На правах рукописи

АКТАЕВ Нуркен Ерболатович

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ КВАЗИСТАЦИОНАРНОЙ И РЕЛАКСАЦИОННОЙ СТАДИЙ ПРОЦЕССА ДЕЛЕНИЯ ВОЗБУЖДЁННОГО АТОМНОГО ЯДРА

01.04.16 – физика атомного ядра и элементарных частиц

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание учёной степени

кандидата физико-математических наук

Томск – 2011

Работа выполнена на кафедре «Физика и химия»
в ГОУ ВПО «Омский государственный университет путей сообщения»
(ОмГУПС (ОмИИТ))

Научный руководитель: доктор физико-математических наук,
профессор Игорь Иванович Гончар

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,
ведущий научный сотрудник
Вячеслав Владимирович Самарин

доктор физико-математических наук,
профессор Александр Иванович Фикс

Ведущая организация: Научно-исследовательский институт
ядерной физики имени Д.В. Скобельцына
Московского государственного университета
имени М.В. Ломоносова

Защита состоится 24 мая 2011 года в 15 00 часов на заседании совета по защите докторских и кандидатских диссертаций Д 212.269.05 при Национальном исследовательском Томском политехническом университете (634050, г. Томск, проспект Ленина 2а).

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Национального исследовательского Томского политехнического университета.

Автореферат разослан « » 2011 года

Учёный секретарь диссертационного совета
кандидат физико-математических наук,
доцент А.В. Кожевников

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы. Такие явления, как деление атомных ядер [1], диссоциация молекул [2], коллапс металлических нанопроволок [3], с теоретической точки зрения представляют собой распад возбуждённой системы, которая, первоначально находясь в квазистационарном (метастабильном) состоянии, преодолевает потенциальный барьер благодаря тепловым флуктуациям. По-видимому, работа [4], посвящённая изучению динамики движения броуновской частицы (БЧ) во внешнем поле, была одной из первых в этом направлении. Результаты, полученные в этой работе, до сих пор актуальны не только для упомянутых выше, но и для многих других естественнонаучных исследований. Неслучайно этот круг задач связывают с именем Х. Крамерса (формула Крамерса).

В ядерной физике модель броуновского движения и формулу Крамерса для скорости деления возбуждённых атомных ядер стали применять, начиная с работы В.М. Струтинского [5]. Многие вопросы здесь не решёны и до сих пор. Один из них, оживлённо обсуждаемый в литературе [6, 7], связан с тем обстоятельством, что скорость деления ядра принимает своё квазистационарное значение не сразу, а спустя некоторое время. Исходя из этого, процесс деления условно можно разделить на две стадии: релаксационную и квазистационарную.

Для учёта релаксационной стадии принято использовать динамический режим в рамках комбинированных динамическо-статистических моделей (КДСМ) [1, 8], суть которых заключается в том, что в начале процесс моделируется динамически с использованием стохастических уравнений Ланжевена в течение времени t_D, а затем, при выполнении определённых условий, моделирование переходит в статистическую ветвь. На этом этапе скорость деления вычисляется по формуле Крамерса. Необходимость такого перехода обусловлена огромными затратами компьютерного времени, которое требуются для динамического режима. Принимая во внимание, что в последнее время чрезвычайно возрос интерес к реакциям с малой, порядка 1%, вероятностью деления [7], возникла необходимость использования статистической модели Крамерса с временной задержкой деления (СМКЗ) [9]. Основная идея такой модели заключается в том, что скорость деления равна нулю в течение некоторого времени τ_S, после чего моделирование переходит в статистическую ветвь. Принято считать, что подавление скорости деления в СМКЗ соответствует динамическому режиму в КДСМ. Однако в работе [6] утверждается, что временная задержка деления в СМКЗ приводит к двойному учёту испущенных частиц при делении (предразрывных частиц). Аргументация авторов этой работы сводится к тому, что идентичны среднее время деления τ_a [1] и величина τ_K, равная обратной крамерсовой скорости деления (КСД). Насколько нам известно, на момент начала работы над диссертацией не существовало ни одной работы, где бы результаты, полученные с помощью статистической модели Крамерса без временной задержки деления (СМК), СМКЗ и КДСМ сравнивали бы «напрямую».

В основе этих трёх моделей лежит согласие квазистационарной (КССД, R_{Dqs}), полученной в результате динамического моделирования, и крамерсовой скоростей деления. В работах [1, 10, 11] было показано, что различие КССД и КСД может достигать 20%. Если в 90-х годах прошлого века такая точность являлась вполне приемлемой, то в настоящее время она должна быть улучшена. Необходимость повышения точности диктуется как минимум тремя обстоятельствами: 1) влиянием эффектов памяти (немарковости) на скорость деления (СД) [12], 2) введением квантовых поправок [13] при вычислении СД, 3) влиянием размерности модели на СД [14]. Все эти эффекты как раз порядка 10-30%, т.е. такого же масштаба, как и принимаемая до сих пор точность аналитических выражений для скорости деления.

Цель диссертационной работы – провести систематическое теоретическое исследование квазистационарной и релаксационной стадий процесса деления возбуждённого атомного ядра и установить влияние корректного описания этих стадий на адекватность моделирования деления с учётом испускания лёгких частиц. В связи с этим в работе поставлены следующие **задачи**:

1. получить более точные аналитические выражение (поправки к формулам Крамерса) для квазистационарной скорости деления, применяемые для моделирования процесса деления ядра и его конкуренции с испусканием частиц;

2. изучить влияние стадии установления квазистационарной скорости деления на механизм формирования наблюдаемых величин (НВ): вероятности деления, средних множественностей предразрывных нейтронов, протонов, альфа-частиц, дейтронов и гамма-квантов.

Научная новизна работы заключается в следующем:

1. получены поправки к классическим формулам Крамерса на ненулевые высшие производные (НВП) в экстремальных точках потенциальной энергии делящегося ядра. Эти поправки позволяют согласовать скорости деления, рассчитанные по формулам Крамерса, с квазистационарными скоростями, вычисленными в рамках динамического моделирования, с точностью 1 %;

2. вопреки теоретическим предсказаниям выявлено, что эти поправки применимы не только в режиме сверхзатухания, но и при достаточно малых значениях коэффициента затухания, сравнимых со значениями частот коллективного движения вблизи квазистационарного состояния и седловой точки потенциала делящегося ядра;

3. разработан и аналитически обоснован теоретический подход, учитывающий релаксационный характер процесса деления. Этот подход позволит проводить более эффективный и корректный анализ разнообразных экспериментальных данных, касающихся процесса деления ядер при высоких значениях энергии возбуждения;

4. впервые с помощью моделирования доказана необходимость учёта релаксационной стадии деления при высоких значениях энергии возбуждения делящегося ядра.

Научное и практическое значение результатов заключается в том, что полученные поправки к формуле Крамерса на НВП, которые улучшают точность формулы Крамерса, дают возможность проводить более адекватный и корректный анализ процесса деления ядра и формирования НВ, таких как: вероятность деления, средние множественности предразрывных нейтронов, протонов, альфа-частиц, дейтронов и гамма-квантов. Разработанный теоретический подход, основанный на учёте релаксационного характера процесса деления ядра, обеспечивает более адекватное моделирование процесса деления возбуждённого атомного ядра, сопровождаемого испусканием лёгких частиц, и позволяет получить реальные оценки среднего времени деления, сопоставимые с экспериментальными данными. Существенное научное значение результатов подтверждается наличием независимых ссылок на работу **I.I. Gontchar and N.E. Aktaev // Physical Review C (2009) 80, 044601** научными сотрудниками из Southeast University (Nanjing, People's Republic of China), Gesellschaft fuer Schwerionenforschung (Darmstadt, Germany), Grand Accélérateur Nationl d'Ions Lourds (Caen, France), Yale University (New Haven, USA), Université Bordeaux I, (Gradignan, France), Washington University (St. Louis USA).

