# Activitat de Divulgació: Nuclis Líquids

El Model Nuclear de Gota Líquida

Contacte:

Arnau Rios Huguet, arnau.rios@icc.ub.edu



# Institut de Ciències del Cosmos UNIVERSITAT DE BARCELONA



Grup de Física Hadrònica, Nuclear i Atòmica



@HadNucAtUB

Iniciativa Binding Blocks



@BINDINGBLOCKS

Activitat originalment concebuda per les Universitats de York i de Surrey











## 1 Introducció

Aquesta activitat de divulgació científica *online* està dirigida a estudiants d'últims anys de Secundària o de Batxillerat. L'activitat té com a objectius:

- 1. Introduir el concepte d'energia d'enllaç.
- 2. Fer veure la varietat de nuclis atòmics en funció del nombre de protons i neutrons.
- 3. Presentar un model matemàtic per l'energia d'enllaç, i explicar l'origen dels diferents termes que conté.
- 4. Desenvolupar coneixements computacionals per predir propietats físiques del nucli atòmic a partir de models teòrics o fórmules matemàtiques.

L'activitat original va ser concebuda dins de la iniciativa Binding Blocks [1] a la Universitats de York, amb la col·laboració d'investigadors de la Universitat de Surrey. Aquesta activitat és part d'una sèrie de treballs de divulgació relacionats amb l'energia d'enllaç, i en trobareu una descripció detallada de l'activitat (en anglès) a l'article [5]. L'activitat té una continuació natural en una sèries d'activitats relacionades amb estrelles de neutrons, que presentem a l'article [6] i que esperem traduir al català aviat.

Una motivació essencial per desenvolupar aquestes activitats és fer divulgació científica de qualitat en el camp de la Física Nuclear. Amb aquest treball, volem suplir la mancança d'activitats en aquest camp a nivell nacional. Aquesta activitat pilot vol ser un vehicle inicial per generar interès en la nostra disciplina. La Física Nuclear té aplicacions molt diverses - des de la generació d'energia, fins a la física mèdica, i és necessària per entendre l'estructura i l'evolució de les estrelles. La Física Nuclear és un camp de recerca viu, estimulant i dinàmic, tant a nivell experimental com a nivell teòric.

L'objectiu principal d'aquesta activitat és fer conèixer aquesta disciplina de manera amena, però també rigorosa. Us animem, doncs, a investigar el concepte d'energia d'enllaç a través d'un model matemàtic senzill i una sèrie d'activitats *online* que us permetran familiaritzar-vos, també, amb els límits de l'estabilitat nuclear i altres conceptes importants en la Física Nuclear.

# 2 Nuclis líquids

### 2.1 Nuclis i isòtops

El nucli atòmic és un sistema físic microscòpic, amb un diàmetre aproximat d'uns  $10^{-15}$  metres. Al centre de cada àtom, els nuclis es defineixen pel nombre i tipus de partícules que contenen. Els constituents del nucli atòmic són els Z protons i N neutrons que formen cada isòtop amb nombre de massa A = N + Z. En la nomenclatura nuclear, els isòtops es denoten amb un superíndex corresponent al nombre de nucleons,  ${}^AX$ , seguit del símbol, X, de l'element corresponent. Per exemple, el  ${}^{12}C$  és l'isòtop de Carboni (Z = 6) amb A = 12 partícules i té, per tant, N = A - Z = 6 neutrons. Aquest es l'isòtop més abundant de Carboni. En canvi, el  ${}^{235}U$  és un isòtop d'Urani (Z = 92) molt poc abundant, amb N = A - Z = 143 neutrons, que es fa servir com a combustible en centrals nuclears.

