

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

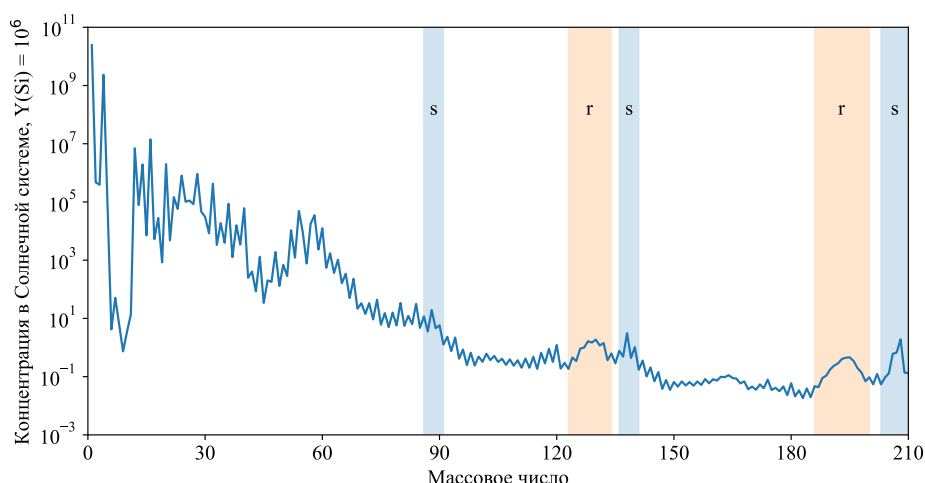
# Содержание

1. Введение	2
2. Модели ядерных реакций в расчетах нуклеосинтеза	5
3. Массы и энергии связи нейтроноизбыточных изотопов	6
4. Подготовка ядерных данных для расчета $r$ -процесса	7
4.1. Расчет скоростей нейтронного захвата с помощью TALYS . . . . .	7
4.2. Модификация базы данных REACLIB . . . . .	7
4.3. Расчет скоростей слабых распадов . . . . .	9
5. Моделирование $r$ -процесса в сценарии слияния нейтронных звезд	13
6. Заключение	14
Список литературы	15

# 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  $^1\text{H}$  и  $^4\text{He}$  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  $\beta^-$ -распады приводят к образованию химического элемента с большим зарядовым числом. В  $r$ -процессе скорости нейтронного захвата на порядки превышают скорости  $\beta^-$ -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 [4], масса изотопов Si принята равной  $10^6$ . Оранжевым отмечены пики  $r$ -процесса, синим — пики  $s$ -процесса (согласно [1]).

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 [4]. Виден избыток легчайших изотопов с  $A \leq 4$ , родившихся в первичном нуклеосинтезе, за которым следует минимум, соответствующий изотомам 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  $\beta^-$ -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 [5]. Неопределенности входных ядерных данных могут существенно сказываться на результатах расчета  $r$ -процесса, на что указывается, например, в статье [2].

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  $\beta^-$ -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**

## 4. Подготовка ядерных данных для расчета $r$ -процесса

### 4.1. Расчет скоростей нейтронного захвата с помощью TALYS

### 4.2. Модификация базы данных 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 [9]. В REACLIB скорость реакции  $\lambda$  задается семью параметрами  $a_i$  функции температуры  $T$  (в ГК):

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

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 (1). В настоящей работе для этого использовался нелинейный метод наименьших квадратов с минимизацией по методу Левенберга–Марквардта (см., например, [10]), реализованный в пакете научных вычислений `scipy` [11].

