

РАСЧЕТ ХАРАКТЕРИСТИК ЯДЕР НУКЛИДОВ: ОТ ЛЕГКИХ ДО СВЕРХТЯЖЕЛЫХ

А.Н. Зарубин

ООО Научно-производственное объединение “Центротех”

624130, Россия, Свердловская обл., Новоуральск

e-mail: zarubin44@mail.ru

Аннотация — *Актуальность и цели.* Представлены характеристические соотношения и параметрические выражения для расчета основных характеристик (удельной энергии связи, объемной и численной плотности конфигурационной упаковки нуклонов, радиуса объема атомного ядра и соответствующего радиуса ячейки Вигнера-Зейтца, давления компактизации и уравнения состояния ядерной материи) ядер 1701 нуклида — от легких до сверхтяжелых. *Материалы и методы.* Подробное описание вывода параметрических выражений и условий для выделения первого класса эквивалентности, состоящего из 1701 нуклида, приводятся в работе «Унифицированная математическая модель сферических атомных ядер», продолжением которой и является представленная работа. Расчет характеристик атомных ядер производится по значениям определяющего параметра — показателя эффективности нуклонов в атомном ядре. *Результаты.* В данной работе приводится характеристическое соотношение в виде гладкой эмпирической корреляции для расчета значений показателя эффективности нуклонов в атомном ядре в зависимости от количества нейтронов и протонов в его составе. В результате подстановки характеристического соотношения в параметрические выражения получаются аналитические формулы для расчета значений основных характеристик ядер 1701 нуклида из первого класса эквивалентности. Сделан прогноз о существовании нейтронного аналога α -частицы в виде кластера из 99 нейтронов, показатель эффективности которых практически не отличим от показателя эффективности нуклонов в α -частице. *Выводы.* Универсальность и адекватность аналитических формул вполне соответствует уровню универсальности и адекватности физических законов. Например, усредненные значения удельной энергии связи атомных ядер по 1701 нуклиду вычисляются с абсолютной погрешностью 10.6482 КэВ и средней относительной погрешностью 0.1342%, что фактически очень близко к погрешности экспериментального измерения их энергии связи. Все расчеты в данной работе проводятся с использованием системы аналитических вычислений свободного программного обеспечения Maxima.

Ключевые слова: структура ядра, конфигурационная упаковка, давление компактизации, уравнение состояния, энергия связи, карта нуклидов, ядерная материя

Calculation of Nuclear Properties of Nuclides: From Light to Superheavy

A.N. Zarubin

CentroTech Research and Production Association LLC
Novouralsk, Sverdlovsk Reg., 624130, Russia

e-mail: zarubin44@mail.ru

Abstract — *Background.* Characteristic relations and parametric expressions are presented for calculating the fundamental properties of 1701 nuclides (ranging from light to superheavy nuclei), including specific binding energy, volumetric and numerical density of nucleon configurational packing, atomic nucleus volume radius and the corresponding Wigner-Seitz cell radius, compactization pressure, and the equation of state for nuclear matter. *Materials and methods.* A detailed derivation of the parametric expressions and the conditions for identifying the first equivalence class, comprising 1701 nuclides, is provided in the paper "A Unified Mathematical Model for Spherical Atomic Nuclei," of which the present work is a continuation. The calculation of atomic nucleus characteristics is performed based on the values of a defining parameter: the nucleon efficiency index within the atomic nucleus. *Results.* This paper presents a characteristic relation in the form of a smooth empirical correlation for calculating the nucleon efficiency index in an atomic nucleus as a function of the number of neutrons and protons. By substituting this characteristic relation into the parametric expressions, analytical formulas are derived to calculate the fundamental characteristics of the 1701 nuclides belonging to the first equivalence class. A prediction is made regarding the existence of a neutron analogue of the α -particle in the form of a 99-neutron cluster, whose efficiency index is virtually indistinguishable from that of nucleons in the α -particle. *Conclusions.* The universality and adequacy of the analytical formulas are consistent with the level of universality and adequacy of physical laws. For instance, the averaged values of the specific binding energy for the 1701 nuclides are calculated with an absolute error of 10.6482 KeV and a mean relative error of 0.1342%, which is remarkably close to the experimental measurement error of their binding energy. All calculations in this work were performed using the open-source computer algebra system Maxima.

Keywords: nucleus structure, nucleon packing, compaction pressure, equation of state, binding energy, nuclide chart, nuclear matter

ВВЕДЕНИЕ

Унифицированный расчет и прогноз значений характеристик атомных ядер от самых легких до сверхтяжелых нуклидов — актуальная задача ядерной физики. Такая задача особенно востребована в настоящее время в связи с обширными исследованиями как в области сверхтяжелых нуклидов, так и в области радиоактивных ядер-изобар вдали от линии стабильности [1-8].

Общепринятые теоретические подходы к объяснению структуры атомных ядер и расчету значений их характеристик основываются на гипотетических силах сильного взаимодействия, действующих между нуклонами [9; 10]. Современный анализ теоретических подходов к расчету основных характеристик атомных ядер дается в [11]. Согласно проведенному в [11] анализу, проблема теоретического описания структуры и расчета значений основных характеристик атомных ядер по всей карте нуклидов (от самых легких до сверхтяжелых) в настоящее время далека от ее решения.

Отсутствие адекватного выражения для расчета сильного взаимодействия, справедливого на всей карте нуклидов, способствовало развитию модельного подхода к расчету характеристик атомных ядер. Появление многочисленных математических моделей структуры атомных ядер опиралось на экспериментально выявленные особенности их характеристик, таких как энергия связи, геометрические размеры, объемная и численная плотность заполнения, период полураспада и т.п. Использование модельного подхода позволило провести достаточно точные вычисления значений различных характеристик атомных ядер, но только на локальных областях карты нуклидов [12; 13]. Подробный анализ достоинств и недостатков известных в настоящее время математических моделей структуры атомных ядер (капельно-жидкостной модели, оболочечной модели, обобщенной модели, кластерной модели, решетчатой модели и т.д.) приводится в [14; 15].

Важнейшей характеристикой атомных ядер, получаемой на основе измерения их масс, выступает энергия связи ядра $B(N, Z)$:

$$B(N, Z) = [Z \cdot m_p + N \cdot m_n - M(N, Z)]c^2, \quad \text{где}$$

$m_p, m_n, M(N, Z)$ — масса протона, нейтрона и атомного ядра, состоящего из Z протонов и N нейтронов; c — скорость света.

В настоящее время наиболее известным соотношением для расчета значений энергии связи атомных ядер является полуэмпирическая формула Вайцеккера-Бете [9; 10], полученная на основе капельно-жидкостной модели:

$$B(N, Z) = a_{\text{vol}} \cdot A - a_{\text{surf}} \cdot A^{2/3} - a_{\text{coul}} \frac{Z(Z-1)}{A^{1/3}} - a_{\text{sym}} \frac{(N-Z)^2}{A} + a_{\text{pair}} \frac{1 - \text{mod}(Z, 2) - \text{mod}(N, 2)}{A^{3/4}},$$

где a_{vol} — коэффициент объемной энергии; a_{surf} — коэффициент поверхностной энергии; a_{coul} — коэффициент кулоновской энергии; a_{sym} — коэффициент энергии симметрии состава ядра; a_{pair} — коэффициент энергии разрыва нуклонной пары; $\text{mod}(x, 2)$ — число x по модулю 2; $A=Z+N$ — массовое число ядра; Z — число протонов в ядре; N — число нейтронов в ядре.

Согласно предложенной в [16] математической модели, значение энергии связи атомного ядра пропорционально значению кулоновской энергии отталкивания двух шаров, каждый из которых содержит половину количества протонов атомного ядра. Утверждается, что полученная модель для оценки энергии связи атомных ядер является адекватной и в целом более точной, чем полуэмпирическая формула Вайцеккера-Бете. Для 165 нуклидов с массовыми числами от $A=24$ до $A=254$ среднее значение модуля относительного отклонения энергии связи атомных ядер составило 0.84% (для полуэмпирической формулы Вайцеккера-Бете в этом случае получилось 1.067%).

