

Angularni moment fisijskih fragmenata

Patricija Kranjčić *

Fizički odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Bijenička 32, Zagreb

20. siječnja 2025.

Sažetak

Fisijski fragmenti imaju određenu raspodjelu angularnog momenta, koja utječe na proces njihove deekscitacije. Zbog važnosti angularnog momenta za potpun opis fisije, novijim istraživanjima proučava se njegova ovisnost o svojstvima fragmenata. U ovome radu, primjenom formalizma nuklearnih energijskih funkcionala gustoće u okviru Hartree-Fock-Bogoliubovljevog modela, proučena je neutronska inducirana fisija jezgre ^{239}Pu . Korištenjem metode projekcije, izračunate su raspodjele angularnog momenta i broja nukleona u fragmentima. Za tri reprezentativne fragmentacije jezgre, pokazano je da srednja vrijednost angularnog momenta raste s njegovom deformacijom. Također, ovisnost srednje vrijednosti angularnog momenta o masi fragmenta u skladu je s eksperimentalno opaženim uzorkom zuba pile. Maksimumi raspodjele broja čestica u fragmentu pokazuju slaganje s vrijednostima dobivenima integracijom gustoće. Model bi se mogao proširiti uključivanjem većeg broja fragmentacija, istovremenom projekcijom na angularni moment i broj čestica te uključivanjem dinamičkih efekata. Na ovaj bi se način mogle dobiti raspodjele angularnog momenta za sve kombinacije broja čestica u fragmentima.

1 Uvod

Nuklearna fisija proces je u kojem se teška atomska jezgra raspada na dva ili više fragmenata [1]. Dva su moguća načina na koja dolazi do fisije. U prvome slučaju, jezgra se spontano raspada u probabilističkom procesu (spontana fisija). U drugome slučaju, raspad je induciran međudjelovanjem jezgre i nekog projektila (inducirana fisija). Fisija je najčešće inducirana apsorpcijom termičkih neutrona, energija reda veličine eV, no mogu je inducirati i fotoni, protoni ili teški ioni. Razumijevanje fisije ključno je za temeljnu i primijenjenu znanost, a posebno u pitanjima proizvodnje energije i sigurnosti. Osim toga, fisija je važna i u astrofizici, npr. u procesima brzog uhvata neutrona kod kojih ograničava sintezu teških elemenata u svemiru [2].

Fisiju kao proces deformacije atomske jezgre, u kojem je jezgra predstavljena kao kapljica tekućine, uveo je Niels Bohr [3]. Taj koncept, uz korekcije koje uzimaju u obzir kvantne efekte više tijela, čini osnovu tzv. makroskopsko-mikroskopskog modela fisije. U okviru tog modela, moguće je izračunati ukupnu energiju atomske jezgre kao funkciju njezine multipolne deformacije, što vodi na opis fisije pomoću višedimenzionalne (hiper-)površine ukupne energije. Projekcija na jednu dimenziju, tzv. put fisije (engl. *fission path*) pokazuje deformirani minimum

energije (osnovno stanje) i meta-stabilni minimum koji se naziva fisijski izomer. Ta su dva minimuma razdvojena unutarnjom barijerom, a nakon izomera se nalazi vanjska barijera koja ga dijeli od područja još većih deformacija. Prelaskom vanjske barijere jezgra se sve više deformira i u konačnici dolazi do formiranja dvaju fragmenata [2].

Nastali fragmenti su u pobuđenom stanju, energije pobuđenja do 30 MeV, njihova je deformacija različita od deformacije osnovnog stanja i imaju određenu raspodjelu angularnih momenata. Nakon formiranja dvaju fragmenata, dolazi do njihove deekscitacije prema osnovnom stanju [2]. U početku, najefikasniji način za smanjivanje energije pobuđenja jest emisija neutrona. Nakon što energija fragmenta padne ispod energije potrebne za odvajanje jednog neutrona (engl. *one-neutron separation energy*), deekscitacija se tipično nastavlja emisijom fotona. Ova početna faza deekscitacije odvija se vrlo brzo, na vremenskoj skali od 10^{-13}s (engl. *prompt particle emission*). Nakon emisije neutrona i fotona, neki će fragmenti biti nestabilni s obzirom na β -raspad. Posljedično, deekscitacija se nastavlja pretvorbom jezgrinog neutrona u proton, uz emisiju elektrona i antineutrina. Ova faza traje u vremenskom rasponu od nekoliko pikosekundi do nekoliko godina. Budući da jezgre dobivene β -raspadom također mogu biti u pobuđenom stanju, deekscitacija se često nastavlja emitiranjem dodatnih neutrona i fotona (engl. *β -delayed*

*pkranjci.phy@pmf.hr

emission). U konačnici, proizvedeni se fragmenti (engl. *fission product yields*) razlikuju i po neutronsom i po protonskom broju od početnih pobuđenih fragmenata (engl. *primary fission yields*) [2].

Teorija nuklearnih energijskih funkcionala gustoće (EDF, od engl. *energy density functional theory*) predstavlja jedini mikroskopski¹ okvir za opis nuklearne fisije [2]. U svojoj osnovnoj inačici, EDF teorija ekvivalentna je teoriji srednjega polja, u kojemu je kompleksno međudjelovanje sustava mnoštva čestica svedeno na jednočestični problem nukleona u potencijalu srednjega polja. U ovoj aproksimaciji, valna funkcija atomske jezgre odgovara Slaterovoj determinanti neovisnih čestica, a očekivana vrijednost operatora Hamiltonijana u ovom stanju daje energijski funkcional gustoće. Taj je funkcional parametriziran s desetak parametara čije su vrijednosti određene prilagodbom na odabrani skup eksperimentalnih podataka. Takav je model potom primjenjiv duž čitave karte nuklida. EDF teorija i njena proširenja dosad su uspješno primijenjeni pri opisu svojstava osnovnog i pobuđenih stanja atomske jezgre [4, 5, 6], kao i pri opisu nuklearnih reakcija [7, 8].

EDF modeli pokazali su se uspješnim u predviđanju različitih aspekata procesa fisije, od vremena poluživota u spontanoj fisiji [9], preko raspodjela masa i naboja fragmenata [10, 11], do dijeljenja energije među fragmentima [12, 13]. U posljednje vrijeme, razvoj novih teorijskih metoda i povećana dostupnost računalnih resursa učinili su EDF primjenjivim i na opis angularnog momenta fisionih fragmenata [14, 15, 16, 17]. Motivirani novim preciznim mjerenjima [18], teorijski su se modeli uglavnom fokusirali na opis najvjerojatnije fragmentacije te na pitanja načina generiranja angularnog momenta u fragmentima i korelacija među njima. S druge strane, početna raspodjela angularnog momenta u fragmentima ima značajan utjecaj na proces njihove deekscitacije, a posebno na smjer emitiranih neutrona i broj emitiranih fotona. Zbog toga su raspodjele za čitav spektar formiranih fragmenata, a ne samo za najvjerojatniju fragmentaciju, sastavni dio statističkih modela koji opisuju deekscitaciju fragmenata [19, 20]. Međutim, teorijski opis ovih raspodjela temeljen na mikroskopskoj teoriji još uvijek nije dostupan, stoga se u praksi koriste fenomenološke raspodjele koje često nisu dovoljno pouzdane.

