

核物理主题数据: 实验、理论与应用专题

# 三维格点空间相对论密度泛函理论: 基于 PC-PK1 的裂变位垒研究\*

黄逸涵 李博 赵鹏巍†

(北京大学, 核物理与核技术国家重点实验室, 北京 100871)

(2025 年 9 月 12 日收到; 2025 年 10 月 16 日收到修改稿)

利用三维格点空间相对论密度泛函理论, 在轴对称破缺、反射对称破缺和  $V_4$  对称性破缺时, 计算了铀系原子核的势能曲线, 探索了所有四极和八极形变自由度对裂变内垒、外垒和同核异能态的影响. 本文的计算结果表明: 反射对称性破缺能显著地降低外垒的高度, 轴对称性破缺能同时降低内垒和外垒的高度,  $V_4$  对称性破缺对内垒和外垒几乎没有影响, 同核异能态几乎不受对称性破缺的影响. 基于相对论密度泛函 PC-PK1, 对同核异能态的能量经验值有轻微低估. 本文数据集可在 <https://www.doi.org/10.57760/sciencedb.j00213.00229> 中访问获取.

**关键词:** 相对论密度泛函理论, 三维格点空间, 裂变位垒,  $V_4$  对称性**DOI:** 10.7498/aps.75.20251255**CSTR:** 32037.14.aps.75.20251255

## 1 引言

核裂变是重原子核分裂成两个或多个质量较小的原子核的衰变过程, 在超重元素合成、快中子俘获过程、核能利用等领域起着重要作用. 裂变位垒是影响原子核裂变概率, 裂变产物分布和动能分布等可观测量的重要物理量, 在裂变过程中起着关键作用<sup>[1-4]</sup>. 例如, 裂变位垒的高度每改变 1 MeV, 对应的裂变半衰期将有几个数量级的变化, 而裂变位垒的宽度则会对原子核的隧穿概率、裂变产物和动能分布产生重要影响. 因此, 准确预言裂变位垒的性质有助于人们预测超重原子核的寿命, 寻找超重核稳定岛<sup>[5-8]</sup>, 也可以为快中子俘获过程的理论预测提供输入量, 研究宇宙中的重元素起源<sup>[9-11]</sup>.

迄今为止, 已有多种核物理模型被用于研究裂变位垒, 包括宏观微观模型<sup>[12-16]</sup>、扩展 Thomas-

Fermi 模型<sup>[17]</sup> 等唯象模型, 以及非相对论密度泛函理论<sup>[8,18-25]</sup>、相对论密度泛函理论<sup>[18,26-34]</sup> 等微观模型. 宏观微观模型将原子核描述为带电液滴, 通过壳修正和对修正方法考虑壳效应对关联效应, 能够快速计算包含多个形变自由度的多维势能曲面, 是实现大规模裂变位垒计算的重要方法之一<sup>[35]</sup>. 该模型也成功预言了铀系原子核裂变位垒的双峰结构和裂变同核异能态的存在<sup>[36]</sup>, 指出打破轴对称<sup>[37-39]</sup> 和反射对称<sup>[40,41]</sup> 对裂变位垒的高度和宽度等特征有着重要影响. 密度泛函理论是目前唯一适用于描述核素图中几乎所有原子核的微观理论, 能微观自洽地描述原子核的裂变位垒<sup>[42,43]</sup>. 非相对论密度泛函理论<sup>[44]</sup> 和相对论密度泛函理论<sup>[45]</sup> 都确认了打破轴对称和反射对称对裂变位垒具有重大影响. 但这些研究只考虑了单独打破轴对称对内垒的影响和单独打破反射对称对外垒的影响<sup>[7,21,46]</sup>, 没有研究同时打破原子核的轴对称和反射对称后

\* 国家重点研发计划 (批准号: 2024YFE0109803, 2024YFA1612600)、国家自然科学基金 (批准号: 12435006, 12475117, 12141501)、全国重点实验室项目 (批准号: NST202401016) 和北京大学高性能计算校级公共平台资助的课题.

† 通信作者. E-mail: [pwzhao@pku.edu.cn](mailto:pwzhao@pku.edu.cn)

裂变位垒的变化. 最近, 基于非相对论密度泛函理论<sup>[47,48]</sup>和相对论密度泛函理论<sup>[31,49]</sup>的研究都表明了同时打破原子核的轴对称和反射对称对再现铀系原子核裂变外垒的经验值有着重要的作用. 但是在这些研究中, 仍然假设原子核满足  $V_4$  对称性 ( $V_4$  是包括恒等操作、沿  $x-z$  平面的镜像操作、沿  $y-z$  平面的镜像操作和同时沿  $x-z$ 、 $y-z$  平面的镜像操作的阶为 4 的阿贝尔群<sup>[50]</sup>). 如何打破  $V_4$  对称对裂变位垒的影响, 仍然需要进一步的研究.

本文将采用三维格点空间相对论密度泛函理论 (three dimensional lattice relativistic density functional theory, 3DRDFT)<sup>[51-53]</sup> 研究打破轴对称、反射对称和  $V_4$  对称对铀系原子核裂变内垒、外垒和同核异能态的影响. 相比于非相对论密度泛函理论, 相对论密度泛函理论具有自动包含自旋轨道耦合<sup>[54,55]</sup>、能够自洽处理奇时间场<sup>[56,57]</sup> 等优势. 相比于多维约束的相对论密度泛函理论, 3DRDFT 能够不受对称性限制地研究原子核的各种性质, 而且能够高效地计算原子核处于大形变时的势能曲线. 3DRDFT 已被成功应用于描述原子核的链式结构<sup>[58]</sup>、环状结构<sup>[59]</sup>和正四面体形状<sup>[53,60]</sup>以及三轴形变原子核<sup>[61,62]</sup>和八极形变原子核<sup>[63]</sup>的转动性质. 本文第 2 节介绍了 3DRDFT 的理论框架和数值细节, 第 3 节展示了结果和讨论, 第 4 节进行了总结.

