

Utjecaj metode blokiranja orbitala na karakteristike raspada egzotičnih jezgara

Ines Markulin , F-3804

Mentor: doc. dr. sc. Tomislav Marketin

Fizički odsjek, PMF, Sveučilište u Zagrebu, 10 000 Zagreb, Hrvatska

(25.01.2016.)

Sažetak

Karakteristike jezgara bogatih neutronima (kao što su energija vezanja, vrijeme poluživota i sl.) su ključne u procesu nukleosinteze teških elemenata u eksplozivnim astrofizičkim događajima. Kako je većina jezgara koje sudjeluju u r-procesu izvan dosega postojećih eksperimentalnih postrojenja, nužno je koristiti teorijske modele za određivanje traženih svojstava. Većina jezgara ima neparan broj barem jedne vrste nukleona, te je nužno imati pouzdan model za njihov opis. Stoga, u ovom se radu ispituje učinkovitost metode blokiranja orbitala i njen utjecaj na svojstva jezgara daleko od doline stabilnosti na primjeru četiri izotopna lanca.

Uvod

Jedno od najaktivnijih područja nuklearne astrofizike bavi se sintezom elemenata težih od željeza u r-procesima. Uz kompleksnosti koja je uključena u modeliranje astrofizičkih procesa, r-proces predstavlja posebno težak izazov zbog velike količine informacija o svojstvima jezgara potrebnih za simuliranje astrofizičkih procesa. To je kompleksan, dinamični proces koji uključuje osjetljivu ravnotežu reakcija jakog, elektromagnetskog i slabog međudjelovanja, zahtijevajući pri tome znanje određenog broja observabli od nekoliko tisuća jezgri duž cijele nuklearne karte.

R-proces je proces koji uključuje više vrsta nuklearnih reakcija (beta raspad, uхват neutrona, itd.) a karakteristično je da je prosječno vrijeme uhvata neutrona značajno kraće od vremena poluživota. Tada nestabilna jezgra (stvorena uhvatom neutrona) hvata sljedeći neutron prije β -raspada. Glavni dokaz postojanja dodatnog (uz s-proces) mehanizma nukleosinteze na neutronske bogatoj strani karte nuklida smatra se činjenica da Svemir sadrži relativno velike količine vrlo teških alfa-radioaktivnih nuklida (^{232}Th , ^{235}U , ^{238}U), kao i spoznaja da najmanje 27 nuklida bogatih neutronima do ^{209}Bi (najteža jezgra koja nastaje s-procesom) ne mogu nastati s-procesima (tj. da su "samo-r-nuklidi").

Jedna od ključnih nuklearnih karakteristika koja ima izravan utjecaj na raspodjelu zastupljenosti elemenata su vremena poluživota β -raspada uključenih jezgri. Postavljanjem vremenske skale za r-procese određujemo brzinu toka materije prema većim atomskim brojevima. Tijekom cijelog trajanja r-procesa pojavljuje se β -odgođena emisija neutrona koja postaje značajna u kasnijim fazama kada se pojavljuje nadmetanje između uhvata neutrona i β -raspada. Posebno značajna su vremena poluživota β -raspada jezgri oko magičnog broja neutrona $N=50, 82$ i 126 . Energija separacije neutrona pokazuje diskontinuitet oko ovih magičnih brojeva što je razlog niskog udarnog presjeka za uhvat neutrona. Kao posljedica tok materije r-procesa pomiče se bliže stabilnosti gdje jezgre imaju znatno veća vremena poluživota β -raspada. Stoga se materija akumulira oko magičnih brojeva $N=50, 82$ i 126 stvarajući vrhove u raspodjeli zastupljenosti elemenata koji odgovaraju vrhovima uočenima u raspodjeli unutar Sunčevog sustava.

Trenutačno je izmjereno samo nekoliko vremena poluživota jezgri r-procesa u blizini magičnih brojeva $N=50$ i $N=82$. Iako su eksperimenti kod GSI dali vrijedne podatke vremena poluživota koja se približavaju trećem vrhu r-procesa, za sada nema eksperimentalnih vremena poluživota za jezgre sa zatvorenom $N = 126$ neutronsom ljuskom koje sudjeluju u r-procesu. Zato izračuni r-procesa nukleosinteze ovise uglavnom o teorijskim vremenima poluživota. [2]

Tipična srednja vremena života za β -raspad daleko od linije stabilnosti su reda veličine ms sa gustoćom neutrona ($n_n > 10^{20} \text{ gm}^{-3}$). Takve ogromne koncentracije neutrona moguće je postići samo uz eksplozivne scenarije koje uključuje relativno visoke temperature (do 1GK): mogući kandidati za mjesto odvijanja r-procesa su stoga eksplozije supernove i sudari neutronske zvijezde. Vrijeme trajanja r-procesa procjenjuje se na tipično desetak sekundi - riječ je o vrlo eksplozivnom nizu reakcija. Niz reakcija prestaje s jezgrama koje unutar tog vremena doživljavaju fisiju (negdje na masi $A \approx 260$). Gašenjem toka neutrona, počinje više ili manje brz β -raspad nastalih nuklida k liniji stabilnosti - β -raspad prestaje na prvom stabilnom ili metastabilnom nuklidu.

U svrhu određivanja energija vezanja i vremena poluživota neparno-neparnih i neparno-parnih jezgri koristimo potpuno samo-suglasan mikroskopski teorijski okvir temeljen na relativističkom nuklearnom funkcionalu gustoće energije. Osnovno stanje svih jezgi je izračunato sa relativističkim Hartree-Bogoliubovljevim (RHB) modelom, dok su pobuđena stanja obuhvaćena sa proton-neutronsom relativističkom kvazičestičnom faznom aproksimacijom (pn-RQRPA). [2]