La part superior de la Figura 1 mostra com funciona aquesta nomenclatura. A la part inferior de la mateixa Figura, hi trobareu una secció del mapa de Segrè (o mapa nuclear) corresponent als isòtops de carboni, nitrogen i oxigen. Al mapa nuclear, s'hi representen, amb requadres, tots els isòtops coneguts element per element. Cada fila representa un element diferent (un valor diferent de Z). A la Figura 1, el color de cada isòtop en representa la vida mitjana. Els isòtops de l'oxigen i









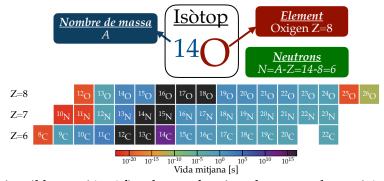


Figura 1: Part superior: il·lustració gràfica de com funciona la nomenclatura isòtopica. Part inferior: secció de la taula de Segrè corresponent a Z = 6,7 i 8. Els colors denoten la vida mitjana de cada isòtop.

carboni que formen el vostre cos són estables (colors foscos). Augmentant o disminuint el nombre de neutrons respecte a la configuració estable obtenim isòtops que esdevenen menys i menys estables. Avui en dia, els físics nuclears, amb una sèrie d'experiments enginyosos, han aconseguit generar i detectar vora 3400 isòtops [7, 3].

A priori, un podria pensar que per entendre les propietats de tots aquests isòtops ens caldria conèixer amb detall la interacció forta que lliga el nucli. La interacció forta és, com la interacció gravitatòria, l'electromagnètica o la feble, una de les 4 interacciones fonamentals de la matèria. Els neutrons i protons dins de cada isòtop (que anomenen col·lectivament nucleons) senten aquesta força forta i es mantenen lligats. Sorprenentment, però, no ens cal conèixer tots els detalls d'aquestes interaccions per poder predir les propietats de la majoria dels isòtops coneguts. A efectes pràctics, n'hi ha prou amb considerar que el nucli es una gota microscòpica, formada per un fluid nuclear incompressible amb una superfície ben definida. Aquest **Model de Gota Líquida** (MGL), com expliquem a continuació, ens permet predir les propietats essencials del nucli atòmic.

#### 2.2 Energia d'enllaç

La quantitat fonamental que descriu el MGL és l'**energia d'enllaç**. L'energia d'enllaç es defineix com l'energia necessària per a separar qualsevol sistema compost en els seus constituents individuals. El concepte d'energia d'enllaç es comú en diferents branques de la ciència - des de la química d'àtoms i molècules, fins a l'astrofísica de sistemes gravitacionals. L'energia d'enllaç, *BE*, d'un isòtop qualsevol es defineix com

$$BE = Nm_{n}c^{2} + Zm_{v}c^{2} - M_{N,Z}c^{2}$$
 (1)

on  $m_nc^2 = 939.565\,\mathrm{MeV^1}\,\mathrm{i}\,m_pc^2 = 938.272\,\mathrm{MeV}$  representen la massa-energia en repòs del neutró i del protó, mentre que  $M_{N,Z}c^2$  és la massa-energia en repòs de l'isòtop corresponent. L'energia d'enllaç per particula típica d'un nucli és de l'ordre  $BE/A \approx 8\,\mathrm{MeV}$ . Fent servir tècniques experimentals avançades, avui en dia es poden mesurar les energies d'enllaç dels nuclis amb una gran precisió. Per exemple, la base de dades més moderna (AME2016) conté més de 2400 energies d'enllaç per partícula mesurades amb una precisió de més d'un 0.005% [8].









Coeficients [MeV]				
$a_V$	$a_S$	$a_C$	$a_A$	$a_P$
15.8	18.3	0.714	23.2	12.0

Taula 1: Coeficients de la fórmula de masses basada en el Model de Gota Líquida, Eq. (2), obtinguts a la Referència [9].