Зависимость энергии связи атомного ядра не только от заряда ядра и числа нейтронов, но и от деформации его объема учтена в модели FRDM [17]. С помощью известных экспериментальных значений масс атомных ядер определялись значения 10 независимых параметров модели FRDM. Среднее по 2194 ядрам нуклидов (от ^{16}O до $^{264}_{108}\text{Hs}$) значение погрешности расчета масс ядер составило 0.56 МэВ, причем для ядер нуклидов с числом нейтронов более 64 погрешность расчета получилась 0.35 МэВ.

За последние десять лет было предпринято большое число попыток использовать статистические методы искусственного интеллекта и машинного обучения (ИИ&МО) для прямого прогнозирования значений различных характеристик атомных ядер. Однако из-за скудного обучающего набора данных результаты экстраполяции методами ИИ&МО как правило плохо согласуются со значениями характеристик атомных ядер, полученными экспериментально. Более перспективным оказалось использование методов ИИ&МО либо для обучения большого числа искусственных нейронных сетей с последующим отбором наиболее успешных [18], либо для корректировки результатов работы имеющихся в настоящее время математических моделей атомных ядер [19].

Прямое математическое моделирование значений характеристик нуклидов в зависимости от количества нейтронов и протонов в составе их ядер сдерживается, в частности, эффектом появления скачков в значениях характеристик ядер нуклидов при небольшом изменении их массового числа. Однако было обнаружено, что эффект появления скачков в значениях характеристик атомных ядер частично компенсируется после перехода к так называемой остаточной энергии нейтрон-протонного взаимодействия за счет учета четности-нечетности чисел протонов и нейтронов в атомном ядре:

$$\Delta_4(N,Z) = B(N,Z) - B(N-1,Z) - B(N,Z-1) + B(N-1,Z-1);$$

$$\Delta_2(N,Z) = B(N,Z) - B(N-2,Z) \text{ — для чётно-чётных нуклидов.}$$

Значения остаточной энергии нейтрон-протонного взаимодействия вычисляются для всего массива нуклидов по известным значениям энергии связи $B(N,Z)$.

В работе [20] остаточное нейтрон-протонное взаимодействие $\Delta_4(N,Z)$ использовалось для расчета значений энергии связи ядер изотопов с количеством протонов от $Z=107$ до $Z=110$ и количеством нейтронов от $N=152$ до $N=161$. Утверждается, что качество предсказаний по методу локальных массовых соотношений $\Delta_4(N,Z)$ сравнимо с погрешностью расчетов в AME2016 на уровне ~ 150 КэВ.

В работе [21] проведено статистическое исследование поведения $\Delta_4(N,Z)$ для 2498 атомных ядер и получены байесовские оценки $\Delta_4(N,Z)$ как функции от массового числа атомных ядер. Число параметров в полученной статистической модели равнялось 476, что позволило рассчитать таблицу масс ядер, у которых массовое число $A > 20$. Результаты прогнозирования значений массы ядер с использованием $\Delta_4(N,Z)$ оказались не хуже, чем результаты аналогичных расчетов по более сложным теоретическим моделям. Среднеквадратическая ошибка предсказания значения массы 65 проверочных ядер нуклидов изменялась от 361.9 до 367.5 КэВ в зависимости от набора обучающих ядер нуклидов.

В работе [22] проведено статистическое исследование поведения $\Delta_2(N,Z)$ для 2644 четно-четных атомных ядер с использованием байесовской модели смешивания восьми моделей, полученных на основе аксиально-симметричных решений уравнения Хартри-Фока-Боголюбова с псевдопотенциалом Скирма. Было задействовано четыре типа модели байесовского смешивания. Таблицы масс ядер нуклидов были вычислены для всех четно-четных ядер, когда их зарядовое число изменялось от $Z=2$ до $Z=120$. Среднеквадратическая ошибка вычисления значений массы 624 проверочных четно-четных ядер составила около 500 КэВ.

В работе [23] представлена математическая модель, предназначенная для расчета и прогноза значений основных характеристик как атомных ядер, так и бесконечной ядерной материи. Проведен расчет характеристик атомных ядер 3149 нуклидов с максимальным значением массового числа $A_{\text{max}}=292$. Расчет проведен с использованием показателя эффективности нуклонов, значения которого определялись по экспериментальным данным удельной энергии связи атомных

ядер. Введение в расчеты значений показателя эффективности нуклонов позволило исключить влияние взаимодействия между нуклонами и получить параметрические выражения для расчета значений основных характеристик атомных ядер. Параметрические выражения для расчета и прогноза значений основных характеристик атомных ядер выглядят следующим образом [23]:

$\sigma = \sigma_\alpha \frac{\xi \cdot A}{\xi_\alpha \cdot A_\alpha} \left(\frac{\lambda_\alpha}{\lambda_{eff}} \right)^3$ — параметрическое выражение для расчета объемной плотности конфигурационной упаковки нуклонов в атомном ядре;

$\varepsilon = \varepsilon_\alpha \left(\frac{\xi \cdot A}{\xi_\alpha \cdot A_\alpha} \left(\frac{\lambda_\alpha}{\lambda_{eff}} \right)^3 \right)^2$ — параметрическое выражение для расчета удельной энергии связи атомного ядра, МэВ/нуклон;

$r_0 = r_{0\alpha} \frac{\lambda_{eff}}{\lambda_\alpha} \left(\frac{\xi_\alpha \cdot A_\alpha}{\xi \cdot A} \right)^{1/3}$ — параметрическое выражение для расчета радиуса ячейки Вигнера-Зейтца в атомном ядре, фм;

$P = P_\alpha \left(\frac{\xi \cdot A}{\xi_\alpha \cdot A_\alpha} \left(\frac{\lambda_\alpha}{\lambda_{eff}} \right)^3 \right)^3 = P_\alpha \left(\frac{\rho}{\rho_\alpha} \right)^3 = P_\alpha \left(\frac{r_{0\alpha}}{r_0} \right)^9$ — параметрическое выражение для расчета давления компактизации нуклонов в объеме атомного ядра (уравнение состояния ядерной материи), МэВ/фм³;

$\rho = \frac{3}{4\pi \cdot r_0^3} = \rho_\alpha \frac{\xi \cdot A}{\xi_\alpha \cdot A_\alpha} \left(\frac{\lambda_\alpha}{\lambda_{eff}} \right)^3$ — параметрическое выражение для расчета численной плотности конфигурационной упаковки нуклонов в атомном ядре, фм⁻³;

$R = r_0 \cdot A^{1/3} = R_\alpha \frac{\lambda_{eff}}{\lambda_\alpha} \left(\frac{\xi_\alpha}{\xi} \right)^{1/3}$ — параметрическое выражение для расчета радиуса объема атомного ядра, полученное на основе эмпирической корреляции Р. Хофстадтера [24], фм;

A — массовое число атомного ядра; ξ — показатель эффективности нуклонов в атомном ядре (определяющий параметр атомного ядра); $\lambda_{eff} = \frac{r_0 \cdot (\xi \cdot A)^{1/3}}{r_p}$ — индекс эффективного размера атомного ядра; $r_p = 0.84075 \pm 0.00064$ фм — среднеквадратичное значение зарядового радиуса протона [25]; $A_\alpha = 4$ — массовое число α -частицы; $\xi_\alpha = 1$ — показатель эффективности нуклонов в α -частице; $\lambda_\alpha = 2.1547$ — индекс эффективного размера α -частицы; $\varepsilon_\alpha = 7.073916$ МэВ/нуклон — удельная энергия связи нуклонов в α -частице, измеренная с погрешностью <0.5 эВ [26]; $\sigma_\alpha = \frac{\xi_\alpha \cdot A_\alpha}{\lambda_\alpha^3} = 0.39985196$ — объемная плотность конфигурационной упаковки нуклонов в α -частице; $r_{0\alpha} = \frac{r_p \cdot \lambda_\alpha}{(\xi_\alpha \cdot A_\alpha)^{1/3}} = 1.1412138$ фм — радиус ячейки Вигнера-Зейтца для α -частицы;

$\rho_\alpha = \frac{3}{4\pi \cdot r_{0\alpha}^3} = 0.160624$ фм⁻³ — численная плотность конфигурационной упаковки нуклонов в α -частице; $P_\alpha = \varepsilon_\alpha \cdot \rho_\alpha = 1.136241$ МэВ/фм³ — давление компактизации нуклонов в α -частице;

$R_\alpha = \frac{r_p \cdot \lambda_\alpha}{\xi_\alpha^{1/3}} = 1.811564$ фм — радиус объема α -частицы.