Teorijski formalizam

Relativistička teorija srednjeg polja

Relativistička teorija srednjeg polja (RMFT) definira atomsku jezgu kao kvantni sustav u kojem su nukleoni opisani kao Diracove čestice koje međudjeluju izmjenom virtualnih mezona i elektromagnetskog polja, pritom se zanemaruje njihova podstruktura. Konkretno, za prvi stupanj slobode modela se uzimaju

slobodni nukleoni mase m kao Diracovi spinori ψ . Elektromagnetsko polje je uključeno jer su protoni nabijene čestice, pa se tim putem odvija njihovo kulonsko međudjelovanje. Tako, kao drugi stupanj slobode, u model ulazi vektorsko polje fotona γ koje karakterizira $m_\gamma = 0$ i $J^\pi = 1^-$. Kod mezona, od interesa su kvantna obilježja: spin (J), izospin (T) i paritet (Π). U interakciji dominiraju mezoni s najnižim vrijednostima J i T te se s obzirom na to klasificiraju kao skalarni ($J = 0$) ili vektorski ($J = 1$), odnosno izoskalarni ($T = 0$) ili izovektorski ($T = 1$) mezoni. U prirodi nije opaženo narušavanje pariteta, stoga je potrebno zadržati samo ona polja koja čuvaju paritetnu simetriju, a to su mezoni koji imaju paritet $\Pi = (-1)^J$. Model je namijenjen proučavanju parno-parnih jezgara koje uvijek imaju pozitivno osnovno stanje što znači da polje negativnog pariteta ne može doprinosti te opravdava isključivanje piona, iako je to polje u mikroskopskoj slici zaslužno za dio dugodosežne nuklearne interakcije ($r > 2$ fm).

mezon	(J^π, T)	polje	napomena
σ	$(0^+, 0)$	izoskalarno skalarno	srednjedosežno privlačenja
ω	$(1^-, 0)$	izoskalarno vektorsko	kratkodosežno odbijanje
ρ	$(1^-, 1)$	izovektorsko vektorsko	izospinski dio nuklearne sile
δ	$(0^+, 1)$	izovektorsko skalarno	ne poboljšava model
π	$(0^-, 1)$	izovektorsko skalarno	neodgovarajući paritet

Tablica 1: Potencijalni kandidati za mezonske stupnjeve slobode [3]

Minimalni skup čine mezonska polja naznačena u tablici (1). Dakle, radi se o tzv. jednostavnom $(\sigma, \omega, \rho, \gamma)$ modelu.

Ekvivalentnu metodu za rješavanje nuklearnog problema više tijela omogućava kovarijantna teorija funkcionala gustoće (DFT) na način da se zanemare potencijali korelacije lokalne izmjene. Kohn-Shamov pristup minimizacije funkcionala energije se koristi za određivanje egzaktnog osnovnog stanja nuklearnog sustava. Funkcional energije opisuje dinamiku nuklearnog sustava, a izvodi se iz efektivnog lagranžijana. Teorija je fenomenološka – u sklopu lagranžijana se pojavljuju efektivni parametri (mase mezona i konstante njihovih vezanja na nukleone) koji se prilagođavaju tako da reproduciraju globalna svojstva nuklearne materije te nekoliko konačnih jezgara u njihovom osnovnom stanju. Jednom kada se slobodni parametri pravilno prilagode, model se na kvantitativnoj razini može koristiti i za različite tipove pobuđenja. [3]

Relativistički Hartree-Bogoljubov model

Nemogućnost direktnog opisivanja pojedinačnih čestica u višečestičnim sustavima, glavna je motivacija za pojednostavljivanje problema nekim novim pristupom kao što je to koncept kvazičestice. Naime, kvantni sustav kao cjelina ima osnovno stanje koje karakterizira minimum energije te različita pobuđena stanja, čije su energije po definiciji veće od one osnovnog stanja. Zbog Boltzmannove raspodjele, većina relevantnih pobuđenja nalazi se u niskoležećim stanjima – među kojima i kvazičestice te kolektivna pobuđenja.

Kvazičestica je fenomen koji se pojavljuje u sustavu i koji, za razliku od prave čestice, ne postoji van sustava. Može se zamišljati kao “obučena” čestica, tj. nešto čime je prava čestica okružena i što mijenja ponašanje čestice. Kvazičestična pobuđenja se formuliraju u drugoj (kanonskoj) kvantizaciji, znači da se umjesto valnih funkcija koriste matematički operatori stvaranja i poništenja koji svojevremenu vrijednost operatora broja povećavaju / smanjuju za iznos 1. Može se uočiti da je stvaranje kvazičestice u stanju iznad Fermijevog ekvivalentno stvaranju čestice u tom stanju, dok je stvaranje šupljine u stanju ispod Fermijevog ekvivalentno poništenju čestice u tom stanju.

Bogoljubova transformacija je unitarna transformacija koja omogućava da se iz jedne reprezentacije priđe u drugu, također unitarnu kanonsku reprezentaciju. Često se koristi za dijagonalizaciju hamiltonijana, čime se dobiju stacionarna rješenja pripadne Schrödingerove jednadžbe.

Budući da su kvazičestice fermionske prirode, vrijede antikomutacijske relacije, pa je potreban fermionski mod “rada” Bogoljubove transformacije – kvazičestični operatori se izražavaju preko jednočestičnih operatora stvaranja i poništenja:

$$\alpha_k^\dagger = \sum_l U_{lk} c_l^\dagger + V_{lk} c_l, \quad (1)$$

pritom se indeks l odnosi na proizvoljnu bazu, dok su U_{lk} i V_{lk} pripadni koeficijenti. Između kvazičestične i čestične baze, transformacija u matricnom obliku glasi:

$$\begin{pmatrix} \alpha \\ \alpha^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U^\dagger & V^\dagger \\ V^T & U^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c \\ c^\dagger \end{pmatrix}. \quad (2)$$

Nakon uvođenja koncepta kvazičestice i Bogoljubova transformacija kanonskih baza, može se pristupiti problemu jezgara s otvorenim ljuskama i deformiranim jezgrama jer u tim slučajevima relativistički model neovisnih nukleona koji se gibaju u srednjem polju ne predstavlja dovoljno dobar opis. Naime, ispostavilo se da je energetska najbolja konfiguracija ona u kojoj su svi nukleoni zadnje, otvorene ljuske sparni. Te korelacije sparivanja igraju važnu ulogu u različitim jednočestičnim i kolektivnim aspektima nuklearne strukture. Preduvjet da se nukleoni vežu u stanje angularnog momenta $J = 0$ je da imaju potpuno isti l te jednaki apsolutni iznos, a suprotni predznak projekcije m , čime se postiže veliki prostorni preklap valnih funkcija.

