中子诱发锕系元素裂变的宏观-微观理论研究

樊铁栓^{1*}, 王智明¹, 钟春来¹, 朱鑫¹, 朱文杰¹, 刘丽乐², 陈永静², 舒能川², 葛智刚², 吴锡真², 李祝霞^{1,2}

1. 北京大学物理学院, 重离子物理研究所, 核科学与技术国家重点实验室, 北京 100871;

2. 中国原子能科学研究院, 北京 102413

*联系人, E-mail: tsfan@pku.edu.cn

收稿日期: 2019-07-04; 接受日期: 2019-08-30; 网络出版日期: 2020-02-11

国家自然科学基金重大项目(编号: 11790324, 91226102)、国家重点研发计划(编号: 2016YY0200804, 2017YFF0206205)和国防基础科研计划(编号: B0120110034)资助项目

摘要 宏观-微观模型是核裂变机制理论研究的主要途径之一, 是有希望可以很好诠释实验并与实验结果进行定量比较的理论方法. 本文综述了在中子诱发锕系元素裂变的宏观-微观理论研究的主要进展. 通过开展宏观-微观模型研究, 实现了基于五维形变参量的势能曲面的真实计算, 利用先进的搜索算法研究获得了核裂变路径、鞍点构型等势能曲面结构信息. 基于五维势能曲面上的裂变动力学研究, 实现了对主要锕系元素的裂变碎片质量分布数据的理论描述.

关键词 宏观-微观模型, 多维势能曲面, 锕系核, 裂变可观测量, 裂变动力学

PACS: 24.75.+i, 25.85.-w, 21.60.Cs

1 引言

对原子核裂变过程进行系统而深入的实验和理论研究, 既是理解极端条件下物质结构(如大形变集体运动)的重要手段, 又是人类获取核能源的重要基础性工作. 近些年来, 从工程领域中先进核能与核装置的优化设计和核废料的安全处置研究, 到物理学中核模型的检验、超重核融合机制研究和天体核物理的快中子俘获现象的理解, 均对精确的核裂变数据及裂变机制研究提出了新的需求, 核裂变数据及裂变机制研究

已经成为国际上核物理研究的新热点^[1-7].

裂变是核内所有核子平等参与的量子多体体系在多维空间中的超大振幅运动, 在复杂的动力学过程中又存在着多体关联和涨落效应. 裂变后现象主要涉及裂变核从鞍点到断点的动力学过程, 即形状从连续变化到突然断裂的过程, 对应的可观测量, 如裂变产物核的质量分布、电荷分布、动能分布、瞬发中子多重性、瞬发中子谱和瞬发伽马谱等均为分布量. 由于裂变过程的复杂性, 至今还没有任何裂变理论能够定量诠释所有的裂变可观察量. 从应用角度看, 即使是裂

引用格式: 樊铁栓, 王智明, 钟春来, 等. 中子诱发锕系元素裂变的宏观-微观理论研究. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2020, 50: 052009
Fan T S, Wang Z M, Zhong C L, et al. Study of neutron induced fission of actinides in a macroscopic-microscopic model (in Chinese). Sci Sin-Phys Mech Astron, 2020, 50: 052009, doi: [10.1360/SSPMA-2019-0235](https://doi.org/10.1360/SSPMA-2019-0235)

变碎片质量分布和中子发射这两个在核能工程中使用最多的数据, 理论计算的精度依然难以满足工程应用提出的要求.

裂变研究的主要理论方法可分为宏观-微观理论与微观理论. 在裂变的宏观-微观理论研究方面, 自从20世纪80–90年代以来, Brosa等人^[8,9]提出了无规颈断裂模型, 通过计算得到了基于五维形变空间的势能曲面, 进而给出了标准道(Standard Channel)、超短道(Super Short Channel)和超长道(Super Long Channel)的多条裂变通道, 在理论上找到了裂变多模式存在的证据, 他们计算的中子诱发铀系元素裂变的碎片质量分布和瞬发中子谱的结果与相应实验数据可以进行系统的比较^[10–13]. Duijvestijn等人^[14]通过温度相关的势能曲面计算扩展了Brosa模型, 计算了中能区直到200 MeV核子诱发铀系元素裂变的质量分布和电荷分布, 但还不能从定量上很好地描述实验数据, 甚至某些理论曲线的形状与实验走向相异.

从20世纪60年代至今, Möller等人^[15–18]发展出了另外一套描述核形状的参数和宏观模型参数, 建立了用于裂变宏观能量计算的有限力程液滴模型(FRLDM), 将有限力程的折叠汤川势模型^[19]应用到微观能级的计算中. 他们针对5254个偶偶核($170 \leq A \leq 330$), 使用宏观-微观方法在五维形变空间上计算了315625个形状的势能, 系统地给出了从质子滴线到 neutron 滴线的所有重原子核的裂变位垒高度^[16]. 通过从Pb到Fm共138个偶偶核的五维势能曲面分析, 他们也证实了多数重核存在对称裂变和非对称裂变两种裂变模式^[20].

由于经过大形变演化的裂变核的最终断裂与断前动力学机制有关, 因此人们发展了不同的裂变动力学模型. 2011年Randrup等人^[21,22]在Möller等人计算的势能曲面上进行了布朗运动的动力学计算, 成功给出了U, Pu, Th和Hg等多种同位素的质量分布. 针对 $^{194,196}\text{At}$ 和 $^{200,202}\text{Fr}$ 低能 β -缓发裂变现象, 由动力学计算得到了衰变子核 $^{178,180}\text{Hg}$ 的非对称裂变碎片质量分布和 $^{204,206,208}\text{Rn}$ 的对称裂变碎片质量分布^[23]. 将Randrup的动力学方法与考虑了电荷分布不对称性自由度的势能曲面结合, 还可以有效地改进电荷分布的计算结果^[24].

微观方法是裂变理论研究的另一个正在蓬勃发展的方向, 其中最具有代表性的是基于自洽平均场(Self-Consistent Mean Field, SCMF)理论提出的CHF(Constrained Hartree-Fock)模型和能量密度泛函(En-

ergy Density Functional, EDF)方法. 微观方法的特点之一是计算量较大, 例如Bulgac等人^[25]的工作就是在美国的TITAN超算中心完成的. 由于裂变过程是一个随时间演化的动力学过程, Simenel和Umar^[26]引入TDHF(TDDFT)方法, 通过直接在三维坐标空间上建模实现了对裂变演化过程的模拟.

