

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
имени М.В.ЛОМОНОСОВА»

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ
КАФЕДРА ОБЩЕЙ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ

МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ
«ВЛИЯНИЕ ТОЧНОСТИ ВХОДНЫХ ПАРАМЕТРОВ
МОДЕЛЕЙ ЯДЕРНЫХ РЕАКЦИЙ НА
ПРЕДСКАЗАННЫЕ ВЫХОДЫ R-ПРОЦЕССА»

Выполнил студент
м213 группы
Негребецкий В.В.

Научный руководитель:
научный сотрудник, кандидат ф.-м. наук
Стопани К.А.

подпись научного руководителя

Допущена к защите:
«___» _____ 2022 года
заведующий кафедрой, профессор
Босс Э.Э.

подпись заведующего кафедрой

Москва
2022

Содержание

Введение	2
1. Теоретические модели в расчетах нуклеосинтеза	6
1.1. Моделирование процессов нуклеосинтеза	6
1.2. Статистическая модель ядерных реакций	6
2. Массы и энергии связи r-изотопов	9
2.1. Макро-микроскопическая модель FRDM2012	9
2.2. Микроскопическая модель HFB-24	13
2.3. Метод локальных массовых соотношений LMR2021	15
2.4. Оценка точности моделей ядерных масс	17
3. Подготовка ядерных данных для расчета r-процесса	20
3.1. Расчет скоростей нейтронного захвата в программе TALYS	20
3.2. Скорости β^- -распадов	25
3.3. Создание библиотек астрофизических скоростей реакций	30
4. Моделирование r-процесса в сценарии слияния нейтронных звезд	33
5. Заключение	34
Список литературы	35

Введение

Образование ядер тяжелых элементов

Нуклеосинтезом называют совокупность протекающих в естественных условиях ядерных процессов, приводящих к образованию атомных ядер. Исследование механизмов нуклеосинтеза является актуальной задачей современной физики, так как они определяют распространенность ядер химических элементов во Вселенной и играют важную роль в астрофизике. Нуклеосинтез сопровождает эволюцию Вселенной с самого ее рождения. В первичном, дозвездном нуклеосинтезе, начавшемся уже в первые секунды после Большого взрыва, стали возникать легчайшие ядра, изотопы водорода и гелия. Наблюдаемое сегодня подавляющее преобладание ядер ^1H и ^4He сложилось именно за счет дозвездного нуклеосинтеза. В звездном нуклеосинтезе, начавшемся приблизительно через 1 млрд лет с появлением первых звезд, в результате стадий термоядерного горения, чередующихся со стадиями гравитационного сжатия, образуются ядра химических элементов вплоть до железа. Термоядерное горение обеспечивает светимость звезды и сдерживает ее сжатие.

Астрофизическим r -процессом, или процессом быстрого нейтронного захвата, называется механизм нуклеосинтеза, в ходе которого исходное ядро поглощает большое число нейтронов и, оказавшись в области нейтронного избытка, испытывает слабые распады. Схематично превращения, происходящие с ядром в r -процессе, показаны на рис. 1. В результате масса ядра увеличивается за счет поглощенных нейтронов, а β^- -распады приводят к образованию химического элемента с большим зарядовым числом. В r -процессе скорости нейтронного захвата на порядки превышают скорости β^- -распадов, что обеспечивает стремительный набор массы и значительное смещение в область нейтронного избытка. Для достижения необходимой интенсивности поглощения нейтронов

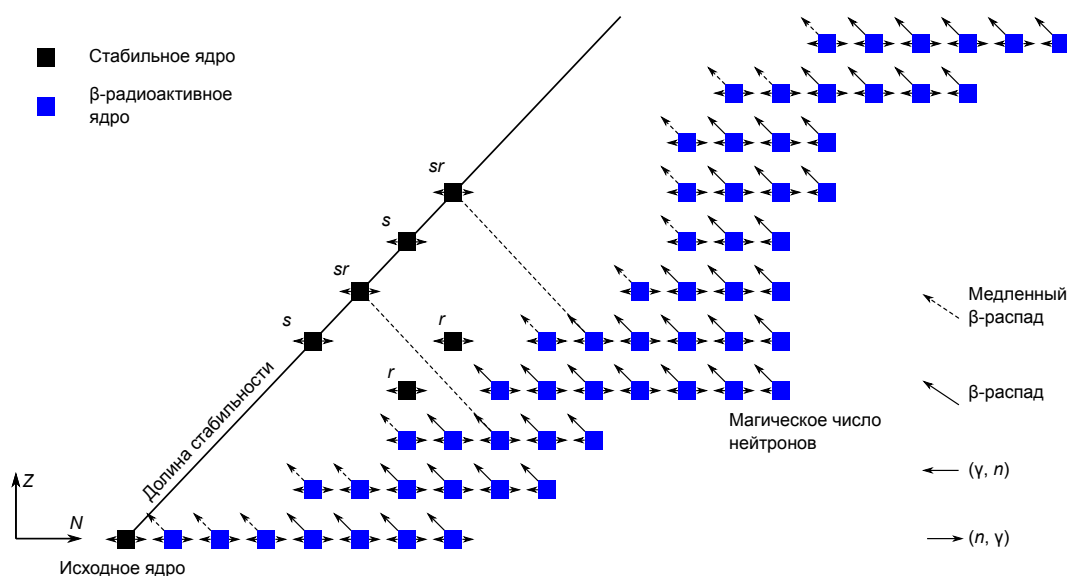


Рис. 1. Схематическое изображение ядерных реакций астрофизического r -процесса.

требуется высокая плотность их потока, около 150 нейтронов на одно зародышевое ядро, и температуры вещества свыше 1 ГК. Подобные условия являются экстремальными даже по меркам астрофизики. Они могут реализовываться лишь в таких катастрофических явлениях, как взрывы сверхновых, слияния двух нейтронных звезд или нейтронной звезды и черной дыры.

По современным представлениям, именно r -процесс обеспечивает возникновение основной массы ядер химических элементов тяжелее железа во Вселенной. Синтез более легких ядер обеспечивается термоядерным горением звездного вещества, но, как известно, им невозможно объяснить возникновение химических элементов за так называемым «железным пиком», максимумом зависимости удельной энергии связи от массового числа. Процесс медленного нейтронного захвата, или s -процесс, отличающийся от r -процесса значительно меньшей интенсивностью поглощения нейтронов и, соответственно, характерными временами порядка сотен лет, требует не столь исключительных астрофизических условий и обеспечивает образование ядер вблизи долины стабильности вплоть до свинца и висмута. Тем не менее s -процессом нельзя объяснить существование более тяжелых ядер, а также нейтроноизбыточных изотопов, слишком удаленных от долины стабильности. Некоторое количество обойденных протоноизбыточных изотопов возникает в p -процессе, механизме взрывного нуклеосинтеза, представляющем собой последовательности фотоядерных реакций и поглощений заряженных частиц. Однако выходы p -процесса малы по сравнению с s - и r -процессами. Кроме того, для синтеза p -изотопов требуется наличие достаточно тяжелых стабильных ядер, достаточное число которых может образоваться только в результате процессов нейтронного захвата.

На рис. 2 представлено массовое распределение ядер химических элементов в Солнечной системе, построенное по данным [34]. Виден избыток легчайших изотопов с $A \leq 4$, родившихся в первичном нуклеосинтезе, за которым сле-

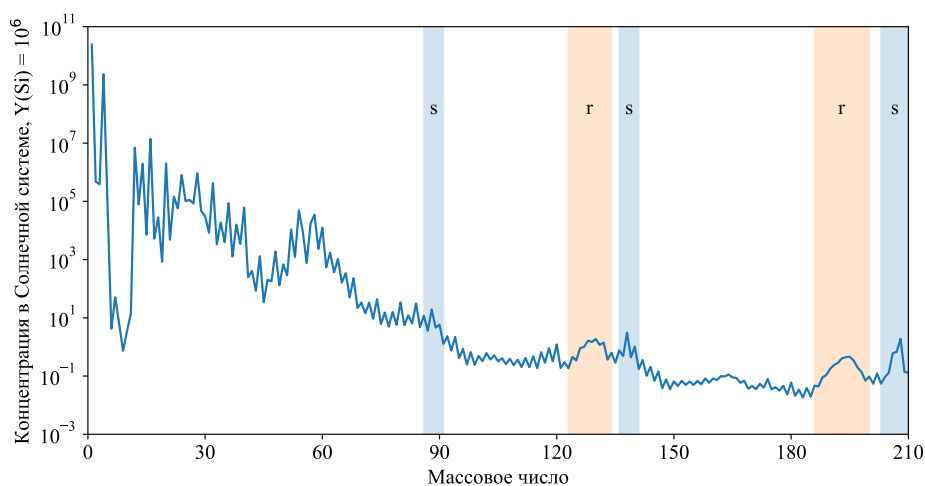


Рис. 2. Массовое распределение ядер в Солнечной системе по данным [34], масса изотопов Si принята равной 10^6 . Оранжевым отмечены пики r -процесса, синим — пики s -процесса (согласно [28]).

дует минимум, соответствующий изотопам Li, Be и B. С массового числа 12 начинается область ядер, рождающихся в основном за счет термоядерного горения звездного вещества, в частности, pp- и CNO-циклов. Видно, что начиная с массовых чисел 54 — 58, соответствующих «железному пику», начинается существенное снижение концентраций изотопов. В области более тяжелых ядер нуклеосинтез целиком обеспечивается s - и r -процессами. На рис. 2 отмечены характерные пики, соответствующие магическим числам нейтронов 50, 82 и 126, что является указанием на высокий вклад процессов нейтронного захвата в нуклеосинтез. Более узкие пики образуются благодаря s -процессу, который протекает вблизи долины стабильности, в то время как r -процесс рождает сверх-нейтроноизбыточные ядра. Для таких экзотических изотопов могут преобладать уже не β^- -распады, протекающие без потери массы, а слабые распады с вылетом нейтронов, что приводит к размыванию и смещению пика r -процесса в область меньших масс.

Подробные обзоры этого важнейшего механизма астрофизического нуклеосинтеза даны в публикациях [1, 2].

Изучение r -процесса

Экстремальные условия протекания r -процесса делают его экспериментальное исследование практически невозможным. Основным источником эмпирических сведений об этом механизме на сегодняшний день являются распространенности ядер химических элементов в Солнечной системе (см. рис. 2). Они известны в основном благодаря исследованиям состава метеоритов-хондритов, сформировавшихся из вещества дозвездного газопылевого облака.

Из-за невозможности воспроизведения условий астрофизического синтеза тяжелых ядер в лаборатории основным методом изучения r -процесса становится компьютерное моделирование. С его помощью стремятся объяснить наблюдаемые распространенности ядер в Солнечной системе. При этом само моделирование r -процесса, сводящееся к решению системы дифференциальных уравнений, сопряжено с рядом трудностей: огромными размерами системы, разбросом значений скоростей реакций, неопределенностью входных параметров.

Входными параметрами симуляции r -процесса являются термодинамические характеристики среды и свойства задействованных в нуклеосинтезе ядер и ядерных реакций. Макроскопические параметры, такие как плотность и температура звездного вещества, в основном известны из астрофизических моделей. Основным сценарием r -процесса, по-видимому, является слияние двух нейтронных звезд. Сопровождающий его выброс нагретого вещества, обогащенного нейтронами, является подходящей средой для образования наиболее тяжелых нерукотворных химических элементов за счет быстрого нейтронного захвата [5]. Термодинамические параметры этого сценария известны в основном благодаря астрофизическим моделям. Примеры таких моделей представлены в работах [6, 7]. В работах [8, 9, 10] помимо результатов астрофизических моделей

слияния нейтронных звезд представлены также результаты моделирования образования ядер в r -процессе.

Большую трудность представляет получение точных ядерных параметров моделирования r -процесса. Как показано на рис. 1, путь r -процесса лежит значительно ниже долины стабильности. Этот механизм нуклеосинтеза задействует экзотические нейтроноизбыточные ядра, экспериментальное изучение которых в лабораторных условиях представляется невозможным. Характеристики r -изотопов и реакций их образования приходится получать при помощи теоретических моделей. При этом различные ядерные модели могут давать существенно разные результаты для экзотических изотопов, например, при расчете энергий связи [35]. Неопределенности энергий связи r -изотопов могут существенно сказываться на результатах расчета r -процесса, на что указывается, например, в работах [32, 4].