Основные положения, выдвигаемые на защиту:

1. наличие ненулевых высших производных в экстремальных точках потенциала приводит к существенному рассогласованию аналитической крамерсовой и динамической квазистационарной скоростей деления возбуждённых атомных ядер;

2. поправки к классическим формулам Крамерса на НВП, позволяют согласовать крамерсову скорость деления с динамической квазистационарной скоростью, полученную путём численного моделирования, в пределах 1 %;

3. для адекватного описания процесса деления при больших значениях энергии возбуждения (> 60 МэВ) атомного ядра необходимо учитывать релаксационный характер поведения скорости деления;

4. статистическая модель Крамерса с временной задержкой деления не приводит к двойному учёту испускания предразрывных частиц. Более того, данные, полученные с использованием этой модели, лучше согласуются с результатами комбинированной динамическо-статистической модели.

Личный вклад соискателя. Все результаты диссертации получены лично автором. Автор принимал непосредственное участие на всех этапах научно-исследовательской работы по теме диссертации: в проведении расчётов, написании компьютерных программ, обработке, анализе и обсуждении полученных результатов, подготовке статей к публикации.

Апробация работы. Результаты диссертации докладывались на 5-ой Международной конференции «Перспективы развития фундаментальных наук» Томск (Россия), май 2008; on the 18th National Congress of Australian Institute of Physics «Physics for the Future» Adelaide (Australia), November – December 2008; на семинаре в лаборатории ядерной физики Австралийского национального университета, Канберра (Австралия), декабрь 2008; на 59-ой Международной конференции «Ядро 2009. Фундаментальные проблемы и прикладные аспекты ядерной физики: от космоса до нанотехнологий» Чебоксары, (Россия), июнь 2009; on the 3rd International Conference «Current problems in nuclear physics and atomic nuclei» Kyiv (Ukraine), June 2010; on the 60th International Conference on Nuclear Physics «Nucleus 2010. Methods of Nuclear Physics for Femto- and Nanotechnologies» St. Petersburg (Russia), July 2010; на семинарах кафедры «Физика и химия» ОмГУПСа, 2008 – 2010.

Публикации. По материалам диссертации опубликовано 11 работ, из них 4 – в изданиях, определённых ВАК Минобрнауки России.

Структура и объём диссертации. Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения, списков аббревиатур, используемых обозначений и литературы. Объём диссертации – 100 страниц, включая 27 рисунков и 1 таблицу. Список литературы содержит 119 наименований.

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обсуждается актуальность работы и мотивация проводимых исследований, даётся краткий обзор по теме диссертации.

В первой главе изложен подробный вывод формулы Крамерса для случая среднего трения и канонического ансамбля. Он был проведён с использованием уравнения Фоккера-Планка

$$\frac{\partial \rho(p,q,t)}{\partial t} = -\frac{p}{m}\frac{\partial \rho(p,q,t)}{\partial q} + \frac{\partial}{\partial p}\left[\rho(p,q,t)\left(\frac{\eta}{m}p - F(q)\right)\right] + D_p \frac{\partial^2 \rho(p,q,t)}{\partial p^2}, \qquad (1)$$

где ρ – плотность вероятности, p – обобщённый импульс БЧ, q – обобщённая координата БЧ, $D_p = \eta T$ – коэффициент диффузии в импульсном пространстве, η – фрикционный параметр, который связан с коэффициентом затухания β и инерционным параметром m соотношением $\eta = m\beta$, T – температура, $F(q) = -dV/dq$ – регулярная сила, V – потенциал, в котором БЧ совершает хаотическое движение. Этот потенциал характеризуется локальным минимумом (квазистационарное состояние, q_{qs}) и максимумом (седловая точка, q_{sd}). Последний (q_{sd}) определяет высоту барьера деления B_f. Если B_f намного превосходит энергию теплового движения, то мы решаем квазистационарную задачу. Тогда (1) перепишется, как

$$\frac{p}{m}\frac{\partial \rho(p,q)}{\partial q} = \frac{\partial}{\partial p}\left[\rho(p,q)\left(\frac{\eta}{m}p - F(q)\right)\right] + D_P \frac{\partial^2 \rho(p,q)}{\partial p^2}. \qquad (2)$$

В этом случае можно предположить, что выполняется квазиравновесное распределение

$$\rho(p,q) = \zeta(p,q)\cdot\Omega(p,q), \qquad (3)$$

где $\Omega(p,q)$ – распределение Максвелла-Больцмана, а $\zeta(p,q)$ – характеризует отклонение распределения от равновесного. Решение вида (3) уравнения (2) определяет число частиц N_{qs}, находящихся в квазистационарном состоянии

$$N_{qs} = \int_{-\infty}^{+\infty} dp \int_{-\infty}^{q_{sd}} dq \rho(p,q), \qquad (4)$$

и поток J БЧ через барьер

$$J = m^{-1}\int_{-\infty}^{+\infty} dp\, p\rho(p,q_{sd}), \qquad (5)$$

Выражения (4) и (5) позволяют найти скорость деления, которая согласно «flux over population method» определяется как

$$R_f = N_{qs}^{-1} \cdot J\,. \tag{6}$$

Таким образом, после нахождения величин J и N_{qs} получаем соотношение

$$R_K = \frac{\omega_{qs}}{2\pi\omega_{sd}}\left(\sqrt{\omega_{sd}^2 + \frac{\beta^2}{4}} - \frac{\beta}{2}\right)\exp\left(-\frac{B_f}{T}\right), \tag{7}$$

которое выражает собой формулу Крамерса для случая среднего трения, где $\omega_{qs(sd)} = \left[V_{qs(sd)}^{(II)} / m\right]^{1/2}$ – абсолютные значения «частот» вблизи q_{qs} и q_{sd} соответственно. Следует отметить, что выражение (7) справедливо для канонического ансамбля, который хорошо подходит для описания химических реакций. А делящемуся ядру больше соответствует микроканонический ансамбль. Тогда выражение (7) примет свой модифицированный вид (22) (см. ниже).

Помимо формулы (7) Х. Крамерсом были получены ещё два соотношения для скорости деления, которые справедливы в режиме сверхзатухания

$$R_I = D_q\left\{\int_{-\infty}^{q_{sd}} dy \exp\left[-T^{-1}V(y)\right]\int_{q_{qs}}^{q_{sc}} dx \exp\left[T^{-1}V(x)\right]\right\}^{-1}, \tag{8}$$

$$R_O = \frac{\omega_{qs}\omega_{sd}}{2\pi\beta}\exp\left(-\frac{B_f}{T}\right), \tag{9}$$

где $D_q = \eta^{-1}T$ – коэффициент диффузии в конфигурационном пространстве, q_{sc} – координата точки разрыва ядра. В текущей главе также обсуждаются границы применимости выражений (7), (8), (9).

Во второй главе представлена динамическая модель деления возбуждённых атомных ядер. В компьютерной программе, реализующей эту модель, предусмотрена возможность описания динамики деления полными уравнениями Ланжевена (ПУЛ)

$$d\begin{bmatrix} p \\ q \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -V^{(I)}(q) & -\beta \\ 0 & m^{-1} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} dt \\ pdt \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \sqrt{2D_p}dw_t \\ 0 \end{bmatrix}, \tag{10}$$

и редуцированным уравнением Ланжевена (РУЛ)

$$dq = -\eta^{-1}V^{(I)}dt + \sqrt{2D_q}dw_t\,, \tag{11}$$

где dw_t – независимый нормально распределённый стохастический дифференциал с нулевым математическим ожиданием и дисперсией dt.

