ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ «МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ имени М.В.ЛОМОНОСОВА»

# ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

КАФЕДРА ОБЩЕЙ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ

# МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ

# «ВЛИЯНИЕ ТОЧНОСТИ ВХОДНЫХ ПАРАМЕТРОВ МОДЕЛЕЙ ЯДЕРНЫХ РЕАКЦИЙ НА ПРЕДСКАЗАННЫЕ ВЫХОДЫ R-ПРОЦЕССА»

Выполнил студент м213 группы Негребецкий В.В.

Научный руководитель: научный сотрудник, кандидат ф.-м. наук Стопани К.А.

подпись научного руководителя

Допущена к защите: «\_\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2022 года заведующий кафедрой, член-корреспондент РАН, профессор Боос Э.Э.

подпись заведующего кафедрой

Москва 2022

# Содержание

1.	. Введение		
	1.1.	Нуклеосинтез тяжелых элементов	3
	1.2.	Особенности изучения <i>r</i> -процесса	5
2.	. Теоретические модели в расчетах нуклеосинтеза		
	2.1.	Моделирование процессов нуклеосинтеза	7
	2.2.	Статистическая модель ядерных реакций	11
3. Ma		ссы и энергии связи <i>г</i> -изотопов	15
	3.1.	Макро-микроскопическая модель FRDM2012	15
	3.2.	Микроскопическая модель HFB-24	19
	3.3.	Метод локальных массовых соотношений LMR2021	21
	3.4.	Оценка точности моделей ядерных масс	23
4.	Подготовка ядерных данных для расчета <i>r</i> -процесса		26
	4.1.	Расчет скоростей нейтронного захвата в программе TALYS	26
	4.2.	Скорости $\beta^-$ -распадов	31
	4.3.	Создание библиотек астрофизических скоростей реакций	36
5.	Моделирование <i>r</i> -процесса при слиянии нейтронных звезд		39
	5.1.	Параметры моделирования	39
	5.2.	Результаты моделирования	41
За	Заключение		
Сп	Список литературы		

# 1. Введение

Нуклеосинтезом называют совокупность протекающих в естественных условиях ядерных процессов, приводящих к образованию атомных ядер. Исследование механизмов нуклеосинтеза является актуальной задачей современной физики, так как они определяют распространенность ядер химических элементов во Вселенной и играют важную роль в астрофизике. Нуклеосинтез сопровождает эволюцию Вселенной с самого ее рождения. В первичном, дозвездном нуклеосинтезе, начавшемся уже в первые секунды после Большого взрыва, стали возникать легчайшие ядра, изотопы водорода и гелия. Наблюдаемое сегодня подавляющее преобладание ядер <sup>1</sup>Н и <sup>4</sup>Не сложилось именно за счет дозвездного нуклеосинтеза. В звездном нуклеосинтезе, начавшемся приблизительно через 1 млрд лет с появлением первых звезд, в результате стадий термоядерного горения, чередующихся со стадиями гравитационного сжатия, образуются химические элементы вплоть до железа.

Процессы, приводящие к образованию более тяжелых элементов, представляют большой интерес для современной физики. Как известно, нуклеосинтез ядер тяжелее железа энергетически невыгоден из-за так называемого «железного пика» — максимума зависимости удельной энергии связи от массового числа. Термоядерное горение не может быть источником таких изотопов, за их появление отвечают другие механизмы. Одним из важнейших процессов нуклеосинтеза тяжелых элементов является процесс быстрого захвата нейтронов, или *r*-процесс. Настоящая работа посвящена исследованию влияния точности входных параметров моделей ядерных реакций на предсказанные выходы *r*-процесса.



**Рис.** 1. Схематическое изображение ядерных реакций астрофизического *r*-процесса.

#### 1.1. Нуклеосинтез тяжелых элементов

Астрофизическим *r*-процессом, или процессом быстрого нейтронного захвата, называется механизм нуклеосинтеза, в ходе которого исходное ядро поглощает большое число нейтронов и, оказавшись в области нейтронного избытка, испытывает слабые распады. Схематично превращения, происходящие с ядром в ходе набора массы в *r*-процессе, показаны на *NZ*-диаграмме на рис. 1. В результате реакций радиационного захвата нейтронов  $(n, \gamma)$  масса ядра увеличивается за счет поглощенных нейтронов, что приводит к движению изотопа вдоль положительного направления оси N, а  $\beta^-$ -распады приводят к образованию химического элемента с большим зарядовым числом и движению вдоль оси Z. В r-процессе скорости нейтронного захвата на порядки превышают скорости  $\beta^-$ -распадов, что обеспечивает стремительный набор массы и значительное смещение в область нейтронного избытка. Для достижения необходимой интенсивности поглощения нейтронов требуется высокая плотность их потока, около  $10^2$  нейтронов на одно зародышевое ядро, и температуры вещества свыше 1 ГК. Подобные условия являются экстремальными даже по меркам астрофизики. Они могут реализовываться лишь в таких катастрофических явлениях, как взрывы сверхновых, слияния двух нейтронных звезд или нейтронной звезды и черной дыры.

По современным представлениям, именно r-процесс обеспечивает возникновение основной массы ядер химических элементов тяжелее железа во Вселенной. Процесс медленного нейтронного захвата, или s-процесс, отличающийся от r-процесса значительно меньшей интенсивностью поглощения нейтронов и, соответственно, характерными временами порядка сотен лет, требует не столь исключительных астрофизических условий и обеспечивает образование ядер вблизи долины стабильности вплоть до свинца и висмута. Тем не менее s-процессом нельзя объяснить существование более тяжелых ядер, а также



**Рис. 2.** Массовое распределение ядер в Солнечной системе по данным [1], масса изотопов Si принята равной 10<sup>6</sup>. Оранжевым отмечены пики *r*-процесса, синим — пики *s*-процесса (согласно [2]).

нейтроноизбыточных изотопов, слишком удаленных от долины стабильности. Некоторое количество обойденных протоноизбыточных изотопов возникает в *p*процессе, механизме взрывного нуклеосинтеза, представляющем собой последовательности фотоядерных реакций и поглощений заряженных частиц. Выходы *p*-процесса малы по сравнению с *s*- и *r*-процессами. Кроме того, для синтеза *p*изотопов требуется наличие достаточно тяжелых стабильных ядер, источником которых также являются процессы нейтронного захвата.

На рис. 2 представлено массовое распределение ядер химических элементов в Солнечной системе, построенное по данным химического анализа хондритов, метеоритов, состав которых наиболее близок к первичному составу вещества Солнечной системы [1]. Виден избыток легчайших изотопов с A < 4, родившихся в первичном нуклеосинтезе, за которым следует минимум, соответствующий изотопам подоболочки  $1p_{3/2}$  Li, Be и B. C массового числа 12 начинается область ядер, рождающихся в основном за счет термоядерного горения звездного вещества, в частности, pp- и CNO-циклов. Видно, что начиная с массовых чисел 54 – 58, соответствующих «железному пику», начинается существенное снижение концентраций изотопов. В области более тяжелых ядер нуклеосинтез целиком обеспечивается s- и r-процессами. На рис. 2 отмечены характерные пики, соответствующие магическим числам нейтронов 50, 82 и 126, что является указанием на высокий вклад процессов нейтронного захвата в нуклеисинтез. Более узкие пики образуются благодаря *s*-процессу, который протекает вблизи долины стабильности, в то время как *r*-процесс рождает сверх-нейтроноизбыточные ядра. Для таких экзотических изотопов могут преобладать уже не  $\beta^{-}$ -распады, протекающие без потери массы, а слабые распады с вылетом нейтронов, что приводит к размыванию и смещению пика *r*-процесса в область меньших масс.

На сегодняшний день слияние двух сверхкомпактных астрофизических объектов, двух нейтронных звезд (H3<sup>2</sup>) или нейтронной звезды и черной дыры звездной массы, принято считать основным сценарием протекания *r*-процесса [3]. Сопровождающий слияние выброс нагретого вещества является подходящей средой для образования наиболее тяжелых нерукотворных химических элементов за счет быстрого нейтронного захвата. В пользу выброса вещества H3<sup>2</sup> как важного источника *r*-изотопов говорит избыток нейтронов (средняя доля протонов в выбросе составляет  $Y_e \equiv \langle Z/A \rangle \approx 0.1$  [4]), а также сходство распространенностей тяжелых изотопов с A > 120 в симуляциях этого сценария нуклеосинтеза с распространенностями в Солнечной системе (например, [5, 6]). При этом нельзя сказать, что сценарий H3<sup>2</sup> полностью объясняет распределение *r*-изотопов во Вселенной. В ряде работ (например, [7, 8, 9]) отмечаются особенности состава старых звезд малой металличности, указывающие на заметный вклад слабого *r*-процесса, который может протекать, например, при вспышках сверхновых.

В обзорах [10, 4, 2] подробно обсуждается механизм астрофизического *r*-процесса и текущий прогресс его изучения.

## 1.2. Особенности изучения *r*-процесса

Экстремальные условия протекания r-процесса делают его экспериментальное исследование практически невозможным. Основным источником эмпирических сведений об этом механизме на сегодняшний день являются распространенности ядер химических элементов в Солнечной системе (см. рис. 2), известные благодаря исследованиям состава метеоритов-хондритов, сформировавшихся из вещества дозвездного газопылевого облака. Также важным источником сведений об r-процессе является исследование спектрального состава звезд.

Из-за невозможности воспроизведения условий астрофизического синтеза тяжелых ядер в лаборатории основным методом изучения *r*-процесса становится компьютерное моделирование. С его помощью стремятся объяснить наблюдаемые распространенности ядер в Солнечной системе. При этом само моделирование *r*-процесса, сводящееся к решению системы дифференциальных уравнений, сопряжено с рядом трудностей: огромными размерами системы, разбросом значений скоростей реакций, неопределенностью входных параметров.

Входными параметрами симуляции r-процесса являются как являющиеся макроскопическими термодинамические характеристики среды, так и микроскопические свойства задействованных в нуклеосинтезе ядер и ядерных реакций. Макроскопические параметры, такие как плотность и температура звездного вещества, в основном известны из астрофизических моделей. Результаты таких расчетов слияния нейтронных звезд представлены в работах [11, 12]. В работах [13, 14, 15] вместе с моделированием слияния нейтронных звезд проводятся симуляции синтеза ядер в r-процессе.

Большую трудность представляет получение достаточно точных значений микроскопических ядерных параметров моделирования *r*-процесса. Как показано на рис. 1, путь *r*-процесса лежит значительно ниже долины стабильности. Этот механизм нуклеосинтеза задействует экзотические нейтроноизбыточные ядра, экспериментальное изучение которых в лабораторных условиях представляется невозможным. Характеристики *r*-изотопов и реакций их образования приходится получать при помощи теоретических моделей. При этом различные ядерные модели могут давать существенно разные результаты для экзотических изотопов, например, при расчете энергий связи [16]. Неопределенности энергий связи *r*-изотопов могут существенно сказываться на результатах расчета *r*-процесса, на что указывается, например, в работах [17, 18].

Целью настоящей работы является определение чувствительности модели *r*-процесса к неопределенностям расчета масс нейтроноизбыточных ядер. Для этого нами были рассмотрены результаты трех расчетов масс нейтроноизбыточных ядер, выполненных при помощи различных ядерных моделей. При помощи этих теоретических значений масс были проведены расчеты сечений реакций нейтронного захвата и построены библиотеки астрофизических ядерных реакций, в которых учтено изменение границ области существования ядер в зависимости от используемой массовой модели. Уделено также внимание  $\beta^-$ распадам, играющим большую роль в *r*-процессе. Полученные библиотеки реакций использованы при симуляции *r*-процесса в реалистичном астрофизическом сценарии слияния двух нейтронных звезд. Различия результирующих массовых распределений *r*-изотопов позволили оценить влияние неопределенностей теоретических значений масс нейтроноизбыточных ядер на моделирование *r*процесса.

## 2. Теоретические модели в расчетах нуклеосинтеза

Моделирование астрофизического *r*-процесса состоит из двух этапов. Сперва рассчитываются характеристики задействованных ядерных реакций, которые не могут быть получены экспериментально. Затем эти данные используются для симуляции эволюции астрофизической ядерной системы вследствие процессов нуклеосинтеза. В настоящем разделе мы пойдем в обратном порядке: сперва объясним, как производится симуляция нуклеосинтеза и как именно в ней используются параметры ядерных реакций, а затем обсудим метод расчета этих параметров.

#### 2.1. Моделирование процессов нуклеосинтеза

Математически расчет нуклеосинтеза состоит в решении системы обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) первого порядка, задающих эволюцию концентраций каждого задействованного в процессе изотопа. Такая система уравнений строится для зоны ограниченного объема, в рамках которой звездное вещество считается однородным. Поиск решения существенно затруднен рядом факторов: огромными размерами системы ОДУ, большим разбросом значений скоростей ядерных реакций, неопределенностью входных параметров. Существует множество методов решения подобных систем уравнений, однако почти все они обладают ограниченной применимостью. Расчет ядерных превращений нуклеосинтеза является одной из наиболее сложных задач такого рода.