# 2.3 El Model de Gota Líquida

El MGL permet trobar una expressió matemàtica senzilla que prediu les energies d'enllaç de qualsevol isòtop [2]. Si suposem que el nucli és una gota incompressible formada per *N* neutrons i *Z* protons amb una superfície molt ben definida, l'energia d'enllaç sorgeix de sumar els següents 5 termes:

$$\frac{BE}{A} = a_V - \frac{a_S}{A^{1/3}} - a_C \frac{Z^2}{A^{4/3}} - a_A \frac{(N-Z)^2}{A^2} + a_P \frac{\delta_{N,Z}}{A}.$$
 (2)

Els coeficients multiplicatius de cada terme,  $a_X$ , són constants que donem a la Taula 1, i que hem tret de la Referència [9]. Si hi teniu interès, la referència [4] aprofundeix en com s'obtenen habitualment aquestes constants a partir de les dades experimentals. La funció

$$\delta_{N,Z} = \begin{cases} A^{-1/2}, & N \text{ és parell i } Z \text{ és parell,} \\ -A^{-1/2}, & N \text{ és senar i } Z \text{ és senar,} \\ 0, & \text{en qualsevol altre cas,} \end{cases}$$
 (3)

apreix a l'últim terme.

El significat físic dels 5 termes que contribueixen a l'energia és relativament fàcil d'entendre. A continuació els describim un a un, però us animem també a veure l'explicació al vídeo introductori d'aquesta activitat,

http://www.ub.edu/laubdivulga/festacienciaub/festacienciaVII/bocins-NuclisLiquids.html. La Figura 2 resumeix gràficament els 5 termes següents:

- Terme de volum (coeficient  $a_V$ ): la interacció nuclear forta és de molt curt abast i, en conseqüència, només els nucleons que són molt a prop els uns dels altres poden contribuir a l'energia d'enllaç. En aquest terme, cada nucleó contribueix una quantitat  $a_V$  a l'energia d'enllaç.
- Terme de superfície (coeficient  $a_S$ ): el nucli té una superfície molt pronunciada. En comparació amb els nucleons a l'interior del nucli, els nucleons a prop de la superfície no interaccionen amb tantes partícules i per tant aporten menys energia d'enllaç. Aquesta diferència es pot incorporar matemàticament com a un terme equivalent a la tensió superficial d'un líquid, que fa disminuir l'energia d'enllaç (signe negatiu) i creix aproximadament amb l'àrea de la superfície nuclear,  $A^{2/3}/A \approx A^{-1/3}$ .
- Terme de Coulomb (coeffcient  $a_C$ ): els protons dins del nucli es repel·leixen els uns als altres a través de la interacció de Coulomb. Com més protons hi ha en un nucli, major és la repulsió electromagnètica i menor l'energia d'enllaç. Aquesta contribució negativa és proporcional al quadrat del nombre de protons,  $Z^2$ .

 $<sup>^{1}</sup>$ En física nuclear, es fan servir unitat de mega-electronvolts (MeV) en comptes de Joules (J). La conversió entre unes i altres és 1 J=6.242  $\times$  10 $^{12}$  MeV.









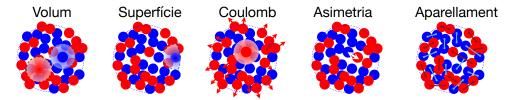


Figura 2: Il·lustració gràfica dels diferents termes de la fórmula de MGL, Eq. (2).

- Terme d'asimetria (coeficient  $a_A$ ): aquest terme està relacionat amb el principi de Pauli. Dos nucleons no poden ocupar el mateix estat quàntic. Si la diferènca entre protons i neutrons augmenta, els neutrons addicionals es veuen obligats a ocupar estats d'energia més alta, fent que el nucli sigui menys estable. Aquest terme penalitza l'asimetria entre neutrons i protons, és a dir, les situacions en què  $N \neq Z$ .
- Terme d'aparellament (coeficient  $a_P$ ): els nucleons dins del nucli voldrien unir-se en parelles amb spins contraris per augmentar l'energia d'enllaç. Aquest mecanisme d'aparellament és semblant al mecanisme que és responsable de la superconductivitat dels electrons. El terme es representa amb una funció  $\delta_{N,Z}$  que aporta més enllaç quan N i Z són tots dos parells.

