含时密度泛函理论框架下裂变碎片的总动能：粒子数投影和集体形变的作用

B. Li,[1] D. Vretenar,[2,1,*] T. Nikšić,[2] P. W. Zhao,[1,†] 和 J. Meng[1,‡]

[1]核物理与技术国家重点实验室，北京大学物理学院，中国北京 100871

[2]萨格勒布大学理学院物理系，克罗地亚萨格勒布 10000

（日期：2026年11月25日）

arXiv:2611.32599v1 [nucl-th] 24 Nov 2026

摘要

将裂变碎片总动能（TKE）限制在轴对称轨迹和单一破缺对称性的平均场态下进行含时密度泛函理论（TDDFT）计算时，除最概然质量分裂之外的区域会低估总动能 10–20 兆电子伏。我们在相对论性 TDDFT+BCS 框架下，结合粒子数投影（PNP）与包含十六极和非轴对称形变的扩展集体空间，重新研究了 ^{240}钚和 ^{252}锎中的这一问题。改变配对强度基本不会影响总动能，但 PNP 会将每条轨迹转化为关于碎片质量的分辨总动能分布，而扩大的集体空间则是获得正确断裂构型所必需的。二者结合后，对经验总动能质量依赖性的再现显著优于标准计算，这表明该差异源于缺失的对称性恢复和构型空间，而非能量泛函本身存在缺陷。

* vretenar@phy.hr

† pwzhao@pku.edu.cn

‡ mengj@pku.edu.cn

一、引言

核裂变是量子多体物理中最丰富的问题之一，对其产生的碎片进行定量的微观描述，不仅有助于检验我们对核多体问题的理解，也能支持从反应堆设计到核合成建模等各种应用 [1–6]。其中有两个量尤为重要：两个初生碎片之间释放的总动能（TKE），以及每个碎片从断裂过程中带走的激发能。由于断裂相关的时间尺度极短，无法直接测量这些量，因此，用于评价数据的裂变碎片衰变代码依赖于很大程度上现象学的处方——根据现有数据标定的能量分配系统学和能级密度参数化 [7–13]。无需诉诸这类现象学方法，而是直接从能量密度泛函（EDF）获得总动能和激发能的完全微观预测，仍然是裂变理论的核心目标 [1–3]。

含时密度泛函理论（TDDFT）无论采用非相对论的 Skyrme、Gogny 形式，还是相对论性的点耦合或介子交换形式，都已成为实现这一目标的实用工具 [14–22]。在采用 TDDFT 研究裂变时，首先要在势能面的外侧斜坡上、越过最后一个鞍点的位置，构造 EDF 的静态自洽解；随后解除对相关集体（多极）坐标的约束，并在实时间内传播多体态，直至两个碎片在断裂时彼此分离。由于配对关联会影响诸如从鞍点到断裂的时间，以及裂变是否发生等因素，几乎所有实现都将平均场演化与 BCS 或 Bogoliubov 型配对处理相结合[15, 16, 18, 23–27]。

在这一框架下，我们此前曾采用建立在点耦合泛函 PC-PK1 [28], 之上的相对论性 TDDFT+BCS 方法，对 ^{240}Pu 的诱发裂变进行了系统研究，沿着轴向四极—八极（β_{20}，β_{30}）平面内的自洽轨迹，从略低于外势垒的构型一直演化到断裂。这些计算对于最可能的中等不对称碎片化，能够较为合理地再现测得的总动能（TKE），但对于更对称和高度不对称的质量分裂，则系统性地低估了 TKE [18, 19, 29–31]。Bjelˇci ^{240}c、Schunck 和 Verriere +最近独立地在更完整的碎片化集合上证实了相同的定性规律，他们开发了一种新的轴对称含时 Hartree-Fock-Bogoliubov（TDHFB）求解器，并生成了数百条 TDHFB 轨迹，涵盖了1 [28], Pu 裂变中几乎整个可达的质量分裂范围。

他们的结果表明，只有在最可能的碎片化附近，TKE 才与实验结果一致；而在质量不对称性较小和较大的两端，TKE 均被低估了 10–20 兆电子伏。这一差异在改变 Skyrme 参数化、配对强度，或配对相互作用的表面与体积特征时，基本保持不变。综合来看，这两种独立且互补的微观方法（我们早期工作中的相对论性 TDDFT+BCS，以及文献 [32] 中的非相对论性 Skyrme TDHFB）所得结果表明，与数据的不一致反映了标准（TD）DFT 裂变动力学的共同局限，而非某一种能量泛函或数值实现的缺陷。

这种标准处理通常缺少的两个要素，很可能可以解释至少一部分差异。第一个要素涉及粒子数对称性：一旦纳入配对关联，多体态便不再是中子数算符和质子数算符的本征态，并且会自发破缺与粒子数守恒相关的 U(1)规范对称性。因此，从单条 TDDFT+BCS 或 TDHFB 轨迹中提取的裂变碎片，仅由平均的、通常为非整数的质子数和中子数来表征，而沿轨迹计算的总动能对应的是这一破缺对称性的平均构型，而不是具有确定且物理上合理的 (Z, N) 的碎片。通过粒子数投影（PNP）[33] 恢复该对称性后，便可以从单条轨迹中提取与该轨迹实际占据的各个具有良好粒子数的道相对应的总动能分布，并将这一分布直接与随碎片质量变化的测得的总动能进行比较，而不再只是与单个平均点比较。第二个要素是通向断裂过程中所探索的集体空间：大多数关于裂变的 TDDFT 研究，包括我们先前的工作，都局限于轴对称（β_{20}，β_{30}）平面内的轨迹，尽管对于近对称构型，到达断裂可能需要额外的集体坐标；而对于高度不对称的构型，再现正确的质量分裂也可能需要额外的集体坐标，例如控制断裂前颈部厚度的十六极形变 β_{40}，或非轴对称自由度，例如三轴 β_{22} 和非对称八极 β_{31} 形变参数。

在本文中，我们在相对论 TDDFT+BCS 框架内重新研究了 ^{240}钚和^{252}Cf 裂变碎片的总动能，将粒子数投影与超出标准（β_{20}，β_{30}）形变参数的一组扩展集体坐标相结合。第二节概述了用于计算具有固定质子数和中子数的碎片总动能的 TDDFT+BCS 形式以及粒子数投影方法。第三节介绍数值实现。在第四节中，我们给出了 ^{240}钚和 ^{252}Cf 的结果，比较了沿若干具有代表性的裂变路径、采用和不采用粒子数投影所得到的总动能，并量化了扩大集体空间对所得总动能（质量数）系统学的影响。第五节总结研究结果，并讨论其对微观裂变理论的意义。

II. 理论框架

A. 含时密度泛函理论

在 TDRDFT 的含时 BCS 近似下 [33, 34], ，核波函数写作

$$|\Phi(t)\rangle = \prod_{k>0}[\mu_k(t) + \nu_k(t)c_k^\dagger(t)c_{\bar{k}}^\dagger(t)]|-\rangle \ . \tag{1}$$

在公式 (1) 中，$\mu_k(t)$ 和 $\nu_k(t)$ 是正则基与准粒子基之间变换的参数，而 $c_k^\dagger(t)$ 表示与正则态 $\phi_k(\boldsymbol{r},t)$ 相关联的产生算符。$\phi_k(\boldsymbol{r},t)$ 的时间演化由含时狄拉克方程 [18, 19]决定

$$i\frac{\partial}{\partial t}\phi_k(\boldsymbol{r},t) = [\hat{h}(\boldsymbol{r},t) - \varepsilon_k(t)]\phi_k(\boldsymbol{r},t), \tag{2}$$

