

Методы моделирования плотности возбужденных состояний атомных ядер

Студент

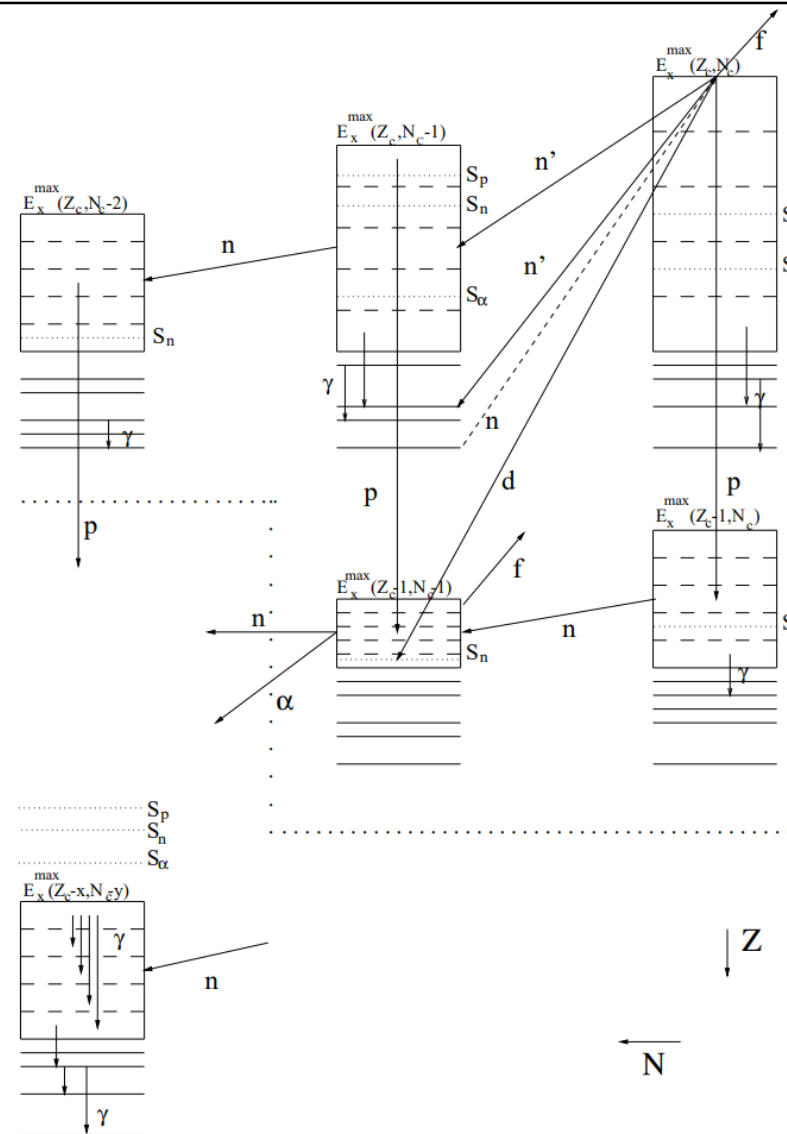
Л. Е. Трофимов

Научный руководитель
д.ф-м.н., доц.

А. Л. Барабанов

Цель работы

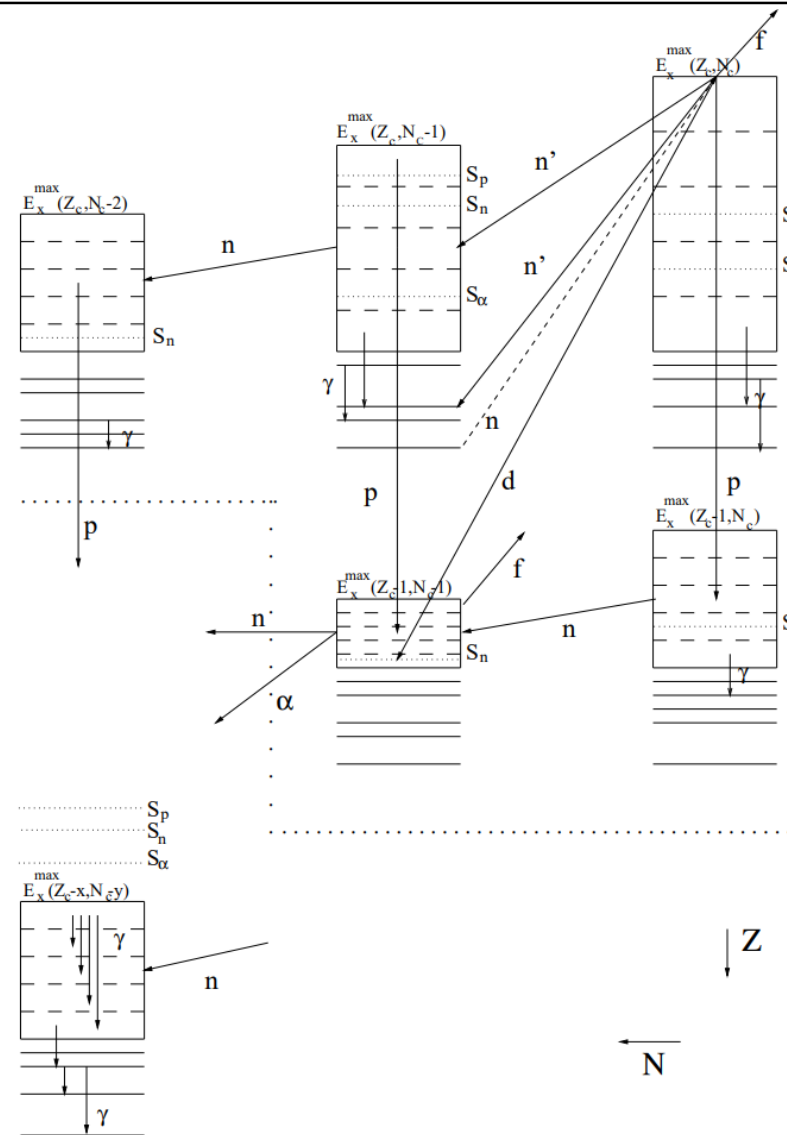
- Освоение известных и разработка новых методов вычисления плотности возбужденных ядерных состояний
- Расчёты сечений ядерных реакций с использованием надежных моделей для плотности возбужденных уровней ядер



3. Koning A., Hilaire S., Goriely S. TALYS-1.9. A nuclear reaction program. User Manual. — 2017.

Моделирование ядерных реакций. Программа Talys

В НИЦ КИ ведутся измерения сечений ядерных реакций, важных для прикладных задач. В рамках сотрудничества нами с помощью программы Talys рассчитаны сечения ряда реакций, идущих с образованием изомеров (долгоживущих изотопов), и проанализировано, как согласуются вычисленные сечения с результатами измерений.



3. Koning A., Hilaire S., Goriely S. TALYS-1.9. A nuclear reaction program. User Manual. — 2017.

Моделирование плотности уровней. Программа Talys

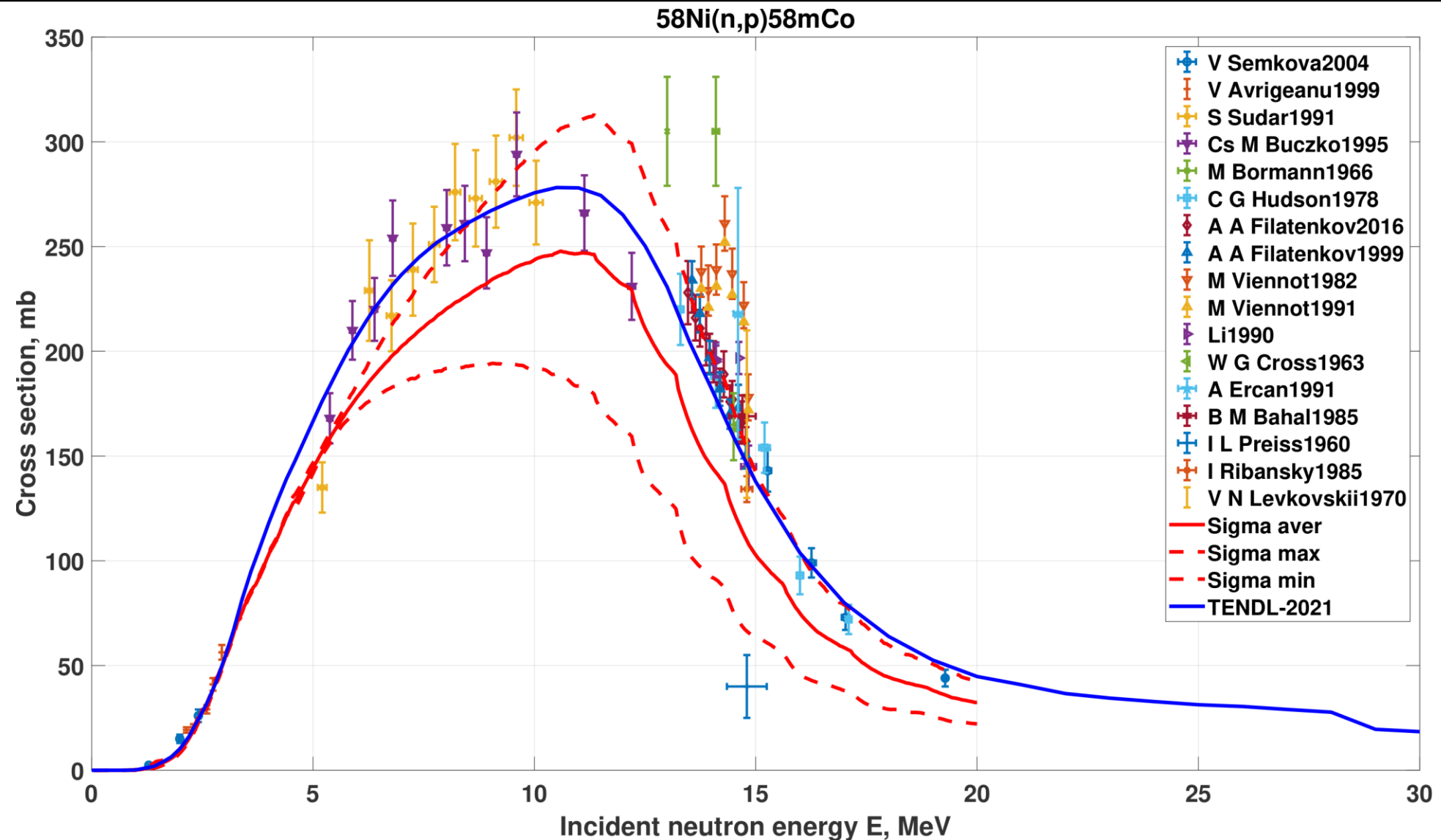
- Модель Гильберта-Камерона
- Ферми-газ с обратным смещением
- Сверхтекучая модель.