## 2.1.1. Система уравнений нуклеосинтеза

Эволюция концентрации каждого отдельного изотопа в ядерной астрофизической системе описывается дифференциальным уравнением следующего вида:

$$\frac{dy_i}{dt} = \sum_{k \in K_i} \pm \lambda_k \prod_{l \in L_k} y_l,\tag{1}$$

где  $\lambda_k$  — скорость k-й реакции,  $y_i$  — концентрация i-го изотопа,  $K_i$  — множество всех реакций, в которых i-й изотоп фигурирует в качестве исходного или продукта,  $L_k$  — множество исходных изотопов k-й реакции. Знак ± перед каждым элементом суммы 1 зависит от того, нарабатывается или расходуется i-й изотоп в k-й реакции. Ясно, что если изотоп расходуется в реакции, то он входит в  $L_k$  не менее одного раза.

Скорость реакции  $\lambda_k$  является важнейшим параметром расчета, так как именно через нее характеристики ядерных реакций влияют на эволюцию концентраций изотопов. Как говорилось выше, эти характеристики и, следовательно, значения  $\lambda_k$  в случае реакций *r*-процесса известны из теоретических ядерных моделей, что вносит в моделирование нуклеосинтеза существенные неопределенности. Исследование этих неопределенностей составляет задачу настоящей работы.

Записанные для каждого изотопа, эти уравнения образуют систему:

$$\frac{d\boldsymbol{y}}{dt} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{y}), \qquad \boldsymbol{y}\Big|_{t=0} = \boldsymbol{y}_0,$$
(2)

где  $\boldsymbol{y}, \boldsymbol{f}$  — векторы значений концентраций изотопов и правых частей уравнений (1) соответственно, а вектор  $\boldsymbol{y}_0$  содержит начальные концентрации изотопов.

Например, для реакции  ${}^{12}C(\alpha, \gamma){}^{16}O$ , протекающей со скоростью  $\lambda$ , фрагмент системы уравнений (2) записывается следующим образом:

$$\dot{y}(^{4}\text{He}) = -\lambda y(^{4}\text{He})y(^{12}\text{C}) + \dots 
\dot{y}(^{12}\text{C}) = -\lambda y(^{4}\text{He})y(^{12}\text{C}) + \dots 
\dot{y}(^{16}\text{O}) = +\lambda y(^{4}\text{He})y(^{12}\text{C}) + \dots,$$
(3)

где знак ... обозначает вклад других реакций в изменение концентраций этих ядер. Неизвестными здесь являются все концентрации изотопов y, кроме их начальных значений. В реальной астрофизической системе число изотопов исчисляется тысячами, и каждому соответствует такое уравнение. Таким образом размерность матрицы системы уравнений (2) в реалистичной модели нуклеосинтеза превышает сотни тысяч отличных от нуля элементов.

Системы уравнений, подобные (2), часто встречаются в науке, например, в задачах химической кинетики. Для их решения создано множество численных методов, но ни один из них не является универсальным. Наиболее широко применяются классические явные численные методы, в частности семейство методов Рунге-Кутты, к которым относится известный метод Эйлера. Эти методы неприменимы к задаче нуклеосинтеза из-за ее сверхжесткости. Жесткими называют системы дифференциальных уравнений, решение которых при помоци явных численных методов дает неконтролируемый рост ошибки, который не может быть устранен путем уменьшения шага интегрирования. В случае задачи нуклеосинтеза высокая жесткость обусловлена обусловлена большим разбросом коэффициентов уравнений, то есть величин скоростей протекания реакций  $\lambda$ , далее мы увидим, что астрофизические скорости ядерных реакций могут отличаться друг от друга на многие порядки. Это приводит к высокой неустойчивости системы уравнений (2) при решении ее классическими явными численными методами.

#### 2.1.2. Неявный метод Эйлера

Для решения систем уравнений высокой жесткости широко применяют неявные численные методы, которые обладают большей устойчивостью, но также и меньшей эффективностью. При численном решении системы дифференциальных уравнений вида (2) интервал времени симуляции разбивается на шаги интегрирования. Размер шагов может быть задан заранее, но для большей устойчивости размер каждого следующего шага вычисляют динамически, исходя из различных требований: на гладкость решения, на оценку ошибки и др. Вектор решения (в данном случае, концентраций изотопов) на каждом шагу вычисляется с помощью численной схемы, аппроксимирующей операцию дифференцирования в левой части системы (2). Классический метод Эйлера предлагает простейшую численную схему вида

$$\frac{d\boldsymbol{y}}{dt}(t) = \frac{\boldsymbol{y}(t + \Delta t) - \boldsymbol{y}(t)}{\Delta t} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{y}(t))$$
(4)

Как видно, значение решения  $y(t + \Delta t)$  на каждом следующем шаге явно выражается из численной схемы и вычисляется тривиально. При всей простоте данный метод не может быть использован в моделировании нуклеосинтеза, так как из-за высокой жесткости задачи для достижения приемлемой точности пришлось бы делать слишком маленькие шаги по времени.

Неявные методы отличаются от явных тем, что из их численной схемы не получается выразить решение на следующем шагу  $\boldsymbol{y}(t + \Delta t)$  явно. Вместо этого получается уравнение относительно  $\boldsymbol{y}(t + \Delta t)$ , которое приходится решать на каждом шагу интегрирования. В неявной модификации метода Эйлера схема интегрирования выглядит так:

$$\frac{d\boldsymbol{y}}{dt}(t+\Delta t) = \frac{\boldsymbol{y}(t+\Delta t) - \boldsymbol{y}(t)}{\Delta t} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{y}(t+\Delta t))$$
(5)

Из этого выражения величина  $y(t + \Delta t)$  отсюда не может быть явно выражена. Для ее вычисления приходится решать систему линейных уравнений, например, с помощью процедуры Ньютона, что существенно увеличивает трудоемкость интегрирования.

Ограничиваясь одной итерацией метода Ньютона, можно получить тривиальное уравнение относительно изменения вектора концентраций изотопов  $\Delta \boldsymbol{y} = \boldsymbol{y}(t + \Delta t) - \boldsymbol{y}(t)$ :

$$\left(\frac{I}{\Delta t} - J\right) \Delta \boldsymbol{y} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{y}_n), \tag{6}$$

где I — единичная матрица, J — якобиан правых частей системы уравнений  $(J_k^i = \partial f_i / \partial y_k)$ , на вычисление которого также уходит большое число операций.

Хотя неявные численные методы являются значительно более трудоемкими, чем явные, они более устойчивы на задачах высокой жесткости и могут применяться для моделирования нуклеосинтеза. В настоящей работе для расчета *r*-процесса мы будем использовать библиотеку SkyNet [19], которая использует простой неявный метод Эйлера. Существуют и более продвинутые неявные методы, подходящие для симуляции нуклеосинтеза, например, используемый в пакете модулей астрофизического моделирования MESA [20] неявный метод более высокого порядка точности. Кроме того, для задач химической кинетики разработан ряд специальных явных численных методов, устойчивых для решения жестких задач, например, [21]. В работе [22] подобный метод успешно применен к задаче термоядерного горения.

В данной работе мы решили остановиться на простом и надежном методе, реализованном в SkyNet, и сосредоточиться на исследовании влияния неопределенностей ядерных данных на расчет нуклеосинтеза.

## 2.1.3. Уравнение состояния

При интегрировании системы уравнений (2) вне зависимости от выбранного численного метода необходимо учитывать влияние термодинамических параметров на процессы нуклеосинтеза. В частности, величины скоростей реакций  $\lambda_k$  из уравнения (1) являются, как будет показано далее, функциями температуры среды и, следовательно, времени.

При моделировании нуклеосинтеза начальные макроскопические параметры (начальная температура, плотность и энтропия вещества) обычно известны из астрофизических расчетов. Также как минимум для одного из этих параметров должен быть задан закон изменения во времени, зависящий от выбранного сценария. Например, вещество, выброшенное в пространство при столкновении двух нейтронных звезд, можно считать равномерно расширяющимся [13], поэтому временной профиль плотности в модели *r*-процесса будет выглядеть как  $\rho \sim t^{-3}$ . Уравнение состояния вещества, в котором протекает нуклеосинтез, позволяет рассчитывать все остальные термодинамические параметры на каждом шаге интегрирования.

В библиотеку SkyNet [19], с помощью которой мы моделируем процессы нуклеосинтеза, входит уравнение состояния [23, 24], разработанное специально для расчета звездных событий. Эта модель состоит из трех независимых компонент: для фотонов, для электронов с позитронами и для тяжелых ионов. Термодинамические характеристики релятивистского электрон-позитронного газа вычисляются на основе уравнения свободной энергии Гельмгольца с помощью разработанной авторами модели процедуры интерполяции, позволяющей получать точные результаты за разумное время. Уравнение состояния газа тяжелых ионов соответствует невырожденному нерелятивистскому больцмановскому газу.

Отметим, что помимо термодинамических закономерностей при моделировании нуклеосинтеза необходимо учитывать энерговыделение ядерных реакций. Вещество, выброшенное в пространство в результате слияния нейтронных звезд, должно остывать вследствие расширения, однако  $\beta$ -распады r-процесса обеспечивают приток энергии в термодинамическую систему. В SkyNet самонагрев вещества вследствие ядерных реакций учитывается за счет добавки энерговыделения к тепловой энергии системы.

#### 2.1.4. Статистическое равновесие

В том случае, когда сильные астрофизические реакции уравновешены с обратными (например, нейтронный захват уравновешивается с фотодиссоциацией), достигается состояние статистического равновесия, при котором практически не происходит изменения концентраций изотопов в системе. Это происходит, например, при температурах свыше 5 ГК, как отмечается в статье [19].

Когда система находится в состоянии статистического баланса, для химических потенциалов каждого i-го изотопа и его нуклонов выполняется соотношение

$$\mu_i = Z_i \mu_p + N_i \mu_n \tag{7}$$

Для прямой  $\alpha$  и обратной  $\alpha'$  реакций условие статистического баланса записывается следующим образом:

$$\lambda_{\alpha} \prod_{k \in L_{\alpha}} y_k = \lambda_{\alpha'} \prod_{l \in L_{\alpha'}} y_l, \tag{8}$$

где  $L_{\alpha}$  — множество исходных изотопов реакции  $\alpha$ . Из этого уравнения, зная зависимость концентраций частиц  $y_i$  от термодинамических параметров (например, в случае больцмановского газа ионов), можно получить выражение для скорости обратной реакции, которое, как отмечается в [19], будет справедливо и для неравновесной системы.

Кроме того, вместе уравнения (7) и (8) дают дополнительную связь между концентрациями изотопов и термодинамическими параметрами в равновесной системе. В библиотеке SkyNet эта связь используется для вычисления равновесного состава вещества.

## 2.2. Статистическая модель ядерных реакций

Для моделирования процессов нуклеосинтеза необходимо знать астрофизические скорости  $\lambda$  всех задействованных ядерных реакций при различных температурах T. Скоростью ядерной реакции называют вероятность ее протекания в единицу времени на единицу концентрации каждой исходной частицы. Величина  $\lambda$  напрямую определяется сечением реакции, значения которого в случае астрофизических процессов не могут быть получены экспериментально, поэтому их приходится вычислять с помощью теоретических моделей.

При астрофизических температурах ядерные реакции  $(n, \gamma)$  и  $(\gamma, n)$  протекают в основном с образованием составного ядра. Вычисление сечений таких реакций может быть выполнено в рамках статистического подхода. Для расчета сечений и астрофизических скоростей нейтронного захвата в настоящей работе используется статистическая модель Хаузера–Фешбаха [25], реализованная в пакете моделирования ядерных реакций TALYS [26].

## 2.2.1. Интегральная формула скорости реакции

Скорость ядерной реакции  $\lambda$  рассчитывается путем свертки ее сечения с энергетическим распределением взаимодействующих частиц. Энергии нейтронов и ядер в равновесной астрофизической системе имеют распределение Максвелла-Больцмана. Кроме того при астрофизических температурах ядра находятся в возбужденных состояниях, и в условиях термодинамического равновесия заселенность уровней также должна подчиняться статистике Максвелла-Больцмана. Тем самым формула для астрофизической скорости ядерной реакции, являющейся функцией температуры среды T, принимает вид

$$\lambda(T) = \sqrt{\frac{8}{\pi m}} \frac{N_A}{(k_B T)^{3/2} G(T)} \int_0^\infty \sum_\mu \frac{(2I^\mu + 1)}{(2I^0 + 1)} \sigma^\mu(E) E \exp\left(-\frac{E + E_x^\mu}{kT}\right) dE,$$
(9)

где  $E_x^{\mu}$  и  $I^{\mu}$  — энергия и спин возбужденного уровня  $\mu$ , m — приведенная масса взаимодействующих частиц,  $k_B$  — постоянная Больцмана,  $N_A$  — число Авогадро, G(T) — статистическая сумма

$$G(T) = \sum_{\mu} \frac{(2I^{\mu} + 1)}{(2I^{0} + 1)} \exp\left(-\frac{E_{x}^{\mu}}{kT}\right)$$
(10)

Далее обсудим статистическую модель, используемую для расчета сечений астрофизических ядерных реакций.

