

UNIwersytet Zielonogórski
Wydział Fizyki i Astronomii
Instytut Fizyki

Wyznaczanie mas dla stanów podstawowych ciężkich jąder
atomowych w ramach modelu makroskopowo-mikroskopowego z
wykorzystaniem parametryzacji modified Funny-Hills.

Dawid Haniewicz

Praca inżynierska napisana
pod przewodnictwem: dra Piotra JACHIMOWICZA

Kierunek: **FIZYKA TECHNICZNA**
Specjalność: **FIZYKA MEDYCZNA**

Akceptacja promotora:

Zielona Góra, 2018

Spis treści

1	Wprowadzenie	3
2	Model mikroskopowo-makroskopowy	3
2.1	Część makroskopowa energii	3
2.2	Część mikroskopowa energii	4
2.2.1	Potencjał Woodsa-Saxona	4
2.2.2	Poprawka powłokowa	4
2.2.3	Poprawka pairing	4
3	Parametryzacja kształtu jądra atomowego	5
3.1	Harmoniki sferyczne	5
3.2	Parametryzacja Modify Funny-Hills	7
3.3	Przeliczanie jednego w drugą	8
4	Wyniki	9
4.1	efekt przeliczania u nas	9
4.2	wyniki wyznaczania mas	9
4.2.1	Uran	9
4.2.2	Radon	9
4.2.3	Z=123	9
5	Wnioski	9

1 Wprowadzenie

Właściwy opis struktur i kształtów jąder atomowych jest bardzo ważny. Wiele jąder atomowych, w szczególności tych ciężkich wykazuje deformacje. Są to najczęściej deformacje kwadrupolowe, heksadekapolowe a nawet oktapolowe. Istnieją również możliwości przewidywania kształtów o nieosiowej deformacji kwadrupolowej lecz eksperymentalnie nie są one dobrze sprawdzone.

bla bla bla

2 Model mikroskopowo-makroskopowy

Energia potencjalna (masa) jądra atomowego obliczana jest w ramach podejścia makroskopowo-mikroskopowego. Zgodnie z nim energia (masa) jądra składa się z dwóch części, makroskopowej E_{macr} , zmieniającej się gładko przy przejściu od jądra do jądra, oraz silnie fluktuującej poprawki do części makroskopowej: E_{micr} , ujmującej efekty powłokowe wynikające z kwantowej natury jądra atomowego:

$$E_{\text{mm}}(Z, N, \beta_{\lambda\mu}) = E_{\text{macr}}(Z, N, \beta_{\lambda\mu}) + E_{\text{micr}}(Z, N, \beta_{\lambda\mu}). \quad (2.1)$$

Każda ze wspomnianych części zależna jest od liczby atomowej Z , liczby neutronów N oraz kształtu (deformacji) nuklidu $\beta_{\lambda\mu}$.

2.1 Część makroskopowa energii

Gładka (makroskopowa) część masy jądra wyznaczana jest w ramach modelu kropłowego Yukawa-plus exponential [] mającego w przypadku jąder parzysto-parzystych następującą formę:

$$\begin{aligned} M_{\text{makr}}(Z, N, \beta_{\lambda}^0) = & M_H Z + M_n N - a_V(1 - \kappa_V I^2)A + a_s(1 - \kappa_s I^2)A^{2/3}B_1(\beta_{\lambda}^0) \\ & + a_0 A^0 + c_1 Z^2 A^{-1/3} B_3(\beta_{\lambda}^0) - c_4 Z^{4/3} A^{-1/3} \\ & + f(k_F r_r) Z^2 A^{-1} - c_a(N - Z) - a_{el} Z^{2.39} \end{aligned} \quad (2.2)$$

gdzie M_H to masa atomu wodoru, M_n - masa neutronu, parametr $I = (N - Z)/A$ wyznacza względny nadmiar neutronów nad protonami, natomiast $A = Z + N$ to liczba masowa. Funkcje $B_1(\beta_{\lambda})$ i $B_3(\beta_{\lambda})$ opisują odpowiednio zależność: członu powierzchniowego i członu kulombowskiego od deformacji jądra:

