

布朗粒子越过位垒的逃逸速率

钟云霄

(北京大学技术物理系)

摘 要

本文用 Reichl 解 Smoluchowski 方程的方法, 计算了布朗粒子越过位垒的逃逸速率. 并模拟了复合核的一维裂变位能曲线, 计算了核裂变速率随时间变化的规律, 并与其它方法计算的结果作了比较.

一、引 言

自从克拉麦 (Kramers)^[1] 指出可以用布朗粒子越过位垒的逃逸来探讨核裂变及化学反应问题以来, 已有过不少人对这课题进行了研究^{[2][3]}. 但由于解福克-普朗克方程的困难, 一般都只得近似的稳定解. 在粘滞性较大情况下, 如假设布朗粒子的速度随时达到了热平衡, 则福克-普朗克方程可以简化为 Smoluchowski 方程, 然后用 Reichl^[4] 方法得到方程的严格解. 本文用这种方法, 解了一维位垒穿透问题, 模拟了复合核的位能曲线, 计算了核裂变速率, 并与其它方法的计算结果进行了比较.

二、基本公式

一质量为 m 的布朗粒子的一维的朗之万方程为:

$$m\ddot{x} = -\alpha\dot{x} + D(t) - \frac{\partial v}{\partial x}, \quad (1)$$

其中 α 为阻尼系数, $D(t)$ 为无规力, v 为粒子位能. 如设 α 与温度 T 为常数¹⁾, 则决定几率分布 $P(x, t)$ 的 Smoluchowski 方程可以写成为:

$$\theta \frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{dU}{dx} P(x, t) \right] + \frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial x^2}. \quad (2)$$

其中

$$\theta = \frac{\alpha}{K_B T}, \quad U = \frac{v}{K_B T}, \quad (3)$$

K_B 为 Boltzmann 常数. 若取 θ 为时间单位, 则(2)式成为:

本文 1983 年 10 月 6 日收到.

1) 如空间可分为若干区域, 而每一区域中 T 与 α 为常数, 则每一区域的 Smoluchowski 方程仍可为(2)式, 这种情况将在另文讨论.

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{dU}{dx} P(x, t) \right] + \frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial x^2}. \quad (2')$$

令

$$P(x, t) = \sum a_n e^{-\lambda_n t} e^{-U(x)/2} \phi_n(x), \quad (4)$$

则 $\phi_n(x)$ 服从微分方程:

$$\frac{d^2 \phi_n}{dx^2} + [K_0 - V(x) + \lambda_n] \phi_n = 0, \quad (5)$$

其中

$$V(x) = \frac{1}{4} \left(\frac{dU}{dx} \right)^2 - \frac{1}{2} \frac{d^2 U}{dx^2} + K_0, \quad (6)$$

$n=0$ $\lambda_n=0$, 是 $P(x, t)$ 的定态解. 不难证明, ϕ_0 与 $U(x)$ 存在着简单的关系:

$$U(x) = -2 \ln \phi_0, \quad (7)$$

a_n 由初始条件与归一化条件决定. 若初始时粒子在 y 处. 即 $P(x, 0) = \delta(x - y)$, 则可得:

$$P(x, t) = \phi_0^2(x) + \frac{\phi_0(x)}{\phi_0(y)} \sum_{n=1} \phi_n(x) \phi_n(y) e^{-\lambda_n t}. \quad (8)$$

选择恰当的 $V(x)$, 可以获得所需要的 $U(x)$, 并求出 $\phi_n(x)$ 与 λ_n , 利用(8)式就得布朗粒子在位能 $U(x)$ 中分布的几率 $P(x, t)$.

三、位能的选择

选位能如图 1 所示:

$$\begin{aligned} V(x) &= \infty && \text{当 } x = 0 \\ V(x) &= 0 && \text{当 } 0 < x \leq d \\ V(x) &= V_0, && \text{当 } d \leq x \leq d + a \\ V(x) &= -V_1, && \text{当 } d + a \leq x < d + a + c \\ V(x) &= \infty, && \text{当 } x = d + a + c \end{aligned}$$

ϕ_0 所服从的方程式为:

$$\left. \begin{aligned} \frac{d^2 \phi_0}{dx^2} + K_0 \phi_0 &= 0, && 0 \leq x \leq d \\ \frac{d^2 \phi_0}{dx^2} - \gamma^2 \phi_0 &= 0, && d \leq x \leq d + a \\ \frac{d^2 \phi_0}{dx^2} + \zeta^2 \phi_0 &= 0, && d + a \leq x \leq d + a + c \end{aligned} \right\} \quad (9)$$

