Потенціал Вудса-Саксона, теорія оболонкових поправок Атомні маси та деформація ядер

В.Ю. ДЕНИСОВ

Київський національний університет імені Тараса Шевченка Інститут ядерних досліджень, Київ, Україна

План

- 1. Вступ.
- 2. Потенціал Вудса-Саксона.
- 3. Теорія оболонкових поправок Струтинського.
- 4. Атомні маси.
- 5. Деформація ядер.
- 7. Поділ ядер.
- 8. Висновки.

1. Вступ

Маса ядра $M_{Nucl}c^2$ менша за сумарну масу усіх протонів та нейтронів

$$M_{\text{Nucl}}c^2 < Z \cdot m_P c^2 + N \cdot m_N c^2.$$

Ця різниця є енергія зв'язку

$$E(Z,N) = Z \cdot m_P c^2 + N \cdot m_N c^2 - M_{\text{Nucl}} c^2.$$

Енергія зв'язку на нуклон







Формула Вайцзеккера для енергії зв'язку

$$B = a_v A + a_s A^{2/3} + a_c \frac{Z^2}{A^{1/3}} + a_{sym} \frac{(N-Z)^2}{A} - \begin{cases} 34A^{-3/4} & \text{for even} - \text{even} \\ 0 & \text{for odd} \\ -34A^{-3/4} & \text{for odd} - \text{odd} \end{cases}$$

Tyr $a_v = -15.75$ MeV, $a_s = 17.8$ MeV, $a_c = 0.71$ MeV and $a_{sym} = 23.7$ MeV.



Краплинна модель

Краплинна модель поділу.

$$R(\theta) = R_0 \lambda(\beta_2, \beta_4) \left[1 + \beta_2 Y_{20}(\theta) + \beta_4 Y_{40}(\theta) \right].$$

Об'єм та кількість частинок зберігається при деформації ядра, тому

$$\frac{4\pi R_0^3}{3} = \frac{2\pi}{3} \int_0^\pi \sin(\theta) \ d\theta \ [R(\theta)]^3 = \frac{4\pi R_0^3}{3} \ (\lambda(\beta_2, \beta_4))^3 \ \int_0^\pi \sin(\theta) \ d\theta \ [1 + \beta_2 Y_{20}(\theta) + \beta_4 Y_{40}(\theta)]^3.$$

Умова для $\lambda(\beta_2,\beta_4)$ є

$$\lambda(\beta_2, \beta_4) = \left\{ \int_0^{\pi} \sin(\theta) \ d\theta \ \left[1 + \beta_2 Y_{20}(\theta) + \beta_4 Y_{40}(\theta) \right]^3 \right\}^{-1/3}.$$

Якщо ми врахуємо β_2^2 та β_2^3 у поверхневої та кулонівської енергіях то

$$\frac{E_{surf}}{b_s A^{1/3}} = 1 + \left(\frac{1}{2\pi}\right)\beta_2^2 + \left(\frac{1}{42}\frac{\sqrt{5}}{\pi^{3/2}}\right)\beta_2^3,$$
$$\frac{E_{coul}}{\frac{3}{5}\frac{e^2Z^2}{R_0}} = 1 - \left(\frac{1}{4\pi}\right)\beta_2^2 - \left(\frac{1}{42}\frac{\sqrt{5}}{\pi^{3/2}}\right)\beta_2^3.$$

$$E_{def} = E_{surf} + E_{coul} =$$

$$= b_s A^{1/3} \left[1 + \left(\frac{1}{2\pi}\right) \beta_2^2 + \left(\frac{1}{42} \frac{\sqrt{5}}{\pi^{3/2}}\right) \beta_2^3 \right]$$

$$+ \frac{3e^2 Z^2}{5R_0} \left[1 - \left(\frac{1}{4\pi}\right) \beta_2^2 - \left(\frac{1}{42} \frac{\sqrt{5}}{\pi^{3/2}}\right) \beta_2^3 \right]$$

