

# Utjecaj metode blokiranja orbitala na karakteristike raspada egzotičnih jezgara

Ines Markulin

Mentor: doc. dr. sc. Tomislav Marketin

# Uvod

- sinteza elemenata težih od željeza u r-procesu (nuklearna astrofizika)
- kompleksan, dinamičan proces - osjetljiva ravnoteža reakcija jakog, elektromagnetskog i slabog međudjelovanja
- zahtjeva znanje određenog broja observabli od nekoliko tisuća jezgri duž cijele nuklearne karte
- r-proces - uključuje više vrsta nuklearnih reakcija (beta raspad, uhvat neutrona, itd.)
- karakteristično prosječno vrijeme uhvata neutrona -značajno kraće od vremena poluživota
- nestabilna jezgra (stvorena u hvatom neutrona) hvata sljedeći neutron prije  $\beta$ -raspada
- vremena poluživota  $\beta$ -raspada uključenih jezgri –izravan utjecaj na raspodjelu zastupljenosti elemenata

- tijekom trajanja r-procesa pojavljuje se  $\beta$ - odgođena emisija neutrona
- značajna u kasnijim fazama – pojave nadmetanje između uhvata neutrona i  $\beta$ -raspada
- značajna vremena poluživota  $\beta$ -raspada oko magičnih brojeva neutrona  $N=50, 82$  i  $126$
- diskontinuit energija separacije neutrona
- razlog niskog udarnog presjeka za uhvat neutrona
- posljedica: pomicanje toka materije r-procesa bliže stabilnosti (jezgre sa znatno većim vremenima poluživota  $\beta$ -raspada)
- akumuliranje materije oko magičnih brojeva
- stvaranje vrhova u raspodjeli zastupljenosti elemenata = vrhovi u raspodjeli unutar Sunčevog sustava
- trajanja r-procesa oko desetak sekundi - vrlo eksplozivan niz reakcija

- niz reakcija prestaje s jezgrama koje unutar tog vremena doživljavaju fisiju ( $A=260$ )
- gašenjem toka neutrona - počinje više ili manje brz  $\beta$ -raspad nastalih nuklida k liniji stabilnosti
- $\beta$ -raspad prestaje na prvom stabilnom ili metastabilnom nuklidu
- određivanja energija vezanja i vremena poluživota neparno-neparnih i neparno-parnih jezgri -  $\rightarrow$  potpuno samo-suglasan mikroskopski teorijski okvir -  $\rightarrow$  relativistički nuklearni funkcional gustoće energije
- osnovno stanje: relativistički Hartree-Bogoljubovljev (RHB) model
- pobuđena stanja: proton-neutronska relativistička kvazičestična fazna aproksimacija (pn-RQRPA)

# Teorijski formalizam

## Relativistička teorija srednjeg polja

- RMFT- definira atomsku jezgru kao kvantni susutav
- nukleoni kao Diracove čestice – međudjeluju izmjenom virtualnih mezona i elektromagnetskog polja (zanemarivanje podstrukture)
- 1.stupanj slobode modela: slobodni nukleoni mase  $m$  kao Diracovi spinori  $\psi$
- kulonsko međudjelovanje putem elektromagnetskog polja
- 2.stupanj slobode: vektorsko polje fotona  $\mathcal{V}$   $m_\gamma = 0$   $J^\pi = 1^-$
- dominiraju mezoni: najniže  $J$  i  $T$
- klasifikacija:  $J=0$  ili  $J=1$ , tj.  $T=0$  ili  $T=1$
- polja koja čuvaju paritetnu simetriju  $\Pi = (-1)^J$
- proučavanje parno-parnih jezgri - pozitivno osnovno stanje
- polje negativnog pariteta ne može doprinosti

- ekvivalentna metoda – kovarijantna teorija funkcionala gustoće (DFT)
- Kohn-Shamov pristup minimizacije funkcionala energije - određivanje egzaktnog osnovnog stanja nuklearnog sustava
- funkcional energije opisuje dinamiku nuklearnog sustava
- izvod iz efektivnog lagranžijana
- efektivni parametri (mase mezona i konstante njihovih vezanja na nukleone) - prilagodba za reproduciranje globalna svojstva nuklearne materije i nekoliko konačnih jezgara u njihovom osnovnom stanju
- nakon prilagodbe parametara model koristimo za različite tipove pobuđenja (kvantitativna razina)

# Relativistički Hartree-Bogoljubov model

- koncept kvazičestice
- kvantni sustav ima osnovno stanje sa minimumom energije i različita pobuđena stanja
- Boltzmannova raspodjela: većina relevantnih pobuđenja nalazi se u niskoležećim stanjima – među kojima i kvazičestice te kolektivna pobuđenja
- kvazičestica: fenomen, pojavljuje se u sustavu i ne postoji van sustava
- zamišlja kao “obučena” čestica, tj. nešto čime je prava čestica okružena i što mijenja ponašanje čestice
- kvazičestična pobuđenja: druga (kanonska) kvantizacija (valne funkcije - > matematički operatori stvaranja i poništenja)
- stvaranje kvazičestice u stanju iznad Fermijevog = stvaranje čestice u tom stanju
- stvaranje šupljine u stanju ispod Fermijevog = poništenje čestice u tom stanju

