

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, доц.

А. Л. Барабанов

НИЯУ «МИФИ»

28 июня 2023 г.

Деление атомных ядер

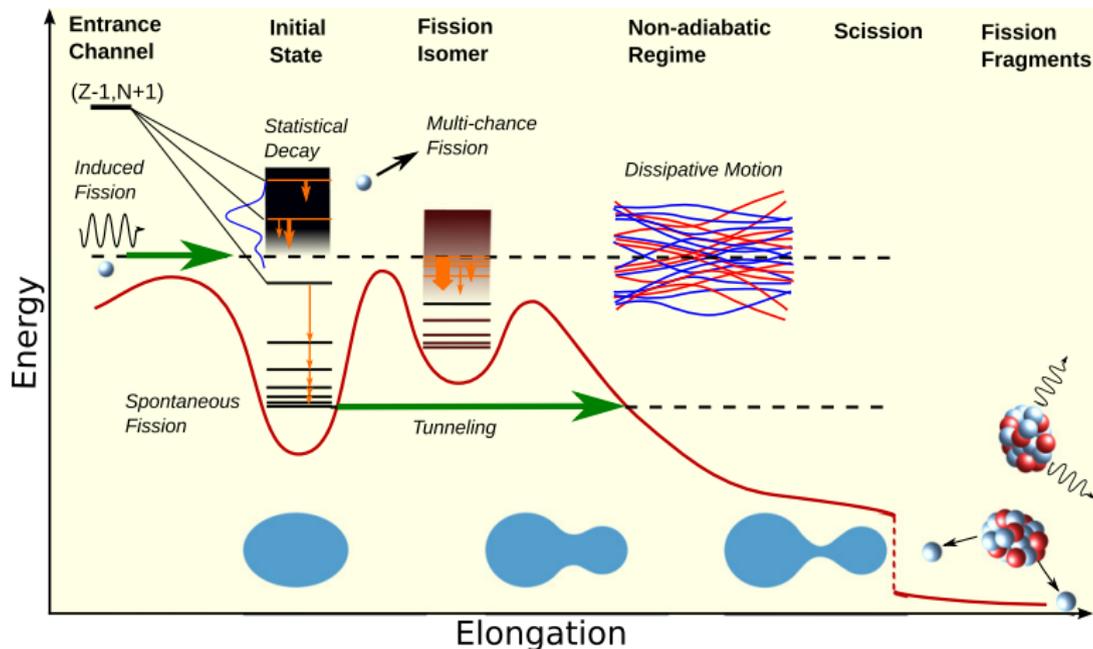


Рисунок 1 — Схематическое изображение процесса ядерного деления [М. Bender et al // Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics. — 2020. — v. 47, iss. 11, 113002].

Деформированное ядро

Вариант параметризации поверхности ядра, использующийся, в частности, в работе Mirea M. // Phys. Rev. C. — 1996. — v. 54, iss. 1. — p. 302:

$$\rho_0(z) = \begin{cases} b_1 \sqrt{1 - \left(\frac{z}{a_1}\right)^2}, & z \leq z_1, \\ -\operatorname{sgn}(d) \sqrt{R_3^2 - (z - c_3)^2} + 1/d, & z_1 < z < z_2, \\ b_2 \sqrt{1 - \left(\frac{z - c_2}{a_2}\right)^2}, & z \geq z_2. \end{cases} \quad (1)$$

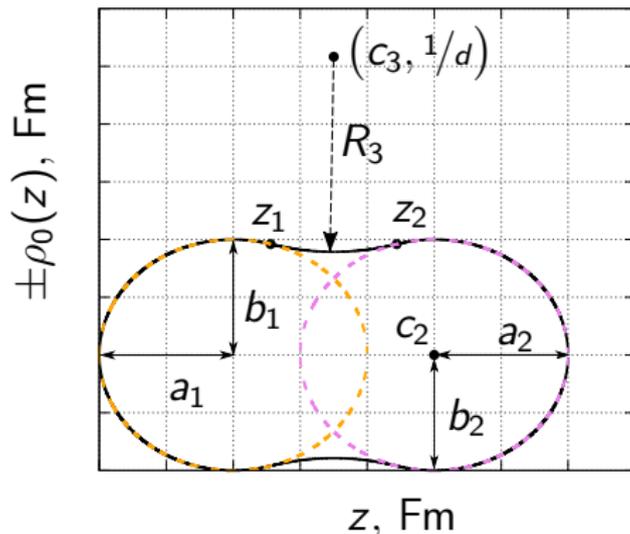


Рисунок 2 — Параметризация поверхности ядра.

Всего в задаче 10 параметров: a_1 , b_1 , a_2 , b_2 , z_1 , z_2 , c_2 , c_3 , R_3 и d .

Симметричные сферические осколки: $a_{1,2} = b_{1,2} = 1$ Fm.

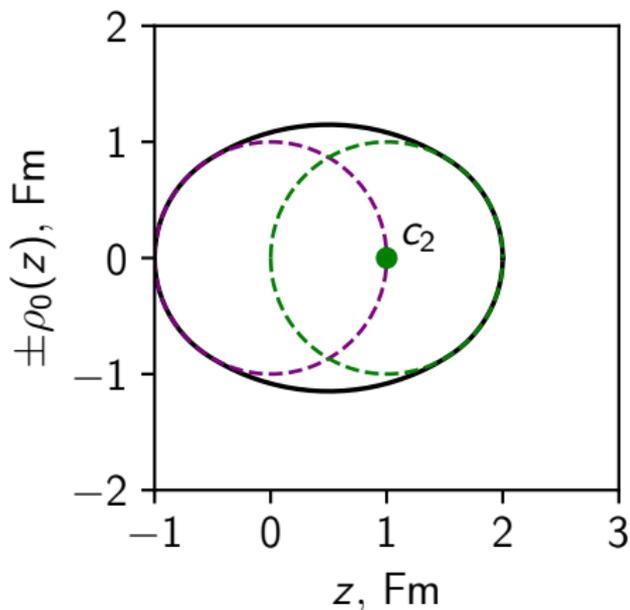


Рисунок 3 — Параметр растяжения $c_2 = 1,0$ Fm.

Симметричные сферические осколки: $a_{1,2} = b_{1,2} = 1$ Fm.

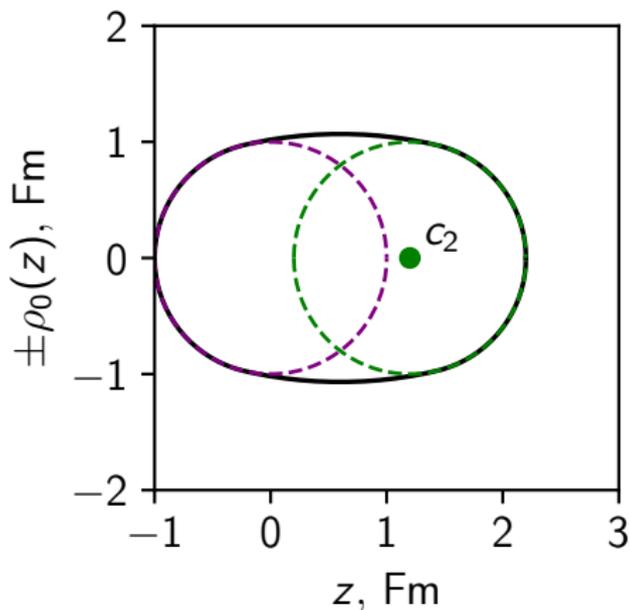


Рисунок 4 — Параметр растяжения $c_2 = 1,2$ Fm.