Одной из основных количественных характеристик делительного процесса является скорость деления. С точки зрения ланжевеновского формализма её можно выразить соотношением

$$R_{fD}(t) = \left[N_{tot} - N_{fD}(t)\right]^{-1} \frac{dN_{fD}(t)}{dt}, \tag{12}$$

где N_{tot} – полное число траекторий, участвующих в моделировании, $N_{fD}(t)$ – число траекторий, достигших точки разрыва к моменту времени t. Типичная зависимость скорости деления, которая получается в результате динамического моделирования, представлена на рисунке 1.

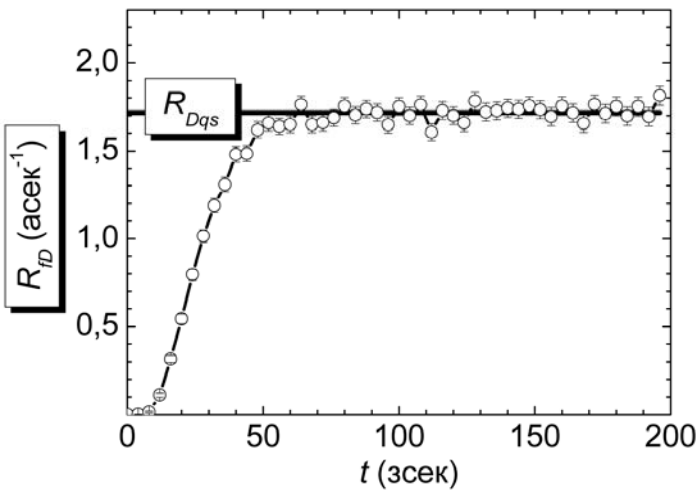

Рисунок 1. Временная зависимость скорости деления $R_{fD}(t)$ (тонкая линия с открытыми круглыми символами). Динамическая квазистационарная скорость деления R_{Dqs} показана толстой линией. Моделирование выполнено с использованием РУЛ, P5P (см. ниже), $B_f = 6$ МэВ, $q_{qs} = 0.375$, $q_{sd} = 0.9$, $q_{sc} = 1.2$, $m = 100$ МэВ·зсек^2, $T = 3$ МэВ, $\beta = 15$ зсек$^{-1}$, $N_{tot} = 2 \cdot 10^5$, $\tau = 0.5$ зсек.

Из рисунка видно, что динамическая скорость деления принимает свое квазистационарное значение R_{Dqs} не сразу, а спустя некоторое время релаксации. Количественно релаксационную стадию будем характеризовать τ_r, определяемым как время, за которое $R_{fD}(t)$ достигает половины своего квазистационарного значения: $R_{fD}(\tau_r) = R_{Dqs}/2$.

Адекватность построенной модели оценивается двумя способами. Первый способ заключается в сравнении результатов численного решения (ЧР) ПУЛ для гармонического осциллятора с их аналитическим решением (АР), представленным в [15]. Результат сравнения приведён на рисунке 2. АР изображено сплошными линиями, а результаты ЧР – круглыми символами. Из рисунка видно, что в пределах статистических погрешностей АР и ЧР неплохо согласуются. Это согласие является аргументом в пользу адекватности построенной динамической модели. Второй способ оценивания заключается в сравнении с результатами работы [16], где приводятся численные значения скоростей деления при использовании бистабильного потенциала Бринкмана.

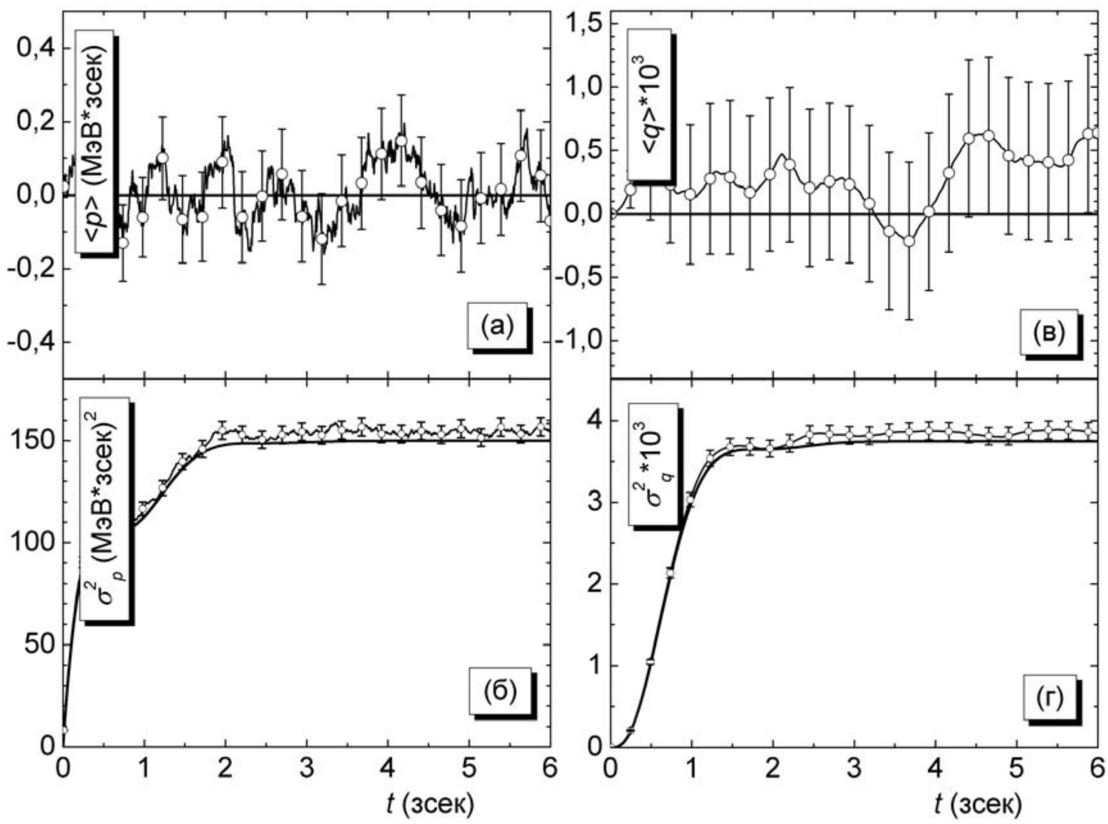

Рисунок 2. Анализ адекватности модели. (а) Среднее значение импульса $\langle p \rangle$, (б) его дисперсия σ_p^2. (в) Среднее значение координаты $\langle q \rangle$, (г) её дисперсия σ_q^2. Расчеты выполнены при, $N_{tot} = 10^4$, $\tau = 7$ зсек, $m = 100$ МэВ$\cdot$зсек^2, $\omega_{HO} = \beta = 1.5$ зсек$^{-1}$, $T = 1.5$ МэВ

В третьей главе проведено систематическое исследование согласия КССД и КСД для различных потенциалов: осцилляторный (P2P), тригонометрический (LCLP), полиномиальный (P5P, 5 порядок), бистабильный (BP). Эти потенциалы представлены на рисунке 3; панели (а – г) соответственно. Для количественной оценки согласия использована относительная разница $\xi_{Kr} = R_{Kr} R_{Dqs}^{-1} - 1$. В качестве R_{Kr} в диссертации использовались R_K, R_I, R_O и т.д. Соответствующие четырём потенциалам относительные разницы представлены на панелях (а1 – г1).

Отметим, что относительная разница $|\xi_I| \le 2\%$ при $T^{-1}B_f \ge 4$ для всех четырёх потенциалов. Для P2P на всём исследуемом диапазоне $T^{-1}B_f$ $|\xi_O| \le 2\%$. Однако, для LCLP, P5P и BP $\xi_O > 5\%$ даже при $T^{-1}B_f \ge 4$. Такое существенное различие R_O и R_{Dqs} мы связываем с наличием ненулевых высших производных в экстремальных точках потенциалов. Для осцилляторного потенциала НВП, разумеется, равны нулю.