RHB model nastao je iz relativističkog poopćavanja HFB teorije koje je bilo potrebno zbog kvantizacije mezonskih polja kako bi se uključile korelacije sparivanja na mikroskopski način.

Osnovno stanje jezgre opisuje generalizirana Slaterova determinanta $|\Phi\rangle$ koja prema jednadžbi $\hat{\alpha}_k |\Phi\rangle = 0$ predstavlja vakuum s obzirom na neovisne kvazičestice. HFB valne funkcije su označene kao U_{lk} i V_{lk} jednadžbom(1) a njima se jedinstveno određuje hermitska jednočestična matrica gustoće $\hat{\rho}$ i antisimetrični tenzor sparivanja $\hat{\Delta}$. Pomoću novodefiniranih gustoća se definira tzv. generalizirana matrica gustoće R

$$R = \begin{pmatrix} \rho & \kappa \\ -\kappa^+ & 1 - \rho^+ \end{pmatrix} \quad (3)$$

Dakle, ukupna energija sustava u RHB modelu “nasljeđuje” ovisnost RMF modela o mezonskim poljima ϕ i matrici gustoće $\hat{\rho}$ te dodaje ovisnost o tenzoru sparivanja $\hat{\kappa}$, a cilj je izraziti ju preko ovisnosti o generaliziranoj matrici gustoće R :

$$E_{RHB} [\hat{\rho}, \hat{\kappa}, \phi] = E_{RMF} [\hat{\rho}, \phi] + E_{par} [\hat{\kappa}] \quad (4)$$

$$E_{RHB} [\hat{\rho}, \hat{\kappa}, \phi] = E_{RHB} [R, \phi] \quad (5)$$

Funktional energije sparivanja E_{par} glasi

$$E_{par} [\hat{\kappa}] = \frac{1}{4} Tr [\hat{\kappa}^+ V^{pp} \hat{\kappa}] \quad (6)$$

gdje je općenita V^{pp} fenomenološka interakcija u pp-kanalu dvočestičnog sparivanja. Ponovno se radi u okviru kovarijantne teorije funkcionala gustoće što znači da se preko varijacijskog principa raspisuju vremenski ovisne HB jednadžbe gibanja:

$$i\partial_t R = [\mathcal{H}(R), R] \quad (7)$$

Generalizirani hamiltonijan \mathcal{H} se dobije kao derivacija funkcionala energije s obzirom na generaliziranu gustoću R što se u bazi operatora $c_l c_l^\dagger$ može pisati:

$$\mathcal{H} = \frac{\delta E_{RHB}}{\delta R} = \begin{pmatrix} \hat{h}_D - m - \lambda & \hat{\Delta} \\ -\hat{\Delta}^+ & -\hat{h}_D + m + \lambda \end{pmatrix} \quad (8)$$

Kemijski potencijal λ osigurava da broj čestica bude konstantan, tj. da očekivana vrijednost operatora broja čestica u osnovnom stanju bude jednaka broju nukleona:

$$Tr \hat{\rho} = N. \quad (9)$$

Zatim se postupak varijacije ponavlja, samo s obzirom na usrednjene potencijale.

Osnovno stanje $|\Phi\rangle$ se određuje HB jednadžbama koje su statički limes vremenski ovisne jednadžbe (5) čime se problem svodi na dijagonalizaciju hamiltonijana:

$$\begin{pmatrix} \hat{h}_D - m - \lambda & \hat{\Delta} \\ -\hat{\Delta}^+ & -\hat{h}_D + m + \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_k(r) \\ V_k(r) \end{pmatrix} = E_k \begin{pmatrix} U_k(r) \\ V_k(r) \end{pmatrix} \quad (10)$$

Svojstvene vrijednosti E_k su kvazičestične energije, dok su svojstveni vektori U_k i V_k kvazičestične valne funkcije. Dimenzija RHB matrice jednadžbe

je dvostruko veća od odgovarajuće Diracove, pa za svako svojstveno stanje pozitivne energije postoji stanje negativne energije istog iznosa. Uslijed fermionske prirode kvazičestičnih operatora – istovremeno se može popuniti samo jedno stanje, a bira se ono s $E_k > 0$.

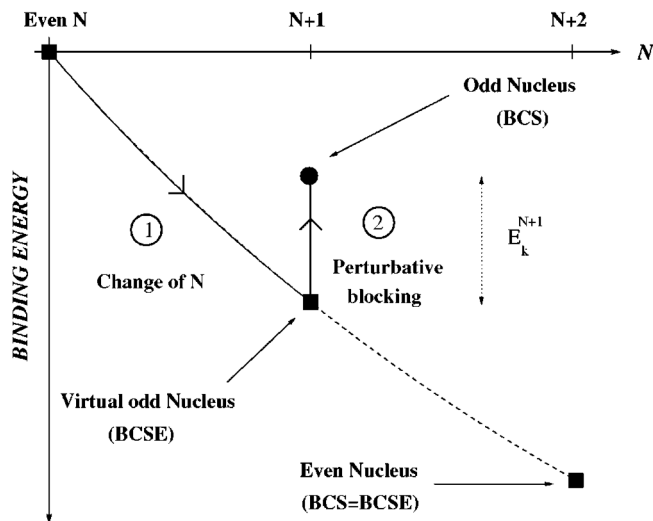
Model koji je korišten u ovom istraživanju je prikladan za opis karakteristika osnovnog stanja i pobuđenih stanja parno-parne jezgre. Međutim kako r-proces prirodno uključuje neparan A i neparno-neparne jezgre, potrebno je osigurati opis karakteristika raspada i za te jezgre. Osnovno stanje neparne jezgre računamo koristeći isti model kao za parno-parne jezgre (koji je prethodno opisan) samo ograničimo očekivanu vrijednost operatora broja čestica na neparan broj protona i/ili neutrona. Na ovaj način su obuhvaćena parna RHB stanja, čija energija je drugačija od stvarne energije osnovnog stanja neparne jezgre za energiju od neparne kvazičestice. [3]

