

Министерство науки и высшего образования

НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЯДЕРНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
«МОСКОВСКИЙ ИНЖЕНЕРНО-ФИЗИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ»
(НИЯУ «МИФИ»)

УДК 539.17

ОТЧЁТ
О НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЕ

МИКРОСКОПИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА
ДЕФОРМИРОВАННЫХ АТОМНЫХ ЯДЕР

Исполнитель темы
студент группы Б19-102

подпись, дата

Д. А. Ситьков

Научный руководитель
д-р физ.-мат. наук, проф.

подпись, дата

А. Л. Барабанов

Москва 2022

Оглавление

Введение	3
1 Параметризация ядра	4
1.1 Аналитическое описание	4
1.2 Симметричная деформация ядра	5
1.3 Потенциал Вудса-Саксона	7
2 Двухцентрковой осциллятор	9
2.1 Симметричный потенциал	9
2.2 Аналитическое решение	10
Заключение	15
А Приложения	16
А.1 Приложение 1	16
Список литературы	17

Введение

Ядерное деление — процесс, зависящий от времени. Каждая его стадия характеризуется некоторым временным масштабом. Ядро проходит процесс, который заканчивается появлением двух возбужденных ядерных осколков. Они, в свою очередь, претерпевают череду распадов, снимающих возбуждение, и оказываются в своих основных состояниях (либо же в изомерных возбуждённых состояниях).

Согласно [1] наиболее явной и интересной характеристикой данного процесса является общее вытягивание ядра в ходе деления. Изначальная вытянутость ядра определяется его деформированной формой в состоянии равновесия. По мере протекания процесса форма ядра меняется, поддерживая и удлиняя образующийся шейный регион между двумя будущими осколками. В итоге система переходит потенциальный барьер и стремится к неадиабатичному процессу разрыва данного региона — образуются два разлетающихся ядерных осколков.

Таким образом, для описания данного процесса требуется аналитическая формула, способная описать поверхность ядра в ходе такой деформации. Далее следует решить задачу Шрёдингера для потенциала, в котором находятся нуклоны в процессе деформации ядерной поверхности.

Последняя задача является комплексной. В данной работе будет рассмотрена первая часть её решения — исследование задачи для модели двухцентрового гармонического осциллятора.

Параметризация ядра

1.1 Аналитическое описание

Подобно [2], осуществим параметризацию поверхности ядра в цилиндрической системе координат (ρ, z) ¹.

$$\rho(z) = \begin{cases} \rho_1(z) = b_1 \sqrt{1 - \left(\frac{z}{a_1}\right)^2}, & z \leq z_1 \\ \rho_3(z) = -\operatorname{sgn}\left(\frac{1}{d}\right) \sqrt{R_3^2 - (z - c_3)^2} + \frac{1}{d}, & z_1 < z < z_2 \\ \rho_2(z) = b_2 \sqrt{1 - \left(\frac{z - c_2}{a_2}\right)^2}, & z \geq z_2. \end{cases} \quad (1.1)$$

Задаются следующие параметры:

- a_1, b_1, a_2, b_2 — полуоси эллипсоидов будущего первого и второго осколков соответственно;
- c_2 — параметр деформации, степень растянутости ядра.

Значения

- z_1, z_2 — точки перехода к шейному региону;
- R_3 — радиус окружности шейного региона;
- $c_3, 1/d$ — величины, определяющие центр окружности шейного региона

¹В силу симметрии задачи зависимость от угла φ опущена.

определяются из системы

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho_1(z_1) = \rho_3(z_1), \\ \frac{d}{dz}\rho_1 \Big|_{z_1} = \frac{d}{dz}\rho_3 \Big|_{z_1}, \\ \rho_2(z_2) = \rho_3(z_2), \\ \frac{d}{dz}\rho_2 \Big|_{z_2} = \frac{d}{dz}\rho_3 \Big|_{z_2} \end{array} \right. \quad (1.2)$$

нелинейных уравнений, к которой необходимо добавить условие постоянства объёма²

$$\int_{-a_1}^{z_1} \rho_1^2(z) dz + \int_{z_1}^{z_2} \rho_3^2(z) dz + \int_{z_2}^{a_2+c_2} \rho_2^2(z) dz = \frac{4}{3}a_1b_1^2 + \frac{4}{3}a_2b_2^2. \quad (1.3)$$

Левая часть выражения (1.3) представлена в разд. А.1 приложений.