## 2 理论框架和数值细节

点耦合相对论密度泛函理论的 Lagrange 密度<sup>[43,64]</sup>为

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = & \bar{\psi}(i\gamma^\mu \partial_\mu - m)\psi - \frac{1}{2}\alpha_S(\bar{\psi}\psi)(\bar{\psi}\psi) \\ & - \frac{1}{2}\alpha_V(\bar{\psi}\gamma^\mu\psi)(\bar{\psi}\gamma_\mu\psi) \\ & - \frac{1}{2}\alpha_{TV}(\bar{\psi}\boldsymbol{\tau}\gamma^\mu\psi) \cdot (\bar{\psi}\boldsymbol{\tau}\gamma_\mu\psi) - \frac{1}{3}\beta_S(\bar{\psi}\psi)^3 \\ & - \frac{1}{4}\gamma_S(\bar{\psi}\psi)^4 - \frac{1}{4}\gamma_V[(\bar{\psi}\gamma^\mu\psi)(\bar{\psi}\gamma_\mu\psi)]^2 \\ & - \frac{1}{2}\delta_S\partial^\nu(\bar{\psi}\psi)\partial_\nu(\bar{\psi}\psi) - \frac{1}{2}\delta_V\partial^\nu(\bar{\psi}\gamma^\mu\psi)\partial_\nu(\bar{\psi}\gamma_\mu\psi) \\ & - \frac{1}{2}\delta_{TV}\partial^\nu(\bar{\psi}\boldsymbol{\tau}\gamma^\mu\psi) \cdot \partial_\nu(\bar{\psi}\boldsymbol{\tau}\gamma_\mu\psi) \\ & - \frac{1}{4}F^{\mu\nu}F_{\mu\nu} - e\frac{1-\tau_3}{2}(\bar{\psi}\gamma^\mu\psi)A_\mu, \end{aligned} \quad (1)$$

其中  $m$  为核子质量,  $e$  为电荷单位,  $A_\mu$  和  $F_{\mu\nu}$  分别为电磁场的四矢量和场强张量.  $\tau_3$  为同位旋算符的第三分量, 本文工作中约定中子的同位旋为 +1, 而质子同位旋为 -1. 耦合常数的下标  $S$ ,  $V$  和  $TV$  分别对应标量, 矢量和同位旋矢量. (1) 式中的耦合常数, 一般通过再有限核的基态性质以及饱和密度处的核物质性质来确定, 本文选取 PC-PK1 耦合常数<sup>[64]</sup>. 该组耦合常数拟合了 60 个球形核的结合能、电荷半径和经验对隙, 在微观、统一描述原子核质量和低激发谱等性质方面取得了很大成功<sup>[65,66]</sup>. 基于 Legendre 变换得到系统的多体 Hamilton 量后, 通过变分原理对能量取极值可以获得单核子满足的 Dirac 方程:

$$\begin{aligned} \hat{h}\psi_k(\mathbf{r}) = & [\boldsymbol{\alpha} \cdot (-i\nabla - \mathbf{V}(\mathbf{r})) + \beta(m + S(\mathbf{r})) \\ & + V^0(\mathbf{r})]\psi_k(\mathbf{r}) = \varepsilon_k\psi_k(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (2)$$

式中,  $\varepsilon_k$  为单核子能量, 而单核子 Hamilton 量  $\hat{h}(\mathbf{r})$  中的标量势  $S(\mathbf{r})$  和矢量势  $V^\mu(\mathbf{r})$  为

$$S(\mathbf{r}) = \alpha_S\rho_S + \beta_S\rho_S^2 + \gamma_S\rho_S^3 + \delta_S\Delta\rho_S, \quad (3a)$$

$$\begin{aligned} V^\mu(\mathbf{r}) = & \alpha_V j^\mu + \gamma_V(j^\mu j_\mu)j^\mu + \delta_V\Delta j^\mu \\ & + \tau_3\alpha_{TV}j_{TV}^\mu + \tau_3\delta_{TV}\Delta j_{TV}^\mu + e\frac{1-\tau_3}{2}A^\mu, \end{aligned} \quad (3b)$$

其中, 电磁场  $A^\mu$  满足 Poisson 方程, 而各种密度  $\rho$  和流  $j$  由占有概率和单核子波函数决定:

$$\rho_S(\mathbf{r}) = \sum_k v_k^2 \bar{\psi}_k(\mathbf{r})\psi_k(\mathbf{r}), \quad (4a)$$

$$j^\mu(\mathbf{r}) = \sum_k v_k^2 \bar{\psi}_k(\mathbf{r})\gamma^\mu\psi_k(\mathbf{r}), \quad (4b)$$

$$j_{TV}^\mu(\mathbf{r}) = \sum_k v_k^2 \bar{\psi}_k(\mathbf{r})\gamma^\mu\tau_3\psi_k(\mathbf{r}), \quad (4c)$$

$$j_c^\mu(\mathbf{r}) = \sum_k v_k^2 \bar{\psi}_k(\mathbf{r})\gamma^\mu\frac{1-\tau_3}{2}\psi_k(\mathbf{r}). \quad (4d)$$

(4c) 式和 (4d) 式中  $\tau_3$  为同位旋算符的第三分量, 本文中约定中子的同位旋是 +1, 质子的同位旋是 -1. 流  $j^\mu(\mathbf{r})$  的零分量通常被记为矢量密度  $\rho_V(\mathbf{r})$ . 对于开壳原子核, 对关联效应会产生重要的影响, 通常采用 Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS) 方法考虑对关联效应, 其对应的能量密度泛函为

$$E_{\text{pair}} = - \sum_{\tau=n,p} \frac{G_\tau}{4} \int d\mathbf{r} \kappa_\tau^*(\mathbf{r})\kappa_\tau(\mathbf{r}), \quad (5)$$