## 2.2.2. Составное ядро

Промежуточное составное ядро образуется в тех случаях, когда время пролета частицы через ядро-мишень оказывается меньше времени протекания реакции. В этом случае энергия поглощенной частицы быстро распределяется по объему ядра-мишени, и вероятность того, что какой-то нуклон получит достаточную энергию, чтобы преодолеть нуклон-нуклонное взаимодействие и покинуть ядро, оказывается мала. Образуется квазистационарная промежуточная система — составное ядро, которое существует достаточно долгое время, чтобы его распад никак не зависел от входного канала реакции.

Механизм составного ядра для реакции захвата частицы a ядром A с вылетом из конечного ядра B частицы b можно представить в виде схемы

$$a + A \xrightarrow{\alpha} C^* \xrightarrow{\alpha'} b + B,$$
 (11)

где  $\alpha$  и  $\alpha'$  — входной и выходной каналы реакции. К такому типу реакций относится рассматриваемый в настоящей работе астрофизический радиационный захват нейтрона  $(n, \gamma)$ .

Для реакции (11) могут быть записаны законы сохранения

$$E_a + E_A = E_C = E_b + E_B \qquad \text{энергии,}$$
  

$$I + l + s = J = I' + l' + s' \qquad \text{углового момента,} \qquad (12)$$
  

$$\pi_a \pi_A (-1)^l = \Pi = \pi_b \pi_B (-1)^{l'} \qquad \text{четности,}$$

где  $E_k$  — энергии частиц, I — спин состояния ядра-мишени A, l и s — орбитальный момент и спин налетающей частицы,  $\pi_k$  — четности частиц. Величины J и  $\Pi$  — спин и четность составной системы. Штрихами отмечены угловые моменты, относящиеся к выходному каналу.

## 2.2.3. Формула Хаузера-Фешбаха

Согласно гипотезе Бора, образование и распад составного ядра являются независимыми процессами:

$$\sigma^{C}_{\alpha\alpha'} = \sigma^{C}_{\alpha} P_{\alpha'} = \sigma^{C}_{\alpha} \frac{\Gamma_{\alpha'}}{\Gamma}$$
(13)

где  $\sigma_{\alpha}$  — сечение образования составного ядра во входном канале  $\alpha$ ,  $P_{\alpha'}$  — вероятность распада промежуточной системы по каналу  $\alpha'$ ,  $\Gamma_{\alpha'}$  и  $\Gamma$  — ширина канала  $\alpha'$  и полная ширина распада составного ядра.

Величина  $\sigma_{\alpha,\alpha'}$  связывает большое число начальных и конечных состояний системы, причем само промежуточное состояние в общем случае складывается из гигантского числа узких резонансов. При вычислениях сечений производится усреднение по всем этим состояниям, причем ширины каждого такого состояния  $\Gamma_{\alpha}$  связаны с коэффициентами прохождения  $T_{\alpha}$ , которые могут быть рассчитаны из оптической модели.

Из квантовой теории столкновений в общем случае сечение какого-либо канала  $\alpha, \alpha'$  реакции может быть записано как

$$\sigma_{\alpha\alpha'} = \pi \frac{1}{k^2} \frac{2J+1}{(2I+1)(2s+1)} |\delta_{\alpha\alpha'} - S_{\alpha\alpha'}|^2,$$
(14)

где  $S_{\alpha\alpha'}$  — матричный элемент S-матрицы, соответствующий асимптотической амплитуде выходного канала реакции. Среднее значение этой величины напрямую связано с  $T_{\alpha}$ :

$$T_{\alpha} \equiv 1 - |\bar{S}_{\alpha\alpha}|^2 \tag{15}$$

В окончательной форме формула Хаузера–Фешбаха для реакции составного

ядра может быть записана следующим образом:

$$\sigma_{\alpha\alpha'} = \pi \frac{1}{k^2} \sum_{J=\text{mod}\ (I+s,1)}^{l_{\text{max}}+I+s} \sum_{\Pi=-1}^{1} \frac{2J+1}{(2I+1)(2s+1)} \\ \times \sum_{j=|J-I|}^{J+I} \sum_{l=|j-s|}^{j+s} \sum_{j'=|J-I'|}^{J+I'} \sum_{l'=|j-s'|}^{j'+s'} \delta_{\pi}(\alpha) \delta_{\pi}(\alpha') \\ \times \frac{\left\langle T_{\alpha lj}^{J}(E_{a}) \right\rangle \left\langle T_{\alpha' l'j'}^{J}(E_{a'}) \right\rangle}{\sum_{\alpha'',l'',j''} \delta_{\pi}(\alpha'') \left\langle T_{\alpha'' l''j'}^{J}(E_{a''}) \right\rangle} W_{\alpha lj\,\alpha' l'j'}^{J}$$
(16)

Множитель  $W^J_{\alpha lj\,\alpha' l'j'}$ , так называемый множитель флуктуаций ширин, отвечает здесь за поправки усреднения состояний, а множители  $\delta_{\pi}(\alpha)$ ,  $\delta_{\pi}(\alpha')$  отвечают за сохранение четности:

$$\delta_{\pi}(\alpha) = \begin{cases} 1, \ \text{если } \pi_{a}\pi_{A}(-1)^{l} = \Pi\\ 0, \ \text{если } \pi_{a}\pi_{A}(-1)^{l} \neq \Pi \end{cases}$$
(17)

Таким образом в TALYS вычисление сечений ядерных реакций, протекающих через составное ядро, производится суммированием вкладов всех разрешенных законами сохранения входных и конечных каналов и состояний промежуточного составного ядра.

## 3. Массы и энергии связи *г*-изотопов

Массы взаимодействующих и результирующих частиц являются важнейшими параметрами расчета сечений ядерной реакции при помощи статистической модели. При этом, как видно из работы [16], предсказания масс экзотических изотопов при помощи различных ядерных моделей существенно различаются между собой. Важно исследовать влияние этих неопределенностей на расчеты сечений астрофизических ядерных реакций и на результаты моделирования *r*процесса. Для этого мы рассмотрим три модели, позволяющие рассчитывать массы ядер и использующие разные подходы.

По методу описания ядерной материи теоретические модели делятся на коллективные, или макроскопические, и микроскопические. Коллективный подход, к которому относится, например, известная формула Вайцзеккера, рассматривает ядро как единое целое, например, как каплю несжимаемой жидкости. В его пользу свидетельствуют деформации ядер, колебательные и вращательные полосы в спектрах. При необходимости описать более тонкие одночастичные эффекты прибегают к микроскопическим моделям, а также коллективным моделям с микроскопическими поправками. Микроскопические модели зачастую основаны на принципе эффективного потенциала, сводящем задачу взаимодействия многих тел к задаче невзаимодействующих тел в общем потенциале.

Для расчета астрофизических скоростей реакций мы используем результаты трех ядерных моделей, реализующих разные подходы к описанию ядерной материи: макро-микроскопической модели FRDM2012 [27], микроскопической модели HFB-24 [28] и феноменологического метода локальных массовых соотношений LMR2021 [29]. Настоящий раздел посвящен их обзору и сравнению.

## 3.1. Макро-микроскопическая модель FRDM2012

Массовая модель FRDM2012 [27] реализует коллективный подход к описанию структуры ядра при помощи продвинутого многопараметрического приближения капли несжимаемой жидкости, дополняя его феноменологическими микроскопическими поправками. Микроскопическая часть модели состоит из процедуры Струтинского [30, 31] для учета оболочечных поправок и метода Липкина–Ногами [32, 33] для учета эффектов спаривания.

#### 3.1.1. Приближение жидкой капли

Макроскопическая основа FRDM2012 развивает подход известной полуэмпирической формулы Бете-Вайцзеккера для вычисления энергии связи. Вместо самой энергии связи в FRDM2012 рассматривается величина потенциальной энергии атомного ядра, зависящая от числа протонов и нейтронов, а также формы нуклида. Выражение для вычисления потенциальной энергии строится в предположении, что ядро является каплей заряженной жидкости с некоторым дополнительными феноменологическими поправками, которые позволяют усредненно учесть некоторые микроскопические эффекты до применения более тонких методов, о которых будет говориться далее. В выражение входят вклады объемной и поверхностной энергии, энергии кулоновского взаимодействия с учетом поверхностных эффектов и поправкой на формфактор протона, энергия Вигнера, усредненная энергия спаривания.

В FRDM2012 влияние деформаций обеспечено и коллективными, и микроскопическими вкладами в потенциальную энергию. Определение энергии основного состояния осуществляется путем минимизации потенциальной энергии по форме ядра, что позволяет определять не только ядерную массу, но и параметры деформации. В работе [27] приводятся значения параметров  $\beta_2$ ,  $\beta_3$ ,  $\beta_4$  и  $\beta_6$ , вычисленные при помощи модели FRDM2012.

#### 3.1.2. Метод оболочечных поправок Струтинского

В подходе Струтинского оболочечные поправки рассматриваются как флуктуации над усредненным значением энергии системы, в котором отсутствуют вклады оболочечных эффектов. В предположении отсутствия остаточного протон-нейтронного взаимодействия эти поправки должны вычисляться отдельно для каждого типа нуклонов:  $\delta E_n$  и  $\delta E_p$  для нейтронов и протонов соответственно. Для обоих типов частиц оболочечная поправка определяется как разность суммы одночастичных энергий  $\epsilon_i^q$  и усредненной энергии  $\delta E_q$ 

$$\delta E_q(N_q,\beta) = \sum_{i=1}^{N_q} \epsilon_i^q(\beta) - \tilde{E}_q(N_q,\beta), \qquad (18)$$

где под  $\beta$  имеется в виду деформация, а под величиной  $N_q$  — число нуклонов соответствующего типа.

Ключевой частью метода Струтинского является вычисление величины  $\tilde{E}_q$ , то есть усреднение суммы одночастичных энергий таким образом, чтобы в ней не осталось оболочечных эффектов. Вообще сумму одночастичных уровней можно выразить через плотность уровней  $g_q$ :

$$E_q = \int_{-\infty}^{\lambda} Eg_q(E)dE,$$
(19)

где  $\lambda$  — энергия Ферми, которую можно найти из условия сохранения числа частиц

$$N_q = \int_{-\infty}^{\lambda} g_q(E) dE \tag{20}$$

Предполагается, что плотность уровней  $g_q$  представляет собой сумму гладкой части  $\tilde{g}_q$  и осциллирующей вокруг нее компоненты  $\delta g_q$ , соответствующей оболочечным эффектам:  $g_q(E) = \tilde{g}_q(E) + \delta g_q(E)$ . В таком случае вычисление усредненной энергии  $\tilde{E}_q$  подразумевает устранение осциллирующей части плотности уровней  $\delta g_q$ .

В методе усреднения Струтинского величина  $\tilde{g_q}$  ищется в виде

$$\tilde{g}_q(E) = \frac{1}{\gamma} \sum_i f\left(\frac{E - \epsilon_i}{\gamma}\right),\tag{21}$$

где  $\gamma$  — параметр сглаживания, а f(x) — некая положительная аналитическая функция, нормированная на единицу, симметричная и имеющая максимум при x = 0. Если в оболочечной компоненте  $\delta g_q(E)$  доминирует осцилляция с периодом  $\hbar\omega$  (по сути соответствующая главным оболочкам), то, выбрав параметр  $\gamma \gtrsim \hbar\omega$ , можно получить гладкую функцию  $\tilde{g}_q(E)$ .

Выбор усредняющей функции f(x) ограничивается требованием на независимость величины  $\tilde{g}_q(E)$  от величины  $\gamma$ . Может быть использовано следующее усреднение одночастичного спектра с гауссовой функцией:

$$\tilde{g}_q(E) = \frac{1}{\gamma\sqrt{\pi}} \sum_i P_M\left(\frac{E-\epsilon_i}{\gamma}\right) \exp\left\{\left(\frac{E-\epsilon_i}{\gamma}\right)^2\right\},\tag{22}$$

где  $P_M(x)$  — полином степени M, который называют корректирующим полиномом. Его степень M становится еще одним добавочным параметром после параметра сглаживания  $\gamma$ .

## 3.1.3. Поправки для учета эффектов спаривания

Используемый в FRDM2012 метод Липкина–Ногами [32, 33] основан на методе Бардина–Купера–Шриффера (БКШ) [34], изначально разработанном для описания эффектов сверхпроводимости и применимого к вычислению парных корреляций в ядре. Волновые функции БКШ нарушают некоторые законы сохранения, и метод Липкина–Ногами решает эту проблему. Мы ограничимся качественным описанием подхода БКШ к описанию эффектов спаривания, так как даже в исходном виде он с успехом использовался для предсказания экспериментальных результатов.

