Влияние эффективных тензорных сил на барьеры деления ядер урановой области

С. В. Толоконников^{+*}, И. Н. Борзов^{+#}, Ю. С. Лютостанский⁺, Э. Е. Саперштейн^{+×1)}

+ Национальный исследовательский центр "Курчатовский институт", 123182 Москва, Россия

*Московский физико-технический институт, (Государственный университет), 141701 Долгопрудный, Россия

[#] Объединенный институт ядерных исследований, 141980 Дубна, Россия

× Национальный исследовательский ядерный университет "МИФИ", 115409 Москва, Россия

Поступила в редакцию 20 ноября 2017 г. После переработки 30 ноября 2017 г.

Исследовано влияние эффективных тензорных сил на барьеры деления ядер урановой области. Предложен модифицированный энергетический функционал плотности (ЭФП) Фаянса FaNDF⁰- а, в котором, в отличие от исходного ЭФП FaNDF⁰, введено сильное эффективное тензорное взаимодействие. Для изотопов ²³⁶U и ²³⁸U это привело к значительному, примерно на 1 МэВ, понижению высоты первого барьера, приближая значения к известным экспериментальным. Однако еще остается заметное, примерно такого же порядка, расхождение с последними. Обсуждаются возможные причины этого.

DOI: 10.7868/S0370274X18020030

Энергетический функционал плотности (ЭФП) Фаянса [1–3]:

$$E_0 = \int d^3 r \mathcal{E}\left(\rho(\mathbf{r}), \nu(\mathbf{r})\right), \qquad (1)$$

где ρ и ν – нормальная и аномальная плотности, соответственно, принадлежит к классу функционалов конечного радиуса с эффективным взаимодействием юкавского типа. Изотопические индексы в (1) для краткости опущены. В обозначениях [2, 3] $\mathcal{E}^{\rm s}$ – поверхностная часть ЭФП, которая исчезает в ядерной материи, выделяется действием следующего оператора:

$$D(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{1}{4\pi r_{\rm c}^2 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \exp\left(-\frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}{r_{\rm c}}\right) - \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}').$$
(2)

Радиус $r_{\rm c}$ юкавской функции для ЭФП DF3 [2, 3] и его модификации DF3-а [4], с которыми было выполнено большинство расчетов с ЭФП Фаянса для сферических ядер, брался одинаковым для изоскалярной и изовекторной компонент ЭФП и равным 0.35 фм.

Другие особенности ЭФП Фаянса по сравнению с ЭФП Скирма, занимающим доминирующее положение в области самосогласованных расчетов в ядрах, – это более сложная плотностная зависимость ("знаменатель Фаянса") и равенство в ядре эффективной и

Энергетический функционал плотности Скирма HFB-17 [8] и другие функционалы этого семейства HFB-(17-27) [9,10] являются рекордсменами в точности самосогласованных расчетов масс ядер. До последнего времени ЭФП Фаянса применялся лишь к сферическим ядрам, поэтому глобальный расчет ядерных масс был не возможен. Первоначально этот метод был сосредоточен на анализе зарядовых радиусов сферических ядер [3], а затем успешно применен к описанию магнитных [11, 12] и квадрупольных [13– 15] моментов, вероятностей β -распада [16], а также характеристик Е2-переходов в полумагических ядрах [13, 17]. Из перечисленного списка ядерных характеристик, за исключением радиусов, только для частот и вероятностей возбуждения Е2-переходов имеются аналогичные расчеты с ЭФП Скирма, позволяющие прямое сравнение. Лучший среди известных нам таких расчетов [18] с популярными ЭФП Скирма SLy4 и SkM* имеет точность заметно ниже, чем результаты процитированных выше работ с ЭФП Фаянса. Что касается зарядовых радиусов, то сравнение с результатами лучших ЭФП Скирма

свободной масс нуклона, $m^* = m$. Обе они в скрытой форме отражают эффекты энергетической зависимости массового оператора и эффективного взаимодействия, присущие самосогласованной теории конечных ферми-систем (ТКФС) [5]. Этот подход основан на общих принципах ТКФС [6] и существенно использует условия согласования ТКФС [7].

¹⁾e-mail: saper@mbslab.kiae.ru

в работах [4,19] и в недавней работе [20] однозначно говорит в пользу ЭФП Фаянса.