Параметр подільності

$$x = \frac{E_{coul}}{2E_{surf}} = \frac{\frac{3}{5}\frac{e^2Z^2}{R_0}}{2b_s A^{2/3}} = \frac{3e^2}{10b_s}\frac{Z^2}{R_0 A^{2/3}} = \frac{3e^2}{10r_0 b_s}\frac{Z^2}{A^1} \approx 0.02\frac{Z^2}{A},$$

де $R_0 = r_0 A^{1/3} \approx 1.2 A^{1/3}$ fm, $B_s \approx 17 - 19$ MeV.

$$E_{def} = b_s A^{1/3} \left\{ \left[1 + \left(\frac{1}{2\pi}\right) \beta_2^2 + \left(\frac{1}{42} \frac{\sqrt{5}}{\pi^{3/2}}\right) \beta_2^3 \right] + 2x \left[1 - \left(\frac{1}{4\pi}\right) \beta_2^2 - \left(\frac{1}{42} \frac{\sqrt{5}}{\pi^{3/2}}\right) \beta_2^3 \right] \right\}$$
$$= b_s A^{1/3} \left\{ (1 + 2x) + \left(\frac{1}{2\pi}\right) \beta_2^2 (1 - x) + \left(\frac{1}{42} \frac{\sqrt{5}}{\pi^{3/2}}\right) \beta_2^3 (1 - 2x) \right\}$$

Поверхнева енергія:

E_{surf}	$10539 \ \beta_2^2 \beta_3^2 \beta_4 \qquad 1350 \ \sqrt{5} \beta_2 \ \beta_4^3 \qquad 1805 \ \sqrt{5} \beta_2^5 \beta_4$
$\overline{b_s A^{2/3}}$ –	$1 + \frac{1}{616} - \frac{\pi^{5/2}}{\pi^{5/2}} - \frac{1}{1001} - \frac{\pi^2}{\pi^2} - \frac{1}{56056} - \frac{\pi^3}{\pi^3}$
	$\frac{5}{\sqrt{5\beta_2}\beta_4^2} = \frac{45}{\sqrt{5\beta_2}^3\beta_4} + \frac{1011}{\sqrt{5\beta_2}^3\beta_4^2} = \frac{1}{\sqrt{5\beta_2}\beta_3^2}$
	$-\frac{1}{77} \frac{\pi^{3/2}}{\pi^{3/2}} - \frac{1}{308} \frac{\pi^2}{\pi^2} + \frac{1}{572} \frac{\pi^{5/2}}{\pi^{5/2}} - \frac{1}{15} \frac{\pi^{3/2}}{\pi^{3/2}}$
	$- 6637 \sqrt{5}\beta_2{}^3\beta_3{}^2 - 54 \sqrt{5}\beta_2 \beta_3{}^2\beta_4 - 3 \beta_2{}^2\beta_4 - 3 \beta_3{}^2\beta_4 - 9911975 \beta_2{}^4\beta_4{}^2$
	$+\frac{1}{4620} \frac{\pi^{5/2}}{\pi^{5/2}} - \frac{1}{13} \frac{\pi^2}{\pi^2} - \frac{1}{14} \frac{\pi^{3/2}}{\pi^{3/2}} - \frac{1}{22} \frac{\pi^{3/2}}{\pi^{3/2}} + \frac{1}{879648} \frac{\pi^3}{\pi^3}$
	$2593337 \beta_2^4 \beta_3^2 = 27955 \beta_4^2 \beta_2^2 = 18059 \beta_3^2 \beta_4^2 + 1313019 \beta_2^2 \beta_4^3$
	$+ \frac{1}{288288} \frac{1}{\pi^3} - \frac{1}{4004} \frac{1}{\pi^2} - \frac{1}{1144} \frac{1}{\pi^2} + \frac{1}{136136} \frac{1}{\pi^{5/2}}$
	$242835 \beta_2^{\ 6}\beta_4 + 23763 \beta_2^{\ 4}\beta_4 + 73 \sqrt{5}\beta_2^{\ 5} + \sqrt{5}\beta_2^{\ 3} = 1635 \sqrt{5}\beta_2^{\ 7}$
	$-\frac{1}{68068} - \frac{\pi^{7/2}}{\pi^{7/2}} + \frac{1}{16016} - \frac{\pi^{5/2}}{\pi^{5/2}} + \frac{1}{924} - \frac{1}{\pi^{5/2}} - \frac{1}{1/42} - \frac{1}{\pi^{3/2}} - \frac{1}{10192} - \frac{1}{\pi^{7/2}} - \frac{1}$
	$195 \beta_2^2 \beta_3^2 = 157122775 \beta_2^8 = 33 \beta_2^4 + 0 4 \beta_4^2 + 5 4 \beta_3^2$
	$-\frac{1}{44} \frac{\pi^2}{\pi^2} - \frac{1}{274450176} \frac{\pi^4}{\pi^4} - \frac{1}{56} \frac{\pi^2}{\pi^2} + \frac{9}{4} \frac{\pi}{\pi} + \frac{3}{4} \frac{\pi}{\pi}$
	$+1218115 \beta_2^6 = 81 \beta_4^3 + 1\beta_2^2 \beta_2^2 = 27099 \beta_3^4 = 161299 \beta_4^4$
	$+\frac{1}{2018016} \frac{\pi^{3}}{\pi^{3}} - \frac{1}{2002} \frac{\pi^{3/2}}{\pi^{3/2}} + \frac{1}{2} \frac{\pi}{\pi} - \frac{1}{11440} \frac{\pi^{2}}{\pi^{2}} - \frac{1}{24752} \frac{\pi^{2}}{\pi^{2}}.$