Симметричные сферические осколки: $a_{1,2} = b_{1,2} = 1$ Fm.

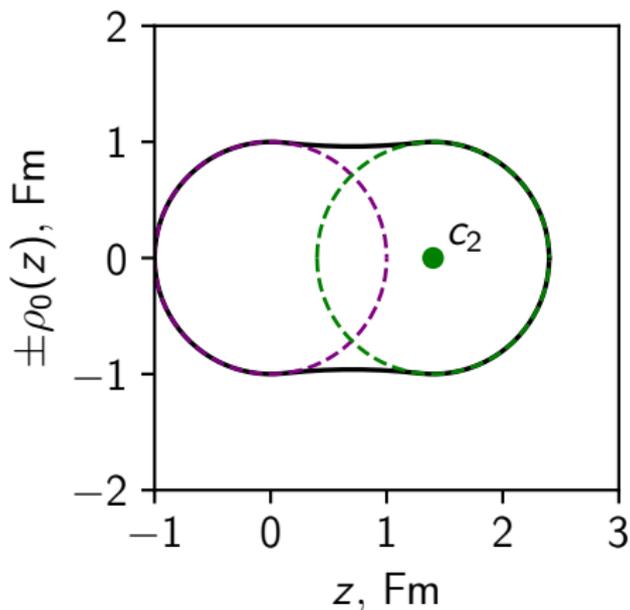


Рисунок 5 — Параметр растяжения $c_2 = 1,4$ Fm.

Симметричные сферические осколки: $a_{1,2} = b_{1,2} = 1$ Fm.

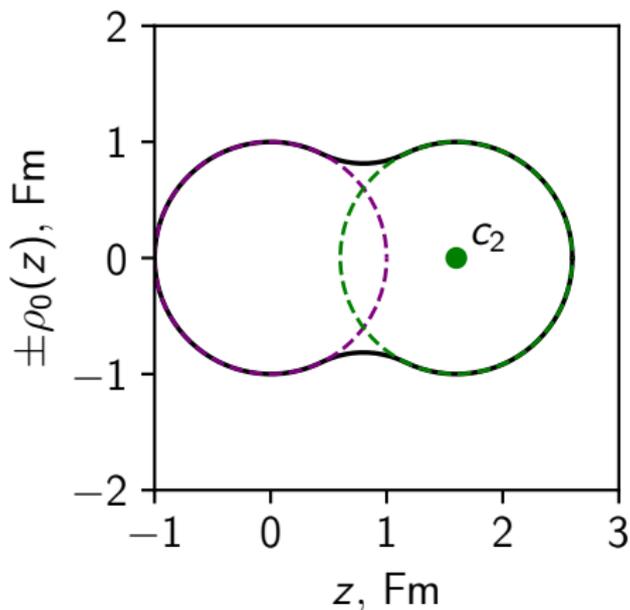


Рисунок 6 — Параметр растяжения $c_2 = 1,6$ Fm.

Симметричные сферические осколки: $a_{1,2} = b_{1,2} = 1$ Fm.

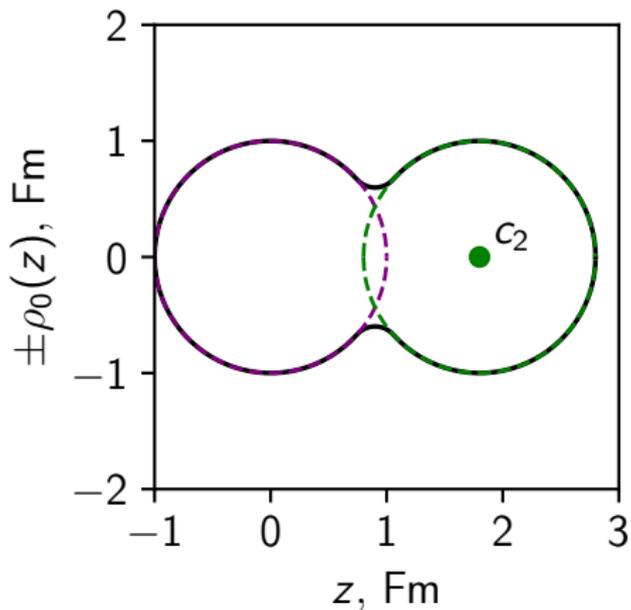


Рисунок 7 — Параметр растяжения $c_2 = 1,8$ Fm.

Симметричные сферические осколки: $a_{1,2} = b_{1,2} = 1$ Fm.

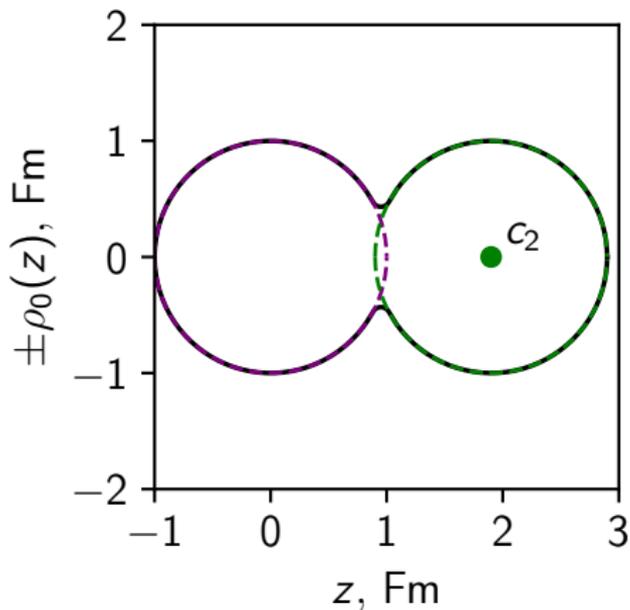


Рисунок 8 — Параметр растяжения $c_2 = 1,9$ Fm.

Потенциал Вудса-Саксона

В сферически симметричном ядре радиуса R нуклоны находятся в потенциале

$$V_{\text{WS}}^0(\rho) = -\frac{V_0}{1 + \exp\left(\frac{\rho - R}{a}\right)}, \quad (2)$$

где V_0 — глубина потенциала, a — параметр диффузности.