Целью настоящей работы является определение чувствительности модели r -процесса к неопределенностям расчета масс нейтроноизбыточных ядер. Для этого нами были рассмотрены результаты трех расчетов масс нейтроноизбыточных ядер, выполненных при помощи различных ядерных моделей. При помощи этих теоретических значений масс были проведены расчеты сечений реакций нейтронного захвата и построены библиотеки астрофизических ядерных реакций, в которых учтено изменение границ области существования ядер в зависимости от используемой массовой модели. Уделено также внимание β^- -распадам, играющим большую роль в r -процессе. Полученные библиотеки реакций использованы при симуляции r -процесса в реалистичном астрофизическом сценарии слияния двух нейтронных звезд. Различия результирующих массовых распределений r -изотопов позволили оценить влияние неопределенностей теоретических значений масс нейтроноизбыточных ядер на моделирование r -процесса.

1. Теоретические модели в расчетах нуклеосинтеза

1.1. Моделирование процессов нуклеосинтеза

В силу недостатка экспериментальных данных основным методом исследования астрофизического нуклеосинтеза является компьютерное моделирование.

Оно состоит в решении системы обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) первого порядка, задающих эволюцию концентраций каждого задействованного в процессе изотопа. Поиск решения существенно затруднен рядом факторов: огромными размерами системы ОДУ, неопределенностью начальных условий, большим разбросом значений скоростей ядерных реакций.

1.2. Статистическая модель ядерных реакций

Для моделирования процессов нуклеосинтеза необходимо знать астрофизические скорости λ всех задействованных ядерных реакций. Скоростью ядерной реакции называют вероятность ее протекания в единицу времени на единицу концентрации каждой исходной частицы. Величина λ напрямую определяется сечением реакции, значения которого в случае астрофизических процессов не могут быть получены экспериментально, поэтому их приходится вычислять с помощью теоретических моделей.

При астрофизических температурах ядерные реакции протекают в основном с образованием составного ядра. Вычисление сечений таких реакций может быть выполнено в рамках статистического подхода. Для расчета сечений и астрофизических скоростей нейтронного захвата в настоящей работе используется статистическая модель Хаузера–Фешбаха [11], реализованная в пакете моделирования ядерных реакций TALYS [29].

1.2.1. Составное ядро

Промежуточное составное ядро образуется в тех случаях, когда время пролета частицы через ядро-мишень оказывается меньше времени протекания реакции. В этом случае энергия поглощенной частицы быстро распределится по объему ядра-мишени, и вероятность того, что какой-то нуклон получить достаточную энергию, чтобы преодолеть нуклон-нуклонное взаимодействие и покинуть ядро, оказывается мала. Образуется квазистационарная промежуточная система — составное ядро, которое существует достаточно долгое время, чтобы его распад никак не зависел от входного канала реакции.

Механизм составного ядра для реакции захвата частицы a ядром A с вылетом из конечного ядра B частицы b можно представить в виде схемы



где α и α' — входной и выходной каналы реакции. К такому типу реакций относится рассматриваемый в настоящей работе астрофизический радиационный захват нейтрона (n, γ).

Для реакции (1) могут быть записаны законы сохранения

$$\begin{aligned} E_a + E_A &= E_C = E_b + E_B && \text{энергии,} \\ I + l + s &= J = I' + l' + s' && \text{углового момента,} \\ \pi_a \pi_A (-1)^l &= \Pi = \pi_b \pi_B (-1)^{l'} && \text{четности,} \end{aligned} \quad (2)$$

где E_k — энергии частиц, I — спин состояния ядра-мишени A , l и s — орбитальный момент и спин налетающей частицы, π_k — четности частиц. Величины J и Π — спин и четность составной системы. Штрихами отмечены угловые моменты, относящиеся к выходному каналу.

1.2.2. Формула Хаузера–Фешбаха

Согласно гипотезе Бора, образование и распад составного ядра являются независимыми процессами:

$$\sigma_{\alpha\alpha'}^C = \sigma_\alpha^C P_{\alpha'} = \sigma_\alpha^C \frac{\Gamma_{\alpha'}}{\Gamma} \quad (3)$$

где σ_α — сечение образования составного ядра во входном канале α , $P_{\alpha'}$ — вероятность распада промежуточной системы по каналу α' , $\Gamma_{\alpha'}$ и Γ — ширина канала α' и полная ширина распада составного ядра.

Величина $\sigma_{\alpha,\alpha'}$ связывает большое число начальных и конечных состояний системы, причем само это состояние в общем случае складывается из гигантского числа узких резонансов. При вычислениях сечений производится усреднение по всем этим состояниям, причем ширины каждого такого состояния T_α связаны с коэффициентами прохождения T_α , которые могут быть рассчитаны из оптической модели.

Из квантовой теории столкновений в общем случае сечение какого-либо канала α, α' реакции может быть записано как

$$\sigma_{\alpha\alpha'} = \pi \frac{1}{k^2} \frac{2J+1}{(2I+1)(2s+1)} |\delta_{\alpha\alpha'} - S_{\alpha\alpha'}|^2, \quad (4)$$

где $S_{\alpha\alpha'}$ — матричный элемент S -матрицы, соответствующий асимптотической амплитуде выходного канала реакции. Среднее значение этой величины напрямую связано с T_α :

$$T_\alpha \equiv 1 - |\bar{S}_{\alpha\alpha}|^2 \quad (5)$$

В окончательной форме формула Хаузера–Фешбаха для реакции составного

ядра может быть записана следующим образом:

$$\begin{aligned}
\sigma_{\alpha\alpha'} = & \pi \frac{1}{k^2} \sum_{J=\text{mod}(I+s,1)}^{l_{\max}+I+s} \sum_{\Pi=-1}^1 \frac{2J+1}{(2I+1)(2s+1)} \\
& \times \sum_{j=|J-I|}^{J+I} \sum_{l=|j-s|}^{j+s} \sum_{j'=|J-I'|}^{J+I'} \sum_{l'=|j-s'|}^{j'+s'} \delta_{\pi}(\alpha) \delta_{\pi}(\alpha') \\
& \times \frac{\langle T_{\alpha l j}^J(E_a) \rangle \langle T_{\alpha' l' j'}^J(E_{a'}) \rangle}{\sum_{\alpha'', l'', j''} \delta_{\pi}(\alpha'') \langle T_{\alpha'' l'' j''}^J(E_{a'') \rangle} W_{\alpha l j \alpha' l' j'}^J}
\end{aligned} \tag{6}$$

Множитель $W_{\alpha l j \alpha' l' j'}^J$, так называемый множитель флуктуаций ширин, отвечает здесь за поправки усреднения состояний, а множители $\delta_{\pi}(\alpha)$, $\delta_{\pi}(\alpha')$ отвечают за сохранение четности:

$$\delta_{\pi}(\alpha) = \begin{cases} 1, & \text{если } \pi_a \pi_A (-1)^l = \Pi \\ 0, & \text{если } \pi_a \pi_A (-1)^l \neq \Pi \end{cases} \tag{7}$$

Таким образом в TALYS вычисление сечений ядерных реакций, протекающих через составное ядро, производится суммированием вкладов всех разрешенных законами сохранения входных и конечных каналов и состояний промежуточного составного ядра.

1.2.3. Интегральная формула скорости реакции

Скорость ядерной реакции λ рассчитывается путем свертки ее сечения с энергетическим распределением взаимодействующих частиц. Энергии нейтронов и ядер в равновесной астрофизической системе имеют распределение Максвелла-Больцмана. Кроме того при астрофизических температурах ядра находятся в возбужденных состояниях, и в условиях термодинамического равновесия заселенность уровней также должна подчиняться статистике Максвелла-Больцмана. Тем самым формула для астрофизической скорости ядерной реакции, являющейся функцией температуры среды T , принимает вид

$$\lambda(T) = \sqrt{\frac{8}{\pi m}} \frac{N_A}{(kT)^{3/2} G(T)} \int_0^{\infty} \sum_{\mu} \frac{(2I^{\mu} + 1)}{(2I^0 + 1)} \sigma^{\mu}(E) E \exp\left(-\frac{E + E_x^{\mu}}{kT}\right) dE, \tag{8}$$

где E_x^{μ} и I^{μ} — энергия и спин возбужденного уровня μ , m — приведенная масса взаимодействующих частиц, k — постоянная Больцмана, N_A — число Авогадро, $G(T)$ — статистическая сумма

$$G(T) = \sum_{\mu} \frac{(2I^{\mu} + 1)}{(2I^0 + 1)} \exp\left(-\frac{E_x^{\mu}}{kT}\right) \tag{9}$$

2. Массы и энергии связи r -изотопов

Массы взаимодействующих и результирующих частиц являются важнейшими параметрами расчета сечений ядерной реакции при помощи статистической модели. При этом, как видно из работы [35], предсказания масс экзотических изотопов при помощи различных ядерных моделей существенно различаются между собой. Важно исследовать влияние этих неопределенностей на расчеты сечений астрофизических ядерных реакций и на результаты моделирования r -процесса. Для этого мы рассмотрим три модели, позволяющие рассчитывать массы ядер и использующие разные подходы.

По методу описания ядерной материи теоретические модели делятся на коллективные, или макроскопические, и микроскопические. Коллективный подход, к которому относится, например, известная формула Вайцеккера, рассматривает ядро как единое целое, например, как каплю несжимаемой жидкости. В его пользу свидетельствуют деформации ядер, колебательные и вращательные полосы в спектрах. При необходимости описать более тонкие одночастичные эффекты прибегают к микроскопическим моделям, а также коллективным моделям с микроскопическими поправками. Микроскопические модели зачастую основаны на принципе эффективного потенциала, сводящем задачу взаимодействия многих тел к задаче невзаимодействующих тел в общем потенциале.

Для расчета астрофизических скоростей реакций мы используем результаты трех ядерных моделей, реализующих разные подходы к описанию ядерной материи: макро-микроскопической модели FRDM2012 [30], микроскопической модели HFB-24 [31] и феноменологического метода локальных массовых соотношений LMR2021 [23]. Настоящий раздел посвящен их обзору и сравнению.

2.1. Макро-микроскопическая модель FRDM2012

Массовая модель FRDM2012 [30] реализует коллективный подход к описанию структуры ядра при помощи продвинутого многопараметрического приближения капли несжимаемой жидкости, дополняя его феноменологическими микроскопическими поправками. Микроскопическая часть модели состоит из процедуры Струтинского [15, 16] для учета оболочечных поправок и метода Липкина–Ногами [17, 18] для учета эффектов спаривания.

2.1.1. Приближение жидкой капли

Макроскопическая основа FRDM2012 развивает подход известной полуэмпирической формулы Бете-Вайцеккера для вычисления энергии связи. Вместо самой энергии связи в FRDM2012 рассматривается величина потенциальной энергии атомного ядра, зависящая от числа протонов и нейтронов, а также формы нуклида. Выражение для вычисления потенциальной энергии строится

в предположении, что ядро является каплей заряженной жидкости с некоторыми дополнительными феноменологическими поправками, которые позволяют усредненно учесть некоторые микроскопические эффекты до применения более тонких методов, о которых будет говориться далее. В выражение входят вклады объемной и поверхностной энергии, энергии кулоновского взаимодействия с учетом поверхностных эффектов и поправкой на формфактор протона, энергия Вигнера, усредненная энергия спаривания.

В FRDM2012 влияние деформаций обеспечено и коллективными, и микроскопическими вкладами в потенциальную энергию. Определение энергии основного состояния осуществляется путем минимизации потенциальной энергии по форме ядра, что позволяет определять не только ядерную массу, но и параметры деформации. В работе [30] приводятся значения параметров β_2 , β_3 , β_4 и β_6 , вычисленные при помощи модели FRDM2012.