式中,  $G_\tau$  是对力强度,  $\kappa(\mathbf{r})$  是对张量密度,

$$\kappa(\mathbf{r}) = 2 \sum_{k>0} f_k u_k v_k |\psi_k(\mathbf{r})|^2, \quad (6)$$

其中,  $f_k$  是平滑截断权重因子,

$$f_k = \frac{1}{1 + \exp[(\varepsilon_k - \lambda_F - \Delta E_\tau)/\mu_\tau]}. \quad (7)$$

费米能  $\lambda_F$  通过粒子数来确定:

$$2 \sum_{k>0} v_k^2 = N_\tau, \quad (8)$$

其中  $N_\tau$  是质子或中子的粒子数. 根据参考文献 [67] 确定截断参数为  $\Delta E_\tau = 5 \text{ MeV}$ ,  $\mu_\tau = \Delta E_\tau/10 = 0.5 \text{ MeV}$ . 3DRDFT 计算的原子核平均对隙  $\Delta^{\text{Theo}}$  为

$$\Delta^{\text{Theo}} = \frac{2E_{\text{pair}}}{\sum_k f_k u_k v_k}. \quad (9)$$

实验上的经验对隙利用三点奇偶质量公式 [68] 从原子核的结合能中提取:

$$\Delta_n^{\text{Exp}} = \frac{1}{2}[B(Z, N+1) - 2B(Z, N) + B(Z, N-1)], \quad (10)$$

$$\Delta_p^{\text{Exp}} = \frac{1}{2}[B(Z+1, N) - 2B(Z, N) + B(Z-1, N)], \quad (11)$$

其中  $B(Z, N)$  是质子数为  $Z$ , 中子数为  $N$  的原子核结合能的实验值.

原子核的  $\lambda$  阶形变定义为

$$\beta_{\lambda\mu} = \frac{4\pi}{3AR^\lambda} \int dr \rho_v(r) r^\lambda Y_{\lambda\mu}, \quad (12)$$

其中  $R = 1.2 \times A^{1/3} \text{ fm}$ ,  $A$  是质量数,  $\rho_v$  是矢量密度. 在保持轴对称和反射对称性时, 三轴形变  $\beta_{22}$  和八极形变  $\beta_{3\mu}$  等于 0. 引入三轴形变  $\beta_{22}$  可以使轴对称性破缺; 引入八极形变  $\beta_{30}$  可以使反射对称性破缺; 引入八极形变  $\beta_{31}$  或  $\beta_{33}$  可以使  $V_4$  对称性破缺. 为了得到裂变位垒, 本文利用增广 Lagrange 方法 (augmented Lagrangian method) 计算给定形变下原子核的能量. 这种方法结合了线性约束和二次约束的优点, 可以将原子核的形变准确地约束到任意给定值 [69]. 此时, 系统的能量密度泛函中需要额外添加约束项:

$$E_{\text{constr.}} = \sum_{ij} [\lambda_{ij} + C_{ij}(\langle \hat{\beta}_{ij} \rangle - \beta_{ij}^c)](\langle \hat{\beta}_{ij} \rangle - \beta_{ij}^c), \quad (13)$$

其中,  $\lambda_{ij}$  是 Lagrange 乘子,  $C_{ij}$  是相应的惩罚常数. 引入形变约束项会导致单核子波函数的运动方程中出现额外的约束势场:

$$V_{\text{constr.}} = \sum_{ij} \lambda_{ij}^{\text{eff}} \hat{\beta}_{ij}, \quad (14)$$

其中  $\lambda_{ij}^{\text{eff}} = \lambda_{ij} + C_{ij}(\langle \hat{\beta}_{ij} \rangle - \beta_{ij}^c)$ .

本文采用相对论密度泛函 PC-PK1 [64] 和零程对相互作用. 中子和质子的对力强度通过再现  $^{240}\text{Pu}$  实验上的经验对隙来确定, 取值分别为  $G_n = -440 \text{ MeV}\cdot\text{fm}^3$  和  $G_p = -540 \text{ MeV}\cdot\text{fm}^3$ . 三维格点空间在  $x, y, z$  轴方向上的格点数分别为 24, 24 和 40, 三个方向的空间步长均为 1 fm.

## 3 计算结果与讨论

### 3.1 同中子数链 $N = 146$ 和同位素链 $Z = 94$ 的对隙

图 1 中蓝色的空心方框展示了基于 3DRDFT 计算的  $Z = 94$  同位素链中的偶偶核中子平均对隙  $\Delta_n^{\text{Theo}}$ , 黑色的实心方框则为相应的中子经验对隙  $\Delta_n^{\text{Exp}}$ . 红色的空心圆展示了基于 3DRDFT 计算的  $N = 146$  同中子数链中的偶偶核质子平均对隙  $\Delta_p^{\text{Theo}}$ , 黑色的实心圆则为相应的质子经验对隙  $\Delta_p^{\text{Exp}}$ . 中子和质子的经验对隙分别通过等式 (10) 和 (11) 从实验上测量的原子核结合能中提取 [70,71]. 3DRDFT 计算的质子平均对隙与实验上经验对隙的最大差值仅为 0.09 MeV, 中子平均对隙与实验上经验对隙的最大差值仅为 0.05 MeV. 这说明了通过  $^{240}\text{Pu}$  的经验对隙确定的对力强度  $G_n = -440 \text{ MeV}\cdot\text{fm}^3$  和  $G_p = -540 \text{ MeV}\cdot\text{fm}^3$  能够较为精确地再现  $Z = 94$  和  $N = 146$  附近原子核的经验对隙.