U ovom radu opisan je i primijenjen EDF model koji predstavlja značajan korak prema određivanju raspodjela angularnog momenta u fragmentima temeljenih na mikroskopskoj teoriji. Struktura rada je sljedeća: u drugom poglavlju opisan je teorijski okvir, uključujući osnove teorije funkcionala gustoće, metodu ponovnog uspostavljanja slomljenih simetrija te osnovne postavke opisa fisionih fragmenata. U trećem poglavlju, model je primijenjen pri opisu raspodjele angularnog momenta u frag-

mentima nastalim neutronske induciranoj fisijom jezgre ²³⁹Pu. Posljednje poglavlje donosi zaključak i plan daljnjeg istraživanja.

2 Teorijska podloga

2.1 Hartree-Fock-Bogoliubov teorija

U nuklearnoj fizici, teorija energijskih funkcionala gustoće najčešće je primijenjena u okviru Hartree-Fock-Bogoliubovljevog (HFB) modela [21]. HFB model predstavlja proširenje Hartree-Fock (HF) teorije koje uključuje korelacije sparivanja. Ove su korelacije neophodne u slučaju otvorenih ljusaka (kad jezgra nema magičan broj protona ili neutrona), a posebno su važne pri opisu fisije.

Za opis čestičnog dijela i sparivanja koristi se koncept kvazičestica, koje su linearna kombinacija čestica i šupljina. Matematički formalizam teorije temeljen je na Bogoliubovljevoj transformaciji, koja povezuje čestične operatore stvaranja i poništenja ($c_m^\dagger, c_m$) s kvazičestičnima ($\beta_\mu^\dagger, \beta_\mu$):

$$\beta_\mu = \sum_m [U_{\mu m}^\dagger c_m + V_{\mu m}^\dagger c_m^\dagger], \quad (1)$$

$$\beta_\mu^\dagger = \sum_m [V_{\mu m}^T c_m + U_{\mu m}^T c_m^\dagger]. \quad (2)$$

U matričnom obliku može se zapisati kao:

$$\begin{pmatrix} \beta \\ \beta^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U^\dagger & V^\dagger \\ V^T & U^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c \\ c^\dagger \end{pmatrix} = \mathcal{W}^\dagger \begin{pmatrix} c \\ c^\dagger \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Pri tome je matrica $\mathcal{W}$:

$$\begin{pmatrix} U & V^* \\ V & U^* \end{pmatrix} \quad (4)$$

hermitska jer kvazičestični operatori trebaju zadovoljavati jednake komutacijske relacije kao i čestični. Osnovno stanje $|\Phi\rangle$ vakuum je s obzirom na kvazičestice:

$$\beta_\mu |\Phi\rangle = 0 \quad (5)$$

koji se može konstruirati iz čestičnog vakuuma $|0\rangle$ na način:

$$|\Phi\rangle = \prod_\mu \beta_\mu |0\rangle \quad (6)$$

za svaki μ iz konfiguracijskog prostora. Valne funkcije koje zadovoljavaju uvjet (5) nazivaju se HFB valnim funkcijama. Kako one ne određuju koeficijente $U_{\mu m}$ i $V_{\mu m}$ na jedinstven način, uvode se matrica gustoće ρ i tenzor sparivanja κ :

$$\rho_{kl} = \frac{\langle \Phi | c_l^\dagger c_k | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle}, \quad \kappa_{kl} = \frac{\langle \Phi | c_l c_k | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle}. \quad (7)$$

¹Mikroskopskim modelom nazivamo teorijski okvir u kojemu se eksplicitno pojavljuju nukleonski stupnjevi slobode, kao i sile među nukleonima.

Pomoću transformacije (3) operatori ($c, c^\dagger$) se mogu izraziti preko ($\beta, \beta^\dagger$). Matrično se ρ i κ mogu zapisati kao:

$$\rho = V^* V^T, \quad \kappa = V^* U^T. \quad (8)$$

Hamiltonijan je:

$$H = \sum_{ij} t_{ij} c_i^\dagger c_j + \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \bar{v}_{ijkl} c_i^\dagger c_j^\dagger c_l c_k, \quad (9)$$

pri čemu t_{ij} opisuje kinetičku energiju, a $\bar{v}_{ijkl}$ dvočestično međudjelovanje. Energija, odnosno očekivana vrijednost Hamiltonijana može se izraziti kao funkcional od ρ, κ i κ^* kao:

$$\begin{aligned} \mathcal{E} = \frac{\langle \Phi | H | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle} &= \sum_{ij} t_{ij} \rho_{ji} + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \bar{v}_{ijkl} \rho_{lj} \rho_{ki} \\ &+ \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \bar{v}_{ijkl} \kappa_{ij}^* \kappa_{kl}. \end{aligned} \quad (10)$$

Varijacija $\mathcal{E}$ po ρ, κ i κ^* daje HFB jednadžbe, koje se rješavaju tražeći svojstvene vrijednosti E_μ i svojstvene vektore (U_μ, V_μ) jednadžbe:

$$\begin{pmatrix} h & \Delta \\ -\Delta^* & -h^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_\mu \\ V_\mu \end{pmatrix} = E_\mu \begin{pmatrix} U_\mu \\ V_\mu \end{pmatrix}, \quad (11)$$

gdje su h Hartree-Fock Hamiltonijan, a Δ polje sparivanja, definirani kao:

$$h_{nm} = \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \rho_{mn}}, \quad \Delta_{mn} = \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \kappa_{mn}^*}. \quad (12)$$

Zbog aproksimacija u teorijama srednjeg polja kao što je i HFB teorija, dobivene valne funkcije nemaju dobro definirane kvantne brojeve. Kako bi se taj problem riješio koriste se metode ponovnog uspostavljanja simetrija.

2.2 Ponovno uspostavljanje simetrija

Nelinearnost jednadžbi srednjeg polja pogoduje mehanizmu slamanja simetrija sustava. Nakon takvog slamanja simetrija, rezultatne valne funkcije nisu invarijantne ni kovarijantne s obzirom na grupu slomljenih simetrija. Zbog toga im se ne mogu pridružiti dobri kvantni brojevi.

Simetrije se mogu ponovo uspostaviti primjenom elemenata grupe simetrija na "deformirane" valne funkcije, čime se dobivaju linearne kombinacije novih valnih funkcija, ispravnih težinskih faktora. Ako su težinski faktori dobro odabrani, dobivene valne funkcije postaju invarijantne ili kovarijantne s obzirom na grupu simetrija te im se mogu pridružiti prikladni kvantni brojevi. To je tzv. uspostavljanje simetrija ili projekcija. Projekcije se temelje na tome što su težinski faktori zadani ireducibilnim reprezentacijama grupe simetrija.

Ponovno uspostavljanje simetrija može se provesti na dva načina, projekcijom nakon varijacije, odnosno rješavanja jednadžbi, ili varijacijom nakon projekcije. U ovome radu, koristi se metoda projekcije nakon varijacije. U tom se slučaju varijacija provodi u dva koraka, najprije se odredi intrinzično stanje, a zatim se energija minimizira unutar potprostora stanja koja su invarijantna s obzirom na grupu simetrija i mogu se dobiti projekcijom od intrinzičnog stanja [22].