S ciljem boljeg razumijevanja metode blokiranja definiramo novi prostor u kojem je kvazičestica kreirana na takav način da izbor energijski poželjne kvazičestice vodi na stanje sa približno točnim brojem čestica. Označimo to stanje sa $|\Psi^{BCSE}(N+1)\rangle$. BCSE se odnosi na stanje koje je kreirano kao paran prostor bez kvazičestičnih pobuđenja i bez slamanja invarijantnosti na vremenski obrat, ali sa neparni prosječnim brojem čestica. Stvaranje kvazičestice sa najnižom energijom pobuđenja generirat će najnižu pobuđenu energiju (s obzirom na novi referentni sustav) i sa stanjem će dati dobru aproksimaciju za neparan broj čestica. Razlika energija $\Delta E(k)$ sa neparnim susjedom postaje:

$$\Delta E(k) = E^{BCSE}(N+1) - E^{BCSE}(N) + E_k^{N+1} \quad (11)$$

$$\Delta E_k \approx \frac{\partial E^{BCSE}}{\partial N} + E_k^{N+1} \quad (12)$$

gdje je E_k^{N+1} najniža energija kvazičestice u $|\Psi^{BCSE}(N+1)\rangle$ i E^{BCSE} je energija od BCS prostora sa N sparenih čestica (parnih ili neparnih). Sada je pobuđena kvazičestica definirana u referentnom stanju $|\Psi^{BCSE}(N+1)\rangle$ i nije nam potrebna nikakva modifikacija kemijskog potencijala. Ova procedura iako nije savršena, daje dobru aproksimaciju energije i valne funkcije neparne jezgre.



Slika 1: Shematski prikaz predložene procedure u dva koraka za određivanje osnovnog stanja neparnog izotopa. [4]

Na slici 1 ilustriran je postupak kojim se eliminira neslaganje između dodavanja nukleona i stvaranja energetski poželjnog kvazičestičnog pobuđenja.[4]

Primjenimo li sve do sada navedeno, konkretno računanje energije vezanja modelom blokiranja orbitala za egzotične jezgre izgledalo bi na sljedeći način. U jezgrama sa neparnim brojem nukleona, za koje tražimo energije vezanja, blokiramo protonsku i neutronsku orbitalu. Dobivena energija je upravo ona koja nas zanima. Kod jezgri sa jednim neparnim nukleonom, blokiramo samo njegovu orbitalu .

Ali kod računanja energije vezanja bez korištenja ove metode za neparne jezgre, moramo paziti da ukupna energija koja se na kraju dobije nije i ona koju tražimo. Dobivenoj energiji dodajemo najnižu kvazičestičnu energiju odgovarajućeg neparnog nukleona. U slučaju oba neparne nukleona, dodaju se dvije najniže energije kvazičestice protona i neutrona. [1]

QRPA izračuni

Računanje vrijednosti β -raspada zahtjeva izračun i za osnovno stanje i pobuđena stanja jezgre kćeri i prijelaze među njima, zajedno sa procjenom leptonskog faznog prostora uključenog u prijelaz. Budući da izračun zahtjeva dobar opis velikog raspona fizikalnih veličina, i zbog cilja da obuhvatimo vrijednosti raspada za jako velik opseg jezgri, koristimo potpuno mikroskopski teorijski okvir temeljen na funkcionalu relativističke nuklearne gustoće energije (RNEDF). RNEDF osnovni okvir koristi samodosljedni prosječno područje za nukleone i za minimalnu grupu mesonskih područja; isoskalarni skalar σ meson ($J^\pi = 0^+, T = 0$), isoskalarni vektor ω meson ($J^\pi = 1^-, T = 0$) i isovektorski vektor ρ meson

($J^\pi = 1^-, T = 1$), dopunjeni sa elektromagnetskim poljem. Medudjelovanje mesona i jezgre je obuhvaćeno sa minimalnom grupom interakcijskih uvjeta, gdje funkcional hvatišta uključuje jasnu ovisnost o gustoći vektora nukleona. Karakteristike osnovnog stanja nukleona su opisane pomoću relativističkog Hartree-Bogoliubovog modela (RHB), koji pravilno opisuje efekte sparivanja u jezgri otvorene ljuske. Za parametre modela koji određuju spajanje ovisno o gustoći i masama mesona, u ovom radu korištena je D3C* parametrizacija koja dobro opisuje vremena poluživota β -raspada u mediju i teškoj jezgri. Korelacije sparivanja za jezgre otvorene ljuske su opisane sa Gogny interakcijom konačnog dosega sa D1S parametrizacijom. Pobudena stanja su obuhvaćena korištenjem proton-neutron relativističke kvazičestične nasumične fazne aproksimacije (pn-RQRPA), formulirana u kanonskoj jedno nukleon bazi od RHB modela i prošireno do opisa pobudjenja nabojne-izmjene (pn-RQRPA). RHB+RQRPA model je potopuno samodosljedan u oba ph i pp kanala. Iste interakcije su korištene u RHB jednadžbama koje određuju kanonsku kvazičestičnu bazu, i u matricnim jednadžbama od RQRPA. Prijelaz između 0^+ osnovnog stanja sferične jezgre roditelja i J^π pobudjenog stanja odgovarajuće jezgre kćeri su inducirana sa operatorom izmjene nabojne izmjene T^{JM} . Pretpostavljajući sferičnu simetriju nuklearnog sistema, kvazičestični parovi mogu biti spareni do dobrog angularnog momenta i matricnih jednadžbi od pn-RQRPA kao :

$$\begin{pmatrix} A^J & B^J \\ A^{*J} & B^{*J} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X^{\lambda J} \\ Y^{\lambda J} \end{pmatrix} = E_\lambda \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X^{\lambda J} \\ Y^{\lambda J} \end{pmatrix} \quad (13)$$

gdje su matrice A i B definirane u kanonskoj bazi. Za svaku energiju $E_\lambda, X^{\lambda J}$ i $Y^{\lambda J}$ u izrazu (13) označava odgovarajuću QRPA amplitudu. Matrični elementi prijelaza između osnovnog stanja jezgre roditelja i pobudjenog stanja jezgre kćeri, koji su inducirani operatorom T^{JM} daje:

$$B_{\lambda J}^\pm = \left| \sum_{pn} \langle p \| T^J \| n \rangle \left(X_{pn}^{\lambda J} u_p v_n + (-1)^J Y_{pn}^{\lambda J} v_p u_n \right) \right|^2 \quad (14)$$

gdje su X i Y amplitude dobivene rješavanjem pn-RQRPA jednadžbi (13). U kanalu $T = 1$ za pn-RQRPA koristimo dio za sparivanje iz Gogny sile:

$$V^{pp}(1, 2) = \sum_{i=1,2} e^{-r_{1,2}^2/\mu_i^2} (W_i + B_i P^\sigma - H_i P^\tau - M_i P^\sigma P^\tau) \quad (15)$$

sa $r_{12} = |r_1 - r_2|$, P^σ, P^τ operatori izmjene spina i izospina i grupa D1S parametara $\mu_i, W_i, B_i, H_i, M_i$ ($i = 1, 2$). Ova sila je bila pažljivo prilagođena karakteristikama sparivanja konačne jezgre preko cijele periodične tablice. Posebice, osnovna prednost Gogny sile je konačan domet koji automatski garantira prvu odsječenost u području momentuma. Za $T = 0$ proton-neutron interakciju sparivanja jezgre otvorene ljuske koristimo oblik koji se sastoji od kombinacije kratko-dosežnog odbojnog Gaussiana sa slabijim daleko-dosežnog Gaussiana.

$$V_{12} = -V_0 \sum_{j=1}^2 g_j e^{-\frac{r_{12}^2}{\mu_j^2}} \hat{\Pi}_{S=1, T=0} \quad (16)$$

gdje se $\hat{\Pi}_{S=1, T=0}$ projicira na stanja sa $S = 1$ i $T = 0$. Dometi $\mu_1 = 1.2 fm$ i $\mu_2 = 0.7 fm$ od dva Gaussiana su uzeta iz Gogny interakcija. Relativne snage $g_1 = 1$ i $g_2 = -2$ su izabrane ovakve vrijednosti kako bi sila bila odbojna na malim udaljenostima. Jedini preostali slobodni parametar je V_0 , ukupna snaga. Ovo međudjelovanje, sa stalnom vrijednosti V_0 je korišteno u nerelativističkim QRPA izračunima vrijednosti β -raspada za sferične r-procese bogate neutronima za jezgre sa točkom čekanja. Dva relativistička izračuna vremena poluživota β -raspada za jezgre bogate neutronima pokazali su da jedna vrijednost za sveukupnu snagu međudjelovanja ne može biti uspješno korištena u drugim područjima nuklearne tablice. Stoga, uzimamo predloženi ansatz u [2]

$$V_0 = V_L + \frac{V_D}{1 + e^{a+b(N-Z)}} \quad (17)$$

gdje su vrijednosti $V_L = 160.0$ MeV, $V_D = 15.0$ MeV, $a = 7.2$ i $b = -0.3$ prilagođene kako bi obuhvatile najbolji mogući opis dostupnih podataka za vremena poluživota. [2]

Vremena poluživota β -raspada

U trenutnom istraživanju vremena poluživota β -raspada uključili smo i dopuštena ($L=0$) i prvi zabranjen prijelaz ($L=0,1$). Vrijednost vremena poluživota β -raspada za prijelaz između početnog i konačnog nuklearnog stanja je jednaka

$$\lambda = \frac{\ln 2}{K} \int_0^{p_0} p_e^2 (W_0 - W)^2 F(Z, W) C(W) dp_e \quad (18)$$

gdje je W energija elektrona u jedinicama $m_e c^2$ sa W_0 kao maksimalnom energijom elektrona koja je jednaka razlici masa između početnih i konačnih nuklearnih stanja, $W_0 = (M_i - M_f) / m_e$, i p_e je impuls elektrona u jedinicama $m_e c$. Maksimalnu energiju elektrona aproksimiramo sa:

$$M_i - M_f \approx \lambda_n - \lambda_p + \Delta m_{np} - E_{QRPA} \quad (19)$$

Konstanta K je izmjerena u dopuštenom β -raspadu i iznosi $K = 6144 \pm 2$ s.

Form faktor $C(W)$ razlikuje se za različite raspade. Za dozvoljene raspade njegova energija je neovisna. U slučaju β^- raspad jezgre bogate neutronima form faktor je jednostavno ograničen Gamow-Tellerovom vjerojatnosti prijelaza, $C(W) = B(GT)$, sa

$$B(GT) = g_A^2 \frac{\langle f \parallel \sum_k \sigma^k t_-^k \parallel i \rangle^2}{(2J_i + 1)} \quad (20)$$

Matrični element je smanjen u skladu sa operatorom spina σ koristeći samo Condon-Shortley faznu konvekciju. Suma ide preko svih nukleona. Za izospinski operator spuštanja koristimo konvenciju $t_- \mid n \rangle = \mid p \rangle$. Konačno, $g_A = 1.2701(25)$ je slaba aksijalna konstanta sparivanja.

Za prvi zabranjeni prijelaz form faktor je:

$$C(W) = k + kaW + kb/W + kcW^2 \quad (21)$$

gdje su faktori k , ka , kb i kc kompleksne kombinacije matričnih elemenata komponenti operatora spin-dipol prijelaza i relativističkih korekcija.

Sustavni izračuni vremena poluživota β -raspada koji su određeni pomoću Gamow-Tellerovih prijelaza pokazali su da teorijski matrični elementi trebaju biti potisnuti sa faktorom q za koji je utvrđeno da je neovisan na određeni prijelaz i da je aproksimativno konstantan na nuklearnoj karti. Postoji dokaz da je konačna snaga prvog zabranjenog prijelaza precijenjena sa teorijskim pristupom. Dodatno, čini se da faktor potisnuća ovisi o korištenom prostoru modela i o specifičnom prvom zabranjenom operatorom. Do sada ni jedno istraživanje nije zabilježilo potisnutost prvih zabranjenih prijelaza za opće izračune vremena poluživota β -raspada. U našim izračunima, uzeli smo u obzir isključenje i Gamow-Tellera i prvih zabranjenih prijelaza koristeći istu efektivnu vrijednost za $g_A = -1.0$. [2]

Rezultati

U ovom odjeljku proučit ćemo energije vezanja i vremena poluživota za četiri izotropna lanca s obzirom na broj neutrona. Vrijednosti su izračunate za neparno-parne i neparno-neparne jezgre za dva slučaja (sa blokiranjem i bez). Koristili smo jezgre željeza Fe ($Z = 26$), kobalta Co ($Z = 27$), kroma Cr ($Z = 24$) i mangana Mn ($Z = 25$).