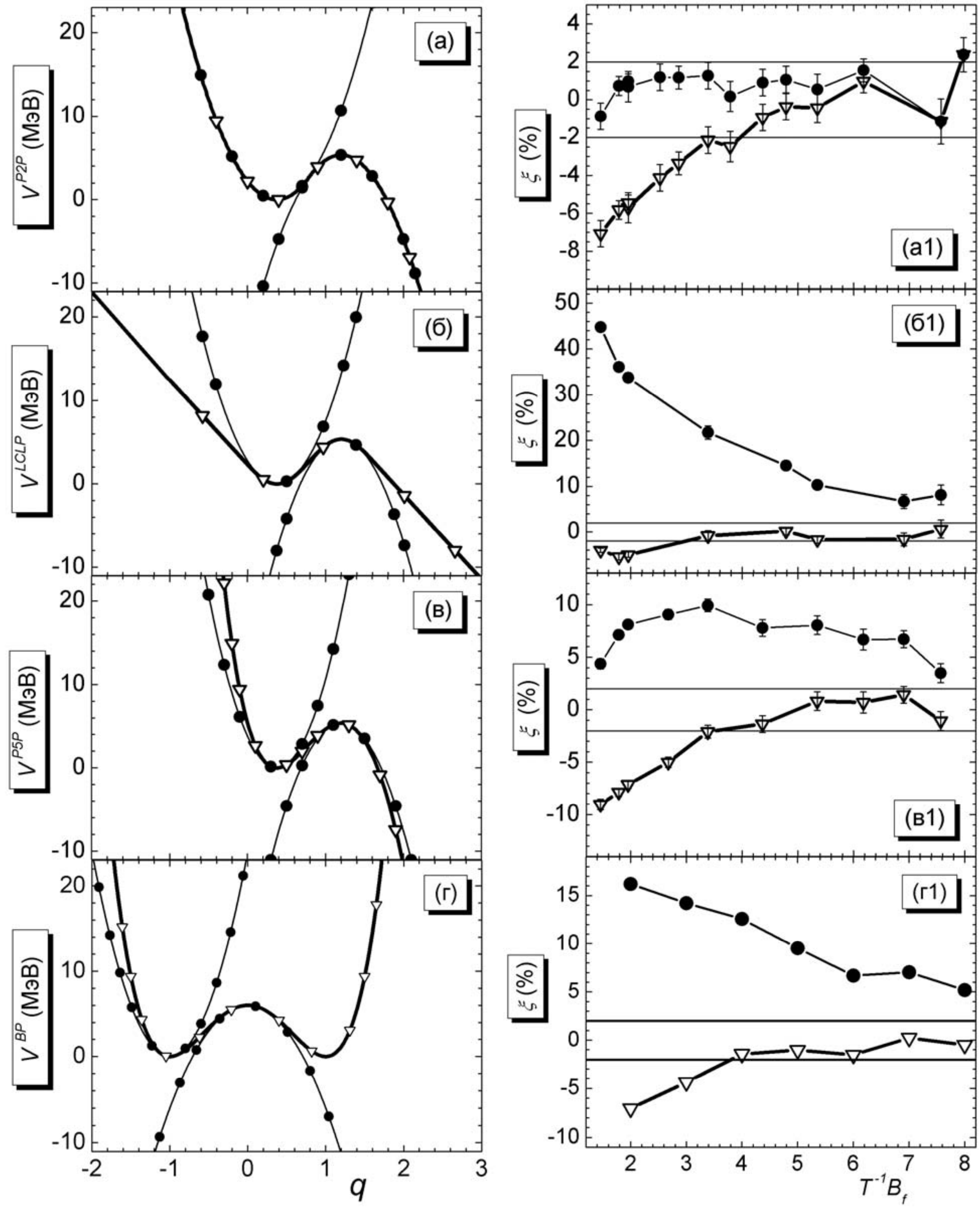

Рисунок 3. Панели (а – г): деформационные зависимости (а) – P2P, (б) – LCLP, (в) – P5P и (г) – BP (толстые линии с открытыми треугольниками) и парабол, аппроксимирующие эти потенциалы вблизи экстремальных точек (тонкие линии с закрытыми круглыми символами). Панели (а1 – г1): соответствующие этим потенциалам относительные разницы $\xi_I = R_I R_{Dqs}^{-1} - 1$ (толстые линии с открытыми треугольниками) и $\xi_O = R_O R_{Dqs}^{-1} - 1$ (тонкие линии с закрытыми круглыми символами). На панели (г1) погрешности не превосходят размеров символов.

Таким образом, исходя из рисунка 3 и анализа, проведённого в текущей главе, сделан вывод, что возможной причиной существенного рассогласования крамерсовой (R_O) и квазистационарной скоростей деления являются НВП.

В четвёртой главе получены поправки (ПР) на НВП к формулам Крамерса (9) и (7). Эти поправки были выведены из выражения (8) при разложении показателей экспонент в ряд Тейлора до второго, четвёртого и шестого порядков малостей по $q-q_{qs(sd)}$. Соответствующие этим разложениям ПР имеют нулевой, первый и второй порядки малости по отношению к $\gamma_{qs(sd)}=T\left|V_{qs(sd)}^{(II)}\right|^{-1}$. Поправки каждого порядка малости имеет 4 разновидности, которые заключаются в количестве учитываемых пределов интегрирования в (8). Так, выражение (9) нулевого порядка малости (слово «поправка» опущено) с тремя учтёнными пределами интегрирования имеет вид

$$R_O^{(0,3)}=4\left[\left\{1+\Phi\left(\gamma_{qs}^{-1/2}\,\bar{\bar{q}}\right)\right\}\times\left\{\Phi\left(\gamma_{sd}^{-1/2}\,\bar{q}\right)+\Phi\left(\gamma_{sd}^{-1/2}\,\bar{\bar{q}}\right)\right\}\right]^{-1}\times R_O, \tag{13}$$

где $\Phi(x)=2(2\pi)^{-1/2}\int_0^x\exp\left(-s^2/2\right)ds$ – интеграл вероятности Лапласа, $\bar{q}=q_{sc}-q_{sd}$, $\bar{\bar{q}}=q_{sd}-q_{qs}$.

Поправки первого порядка, в отличие от нулевого, содержат в себе высшие производные (третью и четвертую) в экстремальных точках потенциала. При всех бесконечных пределах интегрирования получаем

$$R_O^{(1,0)}=\left[1+\gamma_{qs}\left\{\frac{1}{8}\frac{V_{qs}^{(IV)}}{V_{qs}^{(II)}}-\frac{5}{24}\left(\frac{V_{qs}^{(III)}}{V_{qs}^{(II)}}\right)^2\right\}+\gamma_{sd}\left\{\frac{1}{8}\frac{V_{sd}^{(IV)}}{V_{sd}^{(II)}}-\frac{5}{24}\left(\frac{V_{sd}^{(III)}}{V_{sd}^{(II)}}\right)^2\right\}\right]\times R_O. \tag{14}$$

Учёт только одного предела интегрирования, который соответствует точке разрыва q_{sc}, даст выражение

$$R_O^{(1,1)}=\left[I_L^{(1,2)}I_R^{(1,1)}\right]^{-1}\times R_O. \tag{15}$$

Здесь $I_R^{(1,1)}=\sum_{i=1}^{4}{}^{i}G_R^{(1,1)}$, а слагаемые

$${}^{1}G_R^{(1,1)}=\frac{1}{2}\left\{1+\Phi\left(\gamma_{sd}^{-1/2}\,\bar{q}\right)\right\},\qquad {}^{2}G_R^{(1,1)}=-\frac{1}{12}\frac{V_{sd}^{(III)}\tilde{\gamma}_{sd}}{\pi T}\alpha_{sc}e_{sc},$$

$${}^{3}G_R^{(1,1)}=-\frac{1}{48}\frac{V_{sd}^{(IV)}\tilde{\gamma}_{sd}}{\pi T}\left[\alpha_{sc}^{+}e_{sc}-3\gamma_{sd}\tilde{\gamma}_{sd}\,{}^{1}G_R^{(1,1)}\right],$$

$$^4G_R^{(1,1)} = -\frac{1}{144}\frac{\left(V_{sd}^{(III)}\right)^2 \tilde{\gamma}_{sd}}{\pi T^2}\left[e_{sc}\bar{q}^5 + 5\gamma_{sd}\alpha_{sc}^+ e_{sc} - 15\gamma_{sd}^2\tilde{\gamma}_{sd}\cdot {}^1G_R^{(1,1)}\right],$$

