

Ядерные реакции и деление ядер при низких и средних энергиях и проблема микроструктуры деформированных ядер

Исполнитель темы
студент группы Б19-102

Д. А. Ситьков

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

А. Л. Барабанов

НИЯУ «МИФИ»

2 мая 2023 г.

Деление атомных ядер

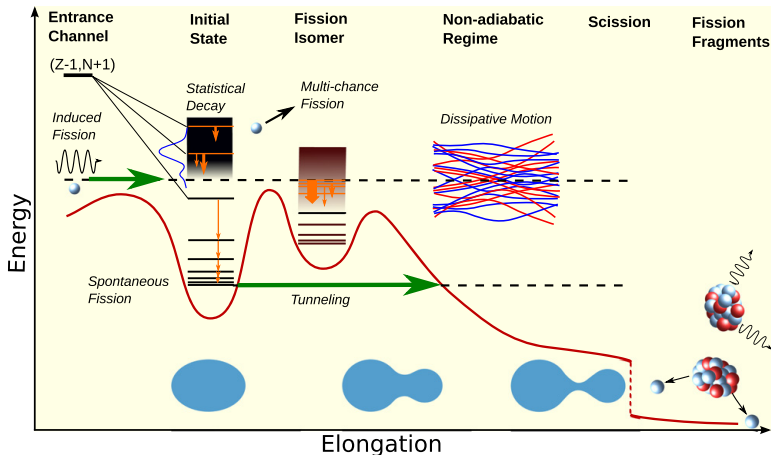


Рисунок 1 — Схематическое изображение процесса ядерного деления [Michael Bender et al, — J. Phys. G: Nucl. Part. Phys., v. 47, iss. 11, 113002, 2020].

Двухцентрковой симметричный осциллятор (1/4)

Потенциал

$$V(\rho, z) = \frac{m\omega^2\rho^2}{2} + \frac{m\omega^2(|z| - z_0)^2}{2} \quad (1)$$

описан в работе P. Holzer, U. Mosel, and W. Greiner,
«Double-centre oscillator and its application to fission», — Nuclear
Physics A, v. 138, iss. 2, 1969.

Двухцентрковой симметричный осциллятор (1/4)

Потенциал

$$V(\rho, z) = \frac{m\omega^2 \rho^2}{2} + \frac{m\omega^2 (|z| - z_0)^2}{2} \quad (1)$$

описан в работе P. Holzer, U. Mosel, and W. Greiner, «Double-centre oscillator and its application to fission», — Nuclear Physics A, v. 138, iss. 2, 1969.

Была решена задача без спин-орбитального взаимодействия

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\rho, z) \right) \phi(\rho, z, \varphi) = E_0 \cdot \phi(\rho, z, \varphi). \quad (2)$$

Двухцентрковой симметричный осциллятор (2/4)

Волновые функции получены разделением переменных

$$\phi_{n_\varphi n_\rho n_z}(\varphi, \rho, z) = v_{n_\varphi}(\varphi) \chi_{n_\varphi n_\rho}(\rho) \zeta_{n_z}(z), \quad (3)$$

Двухцентрковой симметричный осциллятор (2/4)

Волновые функции получены разделением переменных

$$\phi_{n_\varphi n_\rho n_z}(\varphi, \rho, z) = v_{n_\varphi}(\varphi) \chi_{n_\varphi n_\rho}(\rho) \zeta_{n_z}(z), \quad (3)$$

где

$$v_{n_\varphi}(\varphi) = \frac{\exp(in_\varphi\varphi)}{\sqrt{2\pi}}, \quad n_\varphi \in \mathbb{Z}, \quad (4a)$$

Двухцентрковой симметричный осциллятор (2/4)

Волновые функции получены разделением переменных

$$\phi_{n_\varphi n_\rho n_z}(\varphi, \rho, z) = v_{n_\varphi}(\varphi) \chi_{n_\varphi n_\rho}(\rho) \zeta_{n_z}(z), \quad (3)$$