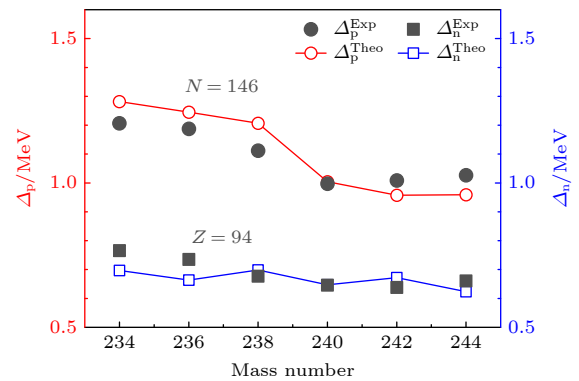


图 1  $Z = 94$  的偶偶核中子对隙 (蓝色空心方框) 和实验上提取的中子经验对隙 (黑色实心方框) 随质量数的变化.  $N = 146$  的偶偶核的质子对隙 (红色空心圆) 和实验上提取的质子经验对隙 (黑色实心圆) 随质量数的变化

Fig. 1. The neutron pairing gap calculated by 3DRDFT (blue open square) and extracted from experiments (black solid square) versus mass number for the even-even nuclei with  $Z = 94$ . The proton pairing gap calculated by 3DRDFT (red open circle) and extracted from experiments (black solid circle) versus mass number for the even-even nuclei with  $N = 146$ .

### 3.2 $^{240}\text{Pu}$ 的势能曲线

基于 3DRDFT 自洽计算的  $^{240}\text{Pu}$  基态的能量为  $-1811.44$  MeV, 四极形变  $\beta_{20}$  为 0.29, 八极形变  $\beta_{30}$  为 0.05. 而  $^{240}\text{Pu}$  基态能量的实验值 [72] 为  $-1813.45$  MeV. 使用参数组 DD-PC11 [73] 的  $^{240}\text{Pu}$  基态能量值为  $-1813.47$  MeV, 四极形变  $\beta_{20}$  为 0.28. 本文计算的  $^{240}\text{Pu}$  基态能量比实验值和文献 [73] 的计算结果高大约 2 MeV, 原因可能是未考虑转动修正能 [65]. 四极形变  $\beta_{20}$  与文献 [73] 的计算结果基本吻合. 结合 3DRDFT 和增广 Lagrange 方法, 在单核子波函数的运动方程 (2) 中引入约束势场 (14), 可以将原子核约束至任意给定的形变. 原子核的能量随形变的变化曲线则为势能曲线. 图 2 中紫色点划线展示了在保持轴对称和反射对称性时  $^{240}\text{Pu}$  的  $\beta_{20}$  势能曲线 (取基态为能量零点). 该曲线具有两个极大值点, 形变  $\beta_{20} = 0.55$  的极大值点对应裂变内垒, 高度为 8.26 MeV; 形变  $\beta_{20} = 1.80$  的极大值点对应裂变外垒, 高度为 9.98 MeV. 该曲线在形变  $\beta_{20} = 0.95$  处具有极小值点, 位于裂变内垒和外垒之间, 对应裂变同核异能态, 比基态高 1.4 MeV. 为了在体系中引入反射对称性破缺, 本文在约束四极形变  $\beta_{20}$  时引入非零的初始八极形变  $\beta_{30}$ , 计算了  $\beta_{20}$  的势能曲线并用蓝色短划线展示. 反射对称性破缺之后, 裂变内垒的变化小于 0.01 MeV, 裂变外垒降低了 4.29 MeV, 同核异能态的变化小于 0.01 MeV. 这说明反射对称性破缺可以显著降低裂变外垒的高度, 对裂变内垒和同核异能态的影响较小. 同理, 为了在体系中引入轴对称性破缺, 我们在约束四极形变  $\beta_{20}$  时同时引入非零的初始三轴形变  $\beta_{22}$  和八极形变  $\beta_{30}$ , 计算了  $\beta_{20}$  的势能曲线并将其用红色实线展示. 相较于仅反射对称性破缺的结果, 反射对称和轴对称性同时破缺使得裂变内垒降低了 2.14 MeV, 裂变外垒降低了 0.57 MeV, 同核异能态的变化仍然小于 0.01 MeV. 这说明轴对称性破缺后可以同时降低裂变内垒和外垒的高度, 对同核异能态的影响可忽略. 这与非相对论密度泛函理论 [47,48] 和多维约束的相对论密度泛函理论 [31,49] 的结论一致. 由于 3DRDFT 可以不受对称性限制地研究原子核, 因此可以研究  $V_4$  对称性对裂变内垒, 外垒和同核异能态的影响. 通过在约束四极形变  $\beta_{20}$  的同时引入非零的三轴形变  $\beta_{22}$  和八极形变  $\beta_{30}$ ,  $\beta_{31}$ ,  $\beta_{33}$ , 在裂变内垒、外垒和同核异能态的周围计算了  $V_4$  对称性破缺后的原子核能量, 结果