ˆ ˆ 其中，$\varepsilon_k(t) = \langle\phi_k(\boldsymbol{r},t)|h(\boldsymbol{r},t)|\phi_k(\boldsymbol{r},t)\rangle$，单粒子哈密顿量 $h(\boldsymbol{r},t)$ 在每个时间步都根据标量、矢量和同位旋矢量道中的含时密度与流进行自洽确定，

$$\rho_S(\boldsymbol{r},t) = \sum_k n_k(t)\bar{\phi}_k(\boldsymbol{r},t)\phi_k(\boldsymbol{r},t), \tag{3a}$$

$$j^\mu(\boldsymbol{r},t) = \sum_k n_k(t)\bar{\phi}_k(\boldsymbol{r},t)\gamma^\mu\phi_k(\boldsymbol{r},t), \tag{3b}$$

$$j_{TV}^\mu(\boldsymbol{r},t) = \sum_k n_k(t)\bar{\phi}_k(\boldsymbol{r},t)\gamma^\mu\tau_3\phi_k(\boldsymbol{r},t), \tag{3c}$$

其中， τ_3 是同位旋泡利矩阵，矢量密度表示为 $\rho_V(\boldsymbol{r},t) = j^0(\boldsymbol{r},t)$。占据概率 $n_k(t) = |\nu_k(t)|^2$ 以及配对张量 $\kappa_k(t) = \mu_k^*(t)\nu_k(t)$ 的时间演化由以下方程控制：

$$i\frac{d}{dt}n_k(t) = \kappa_k(t)\Delta_k^*(t) - \kappa_k^*(t)\Delta_k(t), \tag{4a}$$

$$i\frac{d}{dt}\kappa_k(t) = [\varepsilon_k(t) + \varepsilon_{\bar{k}}(t)]\kappa_k(t) + \Delta_k(t)[2n_k(t) - 1], \tag{4b}$$

在BCS近似中，采用单极配对相互作用，能隙参数 $\Delta_k(t)$定义为：

$$\Delta_k(t) = \left[G\sum_{k'>0} f(\varepsilon_{k'})\kappa_{k'}\right] f(\varepsilon_k), \tag{5}$$

其中， $f(\varepsilon_k)$是配对窗口 [33], 的截断函数， G 是配对强度。

B. 裂变碎片的总动能

对于一条TDDFT轨迹，两个裂变碎片的平均总动能（TKE）为：

$$\bar{E}_{TKE} = \frac{1}{2}m\bar{A}_{\rm H}\boldsymbol{v}_{\rm H}^2 + \frac{1}{2}m\bar{A}_{\rm L}\boldsymbol{v}_{\rm L}^2 + E_{\rm Coul}, \tag{6}$$

其中， $\boldsymbol{v}_f$ 是碎片 $f = $ H、L的速度

$$\boldsymbol{v}_f = \frac{1}{\bar{A}_f}\int_{V_f} d\boldsymbol{r}\ \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r})\ , \tag{7}$$

$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r})$是流， A_f 是碎片 f的平均质量数。积分区域为对应于碎片 f的半体积。 $E_{\rm Coul}$ 是库仑能，

$$E_{\rm Coul} = \alpha\int_{V_H}\int_{V_L}\frac{\rho_V^p(\boldsymbol{r}_H)\rho_V^p(\boldsymbol{r}_L)}{|\boldsymbol{r}_H - \boldsymbol{r}_L|}d\boldsymbol{r}_H d\boldsymbol{r}_L, \tag{8}$$

其中， $\boldsymbol{r}_H$ ($\boldsymbol{r}_L$) 是子空间 V_H (V_L) 中的空间坐标，而 $\rho_V^p(\boldsymbol{r})$ 是质子矢量密度。

在计算 E_{TKE} 含时密度泛函理论+BCS轨迹上的 E_{TKE} 时，裂变碎片的状态并不是核子数算符的本征态。为恢复规范对称性，我们采用粒子数投影；具有确定中子数和质子数的裂变碎片所对应的总动能为

$$E_{\rm TKE}(Z_{\rm L},N_{\rm L},Z_{\rm H},N_{\rm H}) = \frac{1}{2}mA_{\rm H}\boldsymbol{v}_{\rm H}^2(Z_{\rm H},N_{\rm H}) + \frac{1}{2}mA_{\rm L}\boldsymbol{v}_{\rm L}^2(Z_{\rm L},N_{\rm L}) + E_{\rm Coul}(Z_{\rm L},N_{\rm L},Z_{\rm H},N_{\rm H}). \tag{9}$$

$Z_{\rm L}$、 $N_{\rm L}$和 $A_{\rm L}$ （$Z_{\rm H}$、 $N_{\rm H}$和 $A_{\rm H}$）分别是轻（重）碎片的质子数、中子数和质量数。它们需要满足

$$Z = Z_L + Z_H, \quad N = N_L + N_H, \quad A = A_L + A_H, \tag{10}$$

其中， Z、 N和 A 分别为整个裂变系统的质子数、中子数和质量数。质子数为 Z_f、中子数为 N_f 的碎片 $f = {\rm H}$、L的速度为

$$\boldsymbol{v}_f(Z_f, N_f) = \frac{1}{A_f} \int_{V_f} d\boldsymbol{r}\ \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}, Z_f, N_f)\ . \tag{11}$$

$E_{\rm Coul}(Z_{\rm L}, N_{\rm L}, Z_{\rm H}, N_{\rm H})$为库仑能，

$$E_{\rm Coul}(Z_{\rm L}, N_{\rm L}, Z_{\rm H}, N_{\rm H}) = \alpha \int_{V_H}\int_{V_L} \frac{\rho_V^p(\boldsymbol{r}_H, Z_{\rm H}, N_{\rm H})\rho_V^p(\boldsymbol{r}_L, Z_{\rm L}, N_{\rm L})}{|\boldsymbol{r}_H - \boldsymbol{r}_L|} d\boldsymbol{r}_H d\boldsymbol{r}_L, \tag{12}$$

where α 为精细结构常数。投影密度和流分别为

$$j^\mu(\boldsymbol{r}_f, Z_f, N_f) = \frac{\langle\Phi|\bar{\psi}\gamma^\mu\psi\hat{P}_N\hat{P}^{V_f}_{N_f}\hat{P}_Z\hat{P}^{V_f}_{Z_f}|\Phi\rangle}{\langle\Phi|\hat{P}_N\hat{P}^{V_f}_{N_f}\hat{P}_Z\hat{P}^{V_f}_{Z_f}|\Phi\rangle}. \tag{13}$$

其中， ψ为核子场算符。$\hat{}P^{V_f}_{M_f}$和$\hat{}$ $P_M(M = Z, N)$分别为定义于子空间 V_f 和整个空间 [33]，中的粒子数投影算符，

$$\hat{P}^{V_f}_{M_f} = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} d\theta_f\ e^{-i\theta_f(M_f - \hat{M}_f)}, \tag{14}$$

$$\hat{P}_M = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} d\theta\ e^{-i\theta(M - \hat{M})}, \tag{15}$$

$\hat{}\,\hat{}$ 其中， M_f 为子空间 V_f中的粒子数算符， M 为整个空间中的粒子数算符。质子数和中子数投影的详细表达式见附录 VI。裂变碎片的总动能随重碎片质量数 A_H 的变化关系为，

$$E_{\rm TKE}(A_H) = \frac{\sum\limits_{Z_H, N_H, Z_H + N_H = A_H} E_{\rm TKE}(Z_{\rm H}, N_{\rm H})P(Z_{\rm H}, N_{\rm H})}{\sum\limits_{Z_H, N_H, Z_H + N_H = A_H} P(Z_{\rm H}, N_{\rm H})}. \tag{16}$$