В наиболее известной работе [3] с участием самого Фаянса и в последующих работах в рамках этого метода, вплоть до работы [4], использовался ЭФП DF3 [2]. В работе [4] впервые методом Фаянса были рассмотрены ядра тяжелее свинца, которые, в основном, деформированные. Использовался приближенный метод, когда самосогласованный расчет с ЭФП Фаянса проводился для сферического ядра, а затем к полной энергии добавлялась деформационная энергия, полученная с ЭФП Скирма HFB-14. Даже такая грубая схема приводила к достаточно точному описанию радиусов ядер, заметно превосходящему результаты полностью самосогласованных расчетов с ЭФП Скирма. При этом, однако, пришлось несколько модифицировать спин-орбитальные и эффективные тензорные компоненты ЭФП DF3.

Соответствующая функционалу DF3 спинорбитальная амплитуда Ландау–Мигдала (ЛМ) в стандартных для ТКФС [6] обозначениях имеет вид

$$\mathcal{F}_{\rm sl} = C_0 r_0^2 (\kappa + \kappa' \boldsymbol{\tau}_1 \boldsymbol{\tau}_2) \times \\ \times [\nabla_1 \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \times (\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2)] \cdot (\boldsymbol{\sigma}_1 + \boldsymbol{\sigma}_2), \tag{3}$$

где $C_0 = (dn/d\varepsilon_{\rm F})^{-1} = 2\epsilon_{0{\rm F}}/(3\rho_0)$ – стандартный нормировочный фактор ТКФС, ρ_0 – равновесная плотность симметричной ядерной материи, $\epsilon_{0{\rm F}} = k_{0{\rm F}}^2/(2m)$ – отвечающая ей энергия Ферми, а множитель $r_0^2 = (3/(8\pi\rho_0))^{2/3}$ введен, чтобы константы спин-орбитального взаимодействия κ, κ' были безразмерными.

В ядрах с незаполненными полностью спинорбитальными дублетами отлична от нуля так называемая спин-орбитальная плотность

$$\rho_{\rm sl}^{\alpha}(\mathbf{r}) = \sum_{\lambda} \mathbf{n}_{\lambda}^{\alpha} \langle \psi_{\lambda}^{\alpha*}(\mathbf{r})(\boldsymbol{\sigma}_{1})\psi_{\lambda}^{\alpha}(\mathbf{r}) \rangle, \qquad (4)$$

где $\alpha = n, p$ – изотопический индекс, n_{λ} – числа заполнения и ψ_{λ} – волновые функции в состоянии λ . Как показано, например в [5], в таких ядрах в спинорбитальном расщеплении появляется дополнительное слагаемое, обусловленное тензорными силами и первой гармоникой спиновой амплитуды ЛМ. Они входят суммарно, поэтому удобно, следуя [5], описывать их вклад одной эффективной первой гармоникой спиновых сил:

$$\mathcal{F}_1^s = C_0 r_0^2 (g_1 + g_1' \boldsymbol{\tau}_1 \boldsymbol{\tau}_2) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) (\boldsymbol{\sigma}_1 \boldsymbol{\sigma}_2) (\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2).$$
(5)

Однако, поскольку в современных ЭФП Скирма вводятся тензорные силы, с целью "узнавания" мы будем называть параметры g_1 и g'_1 эффективными тензорными силами.

В ядрах урана и других тяжелых и сверхтяжелых ядрах, рассмотренных в [4], вблизи поверхности Ферми нейтронов и протонов имеется сразу несколько частично заполненных уровней с большими значениями полного углового момента *j*. В результате спинорбитальная плотность (4) оказывается, в среднем, значительно больше, чем в ядрах легче свинца, по которым подбирались параметры DF3, поэтому возрастает роль эффективных тензорных сил (5). Оказалось, что для успешного описания этой новой для метода Фаянса области нужно существенно изменить спин-изоспиновую константу g'_1 , со значения -0.12в ЭФП DF3 до -0.30 в DF3-а. Примерно на 10% пришлось изменить и спин-орбитальную константу к. При этом оказалось, что для легких ядер кальция предсказания обоих ЭФП практически идентичны, а для средних ядер, от олова до свинца, DF3-а несколько предпочтительнее. По этой причине в большинстве работ с ЭФП Фаянса, появившихся после [4], в частности, в [13] и [14], использовался функционал DF3-a.