U ovom radu koristimo se projekcijom na dobar angularni moment (AMP, od engl. *angular-momentum projection*) i projekcijom na dobar broj čestica (PNP, od engl. *particle-number projection*). Projekcija na dobar čestica radi se odvojeno od one na dobar angularni moment. Simetrija povezana s angularnim momentom je 3D rotacija, dok je za broj čestica rotacija u baždarnom prostoru. Grupa za 3D rotacije je neabelovska i rotacije su karakterizirane Eulerovim kutovima $\Omega = (\alpha, \beta, \gamma)$. Grupni element je zadan operatorom:

$$\hat{R}(\Omega) = e^{-i\alpha \hat{J}_z} e^{-i\beta \hat{J}_y} e^{-i\gamma \hat{J}_z}. \quad (13)$$

Generalizirani operator projekcije u tom je slučaju:

$$\begin{aligned} \hat{P}_{MK}^J &= \frac{2J+1}{16\pi^2} \int_0^{2\pi} d\alpha \int_0^\pi d\beta \sin\beta \int_0^{4\pi} d\gamma \times \\ &\times D_{MK}^{J*}(\Omega) \hat{R}(\Omega), \end{aligned} \quad (14)$$

pri čemu je J kvantni broj ukupnog angularnog momenta, $M, K \in \{-J, \dots, J\}$ kvantni brojevi njegove projekcije na os kvantizacije, a $D_{MK}^J(\Omega)$ Wignerove D -funkcije [23]:

$$D_{MK}^J(\Omega) = e^{-i\alpha M} d_{MK}^J(\beta) e^{-i\gamma K}. \quad (15)$$

Ovi operatori, prema teoriji grupa, djeluju tako da vrijedi:

$$\hat{R}(\Omega) |JM\lambda\rangle = \sum_K D_{MK}^J(\Omega) |JK\lambda\rangle, \quad (16)$$

gdje je $|JM\lambda\rangle$ potpun skup ortogonalnih stanja, koja su svojstvena stanja operatora $\hat{J}^2$ i $\hat{J}_z$, a λ predstavlja sve preostale kvantne brojeve. Budući da operatori zadovoljavaju relaciju potpunosti, mogu se zapisati kao:

$$\hat{P}_{MK}^J = \sum_\lambda |JM\lambda\rangle \langle JK\lambda|, \quad (17)$$

iz čega je vidljivo da je samo dijagonalna komponenta $\hat{P}_{KK}^J$ projektor u pravom smislu riječi.

Grupa rotacija u baždarnom prostoru je abelovska i operator za projekciju na dobar broj čestica je:

$$\hat{P}^N = \frac{1}{2\pi} \int d\phi e^{-i\phi(\hat{N}-N)}. \quad (18)$$

Ovdje je $\hat{N}$ operator broja za neutrone ili protone, a N broj čestica na koji projiciramo.

U računima je pretpostavljena aksijalna simetrija, zbog čega su integrali po α i γ u formuli (14) trivijalni pa preostaje samo integracija po β . To ne predstavlja bitno ograničenje jer se triaksijalni efekti često mogu zanemariti. Uz tu pretpostavku, raspodjela angularnog momenta je:

$$|c_q(J)|^2 = \frac{2J+1}{2} \int_0^\pi d\beta \sin\beta d_{00}^{J*}(\beta) \mathcal{N}_q(\beta), \quad (19)$$

koja je normalizirana na 1 i u kojoj je $\mathcal{N}_q(\beta)$ preklop, definiran na način:

$$\mathcal{N}_q(\beta) = \langle \Phi_q | \exp(-i\beta \hat{J}_y) | \Phi_q \rangle, \quad (20)$$

gdje je $\hat{J}_y$ y komponenta operatora angularnog momenta, a $|\Phi_q\rangle$ predstavlja odabranu HFB konfiguraciju, za koju se provodi račun. Za preklop vrijedi separabilnost u izospinu:

$$\mathcal{N}_q(\beta) = \mathcal{N}_q^{(\tau=n)}(\beta) \times \mathcal{N}_q^{(\tau=p)}(\beta). \quad (21)$$

2.3 Svojstva fisijskih fragmenata

Početni korak pri računu raspodjela angularnog momenta u fisijskim fragmentima jest određivanje odgovarajućih HFB konfiguracija. U ovome radu, račun provodimo za nekoliko konfiguracija na liniji cijepanja (engl. *scission line*), koja odvaja konfiguracije koje opisuju složenu jezgru (engl. *compound nucleus*) od konfiguracija koje opisuju dva fragmenta. Takve konfiguracije cijepanja odgovaraju strukturama u kojima dva fragmenta nisu u potpunosti odvojena, nego su povezana tankim vratom. Valja napomenuti da u ovakvom modelu nije moguće dobiti dva potpuno odvojena fragmenta jer bi u tom slučaju varijacijski princip dao dvije jezgre u njihovim osnovnim stanjima.

Čest kriterij [24], primijenjen i u ovom radu, jest da HFB konfiguracija $|\Phi_q\rangle$ odgovara konfiguraciji cijepanja ukoliko je

$$q_N \equiv \langle \Phi_q | \hat{Q}_N | \Phi_q \rangle \leq q_N^{\text{sciss}}, \quad (22)$$

gdje je $\hat{Q}_N$ operator broja nukleona u vratu, a q_N^{sciss} parametar. Na ovaj način, konfiguracije cijepanja definirane su kao skup svih stanja $|\Phi_q\rangle$ takvih da je: $q_N > q_N^{\text{sciss}}$ i barem jedan od njihovih susjeda smješten iza linije cijepanja. U ovom računu smo uzeli $q_N^{\text{sciss}} = 3$.

Budući da konfiguracije na liniji cijepanja imaju aksijalno simetričnu gustoću oblika bučice, mogu se razdvojiti na teži ($z < z_N$) i lakši ($z > z_N$) fragment, gdje je z_N minimum raspodjele gustoće. Analogno jednadžbi (19) koja opisuje raspodjelu angularnog momenta u čitavoj jezgri, raspodjela u fisijskom fragmentu može se izračunati kao [14, 15]:

$$|c_q(J_F)|^2 = \frac{2J_F+1}{2} \int_0^\pi d\beta \sin\beta d_{00}^{J_F*}(\beta) \mathcal{N}_q^F(\beta), \quad (23)$$

uz pripadni preklop:

$$\mathcal{N}_q^F(\beta) = \langle \Phi_q | \exp(-i\beta \hat{J}_y^F) | \Phi_q \rangle. \quad (24)$$

Oznaka F služi za raspoznavanje raspodjele težeg ($F = T$) i lakšeg ($F = L$) fragmenta, a q označava ovisnost raspodjele o pojedinoj HFB konfiguraciji. Tu je $\hat{J}^F$ definiran kao:

$$\hat{J}_y^F(\mathbf{r}, \sigma) = \Theta^{F*}(z - z_N) \hat{J}_y(\mathbf{r}, \sigma) \Theta^F(z - z_N), \quad (25)$$

uz prostornu ovisnost o $\mathbf{r}$ i spinsku ovisnost σ . Theta funkcija služi za ograničavanje na dio prostora koji je određen za teži i lakši fragment, tako da je $\Theta^T(z - z_N) = 1 - \mathcal{H}(z - z_N)$, a $\Theta^L(z - z_N) = \mathcal{H}(z - z_N)$. Ovdje je $\mathcal{H}(z)$ Heavisideova step funkcija. Osim toga, prilikom računa potrebno je prostornu ovisnost $\mathbf{r}$ promijeniti u $\mathbf{r} - \mathbf{r}_{CM}^F$, tako da se angularni moment odredi s obzirom na centar mase svakog fragmenta.

