

УДК 539.172.4

## ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТЬ СИМУЛЯЦИИ $r$ -ПРОЦЕССА К ВЫБОРУ МАССОВОЙ МОДЕЛИ

© 2022 г. В. В. Негребецкий<sup>1, \*</sup>, Е. В. Владимирова<sup>2</sup>, М. В. Симонов<sup>1</sup>,  
К. А. Стопани<sup>2</sup>, Т. Ю. Третьякова<sup>1, 2</sup>

<sup>1</sup>Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования  
“Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова”, Физический факультет, Москва, Россия

<sup>2</sup>Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования  
“Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова”,  
Научно-исследовательский институт ядерной физики имени Д.В. Скобельцына, Москва, Россия

\*E-mail: negrebetckii.vv16@physics.msu.ru

Поступила в редакцию 15.11.2021 г.

После доработки 06.12.2021 г.

Принята к публикации 22.12.2021 г.

При помощи различных моделей ядерных масс получены теоретические сечения и скорости реакции нейтронного захвата на ядрах, задействованных в астрофизическом  $r$ -процессе. Проанализировано влияние выбора массовой модели на расчет сечений и скоростей нейтронного захвата на нейтроноизбыточных изотопах индия. По результатам расчета скоростей нейтронного захвата с различными массовыми моделями сформированы четыре варианта базы данных астрофизических скоростей реакций. На их основе проведены симуляции  $r$ -процесса в каноническом приближении, по результатам которых оценена чувствительность симуляции  $r$ -процесса к выбору массовой модели.

DOI: 10.31857/S0367676522040184

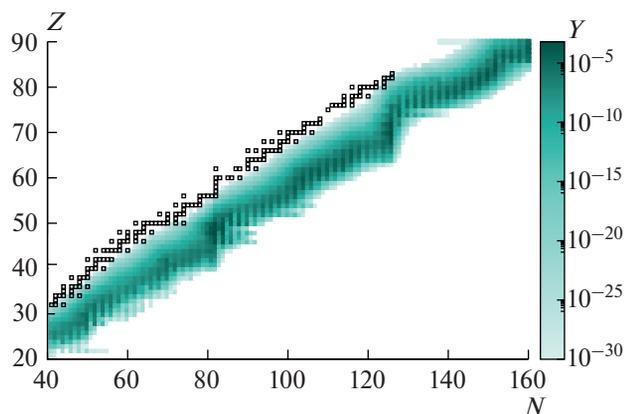
### ВВЕДЕНИЕ

Астрофизический  $r$ -процесс по современным представлениям является основным источником тяжелых элементов во Вселенной. Он состоит из цепочек интенсивных реакций нейтронного захвата, приводящих к быстрому набору массы исходным ядром, и последующих  $\beta$ -распадов, возвращающих сильно удалившееся в нейтроноизбыточную область ядро ближе к долине стабильности. Эффективное протекание  $r$ -процесса возможно лишь при высочайших температурах и плотностях нейтронного потока, которые могут быть достигнуты, например, при взрывах сверхновых и в других катастрофических астрофизических сценариях. Тем самым основным методом исследования  $r$ -процесса является компьютерное моделирование, использующее большое количество ядерных данных в качестве входных параметров. Между тем траектория  $r$ -процесса лежит значительно ниже долины стабильности, в области ядер с большим избытком нейтронов, для которых отсутствуют экспериментальные данные. Единственным источником таких характеристик для экзотических нейтроноизбыточных изотопов являются теоретические ядерные модели.

При этом расхождения значений, предсказанных разными ядерными моделями, могут ока-

заться значительными. Представляет интерес влияние выбора, например, массовой ядерной модели на результаты моделирования  $r$ -процесса. Примером подобного расчета является работа [1], в которой несколько массовых моделей применяются к двум подходам к симуляции  $r$ -процесса. В недавней работе [2] оценивается чувствительность моделирования  $r$ -процесса к выбору параметров функционала плотности энергии (EDF) в форме Скирма при расчете ядерных масс.