Подход рассматривает протоны и нейтроны по отдельности, так как протоннейтронные корреляции полагаются отсутствующими, а итоговая система уравнений одинакова для обоих типов нуклонов. Гамильтониан парного взаимодействия инвариантен относительно обращения времени, что означает двойное вырождение уровней, каждому из которых соответствуют два сопряженных состояния  $|k\sigma\rangle$  ( $\sigma = +, -$ ) между которыми и происходят парные взаимодействия. Полагается, что константа всех таких взаимодействий G неизменна для всех переходов между состояниями. Скоррелированность нуклонов приводит к тому, что они приобретают дополнительную энергию и оказываются на более высоких уровнях. Существует возможность преодоления нуклонами энергии Ферми, из-за чего происходит размытие края заселенности энергетических уровней.

С помощью преобразования Боголюбова из операторов рождения и уничтожения нуклонов  $a_{k\sigma}^+$  и  $a_{k\sigma}$  строятся операторы квазичастиц, соответствующих парам спаренных нуклонов:

$$a_{k\sigma} = u_k b_{k-\sigma} + \sigma v_k b_{k\sigma}^+, \tag{23}$$

где  $v_k$  соответствует доле заселенности k-го уровня квазичастицами и выполняется условие  $u_k^2 + v_k^2 = 1$ , а также закон сохранения числа нуклонов рассматриваемого типа:

$$n = 2\sum_{k} v_k^2 \tag{24}$$

Из этих положений о парных корреляциях в теории БКШ строится система уравнений:

$$n = \sum_{k} \left[ 1 - \frac{\varepsilon_k - \lambda}{\sqrt{(\varepsilon_k - \lambda)^2 + \Delta^2}} \right],$$
  

$$\frac{2}{G} = \sum_{k} \frac{1}{\sqrt{(\varepsilon_k - \lambda)^2 + \Delta^2}},$$
  

$$v_k^2 = \frac{1}{2} \left[ 1 - \frac{\varepsilon_k - \lambda}{\sqrt{(\varepsilon_k - \lambda)^2 + \Delta^2}} \right],$$
  

$$\varepsilon_k = e_k - Gv_k^2,$$
  
(25)

где  $e_k$  — энергии одночастичных состояний,  $\lambda$  — химический потенциал, определяемый энергией верхнего занятого уровня, а в последние два уравнения записываются для всех состояний k. Корреляционная функция  $\Delta$  определяется выражением

$$\Delta = G \sum_{k} u_k v_k \tag{26}$$

и в четных ядрах приблизительно соответствует половине энергии возбуждения первого состояния.

Система уравнений (25) решается относительно  $v_k$ ,  $\lambda$  и G (или  $\Delta$ , в зависимости от того, какая величина известна). Поправка, которую дают эффекты спаривания к результатам жидкокапельной модели, определяется выражением

$$\delta E = \sum_{k} (2v_k^2 - n_k)e_k - \frac{\Delta^2}{G} - G\sum_{k} v_k^4 + \frac{1}{2}G\sum_{k} n_k, \qquad (27)$$

где  $n_k$  — число нуклонов на k-ом дважды-вырожденном уровне в отсутствие сил спаривания.

## 3.2. Микроскопическая модель HFB-24

Модель HFB-24 [28] является одним из представителей семейства реализаций метода Хартри–Фока–Боголюбова с потенциалом взаимодействия Скирма, разрабатываемой группой авторов с 2003 года [35].

Метод Хартри–Фока позволяет приближенно решать уравнение Шредингера для системы многих тел, переходя к случаю движения невзаимодействующих частиц в самосогласованном потенциале. В методе Хартри–Фока–Боголюбова, развивающем этот подход, вместо волновых функций отдельных частиц рассматриваются волновые функции пар нуклонов, что позволяет учитывать в расчете эффект спаривания нуклонов.

В настоящем разделе мы кратко опишем подход Хартри–Фока к описанию многочастичных квантовых систем и исторический вариант потенциала Скирма.

## 3.2.1. Метод Хартри-Фока

Изначально Д. Хартри предложил описывать квантовую систему A частиц (например, электронные оболочки атома или атомное ядро) с помощью факторизованной волновой функции  $\psi(x_1, ..., x_A) = \phi_1(x_1) \cdot ... \cdot \phi_A(x_A)$ , где  $x_j$  — пространственные координаты. Недостатком этой функции является отсутствие симметрии относительно перестановки частиц, неразличимых электронов и нуклонов. В дальнейшем В.А. Фок предложил использовать детерминант Слэтера:

$$\psi(\xi_1, \dots, \xi_A) = \frac{1}{\sqrt{A!}} \cdot \det\left[\phi_i(\xi_j)\right],\tag{28}$$

где  $\xi_j$  обозначает пространственные, спиновые и изоспиновые координаты. Эта функция уже правильно учитывает неразличимость электронов в атомных оболочках или нуклонов в ядре.

Оператор Гамильтона многочастичной квантовой системы может быть записан в виде суммы оператора кинетической энергии и оператора взаимодействия частиц между собой. С учетом двух- и трехчастичных взаимодействий можно записать следующее выражение для полной энергии системы:

$$E_{HF} = \langle \psi | T + V | \psi \rangle = \sum_{i} \langle i | t_i | i \rangle + \sum_{i < j} \langle i j | v_{ij} | i j \rangle + \sum_{i < j < k} \langle i j k | v_{ijk} | i j k \rangle, \quad (29)$$

гдеT-оператор кинетической энергии, <br/>аV-оператор взаимодействий между нуклонами.

С помощью вариационного принципа и условия нормировки волновых функций  $\sum_i \int \phi_i^* \phi_i dx = A$  может быть составлено уравнение на волновые функции системы, при которых реализуется состояние с наименьшей энергией, то есть в

случае с атомным ядром основное состояние:

$$\frac{\delta}{\delta\phi_{\alpha}^{*}}\left[E_{HF} - \sum_{i} e_{i} \int |\phi_{i}|^{2} dx\right] = 0, \qquad (30)$$

где множители Лагранжа  $e_i$  окажутся энергиями отдельных частиц системы. Действительно, выполнив дифференцирование, можно получить систему уравнений уравнений, соответствующих уравнениям Шредингера для волновой функции каждой частицы:

$$h \left| \phi_i \right\rangle = e_i \left| \phi_i \right\rangle \tag{31}$$

Одночастичные гамильтонианы  $h_i$  вместо потенциалов взаимодействия частиц будут содержать лишь взаимодействие с самосогласованным полем, являющимся усреднением парных взаимодействий. Сложность заключается в том, что это поле в общем случае является функционалом одночастичных волновых функций, поэтому его и называют самосогласованным. Из-за этого система уравнений Хартри-Фока обычно решается методом последовательных приближений, начиная с некой приближенной волновой функции системы.

## 3.2.2. Потенциал Скирма

В качестве потенциала двухчастичного взаимодействия  $v_{ij}$  из выражения (29) наиболее широко применяется потенциал Скирма. Он имеет следующий вид:

$$v_{12} = t_0 (1 + x_0 P_\sigma) \delta_{12} + \frac{1}{2} t_1 (1 + x_1 P_\sigma) \left[ \boldsymbol{k}^{\dagger 2} \delta_{12} + \delta_{12} \boldsymbol{k}^2 \right] + t_2 (1 + x_2 P_\sigma) \boldsymbol{k}^{\dagger} \delta_{12} \boldsymbol{k} + i W_0 \boldsymbol{k}^{\dagger} \delta_{12} \times (\boldsymbol{\sigma}_1 + \boldsymbol{\sigma}_2) \boldsymbol{k},$$
(32)

где  $\delta_{12} = \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ , а оператор  $\mathbf{k}$  отвечает импульсу относительного движения частиц

$$\boldsymbol{k} = \frac{i}{2}(\nabla_1 - \nabla_2) \tag{33}$$

Оператор  $P_{\sigma}$  является оператором обмена спинами:

$$P_{\sigma} = \frac{1}{2} (1 + \boldsymbol{\sigma}_1 \boldsymbol{\sigma}_2) \tag{34}$$

Величины  $t_k, x_k$  и  $W_0$  являются параметрами модели.

Потенциал двухчастичного взаимодействия (32) может быть получен разложением в ряд Тейлора модельного гауссового потенциала с эффектом обмена спинами и изоспинами в предположении короткодействия ( $\mu \ll k_F^{-1}$ ):

$$v(r) = e^{-(r/\mu)^2} (W + BP_{\sigma} - HP_{\tau} - MP_{\sigma}P_{\tau})$$
(35)

Трехчастичное взаимодействие приближенно можно представить в виде силы с нулевым радиусом вида

$$v_{123} = t_3 \delta_{12} \delta_{23} \tag{36}$$

Можно показать, что в четно-четных ядрах такой потенциал может быть сведен к двухчастичному потенциалу, зависящему от плотности ядерной материи  $\rho(\mathbf{r})$ :

$$\frac{1}{6}t_3(1+x_3P_{\sigma})\rho(\frac{r_1+r_2}{2})\delta_{12}$$
(37)

Этот потенциал обобщают на случай любых ядер введением параметра  $\gamma$ 

$$\frac{1}{6}t_3(1+x_3P_{\sigma})\rho^{\gamma}(\frac{r_1+r_2}{2})\delta_{12},$$
(38)

Потенциал двухчастичного взаимодействия (32) с добавкой (38) называется потенциалом Скирма [36]. В классическом варианте он обладает небольшим числом параметров:  $x_0$ ,  $x_1$ ,  $x_2$ ,  $x_3$ ,  $t_0$ ,  $t_1$ ,  $t_2$ ,  $t_3$ ,  $W_0$  и  $\gamma$ , значения которых могут быть подсчитаны с помощью экспериментальных данных. В реалистичных ядерных моделях потенциал Скирма используется вместе с членами, отвечающими за кулоновское взаимодействие, эффект спаривания нуклонов и оболочечные поправки. В современных вариантах потенциал входят продвинутые поправки, позволяющие, например, учитывать вклад тензорных сил. Впервые ядерная модель, основанная на методе Хартри–Фока с потенциалом Скирма, была представлена в работе [37]. Сегодня подход Скирма–Хартри–Фока является одним из наиболее широко используемых методов микроскопического описания атомных ядер, существует большое число его вариантов и параметризаций.

#### 3.3. Метод локальных массовых соотношений LMR2021

В отличие от рассмотренных выше ядерных моделей, подход локальных массовых соотношений не описывает структуру и физику ядра, а использует закономерности, связывающие массы соседних изотопов. Обычно это дифференциальные выражения, которые можно применять рекурсивно, начиная с ядер, энергии связи которых известны из эксперимента, и уходя сколь угодно далеко в область экзотических изотопов. Таким образом, имея набор экспериментальных данных, можно шаг за шагом получать массы нуклидов вплоть до границ области существования ядер.

Метод локальных массовых соотношений предложен в [38] и актуален до сих пор благодаря высокой точности (отмеченной, например, в [39]) при сравнительной простоте вычислений. Еще одним достоинством подхода является разнообразие вариантов самого массового соотношения: можно подобрать такое выражение, которое будет наиболее удобно в конкретном исследовании.

#### 3.3.1. Остаточное протон-нейтронное взаимодействие

В настоящей работе наряду с таблицами FRDM2012 и HFB-24 используется таблица теоретических ядерных масс LMR2021 [29], рассчитанная при помощи соотношения, которое связывает массы четырех соседних изотопов, расположенных на NZ-диаграмме в виде квадрата два на два, через энергию остаточного протон-нейтронного взаимодействия  $\Delta_{np}$ . Эта величина введена в работе [40] и впервые использовалась для оценки энергий связи ядер в [41]. Для ядра, состоящего из Z протонов и N нейтронов, величина  $\Delta_{np}$  выражается как

$$\Delta_{np}(N,Z) = S_{np}(N,Z) - [S_p(N-1,Z) + S_n(N,Z-1)] = B(N,Z) + B(N-1,Z-1) - B(N,Z-1) - B(N-1,Z),$$
(39)

где  $S_n, S_p, S_{np}$  — энергии отделения нуклонов и их пары, а B(N, Z) — энергия связи ядра с N нейтронов и Z протонов.

Таким образом масса любого ядра может быть вычислена, если известны энергии связи трех соседних изотопов, образующих вместе с рассматриваемым ядром квадрат на NZ-диаграмме, а также соответствующее значение энергии  $\Delta_{np}$ . В ряде случаев для одного ядра можно построить несколько таких квадратов, тогда в качестве оценки неизвестной энергии связи имеет смысл брать средний результат.

#### 3.3.2. Аппроксимация энергии протон-нейтронного взаимодействия

На рис. З показана экспериментальная зависимость энергии протон-нейтронного взаимодействия от массового числа. Как видно, для ядер с четными и нечетными массовыми числами по отдельности величина  $\Delta_{np}$  может быть аппроксимирована гладкой функцией. Исключение составляют лишь легкие нуклиды, оболочечные эффекты в которых приводят к сильным флуктуациям исследуемой величины, а также симметричные ядра, в которых остаточное взаимодействие протона и нейтрона особенно сильно и выбивается из общей зависимости. Исключив эти изотопы из выборки, можно аппроксимировать ее, например, зависимостью от A в отрицательной степени.