где $\tilde{\gamma}_{qs(sd)} = \sqrt{2\pi\gamma_{qs(sd)}}$, $\alpha_{qs} = \bar{\bar{q}}^2 + 2\gamma_{qs}$, $\alpha_{sc}^+ = \bar{q}^3 + 3\bar{q}\gamma_{sd}$, $e_{sc} = \exp\left(-\gamma_{sd}^{-1}\,\bar{q}^2/2\right)$. Остальные ПР, в том числе и второго порядка, подробно приведены в диссертации. Сравнение модифицированных крамерсовых выражений (с поправками) с КССД приведены на рисунке 4 (а – в). Из рисунка видно, что учёт следующего порядка малости по $\gamma_{qs(sd)}$ приводит к улучшению согласия КСД и КССД.

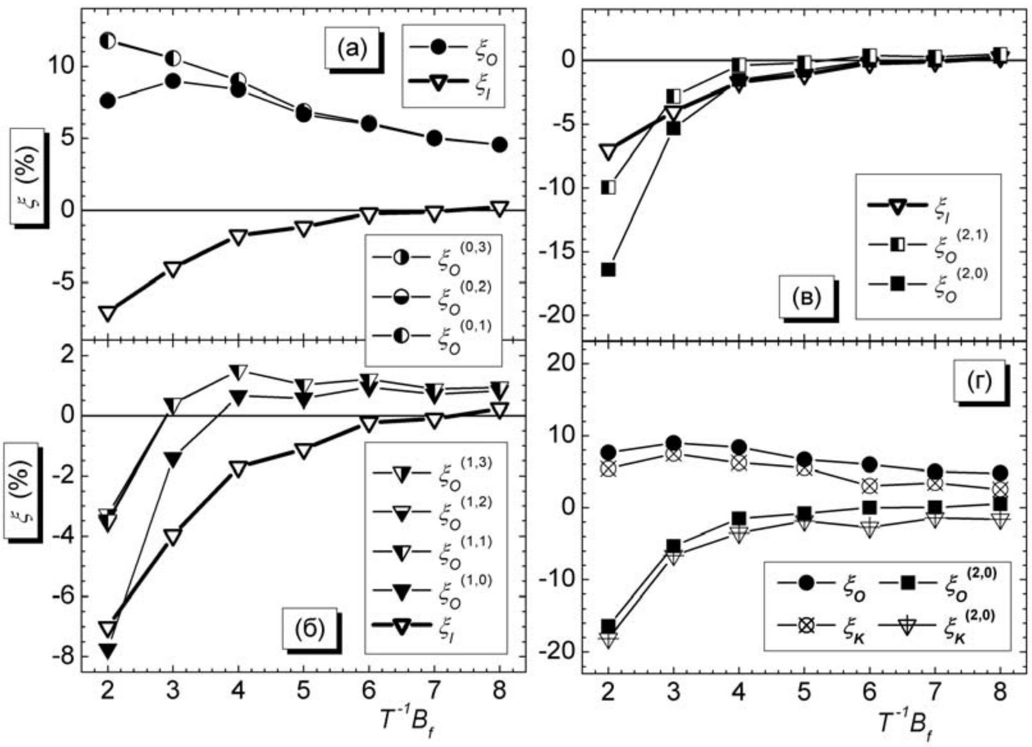

Рисунок 4. Панель (а, б, в) – относительные разницы ξ_{Kr} с поправками нулевого, первого и второго порядков малостей по $\gamma_{qs(sd)}$ соответственно. Панель (г) сравнение результатов, полученных в разных режимах: сверхзатухание – $\beta = 15$ зсек$^{-1}$ (закрытые символы), режим среднего трения – $\beta = 2.5$ зсек$^{-1}$ (зачёркнутые символы). Статистические погрешности для всех зависимостей не превосходят размеров символов.

Наши поправки к формуле Крамерса (R_O) выведены из соотношения (8), которое справедливо для режима сверхзатухания. Следовательно, есть основания полагать, что они применимы только в этом режиме. Мы попытались разобраться в границах применимости этих поправок относительно коэффициента затухания. Для этого мы провели динамическое моделирование, используя полные уравнения Ланжевена (10). Значения параметров моделирования выбирались такими же, как и в предыдущих расчётах, за исключением коэффициента затухания ($\beta = 2.5$ зсек$^{-1}$). Результаты, полученные при таком значении β, представлены на рисунке 4 (г) зачёркнутыми символами. Соответствующие крамерсовы скорости получены при помощи замены R_O на R_K в выражениях с поправками. Из рисунка видно, что различие результатов двух режимов не более 1 %. Таким образом, можно утверждать, что выведенные нами поправки применимы даже в случае среднего трения ($\beta \approx \omega_{sd}$).

В пятой главе проведено исследование влияния учёта релаксационной стадии на адекватность моделирования деления возбуждённых ядер. Это исследование проводилось в два этапа. На первом этапе необходимость временной задержки деления при моделировании была показана аналитически. При этом получена связь между величинами: среднем временем деления τ_a, инверсной КССД R_{Dqs}^{-1} и её временем релаксации τ_r. Второй этап посвящён сравнению результатов моделирования в рамках статистической модели Крамерса с временной задержкой деления с результатами статистической модели Крамерса и комбинированной динамическо-статистической модели. Получение связи между τ_a, R_{Dqs}^{-1} и τ_r основывалось на определении среднего времени деления

$$\tau_a = \int_0^\infty t \cdot \left[-d\Pi_{nf}\left(t\right) \right], \tag{16}$$

где $d\Pi_{nf} = -R_f\left(t\right)\Pi_{nf}dt$ – малая вероятность того, что ядро выживет к моменту времени t. Аппроксимируя временную зависимость $R_{fD}\left(t\right)$ пятью различными способами, мы получили пять различных соотношений между τ_a, R_{Dqs}^{-1} и τ_r. С помощью графического анализа было показано, что оптимальным соотношением между этими величинами является

$$\tau_a = R_{Dqs}^{-1} + \tau_r . \tag{17}$$

Для проверки справедливости выражения (17) было проведено сравнение результатов, полученных по (17), с результатами динамического моделирования. Для моделирования динамики движения БЧ использовались ПУЛ для микроканонического ансамбля

$$\frac{d}{dt}\begin{bmatrix} p \\ q \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} T \cdot S^{(I)}\left(q\right) & -\beta \\ 0 & m^{-1} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} 1 \\ p \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \psi_{pS}\left(t\right) \\ 0 \end{bmatrix}, \tag{18}$$

где случайная сила $\psi_{pS}\left(t\right)$ имеет свойства

$$\langle \psi_{pS}(t) \rangle = 0$$
$$\langle \psi_{pS}(t)\psi_{pS}(t') \rangle = 2D_{pS}(q)\delta(t-t') . \qquad (19 \text{ а, б})$$

Здесь $D_{pS}(q,A,Z) = \eta\left[a^{-1}\left\{E^*_{tot} - V(q,A,Z)\right\}\right]^{1/2}$ – коэффициент диффузии в импульсном пространстве, $a = 0.1A$ МэВ$^{-1}$ параметр плотности одночастичных уровней энергии ядра, E^*_{tot} – его полная энергия возбуждения, A – массовое число, Z – зарядовое число. Энтропия S вычислялась с использованием соотношения Ферми-газа

$$S\left(q, E^*_{tot}, A, Z\right) = 2\sqrt{a\left[E^*_{tot} - V(q,A,Z)\right]} . \qquad (20)$$

Моделирование длилось в течение времени t_D либо до момента деления t_f. В этом случае среднее время деления τ_a вычислялось как

$$\tau_a = N^{-1}_{tot}\left[\sum_{i=1}^{N_{fD}} t_{fi} + \left(N_{tot} - N_{fD}\right)\left(t_D + R^{-1}_{Dqs}\right)\right]. \qquad (21)$$

При этом мы проверили, что τ_a перестаёт изменяться с увеличением t_D при $t_D >> \tau_r$. Параметры моделирования (см. таблицу) выбраны такими, чтобы покрыть широкий диапазон значений R^{-1}_{Dqs} и τ_r.