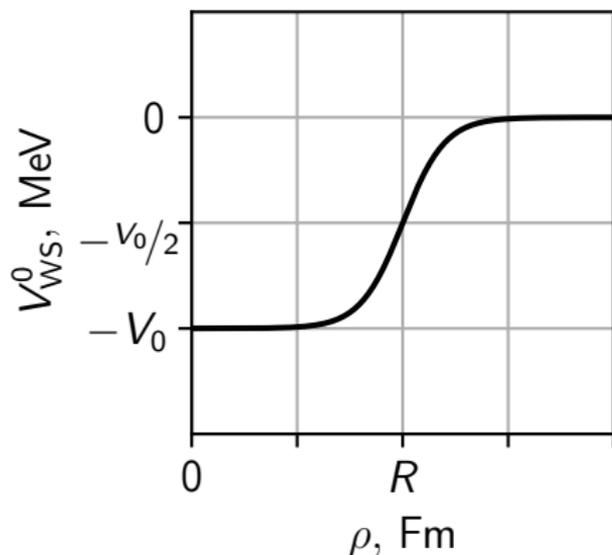


Рисунок 9 — Сферически симметричный потенциал Вудса-Саксона.

Потенциал в деформированном ядре:

$$V_{WS}(\rho) = -\frac{V_0}{1 + \exp\left(\frac{\Delta(\rho, z)}{a}\right)}, \quad (3)$$

где $\Delta(\rho, z)$ — расстояние от поверхности ядра до точки (z, ρ) .

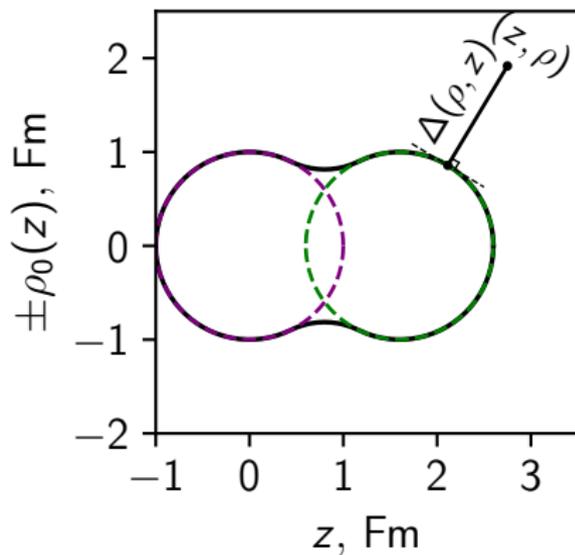


Рисунок 10 — Зависимость потенциала от формы ядра.

Двухцентровый симметричный осциллятор

Потенциал

$$V(\rho, z) = \frac{m\omega^2 \rho^2}{2} + \frac{m\omega^2 (|z| - z_0)^2}{2}, \quad \omega = \omega(z_0) \quad (4)$$

описан в работе Holzer P., Mosel U., Greiner W. // Nuclear Physics A. — 1969. — v. 138, iss. 2. — p. 241.

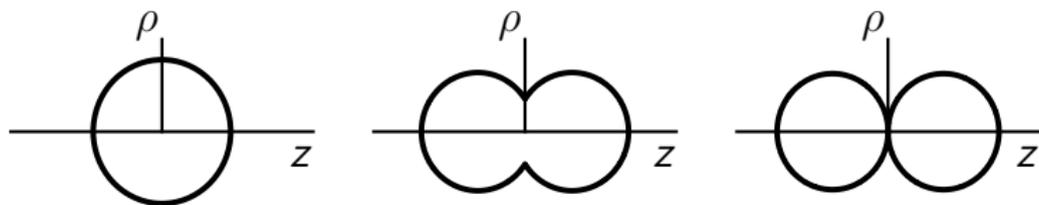


Рисунок 11 — Эквипотенциальные поверхности симметричного двухцентрового осциллятора при его деформации.

Задача Шрёдингера

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\rho, z)\right)\phi(\rho, z, \varphi) = E_0 \cdot \phi(\rho, z, \varphi) \quad (5)$$

была решена разделением переменных:

$$\phi_{n_\varphi n_\rho n_z}(\varphi, \rho, z) = v_{n_\varphi}(\varphi)\chi_{n_\varphi n_\rho}(\rho)\zeta_{n_z}(z), \quad (6)$$

где

$$v_{n_\varphi}(\varphi) = \frac{\exp(in_\varphi\varphi)}{\sqrt{2\pi}}, \quad (7a)$$

$$\begin{aligned} \chi_{n_\varphi n_\rho}(\rho) = & \frac{\exp\left(-\frac{m\omega\rho^2}{2\hbar}\right)\rho^{|n_\varphi|}}{|n_\varphi|!} \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{\frac{|n_\varphi|+1}{2}} \times \\ & \times M\left(-n_\rho, |n_\varphi| + 1; \frac{m\omega\rho^2}{\hbar}\right) \sqrt{\frac{2(|n_\varphi| + n_\rho)!}{n_\rho!}}, \end{aligned} \quad (7b)$$

$$\begin{aligned}
 \zeta_{n_z=1,3,5,\dots}(z \geq 0) &= C^{(-)} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}(z \mp z_0)^2\right) \times \\
 &\times \left[(z \mp z_0) \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} M\left(\frac{1-n_z}{2}, \frac{3}{2}; \frac{m\omega(z \mp z_0)^2}{\hbar}\right) \mp \right. \\
 &\quad \left. \mp \frac{\Gamma(-\frac{n_z}{2})}{2\Gamma(\frac{1-n_z}{2})} M\left(-\frac{n_z}{2}, \frac{1}{2}; \frac{m\omega(z \mp z_0)^2}{\hbar}\right) \right], \quad (8a)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \zeta_{n_z=0,2,4,\dots}(z) &= C^{(+)} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}(|z| - z_0)^2\right) \times \\
 &\times \left[M\left(-\frac{n_z}{2}, \frac{1}{2}; \frac{m\omega(|z| - z_0)^2}{\hbar}\right) - \frac{2\Gamma(\frac{1-n_z}{2})}{\Gamma(-\frac{n_z}{2})} \times \right. \\
 &\quad \left. \times (|z| - z_0) \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} M\left(\frac{1-n_z}{2}, \frac{3}{2}; \frac{m\omega(|z| - z_0)^2}{\hbar}\right) \right]. \quad (8b)
 \end{aligned}$$

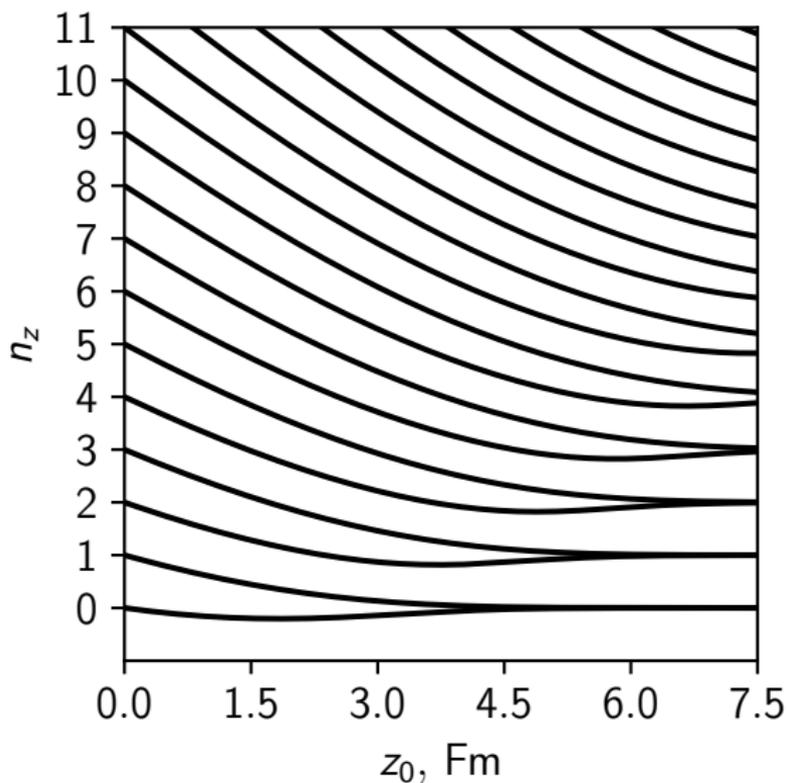


Рисунок 12 — Зависимость аксиального квантового числа n_z от относительного положения z_0 центров осциллятора.