$$\sigma_{\text{av}}(E) = \frac{\sigma_1(E) + \sigma_2(E) + \sigma_3(E)}{3},$$

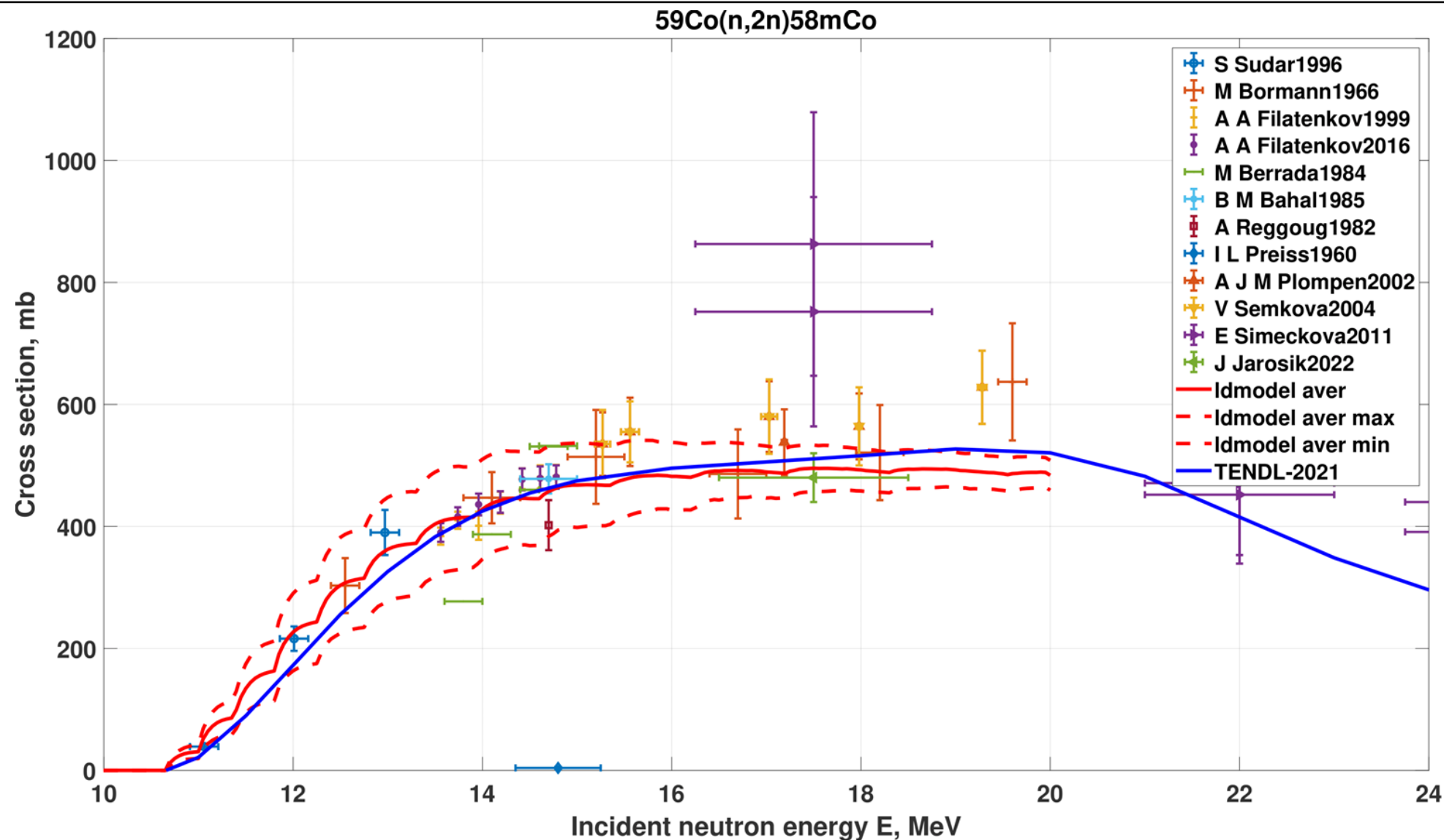
$$\Delta\sigma(E) = \max(|\sigma_1(E) - \sigma_2(E)|, |\sigma_1(E) - \sigma_3(E)|, |\sigma_2(E) - \sigma_3(E)|),$$

$$\sigma_{\text{max}}(E) = \sigma_{\text{av}}(E) + \Delta\sigma(E), \quad \sigma_{\text{min}}(E) = \sigma_{\text{av}}(E) - \Delta\sigma(E).$$

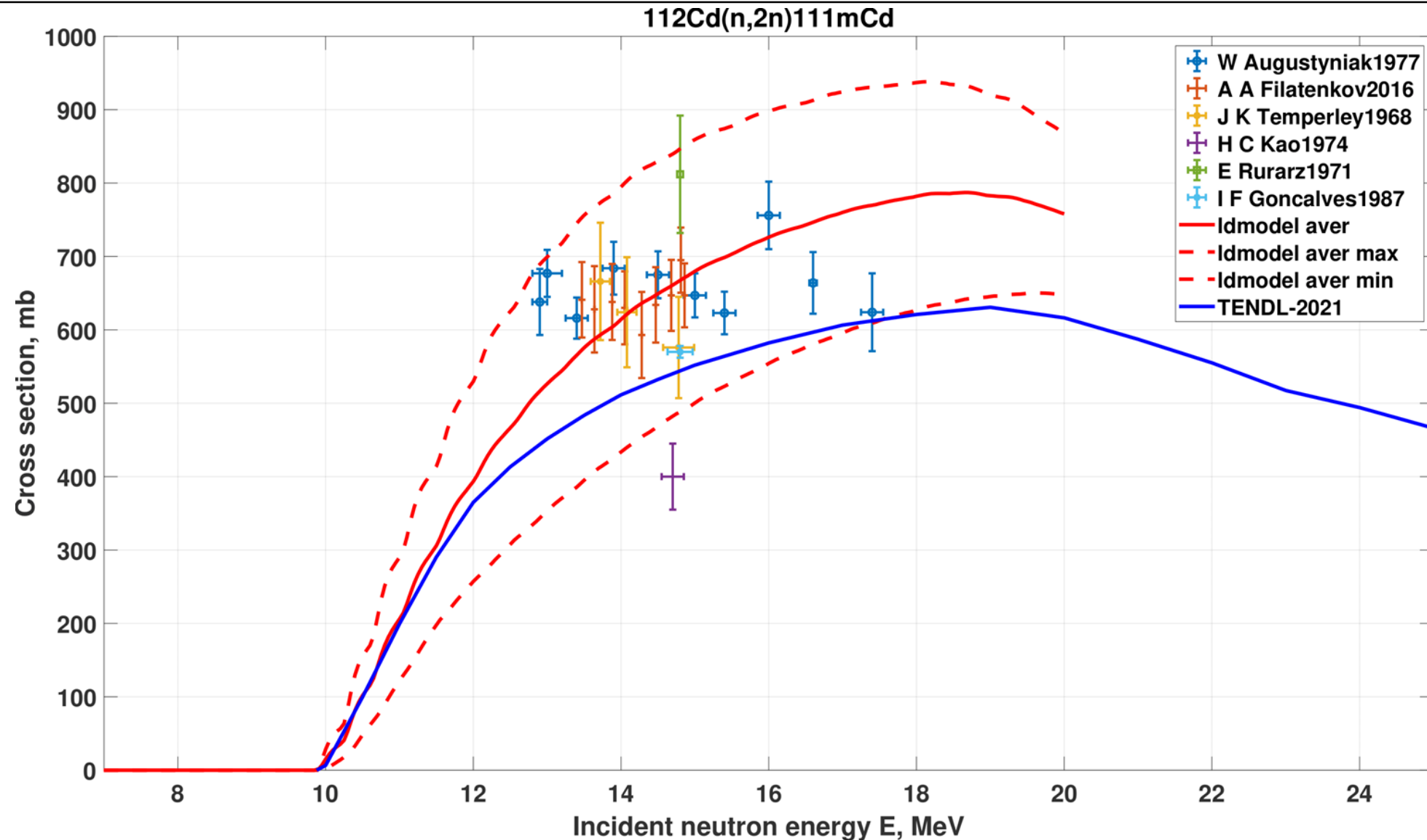
Моделирование ядерных реакций. $^{58}\text{Ni}(n,p)^{58m}\text{Co}$



