



МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ  
ИМЕНИ М. В. ЛОМОНОСОВА  
ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ  
КАФЕДРА ОБЩЕЙ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ



Владимирова Елена Витальевна

# ПАРНЫЕ КОРРЕЛЯЦИИ НУКЛОНОВ И ОЦЕНКИ МАСС АТОМНЫХ ЯДЕР

---

НИИЯФ 2021

## Содержание

- 1. Изучение массовых соотношений, отражающих парные корреляции нуклонов**
- 2. Оценки на основе аппроксимаций массовых соотношений для  $np$ -корреляций**
  - положение границ существования ядер
  - характеристики  $\alpha$ -распада сверхтяжелых элементов
- 3. Разработка программ для работы с массовыми соотношениями**

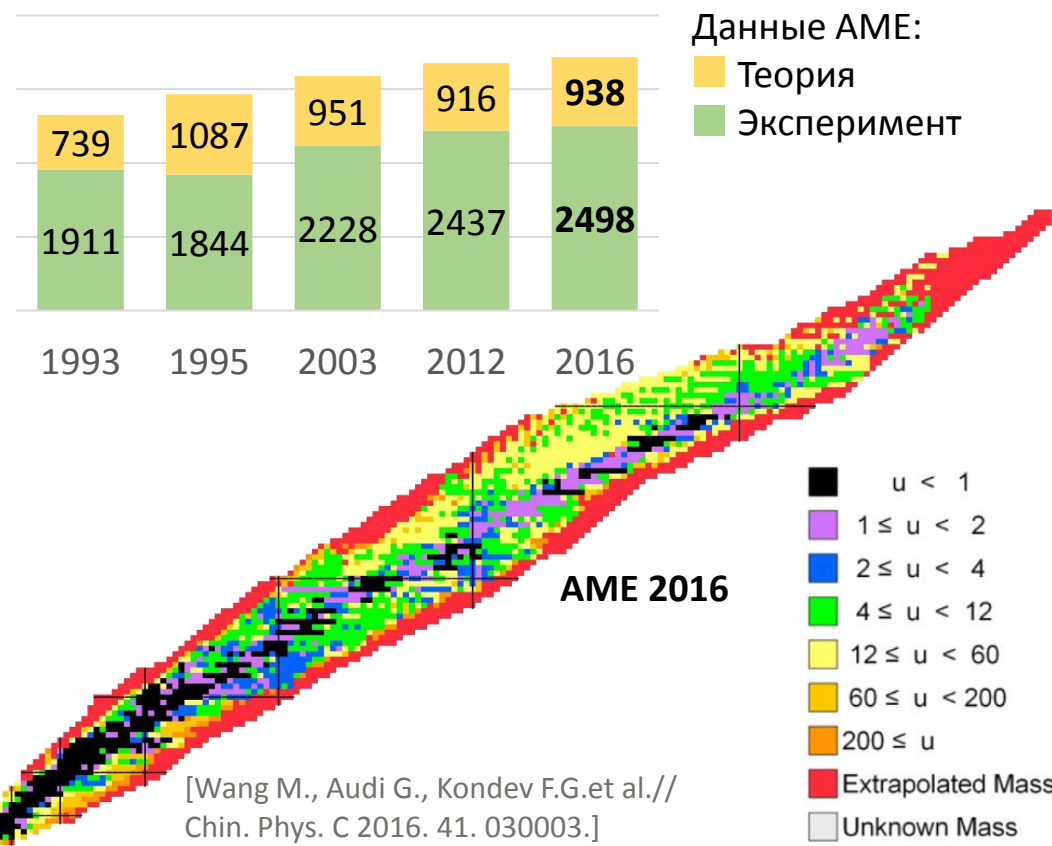
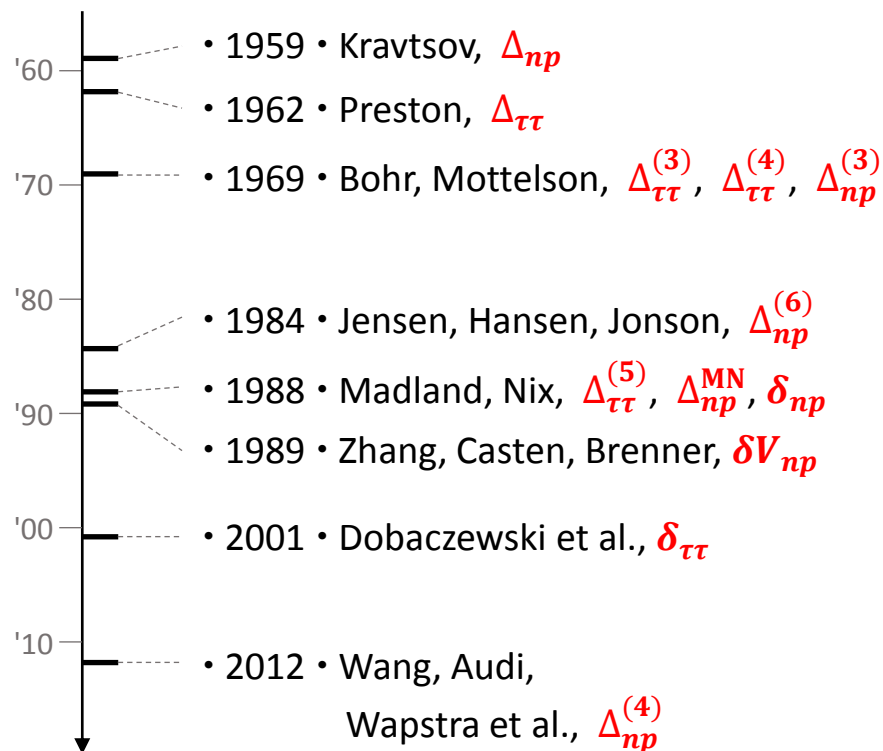
## Массовые соотношения