Вид функции $\rho_3(z)$ из (1.1) обусловлен тем, что точка $(c_3, 1/d)$ — суть центр окружности радиуса R_3 , а сама функция описывает верхнюю или нижнюю (в зависимости от знака коэффициента перед слагаемым с корнем) дугу этой окружности.

На начальном этапе деформации шейный регион должен быть выпуклым: центр окружности радиуса R_3 лежит в области $\rho_3 < 0$, следовательно, $1/d < 0$, и $(-\operatorname{sgn} 1/d) = +1$ — верхняя дуга окружности.

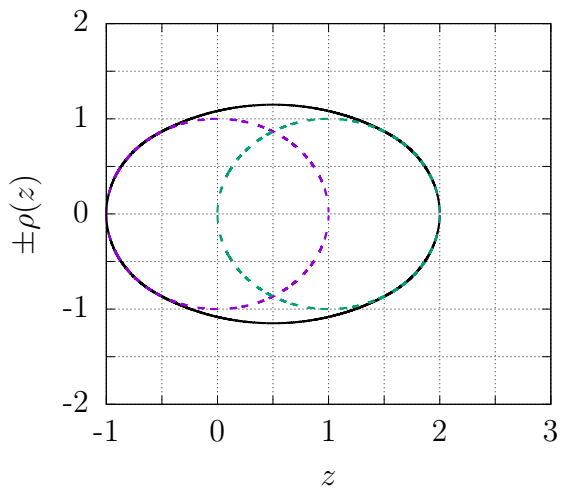
При дальнейшей деформации ядра шейный регион должен стать вогнутым: центр окружности в области $\rho_3 > 0$, поэтому, $1/d > 0$, и $(-\operatorname{sgn} 1/d) = -1$ — нижняя дуга окружности.

1.2 Симметричная деформация ядра

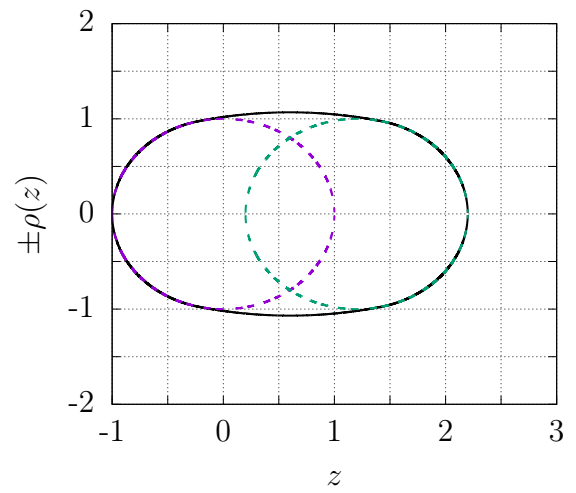
Задача определения параметров $z_1, z_2, R_3, c_3, 1/d$ из систем (1.2) и (1.3) не решается аналитически.

На практике был использован численный метод нахождения решений, который, в свою очередь, реализован итерационным методом (как и любой другой численный метод).

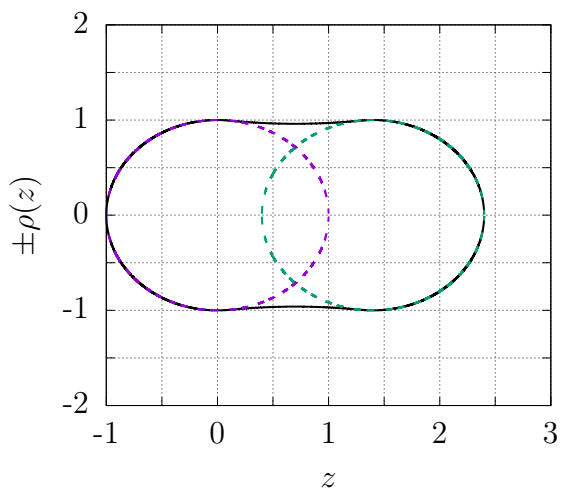
²Общий множитель, равный π , сокращён.