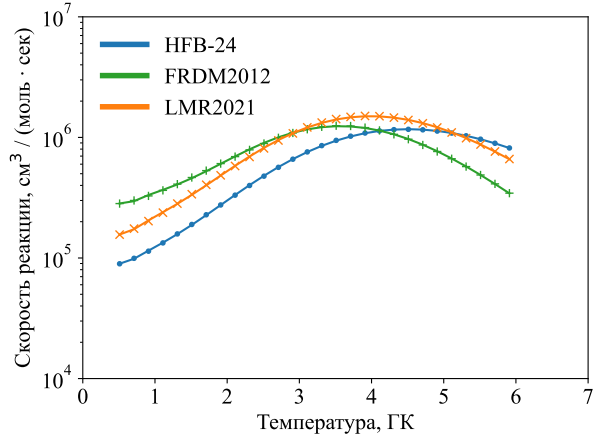
Аппроксимация проводилась по равномерной сетке температур от 0.5 до 6 ГК с шагом 0.2 ГК. Мы взяли не весь диапазон температур, в котором TALYS выдает результаты, чтобы добиться наилучшей точности в интересующей нас области 1 – 5 ГК. Выбор длины шага обусловлен тем, что функция (1) оказалась склонна к осцилляциям на концах диапазона аппроксимации, возникающим при слишком густой сетке, а при указанном шаге они почти исчезают. Скорости реакции  $(n, \gamma)$  на нейтроноизбыточных изотопах индия, тербия и свинца, полученные нами с помощью программы TALYS и аппроксимированные для представления в формате REACLIB, показаны на рис. 2.

Для упрощения работы с базами данных астрофизических скоростей реакций в формате REACLIB в рамках настоящей работы на языке Python 3 был реализован и опубликован в открытом доустпе пакет `ratelib`, доступный для загрузки с помощью каталога Python-пакетов PyPI<sup>1</sup>. 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 (1) и вывод данных в формате REACLIB в текстовый файл.