Таблица. Наборы параметров, используемые для моделирования с потенциалами: P5P, полиномиальный потенциал третьего порядка (P3P), P2P, жидкокапельный потенциал (МЖК).

Набор	Ядро	Потенциал	β (зсек$^{-1}$)	E^*_{tot} (МэВ)
1 набор	^{226}Ra	P5P	4	752; 654; 359; 163; 94; 64
2 набор	^{220}Th	P5P	4	667; 284; 59; 39; 29
3 набор	^{220}Th	P5P; P3P	2	186; 70
4 набор	^{220}Th	P5P	6	186
5 набор	^{220}Th	P2P	1	100
6 набор	^{220}Th	P2P	20	186
7 набор	^{220}Bi	P5P	4	62
8 набор	^{220}Bi	МЖК	1; 2; 4	91

Сравнение результатов моделирования с теоретическим предсказанием (17) представлено на рисунке 5, где относительная разница $\varepsilon_\tau = \left(\tau_a - R^{-1}_{Dqs}\right)\tau_r^{-1}$ показана для восьми различных наборов параметров, и видно, что $\tau_a \neq R_{Dqs}$:

значения времён τ_a и R_{Dqs}^{-1} для всех результатов моделирования отличаются на $(0.5-1.5)\tau_r$. Это отличие даёт право предполагать, что временная задержка деления τ_S в СМК не приводит к двойному учёту частиц, испущенных делящимся ядром, а наоборот, способствует лучшему согласию с результатами КДСМ.

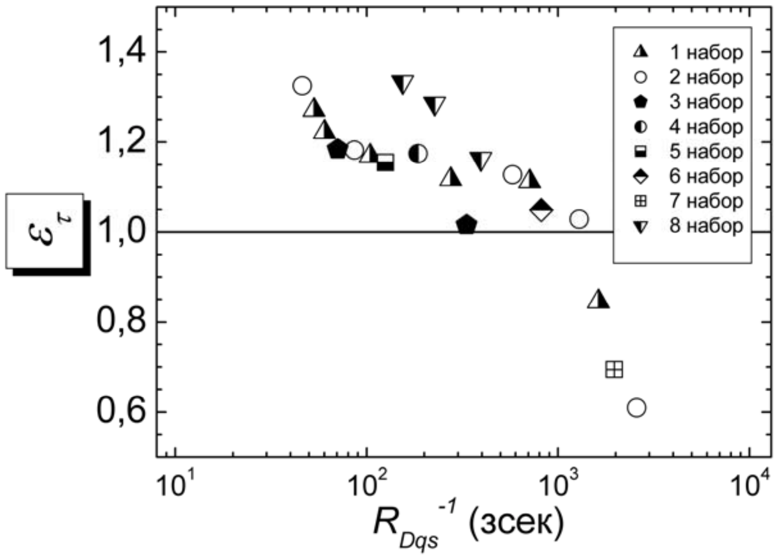

Рисунок 5. Относительная разница ε_τ в зависимости от R_{Dqs}^{-1}. Результаты динамического моделирования (символы) сравниваются с теоретическим предсказанием (17) (сплошная линия).

Полученная связь $\tau_a = R_{Dqs}^{-1} + \tau_r$ указывает на необходимость учёта временной задержки, т.е. использования СМКЗ. КССД и временная задержка деления в СМКЗ вычислялись по формулам

$$R_{KS} = \left(\sqrt{\omega_{Ssd}^2 + \frac{\beta^2}{4}} - \frac{\beta}{2}\right)\frac{\omega_{Sqs}}{2\pi\omega_{Ssd}}\exp\left(S_{sd} - S_{qs}\right), \tag{22}$$

$$\tau_S = \beta\omega_{Ssd}^{-2}\ln\left(S_{qs} - S_{sd}\right), \tag{23}$$

где абсолютные значения «частот» $\omega_{Sqs(sd)} = \sqrt{T_{qs(sd)}S_{qs(sd)}^{(II)}m^{-1}}$.

Результаты моделирования в рамках трёх моделей представлены на рисунке 6. Символами показаны зависимости значений наблюдаемых величин от времени t_D, в течение которого осуществлялось динамическое моделирование. Горизонтальные линии соответствуют результатам, полученным с помощью СМК (пунктирная линия) и СМКЗ (сплошная линия). Из этих рисунков видно, что СМК и СМКЗ приводят к заметно различающимся значениям для всех НВ. При малых значениях t_D значения, полученные при использовании СМК и КДСМ, совпадают в пределах статистических погрешностей. При увеличении t_D значения НВ в КДСМ, отклоняются от СМК и приближаются к значениям, рассчитанным в рамках СМКЗ. Следовательно, можно утверждать, что временная задержка деления способствует уменьшению различия с результатами КДСМ. Таким образом, важность динамического моделирования именно на стадии релаксации скорости деления очевидна.

