

© А. Л. ЛИТНЕВСКИЙ

Омский государственный технический университет
a_lit@list.ru

УДК 539.173(04)

**ВЗАИМОСВЯЗЬ РАВНОВЕСНЫХ РАСПРЕДЕЛЕНИЙ
ВОЗБУЖДЕННЫХ ЯДЕР ПО ДЕФОРМАЦИОННОЙ
КООРДИНАТЕ И ИХ СКОРОСТИ ДЕЛЕНИЯ В СЛУЧАЕ
ИСПОЛЬЗОВАНИЯ КАНОНИЧЕСКОГО АНСАМБЛЯ**

**RELATIONSHIP OF EQUILIBRIUM DISTRIBUTIONS
OF EXCITED NUCLEI IN DEFORMATION COORDINATE AND THEIR
FISSION RATE IN THE CASE OF CANONICAL ENSEMBLE**

Классические формулы Крамерса для скорости деления возбужденных ядер широко используются при комбинированном моделировании этого процесса. В научной литературе имеются данные о том, что при использовании этих формул возможно возникновение неконтролируемых погрешностей скорости деления, величина которых может достигать 20% и даже более. В настоящей работе проанализирована взаимосвязь скорости деления ядер с их равновесным распределением по деформационной координате. На основании результатов проведенного анализа предлагается поправка к формулам Крамерса, позволяющая для ряда коллективных потенциалов значительно снизить погрешность аналитически рассчитываемой скорости деления в случае применения в модели деления канонического ансамбля. Применение предлагаемой методики для согласования крамерсовой скорости деления с динамической квазистационарной даст возможность заметно снизить погрешности комбинированного моделирования деления ядер.

Classical Kramers formulas for fission rate of excited nuclei are widely used in the combined modeling of this process. In the scientific literature there is evidence that when using these formulas, the fission rate can have uncontrolled errors, the size of which can reach 20% or even more. In this paper the relationship between the fission rate of the nuclei and their equilibrium distribution in the deformation coordinate is analyzed. Based on the results of the analysis performed, a correction to Kramers formulas that allows to reduce significantly the error of analytically calculated fission rate for some collective potentials is introduced. The case of using the canonical ensemble in the model of fission is considered. Application of the proposed methodology to reach the agreement of Kramers and dynamical quasistationary fission rates will significantly reduce the errors of the combined simulation of nuclear fission.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА. Деление ядер, формулы Крамерса, скорость деления, равновесные распределения.

KEY WORDS. Fission of nuclei, Kramers formulas, fission rate, equilibrium distributions.

Введение

Комбинированное динамическо-статистическое моделирование в настоящее время широко используется при теоретических исследованиях процесса деления возбужденных атомных ядер [1, 2, 3, 4, 6, 8]. Комбинированные модели деления содержат две ветви: динамическую и статистическую. Для согласованной работы ветвей необходимо добиться, чтобы вычисляемая аналитически скорость деления ядер в статистической ветви совпадала с динамической квазистационарной скоростью деления (КССД, R_{dqs}). Таким образом, задача согласования ветвей модели сводится к необходимости корректного вычисления скорости деления аналитическим путем. Для этого уже на протяжении нескольких десятилетий широко используется подход, предложенный Крамерсом в работе [10]. Однако точность формул Крамера для квазистационарной скорости деления ядер, как оказалось, зависит от многих факторов и зачастую является недостаточной. В литературе имеются данные о том, что погрешность такого аналитического расчета скорости деления может достигать 20% и даже более [5, 9]. Ввиду вышесказанного, проводятся исследования с целью уменьшения погрешностей, возникающих при аналитическом расчете скорости деления. В настоящей работе будет исследована взаимосвязь КССД и равновесного распределения броуновских частиц (движение которых моделирует флуктуации формы делящегося ядра) по делительной координате. Использование полученных результатов позволит скорректировать классическую методику аналитического расчета скорости деления и значительно снизить погрешность получаемых значений этой величины.