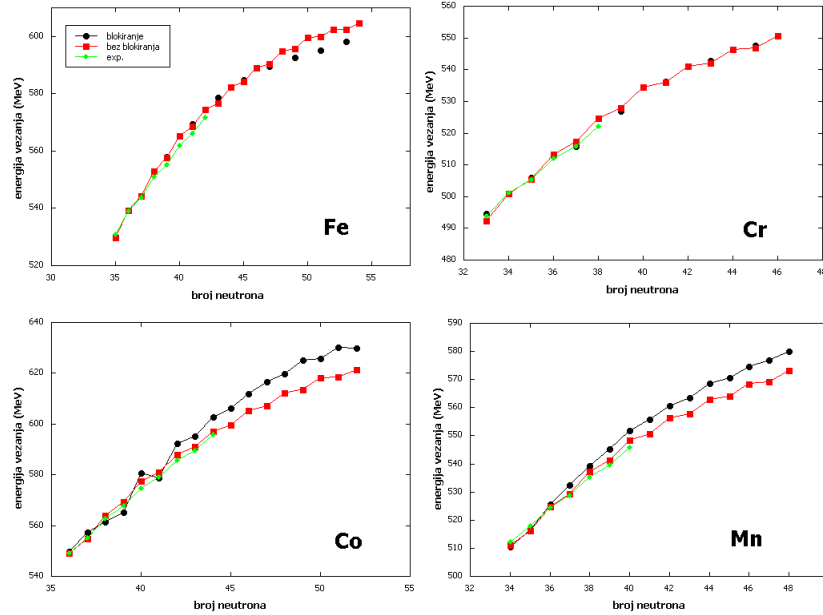
Energije vezanja

Znamo da je energija vezanja E_B ona energija koju je potrebno uložiti da se svih Z protona i N neutrona izdvoji iz jezgre. Za sve jezgre čiji je broj nukleona $A > 30$ energija vezanja po nukleonu je donekle konstantna ($E_B/A \approx 8 - 8.5 MeV$) što je neobično jer bi trebala rasti linerano sa brojem nukleona A . Saturacija E_B/A govori nam da svaki nukleon međudjeluje samo sa nekoliko najbližih susjeda što je karakteristično za interakcije kratkog doseg. Ukoliko bi interakcija nukleona bila dalekodosežna onda bi E_B/A rasla. Najveću E_B/A imaju jezgre sa brojem nukleona A oko 56 a jedna od njih je i željezo koje se često uzima kao mjerilo za određivanje lakših i težih jezgri. Kod težih jezgri E_B/A pada s A što je posljedica većeg doprinosa Coulombovog odbijanja među protonima.

Na slici 2 uspoređene su energije vezanja jezgara četiri izotopna lanca, dobivene sa i bez upotrebe metode blokiranja orbitala, sa eksperimentalnim podacima. Korišteni su željezo ($Z=26, A=61-80$), kobalt ($Z=27, A=63-79$), krom ($Z=24, A=57-70$) i mangan ($Z=25, A=59-73$).

Metoda blokiranja korištena je samo u slučaju neparnog broja nukleona bilo da se radi samo o protonima ili neutronima, ali i kad su to i protoni i neutroni. U slučaju parnog broja protona Z (željezo i krom) metoda blokiranja korištena

je za svaki drugi maseni broj A , jer se radi o kombinaciji neparne-parne i parno-parne jezgre promijenom broja neutrona. Zbog toga na grafu možemo uočiti da te točke nisu međusobno povezane, te su više udaljene. U slučaju neparanog broja protona Z (kobalt i mangan) metoda blokiranja je korištena za svaki maseni broj A jer se radi o izmjeni neparno-parne i neparno-neparnih jezgri promijenom broja neutrona.



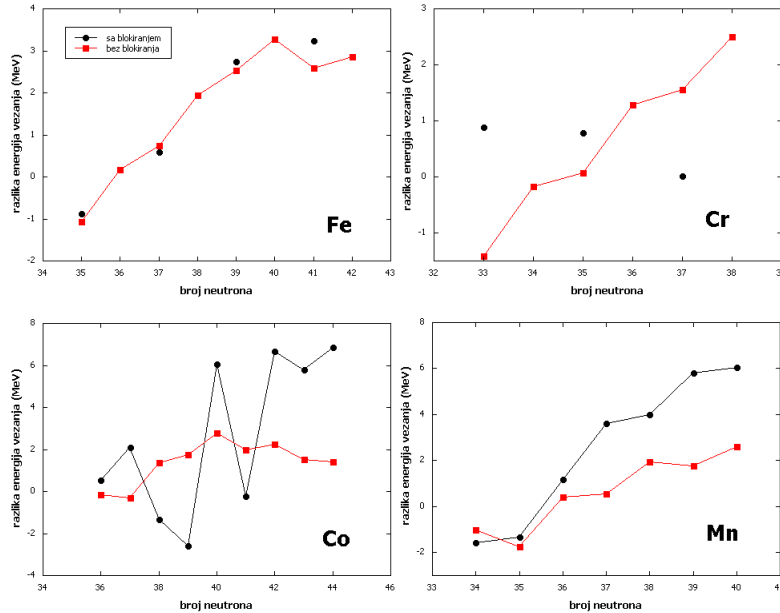
Slika 2: Energija vezanja za izotope željeza ($Z=26$), kroma ($Z=24$), kobalta ($Z=27$) i mangana ($Z=25$) u ovisnosti o broju neutrona. Crnom bojom su prikazana mjerenja dobivena metodom blokiranja, crvenom ona bez blokiranja i zelenom eksperimentalna vrijednosti.