国内在核裂变理论研究方面, 曾经发展了原子核大振幅集体运动的非平衡输运理论^[27], 包括宏观和微观输运理论, 建立了用Fokker-Planck方程计算裂变宽度和质量分布的程序. 微观理论研究的一个重要工作是发展了多维约束协变密度泛函理论(MDC-CDFTs), 进而研究了铀系和超铀系核的势能曲面和裂变位垒^[28,29], 另外有超重复合核的裂变位垒、裂变速率与温度相关裂变位垒的关系等方面的工作^[30,31]. 在宏观-微观理论研究方面中, 通过非稳定核的表面扩散效应修正提高了基态质量公式的计算精度^[32], 在中子诱发铀系核裂变的多模式理论和裂变道概率系统学研究^[10,11]、五维势能曲面理论计算及其搜索算法研究^[33–35]、郎之万方程计算裂变碎片质量分布^[36]等方面取得了进展.

本研究将宏观-微观方法和裂变动力学研究结合, 开展了中子诱发铀系元素裂变的理论研究工作. 基于宏观-微观模型, 实现了五维形变参量空间上的势能曲面的真实计算, 利用先进的搜索算法获得了五维势能曲面上核裂变路径、鞍点构型等重要结构信息; 开展了基于五维势能曲面的裂变动力学研究, 为最终实现对铀系元素的裂变碎片质量分布、电荷分布和动能分布等裂变后现象的理论描述打下了基础.

2 基于宏观-微观方法计算五维势能曲面

为了计算势能曲面, 首先要将核的形状用若干个参数来表示, 而合适的参数化方法应该能自洽地描述从近球形的基态一直到断前的哑铃形状的整体形变过程. 通过改变形状参数的值得到一个由离散格点组成的多维形变空间, 由宏观-微观方法计算每一个格点上的结合能, 最终能够得到位于多维形变空间上的完整的势能曲面^[33,35].

2.1 核形状描述

虽然核形状的描述可以有不同方法, 但是难以从

理论上在其中做出有根据的选择, 其原因在于复合核的形状不是裂变反应的可观测测量. 但是, 某些实验现象却可以间接地帮助我们推测复合核在断裂前可能的形状. 比如铜系元素的低能裂变反应以非对称裂变为, 重碎片质量数 $A_H \approx 140$, 这个值恰好与 ^{132}Sn 这个双幻数核接近, 因此, 重碎片在断裂前的形变很可能接近球形. 最新的理论结果^[37]发现, 复合核的断前形状描述还应该包括八极形变. 在相对较小的形变处, 一些核素存在的第三个位垒可能对应裂变反应截面上精细的共振峰结构, 由此也可以抽取出形变信息. 所以, 对于核形变参量的选择与描述仍需要进一步的研究工作. 目前普遍的认识是, 因为复合核要经历从基态的椭球体逐渐伸长演化到断前的哑铃形状, 合理的形状参数组必须能够描述这一完整的核裂变过程.

本文采用的形状参数有两组: 一组是能够独立描述“碎片”形变的连接二次曲面形状(Three-Quadrature Surface); 另一组是参数含义更加清晰简单的广义劳伦斯形状(Generalized Lawrence Shape), 这两组形状参数各自都包含了5个独立变量. 连接二次曲面用3个二次曲面光滑连接的方式描述形状演化, 当复合核拉长至越过外位垒后, 中间的二次曲面由椭球形变成了双曲面, 进而出现哑铃状形变. 广义劳伦斯形状在描述颈部曲率的参数从负值过渡到正值以后, 出现哑铃状. 该形状不能直接控制碎片的形变, 但是通过参数 s 和 z 也可以间接地控制不对称形变和碎片的形变.

连接二次曲面参数的形式^[15]如下:

$$\rho^2(z) = \begin{cases} a_1^2 - \frac{a_1^2}{c_1^2}(z-l_1)^2, & l_1 + c_1 > z > z_1, \\ a_2^2 - \frac{a_2^2}{c_2^2}(z-l_2)^2, & z_2 > z > l_2 - c_2, \\ a_3^2 - \frac{a_3^2}{c_3^2}(z-l_3)^2, & z_1 > z > z_2, \end{cases} \quad (1)$$

式中, a_i , c_i 表示的是椭球的长短轴, l_i 表示的3个椭球中心的位置, z_i 表示的是3个曲面连接处的位置. 在实际应用中, 可以将5个自由参数约束为核的四极形变 Q_2 、两碎片的形变 ε_{f1} 和 ε_{f2} 、颈部半径 d 和质量不对称性 α_g , 其定义分别为

$$Q_2 = \frac{3Z}{r_0^3 A} \int_V \sqrt{\rho^2 + z^2} 2\rho P_2 \left(\frac{z}{\sqrt{\rho^2 + z^2}} \right) d\rho dz, \quad (2)$$

$$\alpha_g = \frac{a_1^2 c_1 - a_2^2 c_2}{a_1^2 c_1 + a_2^2 c_2}, \quad (3)$$

$$\frac{1}{2} \frac{3 - 2\varepsilon_{f1}}{3 + \varepsilon_{f1}} = \frac{a_1^2}{c_1^2}, \quad (4)$$

$$\frac{1}{2} \frac{3 - 2\varepsilon_{f2}}{3 + \varepsilon_{f2}} = \frac{a_2^2}{c_2^2}. \quad (5)$$

广义劳伦斯形状数学表达式^[9,10]为

$$\rho^2(\zeta) = (l^2 - \zeta^2) \sum_{i=0}^{n=4} a_i (\zeta - z)^i. \quad (6)$$

广义劳伦斯形状的5个独立几何参数为 l , r , z , c , s , 它们分别表示原子核形变的半长度、颈部半径、颈部位置、颈部曲率和质心坐标. 需要说明的是, 这里的质心坐标并不是实际的质心位置, 仅仅作为形状参数被引入. 图1给出连接二次曲面和广义劳伦斯形状的示意图.

对于连接二次曲面, 计算设置的格点总数为500万个左右, 而广义劳伦斯形状的格点数约为1300万, 从而充分保证了势能曲面的完整性, 使得计算得到的势能曲面能够模拟裂变所经历的全部可能的形状, 保证了动力学计算和位垒搜索结果的收敛性.