- Bogoljubova transformacija: unitarna transformacija koja omogućava da se iz jedne reprezentacije prijeđe u drugu (također unitarnu kanonsku reprezentaciju)
- dijagonalizacija hamiltonijana - > stacionarna rješenja pripadne Schrödingerove jednačbe
- fermionska priroda kvazičestica - > antikomutacijske relacije
- fermionski mod “rada” Bogoljubove transformacije – k.operatori izražavaju preko jednočestičnih operatora stvaranja i poništenja

$$\alpha_k^+ = \sum_l U_{lk} c_l^+ + V_{lk} c_l \quad \begin{pmatrix} \alpha \\ \alpha^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U^+ & V^+ \\ V^T & U^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c \\ c^+ \end{pmatrix}$$

- energetski najbolja konfiguracija: svi nukleoni zadnje, otvorene ljuske sparni
- preduvjet vezanja nukleona u stanje angularnog momenta J=0: isti l, jednaki apsolutni iznos i suprotni predznak projekcije m (veliki prostorni preklop valnih funkcija)
- RHB model -relativističko poopćavanja HFB teorije zbog kvantizacije mezonkih polja za uključenje korelacije sparivanja na mikroskopski način



- osnovno stanje jezgre: generalizirana Slaterova determinanta  $|\Phi\rangle$
- generalizirana matrica gustoće
- ukupna energija sustava u RHB modelu

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

matrica gustoće

$$E_{RHB}[\hat{\rho}, \hat{k}, \phi] = E_{RMF}[\hat{\rho}, \phi] + E_{par}[\hat{k}]$$

tenzor sparivanja

$$E_{RHB}[\hat{\rho}, \hat{k}, \phi] = E_{RHB}[R, \phi]$$

mezonsko polje

- funkcional energije sparivanja

$$E_{par}[\hat{k}] = \frac{1}{4} Tr[\hat{k}^+ V^{pp} \hat{k}]$$

- interakcija u pp-kanalu dvočetsičnog sparivanja

- preko varijacijskog principa raspisuju se vremenski ovisne HB jednadžbe gibanja

$$i\partial_t R = [H(R), R]$$

- generalizirani hamiltonijan se dobije kao derivacija funkcionala energije s obzirom na generaliziranu gustoću R

$$H = \frac{\delta E_{RHB}}{\delta R} = \begin{pmatrix} \hat{h}_D - m - \lambda & \hat{\Delta} \\ -\hat{\Delta}^* & -\hat{h}_D + m + \lambda \end{pmatrix} \leftarrow \begin{array}{l} \text{kemijski potencijal} \\ Tr \hat{\rho} = N \end{array}$$

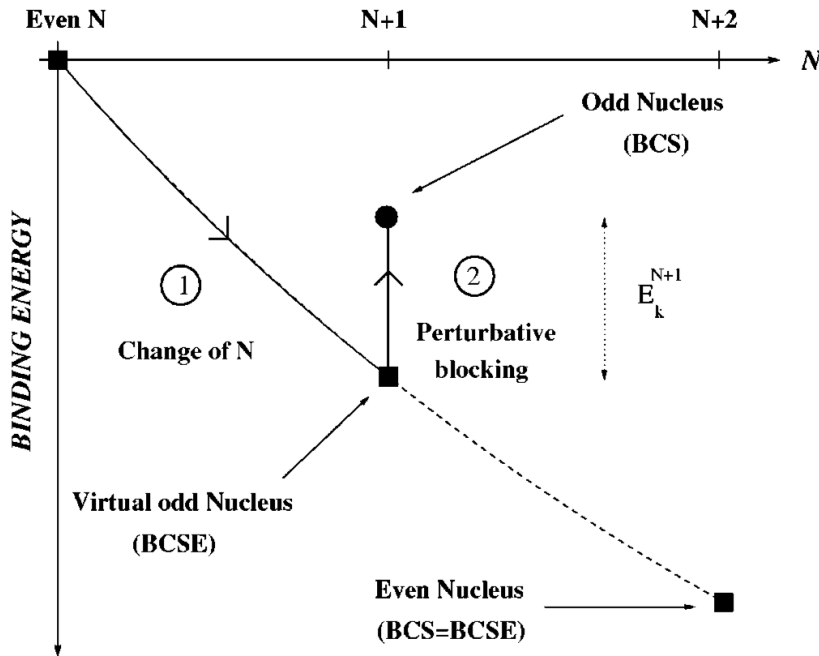
- osnovno stanje  $|\Phi\rangle$  se određuje HB jednadžbama (statički limes vremenski ovisne jednadžbe)
- dijagonalizacija hamiltonijana

svojstveni vektori = k. valne funkcije

svojstvene vrijednosti  
= kvazičestične E

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

# Metoda blokiranja



- novi prostor - > izbor kvazičestice
- > stanje sa točnim br. čestica

$$|\Psi^{BCSE}(N+1)\rangle$$

- BCSE: stanje kreirano kao paran prostor bez kvazičestičnih pobuđenja, bez slamanja invarijantnosti na vremenski obrat (neparni prosječnim brojem čestica)