2.1.2. Метод оболочечных поправок Струтинского

В подходе Струтинского оболочечные поправки рассматриваются как флуктуации над усредненным значением энергии системы, в котором отсутствуют вклады оболочечных эффектов. В предположении отсутствия остаточного протон-нейтронного взаимодействия эти поправки должны вычисляться отдельно для каждого типа нуклонов: δE_n и δE_p для нейтронов и протонов соответственно. Для обоих типов частиц оболочечная поправка определяется как разность суммы одночастичных энергий ϵ_i^q и усредненной энергии δE_q

$$\delta E_q(N_q, \beta) = \sum_{i=1}^{N_q} \epsilon_i^q(\beta) - \tilde{E}_q(N_q, \beta), \quad (10)$$

где под β имеется в виду деформация, а под величиной N_q — число нуклонов соответствующего типа.

Ключевой частью метода Струтинского является вычисление величины \tilde{E}_q , то есть усреднение суммы одночастичных энергий таким образом, чтобы в ней не осталось оболочечных эффектов. Вообще сумму одночастичных уровней можно выразить через плотность уровней g_q :

$$E_q = \int_{-\infty}^{\lambda} E g_q(E) dE, \quad (11)$$

где λ — энергия Ферми, которую можно найти из условия сохранения числа частиц

$$N_q = \int_{-\infty}^{\lambda} g_q(E) dE \quad (12)$$

Предполагается, что плотность уровней g_q представляет собой сумму гладкой части \tilde{g}_q и осциллирующей вокруг нее компоненты δg_q , соответствующей оболочечным эффектам: $g_q(E) = \tilde{g}_q(E) + \delta g_q(E)$. В таком случае вычисление усредненной энергии \tilde{E}_q подразумевает устранение осциллирующей части плотности уровней δg_q .

В методе усреднения Струтинского величина \tilde{g}_q ищется в виде

$$\tilde{g}_q(E) = \frac{1}{\gamma} \sum_i f\left(\frac{E - \epsilon_i}{\gamma}\right), \quad (13)$$

где γ — параметр сглаживания, а $f(x)$ — некая положительная аналитическая функция, нормированная на единицу, симметричная и имеющая максимум при $x = 0$. Если в оболочечной компоненте $\delta g_q(E)$ доминирует осцилляция с периодом $\hbar\omega$ (по сути соответствующая главным оболочкам), то, выбрав параметр $\gamma \gtrsim \hbar\omega$, можно получить гладкую функцию $\tilde{g}_q(E)$.

Выбор усредняющей функции $f(x)$ ограничивается требованием на независимость величины $\tilde{g}_q(E)$ от величины γ . Может быть использовано следующее усреднение одночастичного спектра с гауссовой функцией:

$$\tilde{g}_q(E) = \frac{1}{\gamma\sqrt{\pi}} \sum_i P_M\left(\frac{E - \epsilon_i}{\gamma}\right) \exp\left\{\left(\frac{E - \epsilon_i}{\gamma}\right)^2\right\}, \quad (14)$$

где $P_M(x)$ — полином степени M , который называют корректирующим полиномом. Его степень M становится еще одним добавочным параметром после параметра сглаживания γ .

2.1.3. Поправки для учета эффектов спаривания

Используемый в FRDM2012 метод Липкина–Ногами [17, 18] основан на методе Бардина–Купера–Шриффера (БКШ) [19], изначально разработанном для описания эффектов сверхпроводимости и применимого к вычислению парных корреляций в ядре. Волновые функции БКШ нарушают некоторые законы сохранения, и метод Липкина–Ногами решает эту проблему. Мы ограничимся качественным описанием подхода БКШ к описанию эффектов спаривания, так как даже в исходном виде он с успехом использовался для предсказания экспериментальных результатов.

Подход рассматривает протоны и нейтроны по отдельности, так как протон-нейтронные корреляции полагаются отсутствующими, а итоговая система уравнений одинакова для обоих типов нуклонов. Гамильтониан парного взаимодействия инвариантен относительно обращения времени, что означает двойное вырождение уровней, каждому из которых соответствуют два сопряженных состояния $|k\sigma\rangle$ ($\sigma = +, -$) между которыми и происходят парные взаимодействия. Полагается, что константа всех таких взаимодействий G неизменна для всех переходов между состояниями. Скоррелированность нуклонов приводит к тому,

что они приобретают дополнительную энергию и оказываются на более высоких уровнях. Существует возможность преодоления нуклонами энергии Ферми, из-за чего происходит размытие края заселенности энергетических уровней.

С помощью преобразования Боголюбова из операторов рождения и уничтожения нуклонов $a_{k\sigma}^+$ и $a_{k\sigma}$ строятся операторы квазичастиц, соответствующих парам спаренных нуклонов:

$$a_{k\sigma} = u_k b_{k-\sigma} + \sigma v_k b_{k\sigma}^+, \quad (15)$$

где v_k соответствует доле заселенности k -го уровня квазичастицами и выполняется условие $u_k^2 + v_k^2 = 1$, а также закон сохранения числа нуклонов рассматриваемого типа:

$$n = 2 \sum_k v_k^2 \quad (16)$$

Из этих положений о парных корреляциях в теории БКШ строится система уравнений:

$$\begin{aligned} n &= \sum_k \left[1 - \frac{\varepsilon_k - \lambda}{\sqrt{(\varepsilon_k - \lambda)^2 + \Delta^2}} \right], \\ \frac{2}{G} &= \sum_k \frac{1}{\sqrt{(\varepsilon_k - \lambda)^2 + \Delta^2}}, \\ v_k^2 &= \frac{1}{2} \left[1 - \frac{\varepsilon_k - \lambda}{\sqrt{(\varepsilon_k - \lambda)^2 + \Delta^2}} \right], \\ \varepsilon_k &= e_k - G v_k^2, \end{aligned} \quad (17)$$

где e_k — энергии одночастичных состояний, λ — химический потенциал, определяемый энергией верхнего занятого уровня, а в последние два уравнения записываются для всех состояний k . Корреляционная функция Δ определяется выражением

$$\Delta = G \sum_k u_k v_k \quad (18)$$

и в четных ядрах приблизительно соответствует половине энергии возбуждения первого состояния.

Система уравнений (17) решается относительно v_k , λ и G (или Δ , в зависимости от того, какая величина известна). Поправка, которую дают эффекты спаривания к результатам жидкокапельной модели, определяется выражением

$$\delta E = \sum_k (2v_k^2 - n_k) e_k - \frac{\Delta^2}{G} - G \sum_k v_k^4 + \frac{1}{2} G \sum_k n_k, \quad (19)$$

где n_k — число нуклонов на k -ом дважды-вырожденном уровне в отсутствие сил спаривания.

2.2. Микроскопическая модель HFB-24

Модель HFB-24 [31] является очередным представителем семейства реализаций метода Хартри–Фока–Боголюбова с потенциалом взаимодействия Скирма, разрабатываемой группой авторов с 2003 года [12].

Метод Хартри–Фока позволяет приближенно решать уравнение Шредингера для системы многих тел, переходя к случаю движения невзаимодействующих частиц в самосогласованном потенциале. В методе Хартри–Фока–Боголюбова, развивающем этот подход, вместо волновых функций отдельных частиц рассматриваются волновые функции пар нуклонов, что позволяет учитывать в расчете эффект спаривания нуклонов.

В настоящем разделе мы кратко опишем подход Хартри–Фока к описанию многочастичных квантовых систем и исторический вариант потенциала Скирма.

2.2.1. Метод Хартри–Фока

Изначально Д. Хартри предложил описывать квантовую систему A частиц (например, электронные оболочки атома или атомное ядро) с помощью факторизованной волновой функции $\psi(x_1, \dots, x_A) = \phi_1(x_1) \cdot \dots \cdot \phi_A(x_A)$, где x_j — пространственные координаты. Недостатком этой функции является отсутствие симметрии относительно перестановки частиц, неразличимых электронов и нуклонов. В дальнейшем В.А. Фок предложил использовать детерминант Слэтера:

$$\psi(\xi_1, \dots, \xi_A) = \frac{1}{\sqrt{A!}} \cdot \det [\phi_i(\xi_j)], \quad (20)$$

где ξ_j обозначает пространственные, спиновые и изоспиновые координаты. Эта функция уже правильно учитывает неразличимость электронов в атомных оболочках или нуклонов в ядре.

Оператор Гамильтона многочастичной квантовой системы может быть записан в виде суммы оператора кинетической энергии и оператора взаимодействия частиц между собой. С учетом двух- и трехчастичных взаимодействий можно записать следующее выражение для полной энергии системы:

$$E_{HF} = \langle \psi | T + V | \psi \rangle = \sum_i \langle i | t_i | i \rangle + \sum_{i < j} \langle ij | v_{ij} | ij \rangle + \sum_{i < j < k} \langle ijk | v_{ijk} | ijk \rangle, \quad (21)$$

где T — оператор кинетической энергии, а V — оператор взаимодействий между нуклонами.

С помощью вариационного принципа и условия нормировки волновых функций $\sum_i \int \phi_i^* \phi_i dx = A$ может быть составлено уравнение на волновые функции системы, при которых реализуется состояние с наименьшей энергией, то есть в

случае с атомным ядром основное состояние:

$$\frac{\delta}{\delta\phi_\alpha^*} \left[E_{HF} - \sum_i e_i \int |\phi_i|^2 dx \right] = 0, \quad (22)$$

где множители Лагранжа e_i окажутся энергиями отдельных частиц системы. Действительно, выполнив дифференцирование, можно получить систему уравнений, соответствующих уравнениям Шредингера для волновой функции каждой частицы:

$$h |\phi_i\rangle = e_i |\phi_i\rangle \quad (23)$$

Одночастичные гамильтонианы h_i вместо потенциалов взаимодействия частиц будут содержать лишь взаимодействие с самосогласованным полем, являющимся усреднением парных взаимодействий. Сложность заключается в том, что это поле в общем случае является функционалом одночастичных волновых функций, поэтому его и называют самосогласованным. Из-за этого система уравнений Хартри-Фока обычно решается методом последовательных приближений, начиная с некой приближенной волновой функции системы.

2.2.2. Потенциал Скирма

В качестве потенциала двухчастичного взаимодействия v_{ij} из выражения (21) наиболее широко применяется потенциал Скирма. Он имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} v_{12} = & t_0(1 + x_0 P_\sigma) \delta_{12} \\ & + \frac{1}{2} t_1(1 + x_1 P_\sigma) [\mathbf{k}^{\dagger 2} \delta_{12} + \delta_{12} \mathbf{k}^2] \\ & + t_2(1 + x_2 P_\sigma) \mathbf{k}^\dagger \delta_{12} \mathbf{k} \\ & + i W_0 \mathbf{k}^\dagger \delta_{12} \times (\boldsymbol{\sigma}_1 + \boldsymbol{\sigma}_2) \mathbf{k}, \end{aligned} \quad (24)$$

где $\delta_{12} = \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$, а оператор \mathbf{k} отвечает импульсу относительного движения частиц

$$\mathbf{k} = \frac{i}{2} (\nabla_1 - \nabla_2) \quad (25)$$

Оператор P_σ является оператором обмена спинами:

$$P_\sigma = \frac{1}{2} (1 + \boldsymbol{\sigma}_1 \boldsymbol{\sigma}_2) \quad (26)$$

Величины t_k , x_k и W_0 являются параметрами модели.

Потенциал двухчастичного взаимодействия (24) может быть получен разложением в ряд Тейлора модельного гауссового потенциала с эффектом обмена спинами и изоспинами в предположении короткодействия ($\mu \ll k_F^{-1}$):

$$v(r) = e^{-(r/\mu)^2} (W + B P_\sigma - H P_\tau - M P_\sigma P_\tau) \quad (27)$$

Трехчастичное взаимодействие приближенно можно представить в виде силы с нулевым радиусом вида

$$v_{123} = t_3 \delta_{12} \delta_{23} \quad (28)$$

Можно показать, что в четно-четных ядрах такой потенциал может быть сведен к двухчастичному потенциалу, зависящему от плотности ядерной материи $\rho(\mathbf{r})$:

$$\frac{1}{6} t_3 (1 + x_3 P_\sigma) \rho \left(\frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2} \right) \delta_{12} \quad (29)$$

Этот потенциал обобщают на случай любых ядер введением параметра γ

$$\frac{1}{6} t_3 (1 + x_3 P_\sigma) \rho^\gamma \left(\frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2} \right) \delta_{12}, \quad (30)$$

Потенциал двухчастичного взаимодействия (24) с добавкой (30) называется потенциалом Скирма [13]. В классическом варианте он обладает небольшим числом параметров: $x_0, x_1, x_2, x_3, t_0, t_1, t_2, t_3, W_0$ и γ , значения которых могут быть подсчитаны с помощью экспериментальных данных. В реалистичных ядерных моделях потенциал Скирма используется вместе с членами, отвечающими за кулоновское взаимодействие, эффект спаривания нуклонов и оболочечные поправки. В современных вариантах потенциал входят продвинутые поправки, позволяющие, например, учитывать вклад тензорных сил. Впервые ядерная модель, основанная на методе Хартри–Фока с потенциалом Скирма, была представлена в работе [14]. Сегодня подход Скирма–Хартри–Фока является одним из наиболее широкоиспользуемых методов микроскопического описания атомных ядер, существует большое число его вариантов и параметризаций.