Кулонівська енергія





2. Потенціал Вудса-Саксона





FIG. 3. Calculated fission-barrier heights as a function of mass number for atomic numbers Z = 20 to 90. The points are barriers for beta-stable nuclei from Z = 14 to Z = 117.9 in steps of 2 (except for the last step). The points are the same as the solid curve in Fig. 2.

Форми ядра в основному стані і в седловой точці



Розглянемо для простоти рівняння Шредінгера для протона в ядрі з Z протонами

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V\right]\Psi = E\Psi$$

де

$$V = V_{\text{Coul}}(r) + V_{\text{CR}}(r) + V_{\text{SR}}(r)\hbar^{2}(\vec{S}\vec{L}),$$
$$V_{\text{Coul}}(r) = \begin{cases} \frac{(Z-1)e^{2}}{r}, & r \ge R_{\text{Coul}},\\ \frac{(Z-1)e^{2}}{R_{\text{Coul}}} \left[\frac{3}{2} - \frac{r^{2}}{2R_{\text{Coul}}^{2}}\right], & r \ge R_{\text{Coul}}, \end{cases}$$

є кулонівська енергія,

$$V_{\rm CR}(r) = \frac{V_0}{1 + \exp\left((r - R_C)/d_C\right)}, \quad V_{\rm LS}(r) = \frac{d}{dr} \frac{V_{\rm SR}}{1 + \exp\left((r - R_{\rm SR})/d_{\rm SR}\right)}$$

є центральний та спин-обертальний потенціал.



Рівняння Шредінгера:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V\right]\Psi = E\Psi$$

Повна хвильова функція

$$\Psi = \frac{\psi_{j\ell}(r)}{r} Y_{lm}(\Omega) \xi_s.$$

Поділ змінних, що з'являються в повному рівнянні Шредінгера, призводить до звичайного радіального рівняння для кожного значення орбітального та загального кутового моменту ℓ and j

$$\left\{ -\frac{d^2}{dr^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + \frac{k^2}{E} \left[E - (V_{\text{Coul}}(r) + V_{\text{CR}}(r) + iW_{\text{CI}}(r)) - (V_{\text{SR}}(r) + iW_{\text{SR}}(r))\hbar^2(j(j+1) - \ell(\ell+1) - s(s+1))/2 \right] \right\} \psi_{j\ell} = 0$$

де $k = (2mE/\hbar^2)^{1/2}$.