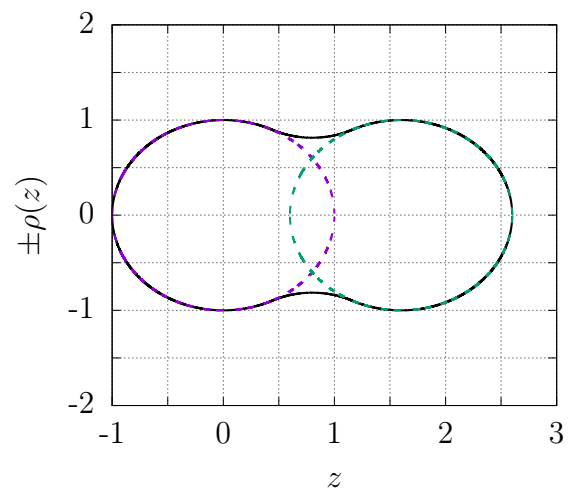
(a) $c_2 = 1,0$



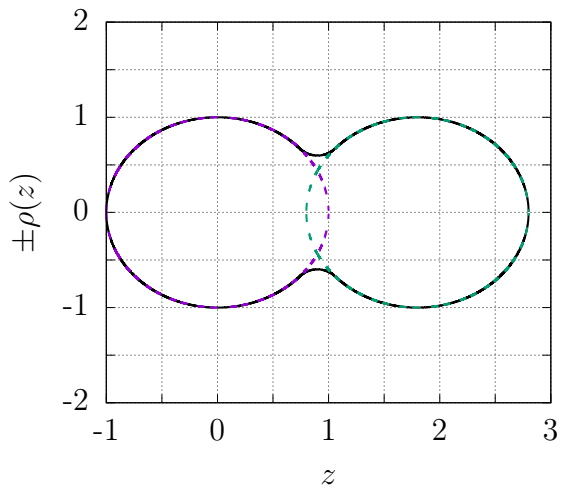
(b) $c_2 = 1,2$



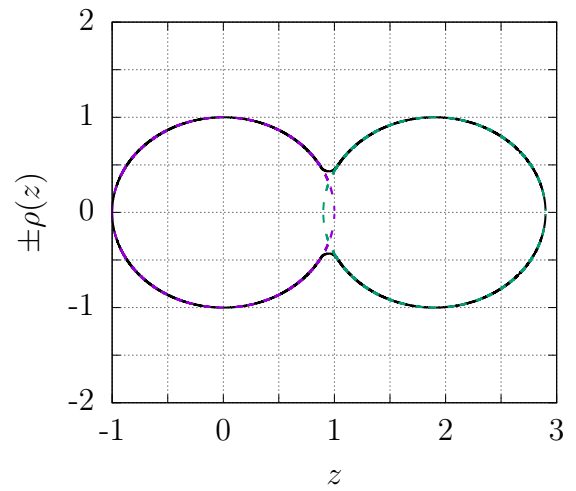
(c) $c_2 = 1,4$



(d) $c_2 = 1,6$



(e) $c_2 = 1,8$



(f) $c_2 = 1,9$

Рисунок 1.1 — Деформация ядра двумя симметричными осколками.

Данная задача оказалась очень чувствительной к начальным (входным) данным, поэтому процесс деформации ядра на рис. 1.1 продемонстрирован на простейшем примере с двумя симметричными осколками $a_1 = b_1 = a_2 = b_2 = 1$.

