对力类型下，对力能隙在小形变区无明显区别，但是在原子核大形变处，表面对力($\eta = 1$)导致较大的能隙结构。

图 4 是不同对力强度和不同对力类型下得到的静态最优裂变路径上的质量张量 M_{22} 和 M_{33} (使用 ATDHF 方法计算) 分布。在裂变外垒之内，质量张量要明显高于更大形变区域，在小形变区域 M_{22} 较大且振荡明显，然后随着 q_{20} 的增大 M_{22} 逐渐减小然后平缓变化。与

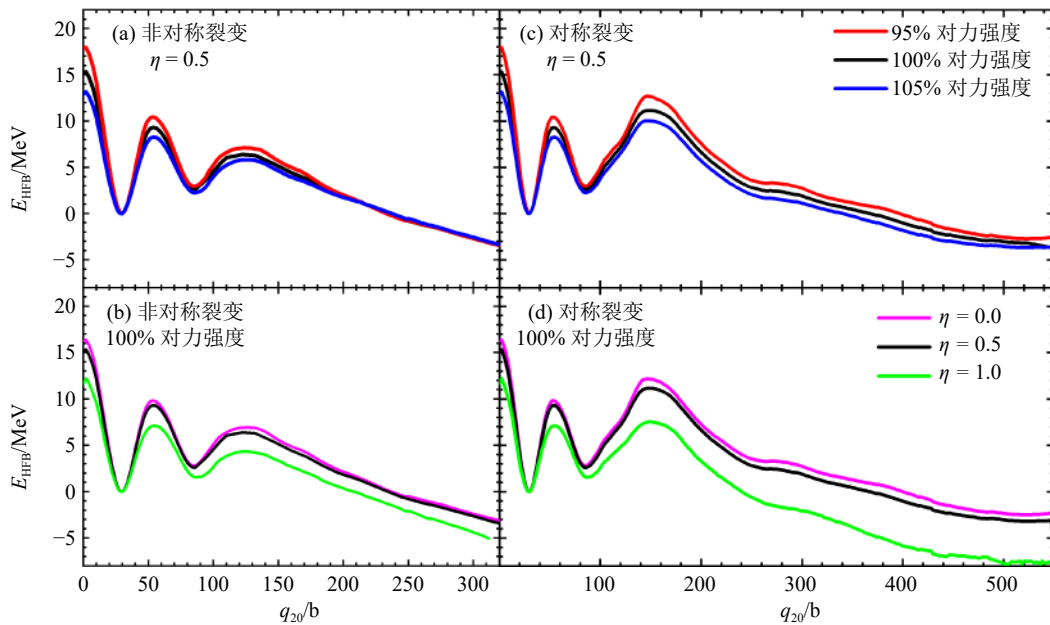


图 2 不同对力强度及不同对力类型下 ²⁴⁰Pu 对称裂变路径和静态最优裂变路径能量变化(在线彩图)

表 2 不同对力强度及对力类型 η 下，复合核 ²⁴⁰Pu 基态、同核异能态、裂变内垒及外垒的能量和在集体空间中的形变坐标

能量及形变信息	对力强度	η	基态	同核异能态	裂变内垒	裂变外垒
实验能量/MeV	-	-	-1813.45 ^[26]	2.8 ^[27]	6.05* ^[28]	5.15* ^[28]
理论能量/MeV	100%	0.0	-1 805.06	2.83	9.83	6.90
	95%	0.5	-1 804.62	2.96	10.43	7.12
	100%	0.5	-1 805.35	2.59	9.32	6.64
	105%	0.5	-1 806.39	2.24	8.29	5.84
形变坐标 ($q_{20}/b, q_{30}/b^{3/2}$)	100%	1.0	-1 806.44	1.55	7.12	4.36
	100%	0.0	(30,0)	(86,0)	(54,0)	(124,8)
	95%	0.5	(30,0)	(86,0)	(54,0)	(124,8)
	100%	0.5	(30,0)	(86,0)	(54,0)	(126,8)
	105%	0.5	(30,0)	(86,0)	(54,0)	(126,8)
100%	1.0	(30,0)	(86,0)	(54,0)	(124,8)	