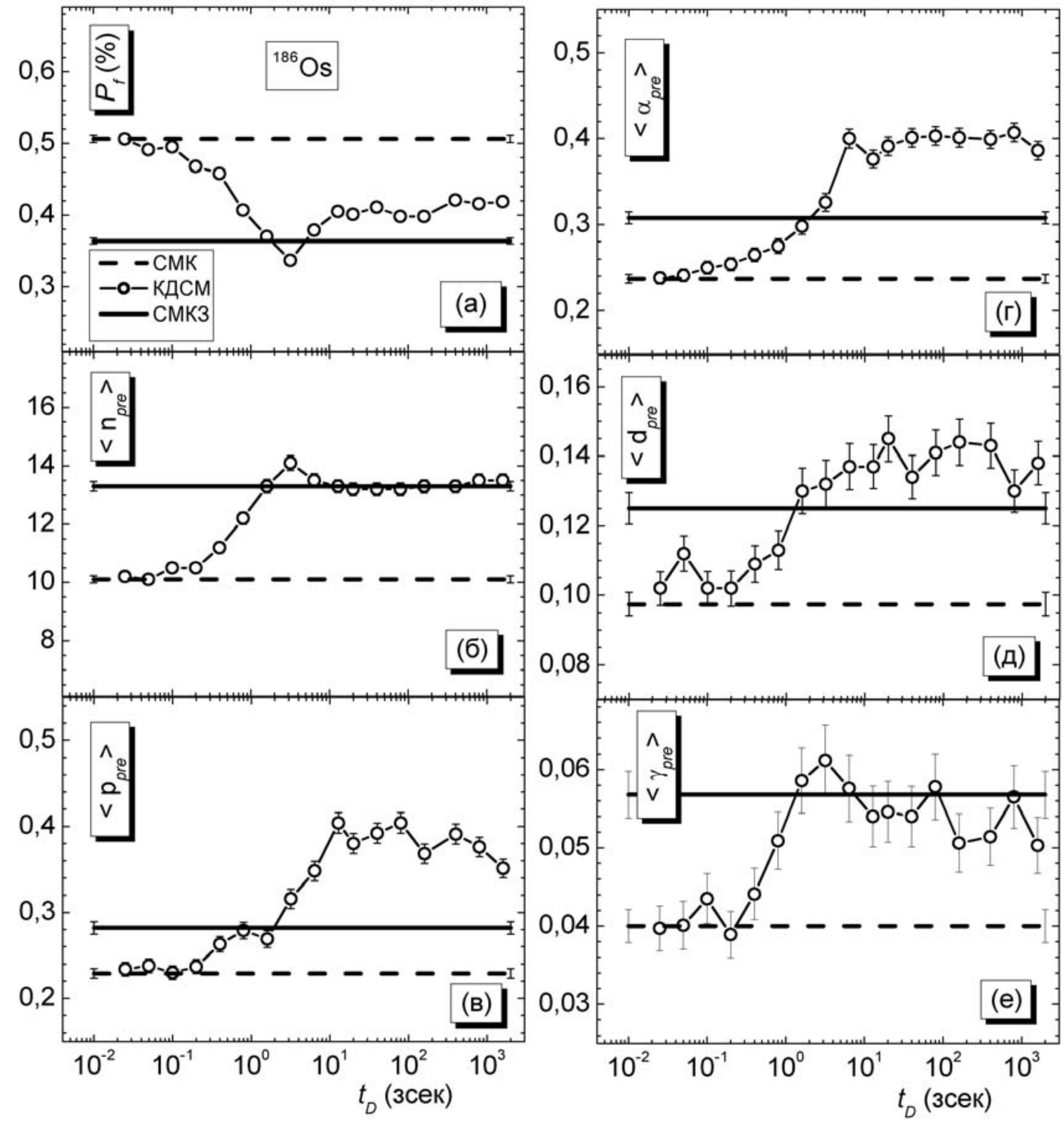

Рисунок 6. Зависимости (а) – вероятности деления P_f и средних множественностей предразрывных частиц: (б) – нейтронов $\langle n_{pre} \rangle$, (в) – протонов $\langle p_{pre} \rangle$, (г) – альфа-частиц $\langle \alpha_{pre} \rangle$, (д) – дейтронов $\langle d_{pre} \rangle$, (е) – гамма-квантов $\langle \gamma_{pre} \rangle$ от времени динамического моделирования t_D. Расчёты выполнены для ядра ^{186}Os при $E^*_{tot} = 289$ МэВ, $\beta = 4$ зсек$^{-1}$, $\tau = 0.05$ зсек. На панелях (а, б) погрешности не превышают размеров символов.

Однако статистически значимое различие между значениями НВ, к которым приводят СМКЗ и КДСМ, сохраняется. Это обстоятельство на качественном уровне можно объяснить следующим образом. Ядро, прежде чем поделиться, испускает большое количество легких частиц. При этом меняется высота барьера деления и энергия возбуждения. Учитывая, что основной конкурирующей с делением модой является испускание нейтронов, высота барьера деления уменьшается «быстрее», чем энергия возбуждения. Это приводит к тому, что $\exp\left(S_{sd} - S_{qs}\right)$ перестаёт быть малым параметром, а значит формула Крамерса (22) становится неприменимой.

На рисунке 6 показана ещё одна интересная особенность: все наблюдаемые величины выходят на плато при $t_D > 10$ зсек. Это «насыщение» является основной идеей КДСМ, однако оно было продемонстрировано лишь в работе [17], да и то в очень ограниченном варианте (только для $\langle \mathrm{n}_{pre} \rangle$). Более того, точность расчётов в 90-е годы не позволяла установить влияние учёта релаксационной стадии на адекватность моделирования процесса деления.

Стоит отметить, что условием выхода на плато является согласие R_{Dqs} со значением R_{KS} после переключения в статистическую ветвь. Чтобы продемонстрировать значимость этого согласия, на рисунке 7 на панелях (а) и (б) показаны по три вероятности деления для ядер $^{190}\mathrm{Pt}$ и $^{186}\mathrm{Os}$ соответственно.

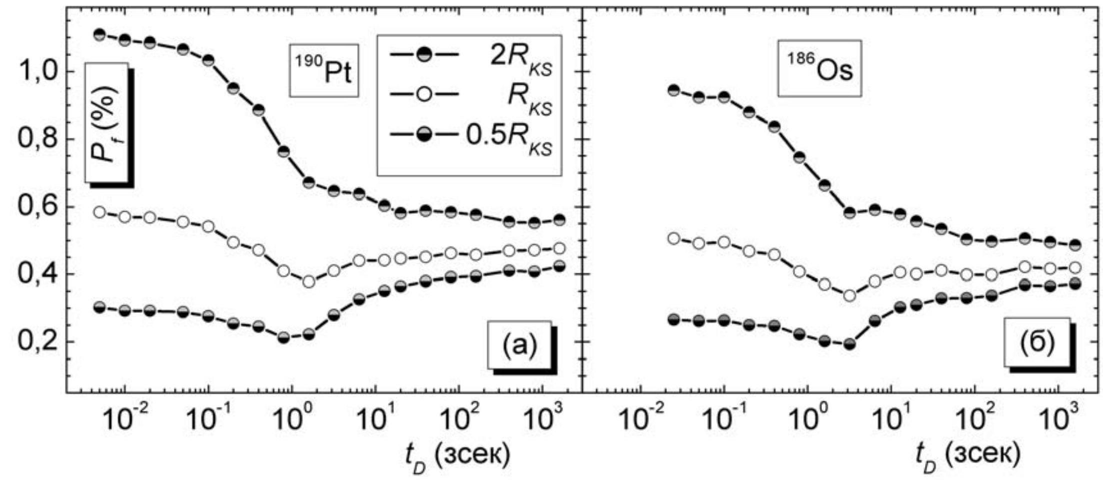

Рисунок 7. Зависимости вероятностей деления P_f от времени динамического моделирования t_D. Для статистической ветви в КДСМ использованы значения $R_{Dqs} = R_{KS}$ (открытые значки), $R_{Dqs} = 2R_{KS}$ (полузакрытые сверху значки) и $R_{Dqs} = 0.5R_{KS}$ (полузакрытые снизу значки).

Открытые значки отвечают $R_{Dqs} = R_{KS}$, полузакрытые сверху – $R_{Dqs} = 2R_{KS}$, полузакрытые снизу – $R_{Dqs} = R_{KS}/2$. Видно, что значения ВД для двух последних случаев не выходят на плато с увеличением t_D. Однако при достаточно больших значениях t_D эти величины стремятся к асимптотическому значению, соответствующему $R_{Dqs} = R_{KS}$.

В заключении сформулированы результаты, выдвигаемые на защиту.

Основные результаты и выводы

1. Проведено систематическое исследование влияния ангармоничности потенциала (наличие НВП) на согласие динамической квазистационарной и крамерсовой скоростей деления. Выявлено, что различие между этими скоростями может достигать 40 %.

2. Получены поправки к крамерсовой скорости деления на ненулевые высшие производные в экстремальных точках потенциальной энергии нулевого, первого и второго порядков малости по отношению $\gamma_{qs(sd)}$. Некоторые из этих поправок помимо ненулевых высших производных учитывают также положения квазистационарного состояния q_{qs}, седловой точки q_{sd} и точки разрыва q_{sc}. Продемонстрировано, что эти поправки можно применять не только в режиме сверхзатухания ($\beta >> \omega_{sd}$), для которого они получены, но и при промежуточных значениях коэффициента затухания ($\beta \approx \omega_{sd}$).

3. Проведено теоретическое обоснование необходимости учёта релаксационной стадии процесса деления атомных ядер для адекватного моделирования этого процесса, сопровождаемого испусканием легких частиц.