$$B_1 = \frac{A^{-2/3}}{8\pi^2 r_0^2 a^4} \iint_V \left(2 - \frac{r_{12}}{a}\right) \frac{e^{-r_{12}/a}}{r_{12}/a} d^3 r_1 d^3 r_2 \quad (2.3)$$

$$B_3 = \frac{15}{32\pi^2} \frac{A^{-5/3}}{r_0^5} \iint_V \frac{1}{r_{12}} \left[1 - \left(1 + \frac{1}{2} \frac{r_{12}}{a_{den}}\right) e^{-r_{12}/a_{den}}\right] d^3 r_1 d^3 r_2, \quad (2.4)$$

gdzie $r_{12} = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$ jest odległością pomiędzy oddziałującymi elementami objętości wyznaczanymi przez wektory \vec{r}_1 i \vec{r}_2 . Funkcje te dobrane są w taki sposób, że dla kształtu sferycznego i przy założeniu ostrego brzegu powierzchni jądra ($a = 0$ oraz $a_{den} = 0$), są równe 1. Współczynniki c_1 i c_4 pojawiające się we wzorze (2.2) zdefiniowane są w następujący sposób:

$$c_1 = \frac{3}{5} \frac{e^2}{r_0}, \quad c_4 = \frac{5}{4} \left(\frac{3}{2\pi}\right)^{2/3} c_1, \quad (2.5)$$

gdzie e to elementarny ładunek elektryczny a r_0 opisuje promień jądra. Funkcja $f(k_F r_p)$ będąca tzw. czynnikiem postaci zdefiniowana jest jako:

$$f(k_F r_p) = -\frac{1}{8} \frac{e^2 r_p^2}{r_0^3} \left[\frac{145}{48} - \frac{327}{2880} (k_F r_p)^2 + \frac{1527}{1209600} (k_F r_p)^4 \right], \quad (2.6)$$

gdzie k_F to długość wektora falowego Fermiego:

$$k_F = \left(\frac{9\pi Z}{4A} \right)^{1/3} r_0^{-1}, \quad (2.7)$$

natomiast r_p jest średnią kwadratową promienia protonu.

tutaj wypisać pozostałe stałe i podać, że pochodzą od fitu do mas z 2001 r.

=====
Ostatnim terminem w Eq. () opisuje energię wiązania elektronów a $a_V, \kappa_V, a_s, \kappa_s, s_0, c_a$ są parametrami regulującymi. A zatem, tylko dwa z tych parametrów (a_s i κ_s) okazują się być zależnymi od deformacji. Pozostałe cztery parametry pozostają niezależne od kształtu jądra atomowego.

2.2 Część mikroskopowa energii

Mikroskopowa część energii składa się z korekcji powłoki i łączenia części makroskopowej:

$$E_{micr} = E_{sh}^{corr} + E_{pair}^{corr} \quad (2.8)$$

Korekcje te są sumą wkładu neutronów i protonów, policzonych oddzielnie. Dla danego jądra, energia mikroskopowa z pojedynczej cząstki daje wahania energii potencjalnej jako funkcja protonów, Z , neutronów, N oraz deformacji β_λ dookoła gładkiego trendu poprzez makroskopową część.

liczona jest w oparciu o potencjał Woods-Saxona ...

2.2.1 Potencjał Woods-Saxona

W teorii pola potencjałem Woods-Saxona opisujemy potencjał nukleonów (protonów i neutronów) wewnątrz jądra atomowego. Wykorzystuje się go do opisanego w przybliżeniu sił przyłożonych do atomu w modelu powłokowym dla struktury jądra atomowego.

Potencjał w funkcji odległości r od środka atomu przedstawia się następująco:

$$V(r) = -\frac{V_0}{1 + e^{\frac{r-R}{a}}} \quad (2.9)$$

, gdzie V_0 opisuje wielkość potencjału, a jest grubością powierzchni atomu, a $R = r_0 A^{1/3}$ jest promieniem atomu, dla $r_0 = 1.25 fm$ oraz liczby atomowej A .