Моделирование ядерных реакций. $^{59}\text{Co}(n,2n)^{58\text{m}}\text{Co}$



Моделирование ядерных реакций. $^{112}\text{Cd}(n,2n)^{111\text{m}}\text{Cd}$



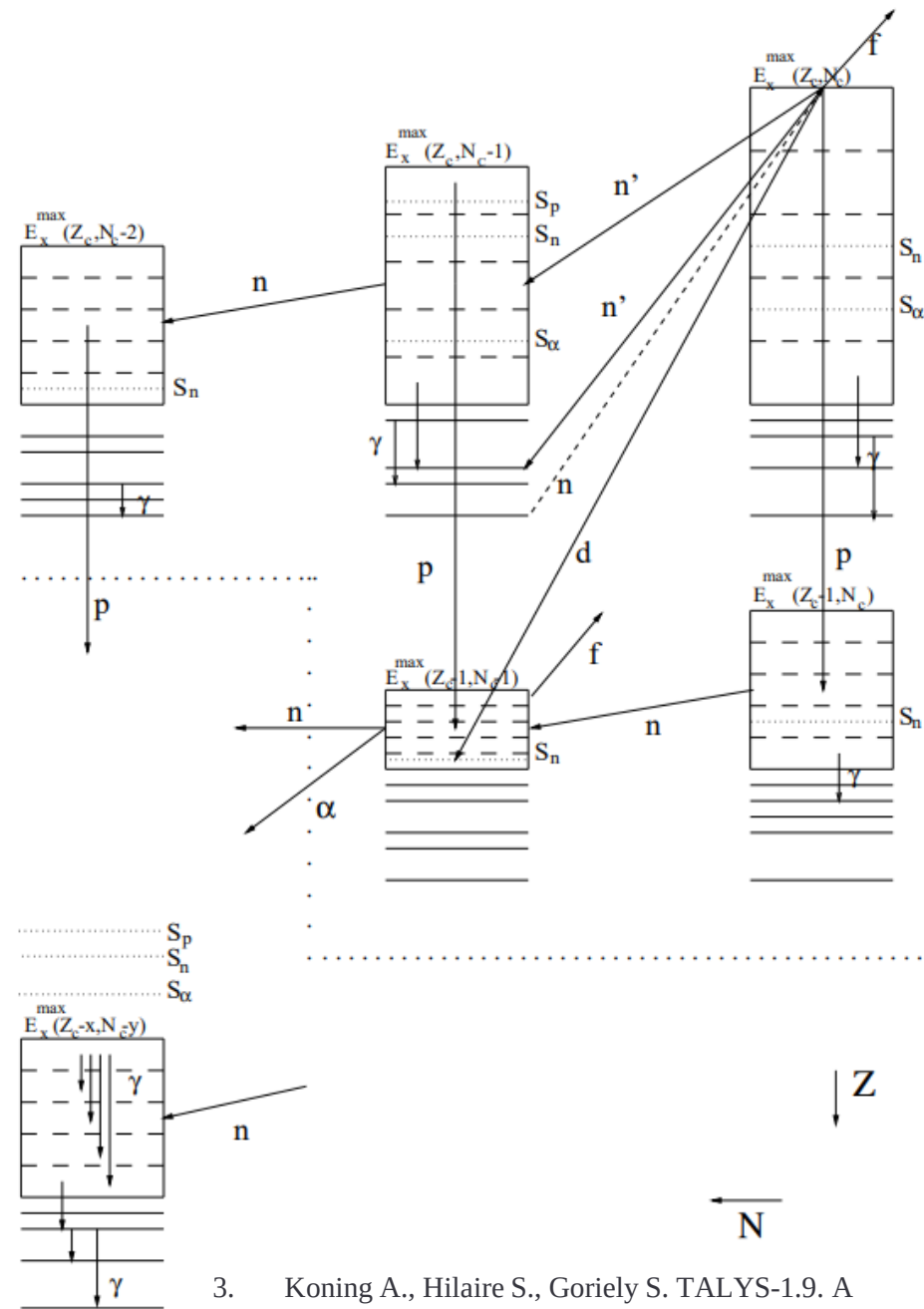
Два подхода к вычислению плотности состояний:

1. Метод ферми-газа.

4. Bethe H. An Attempt to Calculate the Number of Energy Levels of a Heavy Nucleus // Physical Review. — 1936. — Vol. 50. — P. 332–341.

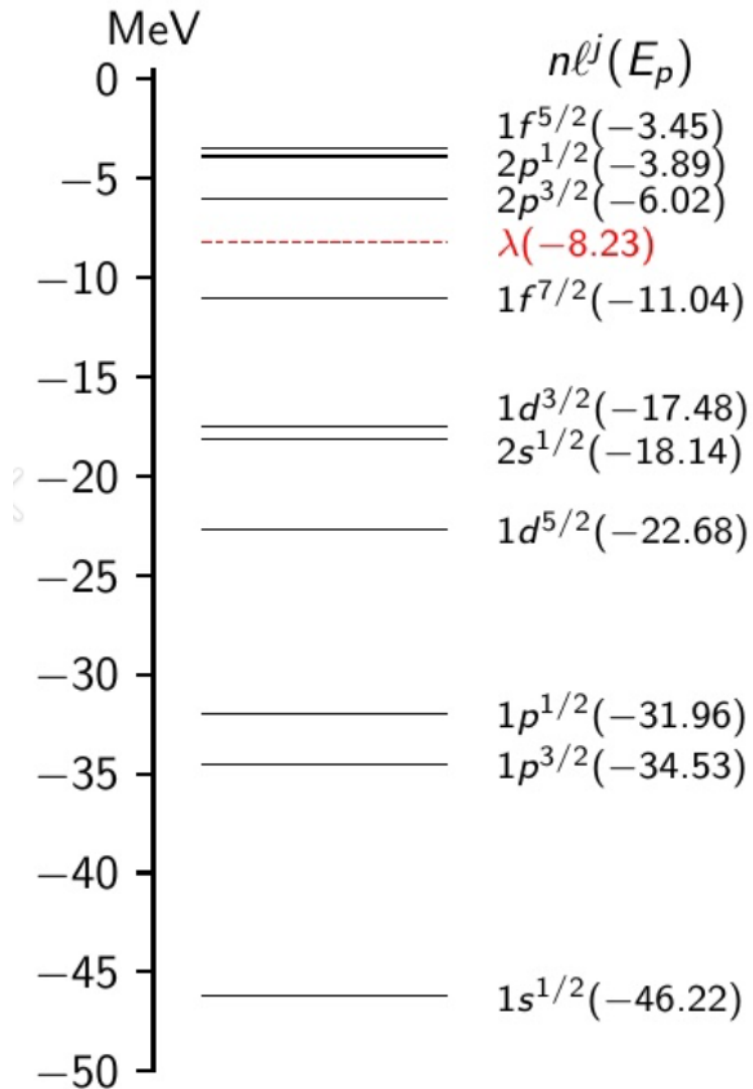
2. Комбинаторный расчёт.

31. Uhrenholt H., Aberg S., Möller P. et al. Combinatorial nuclear level-density model // Nuclear Physics A. — 2013. — Vol. 913. — P. 127.



3. Koning A., Hilaire S., Goriely S. TALYS-1.9. A nuclear reaction program. User Manual. — 2017.

Комбинаторный расчёт. Одночастичные уровни ^{62}Ni



Набор одночастичных состояний получен методом Хартри-Фока с учётом теории Бардина-Купера-Шриффера

$$\{n, l, j, j_z, \varepsilon\}$$

Уровни

$$\{n, l, j, \varepsilon\}$$

Комбинаторный расчёт

Одночастичные состояния

$$\{n, l, j, j_z, \varepsilon\}$$



Многочастичные состояния

$$\underbrace{\{1, 1, \dots, 1, 1, 1, 0, 0, 0, \dots\}}$$

Основное состояние

$$\{1, 1, \dots, 1, 1, 0, 1, 0, 0, \dots\}$$

$$\{1, 1, \dots, 1, 0, 1, 1, 0, 0, \dots\}$$

$$\{1, 1, \dots, 0, 1, 1, 1, 0, 0, \dots\}$$

$$\vdots$$

$$\{0, 1, \dots, 1, 1, 1, 1, 0, 0, \dots\}$$

$$\{1, 1, \dots, 1, 1, 0, 0, 1, 0, \dots\}$$

$$\vdots$$

$$\{0, 1, \dots, 1, 1, 1, 0, 1, 0, \dots\}$$

$$\{1, 1, \dots, 1, 0, 0, 1, 1, 0, \dots\}$$

$$\{1, 1, \dots, 0, 1, 0, 1, 1, 0, \dots\}$$

$$\vdots$$

$$\{1, 0, \dots, 1, 1, 0, 1, 1, 0, \dots\}$$

$$\{0, 1, \dots, 1, 1, 0, 1, 1, 0, \dots\}$$

$$\{1, 1, \dots, 0, 0, 1, 1, 1, 0, \dots\}$$

$$\vdots$$

Комбинаторный расчёт

$$n(i) = \{1, 1, \dots, 1, 0, 0, 1, 1, 0, \dots\}$$

$$U_i = \sum_{j=1}^N (\varepsilon_F - \varepsilon_j(i))(1 - n_j(i)) + \sum_{j=N+1} (\varepsilon_j(i) - \varepsilon_F)n_j(i)$$