1.3 Потенциал Вудса-Саксона

Поле, в котором движутся нуклоны, определяется потенциалом Вудса-Саксона

$$V(\rho, z) = -\frac{V_0}{1 + \exp\left[\frac{\Delta(\rho, z)}{a}\right]}, \quad (1.4)$$

где величина V_0 определяет глубину потенциала, a — параметр диффузности, характеризующий размытие края потенциальной ямы, а $\Delta(\rho, z)$ определяет расстояние (взятое с противоположным знаком внутри ядра) между точкой с координатами (z, ρ) и поверхностью ядра.

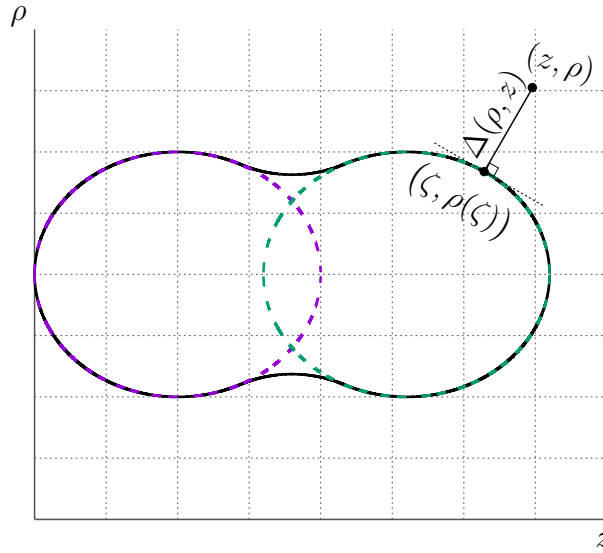


Рисунок 1.2 — Связь потенциала Вудса-Саксона с параметризацией поверхности ядра.

Таким образом, используя предложенную в разд. 1.1 параметризацию ядра, имея точку $(\zeta, \rho(\zeta))$ на поверхности ядра и точку (z, ρ) , например, вне ядра, получим (рис. 1.2)

$$\Delta(\rho, z) = \sqrt{(\rho - \rho(\zeta))^2 + (z - \zeta)^2}, \quad (1.5)$$

что непосредственно связывает функцию (1.1) с потенциалом Вудса-Саксона.

Спин-орбитальное взаимодействие описывается дополнительным слагаемым к потенциалу (1.4) вида

$$V_{\text{is}} = -\lambda \left(\frac{1}{2mc}\right)^2 (\nabla V \times \hat{\mathbf{p}}) \cdot \hat{\mathbf{s}}, \quad (1.6)$$

где $\lambda = 35$ — безразмерная константа взаимодействия, m — масса нуклона, c — скорость света. Операторы $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$, $\hat{\mathbf{s}} = \frac{\sigma}{2}$ (σ_i — матрицы Паули).

Уравнение Шрёдингера в таком потенциале

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\rho, z) + V_{\text{ls}}(\rho, z) \right] \Psi(\rho, z, \varphi) = E\Psi(\rho, z, \varphi) \quad (1.7)$$

не решается аналитически. Однако подходящий базис для разложения решения уравнения (1.7) может быть получен из собственных функций задачи с потенциалом двухцентрового осциллятора.

Двухцентрковой осциллятор

2.1 Симметричный потенциал

Гамильтониан двухцентрковой осциллятора с частотами $\omega_{(1,2)\rho}$ и $\omega_{(1,2)z}$ вдоль соответствующих осей в цилиндрической системе координат:

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{T} + V(\rho, z) + V(\hat{\mathbf{I}}_1, \hat{\mathbf{I}}_2) \equiv \hat{\mathcal{H}}_0 + V(\hat{\mathbf{I}}_1, \hat{\mathbf{I}}_2), \quad (2.1)$$

где сумма

$$V(\rho, z) + V(\hat{\mathbf{I}}_1, \hat{\mathbf{I}}_2) = \frac{1}{2}m \times \begin{cases} \omega_{1\rho}^2 \rho^2 + \omega_{1z}^2 (z - z_1)^2 + C\hat{\mathbf{I}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}} + D\hat{\mathbf{I}}_1^2, & z > 0 \\ \omega_{2\rho}^2 \rho^2 + \omega_{2z}^2 (z + z_2)^2 + C\hat{\mathbf{I}}_2 \cdot \hat{\mathbf{s}} + D\hat{\mathbf{I}}_2^2, & z < 0, \end{cases} \quad (2.2)$$

в которой $\hat{\mathbf{I}}_1$ и $\hat{\mathbf{I}}_2$ — операторы орбитальных моментов по отношению к двум соответствующим центрам z_1 и $(-z_2)$ на оси Oz , C и D — параметры, подбирающиеся из условия наилучшего описания перехода от одного сферического ядра к двум в процессе деформации.