razlika energija sa neparnim susjedom

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

$$\Delta E_k \approx \frac{\partial E^{BCSE}}{\partial N} + E_k^{N+1}$$

energija BCS prostora N sparenih čestica

najniža E kvazičestice

# QRPa izračun

- potpuno mikroskopski teorijski okvir temeljen na funkcionalu relativističke nuklearne gustoće energije (RNEDF)
- osnovni okvir koristi samodosljedno prosječno područje za nukleone i za minimalnu grupu mesonskih područja
- izoskalarni skalar  $\sigma$  meson, izoskalarni vektor  $\omega$  meson, izovektorski vektor  $\rho$  meson  $(J^\pi = 0^+, T = 0)$   $(J^\pi = 1^-, T = 0)$   $(J^\pi = 1^-, T = 1)$
- dopunjeni elektromagnetskim poljem
- RHB-efekti sparivanja u jezgri otvorene ljuske
- D3C\* parametrizacija: parametri modela za spajanje ovisno o gustoći i masi mesona (vremena poluživota  $\beta$ -raspada u mediju i teškoj jezgri)
- Gogny interakcijom konačnog dosega i D1S parametrizacijom: korelacije sparivanja (jezgre otvorene ljuske)
- pobuđena stanja: proton-neutron relativističke kvazičestične nasumične fazne aproksimacije (pn-RQRPA)

- kvazičestični parovi mogu biti spareni do dobrog angularnog momenta i matričnih jednadžbi od pn-RQRPA kao (sferična simetrija)

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

- matrični el. prijelaza između osnovnog stanja roditelja i pobuđenog stanja kćeri (inducirano operatorom)  $T^{JM}$

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

- X i Y amplitude dobivene rješavanjem pn-RQRPA jednadžbi
- dio za sparivanje iz Gogny sile (kanal T=1 za pn-RQRPA)

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

$$r_{12} = |r_1 - r_2|$$

grupa D1S parametara

operatori izmjene spina i izospina

- T=0 proton-neutron interakcija sparivanja jezgre otvorene ljuske: kombinacija kratko-dosežnog odbojnog Gaussiana sa slabijim daleko-dosežnim Gaussianom

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

- domet od dva Gaussiana su uzeta iz Gogny interakcija  $\mu_1 = 1.2 \text{ fm}$   
 $\mu_2 = 0.7 \text{ fm}$

- relativne snage  $g_1 = 1$   $g_2 = -2$   
(kako bi sila bila odbojna na malim udaljenostima )

- ukupna snaga

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

$V_D = 15.0 \text{ MeV}$        $V_L = 160.0 \text{ MeV}$        $a = 7.2$        $b = -0.3$

- najbolji mogući opis dostupnih podataka za vremena poluživota

# Vrijeme poluživota

- vrijednost vremena poluživota  $\beta$ -raspada  
(prijelaz između početnog i konačnog nuklearnog stanja)

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

- maksimalna energija e  $W_0 = \frac{(M_i - M_f)}{m_e}$   $K = 6144 \pm 2s$
- aproksimacija

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

- form faktor  $C(W)$  ograničen Gamow-Tellerovom vjerojatnosti prijelaza  $C(W)=B(GT)$  kod raspada  $\beta^-$

$$B(GT) = g_A^2 \frac{\left\langle f \left\| \sum_k \sigma^k t^k \right\| i \right\rangle^2}{(2J_i + 1)}$$

$$B(GT) = g_A^2 \frac{\left\langle f \left\| \sum_k \sigma^k t^k \right\| i \right\rangle^2}{(2J_i + 1)}$$

- matrični element je smanjen u skladu sa operatorom spina  $\sigma$  korišćeći samo Condon-Shortley faznu konvekciju
- suma ide preko svih nukleona
- izospinski operator spuštanja  $\longrightarrow t_- |n\rangle = |p\rangle$
- slaba aksijalan konstanta sparivanja  $\longrightarrow g_A = -1.2701$
- form faktor prvog zabranjenog prijelaza

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

- faktori su kompleksne kombinacije matričnih elemenata komponenti operatora spin-dipol prijelaza i relativističkih korekcija