Цель данной работы — продолжить работу, начатую в [23], и представить характеристическое соотношение и параметрические выражения для проведения расчета основных характеристик атомных ядер 1701 нуклида из первого класса эквивалентности, расположенных на карте нуклидов от области самых легких до области сверхтяжелых нуклидов, Рис. 1.

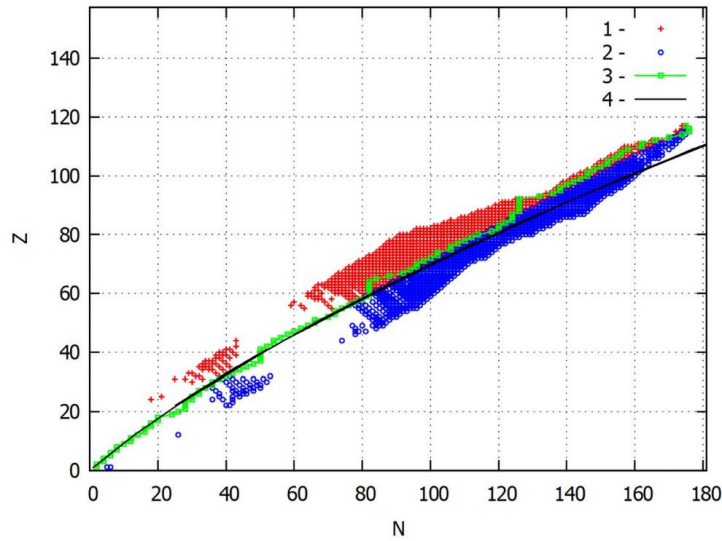


Рис. 1 Местоположение атомных ядер 1701 нуклида из первого класса эквивалентности на карте нуклидов (1 — область β^+ - нестабильных нуклидов; 2 — область β^- - нестабильных нуклидов; 3 — нуклиды с максимальным значением удельной энергии связи; 4 — линия стабильности из полуэмпирической формулы Вайцзеккера-Бете $Z=A/(1.98+0.015A^{2/3})$)

Характеристическое соотношение для нуклонов в ядрах нуклидов из первого класса эквивалентности

В рамках унифицированной математической модели сферических атомных ядер все нуклиды из первого класса эквивалентности имеют одинаковое значение индекса их эффективных размеров, равное $\lambda_{eff} = 1$ [23]. Значения радиуса ячейки Вигнера-Зейтца для атомных ядер определяются после подстановки экспериментальных значений удельной энергии связи [27] в следующее параметрическое выражение [23]:

$$r_0 = r_{0max} \left(\frac{\varepsilon}{\varepsilon_{max}} \right)^{1/6}, \quad \text{где}$$

$r_{0max} = \frac{r_p}{\sigma_{max}^{1/3}} = 0.96242$ фм — радиус ячейки Вигнера-Зейтца для бесконечной нуклонной ядерной материи [23];

$\sigma_{max} = \frac{2}{3}$ — значение объемной плотности конфигурационной упаковки нуклонов в бесконечной нуклонной ядерной материи [23];

$\varepsilon_{max} = \varepsilon_\alpha \left(\frac{\sigma_{max} \cdot \lambda_\alpha^3}{\xi_\alpha \cdot A_\alpha} \right)^2 = 19.66429$ МэВ/нуклон — удельная энергия связи бесконечной нуклонной ядерной материи [23].

Согласно определению показателя эффективности нуклонов (ξ) ядро нуклида с массовым числом A в среднем имеет $\xi \cdot A$ эффективных нуклонов, для которых условие конфигурационной упаковки по Z-алгоритму выглядит следующим образом [23]:

$$\Psi(\lambda_{eff}) = \xi \cdot A, \quad \text{где} \quad (1)$$

$$\Psi(\lambda_{eff}) = \begin{cases} 0, & \text{если } \lambda_{eff} < 1 \\ 1, & \text{если } 1 \leq \lambda_{eff} < 2 \\ 1 + \sum_{j=0}^{j_{max}-1} \Psi_j(\lambda_j), & \text{если } \lambda_{eff} - 1 - 2j_{max} < 1 \\ \sum_{j=0}^{j_{max}} \Psi_j(\lambda_j), & \text{если } \lambda_{eff} - 1 - 2j_{max} \geq 1 \end{cases} \quad \text{— суммарное число нуклонов в сферическом}$$

атомном ядре с индексом эффективного размера λ_{eff} ;

$$\Psi_j(\lambda_j) = \left\lfloor 2\lambda_j^2 \left(1 + \sqrt{1 - \lambda_j^{-2}} \right) \right\rfloor \quad \text{— максимальное число нуклонов в } j\text{-ом слое атомного ядра;}$$

$$\lambda_j = \lambda_{eff} - 1 - 2j, \quad j = 0, \dots, j_{max};$$

$j_{max} = \lfloor (\lambda_{eff} - 1)/2 \rfloor$ — максимальное значение номера слоя нуклонов в атомном ядре с индексом эффективного размера λ_{eff} ;

$\lfloor x \rfloor$ — целочисленная часть числа x .

Поиск значений показателя эффективности нуклонов ξ производится методом дихотомии с помощью функции **find-root** из системы аналитических вычислений СПО **Maxima** с постоянным начальным интервалом поиска $[10^{-5}; 2]$. Выбор метода дихотомии для поиска ξ , значение которого минимизирует невязку уравнения (1), объясняется тем, что ступенчатую функцию $\Psi(\lambda_{eff})$ невозможно продифференцировать.

Результаты поиска значений показателя эффективности нуклонов в ядрах 1701 нуклида из первого класса эквивалентности приводятся на Рис. 2. Гладкая зависимость расчетных значений показателя эффективности нуклонов в ядрах нуклидов из первого класса эквивалентности от соответствующих значений их массового числа аппроксимировалась следующим наиболее адекватным характеристическим соотношением

$$\xi = a + \frac{b}{A} + \frac{c}{A^2} + \frac{d}{A^3} + \frac{e}{A^4} + \frac{f}{A^5}. \quad (2)$$

Соответствующие значения параметров характеристического соотношения (2) и значения критериев качества аппроксимации расчетных данных представлены в Табл.1. Сравнение значений показателя эффективности нуклонов в ядрах 1701 нуклида из первого класса эквивалентности с результатами расчетов по характеристическому соотношению (2) выявило, что максимальный уровень отклонения в области легких нуклидов менее 3%, Рис. 3.



Рис. 2 Значения показателя эффективности нуклонов в ядрах 1701 нуклида из первого класса эквивалентности в зависимости от их массового числа

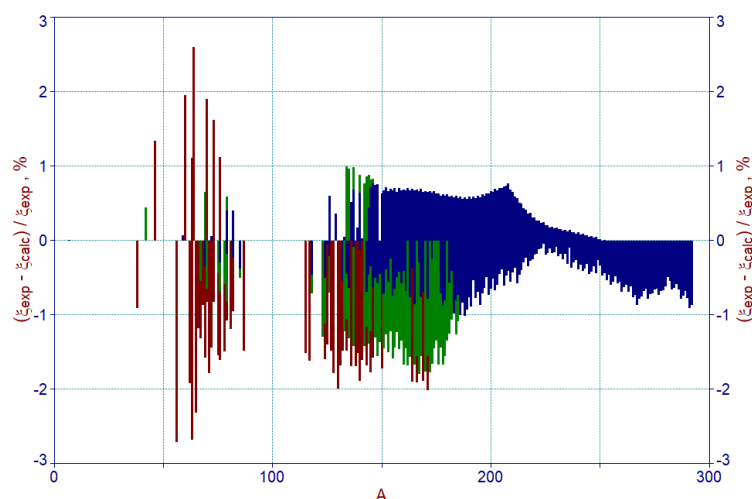


Рис. 3 Относительное отклонение показателя эффективности нуклонов ядер 1701 нуклида из первого класса эквивалентности ξ_{exp} от аналогичных результатов ξ_{calc} , рассчитанных по характеристическому соотношению (2)

Таблица 1. Критерии качества отображения зависимости значений показателя эффективности нуклонов в ядрах нуклидов из первого класса эквивалентности наиболее адекватной математической моделью