2.2 宏观模型

选择由Pomorski等人^[38,39]提出的LSD模型(Lublin-Strasbourg Drop Model)作为描述核裂变过程的宏观模型. 相对于传统的液滴模型, Pomorski等人通过对核的能量密度泛函作薄壁展开得到新的宏观能表达式, 而用于裂变研究的LSD公式^[38,39]最主要改进之处就是增加了表面曲率项, 其中参数是通过拟合2766个核的结合能实验数据确定的, 相对来说更适于描述核的大形变, 他们计算基态质量的误差控制在 $\delta B = 0.698 \text{ MeV}$.

LSD模型的计算宏观能 E_{mac} 的表达式为

$$E_{\text{mac}} = b_{\text{surf}} \left(1 - \kappa_{\text{surf}} I^2 \right) A^{2/3} B_{\text{surf}}(q) + b_{\text{cur}} \left(1 - \kappa_{\text{cur}} I^2 \right) A^{1/3} B_{\text{cur}}(q) + \frac{3}{5} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0^{\text{ch}} A^{1/3}} B_{\text{coul}}(q), \quad (7)$$

式中, $I = |N - Z|/A$ 是复合核的同位旋, κ_{surf} , κ_{cur} 分别为拟合参数, $B_{\text{surf}}(q)$, $B_{\text{cur}}(q)$ 和 $B_{\text{coul}}(q)$ 分别表示变形核表面积、曲率积分和库仑能与球形核对应量的比值.

图2比较了利用LSD模型和Myers-Swiatecki液滴

图 1 连接二次曲面(a)和广义劳伦斯形状^[35](b)的示意图. 各个参量的含义在图中已标明

Figure 1 Three quadrature surfaces (a) and generalized Lawrence shape ^[35] (b). The shape parameters are depicted on the plot.

图 2 (网络版彩图) LSD模型(蓝色曲线)与MS-LDM(朱红色曲线)模型宏观能计算结果的沿裂变路径的比较

Figure 2 (Color online) Comparison of macroscopic energies calculated in LSD (blue curve) and MS-LDM models (vermillion curve) along the fission path.

模型(MS-LDM)^[40]计算的宏观能, 发现LSD模型在计算位垒高度时解决了LDM模型计算结果偏高的问题.

2.3 微观修正能

在宏观能计算的基础上, 考虑原子核的壳层结构以及成对效应, 采用Strutinsky壳修正方法进行微观能量修正. 单粒子能级通过求解Schrodinger方程的本征值得到, 核子(中子或质子)的哈密顿量为

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 + V_1 + V_{so} + V_c, \quad (8)$$

式中, V_1 是微观单粒子势, V_{so} 是自旋轨道耦合势, V_c 是

库仑势. 在多种可供选择的微观单粒子势中, 使用了Woods-Saxon势^[41]和折叠Yukawa势^[16]. Woods-Saxon势为

$$V_1(\rho, \zeta) = -\frac{V_0}{1 + \exp\left\{\frac{[L(\rho, \zeta) - R_0]}{a}\right\}}, \quad (9)$$

式中, $L(\rho, \zeta)$ 描述的是一个等势面, 形状等同于广义劳伦斯形状的缩放; a 表示Woods-Saxon势的弥散程度, R_0 表示球形核的半径. 折叠Yukawa势由对核的内部体积分为

$$V_1(r) = -\frac{V_0}{4\pi a^3} \int_V \frac{e^{-\frac{|r-r'|}{a}}}{|r-r'|} d\mathbf{r}'. \quad (10)$$

显然, 某一体积元的较高核物质密度将会对应更低的势能. 当核形变达到类似哑铃的形状时, 会自然地产生双中心势. 因此, 在描述核裂变这种涉及大形变的过程时, 折叠Yukawa势比Woods-Saxon具有优势.

自旋轨道耦合势为

$$V_{so}(\mathbf{r}) = -\frac{\lambda}{2M^2 c^2} s \cdot [\nabla V_1(\mathbf{r}) \times \mathbf{p}]. \quad (11)$$

而库仑势为

$$V_c(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{3Ze^2}{4\pi R_0^3} \int_V \frac{d\mathbf{r}'}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}. \quad (12)$$

由于势能曲面的计算需要求解大量的(约 10^5 – 10^6)

个)Schrödinger方程, 提高计算速度就非常重要. 本研究采用基矢展开法求解单粒子能级, 选择椭圆谐振子函数作为正交归一完备组将本征函数 Ψ 展开, 就可以把Schrödinger方程转换为矩阵特征值问题求解. 将矩阵对角化得到单粒子能级, 然后进行如下的壳能量修正:

$$E_{\text{sh}} = \sum_i e_i - \int_{-\infty}^{\lambda_f} \varepsilon \tilde{g}(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (13)$$

上式积分号中的能级平滑函数写为

$$\tilde{g}(\varepsilon) = \frac{1}{\sqrt{\pi}\gamma} \sum_k n_k P_6\left(\frac{|\varepsilon - e_k|}{\gamma}\right) \exp\left[-\left(\frac{|\varepsilon - e_k|}{\gamma}\right)^2\right], \quad (14)$$

其中求和号内的多项式

$$P_6(x) = -\frac{1}{6}x^6 + \frac{7}{4}x^4 - \frac{35}{8}x^2 + \frac{35}{16}. \quad (15)$$

考虑到原子核的对效应的存在, 根据BCS方法, 在壳结构的基础上加上对效应的影响, 然后计算对效应的平滑能级最终得到对效应的修正.

2.4 宏观-微观模型势能曲面的计算

基于上述模型, 我们开展了裂变势能曲面的计算, 计算的模型包括4种组合, 如表1所示.

在裂变路径搜索的算法研究中, 通过对前3种模型组合的比较, 最终选出最适合的组合方式, 开展进一步的研究.

3 势能曲面上裂变路径搜索算法的研究

为了理解在五维形变空间中的势能曲面, 需要搜索基态、鞍点、断点和裂变路径(裂变谷)等关键位置. 裂变核从基态开始形变, 直到在断点处分裂成两个碎

片, 这个过程中在势能曲面上形成的轨迹定义为一条裂变路径. 真实的裂变路径有无数条, 本研究的任务是通过发展适当的搜索算法, 寻找一条最优路径, 即能量最低、总是沿着势能曲线上的“山谷”前进的道路, 真实的裂变路径集中在这条最优路径的附近^[33,34].

3.1 模拟降水法

模拟降水法或者分水岭算法模拟了如下的降水过程: 将势能曲面看成是由高低有异的山脊(分水岭)分割成互不相交的盆地集. 设想在重力作用下, 降落在曲面上某一地点的雨滴将会沿一条势能最快下降的路径向向下流动, 最终到达某一局部最低点. 若降落在不同地点的两个雨滴最终汇流到同一局部最低点, 就认为这两个地点属于同一个集水盆地, 而降落在山脊上的雨滴则可能流入与前者邻接盆地中的任何一个.