В настоящей работе исследуется отклик канонической модели  $r$ -процесса на изменение теоретических значений масс изотопов. В первом разделе статьи изложена методика моделирования астрофизического  $r$ -процесса в каноническом приближении. Во втором разделе рассматриваются использованные нами массовые модели: FRDM2012, HFB-24, WS + RBF, а также метод локальных массовых соотношений (LMR). Третий раздел посвящен вычислению необходимых для симуляции  $r$ -процесса сечений и скоростей реакции нейтронного захвата, в котором теоретические значения масс ядер являются важными параметрами. Результаты симуляций  $r$ -процесса на основе скоростей нейтронного захвата, вычисленных при помощи четырех массовых моделей, представлены в последнем разделе работы.



**Рис. 1.** Результат односекундной симуляции канонической модели  $r$ -процесса. Цветом показаны концентрации  $r$ -изотопов, черными квадратами отмечены стабильные ядра. Концентрации изотопов нормированы на суммарную.

## МОДЕЛИРОВАНИЕ $r$ -ПРОЦЕССА

Изменение концентраций изотопов  $Y_i$  в звездном веществе подчиняется системе дифференциальных уравнений следующего вида:

$$\frac{dY_i}{dt} = \sum_k \pm \lambda_k \prod_{m_k} Y_{m_k}, \quad (1)$$

где сумма по индексу  $k$  отвечает множеству реакций, в которых изотоп  $i$  является продуктом или одной из исходных частиц. Знак перед каждым членом суммы определяет тем, нарабатывается или расходуется в ней изотоп  $i$ . Произведение по индексу  $m_k$  соответствует множеству изотопов, задействованных в реакции  $k$  в качестве расходимых. Величина  $\lambda_k$  обозначает здесь скорость ядерной реакции  $k$ . Это важный параметр, зависящий как от макроскопических характеристик вещества, таких как плотность и температура, так и от ядерных свойств.

При описании  $r$ -процесса с помощью системы уравнений (1) возникает ряд расчетных проблем. Численное решение системы затруднено ее большим размером: более семи тысяч уравнений и около 150 тысяч ненулевых членов в правых частях (1). Кроме того, существует проблема высокой жесткости этих уравнений, то есть большого разброса значений  $\lambda_i$ , которые могут различаться на десятки порядков для различных реакций. Для решения таких систем применяют неявные численные методы. В настоящей работе для расчета эволюции астрофизической ядерной системы применяется библиотека SkyNet [3], реализующая неявный метод Эйлера.

Отдельную трудность представляет определение величин  $\lambda_i$  для экзотических ядер. Скорости

ядерных реакций рассчитываются на основе их сечений, которые для астрофизических процессов вычисляются теоретически. Для этого необходимо знать множество ядерных параметров, таких как масса и плотность состояний. Траектория  $r$ -процесса лежит в области нейтроноизбыточных изотопов, для которых отсутствуют экспериментальные данные, поэтому предварительно с помощью теоретических моделей вычисляются необходимые ядерные характеристики, что вносит в расчет существенные неопределенности.

Существуют различные астрофизические сценарии, в которых возможно протекание  $r$ -процесса, например, сверхновые различных типов [4, 5] и слияние нейтронных звезд [6]. В настоящей работе вместо конкретного сценария применяется каноническая модель  $r$ -процесса, использованная ранее, например, в [1]. В канонической модели температура и плотность вещества не меняются, а исходная смесь изотопов состоит из одного лишь  $^{56}\text{Fe}$ . Такого приближения достаточно для оценки влияния выбора массовой модели на конечные распределения продуктов  $r$ -процесса.

На рис. 1 показаны результаты расчета  $r$ -процесса при помощи канонической модели, реализованной нами на основе библиотеки SkyNet. На диаграмме изотопов оттенками серого отражены итоговые концентрации  $Y$  продуктов односекундного  $r$ -процесса. Пустыми квадратами отмечены стабильные ядра. В этой симуляции использовались стандартные значения скоростей ядерных реакций  $\lambda_i$  из широко используемой библиотеки астрофизических скоростей REACLIB [7]. Этот результат отражает характерные особенности  $r$ -процесса: видно, что его траектория существенно смещена в область нейтроноизбыточных ядер, наблюдается ступенчатое поведение, особенно в областях магических чисел нейтронов 82 и 126.