U gornjem redu nalaze se grafovi za elemente sa parnim brojem protona (željezo i krom), dok su u donjem redu oni za elemente sa neparnim brojem protona (kobalt i mangan).

Grafovi za željezo i krom pokazuju dobro poklapanje vrijednosti dobivenih metodom blokiranja i bez nje sa eksperimentalnim podatcima, s time da je ono bolje za manji broj nukleona ($Fe A = 61 - 63$, $Cr A = 63 - 65$). Također, možemo primjetiti dobro poklapanje izračunatih vrijednosti u oba slučaja, ali se kod željeza za veće brojeve nukleona počinje javljati malo odstupanje gdje vrijednosti sa blokiranjem postaju manje od onih bez.

Kod kobalta i mangana grafovi prikazuju male razlike izračunatih vrijednosti za obje metode od eksperimentalnih, s time da ona bez blokiranja pokazuju ipak bolje slaganje. Ponovo je to slaganje bolje za manji broj nukleona ($Co A=57-60$, $Mn A=59-62$), te se sa porastom istog razlike povećavaju kako između samih metoda tako i sa eksperimentalnim podatcima.

Za oba izotropna lanca (Co i Mn) vidimo da su vrijednosti energija vezanja dobivene metodom blokiranja veće od onih bez blokiranja, s time da je to kod kobalta izraženije za veći broj neutrona. Usporedimo li zadnje dvije eksperimentalne vrijednosti sa onim izračunatima, možemo primjetiti kako su dobivene vrijednosti ovim metodama veće od onih iz eksperimenta. Tako je i u slučaju željeza i kroma.



Slika 3: Razlika energija vezanja za izotope željeza ($Z=26$), kroma ($Z=24$), kobalta ($Z=27$) i mangana ($Z=25$) u ovisnosti o broju neutrona. Crnom bojom su prikazana mjerenja dobivena metodom blokiranja i crvenom ona bez blokiranja.

Na slici 3 prikazana je razlika energija vezanja dobivena sa blokiranjem orbitala ili bez i energija dobivenih u eksperimentu. Možemo primjetiti da je ta razlika veća u slučaju blokiranja što je posebno izraženo za izotope kobalta i mangana, znači kod elemenata sa neparnim brojem protona. Dakle, porastom broja neutrona povećavaju se i skokovi koji predstavljaju razlike teorijskih vrijednosti od eksperimentalnih. Također, možemo primjetiti kako su kod željeza te razlike slične u oba slučaja, što za ostale elemente nije slučaj.

Na kraju iz grafova možemo zaključiti kako metoda blokiranja daje bolje rezultate za slučaj jezgri sa parnim brojem protona koji se dobro poklapaju i sa onim bez blokiranja, ali i sa eksperimentalnim vrijednostima. Za neparan broj protona postoji manje odstupanje, ali i dalje daje rezultate koji dobro prate one eksperimentalne. Također, svi modeli imaju tendenciju davati sve lošije rezultate kako se udaljavamo od doline stabilnosti. Kod izotopa željeza, razlika se pojavljuje tek na $N = 50$ što ukazuje na moguć utjecaj zatvorene ljuske. Kod

neparnih jezgara, to bi moglo biti zbog zanemarene interakcije između valentnih nukleona.

Za kvantitativnu analizu izračunali smo prosječnu devijaciju \bar{r} po

$$\bar{r} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N r_i \quad (22)$$

gdje je r_i u slučaju blokiranja

$$r_i = \frac{r_{blok} - r_{exp}}{r_{exp}} \quad (23)$$

a u slučaju bez blokiranja

$$r_i = \frac{r_{bez} - r_{exp}}{r_{exp}} \quad (24)$$

za svaki od četiri izotopa.

Prosječna devijacija za metodu blokiranja mogla bi dati lošije prosjeke jer su parametri podešeni ne uzimajući u obzir metodu blokiranja. Zato smo još dodatno izračunali i standardnu devijaciju kao

$$\sigma = \left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (r_i - \bar{r})^2 \right]^{1/2}. \quad (25)$$

Standardnom devijacijom ćemo saznati mogu li se parametri modela podesiti koristeći metodu blokiranja tako da sve skupa da bolji model.

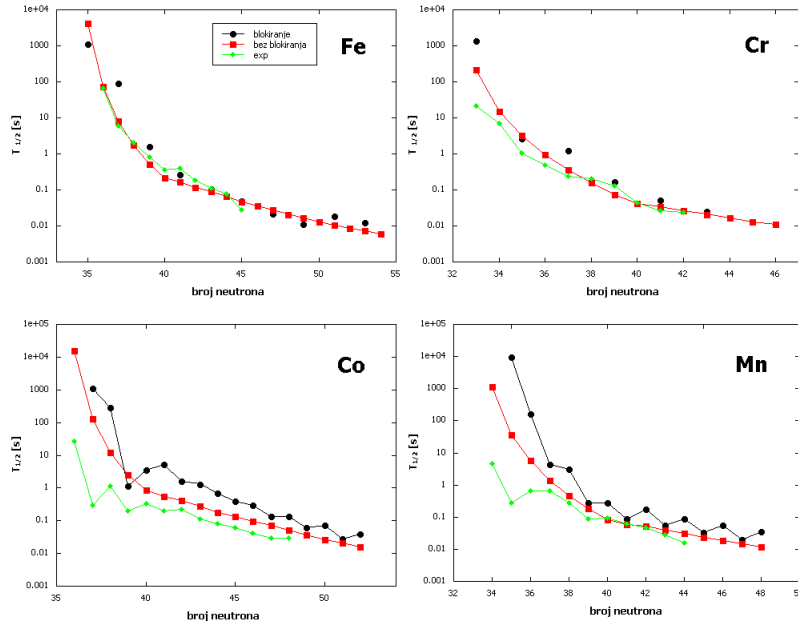
	\bar{r}_{bloc}	\bar{r}_{bez}	σ_{bloc}	σ_{bez}
Fe (Z=26)	1.42	1.63	1.66	1.34
Co (Z=27)	2.65	1.40	3.52	0.97
Cr (Z=24)	0.57	0.64	0.39	1.29
Mn (Z=25)	2.53	0.64	2.93	1.48