L'origen dels dos últims termes és purament quàntic i, estrictament parlant, són correccions al model clàssic d'una gota nuclear.

#### 3 Activitat

L'activitat que us proposem està dividida en 3 passos diferents, que us describim a continuació i representem al diagrama de la Figura 3.

#### 3.1 Vídeo

El primer pas es veure el vídeo

http://www.ub.edu/laubdivulga/festacienciaub/festacienciaVII/bocins-NuclisLiquids.html que descriu els 5 termes de la fórmula d'energia d'enllaç del MGL, Eq. (2). El vídeo dura aproximadament 6 minuts i explica de manera visual els diferents termes descrits a la Secció 2.3. El vídeo també serveix com una introducció a l'ús i les aplicacions de la fórmula, que podreu manipular de forma intuitiva amb els fulls de treball virtual de la següent secció.

#### 3.2 Fulls de treball virtual

Després de veure el vídeo, podeu treballar amb els fulls de treball virtuals disponibles a la web https://github.com/arnaurios/Divulgacio\_Outreach/tree/main/Catala. Si cliqueu a la primera icona de Binder (sota el text Enllaç al Binder de l'Activitat 1 - Model de Gota Líquida Troba els Paràmetres), podreu llençar el programa al núvol i fer-lo servir des d'un navegador². Per fer-lo funcionar, un cop carregat el Binder, cal clicar a Kernel > Run All & Restart.

Els full de treball virtual us permetrà explorar individualment les prediccions teòriques del MGL i comparar-les inicialment amb les dades experimentals en el cas de l'oxigen (element amb Z=8). Les tasques del full de treball us permetran entendre els 3 passos fonamentals associats a qualsevol model teòric:

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>Alternativament, podeu descarregar les Jupyter Notebooks corresponents i fer servir els codis localment.











Figura 3: L'activitat està dividida en els següents passos: 1) veure el vídeo a http://www.ub.edu/laubdivulga/festacienciaub/festacienciaVII/bocins-NuclisLiquids.html; 2) manipular els fulls de treball virtuals a https://github.com/arnaurios/Divulgacio\_Outreach/tree/main/Catala; i 3) omplir el questionari final a https://forms.office.com/r/rDDD2RRTik.

- 1. Optimització, per determinar els coeficients de la fórmula de MGL
- 2. Validació per comparar amb les dades experimentals, i
- 3. Predicció per buscar els límits de l'estabilitat nuclear.

#### 3.2.1 Optimització

Les primeres dues tasques 1.a-1.b del full de treball MGL1\_Trobar\_Parametres us demanen optimitzar els paràmetres del MGL. En general, quan s'estableix un model teòric com la fórmula de l'Eq. (2), els coeficients numèrics s'han d'obtenir d'alguna manera. Dit d'una altra manera: el model està fixat per les hipotesis del problema (en aquest cas, que el nucli és una gota líquida) pero els coeficients es determinen mitjançant un altre procediment. Inicialment, els paràmetres  $a_V$  i  $a_A$  són zero, i els podeu determinar seguint protocols molt simples. La tasca és purament visual: no cal saber matemàtiques per fer els ajustos fent servir les Figures 1 i 2 seguint un procediment de prova i error. Assumim que les constants  $a_S$ ,  $a_C$  i  $a_P$  ja són conegudes.

Així doncs, les tasques 1.a-1.b us permeten determinar el coeficient associat al terme de volum,  $a_V$ . Per aquesta primera tasca d'optimització, podeu treballar amb les dades d'un sol isòtop amb amb N = Z, <sup>16</sup>O. Un cop determinada  $a_V$ , la tasca 1.c consisteix en trobar la constant  $a_S$  minimitzant les diferències amb les dades experimentals pels isòtops amb  $N \neq Z$ .