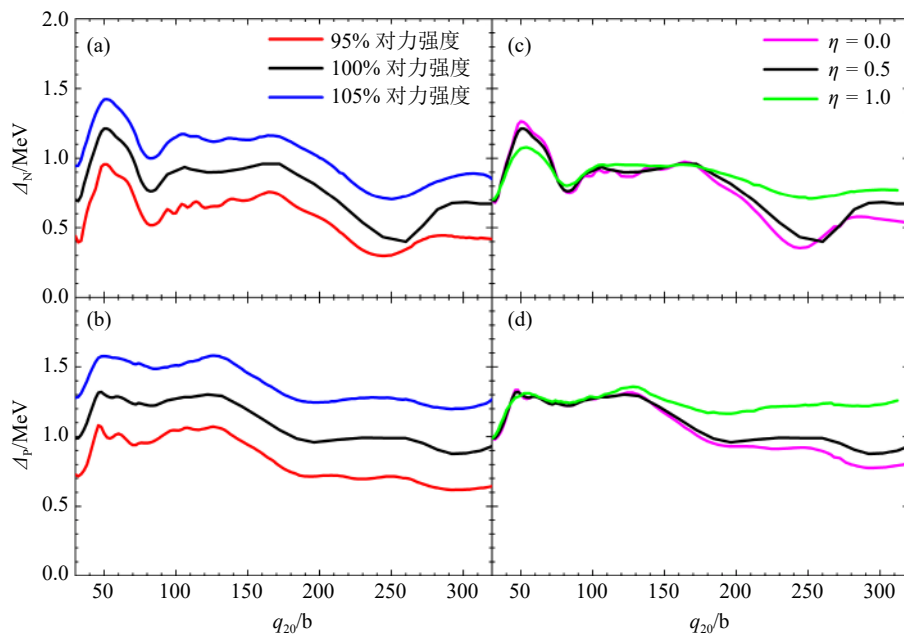


图 3 静态最优裂变路径上的对力能隙信息 (在线彩图)

图(a)、(b)分别为不同对力强度计算得到的中子、质子对力能隙；图(c)、(d)分别为不同类型对力对应的中子、质子对力能隙

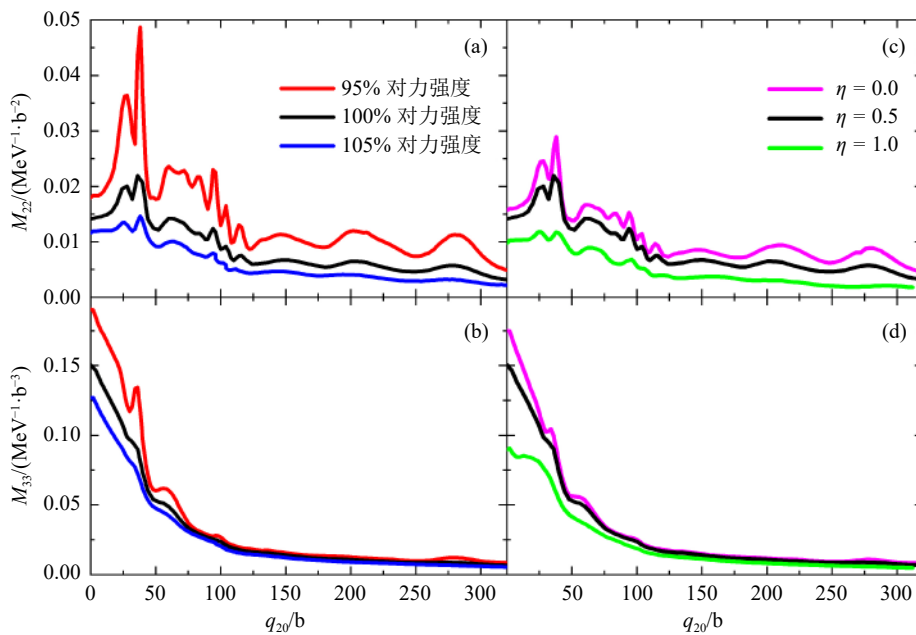


图 4 静态最优裂变路径上不同对力强度及对力类型计算的质量张量 M_{22} 和 M_{33} (在线彩图)