# Rezultati

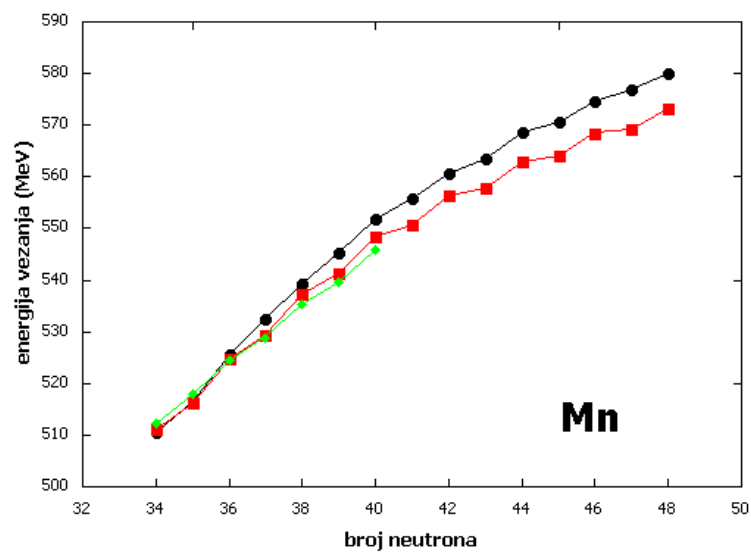
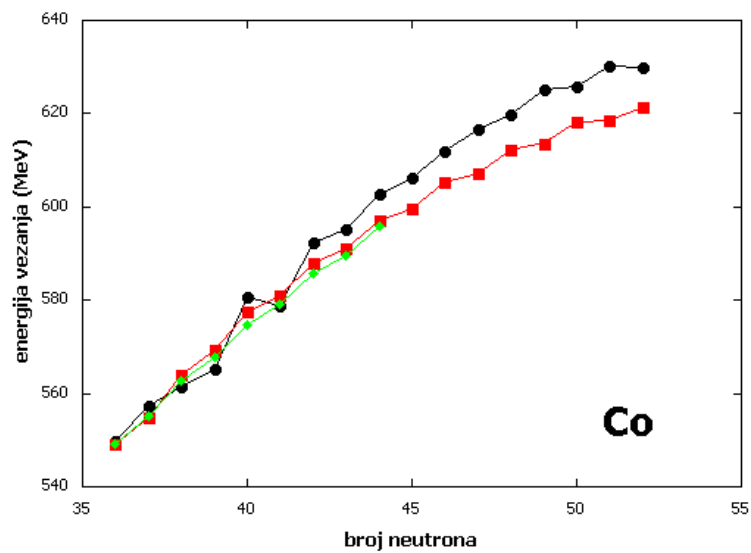
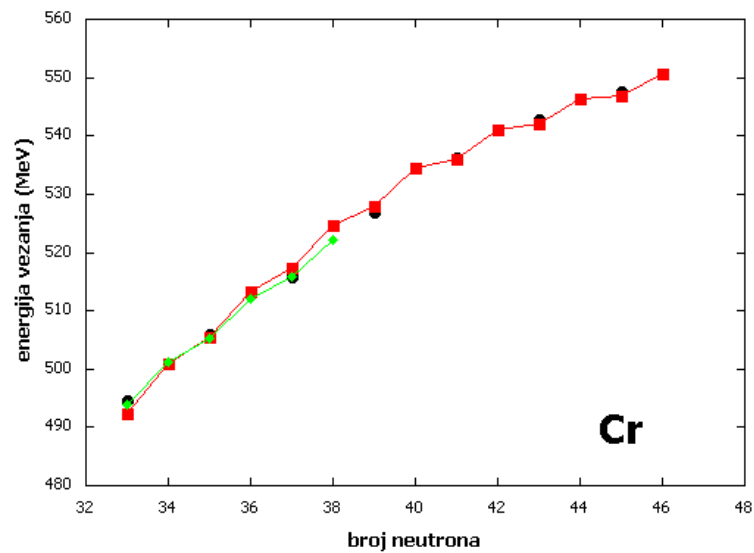
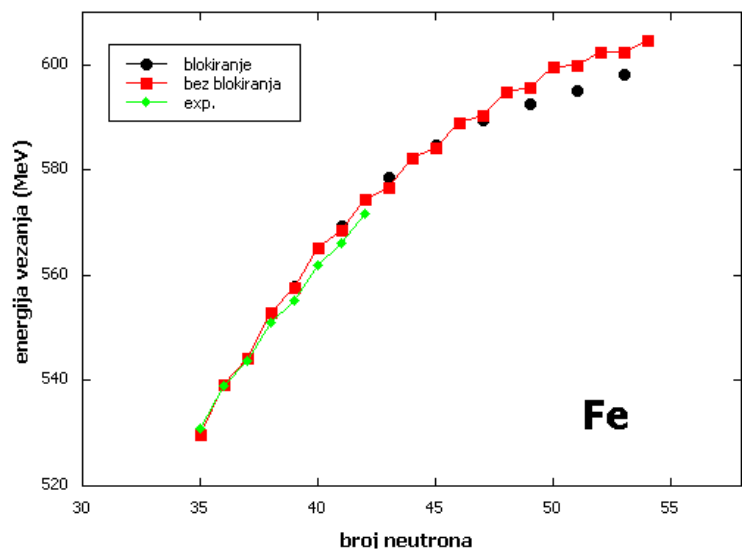
- energije vezanja i vremena poluživota za četiri izotropna lanca s obzirom na broj neutrona
- vrijednosti su izračunate za neparno-parne i neparno-neparne jezgre za dva slučaja (sa blokiranjem i bez)
- koristili smo jezgre  
željeza Fe (Z=26)  
kobalta Co (Z=27)  
kroma Cr (Z=24)  
mangana Mn (Z=25)