Лишь недавно метод Фаянса был распространен на деформированные ядра [21]. При этом использовался ЭФП FaNDF⁰ [22], являющийся локализованной версией функционала (1), в которой используется следующее приближение для оператора (2):

$$D(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \rightarrow -r_{\rm c}^2 \nabla^2 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}').$$
 (6)

Параметры FaNDF⁰ подбирались по тому же массиву данных для сферических ядер, что и параметры DF3, поэтому и значения констант в (3) и (5) оказались практически те же, что и в DF3. Первые применения к деформированным ядрам ЭФП Фаянса FaNDF⁰ с параметрами, повторимся, подобранным лишь по сферическим ядрам [23, 24], оказались достаточно успешными. В частности, в первой из этих работ была подтверждена, в согласии с экспериментальными данными по зарядовым радиусам и магнитным моментам нечетных изотопов свинца, сферическая форма легких изотопов Pb.

В работе [24] исследовались барьеры деления ядер урановой области. Учитывалась только квадрупольная степень свободы, которая играет основную роль для первого барьера. По этой причине практически не рассматривались вторые барьеры, для которых, согласно оценкам, октупольная степень свободы очень важна. Найденные значения высоты первого барьера $B_f^{(1)}$ ядра ²³⁸U и нескольких других соседних ядер, для которых известны их экспериментальные значения, оказались заметно выше последних, хотя и заметно ниже, т.е. ближе к эксперименту, чем предсказания популярного ЭФП Скирма SLy4 [25]. Так, для ²³⁸U было получено $B_f^{(1)} \simeq 8.47$ МэВ, что более чем на 2 МэВ превосходит экспериментальное значение $(B_f^{(1)})_{\rm exp} = 6.30$ МэВ [26].

Была надежда, что последовательный учет октупольной степени свободы исправит ситуацию. Сейчас мы имеем возможность делать такие расчеты согласно следующей схеме. Сначала фиксируется параметр квадрупольной деформации β_2 , затем включается октупольная степень свободы, и ищется минимум деформационной энергии $U(\beta_2; \beta_3)$ по переменной β_3 . На рис. 1 для ядра ²³⁸U сравниваются резуль-



Рис. 1. (Цветной онлайн) Кривые деформационной энергии ядра ²³⁸U для функционала Фаянса FaNDF⁰ без учета и с учетом октупольной степени свободы

тирующие кривые $U(\beta_2)$, полученные без учета и с учетом β_3 . Как видно, радикально меняется второй барьер $B_f^{(2)}$, тогда как первый практически остается прежним. Рис. 2 поясняет, почему это происходит. На нем построена зависимость от β_2 равновесного значения октупольного момента q_3 ($q_3 \propto \beta_3$), отвечающего минимуму $U(\beta_2;\beta_3)$ при данном значении β_2 . Как видно, $q_3 = 0$ (а значит, и $\beta_3 = 0$) вплоть до $\beta_2 \simeq 0.8$, тогда как первый барьер находится в области $\beta_2 \simeq 0.5$. На этом рисунке нанесены также значения наведенного гексадекапольного момента q_4 , пропорционального параметру гексадекапольной деформации β_4 .

Тот факт, что при учете октупольной степени свободы второй барьер, как правило, становится ниже первого, важен для астрофизических приложений, поскольку именно более высокий барьер определяет границу между процессами деления и нейтронного захвата. Для подавляющего большинства ядер



Рис. 2. (Цветной онлайн) Кривые равновесных значений мультипольных моментов q_3 (b^{3/2}) и q_4 (b²) ядра ²³⁸U в зависимости от квадрупольной деформации β_2 для функционала Фаянса FaNDF⁰-а

Таблица 1. Значения констант зависящих от спина компонент исходного FaNDF^0 и модифицированного FaNDF^0 -а функционалов Фаянса

Параметр	$FaNDF^{0}$	FaNDF ⁰ -a
κ	0.19	0.185
κ'	0.0	0.075
g_1	0.0	0
g_1'	0.0	-0.300

урановой области оказывается справедливым неравенство $B_f^{(1)} > B_f^{(2)}$, так что расчет первого барьера имеет первоочередное значение, а для второго, как правило, важно только убедиться, что он ниже первого.