Модель

Для проведения исследований мы используем динамическую модель деления ядер, основанную на представлении о флуктуациях формы делящегося возбужденного ядра как о блуждании броуновской частицы под действием случайной силы. При моделировании используем редуцированное (приведенное) уравнение Ланжевена (1):

$$q_{n+1} = q_n - \frac{1}{\eta} \left(\frac{dU(q)}{dq} \right)_n \tau + b_n \sqrt{\frac{T(q)}{\eta}} \tau. \quad (1)$$

Здесь коллективная деформационная координата q представляет собой половину расстояния между центрами масс будущих осколков деления, выраженную в единицах радиуса сферического ядра. Квазистационарному состоянию соответствует сферическая форма ядра ($q_{qs} = 0.375$), седловой конфигурации — $q_{sd} = 0.8$, точке разрыва — $q_{sc} = 1.2$, τ — временной шаг динамического моделирования, η — фрикционный параметр, m — инерционный параметр, $U(q)$ — потенциальная энергия, $T(q)$ — температура ядра, b — распределенная по Гауссу случайная величина, причем $\langle b \rangle = 0$ и $(\Delta b)^2 = 2$. В настоящей работе при моделировании используется канонический ансамбль, т. е. температура ядра полагается не зависящей от деформационной координаты и равной температуре ядра, соответствующей квазистационарному состоянию (2):

$$T = \left[\frac{E_{tot}}{a} \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (2)$$

где a — параметр плотности одночастичных уровней ядра, E_{tot} — полная энергия возбуждения ядра.

Теперь обсудим коллективные потенциалы, используемые в работе. Крамерс получил выражение для скорости распада метастабильного состояния, используя неограниченный потенциал, составленный из двух гладко сшитых, перевернутых одна относительно другой, парабол. Мы будем называть его Н-потенциалом. Именно при использовании такого потенциала в динамической модели наблюдается наилучшее согласие крамерсовой и динамической квазистационарной скоростей деления. Н-потенциал задается выражением (3):

$$U_H(q) = \begin{cases} \frac{C_{qs}}{2}(q - q_{qs})^2, & q < q_m \\ -\frac{C_{sd}}{2}(q - q_{sd})^2 + B_f, & q > q_m \end{cases}, \quad (3)$$

где C_{qs} и C_{sd} — жесткости парабол, составляющих потенциал вблизи квазистационарной и седловой точек соответственно, q_m — точка сшивки парабол.

При моделировании процесса деления возбужденных ядер такой потенциал применять нежелательно. Из физического смысла коллективной координаты q следует, что ее значения должны быть неотрицательными. Поэтому для предотвращения попадания броуновских частиц в нефизическую область значений координаты Н-потенциал необходимо модифицировать так, чтобы потенциальная энергия резко возрастала в области сплюснутых конфигураций ядра. Для этого, например, можно при $q < q_{qs}$ добавить экспоненциальную стенку. Такой потенциал мы будем называть W-потенциалом (4):

$$U_W(q) = \begin{cases} \frac{C_{qs}}{2}(q - q_{qs})^2 + \exp(100(q_{qs} - q)^3) - 1, & q < q_{qs} \\ \frac{C_{qs}}{2}(q - q_{qs})^2, & q_{qs} < q < q_m \\ -\frac{C_{sd}}{2}(q - q_{sd})^2 + B_f, & q_m < q. \end{cases}. \quad (4)$$

На рисунке 1 представлены Н- и W-потенциалы, составленные из парабол равных жесткостей. При использовании этих потенциалов во входных данных компьютерной программы, реализующей модель деления, можно задать значение параметра $\Omega = C_{qs}/C_{sd}$. Жесткости парабол, составляющих потенциал, и координата точки их сшивки вычисляются автоматически, исходя из положений квазистационарной и седловой точек, высоты барьера деления и условий гладкой сшивки парабол. В процессе исследований мы использовали два асимметричных потенциала, для которых значения этого параметра составляли 0.2 и 5, т. е. потенциалы с узким и широким барьерами.

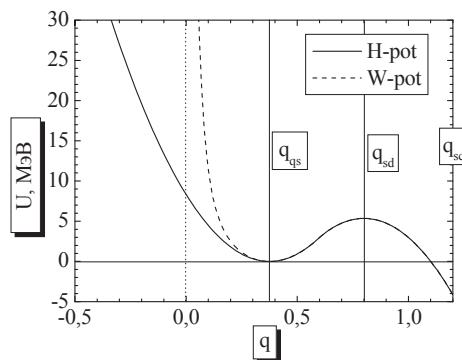


Рис. 1. Н-потенциал (сплошная линия) и W-потенциал (штриховая линия)

Результаты исследований

Согласно подходу Крамерса, скорость деления ядер вычисляется по формуле:

$$R_O = \frac{\omega_{qs} \omega_{sd}}{2\pi\beta} \exp\left(-\frac{B_f}{T}\right). \quad (5)$$