2.2.2 Poprawka powłokowa

Korekcja powłoki to oscylacje w rozkładzie poziomów pojedynczej cząstki dla średniego rozkładu tych poziomów. Korekcja energii jądra jest różnicą dwoma tymi energiami: jedna kiedy posiada powłokę a druga kiedy jej nie posiada. Możemy zauważyć, że poziomy Fermiego są położone powyżej zamkniętej powłoki, jądra posiada więcej wiązań niż średnia, podczas gdy ma mniej wiązań niż średnia gdy poziom jest niżej.

2.2.3 Poprawka pairing

na początek cztery równania BCS oraz wzór na E_{BCS}

$$E_{BCS} = 2 \sum_{\nu>0} \epsilon_\nu v_\nu^2 - \frac{\Delta^2}{G} - G \sum_{\nu>0} v_\nu^4 \quad (2.10)$$

3 Parametryzacja kształtu jądra atomowego

3.1 Harmoniki sferyczne

Harmoniki sferyczne stanowią podstawę do reprezentowania funkcji na sferze. Są one analogią do sferycznego opisu jednowymiarowego szeregu Fouriera. Harmoniki sferyczne pojawiają się w wielu zagadnieniach fizyki, poczynając od opisu konfiguracji elektronowej w atomie, aż po opis pól magnetycznych i grawitacyjnych planet. Pojawiają się one również w rozwiązaniu równania Schrödingera dla współrzędnych sferycznych. Harmoniki sferyczne są więc często omawiane w podręcznikach z tych dziedzin fizyki [MacRobert and Sneddon, 1967; Tinkham, 2003].

Harmoniki sferyczne mają również bezpośrednie zastosowanie w grafice komputerowej. Transport światła obejmuje wiele wielkości zdefiniowanych w sferycznych i półkulistych domenach, dzięki czemu harmoniki sferyczne stanowią naturalną podstawę do reprezentowania tych funkcji.

Pierwsze efekty zastosować harmonik sferycznych w grafice komputerowej zostały zaprezentowane w pracach Cabrál [1987] i Silliona [1991]. Ostatnio w literaturze graficznej pojawiło się kilka dogłębnych prezentacji [Ramamoorthi, 2002; Green, 2003; Wyman, 2004; Sloan, 2008].

Harmoniczną jest funkcją, która spełnia równanie Laplace'a:

$$\Delta^2 f = 0 \quad (3.1)$$

Jak sama nazwa wskazuje, harmoniki sferyczne są nieskończonym zbiorem funkcji zdefiniowanych w sferze. Wynikają one z rozwiązania części kątowej równania Laplace'a we współrzędnych sferycznych z wykorzystaniem separacji zmiennych. **The spherical harmonic basis functions derived in this fashion take on complex values, but a complementary, strictly real valued, set of harmonics can also be defined.** Ponieważ w grafice komputerowej zazwyczaj spotykamy się tylko z funkcjami o wartościach rzeczywistych, ograniczamy naszą dyskusję do wartości rzeczywistych.

Jeśli reprezentujemy wektor kierunkowy $\vec{\omega}$ używając standardowej parametryzacji sferycznej,

$$\vec{\omega} = (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta) \quad (3.2)$$

wówczas funkcje rzeczywiste harmonicznych sferycznych będą zdefiniowane następująco,

$$y_l^m(\theta, \phi) = \begin{cases} \sqrt{2}K_l^m \cos(m\phi)P_l^m(\cos \theta) & \text{if } m > 0, \\ K_l^0 P_l^0(\cos \theta) & \text{if } m = 0, \\ \sqrt{2}K_l^m \sin(-m\phi)P_l^{-m}(\cos \theta) & \text{if } m < 0, \end{cases} \quad (3.3)$$

gdzie K_l^m jest stałą normalizacyjną

$$K_l^m = \sqrt{\frac{(2l+1)}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} \quad (3.4)$$

a P_l^m są powiązanymi wielomianami Legendre'a. Istnieje wiele możliwości zdefiniowania wielomianów Legendre'a lecz najbardziej numerycznym sposobem jest użycie relacji cyklicznych [Press, 1992]:

$$P_0^0(z) = 1, \quad (3.5)$$

$$P_m^m(z) = (2m-1)!!(1-z^2)^{m/2}, \quad (3.6)$$

$$P_{m+1}^m(z) = z(2m+1)!!P_m^m(z), \quad (3.7)$$

$$P_l^m(z) = \frac{z(2l-1)}{l-m}P_{l-1}^m(z) - \frac{(l+m-1)}{l-m}P_{l-2}^m(z) \quad (3.8)$$

Funkcje podstawowe są indeksowane według dwóch stałych podstawowych, rząd l , oraz stopień m^2 . Spełniają one ograniczenie, że $l \in \mathbb{N}$ oraz $-l \leq m \leq l$; stąd istnieją funkcje podstawowe $2l + 1$ rzędu l .