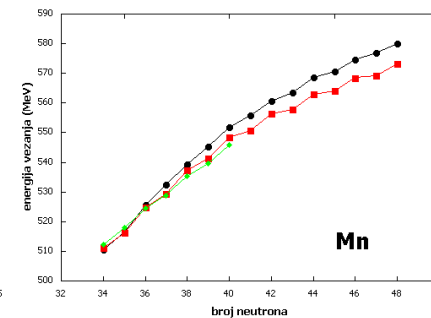
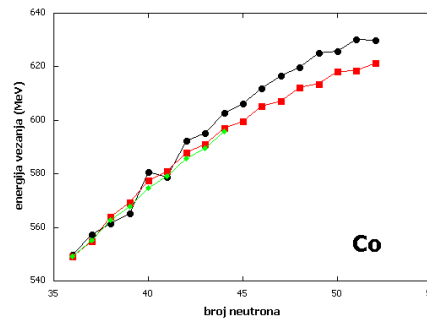
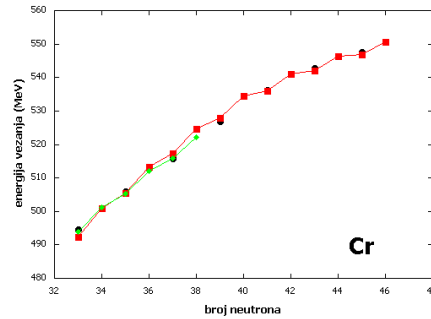
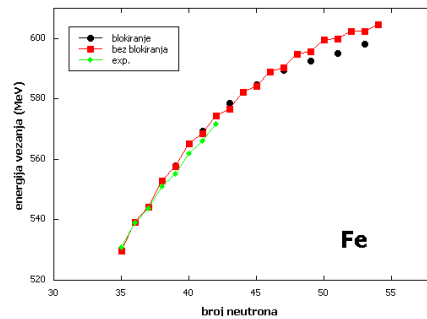
# Energije vezanja

- $E_B$  energija koju je potrebno uložiti da se svih  $Z$  protona i  $N$  neutrona izdvoji iz jezgre
- sve jezgre čiji je broj nukleona  $A > 30$  energija vezanja po nukleonu je konstantna

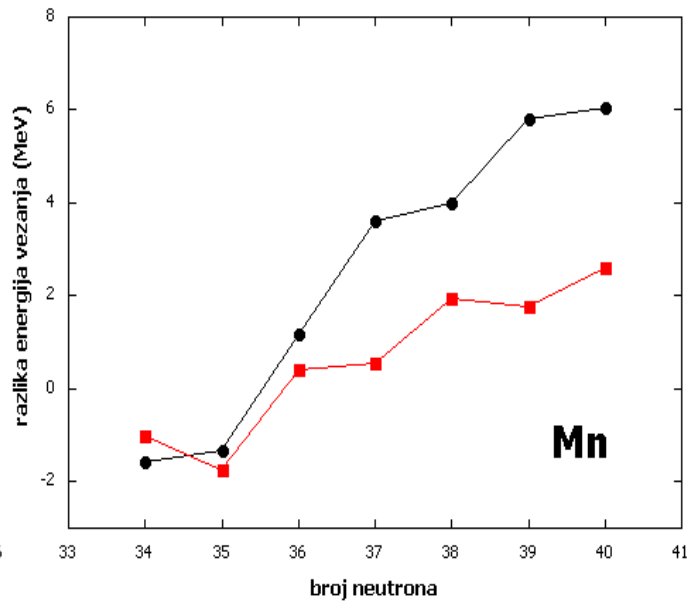
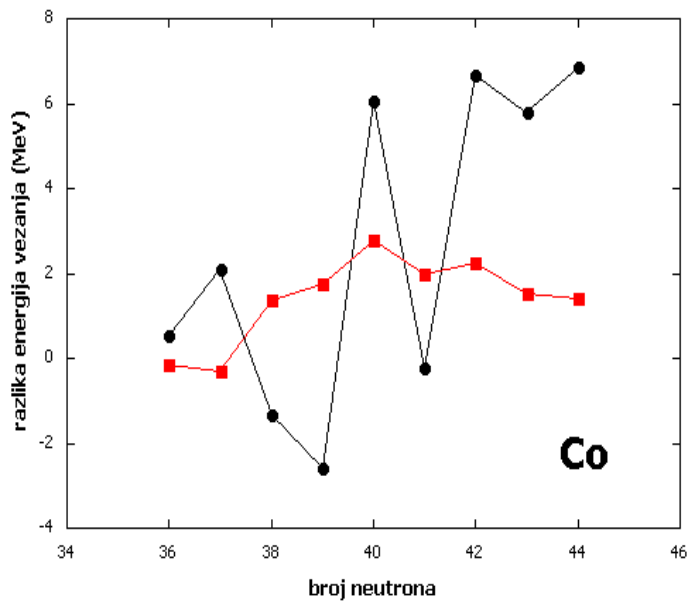
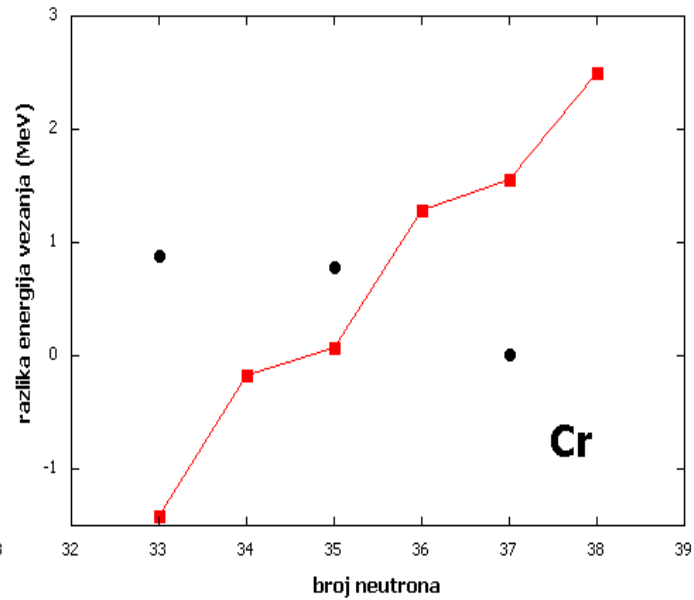
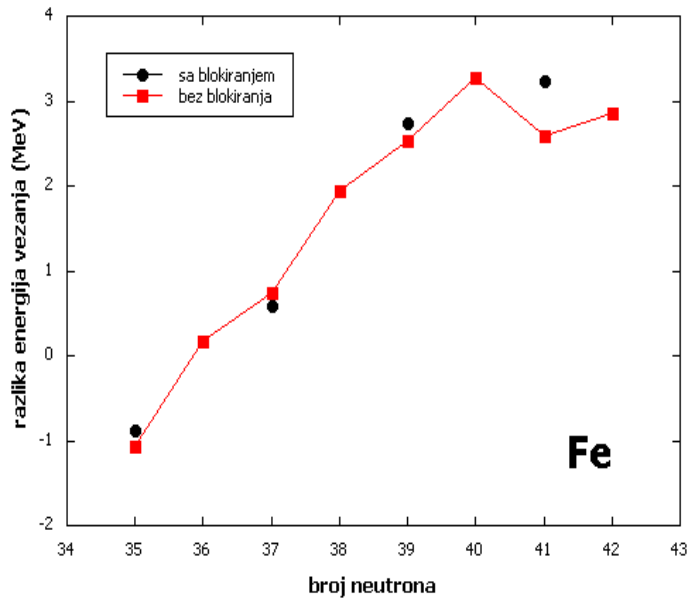
$$E_B/A \approx 8 - 8.5 \text{ MeV}$$