2.3. Метод локальных массовых соотношений LMR2021

В отличие от рассмотренных выше ядерных моделей, подход локальных массовых соотношений не описывает структуру и физику ядра, а использует закономерности, связывающие массы соседних изотопов. Обычно это дифференциальные выражения, которые можно применять рекурсивно, начиная с ядер, энергии связи которых известны из эксперимента, и уходя сколь угодно далеко в область экзотических изотопов. Таким образом, имея набор экспериментальных данных, можно шаг за шагом получать массы нуклидов вплоть до границ области существования ядер.

Метод локальных массовых соотношений предложен в [22] и актуален до сих пор благодаря высокой точности (отмеченной, например, в [26]) при сравнительной простоте вычислений. Еще одним достоинством подхода является разнообразие вариантов самого массового соотношения: можно подобрать такое выражение, которое будет наиболее удобно в конкретном исследовании.

2.3.1. Остаточное протон-нейтронное взаимодействие

В настоящей работе наряду с таблицами FRDM2012 и HFB-24 используется таблица теоретических ядерных масс LMR2021 [23], рассчитанная при помощи соотношения, которое связывает массы четырех соседних изотопов, расположенных на NZ -диаграмме в виде квадрата два на два, через энергию остаточного протон-нейтронного взаимодействия Δ_{np} . Эта величина введена в работе [21] и впервые использовалась для оценки энергий связи ядер в [20]. Для ядра, состоящего из Z протонов и N нейтронов, величина Δ_{np} выражается как

$$\begin{aligned}\Delta_{np}(N, Z) &= S_{np}(N, Z) - [S_p(N-1, Z) + S_n(N, Z-1)] = \\ &= B(N, Z) + B(N-1, Z-1) - B(N, Z-1) - B(N-1, Z),\end{aligned}\quad (31)$$

где S_n , S_p , S_{np} — энергии отделения нуклонов и их пары, а $B(N, Z)$ — энергия связи ядра с N нейтронов и Z протонов.

Таким образом масса любого ядра может быть вычислена, если известны энергии связи трех соседних изотопов, образующих вместе с рассматриваемым ядром квадрат на NZ -диаграмме, а также соответствующее значение энергии Δ_{np} . В ряде случаев для одного ядра можно построить несколько таких квадратов, тогда в качестве оценки неизвестной энергии связи имеет смысл брать средний результат.

2.3.2. Аппроксимация энергии протон-нейтронного взаимодействия

На рис. 3 показана экспериментальная зависимость энергии протон-нейтронного взаимодействия от массового числа. Как видно, для ядер с четными и нечетными массовыми числами по отдельности величина Δ_{np} может быть аппроксимирована гладкой функцией. Исключение составляют лишь легкие нуклиды, оболочечные эффекты в которых приводят к сильным флуктуациям исследуемой величины, а также симметричные ядра, в которых остаточное взаимодействие протона и нейтрона особенно сильно и выбивается из общей зависимости. Исключив эти изотопы из выборки, можно аппроксимировать ее, например, зависимостью от A в отрицательной степени.

В ранних работах [24, 25] авторы LMR2021 разбивали массив данных на несколько областей по значению массового числа, для каждого из которых делалась отдельная аппроксимация. В качестве модельной функции использовалось выражение

$$\Delta_{np}^{\text{аппр}} = C_1 + C_2 A^{-1}, \quad (32)$$

где C_1 и C_2 являются параметрами аппроксимации, причем для нечетных ядер полагалось $C_2 = 0$, то энергия протон-нейтронного взаимодействия, независимая от A . В новой работе [23] была выбрана другая модельная функция:

$$\Delta_{np}^{\text{аппр}} = \alpha A^\beta, \quad (33)$$

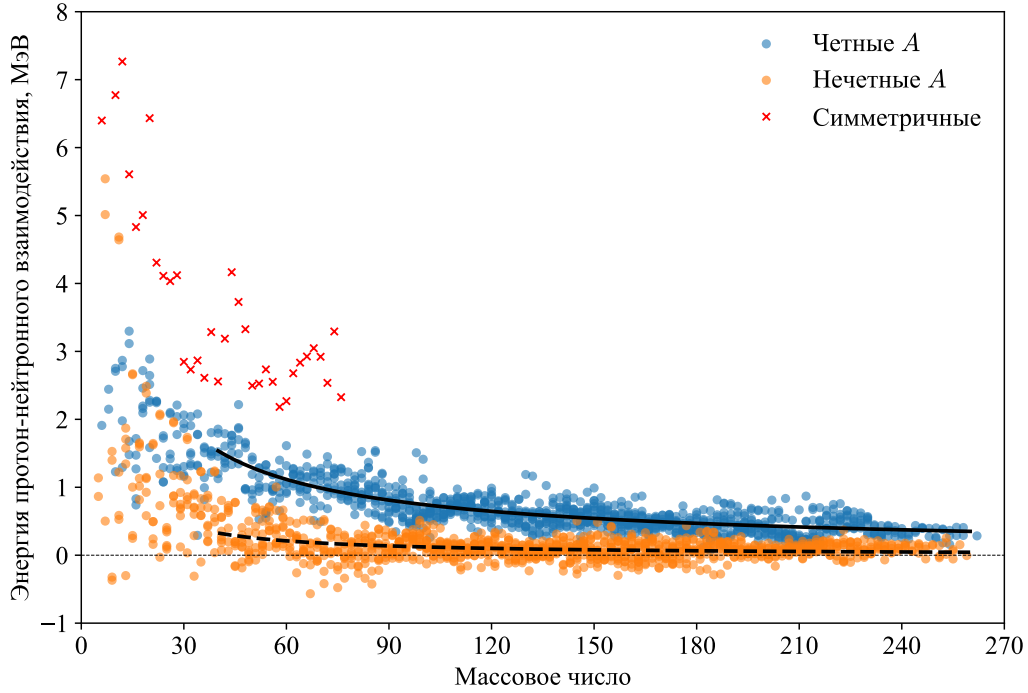


Рис. 3. Экспериментальная зависимость величины Δ_{np} от массового числа, построенная по данным AME2020 [33]. Разными цветами отмечены четные и нечетные ядра, а также ядра с равным числом протонов и нейтронов. Черными линиями показаны аппроксимации зависимости, полученные в работе [23].

где α и β являются параметрами аппроксимации. Использование степени β массового числа A в качестве подгоночного параметра позволило отказаться от разбиения выборки исходных данных на диапазоны по массе изотопов. При этом, как показано в [23], новая модельная функция (33) выигрывает у старой (32) в точности аппроксимации при использовании одной и той же исходной выборки данных.

В настоящей работе под массовой таблицей LMR2021 имеются в виду результаты работы [23], в которой в качестве исходной выборки для аппроксимации использовалась последняя редакция базы данных AME2020 [33]. На рис. 3 черными линиями показаны результаты этой аппроксимации.

2.4. Оценка точности моделей ядерных масс

Описанные в настоящем разделе ядерные модели использовались нами для расчета скоростей реакций нейтронного захвата, участвующих в астрофизическом r -процессе. Выбор именно этих моделей обусловлен тем, что каждая из них реализует отдельный подход к предсказанию масс экзотических ядер. Будет интересно посмотреть, как различные методы расчета ядерных масс влияют на результаты моделирования r -процесса.

Для нас наиболее интересны предсказания масс изотопов с большим из-

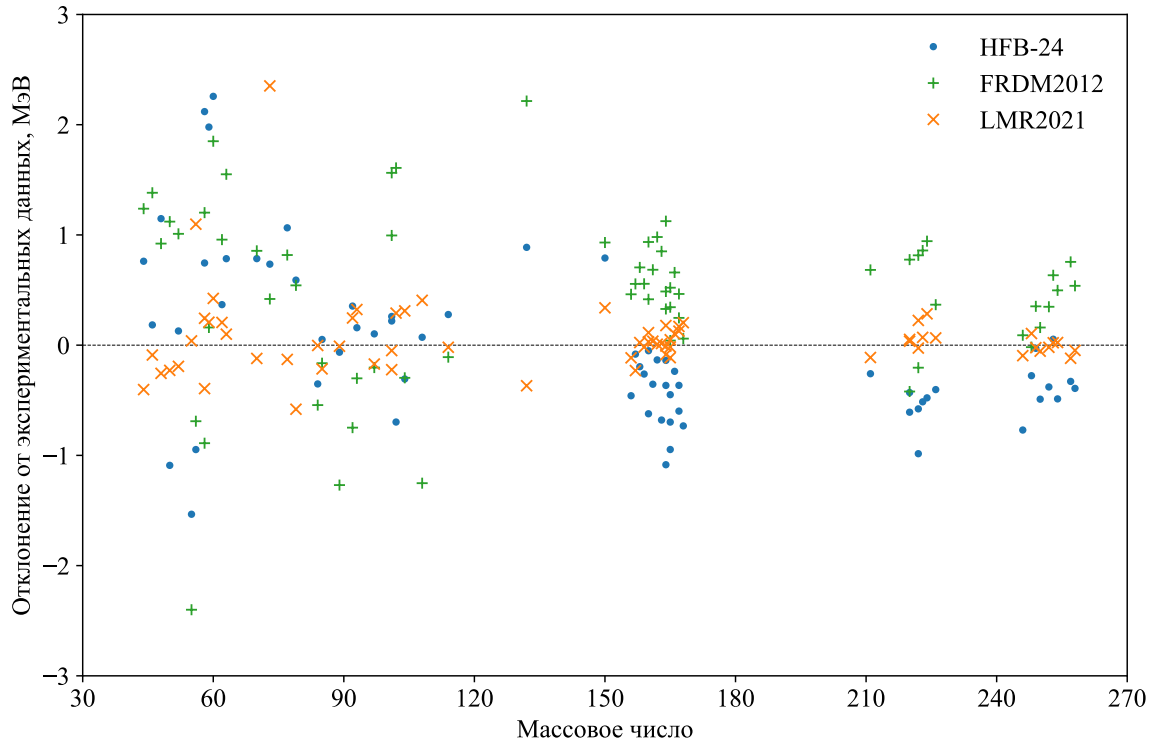


Рис. 4. Разница теоретических энергий связи из таблиц FRDM2012 [30], HFB-24 [31] и специальной версии LMR2021 [23] (см.пояснение в тексте) и экспериментальных значений из базы данных AME2020 [33].

бытком нейтронов, которые не могут быть получены в лабораторных условиях. Оценить точность теоретических моделей в этой области NZ -диаграммы не представляется возможным в силу отсутствия экспериментальных данных. Тем не менее можно проанализировать точность предсказания моделей вблизи долины стабильности. Для этого мы исследовали отклонения теоретических энергий связи от экспериментальных значений из базы данных AME2020 для ряда ядер. При этом в качестве таблицы LMR2021 использовалась специальная версия, рассчитанная описанным выше методом, но на основе базы данных AME2016, а не более новой AME2020. Использование именно этой версии таблицы обусловлено тем, что в массовую таблицу LMR2021 исходные экспериментальные данные входят без изменений, поэтому сравнивать стандартную версию таблицы с AME2020 было бы некорректно.