M_{22} 相比, M_{33} 在小形变区也是较大, 但是并没有明显的振荡, 随 q_{20} 增大 M_{33} 快速减小, 到 $q_{20} > 100$ b 时, M_{33} 变平滑, 且基本保持不变。

从图 4 中可以看出, 对力强度增大, 质量张量的涨落逐渐变小, 而对力强度的减少, 会使得质量张量的涨落变强。从图 4 中可以看到与混合对力 ($\eta = 0.5$) 相比, 体积对力 ($\eta = 0$) 计算的 M_{22} 较大且涨落明显, 但是涨落的幅度比对力强度减弱 5% 的幅度还是要小很多。然而, 表面对力 ($\eta = 1$) 计算的质量张量 M_{22} 的数值偏小,

且涨落较弱, 它的变化幅度比对力增强 5% 的情况要大。

图 5 是不同对力强度和不同对力类型下的裂变剪裁线及剪裁线上对应的重碎片质量。从图 5(a) 中可以看出, 在对力强度改变 5% 的情况下, 不同对力强度下剪裁线的位置没有产生太大的变化, 但是形状上产生了一些的改变, 尤其是 95% 对力强度下。同时可以从图 5(c) 中看出, 95% 对力强度下剪裁线上的重碎片质量分布明显有向 $A = 135$ 靠拢的趋势。图 5(b) 展示了不同对力类型

下的剪裂线位置，从中可以明显地看出，对于表面对力，即 $\eta = 1$ 时，剪裂线发生了明显的变化：在 q_{30} 较小的区域，剪裂线发生了明显的前移，其对应的 q_{20} 变小。 $\eta = 0$ 时，剪裂线上的重碎片质量分布也有着明显向 $A = 135$ 靠近的趋势。

图 6 是不同对力强度和不同对力类型时，TDGCM+GOA 框架下计算得到的重裂变碎片质量和电荷分布，并与实验数据 [29-31] 进行了比较。减弱强度之后的混合对力 (95% 对力强度) 以及体积对力 ($\eta = 0$) 的重裂变碎片质量分布在 $A = 135$ 左右的峰值有明显的增大，这是

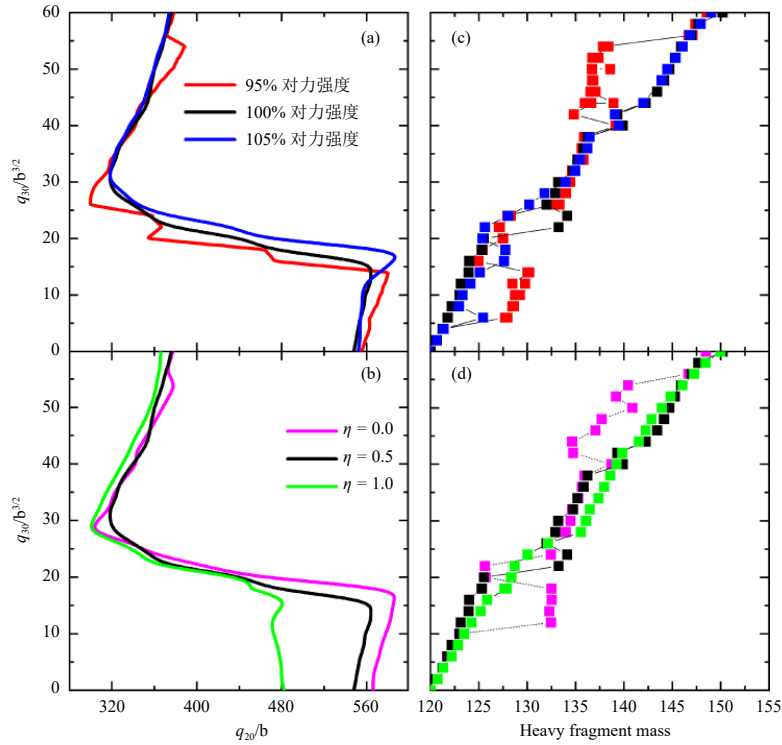


图 5 不同对力强度及对力类型下对应的剪裂线位置及剪裂线上重碎片质量分布信息 (在线彩图)

