

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

1. Введение	2
2. Модели ядерных реакций в расчетах нуклеосинтеза	5
3. Массы и энергии связи нейтроноизбыточных изотопов	6
3.1. Макро-микроскопическая модель FRDM2012	6
3.2. Микроскопическая модель HFB-24	8
3.3. Метод локальных массовых соотношений LMR2021	8
3.4. Заключение	10
4. Подготовка ядерных данных для расчета r-процесса	13
4.1. Расчет скоростей нейтронного захвата	13
4.2. Модификация базы данных REACLIB	18
4.3. Скорости β^- -распадов	21
5. Моделирование r-процесса в сценарии слияния нейтронных звезд	25
6. Заключение	26
Список литературы	27

1. Введение

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. 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 требуется высокая плотность их потока, около 150 нейтронов на одно зародышевое ядро, и температуры вещества свыше 1 ГК. Такие экстремальные условия могут реализовываться при катастрофических явлениях: взрывах сверхновых, слияниях

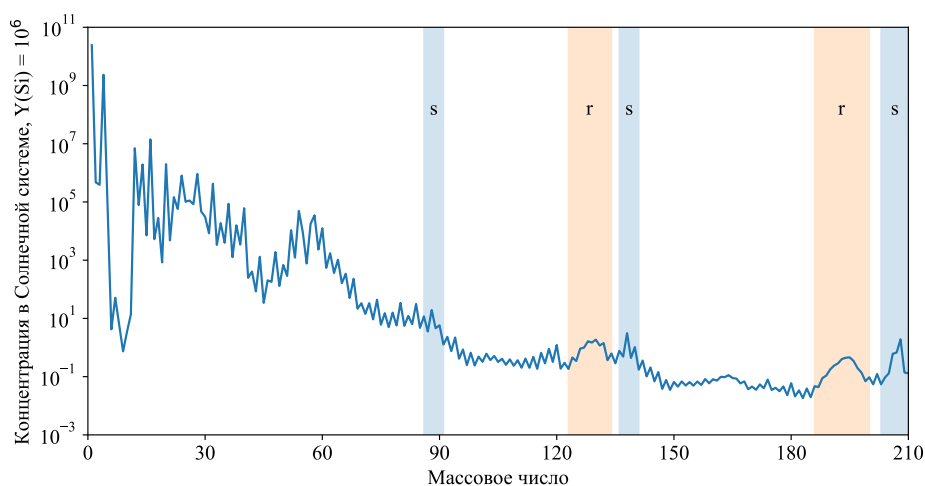


Рис. 1. Массовое распределение ядер в Солнечной системе по данным [19], масса изотопов Si принята равной 10^6 . Оранжевым отмечены пики r -процесса, синим — пики s -процесса (согласно [13]).

двух нейтронных звезд, слияниях 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. Однако 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. 1 представлено массовое распределение ядер в Солнечной системе, построенное по данным [19]. Виден избыток легчайших изотопов с $A \leq 4$, родившихся в первичном нуклеосинтезе, за которым следует 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. 1 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.

Основным методом исследования r -процесса и эволюции астрофизических ядерных систем в целом является математическое моделирование, сводящееся к решению системы обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) большой размерности. Численное интегрирование таких задач само по себе представляет существенные трудности. Входными параметрами такой системы ОДУ являются температуры и плотности среды, определяемые астрофизическим сценарием, и свойства участвующих в r -процессе реакций и ядер. Так

как путь r -процесса лежит в основном в области экзотических нейтроноизбыточных ядер, экспериментальное изучение которых в лабораторных условиях представляется невозможным, их характеристики приходится получать при помощи теоретических ядерных моделей. При этом различные ядерные модели могут давать существенно разные результаты для экзотических изотопов, например, при расчете энергий связи [20]. Неопределенности входных ядерных данных могут существенно сказываться на результатах расчета r -процесса, на что указывается, например, в статье [17].

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.

2. Модели ядерных реакций в расчетах нуклеосинтеза

3. Массы и энергии связи нейтроноизбыточных изотопов

Массы взаимодействующих и результирующих частиц являются важнейшими параметрами расчета сечений ядерной реакции при помощи статистической модели. В частности, энергия связи ядра используется при расчете плотности высоколежащих уровней, которая в модели Ферми-газа задается формулой

$$\omega(E) = \frac{\sqrt{\pi}}{12} \frac{\exp[2\sqrt{a(E - \Delta)}]}{a^{1/4}(E - \Delta)^{5/4}}, \quad (1)$$

где a и Δ являются параметрами модели, а E есть энергия возбуждения системы. В случае реакции нейтронного захвата энергия возбуждения E равна сумме кинетической энергии нейтрона и энергии его отделения S_n , которая в свою очередь определяется как разница энергий связи $B(N, Z)$ конечного и исходного изотопа:

$$S_n = B(N, Z) - B(N - 1, Z) \quad (2)$$

При этом, как видно из работы [20], 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 [15], микроскопической модели HFB-24 [16] и феноменологического метода локальных массовых соотношений LMR2021 [8]. Настоящий раздел посвящен их обзору и сравнению.

3.1. Макро-микроскопическая модель FRDM2012

Массовая модель FRDM2012 реализует коллективный подход к описанию структуры ядра при помощи продвинутого многопараметрического приближения капли несжимаемой жидкости, дополняя его феноменологическими микро-

скопическими поправками. Микроскопическая часть модели состоит из процедуры Струтинского [1, 2] для учета оболочечных поправок и метода Липкина-Ногами [3, 4] для учета эффектов спаривания.