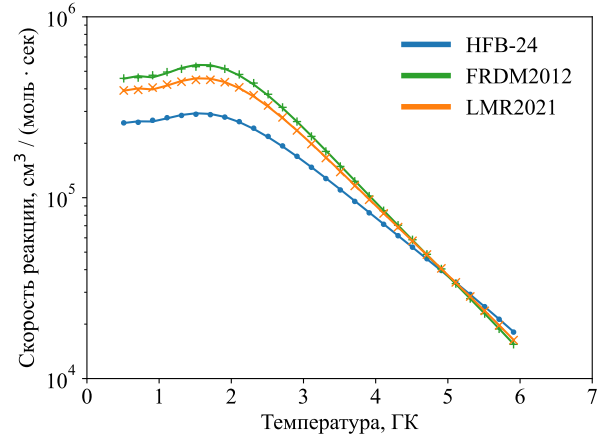
---

<sup>1</sup><https://pypi.org/project/ratelib/>

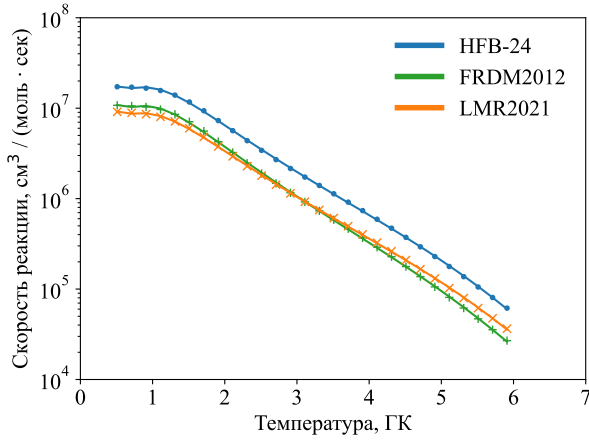




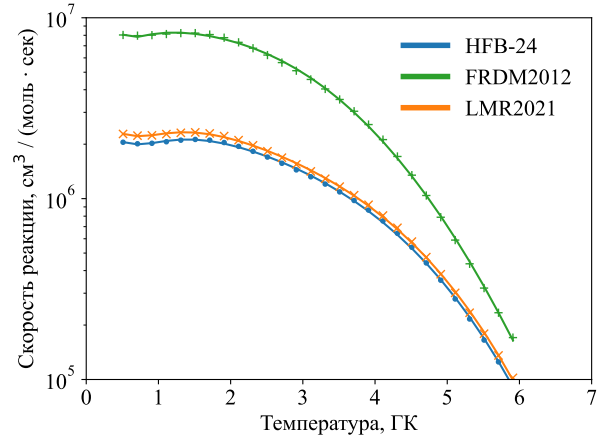
(a)  $^{141}\text{In}$



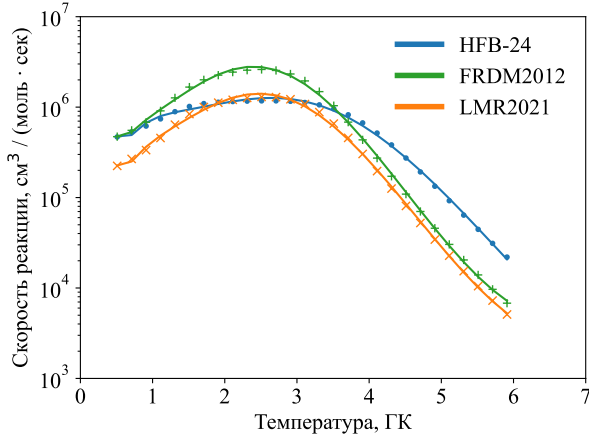
(b)  $^{142}\text{In}$



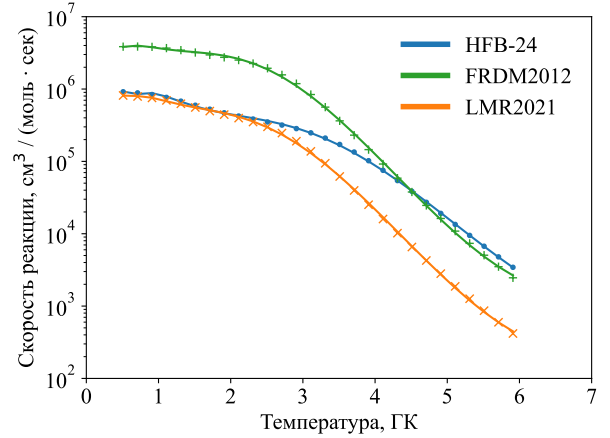
(c)  $^{186}\text{Tb}$



(d)  $^{187}\text{Tb}$



(e)  $^{236}\text{Pb}$



(f)  $^{237}\text{Pb}$

**Рис. 2.** Скорости реакции  $(n, \gamma)$  на некоторых нейтроноизбыточных изотопах индия, тербия и свинца, полученные с помощью программы TALYS с использованием различных массовых моделей, и результаты их аппроксимации функцией (1).

### 4.3. Расчет скоростей слабых распадов

Помимо реакций нейтронного захвата, важную роль в  $r$ -процессе играют  $\beta^-$ -распады. Скорость слабых распадов зависит массы распадающегося и конечного ядер, на что указывает хорошо известное правило Сарджента  $\lambda \sim Q_\beta^5$ , связывающее скорость распада  $\lambda$  с энергосвязью  $Q_\beta$ . Экспериментальные данные, позволяющие говорить о степенной связи скорости  $\beta$ -распада  $\lambda$  с  $Q_\beta$ , были представлены Сарджентом в [6]. Для расчета периодов  $\beta$ -распадов применяются различные теоретические модели, например, [7].