其中

$$\gamma^2 = V_0 - K_0, \quad \zeta^2 = V_1 + K_0. \quad (10)$$

分别以 $\phi_{01}, \phi_{02}, \phi_{03}$ 表示(9)式的三段解, 则有:

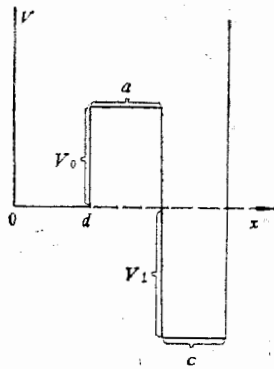


图 1

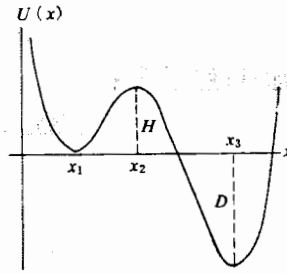


图 2

$$\left. \begin{aligned} \phi_{01} &= A_1 \sin \sqrt{K_0} x \\ \phi_{02} &= A_2 e^{-\gamma(x-d)} + B_2 e^{\gamma(x-d)}, \\ \phi_{03} &= A_3 \sin [\pi + \zeta x - \zeta(a+d+c)]. \end{aligned} \right\} \quad (11)$$

从连续条件可得:

$$\left. \begin{aligned} B_2/A_1 &= \frac{1}{2} \left[\sin \sqrt{K_0} d + \frac{\sqrt{K_0}}{\gamma} \cos \sqrt{K_0} d \right], \\ A_2/A_1 &= \frac{1}{2} \left[\sin \sqrt{K_0} d - \frac{\sqrt{K_0}}{\gamma} \cos \sqrt{K_0} d \right], \\ A_3 &= (A_2 e^{-\gamma a} + B_2 e^{\gamma a}) / \sin(\pi - \zeta c). \end{aligned} \right\} \quad (12)$$

K_0 必须服从方程式:

$$\begin{aligned} f(K_0) &= \left[1 + \frac{\gamma}{\zeta} \tan(\pi - \zeta c) \right] A_2 e^{-\gamma a} \\ &+ \left[1 - \frac{\gamma}{\zeta} \tan(\pi - \zeta c) \right] B_2 e^{\gamma a} = 0. \end{aligned} \quad (13)$$

表 1

	第一组数	第二组数	第三组数	第四组数
V_0	14.46445	12.40576	8.27925	10.58645
V_1	-4.44375	2.20965	-2.42936	-5.15197
d	0.81	1.5	1.08	0.8
a	7.33775	5.94281	8.04875	7.85936
c	1.31525	1.08906	1.721406	1.78599
H	6	6	4	2
D	24	24	24	24
x_1	0.55359	0.899156	0.73759	0.58916
x_2	2.15261	2.47869	2.31591	1.59093
x_3	8.6360	7.84707	10.28465	10.26661
$\sqrt{K_0}$	2.83746	1.74697	2.12963	2.666156
γ	2.53244	3.05841	1.93492	1.86495
ζ	1.89933	2.29381	1.45119	1.39872

图 3 是按第一组数画出的 $V(x)$ 及 $U(x)$ 图。

为了使我们计算的问题与核裂变问题可以比较, 我们希望 $U(x)$ 成如图 2 所示的形式. 为此, 我们选择了如表 1 所示的 V_0, V_1, d, a, c 等值, 相应的 $U(x)$ 的参量有 $H, D, x_1, x_2, x_3, \sqrt{K_0}, \gamma, \xi$ 等.