№6503 по каталогу программы Table Curve 2d: $\xi = a + \frac{b}{A} + \frac{c}{A^2} + \frac{d}{A^3} + \frac{e}{A^4} + \frac{f}{A^5}$

Коэффициент детерминации	Скорректированный коэффициент детерминации	Стандартная ошибка	Критерий Фишера		
0.9996668634	0.9996656835	2.28609e-05	1017261.6928		
Параметры модели					
Параметр	Значение параметра	Ошибка	t-критерий	Доверительные пределы 99.9%	
a	-0.00014116	6.71845e-06	-21.0114405	-0.00016331	-0.00011902
b	0.434729525	0.002380813	182.5971236	0.426881712	0.442577338
c	3.881765184	0.261791030	14.82772419	3.018829917	4.744700451
d	-251.980472	10.09159976	-24.9693287	-285.245161	-218.715782
e	2463.574584	101.0183461	24.38739772	2130.590319	2796.558849
f	-6919.85865	295.6114391	-23.4086295	-7894.27529	-5945.44201
Дисперсионный анализ					
Источник изменчивости	Сумма квадратов	Степени свободы	Средний квадрат	Критерий Фишера	
Фактор	0.0026582239	5	0.00053164479	1.01726e+06	
Ошибка	8.858467e-07	1695	5.2262342e-10		
Сумма	0.0026591098	1700			

Дальнейшее повышение точности аппроксимации значений показателя эффективности нуклонов ядер 1701 нуклида из первого класса эквивалентности достигается за счет увеличения числа независимых факторов в характеристическом соотношении за счет перехода от массовых чисел (A) к числу протонов (Z) и числу нейтронов (N) в составе этих ядер. Найдено, что наиболее точной аппроксимацией среди эмпирических корреляций с 10 параметрами оказалось следующее выражение

$$\xi = \frac{\sqrt{F(Z,N)}}{Z+N}, \quad \text{где} \quad (4)$$

$$F(Z,N) = a + b \cdot \ln(Z) + c \cdot \ln(N) + d \cdot \ln(Z)^2 + e \cdot \ln(N)^2 + f \cdot \ln(Z) \cdot \ln(N) + g \cdot \ln(Z)^3 + h \cdot \ln(N)^3 + i \cdot \ln(Z)^2 \cdot \ln(N) + j \cdot \ln(Z) \cdot \ln(N)^2.$$

Соответствующие значения параметров характеристического соотношения (4) и значения критериев качества аппроксимации расчетных данных представлены в Табл. 2. Графическое отображение зависимости значений показателя эффективности нуклонов в ядрах нуклидов из первого класса эквивалентности от числа нейтронов и числа протонов в их составе приводится на Рис. 4.

На Рис. 5 приводятся значения относительного отклонения показателя эффективности нуклонов ядер 1701 нуклида из первого класса эквивалентности ξ_{exp} от аналогичных результатов ξ_{calc} , рассчитанных по характеристическому соотношению (4).

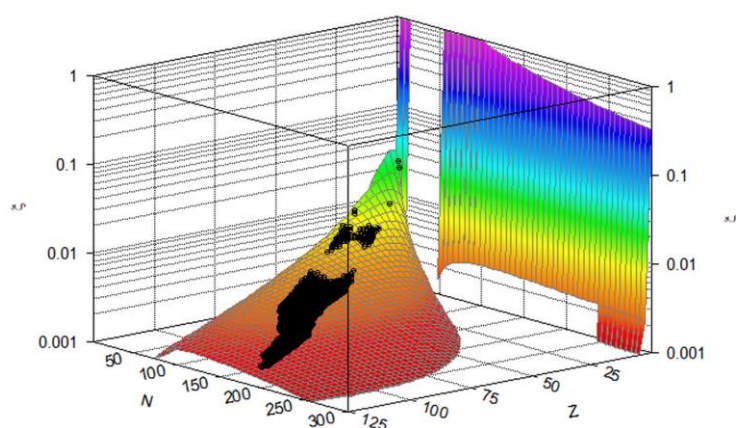


Рис. 4 Показатель эффективности нуклонов в ядрах 1701 нуклида из первого класса эквивалентности

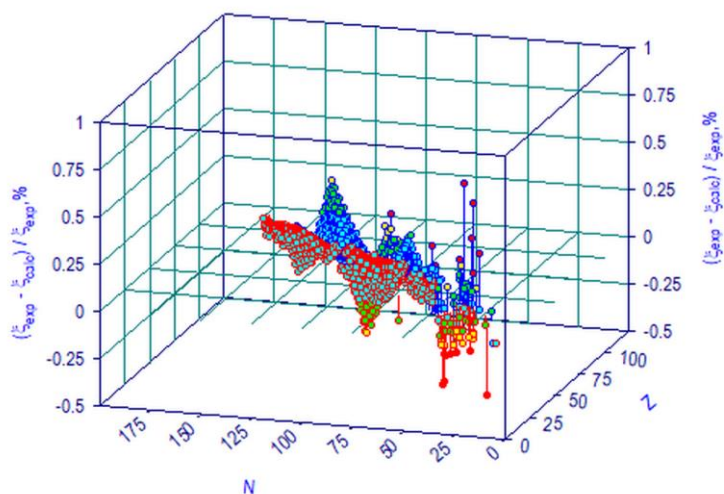


Рис. 5 Относительное отклонение показателя эффективности нуклонов ядер 1701 нуклида из первого класса эквивалентности ξ_{exp} от аналогичных результатов ξ_{calc} , рассчитанных по характеристическому соотношению (4)

Таблица 2. Критерии качества отображения зависимости значений показателя эффективности нуклонов в ядрах нуклидов из первого класса эквивалентности наиболее точной эмпирической корреляцией с 10 параметрами, найденными с помощью программы Table Curve 3d

Коэффициент детерминации	Скорректированный коэффициент детерминации	Стандартная ошибка	Критерий Фишера		
0.9999907747	0.9999907201	3.80878e-06	2.036653e+07		
Параметры модели					
Параметр	Значение параметра	Ошибка	t-критерий	Доверительные пределы 95%	
a	0.029237694	0.009596287	3.046771505	0.010415845	0.048059542
b	0.029237694	0.002007351	18.94375457	0.034089612	0.041963919
c	0.029237694	0.007263963	6.397683291	0.032225233	0.060719842
d	0.029237694	0.004214212	-10.6783031	-0.05326625	-0.03673501
e	0.029237694	0.002845748	-21.6609058	-0.06722304	-0.05605992
f	0.029237694	0.008069359	12.47591845	0.084845681	0.116499643
g	0.029237694	0.000993415	-43.8908445	-0.04555029	-0.04165339
h	0.029237694	0.001632702	11.36716267	0.015356857	0.021761515
i	0.029237694	0.003813798	25.14760015	0.088427615	0.103388138
j	0.029237694	0.004549475	-15.8886649	-0.08120828	-0.06336189
Дисперсионный анализ					
Источник изменчивости	Сумма квадратов	Число степеней свободы	Средний квадрат	Критерий Фишера	
Фактор	0.0026590852	9	0.00029545392	2.036653e+07	
Ошибка	2.4531064e-08	1691	1.4506839e-11		
Сумма	0.0026591098	1700			

Определение значений параметров характеристического соотношения (4) производится с использованием автоматического смещения числа нейтронов и числа протонов за счет прибавления к ним машинного нуля ($\nu_0 = 10^{-32}$), что позволяет исключить появление ошибки из-за передачи нуля в логарифмическую функцию. Дальнейшее уменьшение значения ν_0 не изменяет вид функции и значения параметров характеристического соотношения (4). Вид функции и значения параметров характеристического соотношения (4) оказались таковы, что появилась возможность исследования значений показателя эффективности различных нейтронных кластеров при отсутствии в их составе протонов. Появление хотя бы одного протона в составе нейтронного кластера резко снижает значение показателя эффективности нуклонов, Рис. 4. Характеристическое соотношение (4) исключает существование кластеров, состоящих только из протонов.