Ясно, что для улучшения согласия с экспериментом, в рамках данного подхода, нужно модифицировать параметры функционала с учетом характеристик тяжелых деформированных ядер. Первым шагом на этом пути является изменение параметров, зависящих от спина компонент ЭФП FaNDF⁰, входящих в (3) и (5). В отличие от ЭФП DF3, в этом функционале эффективные тензорные силы вообще отсутствуют. Естественно для начала взять для четырех констант в (3) и (5) те же значения, что были выбраны в ЭФП DF3-а [4] и назвать модифицированный таким образом ЭФП FaNDF⁰-а. Сравнение параметров исходного и модифицированного ЭФП Фаянса для деформированных ядер выполнено в табл. 1.

Сравнение результатов расчета деформационной кривой ядра ²³⁸U для функционалов FaNDF⁰ и FaNDF⁰-а приведено на рис. 3. Как видно, значение $B_f^{(1)}$ заметно снижается с 8.47 МэВ до 7.56 МэВ, оставаясь все же выше приведенного выше эксперимен-



Рис. 3. (Цветной онлайн) Кривые деформационной энергии ядра $^{238}{\rm U}$ для функционалов Фаянса ${\rm FaNDF}^0$ и ${\rm FaNDF}^0$ -а

тального значения. Влияние эффективного тензорного взаимодействия на высоту второго барьера $B_f^{(2)}$ еще больше, но в данном случае важно лишь то, что он остается ниже первого.

Деформационные кривые для четных изотопов ^{232–238}U с модифицированным функционалом Фаянса построены на рис. 4. Кривые более легких изото-



Рис. 4. (Цветной онлайн) Кривые деформационной энергии четных изотопов $^{232-238}{\rm U}$ для функционала Фаянса ${\rm FaNDF}^0\text{-a}$

пов качественно повторяют соответствующую кривую для ²³⁸U. Во всех случаях, кроме самого легкого из рассмотренных ядра ²³²U, второй барьер ниже первого. В этом же ядре второй барьер, хоть и незначительно, но выше первого. Данный пример показывает, что при систематических расчетах барьеров деления следить за положением второго барьера необходимо. Для изотопа ²³⁶U также известно [26] экспериментальное значение $(B_f^{(1)})_{exp} = 5.00$ Мэв. Отвечающее рис. 4 найденное нами для ЭФП FaNDF⁰-а, теоретическое значение 6.87 МэВ значительно выше, но, как и для изотопа ²³⁸U, примерно на 1 Мэв ниже найденного в [24] значения 7.97 МэВ для ЭФП FaNDF⁰.

В заключение мы приведем на рис. 5 кривые деформационной энергии тяжелых изотопов урана в



Рис. 5. (Цветной онлайн) Кривые деформационной энергии тяжелых четных изотопов $^{258-262}{\rm U}$ для функционала Фаянса FaNDF⁰-а

районе ²⁶⁰U. В работе [24], при достаточно грубом рассмотрении, без учета октупольной деформации для исходного функционала Фаянса FaNDF⁰ было предположено, что в этих ядрах происходит фазовый переход в сферическое основное состояние. Настоящий, более последовательный расчет с модифицированным функционалом FaNDF⁰-а подтверждает это предположение.

Резюмируем результаты данного исследования барьеров деления изотопов урана на основе модифицированного ЭФП Фаянса FaNDF⁰-а, в котором, по сравнению с исходным ЭФП FaNDF⁰, незначительно изменены спин-орбитальные константы, но введено сильное эффективное тензорное взаимодействие. Параметры этих зависящих от спина компонент ЭФП взяты теми же, что и в ЭФП Фаянса DF3-а [4], который оказался успешным в сферических ядрах. Для изотопов ²³⁶U и ²³⁸U введение сильных эффективных тензорных сил привело к значительному, примерно на 1 МэВ, понижению высоты первого барьера, приближая значения к экспериментальным. Однако еще остается значительное, почти 2 МэВ – в первом случае и несколько больше 1 МэВ – во втором, расхождение. Для его ликвидации, повидимому, необходимо изменение других параметров ЭФП FaNDF⁰, а возможно, потребуется выход за рамки теории среднего поля.

Авторы благодарны М. Кортелайнену за полезные обсуждения. Работа поддержана грантами РНФ #16-12-10155 (роль тензорных сил) и 16-12-10161 (роль октупольной деформации). Частичная поддержка также осуществлялась грантом РФФИ 16-02-00228-а. Работа была выполнена с использованием вычислительных ресурсов федерального центра коллективного пользования НИЦ "Курчатовский институт", http://ckp.nrcki.ru. ЭЕС был также поддержан Проектом "Российское образование мирового класса" НИЯУ МИФИ, согласно Контракту Министерства образования и науки Российской Федерации № 02. A03.21.0005.