$$M_i = \sum_j m_j(i)n_j(i)$$

$$P_i = \prod_j p_j(i)n_j(i)$$

$$\omega(U, M, P) = \frac{\Delta N(P)}{\Delta U \Delta M}$$

Плотность уровней

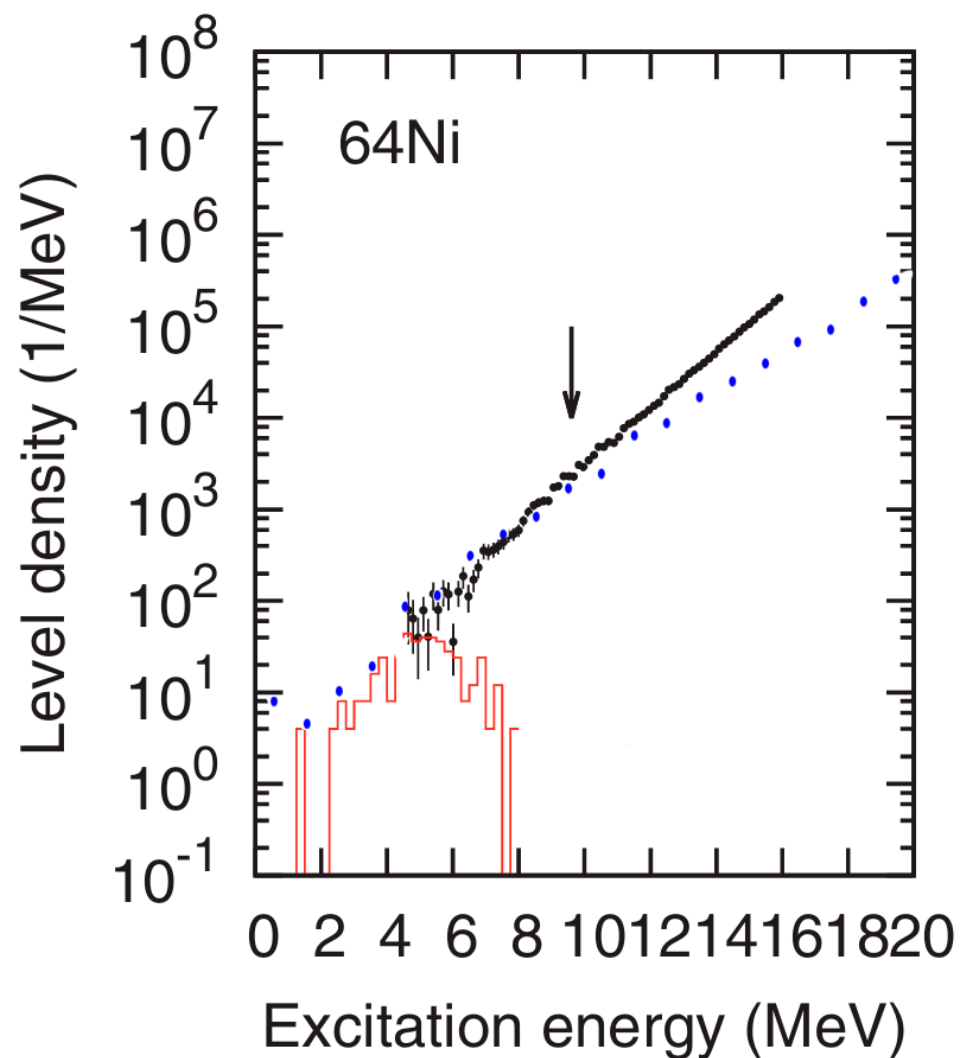
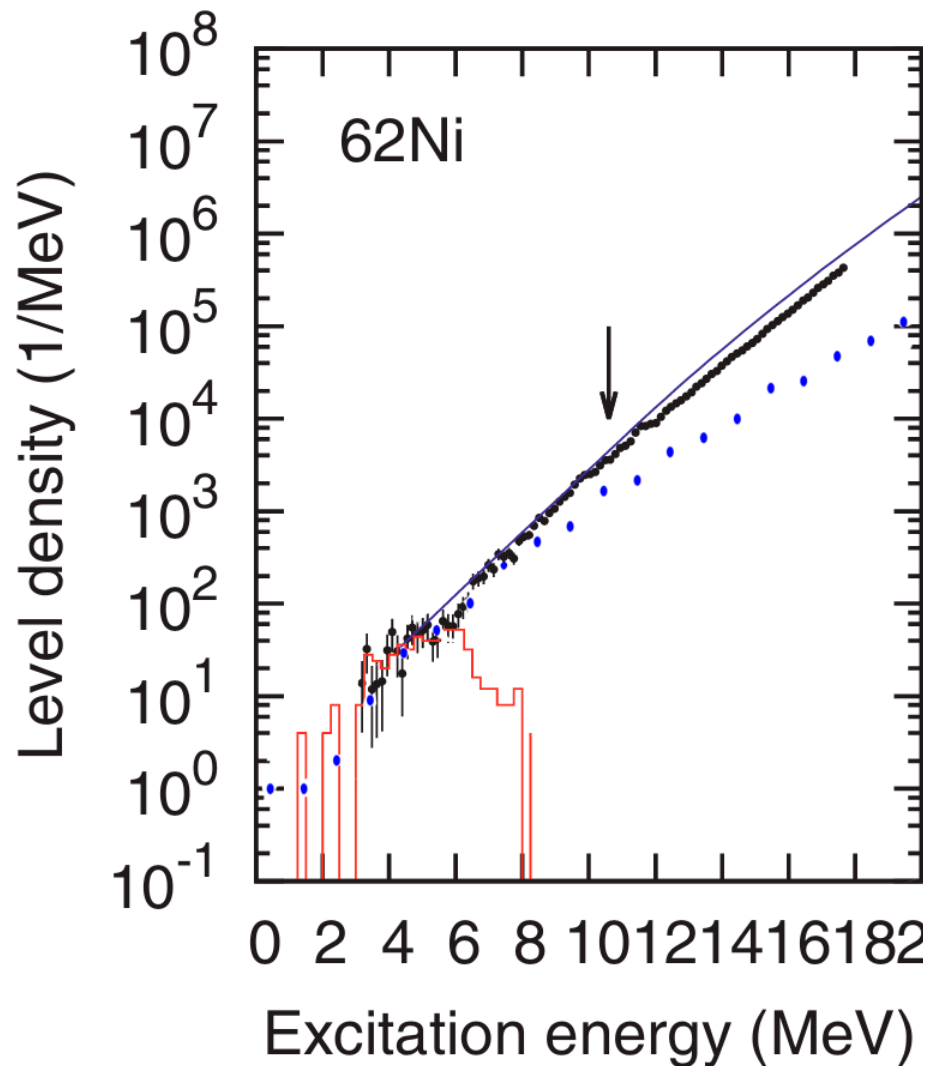
$$\rho(U, I, P) = \omega(U, M = I, P) - \omega(U, M = I + 1, P)$$

$$\rho(U, I, P) = \frac{\Delta N(P)}{\Delta U \Delta I}$$

$$\rho(U, P) = \sum_I \rho(U, I, P)$$

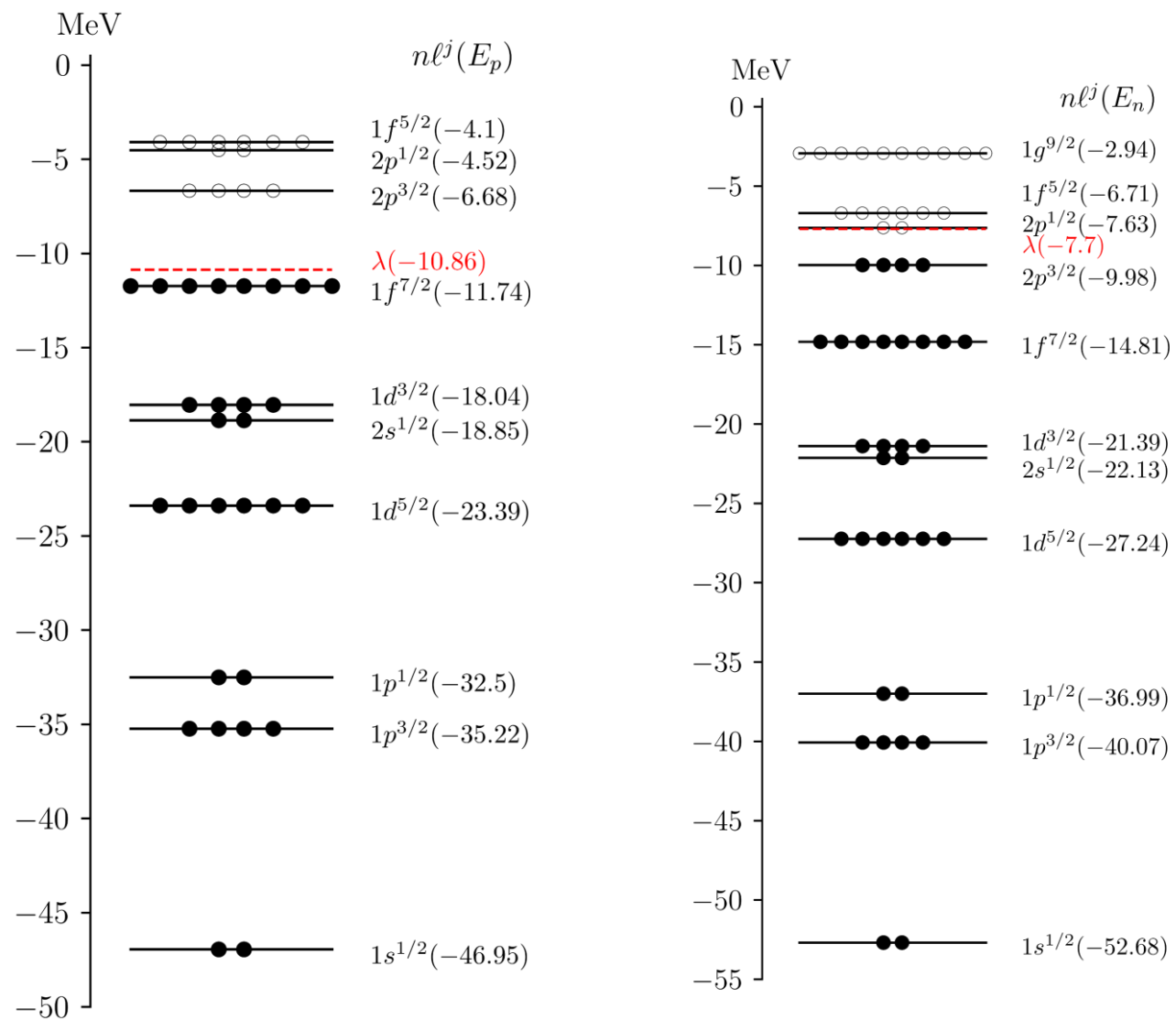
$$\rho(U) = \rho(U, P = +1) + \rho(U, P = -1)$$