如图 2 中绿色空心圆所示. 打破  $V_4$  对称导致的裂变内垒、外垒和同核异能态高度的变化都小于 0.05 MeV. 这表明在计算裂变位垒和同核异能态时,  $V_4$  对称性的影响可以忽略. 这里将打破  $V_4$  对称性后裂变内垒、外垒和同核异能态的 3DRDFT 计算结果与实验上的经验值进行比较. 其中, 内垒的高度与经验值差值仅为 0.07 MeV, 外垒的高度与经验值差值仅为 0.03 MeV, 很好地再现了实验上提取的经验值. 3DRDFT 计算的同核异能态的能量 (取基态为能量零点) 为 1.4 MeV, 文献 [31] 中计算的同核异能态的能量为 2.0 MeV, 实验上提取的同核异能态能量的经验值为 2.8 MeV. 3DRDFT 计算的同核异能态的能量小于文献 [31] 中的结果. 这可能是因为 3DRDFT 是在全形变空间中寻找能量极小, 相当于在更大的模型空间上进行变分计算, 因此会得到能量更低的同核异能态. 3DRDFT 计算的同核异能态的能量比经验值低 1.4 MeV, 相差较大. 这可能是因为 3DRDFT 中原子核的波函数仅为一个 Slater 行列式, 没有考虑基态和同核异能态之间的混合. 通过生成坐标方法 [74] 考虑不同形变的原子核波函数的混合, 就可以降低基态能量, 可以更好地再现同核异能态的经验值.

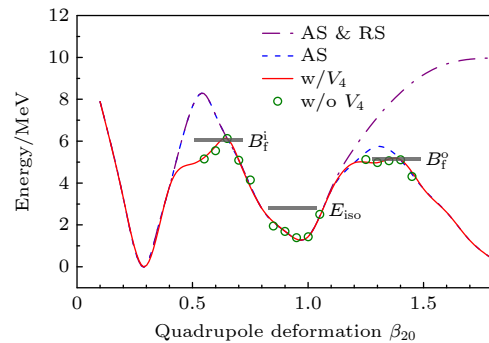


图 2  $^{240}\text{Pu}$  分别在保持轴对称和反射对称性 (紫色点划线)、轴对称性 (蓝色短划线)、 $V_4$  对称性 (红色实线) 时的势能曲线以及  $V_4$  对称性破缺后在裂变内垒、外垒和同核异能态附近的势能 (绿色空心圆). 经验裂变内垒  $B_f^i$ 、外垒  $B_f^o$  和同核异能态  $E_{\text{iso}}$  的能量由黑色横线标记. 取  $^{240}\text{Pu}$  的基态能量为 0

Fig. 2. The potential energy curve of  $^{240}\text{Pu}$  with axial symmetry and reflection symmetry (purple dot-dashed line), axial symmetry (blue dashed line),  $V_4$  symmetry (red solid line) and potential energy of  $^{240}\text{Pu}$  nearby inner barrier, outer barrier, isomeric state with  $V_4$  symmetry breaking (green open circle). The empirical inner barrier  $B_f^i$ , outer barrier  $B_f^o$  and isomeric state  $E_{\text{iso}}$  is denoted by the black dash line. The energy is normalized with respect to the energy of the ground state.

表 1 在  $V_4$  对称性破缺时, 7 个锕系原子核的裂变内垒、外垒和同核异能态的能量经验值  $\Delta E_{\text{Exp}}$  和基于 3DRDFT 计算的能量  $\Delta E_{\text{Theo}}$ , 四极形变  $\beta_{20}$ ,  $\beta_{22}$  和八极形变  $\beta_{30}$ ,  $\beta_{31}$ ,  $\beta_{32}$ ,  $\beta_{33}$

Table 1. The energies extracted from experiments  $\Delta E_{\text{Exp}}$  and the energies  $\Delta E_{\text{Theo}}$ , quadrupole deformations  $\beta_{20}$ ,  $\beta_{22}$  and octupole deformations  $\beta_{30}$ ,  $\beta_{31}$ ,  $\beta_{32}$ ,  $\beta_{33}$  of fission inner barrier, outer barrier, and isomeric states of 7 actinide nuclei obtained by 3DRDFT with  $V_4$  symmetry breaking.

核素	$^{232}\text{U}$	$^{234}\text{U}$	$^{236}\text{U}$	$^{238}\text{U}$	$^{236}\text{Pu}$	$^{238}\text{Pu}$	$^{240}\text{Pu}$	
内垒	$\Delta E_{\text{Exp}}/\text{MeV}$	4.90	4.80	5.00	6.30	—	5.60	6.05
	$\Delta E_{\text{Theo}}/\text{MeV}$	4.59	5.24	5.13	5.70	5.94	5.75	6.12
	$\beta_{20}$	0.60	0.60	0.60	0.65	0.60	0.60	0.65
	$\beta_{22}$	0.04	0.06	0.06	0.06	0.06	0.06	0.06
	$\beta_{30}$	0	0	0	0	0	0	0
	$\beta_{31}$	0	0	0	0	0	0	0
	$\beta_{32}$	0	0	0	0	0	0	0
	$\beta_{33}$	0	0	0	0	0	0	0
外垒	$\Delta E_{\text{Exp}}/\text{MeV}$	5.40	5.50	5.67	5.50	—	5.10	5.15
	$\Delta E_{\text{Theo}}/\text{MeV}$	5.45	6.06	5.58	5.78	5.15	5.02	5.12
	$\beta_{20}$	1.20	1.20	1.35	1.35	1.20	1.25	1.40
	$\beta_{22}$	0.03	0.03	0.03	0.03	0.03	0.03	0.02
	$\beta_{30}$	0.41	0.37	0.39	0.50	0.35	0.30	0.51
	$\beta_{31}$	0	0	0	0	0	0	0
	$\beta_{32}$	0.02	0.01	0	0	0.02	0.01	0.01
	$\beta_{33}$	0	0	0	0	0	0	0
同核异能态	$\Delta E_{\text{Exp}}/\text{MeV}$	—	—	2.3	2.6	—	2.4	2.25
	$\Delta E_{\text{Theo}}/\text{MeV}$	2.1	1.2	1.2	1.2	1.4	1.4	1.4
	$\beta_{20}$	0.85	0.90	0.90	1.00	0.90	0.90	0.95
	$\beta_{22}$	0	0	0	0	0	0	0
	$\beta_{30}$	0	0	0	0	0	0	0
	$\beta_{31}$	0	0	0	0	0	0	0
	$\beta_{32}$	0	0	0	0	0	0	0
	$\beta_{33}$	0	0	0	0	0	0	0