### Некоторые проявления спаривания нуклонов:

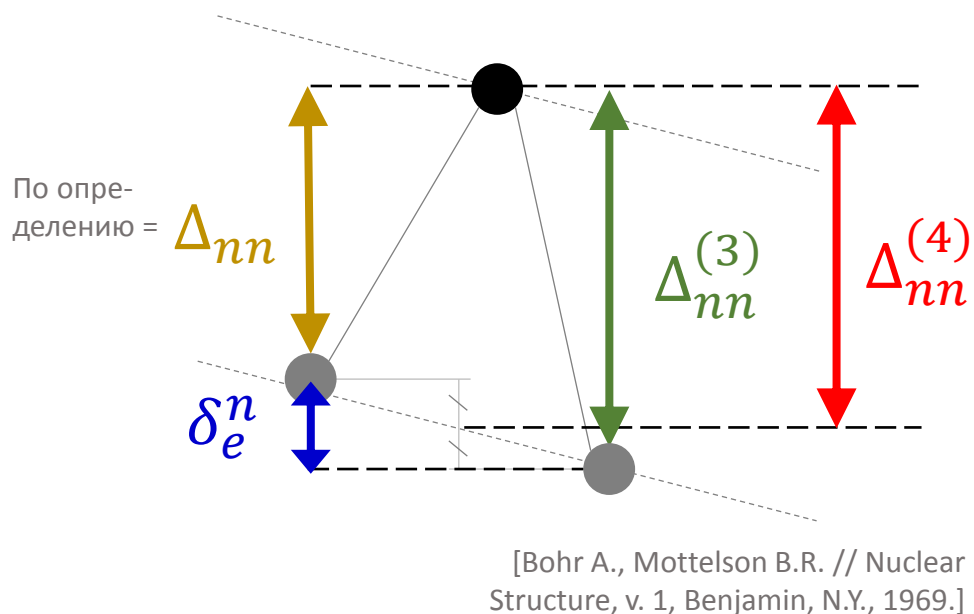
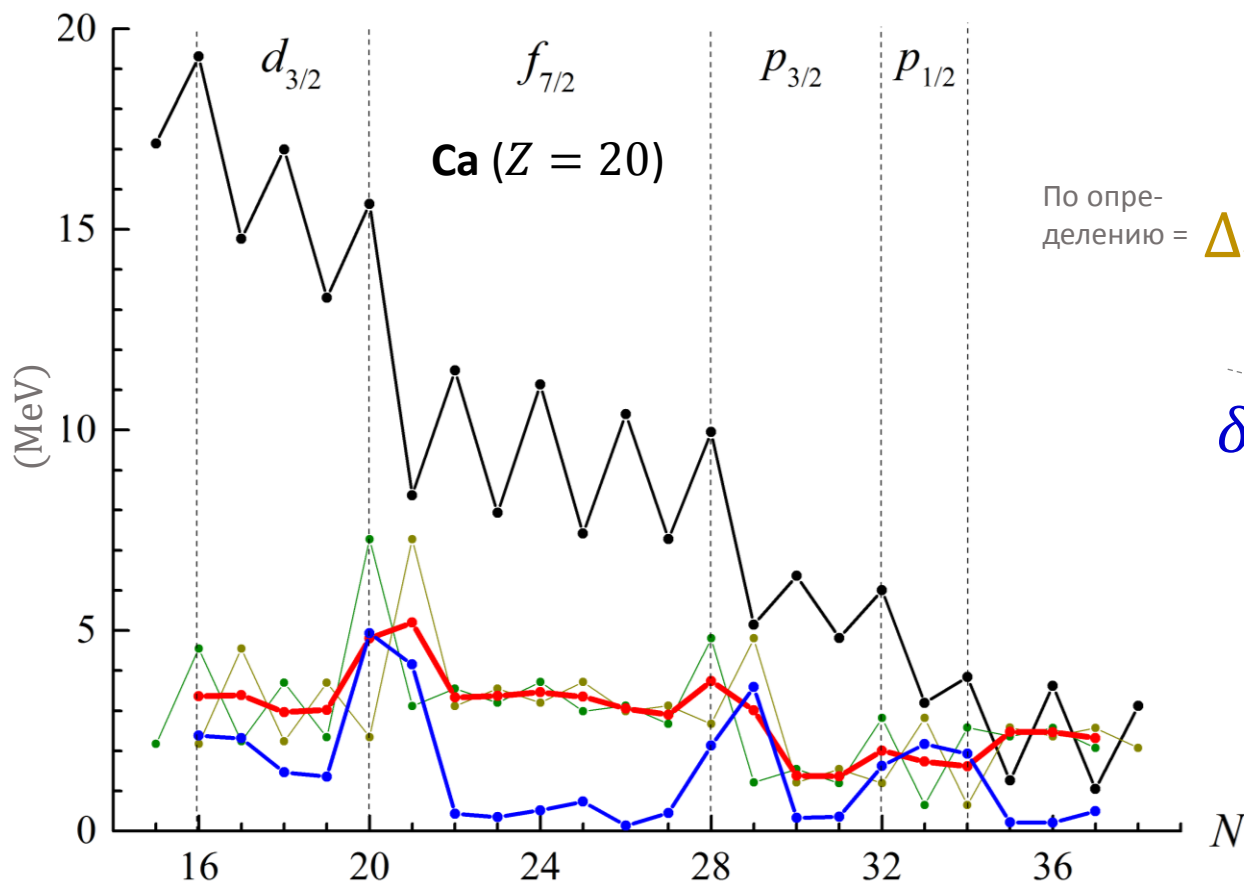
- $J^P(\text{четно} - \text{четных}) = 0^+$
- Повышенная стабильность even-even ядер
- **EOS-эффект:**  $B_{\text{odd}}(A) < \frac{1}{2} [B_{\text{even}}(A - 1) + B_{\text{even}}(A + 1)]$ ,  $B$  – энергия связи ядра

(1 – 3 MeV)

Соотношения для оценки парных корреляций:



# Корреляции тождественных нуклонов на примере нейтронов



Графики по данным AME2016  
[Wang M., Audi G., Kondev F.G. et al.// Chin. Phys. C 2016 . 41. 030003.]