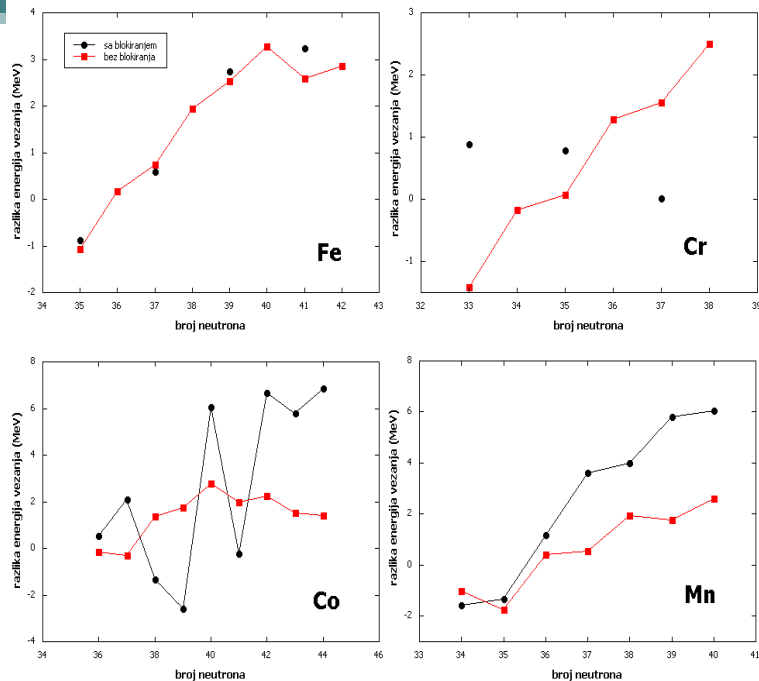
- neobično jer bi trebala rasti linerano sa brojem nukleona  $A$
- saturacija  $E_B / A \rightarrow$  svaki nukleon međudjeluje samo sa nekoliko najbližih susjeda (karakteristika interakcija kratkog dosega)
- slika: uspoređene su energije vezanja jezgara četiri izotopna lanca (dobivene sa i bez upotrebe metode blokiranja orbitala) sa eksperimentalnim podacima
- željezo ( $Z=26, A=61-80$ ), kobalt ( $Z=27, A=63-79$ ), krom ( $Z=24, A=57-70$ ) i mangan ( $Z=25, A=59-73$ )





- željezo i krom: poklapanje vrijednosti dobivenih metodom blokiranja i bez nje sa eksperimentalnim podacima
- bolje za manji broj nukleona (Fe  $A=61-63$ , Cr  $A=63-65$ )
- kobalt i mangan: grafovi prikazuju male razlike izračunatih vrijednosti za obje metode od eksperimentalnih
- ona bez blokiranja pokazuju ipak bolje slaganje
- bolje za manji broj nukleona (Co  $A=57-60$ , Mn  $A=59-62$ )
- zadnje dvije dobivene vrijednosti ovim metodama veće od onih iz eksperimenta





- razlika energija vezanja dobivena sa blokiranjem orbitala ili bez i energija dobivenih u eksperimentu
- veća razlika u slučaju blokiranja (izraženije za izotope kobalta i mangana, neparan broj protona)
- porastom broja neutrona povećavaju se i skokovi (razlike teorijskih vrijednosti od eksperimentalnih)
- kod željeza razlike su slične u oba slučaja, što za ostale elemente nije slučaj