这里， $E_{\rm TKE}(Z_{\rm H}, N_{\rm H})$表示式（9）中的 $E_{\rm TKE}(Z - Z_{\rm H}, N - N_{\rm H}, Z_{\rm H}, N_{\rm H})$，因为轻碎片的粒子数由 $N_L = N - N_H$和 $Z_L = Z - Z_H$确定。已知裂变系统的总中子数为 N、质子数为 Z时，获得中子数为 $N_{\rm H}$、质子数为 $Z_{\rm H}$的重碎片的概率为

$$P(Z_{\rm H}, N_{\rm H}) = \frac{\langle\Phi|\hat{P}_N\hat{P}^{V_H}_{N_H}\hat{P}_Z\hat{P}^{V_H}_{Z_H}|\Phi\rangle}{\langle\Phi|\hat{P}_N\hat{P}_Z|\Phi\rangle}. \tag{17}$$

III. 数值细节

在本次计算中，我们采用三维坐标空间 [35–42], 中的含时相对论密度泛函理论，所有方向上的晶格网格间距均为 1.0 飞米。对于 ^{240}Pu，盒子尺寸为 $L_x \times L_y \times L_z = 20 \times 20 \times 60$ 飞米^3；对于 ^{252}Cf，则为 $L_x \times L_y \times L_z = 26 \times 26 \times 60$ 飞米^3。含时狄拉克方程（2）采用预测-校正法求解，含时方程（4）采用欧拉算法求解。时间演化步长为 0.2 飞米/c $\approx 6.67 \times 10^{-4}$ zs。粒子-空穴道中采用点耦合相对论能量密度泛函 PC-PK1 [28] ，并在粒子-粒子道中采用单极配对相互作用。对于 ^{240}Pu，中子的配对强度参数 G 为 -0.135 兆电子伏，质子的配对强度参数为 -0.230 兆电子伏；对于 ^{252}Cf，这些参数分别为 -0.125 兆电子伏（中子）和 -0.210 兆电子伏（质子）。这些数值分别根据 ^{240}Pu和 ^{252}Cf的经验配对能隙，使用三点奇偶质量公式确定。选取子空间 V_f 为 $z > 0$ 或 $z < 0$ ，其中 z轴沿裂变方向， z 的区间为从 -30 飞米到 30 飞米。在计算式（13）时，对 θ 和 θ_f 的积分采用梯形法则求值，并将区间离散为 40 个点。式（16）的求和中仅包含满足 $P(Z_{\mathrm{H}}, N_{\mathrm{H}}) > 10^{-6}$ 的道。

IV. 结果与讨论

采用相对论密度泛函 PC-PK1 [28] 和单极配对计算得到的 ^{240}钚形变能曲面，作为轴对称四极形变参数 β_{20} 和八极形变参数 β_{30} 的函数，显示于图1上图。平衡极小值位于（β_{20}, β_{30}） =(0.29, 0.0)，异构态位于（β_{20}, β_{30}） =(0.94, 0.0)。存在两个裂变势垒：内势垒位于（β_{20}, β_{30}） $\approx$(0.63, 0.0)，外势垒位于（β_{20}, β_{30}） $\approx$(1.27, 0.36)。

与我们先前的研究类似 [18, 19, 29, 31], ，我们从能量表面上的三个点开始，这些点位于平衡极小值能量下方 1 兆电子伏处，并在图1上图中以空心点表示。解除对四极矩和八极矩的约束后，体系沿相应的自洽含时密度泛函理论轨迹向断裂演化。断裂后，两个裂变碎片（裂变碎片）以总动能（总动能）出现。当两裂变碎片的

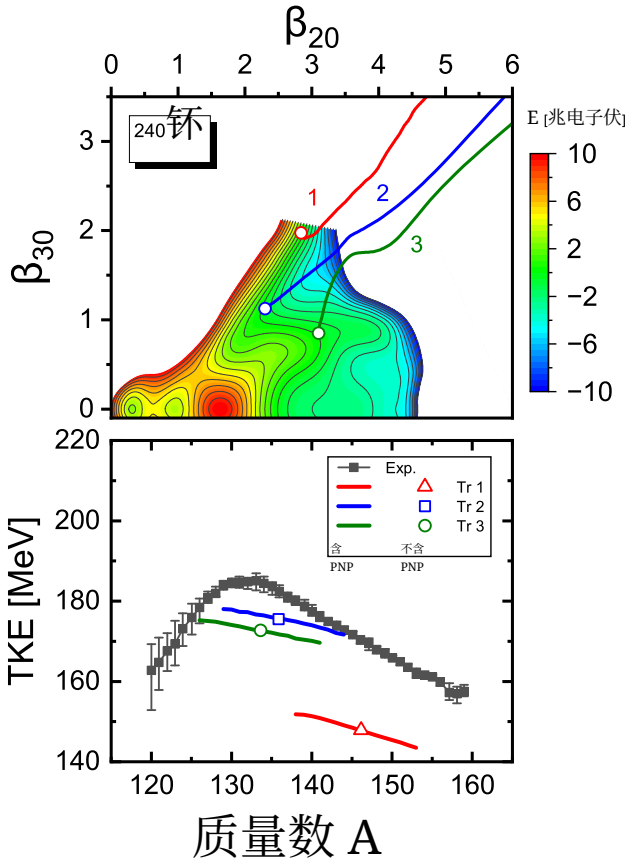


图1。（网络版彩图）上图：^{240}Pu 在轴对称四极形变 β_{20} 和八极形变参数 β_{30} 构成的平面上的自洽形变能面。等高线连接能量相同的能面点，空心圆点位于比平衡极小值能量低 1 MeV 的等能曲线上。相应的形变参数为（β_{20}，β_{30}）=（2.84，1.98）、（2.30，1.13）、（3.10，0.85），这些参数是自洽 TDDFT 裂变轨迹 1、2 和 3 的起始点。下图：空心符号表示轨迹 $1-3$ 生成碎片的平均总动能。曲线表示这些轨迹相应的粒子数投影总动能分布，它们是重碎片质量的函数。实验数据由对参考文献 [43–46] 的结果取平均得到。

质心间距离达到 25 飞米时，时间演化终止。随后分别利用矢量密度$\rho_V(\boldsymbol{r})$和公式（6）计算裂变碎片的平均质量数和总动能。轨迹 $1-3$ 对应的结果在图1下图中以空心符号表示，并与实验值一同给出。尽管轨迹2和3计算得到的总动能与数据在定性上相符，但对于高度质量不对称裂变路径1，预测的总动能比

比实验值低。

由于在形变能量表面和裂变路径的自洽计算中纳入配对关联，会破坏U(1)粒子数规范对称性，因此计算得到的碎片质量数是期望值，通常不局限于整数。通过粒子数投影（PNP）可以恢复粒子数对称性。为了获得单个裂变碎片（裂变碎片）和总系统粒子数均确定的态，我们采用双粒子数投影方法 [33]。因此，对于每条轨迹，我们都会计算与PNP得到的质量数分布相关联的总动能。所得总动能如图1下图所示。对于每条轨迹，粒子数投影后的总动能会随重碎片质量数增加而降低，这主要是因为两个碎片之间的库仑斥力减弱。

因此，标准含时密度泛函理论（TDDFT）方法只能给出以平均质量数表征的裂变碎片的总动能。然而，纳入PNP后，便可以计算平均值附近一系列碎片质量数对应的总动能。由此得到的总动能分布再现了实验观测到的质量依赖性。例如，对于轨迹2，PNP使我们能够计算重碎片质量数为129至144时的总动能，相应的总动能从178.0兆电子伏降至171.7兆电子伏。

在文献 [32] 中，通过改变配对相互作用的强度及其表面与体积特征，研究了配对关联对所计算总动能的影响。研究发现，这些修改均未能显著减小与实验之间的差异：偏离最可能裂变道时对总动能的低估基本保持不变。为使用不同的配对相互作用进一步检验这一结论，我们从与图1所示相同的初始点出发，将配对强度参数提高10%，重新计算了自洽裂变路径。需要指出的是，原始配对强度是根据 ^{240}钚的经验配对能隙确定的。结果见图2。裂变路径仅受到边际影响，相应的总动能与实验数据相比也只有轻微改善。