Подобно [3], рассмотрим только $\hat{\mathbf{I}}$ -независимую часть (2.1), т.е. $\hat{\mathcal{H}}_0$, и опишем случай полностью симметричного осциллятора

$$\omega_{1\rho} = \omega_{2\rho} = \omega_{1z} = \omega_{2z} \equiv \omega. \quad (2.3)$$

Перепишем $\hat{\mathbf{I}}$ -независимую часть (2.2) в другом виде — зададим величину $V = \text{const}$.

$$\rho(z) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2V}{m\omega^2} - (z - z_1)^2}, & z > 0 \\ \sqrt{\frac{2V}{m\omega^2} - (z + z_2)^2}, & z < 0. \end{cases}$$

Из условия непрерывности $\rho(-0) = \rho(+0)$ и учитывая, что центры не должны совпадать, сразу установим, что единственным параметром, определяющим форму потенциала,

является положение центров относительно друг друга $z_1 = z_2 \equiv z_0 > 0$, и

$$\rho(z) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2V}{m\omega^2} - (z - z_0)^2}, & z > 0 \\ \sqrt{\frac{2V}{m\omega^2} - (z + z_0)^2}, & z < 0. \end{cases} \quad (2.4)$$

Условие постоянства объёма

$$\int_{z_{\text{lb}}}^0 \rho^2(z < 0) dz + \int_0^{z_{\text{rb}}} \rho^2(z > 0) dz = \frac{4}{3}R^3, \quad (2.5)$$

где

$$z_{\text{lb}} = -\frac{\sqrt{2V/m}}{\omega} - z_0 < 0, \quad z_{\text{rb}} = \frac{\sqrt{2V/m}}{\omega} + z_0 > 0, \quad R = r_0 A^{1/3},$$

только лишь выбором частоты ω не может быть удовлетворено всегда для произвольного значения V , поэтому наложим это условие только на эквипотенциальные поверхности, совпадающие с поверхностью ядра. Тогда, согласно [4, §4, п. 1],

$$V = \frac{m\omega_0^2 r_0^2}{2}, \quad \text{где } r_0 = 1,2 \text{ (фм) и } \hbar\omega_0 = 40A^{-1/3} \text{ (МэВ).}$$

Уравнение (2.5) преобразуется к виду

$$2 \left[\frac{\omega_0 r_0}{\omega} \right]^3 + 3z_0 \left[\frac{\omega_0 r_0}{\omega} \right]^2 - z_0^3 - 2R^3 = 0,$$

откуда получим зависимость частоты от параметра формы потенциала в виде

$$\omega = \omega_0 \frac{r_0}{r}, \quad r = r(z_0), \quad (2.6)$$

где r — решение уравнения

$$2r^3 + 3r^2 z_0 - z_0^3 - 2R^3 = 0.$$

2.2 Аналитическое решение

Тогда можно записать следующее выражение для потенциальной энергии:

$$\frac{2V(\rho, z)}{m\omega^2} = \begin{cases} \rho^2 + (z_0 - z)^2, & z > 0 \\ \rho^2 + (z_0 + z)^2, & z < 0 \end{cases} = \rho^2 + (z_0 - |z|)^2,$$

$$V(\rho, z) = \frac{m\omega^2\rho^2}{2} + \frac{m\omega^2(z_0 - |z|)^2}{2}. \quad (2.7)$$

Соответствующее уравнение Шрёдингера $\hat{\mathcal{H}}_0\Phi = E\Phi$ в цилиндрических координатах имеет вид:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2} (\rho^2 + z^2 - 2|z|z_0 + z_0^2) + \frac{2mE}{\hbar^2} \right) \Phi(\rho, z, \varphi) = 0. \quad (2.8)$$