## МОДЕЛИ ЯДЕРНЫХ МАСС

В настоящей работе несколько моделей ядерных масс используются для вычисления скоростей реакции нейтронного захвата ( $n, \gamma$ ), являющейся одной из основных реакций  $r$ -процесса. Это делается для определения влияния выбора массовой модели на результаты нашей симуляции  $r$ -процесса в каноническом приближении.

Ядерные модели принято делить на коллективные и микроскопические. Микроскопический подход представлен в настоящей работе методом Хартри–Фока–Боголюбова с потенциалом Скирма HFB-24 [8]. Модели FRDM2012 [9] и WS + RBF [10], также использованные нами, реализуют микро-макроскопический подход. FRDM дополняет приближение жидкой капли учетом внутренней оболочечной структуры по методу

Струтинского и нуклонного спаривания по методу Бардина–Купера–Шриффера. В модели WS + RBF макроскопический вклад описывается формулой Бете–Вайцзеккера, вклад деформаций учитывается с помощью приближения Томаса–Ферми, после чего результаты уточняются с помощью метода радиальных базисных функций (RBF). В настоящей работе используются четыре готовые таблицы масс ядер, рассчитанные авторами моделей FRDM2012, HFB-24 и WS + RBF и имеющиеся в открытом доступе.

Помимо теоретических ядерных моделей, для оценки неизвестных масс ядер могут быть использованы феноменологические соотношения, использующие имеющиеся экспериментальные данные. В настоящей работе помимо перечисленных массовых таблиц использовался известный метод локальных массовых соотношений (LMR) [11, 12], связывающих энергии связи нескольких изотопов, соседствующих на NZ-диаграмме. Преимуществом данного метода является его чрезвычайная простота и высокая точность в областях NZ-диаграммы с достаточным количеством экспериментально полученных значений энергий связи. В настоящей работе используется массовое соотношение, связывающее энергии связи четырех соседних изотопов через величину остаточного нейтрон-протонного взаимодействия  $\Delta_{np}$ :

$$\Delta_{np}(N, Z) = B(N, Z) + B(N - 1, Z - 1) - B(N, Z - 1) - B(N - 1, Z). \quad (2)$$

Экспериментальная зависимость величины  $\Delta_{np}$  от массового числа может быть аппроксимирована степенной функцией. Таким образом, из соотношения (2) можно получить энергию связи любого из четырех ядер при наличии значений трех других энергий связи. Расчет можно повторять для других изотопов уже с использованием не только известных из опыта значений энергий связи, но и вычисленных на предыдущих итерациях процесса. Данный метод использовался авторами для определения границ отделения нейтронов и протонов [13] и вычисления масс сверхтяжелых ядер [14, 15].

В настоящей работе для оценки неизвестных энергий связи  $r$ -изотопов метод остаточного нейтрон-протонного взаимодействия применялся к экспериментальным данным AME2020 [16].

### РАСЧЕТ СЕЧЕНИЙ И СКОРОСТЕЙ НЕЙТРОННОГО ЗАХВАТА

Скорость ядерной реакции определяется как свертка ее сечения и энергетического распределения взаимодействующих частиц. Энергии нейтронов и ядер в звездном веществе имеют распределение Максвелла–Больцмана. При расчете астрофизической реакции следует учитывать, что в

звездном веществе ядро находится в возбужденных состояниях с энергиями возбуждения  $E_x^\mu$  и значениями спина  $I^\mu$ . В условиях термодинамического равновесия заселение уровней также подчиняется статистике Максвелла–Больцмана. Тем самым формула для скорости астрофизической реакции принимает вид

$$\lambda(T) = \sqrt{\frac{8}{\pi m}} \frac{N_A}{(kT)^{3/2}} G(T) \times \int_0^\infty dE \sum_\mu \frac{2I^\mu + 1}{2I^0 + 1} \sigma^\mu(E) E \exp\left(\frac{-E - E_x^\mu}{kT}\right), \quad (3)$$