#### 3.2.2 Validació

Despres d'haver optimitzat el model, podeu *validar*-lo comparant les prediccions del model teòric amb les dades experimentals. Els ajustos del model no són mai perfectes del tot, així que és important conèixer la mida i les característiques de les discrepàncies entre models ajustats i dades experimentals. En aquesta activitat, us proposem validar el model analitzant la precisió associada amb el terme d'aparellament, i el seu coeficient corresponent,  $a_P$ . Aquest és l'objectiu de la tasca 1.d del full MGL1\_Trobar\_Parametres. Els canvis en aquest coeficient donen, en general, contribucions petites a l'energia d'enllaç. També podeu intentar minimitzar les diferències amb les dades experimentals en isòtops d'altres elements, i així podreu determinar quina es la precisió típica de les vostres prediccions. En altres paraules, analitzant la qualitat de les vostres prediccions respecte a les dades experimentals, podeu quantificar i validar el MGL de l'Eq. (2).









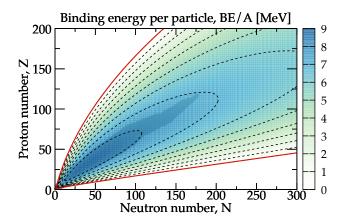


Figura 4: Energia d'enllaç en MeV en funció del nombre de neutrons, N, i del nombre de protons, Z, obtinguda amb el MGL i els paràmetres que determinareu en aquesta activitat. Les línies discontínues corresponen a zones d'energia constants d'entre 1 i 8 MeV. La línea vermella correspon a BE/A = 0. La figura al fons correspon al mapa nuclear obtingut amb els  $\approx 3400$  isòtops coneguts avui en dia [3].

#### 3.2.3 Predicció

La tercera part de l'activitat és al segon full, MGL1\_Predicció i us permet generar, a partir del model, una predicció científica. Per una cadena isotòpica donada (o per un valor fix de Z), incrementar el nombre de neutrons N típicament comporta un decreixement del valor de BE/A. Per un nombre màxim de neutrons,  $N_{\rm max}$  (o un nombre de massa màxim  $A_{\rm max} = Z + N_{\rm max}$ ), l'energia d'enllaç canvia de signe. Una configuració amb energia d'enllaç negativa correspon a un sistema no lligat. En altres paraules, un nucli amb BE/A < 0, d'exisitir, decauria immediatament en tots els seus constituents individuals.

La segona pàgina del full de treball us permet calcular el nombre de massa màxim per als isòtops d'oxigen. Aquesta predicció es basa en el MGL de l'Eq. (2), i depèn dels valors dels coeficients  $a_V$  i  $a_S$  que heu determinat a les tasques 1.a-1.c. A la tasca 2.a, podreu predir quin hauria de ser l'isòtop més pesat de l'oxigen fent servir les constants  $a_V$  i  $a_S$  de la pàgina anterior. Les tasques 2.b-2.c us permeten estudiar el rang d'isòtops permesos si canvieu lleguerament els valors de  $a_V$  i  $a_S$ . En altres paraules, esteu mesruant la sensibilitat de les vostres prediccions segons els valors dels coeficients. Aquests *anàlisis de sensibilitat* són eïnes estàndards en qualsevol procediment estadístic. La Figura 4 mostra les prediccions per l'energia d'enllaç de la fórmula del MGL amb els paràmetres que obteniu en aquesta activitat. Aquesta figura està sobreimposada als 3400 isòtops estables coneguts, i demostra que clarament els isòtops mesurats avui en dia són els més lligats en el sentit que tenen energies d'enllaç d'entre 7 i 8 MeV. A més, els límits d'estabilitat nuclear, representats aquí amb la línia vermella, són molt lluny dels isòtops coneguts: hi ha molt isotòps nous per explorar!

### 3.3 Qüestionari

Un cop heu dut a terme les tasques en el vostre full de treball, podeu acabar l'activitat omplint el qüestionari a la web:

https://forms.office.com/r/rDDD2RRTik

El qüestonari us donarà comentaris a cada resposta i us permetrà evaluar els vostres coneixements nuclears!