3.1.1. Приближение жидкой капли

3.1.2. 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

$$\delta E_q(N_q, \beta) = \sum_{i=1}^{N_q} \epsilon_i^q(\beta) - \tilde{E}_q(N_q, \beta), \quad (3)$$

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 :

$$E_q = \int_{-\infty}^{\lambda} E g_q(E) dE, \quad (4)$$

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

$$N_q = \int_{-\infty}^{\lambda} g_q(E) dE \quad (5)$$

Предполагается, что плотность уровней g_q представляет собой сумму гладкой части \tilde{g} и осциллирующей вокруг нее компоненты δg_q , соответствующей оболочечным эффектам. В таком случае вычисление усредненной энергии \tilde{E}_q подразумевает устранение осциллирующей части плотности уровней. В методе усреднения Струтинского величина \tilde{g}_q ищется в виде

$$\tilde{g}_q(E) = \frac{1}{\gamma} \sum_i f\left(\frac{E - \epsilon_i}{\gamma}\right) \quad (6)$$

, 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:

$$\tilde{g}_q(E) = \frac{1}{\gamma\sqrt{\pi}} \sum_i P_M \left(\frac{E - \epsilon_i}{\gamma} \right) \exp \left(- \frac{E - \epsilon_i}{\gamma} \right)^2, \quad (7)$$

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

3.1.3. Метод Липкина-Ногами

3.2. Микроскопическая модель HFB-24

3.3. Метод локальных массовых соотношений LMR2021

3.3.1. Локальные массовые соотношения

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 [7] и актуален до сих пор благодаря высокой точности (отмеченной, например, в [11]) 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.

3.3.2. Остаточное протон-нейтронное взаимодействие

В настоящей работе наряду с таблицами FRDM2012 и HFB-24 используется таблица теоретических ядерных масс LMR2021 [8], 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 [6] и впервые использовалась для оценки энергий связи ядер в [5]. Для ядра, состоящего из Z протонов и N нейтронов, величина Δ_{np} выражается как

$$\begin{aligned}\Delta_{np}(N, Z) &= S_{np}(N, Z) - [S_p(N-1, Z) + S_n(N, Z-1)] = \\ &= B(N, Z) + B(N-1, Z-1) - B(N, Z-1) - B(N-1, Z),\end{aligned}\quad (8)$$

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.

3.3.3. Аппроксимация энергии протон-нейтронного взаимодействия

На рис. 2 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 [9, 10] 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

$$\Delta_{np}^{\text{аппр}} = C_1 + C_2 A^{-1}, \quad (9)$$

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 [8] была выбрана другая модельная функция:

$$\Delta_{np}^{\text{аппр}} = \alpha A^{\beta}, \quad (10)$$

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 [8], новая модельная функция (10) выигрывает у старой (9)

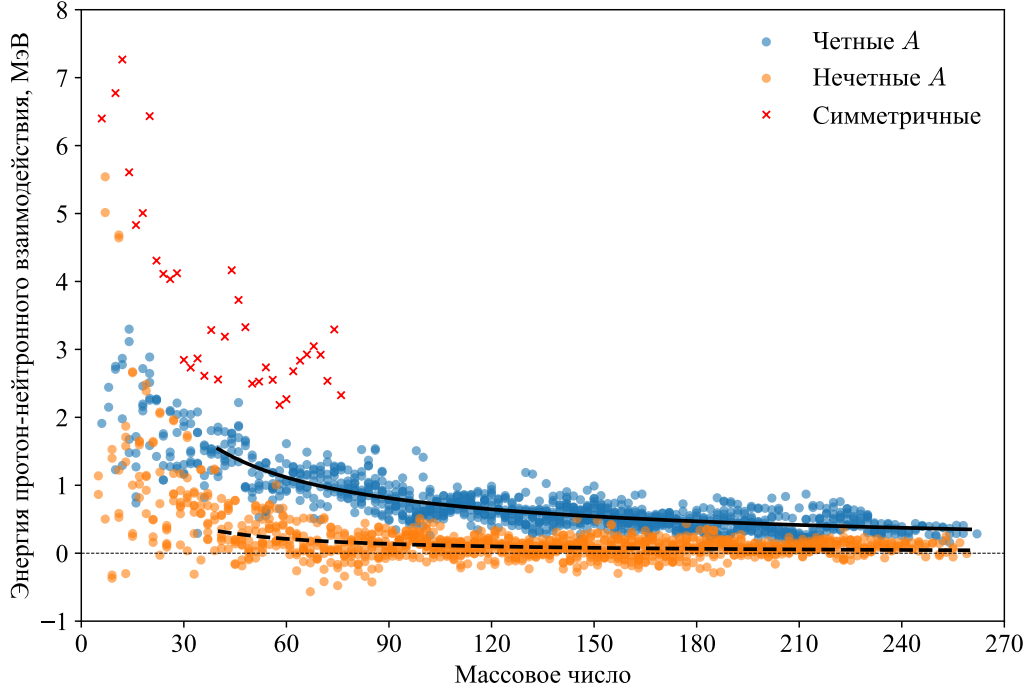


Рис. 2. Экспериментальная зависимость величины Δ_{np} от массового числа, построенная по данным AME2020 [18]. Разными цветами отмечены четные и нечетные ядра, а также ядра с равным числом протонов и нейтронов. Черными линиями показаны аппроксимации зависимости, полученные в работе [8].

в точности аппроксимации при использовании одной и той же исходной выборки данных.

В настоящей работе под массовой таблицей LMR2021 имеются в виду результаты работы [8], в которой в качестве исходной выборки для аппроксимации использовалась последняя редакция базы данных AME2020 [18]. На рис. 2 черными линиями показаны результаты этой аппроксимации.

3.4. Заключение

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 избытком 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 вбли-