Це рівняння можна записати у вигляді

$$\frac{d^2}{dr^2}\psi(r) = A(r)\psi(r).$$

Вводимо допоміжну функцію

$$\zeta(r) = \psi(r) - \frac{h^2}{12} A(r) \psi(r),$$

де h - крок алгоритму кінцевих різниць. Для функції ζ існує алгоритм Нумерова, заснований на формулі скінченної різниці для трьох послідовних точок на сітці з кроком h,

$$\zeta_{i+1}(r_{i+1}) = \left[2 + \frac{h^2 A_i}{1 - (h^2/12)A_i}\right] \zeta_i(r_i) - \zeta_{i-1}(r_{i-1}).$$

Граничні умови для $r = 0 \in \psi(r) = 0$.

Асимптотика для $r \to \infty$ для зв'язаних рівнів $E < 0 \in \psi(r) \sim \exp\left[-\sqrt{-2mE/\hbar^2}r\right]$. Асимптотита для $r \to \infty$ для квазістаціонарних рівнів $E > 0 \in \psi(r) \sim \sin\left[\sqrt{2mE/\hbar^2}r + \delta_\ell - \ell\pi/2\right]$, де δ_ℓ - фаза розсіяння.



Борис Васильович Нумеров [29 січня 1891 - 13 вересня 1941] був російським астрономом, землевпорядником та геофізиком.

Якщо оцінити одночастинну енергію E_i і підсумувати всі енергії, то енергія

$$E_{\text{tot}} = \sum_{i}^{i_F} E_i.$$

не збігається до енергії зв'язку ядер, тому що потенціал не є самоузгодженим.

Зауважимо, що енергію зв'язування можна оцінити в рамках наближення Хартрі-Фока з високою точністю. Однак наближення Хартрі-Фока є досить складним.

Однак безліч різноманітних величин:

- рівні частинки,

- бар'єри ділення, період напіврозпаду поділу,
- енергії зв'язування (використовуючи підхід до корекції оболонки)
- різні параметри динаміки,
- енергії одночастинкових і збуджених станів

може бути оцінена в простому наближенні Вудса-Саксона з високою точністю.

Отже, наближення Вудса-Саксона є досить простим і корисним!

3. Теорія оболонкових поправок Струтинського

Вілен Митрофанович Струтинський запровадив підхід до виправлення оболонок у 1965-1968 рр.

(16 жовтня 1929 р., Данилова Балка, Кіровоградський район, Україна - 28 червня 1993 р., Рома, Італія)

Член-кореспондент НАНУ, начальник відділу теоретичної ядерної фізики в ІЯД, Київ.







Головна думка: Як ми це вказували

$$E_{\rm tot} = \sum_{i}^{i_F} E_i.$$

не співпадає з енергією зв'язку ядер, тому що потенціал не є самоузгодженим, але ми вважаємо

$$E_{\text{tot}} = \sum_{i}^{i_{F}} \tilde{E}_{i} + \left[\sum_{i}^{i_{F}} E_{i} - \sum_{i}^{i_{F}} \tilde{E}_{i}\right]$$

$$\Downarrow \text{substitution} \Downarrow$$

$$= + \left[\sum_{i}^{i_{F}} E_{i} - \sum_{i}^{\tilde{i}_{F}} \tilde{E}_{i}\right]$$

$$= \delta E.$$

Відмітимо, що в цілому досить точна.

 $\sum \tilde{E}_i$ - енергія, яка оцінюється за допомогою плавних одночастинних енергій, усереднених за енергією.

Густина одночастинних рівнів щільність

$$g(E) = \sum_{i} \delta(E - E_i)$$

дає одночастинну енергію, Е_i. В цьому випадку

$$\sum_{i} E_{i} = \int dE ().$$

Плавна одночастинна енергія, \tilde{E} задається середньою щільністю рівня однієї частинки, $\tilde{g}(\epsilon)$, отриманою від g(E), складанням з розгладженням функція f(x):

$$\tilde{g}(E) = \frac{1}{\gamma} \int_{-\infty}^{+\infty} dE' \ g(E') f\left(\frac{E-E'}{\gamma}\right) = \frac{1}{\gamma} \sum_{i} f\left(\frac{E-E_i}{\gamma}\right),$$