TDDFT在裂变动力学中的大多数应用都假设了轴对称性，而大多数裂变产额和总动能的计算也都局限于自洽

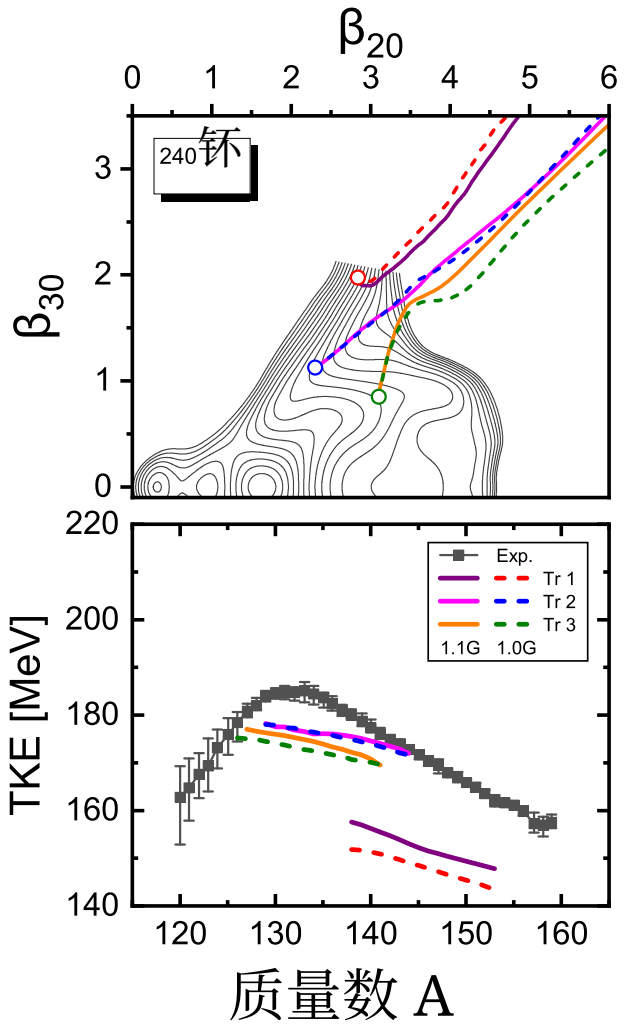


图2。（网络版彩图）与图1图注相同，但还包括通过将配对强度参数提高 10% 得到的另外三条含时密度泛函理论轨迹的总动能分布。

在四极形变—八极形变（β_{20}, β_{30}）平面上的轨迹。在当前分析中，我们开始探讨额外的集体自由度及其对所预测总动能的影响。图3比较了质量不对称裂变路径1与轨迹4在（β_{20}, β_{30}）平面上的投影；轨迹4从（$\beta_{20}, \beta_{30}, \beta_{40}$）$=(3.40, 2.40, 8.20)$处出发，并包含一个初始$\beta_{40}$ 约束。尽管轨迹4与轨迹1从相同能量处出发，但对初始十六极形变进行约束，从而约束了裂变系统的初始颈部厚度，会导致裂变碎片在断裂时的电荷分布之间间距更小。这一点如图4所示，该图比较了裂变轨迹1和4中 ^{240}Pu在初始点和断裂点处的核子密度。因此，库仑斥力

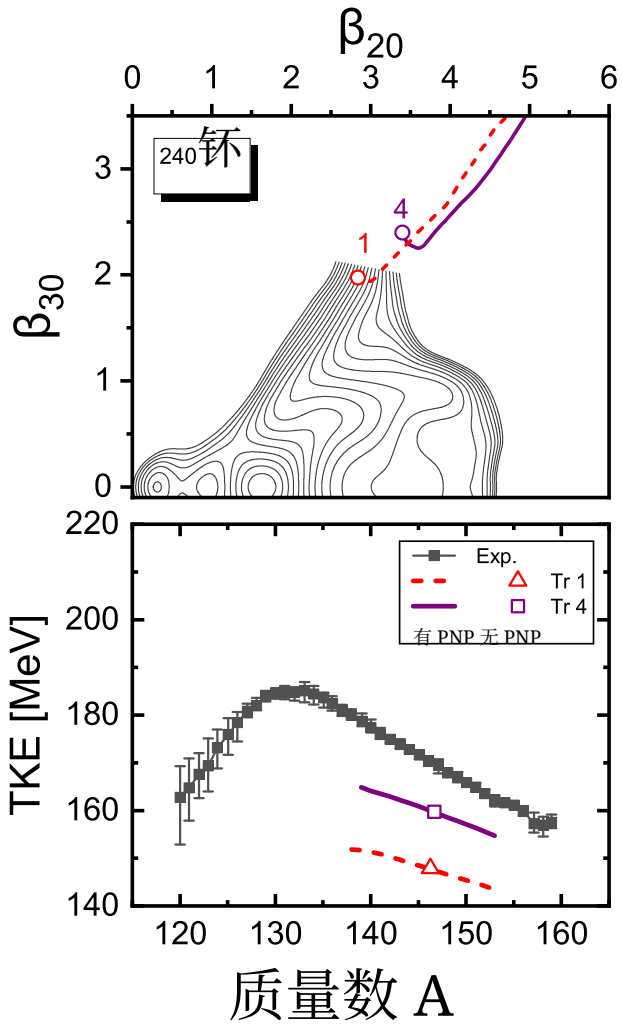


图3。（在线彩色）上图：形变能面和轨迹 1 与图1相同。轨迹 4（实线所示）从 $(\beta_{20}, \beta_{30}, \beta_{40}) = (3.40, 2.40, 8.20)$ 出发，并包含一个初始 β_{40} 约束。它从与轨迹 1 相同的能量出发。下图：轨迹 1 的结果和数据与图1相同。空心方框表示轨迹 4 的裂变碎片平均总动能，实线表示相应的粒子数投影总动能分布。

在断裂处，轨迹 4 的这种作用更强。因此，尽管两种情况下得到的碎片质量分布相似，但相应的总动能相差近 10 兆电子伏。

这一结果凸显了在对裂变可观测量进行建模时，探索更广泛的集体自由度空间的重要性。在图5中，我们展示了一项计算结果，其中考虑了数量多得多的轨迹，且所有初始构型具有相同的能量，比平衡极小值低1兆电子伏。

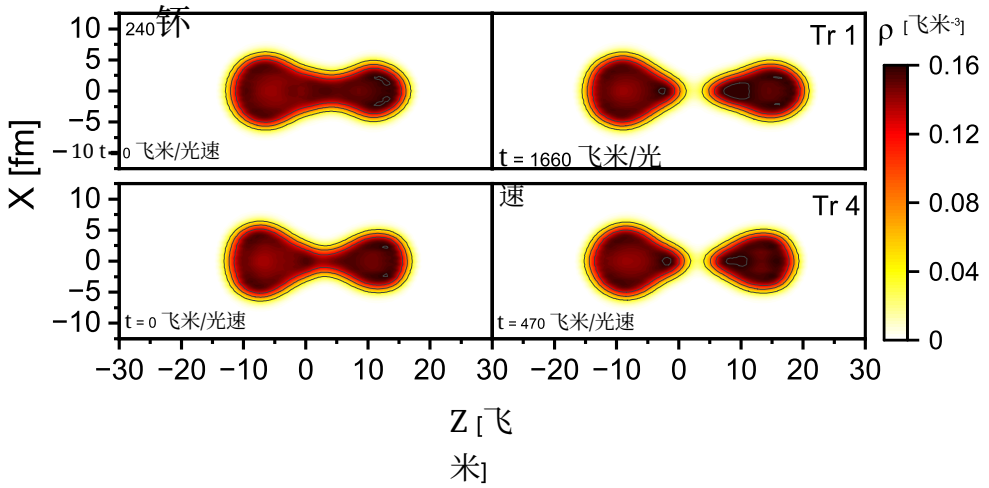


图4.（在线彩色）图3所示的裂变轨迹1（上图）和4（下图）中，^{240}Pu在初始时刻（左）和断裂点（右）的单体密度。

上图展示了投影到（β_{20}, β_{30}）平面上的轨迹。蓝色轨迹起始于受（β_{20}, β_{30}）约束的初始态，并位于主裂变谷内。更不对称的轨迹（橙色）起始于受初始（$\beta_{20}, \beta_{30}, \beta_{40}$）形变参数约束的状态。最后，为了到达质量对称区域中的断裂等高线，必须打破轴对称性，而绿色轨迹则始于受（$\beta_{20}, \beta_{30}, \beta_{22}$）约束的点。质量对称区域中的轴对称轨迹无法到达断裂等高线。