虽然势能曲面是连续曲面, 但我们的计算只能给出一个由离散格点组成的网格面, 这时对应的分水岭实际上是由一串格点相连而成的折线, 某一格点上雨滴流动的方向应为该格点与下降最快的邻居格点的连线方向. 某个集水盆地由一个局部极小值点以及汇入这个极小值点的所有水滴流经的格点组成. 一条裂变路径是势能曲面上串起一系列相邻格点的曲线. 将势能曲面分割为不同的集水盆地之后, 裂变路径也可看作是串起一系列盆地的曲线. 从某一个盆地内部出发, 翻越分水岭, 进入相邻的另一个盆地, 这条路径攀登的最大高度是与分水岭相交的那一点. 因此, 找出任意两个相邻盆地间的分水岭上的最低点, 便是连接这两个相邻盆地的最优路径上的最高点(即位垒).

模拟降水法的算法实现步骤如下.

(1) 遍历网格. 对每个格点找到使其势能下降最快的邻居格点作为水流的前进方向, 水流的最终汇集点给出了全部的势能局部极小值点, 进而将这些极小值点标记为积水盆地(图3(a)).

(2) 再次遍历网格. 跟踪经过每个格点的水流, 找到最终流入的极小值格点, 确定该格点所属的盆地, 全部格点都归入了对应的盆地. 此时, 整个势能曲面便分割为一系列的集水盆地. 图3中有A, B, C, D, E, F 6个集水盆地, 减号“-”标记极小值点的位置(图3(b)).

(3) 第三次遍历网格, 寻找分水岭. 分水岭由相邻的格点串接而成. 判断某个格点是否在分水岭上的条件是, 它具有至少一个能量更低并属于不同盆地的邻

表 1 裂变势能曲面计算使用的模型

Table 1 Models used in calculations of fission potential energy surface

形状描述	宏观模型	微观模型的单粒子势
广义劳伦斯形状	LSD	Woods-Saxon势
广义劳伦斯形状	MS-LDM	折叠Yukawa势
广义劳伦斯形状	LSD	折叠Yukawa势
连接二次曲面	LSD	折叠Yukawa势

图 3 (网络版彩图)由模拟降水法搜索二维势能面上的分水岭和集水盆地. (a) 最初的二维势能曲面; (b) 由遍历网格分割得到不同的集水盆地; (c) 找出分水岭(虚线); (d) 鞍点位置(箭头)^[34]

Figure 3 (Color online) Two-dimensional schematic surface for optimal search strategies. (a) Initial two-dimensional contour plot; (b) different basins divided by scanning all the grids; (c) the watersheds (dashed lines) found; (d) the locations of saddle points (red arrows)^[34].

居格点. 图3(c)和(d)中, 分水岭由虚线标记.

(4) 确定每一对相邻盆地间的鞍点. 这一过程要遍历所有的分水岭上的格点(图3(d)).

(5) 进行裂变路径搜索. 将势能曲面抽象为一个无向图, 其顶点代表各个盆地, 相邻盆地用标出权重的边连接, 权重表示鞍点的高度. 在无向图上寻找最优路径, 在这里“最优”指的各条边的权重值尽可能小. 路径的起点通常选在核的基态, 终点可以指定, 也可以由其他条件(如核的半长度大于某个值)来限制. 通过广度优先或深度优先搜索, 可以得到全部路径. 上一步得到的最优路径只包含了鞍点和极小值点, 而完整路径是由相邻格点串接而成的. 从路径上的各个鞍点出发, 分别沿着分水岭两侧顺流而下, 直达盆地的极小值点, 这样便得到了一条路径片段. 将所有的路径片段相连接, 就是一条完整的裂变路径.

3.2 模拟泛洪法

模拟泛洪算法假设在一片高低起伏的地貌上, 水从各个局部最低点开始向上漫溢, 逐渐将不同局部区域淹没. 随着水面继续上涨, 相邻淹没区域将在边缘区域连成一体. 但若在水面交汇处筑起分水岭堤坝,

仍然可以将这片区域重新分割为不同的集水盆地.

Möller等人^[15]的算法首先选择两个极小值点, 一个作为“入水点”, 另一个作为“出水点”. 首先以某个局部极小点为“湿”的入水点, 通过注水不断将水位提升至某一预设的较高阈值, 然后扫描全部网格, 并对每个格点做两个判断: (1) 该格点水位是否低于预设的水位阈值? (2) 其邻居格点是否有“湿”的? 如果两个回答均为“是”, 则该格点也被判断为“湿”. 迭代这个过程, 直到在某一遍历之后, 不再有新的格点被标记为“湿”为止. 然后再次提升水位, 继续查找和标记“湿”的格点. 一旦出水点被标记为“湿”, 则说明水面越过了分水岭, 从而得到了鞍点能量的上限.

本研究发展的新算法具有如下特点.

(1) 引入“岸线”的概念. 由于提升水位总是首先淹没岸边区域, 因此只需要考察“岸边”就可以得到新近被水淹没的格点, 而不需要每次遍历全部格点.

(2) 自动折半查找确定裂变位垒的更精确能量.

(3) 同时向被分水岭隔开的两个盆地内注水以寻求交汇点, 这样除了可以提高效率外, 还不需要在分水岭上“筑坝”分割集水盆地. 由于采用两个盆地同时注水的策略, 当水面连接时, 鞍点的位置便自然确定了.

3.3 裂变路径搜索结果及位垒高度

在裂变路径的搜索中, 分别采用如下的宏观模型和微观模型组合: (1) LSD公式加Woods-Saxon势; (2) Mayers-Świątecki公式加折叠Yukawa势; (3) LSD公式加折叠Yukawa势. 图4中显示的裂变路径搜索结果具有锆系元素裂变的双峰位垒特点, 但组合(3)计算的能量是最低的, 而组合(2)的能量最高. 在形变较小的内位垒附近, 3种组合的计算结果差别不大; 随着形变的增加, 组合(1)和(2)的能量与组合(3)的差别变大. 这是由于Mayers-Świątecki公式没有考虑表面曲率对表面能的修正, 在核的形变较大直至变成哑铃状时, 颈部的表面能较小, 这时还用不变的表面张力就会高估表面能, 而LSD公式的表面曲率修正项则能够有效降低这种大形变的影响. 其次, Woods-Saxon势只具有唯一的势中心, 即势能最低点, 这显然与大形变裂变核的实际势场分布不符. 计算结果表明, LSD公式加折叠Yukawa势的组合得到的结果最好.