где

$$v_{n_\varphi}(\varphi) = \frac{\exp(in_\varphi \varphi)}{\sqrt{2\pi}}, \quad n_\varphi \in \mathbb{Z}, \quad (4a)$$

$$\begin{aligned} \chi_{n_\varphi n_\rho}(\rho) = & \frac{\exp\left(-\frac{m\omega\rho^2}{2\hbar}\right) \rho^{|n_\varphi|}}{|n_\varphi|!} \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{\frac{|n_\varphi|+1}{2}} \sqrt{\frac{2(|n_\varphi| + n_\rho)!}{n_\rho!}} \times \\ & \times M\left(-n_\rho, |n_\varphi| + 1; \frac{m\omega\rho^2}{\hbar}\right), \quad n_\rho \in \mathbb{N}_0, \quad (4b) \end{aligned}$$

$$\zeta_{n_z=1,3,5,\dots}(z \geq 0) = C^{(-)} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}(z \mp z_0)^2\right) \times$$

$$\times \left[(z \mp z_0) \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} M\left(\frac{1-n_z}{2}, \frac{3}{2}; \frac{m\omega(z \mp z_0)^2}{\hbar}\right) \mp \right.$$

$$\left. \mp \frac{\Gamma(-\frac{n_z}{2})}{2\Gamma(\frac{1-n_z}{2})} M\left(-\frac{n_z}{2}, \frac{1}{2}; \frac{m\omega(z \mp z_0)^2}{\hbar}\right) \right], \quad (5a)$$

$$\zeta_{n_z=0,2,4,\dots}(z) = C^{(+)} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}(|z| - z_0)^2\right) \times$$

$$\times \left[M\left(-\frac{n_z}{2}, \frac{1}{2}; \frac{m\omega(|z| - z_0)^2}{\hbar}\right) - \frac{2\Gamma(\frac{1-n_z}{2})}{\Gamma(-\frac{n_z}{2})} (|z| - z_0) \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \times \right.$$

$$\left. \times M\left(\frac{1-n_z}{2}, \frac{3}{2}; \frac{m\omega(|z| - z_0)^2}{\hbar}\right) \right], \quad n_z(z_0) \in \mathbb{R}. \quad (5b)$$

Двухцентрковой симметричный осциллятор (3/4)

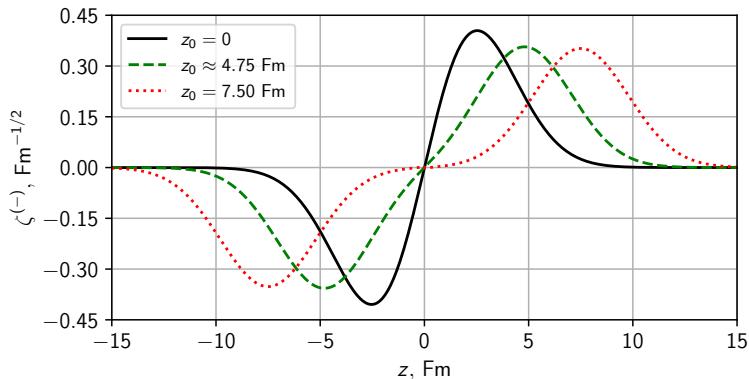


Рисунок 2 — Графики нечётной аксиальной функции $\zeta^{(-)}(z) \equiv \zeta_1(z)$ при зависимости $n_z(z_0)$, определяющейся квантовым числом $n_z(z_0 = 0) = 1$.