Плотность уровней. Сравнение с экспериментом



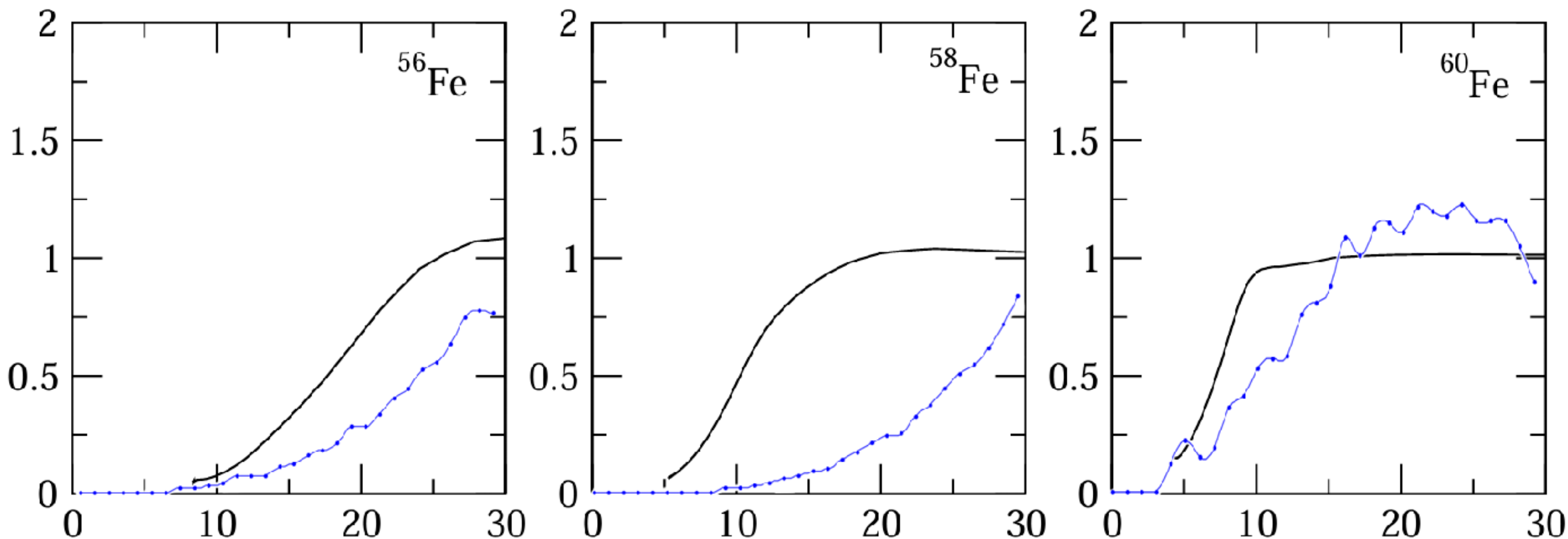
40. Voinov A., Grimes S., Brune C. Recent experimental results on level densities for compound reaction calculations // EPJ Web of Conferences. — 2012. — Vol. 21. — P. 05001.

Одночастичные уровни ^{60}Fe



$$A(U) = \frac{\rho(U, P = -1)}{\rho(U, P = +1)}$$

Сравнение моделей. Асимметрия в чётности



42. Mocalj D., Rauscher T., Martinez-Pinedo G., [et al.]. Large-scale prediction of the parity distribution in the nuclear level density and application to astrophysical reaction rates // Phys. Rev. C. — 2007 — Vol. 75, No. 4 — P. 45805.

Заключение (1)

- Расчёты, выполненные по программе Talys, указывают на заметную чувствительность сечений образования ядер в изомерных (долгоживущих) состояний в ядерных реакциях, инициированных нейтронами, к моделям для плотности возбуждённых ядерных состояний. Этим определяется высокая значимость надёжного моделирования плотности уровней. Часть полученных результатов вошла в опубликованную статью Sitkov D. A., Trofimov L. E., Filonchik P. G., Titarenko Y. E., Barabanov A. L. Analysis of the Cross Sections of the Formation of Nuclei in Isomeric States in (n, p) Reactions // Physics of Particles and Nuclei Letters. — 2024 — Vol. 21, No. 4 — P. 567–570.

Заключение (2)

- Создана компьютерная программа для вычисления плотности возбуждённых состояний атомных ядер в рамках комбинаторного метода. Метод основан на расчёте энергий одночастичных нуклонных состояний в самосогласованном потенциале ядра без привлечения подгоночных параметров. Вычисленные плотности уровней зависят от энергии возбуждения, спина и чётности возбужденных состояний.
- Выполнено моделирование плотности уровней в зависимости от энергии в комбинаторном подходе для изотопов никеля на одночастичном базисе, полученном в рамках метода Хартри-Фока с учётом эффекта спаривания нуклонов.

Заключение (3)

- В расчётах по созданной программе для изотопов Ni установлено, что вычисленная плотность уровней согласуется с экспериментальными данными до энергии возбуждения 8-10 МэВ. Распространение этого подхода на более высокие энергии требует модификации используемого алгоритма (модификация планируется).
- Рассчитаны асимметрии чётности в зависимости от энергии возбуждения для цепочек изотопов никеля. Наблюдается разумное согласие с модельными данными других авторов.
- В перспективе планируется распространение комбинаторного метода вычисления плотности уровней на деформированные ядра и, в частности, использование метода для описания деления ядер.

Список литературы (1)

1. Bohr A., Mottelson B. Nuclear Structure. Single-particle motion. — W. A. Benjamin, 1969 — 1219 p.
2. Ring P., Shuck P. The Nuclear Many-Body Problem. — Springer-Varlag, 1980 — 717 p.
3. Koning A., Hilaire S., Goriely S. TALYS-1.9. A nuclear reaction program. User Manual. — 2017.
4. Bethe H. An Attempt to Calculate the Number of Energy Levels of a Heavy Nucleus // Physical Review. — 1936 — Vol. 50 — P. 332–341.
5. Bardeen J., Cooper L. N., Schrieffer J. R. Microscopic Theory of Superconductivity // Phys. Rev. — 1957 — Vol. 106, No. 1 — P. 162–164.
6. Bohr A., Mottelson B. R., Pines D. Possible Analogy between the Excitation Spectra of Nuclei and Those of the Superconducting Metallic State // Phys. Rev. — 1958 — Vol. 110, No. 4 — P. 936–938.
7. Belyaev S. T. Effect of pairing force correlations on nuclear properties // Selskab Mat. Fys. Medd. — 1959 — Vol. 31, No. 11.
8. Ericson T. The statistical model and nuclear level densities // Advances in Physics. — 1960 — Vol. 9, No. 36 — P. 425–511.
9. Gilbert A., Cameron A. A composite nuclear-level density formula with shell corrections // Canadian Journal of Physics. — 1965 — Vol. 43 — P. 1446–1496.
10. Kluge G. Influence of pairing correlations on nuclear level densities // Nuclear Physics. — 1964 — Vol. 51 — P. 41–49.
11. Dilg W., Schantl W., Vonach H. Level density parameters for the back-shifted fermi gas model in the mass range $40 < A < 250$ // Nuclear Physics A. — 1973 — Vol. 217 — P. 269–298.

Список литературы (2)

12. Bohr A., Mottelson B. Nuclear Structure. Nuclear Deformations. — Basic Books, 1969 — 748 p.
13. Игнатюк А. В. Статистические свойства возбужденных атомных ядер. — Энергоатомиздат, 1983 — 176 с.
14. Capote R., Herman M., Oblozinsky P., Young P. G., Goriely S. RIPL - Reference Input Parameter Library for Calculation of Nuclear Reactions and Nuclear Data Evaluations // Nuclear Data Sheets. — 2009 — Vol. 110, No. 12 — P. 3107–3214.
15. Mayer M. G. On Closed Shells in Nuclei // Phys. Rev. — 1948 — Vol. 74 — P. 235–239.
16. Mayer M. G. Nuclear Configurations in the Spin-Orbit Coupling Model. II. Theoretical Considerations // Phys. Rev. — 1950 — Vol. 78 — P. 22–23.
17. Grover J. R. Shell-Model Calculations of the Lowest-Energy Nuclear Excited States of Very High Angular Momentum // Phys. Rev. — 1967 — Vol. 157, No. 4 — P. 832–847.
18. Williams F. C. An iterative method for the calculation of nuclear level densities // Nuclear Physics A. — 1969 — Vol. 133, No. 1 — P. 33–49.
19. Hillman M., Grover J. R. Shell-Model Combinatorial Calculations of Nuclear Level Densities // Phys. Rev. — 1969 — Vol. 185, No. 4 — P. 1303–1319.
20. Williams F., Chan G., Huizenga J. The significance of shell corrections in the parameterization of numerical state density calculations // Nuclear Physics A. — 1972 — Vol. 187 — P. 225–248.
21. Hillman M. Combinatorial calculations of nuclear level densities, spin projections, and nuclear deformation // Phys. Rev. C. — 1974 — Vol. 9, No. 6 — P. 2289–2296.
22. Nix J. R. Calculation of Fission Barriers for Heavy and Superheavy Nuclei // Annual Review of Nuclear and Particle Science. — 1972 — Vol. 22 — P. 65–120.