Procjena broja nukleona u svakom fragmentu može se dobiti integracijom ukupne gustoće po odgovarajućem potprostoru. Zbog toga što je dobiveni broj necjelobrojan, potrebno je provesti projekciju na dobar broj čestica, ponovo prema teoriji ponovnog uspostavljanja simetrija. Puna raspodjela broja protona i neutrona u fragmentima je:

$$|c_q(N_F, Z_F)|^2 = \langle \Phi_q | \hat{P}^{N_F} \hat{P}^{Z_F} \hat{P}^{N_0} \hat{P}^{Z_0} | \Phi_q \rangle, \quad (26)$$

gdje su operatori $\hat{P}^{N_F}, \hat{P}^{Z_F}, \hat{P}^{N_0}, \hat{P}^{Z_0}$ definirani jednadžbom (18), N_F i Z_F odgovaraju broju neutrona i protona u fragmentima, a N_0 i Z_0 broju neutrona i protona u čitavoj jezgri. Operator broja čestica u fragmentima definiran je analogno jednadžbi (25). Valja napomenuti da bi jednadžba (26) načelno mogla dati četverostruku raspodjelu. Međutim, u praksi nas zanima samo ona komponenta u kojoj projicirani brojevi nukleona N_0 i Z_0 odgovaraju stvarnom broju nukleona u ukupnoj jezgri. Raspodjele (23) i (26) normalizirane su na 1.

Koristeći raspodjelu za J možemo izračunati srednju vrijednost angularnog momenta u fragmentima $\langle J_F \rangle$:

$$\langle J_F \rangle (\langle J_F \rangle + 1) = \sum_{J_F} |c_q(J_F)|^2 J_F (J_F + 1). \quad (27)$$

Odvojene raspodjele za N i Z dobivaju se marginalizacijom po komplementarnom izospinu:

$$|c_q(N_F)|^2 = \sum_{Z_F} |c_q(N_F, Z_F)|^2, \quad (28)$$

$$|c_q(Z_F)|^2 = \sum_{N_F} |c_q(N_F, Z_F)|^2. \quad (29)$$

Fisijski fragmenti na liniji cijepanja su deformirani, i ta je deformacija tipično različita od deformacije osnovnog stanja jezgre. Za kvantifikaciju kvadrupolne deformacije obično se koristi bezdimenzionalni parametar deformacije:

$$\beta_2^F = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} \frac{4\pi}{3A_F R_F^2} q_{20}^F, \quad (30)$$

gdje je $R_F = 1.2A_F^{1/3}$ [15].

2.4 Trostruka projekcija i dinamički efekti

Opisani model razmatra odvojene projekcije na angularni moment i broj čestica. Međutim, moguća je i istovremena projekcija koja bi rezultirala trostrukom raspodjelom u svakom fragmentu svake HFB konfiguracije:

$$|c_q(J_F, N_F, Z_F)|^2 = \langle \Phi_q | \hat{P}^{J_F} \hat{P}^{N_F} \hat{P}^{Z_F} \hat{P}^{N_0} \hat{P}^{Z_0} | \Phi_q \rangle. \quad (31)$$

Ovakav je pristup u srži statičan i ne uzima u obzir vjerojatnost da jezgra dinamičkom evolucijom završi u bilo kojoj od HFB konfiguracija. Ta bi se vjerojatnost mogla izračunati koristeći vremenski ovisnu metodu generirajućih koordinata (engl. *time-dependent generator coordinate method*) [2]. Kombiniranjem tih vjerojatnosti s trostrukom raspodjelom može se dobiti raspodjela angularnog momenta za sve kombinacije broja čestica u fisijskim fragmentima, što bi bio prvi takav rezultat temeljen na mikroskopskoj teoriji. Te bi se raspodjele potom mogle koristiti kao ulazni podaci statističkih modela koji simuliraju deekscitaciju fisijskih fragmenata [19, 20]. Međutim, takav je račun iznimno numerički zahtjevan, stoga zahtijeva snažnu optimizaciju i paralelizaciju koda te njegovo pokretanje na superračunalu. Zbog toga ćemo se u ovom radu zadržati na ilustrativnom primjeru odvojenih projekcija, a prošireni model ostaviti za nastavak istraživanja.

3 Račun i rezultati

3.1 Numeričke metode i detalji računa

Račun je proveden koristeći računalni program HFBTHO [25]. Kôd je napisan u Fortranu 2003 te je paraleliziran OpenMP i MPI metodama, što znatno ubrzava izvršavanje.

Računi su pokretani na računalnom klasteru Zavoda za teorijsku fiziku.

HFB račun zahtjeva odabir konkretne parametrizacije funkcionala gustoće. U ovom je radu korištena Skyrme SkM* interakcija [26], koja je standardan odabir pri proučavanju fisije. Nuklearne valne funkcije razvijene su u bazi deformiranog harmoničkog oscilatora od 1200 stanja iz 30 oscilatorskih ljusaka. Ovakav odabir omogućuje zadovoljavajuću konvergenciju rezultata, uz priuštiv računalni trošak.

U ovom radu račun je proveden za jezgru ^{240}Pu , koja predstavlja fisiju jezgre ^{239}Pu induciranu termičkim neutronom. Za tri konfiguracije na liniji cijepanja proveli smo račun kojim smo dobili podatke o raspodjeli angularnog momenta. Za jednu od tih kombinacija proveli smo i PNP, kojim smo dobili podatke o raspodjeli broja nukleona u fragmentima. Broj kutova β koji je korišten pri AMP je 60, a broj kutova ϕ za PNP je 31. Takav odabir daje izvrsnu konvergenciju projiciranog računa.

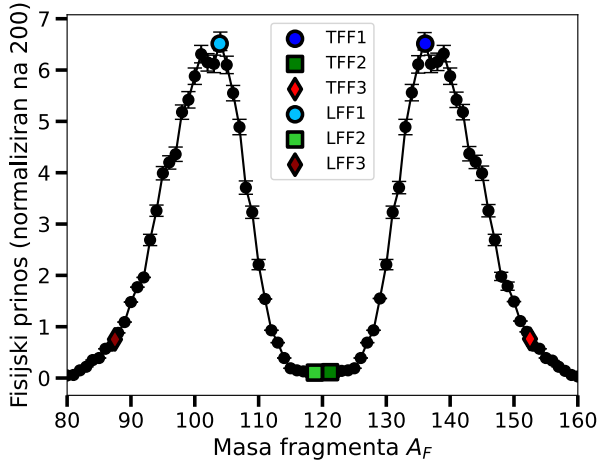
3.2 Svojstva odabranih konfiguracija

Odabrane se konfiguracije razlikuju po broju neutrona i protona u fragmentima, kao i po deformacijama fragmenata. Pri određivanju konfiguracija ograničili smo kvadrupolni (q_{20}) i oktopolni (q_{30}) multipolni moment u HFB računu. Za parove težeg fisijskog fragmenta (TFF) i lakšeg (LFF) koji čine pojedinu konfiguraciju vrijednosti su navedene u Tablici 1. Vrijednosti A_F i Z_F fragmenata dobivene su integracijom gustoće od područja vrata prema lijevo ili desno, ovisno o fragmentu, pa su zbog toga necjelobrojne. Broj neutrona dobije se kao razlika atomske mase i broja protona. Parametar deformacije β_2^F izračunat je prema jednadžbi (30).

Tablica 1: Karakteristične vrijednosti ukupne mase, broja protona i neutrona te kvadrupolne i oktopolne deformacije, za svaki fragment iz triju razmatranih konfiguracija.