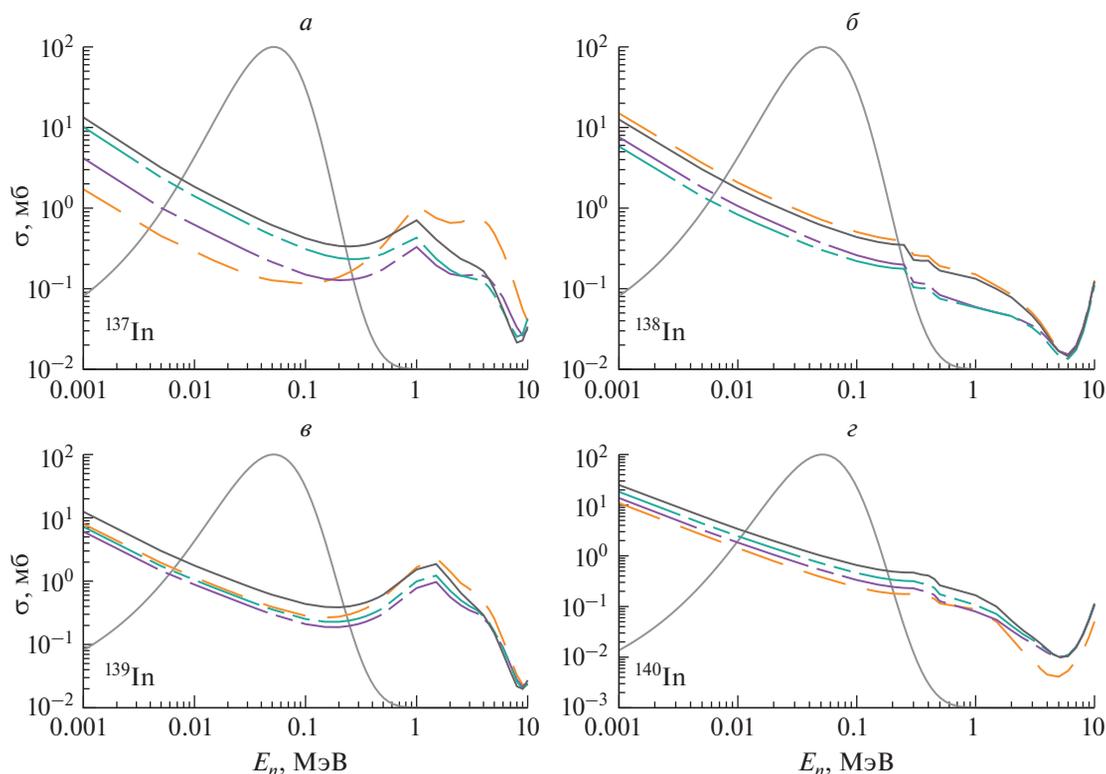
где  $m$  – приведенная масса взаимодействующих частиц,  $k$  – постоянная Больцмана,  $N_A$  – число Авогадро,  $G(T)$  – статистическая сумма:

$$G(T) = \sum_\mu \frac{2I^\mu + 1}{2I^0 + 1} \exp\left(\frac{-E_x^\mu}{kT}\right). \quad (4)$$

Расчет сечений  $\sigma^\mu$  осуществляется с помощью статистической модели ядерных реакций. В настоящей работе используется реализация статистической модели из пакета TALYS [17]. Отметим, что, помимо энергий связи ядер, статистическая модель требует ряд других ядерных параметров, таких как энергетическая плотность уровней. В настоящей работе внимание уделяется лишь теоретическим значениям масс, в качестве остальных параметров модели взяты стандартные значения TALYS. В частности, для определения плотности ядерных уровней взята основанная на приближении Ферми-газа модель константной температуры (CTM) [18].