使用上述两种搜索算法, 计算得到了U和Pu核裂

图 4 (网络版彩图)采用不同宏观模型和独立粒子势时所得到的 ^{236}U 裂变路径比较

Figure 4 (Color online) Comparison of fission paths of ^{236}U from different macroscopic models and single-particle potentials.

变的裂变位垒高度和裂变路径^[33], 其中内垒高度和外垒高度分别显示在图5 ($^{229-244}\text{U}$)和图6 ($^{238-244}\text{Pu}$)中, 同时也给出了Möller等人^[15]的理论计算和Mamdouh等人^[42]在四维形变空间上使用扩展的Thomas-Fermi模型 (Extended Thomas-Fermi plus Strutinsky Integral, ETF-SI)给出的结果作为比较. 图中列出的实验数据分别来自Koning等人的结果^[14]和Maslov推荐评价的RIPL-3数据库^[43].

此外, 还计算了裂变重碎片最可几质量分布情况. 在最优裂变路径的搜索过程中, 除了裂变势垒高度和最优裂变路径之外, 还可以计算出重碎片质量的演化过程. 结合瑞利判据, 可以在路径上确定出断裂发生

的位置, 确认当前断裂的位置就是最可几重碎片的质量. 针对Th, U, Pu, Cm 4种核素的偶偶核同位素, 在我们计算的五维势能曲面上进行搜索得到了最可几重碎片质量, 将其与实验测量的重碎片平均质量进行比较, 很好地重现了重碎片质量 $A_H \approx 140$ 这一实验现象. 通过对比发现, 我们的结果和实验符合较好.

3.4 多模式裂变路径搜索算法研究

多模式裂变路径搜索算法的目标是在最优裂变路径之外搜寻到其他的次优路径, 它应该包含另一个比前者位垒更高的裂变位垒, 且须终止在另一个完全不同的末态.

为此, 我们在搜索过程中加入一定的约束: 在搜索得到最优裂变路径之后, 将最优路径上的盆地剔除, 以防在次优路径搜索中再次涉足这些盆地. 由于模拟降水法中的分水岭算法对于噪声比较敏感, 容易造成曲面的过度分割, 作为预处理, 需要把位垒高度较低的盆地相互融合成一个较大的盆地, 同时剔除可与原最优路径上盆地相融合的那些盆地, 由此减少了备选盆地的数量. 在我们的程序中, 这些低位垒高度的阈值设置为0.3 MeV, 相比Möller等人工作中的0.5 MeV还要略小一些.

图7展示的是 ^{236}U 多模式裂变路径和该路径在势能曲面上沿 (l, r) 方向的投影. 投影后的二维势能曲面使用^[34]

$$E_{\text{def}}(l, r) = \min_{z, c, s} E_{\text{def}}(l, r, z, c, s) \quad (16)$$

计算得到, 裂变路径的投影则是直接把裂变路径按照 l, r 坐标绘制到二维势能曲面上. 从图7(b)可以看出, 对称

图 5 (网络版彩图) U同位素的内位垒(a)和外位垒(b)高度的多种计算结果的比较

Figure 5 (Color online) Comparison of inner (a) and outer (b) fission barriers of U isotopes from different theoretical and evaluated results.

图 6 (网络版彩图) Pu 同位素的内位垒(a)和外位垒(b)高度的多种计算结果的比较

Figure 6 (Color online) Comparison of inner (a) and outer (b) fission barriers of Pu isotopes from different theoretical and evaluated results.

图 7 (网络版彩图) ^{236}U 多模式裂变路径(a)及其在势能曲面上的投影(b) [34]

Figure 7 (Color online) Multi-modal fission paths of ^{236}U (a) and their projections on a two-dimensional potential energy surface (b) [34].

裂变路径和非对称裂变路径从基态出发直至第一位垒(内垒)基本重合, 但经过第二极小值后随形变增加迅速分开, 对称裂变的第二位垒高度比非对称裂变的高出约 2.8 MeV. 图 7(a)表明, 随裂变核不断拉长, 对称裂变与非对称裂变核的核颈部半径大小之差增加, 对称裂变路径和非对称裂变路径在两维势能曲面上明显分开, 由此可以定性地解释为什么在低激发能时 ^{236}U 的非对称裂变占主导地位, 直到激发能比较高的时候对称产额才逐渐增加.

4 裂变动力学计算

裂变是一个多粒子运动的动力学过程, 可将裂变核的形状演化这种集体运动看作是在多维(如五维)形变空间中势能曲面上的布朗运动, 即布朗粒子在势能

曲面这个外场中做漂移运动. 同时, 由于微观粒子的单粒子运动与宏观形变的耦合, 会使得裂变核在势能曲面上的运动具有一定的随机性, 这时裂变核的形状演化就可以使用描述布朗运动的郎之万方程描述. 布朗运动方法的优势在于能够从裂变核的基态出发, 模拟裂变过程所对应的形状变化过程, 最终可直接得到裂变碎片的质量分布.

描述布朗粒子运动的郎之万方程为

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial}{\partial \chi_i} L = \frac{\partial}{\partial \chi_i} L - \frac{\partial}{\partial \chi_i} F + \Gamma_i, \quad (17)$$

式中, L 是拉格朗日量, χ_i 是形状参数, F 是摩擦力, Γ_i 是随机力. 假设裂变核形状演化是一种强阻尼运动 (Strongly Damped Shape Evolution) 过程, 这时郎之万方程中的加速度项可以忽略, 则布朗粒子处于平衡状态, 耗散张量趋于各向同性, 可以将郎之万方程简化

为下面的Smoluchowski方程:

$$0 = \frac{\partial}{\partial \chi_i} L - \frac{\partial}{\partial \chi_i} F + \Gamma_i. \quad (18)$$

然后, 利用Metropolis随机游走算法^[21]求解得到断点位置. 但考虑到断前形状颈部断裂的无规性, 断点并不一定发生在颈部最细的位置, 我们引用无规颈断裂模型最终得到合理质量分布.