所得平均总动能如图5下图中的空心符号所示，颜色编码与前文相同。再次发现，只有不对称势阱中最可能的裂变路径所计算出的总动能与实验值较为接近。对于更对称和高度不对称的轨迹，计算得到的总动能无论是绝对值还是质量依赖性，都无法再现实验数据。

红色三角形表示对PNP分布取平均后得到的总动能。在这一过程中，多条轨迹可能对给定的一对裂变碎片有所贡献。对于每条轨迹，首先计算PNP分布，然后对该碎片对的所有贡献取平均，得到与特定碎片对相关的总动能。

$$\langle E_{\mathrm{TKE}}(A_H)\rangle = \frac{1}{m}\sum_{q=1}^{m} E^{q}_{\mathrm{TKE}}(A_H), \tag{18}$$

其中，E^{q} 总动能(A_H) 表示第 q 条 TDDFT轨迹的总动能，使用公式（16）计算得到；m 表示在给定重碎片质量数下，对总动能有贡献的 TDDFT轨迹数量

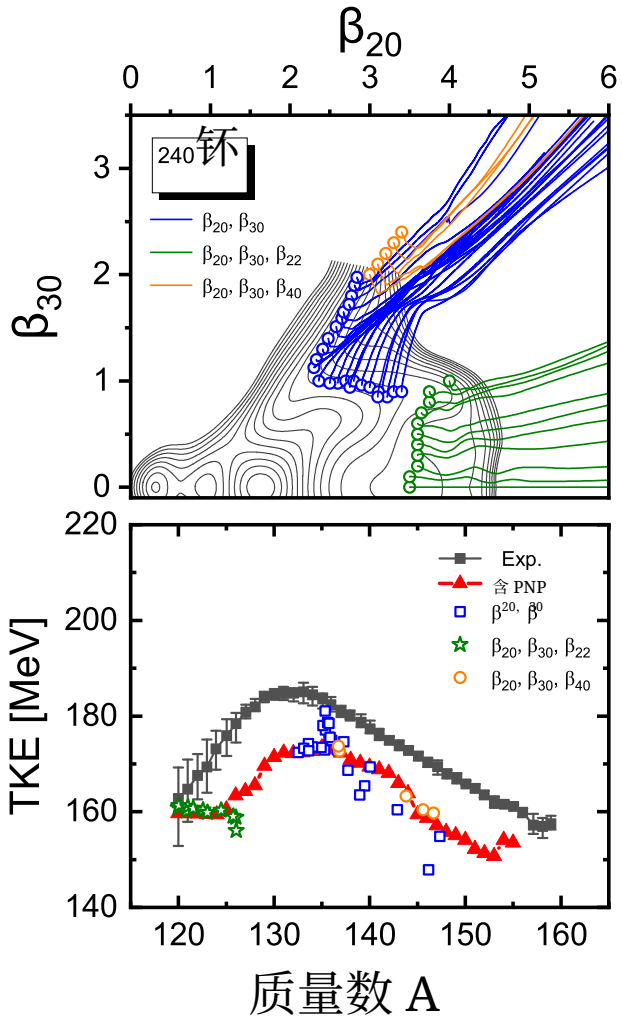


图5。（在线彩色）上图：形变能面与图1上图中的相同。空心圆点表示TDDFT裂变轨迹的初始 β_{20} 和 β_{30} 形变参数，所有初始构型的能量均相同，比平衡极小值低1兆电子伏。实线曲线表示这些轨迹在（β_{20}，β_{30}）平面上的投影。蓝色、绿色和橙色TDDFT轨迹分别从受（β_{20}，β_{30}）、（β_{20}，β_{30}，β_{22}）和（β_{20}，β_{30}，β_{40}）形变参数约束的初始态出发。下图：蓝色、绿色和橙色符号分别表示从上图所示相应初始点出发的TDDFT轨迹中生成碎片的平均总动能。红色三角形表示从上图所有TDDFT裂变轨迹获得的粒子数投影总动能分布的平均值。

质量数 A_H。尽管计算得到的总动能仍无法在定量上重现实验值，但其质量依赖性如今与实验结果的吻合程度已显著提高

这些数据。

图 5 所示通过对 PNP分布取平均得到的总动能，应被视为总动能的下限。这是因为其中未包含裂变系统的激发能：所有轨迹均初始化于冷核的形变能曲面上的各点。计算得到的总动能与复合核^{240}钚 [43–46]裂变时平均动能释放的实验数据进行了比较。在这些实验中，复合核由热中子俘获于 ^{239}钚形成，其激发能对应于中子分离能。然而，这一断裂前激发能不能简单地加到总动能上，因为其中一部分会转化为初生碎片的激发能。

作为第二个例子，我们因此考察 ^{252}Cf的自发裂变。在自发裂变中，系统从基态势阱出发，通过量子隧穿穿越裂变势垒，并在势垒后的区域出现，同时沿隧穿路径保持能量守恒。TDDFT裂变轨迹初始化于裂变势垒之外的出口点，这些出口点在图 6 的上图中以空心圆表示，系统正是在此处从量子隧穿区域中出现。除初始化于约束在（β_{20}, β_{30}）中的各点的轨迹，以及从约束在（$\beta_{20}, \beta_{30}, \beta_{40}$）中的各点出发的极不对称轨迹外，我们还发现，要弥合 $\beta_{30} \approx 1$ 附近的间隙，就必须打破轴对称性。因此，相应的裂变路径初始化于约束在（$\beta_{20}, \beta_{30}, \beta_{31}$）中的各点。从该八极形变区域出发的轴对称轨迹无法达到断裂 [27]。

所得的总动能如下图 6 的下图所示。空心符号表示按重碎片平均质量数计算得到的总动能，颜色编码与上图所示的轨迹相对应。尽管平均总动能总体上与文献 [47], 的数据一致，甚至在近乎对称裂变情况下超过了实验值，但其详细的质量依赖性并未得到再现。红色三角形再次表示对PNP分布取平均得到的总动能。在这种情况下，理论结果紧密遵循总动能随重碎片质量数变化的经验趋势。与 ^{240}钚的情况一样，这些结果表明，允许更广泛的集体自由度空间，并对生成的裂变碎片进行PNP处理，可以对与给定裂片对相关的总动能贡献取平均，从而再现其质量依赖性