На рис. 4 представлены результаты этого сранения. Среднеквадратичные отклонения составляют 0.73 МэВ для HFB-24, 0.89 МэВ для FRDM2012 и 0.37 МэВ для специальной версии LMR2021. Как видно, для новых экспериментальных данных, появившихся в последней версии AME2020 предсказания всех трех моделей имеют значительные флуктуации в области легких ядер. Для массовых чисел $A > 120$ модель FRDM2012 заметно завышает, а HFB-24 занижает величину энергии связи. Метод локальных массовых соотношений LMR2021 при этом обладает наивысшей точностью. Это может быть связано с тем, что методом LMR2021 коллективные и микроскопические эффекты учитываются неявно за счет исходных экспериментальных данных, не делается

никаких сильных предположений о структуре и физике ядер.

Однако точность предсказаний на малом удалении от долины стабильности не гарантирует ее сохранение в области сверхнейтроноизбыточных изотопов, где в основном протекает r -процесс. Безусловно для развития понимания астрофизического r -процесса и нуклеосинтеза в целом необходимо совершенствовать наши представления о физике нейтроноизбыточных ядер.

3. Подготовка ядерных данных для расчета r -процесса

Ядерные характеристики, такие как энергия связи, определяют величины скоростей ядерных реакций, непосредственно влияющих на протекание r -процесса. Для моделирования r -процесса необходимо располагать значениями скоростей нейтронного захвата, β -распада и других реакций, протекающих при астрофизических условиях. При этом ошибки определения ядерных масс могут приводить к большим неопределенностям в расчете скоростей реакций и, как следствие, сказываться на результатах симуляций механизмов нуклеосинтеза.

Настоящий раздел посвящен описанию проведенных нами расчетов скоростей (n, γ) , анализу полученных результатов, а также методики формирования из них баз данных астрофизических ядерных реакций, которые можно было бы использовать при моделировании r -процесса.

3.1. Расчет скоростей нейтронного захвата в программе TALYS

В настоящей работе для исследования чувствительности модели r -процесса к выбору теоретических значений масс нейтроноизбыточных ядер мы рассчитали скорости реакции (n, γ) r -процесса с помощью программы TALYS [29], используя три различные массовые таблицы: FRDM2012, HFB-24 и LMR2021. В настоящем разделе обсуждаются некоторые практические детали проведенных расчетов и анализируются их результаты.

3.1.1. Массы ядер как параметры расчета

Программа TALYS [29], которую мы использовали для расчета сечений и скоростей реакции (n, γ) , позволяет задавать различные параметры статистической модели, в том числе теоретические массы ядер. Мы использовали микроколлективную модель FRDM2012 [30] и микроскопическую модель HFB-24 [31], внесенные в состав пакета TALYS его разработчиками, а также феноменологический метод LMR2021, предсказания которого были переведены нами в формат TALYS. Расчеты скоростей с массовой моделью HFB D1M [27], также включенной в TALYS по умолчанию, не проводились, так как эта модель, как и HFB-24, является реализацией микроскопического метода Хартри-Фока-Боголюбова, отличаясь лишь использованием потенциала Гюни вместо потенциала Скинра.

Помимо таблиц теоретических масс ядер, в TALYS внесена таблица экспериментальных масс, построенная на основе базы данных AME2003 [39]. В наших расчетах при наличии экспериментальных масс предпочтение отдавалось им. Наконец, если при расчете TALYS требуются значения масс, отсутствующие и в экспериментальной, и в теоретической таблице, то программа использует аналитическую формулу Дуффо-Цукера [40]. В наших расчетах эта формула использовалась только если неизвестна была масса конечного ядра нейтронно-

го захвата.

3.1.2. Модификация исходного кода TALYS

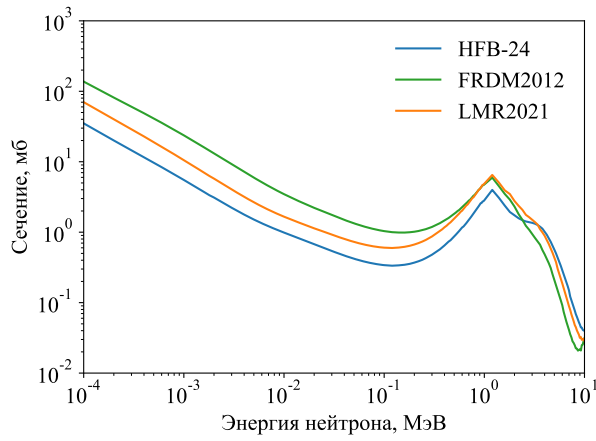
В исходный код программы TALYS нами было внесено изменение, делающее сетку температур, по которой производится расчет астрофизических скоростей, равномерной и более густой. Эта правка никак не влияет на работу статистической модели ядерных реакций, лишь делает выходные данные более подробными ценой некоторого увеличения времени расчета. Все расчеты TALYS, использовавшиеся в настоящей работе, получены на этой измененной версии программы.

3.1.3. Результаты расчета сечений реакции (n, γ) с помощью TALYS

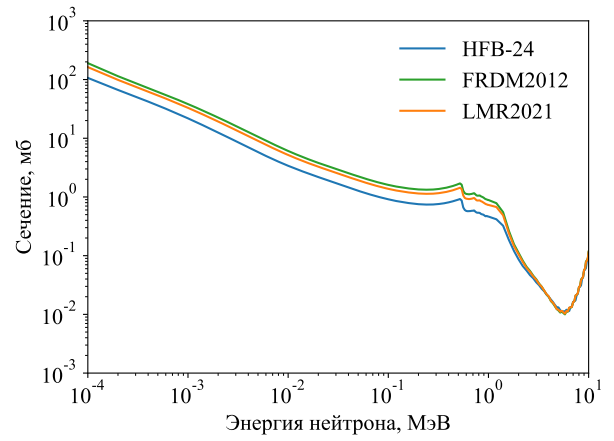
В режиме расчета астрофизических скоростей TALYS вычисляет сечения реакции и интегрирует их в соответствии с формулой (8). Прежде чем искать скорости реакций, мы запустили TALYS в режиме расчета сечений для ряда реакций нейтронного захвата, используя значения масс FRDM2012, HFB-24 и LMR2021, чтобы проанализировать влияние массовой модели на величины сечений. Результаты представлены на рис. 5. Как видно, наибольшие различия в сечениях, полученных с использованием разных массовых моделей, относятся к низкоэнергетической области, в то время как при энергиях 5 – 10 МэВ спектры оказываются очень схожи и могут даже, как в случае с реакцией $^{142}\text{In}(n, \gamma)^{143}\text{In}$, практически сливаться. При этом как раз энергии частиц до 0.5 МэВ наиболее интересны с точки зрения астрофизики. Таким образом можно ожидать существенного влияния выбора массовой ядерной модели на результаты моделирования r -процесса.

Видно, что в ряде случаев сечения, полученные при помощи массовой модели FRDM2012, превышают остальные сечения, однако это не всегда так: например, в спектре реакции $^{186}\text{Tb}(n, \gamma)^{187}\text{Tb}$ сечение для массовой модели HFB-24. Заметно также, что для ядер с нечетным числом нейтронов вариация массовой модели приводит к большим расхождениям в сечениях (n, γ) , чем для соседних изотопов с четным числом нейтронов. Например, на рис. 5е сечение (n, γ) на четно-четном ядре ^{236}Pb , полученное при помощи модели LMR2021, заметно отличается от результатов остальных массовых моделей, однако это различие не превышает отклонение спектра FRDM2012 от спектров прочих моделей для нейтронного захвата на изотопе ^{237}Pb с одним неспаренным нейтроном (см. рис. 5f).

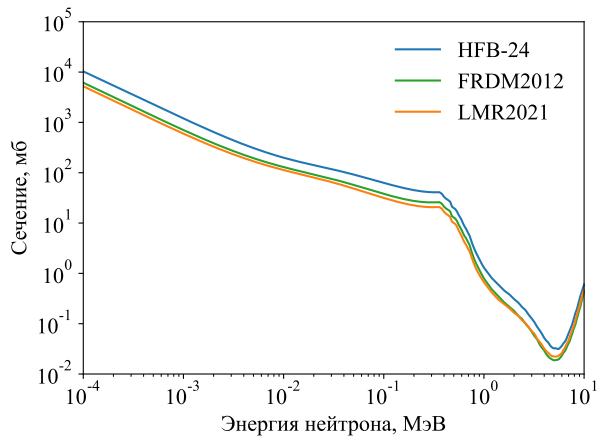
Любопытно, как разные массовые модели показывают стремление к некому единому пределу в тех или иных областях энергий. Уже отмечалось, что при энергиях выше 5 МэВ зависимости сечений (n, γ) для многих ядер сходятся. Для изотопа ^{141}In наблюдается сближение сечений FRDM2012 и LMR2021 вблизи пика некоего порогового эффекта при энергии 1 МэВ. Для изотопа ^{236}Pb



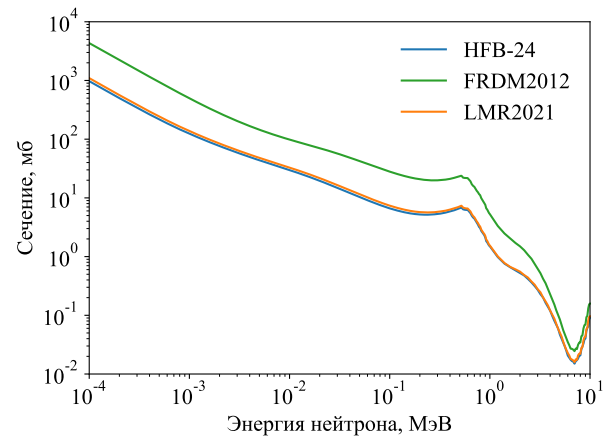
(a) ^{141}In



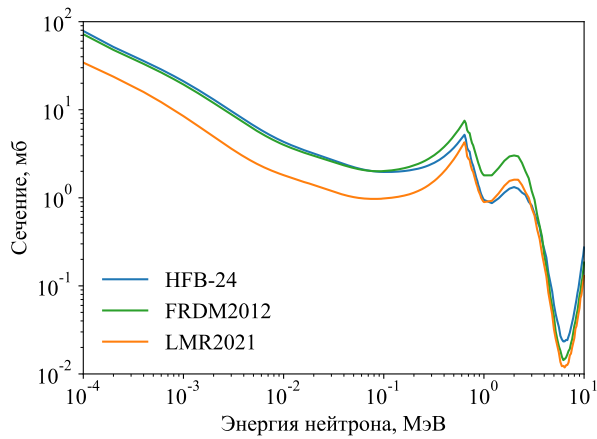
(b) ^{142}In



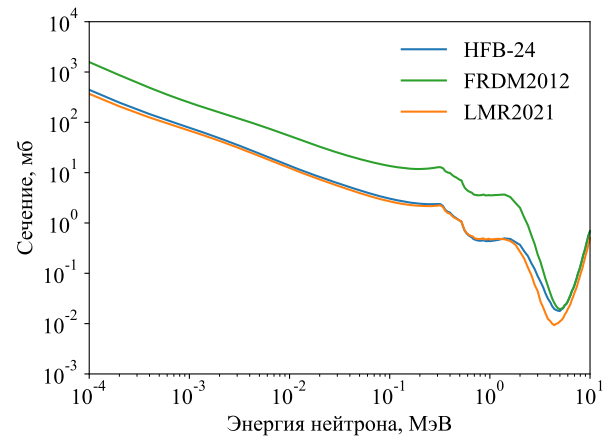
(c) ^{186}Tb



(d) ^{187}Tb



(e) ^{236}Pb



(f) ^{237}Pb

Рис. 5. Сечения реакции (n, γ) на некоторых нейтроноизбыточных изотопах индия, тербия и свинца, полученные с помощью программы TALYS с использованием различных массовых моделей.

сечения HFB-24 и FRDM2012 очень близки в области низких энергий, однако при энергиях выше 0.1 МэВ сечение HFB-24 становится ближе к результатам модели LMR2012. Напротив, у изотопа ^{237}Pb сначала наблюдается близость сечений HFB-24 и LMR2021, но при энергии около 2 МэВ они расходятся, и график HFB-24 устремляется к графику сечений, полученному при помощи модели FRDM2012. Все это указывает на сложную связь сечений и ядерных масс.