Список литературы (3)

23. Vautherin D., Brink D. M. Hartree-Fock Calculations with Skyrme's Interaction. I. Spherical Nuclei // Phys. Rev. C. — 1972 — Vol. 5, No. 3 — P. 626–647.
24. Herman M., Reffo G. Codes for the combinatorial calculation of few quasi-particle state densities in spherical and deformed nuclei // Computer Physics Communications. — 1987 — Vol. 47 — P. 103–111.
25. Cerf N. Realistic microscopic level densities for spherical nuclei // Phys. Rev. C. — 1994 — Vol. 50 — P. 836–844.
26. Hilaire S., Delaroche J. E., Koning A. J. Generalized particle-hole state densities within the equidistant spacing model // Nuclear Physics A. — 1998 — Vol. 632 — P. 417–441.
27. Hilaire S., Delaroche J. E., Girod M. Combinatorial nuclear level densities based on the Gogny nucleon-nucleon effective interaction // The European Physical Journal A. — 2001 — Vol. 12 — P. 169–184.
28. Hilaire S., Goriely S. Global microscopic nuclear level densities within the HFB plus combinatorial method for practical applications // Nuclear Physics A. — 2006 — Vol. 779 — P. 63–81.
29. Goriely S., Hilaire S., Koning A. J. Improved microscopic nuclear level densities within the Hartree-Fock-Bogoliubov plus combinatorial method // Phys. Rev. C. — 2008 — Vol. 78 — P. 64307.
30. Hilaire S., Girod M., Goriely S., Koning A. J. Temperature-dependent combinatorial level densities with the D1M Gogny force // Phys. Rev. C. — 2012 — Vol. 86 — P. 64317.
31. Uhrenholt H., Aberg S., Möller P., Ichikawa T. Combinatorial nuclear level density model // Nuclear Physics A. — 2013 — Vol. 913 — P. 127.
- 32 Døssing T., Aberg S., Albertsson M., Carlsson B. G., Randrup J. Angular momentum in fission fragments // Physical Review C. — 2024 — Vol. 109, No. 3.

Список литературы (4)

33. Zhao J., Niksic T., Vretenar D. Microscopic model for the collective enhancement of nuclear level densities // Phys. Rev. C. — 2020 — Vol. 102 — P. 54606.
34. Geng K.-P., Du P.-X., Li J., Fang D.-L. Calculation of microscopic nuclear level densities based on covariant density functional theory // Nucl. Sci. Tech. — 2023 — Vol. 34, No. 9.
35. Sidorov S., Kornilova A., Tretyakova T. Tensor force impact on shell evolution in neutron-rich Si and Ni isotopes // Chinese Physics C. — 2024 — Vol. 48, No. 4 — P. 44101.
36. Titarenko Y. E., Pavlov K. V., Titarenko A. Y. Benchmark Experiments for Verification of Nuclear Data Libraries for Designing Fusion Blankets // Fusion Science and Technology. — 2022 — Vol. 78, No. 7 — P. 549–572.
37. Sitkov D. A., Trofimov L. E., Filonchik P. G., Titarenko Y. E., Barabanov A. L. Analysis of the Cross Sections of the Formation of Nuclei in Isomeric States in (n, p) Reactions // Physics of Particles and Nuclei Letters. — 2024 — Vol. 21, No. 4 — P. 567–570.
38. Соколов Ю. В. Плотность уровней атомных ядер. — Энергоатомиздат, 1990 — 165 с.
39. Nilsson S. G. Binding states of individual nucleons in strongly deformed nuclei // 29(CERN-55-30). — 1955 — P. 1–69.
40. Voinov A., Grimes S., Brune C. Recent experimental results on level densities for compound reaction calculations // EPJ Web of Conferences. — 2012 — Vol. 21 — P. 5001.
41. Bonett-Matiz M., Mukherjee A., Alhassid Y. Level densities of nickel isotopes: Microscopic theory versus experiment // Physical Review C. — 2013 — Vol. 88, No. 1 — P. 11302
42. Mocalj D., Rauscher T., Martinez-Pinedo G., [et al.]. Large-scale prediction of the parity distribution in the nuclear level density and application to astrophysical reaction rates // Phys. Rev. C. — 2007 — Vol. 75, No. 4 — P. 45805.

Метод ферми-газа . Плотность многочастичных состояний

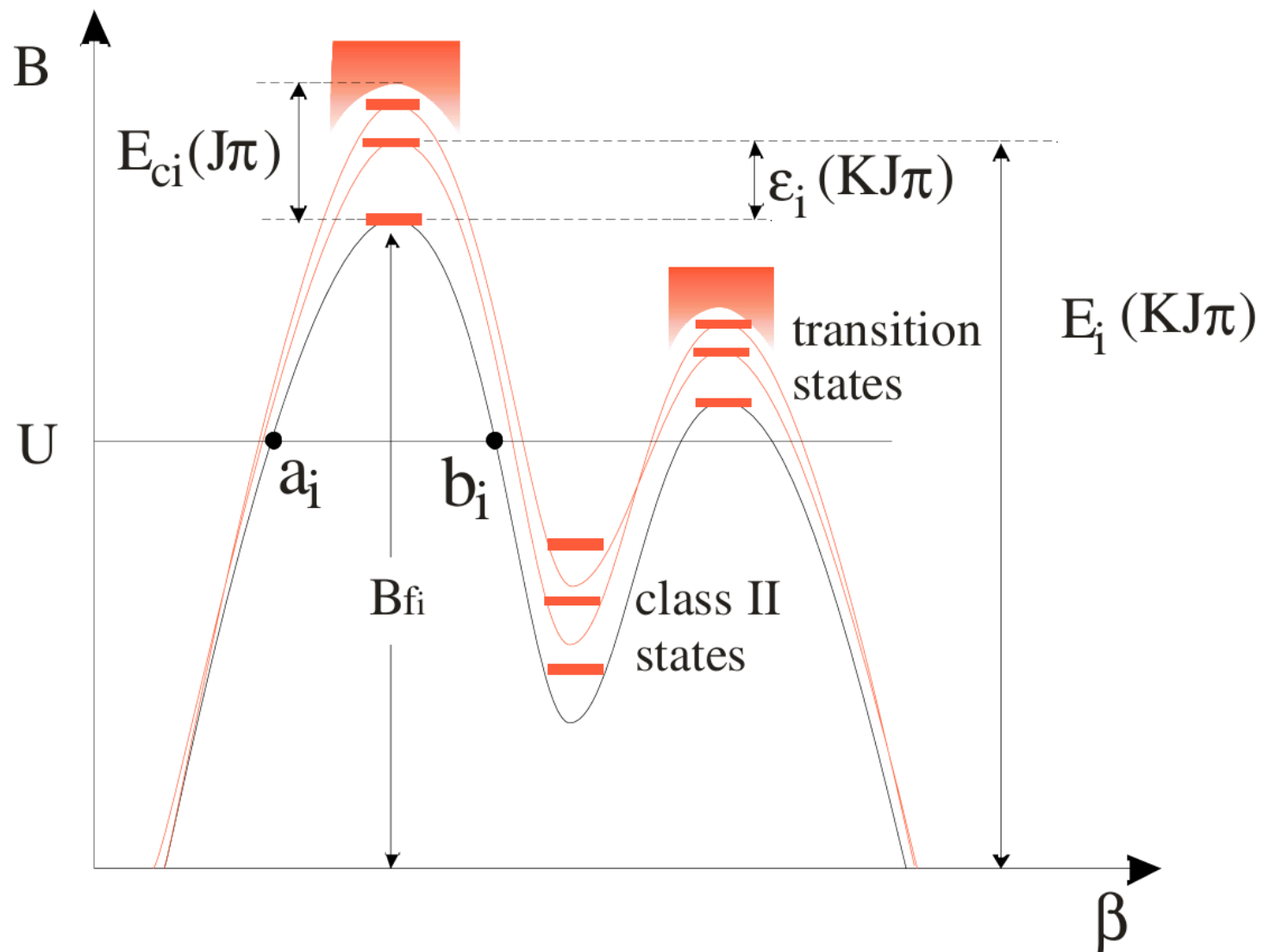
$$\omega(U) = \frac{\sqrt{\pi}}{12} \frac{e^{2\sqrt{aU}}}{a^{1/4}U^{5/4}},$$