В этом выражении W_{qs} и W_{sd} — частоты незатухающих колебаний броуновской частицы вблизи квазистационарной и седловой точек. Из этого выражения следует, что скорости деления, полученные при использовании Н- и W-потенциалов, должны совпадать. Моделирование показало существенное повышение динамической квазистационарной скорости деления при переходе от Н-потенциала к W-потенциалу. Данная ситуация подробно обсуждалась в работе [7], где показано, что причиной этого является изменение параметров конфигурационного пространства, доступного броуновским частицам в области квазистационарного состояния, и, как следствие, смещение долговременного динамического распределения частиц в сторону точки разрыва. В той же работе предложен способ количественного описания обнаруженного эффекта. Кроме того, было показано, что изменение потенциала приводит к одинаковому изменению скорости деления, независимо от коэффициента затухания. Поэтому в настоящей работе мы ограничимся расчетами, проводимыми при $\beta = 10 \text{ зс}^{-1}$.

Итак, мы выявили связь скорости деления с видом равновесного распределения броуновских частиц по коллективной координате. На следующем этапе необходимо установить параметры распределения, с помощью которых можно было бы прогнозировать изменение скорости деления при изменении формы потенциала. Для этого, а также для обеспечения возможности практического использования результатов исследований необходимо научиться вычислять распределение аналитически. Основная сложность здесь состоит в наличии потока частиц через барьер. Его учет в расчете распределения — достаточно сложная задача. В процессе исследований нам удалось установить, что в действительности нет необходимости вычислять именно долговременное динамическое распределение с учетом этого потока. Достаточно проанализировать равновесное распределение частиц в области квазистационарного состояния (левее седловой точки) в отсутствии их потока через барьер. Такое распределение может быть получено путем динамического моделирования при ограничении движения

броуновских частиц правее седловой точки. Они представлены точками на рис. 2. Было обнаружено, что отношение количества частиц, собравшихся в седловой точке при использовании Н- и W-потенциалов, равно (с учетом погрешности вычислений) отношению соответствующих динамических скоростей деления. Для практического использования этого результата необходимо аналитически (не прибегая к динамическому моделированию) вычислить равновесные распределения частиц. Для этого можно использовать выражение (6):

$$\rho_{\text{Pqs}}(q) = \alpha_{qs} e^{-(E-U)/T}, \quad q < q_{sd}, \quad (6)$$

где — плотность вероятности обнаружения частицы в точке с координатой q , — нормировочный множитель. Анализированное распределение показано линией на рис. 2. Исследования показали, что отношение значений функций распределения в седловой точке, полученных при использовании Н- и W-потенциалов, равно отношению соответствующих динамических квазистационарных скоростей деления. Этот факт позволяет сформулировать поправку к крамерсовой скорости деления на изменение области сплюснутых форм ядра (7):

$$R_W = R_O \frac{\rho_{\text{PqsW}}(q_{sd})}{\rho_{\text{PqsH}}(q_{sd})}. \quad (7)$$

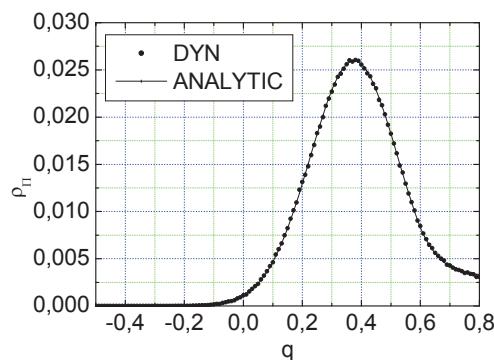


Рис. 2. Равновесные распределения броуновских частиц по координате, полученные при использовании Н- и W-потенциалов при ограничении движения частиц правее седловой точки. Точки на графике соответствуют результатам динамического моделирования, линия — аналитического расчета

Предложенная поправка справедлива для случая одинаковых по форме барьеров у используемых потенциалов. Изменение формы барьера приводит к нарушению равенства. Нам удалось установить, что для учета изменения формы барьера можно вычислить аналог равновесного распределения для области барьера (между квазистационарным состоянием и точкой разрыва). Для этого предлагается использовать выражение (8):

$$\rho_{\text{Pqs}}(q) = \alpha_{qs} e^{-(E-U)/T}, \quad q < q_{sd}, \quad (8)$$

В отличие от выражения (6), в этой формуле показатель экспоненты имеет отрицательный знак. Одновременное применение описанных поправок позволяет вычислить крамерсову скорость деления для любого из рассматриваемых потенциалов с точностью 2%:

$$R_{iCorr} = \alpha R_H, \quad (9)$$

или

$$R_{iCorr} = \alpha R_{OH}, \quad (10)$$

где

$$\alpha = \frac{\rho_{\Pi qsi}(q_{sd})}{\rho_{\Pi qsh}(q_{sd})} \frac{\rho_{\Pi sdi}(q_{sd})}{\rho_{\Pi sd}(q_{sd})}. \quad (11)$$

Расчеты показали, что для выполнения приведенного равенства необходимо, чтобы Н-потенциал, для которого вычисляются распределения, имел ту же самую высоту барьера деления и координаты седловой точки и квазистационарного состояния, что и используемый при моделировании потенциал. Важной особенностью предложенной методики является то, что поправка строится не от крамерсовой скорости для используемого потенциала, а от крамерсовой скорости для Н-потенциала, которая наилучшим образом согласуется с динамической квазистационарной скоростью деления.