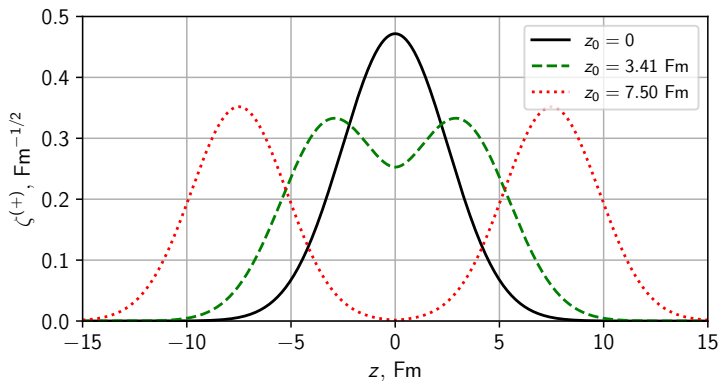


Рисунок 3 — Графики чётной аксиальной функции $\zeta^{(+)}(z) \equiv \zeta_0(z)$ при зависимости $n_z(z_0)$, определяющейся квантовым числом $n_z(z_0 = 0) = 0$.

Двухцентрковой симметричный осциллятор (4/4)

Получены энергетические уровни

$$E_{n_\varphi n_\rho n_z}^0(z_0) = \hbar\omega(z_0)(|n_\varphi| + 2n_\rho + n_z(z_0) + 3/2). \quad (6)$$

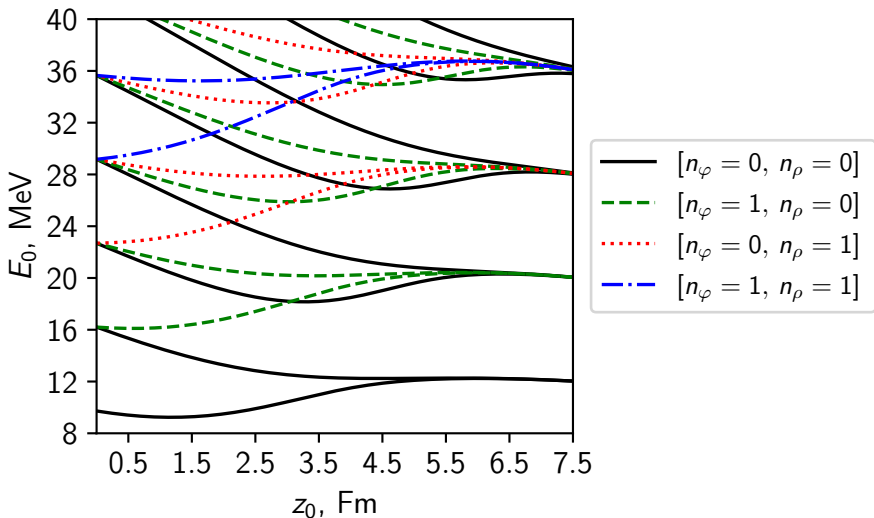


Рисунок 4 — Зависимости низших энергетических уровней от параметра растяжения z_0 для ядра с $A = 235$.

Спин-орбитальное слагаемое (1/2)

Введение ядерного спин-орбитального взаимодействия производится путём добавления к потенциалу $V(\rho, z)$ слагаемого

$$V_1(\hat{\ell}, \hat{s}) = -\kappa \hbar \omega \cdot 2\hat{\ell} \cdot \hat{s}, \quad (7)$$

описанного в работе D. Scharnweber, W. Greiner, and U. Mosel, «The two-center shell model», — Nuclear Physics A, v. 164, iss. 2, 1971.

Спин-орбитальное слагаемое (1/2)

Введение ядерного спин-орбитального взаимодействия производится путём добавления к потенциалу $V(\rho, z)$ слагаемого

$$V_1(\hat{\ell}, \hat{s}) = -\kappa \hbar \omega \cdot 2\hat{\ell} \cdot \hat{s}, \quad (7)$$

описанного в работе D. Scharnweber, W. Greiner, and U. Mosel, «The two-center shell model», — Nuclear Physics A, v. 164, iss. 2, 1971.