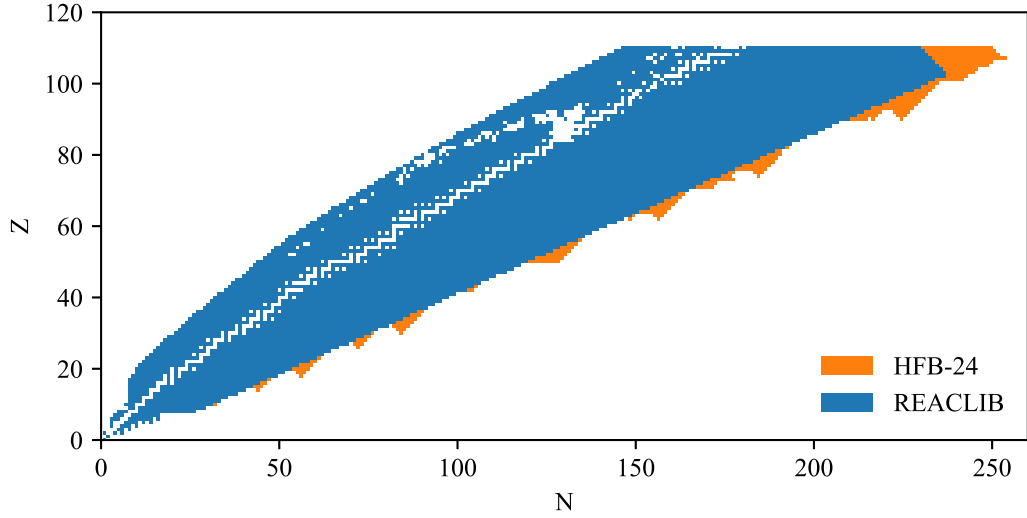
После проведения расчета скоростей реакций нейтронного захвата на ядрах, входящих в используемые в настоящей работе таблицы теоретических масс, оказалось, что в REACLIB отсутствуют скорости слабых распадов для некоторых ядер-продуктов. Обусловлено это тем, что разные ядерные модели по-разному предсказывают не только энергии связи, но и область существования яде, определяемые знаком энергий отделения протона  $B_p$  и нейтрона  $B_n$ :

$$\begin{aligned} B_p(A, Z) &= E_{\text{св}}(A, Z) - E_{\text{св}}(A - 1, Z - 1), \\ B_n(A, Z) &= E_{\text{св}}(A, Z) - E_{\text{св}}(A - 1, Z), \end{aligned} \quad (2)$$

где  $E_{\text{св}}$  — энергия связи ядра, зависящая от выбора массовой модели. При отрицательных значениях  $B_p$  или  $B_n$  протон или нейтрон, соответственно, будет беспрепятственно покидать ядро. Ясно, что положение линии отделения нейтрона должно существенно влиять на протекание  $r$ -процесса, потому что в области  $B_n < 0$  накопление нейтронов становится невозможным. На рис. 3 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  $(n, \gamma)$ . Если добавить такие реакции  $(n, \gamma)$  в REACLIB без соответствующих распадов, то их продукты будут накапливаться, приводя к некорректным результатам моделирования  $r$ -процесса.

В условиях астрофизического  $r$ -процесса по его определению характерные времена  $\beta^-$ -распадов превышают скорости реакции  $(n, \gamma)$  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 было принято решение не менять скорости тех  $\beta^-$ -распадов, которые уже присутствовали в REACLIB, а недостающие получить с помощью экстраполяции в нейтроноизбыточную область для изотопов каждого отдельного химического элемента.

Отметим, что в библиотеке REACLIB для изотопов с избытком нейтронов помимо обычных  $\beta^-$ -распадами присутствуют  $\beta^-$ -распады с вылетом 1 — 3 нейтронов. На рис. 4 показаны скорости слабых распадов нейтроноизбыточных изотопов тербия. Как видно, начиная с изотопа Tb<sup>175</sup> над  $\beta^-$ -распадом начинает преобладать распад Tb<sup>A</sup> → Dy<sup>A-1</sup> + n, а с углублением в область нейтронного избытка усиливаются каналы с вылетом 2 и 3 нейтронов. Более того, начиная



**Рис. 3.** Данные о слабых распадах из библиотеки REACLIB (синие квадраты) и нейтроноизбыточные изотопы, присутствующие в таблице масс HFB-24, но отсутствующие в REACLIB (оранжевые квадраты).