- metoda blokiranja daje bolje rezultate za slučaj jezgri sa parnim brojem protona
- neparan broj protona: postoji manje odstupanje, ali i dalje dobro prate eksperimentalne vrijednosti
- svi modeli imaju tendenciju davati sve lošije rezultate kako se udaljavamo od doline stabilnosti
- izotop željeza: razlika se pojavljuje tek na  $N = 50$  -> moguć utjecaj zatvorene ljuske
- neparne jezgre: moguće zbog zanemarene interakcije između valentnih nukleona
- prosječna i standardna devijacija

$$\bar{r} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N r_i$$

$$r_i = \frac{r_{blok} - r_{exp}}{r_{exp}}$$

$$r_i = \frac{r_{bez} - r_{exp}}{r_{exp}}$$

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

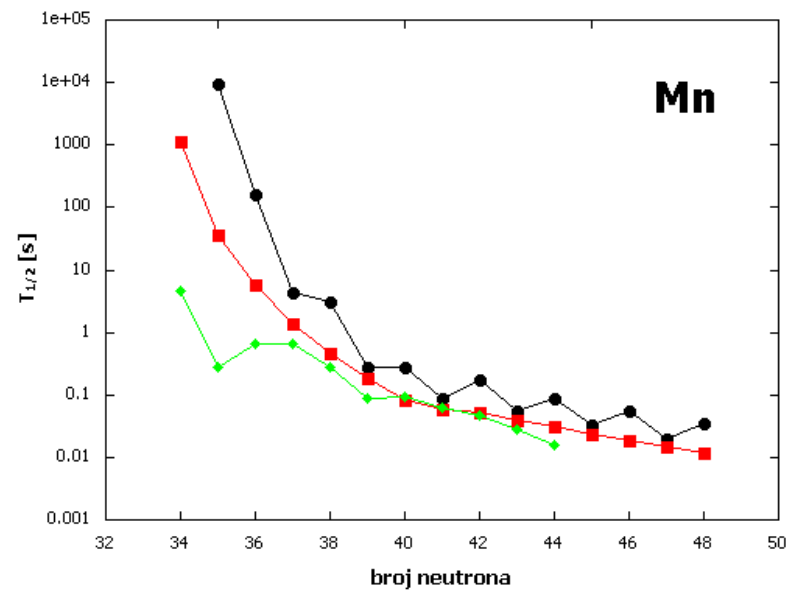
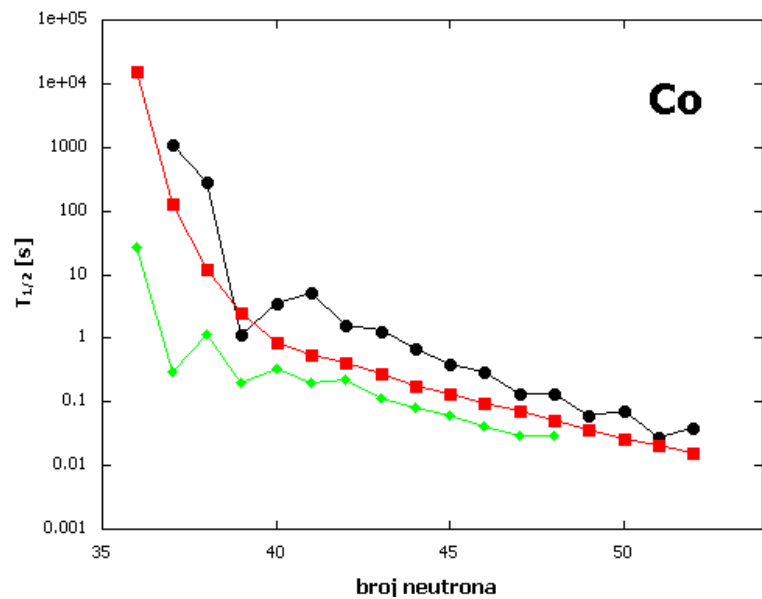
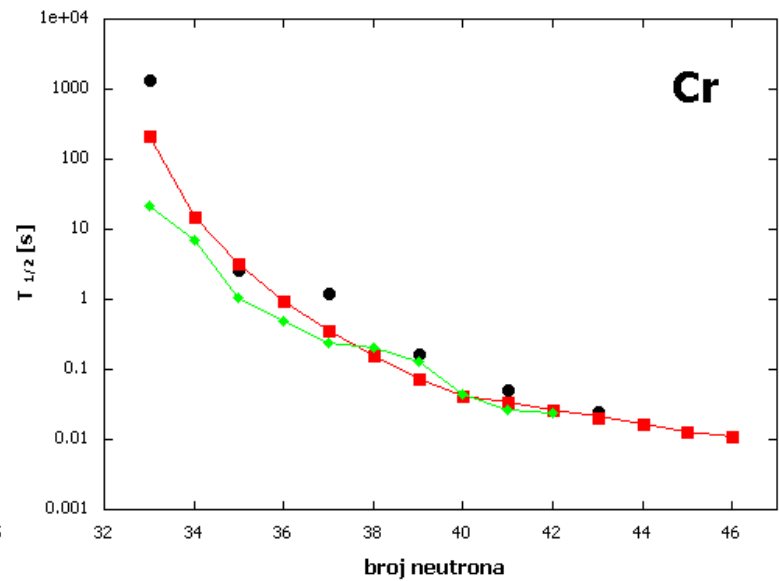
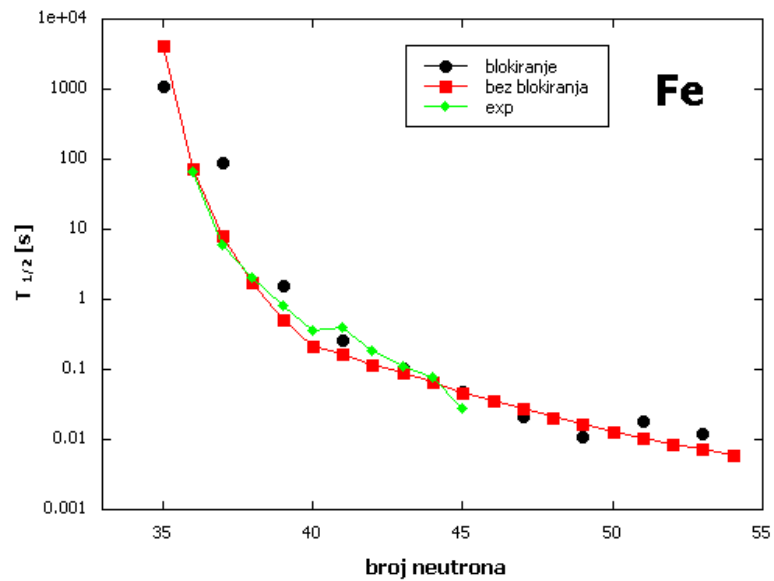
|           | <b>r (blok)</b> | <b>r (bez)</b> | <b><math>\sigma</math> (blok)</b> | <b><math>\sigma</math> (bez)</b> |
|-----------|-----------------|----------------|-----------------------------------|----------------------------------|
| Fe (Z=26) | 1.42            | 1.63           | 1.66                              | 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                             |