где a – параметр плотности уровней

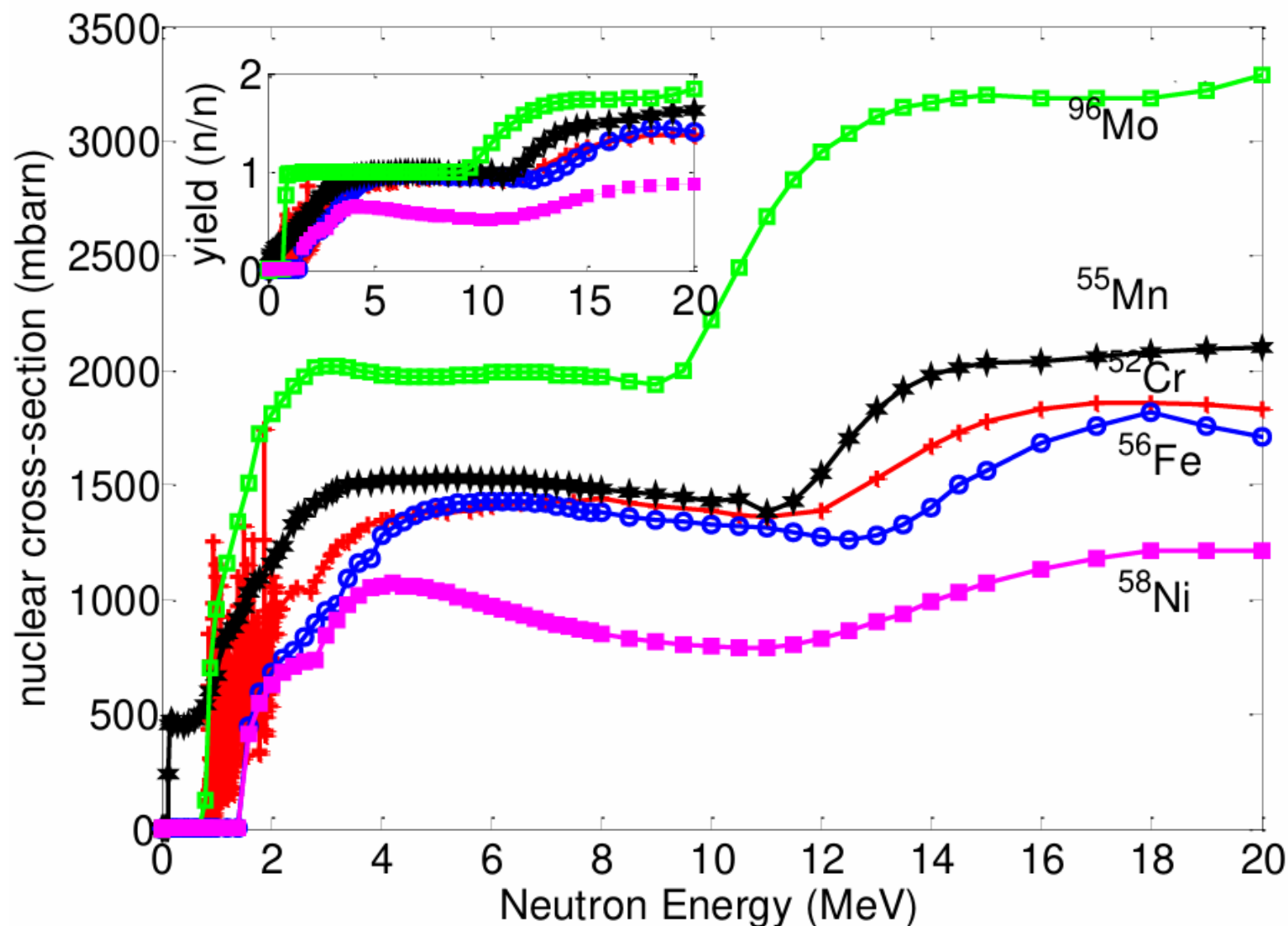
$$a = \frac{\pi^2}{6} g.$$

g – плотность одночастичных состояний вблизи энергии Ферми.

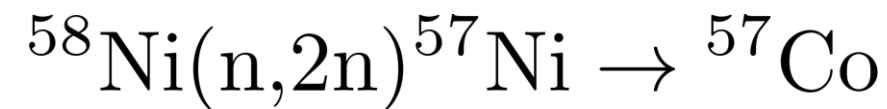
Дополнительные слайды.



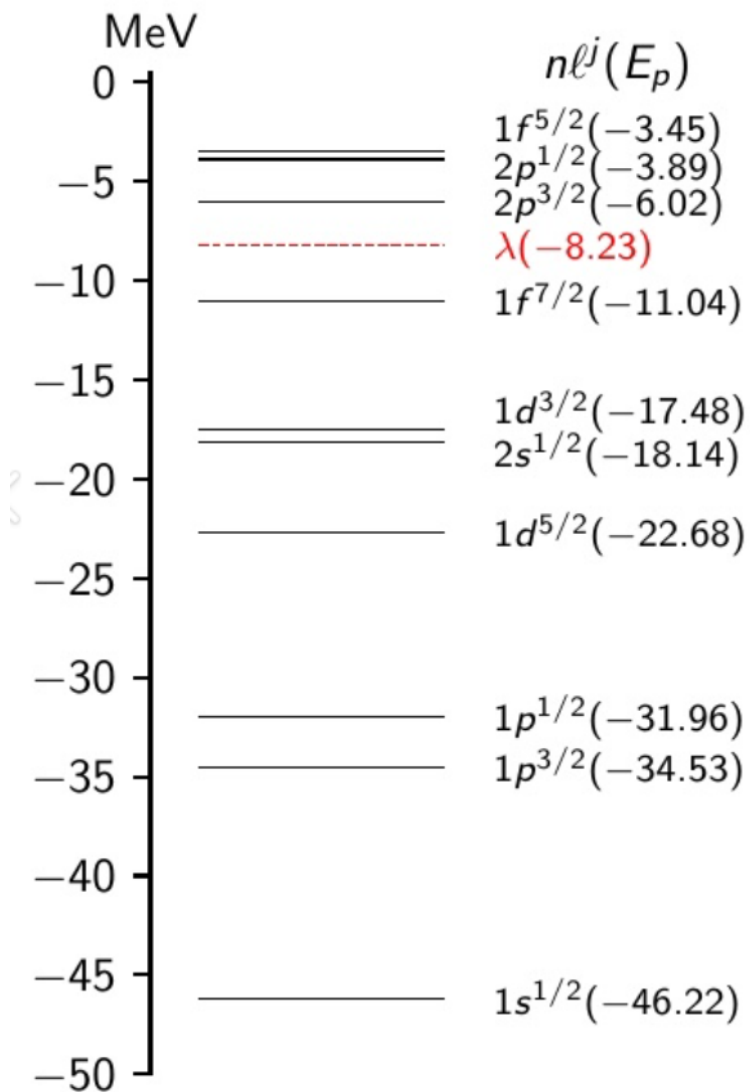
Дополнительные слайды.



Suryanto H., Kambali I. A Novel Method for ^{57}Ni and ^{57}Co Production using Cyclotron-Generated Secondary Neutrons // Atom Indonesia. 2018. V. 44(2), P. 81—87.