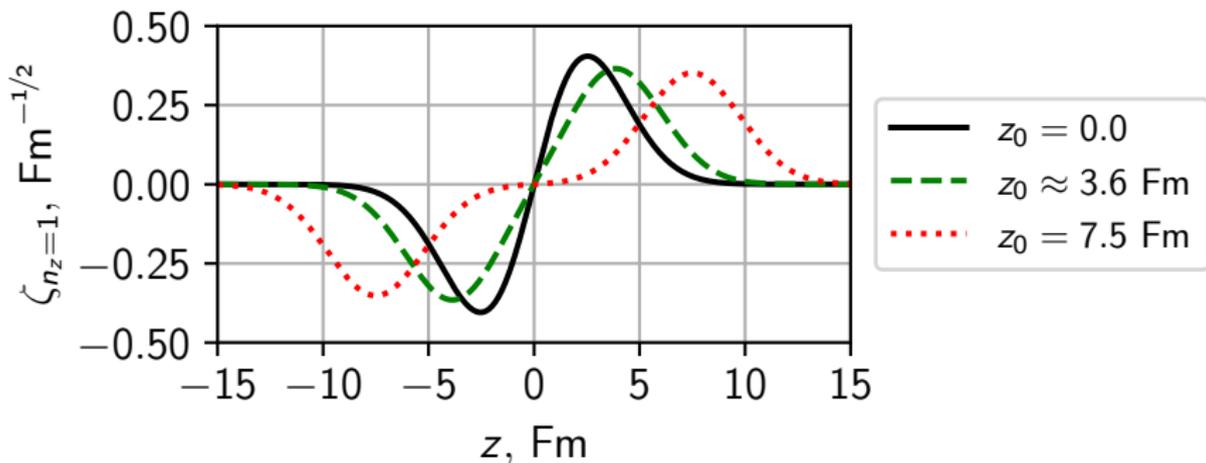


Рисунок 13 — Графики нечётной аксиальной функции $\zeta_1(z)$ при зависимости $n_z(z_0)$, определяющейся квантовым числом $n_z(z_0 = 0) = 1$.

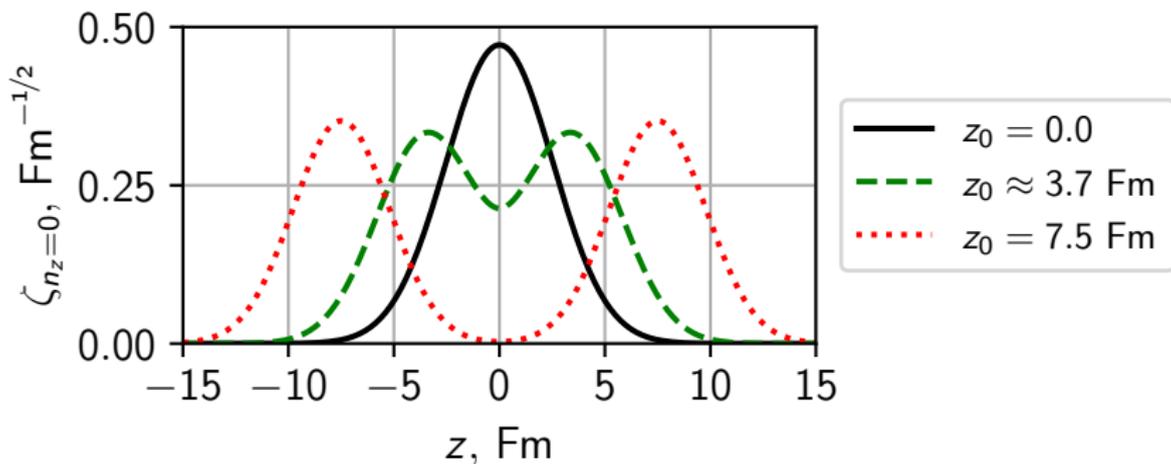


Рисунок 14 — Графики чётной аксиальной функции $\zeta_0(z)$ при зависимости $n_z(z_0)$, определяющейся квантовым числом $n_z(z_0 = 0) = 0$.

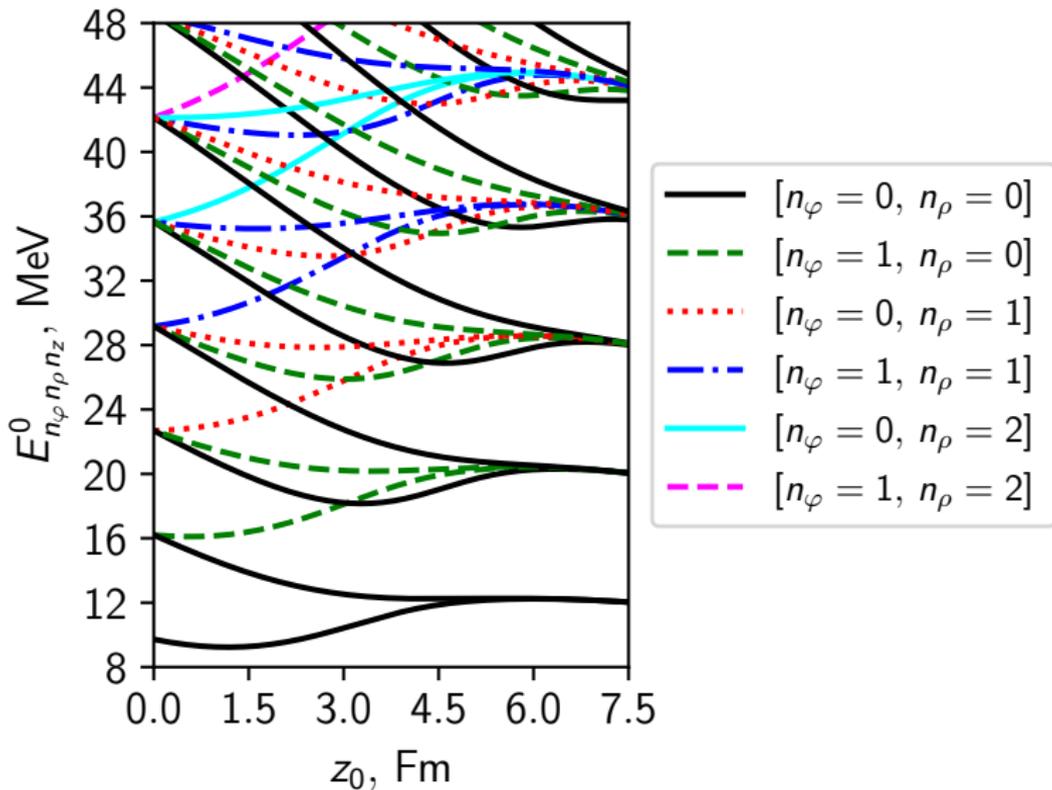


Рисунок 15 — Энергии $E_{n_{\varphi} n_{\rho} n_z}^0(z_0) = \hbar\omega(z_0)(|n_{\varphi}| + 2n_{\rho} + n_z(z_0) + 3/2)$ низших энергетических уровней для ядра с $A = 235$.