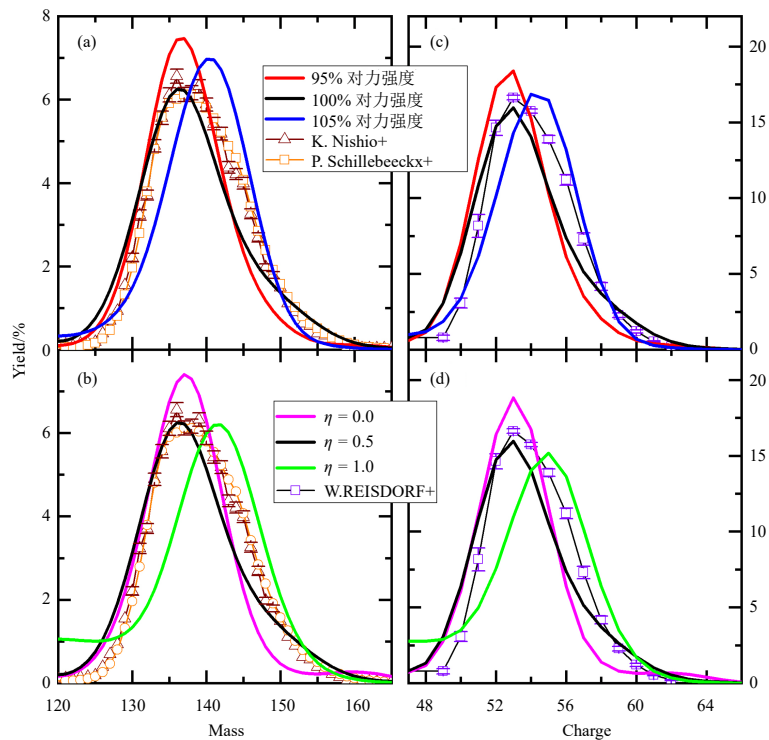


图 6 不同对力强度计算得到的裂变碎片质量和电荷产额分布 (在线彩图)

受到剪裂线上的重碎片质量分布向 $A = 135$ 靠拢的影响。然而，当对于表面对力，即 $\eta = 1$ 时，其质量分布中的对称成分 ($A = 120$) 明显增加，对称裂变发生的概率增加。当增强对力强度到 105% 时，剪裂线上的质量分布相比与 100% 的对力变化不大，但是由于质量张量在增强对力之后，在大形变组态时变化十分平滑，这导致裂变的主要驱动力可能由势能部分做主导，而根据之前静态位能面的计算，我们可以发现，静态的最优裂变路径的终点对应的重裂变碎片是 $A_H = 140$ ，这正是裂变动力学计算中 105% 对应的峰。此外，我们也可以发现在增强对力之后，对称裂变道和非对称裂变道的势能分别都有所下降，但是对称裂变道下降的幅度更大，这也会导致一定程度上对称裂变道的竞争力变强。我们除了可以观察到 105% 由明显的非对称裂变分布的峰之外，还可以看到对称裂变分布的附近 ($A = 120$)，增强对力之后，其相应的产额也有一定程度的增强。从图 6 中可以看出对力类型为混合对力 ($\eta = 0.5$) 时，且选用适当的对力强度时 (100% 对力强度)，裂变产额分布与实验值最为贴近。

3 总结

本工作以中子入射 ^{239}Pu 形成的复合核 ^{240}Pu 为例，在 Skyrme 有效核力的能量密度泛函理论 (DFT) 的框架下并基于 Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB) 近似，研究了对力的不确定度对裂变可观测量的影响，主要通过改变对力的强度以及使用不同的对力类型两个角度来进行研究。

首先分析了在不同对力类型、对力强度情况下 ^{240}Pu 的静态位能面的情况，主要基于四极和八极矩约束的集体空间位能曲面。对力强度的改变对裂变内垒及外垒的高度均有较大影响：当对力强度减弱时，裂变位垒的高度增加；当对力强度增强时，裂变位垒的高度减小。在使用不同的对力类型时，体积对力和混合型对力的位垒高度接近，其中体积对力给出的位垒高度略高。然而，使用表面对力时，位垒高度有较大幅度的降低，超过了对力强度增强 5% 的效果，对称裂变路径及静态最优裂变路径上的能量影响比较明显。对力强度及对力类型的改变对裂变核基态、同质异能态及裂变位垒处的形变影响不明显。