通过在五维势能曲面上进行随机游走, 我们计算了中子诱发^{209–219}Ra和^{225–232}Pa裂变的产额分布和^{222–228}Th偶偶核裂变碎片电荷分布, 并从理论上初步研究了²³²Th(n,f)和²³³U(n,f)反应的产额能量关系, 与实验数据符合较好. 作为例子, 图8给出了热中子诱发²³⁵U(n,f)裂变产额分布的计算结果, 并与实验数据^[44]进行了比较.

另一种方法是直接求解朗之万方程. 我们采用三维朗之万动力学方法研究了裂变碎片质量分布等物理量, 其中势能曲面采用基于双中心壳模型^[45]的宏观-微观模型计算得到, 质量张量和黏滞张量的计算分别采用了Werner-Wheeler方法^[46]和墙加窗一体模型^[47,48]. 为节省计算时间, 本文将颈部参数 ϵ 固定为0.35, 在三维形变空间 $\{Z_0/R_0, \delta, \eta\}$ 中进行动力学计算, 其中 Z_0/R_0 为双中心距离, δ 为碎片变形程度参数, η 为质量非对称度. 根据Bulgac等人^[25]的微观实时计算, 重碎片形

图8 (网络版彩图) ²³⁵U(n,f)反应碎片质量产额分布的计算(黑点)和实验评价(红点)结果比较, 其中计算结果是来自五维势能曲面上的随机游走模型

Figure 8 (Color online) The comparison of the calculated (dark dots, from random walks on a five-dimensional potential energy surface) and evaluated (red dots) results of fission fragments mass distribution for the ²³⁵U(n,f) reaction.

状在裂变过程的早期已经接近球形, 因此, 本文将非对称区域的重碎片形状约束为近球形, 轻碎片和对称区域的重碎片形状可自由变化.

本文计算的14 MeV中子诱发^{233,235,238}U和²³⁹Pu裂变的初始碎片质量分布分别如图9–12所示. 其中, 图9(a)显示了模型计算的14 MeV中子诱发²³⁵U裂变初始碎片质量分布与裂变通用计算程序GEF^[49]计算的发射中子前碎片质量分布, 以及ENDF/B-VIII.0库^[50]产额数据的比较, 从图中可以看到本文计算的质量分布与GEF计算结果符合, 相比较评价数据整体右移了约2–3个核子数, 这是由于当前计算中尚未考虑碎片发射中子的影响, 而评价数据为中子发射后的结果. 图9(b)显

图9 (网络版彩图) (a) 14 MeV中子诱发²³⁵U裂变的碎片质量产额分布的比较: 红色线来自形状约束三维郎之万方法的计算结果^[36], 蓝色点划线由GEF程序^[49]计算得到, 黑点是ENDF/B-VIII.0库^[50]数据. (b) 形状约束三维郎之万方法与不含重碎片形状约束的一般三维郎之万方法, 以及四维郎之万方法^[51]计算结果的比较

Figure 9 (Color online) (a) The comparison of fission fragment mass distributions for 14 MeV neutron induced ²³⁵U: the three-dimensional Langevin model with the constraint on the heavy fragment shape ^[36] (red curve), the calculated with GEF code ^[49] (blue dash-dot curve) and the evaluated data from ENDF/B-VIII.0 ^[50] (solid circles). (b) A comparison between the results of the present work with and without introducing the constraint on the heavy fragment shape (red line and black dash-dot line) and those with a four-dimensional Langevin approach based on the TCSM ^[51] (green dash-dot line).

示了本文计算结果与基于双中心壳模型的一般三维($\delta_1=\delta_2$)和四维朗之万方法计算结果的比较, 从图中可明显看到重碎片形状约束的引入对计算结果有明显的改善. 从图10–12可以看到, 计算的14 MeV中子诱发 $^{233,238}\text{U}$ 和 ^{239}Pu 裂变的初始碎片质量分布与GEF计算结果和评价数据同样符合, 表明本研究中引入的重碎片形状约束具有一定的合理性.

5 结论

本文将裂变的宏观-微观模型与裂变动力学结合, 计算了中子诱发锕系元素裂变的五维势能曲面, 进而开展了包括裂变碎片质量分布、电荷分布等在内的裂变后现象的定量研究. 在该宏观-微观方法中, 核的表面形状用五维广义劳伦斯形状和连接二次曲面描述, 采用Strutinsky的壳修正方法计算形变核的势能. 宏观模型采用LSD公式, 用折叠Yukawa势进行单粒子能级计算. 在五维形变空间中计算了U和Pu元素总共23个同位素的势能曲面, 其中广义劳伦斯形状形变空间具有1300万个格点, 连接二次曲面空间的格点数约为300万个. 使用我们发展的模拟泛洪法和模拟降水法两种搜索算法, 得到了锕系主要核素五维势能曲面上

图 10 (网络版彩图) 14 MeV中子诱发 ^{233}U 裂变的碎片质量产额分布的比较: 红色线来自形状约束三维郎之万方法的计算结果^[36], 蓝色点划线由GEF程序计算得到^[49], 黑点是ENDF/B-VIII.0库数据^[50]

Figure 10 (Color online) Comparison of fragment mass distributions for 14 MeV neutron induced ^{233}U fission: the three-dimensional Langevin model with the constraint on the heavy fragment shape [36] (red curve), the calculated with GEF code [49] (blue dash-dot curve) and the evaluated data from ENDF/B-VIII.0 [50] (solid circles).

图 11 (网络版彩图) 14 MeV中子诱发 ^{238}U 裂变的碎片质量产额分布的比较: 红色线来自形状约束三维郎之万方法的计算结果^[36], 蓝色点划线由GEF程序计算得到^[49], 黑点是ENDF/B-VIII.0库数据^[50]

Figure 11 (Color online) Comparison of fragment mass distributions for 14 MeV neutron induced ^{238}U fission: the three-dimensional Langevin model with the constraint on the heavy fragment shape [36] (red curve), the calculated with GEF code [49] (blue dash-dot curve) and the evaluated data from ENDF/B-VIII.0 [50] (solid circles).

图 12 (网络版彩图) 14 MeV中子诱发 ^{239}Pu 裂变的碎片质量产额分布的比较: 红色线来自形状约束三维郎之万方法的计算结果^[36], 蓝色点划线由GEF程序计算得到^[49], 黑点是ENDF/B-VIII.0库数据^[50]

Figure 12 (Color online) Comparison of fragment mass distributions for 14 MeV neutron induced ^{239}Pu fission: the three-dimensional Langevin model with the constraint on the heavy fragment shape [36] (red curve), the calculated with GEF code [49] (blue dash-dot curve) and the evaluated data from ENDF/B-VIII.0 [50] (solid circles).