Оператор орбитального момента для нуклона, помещённого в поле V , имеет вид

$$\hat{L} = \nabla V \times \hat{p}, \quad \hat{L} \equiv \hbar m \omega^2 \hat{\ell}. \quad (8)$$

Спин-орбитальное слагаемое (2/2)

В цилиндрических координатах оператор \hat{L} имеет компоненты

$$\hat{L}_{\pm} = \mp \hbar e^{\pm i\varphi} \left(\frac{\partial V}{\partial \rho} \frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial V}{\partial z} \frac{\partial}{\partial \rho} \mp i \frac{\partial V}{\partial z} \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \quad (9a)$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{1}{\rho} \frac{\partial V}{\partial \rho} \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (9b)$$

Низшие энергетические уровни (1/4)

Векторы состояний со спиновой частью

$$\Phi_{n_\varphi n_\rho n_z}(\varphi, \rho, z, s) = \phi_{n_\varphi n_\rho n_z}(\varphi, \rho, z) \sigma(s) \iff |n_\varphi n_\rho n_z s\rangle. \quad (10)$$

Низшие энергетические уровни (1/4)

Векторы состояний со спиновой частью

$$\Phi_{n_\varphi n_\rho n_z}(\varphi, \rho, z, s) = \phi_{n_\varphi n_\rho n_z}(\varphi, \rho, z) \sigma(s) \iff |n_\varphi n_\rho n_z s\rangle. \quad (10)$$

Гамильтониан системы имеет вид

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + V_1(\hat{\ell}, \hat{s}), \quad (11)$$

где $\hat{\mathcal{H}}_0$ — гамильтониан невозмущённого двухцентрового осциллятора.

Низшие энергетические уровни (1/4)

Векторы состояний со спиновой частью

$$\Phi_{n_\varphi n_\rho n_z}(\varphi, \rho, z, s) = \phi_{n_\varphi n_\rho n_z}(\varphi, \rho, z) \sigma(s) \iff |n_\varphi n_\rho n_z s\rangle. \quad (10)$$

Гамильтониан системы имеет вид

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + V_1(\hat{\ell}, \hat{s}), \quad (11)$$

где $\hat{\mathcal{H}}_0$ — гамильтониан невозмущённого двухцентрового осциллятора.

Так, его матричные элементы

$$\begin{aligned} \langle n'_\varphi n'_\rho n'_z s' | \hat{\mathcal{H}} | n_\varphi n_\rho n_z s \rangle &= E_0(z_0) \delta_{n'_\varphi, n_\varphi} \delta_{n'_\rho, n_\rho} \delta_{n'_z, n_z} \delta_{s', s} - \kappa \hbar \omega(z_0) \times \\ &\times \left(\langle n'_\varphi n'_\rho n'_z | \ell_+ | n_\varphi n_\rho n_z \rangle \delta_{s', s-1} + \langle n'_\varphi n'_\rho n'_z | \ell_- | n_\varphi n_\rho n_z \rangle \delta_{s', s+1} + \right. \\ &\left. + 2sn_\varphi \delta_{n'_\varphi, n_\varphi} \delta_{n'_\rho, n_\rho} \delta_{n'_z, n_z} \delta_{s', s} \right). \quad (12) \end{aligned}$$

Низшие энергетические уровни (2/4)

Были рассмотрены первые вектора состояний: $|000 \pm 1/2\rangle$, $|001 \pm 1/2\rangle$, $|100 \pm 1/2\rangle$, $|101 \pm 1/2\rangle$ и получены ненулевые матричные элементы

$$\langle 000 -1/2 | \hat{\mathcal{H}} | 000 -1/2 \rangle = E_{000}^0, \quad (13a)$$

$$\langle 000 +1/2 | \hat{\mathcal{H}} | 000 +1/2 \rangle = E_{000}^0, \quad (13b)$$

$$\langle 101 -1/2 | \hat{\mathcal{H}} | 000 +1/2 \rangle = +\chi \hbar \omega \langle \zeta_1 | \hat{z}_1 | \zeta_0 \rangle, \quad (13c)$$

Низшие энергетические уровни (2/4)