Рассмотрим теперь результаты применения предложенной методики к аналитическому вычислению скорости деления ядер при использовании разных потенциалов. Они представлены в таблице 1. В первой колонке указывается используемый потенциал и отношение жесткостей составляющих парабол (для потенциалов, построенных на основе парабол), во второй колонке — КССД, в третьей — относительная разность КССД и крамерсовой скорости деления, ξ_{OD} , выраженная в процентах, в четвертой — отношение КССД, полученной при использовании указанного в первой колонке потенциала к КССД для Н-потенциала с равными жесткостями составляющих парабол, в пятой — корректирующий множитель, в шестой — вычисленная скорость деления с учетом поправки.

Таблица 1

Результаты расчетов для $\beta=10$ зс⁻¹

Потенциал, Cqs/Csd	Rdqs, ac-1	ξ_{OD} , %	Ri/RH1	α	Ri _{corr} , as ⁻¹
H, 1	1.9254±0.0109	-0.5023±0.57	1	1	1.9254
W, 1	2.1326±0.0102	9.2617±0.48	1.1076	1.0985	2.1151
H, 0.2	2.2912±0.0120	-13.3101±0.52	1.1900	1.1753	2.2629
H, 5	2.3175±0.0113	-12.0220±0.49	1.2036	1.2151	2.3396

Из таблицы 1 следует, что для потенциалов, не имеющих высших производных, аналитическое значение скорости деления с учетом поправки отличается

от КССД не более чем на 2%. Условием применимости описанной методики является отсутствие у потенциалов производных высших порядков. Ее обобщение на этот случай будет служить предметом дальнейших исследований.

Заключение

Современные модели деления ядер все еще содержат в себе значительное количество допущений, снижающих точность расчетов. Одни из них обусловлены недостатком информации о строении ядра, другие — экономией компьютерного времени. Применение описанного в настоящей работе способа корректировки крамерсовой скорости деления во многих случаях позволит заметно снизить погрешности моделирования, практически не увеличивая при этом время, необходимое на проведение расчетов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Адеев Г. Д. Многомерный стохастический подход к динамике деления возбуждённых ядер / Г. Д. Адеев, А. В. Карпов, П. Н. Надточий, Д. В. Ванин // Физика элементарных частиц и атомного ядра. 2005. Т. 36. С. 731.
2. Гончар И. И. Ланжевеновская флуктуационно-диссипативная динамика деления возбуждённых атомных ядер / И. И. Гончар // Физика элементарных частиц и атомного ядра. 1995. Т. 26. С. 922.
3. Гончар И. И. Теоретическое исследование зависимости среднего времени деления возбужденных атомных ядер от углового момента / И. И. Гончар // Ядерная физика. 2004. Т. 67. С. 2101.
4. Гончар И. И. Многомерная динамико-статистическая модель деления возбуждённых ядер / И. И. Гончар // Ядерная физика. 2000. Т. 63. С. 1778.
5. Дёмина Е. Г. Точность приближенных формул Крамерса для скорости деления: канонический и микроканонический ансамбли / Е. Г. Дёмина, И. И. Гончар // Ядерная физика. 2014. Т. 77. С. 882.
6. Ерёменко Д. О. Динамико-статистический подход к описанию реакции вынужденного деления тяжёлых ядер / Д. О. Ерёменко // Ядерная физика. 2009. Т. 72. С. 1707.
7. Литневский А. Л. Анализ влияния формы коллективного потенциала в области сплюснутых форм ядра на квазистационарную скорость деления. Поправка к классическим формулам Крамерса / А. Л. Литневский, И. И. Гончар // Вестник ТоГУ. 2015. № 1 (36). С. 17.
8. Gontchar I. A C-code for combining a Langevin fission dynamics of hot nuclei with a statistical model including evaporation of light particles and giant dipole γ -quanta / I. Gontchar, L. A. Litnevsky, P. Frqbrich // Computer Physics Communications. 1997. No 107. P. 223.
9. Gontchar I. I. Disentangling effects of potential shape in the fission rate of heated nuclei / I. I. Gontchar, M. V. Chushnyakova, N. E. Aktaev, A. L. Litnevsky, E.G. Pavlova // Physical Review. 2010. Vol. 82. Pp. 604-606.
10. Kramers H. A. Brownian motion in a field of force and the diffusion model of chemical reactions / H. A. Kramers // Physica. 1940. Vol. 7. P. 284.