Разделяя переменные

$$\Phi(\rho, z, \varphi) = \chi(\rho)\zeta(z)v(\varphi),$$

получим функции

$$v(\varphi) = \frac{\exp(in_\varphi\varphi)}{\sqrt{2\pi}}, \quad n_\varphi \in \mathbb{Z} \text{ — целое число}, \quad (2.9)$$

$$\chi(\rho) = C \exp\left(-\frac{m\omega\rho^2}{2\hbar}\right) \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{\frac{1}{2}(1+n_\rho)} \rho^{|n_\rho|} {}_1F_1\left(-n_\rho, 1+n_\rho, \frac{m\omega\rho^2}{\hbar}\right),$$

$$n_\rho \in \mathbb{N} \text{ — положительное целое число}, \quad (2.10)$$

${}_1F_1(a, b, c)$ — вырожденная гипергеометрическая функция¹,

C — нормировочная константа.

Общий вид функции $\zeta(z)$: для $0 < z < \infty$

$$\begin{aligned} \zeta(z > 0) = & \exp\left(-\frac{m\omega^2}{2\hbar}(z - z_0)^2\right) \times \\ & \times \left[C_1 \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}(z - z_0) {}_1F_1\left(\frac{1+n_z}{2}, \frac{3}{2}, \frac{m\omega}{\hbar}(z - z_0)^2\right) + \right. \\ & \left. + C_2 {}_1F_1\left(-\frac{n_z}{2}, \frac{1}{2}, \frac{m\omega}{\hbar}(z - z_0)^2\right) \right], \quad (2.11) \end{aligned}$$

¹Выражается через гипергеометрическую функцию как ${}_1F_1(a, c, z) = \lim_{b \rightarrow \infty} F(a, b; c; z/b)$ и является решением вырожденного гипергеометрического уравнения $z \frac{d^2 w}{dz^2} + (c - z) \frac{dw}{dz} - aw = 0$.

и для $-\infty < z < 0$

$$\begin{aligned} \zeta(z < 0) = \exp\left(-\frac{m\omega^2}{2\hbar}(z + z_0)^2\right) \times \\ \times \left[C'_1 \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}(z + z_0) {}_1F_1\left(\frac{1 - n_z}{2}, \frac{3}{2}, \frac{m\omega}{\hbar}(z + z_0)^2\right) + \right. \\ \left. + C'_2 {}_1F_1\left(-\frac{n_z}{2}, \frac{1}{2}, \frac{m\omega}{\hbar}(z + z_0)^2\right) \right], \end{aligned} \quad (2.12)$$

где C_1, C_2, C'_1, C'_2 — постоянные, а $n_z \in \mathbb{R}$ — не обязательно целое число.

Для того, чтобы выделить физически осмысленные решения (2.8), функция $\zeta(z)$ должна удовлетворять условиям непрерывности:

$$[\zeta(z > 0) = \zeta(z < 0)]_{z=0}, \quad (2.13)$$

$$\left[\frac{d\zeta(z < 0)}{dz} = \frac{d\zeta(z > 0)}{dz} \right]_{z=0}. \quad (2.14)$$

Также должно выполняться $\zeta(z \rightarrow \pm\infty) \rightarrow 0$, откуда получим

$$\frac{C_1}{2\Gamma\left(\frac{1-n_z}{2}\right)} + \frac{C_2}{\Gamma\left(-\frac{n_z}{2}\right)} = 0, \quad (2.15)$$

$$\frac{C'_1}{2\Gamma\left(\frac{1-n_z}{2}\right)} - \frac{C'_2}{\Gamma\left(-\frac{n_z}{2}\right)} = 0, \quad (2.16)$$

где $\Gamma(x)$ — гамма-функция. Эти уравнения являются уравнениями на собственные значения соответствующей задачи на $\zeta(z)$.