В ранних работах [43, 44] авторы LMR2021 разбивали массив данных на несколько областей по значению массового числа, для каждого из которых делалась отдельная аппроксимация. В качестве модельной функции использовалось выражение

$$\Delta_{np}^{\text{amp}} = C_1 + C_2 A^{-1}, \tag{40}$$

где  $C_1$  и  $C_2$  являются параметрами аппроксимации, причем для нечетных ядер полагалось  $C_2 = 0$ , то энергия протон-нейтронного взаимодействия, независящая от A. В более новой работе [29] была выбрана другая модельная функция:

$$\Delta_{np}^{\text{annp}} = \alpha A^{\beta}, \tag{41}$$



**Рис. 3.** Экспериментальная зависимость величины  $\Delta_{np}$  от массового числа, построенная по данным AME2020 [42]. Разными цветами отмечены четные и нечетные ядра, а также ядра с равным числом протонов и нейтронов. Черными линиями показаны аппроксимации зависимости, полученные в работе [29].

где  $\alpha$  и  $\beta$  являются параметрами аппроксимации. Использование степени  $\beta$  массового числа A в качестве подгоночного параметра позволило отказаться от разбиения выборки исходных данных на диапазоны по массе изотопов. При этом, как показано в [29], новая модельная функция (41) выигрывает у старой (40) в точности аппроксимации при использовании одной и той же исходной выборки данных.

В настоящей работе под массовой таблицей LMR2021 имеются в виду результаты работы [29], в которой в качестве исходной выборки для аппроксимации использовалась последняя редакция базы данных AME2020 [42]. На рис. З черными линиями показаны результаты этой аппроксимации.

#### 3.4. Оценка точности моделей ядерных масс

Описанные в настоящем разделе ядерные модели использовались нами для расчета скоростей реакций нейтронного захвата, участвующих в астрофизическом *r*-процессе. Выбор именно этих моделей обусловлен тем, что каждая из них реализует отдельный подход к предсказанию масс экзотических ядер. Будет интересно посмотреть, как различные методы расчета ядерных масс влияют на результаты моделирования *r*-процесса.

Для нас наиболее интересны предсказания масс изотопов с большим из-



**Рис. 4.** Разница теоретических энергий связи из таблиц FRDM2012 [27], HFB-24 [28] и специальной версии LMR2021 [29] (см.пояснение в тексте) и экспериментальных значений из базы данных AME2020 [42].

бытком нейтронов, которые не могут быть получены в лабораторных условиях. Оценить точность теоретических моделей в этой области NZ-диаграммы не представляется возможным в силу отсутствия экспериментальных данных. Тем не менее можно проанализировать точность предсказания моделей вблизи долины стабильности. Для этого мы исследовали отклонения теоретических энергий связи от экспериментальных значений из базы данных AME2020 для ряда ядер. При этом в качестве таблицы LMR2021 использовалась специальная версия, рассчитанная описанным выше методом, но на основе базы данных AME2016, а не более новой AME2020. Использование именно этой версии таблицы обусловлено тем, что в массовую таблицу LMR2021 исходные экспериментальные данные входят без изменений, поэтому сравнивать стандартную версию таблицы с AME2020 было бы некорректно.

На рис. 4 представлены результаты этого сравнения. Среднеквадратичные отклонения составляют 0.73 МэВ для HFB-24, 0.89 МэВ для FRDM2012 и 0.37 МэВ для специальной версии LMR2021. Как видно, для новых экспериментальных данных, появившихся в последней версии AME2020 предсказания всех трех моделей имеют значительные флуктуации в области легких ядер. Для массовых чисел A > 120 модель FRDM2012 заметно завышает, а HFB-24 занижает величину энергии связи. Метод локальных массовых соотношений LMR2021 при этом обладает наивысшей точностью. Это может быть связано с тем, что методом LMR2021 коллективные и микроскопические эффекты учитываются неявно за счет исходных экспериментальных данных, не делается

никаких сильных предположений о структуре и физике ядер.

Однако точность предсказаний на малом удалении от долины стабильности не гарантирует ее сохранение в области сверхнейтроноизбыточных изотопов, где в основном протекает *r*-процесс. Безусловно для развития понимания астрофизического *r*-процесса и нуклеосинтеза в целом необходимо совершенствовать наши представления о физике нейтроноизбыточных ядер.

# 4. Подготовка ядерных данных для расчета *r*-процесса

Ядерные характеристики, такие как энергия связи, определяют величины скоростей ядерных реакций, непосредственно влияющих на протекание *r*-процесса. Для моделирования *r*-процесса необходимо располагать значениями скоростей нейтронного захвата, β-распада и других реакций, протекающих при астрофизических условиях. При этом ошибки определения ядерных масс могут приводить к большим неопределенностям в расчете скоростей реакций и, как следствие, сказываться на результатах симуляций механизмов нуклеосинтеза.

Настоящий раздел посвящен описанию проведенных нами расчетов скоростей  $(n, \gamma)$ , анализу полученных результатов, а также методики формирования из них баз данных астрофизических ядерных реакций, которые можно использовать при моделировании r-процесса.

## 4.1. Расчет скоростей нейтронного захвата в программе TALYS

В настоящей работе для исследования чувствительности модели r-процесса к выбору теоретических значений масс нейтроноизбыточных ядер мы рассчитали скорости реакции  $(n, \gamma)$  r-процесса с помощью программы TALYS [26], используя три различные массовые таблицы: FRDM2012, HFB-24 и LMR2021. В настоящем разделе обсуждаются некоторые практические детали проведенных расчетов и анализируются их результаты.

## 4.1.1. Массы ядер как параметры расчета

Программа TALYS [26], которую мы использовали для расчета сечений и скоростей реакции  $(n, \gamma)$ , позволяет задавать различные параметры статистической модели, в том числе теоретические массы ядер. Мы использовали микроколлективную модель FRDM2012 [27] и микроскопическую модель HFB-24 [28], внесенные в состав пакета TALYS его разработчиками, а также феноменологический метод LMR2021, предсказания которого были переведены нами в формат TALYS.

Помимо таблиц теоретических масс ядер, в TALYS внесена таблица экспериментальных масс, построенная на основе базы данных AME2003 [45]. В наших расчетах при наличии экспериментальных масс предпочтение отдавалось им. Наконец, если при расчете TALYS требуются значения масс, отсутствующие и в экспериментальной, и в теоретической таблице, то программа использует аналитическую формулу Дуфло-Цукера [46].

## 4.1.2. Модификация исходного кода TALYS

В исходный код программы TALYS нами было внесено изменение, делающее сетку температур, по которой производится расчет астрофизических скоростей, равномерной и более густой. Эта правка никак не влияет на работу статистической модели ядерных реакций, лишь делает выходные данные более подробными ценой некоторого увеличения времени расчета. Все расчеты TALYS, использовавшиеся в настоящей работе, получены на этой измененной версии программы.

## 4.1.3. Результаты расчета сечений реакции $(n, \gamma)$ с помощью TALYS

В режиме расчета астрофизических скоростей TALYS вычисляет сечения реакции и интегрирует их в соответствии с формулой (9). Прежде чем искать скорости реакций, мы запустили TALYS в режиме расчета сечений для ряда реакций нейтронного захвата, используя значения масс FRDM2012, HFB-24 и LMR2021, чтобы проанализировать влияние массовой модели на величины сечений. Результаты представлены на рис. 5. Как видно, наибольшие различия в сечениях, полученных с использованием разных массовых моделей, относятся к низкоэнергетической области, в то время как при энергиях 5 – 10 МэВ графики оказываются очень схожи и могут даже, как в случае с реакций <sup>142</sup>In( $n, \gamma$ )<sup>143</sup>In, практически сливаться. При этом как раз энергии частиц до 0.5 МэВ наиболее интересны с точки зрения астрофизики. Таким образом можно ожидать существенного влияния выбора массовой ядерной модели на результаты моделирования r-процесса.

Видно, что в ряде случаев сечения, полученные при помощи массовой модели FRDM2012, превышают остальные сечения, однако это не всегда так: например, в реакции <sup>186</sup>Tb $(n, \gamma)^{187}$ Tb сечение для массовой модели HFB-24. Заметно также, что для ядер с нечетным числом нейтронов вариация массовой модели приводит к большим расхождениям в сечениях  $(n, \gamma)$ , чем для соседних изотопов с четным числом нейтронов. Например, на рис. 5д сечение  $(n, \gamma)$  на четно-четном ядре <sup>236</sup>Pb, полученное при помощи модели LMR2021, заметно отличается от результатов остальных массовых моделей, однако это различие не превышает отклонение спектра FRDM2012 от спектров прочих моделей для нейтронного захвата на изотопе <sup>237</sup>Pb с одним неспаренным нейтроном (см. рис. 5е).

Любопытно, как разные массовые модели показывают стремление к некому единому пределу в тех или иных областях энергий. Уже отмечалось, что при энергиях выше 5 МэВ зависимости сечений  $(n, \gamma)$  для многих ядер сходятся. Для изотопа <sup>141</sup>In наблюдается сближение сечений FRDM2012 и LMR2021 вблизи пика некого порогового эффекта при энергии 1 МэВ. Для изотопа <sup>236</sup>Pb сечения HFB-24 и FRDM2012 очень близки в области низких энергий, однако при энергиях выше 0.1 МэВ сечение HFB-24 становится ближе к результатам



**Рис. 5.** Сечения реакции  $(n, \gamma)$  на некоторых нейтроноизбыточных изотопах индия, тербия и свинца, полученные с помощью программы TALYS с использованием различных массовых моделей.

модели LMR2021. Напротив, у изотопа <sup>237</sup>Pb сначала наблюдается близость сечений HFB-24 и LMR2021, но при энергии около 2 МэВ они расходятся, и график HFB-24 устремляется к графику сечений, полученному при помощи модели FRDM2012. Все это указывает на сложную связь сечений и ядерных масс.

## 4.1.4. Результаты расчета скорости реакции $(n, \gamma)$ с помощью TALYS

При помощи программы TALYS нами были выполнены расчеты скорости реакции  $(n, \gamma)$  на каждом изотопе, содержащемся в массовых таблицах FRDM2012, HFB-24 и LMR2021, с использованием содержащихся в них теоретических значений масс. Результаты расчетов для некоторых нейтроноизбыточных ядермишеней представлены на рис. 6.

Поскольку скорость реакции получают путем свертки сечения реакции с распределением взаимодействующих частиц по энергии, представленные результаты соотносятся с графиками сечений на 5. Точно также в области высоких температур (т.е. высоких средних энергий частиц) присутствует сближение скоростей, полученных с использованием разных массовых моделей. С другой стороны, как и в случае с сечениями, чувствительность расчета скоростей к выбору массовой модели для ядер с нечетным числом нейтронов оказывается выше, чем для соседних изотопов с четным числом нейтронов. Особенно хорошо это видно по графику скорости реакции <sup>141</sup>In $(n, \gamma)^{142}$ In на рис. 6а с различиями в области низких температур почти на порядок. Для изотопов свинца на рис. 6д и 6е, как и в случае с сечениями, скорость HFB-24 при низких температурах тяготеет к результатам FRDM2012 и LMR2021, соответственно, но в области высоких температур устремляется к результатам другой модели.

## 4.1.5. Нейтронный захват за границей существования ядер

Во всех рассмотренных нами массовых таблицах присутствуют изотопы, находящиеся за областью существования ядер, то есть имеющие отрицательные энергии отделения протона  $B_p$  или нейтрона  $B_n$ :

$$B_p(A, Z) = E_{\rm cB}(A, Z) - E_{\rm cB}(A - 1, Z - 1),$$
  

$$B_n(A, Z) = E_{\rm cB}(A, Z) - E_{\rm cB}(A - 1, Z),$$
(42)

где  $E_{\rm cb}$  — энергия связи ядра, зависящая от выбора массовой модели. При отрицательных значениях  $B_p$  или  $B_n$  ядро фактически не существует.

Мы провели расчеты скоростей нейтронного захвата в том числе и на этих несуществующих ядрах, чтобы убедиться, что их учет при моделировании *r*процесса не будет приводить к некорректным результатам. На рис. 7 представлены зависимости теоретических скоростей реакции  $(n, \gamma)$  при T = 2 ГК на нейтроноизбыточных изотопах тербия, а также энергии отделения нейтрона  $B_n$ 



**Рис. 6.** Скорости реакции  $(n, \gamma)$  на некоторых нейтроноизбыточных изотопах индия, тербия и свинца, полученные с помощью программы TALYS с использованием различных массовых моделей.



**Рис. 7.** Сверху: скорости нейтронных захватов на нейтроноизбыточных изотопах тербия, рассчитанные с помощью различных таблиц ядерных масс при T = 2 ГК. Снизу: энергии отделения нейтронов для нейтроноизбыточных изотопов тербия по данным тех же массовых таблиц.