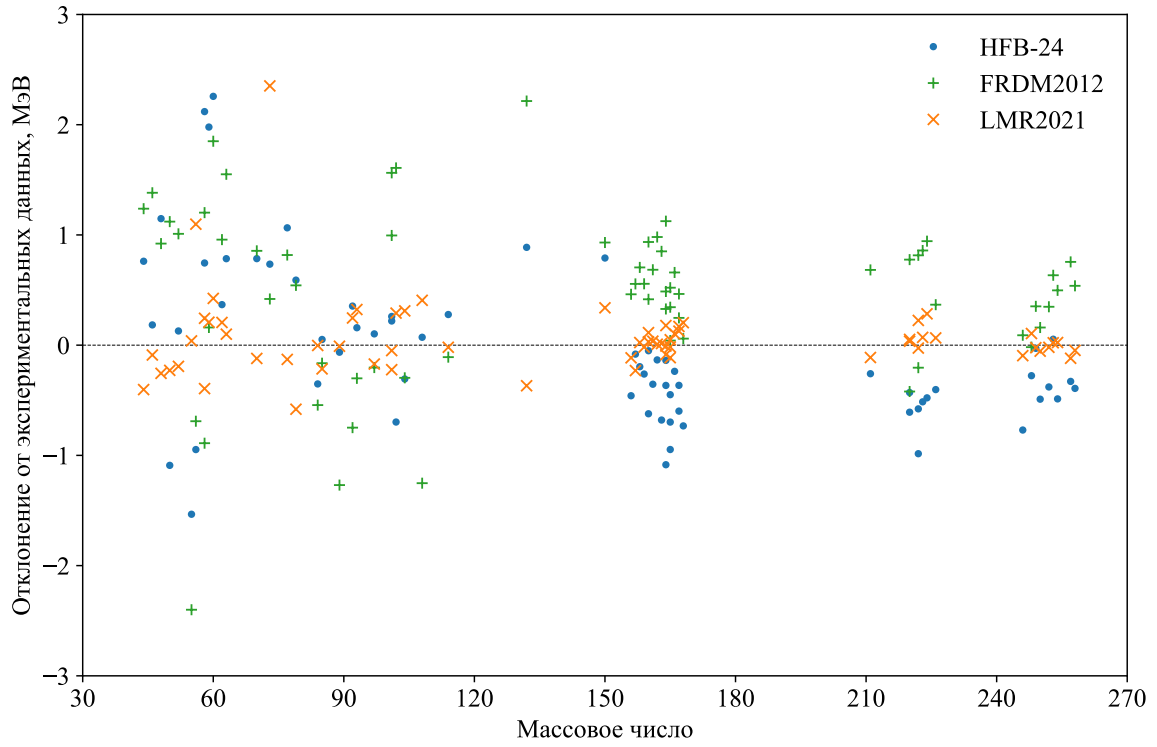


Рис. 3. Разница теоретических энергий связи из таблиц FRDM2012 [15], HFB-24 [16] и специальной версии LMR2021 [8] (см. пояснение в тексте) и экспериментальных значений из базы данных AME2020 [18].

зи 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. 3 представлены результаты этого сравнения. 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 астрофи-

зического r -процесса и нуклеосинтеза в целом необходимо совершенствовать наши представления о физике нейтроноизбыточных ядер.

4. Подготовка ядерных данных для расчета r -процесса

Ядерные характеристики, такие как энергия связи, определяют величины скоростей ядерных реакций, непосредственно влияющих на протекание r -процесса. Астрофизической скоростью ядерной реакции λ называют вероятность протекания реакции в единицу времени на единицу концентрации каждого исходного изотопа. В этом разделе обсуждается примененная нами методика расчета скоростей реакции нейтронного захвата, обработка полученных данных и формирование на их основе библиотек астрофизических скоростей реакций, которые мы в дальнейшем использовали для моделирования реалистичного сценария r -процесса при слиянии нейтронных звезд.

4.1. Расчет скоростей нейтронного захвата

4.1.1. Формула астрофизической скорости реакции

Скорость ядерной реакции λ рассчитывается путем свертки ее сечения с энергетическим распределением взаимодействующих частиц. Энергии нейтронов и ядер в звездном веществе имеют распределение Максвелла-Больцмана. Следует учитывать, что 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

$$\lambda(T) = \sqrt{\frac{8}{\pi m}} \frac{N_A}{(kT)^{3/2} G(T)} \int_0^\infty \sum_\mu \frac{(2I^\mu + 1)}{(2I^0 + 1)} \sigma^\mu(E) E \exp\left(-\frac{E + E_x^\mu}{kT}\right) dE, \quad (11)$$

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

$$G(T) = \sum_\mu \frac{(2I^\mu + 1)}{(2I^0 + 1)} \exp\left(-\frac{E_x^\mu}{kT}\right) \quad (12)$$

Расчет скорости ядерной реакции требует предварительного расчета зависимости ее сечения от энергии взаимодействия $\sigma(E)$. В настоящей работе рассматривается эволюция астрофизической ядерной системы при температурах не более 6 ГК. Энергии нейтронов при таких условиях достаточно малы, чтобы реакцию (n, γ) можно было рассматривать с точки зрения статистической модели ядерных реакций.

4.1.2. Расчеты в программе TALYS с различными массами ядер

В настоящей работе сечения и скорости реакций нейтронного захвата выполнены при помощи программы TALYS [14], которая позволяет задавать различные параметры статистической модели, в том числе теоретические массы ядер. Мы использовали микро-коллективную модель FRDM2012 [15] и микроскопическую модель HFB-24 [16], 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 [12], 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 Гоньи вместо потенциала Скирма.

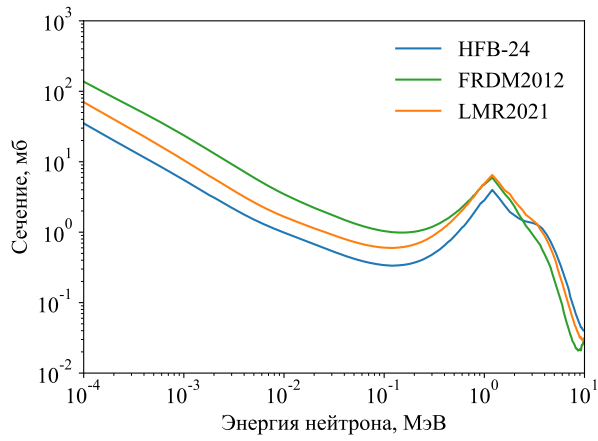
Помимо таблиц теоретических масс ядер, в TALYS внесена таблица экспериментальных масс, построенная на основе базы данных AME2003 [23]. В наших расчетах при наличии экспериментальных масс предпочтение отдавалось им. Наконец, если при расчете TALYS требуются значения масс, отсутствующие и в экспериментальной, и в теоретической таблице, то программа использует аналитическую формулу Дуффо-Цукера [24]. В наших расчетах эта формула использовалась только если неизвестна была масса конечного ядра нейтронного захвата.