де $\gamma \sim (1 \div 2)\hbar\Omega = (1 \div 2)E_F A^{1/3}$ - параметр усереднення, близький до відстані між оболонками 8 ÷ 10 МеВ. Отже, усереднення відбувається як через зв'язані одночастинки, так і над континуумом одночастинок позитивної енергії. Тому

$$\delta E = \sum_{i}^{i_F} E_i - \int_{-\infty}^{\tilde{\lambda}} dE \; \tilde{g}(E) \; E,$$

де $\tilde{\lambda}$ - згладжений рівень Фермі, визначений за допомогою рівняння числа частинок:

$$N = \int_{-\infty}^{\tilde{\lambda}} dE \ \tilde{g}(E).$$

Функція складання f(x) може бути записана як добуток

$$f(x) = \omega(x)P_p(x),$$

де

$$\omega(x) = \pi^{-1/2} \exp(-x^2)$$

є функцією зважування і

$$P_m(x) = \sum_{k=0,2,\dots}^m \frac{(-1)^{k/2}}{2^k (k/2)!} H_k(x)$$

- так званий поліном виправлення кривизни m й порядку (типові значення поліноміального порядку складають m = 6, 8).

Згладжена одночастинна енергія може бути виражена у вигляді:

$$\tilde{E} = \int_{-\infty}^{\tilde{\lambda}} E \, \tilde{g}(E) dE = \sum_{i} E_{i} \tilde{n}_{i} + \gamma \frac{d\tilde{E}}{d\gamma},$$

е згладжений розподіл заселення нуклонів

$$\tilde{n}_i = \frac{1}{\gamma} \int_{-\infty}^{\tilde{\lambda}} dE f\left(\frac{E - E_i}{\gamma}\right).$$

Оскільки значення \tilde{E} не повинно залежати від діапазону згладжування γ (ані від порядку корекції кривизни m), другий доданок повинен бути рівним нулю, тобто

$$\frac{d\tilde{E}}{d\gamma} = 0$$
 and $\frac{d\tilde{E}}{dm} = 0.$

Якщо умова плато не виконується, метод усереднення Струтинського не дає однозначного результату.

Як правило, метод оболонкової поправки Струтинського (або точність плато) становить ~ 0,5 MeB у дуже важких ядрах і ~ 1,5 MeB у легких та середніх ядрах. Однак часто такої точності достатньо. Вибір γ і m на практиці визначає як відповідні значення, де функції $\tilde{E}(\gamma) \simeq i \tilde{E}(m) \simeq constant.$



Залежність оболонкової поправки від параметра усереднення γ та порядку полінома виправлення кривизни p.

Shell features
$$\delta E_{\text{shell}} = \sum_{i}^{i_F} E_i - \int_{-\infty}^{\tilde{\lambda}} dE \ \tilde{g}(E) \ E.$$



Найвище значення корекції оболонки - $\delta E_{\text{shell}} = -13 \div -14$ MeB, оцінене для основного стану ²⁰⁸ Pb.

Для порівняння, енергія зв'язку ²⁰⁸ Pb - -1636 MeB.

Метод оболонки поправки був надзвичайно корисним.

За допомогою цього методу було побудовано масові формули з надзвичайно високою точніс

Аксіальні деформації:

$$R(\theta) = R_0 [1 + \beta_2 Y_{20}(\theta) + \beta_4 Y_{40}(\theta)],$$

$$Y_{20}(\theta) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3\cos^2\theta - 1),$$

$$Y_{40}(\theta) = \frac{9}{256\sqrt{\pi}} (35\cos^4\theta - 30\cos^2\theta + 3).$$









Неаксіальні деформації:

$$R(\theta,\varphi) = R_0[1+\beta_2 Y_{20}(\theta) + \beta_{22}(Y_{22}(\theta,\varphi) + Y_{2-2}(\theta,\varphi))],$$

$$Y_{22}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{3\cdot 5}{32\pi}} \sin^2\theta e^{2i\phi},$$

$$Y_{2-2}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{3\cdot 5}{32\pi}} \sin^2\theta e^{-2i\phi}.$$