Oznaka za konfiguraciju fisijskih fragmenata (FF)	FF1		FF2		FF3	
Oznaka za teži (TFF) ili lakši (LFF) fisijski fragment	TFF1	LFF1	TFF2	LFF2	TFF3	LFF3
Masa fragmenta A_F	136.10	103.90	121.20	118.80	152.51	87.49
Broj protona Z_F	52.43	41.57	47.43	46.57	89.24	34.76
Broj neutrona N_F	83.67	62.33	73.77	72.23	63.27	52.73
Kvadrupolni moment q_{20} [b]	4.62	13.5	27.35	27.06	18.35	12.24
Oktopolni moment q_{30} [$b^{3/2}$]	1.07	-1.14	2.25	-2.22	4.19	-1.30
Parametar kvadrupolne deformacije β_2^F	0.12	0.54	0.85	0.86	0.39	0.65

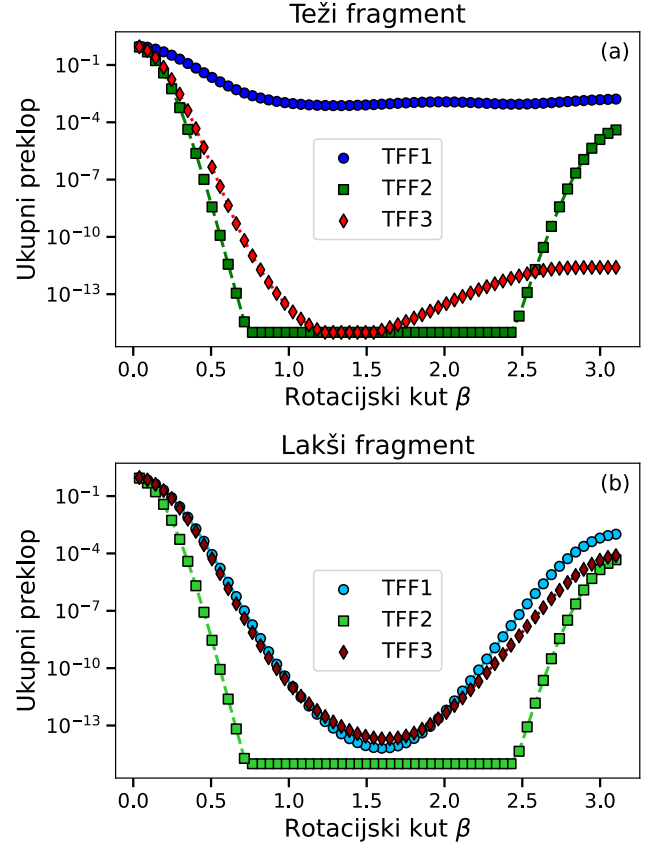
Odabrane konfiguracije su reprezentativni slučajevi, svaki s različitom vjerojatnošću da se dogode u fisiji. Na Slici 1 prikazani su eksperimentalni podaci za fisijski prinos (engl. *fission yields*) za fisiju ^{239}Pu induciranu termalnim neutronom [27]. Raspodjela je simetrična i ima maksimum za fragmentaciju $A_T = 136, A_L = 104$, dok je vjerojatnost opažanja simetričnih fragmentacija iznimno mala. Na slici su dodatno označene i konfiguracije iz Tablice 1. Konfiguracija FF1 je blizu najvjerojatnije fragmentacije, FF2 je u blizini potpuno simetrične fisije, a FF3 predstavlja slučaj velike asimetrije u raspadu.



Slika 1: Izmjereni fisijski prinos (normaliziran na 200) u neutronski induciranoj fisiji jezgre ^{239}Pu [27] (prikazan crno). Dodatno su označene konfiguracije iz Tablice 1.

3.3 Raspodjele angularnog momenta u fisijskim fragmentima

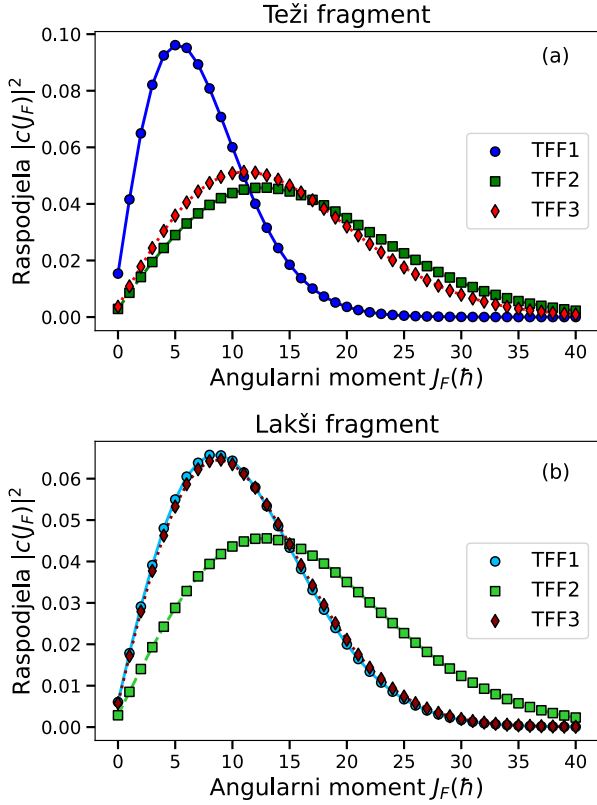
Za račun raspodjela angularnog momenta najprije je potrebno izračunati preklap između polaznog HFB stanja i stanja rotiranog za različite kutove β , prema jednadžbi (24). Slika 2 prikazuje ukupni preklap u ovisnosti o rotacijskom kutu (dobiven množenjem preklapa za neutrone i protone jer vrijedi relacija (21)). Navedene su oznake za svaki fragment iz čega se mogu iščitati svojstva prema Tablici 1. Preklapi su realni te, po očekivanju, sporije padaju za konfiguracije koje su manje deformirane. To znači da su samo manji rotacijski kutovi relevantni u računu. U granici potpuno sferičnog fragmenta preklap bi bio konstantan (iznosio bi 1). Razlog tomu je što je takvo stanje već svojstveno stanje operatora angularnog momenta pa projekcija na dobar angularni moment nema nikakav utjecaj. Odgovarajuća raspodjela za taj slučaj je 1 za $J = 0$ i 0 za sve ostale angularne momente.



Slika 2: Ovisnost preklopa (jednadžba (24)) o vrijednosti rotacijskog kuta $\beta \in [0, \pi]$ za teži (gore) i lakši (dolje) fragment u trima konfiguracijama iz Tablice 1. Vrijednosti manje od 10^{-15} prikazane su s tom vrijednosti jer varijacije ispod tog broja nemaju fizikalnog značenja.

Na Slici 3 prikazane su raspodjele angularnog momenta. Prethodno prikazani preklapi ulaze u integral koji daje ove raspodjele (prema jednadžbi (23)). Posebno su prikazane ovisnosti za teže i lakše fragmente, za svaku od triju konfiguracija. Nijanse iste boje korištene su za prikaz fragmenata iz iste konfiguracije (plava za FF1, zelena za FF2 i crvena za FF3).