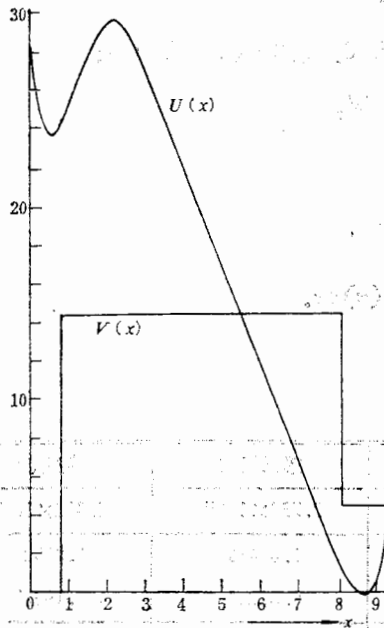


图 3

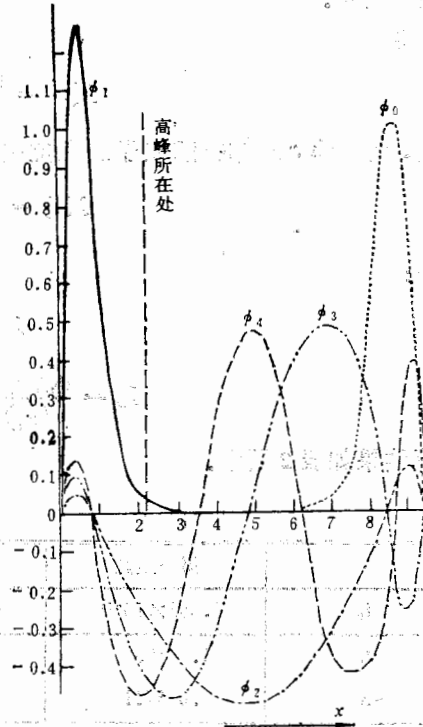


图 4

四、 $P(x, t)$ 及越过位垒的逃逸速率

要计算 $P(x, t)$, 必须先从(5)式计算 ϕ_n .

令

$$K_n = K_0 + \lambda_n \quad (14)$$

当 $K_n < V_0$ 时, ϕ_n 的解与(11)式相同, 只是以 K_n 代替 K_0 而已. 归一化常数 A_1 从

$$\int_0^{d+a+c} \phi_n^2(x) dx = 1 \quad (15)$$

得出. 假定布朗粒子初始状态是在第一个位谷的最低点, 即 $y = x_1$, $\phi_n(y) = \phi_n(x_1)$.

若 $K_n > V_0$, 则(9)式中第二式必须改为:

$$\frac{d^2 \phi_n}{dx^2} + \beta^2 \phi_n = 0, \quad (16)$$

相应的解(11)式中的第二式必须改为:

$$\phi_{n2} = A_2 \sin \beta(x-d) + B_2 \cos \beta(x-d), \quad (17)$$

其中

$$\beta^2 = K_n - V_0. \quad (18)$$

其它两段解的形式仍与(11)式相同。现将第一套数据位能解出 $\phi_0, \phi_1, \phi_2, \phi_3, \phi_4$ ，作图如图4所示。

令

$$I(t) = \int_0^{x_2} P(x, t) dx, \quad (19)$$

显然, $I(t)$ 为 t 时刻布朗粒子还在位垒内的几率。将(8)式代入(19)式可得:

$$I(t) = I_0 + \sum_{n=1} I_n e^{-\lambda_n t}, \quad (20)$$

其中:

$$I_0 = \int_0^{x_2} \phi_0^2(x) dx, \quad (21)$$

$$I_n = \frac{\phi_n(x_1)}{(x_1)} \int_0^{x_2} \phi_0(x) \phi_n(x) dx. \quad (22)$$

计算结果如表2所示。

表 2

	第一组数	第二组数	第三组数	第四组数
I_0	2.667×10^{-11}	4.879×10^{-11}	2.730×10^{-11}	2.312×10^{-11}
I_1	1.00106	1.00076	1.00486	1.01324
λ_1	0.005211	0.004146	0.02223	0.19277
I_2	.00005867	-.0002309	.0002281	.0010511
λ_2	6.5726	8.1744	3.8585	3.6164
I_3	.0001127	.000012203	.0005440	
λ_3	7.0354	9.6266	4.1874	

从以上的结果可以看出, 对以上四种不同位能, I_0 均很小可以忽略, 对 $I(t)$ 贡献最大为 $I_1 e^{-\lambda_1 t}$ 。在 $t > 0.5$ 时, $n > 1$ 的项对 $I(t)$ 的贡献也可以忽略不计。比较以上几组不同位能数据可以看出, H 愈小, $n > 1$ 的项贡献愈大。