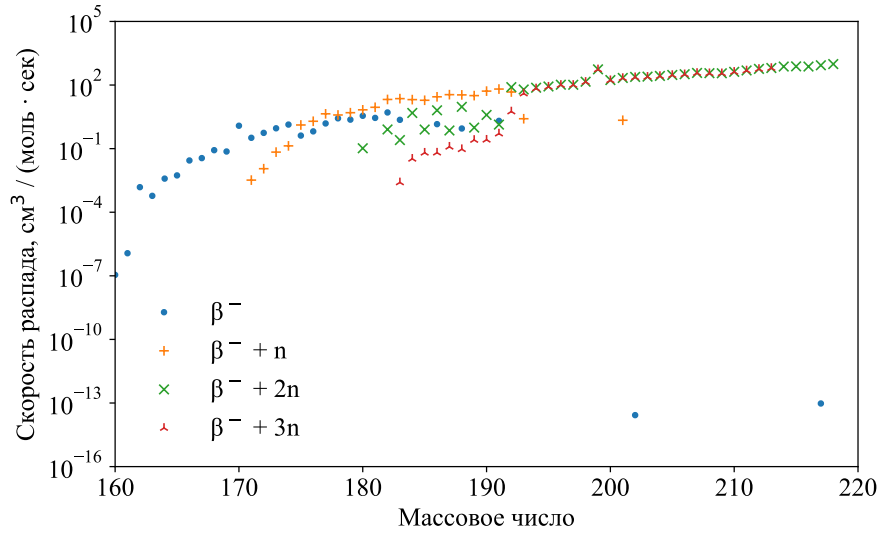
с  $A = 185$  скорости  $\beta^-$ -распада падают до пренебрежимо малых значений. При этом видно, что сумма скоростей всех четырех каналов распада для каждого изотопа в зависимости от массового числа может быть аппроксимирована простой функцией, например, полиномом второй степени.

Суммирование скорости  $\beta^-$ -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  $(n, \gamma)$ , на порядки превосходящих скорости  $\beta^-$ -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  $(n, \gamma)$  и обратной реакцией фотовывивания нейтрона  $(\gamma, n)$ . Это позволило нам при добавлении отсутствующих скоростей слабых распадов в REACLIB ограничиться только  $\beta^-$ -распадами. Такое допущение обусловлено спецификой  $r$ -процесса и может быть неприменимо для моделирования других процессов астрофизического нуклеосинтеза.

Выборки исходных данных для аппроксимаций составлялись из сумм скоростей слабых распадов для каждого нейтроноизбыточного изотопа заданного химического элемента. 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:

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

Хотя параметры  $c_1$  и  $c_2$  можно получить из известных значений коэффициентов



**Рис. 4.** Скорости слабых распадов нейтроноизбыточных изотопов тербия, содержащиеся в библиотеке REACLIB. Различными маркерами отмечены  $\beta^-$ -распады с вылетом разного числа нейтронов. Скорости ниже  $10^{-16} \frac{\text{см}^3}{\text{моль} \cdot \text{сек}}$  не показаны.

формулы Вайцзеккера, для надежности мы аппроксимировали их, используя список стабильных ядер, полученный из базы данных NUBASE2020 [8].

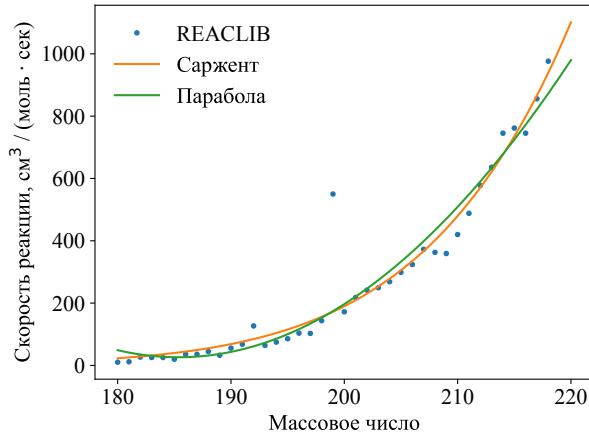
В качестве простейшей модельной функции для экстраполяции зависимости скоростей слабых распадов от массового числа может быть использован полином второй степени. Эта функция не отражает физики процесса, однако имеет всего три параметра аппроксимации и не требует большого числа исходных точек.