Были рассмотрены первые вектора состояний: $|000 \pm 1/2\rangle$, $|001 \pm 1/2\rangle$, $|100 \pm 1/2\rangle$, $|101 \pm 1/2\rangle$ и получены ненулевые матричные элементы

$$\langle 000 -1/2 | \hat{\mathcal{H}} | 000 -1/2 \rangle = E_{000}^0, \quad (13a)$$

$$\langle 000 +1/2 | \hat{\mathcal{H}} | 000 +1/2 \rangle = E_{000}^0, \quad (13b)$$

$$\langle 101 -1/2 | \hat{\mathcal{H}} | 000 +1/2 \rangle = +\chi \hbar \omega \langle \zeta_1 | \mathfrak{J}_1 | \zeta_0 \rangle, \quad (13c)$$

$$\langle 001 -1/2 | \hat{\mathcal{H}} | 001 -1/2 \rangle = E_{001}^0, \quad (14a)$$

$$\langle 001 +1/2 | \hat{\mathcal{H}} | 001 +1/2 \rangle = E_{001}^0, \quad (14b)$$

$$\langle 100 -1/2 | \hat{\mathcal{H}} | 001 +1/2 \rangle = +\chi \hbar \omega \langle \zeta_0 | \mathfrak{J}_1 | \zeta_1 \rangle, \quad (14c)$$

$$\langle 100 -1/2 | \hat{\mathcal{H}} | 100 -1/2 \rangle = E_{100}^0 + \varkappa \hbar \omega, \quad (15a)$$

$$\langle 001 +1/2 | \hat{\mathcal{H}} | 100 -1/2 \rangle = -\varkappa \hbar \omega \langle \zeta_0 | \mathfrak{z}_1 | \zeta_1 \rangle, \quad (15b)$$

$$\langle 100 +1/2 | \hat{\mathcal{H}} | 100 +1/2 \rangle = E_{100}^0 - \varkappa \hbar \omega, \quad (15c)$$

$$\langle 100 -1/2 | \hat{\mathcal{H}} | 100 -1/2 \rangle = E_{100}^0 + \varkappa \hbar \omega, \quad (15a)$$

$$\langle 001 +1/2 | \hat{\mathcal{H}} | 100 -1/2 \rangle = -\varkappa \hbar \omega \langle \zeta_0 | \mathfrak{z}_1 | \zeta_1 \rangle, \quad (15b)$$

$$\langle 100 +1/2 | \hat{\mathcal{H}} | 100 +1/2 \rangle = E_{100}^0 - \varkappa \hbar \omega, \quad (15c)$$

$$\langle 101 -1/2 | \hat{\mathcal{H}} | 101 -1/2 \rangle = E_{101}^0 + \varkappa \hbar \omega, \quad (16a)$$

$$\langle 000 +1/2 | \hat{\mathcal{H}} | 101 -1/2 \rangle = -\varkappa \hbar \omega \langle \zeta_1 | \mathfrak{z}_1 | \zeta_0 \rangle, \quad (16b)$$

$$\langle 101 +1/2 | \hat{\mathcal{H}} | 101 +1/2 \rangle = E_{101}^0 - \varkappa \hbar \omega, \quad (16c)$$

где $E_{n_\varphi n_\rho n_z}^0 = E_{n_\varphi n_\rho n_z}^0(z_0)$ — энергия соответствующего невозмущённого уровня, оператор $\mathfrak{z}_1 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \left(\frac{m\omega}{\hbar} z + \frac{\partial}{\partial z} \right)$, константа $\varkappa = 0.05$, $\zeta_{n_z}(z)$ — аксиальная часть функций $\Phi_{n_\varphi n_\rho n_z}(\varphi, \rho, z, s)$.