若将 I_0 与 $n > 1$ 的项忽略, 则可得:

$$I(t) = I_1 e^{-\lambda_1 t} \quad (23)$$

或

$$\frac{1}{I(t)} \frac{dI(t)}{dt} = -\lambda_1 \quad (24)$$

即布朗粒子留在位垒内的几率随时间作指数规律衰减。 λ_1 即衰减速率。

五、原子核裂变几率的计算

现将以上结果用于原子核的裂变几率的计算。用形变参量 ξ_2, ξ_3, ξ_4 来描述原子核

的形变, 则原子核表面用柱坐标 ρ, Z 描述的方程式为^[5]:

$$\left. \begin{aligned} \rho^2 &= \xi_0(\xi_2, \xi_3, \xi_4)(\xi_2^2 - Z^2)[\xi_4 Z^2 - 2\xi_3 \xi_2 Z + \xi_2^2(1 + \xi_3^2 - \xi_4)] \\ \xi_0(\xi_2, \xi_3, \xi_4) &= \xi_2^{-5} \left(1 + \xi_3^2 - \frac{4}{5} \xi_4 \right)^{-1} \end{aligned} \right\} \quad (25)$$

其中 $2\xi_2$ 为核的长度, ξ_3 描述核断裂点的对称性, 若 $\xi_3 = 0$, 则裂变后两碎片质量相等. ξ_4 描述了核的颈部形状, 若 $\xi_4 = 0$, 则核的形状为轴对称椭球. 现在我们只考虑核的伸长形变, 令 $\xi_3 = \xi_4 = 0$, 并以 ξ 代替 ξ_2 , 则(25)式为:

$$\rho^2 = \frac{1}{\xi^3} (\xi^2 - Z^2) \quad (26)$$

为一椭球, 该椭球的长轴为 ξ , 短轴为 $\frac{1}{\sqrt{\xi}}$. 从原子核的液滴模型计算结果, 核形变位能处于鞍点时其长轴与短轴之比为 2.312. 用(26)式, 则处于鞍点时:

$$\xi^{3/2} = 2.312$$

\therefore

$$\xi = 1.7486$$

球形核, $\xi = 1$. 因而从球形至鞍点, 形变参量的相差 $\Delta\xi$ 为:

$$\Delta\xi = 1.7486 - 1 = 0.7486 \quad (27)$$

把核裂变作为一维的布朗运动, 其朗之万方程为:

$$M_{22}\ddot{\xi} = -Z_{22}\dot{\xi} + D(t) - \frac{dv}{d\xi} \quad (28)$$

质量系数与阻尼系数分别为^[5]:

$$M_{22} = \frac{3}{10} M_0 R_0^3 \quad (29)$$

$$Z_{22} = 4\pi\eta_0 R_0^3 \quad (30)$$

其中 M_0 为原子核质量, R_0 为球形核半径, η_0 为粘滞系数. 为了能把第三节中的位能用于核裂变, 将形变参量作一变换.

$$\left. \begin{aligned} \xi &= \sigma x \\ \sigma &= \frac{\Delta\xi}{x_2 - x_1} \end{aligned} \right\} \quad (31)$$

这样(28)式成为:

$$M_{22}\sigma^2\ddot{x} = -Z_{22}\sigma^2\dot{x} + D'(t) - \frac{dv}{dx} \quad (32)$$

与(3)式相应的 U 及 θ 分别为:

$$U(x) = \frac{v}{K_B T} \quad \theta = \frac{Z_{22}\sigma^2}{K_B T} = \frac{4\pi\eta_0 R_0^3 \sigma^2}{K_B T} \quad (33)$$

从(7)式可得:

$$\left(\frac{d^2 U}{dx^2} \right)_{x_1} = 2K_0 \quad \left(\frac{d^2 U}{dx^2} \right)_{x_2} = -2\gamma^2$$

分别以 ω_1 及 ω_2 为原子核形变位能在位谷深处(即 x_1 附近)与位垒顶部(即 x_2 附近)的谐振频率及反谐振频率, 则有:

$$\omega_1^2 = \frac{1}{M_{22}} \left(\frac{d^2 v}{d\xi^2} \right) = \frac{1}{M_{22}\sigma^2} \left(\frac{d^2 v}{dx^2} \right)_{x_1} = \frac{K_B T}{M_{22}\sigma^2} 2K_0 \quad (34)$$

$$\omega_2^2 = \frac{K_B T}{M_{22}\sigma^2} 2\gamma^2 \quad (35)$$

表示核形变位能的特征的主要是 $\omega_1\hbar$, $\omega_2\hbar$ 及 Q 三个量, 其中

$$Q = K_B T [U(x_2) - U(x_1)] = K_B T H \quad (36)$$

为形变位垒的高度. 现在就第三节中提出的四个位能数据计算 $\omega_1\hbar$, $\omega_2\hbar$, $Q \cdots$ 等值如表 3 所示. 核质量取 ^{236}U 核的质量, ^{236}U 核的粘滞系数取为 $\eta_0 = 10^{16} \text{ MeV} \cdot \text{sec} \cdot \text{cm}^{-3[2]}$.