Rząd l określa również częstotliwość funkcji podstawowych w sferze. Harmoniki sferyczne mogą być też przedstawione jako funkcje trygonometryczne we współrzędnych sferycznych θ i ϕ oraz we współrzędnych kartezjańskich x , y i z . Używając reprezentacji kartezjańskiej, każde y_l^m dla stałej l odpowiada wielomianowi o maksymalnym rzędzie l dla x , y i z .

Kilka pierwszych harmonik sferycznych, zarówno w reprezentacji sferycznej jak i kartezjańskiej prezentują się następująco:

		Sferyczne	Kartezjańskie
$l = 0$	$y_0^0(\theta, \phi) =$	$\sqrt{\frac{1}{4\pi}}$	$\sqrt{\frac{1}{4\pi}},$
$l = 1$	$y_1^{-1}(\theta, \phi) =$	$\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin \phi \sin \theta$	$\sqrt{\frac{3}{4\pi}} x,$
	$y_1^0(\theta, \phi) =$	$\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$	$\sqrt{\frac{3}{4\pi}} z,$
	$y_1^1(\theta, \phi) =$	$\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \phi \sin \theta$	$\sqrt{\frac{3}{4\pi}} y,$
	$y_2^{-2}(\theta, \phi) =$	$\sqrt{\frac{15}{4\pi}} \sin \phi \cos \phi \sin^2 \theta$	$\sqrt{\frac{15}{4\pi}} xy,$
$l = 2$	$y_2^{-1}(\theta, \phi) =$	$\sqrt{\frac{15}{4\pi}} \sin \phi \sin \theta \cos \theta$	$\sqrt{\frac{15}{4\pi}} yz,$
	$y_2^0(\theta, \phi) =$	$\sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1)$	$\sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3z^2 - 1),$
	$y_2^1(\theta, \phi) =$	$\sqrt{\frac{15}{4\pi}} \cos \phi \sin \theta \cos \theta$	$\sqrt{\frac{15}{8\pi}} xz,$
	$y_2^2(\theta, \phi) =$	$\sqrt{\frac{15}{16\pi}} (\cos^2 \phi - \sin^2 \phi) \sin^2 \theta$	$\sqrt{\frac{15}{32\pi}} (x^2 - y^2).$

Harmoniki przedstawione na rysunkach poniżej.

Harmoniki sferyczne definiują **complete basis** na sferze. Zatem dowolna funkcja sferyczna o wartościach rzeczywistych f może być rozszerzona jako liniowa kombinacja funkcji bazowych:

$$f(\vec{\omega}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l y_l^m(\vec{\omega}) f_l^m \quad (3.9)$$

gdzie współczynnik f jest obliczony przez rzutowanie f funkcję podstawową y_l^m :

$$f_l^m = \int_{\Omega_{4\pi}} y_l^m(\vec{\omega}) f(\vec{\omega}) d\vec{\omega} \quad (3.10)$$

Podobnie jak w przypadku szeregu Fouriera, rozszerzenie to jest prawdziwe, kiedy l dąży do nieskończoności, wymaga to jednak nieskończonej liczby współczynników. Ograniczając liczbę pasm do $l = n - 1$, zachowujemy tylko częstotliwość funkcji do pewnego momentu, uzyskując przybliżone pasma funkcji f

n-tego rzędu pierwotnej funkcji f :

$$\tilde{f}(\vec{\omega}) = \sum_{l=0}^{n-1} \sum_{m=-l}^l y_l^m(\vec{\omega}) f_l^m \quad (3.11)$$

Funkcje niskiej częstotliwości mogą być dobrze aproksymowane za pomocą tylko kilku pasm, a wraz ze wzrostem liczby współczynników, sygnały o wyższej częstotliwości mogą przybliżane dokładniej.