REFERENCES

1. Adeev G. D., Karпов A. V., Nadtochij P. N., Vanin D. V. Mnogomernyj stohasticheskij podhod k dinamike delenija vozbuždionnyh jader [Multidimensional Stochastic Ap-

- proach to Fission Dynamics of Excited Nuclei] // Fizika jelementarnykh chastic i atomnogo jadra [Physics of Elementary Particles and Atomic Nuclei]. 2005. Vol. 36. P. 731. (In Russian)
2. Gonchar I. I. Lanzhevenovskaja fluktuationno-dissipativnaja dinamika delenija vozbu-zhdjonnih atomnyh jader [Langevin Fluctuation-Dissipation Dynamics of Fission of Excited Atomic Nuclei] // Fizika jelementarnykh chastic i atomnogo jadra [Physics of Elementary Particles and Atomic Nuclei]. 1995. Vol. 26. P. 922. (In Russian)
 3. Gonchar I. I. Teoreticheskoe issledovanie zavisimosti srednego vremeni delenija voz-buzhdennyh atomnyh jader ot uglovogo momenta [Theoretical Investigation of the Angular-momentum Dependence of the Mean Fission Lifetime of Excited Nuclei] // Jadernaja fizika [Physics of Atomic Nuclei]. 2004. Vol. 67. P. 2101. (In Russian)
 4. Gonchar I. I. Mnogomernaja dinamichesko-statisticheskaja model' delenija vozbu-zhdjonnih jader [Multidimensional Dynamical-statistical Model of Excited Nuclei Fission] // Jadernaja fizika [Physics of Atomic Nuclei]. 2000. Vol. 63. P. 1778. (In Russian)
 5. Demina E. G., Gonchar I. I. Tochnost' priblizhennyh formul Kramersa dlja skorosti delenija: kanonicheskij i mikrokanonicheskij ansamblji [Accuracy of the Approximate Kramers Formulas for the Fission Rate: Canonical and Microcanonical Ensembles] // Jadernaja fizika [Physics of Atomic Nuclei]. 2014. Vol. 77. P. 882. (In Russian)
 6. Eremenko D. O. Dinamiko-statisticheskij podhod k opisaniju reakcii vynuzhdennogo delenija tjazholyh jader [Combined Dynamical and Statistical Approach to Describing Induced Fission of Heavy Nuclei] // Jadernaja fizika [Physics of Atomic Nuclei]. 2009. Vol. 72. P. 1707. (In Russian)
 7. Litnevskij A. L., Gonchar I. I. Analiz vlijaniya formy kollektivnogo potenciala v oblasti spljusnutiy form jadra na kvazistacionarnuju skorost' delenija. Popravka k klassicheskim formulam Kramersa [The Analysis of the Impact of the Collective Potential Shape in the Oblate Nuclear Configurations Region on the Quasistationary Fission Rate. The Correction Factor to the Classical Kramers's Formulas] // Vestnik ToGU [PNU Herald]. 2015. No 1(36). P. 17. (In Russian)
 8. Gontchar I., Litnevsky L.A., Fröhlich P. A C-code for combining a Langevin fission dynamics of hot nuclei with a statistical model including evaporation of light particles and giant dipole γ -quanta // Computer Physics Communications. 1997. No 107. P. 223.
 9. Kramers H. A. Brownian motion in a field of force and the diffusion model of chemical reactions // Physica. 1940. Vol. 7. P. 284.
 10. Gontchar I. I., Chushnyakova M. V., Aktaev N. E., Litnevsky A. L., Pavlova E. G. Disentangling effects of potential shape in the fission rate of heated nuclei // Physical Review. 2010. Vol. 82. Pp. 604-606.

Автор публикации

Литневский Андрей Леонидович — кандидат физико-математических наук, доцент кафедры «Электроснабжение промышленных предприятий» Омского государственного технического университета

Author of the publication

Andrey L. Litnevskiy — Cand. Sci. (Phys. and Math.), Associate Professor at the Department of Electric Power Supply in Industry, Omsk State Technical University