4.1.3. Модификация исходного кода TALYS

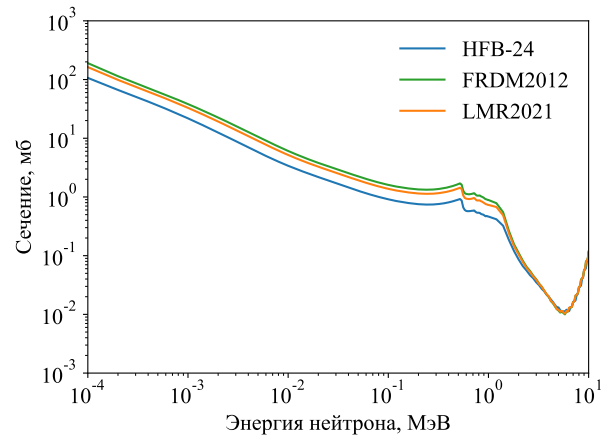
В исходный код программы TALYS нами было внесено изменение, делающее сетку температур, по которой производится расчет астрофизических скоростей, равномерной и более густой. Эта правка никак не влияет на работу статистической модели ядерных реакций, лишь делает выходные данные более подробными ценой некоторого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

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

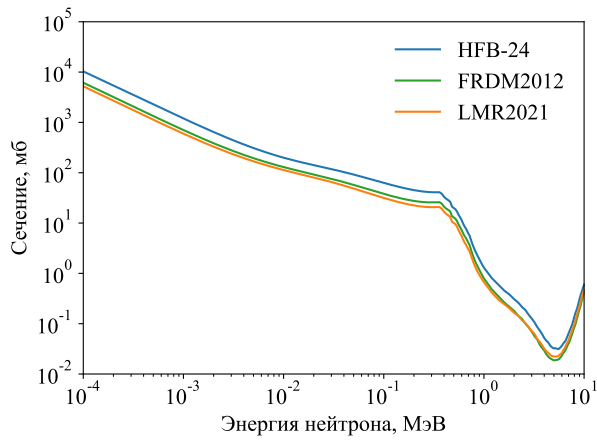
Предварительно мы получили сечения реакции нейтронного захвата на некоторых нейтроноизбыточных ядрах, используя значения масс FRDM2012, HFB-24 и LMR2021, чтобы проанализировать влияние массовой модели на сечение реакции. Результаты представлены на рис. 4. Как видно, наибольшие различия в сечениях, полученных 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



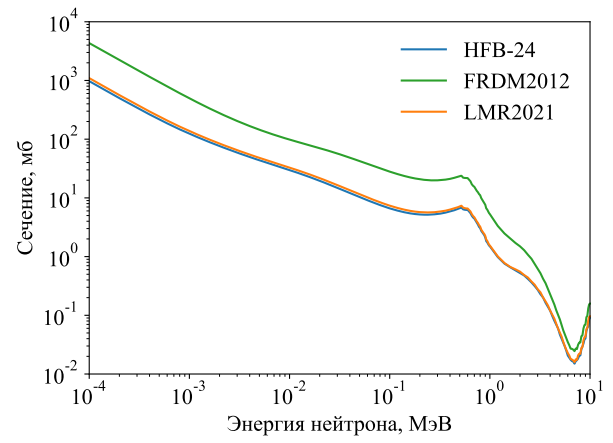
(a) ^{141}In



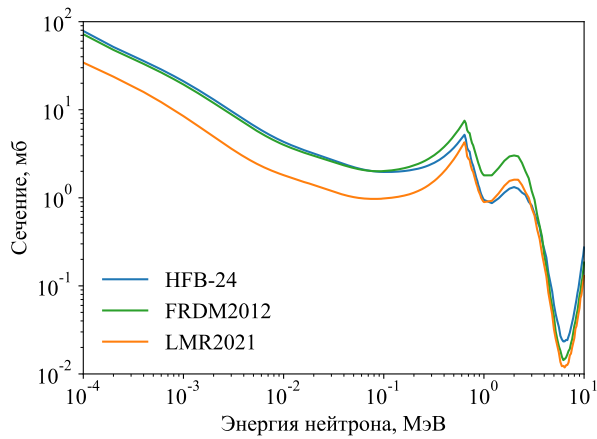
(b) ^{142}In



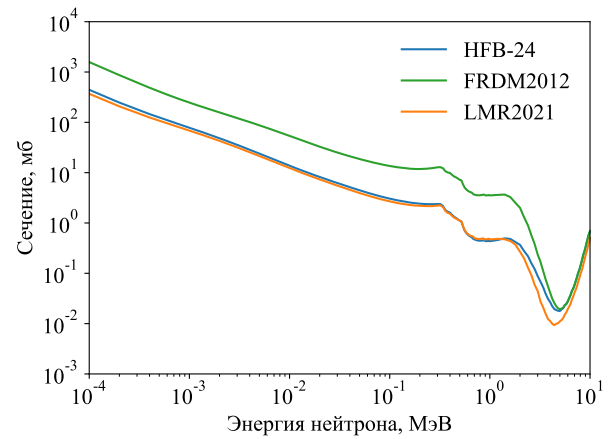
(c) ^{186}Tb



(d) ^{187}Tb



(e) ^{236}Pb



(f) ^{237}Pb

Рис. 4. Сечения реакции (n, γ) на некоторых нейтроноизбыточных изотопах индия, тербия и свинца, полученные с помощью программы TALYS с использованием различных массовых моделей.

существенного влияния выбора массовой ядерной модели на результаты моделирования r -процесса.

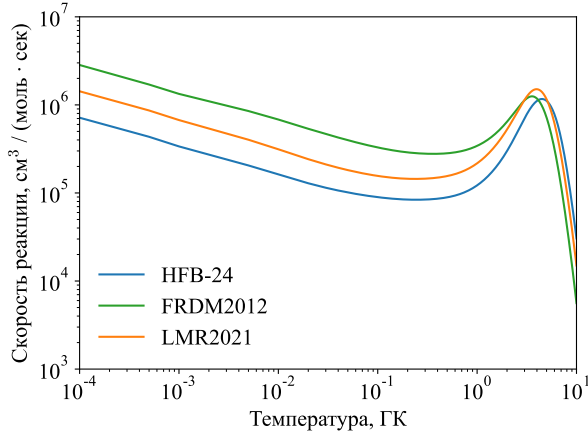
Видно, что в ряде случаев сечения, полученные при помощи массовой модели FRDM2012, превышают остальные сечения, однако это не всегда так: например, в спектре реакции $^{186}\text{Tb}(n, \gamma)^{187}\text{Tb}$ сечение для массовой модели HFB-24. Заметно также, что для ядер с нечетным числом нейтронов вариация массовой модели приводит к большим расхождениям в сечениях (n, γ) , чем для соседних изотопов с четным числом нейтронов. Например, на рис. 4е 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. 4f).