实验观测到的。

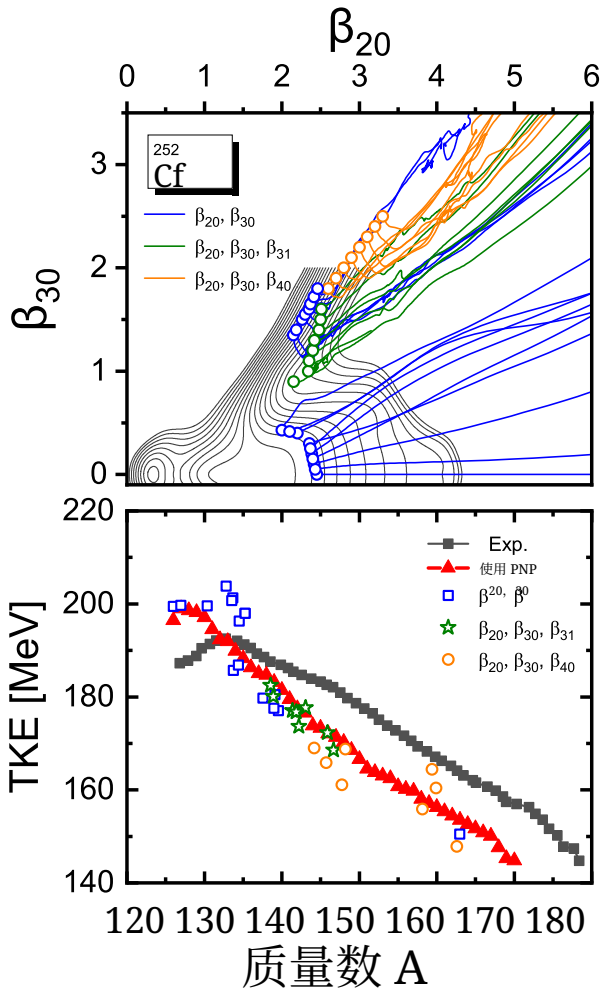


图 6。（彩色在线）上图：^{252}Cf 在轴对称四极 β_{20} 和八极 β_{30} 形变参数平面内的自洽形变能量面。空心圆点表示TDDFT裂变轨迹的初始 β_{20} 和 β_{30} 形变参数，所有初始构型的能量均与平衡极小值相同。实线曲线表示这些轨迹在（β_{20}，β_{30}）平面上的投影。蓝色、绿色和橙色TDDFT轨迹分别从受（β_{20}，β_{30}）、（β_{20}，β_{30}，β_{31}）、（β_{20}，β_{30}，β_{40}）形变参数约束的初始态出发。下图：蓝色、绿色和橙色符号表示从上图所示相应初始点出发的TDDFT轨迹中生成碎片的平均总动能。红色三角形表示对上图所有TDDFT裂变轨迹得到的粒子数投影总动能分布取平均的结果。数据引自文献 [47]。

V. 总结与展望

在本文中，我们在相对论性 TDDFT+BCS 框架内研究了 ^{240}钚和 ^{252}Cf 的裂变碎片总动能。正如我们先前的研究 [18, 19, 29, 31], 所示，并且最近一项涵盖更完整碎片化集合的非相对论性 TDHFB 研究 [32], 也独立证实，标准微观裂变动力学仅在最可能的质量分裂附近再现测得的总动能，而对于更对称和更不对称的碎片化，其预测值均低估了 10–20 兆电子伏。Ref. [32] 指出，无论改变 Skyrme 参数化、配对强度还是其表面与体积特征，这一差异基本保持不变。受此观察启发，我们研究了标准处理所缺少的两个要素：通过粒子数投影（PNP）恢复因配对关联而破缺的粒子数对称性，以及将通向断裂过程中探索的集体空间扩展到轴对称构型之外。

我们证实，相对于由 ^{240}Pu 的经验奇偶质量交错所确定的数值，将配对相互作用提高 10% 后，仅改变配对强度并不会实质性改变裂变路径和最终的总动能，这与文献 [32] 的结论一致；该文献采用了不同的能量密度泛函和配对处理方法。相比之下，粒子数投影会定性地改变这一图景：未进行投影的 TDDFT+BCS 轨迹在单一平均的、非整数的碎片质量数处，只给出一个平均总动能值；而 PNP 则将每条轨迹转换为其实际占据的物理整数 (Z,N) 分区上的总动能值分布，并且随着重碎片质量数增加而正确降低，因为远离的碎片之间的库仑斥力随之减小。我们进一步发现，由十六极矩 β_{40} 控制的断裂前颈部初始厚度，会直接且显著地影响总动能：约束轨迹从更薄的颈部开始，会使断裂时的碎片电荷分布更加接近，并将总动能提高近 10 兆电子伏，同时不改变碎片质量分裂。综合这两个因素，由遍历扩展集体空间的一组轨迹构成系综，将每条轨迹投影到确定的粒子数，并根据对给定裂片对有贡献的轨迹进行平均，相比任何单一的未投影轨迹，都能显著更好地再现实验总动能系统学的质量依赖性；这一点对于 ^{240}Pu 的诱发裂变和 ^{252}Cf 的自发裂变均成立。

这些结果表明，微观裂变理论中长期存在的一部分总动能差异，并非能量密度泛函本身的缺陷，而是反映了这样一种表示方式的不完整性：将裂变系统表示为一条受限于狭窄集体空间、且破坏对称性的单一平均场轨迹。恢复粒子数对称性，并允许系统探索更丰富的断裂前形状，分别解决了问题的不同部分。前者修正了平均场轨迹与其产生的物理整数 Z 和 N 碎片之间的对应关系；后者则修正了裂变系统最初到达正确断裂构型的能力。与此同时，我们的结果仍只能算部分令人满意。此处取得的改进主要体现在总动能（质量数）的质量依赖性，或其形状上。相对于实验结果的系统性偏移仍然存在，在 ^{252}Cf 的重碎片质量数较大时尤为明显。此外，对于 ^{240}Pu 的诱发裂变，投影平均总动能应被理解为一个下限，因为我们的轨迹始于冷核形变能面上的构型，因此忽略了断裂前激发能；在中子诱发裂变中，这部分能量只有一部分会作为内部激发被碎片保留，而不会全部转化为动能。要与数据进行一致比较，还需要将当前方法与对该激发能及其在裂变系统和生成碎片之间分配方式的显式处理相结合。

本研究还可进行若干自然的拓展。本文考察的集体空间虽然已比大多数以往研究更为广泛，但仍不全面；要充分描述相关断裂构型，可能还需要纳入更多非轴对称自由度和高多极自由度，尤其是在对称质量区和高度不对称质量区。可以用针对集体坐标的适当构型混合处理，取代目前逐轨迹粒子数投影平均，其思路与含时生成坐标法一致。最后，既然我们已证明这些要素能显著改善总动能的预测，就有必要检验它们能否同样改善另一项密切相关且同样存在问题的预测：总激发能在两个裂变碎片之间的分配 [32]。将目前的理论框架扩展到更多裂变系统，并涵盖更广的质量范围和裂变性范围，将有助于确定这些结论的普适性。

VI. 附录

在含时密度泛函理论中，原子核的波函数可以表示为质子波函数与中子波函数的直积

$$|\Phi\rangle = |\Phi_n\rangle \bigotimes |\Phi_p\rangle = \prod_{i>0}[\mu_{i,n} + \nu_{i,n} c^\dagger_{i,n} c^\dagger_{\bar{i},n}]|-\rangle \bigotimes \prod_{j>0}[\mu_{j,p} + \nu_{j,p} c^\dagger_{j,p} c^\dagger_{\bar{j},p}]|-\rangle, \tag{19}$$

其中，下标 n (p) 表示与中子（质子）相关的参数。粒子数投影态写为

$$\hat{P}_N \hat{P}^{V_f}_{N_f} \hat{P}_Z \hat{P}^{V_f}_{Z_f} |\Phi\rangle = \hat{P}_N \hat{P}^{V_f}_{N_f} \prod_{i>0}[\mu_{i,n} + \nu_{i,n} c^\dagger_{i,n} c^\dagger_{\bar{i},n}]|-\rangle \bigotimes \hat{P}_Z \hat{P}^{V_f}_{Z_f} \prod_{j>0}[\mu_{j,p} + \nu_{j,p} c^\dagger_{j,p} c^\dagger_{\bar{j},p}]|-\rangle, \tag{20}$$