для тех же ядер, рассчитанные по данным рассматриваемых нами массовых моделей. Как видно, начиная с массового числа 192 для некоторых, в первую очередь нечетно-нечетных изотопов  $B_n$  резко падает, доходя до отрицательных значений. При этом начинаются сильные колебания скорости  $(n, \gamma)$ : если конечное ядро имеет отрицательную  $B_n$ , то и скорость реакции снижается на порядки.

Таким образом включение реакций  $(n, \gamma)$  с образованием несвязанных нейтроноизбыточных ядер в симуляцию *r*-процесса не должно существенно повлиять на результаты моделирования. С другой стороны, учет таких реакций оставляет модели *r*-процесса возможность для некоторой инерции за границы существования. Путь *r*-процесса будет не просто упираться в линию отделения нейтрона из-за отсутствия возможности продвинуться дальше, а естественным образом замедляться.

## 4.2. Скорости $\beta^-$ -распадов

Помимо реакций нейтронного захвата, важную роль в r-процессе играют  $\beta^-$ распады, которые увеличивают зарядовое число распадающегося ядра и тем самым обеспечивают естественный синтез новых химических элементов. При моделировании r-процесса важно убедиться, что для каждого ядра в нейтроноизбыточной области, нарабатывающегося в результате реакций  $(n, \gamma)$ , имеются данные о слабом распаде.

Значения астрофизических скоростей слабых распадов экзотических ядер, как и в случае с реакцией нейтронного захвата, приходится искать при помощи теоретических моделей. Ряд расчетов скоростей  $\beta$ -распадов выполнен специально для применения в астрофизических приложениях и, в частности, для расчета *r*-процесса (см., например, работы [47, 48]). Большой массив скоростей слабых распадов, рассчитанных при помощи модели FRDM+QRPA [47], содержится в базе данных астрофизических скоростей реакций REACLIB [49].

## 4.2.1. Зависимость скорости β-распада от массы ядра

Очевидно, что скорость  $\beta$ -распада должна сильно зависеть от массы исходного ядра. На это указывает хорошо известное правило Сарджента  $\lambda \sim Q_{\beta}^{5}$ , связывающее скорость распада  $\lambda$  с энерговыделением  $Q_{\beta}$ , которое зависит от энергий связи начального и конечного ядер. Экспериментальные данные, позволяющие говорить о степенной связи скорости  $\beta$ -распада  $\lambda$  с  $Q_{\beta}$ , были представлены Сарджентом в [50]. Таким образом вариации теоретической массовой модели должны влиять на результаты моделирования *r*-процесса не только через реакции  $(n, \gamma)$ , но и через слабые распады.

В условиях астрофизического r-процесса по его определению характерные времена  $\beta^-$ -распадов превышают скорости реакции  $(n, \gamma)$  на порядки. Таким образом при моделировании r-процесса, в особенности на коротких промежутках времени порядка 1 с, можно ожидать, что влияние неопределенностей теоретических значений скоростей слабых распадов будет незначительно в сравнении с неопределенностями расчета скоростей захвата нейтрона, обусловленных той же вариацией массовой модели. Исходя из этих соображений, в настоящей работе мы использовали скорости  $\beta$ -распадов из библиотеки REACLIB для всех трех наборов скоростей  $(n, \gamma)$ , полученных при помощи разных таблиц теоретических ядерных масс.

# 4.2.2. Недостаток данных о скоростях $\beta^-$ -распадов

После проведения расчета скоростей реакций нейтронного захвата на ядрах, входящих в используемые в настоящей работе таблицы теоретических масс, оказалось, что в REACLIB отсутствуют скорости слабых распадов для некоторых ядер-продуктов. Это было ожидаемо, ведь разные ядерные модели по-разному предсказывают не только энергии связи, но и границы области существования ядер, определяемые знаком энергий отделения протона  $B_p$  и нейтрона  $B_n$  (см. формулы 42). Кроме того, как отмечалось ранее, в теоретических таблицах массы изотопов даны с некоторым запасом в область за границей существования ядер, и объем этого запаса разнится от таблицы к таблице.

На рис. 8 синим цветом отмечены ядра, слабые распады которых внесены



**Рис. 8.** Данные о слабых распадах из библиотеки REACLIB и нейтроноизбыточные изотопы, присутствующие в таблице масс HFB-24, но отсутствующие в REACLIB.

в библиотеку REACLIB, а оранжевым — ядра из таблицы HFB-24, для которых в REACLIB отсутствуют данные по слабым распадам. Если добавить такие реакции  $(n, \gamma)$  в REACLIB без соответствующих распадов, то их продукты будут накапливаться, приводя к некорректным результатам моделирования *r*-процесса. Похожую картину можно видеть для таблицы LMR2021. Для таблицы FRDM2012 область недостатка данных о  $\beta$ -распадах минимальна, так как модель слабых распадов, используемая в REACLIB, основана на массовой модели FRDM2012.

Как было отмечено выше, скорости  $\beta^-$ -распадов в *r*-процессе существенно ниже скоростей  $(n, \gamma)$  и влияние масс ядер на периоды полураспада не должно заметно сказываться на результатах моделирования *r*-процесса. В связи с этим мы решили ограничиться простой экстраполяцией в область нейтронного избытка для определения недостающих скоростей слабых распадов, используя в качестве исходных данных присутствующие в библиотеке REACLIB скорости.

## 4.2.3. В-распады с вылетом нейтронов

В библиотеке REACLIB для изотопов с избытком нейтронов помимо обычных  $\beta^-$ -распадов присутствуют  $\beta^-$ -распады с вылетом 1—3 нейтронов. На рис. 9 показаны скорости слабых распадов нейтроноизбыточных изотопов тербия. Как видно, начиная с изотопа Tb<sup>175</sup> над  $\beta^-$ -распадом начинает преобладать распад Tb<sup>A</sup>  $\rightarrow$  Dy<sup>A-1</sup> + n, а с углублением в область нейтронного избытка усиливаются каналы с вылетом 2 и 3 нейтронов. Более того, начиная с A = 185 скорости  $\beta^-$  распада падают до пренебрежимо малых значений. При этом видно, что сумма скоростей всех четырех каналов распада для каждого изотопа в зависимости от массового числа может быть аппроксимирована простой функцией, например,



**Рис. 9.** Скорости слабых распадов нейтроноизбыточных изотопов тербия, содержащиеся в библиотеке REACLIB. Различными маркерами отмечены β<sup>-</sup>-распады с вылетом разного числа нейтронов. Скорости ниже 10<sup>-16</sup> <u>см<sup>3</sup></u> не показаны.

полиномом второй степени.

Суммирование скорости  $\beta^-$ -распадов с вылетом разного числа нейтронов с точки зрения задачи расчета *r*-процесса имеет смысл, даже несмотря на то, что продукты этих распадов различаются числом нейтронов. При скоростях реакции  $(n, \gamma)$ , на порядки превосходящих скорости  $\beta^-$ -распадов, небольшие различия в числе нейтронов между изотопами одного химического элемента перестают играть большую роль, так продукт распада сразу же начнет интенсивного поглощать нейтроны. Причем предел, до которого ядро в *r*-процессе может насыщаться нейтронами, определяется не столько слабыми распадами, сколько статистическим равновесием между реакцией нейтронного захвата  $(n, \gamma)$  и обратной реакцией фотовыбивания нейтрона  $(\gamma, n)$ . Это позволило нам при добавлении отсутствующих скоростей слабых распадов в REACLIB ограничиться только  $\beta^-$ -распадами. Такое допущение обусловлено спецификой *r*-процесса и может быть неприменимо для моделирования других процессов астрофизического нуклеосинтеза.

#### 4.2.4. Аппроксимация скоростей слабых распадов

Выборки исходных данных для аппроксимаций составлялись из сумм скоростей слабых распадов, независимо от числа вылетающих нейтронов, для каждого нейтроноизбыточного изотопа заданного химического элемента. Критерий нейтроноизбыточности, который мы используем в настоящей работе, описан в разделе 4.3.3.

В качестве простейшей модельной функции для экстраполяции зависимости скоростей слабых распадов от массового числа может быть использован полином второй степени. Эта функция не отражает физики процесса, однако имеет



**Рис. 10.** Экстраполяция скоростей слабых распадов для нейтроноизбыточных ядер на основе данных из библиотеки REACLIB двумя модельными функциями: полиномом второй степени и формулой скорости β-распада на основе правила Сарджента и формулы Вайцзеккера.

всего три параметра аппроксимации и не требует большого числа исходных точек.

Более качественную модельную функцию можно получить, используя правило Сарджента  $\lambda \sim Q_{\beta}^5$ . Энерговыделение  $Q_{\beta}$  может быть связано с массовым числом A через формулу Вайцзеккера для энергии связи. Тогда зависимость скорости распада  $\lambda$  от массового числа A при фиксированном зарядовом числе Z может быть представлена в виде

$$\lambda = b_1 \cdot (Q_\beta(A) - b_2)^5,$$

$$Q_\beta(A) = a_1 - \frac{a_2}{A^{1/3}} - \frac{a_3}{A} + \frac{a_4}{A^{3/4}}\xi, \quad \xi = \begin{cases} +1 & \text{для четных} \\ 0 & \text{для нечетных} \\ -1 & \text{для нечетно-нечетных} \end{cases},$$
(43)

где  $a_1, a_2, a_3, a_4, b_1, b_2$  — параметры аппроксимации. Чтобы снизить число параметров, можно опустить член формулы Вайцзеккера, отвечающий за чётность (параметр  $a_4$ ), не слишком сильно потеряв в точности.

На рис. 10 показаны примеры аппроксимаций скоростей слабых распадов нейтроноизбыточных изотопов тербия и свинца из библиотеки REACLIB, выполненных с использованием описанных модельных функций. Как видно, различия между двумя экстраполяциями несущественны, хотя экстраполированные значения, полученные с помощью правила Сарджента, обычно превосходят параболическую экстраполяцию в области сильного нейтронного избытка.

В настоящей работе мы использовали аппроксимацию по правилу Сарджента для большинства ядер, а к параболической модельной функции прибегали лишь в случае недостаточных размеров массива исходных данных.

## 4.2.5. Особенность *β*-распадов из библиотеки REACLIB

Отметим, что в библиотеке REACLIB все слабые распады имеют постоянные значения, не зависящие от температуры. При этом ясно, что в зависимости от температуры среды меняется заселенность энергетических уровней ядра, от которой зависят скорости  $\beta$ -распадов. В описании базы данных [49] упоминается, что, хотя учет возбужденных состояний может существенно повлиять на периоды полураспадов, в текущей версии REACLIB в библиотеку включены экспериментальные и теоретические скорости  $\beta$ -распадов лишь в земных условиях, однако они могут быть замещены в дальнейшем астрофизическими скоростями, завясящими от температур и плотностей среды.

## 4.3. Создание библиотек астрофизических скоростей реакций

В настоящей работе скорости нейтронных захватов, полученные при помощи программы TALYS с использованием различных таблиц теоретических масс нейтроноизбыточных ядер, подставлялись в библиотеку астрофизических реакций REACLIB [49]. Мы заменили в оригинальной базе данных REACLIB все реакции  $(n, \gamma)$  на нейтроноизбыточных ядрах результатами наших расчетов, а также внесли недостающие скорости  $\beta^-$ -распадов. Таким образом были получены три варианта библиотеки астрофизических скоростей реакций, отличающихся выбором массовой модели для расчета скоростей нейтронного захвата.

## 4.3.1. Представление скоростей реакций в формате REACLIB

В REACLIВ скорость реакции  $\lambda$  задается семью параметрами  $a_i$  функции температуры T (в ГК):

$$\lambda = \exp\left[a_0 + \sum_{i=1}^5 a_i T^{\frac{2i-5}{3}} + a_6 \ln T\right]$$
(44)

Программа TALYS выдает результаты расчета скоростей в виде таблицы в астрофизическом диапазоне температур от  $10^5$  до  $10^{10}$  К. Для представления полученных нами скоростей реакций в формате REACLIB их необходимо аппроксимировать с помощью функции (44). В настоящей работе для этого использовался нелинейный метод наименьших квадратов с минимизацией по методу Левенберга–Марквардта (см., например, [51]), реализованный в пакете научных вычислений scipy [52].

Аппроксимация проводилась по равномерной сетке температур от 0.5 до 6 ГК с шагом 0.2 ГК. Мы взяли не весь диапазон температур, в котором TALYS выдает результаты, чтобы добиться наилучшей точности в интересующей нас области 1-5 ГК. Выбор длины шага обусловлен тем, что функция (44) оказалась склонна к осцилляциям на концах диапазона аппроксимации, возникаю-



**Рис. 11.** Скорости реакции  $(n, \gamma)$  на нейтроноизбыточных изотопах свинца <sup>236</sup>Pb и <sup>237</sup>Pb, полученные с помощью программы TALYS с использованием различных массовых моделей, и результаты их аппроксимации функцией (44).