Для определения постоянных C_l, C'_l ($l = 1, 2$) необходимо к уравнениям (2.13), (2.14) добавить ещё два уравнения.

Заметим, что гамильтониан $\hat{\mathcal{H}}_0$ коммутирует с оператором чётности \hat{P} . Значит, они имеют общую систему собственных функций:

$$\hat{P}\zeta(z > 0) = \pm\zeta(z < 0). \quad (2.17)$$

Из явного вида функций $\zeta(z > 0)$ и $\zeta(z < 0)$ получим

$$\text{для положительной чётности } C_1 = -C'_1, \quad C_2 = C'_2, \quad (2.18)$$

или

$$\text{для отрицательной чётности } C_1 = C'_1, \quad C_2 = -C'_2. \quad (2.19)$$

Из этих уравнений следует, что уравнения (2.15) и (2.16) равносильны (для любой чётности $\zeta(z)$). Более того, одно из уравнений (2.13) и (2.14) будет выполнено тождественно (для определённой чётности).

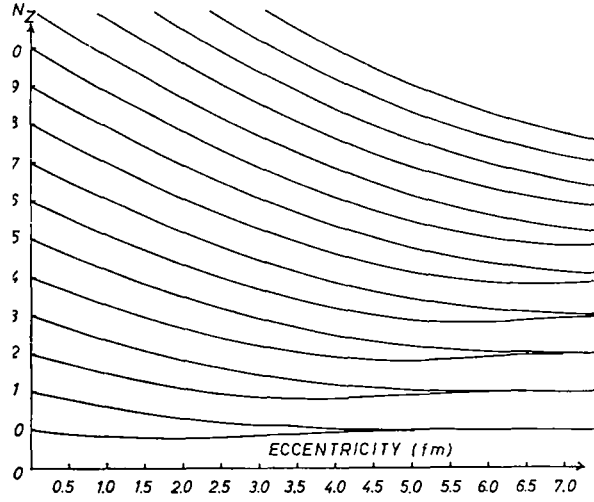


Рисунок 2.1 — Собственные значения n_z задачи на функцию $\zeta(z)$ как функции относительного положения центров осциллятора z_0 . Линии, выходящие из чётных значений $n_z(z_0 = 0)$, отвечают положительной чётности $\zeta(z)$; из нечётных — отрицательной. [*P. Holzer, U. Mosel, and W. Greiner*, — Nuclear Physics A, v. 138, iss. 2, 1969]

Как видно из рис. 2.1, вообще говоря, n_z — не целые числа.

Энергия же связана со всеми тремя квантовыми числами соотношением

$$E(z_0) = \hbar\omega(z_0)(n_z(z_0) + 2n_\rho + |n_\varphi| + 3/2) \quad (2.20)$$

и, естественно, является функцией z_0 .

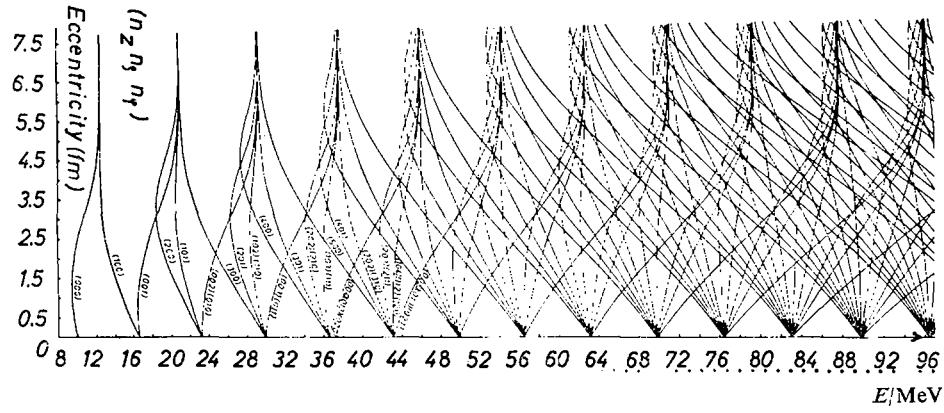


Рисунок 2.2 — Собственные значения уравнения Шрёдингера для волновой функции $\Phi(\rho, z, \varphi)$ как функция переменной z_0 . В квадратных скобках представлены квантовые числа $[n_z(z_0 = 0), n_\rho, n_\varphi]$. Энергии были вычислены для ядра с массовым числом $A = 235$, точка деления которого лежит в области $z_0 = 6,3$ фм. [*P. Holzer, U. Mosel, and W. Greiner, — Nuclear Physics A, v. 138, iss. 2, 1969*]