Согласно Рис. 4 можно спрогнозировать существование нейтронного аналога α -частицы ($\xi_\alpha = 1$) в виде экстремального нейтронного кластера из 99 нейтронов с показателем эффективности близкого к единице $\xi_n = 0.99422551$. Увеличение числа нейтронов в составе нейтронного кластера более 99 приводит к постепенному снижению значения показателя эффективности нуклонов, Рис. 4. Согласно параметрическим выражениям, экстремальный нейтронный кластер, состоящий из $N_n = 99$ нейтронов, $Z_n = 0$ протонов и $A_n = 99$ нуклонов, имеет следующие значения его характеристик:

$\varepsilon_n = \varepsilon_\alpha \left(\frac{\xi_n \cdot A_n}{\xi_\alpha \cdot A_\alpha} \left(\frac{\lambda_\alpha}{\lambda_{eff}} \right)^3 \right)^2 = 4.28648 \cdot 10^5 \frac{\text{МэВ}}{\text{нуклон}}$ — удельная энергия связи экстремального нейтронного кластера;

$r_{0n} = r_{0\alpha} \frac{\lambda_{eff}}{\lambda_\alpha} \left(\frac{\xi_\alpha \cdot A_\alpha}{\xi_n \cdot A_n} \right)^{1/3} = 0.1820931 \text{ фм}$ — радиус ячейки Вигнера-Зейтца в экстремальном нейтронном кластере;

$P_n = P_\alpha \left(\frac{\xi_n \cdot A_n}{\xi_\alpha \cdot A_\alpha} \left(\frac{\lambda_\alpha}{\lambda_{eff}} \right)^3 \right)^3 = 1.694853 \cdot 10^7 \frac{\text{МэВ}}{\text{фм}^3}$ — давление компактизации нуклонов в объеме экстремального нейтронного кластера;

$R_n = r_{0n} \cdot A_n^{1/3} = 0.84237454 \text{ фм}$ — радиус объема экстремального нейтронного кластера.

Экстремальное значение давления компактизации P_n сжало кластер из 99 нейтронов до размера одного нуклона, что не позволяет использовать параметрические выражения для расчета объемной и численной плотности конфигурационной упаковки нейтронов в объеме экстремального кластера.

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТА ХАРАКТЕРИСТИК ЯДЕР НУКЛИДОВ ИЗ ПЕРВОГО КЛАССА ЭКВИВАЛЕНТНОСТИ

Расчет значений основных характеристик ядер 1701 нуклида из первого класса эквивалентности становится возможным после подстановки характеристического соотношения (4) в соответствующие параметрические выражения, полученные в рамках унифицированной математической модели сферических атомных ядер.

Выражение для расчета значений удельной энергии связи (МэВ/нуклон) ядер 1701 нуклида из первого класса эквивалентности получается из следующего параметрического соотношения [23]:

$$\varepsilon = \varepsilon_\alpha \left[\frac{\xi \cdot A}{\xi_\alpha \cdot A_\alpha} \left(\frac{\lambda_\alpha}{\lambda_{eff}} \right)^3 \right]^2 = \frac{\varepsilon_{lim}}{\lambda_{eff}^6} F(Z, N), \quad \text{где} \quad (5)$$

$\varepsilon_{lim} = \varepsilon_\alpha \left[\frac{\lambda_\alpha^3}{\xi_\alpha \cdot A_\alpha} \right]^2 = 44.2447 \text{ МэВ/нуклон}$ — предельное значение удельной энергии связи бесконечной кварк-глюонной материи [23].

На Рис. 6 приводятся значения относительного отклонения экспериментальных значений удельной энергии связи ядер 1701 нуклида из первого класса эквивалентности ε_{exp} от аналогичных результатов ε_{calc} , рассчитанных по соотношению (5). Изолинии с постоянным значением удельной энергии связи атомных ядер нуклидов из первого класса эквивалентности приводятся на Рис. 7.

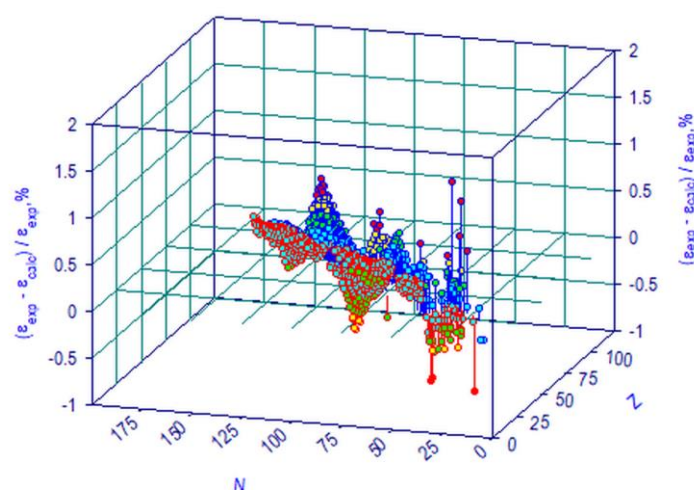


Рис.6 Относительное отклонение экспериментальных значений удельной энергии связи ядер 1701 нуклида из первого класса эквивалентности ϵ_{exp} от аналогичных результатов ϵ_{calc} , рассчитанных по соотношению (5)

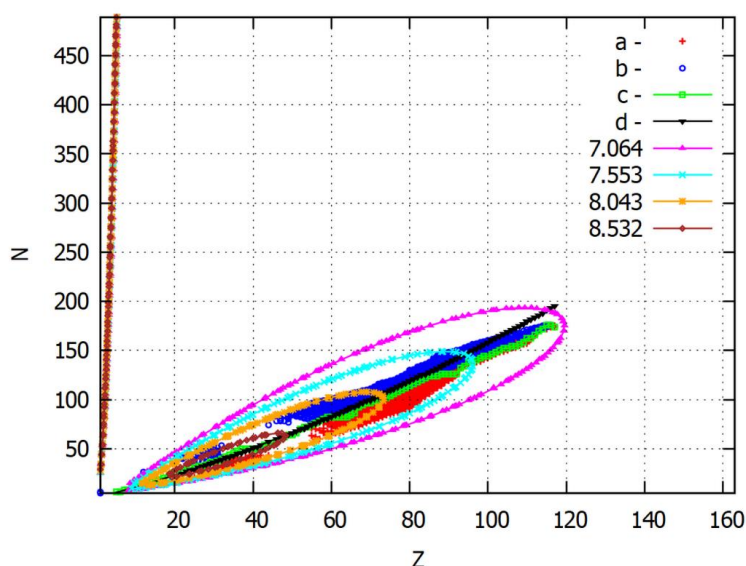


Рис.7 Контурный график удельной энергии связи атомных ядер на карте нуклидов с указанием местоположения 1701 нуклида из первого класса эквивалентности (a — область β^+ -нестабильных нуклидов; b — область β^- -нестабильных нуклидов; c — нуклиды с максимальным значением удельной энергии связи (хребетная линия); d — линия стабильности из полуэмпирической формулы Вайцзеккера-Бете $Z=A/(1.98+0.015A^{2/3})$; числа от 7.064 до 8.532 — обозначают изолинии с соответствующим постоянным значением ϵ , МэВ/нуклон)

Оценка точности расчета значений удельной энергии связи ядер 1701 нуклида из первого класса эквивалентности производится с помощью следующих показателей:

нижней (Δ_-) и верхней (Δ_+) границ диапазона изменения погрешности расчета характеристики атомного ядра $\Delta_- = \min_{A_1}(y_{\text{exp}} - y)$ и $\Delta_+ = \max_{A_1}(y_{\text{exp}} - y)$, где A_1 — множество нуклидов из первого класса эквивалентности и y_{exp} , y — соответствующие экспериментально измеренные и расчетные значения характеристики атомного ядра;

среднего значения абсолютной $\langle \Delta_{abs} \rangle$ и среднего значения относительной $\langle \delta \rangle$ погрешности расчета удельной энергии связи по всем 1701 нуклидам из первого класса эквивалентности

$$\langle \Delta_{abs} \rangle = \frac{1}{1701} \sum_{A_1} |y_{exp} - y| \text{ и } \langle \delta \rangle = \frac{100\%}{1701} \sum_{A_1} \frac{|y_{exp} - y|}{y_{exp}}.$$

В случае соотношения (5) получились следующие показатели оценки точности расчета удельной энергии связи ядер нуклидов из первого класса эквивалентности:

$$\Delta_- = -63.9294 \frac{\text{КэВ}}{\text{нуклон}}; \Delta_+ = 107.5262 \frac{\text{КэВ}}{\text{нуклон}}; \langle \Delta_{abs} \rangle = 10.6482 \frac{\text{КэВ}}{\text{нуклон}}; \langle \delta \rangle = 0.1342\%.$$

Выражение для расчета значений объемной плотности конфигурационной упаковки нуклонов в ядрах 1701 нуклида из первого класса эквивалентности получается из следующего параметрического соотношения [23]

$$\sigma = \sigma_\alpha \frac{\xi \cdot A}{\xi_\alpha \cdot A_\alpha} \left(\frac{\lambda_\alpha}{\lambda_{eff}} \right)^3 = \frac{\sqrt{F(Z, N)}}{\lambda_{eff}^3}. \quad (6)$$

На Рис. 8 приводятся значения относительного отклонения значений объемной плотности конфигурационной упаковки нуклонов в ядрах 1701 нуклида из первого класса эквивалентности σ_{exp} от аналогичных результатов σ_{calc} , рассчитанных по соотношению (6). Изолинии с постоянным значением объемной плотности конфигурационной упаковки нуклонов в атомных ядрах нуклидов из первого класса эквивалентности приводятся на Рис. 9.