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 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 LMR2021. 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.

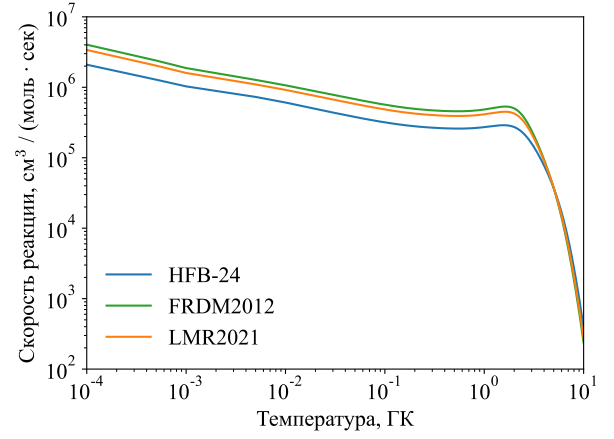
4.1.5. Результаты расчета скорости реакции (n, γ) с помощью TALYS

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. 5.

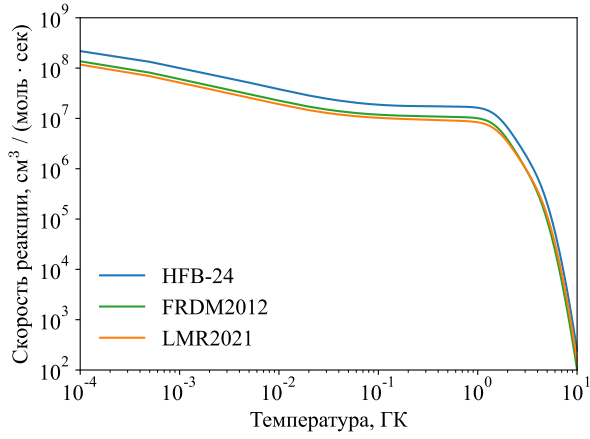
Поскольку корость реакции получают путем свертки сечения реакции с распределением взаимодействующих частиц по энергии, представленные результаты соотносятся с графиками сечений на 4. Точно также в области высоких температур (т.е. высоких средних энергий частиц) присутствует сближение скоростей, полученных 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. 5а с различиями в области низких температур почти на порядок. Для изотопов свинца на рис. 5е и 5f, как



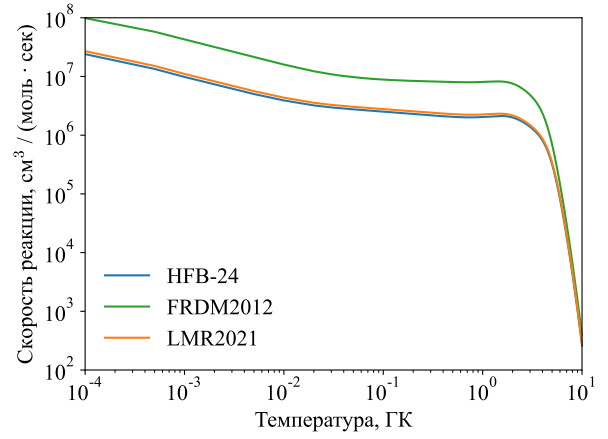
(a) ^{141}In



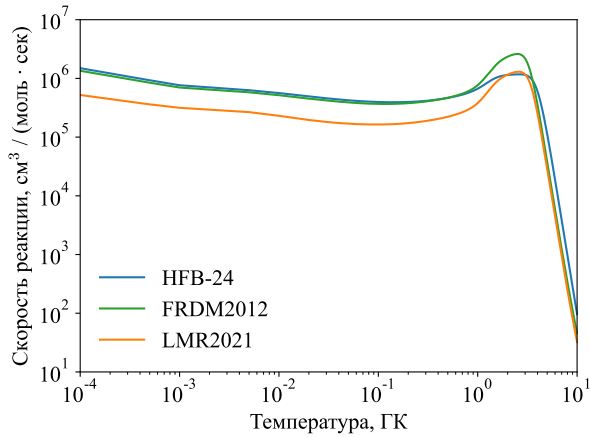
(b) ^{142}In



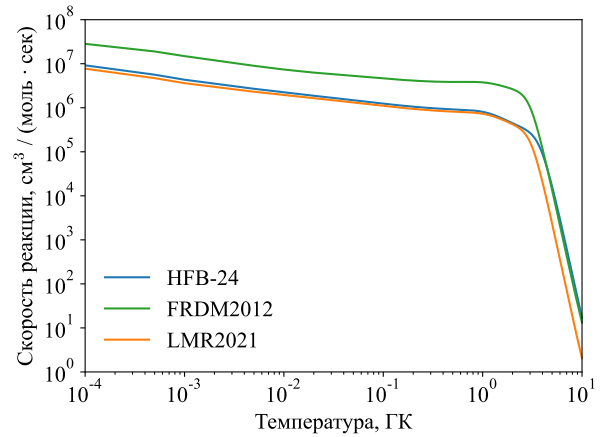
(c) ^{186}Tb



(d) ^{187}Tb



(e) ^{236}Pb



(f) ^{237}Pb

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

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.

4.1.6. 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 :

$$\begin{aligned} B_p(A, Z) &= E_{\text{св}}(A, Z) - E_{\text{св}}(A - 1, Z - 1), \\ B_n(A, Z) &= E_{\text{св}}(A, Z) - E_{\text{св}}(A - 1, Z), \end{aligned} \quad (13)$$

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. 6 представлены зависимости теоретических скоростей реакции (n, γ) при $T = 2$ ГК на 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 упирается в линию отделения нейтрона из-за отсутствия возможности продвинуться дальше, а естественным образом замедляться.