Często wygodnie jest przeformułować schemat indeksowania tak aby wykorzystywał pojedynczy parametr $i = l(l+1) + m$. Przy tej konwencji łatwo zauważyć, że przybliżenie n-tego rzędu może zostać zrekonstruowane przy użyciu n^2 współczynników.

zrobić rysunekzki z przykładowymi kształtami itp ..

3.2 Parametryzacja Modify Funny-Hills

Parametryzacja Funny-Hills jest sposobem na zmniejszenie liczby współrzędnych, co znacznie upraszcza obliczenia dynamiczne i jest to powód, dla którego łatwiej jest z niej korzystać niż zużycia harmonik sferycznych do opisu bardzo zdeformowanych kształtów.

Zgodnie z tą ideą kształt rozszczepialnego jądra przedstawiliśmy za pomocą wielomianu Lagrange'a P_n :

$$\tilde{\rho}_s^2(z) = R_0^2 \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n P_n \left(\frac{z - z_{sh}}{z_0} \right), \quad (3.12)$$

gdzie $\tilde{\rho}_s(z)$ jest odległością od symetrii osi z do powierzchni jądra. Lewa i prawa strona jądra znajduje się w punkcie $z_{sh} - z_0$ oraz $z_0 + z_{sh}$ co prowadzi do następujących zależności między współczynnikiem rozszerzalności α_n :

$$\alpha_0 = - \sum_{n=2,4}^{\infty} \alpha_n, \quad \alpha_1 = - \sum_{n=3,5}^{\infty} \alpha_n. \quad (3.13)$$

Przesunięcie z_{sh} współrzędnej z , która pojawia się w równaniu 3.12 określa, że centrum masy jądra znajduje się w $z = 0$ i jest zadane równaniem:

$$z_{sh} = - \frac{1}{3} \frac{\alpha_1}{\alpha_0} z_0 = - \frac{2}{9} \frac{\alpha_1}{\alpha_0^2} R_0. \quad (3.14)$$

R_0 w równaniu 3.12 jest parametrem promienia odpowiadającego sferycznemu jądru o tej samej objętości. Forma ta odpowiada $\alpha_0 = -\alpha_2 = \frac{2}{3}$. Spłaszczony kształt uzyskujemy przy $\alpha_2 < -\frac{2}{3}$ a wydłużony przy $-\frac{2}{3} < \alpha_2 < 0$. Dla α_2 dążącego do zera, jądro staje się nieskończenie długie. Zachowanie objętości skutkuje więc:

$$z_0 = \frac{2}{3} \frac{R_0}{\alpha_0}, \quad (3.15)$$

gdzie z_0 jest połową odległości od zdeformowanego jądra. Należy zauważyć, że parametr wydłużenia c jest równy połowie długości jądra w jednostkach R_0 :

$$c = \frac{z_0}{R_0} = \frac{2}{3\alpha_0}. \quad (3.16)$$

Parametryzacja 3.12 jest bardzo ogólna, ponieważ dowolny kształt zdeformowanego jądra może być łatwo rozszerzony w szereg wielomianów Lagrange'a. Dla $\lambda \leq 4$ równanie 3.12 jest równoznaczne z definicją Funny-Hills

$$\tilde{\rho}_s^2(z) = R_0^2 c^2 (1 - u^2) (A + \alpha u + B u^2), \quad (3.17)$$

dla wartości pozytywnych parametru B (tzw. szyjki), natomiast dla $B < 0$ jądro w kształcie diamentu jest opisane

$$\tilde{\rho}_s^2(z) = R_0^2 c^2 (1 - u^2) (A + \alpha u) e^{(B c^3 u^2)}, \quad (3.18)$$

gdzie znów $u = z - z_{sh}/z_0$.

Problem, który pojawia się w parametryzacjach (3.12) oraz (3.17)-(3.18) polega na tym, że w niektórych kombinacjach parametrów odkształcenia pojawiają się dodatkowe **roots** między wierzchołkami ($u = \pm 1$) to znaczy dla niektórych regionów wartości z , pierwiastek odległości $\tilde{\rho}_s^2(z)$ jest ujemny, co jest oczywiście niefizyczne.