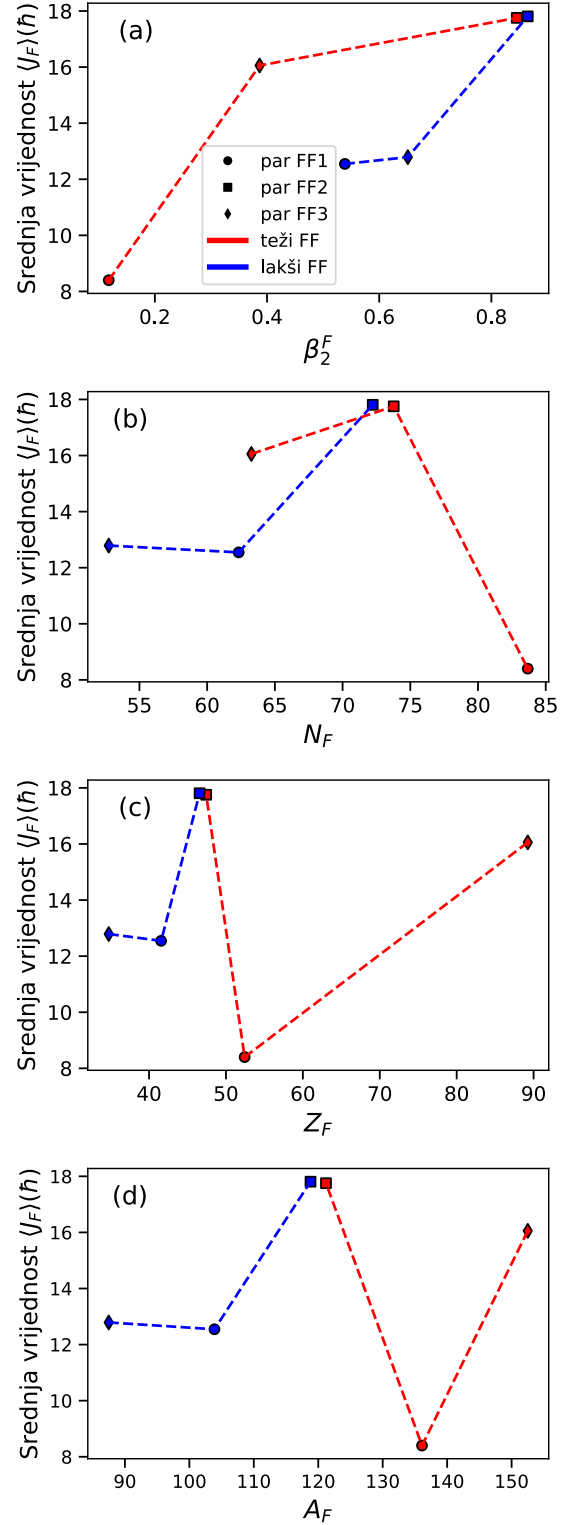
Vidljivo je da raspodjele ovise o svojstvima fragmenata. Teški fragment u blizini najvjerojatnije fragmentacije (TFF1) ima maksimum raspodjele na $J_F = 5\hbar$, dok je raspodjela odgovarajućeg lakšeg fragmenta (LFF1) pomaknuta prema nešto većim vrijednostima angularnog momenta. Gotovo simetrične fragmentacije (TFF2 i LFF2) iznimno su deformirane (Tablica 1) te su, po očekivanju, odgovarajuće raspodjele vrlo slične. Teški fragment asimetrične fragmentacije (TFF3) nosi značajan angularni moment, dok je odgovarajući lakši fragment (LFF3) sličniji onome iz prve konfiguracije.



Slika 3: Raspodjele angularnog momenta (jednadžba (23)) za teži (gore) i lakši (dolje) fragment u trima konfiguracijama iz Tablice 1.

Kako bismo kvantificirali ove razlike, na Slici 4 prikazana je srednja vrijednost angularnog momenta (jednadžba (27)) u ovisnosti o kvadrupolnoj deformaciji fragmenta β_2^F (panel (a)), broju neutrona N_F (panel (b)), protona Z_F (panel (c)) i masi A_F (panel (d)). Crvenom bojom označen je teži fragment iz konfiguracije, a plavom lakši. Također, fragmenti koji čine "par", odnosno pripadaju istoj konfiguraciji prikazani su istim simbolom.

Sa Slike 4(a) vidljivo je da za teže i lakše fragmente srednja vrijednost angularnog momenta raste s deformacijom fragmenta. Konkretnu korelaciju možemo kvantificirati koristeći Pearsonov koeficijent korelacije. Dobivena vrijednost za korelaciju težih i lakših fragmenata zajedno je 0.81, što ukazuje na porast $\langle J_F \rangle$ s porastom β_2^F . Osim toga, dobivena p -vrijednost za tu korelaciju iznosila je 0.049, što znači da je korelacija statistički značajna. Odvojenim računom Pearsonovog koeficijenta dobiva se 0.87 za teže fragmente i 0.95 za lakše fragmente. To znači da je korelacija veća ako gledamo odvojeno ovisnost $\langle J_F \rangle$ o β_2^F u težim i lakšim fragmentima. Za teže fragmente p -vrijednost je 0.31, a za lakše 0.19, što znači da te korelacije nisu toliko statistički značajne. Valja napomenuti da je to očekivano jer se radi o malom broju točaka i račun je samo ilustrativan.



Slika 4: Ovisnost srednje vrijednosti angularnog momenta o deformaciji fragmenta β_2^F , broju neutrona N_F , broju protona Z_F i ukupnoj masi fragmenta A_F . Prikazani su rezultati za sve tri konfiguracije iz Tablice 1. Radi preglednosti, konfiguracije koje odgovaraju težim i lakim fragmentima odvojeno su povezane iscrtkanim linijama.

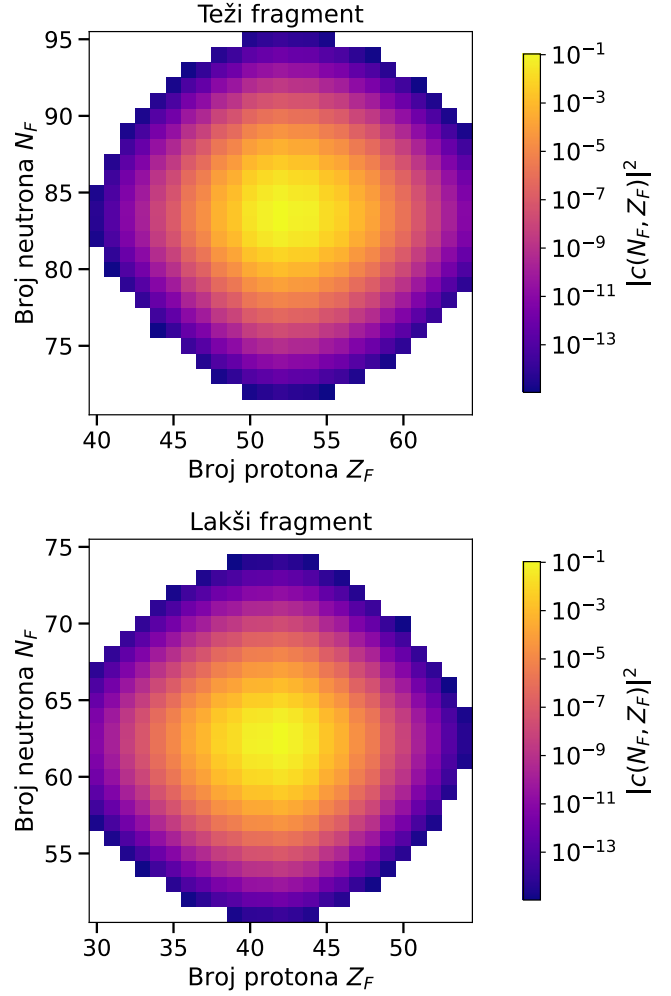
Nadalje, zanimljivo je uočiti da se minimum srednje vrijednosti angularnog momenta kao funkcije broja neutrona u fragmentima (panel 4(b)) i broja protona u fragmentima (panel 4(c)) nalazi u blizini magičnih brojeva $N = 82$ i $Z = 50$. Ovdje valja napomenuti da su parametri modela određeni prilagodbom na empirijske podatke o skupu atomskih jezgara u blizini osnovnog stanja i, manjim dijelom, u blizini prve fisijske barijere. Činjenica da model predviđa efekte ljusaka na očekivanim brojevima neutrona i protona i u fisijskim fragmentima nije trivijalna i potvrđuje njegovu prediktivnu moć.