4. Анализ влияния релаксационной стадии процесса деления на механизм формирования наблюдаемых величин (вероятность деления, средние множественности предразрывных нейтронов, протонов, альфа-частиц, дейтронов и гамма-квантов) позволил доказать, что наиболее адекватное моделирование этой стадии удается достичь только в рамках комбинированной динамическо-статистической модели. В случаях, когда удобнее использовать статистическую модель Крамерса (например, для анализа реакций деления ядер при низких значениях параметра делимости и высоких энергиях возбуждения), также необходимо учитывать временную задержку деления. Причем, это не приводит к двойному учету испускаемых частиц.

5. Впервые с хорошей точностью продемонстрировано, что при увеличении времени динамического моделирования значения шести наблюдаемых величин (вероятности деления, средних множественностей предразрывных нейтронов, протонов, альфа-частиц, дейтронов и гамма-квантов) перестают зависеть от этого параметра.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ДИССЕРТАЦИИ ОПУБЛИКОВАНЫ В РАБОТАХ:

Издания, определённые ВАК Минобрнауки России

1. Gontchar I.I., Aktaev N.E. Importance of the relaxation stage for adequate modeling of nuclear fission accompanied by light particle emission // Phys. Rev. C. – 2009. – V. 80. – 044601.
2. Актаев Н.Е., Гончар И.И. Динамическое и статистическое моделирование процесса деления высоковозбуждённых атомных ядер с учётом релаксационной стадии // Известия РАН. Серия физическая. – 2010. – Т. 74, № 4. – С. 545 – 548.
3. Aktaev N.E., Gontchar I.I. Comment on “Systematic description of evaporation spectra for light and heavy compound nuclei” // Phys. Rev. C. – 2010. – V. 82. – 059801.
4. Gontchar I.I., Chushnyakova M.V., Aktaev N.E., Litnevsky A.L., Pavlova E.G. Disentangling effects of potential shape in the fission rate of heated nuclei // Phys. Rev. C. – 2010. – V. 82. – 064606.

Материалы конференций

5. Актаев Н.Е. Математическое моделирование процесса деления возбуждённых атомных ядер с учётом релаксационный стадии // Труды 5-ой Международной конференции «Перспективы развития фундаментальных наук» (Россия, Томск, 20 – 23 мая 2008 г.). – С. 226 – 227.
6. Gontchar I.I., Aktaev N.E. Fission rate of heated nuclei: analytical formulas versus dynamical modeling // Book of abstract of the 18th National Congress of Australian Institute of Physics «Physics for the Future» (Australia, Adelaide, 30 November – 5 December 2008). – P. 171.
7. Gontchar I.I., Aktaev N.E. Fission rate of heated nuclei: analytical formulas versus dynamical modeling // Book of refereed papers of the 18th National Congress of Australian Institute of Physics «Physics for the Future» (Australia, Adelaide, 30 November – 5 December 2008). – P. 167 – 170.
8. Актаев Н.Е., Гончар И.И. Динамическое и статистическое моделирование процесса деления высоковозбуждённых атомных ядер с учётом релаксационной стадии // Материалы 59-й Международной конференции «Ядро 2009. Фундаментальные проблемы и прикладные аспекты ядерной физики: от космоса до нанотехнологий» (Россия, Чебоксары, 15 – 19 июня 2009 г.). – С. 241.

9. Gontchar I.I., Pavlova E.G., Litnevsky A.L., Aktaev N.E. How much accurate is description of nuclear fission rate by means of Kramers formula? // Book of abstracts of the 3rd International Conference «Current problem in nuclear physics and atomic nuclei» (Ukraine, Kyiv, 7 – 12 June 2010). – P. 22 – 23.
10. Gontchar I.I., Pavlova E.G., Litnevsky A.L., Aktaev N.E. How much accurate is description of nuclear fission rate by means of Kramers formula? // Proceedings of the 3rd International Conference «Current problem in nuclear physics and atomic nuclei» (Ukraine, Kyiv, 7 – 12 June 2010). – P. 46 – 50.
11. Aktaev N.E., Gontchar I.I. Modified Kramers approach for description of fission of excited nuclei // Book of abstracts of the 60th International Conference on Nuclear Physics «Nucleus 2010. Methods of Nuclear Physics for Femto- and Nanotechnologies» (Russia, St. Petersburg , 6 – 9 July 2010). – P. 313.

СПИСОК ЦИТИРУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

[1] Gontchar I.I., Fröbrich P., Pischasov N.I. Consistent dynamical and statistical description of fission of hot nuclei // Phys. Rev. C. – 1993. – V. 47. – P. 2228.

[2] Edholm O., Blomberg C. Decay of angular correlation functions by multiple rotational potential diffusion in polymer chains, with applications to NMR relaxation in paraffin chains of lipid bilayers // Chem. Phys. – 1979. – V. 42 – P. 449.

[3] Bürki J., Stafford C.A., Stein D.L. Theory of Metastability in Simple Metal Nanowires // Phys. Rev. Lett. – 2005. – V. 95. – 090601.

[4] Kramers H.A. Brownian motion in a field of force and the diffusion model of chemical reaction // Physica. – 1940. – V. 7. – P. 284.

[5] Strutinsky V.M. The fission width of excited nuclei // Phys. Lett. B. – 1973. – V. 47, № 2. – P. 121.

[6] Hofmann H., Ivanyuk F.A. Mean first passage time for nuclear fission and the emission of light particles // Phys. Rev. Lett. – 2003. – V. 90. – 132701.

[7] Schmitt C., Nadtochy P.N., Heinz A., Jurado B., Kelic A., Schmidt K.-H. First experiment on fission transient in fissile spherical nuclei produced by fragmentation of radioactive beams // Phys. Rev. Lett. – 2007. – V. 99. – 042701.

[8] Адеев Г.Д., Карпов А.В., Надточий П.Н., Ванин Д.В. Многомерный стохастический подход к динамике деления возбуждённых ядер // ЭЧАЯ. – 2005. – Т. 36, вып. 4. – С. 731.

[9] Hinde D.J., Hilscher D., Rossner H., Gebauer B., Lehmann M., Wilpert M. Neutron emission as a probe of fusion-fission and quasifission dynamics // Phys. Rev. C. – 1992. – V. 45, № 3. – P. 1229.
[10] Bao J.-D., Jia Y. Determination of fission rate by mean last passage time // Phys. Rev. C. – 2004. – V. 69. – 027602.
[11] Fröbrich P., Ecker A. Langevin description of fission of hot metallic clusters // Euro. Phys. Jour. D. – 1998. – V. 3. – P. 245.
[12] Гегечкори А.Е., Анищенко Ю.А., Надточий П.Н., Адеев Г.Д. Влияние эффектов немарковости на скорость и времена деления // ЯФ. – 2008. – Т. 71, № 12. – С. 2041.
[13] Fröbrich P., Tillack G.-R. Path-integral derivation for the rate of stationary diffusion over a multidimensional barrier // Nucl. Phys. A. – 1992. – V. 540. – P. 353.
[14] Nadtochy P.N., Kelic A., Schmidt K.-H. Fission rate in multi-dimensional Langevin calculation // Phys. Rev. C. – 2007. – V. 75. – 064614.
[15] Chandrasekhar S. Stochastic problem in physics and astronomy // Rev. of Mod. Phys. – 1943. – V. 15. – P. 1.
[16] Edholm O., Leimar O. The accuracy of Kramers' theory of chemical kinetics // Physica A. – 1979. – V. 98. – P. 313.
[17] Fröbrich P., Gontchar I.I., Mavlitov N.D. Langevin fluctuation-dissipation dynamics of hot nuclei: prescission neutron multiplicities and fission probabilities // Nucl. Phys. A. – 1993. – V. 556. – P. 281.

Типография ОмГУПСа. 2011. Тираж 120 экз. Заказ .
644046, г. Омск, пр. Маркса, 35