Powyższe rozważania i staranne badania powierzchni potencjału energetycznego **liquid-drop** w jądrach z różnych regionów masowych doprowadziły nas do zaproponowania następującej parametryzacji:

$$\tilde{\rho}_s^2(z) = \frac{R_0^2}{cf(a, B)}(1 - u^2)(1 + \alpha u - Be^{-a^2 u^2}) \quad (3.19)$$

gdzie u i z_0 są zdefiniowane tak jak wcześniej a funkcja

$$f(a, B) = 1 - \frac{3B}{4a^2} \left[e^{-a^2} + \sqrt{\pi} \left(a - \frac{1}{2a} \right) \text{Erf}(a) \right] \quad (3.20)$$

zapewnia normalizację objętości zdeformowanego kształtu. Kształt zdefiniowany w ten sposób jest całkowicie wolny od niepotrzebnych zer w przedziale $u \in (-1, 1)$ i poprawnie opisuje diamentopodobne jak i "szyjkowe" kształty.

Znaczenie parametrów deformacji w równaniu 3.19 ma podobne znaczenie co w parametryzacji Funny-Hill: c opisuje wydłużenie kształtu, B formowanie "szyjki", z kolei α odpowiada za **left-right assymetry**. Szerokość "szyjki" a jest tutaj stała ponieważ dla małych wartości bezwzględnych B , kształt jądra jest praktycznie niezależny od a . Minimalizację energii włoż ścieżek rozszczepienia daje parametr $a = 1$, ale ta wartość nie jest kluczowa. Podobne wartości energii dla stałych wydłużeń c (lecz dla różnych wartości B) uzyskuje się dla $0.8 \leq a \leq 2$.

W związku z tym, wygodniej jest wprowadzić parametr szyjki h , który jest niczym innym jak kombinacją liniową parametrów c i B

$$h = B - (c - 1) \quad (3.21)$$

Linia $h = 0$ w płaszczyźnie deformacji (c, h) średniej ścieżce **liquid drop** do rozszczepienia. Oczywiście nasze parametry B i h nie odpowiadają dokładnie tym z parametryzacji Funny-Hill ale mają podobne znaczenie.

Parametr z_{sh} , który jest związany z centrum masy jest uzyskiwany z warunku ośrodka masowego:

$$z_{sh} = -\frac{4}{15}\alpha \frac{z_0}{f(a, B)}. \quad (3.22)$$

Punkt rozszczepienia $z_{sc} = 0$ jest osiągany przy $B = 0$ dla kształtów symetrycznych ($\alpha = 0$) oraz

$$B \approx 1 - \frac{\alpha^2}{4a^2} \quad \text{at} \quad u_{sc} \approx \frac{-\alpha}{2B_{sc}} \quad (3.23)$$

przy uwzględnieniu asymetrycznych kształtów $\alpha \neq 0$.

Niestety wydłużenie, asymetria masowa i parametry szyi nie są wystarczające, aby opisać całą rodzinę kształtów pojawiających się w procesie rozszczepienia. Wokół pierwszej bariery rozszczepienia niektóre jądra wolą kształty niosiowe. Nieosiowość staje się jeszcze bardziej prawdopodobna, gdy uwzględni się rotację jądrową.

zrobić rysunekzki z przykładowymi kształtami itp ...

3.3 Przeliczanie jednego w drugą

Wziąć z pracy Mollera ze str 4 (rozdział Multipole expansion) - to jest metoda za pomocą całki napisać, że można też to zrobić metodą najmniejszych kwadratów

4 Wyniki

4.1 efekt przeliczania u nas

pokazanie nałożonych kształtów w 2 parametryzacjach

4.2 wyniki wyznaczania mas

opisać jaka była siatka w funny w ramach której poszukiwano mas
ogarnięto tak 3 kolejne jądra dla których szczegółowe wyniki są poniżej

4.2.1 Uran

mapki i porównanie z exp ..

4.2.2 Radon

mapki i porównanie z exp ..

4.2.3 $Z=123$

mapki i porównanie z exp ..

5 Wnioski

że 0.5 MeV różnicy względem exp to na prawdę dobry wynik
funny i harmoniki dają to samo, więc funny jest ok