3.1.4. Результаты расчета скорости реакции (n, γ) с помощью TALYS

При помощи программы TALYS нами были выполнены расчеты скорости реакции (n, γ) на каждом изотопе, содержащемся в массовых таблицах FRDM2012, HFB-24 и LMR2021, с использованием содержащихся в них теоретических значений масс. Результаты расчетов для некоторых нейтроноизбыточных ядер-мишеней представлены на рис. 6.

Поскольку корость реакции получают путем свертки сечения реакции с распределением взаимодействующих частиц по энергии, представленные результаты соотносятся с графиками сечений на 5. Точно также в области высоких температур (т.е. высоких средних энергий частиц) присутствует сближение скоростей, полученных с использованием разных массовых моделей. С другой стороны, как и в случае с сечениями, чувствительность расчета скоростей к выбору массовой модели для ядер с нечетным числом нейтронов оказывается выше, чем для соседних изотопов с четным числом нейтронов. Особенно хорошо это видно по графику скорости реакции $^{141}\text{In}(n, \gamma)^{142}\text{In}$ на рис. 6а с различиями в области низких температур почти на порядок. Для изотопов свинца на рис. 6е и 6ф, как и в случае с сечениями, скорость HFB-24 при низких температурах тяготеет к результатам FRDM2012 и LMR2021, соответственно, но в области высоких температур устремляется к результатам другой модели.

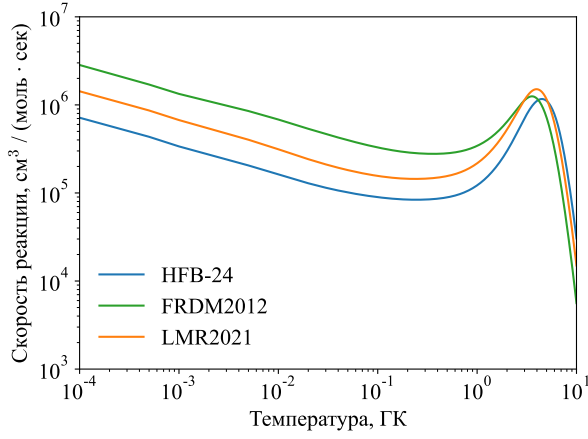
3.1.5. Нейтронный захват за границей существования ядер

Во всех рассмотренных нами массовых таблицах присутствуют изотопы, находящиеся за областью существования ядер, то есть имеющие отрицательные энергии отделения протона B_p или нейтрона B_n :

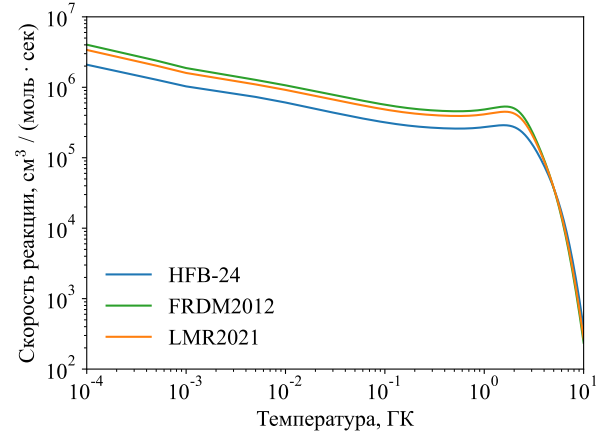
$$\begin{aligned} B_p(A, Z) &= E_{\text{св}}(A, Z) - E_{\text{св}}(A - 1, Z - 1), \\ B_n(A, Z) &= E_{\text{св}}(A, Z) - E_{\text{св}}(A - 1, Z), \end{aligned} \quad (34)$$

где $E_{\text{св}}$ — энергия связи ядра, зависящая от выбора массовой модели. При отрицательных значениях B_p или B_n ядро фактически не существует.

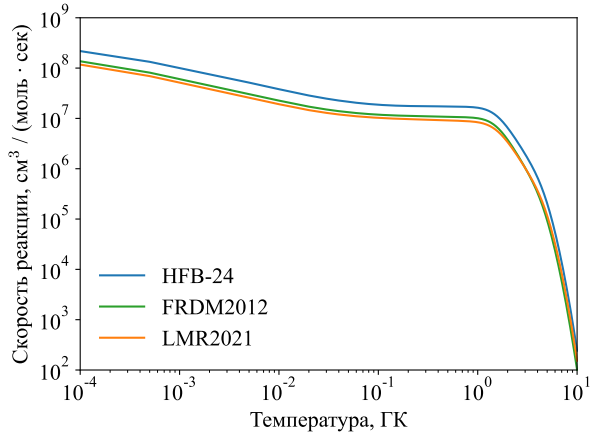
Мы провели расчеты скоростей нейтронного захвата в том числе и на этих несуществующих ядрах, чтобы убедиться, что их учет при моделировании r -процесса не будет приводить к некорректным результатам. На рис. 7 представлены зависимости теоретических скоростей реакции (n, γ) при $T = 2$ ГК на



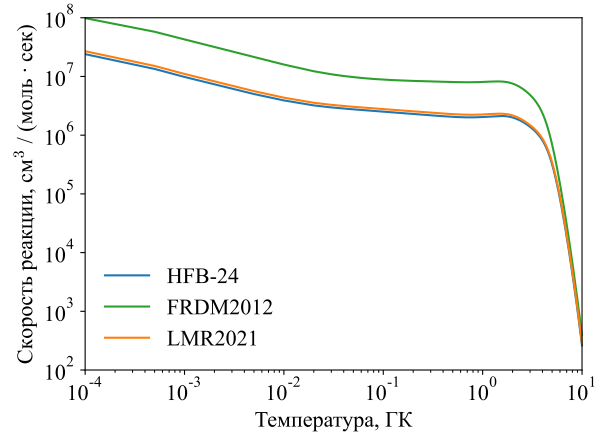
(a) ^{141}In



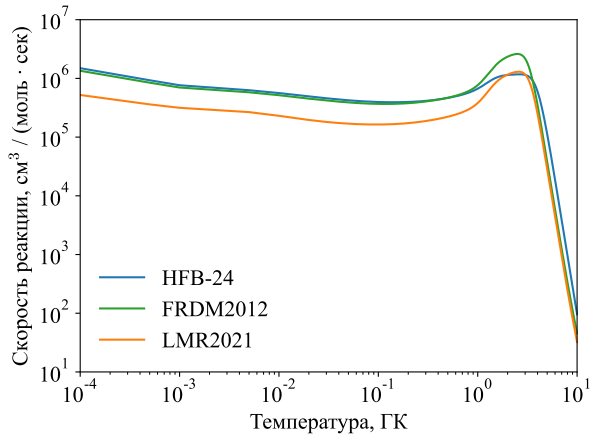
(b) ^{142}In



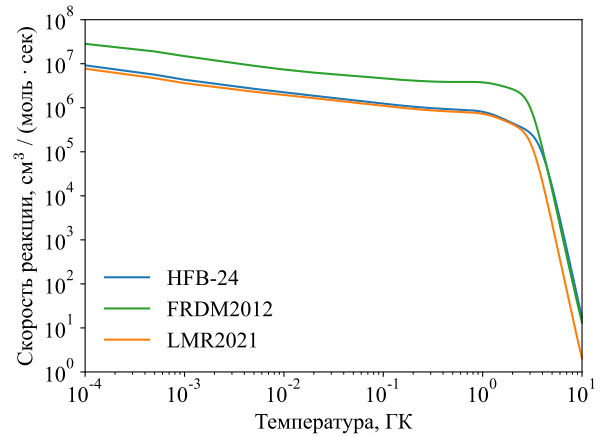
(c) ^{186}Tb



(d) ^{187}Tb



(e) ^{236}Pb



(f) ^{237}Pb

Рис. 6. Скорости реакции (n, γ) на некоторых нейтроноизбыточных изотопах индия, тербия и свинца, полученные с помощью программы TALYS с использованием различных массовых моделей.

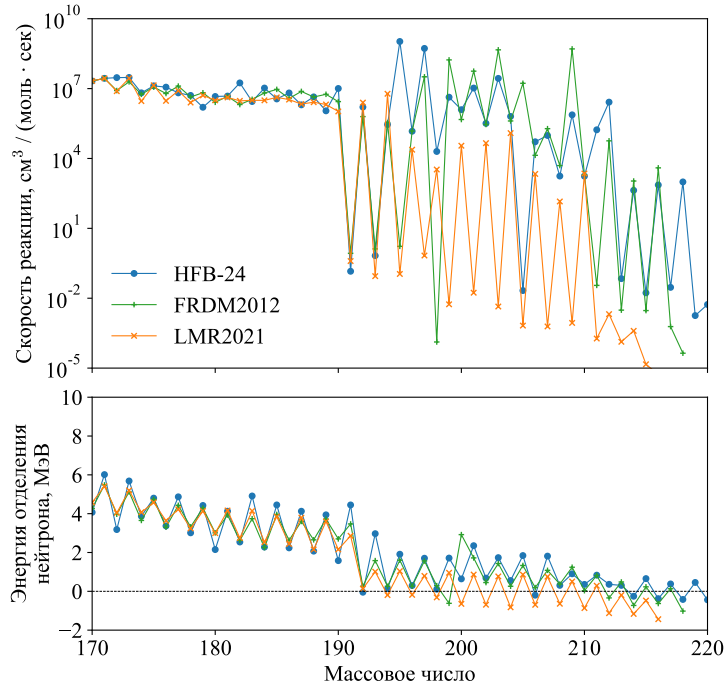


Рис. 7. Сверху: скорости нейтронных захватов на нейтроноизбыточных изотопах тербия, рассчитанные с помощью различных таблиц ядерных масс при $T = 2$ ГК. Снизу: энергии отделения нейтронов для нейтроноизбыточных изотопов тербия по данным тех же массовых таблиц.

нейтроноизбыточных изотопах тербия, а также энергии отделения нейтрона B_n для тех же ядер, рассчитанные по данным рассматриваемых нами массовых моделей. Как видно, начиная с массового числа 192 для некоторых, в первую очередь нечетно-нечетных изотопов B_n резко падает, доходя до отрицательных значений. При этом начинаются сильные колебания скорости (n, γ) : если конечное ядро имеет отрицательную B_n , то и скорость реакции снижается на порядки.

Таким образом включение реакций (n, γ) с образованием несвязанных нейтроноизбыточных ядер в симуляцию r -процесса не должно существенно повлиять на результаты моделирования. С другой стороны, учет таких реакций оставляет модели r -процесса возможность для некоторой инерции за границы существования. Путь r -процесса будет не просто упираться в линию отделения нейтрона из-за отсутствия возможности продвинуться дальше, а естественным образом замедляться.

3.2. Скорости β^- -распадов

Помимо реакций нейтронного захвата, важную роль в r -процессе играют β^- -распады, которые увеличивают зарядовое число распадающегося ядра и тем самым обеспечивают естественный синтез новых химических элементов. При моделировании r -процесса важно убедиться, что для каждого ядра в нейтроно-

избыточной области, нарабатывающегося в результате реакций (n, γ) , имеются данные о слабом распаде.

Значения астрофизических скоростей слабых распадов экзотических ядер, как и в случае с реакцией нейтронного захвата, приходится искать при помощи теоретических моделей. Ряд расчетов скоростей β -распадов выполнен специально для применения в астрофизических приложениях и, в частности, для расчета r -процесса (см., например, работы [37, 38]). Большой массив скоростей слабых распадов, рассчитанных при помощи модели FRDM+QRPA [37], содержится в базе данных астрофизических скоростей реакций REACLIB [42].

3.2.1. Зависимость скорости β -распада от массы ядра

Очевидно, что скорость β -распада должна сильно зависеть от массы исходного ядра. На это указывает хорошо известное правило Сарджента $\lambda \sim Q_\beta^5$, связывающее скорость распада λ с энергосвязью Q_β , которое зависит от энергий связи начального и конечного ядер. Экспериментальные данные, позволяющие говорить о степенной связи скорости β -распада λ с Q_β , были представлены Сарджентом в [36]. Таким образом вариации теоретической массовой модели должны влиять на результаты моделирования r -процесса не только через реакции (n, γ) , но и через слабые распады.