静态裂变路径上的对力能隙计算结果表明，对力强度的改变会影响中子及质子对力能隙的大小。当对力强度增强时，对力能隙将增大，反之将减小。不同的对力类型在小形变区域，对能隙的差异几乎可以忽略。然而，在大形变区，对力类型对对能隙的影响比较大，尤其是，

表面型对力与其它类型的对力差别明显，会导致在大形变区域较大的对能隙。质量张量 M_{22} 受对力强度的影响较为明显，其变化主要集中在小形变区的振荡结构和大形变区平滑结构。质量张量 M_{33} 受对力强度改变的影响主要是小形变区较大，大形变区基本保持不变。

根据复合核 ^{240}Pu 裂变位能面信息，基于含时生成坐标法 (TDGCM) 和高斯重叠近似 (GOA) 计算了裂变碎片质量和电荷分布。结果表明，对力强度的变化、对力形式的变化，均会对裂变碎片的质量及电荷分布产生明显影响。混合型对力 ($\eta = 0.5$) 计算得到的碎片质量及电荷分布与实验结果符合较好。使用体积对力的结果，与将混合对力的强度减弱 5% 的效果差不多，都使得最后的裂变产额更加集中在非对称裂变峰附近。然而使用表面对力，不仅使得产额的峰值位置相对于实验的峰值有较为明显的偏离，而且对称裂变发生的概率也会有一定的提升，与实验结果有一定偏离。

综上所述，我们发现表面型对力可能不大适合用于裂变相关物理量的描述，它的计算结果，在小形变区域与使用了增强对力强度之后的混合对力的结果类似，但是在在大形变区域与使用其它对力类型有较大的偏差，也大于增强对力强度 5% 的结果，而且它的碎片质量分布与电荷分布的峰位与实验有明显的差异。另外，我们的计算表明，当研究裂变过程相关问题时，使用混合型对力 ($\eta = 0.5$) 且有合适的对力强度是更好的选择。

参考文献：

- [1] SCHUNCK N, ROBLEDO L M. *Rep Prog Phys*, 2016, 79: 116301.
- [2] BENDER M, BERNARD R, BERTSCH G, et al. *Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics*, 2020, 47(11): 113002.
- [3] BULGAC A, MAGIERSKI P, ROCHE K J, et al. *Phys Rev Lett*, 2016, 116: 122504.
- [4] REGNIER D, DUBRAY N, VERRIÈRE M, et al. *Computer Physics Communications*, 2018, 225: 180.
- [5] SADHUKHAN J, NAZAREWICZ W, SCHUNCK N. *Phys Rev C*, 2016, 93: 011304.
- [6] LU B N, ZHAO E G, ZHOU S G. *Phys Rev C*, 2012, 85: 011301.
- [7] TAO H, ZHAO J, LI Z P, et al. *Phys Rev C*, 2017, 96: 024319.
- [8] ZHAO J, NIKŠIĆ T, VRETENAR D, et al. *Phys Rev C*, 2019, 99: 014618.
- [9] LI Z, CHEN S, CHEN Y, et al. *Phys Rev C*, 2022, 106: 024307.
- [10] ZHOU M H, LI Z Y, CHEN S Y, et al. *Chin Phys C*, 2023, 47(6): 064106.
- [11] QIANG Y, PEI J C, STEVENSON P D. *Phys Rev C*, 2021, 103: L031304.
- [12] GUO L, SHEN C, YU C, et al. *Phys Rev C*, 2018, 98: 064609.
- [13] LI B, VRETENAR D, NIKŠIĆ T, et al. *Frontiers of Physics*, 2024, 19(4): 44201.
- [14] KARATZIKOS S, AFANASJEV A, LALAZISSIS G, et al. *Phys Lett B*, 2010, 689(2): 72.