Спин-орбитальное слагаемое

Спин-орбитальное взаимодействие

$$V_1(\hat{\ell}, \hat{s}) = -\kappa\hbar\omega \cdot 2\hat{\ell} \cdot \hat{s}, \quad (9)$$

введено в работе Scharnweber D., Greiner W., Mosel U. // Nuclear Physics A. — 1971. — v. 164, iss. 2. — p. 257.

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

$$\hat{L} = \nabla V \times \hat{p}, \quad \hat{L} \equiv \hbar m\omega^2 \hat{\ell}. \quad (10)$$

В цилиндрических координатах оператор \hat{L} имеет компоненты

$$\hat{L}_{\pm} = \mp \hbar e^{\pm i\varphi} \left(\frac{\partial V}{\partial \rho} \frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial V}{\partial z} \frac{\partial}{\partial \rho} \mp i \frac{\partial V}{\partial z} \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \quad (11a)$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{1}{\rho} \frac{\partial V}{\partial \rho} \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (116)$$

Низшие энергетические уровни

Гамильтониан системы:

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + V_1(\hat{\ell}, \hat{s}), \quad (12)$$

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

Собственные функции оператора $\hat{\mathcal{H}}_0$:

$$\Phi_{n_\varphi n_\rho n_z}(\varphi, \rho, z, s) = \phi_{n_\varphi n_\rho n_z}(\varphi, \rho, z) \sigma(s) \equiv \langle \mathbf{r} \sigma | n_\varphi n_\rho n_z s \rangle. \quad (13)$$

Были рассмотрены низшие энергетические состояния и получены ненулевые матричные элементы:

$$\langle 000 -1/2 | \hat{\mathcal{H}} | 000 -1/2 \rangle = E_{000}^0, \quad (14a)$$

$$\langle 000 +1/2 | \hat{\mathcal{H}} | 000 +1/2 \rangle = E_{000}^0, \quad (14б)$$

$$\langle 101 -1/2 | \hat{\mathcal{H}} | 000 +1/2 \rangle = +\varkappa \hbar \omega \langle \zeta_1 | \mathfrak{J} | \zeta_0 \rangle, \quad (14в)$$

$$\langle 001 -1/2 | \hat{\mathcal{H}} | 001 -1/2 \rangle = E_{001}^0, \quad (15a)$$

$$\langle 001 +1/2 | \hat{\mathcal{H}} | 001 +1/2 \rangle = E_{001}^0, \quad (15б)$$

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

$$\langle 100 -1/2 | \hat{\mathcal{H}} | 100 -1/2 \rangle = E_{100}^0 + \varkappa \hbar \omega, \quad (16a)$$

$$\langle 001 +1/2 | \hat{\mathcal{H}} | 100 -1/2 \rangle = -\varkappa \hbar \omega \langle \zeta_0 | \mathfrak{z} | \zeta_1 \rangle, \quad (16b)$$

$$\langle 100 +1/2 | \hat{\mathcal{H}} | 100 +1/2 \rangle = E_{100}^0 - \varkappa \hbar \omega, \quad (16b)$$

$$\langle 101 -1/2 | \hat{\mathcal{H}} | 101 -1/2 \rangle = E_{101}^0 + \varkappa \hbar \omega, \quad (17a)$$

$$\langle 000 +1/2 | \hat{\mathcal{H}} | 101 -1/2 \rangle = -\varkappa \hbar \omega \langle \zeta_1 | \mathfrak{z} | \zeta_0 \rangle, \quad (17b)$$

$$\langle 101 +1/2 | \hat{\mathcal{H}} | 101 +1/2 \rangle = E_{101}^0 - \varkappa \hbar \omega, \quad (17b)$$

где оператор $\mathfrak{z} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \left(\frac{m\omega}{\hbar} z + \frac{\partial}{\partial z} \right)$, константа $\varkappa = 0,05$.

С их помощью были получены новые энергетические уровни:

$$E_{1,2}^{(2)} = E_{000}^0, \quad (18)$$

$$E_1^{(4)} = E_{001}^0, \quad (19a)$$

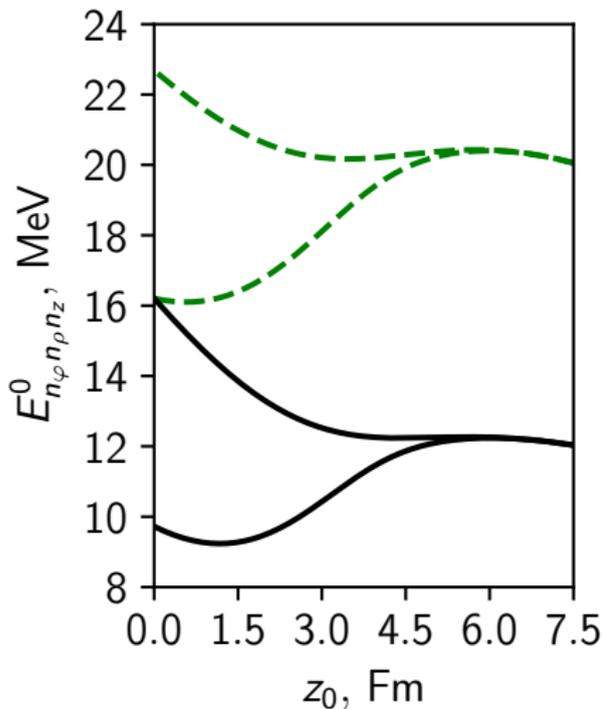
$$E_2^{(4)} = E_{100}^0 - \varkappa \hbar \omega, \quad (19b)$$

$$E_{3,4}^{(4)} \approx \frac{E_{100}^0 + E_{001}^0 + \varkappa \hbar \omega}{2} \pm \frac{\sqrt{(E_{100}^0 - E_{001}^0)^2 + 2\varkappa \hbar \omega \cdot (E_{100}^0 - E_{001}^0)}}{2}. \quad (19b)$$