На рис. 2.2 видно, что для $z_0 = 0$ воспроизводятся энергетические уровни гармонического осциллятора.

С другой стороны, похожие энергетические уровни получаются и при больших значениях z_0 — в таком случае имеем два независимых гармонических осциллятора с соответствующими частотами $\omega(z_0)|_{A/2}$.

Заключение

В данной работе была исследована параметризация поверхности ядра при его деформации, которая непосредственно связана с потенциалом Вудса-Саксона, в котором находятся нуклоны в процессе деформации.

Поскольку уравнение Шрёдингера с наиболее приближенным к реальному потенциалом Вудса-Саксона не имеет аналитических решений, то предлагается способ его решения методом поиска собственных функций гамильтониана в виде разложения по собственным функциям гамильтониана двухцентрового гармонического осциллятора. Здесь был рассмотрен полностью симметричный случай такого осциллятора, не учитывающий орбитальное взаимодействие двух центров, и получены собственные функции и собственные значения соответствующей задачи. Примечательно, что при больших деформациях заметна энергетическая структура двух независимых осцилляторов. При отсутствии деформации же воспроизводятся энергетические уровни единичного гармонического осциллятора.

Дальнейшее развитие работы будет включать в себя численное решение уравнений сшивки на z -зависимую часть собственных функций задачи двухцентрового осциллятора, что позволит получить полностью аналитическое решение задачи с данным потенциалом. Затем будет рассмотрено решение задачи с диагонализированным потенциалом Вудса-Саксона на получение соответствующих одночастичных волновых функций нуклонов и их энергий в процессе деформации [5].

Приложения

А.1 Приложение 1

Левая часть выражения (1.3) имеет вид

$$\frac{b_1^2(2a_1 - z_1)(a_1 + z_1)^2}{3a_1^2} + (J_1 \cdot (1/d)^2 - 2J_3 \cdot |1/d| + J_2) + \frac{b_2^2(2a_2 - c_2 + z_2)(a_2 + c_2 - z_2)^2}{3a_2^2}, \quad (\text{A.1})$$

где

$$J_1 = z_2 - z_1,$$

$$J_3 = \frac{R_3^2}{2} \left[\arccos \frac{z_1 - c_3}{R_3} - \arccos \frac{z_2 - c_3}{R_3} \right] - \frac{1}{2} \left[(z_1 - c_3) \sqrt{R_3^2 - (z_1 - c_3)^2} - (z_2 - c_3) \sqrt{R_3^2 - (z_2 - c_3)^2} \right],$$

$$J_2 = R_3^2(z_2 - z_1) - \frac{(z_2 - c_3)^3 - (z_1 - c_3)^3}{3}.$$

Список литературы

- [1] M. Bender *et al.*, “Future of nuclear fission theory”, — *Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics*, v. 47, iss. 11, 113002, 2020.
- [2] M. Mirea, “Supersymmetric two-center shell model for spontaneous heavy-ion emission”, — *Phys. Rev. C*, v. 54, iss. 1, p. 302–314, 1996.
- [3] P. Holzer, U. Mosel, and W. Greiner, “Double-centre oscillator and its application to fission”, — *Nuclear Physics A*, v. 138, iss. 2, p. 241–252, 1969.
- [4] О. Бор и Б. Мотгельсон, *Структура атомного ядра. Том 1. Одночастичное движение*. — Москва: Мир, 1971.
- [5] M. Mirea, “Two Center Shell Model with Woods-Saxon Potentials”, — *Romanian Reports in Physics*, v. 59, iss. 2, p. 523–531, 2007.