- [15] GIULIANI S A, ROBLEDO L M. *Phys Rev C*, 2013, 88: 054325.
- [16] SCHUNCK N, DUKE D, CARR H, et al. *Phys Rev C*, 2014, 90: 054305.
- [17] GUAN X, WANG T C, JIANG W Q, et al. *Phys Rev C*, 2023, 107: 034307.
- [18] BULGAC A, JIN S, ROCHE K J, et al. *Phys Rev C*, 2019, 100: 034615.
- [19] ZHAO J, NIK T, VRETENAR D. *Phys Rev C*, 2021, 104: 044612.
- [20] CHEN Y J, SU Y, DONG G, et al. *Chin Phys C*, 2022, 46(2): 024103.
- [21] CHEN Y J, SU Y, LIU L L, et al. *Chin Phys C*, 2023, 47(5): 054103.
- [22] WANG X B, CHEN Y, DONG G X, et al. *Phys Rev C*, 2023, 108: 034306.
- [23] SU Y, LI Z Y, LIU L L, et al. *Nucl Sci Tech*, 2024, 35: 62.
- [24] DOBACZEWSKI J, NAZAREWICZ W, STOITSOV M. *Eur Phys J A*, 2002, 15: 21.
- [25] BARTEL J, QUENTIN P, BRACK M, et al. *Nuclear Physics A*, 1982, 386(1): 79.
- [26] WANG M, HUANG W, KONDEV F, et al. *Chin Phys C*, 2021, 45(3): 030003.
- [27] SINGH B, ZYWINA R, FIRESTONE R B. *Nuclear Data Sheets*, 2002, 97(2): 241.
- [28] CAPOTE R, HERMAN M, OBLOŽINSKÝ P, et al. *Nuclear Data Sheets*, 2009, 110(12): 3107.
- [29] SCHILLEBEECKX P, WAGEMANS C, DERUYTTER A, et al. *Nuclear Physics A*, 1992, 545(3): 623.
- [30] KATSUHISA N I K, YOSHIHIRO N, KIMURA I. *Journal of Nuclear Science and Technology*, 1995, 32(5): 404.
- [31] REISDORF W, UNIK J, GRIFFIN H, et al. *Nuclear Physics A*, 1971, 177(2): 337.

Investigation of the Impact of Pairing Correlations on the Nuclear Fission Process Based on the Energy Density Functional Theory

SU Yang¹, LI Zeyu¹, LIU Lile¹, CHEN Yongjing¹, WANG Xiaobao^{2,†}

(1. China Nuclear Data Center, China Institute of Atomic Energy, Beijing 102413, China;

2. School of Science, Huzhou University, Huzhou 313000, Zhejiang, China)

Abstract: This study systematically investigates the impacts of uncertainties in the form and the strength of the pairing force on observables related to nuclear fission, taking the neutron-induced fission of ^{239}Pu as an example, thereby revealing the role of pairing in the fission process. The energy density functional theory (DFT) based on the Skyrme force was employed to calculate the potential energy surface in the two-dimensional deformation space of ^{240}Pu , using volume, surface, and mixed pairing forces within the Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB) approximation. And we also test the effects of varying pairing strengths for the mixed pairing force. Subsequently, based on the DFT calculations, the fission dynamics of ^{240}Pu were further studied using the Time-Dependent Generator Coordinate Method (TDGCM) plus the Gaussian Overlap Approximation (GOA). By analyzing the influence of varying the types or the strength of the pairing force on fission related properties, we found that variation in the pairing strength significantly affect both small and large deformation regions. However, alterations in pairing force type primarily cause notable differences in the large deformation region. The configurations at large deformation in the nucleus have significant impacts on the fission dynamics. Our results show that there are explicit differences in the configurations at large deformations obtained by different types of pairing force, so the choice of pairing force is very important for the fission description. The mixed-type of pairing force gives the best results in the calculation of fission dynamics.

Key words: nuclear fission; density functional theory; pairing correlation; fission potential energy surface

Received date: 09 Jan. 2024; Revised date: 19 Feb. 2024

Foundation item: National Natural Science Foundation of China (12275081); Continuous-Support Basic Scientific Research Project (BJ010261223282); Key Laboratory of Nuclear Data foundation (JCKY2023201C153-6)

† Corresponding author: WANG Xiaobao, E-mail: xbwang@zjhu.edu.cn