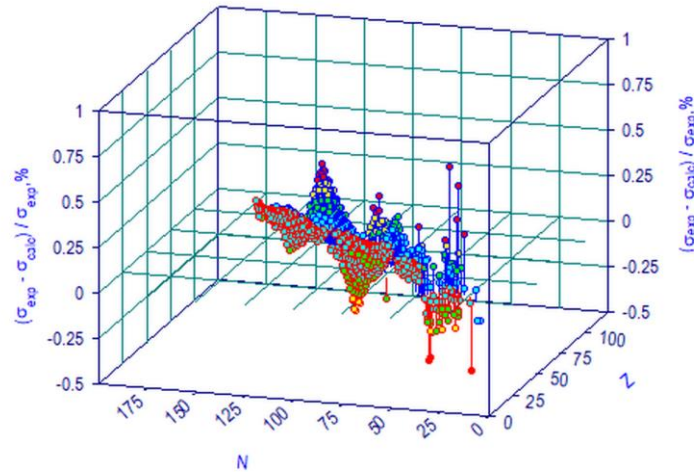


Рис. 8 Относительное отклонение значений объемной плотности конфигурационной упаковки нуклонов в ядрах 1701 нуклида из первого класса эквивалентности σ_{exp} от аналогичных результатов σ_{calc} , рассчитанных по соотношению (6)

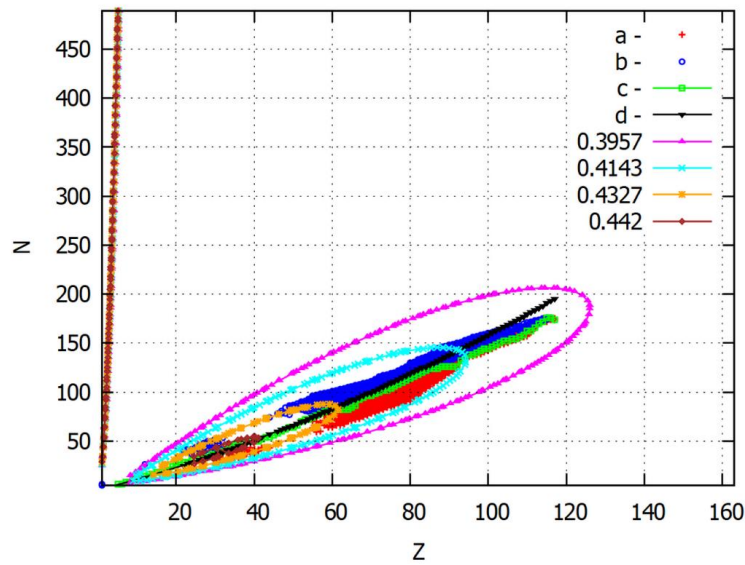


Рис. 9 Контурный график объемной плотности конфигурационной упаковки нуклонов в атомных ядрах на карте нуклидов с указанием местоположения 1701 нуклида из первого класса эквивалентности (a — область β^+ - нестабильных нуклидов; b — область β^- - нестабильных нуклидов; c — нуклиды с максимальным значением удельной энергии связи (хребетная линия); d — линия стабильности из полуэмпирической формулы Вайцзеккера-Бете $Z=A/(1.98+0.015A^{2/3})$; числа от 0.3957 до 0.442 — обозначают изолинии с соответствующим постоянным значением σ , доля объема атомного ядра)

Выражение для расчета значений радиуса ячейки Вигнера_Зейтца в ядрах 1701 нуклида из первого класса эквивалентности получается из следующего параметрического соотношения [23]

$$r_0 = r_{0\alpha} \frac{\lambda_{eff}}{\lambda_\alpha} \left(\frac{\xi_\alpha \cdot A_\alpha}{\xi \cdot A} \right)^{1/3} = r_p \frac{\lambda_{eff}}{F(Z,N)^{1/6}}. \quad (7)$$

На Рис. 10 приводятся значения относительного отклонения значений радиуса ячейки Вигнера-Зейтца в ядрах 1701 нуклида из первого класса эквивалентности r_{0exp} от аналогичных результатов r_{0calc} , рассчитанных по соотношению (7). Изолинии с постоянным значением радиуса ячейки Вигнера-Зейтца в атомных ядрах нуклидов из первого класса эквивалентности приводятся на Рис. 11.

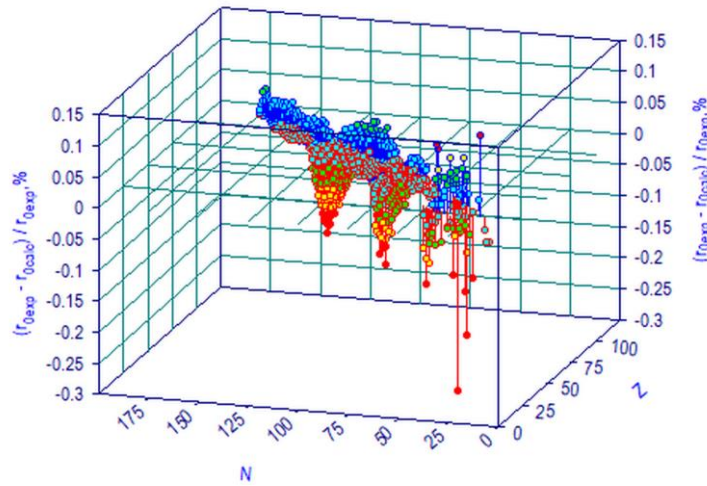


Рис. 10 Относительное отклонение значений радиуса ячейки Вигнера-Зейтца в ядрах 1701 нуклида из первого класса эквивалентности r_{0exp} от аналогичных результатов r_{0calc} , рассчитанных по соотношению (7)

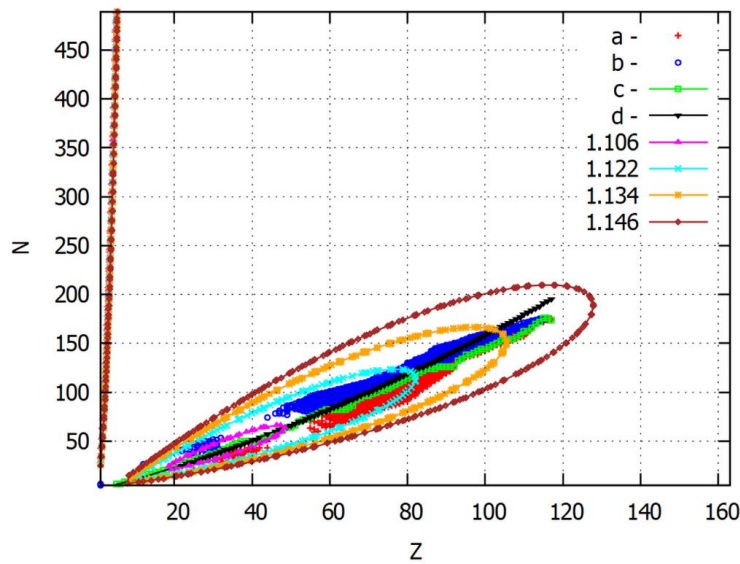


Рис. 11 Контурный график радиуса ячейки Вигнера-Зейтца в атомных ядрах на карте нуклидов с указанием местоположения 1701 нуклида из первого класса эквивалентности (a — область β^+ - нестабильных нуклидов; b — область β^- - нестабильных нуклидов; c — нуклиды с максимальным значением удельной энергии связи (хребтовая линия); d — линия стабильности из полуэмпирической формулы Вайцеккера-Бете $Z=A/(1.98+0.015A^{2/3})$; числа от 1.106 до 1.146 — обозначают изолинии с соответствующим постоянным значением r_0 , фм)