На рис. 2 показаны полученные нами сечения реакции  $(n, \gamma)$  на нейтроноизбыточных изотопах индия с массовыми числами  $A = 137 - 140$  в астрофизическом диапазоне энергий. Для вычислений мы использовали массовые модели FRDM2012, HFB-24, WS + RBF и LMR. На рисунках пунктирной линией показано энергетическое распределение нейтронов в звездном веществе, по которому можно судить, при каких энергиях сечение реакции дает наибольший вклад в ее скорость  $\lambda$ . По представленным графикам видно, что выбор массовой модели существенно влияет на результаты расчета сечения реакции. Для некоторых изотопов сечения, полученные с использованием разных массовых моделей, могут различаться почти на порядок, как в случае с изотопом  $^{137}\text{In}$  (рис. 2а).

В табл. 1 приведены энергии реакции  $(n, \gamma)$  на нейтроноизбыточных изотопах индия для каждой из четырех моделей. Эти данные согласуются с рис. 2: например, видно, что для изотопа  $^{137}\text{In}$  энергия нейтронного захвата, рассчитанная по FRDM2012, значительно отличается от результа-



**Рис. 2.** Сечения реакции  $(n, \gamma)$  на изотопах индия: а) –  $^{137}\text{In}$ , б) –  $^{138}\text{In}$ , в) –  $^{139}\text{In}$ , г) –  $^{140}\text{In}$ . Расчет для четырех различных массовых моделей: сплошная линия – LMR, штриховая – FRDM2012, штрихпунктирная – HFB-24, штрихпунктирная с двумя точками – WS4 + RBF. Серым пунктиром показано энергетическое распределение нейтронов при температуре 1.2 ГК.

тов остальных массовых моделей. Зачастую связь между вариациями массовой модели и изменениями в сечениях ведет себя сложнее, как, например, для захвата на  $^{138}\text{In}$  (рис. 2б): FRDM2012 и HFB-24 дают близкие значения  $Q$ , однако сечения каждой из этих двух моделей проходят ближе к LMR и WS + RBF соответственно, чем друг к другу.

Расчет сечений был выполнен нами для всех реакций нейтронного захвата, представленных в

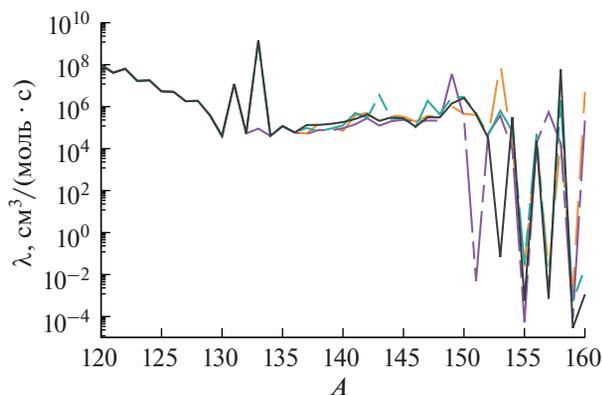
**Таблица 1.** Энергии реакции  $(n, \gamma)$  на четырех нейтроноизбыточных изотопах индия, рассчитанные для четырех различных наборов теоретических масс

Мишень	$Q_{\text{FRDM2012}}$ , МэВ	$Q_{\text{HFB-24}}$ , МэВ	$Q_{\text{WS+RBF}}$ , МэВ	$Q_{\text{LMR}}$ , МэВ
$^{137}\text{In}$	0.66	1.28	1.75	1.64
$^{138}\text{In}$	3.00	2.98	2.71	2.88
$^{139}\text{In}$	0.95	1.16	1.17	1.32
$^{140}\text{In}$	2.03	2.62	2.70	2.69