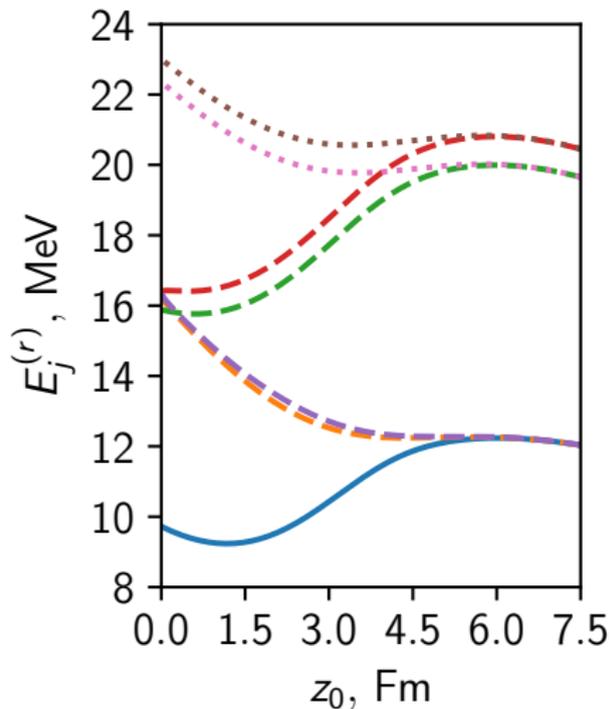
При рассмотрении ограниченного количества волновых функций получим лишь оценочные оставшиеся энергетические уровни:

$$E_1^{(8)} \sim E_{101}^0 + \varkappa \hbar \omega, \quad (20a)$$

$$E_2^{(8)} \sim E_{101}^0 - \varkappa \hbar \omega. \quad (20b)$$



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



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

Рисунок 16 — Сравнение энергетических уровней.

Реакции с образованием ядер-изомеров

Недавно в НИЦ «Курчатовский институт» были измерены сечения реакций [Titarenko Yu. E. et al // Fusion Science and Technology. — 2022. — v. 78, iss. 7. — p. 549]:

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

В связи с вопросом оценки надёжности этих данных была исследована возможность использования TALYS-1.9 для предсказания соответствующих сечений.

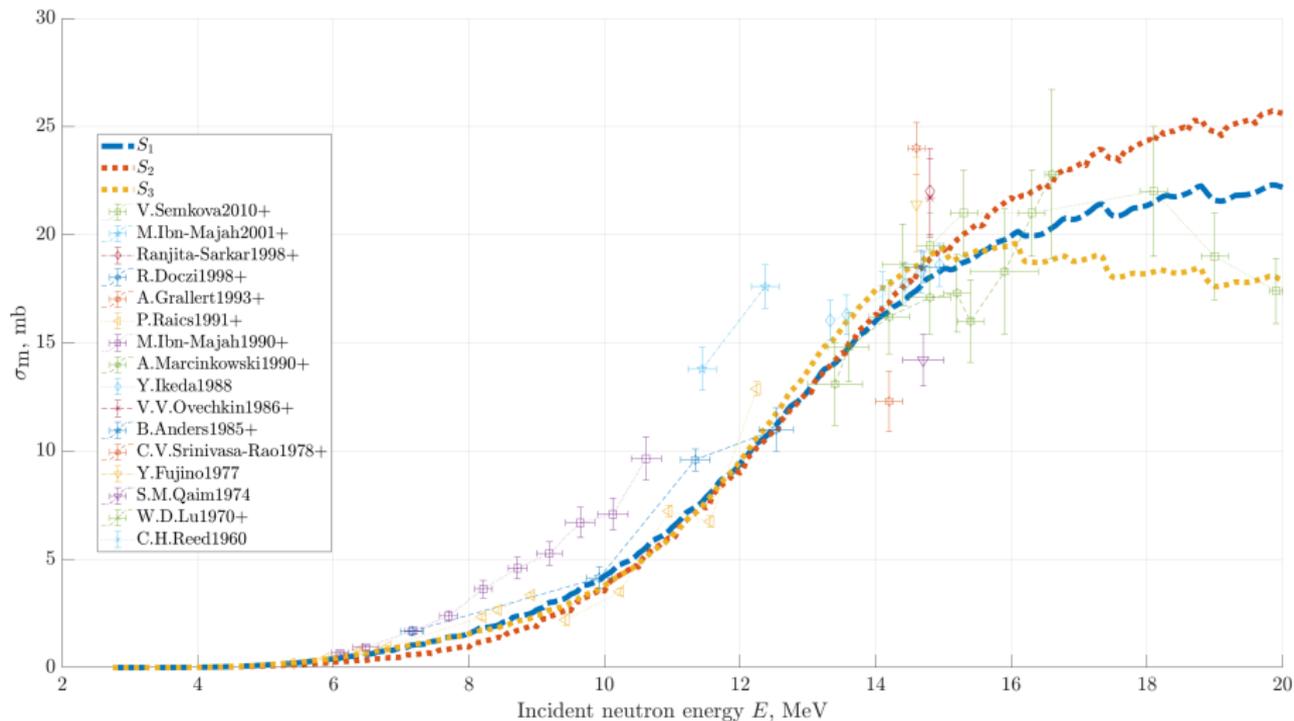


Рисунок 17 — Разброс сечений, вычисленных по TALYS-1.9, для разных моделей плотности уровней возбуждённых атомных ядер для реакции $^{91}\text{Zr}(n, p)^{91m}\text{Y}$.