Расчёт в методе Хартри-Фока

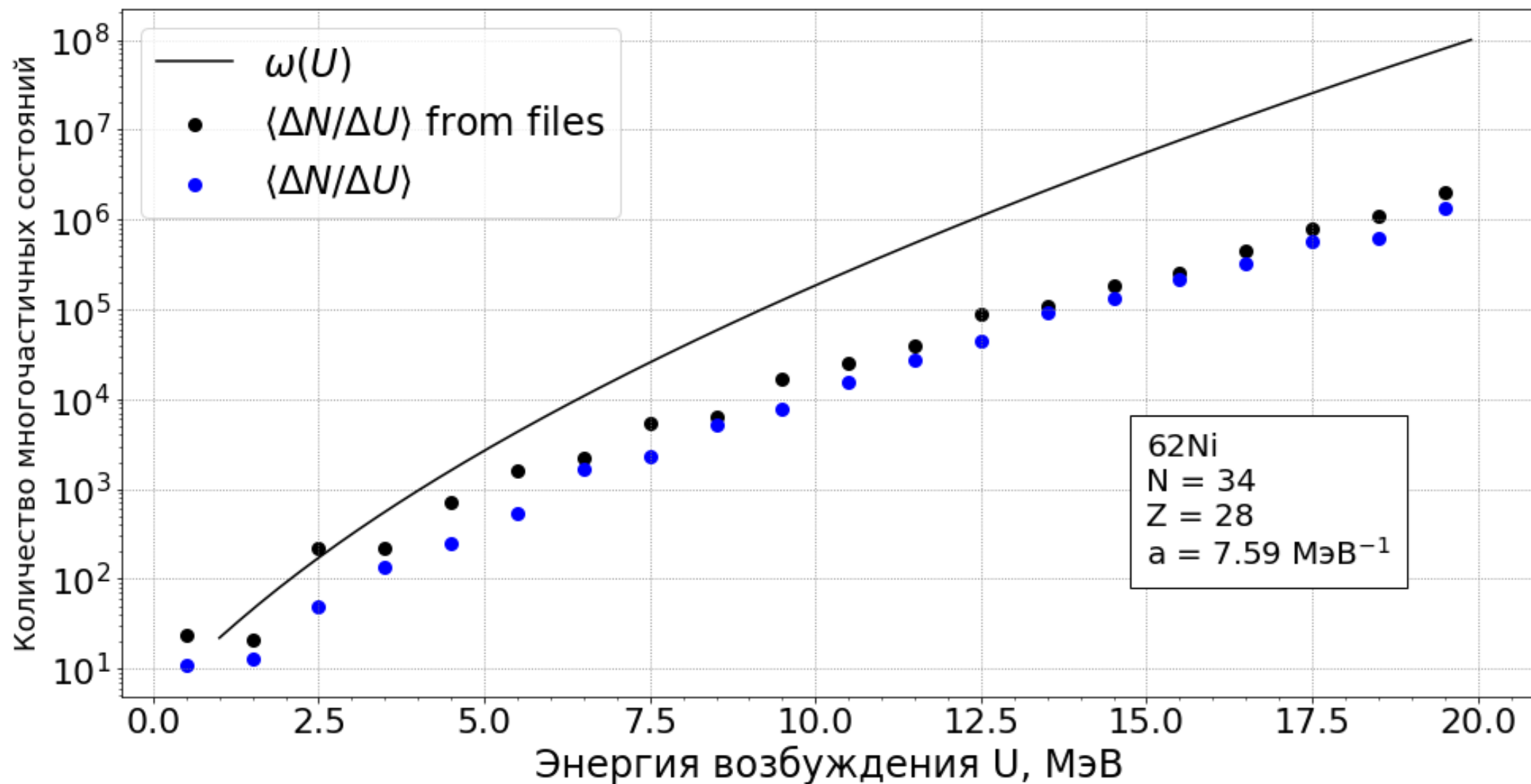


Набор одночастичных состояний зависит от энергии возбуждения ядра

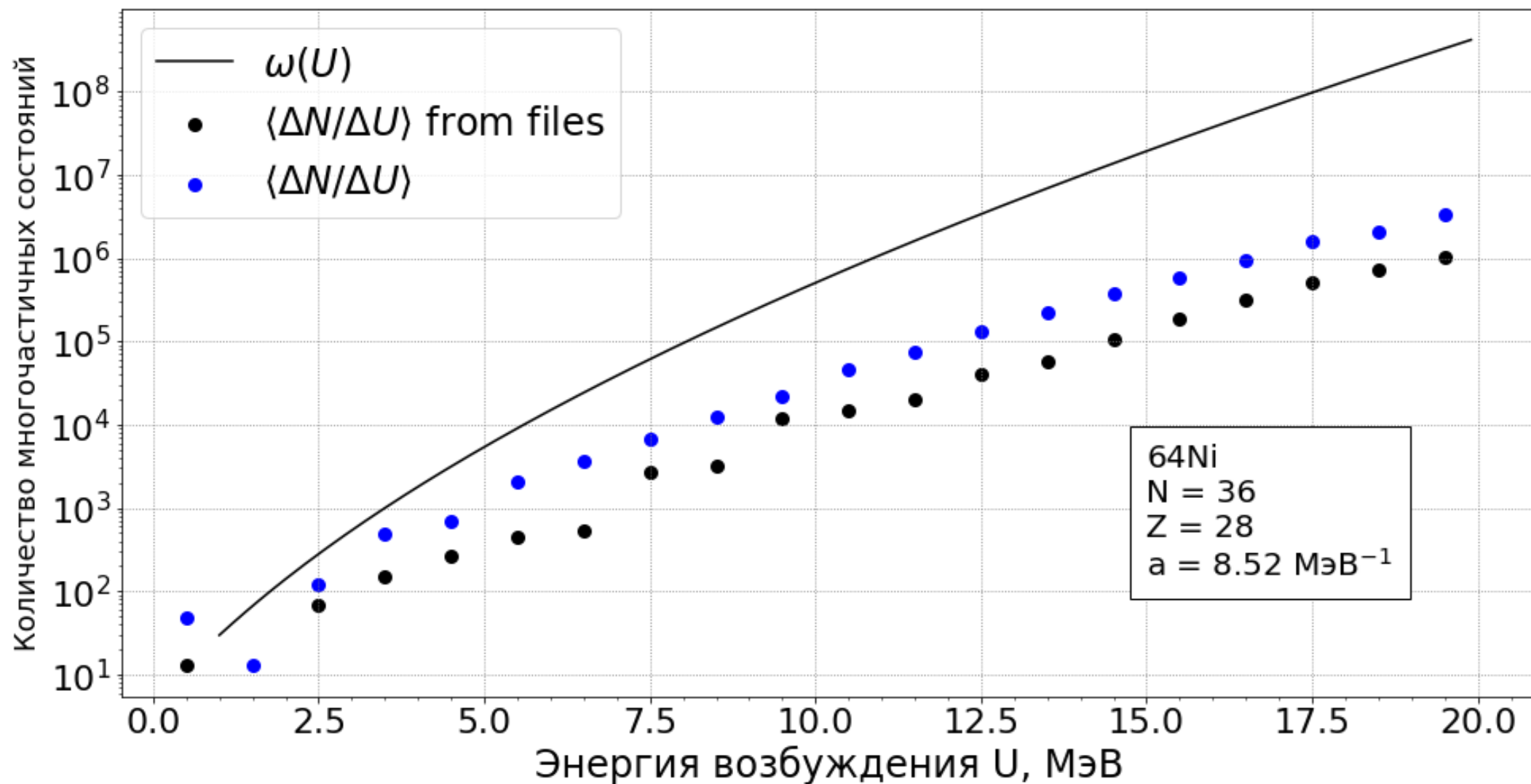
$$\{n, l, j, j_z, \varepsilon\}$$

Уровни
 $\{n, l, j, \varepsilon\}$

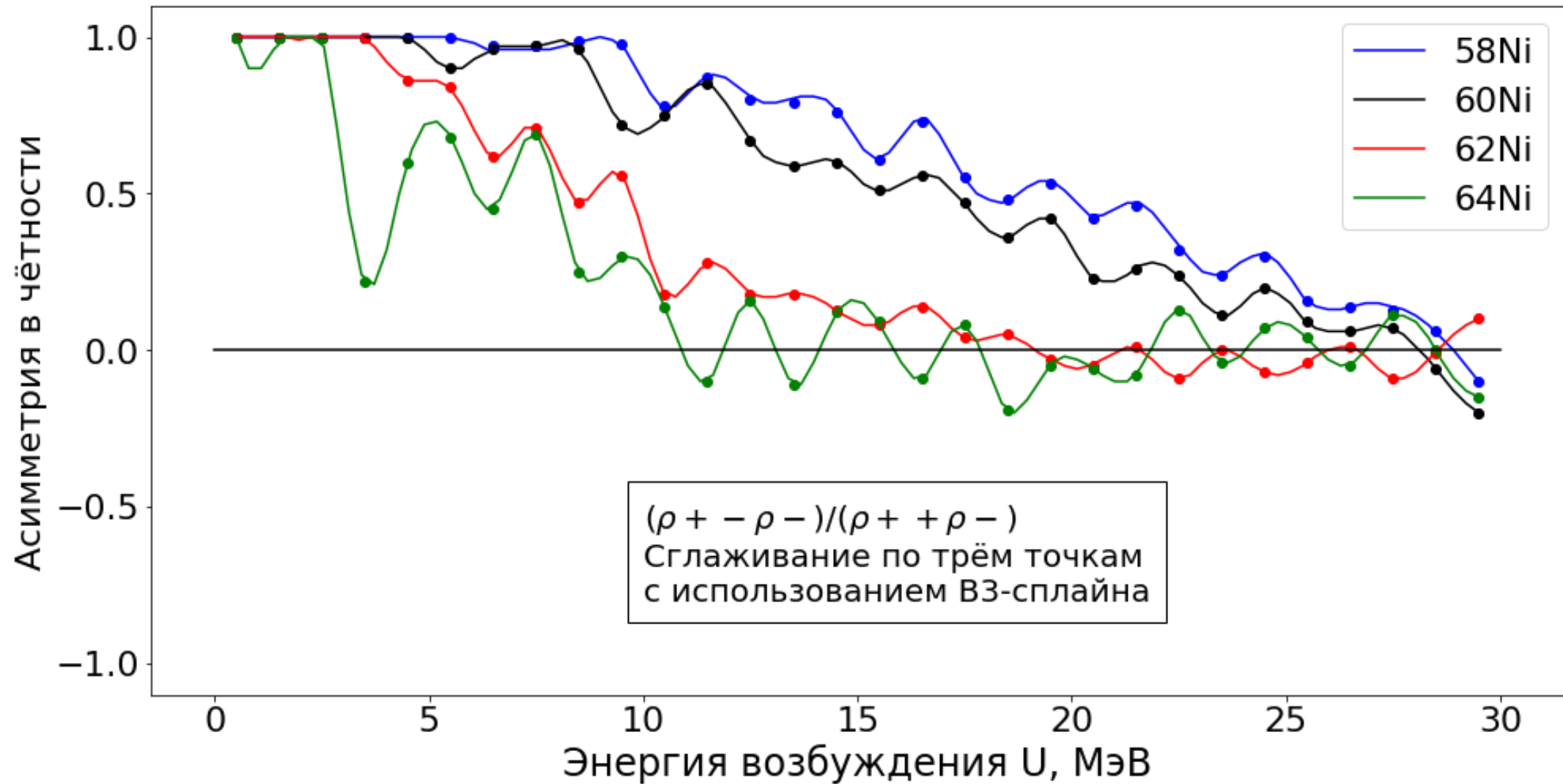
Сравнение моделей. Плотность многочастичных состояний



Сравнение моделей. Плотность многочастичных состояний



Сравнение моделей. Асимметрия в чётности



Асимметрия в чётности

$$\rho(U, I, P) = \frac{\Delta N(P)}{\Delta U \Delta I} \quad \rho(U, P) = \sum_I \rho(U, I, P)$$

$$\rho(U) = \rho(U, P = +1) + \rho(U, P = -1)$$

$$A(U) = \frac{\rho(U, P = -1)}{\rho(U, P = +1)}$$

Асимметрия в чётности цепочки изотопов никеля