### 3.3 7 个锕系原子核的裂变内垒、外垒及 isomer 态

表 1 列出了利用 3DRDFT 计算的  $^{232}\text{U}$ ,  $^{234}\text{U}$ ,  $^{236}\text{U}$ ,  $^{238}\text{U}$ ,  $^{236}\text{Pu}$ ,  $^{238}\text{Pu}$ ,  $^{240}\text{Pu}$  原子核处于裂变内垒、外垒及同核异能态时的形变和能量. 这些原子核的裂变内垒、外垒和同核异能态的四极形变  $\beta_{20}$  分别处于 0.60—0.65 之间、1.20—1.40 之间和 0.85—1.00 之间, 并且同一种元素的裂变内垒、外垒和同核异能态的四极形变  $\beta_{20}$  随中子数单调增加. 原子核处于裂变内垒和外垒时, 其对应的三轴形变  $\beta_{22}$  分别处于 0.04—0.07 之间和 0.02—0.03 之间, 而同核异能态的三轴形变都为 0. 这体现轴对称性破缺对锕系原子核的裂变内垒和外垒都有影响, 而对裂变同核异能态的影响可忽略. 这些原子核处于裂变内垒和同核异能态时, 八极形变  $\beta_{30}$  都

为 0, 而处于裂变外垒时, 具有明显的八极形变. 这体现反射对称性破缺对裂变外垒具有显著影响, 对裂变内垒和同核异能态的影响可忽略. 这些原子核处于裂变内垒、外垒及同核异能态时, 对应的非轴对称八极形变  $\beta_{31}$  和  $\beta_{33}$  均为 0, 这体现了  $V_4$  对称性破缺对裂变位垒和同核异能态的影响几乎为 0.

## 4 结 论

采用三维格点空间相对论密度泛函理论计算了  $^{232}\text{U}$ ,  $^{234}\text{U}$ ,  $^{236}\text{U}$ ,  $^{238}\text{U}$ ,  $^{236}\text{Pu}$ ,  $^{238}\text{Pu}$ ,  $^{240}\text{Pu}$  原子核处于裂变内垒、外垒和同核异能态时的形变和能量. 以  $^{240}\text{Pu}$  为例, 展示了反射对称破缺、轴对称破缺和  $V_4$  对称性破缺后, 原子核势能曲线的变化. 计算结果表明: 反射对称性破缺能显著降低外

垒高度 (约为 4 MeV), 轴对称性破缺会同时降低内垒 (约为 2 MeV) 和外垒高度 (约为 0.6 MeV),  $V_4$  对称性破缺对位垒的影响可忽略不计, 裂变同核异能态的形变和能量几乎不受对称性破缺的影响. 对于本文考虑的铜系偶偶核, 在  $V_4$  对称性破缺的情况下, 它们的裂变内垒、外垒和同核异能态的非轴对称八极形变  $\beta_{31}$  和  $\beta_{33}$  皆为 0. 这也反映了  $V_4$  对称性破缺对裂变位垒和同核异能态影响十分有限.

本文只展示了  $Z = 94$  和  $N = 146$  附近的偶偶核中轴对称破缺、反射对称破缺和  $V_4$  对称性破缺对裂变位垒和同核异能态的影响, 对于其他核区的偶偶核, 以及奇奇核和奇 A 核的相关研究仍在进行中.

## 数据可用性声明

支撑本研究数据的数据集可在科学数据银行 <https://www.doi.org/10.57760/sciencedb.j00213.0022900229> 中访问获取.