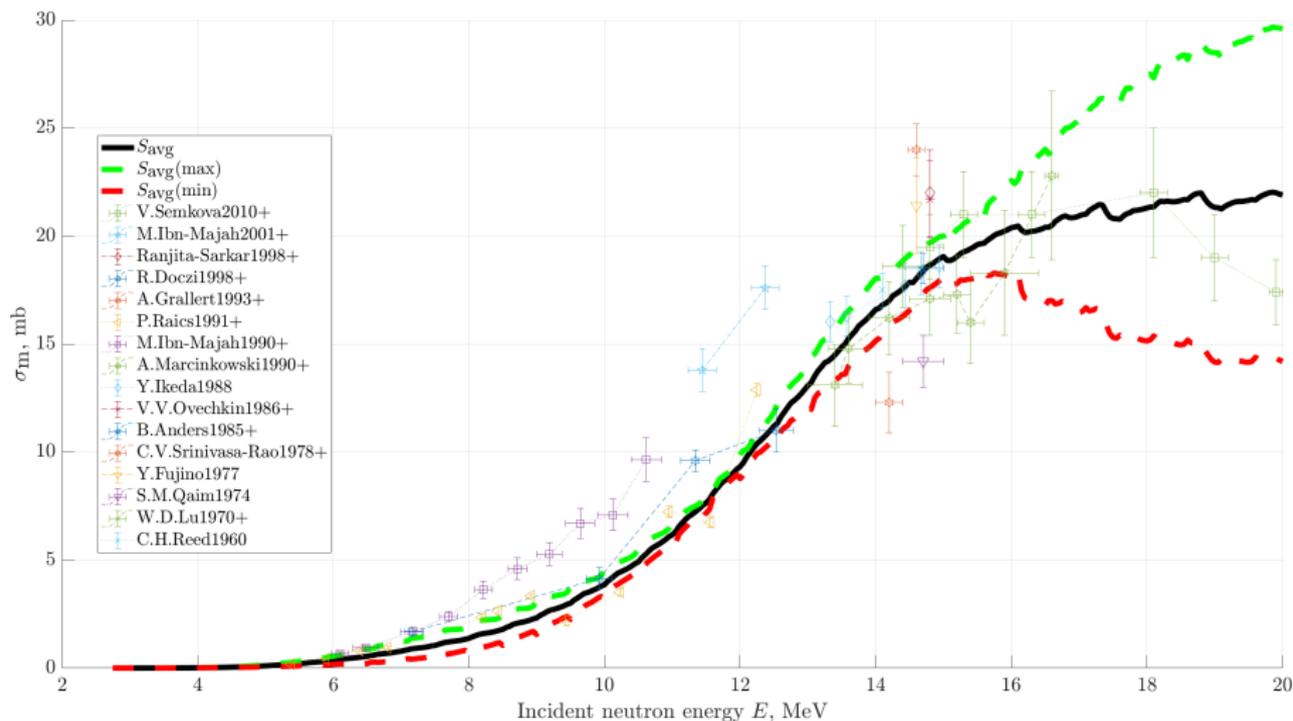


Рисунок 18 — Усреднение сечений, вычисленных по TALYS-1.9, для реакции $^{91}\text{Zr}(n, p)^{91m}\text{Y}$.

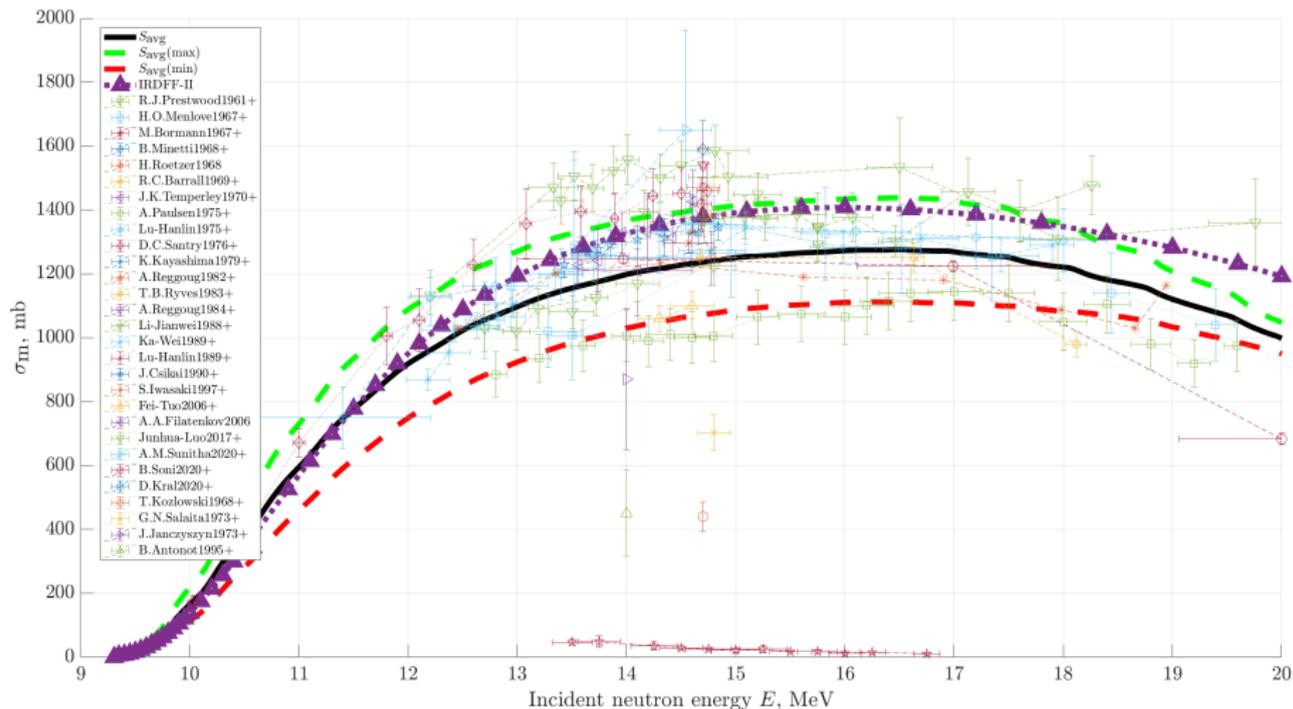


Рисунок 19 — Усреднение сечений, вычисленных по TALYS-1.9, для реакции $^{115}\text{In}(n, 2n)^{114m}\text{In}$.

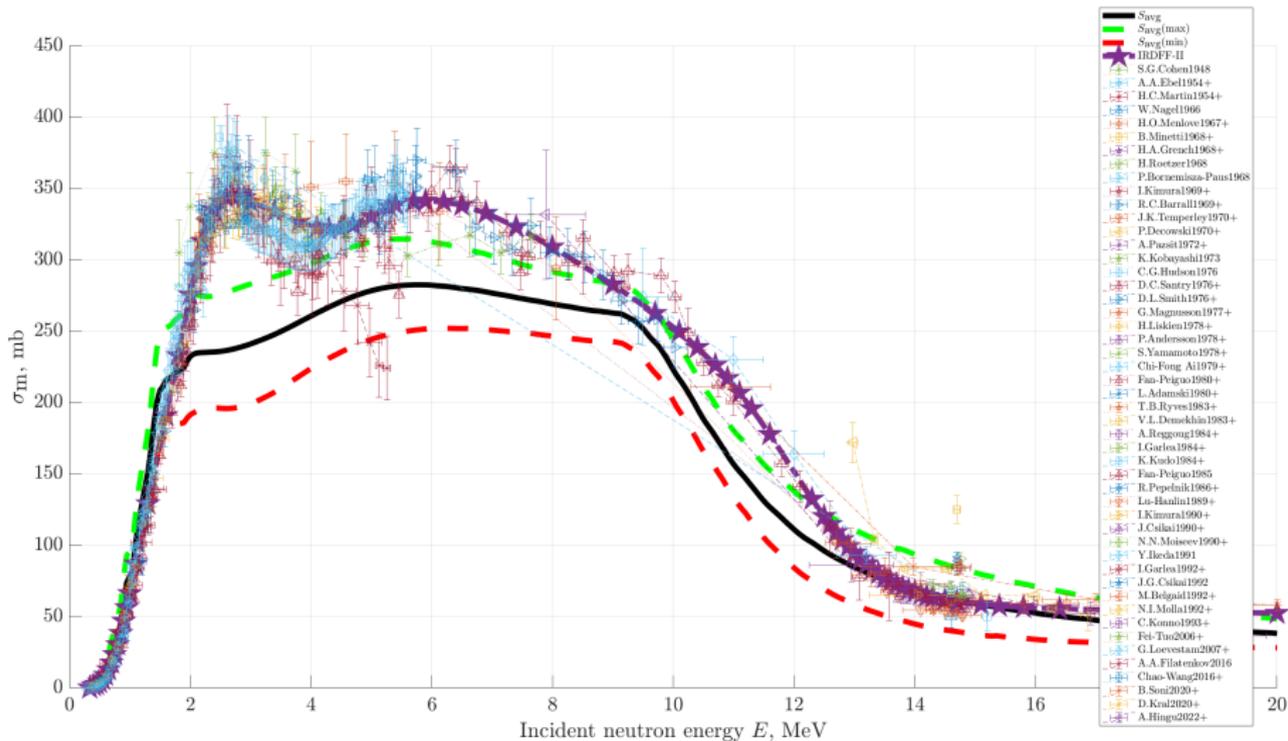


Рисунок 20 — Усреднение сечений, вычисленных по TALYS-1.9, для реакции $^{115}\text{In}(n, n')^{115m}\text{In}$.