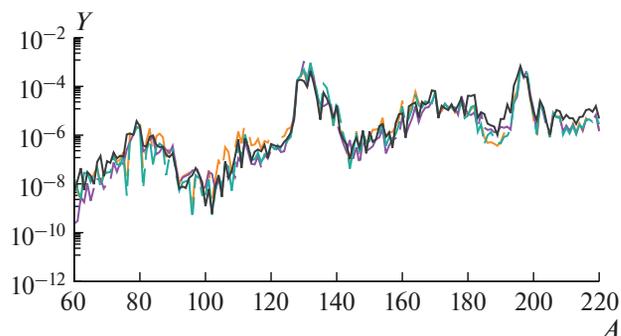
базе данных REACLIB. Полученные сечения использовались для вычисления скоростей нейтронного захвата по формуле (3). Зависимость скоростей реакции  $(n, \gamma)$  на нейтроноизбыточных изотопах индия от массового числа при температуре 1.2 ГК представлена на рис. 3. Заметны существенные расхождения скоростей, особенно проявляющиеся для изотопов с массовым числом больше 130. Например, для ядра  $^{133}\text{In}$  модель HFB-24 не повторяет резкий пик, предсказанный другими моделями. Для массовых чисел 143 и 147 отличные от результатов других моделей значения дает WS + RBF. Для наиболее тяжелых изотопов расхождения становятся еще масштабнее и достигают нескольких порядков.

### ВЛИЯНИЕ ВЫБОРА МАССОВОЙ МОДЕЛИ НА ВЫХОДЫ $r$ -ПРОЦЕССА

Представленный в предыдущем разделе расчет скоростей  $(n, \gamma)$  был проведен для всех реакций нейтронного захвата, представленных в базе данных REACLIB, с использованием четырех массовых моделей: FRDM2012, HFB-24, WS + RBF и LMR. Таким образом были сформированы четы-



**Рис. 3.** Зависимость скорости реакции  $(n, \gamma)$  на нейтроноизбыточных изотопах индия от массового числа ядра-мишени. Расчет для четырех различных массовых моделей: сплошная линия – LMR, штриховая – FRDM2012, штрихпунктирная – HFB-24, штрихпунктирная с двумя точками – WS4 + RBF.



**Рис. 4.** Массовые распределения  $r$ -изотопов в канонической модели с вариацией массовой модели, использовавшейся при расчете скоростей реакции  $(n, \gamma)$ : сплошная линия – LMR, штриховая – FRDM2012, штрихпунктирная – HFB-24, штрихпунктирная с двумя точками – WS4 + RBF. Концентрации изотопов нормированы на суммарную.

ре модификации REACLIB, отличающиеся друг от друга величинами скоростей  $(n, \gamma)$ . Эти базы данных использовались нами для симуляции  $r$ -процесса в каноническом приближении. Результаты этих расчетов представлены на рис. 4, где изображены полученные нами массовые распределения  $r$ -нуклидов. Как видно, расхождения результатов для некоторых значений  $A$  превышают три порядка. Наблюдаются также и качественные различия: например, микро-макроскопические модели FRDM2012 и WS + RBF в области  $A = 70-90$  предсказывают несколько заметных провалов, которые не повторяют две другие модели. В широкой области  $A = 100-170$  результаты FRDM2012 имеют повышенный выход относительно прочих моделей.

Целью настоящей работы было определение чувствительности канонической модели  $r$ -процесса к выбору массовых моделей. Как видно, отклик модели на изменение набора теоретических масс ядер силен, причем зависимость между вариацией массовой модели и изменением выходов  $r$ -изотопов представляется сложной.

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Достоверность моделирования астрофизического нуклеосинтеза зависит от точности определения входных ядерных параметров для экзотических изотопов, чьи характеристики на данный момент не могут быть установлены экспериментально. Как показывают результаты настоящей работы, различия предсказаний ядерных масс современными ядерными моделями существенны, так как приводят к большим и непредсказуемым расхождениям в предсказаниях сечений и скоро-