- А.В. Смирнов, С.В. Толоконников, С.А. Фаянс, ЯФ 48, 1661 (1988) [Phys. Atom. Nucl. 48, 995 (1988)].
- I. N. Borzov, S. A. Fayans, E. Kromer, and D. Zawischa, Z. Phys. A **355**, 117 (1996).
- S.A. Fayans, S.V. Tolokonnikov, E.L. Trykov, and D. Zawischa, Nucl. Phys. A 676, 49 (2000).
- С.В. Толоконников, Э.Е. Саперштейн, ЯФ 73, 1731 (2010) [Phys. Atom. Nucl. 73, 1684 (2010)].
- V. A. Khodel and E. E. Saperstein, Phys. Rep. 92, 183 (1982).
- А.Б. Мигдал, Теория конечных ферми-систем и свойства атомных ядер, Наука, М. (1965); Wiley, N.Y. (1967).
- S. A. Fayans and V.A. Khodel, JETP Lett. 17, 444 (1973).
- S. Goriely, N. Chamel, and J. M. Pearson, Phys. Rev. Lett. 102, 152503 (2009).
- 9. S. Goriely, http://www-astro.ulb.ac.be/bruslib/ nucdata/
- Э. Е. Саперштейн, С. В. Толоконников, ЯФ 74, 1306 (2011) [Phys. At. Nucl. 74, 1277 (2011)].

- И. Н. Борзов, Э. Е. Саперштейн, С. В. Толоконников, ЯФ 71, 000 (2008) [Phys. At. Nucl. 71, 469 (2008)].
- I.N. Borzov, E.E. Saperstein, S.V. Tolokonnikov, G. Neyens, and N. Severijns, Eur. Phys. J. A 45, 159 (2010).
- S. V. Tolokonnikov, S. Kamerdzhiev, D. Voytenkov, S. Krewald, and E. Saperstein, Phys. Rev. C 84, 064324 (2011).
- S. V. Tolokonnikov, S. Kamerdzhiev, S. Krewald, E. E. Saperstein, and D. Voitenkov, EPJA 48, 70 (2012).
- S. Kamerdzhiev, S. Krewald, S. Tolokonnikov, E. E. Saperstein, and D. Voitenkov, EPJ Web of Conferences 38, 10002 (2012).
- 16. I.N. Borzov, Nucl. Phys. A 777 645 (2006).
- S. V. Tolokonnikov, S. Kamerdzhiev, S. Krewald, E. E. Saperstein, and D. Voitenkov, EPJ Web of Conferences 38, 04002 (2012).
- J. Terasaki, J. Engel, and G. F. Bertsch, Phys. Rev. C 78, 044311 (2008).
- Э. Е. Саперштейн, С. В. Толоконников, ЯФ 74, 1306 (2011) [Phys. At. Nucl. 74, 1277 (2011)].
- K. Minamisono, D. M. Rossi, R. Beerwerth et al. (Collaboration), Phys. Rev. Lett. 117, 252501 (2016).
- S. V. Tolokonnikov, I. N. Borzov, M. Kortelainen, Yu. S. Lutostansky, and E. E. Saperstein, J. Phys. G 42, 075102 (2015).
- 22. S. A. Fayans, Письма в ЖЭТФ **68**, 161 (1998) [JETP Lett. **68**, 169 (1998)].
- S. V. Tolokonnikov, I. N. Borzov, M. Kortelainen, Yu.S. Lutostansky, and E.E. Saperstein, Phys. At. Nucl. 79, 21 (2016).
- С. В. Толоконников, И. Н. Борзов, Ю. С. Лютостанский, И. В. Панов, Э. Е. Саперштейн, ЯФ 80, 319 (2017) [Phys. At. Nucl. 80, 631 (2017)].
- E. Chabanat, P. Bonche, P. Haensel, J. Meyer, and R. Scheffer, Nucl. Phys. A 635, 231 (1998).
- R. Capote, M. Herman, P. Obložinský et al. (Collaboration), Nucl. Data Sheets 110, 3107 (2009).