Низшие энергетические уровни (3/4)

С их помощью были получены новые энергетические уровни системы:

$$E_{1,2}^{(2)} = E_{000}^0, \quad (17)$$

Низшие энергетические уровни (3/4)

С их помощью были получены новые энергетические уровни системы:

$$E_{1,2}^{(2)} = E_{000}^0, \quad (17)$$

$$E_1^{(4)} = E_{001}^0, \quad (18a)$$

$$E_2^{(4)} = E_{100}^0 - \varkappa \hbar \omega, \quad (18b)$$

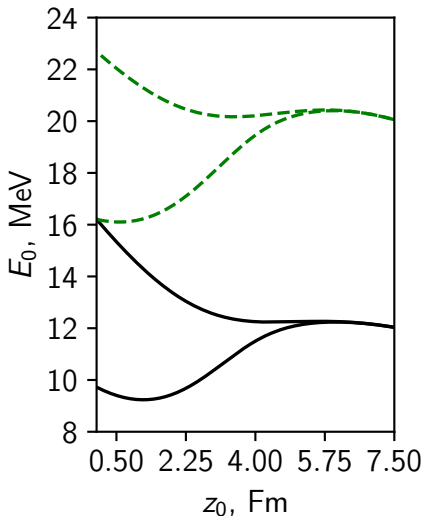
$$E_{3,4}^{(4)} \approx \frac{E_{100}^0 + E_{001}^0 + \varkappa \hbar \omega}{2} \pm \frac{\sqrt{(E_{100}^0 - E_{001}^0)^2 + 2\varkappa \hbar \omega \cdot (E_{100}^0 - E_{001}^0)}}{2}. \quad (18c)$$

Низшие энергетические уровни (4/4)

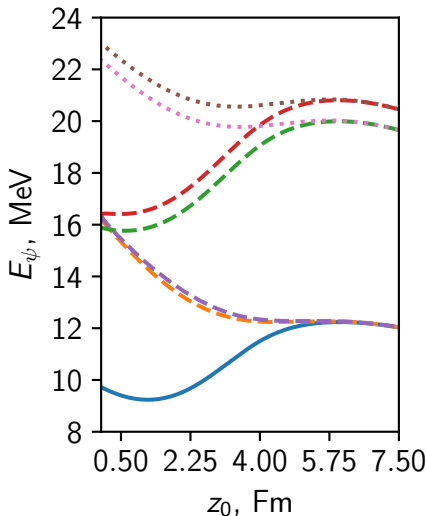
При рассмотрении ограниченного количества волновых функций получим лишь оценочные оставшиеся энергетические уровни

$$E_1^{(8)} \sim E_{101}^0 + \kappa \hbar \omega, \quad (19a)$$

$$E_2^{(8)} \sim E_{101}^0 - \kappa \hbar \omega. \quad (19b)$$



(a) $V_1(\hat{\ell}, \hat{s}) = 0$



(b) $V_1(\hat{\ell}, \hat{s}) \neq 0$

Рисунок 5 — Сравнение энергетических уровней.

Расчёты по TALYS

Комплекс TALYS-1.9 является хорошей основой для получения надёжных оценок сечений: с разумной точностью как экспериментальные данные, так и существующие оценки воспроизводятся расчётами по TALYS с определённым набором параметров.

Расчёты по TALYS

Комплекс TALYS-1.9 является хорошей основой для получения надёжных оценок сечений: с разумной точностью как экспериментальные данные, так и существующие оценки воспроизводятся расчётами по TALYS с определённым набором параметров.

Для реакций

- $^{91}\text{Zr}(n, p)^{91g/m}\text{Y}$;
- $^{91}\text{Zr}(n, n+\alpha)^{87g/m}\text{Sr}$;
- $^{115}\text{In}(n, 2n)^{114g/m}\text{In}$;
- $^{115}\text{In}(n, n')^{115g/m}\text{In}$

были произведены расчёты для проверки «разумной точности» комплекса.