Выражение для расчета значений давления компактизации в ядрах 1701 нуклида из первого класса эквивалентности получается из следующего параметрического соотношения [23]

$$P = P_\alpha \left(\frac{\xi \cdot A}{\xi_\alpha \cdot A_\alpha} \left(\frac{\lambda_\alpha}{\lambda_{eff}} \right)^3 \right)^3 = \frac{P_{lim}}{\lambda_{eff}^9} F(Z, N)^{3/2}, \quad \text{где} \quad (8)$$

$P_{lim} = P_{\alpha} \left(\frac{\lambda_{\alpha}^3}{\xi_{\alpha} \cdot A_{\alpha}} \right)^3 = 17.7735 \text{ МэВ/фм}^3$ — предельное значение давления компактизации в бесконечной кварк-глюонной материи [23].

На Рис. 12 приводятся значения относительного отклонения давления компактизации в ядрах 1701 нуклида из первого класса эквивалентности P_{exp} от аналогичных результатов P_{calc} , рассчитанных по соотношению (8). Изолинии с постоянным значением давления компактизации в атомных ядрах нуклидов из первого класса эквивалентности приводятся на Рис. 13.

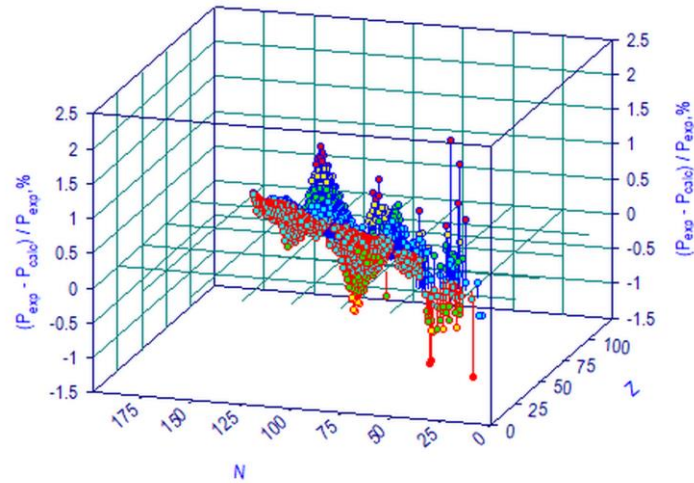


Рис.12 Относительное отклонение значений давления компактизации в ядрах 1701 нуклида из первого класса эквивалентности P_{exp} от аналогичных результатов P_{calc} , рассчитанных по соотношению (8)

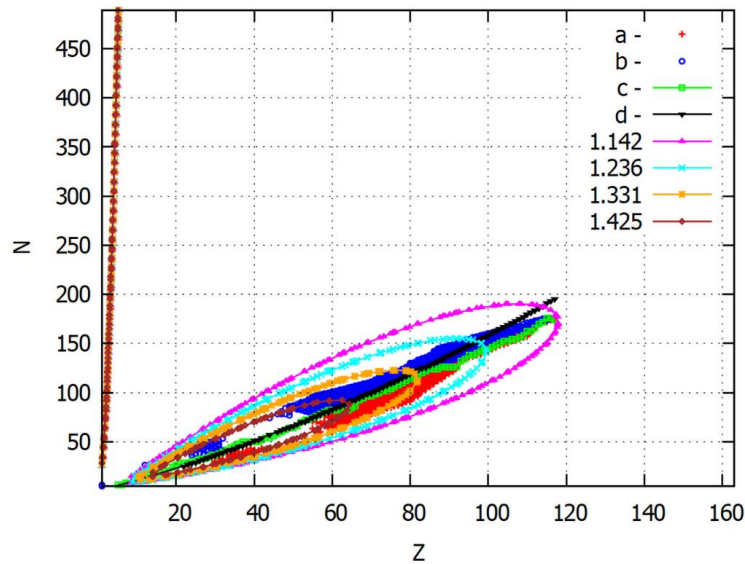


Рис. 13 Контурный график давления компактизации в атомных ядрах на карте нуклидов с указанием местоположения 1701 нуклида из первого класса эквивалентности (a — область β^+ -нестабильных нуклидов; b — область β^- -нестабильных нуклидов; c — нуклиды с максимальным значением удельной энергии связи (хребетная линия); d — линия стабильности из полуэмпирической формулы Вайцзеккера-Бете $Z=A/(1.98+0.015A^{2/3})$; числа от 1.142 до 1.425 — обозначают изолинии с соответствующим постоянным значением P , МэВ/фм³)

Выражение для расчета значений радиуса объема ядер 1701 нуклида из первого класса эквивалентности получается из следующего параметрического соотношения [23]

$$R = R_{\alpha} \frac{\lambda_{eff}}{\lambda_{\alpha}} \left(\frac{\xi_{\alpha}}{\xi} \right)^{1/3} = r_p \cdot \lambda_{eff} \left[\frac{Z+N}{\sqrt{F(Z,N)}} \right]^{1/3}. \quad (9)$$

На Рис.14 приводятся значения относительного отклонения радиуса объема ядер 1701 нуклида из первого класса эквивалентности R_{exp} от аналогичных результатов R_{calc} , рассчитанных по соотношению (9). Изолинии с постоянным значением радиуса объема атомных ядер нуклидов из первого класса эквивалентности приводятся на Рис. 15.

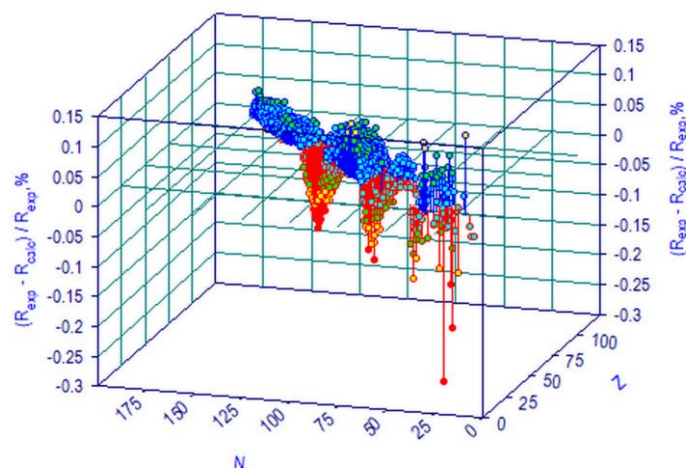


Рис.14 Относительное отклонение значений радиуса объема ядер 1701 нуклида из первого класса эквивалентности R_{exp} от аналогичных результатов R_{calc} , рассчитанных по соотношению (9)

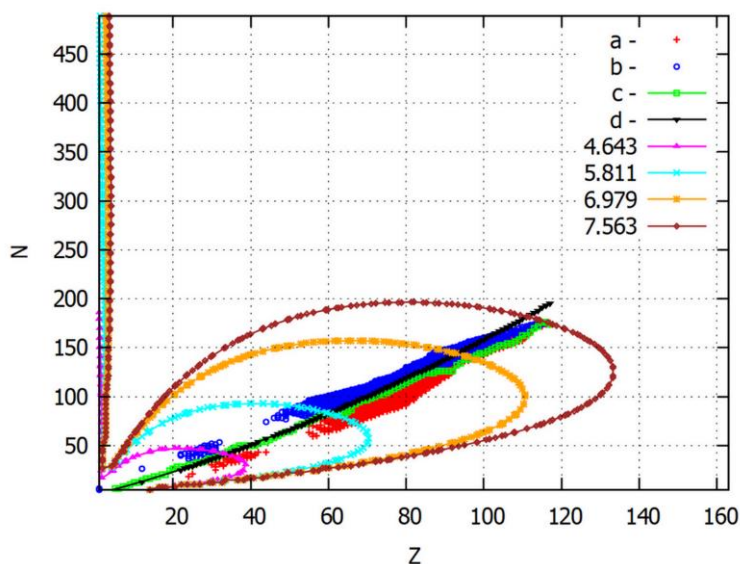


Рис. 15 Контурный график радиуса объема атомных ядер на карте нуклидов с указанием местоположения 1701 нуклида из первого класса эквивалентности (a — область β^+ - нестабильных нуклидов; b — область β^- - нестабильных нуклидов; c — нуклиды с максимальным значением удельной энергии связи (хребетная линия); d — линия стабильности из полуэмпирической формулы Вайцеккера-Бете $Z=A/(1.98+0.015A^{2/3})$; числа от 4.643 до 7.563 — обозначают изолинии с соответствующим постоянным значением R, фм)