щим при слишком густой сетке, а при указанном шаге они почти исчезают. Скорости реакции  $(n, \gamma)$  на нейтроноизбыточных изотопах индия, тербия и свинца, полученные нами с помощью программы TALYS и аппроксимированные для представления в формате REACLIB, показаны на рис. 11.

## 4.3.2. Пакет ratelib

Для упрощения работы с базами данных астрофизических скоростей реакций в формате REACLIB в рамках настоящей работы на языке Python был реализован пакет ratelib, доступный для загрузки с помощью каталога Pythonпакетов PyPI<sup>1</sup>. Пакет ratelib поддерживает загрузку базы данных из текстового файла, представление нуклидов, скоростей реакций и их коллекций в виде объектов языка Python, аппроксимацию таблиц скоростей реакций с помощью функции (44) и вывод данных в формате REACLIB в текстовый файл. В настоящей работе все модификации библиотеки REACLIB, в том числе аппроксимации функции (44), выполнены при помощи пакета ratelib.

## 4.3.3. Критерий нейтроноизбыточности

Подставляя скорости  $(n, \gamma)$  в библиотеку REACLIB, мы ограничивались только реакциями на нейтроноизбыточных изотопах. Для других ядер стандартные значения скоростей оставлялись неизменными.

То, является ли изотоп нейтроноизбыточным, определялось ненулевым значением скорости распада, а также отношением числа нейтронов к протонам. Продифференцировав формулу Вайцзеккера по числу нейтронов N, можно най-

 $<sup>^{1}</sup> https://pypi.org/project/ratelib/$ 

ти простое условие максимума энергии связи:

$$\frac{N}{Z} = c_1 + c_2 A^{2/3} \tag{45}$$

Хотя параметры  $c_1$  и  $c_2$  можно получить из известных значений коэффициентов формулы Вайцзеккера, для надежности мы аппроксимировали их, используя список стабильных ядер, полученный из базы данных NUBASE2020 [53].

## 5. Моделирование *r*-процесса при слиянии нейтронных звезд

Целью настоящей работы является исследование чувствительности реалистичной модели r-процесса к неопределенностям теоретических масс нейтроноизбыточных ядер. Для этого мы построили три библиотеки астрофизических скоростей реакций, отличающихся выбором массовой модели для расчета скоростей реакций  $(n, \gamma)$ , чтобы затем использовать их для расчета выходов rизотопов. В этом разделе описываются параметры нашей симуляции r-процесса и представлены результаты проведенных нами расчетов.

## 5.1. Параметры моделирования

Помимо астрофизических скоростей реакций, важными параметрами моделирования нуклеосинтеза являются термодинамические характеристики среды. В частности, скорость ядерной реакции является функцией температуры (см. формулу (9)). Необходимо задать не только начальные значения этих величин, но и законы их изменения во времени. Все эти данные приходится извлекать из астрофизических моделей.

#### 5.1.1. Реалистичная модель слияния нейтронных звезд

Опираясь на результаты модели слияния нейтронных звезд [13] и статью авторов библиотеки SkyNet [54] о моделировании r-процесса в сопровождающих слияние выбросах, мы остановились на следующих начальных значения температуры, средней доли протонов и энтропии:

$$T = 6 \ \Gamma \mathrm{K}, \quad Y_e = 0.1, \quad s = 10 \frac{k_B}{\mathrm{барион}} \tag{46}$$

Исходные состав и плотность вещества рассчитывается с помощью уравнений статистического баланса (см. раздел 2.1.4). Согласно [6, 13, 3], перед началом *r*-процесса расширяющийся выброс вещества сливающихся нейтронных звезд сильно разогрет и находится в состоянии статистического баланса. Напомним, что для равновесной системы, в которой выходы прямых и обратных реакций компенсируют друг друга, можно получить связь между концентрациями изотопов и термодинамическими параметрами. Библиотека SkyNet позволяет с его помощью рассчитать исходные концентрации изотопов и недостающие термодинамические величины, в данном случае плотность.

Если вещество выброса расширяется равномерно [13, 54], то его плотность меняется обратно пропорционально кубу времени эволюции системы. В SkyNet для подобных сценариев предлагается кусочно-определенная зависимость:

$$\rho(t) = \begin{cases} \rho_0 e^{-t/\tau}, & t \le 3\tau \\ \rho_0 \left(\frac{3\tau}{et}\right)^3, & t \ge 3\tau \end{cases} \tag{47}$$

У этой функции нет проблем со значением в момент t = 0 и, как отмечается в [54], она все еще соответствует астрофизическому сценарию выброса вещества при слиянии нейтронных звезд. При расчете нуклеосинтеза мы использовали величину характерного времени  $\tau = 10$  мс. Как уже говорилось в разделе 2.1.3, для моделирования эволюции астрофизической ядерной системы достаточно задать временной профиль одной термодинамической величины, а все остальные можно рассчитывать на каждом шаге интегрирования с помощью уравнения состояния.

## 5.1.2. Каноническая модель r-процесса

Отметим, что помимо реалистичных моделей r-процесса, воспроизводящих конкретные астрофизические явления, существуют и универсальные модели, параметры которых подбираются из требования эффективного протекания r-процесса. Ряд таких моделей описан в обзоре [10]. Их преимуществами являются простот и независимость от астрофизического сценария, что позволяет проводить пробные расчеты r-процесса, проверять модель и делать предварительные выводы о чувствительности r-процесса к выбору параметров.

В предыдущих наших работах [55, 56, 57], а также в работе, выполненной вместе с авторами массовой модели LMR2021 [29], для исследования влияния теоретических ядерных масс на выходы *r*-изотопов мы использовали каноническую модель, описанную в [10], с некоторыми отличиями. В канонической модели *r*-процесса температура вещества и содержание в нем нейтронов постоянны на всем времени симуляции и достаточны, чтобы поддерживать высокие скорости реакций  $(n, \gamma)$  и  $(\gamma, n)$ , превышающие скорости  $\beta^-$ -распадов. Исходное вещество является чистым <sup>56</sup>Fe, моделируя таким образом железное ядро массивной звезды, взрывы которых рассматриваются как важный источник *r*-изотопов. В канонической модели учитываются только основные реакции *r*-процесса, а также спонтанное деление тяжелых ядер. Наконец, предполагается, что при  $Z \geq 26$  реакции  $(n, \gamma)$  и  $(\gamma, n)$  находятся в состоянии статистического баланса, что обеспечивает устойчивость пути *r*-процесса.

Наша модель отличалась от канонической тем, что концентрация нейтронов была не постоянной, хоть и очень высокой (1000 нейтронов на 1 исходное ядро железа), учитывались все астрофизические реакции, представленные в библиотеке REACLIB [49], а условие баланса  $(n, \gamma)$  и  $(\gamma, n)$  не задавалось. Таким образом мы получили динамическую модель, в которой облако нейтронов постепенно истощалось и учитывался вклад всех возможных реакций. При этом в определенный момент симуляции мы наблюдали равновесие прямых и обратных реакций нейтронного захвата, при котором путь *r*-процесса на некоторое время стабилизировался.

В настоящей работе мы решили использовать модель, описанную в предыдущем подразделе, для получения более реалистичных результатов.



**Рис. 12.** Массовые распределения продуктов *r*-процесса, полученные в симуляциях нуклеосинтеза длительностью 1 сек с разными массовыми моделями, и наблюдаемые в Солнечной системе распространенности ядер с  $A \ge 80$  [1]. Экспериментальные данные нормированы по участку  $145 \le A \le 185$  теоретических распределений.

#### 5.2. Результаты моделирования

На основе библиотеки SkyNet [19] мы подготовили программу, симулирующую *r*-процесс в выбросе вещества при слиянии двух нейтронных звезд. Термодинамические параметры были заданы так, как описано в разделе 5.1.1. Мы провели три симуляции, использующие разные библиотеки астрофизических реакций, составленные нами с использованием трех таблиц теоретических масс ядер: FRDM2012 [27], HFB-24 [28] и LMR2021 [29]. В этом подразделе представлены результаты наших расчетов и анализ чувствительности модели *r*-процесса к массам задействованных изотопов.

#### 5.2.1. Итоговые выходы г-изотопов

На рис. 12 представлены выходы продуктов *r*-процесса через 1 секунду симуляции. На полученные нами массовые распределения наложены данные о наблюдаемых в Солнечной системе распространенностях изотопов с  $A \ge 80$ . Отметим, что мы моделировали изолированный односекундный *r*-процесс в сценарии слияния нейтронных звезд, в то время как экспериментальное распределение складывалось на астрофизических масштабах времени в результате множества механизмов нуклеосинтеза, поэтому сравнивать их мы будем лишь на качественном уровне. В частности, как и в прочих работах (например, [6]), полученное массовое распределение расходится с экспериментальными на многие порядки, так как в этой области основной вклад должны вносить *s*-процесс и слабый *r*-процесс.

Использованная нами модель нуклеосинтеза воспроизводит основные свойства наблюдаемых распространенностей тяжелых ядер: хорошо видны три пика r-процесса с  $A \approx 80 - 88$ , 128 - 142, 190 - 200, соответствующие магическим числам нейтронов. Как говорилось выше, экспериментальные пики r-процесса смещены относительно пиков s-процесса, так как ядра, рождающиеся при быстром захвате нейтронов, далеки от долины стабильности и быстро распадаются. Мы симулируем односекундный r-процесс, поэтому полученные нами пики с  $A \approx 128 - 142$  находятся между экспериментальными пиками r- и s-процесса, находясь в процессе размытия вследствие распадов. В области тяжелых ядер размытие происходит значительно быстрее, поэтому полученные нами максимумы с  $A \approx 190 - 220$  совпадают с экспериментальным третьим пиком r-процесса.

Рис. 12 позволяет оценить чувствительность симуляции *r*-процесса к теоретическим ядерным массам. Видно, что вариация массовой модели приводит к значительным расхождениям распределений *r*-изотопов. Выходы в симуляции с массовой таблицей FRDM2012 почти везде превышают выходы остальных симуляций, для некоторых значений A на многие порядки. Это хорошо заметно для ядер с  $A \ge 200$ . При этом в области  $164 \le A \le 182$ , где массовое распределение FRDM2012, наоборот, ниже остальных распределений, оно повторяет профиль экспериментальных данных.

Массовые распределения FRDM2012 и LMR2021 для некоторых массовых чисел демонстрируют схожие глубокие провалы, например, на промежутке A = 73 - 78. Такие поведение может быть вызвано микроскопическими ядерными эффектами, так как эти минимумы коррелируют с изменением четности A. Также FRDM2012 и LMR2021 предсказывают схожие зубчатые формы максимума в области A = 100 - 106. HFB-24 эти особенности не воспроизводит или воспроизводит не так заметно, предсказывая там более гладкое поведение массового распределения. По-видимому, FRDM2012 и LMR2021 в одинаковой степени чувствительны к четности ядер. Заметим, что в методе LMR2021 микроскопические эффекты явным образом не учитываются.

## 5.2.2. Эволюция выходов r-изотопов

Более детально изучить влияние массовой модели на симуляцию *r*-процесса можно по изменению концентраций изотопов во времени. На рис. 13 представлены графики выходов нейтроноизбыточных изотопов тербия в *r*-процессе в зависимости от времени, прошедшего с начала симуляции. Показаны две группы нуклидов, различающиеся степенью перегруженности нейтронами: около 14 избыточных частиц у изотопов сверху и около 25 у изотопов снизу. Видно, как сильно различаются графики в разных рядах: синтез более нейтроноизбыточных ядер идет интенсивнее, но при этом они быстрее начинают распадаться.

Изотопы начинают нарабатываться не сразу, по прошествии приблизительно



**Рис. 13.** Эволюция концентраций нейтроноизбыточных изотопов тербия в симуляциях *r*-процесса с использованием различных массовых моделей. Теоретические концентрации отнормированы, как на рис. 12, и домножены на 10<sup>6</sup>.

500-600 мс. При этом временная зависимость концентрации изотопа <sup>191</sup> Tb имеет два максимума, первый из которых возникает значительно раньше, спустя около 200 мс с начала симуляции. Судя по всему, в течение короткого времени происходило накопление <sup>191</sup> Tb, оказавшегося на пути *r*-процесса, а затем изотоп начал распадаться. Отсутствие аналогичного пика на остальных графиках говорит о том, что для прочих изотопов статистическое равновесие между  $(n, \gamma)$ и  $(\gamma, n)$  отсутствовало. Волна нейтронных захватов, проходя через них, двигалась дальше, не приводя к существенному накоплению этих ядер. По видимому, второй максимум на графике для <sup>191</sup> Tb, а также единственные максимумы на остальных графиках, возникают преимущественно за счет делений тяжелых ядер, до которых приблизительно к середине односекундной симуляции доходит волна *r*-процесса.

Как видно, форма максимумов и их расположение сильно варьируются в зависимости от выбора модели ядерных масс. Выходы одного и того же изотопа в разных симуляциях могут отличаться в разы, а положение пика деления может смещаться почти на 100 мс.