Nedavna mjerenja [18] potvrdila su da ovisnost srednjeg angularnog momenta o masi fragmenta prati tzv. uzorak zuba pile (engl. *saw-tooth pattern*). Budući da je isti uzorak opažen za tri različite reakcije (dvije inducirane i jednu spontanu), predloženo je da je on univerzalan. Premda smo u ovome radu izračunali distribucije samo triju konfiguracija, dobivena ovisnost (panel 4(d)) potpuno je konzistentna s eksperimentalno opaženim uzorkom. Sličan efekt prvi je put dobiven mikroskopskim teorijskim modelom u [15].

3.4 Raspodjela broja čestica u fisijskim fragmentima

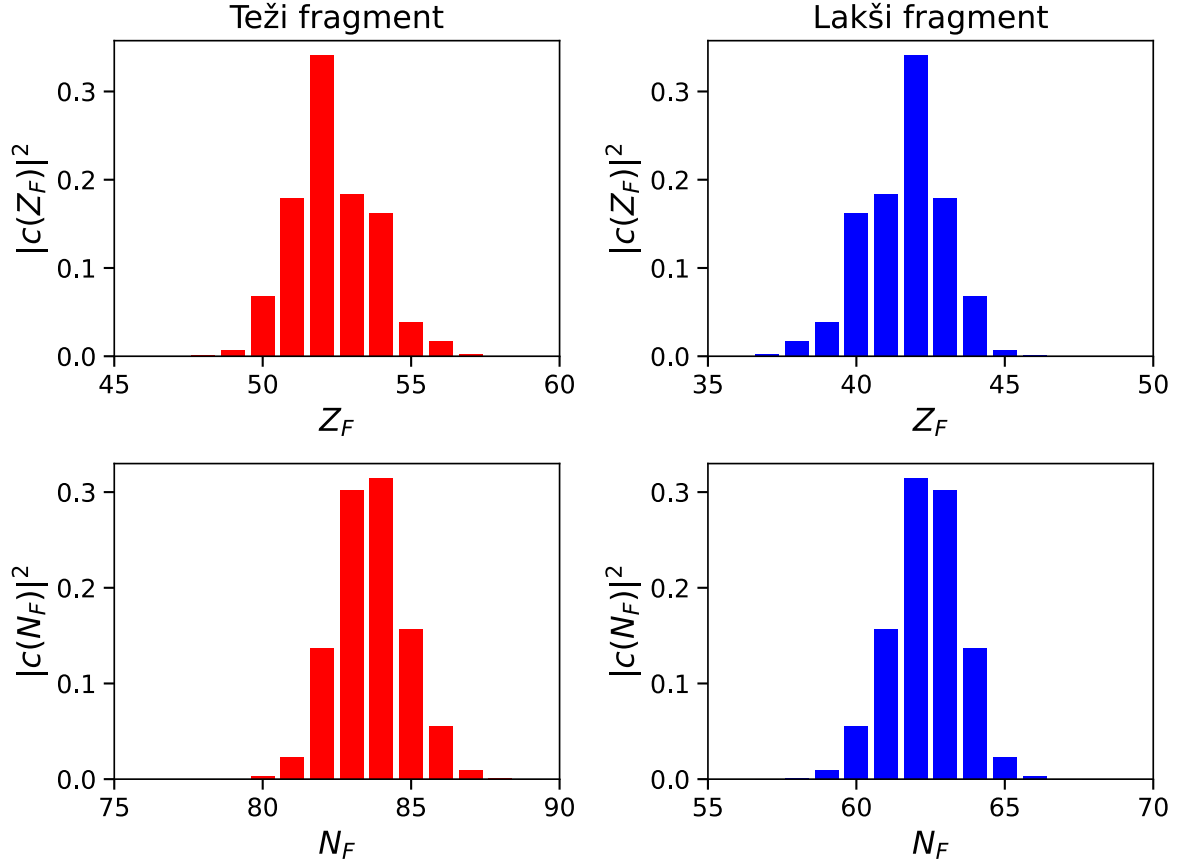
Osim raspodjele angularnog momenta, fisijski fragmenti u našem modelu karakterizirani su i raspodjelom broja čestica. Za ilustrativni račun raspodjele broja čestica u fragmentima, odabrali smo konfiguraciju FF1 iz Tablice 1. Integracijom jednočestične gustoće može se dobiti procjena broja čestica u svakom od fragmenata. Međutim, ovakav pristup daje necjelobrojne vrijednosti (Tablica 1). Budući da HFB stanje nije svojstveno stanje operatora broja čestica, puna raspodjela u broju protona i neutrona može se dobiti metodom projekcije (PNP). U ovome radu, primijenjena je istovremena projekcija na dobar broj čestica u čitavoj jezgri te u jednom od fragmenata. Budući da se projekcije provode odvojeno u svakom izospinskom kanalu, ovakav pristup odgovara četverostruko projekciji (jednadžba (26)). Pri projekciji u čitavoj jezgri, zadržana je samo komponenta valne funkcije koja odgovara točnom broju nukleona za ^{240}Pu . Pri projekciji u fragmentima, proučena je čitava raspodjela.

Na Slici 5 prikazani su grafovi dvostruke raspodjele broja neutrona i protona (jednadžba (26)) za teži (gornji panel) i lakši (donji panel) fragment. Po očekivanju, raspodjele pokazuju dosta široku raspršenost oko najvjerojatnijih vrijednosti. Širina raspodjele u broju čestica povezana je s jakosti korelacija sparivanja, na sličan način na koji je raspodjela angularnog momenta povezana s deformacijom.



Slika 5: Ukupna raspodjela broja protona i neutrona u težem (gore) i lakšem (dolje) fragmentu konfiguracije FF1.

Slika 6 prikazuje odvojene raspodjele dobivene marginalizacijom dvostrukih raspodjela po komplementarnom izospinu (prema jednadžbama (28) i (29)). Iz tog grafa mogu se iščitati najvjerojatnije vrijednosti N_F i Z_F za teži, odnosno lakši fragment. Kao što je već napomenuto, HFB konfiguracija nije svojstveno stanje operatora broja čestica pa se fragmenti sastoje od linearne kombinacije komponenti sa svim brojevima čestica vidljivim na Slici 5. Ipak, maksimum raspodjele odgovara broju dobivenom integracijom gustoće. Vrijednosti Z_F dobivene integracijom su 52.43 i 41.57, dakle ne razlikuju se značajno od vrijednosti koje odgovaraju maksimumima projekcije, a to su $Z_T = 52$ za teži i $Z_L = 42$ za lakši fragment. Pripadne vrijednosti za neutrone, $N_T = 84$ i $N_L = 62$, također su gotovo jednake onima koje bi se dobile integracijom, 83.67 za teži i 62.33 za lakši fragment.



Slika 6: Raspodjela broja protona (gore) i broja neutrona (dolje) u težem (crveno) i lakšem (plavo) fragmentu konfiguracije FF1.

4 Zaključak

U ovom radu, metoda projekcije primjenjena je u računu raspodjela angularnog momenta u fizijskim fragmentima. Za tri konfiguracije na liniji cijepanja, pokazano je da srednja vrijednost angularnog momenta raste s deformacijom fragmenta. Osim toga, dobivena ovisnost o masi fragmenta u skladu je s eksperimentalno opaženim uzorkom zuba pile, a model uspješno predviđa i minimum srednjih vrijednosti angularnog momenta u blizini magičnih brojeva za protone i neutrone. Projekcijom na dobar broj čestica dobivene su raspodjele čiji maksimumi odgovaraju brojevima čestica dobivenim integracijom gustoće u fragmentima.