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе представлено характеристическое соотношение в виде двумерного кубического полинома в логарифмических координатах от числа протонов и числа нейтронов в составе ядер 1701 нуклида, определенных ранее в [23] как первый из восьми классов эквивалентности. Нуклиды из первого класса эквивалентности располагаются на карте нуклидов от области самых легких до области сверхтяжелых нуклидов. Характеристическое соотношение служит для вычисления значений определяющего параметра (показателя эффективности нуклонов в атомных ядрах) с коэффициентом детерминации 0.99999077 и относительной погрешностью не более 0.75%. Подстановка характеристического соотношения в параметрические выражения, полученные ранее в рамках унифицированной математической модели сферических атомных ядер [23], позволила в данной работе получить аналитические соотношения для расчета с высокой степенью точности основных характеристик ядер 1701 нуклида — удельной энергии связи, объемной и численной плотности конфигурационной упаковки нуклонов, радиуса объема атомных ядер и соответствующего радиуса ячейки Вигнера-Зейтца, давления компактизации и уравнения состояния ядерной материи. Например, среднее значение абсолютной погрешности расчета удельной энергии связи ядер 1701 нуклида, от самых легких до сверхтяжелых, равно 10.6482 КэВ при среднем значении относительной погрешности 0.1342%. Найденная в данной работе степень согласованности результатов расчета значений основных характеристик ядер 1701 нуклида из первого класса эквивалентности со значениями аналогичных экспериментальных данных практически соответствует точности расчетов по физическим законам. На основе представленного в работе характеристического соотношения сделан прогноз о необходимых условиях существования кластеров из нейтронов: в составе кластера не должно быть протонов и число нейтронов в кластере должно быть не менее 99. Произведен расчет значений характеристик минимально возможного кластера из 99 нейтронов, который по уровню показателя эффективности его нейтронов аналогичен α -частице.

Конфликт интересов

Автор данной работы заявляет, что он не имеет конфликта интересов.

Список литературы

1. О.П. Бадаев, С.Д. Кургалин, Ю.М. Чувильский, В. Шайд. Энергия связи и времена жизни сверхтяжелых ядер // Вестник ВГУ. Серия: Физика. Математика. 2007. №2. С.5-19.
2. А. Собичевски. Теоретическое описание и предсказания свойств сверхтяжелых ядер // Успехи химии 78(12)2009. С.1200-1210.
3. А.В. Карпов, В.А. Рачков, В.В. Сайко. Получение нейтронообогащенных тяжелых и сверхтяжелых ядер в реакциях слияния // Письма в ЭЧАЯ. 2018.т.15. №3(215). С.196-209.
4. Ю.Ц. Оганесян, С.Н. Дмитриев. Сверхтяжелые элементы Периодической системы Д.И. Менделеева // Успехи химии 78(12)2009. С.1165-1176.
5. Б.С. Ииханов, Т.Ю. Третьякова. Путь к сверхтяжелым элементам // ВМУ Серия 3. Физика. Астрономия. 2017. №3. С.3-20.
6. Е.В. Владимиров, Б.С. Ииханов, М.В. Симонов, Т.Ю. Третьякова. Оценка энергий связи сверхтяжелых ядер на основе массовых соотношений для остаточного пр-взаимодействия // Ученые записки физического факультета Московского университета №3. 1930409(2019). С.1-4.
7. Н.Н. Колесников. Энергия связи и стабильность тяжелых и сверхтяжелых ядер // ВМУ. Серия 3. Физика. Астрономия. 2016. №4. С.42-49.

8. В.С. Окунев. Исследование эффектов стабилизации и влияния перегруженности протонами на ядерно-физические свойства тяжелых нуклидов // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. «Естественные науки». 2011. №4. С.81-98.
9. Ю. М. Широков, Н. П. Юдин. Ядерная физика. (Наука, Москва, 1972).
10. Бор А., Моттельсон Б. Структура атомного ядра. М.: Мир, 1971. Т.1.
11. Джолос Р.В. Нуклон-нуклонное взаимодействие как основа для исследования структуры тяжелых ядер // Ядерная физика, 2023, том 86, №2, с337-344.
12. Ghahramany N., Gharaat Sh., and Ghanaatian M., New Approach to Nuclear Binding Energy in Integrated Nuclear Model // Physics of Particles and Nuclei Letters **8**, No2 (165), 169-181 (2011).
13. П. Б. Кац, С. М. Удовенко, Формула Бете-Вайцзеккера. Обзор и подбор коэффициентов // Веснік Брэсцкага ўніверсітэта. Серыя 4: Фізіка. Матэматыка, №2, 26-45 (2021).
14. Джолос Р.В., Колганова Е.А. Структура атомного ядра: вчера и сегодня // Физика элементарных частиц и атомного ядра, 2024, Т.55, вып.5, С.1399-1424.
15. Norman D. Cook Models of the Atomic Nucleus. Unification through a Lattice of Nucleons. Second Edition. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2010, p.324.
16. Н.Д. Минченков. Новый метод расчета энергии связи атомных ядер // Вестник молодого ученого УГНТУ №3. 2023. С.115-122.
17. P. Möller, W.D. Myers, and W.J. Swiatecki, J. Treiner. Nuclear Mass Formula with a Finite-Range Droplet Model and a Folded-Yukawa Single-Particle Potential // At. Data and Nucl. Data Tables, 1988. 39, pp. 225-233.
18. А.О. Белозеров, А.И. Мазур. Машинное обучение для задач экстраполяции с малым объемом данных // Системы и средства информатики. 2022. Т.32. №2. С.13-22.
19. Н.А. Блинов. Возможности машинного обучения для нахождения энергии связи и дефекта массы атомного ядра // https://elibrary.ru/58801093_86427438.pdf
20. М.В. Симонов, У.В. Владимирова, Т.Ю. Третьякова, Б.С. Ишиханов. Феноменологический подход к вычислению энергий связи для сверхтяжелых элементов // Известия РАН. Серия физическая. 2021. Том 85. №5. С.676-681.
21. К.А. Стопани, Е.В. Владимирова, В.В. Негребецкий, М.В. Симонов, Т.Ю. Третьякова. Модель масс ядер на основе байесовской оценки локальных разностных соотношений энергий связи // Ядерная физика, 2023, том 86, №4, с.476-484. doi: 10.31857/S0044002723040347.
22. Sharma A., Schunck N. and Wendt K. Bayesian model mixing with multi reference energy density functional // PHYSICAL REVIEW RESEARCH **7**, 023179 (2025) DOI: 10.1103/PhysRevResearch.7.023179.
23. А.Н. Зарубин. Унифицированная математическая модель сферических атомных ядер // Проблемы науки №3(96), 2026. С.5-24; <https://arxiv.org/ru/a/AX-136203>.
24. Р. Хофстадтер, Рассеяние электронов и структура ядер. // УФН LXIII, Декабрь, вып.4, 693-759 (1957) [Phys. Rev. 28, 214 (1956)].
25. Proton rms charge radius // The NIST Reference on Constants, Units, and Uncertainty. CODATA. Internationally recommended 2022 values of the Fundamental Physical Constants.
26. Live Chart of Nuclides Nuclear Data Services [Electronic resource]: <http://www-nds.iaea.org/relnsd/vcharthtml/VChartHTML.html> (accessed 11.11.2024)
27. Параметры основных и изомерных состояний атомных ядер. База данных ЦДФЭ НИИЯФ МГУ. <http://www.cdfе.sinp.msu.ru/services/gsp.ru.html>. (Дата обращения 05.10.2020)