Бета-коливання $\beta_2 = \beta_{20} + \beta_{20}^t \cos(\omega_{\beta}^t), \, \omega_{\beta}$ - частота бета-коливань. Класичний гамільтоніан - це

$$H = \frac{\mathcal{M}_{\beta}}{2} \left(\frac{d\beta_{20}^t \cos \omega_{\beta} t}{dt} \right)^2 + \frac{\mathcal{C}_{\beta}}{2} \left(\beta_{20}^t \cos \omega_{\beta} t \right)^2.$$

Якщо
 $\beta_{22}=\beta_{22}^0+\beta_{22}^t\cos\omega_\gamma t$ - гамма-коливання, ω_γ є частота гам
а-вібрацій. Класичний Гамільтониан

$$H = \frac{\mathcal{M}_{\gamma}}{2} \left(\frac{d\beta_{22}^t \cos \omega_{\gamma} t}{dt} \right)^2 + \frac{\mathcal{C}_{\gamma}}{2} \left(\beta_{22}^t \cos \omega_{\gamma} t \right)^2.$$





Аксіальні дзеркально-асиметрична деформація (грушоподібна)

$$R(\theta) = R_0 [1 + \beta_2 Y_{20}(\theta) + \beta_3 Y_{30}(\theta)],$$

$$Y_{30}(\theta) = \sqrt{\frac{7}{64\pi}} (5\cos^2\theta - 3)\cos\theta.$$



Неаксіальна дзеркально-асиметрична деформація (банановая)

$$R(\theta) = R_0 [1 + \beta_2 Y_{20}(\theta) + \beta_3 Y_{30}(\theta) + \beta_{31} (Y_{31}(\theta, \varphi) - Y_{3-1}(\theta, \varphi))],$$

$$Y_{31}(\theta) = -\sqrt{\frac{3 \cdot 7}{16\pi}} (5 \cos^2 \theta - 1) \sin \theta e^{i\phi},$$

$$Y_{3-1}(\theta) = \sqrt{\frac{3 \cdot 7}{16\pi}} (5 \cos^2 \theta - 1) \sin \theta e^{-i\phi}.$$

R. R. Chasman, Physics Letters B, Volume 266, Issues 3-4, 29 August 1991, Pages 243-248. Вивчено вплив деформацій $Y_{3\pm 1}(\theta, \varphi)$ на енергетичну поверхню нуклідів в області A = 190. Знайдено багато нуклідів із супердеформованими та гіпердеформованими мінімумами. Стани, пов'язані з ціми мінімумами, виявляються поблизу моменту в I = 40. Існують різні більш точні підходи до опису атомних мас

- Thomas-Fermi + Strutinsky Shell Corrections
- Extended Thomas-Fermi + Strutinsky Shell Corrections
- Hartree-Fock and Hartree-Fock-Bogoliubov
- Relativistic Mean Field Theory

7. Ділення ядра.

Розділення на два фрагменти, енергетичний стан:

Released Energy at Fission = $E(Z, N) - E(Z_1, N_1) - E(Z_2, N_2)$.

Дія:

$$\mathcal{A}(E) = (2/\hbar) \int_{a}^{b} \sqrt{2\mu(s)(\mathcal{V}(s) - E)} ds,$$

де *s* э траєкторія поділу у просторі $\beta_2, \beta_3, ..., \beta_\ell, \mu = \sum_{\ell,\ell'} B_{\ell,\ell'} \frac{d\beta_\ell}{ds} \frac{d\beta_{\ell'}}{ds}$. Коефіцієнт проникнення:

 $T(E) = 1/\{1 + \exp[\mathcal{A}(E)]\}$

Кількість зіткнень ядра з бар'єром поділу в одиницю часу $\omega_0/(2\pi)$:

$$\nu_{\rm sf} = \frac{2\pi\ln 2}{\omega_0},$$

де $E_{zp} = 0.5\hbar\omega_0 \approx 0.7$ MeV.

Період напіврозпаду:

 $t_{sf}(E) = \nu_{\rm sf}/T(E)$







Spontaneous Fission Half Life (yrs)

Bimodal fission















Ternary fission: 1event for few handrents of binary fission events



Дякую за увагу!

•