стей астрофизических реакций и, как следствие, к высокой неопределенности выходов продуктов нуклеосинтеза. Минимизация ошибок определения ядерных параметров моделей может стать ключом к пониманию механизмов образования элементов и звездной эволюции.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Goriely S. // *Hyp. Int.* 2001. V. 132. No. 1. P. 105.
2. Sproue T.M., Navarro Perez R., Surman R. et al. // *Phys. Rev. C.* 2020. V. 101. Art. No. 055803.
3. Lippuner J., Roberts L.F. // *Astrophys. J. Suppl. Ser.* 2017. V. 233. No. 2. P. 18.
4. Sumiyoshi K., Terasawa M., Mathews G.J. et al. // *Astrophys. J.* 2001. V. 562. No. 2. P. 880.
5. Farouqi K., Kratz K.-L., Mashonkina L.I. et al. // *Astrophys. J. Lett.* 2009. V. 694. Art. No. L49.
6. Wanajo S., Sekiguchi Y., Nishimura N. et al. // *Astrophys. J. Lett.* 2014. V. 789. Art. No. L39.
7. Cyburt R.H., Amthor A.M., Ferguson R. et al. // *Astrophys. J.* 2010. V. 189. No. 1. P. 240.
8. Goriely S., Chamel N., Pearson J.M. // *Phys. Rev. C.* 2013. V. 88. Art. No. 024308.
9. Möller P., Sierk A.J., Ichikawa T., Sagawa H. // *Atom. Data Nucl. Data Tables.* 2016. V. 109. P. 1.
10. Ma N.-N., Zhang H.-F., Bao X.-J., Zhang H.-F. // *Chin. Phys. C.* 2019. V. 43. Art. No. 044105.
11. Garvey G.T., Kelson I. // *Phys. Rev. Lett.* 1966. V. 16. No. 5. Art. No. 197.
12. Jänecke J., Behrens H. // *Phys. Rev. C.* 1974. V. 9. No. 4. P. 1276.
13. Vladimirova E.V., Simonov M.V., Tretyakova T.Yu. // *AIP Conf. Proc.* 2021. V. 2377. Art. No. 070003.
14. Vladimirova E.V., Ishkhanov B.S., Simonov M.V. et al. // *Int. J. Mod. Phys. E.* 2021. V. 30. No. 4. Art. No. 2150025.
15. Симонов М.В., Владимировна Е.В., Ишханов Б.С., Третьякова Т.Ю. // *Изв. РАН. Сер. физ.* 2021. Т. 85.

- № 5. С. 676; *Simonov M.V., Vladimirova E.V., Tretyakova T.Yu., Ishkhanov B.S.* // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2021. V. 85. No. 5. P. 521.
16. *Huang W.J., Wang M., Kondev F.G. et al* // Chin. Phys. C. 2021. V. 45. Art. No. 030002.
17. *Koning A.J., Rochman D., Sublet J. et al* // Nucl. D. Sheets. 2019. V. 155. P. 1.
18. *Gilbert A., Cameron A.G.W.* // Can. J. Phys. 1965. V. 43. P. 1446.

### Sensitivity of $r$ -process simulation to choose of the mass model

**V. V. Negrebetskiy<sup>a, \*</sup>, E. V. Vladimirova<sup>b</sup>, M. V. Simonov<sup>a</sup>, K. A. Stopani<sup>b</sup>, T. Yu. Tretyakova<sup>a, b</sup>**

<sup>a</sup> *Department of General Nuclear Physics, Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University, Moscow, 119991 Russia*

<sup>b</sup> *Skobeltsyn Institute of Nuclear Physics, Lomonosov Moscow State University, Moscow, 119991 Russia*

*\*e-mail: negrebetckii.vv16@physics.msu.ru*

Neutron capture cross-sections and reaction rates for isotopes participating in astrophysical  $r$ -process were obtained with the help of different nuclear mass models. Impact of mass model choice on neutron capture cross-section and rate predictions for neutron-rich indium isotopes was analyzed. Based on the results of neutron capture rates calculations with different mass models four reaction rates data bases were compiled. With the help of these data bases simulations of astrophysical  $r$ -process were performed, and the results of these simulations were used to estimate  $r$ -process model sensitivity to the choice of nuclear mass model.