В условиях астрофизического r -процесса по его определению характерные времена β^- -распадов превышают скорости реакции (n, γ) на порядки. Таким образом при моделировании r -процесса, в особенности на коротких промежутках времени порядка 1 с, можно ожидать, что влияние неопределенностей теоретических значений скоростей слабых распадов будет незначительно в сравнении с неопределенностями расчета скоростей захвата нейтрона, обусловленных той же вариацией массовой модели. Исходя из этих соображений, в настоящей работе мы использовали скорости β -распадов из библиотеки REACLIB для всех трех наборов скоростей (n, γ) , полученных при помощи разных таблиц теоретических ядерных масс.

3.2.2. Недостаток данных о скоростях β^- -распадов

После проведения расчета скоростей реакций нейтронного захвата на ядрах, входящих в используемые в настоящей работе таблицы теоретических масс, оказалось, что в REACLIB отсутствуют скорости слабых распадов для некоторых ядер-продуктов. Это было ожидаемо, ведь разные ядерные модели по-разному предсказывают не только энергии связи, но и границы области существования ядер, определяемые знаком энергий отделения протона B_p и нейтрона B_n (см. формулы 34). Кроме того, как отмечалось ранее, в теоретических таблицах массы изотопов даны с некоторым запасом в область за границей существования ядер, и объем этого запаса разнится от таблицы к таблице.

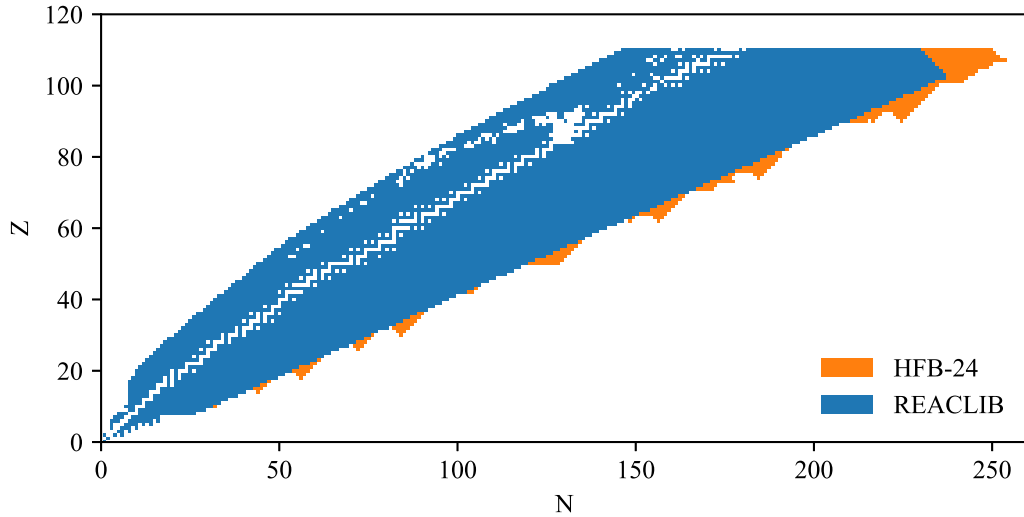


Рис. 8. Данные о слабых распадах из библиотеки REACLIB (синие квадраты) и нейтроноизбыточные изотопы, присутствующие в таблице масс HFB-24, но отсутствующие в REACLIB (оранжевые квадраты).

На рис. 8 синим цветом отмечены ядра, слабые распады которых внесены в библиотеку REACLIB, а оранжевым — ядра из таблицы HFB-24, для которых в REACLIB отсутствуют данные по слабым распадам. Если добавить такие реакции (n, γ) в REACLIB без соответствующих распадов, то их продукты будут накапливаться, приводя к некорректным результатам моделирования r -процесса. Похожую картину можно видеть для таблицы LMR2021. Для таблицы FRDM2012 область недостатка данных о β^- -распадах минимальна, так как модель слабых распадов, используемая в REACLIB, основана на массовой модели FRDM2012.

Как было отмечено выше, скорости β^- -распадов в r -процессе существенно ниже скоростей (n, γ) и влияние масс ядер на периоды полураспада не должно заметно сказываться на результатах моделирования r -процесса. В связи с этим мы решили ограничиться простой экстраполяцией в область нейтронного избытка для определения недостающих скоростей слабых распадов, используя в качестве исходных данных присутствующие в библиотеке REACLIB скорости.

3.2.3. Слабые распады с вылетом нейтронов

В библиотеке REACLIB для изотопов с избытком нейтронов помимо обычных β^- -распадами присутствуют β^- -распады с вылетом 1 — 3 нейтронов. На рис. 9 показаны скорости слабых распадов нейтроноизбыточных изотопов тербия. Как видно, начиная с изотопа Tb¹⁷⁵ над β^- -распадом начинает преобладать распад $Tb^A \rightarrow Dy^{A-1} + n$, а с углублением в область нейтронного избытка усиливаются каналы с вылетом 2 и 3 нейтронов. Более того, начиная с $A = 185$ скорости β^- -распада падают до пренебрежимо малых значений. При этом видно, что сумма скоростей всех четырех каналов распада для каждого изотопа в зависимости от массового числа может быть аппроксимирована простой функ-

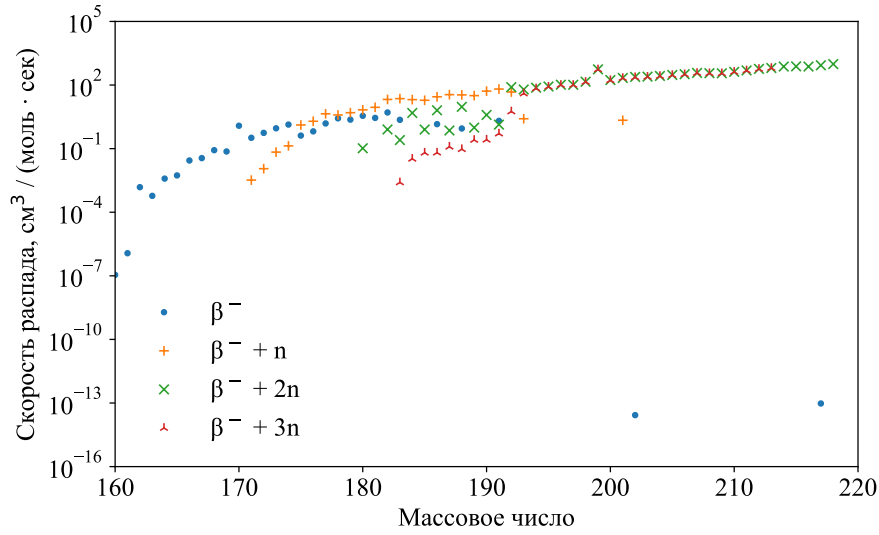


Рис. 9. Скорости слабых распадов нейтроноизбыточных изотопов тербия, содержащиеся в библиотеке REACLIB. Различными маркерами отмечены β^- -распады с вылетом разного числа нейтронов. Скорости ниже $10^{-16} \frac{\text{см}^3}{\text{моль} \cdot \text{сек}}$ не показаны.

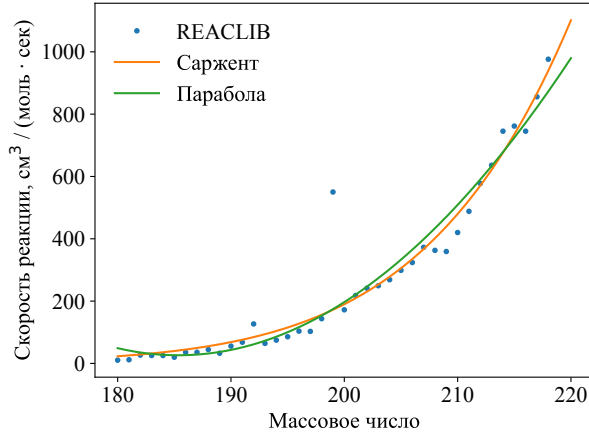
цией, например, полиномом второй степени.

Суммирование скорости β^- -распадов с вылетом разного числа нейтронов с точки зрения задачи расчета r -процесса имеет смысл, даже несмотря на то, что продукты этих распадов различаются числом нейтронов. При скоростях реакции (n, γ) , на порядки превосходящих скорости β^- -распадов, небольшие различия в числе нейтронов между изотопами одного химического элемента перестают играть большую роль, так продукт распада сразу же начнет интенсивного поглощать нейтроны. Причем предел, до которого ядро в r -процессе может насыщаться нейтронами, определяется не столько слабыми распадами, сколько статистическим равновесием между реакцией нейтронного захвата (n, γ) и обратной реакцией фотовывивания нейтрона (γ, n) . Это позволило нам при добавлении отсутствующих скоростей слабых распадов в REACLIB ограничиться только β^- -распадами. Такое допущение обусловлено спецификой r -процесса и может быть неприменимо для моделирования других процессов астрофизического нуклеосинтеза.

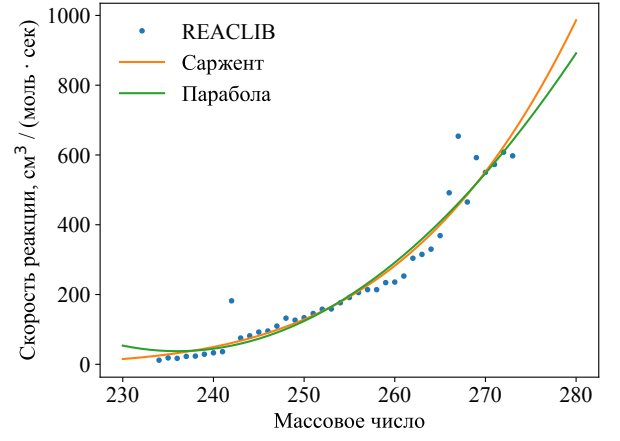
3.2.4. Аппроксимация скоростей слабых распадов

Выборки исходных данных для аппроксимаций составлялись из сумм скоростей слабых распадов, независимо от числа вылетающих нейтронов, для каждого нейтроноизбыточного изотопа заданного химического элемента. Критерий нейтроноизбыточности, который мы используем в настоящей работе, описан в разделе 3.3.3.

В качестве простейшей модельной функции для экстраполяции зависимости скоростей слабых распадов от массового числа может быть использован полином второй степени. Эта функция не отражает физики процесса, однако имеет



(a) Тербий



(b) Свинец

Рис. 10. Экстраполяция скоростей слабых распадов для нейтроноизбыточных ядер на основе данных из библиотеки REACLIB двумя модельными функциями: полиномом второй степени и формулой скорости β -распада на основе правила Сарджента и формулы Вайцзеккера.

всего три параметра аппроксимации и не требует большого числа исходных точек.

Более качественную модельную функцию можно получить, используя правило Сарджента $\lambda \sim Q_\beta^5$. Энерговыделение Q_β может быть связано с массовым числом A через формулу Вайцзеккера для энергии связи. Тогда зависимость скорости распада λ от массового числа A при фиксированном зарядовом числе Z может быть представлена в виде

$$\lambda = b_1 \cdot (Q_\beta(A) - b_2)^5, \quad Q_\beta(A) = a_1 - \frac{a_2}{A^{1/3}} - \frac{a_3}{A} + \frac{a_4}{A^{3/4}}\xi, \quad \xi = \begin{cases} +1 & \text{для четных} \\ 0 & \text{для нечетных} \\ -1 & \text{для нечетно-нечетных} \end{cases}, \quad (35)$$

где $a_1, a_2, a_3, a_4, b_1, b_2$ — параметры аппроксимации. Чтобы снизить число параметров, можно опустить член формулы Вайцзеккера, отвечающий за чётность (параметр a_4), не слишком сильно потеряв в точности.

На рис. 10 показаны примеры аппроксимаций скоростей слабых распадов нейтроноизбыточных изотопов тербия и свинца из библиотеки REACLIB, выполненных с использованием описанных модельных функций. Как видно, различия между двумя экстраполяциями несущественны, хотя экстраполированные значения, полученные с помощью правила Сарджента, обычно превосходят параболическую экстраполяцию в области сильного нейтронного избытка.

В настоящей работе мы использовали аппроксимацию по правилу Сарджента для большинства ядер, а к параболической модельной функции прибегали лишь в случае недостаточных размеров массива исходных данных.