的最优裂变路径和基态点、鞍点、断点等关键物理参数点. 通过多模式裂变路径搜索算法研究, 从理论上得到了锕系主要核素裂变具有非对称和对称两种裂变模

式. 在五维势能曲面上进行随机行走模拟, 得到了中子诱发 $^{209-219}\text{Ra}$ 和 $^{225-232}\text{Pa}$ 裂变的产额分布和 $^{222-228}\text{Th}$ 偶偶核裂变碎片电荷分布, 并探索了 $^{232}\text{Th}(\text{n}, \text{f})$ 和 $^{233}\text{U}(\text{n}, \text{f})$

反应的产额能量关系. 在朗之万方程方法中, 计算得到了 14 MeV 中子诱发 $^{235, 233, 238}\text{U}$ 和 ^{239}Pu 裂变碎片质量分布, 与实验结果符合较好.

参考文献

- 1 Dimitriou P, Hamsch F J, Pomp S. Fission product yields data current status and perspectives: Summary report an IAEA Technical Meeting. In: Fission Yields Technical Meeting. Vienna: IAEA, 2016. 1–74
- 2 Harada H, Plompen A. Meeting Nuclear Data Needs for Advanced Reactor Systems. Technical Report, NEA/NSC/WPEC/DOC(2014) 446. Nuclear Energy Agency, Organization for Economic Co-operation and Development. Technical Report, Nuclear Energy Agency of the OECD (NEA), Issy-les-Moulineaux (France)
- 3 Forrest R A. Nuclear science and data needs for advanced nuclear systems. *Energy Procedia*, 2011, 7: 540–552
- 4 Brown D. Nuclear data needs and capabilities for applications. BNL-108491-2015-IR, 2015, National Nuclear Data Center Brookhaven National Laboratory
- 5 Möller P, Sierk A J. Nuclear physics: Into the fission valley. *Nature*, 2003, 422: 485–486
- 6 核物理与等离子体物理发展战略研究编写组. 核物理与等离子体物理——学科前沿及发展战略(上册: 核物理卷). 北京: 科学出版社, 2017. 第八章
- 7 Tanimura Y, Lacroix D, Ayik S. Microscopic phase-space exploration modeling of ^{258}Fm spontaneous fission. *Phys Rev Lett*, 2017, 118: 152501, arXiv: 1609.01424
- 8 Brosa U, Grossmann S, Müller A, et al. Nuclear scission. *Nucl Phys A*, 1989, 502: 423–442
- 9 Brosa U, Grossmann S, Müller A. Nuclear scission. *Phys Rep*, 1990, 197: 167–262
- 10 Fan T S, Hu J M, Bao S L. Study of multichannel theory for the neutron induced fissions of actinide nuclei. *Nucl Phys A*, 1995, 591: 161–181
- 11 Brosa U, Knitter H H, Fan T S, et al. Systematics of fission-channel probabilities. *Phys Rev C*, 1999, 59: 767–775
- 12 Ohsawa T, Horiguchi T, Hayashi H. Multimodal analysis of prompt neutron spectra for $^{237}\text{Np}(\text{n}, \text{f})$. *Nucl Phys A*, 1999, 653: 17–26
- 13 Zheng N, Zhong C L, Fan T S. Calculation of prompt fission neutron from $^{233}\text{U}(\text{n}, \text{f})$ reaction by multi-modal Los Alamos model. *Plasma Sci Technol*, 2012, 14: 521–525
- 14 Duijvestijn M C, Koning A J, Hamsch F J. Mass distributions in nucleon-induced fission at intermediate energies. *Phys Rev C*, 2001, 64: 014607
- 15 Möller P, Sierk A J, Ichikawa T, et al. Heavy-element fission barriers. *Phys Rev C*, 2009, 79: 064304
- 16 Möller P, Nix J R, Myers W D, et al. Nuclear ground-state masses and deformations. *Atomic Data Nucl Data Tables*, 1995, 59: 185–381
- 17 Möller P, Nix J R, Swiatecki W J. New developments in the calculation of heavy-element fission barriers. *Nucl Phys A*, 1989, 492: 349–387
- 18 Möller P, Sierk A J, Ichikawa T, et al. Fission barriers at the end of the chart of the nuclides. *Phys Rev C*, 2015, 91: 024310
- 19 Bolsterli M, Fiset E O, Nix J R, et al. New calculation of fission barriers for heavy and superheavy nuclei. *Phys Rev C*, 1972, 5: 1050–1077
- 20 Möller P, Madland D G, Sierk A J, et al. Nuclear fission modes and fragment mass asymmetries in a five-dimensional deformation space. *Nature*, 2001, 409: 785–790
- 21 Randrup J, Möller P. Brownian shape motion on five-dimensional potential-energy surfaces: Nuclear fission-fragment mass distributions. *Phys Rev Lett*, 2011, 106: 132503, arXiv: 1103.0535
- 22 Randrup J, Möller P, Sierk A J. Fission-fragment mass distributions from strongly damped shape evolution. *Phys Rev C*, 2011, 84: 034613, arXiv: 1107.2624
- 23 Ghys L, Andreyev A N, Huyse M, et al. Evolution of fission-fragment mass distributions in the neutron-deficient lead region. *Phys Rev C*, 2014, 90: 41301
- 24 Möller P, Ichikawa T. A method to calculate fission-fragment yields $Y(Z, N)$ versus proton and neutron number in the Brownian shape-motion model. *Eur Phys J A*, 2015, 51: 173, arXiv: 1508.05964
- 25 Bulgac A, Magierski P, Roche K J, et al. Induced fission of ^{240}Pu within a real-time microscopic framework. *Phys Rev Lett*, 2016, 116: 122504, arXiv: 1511.00738
- 26 Simenel C, Umar A S. Formation and dynamics of fission fragments. *Phys Rev C*, 2014, 89: 031601, arXiv: 1312.4669