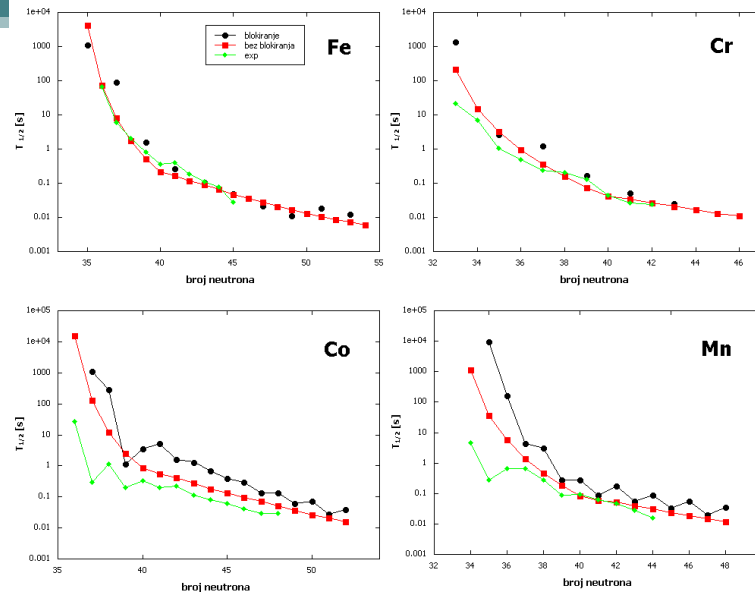
- željezo i krom (paran broj p): u prosjeku metoda blokiranja orbitala daje bolje rezultate od one bez
- paran proton i jedan neutron viška, metoda blokiranja radi sasvim dobro
- kobalt i mangan (neparan broj p): metoda blokiranja se raspada
- najvjerojatniji razlog: kod neparno-neparnih jezgri ne uzima se 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

- slika: usporedba vremena poluživota za četiri izotropna lanca (sa i bez upotrebe blokiranja) sa eksperimentalnim podacima
- željezo ( $Z=26$ ,  $A=61-80$ ), kobalt ( $Z=27$ ,  $A=63-79$ ), krom ( $Z=24$ ,  $A=57-70$ ) i mangan ( $Z=25$ ,  $A=59-73$ )





- željezo i krom: dobro slaganje dobivenih rezultata sa eksperimentalnim
- za veći broj neutrona poklapanje rezultata sa i bez blokiranja se povećava, a smanjuje ono sa eksperimentalnim
- kobalt i mangan: veće razlike među rezultatima
- najveće vrijednosti dobivene blokiranjem, a one eksperimentalne najmanje, model daje (sa blokiranjem i bez) više vrijednosti od stvarnih

|           | <b>r (blok)</b> | <b>r(bez)</b> | <b>σ (blok)</b> | <b>σ (bez)</b> |
|-----------|-----------------|---------------|-----------------|----------------|
| 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           |

- za jezgre sa parnim brojem protona prosječna devijacija za blokiranje je manja od one sa neparnim brojem protona, ali su te vrijednosti ipak veće od onih bez blokiranja
- kod računanja vremena poluživota bolja metoda je ona bez blokiranja orbitala
- najmanje standardne devijacije imaju željezo i krom, kao i prosječne devijacije

$$\bar{r} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N r_i \quad r_i = \log_{10} \frac{T_{1/2}^{\text{izrač.}}}{T_{1/2}^{\text{exp.}}} \quad \sigma = \left[ \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (r_i - \bar{r})^2 \right]^{1/2}$$

# Zaključak

- izračunate energije 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)
- 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  $Z$

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.

**Hvala na pažnji!**