U nastavku istraživanja, račun bi trebalo proširiti s tri na stotinjak konfiguracija. Kombiniranjem projekcija na angularni moment i broj čestica, te uključivanjem dinamičkih efekata putem vremenski ovisne metode generirajućih koordinata, mogle bi se dobiti raspodjele angularnog momenta za sve kombinacije broja čestica u fizijskim fragmentima. To bi bio prvi takav rezultat temeljen na mikroskopskoj teoriji.

Zahvale

Ovaj rad izrađen je pod vodstvom docenta Petra Marevića na Zavodu za teorijsku fiziku Fizičkog odsjeka Prirodoslovno-matematičkog fakulteta u Zagrebu. Zahvaljujem se mentoru dr.sc. Mareviću na trudu i vremenu koje je uložio kako bi prenio znanje i dao korisne savjete potrebne za izradu ovog rada.

Literatura

- [1] P. Talou i R. Vogt. *Nuclear Fission: Theories, Experiments and Applications*. Springer, Berlin, 2023. ISBN: 978-3031145445.
- [2] N. Schunck i D. Regnier. „Theory of Nuclear Fission”. *Progress in Particle and Nuclear Physics* 125.103963 (2022.). DOI: <https://doi.org/10.1016/j.pnpnp.2022.103963>.
- [3] N. Bohr i J.A. Wheeler. „The Mechanism of Nuclear Fission”. *Phys. Rev.* 56.426 (1939.). DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRev.56.426>.

- [4] M. Bender, P.-H. Heenen i P.-G. Reinhard. „Self-consistent mean-field models for nuclear structure”. *Rev. Mod. Phys.* 75.121 (2003.). DOI: <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.75.121>.
- [5] L.M. Robledo, T.R. Rodríguez i R.R. Rodríguez-Guzmán. „Mean field and beyond description of nuclear structure with the Gogny force: a review”. *J. Phys. G: Nucl. Part. Phys.* 46.013001 (2019.). DOI: [10.1088/1361-6471/aadebd](https://doi.org/10.1088/1361-6471/aadebd).
- [6] T. Nikšić, D. Vretenar i P. Ring. „Relativistic nuclear energy density functionals: Mean-field and beyond”. *Progress in Particle and Nuclear Physics* 66 (2011.), str. 519–548. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ppnp.2011.01.055>.
- [7] C. Simenel. „Nuclear quantum many-body dynamics”. *Eur. Phys. J. A* 48.152 (2012.). DOI: <https://doi.org/10.1140/epja/i2012-12152-0>.
- [8] T. Nakatsukasa, K. Matsuyanagia, M. Matsuo i K. Yabana. „Time-dependent density-functional description of nuclear dynamics”. *Rev. Mod. Phys.* 88.045004 (2016.). DOI: <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.88.045004>.
- [9] A. Baran i dr. „Fission barriers and probabilities of spontaneous fission for elements with $Z \geq 100$ ”. *Nucl. Phys. A* 944.442-470 (2015.). DOI: <https://doi.org/10.1016/j.nuclphysa.2015.06.002>.
- [10] H. Goutte, P. Casoli i J.-F. Berger. „Mass and kinetic energy distributions of fission fragments using the time dependent generator coordinate method”. *Nucl. Phys. A* 734.217-220 (2004.). DOI: <https://doi.org/10.1016/j.nuclphysa.2004.01.038>.
- [11] D. Regnier, N. Dubray, N. Schunck i M. Verrière. „Fission fragment charge and mass distributions in $^{239}\text{Pu}(n,f)$ in the adiabatic nuclear energy density functional theory”. *Phys. Rev. C* 93.054611 (2016.). DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.93.054611>.
- [12] W. Younes i D. Gogny. „Nuclear Scission and Quantum Localization”. *Phys. Rev. Lett.* 107.132501 (2011.). DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.107.132501>.
- [13] A. Bulgac, P. Magierski, K.J. Roche i I. Stetcu. „Induced Fission of ^{240}Pu within a Real-Time Microscopic Framework”. *Phys. Rev. Lett.* 116.122504 (2016.). DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.116.122504>.
- [14] A. Bulgac i dr. „Fission Fragment Intrinsic Spins and Their Correlations”. *Phys. Rev. Lett.* 126.142502 (2021.). DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.126.142502>.
- [15] P. Marević, N. Schunck, J. Randrup i R. Vogt. „Angular momentum of fission fragments from microscopic theory”. *Phys. Rev. C* 104.L021601 (2021.). DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.104.L021601>.
- [16] A. Bulgac, I. Abdurrahman, K. Godbey i I. Stetcu. „Fragment Intrinsic Spins and Fragments’ Relative Orbital Angular Momentum in Nuclear Fission”. *Phys. Rev. Lett.* 128.022501 (2022.). DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.128.022501>.
- [17] G. Scamps, I. Abdurrahman, M. Kalker, A. Bulgac i I. Stetcu. „Spatial orientation of the fission fragment intrinsic spins and their correlations”. *Phys. Rev. C* 108.L061602 (2023.). DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.108.L061602>.
- [18] J.N. Wilson i dr. „Angular momentum generation in nuclear fission”. *Nature* 590.566-570 (2021.). DOI: <https://doi.org/10.1038/s41586-021-03304-w>.
- [19] J. Randrup i R. Vogt. „Calculation of fission observables through event-by-event simulation”. *Phys. Rev. C* 80.024601 (2009.). DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.80.024601>.
- [20] P. Talou i dr. „Fission fragment decay simulations with the CGMF code”. *Comput. Phys. Commun.* 269.108087 (2021.). DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2021.108087>.
- [21] Nicolas Schunck. *Energy Density Functional Methods for Atomic Nuclei*. IOP Publishing Ltd, 2019. ISBN: 978-0-7503-1422-0.
- [22] J.A. Sheikh, J. Dobaczewski, P. Ring, L.M. Robledo i C. Yannouleas. „Symmetry restoration in mean-field approaches”. *J. Phys. G: Nucl. Part. Phys.* 48.123001 (2021.). DOI: <https://doi.org/10.1088/1361-6471/ac288a>.
- [23] D.A. Varshalovich, A.N. Moskalev i V.K. Khersonskii. *Quantum Theory Of Angular Momentum*. World Scientific Publishing Company, 1988. ISBN: 9789814415491.
- [24] M. Verrière, N. Schunck i D. Regnier. „Microscopic calculation of fission product yields with particle-number projection”. *Phys. Rev. C* 103.054602 (2021.). DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.103.054602>.
- [25] P. Marević i dr. „Axially-deformed solution of the Skyrme-Hartree-Fock-Bogoliubov equations using the transformed harmonic oscillator basis (IV) hf-btho (v4.0): A new version of the program”. *Comput. Phys. Commun.* 276.108367 (2022.). DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2022.108367>.

- [26] J. Bartel, P. Quentin, M. Brack, C. Guet i H.-B. Håkansson. „Towards a better parametrisation of Skyrme-like effective forces: A critical study of the SkM force”. *Nucl.Phys.A* 386.79 (1982.). DOI: [https://doi.org/10.1016/0375-9474\(82\)90403-1](https://doi.org/10.1016/0375-9474(82)90403-1).
- [27] K. Nishio, Y. Nakagome, I. Kanno i I. Kimura. „Measurement of Fragment Mass Dependent Kinetic Energy and Neutron Multiplicity for Thermal Neutron Induced Fission of Plutonium-239”. *J. Nucl. Sci. Technol.* 32.404-414 (1995.). DOI: <https://doi.org/10.1080/18811248.1995.9731725>.