Заключение

1. Изучен способ гибкой параметризации формы деформированного ядра, в том числе, делящегося, превращающегося в пару разделённых осколков.
2. Построены аналитические решения уравнения Шрёдингера, описывающие одночастичные состояния в потенциале симметричного двухцентрового осциллятора, и получены энергии этих одночастичных состояний.
3. Выполнены численные расчёты энергий одночастичных состояний в потенциале, соответствующем ядру с числом нуклонов $A = 235$, в зависимости от деформации потенциала, и установлено согласие с результатами, имеющимися в литературе.
4. Показана возможность использования программного комплекса TALYS-1.9 для предсказания сечений реакций с выходом ядер-изомеров, протекающих под действием нейтронов с энергией, близкой к 14 МэВ.

Дополнительный слайд 1.

Частота двухцентрового осциллятора

Условие постоянства объёма накладывается на эквипотенциальные поверхности, совпадающие с поверхностью ядра, где

$$V = \frac{m\omega_0^2 R^2}{2}, \quad (21)$$

при $R = r_0 A^{1/3}$, $r_0 = 1,2$ (Fm), $\hbar\omega_0 = 40A^{-1/3}$ (MeV).

Зависимость $\omega = \omega(z_0)$ из

$$2 \left[\frac{\omega_0 R}{\omega} \right]^3 + 3z_0 \left[\frac{\omega_0 R}{\omega} \right]^2 - z_0^3 - 2R^3 = 0 \quad (22)$$

подстановкой $\omega = \omega_0 \frac{R}{r}$ находится аналитически.

Получим уравнение

$$2r^3 + 3r^2 z_0 - z_0^3 - 2R^3 = 0 \quad (23)$$

с единственным вещественным решением

$$r(z_0) = \frac{1}{2} \left[\frac{z_0^2}{\left\{ 2\sqrt{2}\sqrt{R^3(2R^3 + z_0^3)} + 4R^3 + z_0^3 \right\}^{1/3}} + \right. \\ \left. + \left\{ 2\sqrt{2}\sqrt{R^3(2R^3 + z_0^3)} + 4R^3 + z_0^3 \right\}^{1/3} - z_0 \right]. \quad (24)$$

Дополнительный слайд 2.

Модели плотности энергетических уровней

Комплекс TALYS-1.9 включает в себя 6 моделей плотности уровней:

- модель Гильберта-Камерона $\rightarrow S_1(E)$,
- модель ферми-газа с обратным смещением $\rightarrow S_2(E)$,
- сверхтекучую модель $\rightarrow S_3(E)$,
- 3 комбинаторно-расчётные модели.

Дополнительный слайд 3.

Оценка надёжности вычислений

Неопределённость теоретического предсказания истинного сечения:

$$\Delta S(E) = \max \{ |S_1(E) - S_2(E)|, |S_1(E) - S_3(E)|, |S_2(E) - S_3(E)| \}. \quad (25)$$

Среднее значение

$$S_{\text{avg}}(E) = \frac{S_1(E) + S_2(E) + S_3(E)}{3} \quad (26)$$

можно взять в качестве наиболее вероятного прогноза.

Имеем коридор $S_{\text{avg}}(\text{max}) = S_{\text{avg}} + \Delta S$,

$S_{\text{avg}}(\text{min}) = S_{\text{avg}} - \Delta S$ для истинного значения сечения.

Дополнительный слайд 4. Образование ^{87m}Sr

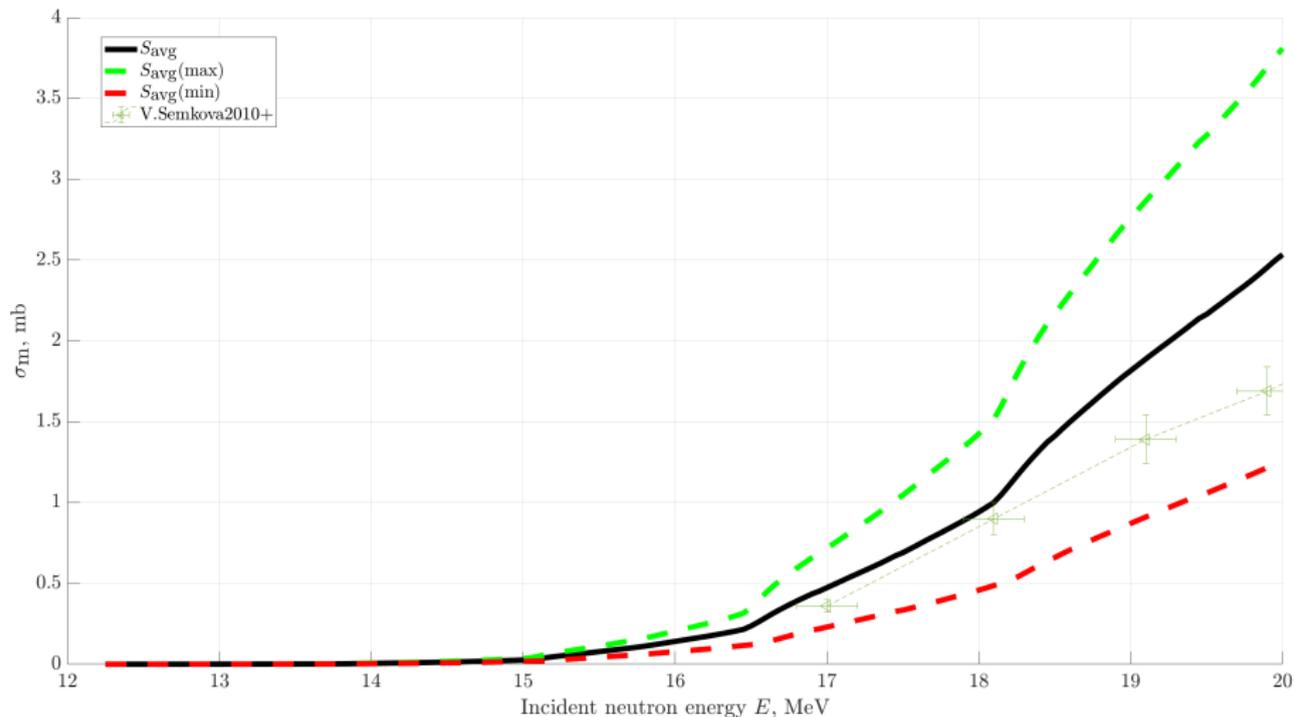


Рисунок 21 — Усреднение сечений, вычисленных по TALYS-1.9, для реакции $^{91}\text{Zr}(n, n\alpha)^{87m}\text{Sr}$.