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

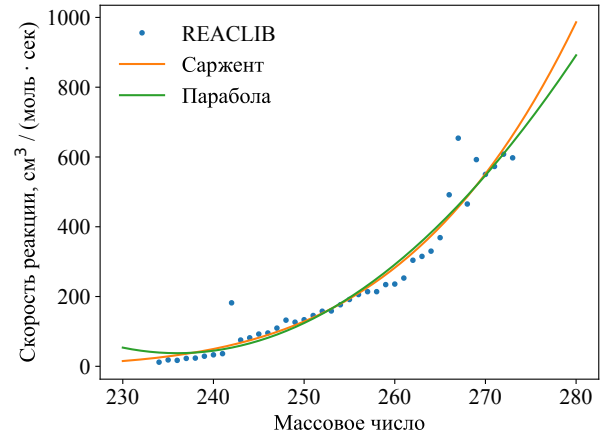
$$\lambda = b_1 \cdot (Q_\beta(A) - b_2)^5, \quad Q_\beta(A) = a_1 - \frac{a_2}{A^{1/3}} - \frac{a_3}{A} + \frac{a_4}{A^{3/4}}\xi, \quad \xi = \begin{cases} +1 & \text{для четных} \\ 0 & \text{для нечетных} \\ -1 & \text{для нечетно-нечетных} \end{cases}, \quad (4)$$

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. 5 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 несут незначительные различия, хотя экстраполированные значения, полученные с помощью правила Сарджента, обычно превосходят параболическую экстраполяцию в области сильного нейтронного избытка.



(a) Тербий



(b) Свинец

**Рис. 5.** Экстраполяция скоростей слабых распадов для нейтроноизбыточных ядер на основе данных из библиотеки REACLIB двумя модельными функциями: полиномом второй степени и формулой скорости  $\beta$ -распада на основе правила Сарджента и формулы Вайцеккера.

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  $\beta$ -распадов. В статье [9] упоминается, что, хотя учет возбужденных состояний может существенно повлиять на периоды полураспадов, в текущей версии REACLIB в библиотеку включены экспериментальные и теоретические скорости  $\beta$ -распадов лишь в земных условиях, однако они могут быть замещены в дальнейшем астрофизическими скоростями, зависящими от температур и плотностей среды.

## 5. Моделирование $r$ -процесса в сценарии слияния нейтронных звезд

## 6. Заключение

## Список литературы

- [1] J.J. Cowan, C. Sneden, J.E. Lawler et al, [Rev. Mod. Phys.](#) (2021) **93** 015002
- [2] S. Goriely, [Hyp. Int.](#) (2001) **132** 105
- [3] W.J. Huang, M. Wang, F.G. Kondev et al, [Chinese Phys. C](#) (2021) **45** 030002
- [4] K. Lodders, [ApJ](#) (2003) **591** 1220
- [5] A. Sobiczewski, Yu.A. Litvinov, M. Palczewski, [ADNDT](#) (2018) **119** 1
- [6] B.W. Sargent, [Proc. R. Soc. Lond. A](#) (1933) **139** 659
- [7] P. Möller, B. Pfeiffer, K.-L. Kratz, [Phys. Rev. C](#) (2003) **67** 055802
- [8] F.G. Kondev, M. Wang, W.J. Huang et al, [Chinese Phys. C](#) **45** 030001
- [9] R.H. Cyburt, A.M. Amthor, R. Ferguson et al, [ApJ](#) (2010) **189** 240
- [10] K. Levenberg, [Quarterly of Applied Mathematics](#) (1944) **2** 164
- [11] P. Virtanen, R. Gommers, T.E. Oliphant et al, [Nature Methods](#) (2020) **17** 261