Tablica 2: Prosječna i standardna devijacija energije vezanja u slučaju blokiranja i bez za promatrane izotope

Iz ove tablice možemo zaključiti da u slučaju željeza i kroma, odnosno kada imamo paran broj protona, u prosjeku metoda blokiranja orbitala daje bolje rezultate od one bez. Znači kada imamo paran proton i jedan neutron viška, tada metoda blokiranja radi sasvim dobro. Ali u slučaju kobalta i mangana, neparan broj protona, metoda blokiranja se raspada. Najvjerojatniji razlog tome je da se kod neparno-neparnih jezgri ne uzima u obzir dodatna interakcija između tog posljednjeg neparnog protona i posljednjeg neutrona. Standardna devijacija za metodu blokiranja veća je za izotope sa neparnim brojem protona, ali u slučaju izotopa kroma je značajno manja.

Vremena poluživota

Na slici 4 uspoređena su vremena poluživota za četiri izotropna lanca, dobivena sa i bez upotrebe metode blokiranja orbitala, sa eksperimentalnim podacima. Korišteni su željezo ($Z=26$, $A=61-80$), kobalt ($Z=27, A=63-79$), krom ($Z=24$, $A=57-70$) i mangan ($Z=25$, $A=59-73$).



Slika 4: Vrijeme poluživota za izotope željeza ($Z=26$), kroma ($Z=24$), kobalta ($Z=27$) i mangana ($Z=25$) u ovisnosti o broju neutrona. Crnom bojom su prikazana mjerenja dobivena metodom blokiranja, crvenom ona bez blokiranja i zelenom eksperimentalna vrijednosti.

U gornjem redu nalaze se grafovi za elemente sa parnim brojem protona (željezo i krom), dok su u donjem redu oni za elemente sa neparnim brojem protona (kobalt i mangan). Kod željeza i kroma možemo vidjeti dobro slaganje dobivenih rezultata blokiranjem sa onima bez i sa onim eksperimentalnim. U oba slučaja za veći broj neutrona poklapanje između rezultata iz blokiranja i onih bez se povećava, ali se smanjuje ono sa eksperimentalnim, s time da su poklapanja bolja kod željeza.

Kod kobalta i mangana stvari su malo drugačije. Naime, imamo veće razlike među rezultatima, s time da su vrijednosti dobivene blokiranjem najveće, a one eksperimentalne najmanje, što bi značilo da nam ovaj model daje (sa blokiranjem i bez) više vrijednosti od stvarnih. I ovdje se može primjetiti da se sa porastom broja neutrona smanjuje razlika među vrijednostima blokiranja i onih bez, što je najizraženije kod kobalta.

Za kvantitativnu analizu izračunali smo prosječnu devijaciju \bar{r} po

$$\bar{r} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N r_i \quad (26)$$

gdje je r_i

$$r_i = \log_{10} \frac{T_{1/2}^{izrač.}}{T_{1/2}^{exp.}} \quad (27)$$

Izračunali smo i standardnu devijaciju kao

$$\sigma = \left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (r_i - \bar{r})^2 \right]^{1/2} \quad (28)$$

	\bar{r}_{bloc}	\bar{r}_{bez}	σ_{bloc}	σ_{bez}
Fe (Z=26)	0.30	-0.08	0.46	0.17
Co (Z=27)	1.25	0.82	0.83	0.84
Cr (Z=24)	0.66	0.21	0.60	0.34
Mn (Z=25)	1.13	0.61	1.28	0.82

Tablica 3: Prosječna i standardna devijacija vremena poluživota u slučaju blokiranja i bez za promatrane izotope.

Promotrimo li rezultate iz tablice (3) vidimo da za željezo i krom, odnosno za jezgre sa parnim brojem protona prosječna devijacija za blokiranje je manja od one sa neparnim brojem protona, ali su te vrijednosti ipak manje od onih bez blokiranja. Iz toga možemo zaključiti da u slučaju računanja vremena poluživota bolja metoda je ona bez blokiranja orbitala u oba slučaja (i sa parnim i neparnim brojem protona). I standardna devijacija u slučaju bez blokiranja ima manje vrijednosti, osim u slučaju kobalta gdje je njena vrijednost kod metode blokiranja manja za 0,01 od one bez. Najmanje standardne devijacije imaju željezo i krom, kao i prosječne devijacije. Znači da model blokiranja orbitala daje bolje rezultate u slučaju jezgri sa parnim broje protona, nego za one sa neparnim brojem protona.

Zaključak

Rezultati izračunatih energija vezanja i vremena poluživota za četiri izotopna lanca (željezo, kobalt, krom i mangan) pokazala su da metoda blokiranja orbitala daje dobre rezultate u slučaju parnog broja protona (čak i bolje od metode bez blokiranja), dok za neparan protonski broj Z ipak je bolja metoda bez blokiranja. Obje metode pokazuju dobro slaganje sa eksperimentalnim vrijednostima, ali ipak postoje odstupanja, posebice za veće vrijednosti masenog broja A, i ono postaje veće za jezgre neparnog Z.

Zahvala

Željela bih se zahvaliti svom mentoru doc. dr. sc. Tomislavu Marketinu na uloženom znanju i vremenu za nastanak ovog rada, te na svim konstruktivnim kritikama i savjetima.

References

- [1] P. Ring, P. Schuck, *The Nuclear Many-Body Problem*, Springer-Verlag New York, 1980
- [2] T. Marketin, L. Huther, and G. Martínez-Pinedo, Large scale evaluation of betadecay rates of r-process nuclei with the inclusion of first-forbidden transitions, arXiv:1507.07442v1 [nucl-th] (2015).
- [3] J. Petković, *Određivanje spektra antineutrina iz nuklearnih reaktora (Diplomski rad)*, Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet, Fizički odsjek, Zagreb (2015).
- [4] T. Duguet, P.-H. Heenen, J. Meyer, Pairing correlations. I. Description of odd nuclei in mean-field theories, *Phys. Rev. C* 65.014310 (2001).