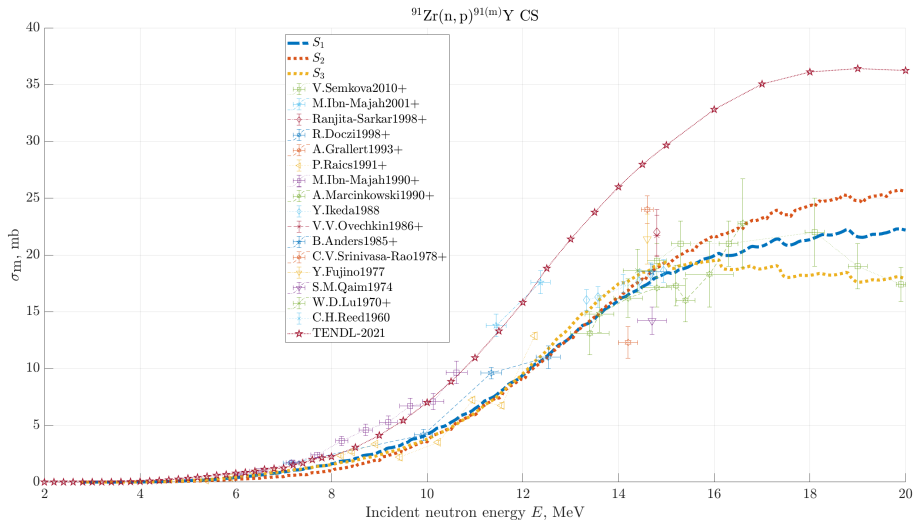


Рисунок 6 — Разброс сечений, вычисленных по TALYS-1.9, для разных моделей плотности уровней возбуждённых атомных ядер для реакции $^{91}\text{Zr}(n, p)^{91\text{m}}\text{Y}$.

$^{91}\text{Zr}(n, p)^{91\text{m}}\text{Y}$ CS

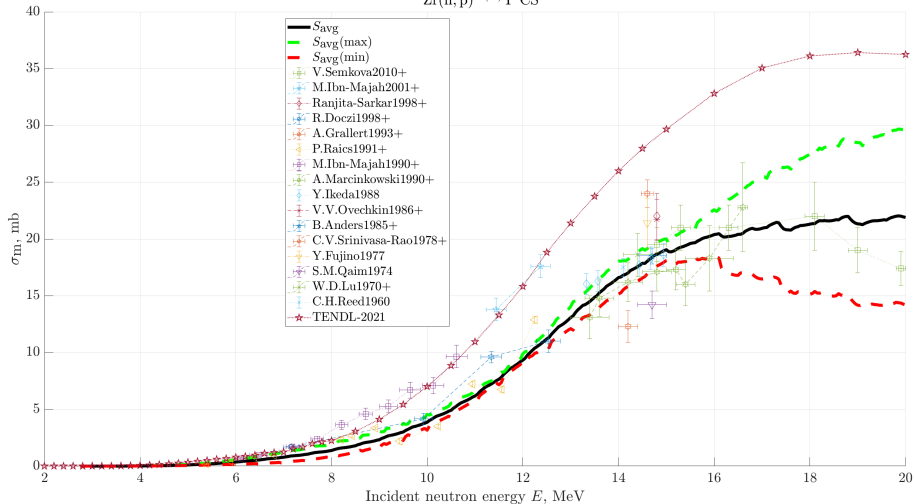


Рисунок 7 — Усреднение сечений, вычисленных по TALYS-1.9, для реакции $^{91}\text{Zr}(n, p)^{91\text{m}}\text{Y}$.