На рис. 14 зафиксированы выходы изотопов в диапазоне N = 40 - 160 и Z = 30 - 90 по прошествии 200, 500 и 800 мс с момента начала симуляции. Изначально путь *r*-процесса представляет собой узкую полосу, прижатую к границе отделения нейтронов. Локализованность области *r*-процесса обеспечивается статистическим балансом между реакциями нейтронного захвата и фотодиссоциации. Накопление ядер в этой полосе, скорее всего, и приводит к образованию первого максимума на графике эволюции концентрации <sup>191</sup> Tb на рис. 13. Затем в какой-то момент путь *r*-процесса расползается и смещается ближе к долине



**Рис. 14.** Выходы *r*-изотопов в симуляциях с разными массовыми моделями: в левом столбце FRDM2012, в центре HFB-24, в правом столбце LMR2021. Нормировка концентраций такая же, как на рис. 12. Пустыми квадратами отмечены стабильные изотопы.

стабильности, формируя пик деления. Это может происходить вследствие делений тяжелых ядер, до которых доходит волна *r*-процесса, а также как результат нарушения статистического баланса.

Важно, что время существования узкой области *r*-процесса различается в зависимости от выбора массовой модели: видно, что к середине симуляции (рис. 14, средний ряд) в расчетах с таблицами масс FRDM2012 и LMR2021 путь *r*-процесса все еще узок и расположен близко к линии отделения нейтронов, а в расчете с HFB-24 уже произошло размытие и смещение зоны нуклеосинтеза. Это очень важное обстоятельство, подчеркивающее важность теоретических значений масс нейтроноизбыточных изотопов в моделировании *r*-процесса. Астрофизический *r*-процесс, в отличие от термоядерного горения и даже *s*процесса, является взрывным механизмом нуклеосинтеза, протекающего в течение миллисекунд. На ограниченном промежутке времени волна нейтронных захватов может вовсе не дойти до области тяжелых изотопов, не образовав те химические элементы, существование которых принято объяснять *r*-процессом. Тем самым ядерные массы не только влияют на выходы *r*-изотопов в симуля-



**Рис. 15.** Изменения температуры системы в первые 600 мс симуляции *r*-процесса в выбросах вещества при слиянии нейтронных звезд. Расчеты проводились с использованием разных моделей ядерных масс.

ции нуклеосинтеза, но и определяют, идет ли вообще r-процесс в том или ином астрофизическом сценарии.

#### 5.2.3. Эволюция термодинамических параметров

От выбора астрофизического сценария зависят важнейшие термодинамические величины влияющие на протекание *r*-процесса. В то же время многие процессы в астрофизике напрямую обусловлены ядерными реакциями. Любопытно пронаблюдать, как выбор модели масс ядер может повлиять на макроскопические параметры модельной системы.

Как говорилось выше, в нашей симуляции нуклеосинтеза учитывается энерговыделение реакций, что должно приводить к дополнительному нагреву остывающего вещества, выброшенного при столкновении нейтронных звезд. Чувствительность термодинамических параметров к вариации масс нейтроноизбыточных ядер можно пронаблюдать по зависимости температуры системы от времени, представленной на рис. 15.

В случае *r*-процесса основным источником ядерной энергии должны выступать  $\beta^-$ -распады. Напомним, что библиотеки астрофизических скоростей реакций, которые мы составили в рамках настоящей работы, заимствуют скорости  $\beta^-$ -распадов из библиотеки REACLIB [49]. Там, где использованная массовая модель выходит за границы REACLIB (практически совпадающие с границами массовой таблицы FRDM2012), скорости недостающих  $\beta^-$ -распадов вычислялись с помощью экстраполяции. Полученный результат таким образом ожидаем. Профили температур, полученные в симуляциях с разными массовыми моделями, практически не отличаются, потому что источниками нагрева в расчетах выступал практически один и тот же набор распадов. Тот факт, что на достаточно длительном времени расчета симуляция с моделью FRDM2012 оказываются заметно менее нагретой, чем остальные, объясняется тем, что в двух других библиотеках астрофизических реакций присутствуют дополнительные  $\beta^-$ -распады сверхнейтроноизбыточных изотопов, до которых волна *r*-процесса доходит как раз в пределах 100 мс. К моменту времени около 400 мс, как видно по рис. 14, путь *r*-процесса смещается к долине стабильности, и распады этих сверхнейтроноизбыточных изотопов, обеспечивавшие симуляциям с HFB-24 и FRDM2012 добавку ко внутренней энергии, прекращаются, поэтому температуры во всех трех расчетах к концу симуляции сравниваются.

Хотя разница между профилями температур мала, она все же указывает на важность слабых распадов для моделирования нуклеосинтеза. Если бы составленные нами библиотеки астрофизических скоростей реакций включали также рассчитанные с различными массовыми моделями скорости распадов, влияние масс нейтроноизбыточных изотопов на термодинамику системы могло бы быть более заметным.

# Заключение

В рамках настоящей работы нами были рассчитаны скорости реакций нейтронного захвата, задействованных в *r*-процессе, с использованием трех различных моделей ядерных масс: макро-микроскопической FRDM2012 [27], микроскопической HFB-24 [28] и модели LMR2021 [29], основанной на локальных массовых отношениях. С помощью подготовленного нами пакета ratelib на основе этих данных были составлены три библиотеки астрофизических скоростей реакций в формате REACLIB [49]. Полученные базы данных мы использовали для моделирования r-процесса в слиянии нейтронных звезд с помощью написанной нами программы, использующей библиотеку симуляции астрофизических ядерных систем SkyNet [54]. Полученные нами результаты говорят высокой чувствительности *r*-процесса к значениям масс нейтроноизбыточных изотопов. Чувствительность эта сказывается не только на выходах *r*-изотопов, но и на самом течении *r*-процесса, и может даже влиять на то, будет ли идти *r*-процесс в заданном астрофизическом сценарии или нет. Кроме того, было обнаружено заметное влияние выбора массовой модели на термодинамику системы, обеспечиваемое в первую очередь энерговыделением  $\beta$ -распадов, являющихся важной частью цепочек *r*-процесса.

При больших достижениях в определении основных астрофизических сценариев *r*-процесса детальное исследование наблюдаемых распространенностей тяжелых изотопов во Вселенной и получение точных моделей их синтеза все еще являются важными и актуальными задачами современной физики. Как мы видим, связь астрофизических явлений и ядерных реакций нуклеосинтеза очень тесна и сложна, изучение одного невозможно без изучения другого. Многое зависит от развития наших знаний о физике нейтроноизбыточных ядер, задействованных в *r*-процессе. Как показывают наши расчеты, неточность ядерных данных в моделировании нуклеосинтеза может привести к высоким неопределенностям не только распространенностей *r*-изотопов, но и термодинамических параметров, напрямую влияющих на астрофизические расчеты. Все это мотивирует на дальнейшее развитие ядерных моделей, годящихся для предсказания характеристик экзотических изотопов.

## Список литературы

- [1] K. Lodders, ApJ (2003) **591** 1220
- [2] J.J. Cowan, C. Sneden, J.E. Lawler et al, Rev. Mod. Phys. (2021) 93 015002
- [3] F.-K. Thielemann, M. Eichler, I.V. Panov, B. Wehmeyer, Annu. Rev. Nucl. Part. Sci. (2017) 67 253
- [4] T. Kajino, W. Aoki, A.B. Balantekin et al, Prog. Part. Nuc. Phys. (2019) 107 109
- [5] C. Freiburghaus, S. Rosswog, F.-K. Thielemann, ApJL (1999) 525 L121
- [6] S. Goriely, A. Bauswein, H.-T. Janka, ApJL (2011) 738 L32
- [7] S. Honda, W. Aoki, Y. Ishimaru et al, ApJ (2006) 643 1180
- [8] Y.-Z. Qian, G.J. Wasserburg, Phys. Rept. (2007) 442 237
- [9] C.J. Hansen, F. Montes, A. Arcones, ApJ (2014) **797** 123
- [10] M. Arnould, S. Goriely, K. Takahashi, Phys. Rept. (2007) 450 97
- [11] S. Rosswog, M. Liebendörfer, F.-K. Thielemann et al, Astron. Astrophys. (1999)
   341 499
- [12] S. Rosswog, T. Piran, E. Nakar, MNRAS (2013) **430** 2585
- [13] O. Korobkin, S. Rosswog, A. Arcones, C. Winteler, MNRAS (2012) 426 1940
- [14] S. Rosswog, O. Korobkin, A. Arcones et al, MNRAS (2014) **439** 744
- [15] I. Kullmann, S. Goriely, O. Just et al, MNRAS (2021) **439** 744
- [16] A. Sobiczewski, Yu.A. Litvinov, M. Palczewski, ADNDT (2018) 119 1
- [17] S. Goriely, Hyp. Int. (2001) **132** 105
- [18] S. Brett, I. Bentley, N. Paul et al, Eur. Phys. J. A (2012) 48 184
- [19] J. Lippuner, L.F. Roberts, ApJS (2017) 233 18
- [20] B. Paxton, L. Bildsten, A. Dotter et al, ApJ (2011) **192** 3
- [21] П.Е. Булатов, А.А. Белов, Н.Н. Калиткин, Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша (2018) **2018** 32
- [22] M.W. Guidry, J.A. Harris, Comput. Sci. Disc. (2013) 6 015002
- [23] F.X. Timmes, D. Arnett, ApJS (1999) **125** 277

- [24] F.X. Timmes, F.D. Swesty, ApJS (2000) **123** 501
- [25] W. Hauser, H. Feshbach, Phys. Rev. (1952) 87 366
- [26] A.J. Koning, D. Rochman, J. Sublet et al, Nucl. D. Sheets (2019) 155 1
- [27] P. Möller, A.J. Sierk, T. Ichikawa, H. Sagawa, ADNDT (2016) 109 1
- [28] S. Goriely, N. Chamel, J.M. Pearson, Phys. Rev. C (2013) 88 024308
- [29] Е.В. Владимирова, М.В. Симонов, В.В. Негребецкий и др., Изв. РАН. Серия Физическая (2022) **4** 571
- [30] V.M. Strutinsky, Nucl. Phys. A (1966) 1 1
- [31] V.M. Strutinsky, Nucl. Phys. A (1967) 2 420
- [32] H.J. Lipkin, Annals of Physics (1960) (2) 272
- [33] Y. Nogami, Phys. Rev. B (1964) 2 313
- [34] J. Bardeen, L.N. Cooper, J.R. Schrieffer, Phys. Rev. (1957) 108 1175
- [35] M. Samyn, S. Goriely, J.M. Pearson, Nucl. Phys. A (2003) 22 69
- [36] T.H.R. Skyrme, Nucl. Phys. (1959) 9 615
- [37] D. Vautherin, D.M. Brink, Phys. Rev. C (1972) 5 626
- [38] G.T. Garvey, I. Kelson, Phys. Rev. Lett. (1966) 16 197
- [39] M. Bao, Z. He, Y.M. Zhao, A. Arima, Phys. Rev. C (2014) 90 024314
- [40] V.A. Kravtsov, JETP (1959) **36** 1224
- [41] J. Jänecke, H. Behrens, Phys. Rev. C (1974) 9 1276
- [42] W.J. Huang, M. Wang, F.G. Kondev et al, Chinese Phys. C (2021) 45 030002
- [43] E.V. Vladimirova, M.V. Simonov, T.Yu. Tretyakova, AIP Conf. Proc. (2021) 2377 070003
- [44] E.V. Vladimirova, B.S. Ishkhanov, M.V. Simonov et al, Int. J. Modern Phys. E (2021) 30 2150025
- [45] A.H. Wapstra, G. Audi, C. Thibault, Nucl. Phys. A (2003) 729 129
- [46] J. Duflo, A. Zuker, Phys. Rev. C (1995) **52** 23
- [47] P. Möller, B. Pfeiffer, K.-L. Kratz, Phys. Rev. C (2003) 67 055802
- 48 I.V. Panov, Yu.S. Lutostansky, F.-K. Thielemann, Nucl. Phys. A (2016) 947 1

- [49] R.H. Cyburt, A.M. Amthor, R. Ferguson et al, ApJ (2010) 189 240
- [50] B.W. Sargent, Proc. R. Soc. Lond. A (1933) **139** 659
- [51] K. Levenberg, Quarterly of Applied Mathematics (1944) 2 164
- [52] P. Virtanen, R. Gommers, T.E. Oliphant el al, Nature Methods (2020) 17 261
- [53] F.G. Kondev, M. Wang, W.J. Huang et al, Chinese Phys. C 45 030001
- [54] J. Lippuner, L.F. Roberts, ApJ (2015) 815 82
- [55] V.V. Negrebetskiy, K.A. Stopani, Moscow Univ. Phys. Bul. (2021) 76 22
- [56] В.В. Негребецкий, Е.В. Владимирова, М.В. Симонов и др., Изв. РАН. Серия Физическая (2022) 4 595
- [57] V. Negrebetskiy, E. Vladimirova, M. Simonov et al, PoS (2022) 380 333