#### 4 Material addicional

Aquesta activitat va sorgir de la iniciativa Binding Blocks a la Universitat de York. A la seva web (veieu llista adjunta) hi trobareu informació sobre altres activitats centrades en la Física Nuclear. Si sou professors, podeu també podeu donar-vos alta a la seva newsletter.

- Binding Blocks Collaboration https://www.york.ac.uk/physics/public-and-schools/secondary/binding-blocks/
- 2. The Colourful Nuclide Chart (visualització atractiva de la taula nuclear) https://people.physics.anu.edu.au/~ecs103/chart/
- 3. Discovery of Nuclides Project (web actualitzada amb dades dels últims isòtops descoberts) https://people.nscl.msu.edu/~thoennes/isotopes/
- 4. Live Chart of Nuclides (taula nuclear amb dades nuclear a nivell professional) https://www-nds.iaea.org/relnsd/vcharthtml/VChartHTML.html

Aquesta activitat està organitzada per membres de l'Institut de Ciències del Cosmos. Si creieu que podeu tenir interès en activitats de divulgació de l'Institut, podeu donar-vos d'alta a la llista de correu electrònic aquí: http://icc.ub.edu/press\_media/subscription

# Referències

- [1] C. Diget, A. Pastore, K. Leech, T. Haylett, S. Lock, T. Sanders, M. Shelley, H. V. Willett, J. Keegans, L. Sinclair, and E. C. Simpson. Binding blocks: building the universe one nucleus at a time. *Phys. Educ.*, 52(2):024001, 2017. URL http://stacks.iop.org/0031-9120/52/i=2/a=024001. Preprint disponible aquí: https://arxiv.org/abs/1610.02296.
- [2] P. E. Hodgson, E. Gadioli, and E. Gadioli-Erba. *Introductory Nuclear Physics*. Oxford Univ. Press, 1997. ISBN 0198518978.
- [3] F. Kondev, M. Wang, W. Huang, S. Naimi, and G. Audi. The NUBASE2020 evaluation of nuclear physics properties. *Chinese Phys. C*, 45(3):030001, mar 2021. doi: 10.1088/1674-1137/abddae. URL https://doi.org/10.1088/1674-1137/abddae.
- [4] A. Pastore. An introduction to bootstrap for nuclear physics. *J. Phys. G: Nucl. Part. Phys.*, 46 (5):052001, 2019. doi: 10.1088/1361-6471/ab00ad. URL https://doi.org/10.1088/1361-6471/ab00ad. Preprint disponible aquí: https://arxiv.org/abs/1810.05585.
- [5] A. Pastore, A. M. Romero, C. Diget, A. Rios, K. Leech, and P. Stokoe. From nuclei to neutron stars: simple binding energy computer modelling in the classroom (part 1). *Phys. Educ.*, 56(3): 035012, 2021. URL https://doi.org/10.1088/1361-6552/abe09d. Preprint disponible aquí: https://arxiv.org/abs/2007.06872.
- [6] A. Rios, A. Pastore, C. Diget, A. M. Romero, K. Leech, and P. Stokoe. From nuclei to neutron stars: simple binding energy computer modelling in the classroom (part 2), 2021. URL https://arxiv.org/abs/2104.12449.
- [7] M. Thoennessen and B. Sherrill. From isotopes to the stars. *Nature*, 473(7345):25–26, 2011. doi: 10.1038/473025a. URL https://doi.org/10.1038/473025a.









- [8] M. Wang, G. Audi, F. Kondev, W. Huang, S. Naimi, and X. Xu. The AME2016 atomic mass evaluation (ii). tables, graphs and references. *Chinese Phys. C*, 41(3):030003, 2017. doi: 10.1088/1674-1137/41/3/030003. URL http://nuclearmasses.org/.
- [9] C. F. v. Weizsäcker. Zur Theorie der Kernmassen. Z. Phys., 96(7):431–458, Jul 1935. ISSN 0044-3328. doi: 10.1007/BF01337700. URL https://doi.org/10.1007/BF01337700.