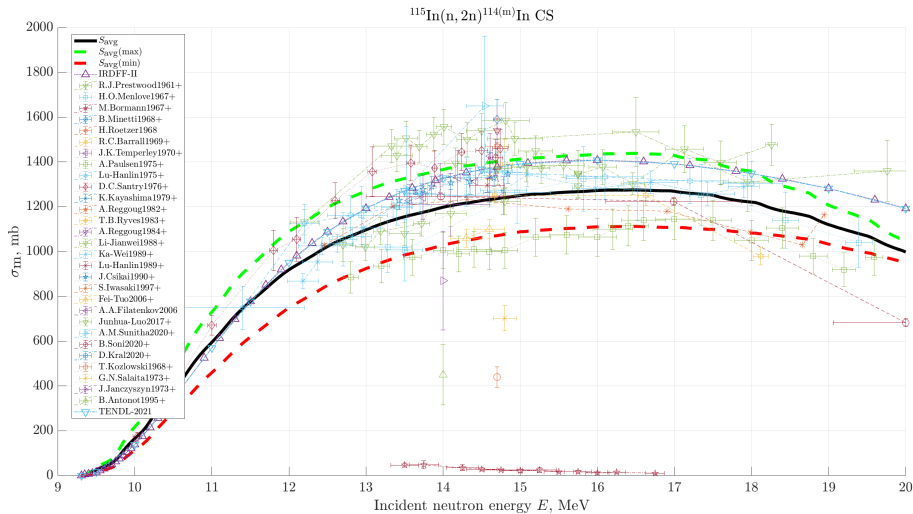


Рисунок 8 — Усреднение сечений, вычисленных по TALYS-1.9, для реакции $^{115}\text{In}(n, 2n)^{114(m)}\text{In}$.

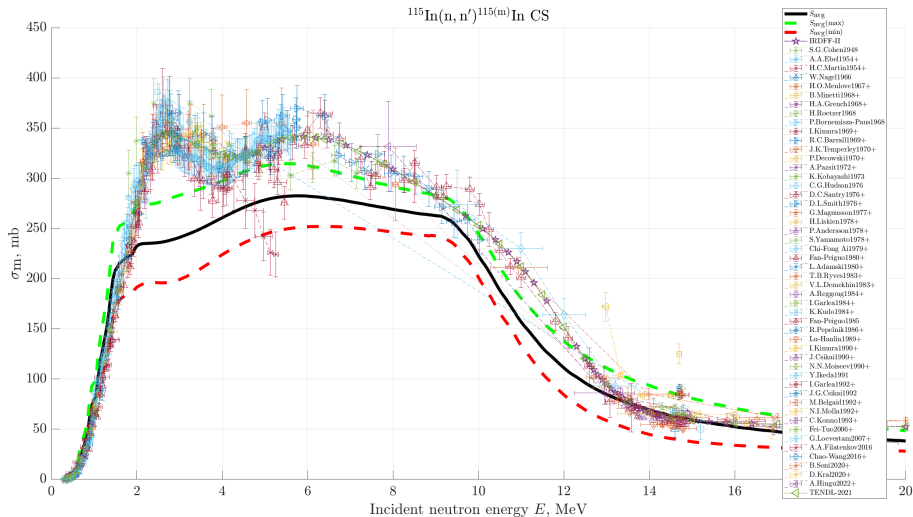


Рисунок 9 — Усреднение сечений, вычисленных по TALYS-1.9, для реакции $^{115}\text{In}(n, n')^{115\text{m}}\text{In}$.

Заключение (1/2)

В ходе проделанной работы

- введено спин-орбитальное взаимодействие в модели двухцентрового симметричного осциллятора → получены новые энергетические уровни на ограниченном количестве волновых функций;

Заключение (1/2)

В ходе проделанной работы

- введено спин-орбитальное взаимодействие в модели двухцентрового симметричного осциллятора → получены новые энергетические уровни на ограниченном количестве волновых функций;
- установлена возможность использования программного комплекса TALYS-1.9 для получения оценок для сечений реакций, протекающих с образованием ядер в изомерных (долгоживущих) состояниях → при использовании дополнительных параметров в ряде случаев комплекс можно использовать как предсказательный инструмент.

Заключение (2/2)

В дальнейшем планируется

- нахождение волновых функций и энергий одночастичных состояний в двухцентровой модели ядра (в частности, для описания деления ядер);

Заключение (2/2)

В дальнейшем планируется

- нахождение волновых функций и энергий одночастичных состояний в двухцентровой модели ядра (в частности, для описания деления ядер);
- изучение возможностей программного комплекса TALYS-1.9 по моделированию ядерных реакций.