4.2. Модификация базы данных REACLIB

4.2.1. Представление скоростей реакций в REACLIB

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 [26]. В REACLIB скорость реакции λ задается семью парамет-

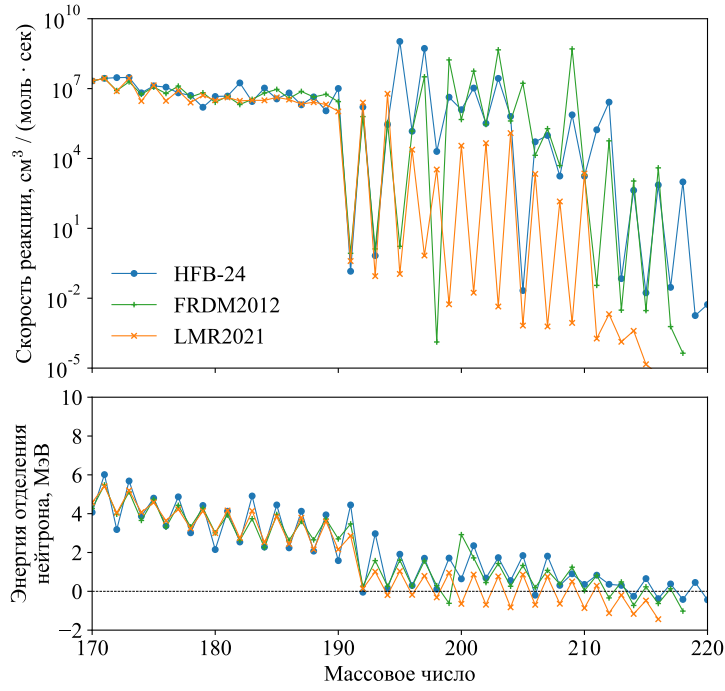


Рис. 6. Сверху: скорости нейтронных захватов на нейтроноизбыточных изотопах тербия, рассчитанные с помощью различных таблиц ядерных масс при $T = 2$ ГК. Снизу: энергии отделения нейтронов для нейтроноизбыточных изотопов тербия по данным тех же массовых таблиц.

рами a_i функции температуры T (в ГК):

$$\lambda = \exp \left[a_0 + \sum_{i=1}^5 a_i T^{\frac{2i-5}{3}} + a_6 \ln T \right] \quad (14)$$

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 (14). В настоящей работе для этого использовался нелинейный метод наименьших квадратов с минимизацией по методу Левенберга–Марквардта (см., например, [27]), реализованный в пакете научных вычислений `scipy` [28].

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 (14) оказалась склонна к осцилляциям на концах диапазона аппроксимации, возникающим 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. 7.

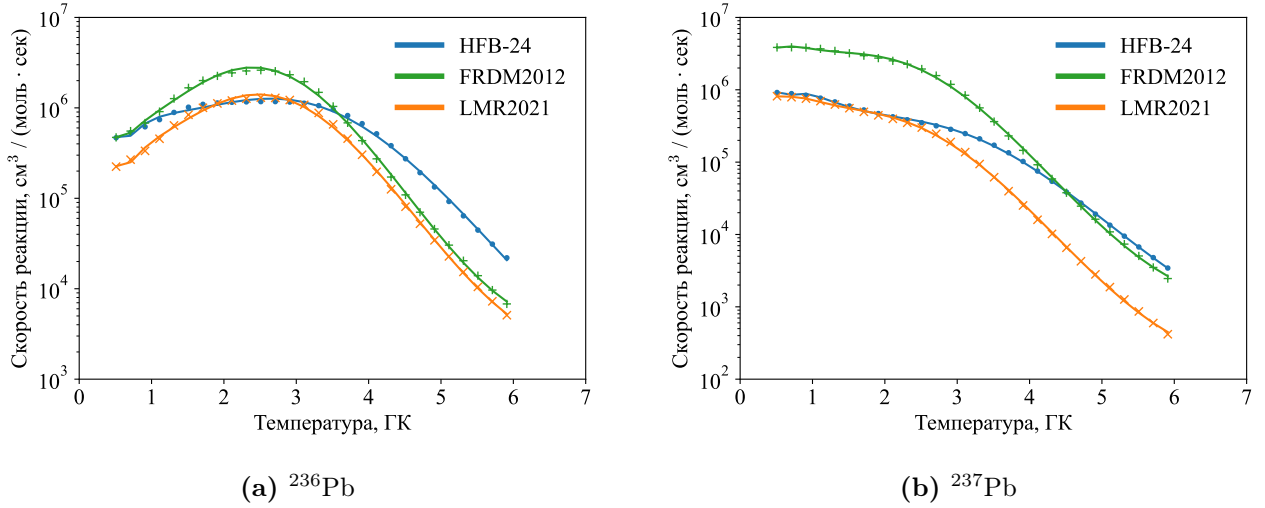


Рис. 7. Скорости реакции (n, γ) на нейтроноизбыточных изотопах свинца ^{236}Pb и ^{237}Pb , полученные с помощью программы TALYS с использованием различных массовых моделей, и результаты их аппроксимации функцией (14).

4.2.2. 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 (14) и вывод данных в формате REACLIB в текстовый файл. В настоящей работе все модификации библиотеки REACLIB, в том числе аппроксимации функции 14, выполнены при помощи пакета *ratelib*.

4.2.3. Критерий нейтроноизбыточности

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

То, является ли изотоп нейтроноизбыточным, определялось ненулевым значением скорости распада, а также отношением числа нейтронов к протонам. Продифференцировав формулу Вайцзеккера по числу нейтронов N , можно найти простое условие максимума энергии связи:

$$\frac{N}{Z} = c_1 + c_2 A^{2/3} \quad (15)$$

Хотя параметры c_1 и c_2 можно получить из известных значений коэффициентов

¹<https://pypi.org/project/ratelib/>

формулы Вайцзеккера, для надежности мы аппроксимировали их, используя список стабильных ядер, полученный из базы данных NUBASE2020 [25].

4.3. Скорости β^- -распадов

4.3.1. Теоретические значения скоростей β^- -распадов

Помимо реакций нейтронного захвата, важную роль в r -процессе играют β^- -распады. Значения их астрофизических скоростей также приходится рассчитывать на основе теоретических представлений. Для предсказания периодов β -распадов нейтроноизбыточных ядер применяются различные модели, например, [22]. Результаты подобных расчетов представлены в библиотеке астрофизических скоростей реакций REACLIB.