## 参考文献

- [1] Schmidt K H, Jurado B 2018 *Rep. Prog. Phys.* **81** 106301
- [2] Bender M, Bernard R, Bertsch G, Chiba S, Dobaczewski J, Dubray N, Giuliani S A, Hagino K, Lacroix D, Li Z, Magierski P, Maruhn J, Nazarewicz W, Pei J, Péru S, Pillet N, Randrup J, Regnier D, Reinhard P G, Robledo L M, Ryssens W, Sadhukhan J, Scamps G, Schunck N, Simenel C, Skalski J, Stetcu I, Stevenson P, Umar S, Verriere M, Vretenar D, Warda M, Åberg S 2020 *J. Phys. G: Nucl. Part. Phys.* **47** 113002
- [3] Schunck N, Robledo L M 2016 *Rep. Prog. Phys.* **79** 116301
- [4] Schunck N, Regnier D 2022 *Prog. Part. Nucl. Phys.* **125** 103963
- [5] Hofmann S, Münzenberg G 2000 *Rev. Mod. Phys.* **72** 733
- [6] Oganessian Y T, Abdullin F S, Bailey P D, Benker D E, Bennett M E, Dmitriev S N, Ezold J G, Hamilton J H, Henderson R A, Itkis M G, Lobanov Y V, Mezentsev A N, Moody K J, Nelson S L, Polyakov A N, Porter C E, Ramayya A V, Riley F D, Roberto J B, Ryabinin M A, Rykaczewski K P, Saggaidak R N, Shaughnessy D A, Shirokovsky I V, Stoyer M A, Subbotin V G, Sudowe R, Sukhov A M, Tsyganov Y S, Utyonkov V K, Voinov A A, Vostokin G K, Wilk P A 2010 *Phys. Rev. Lett.* **104** 142502
- [7] Möller P, Sierk A J, Ichikawa T, Iwamoto A, Bengtsson R, Uhrenholt H, Åberg S 2009 *Phys. Rev. C* **79** 064304
- [8] Pei J C, Nazarewicz W, Sheikh J A, Kerman A K 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 192501
- [9] Korobkin O, Rosswog S, Arcones A, Winteler C 2012 *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **426** 1940
- [10] Just O, Bauswein A, Pulpillo R A, Goriely S, Janka H T 2015 *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **448** 541
- [11] Chen J W, Pei J C, Qiang Y, Chi J H 2023 *Chin. Phys. Lett.* **40** 012401
- [12] Möller P, Madland D, Sierk A, Iwamoto A 2001 *Nature* **409** 785790
- [13] Pomorski K, Dudek J 2003 *Phys. Rev. C* **67** 044316
- [14] Ivanyuk F A, Pomorski K 2009 *Phys. Rev. C* **79** 054327
- [15] Kowal M, Jachimowicz P, Sobczewski A 2010 *Phys. Rev. C* **82** 014303
- [16] Royer G, Jaffré M, Moreau D 2012 *Phys. Rev. C* **86** 044326
- [17] Mamdouh A, Pearson J, Rayet M, Tondeur F 2001 *Nucl. Phys. A* **679** 337
- [18] Bührvenich T, Bender M, Maruhn J A, Reinhard P G 2004 *Phys. Rev. C* **69** 014307
- [19] Samyn M, Goriely S, Pearson J M 2005 *Phys. Rev. C* **72** 044316
- [20] Minato F, Chiba S, Hagino K 2009 *Nucl. Phys. A* **831** 150
- [21] Egido J L, Robledo L M 2000 *Phys. Rev. Lett.* **85** 1198
- [22] Kortelainen M, McDonnell J, Nazarewicz W, Reinhard P G, Sarich J, Schunck N, Stoitsov M V, Wild S M 2012 *Phys. Rev. C* **85** 024304
- [23] McDonnell J, Schunck N, Nazarewicz W 2013 *Fission and Properties of Neutron-Rich Nuclei: Proceedings of the Fifth International Conference on Fission and Properties of Neutron-Rich Nuclei (ICFN5)* (Singapore: World Scientific Publishing Company) pp597–604
- [24] Staszczak A, Baran A, Nazarewicz W 2013 *Phys. Rev. C* **87** 024320
- [25] Schunck N, Duke D, Carr H, Knoll A 2014 *Phys. Rev. C* **90** 054305
- [26] Blum V, Maruhn J A, Reinhard P G, Greiner W 1994 *Phys. Lett. B* **323** 262
- [27] Zhang W, Zhang S S, Zhang S Q, Meng J 2003 *Chin. Phys. Lett.* **20** 1694
- [28] Lü H F, Geng L S, Meng J 2006 *Chin. Phys. Lett.* **23** 2940
- [29] Li Z P, Nikšić T, Vretenar D, Ring P, Meng J 2010 *Phys. Rev. C* **81** 064321
- [30] Abusara H, Afanasjev A V, Ring P 2010 *Phys. Rev. C* **82** 044303
- [31] Lu B N, Zhao E G, Zhou S G 2012 *Phys. Rev. C* **85** 011301
- [32] Lu B N, Zhao J, Zhao E G, Zhou S 2012 *EPJ Web Conf.* **38** 05003
- [33] Abusara H, Afanasjev A V, Ring P 2012 *Phys. Rev. C* **85** 024314
- [34] Prassa V, Nikšić T, Lalazissis G A, Vretenar D 2012 *Phys. Rev. C* **86** 024317
- [35] Möller P, Sierk A J, Iwamoto A 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 072501
- [36] Brack M, Damgaard J, Jensen A S, Pauli H C, Strutinsky V M, Wong C Y 1972 *Rev. Mod. Phys.* **44** 320
- [37] Pashkevich V 1969 *Nucl. Phys. A* **133** 400
- [38] Möller P, Nilsson S G 1970 *Phys. Lett. B* **31** 283
- [39] Randrup J, Larsson S E, Möller P, Nilsson S G, Pomorski K, Sobczewski A 1976 *Phys. Rev. C* **13** 229
- [40] Pashkevich V 1971 *Nucl. Phys. A* **169** 275
- [41] Pauli H C, Ledergerber T, Brack M 1971 *Phys. Lett. B* **34** 264
- [42] Bender M, Heenen P H, Reinhard P G 2003 *Rev. Mod. Phys.* **75** 121
- [43] Meng J 2016 *Relativistic Density Functional for Nuclear Structure* (Singapore: World Scientific) p716
- [44] Girod M, Grammaticos B 1983 *Phys. Rev. C* **27** 2317
- [45] Rutz K, Maruhn J, Reinhard P G, Greiner W 1995 *Nucl. Phys. A* **590** 680
- [46] Bonneau L, Quentin P, Samsøen D 2004 *Eur. Phys. J. A* **21** 391