其对 $\hat{} \ P_M \hat{} P^{V_f}_{M_f} \prod_{j>0}[\mu_{j,m} + \nu_{j,m} c^\dagger_{j,m} c^\dagger_{\bar{j},m}]|-\rangle$ ($M = Z, N$ and $m = p, n$) 的显式表达式为：

$$\begin{aligned}
&\hat{P}_M \hat{P}^{V_f}_{M_f} \prod_{j>0}[\mu_{j,m} + \nu_{j,m} c^\dagger_{j,m} c^\dagger_{\bar{j},m}]|-\rangle \\
&= \frac{1}{4\pi^2} \int d\theta^m_f \int d\theta^m \ e^{-i\theta^m_f M_f - i\theta^m M} \ e^{i\theta^m \hat{M} + i\theta^m_f \hat{M}_f} \prod_{j>0}[\mu_{j,m} + \nu_{j,m} c^\dagger_{j,m} c^\dagger_{\bar{j},m}]|-\rangle \\
&= \frac{1}{4\pi^2} \int d\theta^m_f \int d\theta^m \ e^{-i\theta^m_f M_f - i\theta^m M} \prod_{j>0}[\mu_{j,m} + \nu_{j,m} b^\dagger_{j,m}(\theta^m_f, \theta^m) b^\dagger_{\bar{j},m}(\theta^m_f, \theta^m)]|-\rangle.
\end{aligned} \tag{21}$$

算符 $b^\dagger_{j\ ,\ m}(\theta^m_f, \theta^m)$ 定义为：

$$b^\dagger_{j,m}(\theta^m_f, \theta^m) = e^{i\theta^m} e^{i\theta^m_f \hat{M}_f} c^\dagger_{j,m} e^{-i\theta^m_f \hat{M}_f}, \tag{22}$$

并满足正交归一条件，

$$\langle -|b_{i,m}(\theta^m_f, \theta^m) b^\dagger_{j,m}(\theta^m_f, \theta^m)|-\rangle = \langle -|c_{i,m} c^\dagger_{j,m}|-\rangle = \delta_{ij}. \tag{23}$$

因此，$|\Phi_m(\theta^m_f, \theta^m)\rangle = \prod_{j>0}[\mu_{j,m} + \nu_{j,m} b^\dagger_{j,m}(\theta^m_f, \theta^m) b^\dagger_{\bar{j}\ ,\ m}(\theta^m_f, \theta^m)]|-\rangle$ 等价于 BCS 真空。公式（13）中的分母可因式分解如下：

$$\langle \Phi | \hat{P}_N \hat{P}^{V_f}_{N_f} \hat{P}_Z \hat{P}^{V_f}_{Z_f} | \Phi \rangle = \langle \Phi_n | \hat{P}_N \hat{P}^{V_f}_{N_f} | \Phi_n \rangle \langle \Phi_p | \hat{P}_Z \hat{P}^{V_f}_{Z_f} | \Phi_p \rangle, \tag{24}$$

其中，重叠核 $\langle \Phi_m | \hat{} P_M \hat{} P^{V_f}_{M_f} | \Phi_m \rangle$ 读作（$M = Z$、 N和 $m = p$、 n），

$$\langle \Phi_m | \hat{P}_M \hat{P}^{V_f}_{M_f} | \Phi_m \rangle = \frac{1}{4\pi^2} \int d\theta^m_f \int d\theta^m \ e^{-i\theta^m_f M_f - i\theta^m M} \langle \Phi_m | \Phi_m(\theta^m_f, \theta^m) \rangle, \tag{25}$$

而 $\langle\Phi_m|\Phi_m(\theta_f^m,\theta^m)\rangle$ 可使用 Pfaffian算法 [48, 49]计算。相应地，式（13）中的分子可表示为

$$\begin{aligned}&\langle\Phi|\bar{\psi}\gamma^\mu\psi\hat{P}_N\hat{P}_{N_f}^{V_f}\hat{P}_Z\hat{P}_{Z_f}^{V_f}|\Phi\rangle\\&=\langle\Phi_n|\bar{\psi}_n\gamma^\mu\psi_n\hat{P}_N\hat{P}_{N_f}^{V_f}|\Phi_n\rangle\langle\Phi_p|\hat{P}_Z\hat{P}_{Z_f}^{V_f}|\Phi_p\rangle+\langle\Phi_n|\hat{P}_N\hat{P}_{N_f}^{V_f}|\Phi_n\rangle\langle\Phi_p|\bar{\psi}_p\gamma^\mu\psi_p\hat{P}_Z\hat{P}_{Z_f}^{V_f}|\Phi_p\rangle,\end{aligned}\tag{26}$$

其中，ψ_n 和 ψ_p 分别是中子和质子场算符。

重叠 $\langle\Phi_m|\hat{P}_M\hat{P}_{M_f}^{V_f}|\Phi_m\rangle$ 使用式（25）计算，而重叠 $\langle\Phi_m|\bar{\psi}_m\gamma^\mu\psi_m\hat{P}_M\hat{P}_{M_f}^{V_f}|\Phi_m\rangle$($M=Z,N$和 $m=p,n$)为

$$\begin{aligned}&\langle\Phi_m|\bar{\psi}_m\gamma^\mu\psi_m\hat{P}_M\hat{P}_{M_f}^{V_f}|\Phi_m\rangle=\frac{1}{4\pi^2}\int d\theta_f^m\int d\theta^m\ e^{-i\theta_f^m M_f-i\theta^m M}\langle\Phi_m|\bar{\psi}_m\gamma^\mu\psi_m|\Phi_m(\theta_f^m,\theta^m)\rangle\\&=\frac{1}{4\pi^2}\int d\theta_f^m\int d\theta^m\ e^{-i\theta_f^m M_f-i\theta^m M}\sum_{i,j}\bar{\phi}_{i,m}(\boldsymbol{r}_f)\gamma^\mu\phi_{j,m}(\boldsymbol{r}_f,\theta_f^m,\theta^m)\langle\Phi_m|c_{i,m}^\dagger b_{j,m}(\theta_f^m,\theta^m)|\Phi_m(\theta_f^m,\theta^m)\rangle,\end{aligned}\tag{27}$$

其中，$\phi_{j,\ m}(\boldsymbol{r}_f,\theta_f^m,\theta^m)$是与算符$b_{j,\ m}^\dagger(\theta_f^m,\theta^m)$对应的波函数。我们使用 Pfaffian 算法计算重叠核$\langle\Phi_m|c_{i,\ m}^\dagger b_{j,\ m}(\theta_f^m,\theta^m)|\Phi_m(\theta_f^m,\theta^m)\rangle$，并指出，只有费米海中的态才会对核子场算符 ψ_m（无海近似）作出贡献，

$$\bar{\psi}_m\approx\sum_i c_{i,m}^\dagger\bar{\phi}_{i,m}(\boldsymbol{r}_f),\quad \psi_m\approx\sum_j b_{j,m}(\theta_f^m,\theta^m)\phi_{j,m}(\boldsymbol{r}_f,\theta_f^m,\theta^m).\tag{28}$$

致谢

本工作部分得到中国高端外国专家计划、国家自然科学基金委员会（项目编号：12435006和12475117）、中子科学与技术国家重点实验室（项目编号：NST202401016）、国家重点研发计划（2024YFE0109803）、国家重点研究与发展计划（2024YFA1612600）、核数据国家重点实验室基金（JCKY2026201C153）、北京大学高性能计算平台的支持；同时得到项目“作为量子与复杂系统卓越科学中心组成部分的前沿研究及其应用实施，以及李代数表示”（项目编号：PK.1.1.10.0004）的支持。该项目由欧盟通过欧洲区域发展基金和2021—2027年竞争力与凝聚力计划共同资助，并得到克罗地亚科学基金会项目“复杂飞秒系统动力学”（IP-2025-02-4214）的支持。