Скорость слабых распадов зависит массы распадающегося и конечного ядер, на что указывает хорошо известное правило Сарджента $\lambda \sim Q_\beta^5$, связывающее скорость распада λ с энергосвободением Q_β . Экспериментальные данные, позволяющие говорить о степенной связи скорости β -распада λ с Q_β , были представлены Сарджентом в [21]. Учитывая, что величина Q_β зависит от энергий связи распадающегося и конечного ядер, следует ожидать, что вариация массовой модели будет влиять на скорость β^- -распада.

В условиях астрофизического r -процесса по его определению характерные времена β^- -распадов превышают скорости реакции (n, γ) на порядки. Таким образом для достижения удовлетворительной точности симуляции r -процесса, в особенности на коротких промежутках времени около 1 с, достаточно задать скорости слабых распадов приблизительно. Поэтому нами было принято решение не менять скорости тех β^- -распадов, которые уже присутствовали в 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 статье [26] 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.

4.3.2. 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 неко-

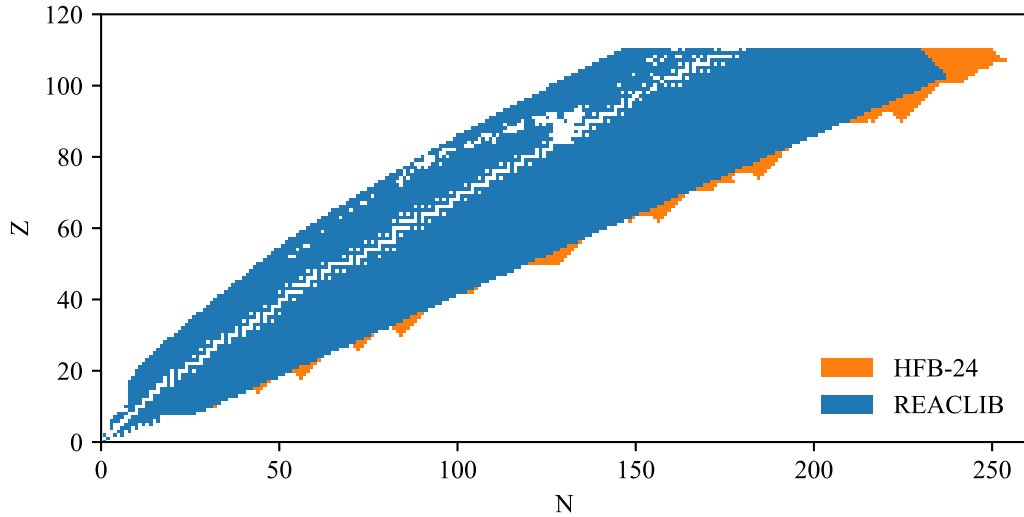


Рис. 8. Данные о слабых распадах из библиотеки REACLIB (синие квадраты) и нейтроноизбыточные изотопы, присутствующие в таблице масс HFB-24, но отсутствующие в REACLIB (оранжевые квадраты).

торых ядер-продуктов. Обусловлено это тем, что разные ядерные модели по-разному предсказывают не только энергии связи, но и область существования ядер, определяемые знаком энергий отделения протона B_p и нейтрона B_n (см. формулы 13). 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.

На рис. 8 синим цветом отмечены ядра, для которых в REACLIB присутствуют данные по слабым распадам, а оранжевым — отсутствующие в REACLIB ядра, являющиеся продуктами рассчитанных нами с помощью модели HFB-24 реакций (n, γ) . Если добавить такие реакции (n, γ) в REACLIB без соответствующих распадов, то их продукты будут накапливаться, приводя к некорректным результатам моделирования r -процесса.

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.

4.3.3. 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 Tb^{175} над β^- -распадом начинает преобладать распад $\text{Tb}^A \rightarrow \text{Dy}^{A-1} + n$, а с углублением в область нейтронного избытка усиливаются каналы с вылетом 2 и 3 нейтронов. Более того, начиная с $A = 185$

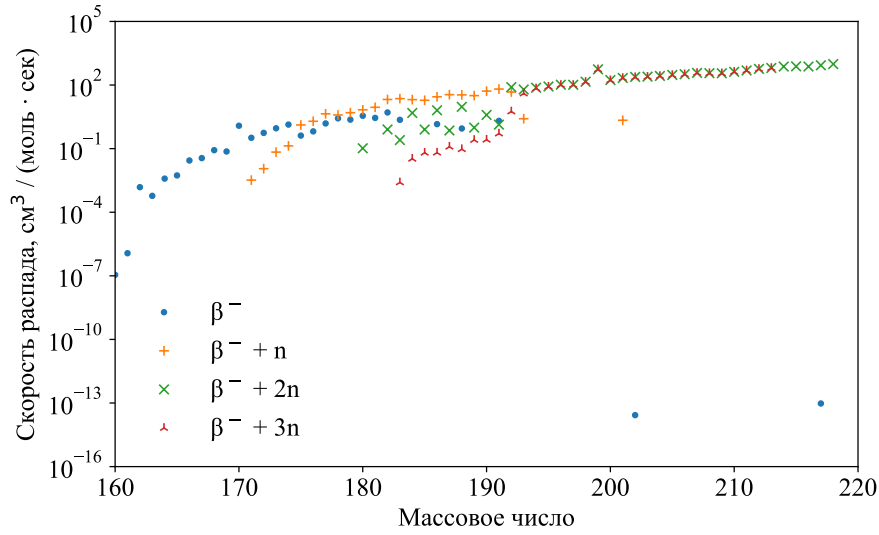


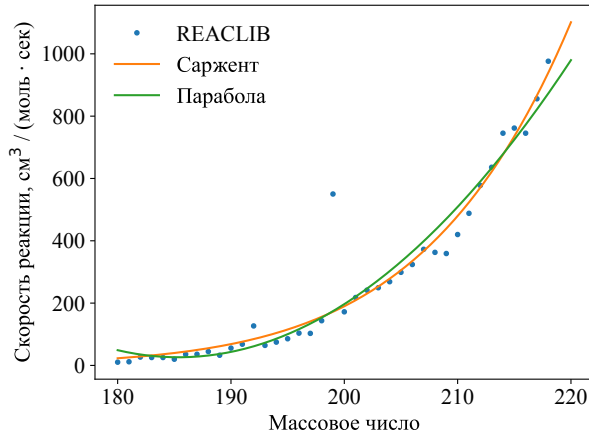
Рис. 9. Скорости слабых распадов нейтроноизбыточных изотопов тербия, содержащиеся в библиотеке REACLIB. Различными маркерами отмечены β^- -распады с вылетом разного числа нейтронов. Скорости ниже $10^{-16} \frac{\text{см}^3}{\text{моль} \cdot \text{сек}}$ не показаны.