- [47] Ryssens W, Scamps G, Goriely S, Bender M 2022 *Eur. Phys. J. A* **50** 246
- [48] Ryssens W, Scamps G, Goriely S, Bender M 2023 *Eur. Phys. J. A* **59** 96
- [49] Lu B N, Zhao J, Zhao E G, Zhou S G 2014 *Phys. Rev. C* **89** 014323
- [50] Ma Z Q 2006 *Group Theory in Physics* (Peking: Science Press) p22 (in Chinese) [马中骥 2006 物理学中的群论 (北京: 科学出版社) 第 22 页]
- [51] Ren Z X, Zhang S Q, Meng J 2017 *Phys. Rev. C* **95** 024313
- [52] Li B, Ren Z X, Zhao P W 2020 *Phys. Rev. C* **102** 044307
- [53] Xu F F, Li B, Ren Z X, Zhao P W 2024 *Phys. Rev. C* **109** 014311
- [54] Ring P 1996 *Prog. Part. Nucl. Phys.* **37** 193
- [55] Ren Z X, Zhao P W 2020 *Phys. Rev. C* **102** 021301
- [56] Vretenar D, Afanasjev A, Lalazissis G, Ring P 2005 *Phys. Rep.* **409** 101
- [57] Meng J, Peng J, Zhang S Q, Zhao P W 2013 *Front. Phys.* **8** 55
- [58] Ren Z X, Zhang S Q, Zhao P W, N I, Maruhn J A, Meng J 2019 *Sci. China Phys. Mech. Astron.* **62** 112062
- [59] Ren Z X, Zhao P W, Zhang S Q, Meng J 2020 *Nucl. Phys. A* **996** 121696
- [60] Xu F F, Li B, Ring P, Zhao P W 2024 *Phys. Lett. B* **856** 138893
- [61] Ren Z X, Zhao P W, Meng J 2022 *Phys. Rev. C* **105** L011301
- [62] Li B, Zhao P W, Meng J 2024 *Phys. Lett. B* **856** 138877
- [63] Xu F F, Wang Y K, Wang Y P, Ring P, Zhao P W 2024 *Phys. Rev. Lett.* **133** 022501
- [64] Zhao P W, Li Z P, Yao J M, Meng J 2010 *Phys. Rev. C* **82** 054319
- [65] Yang Y L, Wang Y K, Zhao P W, Li Z P 2021 *Phys. Rev. C* **104** 054312
- [66] Yang Y L, Zhao P W, Li Z P 2023 *Phys. Rev. C* **107** 024308
- [67] Ryssens W, Hellemans V, Bender M, Heenen P H 2015 *Comput. Phys. Commun.* **190** 231
- [68] Bender M, Rutz K, Reinhard P, Maruhn J A 2000 *Eur. Phys. J. A* **8** 59
- [69] Staszczak A, Stoitsov M, Baran A, Nazarewicz W 2010 *Eur. Phys. J. A* **46** 85
- [70] Wang M, Huang W, Kondev F, Audi G, Naimi S 2021 *Chin. Phys. C* **45** 030003
- [71] Kondev F, Wang M, Huang W, Naimi S, Audi G 2021 *Chin. Phys. C* **45** 030001
- [72] Wang M, Audi G, Kondev F, Huang W J, Naimi S, Xu X 2017 *Chin. Phys. C* **41** 030003
- [73] Agbemava S E, Afanasjev A V, Ray D, Ring P 2014 *Phys. Rev. C* **89** 054320
- [74] Ring P, Schuck P 1980 *The Nuclear Many-Body Problem* (Heidelberg: Springer Berlin) pp244–279
- [75] Capote R, Herman M, Obložinský P, Young P, Goriely S, Belgya T, Ignatyuk A, Koning A, Hilaire S, Plujko V, Avrigeanu M, Bersillon O, Chadwick M, Fukahori T, Ge Z, Han Y, Kailas S, Kopecky J, Maslov V, Reffo G, Sin M, Soukhovitskii E, Talou P 2009 *Nucl. Data Sheets* **110** 3107
- [76] Singh B, Zywina R, Firestone R B 2002 *Nucl. Data Sheets* **97** 241

SPECIAL TOPIC—Thematic data in nuclear physics: Experimental, theoretical and applied research

## Relativistic density functional theory in 3-dimensional lattice: Fission barriers with PC-PK1\*

HUANG Yihan LI Bo ZHAO Pengwei †

(State Key Laboratory of Nuclear Physics and Technology, Peking University, Beijing 100871, China)

( Received 12 September 2025; revised manuscript received 16 October 2025 )

### Abstract

Nuclear fission is a decay process by which a heavy nucleus splits into two or more lighter nuclei. It plays a crucial role in the synthesis of superheavy elements, the rapid neutron-capture process, nuclear energy application and so on. The fission barrier is an important property of heavy nuclei, because its height and width directly relate to the lifetimes of heavy nuclei, and influence the charge yield, mass yield, and kinetic energies of fission fragments. In our study, the potential energy curves of actinide nuclei are obtained from the relativistic density functional theory in three-dimensional (3D) lattice when the axial symmetry, reflection symmetry and  $V_4$  symmetry are broken in turn. The effects of all the quadrupole and octupole deformation degrees of freedom on the inner barrier, outer barrier, and the fission isomeric state are investigated. It is found that breaking the reflection symmetry can lower the outer fission barriers significantly, breaking the axial symmetry can lower both the inner and outer barriers, breaking the  $V_4$  symmetry has little effect on the inner and outer barriers, and the fission isomeric state is almost unaffected by symmetry breaking. Based on the relativistic density functional PC-PK1 and monopole pairing interaction, our results well reproduce the empirical values of the inner and outer barriers extracted from experiments, and the energies of the fission isomeric states are slightly underestimated. All the data presented in this paper are openly available at <https://www.doi.org/10.57760/sciencedb.j00213.00229>.

**Keywords:** relativistic density functional theory, 3-dimensional lattice space, fission barrier,  $V_4$  symmetry

**DOI:** [10.7498/aps.75.20251255](https://doi.org/10.7498/aps.75.20251255)

**CSTR:** [32037.14.aps.75.20251255](https://cstr.cn/32037.14.aps.75.20251255)

\* Project supported by the National Key R&D Program of China (Grant Nos. 2024YFE0109803, 2024YFA1612600), the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 12435006, 12475117, 12141501), the National Key Laboratory of Neutron, China (Grant No. NST202401016), and the High-Performance Computing Platform of Peking University, China.

† Corresponding author. E-mail: [pwzhao@pku.edu.cn](mailto:pwzhao@pku.edu.cn)