[1] N. Schunck和L. M. Robledo, 《物理学进展报告》79，116301（2016）。[2] M. Bender、R. Bernard、G. Bertsch、S. Chiba、J. Dobaczewski、N. Dubray、S. A. Giuliani、K. Hagino、D. Lacroix、Z. Li、P. Magierski、J. Maruhn、W. Nazarewicz、J. Pei、S. P´eru、N. Pillet、J. Randrup、D. Regnier、P.-G. Reinhard、L. M. Robledo、W. Ryssens、J. Sadhukhan、G. Scamps、N. Schunck、C. Simenel、J. Skalski、I. Stetcu、P. Stevenson、S. Umar、M. Verriere、D. Vretenar、M. Warda和S. ˚Aberg, 《物理学杂志G：核与粒子物理》47，113002（2020）。[3] N. Schunck和D. Regnier, 《粒子与核物理进展》125，103963（2022）。

[4] J. J.Cowan、C. Sneden、J. E. Lawler、A. Aprahamian、M. Wiescher、K. Langanke、G. Mart´ınez- Pinedo 和 F.-K. Thielemann, 《现代物理学评论》93，015002（2021）。

[5]J. Sadhukhan、S. A. Giuliani、Z. Matheson 和 W. Nazarewicz, 《物理评论C》101，065803（2020）。

[6]S. A. Giuliani、G. Mart´ınez-Pinedo、M.-R. Wu 和 L. M. Robledo, 《物理评论C》102，045804（2020）。

[7] J. Verbeke、J. Randrup 和 R. Vogt, 《计算机物理通讯》191，178（2015）。

[8]P. Talou、I. Stetcu、P. Jaffke、M. Rising、A. Lovell 和 T. Kawano, 《计算机物理通讯》269，108087（2021）。

[9] J. Randrup 和 R. Vogt, 《物理评论C》80，024601（2009年）。[10] O. Litaize 和 O. Serot, 《物理评论C》82，054616（2010）。[11] B. Becker、P. Talou、T. Kawano、Y. Danon 和 I. Stetcu, 《物理评论C》87，014617（2013年）。[12] O. Litaize、O. Serot 和 L. Berge, 《欧洲物理学杂志A》51，177（2015年）。[13] A. Bulgac, 《物理评论C》102，044609（2020年）。[14]J. W. Negele、S. E. Koonin、P. M¨oller、J. R. Nix 和 A. J. Sierk, 《物理评论C》17，1098（1978年）。[15] G. Scamps、C. Simenel 和 D. Lacroix, 《物理评论C》92，011602（2015年）。[16] A. Bulgac、P. Magierski、K. J. Roche 和 I. Stetcu, 《物理评论快报》116，122504（2016年）。[17] Y. Tanimura、D. Lacroix 和 S. Ayik, 《物理评论快报》118，152501（2017年）。[18]Z. X. Ren、D. Vretenar、T. Nikˇsi´c、P. W. Zhao、J. Zhao 和 J. Meng, 《物理评论快报》128，172501（2022年）。

[19]Z. X. Ren、J. Zhao、D. Vretenar、T. Nikˇsi´c、P. W. Zhao 和 J. Meng，《物理评论C》105，044313（2022年）。[20] L. Tong 和 S. Yan，《物理评论C》106，044611（2022年）。[21] Y. Huang、X.-X. Sun 和 L. Guo，《物理评论C》110，064318（2024年）。[22] Y. Huang、X.-X. Sun 和 L. Guo，《欧洲物理学杂志A》60，100（2024年）。[23]A. Bulgac、I. Abdurrahman、S. Jin、K. Godbey、N. Schunck 和 I. Stetcu，《物理评论快报》126，142502（2021年）。[24] A. Bulgac、I. Abdurrahman、K. Godbey 和 I. Stetcu，《物理评论快报》128，022501（2022年）。[25] I. Abdurrahman、M. Kafker、A. Bulgac 和 I. Stetcu，《物理评论快报》132，242501（2024年）。[26] A. Bulgac、I. Abdurrahman、M. Kafker 和 I. Stetcu，《物理评论快报》135，062501（2025年）。[27]B. Li、D. D. Zhang、D. Vretenar、T. Nikˇsi´c、P. W. Zhao 和 J. Meng，《物理评论快报》136，252502（2026年）。[28] P. W. Zhao、Z. P. Li、J. M. Yao 和 J. Meng，《物理评论C》82，054319（2010年）。

[29]B. Li、D. Vretenar、Z. X. Ren、T. Nikˇsi´c、J. Zhao、P. W. Zhao 和 J. Meng，《物理评论C》107，014303（2023）。

[30]B. Li、D. Vretenar、T. Nikˇsi´c、J. Zhao、P. W. Zhao 和 J. Meng，《物理学前沿》19，44201（2024年）。[31] B. Li、D. Vretenar、T. Nikˇsi´c、P. W. Zhao 和 J. Meng，《物理评论C》111，L051302（2025年）。[32] A. Bjelˇci´c、N. Schunck 和 M. Verriere，《物理评论C》113，034602（2026年）。[33] G. Scamps 和 D. Lacroix，《物理评论C》87，014605（2013年）。[34]S. Ebata、T. Nakatsukasa、T. Inakura、K. Yoshida、Y. Hashimoto 和 K. Yabana，《物理评论C》82，034306（2010年）。[35] Z. X. Ren、S. Q. Zhang 和 J. Meng，《物理评论C》95，024313（2017年）。[36]Z. X. Ren、S. Q. Zhang、P. W. Zhao、N. Itagaki、J. A. Maruhn 和 J. Meng，《中国科学：物理学 力学 天文学》62，112062（2019年）。[37] Z. X. Ren、P. W. Zhao、S. Q. Zhang 和 J. Meng，《核物理A》996，121696（2020年）。[38] B. Li、Z. X. Ren 和 P. W. Zhao，《物理评论C》102，044307（2020年）。[39] F. F. Xu、B. Li、Z. X. Ren 和 P. W. Zhao，《物理评论C》109，014311（2024年）。[40] F. F. Xu、B. Li、P. Ring 和 P. W. Zhao，《物理学快报B》856，138893（2024年）。[41]F. F. Xu、Y. K. Wang、Y. P. Wang、P. Ring 和 P. W. Zhao，《物理评论快报》133，022501（2024年）。

[42] F. F. Xu 和 P. W. Zhao, 《物理评论快报》136，232503（2026年）。[43]C. Wagemans、E. Allaert、A. Deruytter、R. Barth´el´emy 和 P. Schillebeeckx, 《物理评论C》30，218（1984年）。[44] P. Geltenbort、F. G¨onnenwein 和 A. Oed, 《辐射效应》93，57（1986年），https://doi.org/10.1080/00337578608207429。[45]K. NISHIO、Y. NAKAGOME、I. KANNO 和 I. KIMURA, 《核科学与技术杂志》32，404（1995年），https://doi.org/10.1080/18811248.1995.9731725。[46] C. TSUCHIYA、Y. NAKAGOME、H. YAMANA、H. MORIYAMA、K. NISHIO、I. KANNO、K. SHIN 和 I. KIMURA, 《核科学与技术杂志》37，941（2000年），https://doi.org/10.1080/18811248.2000.9714976。[47] F.-J. Hambsch 和 S. Oberstedt, 《核物理A》617，347（1997年）。[48] Q. L. Hu、Z. C. Gao 和 Y. S. Chen, 《物理学快报B》734，162（2014年）。[49] L. M. Robledo, 《物理评论C》79，021302（2009年）。