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 функцией, например, полиномом второй степени.

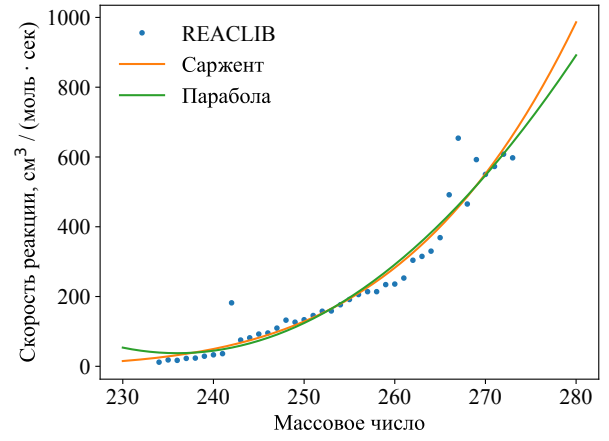
Суммирование скорости β^- -распадов с вылетом разного числа нейтронов с точки зрения задачи расчета r -процесса имеет смысл, даже несмотря на то, что продукты этих распадов различаются числом нейтронов. При скоростях реакции (n, γ) , на порядки превосходящих скорости β^- -распадов, небольшие различия 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.

4.3.4. 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 выше.



(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.

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

Используя правило Сарджента $\lambda \sim Q_\beta^5$, можно получить более качественную модельную функцию. 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

$$\lambda = b_1 \cdot (Q_\beta(A) - b_2)^5, \quad Q_\beta(A) = a_1 - \frac{a_2}{A^{1/3}} - \frac{a_3}{A} + \frac{a_4}{A^{3/4}}\xi, \quad \xi = \begin{cases} +1 & \text{для четных} \\ 0 & \text{для нечетных} \\ -1 & \text{для нечетно-нечетных} \end{cases}, \quad (16)$$

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.

5. Моделирование r -процесса в сценарии слияния нейтронных звезд

6. Заключение

Список литературы

- [1] V.M. Strutinsky, [Nucl. Phys. A \(1966\) 1 1](#)
- [2] V.M. Strutinsky, [Nucl. Phys. A \(1967\) 2 420](#)
- [3] [Annals of Physics \(1960\) \(2\) 272](#)
- [4] [Phys. Rev. B \(1964\) 2 313](#)
- [5] J. Jänecke, H. Behrens, [Phys. Rev. C \(1974\) 9 1276](#)
- [6] V.A. Kravtsov, [JETP \(1959\) 36 1224](#)
- [7] G.T. Garvey, I. Kelson, [Phys. Rev. Lett. \(1966\) 16 197](#)
- [8] Е.В. Владимирова, М.В. Симонов, В.В. Негребецкий, К.А. Стопани, Т.Ю. Третьякова, [Изв. РАН. Серия Физическая \(2022\) 4 571](#)
- [9] E.V. Vladimirova, M.V. Simonov, T.Yu. Tretyakova, [AIP Conf. Proc. \(2021\) 2377 070003](#)
- [10] E.V. Vladimirova, B.S. Ishkhanov, M.V. Simonov et al, [Int. J. Modern Phys. E \(2021\) 30 2150025](#)
- [11] M. Bao, Z. He, Y.M. Zhao, A. Arima, [Phys. Rev. C \(2014\) 90 024314](#)
- [12] S. Goriely, S. Hilaire, M. Girod, S. Peru, [Phys. Rev. Lett. \(2009\) 102 242501](#)
- [13] J.J. Cowan, C. Sneden, J.E. Lawler et al, [Rev. Mod. Phys. \(2021\) 93 015002](#)
- [14] A.J. Koning, D. Rochman, J. Sublet et al, [Nucl. D. Sheets \(2019\) 155 1](#)
- [15] P. Möller, A.J. Sierk, T. Ichikawa, H. Sagawa, [ADNDT \(2016\) 109 1](#)
- [16] S. Goriely, N. Chamel, J.M. Pearson, [Phys. Rev. C \(2013\) 88 024308](#)
- [17] S. Goriely, [Hyp. Int. \(2001\) 132 105](#)
- [18] W.J. Huang, M. Wang, F.G. Kondev et al, [Chinese Phys. C \(2021\) 45 030002](#)
- [19] K. Lodders, [ApJ \(2003\) 591 1220](#)
- [20] A. Sobiczewski, Yu.A. Litvinov, M. Palczewski, [ADNDT \(2018\) 119 1](#)
- [21] B.W. Sargent, [Proc. R. Soc. Lond. A \(1933\) 139 659](#)
- [22] P. Möller, B. Pfeiffer, K.-L. Kratz, [Phys. Rev. C \(2003\) 67 055802](#)
- [23] A.H. Wapstra, G. Audi, C. Thibault, [Nucl. Phys. A \(2003\) 729 129](#)

- [24] J. Duflo, A. Zuker, [Phys. Rev. C \(1995\) **52** 23](#)
- [25] F.G. Kondev, M. Wang, W.J. Huang et al, [Chinese Phys. C **45** 030001](#)
- [26] R.H. Cyburt, A.M. Amthor, R. Ferguson et al, [ApJ \(2010\) **189** 240](#)
- [27] K. Levenberg, [Quarterly of Applied Mathematics \(1944\) **2** 164](#)
- [28] P. Virtanen, R. Gommers, T.E. Oliphant et al, [Nature Methods \(2020\) **17** 261](#)