表 3

	第一组数	第二组数	第三组数	第四组数
$K_B T$	1 MeV	1 MeV	1.5 MeV	3 MeV
Q	6 MeV	6 MeV	6 MeV	6 MeV
$\hbar\omega_1$	0.887 MeV	0.539 MeV	0.805 MeV	0.904 MeV
$\hbar\omega_2$	0.792 MeV	0.944 MeV	0.731 MeV	0.633 MeV
θ	11.214×10^{-21} 秒	11.492×10^{-21} 秒	7.673×10^{-21} 秒	9.524×10^{-21} 秒
W_S	.005670	.004216	.02402	.2142
W_K	.004762	.003354	.02060	.1898
W_B	.005953	.003710	.02731	.2815
λ_1	.005211	.004145	.02223	.1928

表 3 中的 W_S 为应用 Smoluchowski 的定态解计算的裂变几率, W_K 为 Kramers 定态解计算的裂变几率, W_B 为用 Bohr Wheeler 公式计算的结果. 这些公式分别为:

$$W_S = \frac{\tau\omega_1\omega_2\theta}{2\pi} e^{-Q/K_B T}$$

$$W_K = \frac{\omega_1\theta}{4\pi\tau\omega_2} (\sqrt{1 + 4\omega_2^2\tau^2} - 1) e^{-Q/K_B T}$$

$$W_B = \frac{\omega_1\theta}{2\pi} e^{-Q/K_B T}$$

其中

$$\tau = \frac{M_{22}}{Z_{22}} = 0.7930 \times 10^{-21} \text{ 秒}$$

以上计算的都是以 θ 为时间单位的单位时间裂变几率. 从表 3 所列的结果可以看出, 在本文所取的定态范围内, 用 Smoluchowski 的定态解及 Kramer 的定态解公式计算的结果与本文所解的结果是差别不大的. 常用的 Bohr, Wheeler 公式计算的结果与我们计算的结果差别要大一些, 这是因为他们的公式是在完全平衡的假设下推得的^[6], 而当裂变几率较大时, 这种假设是不适用的. W_S 与 W_K 值的接近是由于我们所取的粘滞系数较大的缘故, 说明了在我们所用的粘滞系数附近, 用 Smoluchowski 方程是合适的.

六、结 论

(1) 利用本文所用的方法, 可以很方便地获得我们所需要的位能形式, 从而得到布朗

粒子逃逸出位垒的几率, 只要该具体问题满足 Smoluchowski 方程的近似条件, 就能得到严格解. 因而此方法有着广泛的应用. 并且可以用来处理更复杂的位垒, 如双峰位垒. 这方面的计算正在进行中.

(2) 应用此方法可以找出定态解的适用的范围.

(3) 对高温, 低位垒的裂变问题或其它类似问题, 可以得到随时间变化的裂变几率.

参 考 文 献

- [1] S. Chandrasekhar, *Rev. Mod. Phys.*, 15(1943), 1.
- [2] 胡济民、钟云霄, 高能物理与核物理, 4(1980), 368.
- [3] 吴锡真、卓益忠, 高能物理与核物理, 4(1980), 113.
- [4] L. E. Reichl, *J. Chem. Phys.*, 77(1982), 4199.
- [5] J. Schirmer, S. Knaak, G. Sussmann, *Nuclear Physics*, A119 (1973), 31—44.
- [6] L. G. Moretto, *Phys. and Chem. of Fission*, 1 (1973), 329.

THE ESCAPE OF BROWNIAN PARTICLE OVER POTENTIAL BARRIERS

ZHONG YUN-XIAO

(Peking University)

ABSTRACT

A convenient method is introduced to calculate the rate of escape of Brownian particle over potential barriers by exact solution of Smoluchowskian equation. This method is applied to calculate the nuclear fission probabilities. The results for four different cases are compared with the results of other theories.