- 27 Wu X Z, Gu J Z, Zhuo Y Z, et al. Possible understanding of hyperdeformed $^{144-146}\text{Ba}$ nuclei appearing in the spontaneous fission of ^{252}Cf . *Phys Rev Lett*, 1997, 79: 4542–4545
- 28 Zhou S G. Multidimensionally constrained covariant density functional theories—nuclear shapes and potential energy surfaces. *Phys Scr*, 2016, 91: 063008, arXiv: [1605.00956](#)
- 29 Lu B N, Zhao E G, Zhou S G. Potential energy surfaces of actinide nuclei from a multidimensional constrained covariant density functional theory: Barrier heights and saddle point shapes. *Phys Rev C*, 2012, 85: 011301, arXiv: [1110.6769](#)
- 30 Pei J C, Nazarewicz W, Sheikh J A, et al. Fission barriers of compound superheavy nuclei. *Phys Rev Lett*, 2009, 102: 192501, arXiv: [0901.0901](#)
- 31 Zhu Y, Pei J C. Thermal fission rates with temperature dependent fission barriers. *Phys Rev C*, 2016, 94: 024329, arXiv: [1605.04522](#)
- 32 Wang N, Liu M, Wu X Z, et al. Surface diffuseness correction in global mass formula. *Phys Lett B*, 2014, 734: 215–219, arXiv: [1405.2616](#)
- 33 Zhong C L, Fan T S. Study of fission barrier heights of uranium isotopes by the macroscopic-microscopic method. *Commun Theor Phys*, 2014, 62: 405–409
- 34 Wang Z M, Zhu W J, Zhu X, et al. ^{236}U multi-modal fission paths on a five-dimensional deformation surface. *Commun Theor Phys*, 2019, 71: 417–420
- 35 Wang Z M, Zhu W J, Zhong C L, et al. New calculations of five-dimensional fission barriers for actinide nuclei. *Nucl Phys A*, 2019, 989: 81–96
- 36 Liu L L, Wu X Z, Chen Y J, et al. Study of fission dynamics with a three-dimensional Langevin approach. *Phys Rev C*, 2019, 99: 044614
- 37 Scamps G, Simenel C. Impact of pear-shaped fission fragments on mass-asymmetric fission in actinides. *Nature*, 2018, 564: 382–385
- 38 Pomorski K, Dudek J. Nuclear liquid-drop model and surface-curvature effects. *Phys Rev C*, 2003, 67: 044316
- 39 Dobrowolski A, Pomorski K, Bartel J. Fission barriers in a macroscopic-microscopic model. *Phys Rev C*, 2007, 75: 024613
- 40 Myers W D, Swiatecki W J. Nuclear masses and deformations. *Nucl Phys*, 1966, 81: 1–60
- 41 Strutinsky V M, Ivanjuk F A. A new definition of shell corrections to the liquid drop energy. *Nucl Phys A*, 1975, 255: 405–418
- 42 Mamdouh A, Pearson J M, Rayet M, et al. Large-scale fission-barrier calculations with the ETFSI method. *Nucl Phys A*, 1998, 644: 389–414
- 43 Capote R, Herman M, Obložinský P, et al. RIPL—Reference input parameter library for calculation of nuclear reactions and nuclear data evaluations. *Nucl Data Sheets*, 2009, 110: 3107–3214
- 44 Dyachenko P P, Kuzminov B D, Tarasko M Z. Energy and mass distribution of fragments from fission of ^{235}U by monoenergetic neutrons from 0 to 15.5 MeV. *Yadernaya Fizika*, 1968, 8: 2
- 45 Maruhn J, Greiner W. The asymmetric two center shell model. *Z Physik*, 1972, 251: 431–457
- 46 Davies K T R, Sierk A J, Nix J R. Effect of viscosity on the dynamics of fission. *Phys Rev C*, 1976, 13: 2385–2403
- 47 Blocki J, Boneh Y, Nix J R, et al. One-body dissipation and the super-viscosity of nuclei. *Ann Phys*, 1978, 113: 330–386
- 48 Feldmeier H. Transport phenomena in dissipative heavy-ion collisions: The one-body dissipation approach. *Rep Prog Phys*, 1987, 50: 915–994
- 49 Schmidt K H, Jurado B, Amouroux C, et al. General description of fission observables: GEF model code. *Nucl Data Sheets*, 2016, 131: 107–221
- 50 Brown D A, Chadwick M B, Capote R, et al. ENDF/B-VIII.0: The 8th major release of the nuclear reaction data library with CIELO-project cross sections, new standards and thermal scattering data. *Nucl Data Sheets*, 2018, 148: 1–142
- 51 Ishizuka C, Usang M D, Ivanyuk F A, et al. Four-dimensional Langevin approach to low-energy nuclear fission of ^{236}U . *Phys Rev C*, 2017, 96: 064616, arXiv: [1712.05488](#)

Study of neutron induced fission of actinides in a macroscopic-microscopic model

FAN TieShuan^{1*}, WANG ZhiMing¹, ZHONG ChunLai¹, ZHU Xin¹, ZHU WenJie¹,
LIU LiLe², CHEN YongJing², SHU NengChuan², GE ZhiGang²,
WU XiZhen² & LI ZhuXia^{1,2}

¹ School of Physics, Institute of Heavy Ion Physics and Key Laboratory of Nuclear Physics and Technology,
Peking University, Beijing 100871, China;

² China Institute of Atomic Energy, Beijing 102413, China

The macroscopic-microscopic (MM) model, as a powerful theoretical tool for the understanding of nuclear fission mechanism, is deemed to be a so impressive theoretical method that its calculated results would quantitatively predict the fission observables in the near future. This paper reviews our recent progress in the theoretical calculations of the five-dimensional (5D) potential energy surfaces (PESs) and the fission fragment mass distributions for the neutron induced fission of actinides within the framework of the MM model along with the random walking method and Langevin model. Firstly, we use the 5D generalized Lawrence shape and three quadrature surfaces parameterizations as the shape descriptions, the Lublin-Strasbourg Drop model for the macroscopic energy and the folded-Yukawa model as the single-particle potential. A new method to use a two-center oscillator basis in calculating Hamiltonian matrix on any kind of shape description is presented. Then, the advanced search algorithms are developed and used in searching for the optimal fission path, fission saddles and other structure information on a 5D PES surface. The method of random walks on 5D PESs is used to calculate the fission fragment mass distributions for the $^{235}\text{U}(\text{n},\text{f})$ reaction. Finally, three-dimensional Langevin model with a constraint on the heavy fragment deformation are applied to study the fragment mass distributions for 14 MeV neutron-introduced fissions of uranium isotopes.

macroscopic-microscopic model, multi-dimensional potential surface, actinides, fission observable, fission dynamics

PACS: 24.75.+i, 25.85.-w, 21.60.Cs

doi: [10.1360/SSPMA-2019-0235](https://doi.org/10.1360/SSPMA-2019-0235)