3.2.5. Особенность слабых распадов из библиотеки REACLIB

Отметим, что в библиотеке REACLIB все слабые распады имеют постоянные значения, не зависящие от температуры. При этом ясно, что в зависимости от температуры среды меняется заселенность энергетических уровней ядра, от которой зависят скорости β -распадов. В описании базы данных [42] упоминается, что, хотя учет возбужденных состояний может существенно повлиять на периоды полураспадов, в текущей версии REACLIB в библиотеку включены экспериментальные и теоретические скорости β -распадов лишь в земных условиях, однако они могут быть замещены в дальнейшем астрофизическими скоростями, зависящими от температур и плотностей среды.

3.3. Создание библиотек астрофизических скоростей реакций

В настоящей работе скорости нейтронных захватов, полученные при помощи программы TALYS с использованием различных таблиц теоретических масс нейтроноизбыточных ядер, подставлялись в библиотеку астрофизических реакций REACLIB [42]. Мы заменили в оригинальной базе данных REACLIB все реакции (n, γ) на нейтроноизбыточных ядрах результатами наших расчетов, а также внесли недостающие скорости β^- -распадов. Таким образом были получены три варианта библиотеки астрофизических скоростей реакций, отличающихся выбором массовой модели для расчета скоростей нейтронного захвата.

3.3.1. Представление скоростей реакций в формате REACLIB

В REACLIB скорость реакции λ задается семью параметрами a_i функции температуры T (в ГК):

$$\lambda = \exp \left[a_0 + \sum_{i=1}^5 a_i T^{\frac{2i-5}{3}} + a_6 \ln T \right] \quad (36)$$

Программа TALYS выдает результаты расчета скоростей в виде таблицы в астрофизическом диапазоне температур от 10^5 до 10^{10} К. Для представления полученных нами скоростей реакций в формате REACLIB их необходимо аппроксимировать с помощью функции (36). В настоящей работе для этого использовался нелинейный метод наименьших квадратов с минимизацией по методу Левенберга–Марквардта (см., например, [43]), реализованный в пакете научных вычислений *scipy* [44].

Аппроксимация проводилась по равномерной сетке температур от 0.5 до 6 ГК с шагом 0.2 ГК. Мы взяли не весь диапазон температур, в котором TALYS выдает результаты, чтобы добиться наилучшей точности в интересующей нас области 1 – 5 ГК. Выбор длины шага обусловлен тем, что функция (36) оказалась склонна к осцилляциям на концах диапазона аппроксимации, возникаю-

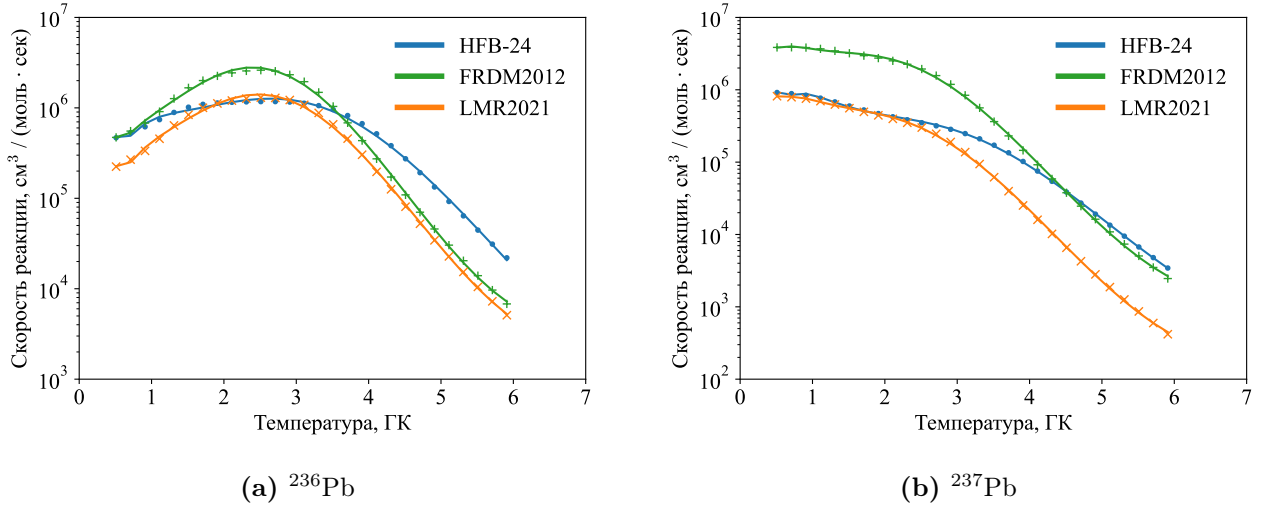


Рис. 11. Скорости реакции (n, γ) на нейтроноизбыточных изотопах свинца ^{236}Pb и ^{237}Pb , полученные с помощью программы TALYS с использованием различных массовых моделей, и результаты их аппроксимации функцией (36).

щим при слишком густой сетке, а при указанном шаге они почти исчезают. Скорости реакции (n, γ) на нейтроноизбыточных изотопах индия, тербия и свинца, полученные нами с помощью программы TALYS и аппроксимированные для представления в формате REACLIB, показаны на рис. 11.

3.3.2. Пакет ratelib

Для упрощения работы с базами данных астрофизических скоростей реакций в формате REACLIB в рамках настоящей работы на языке Python был реализован и опубликован в открытом доустпе пакет ratelib, доступный для загрузки с помощью каталога Python-пакетов PyPI¹. Пакет ratelib поддерживает загрузку базы данных из текстового файла, представление нуклидов, скоростей реакций и их коллекций в виде объектов языка Python, аппроксимацию таблиц скоростей реакций с помощью функции (36) и вывод данных в формате REACLIB в текстовый файл. В настоящей работе все модификации библиотеки REACLIB, в том числе аппроксимации функции (36), выполнены при помощи пакета ratelib.

3.3.3. Критерий нейтроноизбыточности

Подставляя скорости (n, γ) в библиотеку REACLIB, мы ограничивались только реакциями на нейтроноизбыточных изотопах. Для других ядер стандартные значения скоростей оставлялись неизменными.

То, является ли изотоп нейтроноизбыточным, определялось ненулевым значением скорости распада, а также отношением числа нейтронов к протонам.

¹<https://pypi.org/project/ratelib/>

Продифференцировав формулу Вайцеккера по числу нейтронов N , можно найти простое условие максимума энергии связи:

$$\frac{N}{Z} = c_1 + c_2 A^{2/3} \quad (37)$$

Хотя параметры c_1 и c_2 можно получить из известных значений коэффициентов формулы Вайцеккера, для надежности мы аппроксимировали их, используя список стабильных ядер, полученный из базы данных NUBASE2020 [41].

4. Моделирование r -процесса в сценарии слияния нейтронных звезд

5. Заключение

Список литературы

- [1] M. Arnould, S. Goriely, K. Takahashi, [Phys. Rept. \(2007\) 450 97](#)
- [2] T. Kajino, W. Aoki, A.B. Balantekin et al, [Prog. Part. Nuc. Phys. \(2019\) 107 109](#)
- [3]
- [4] S. Brett, I. Bentley, N. Paul et al, [Eur. Phys. J. A \(2012\) 48 184](#)
- [5] F.-K. Thielemann, M. Eichler, I.V. Panov, B. Wehmeyer, [Annu. Rev. Nucl. Part. Sci. \(2017\) 67 253](#)
- [6] S. Rosswog, M. Liebendörfer, F.-K. Thielemann et al, [Astron. Astrophys. \(1999\) 341 499](#)
- [7] S. Rosswog, T. Piran, E. Nakar, [MNRAS \(2014\) 439 744](#)
- [8] O. Korobkin, S. Rosswog, A. Arcones, C. Winteler, [MNRAS \(2012\) 426 1940](#)
- [9] S. Rosswog, O. Korobkin, A. Arcones et al, [MNRAS \(2014\) 439 744](#)
- [10] I. Kullmann, S. Goriely, O. Just et al, [MNRAS \(2021\) 439 744](#)
- [11] W. Hauser, H. Feshbach, [Phys. Rev. \(1952\) 87 366](#)
- [12] M. Samyn, S. Goriely, J.M. Pearson, [Nucl. Phys. A \(2003\) 22 69](#)
- [13] T.H.R. Skyrme, [Nucl. Phys. \(1959\) 9 615](#)
- [14] D. Vautherin, D.M. Brink, [Phys. Rev. C \(1972\) 5 626](#)
- [15] V.M. Strutinsky, [Nucl. Phys. A \(1966\) 1 1](#)
- [16] V.M. Strutinsky, [Nucl. Phys. A \(1967\) 2 420](#)
- [17] H.J. Lipkin, [Annals of Physics \(1960\) \(2\) 272](#)
- [18] Y. Nogami, [Phys. Rev. B \(1964\) 2 313](#)
- [19] J. Bardeen, L.N. Cooper, J.R. Schrieffer, [Phys. Rev. \(1957\) 108 1175](#)
- [20] J. Jänecke, H. Behrens, [Phys. Rev. C \(1974\) 9 1276](#)
- [21] V.A. Kravtsov, [JETP \(1959\) 36 1224](#)
- [22] G.T. Garvey, I. Kelson, [Phys. Rev. Lett. \(1966\) 16 197](#)
- [23] Е.В. Владимирова, М.В. Симонов, В.В. Негребецкий, К.А. Стопани, Т.Ю. Третьякова, [Изв. РАН. Серия Физическая \(2022\) 4 571](#)

- [24] E.V. Vladimirova, M.V. Simonov, T.Yu. Tretyakova, [AIP Conf. Proc. \(2021\) **2377** 070003](#)
- [25] E.V. Vladimirova, B.S. Ishkhanov, M.V. Simonov et al, [Int. J. Modern Phys. E \(2021\) **30** 2150025](#)
- [26] M. Bao, Z. He, Y.M. Zhao, A. Arima, [Phys. Rev. C \(2014\) **90** 024314](#)
- [27] S. Goriely, S. Hilaire, M. Girod, S. Peru, [Phys. Rev. Lett. \(2009\) **102** 242501](#)
- [28] J.J. Cowan, C. Sneden, J.E. Lawler et al, [Rev. Mod. Phys. \(2021\) **93** 015002](#)
- [29] A.J. Koning, D. Rochman, J. Sublet et al, [Nucl. D. Sheets \(2019\) **155** 1](#)
- [30] P. Möller, A.J. Sierk, T. Ichikawa, H. Sagawa, [ADNDT \(2016\) **109** 1](#)
- [31] S. Goriely, N. Chamel, J.M. Pearson, [Phys. Rev. C \(2013\) **88** 024308](#)
- [32] S. Goriely, [Hyp. Int. \(2001\) **132** 105](#)
- [33] W.J. Huang, M. Wang, F.G. Kondev et al, [Chinese Phys. C \(2021\) **45** 030002](#)
- [34] K. Lodders, [ApJ \(2003\) **591** 1220](#)
- [35] A. Sobiczewski, Yu.A. Litvinov, M. Palczewski, [ADNDT \(2018\) **119** 1](#)
- [36] B.W. Sargent, [Proc. R. Soc. Lond. A \(1933\) **139** 659](#)
- [37] P. Möller, B. Pfeiffer, K.-L. Kratz, [Phys. Rev. C \(2003\) **67** 055802](#)
- [38] I.V. Panov, Yu.S. Lutostansky, F.-K. Thielemann, [Nucl. Phys. A \(2016\) **947** 1](#)
- [39] A.H. Wapstra, G. Audi, C. Thibault, [Nucl. Phys. A \(2003\) **729** 129](#)
- [40] J. Duflo, A. Zuker, [Phys. Rev. C \(1995\) **52** 23](#)
- [41] F.G. Kondev, M. Wang, W.J. Huang et al, [Chinese Phys. C **45** 030001](#)
- [42] R.H. Cyburt, A.M. Amthor, R. Ferguson et al, [ApJ \(2010\) **189** 240](#)
- [43] K. Levenberg, [Quarterly of Applied Mathematics \(1944\) **2** 164](#)
- [44] P. Virtanen, R. Gommers, T.E. Oliphant et al, [Nature Methods \(2020\) **17** 261](#)