$$S_n(N, Z) = B(N, Z) - B(N-1, Z)$$

$$\Delta_{nn} = (-1)^N [S_n(N) - S_n(N-1)]$$

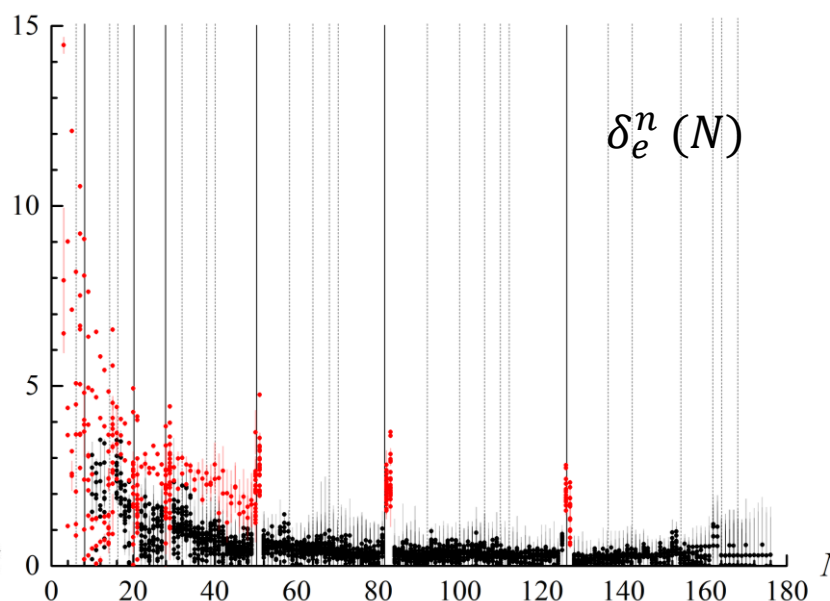
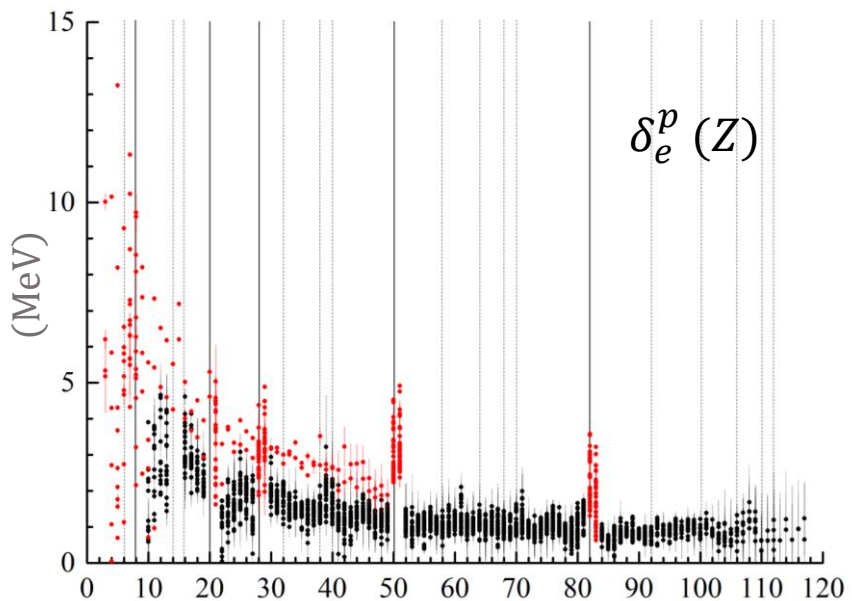
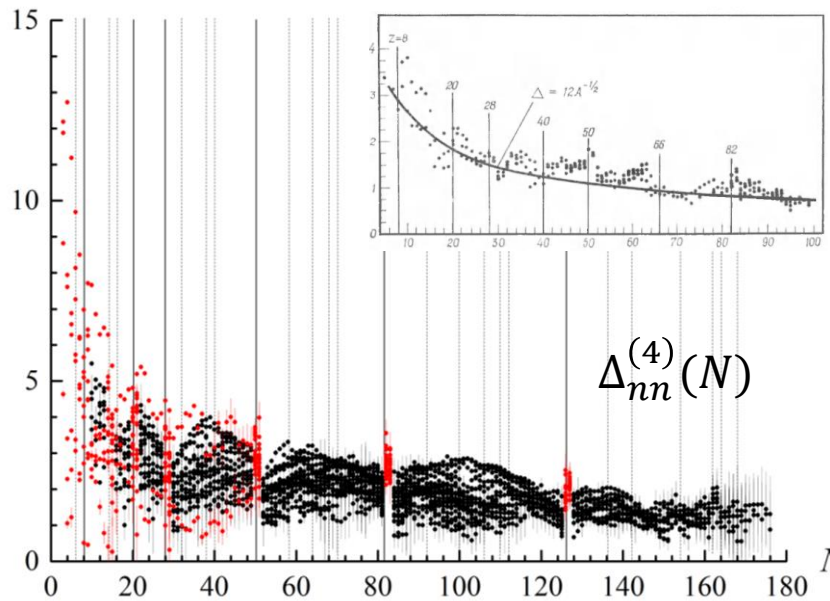
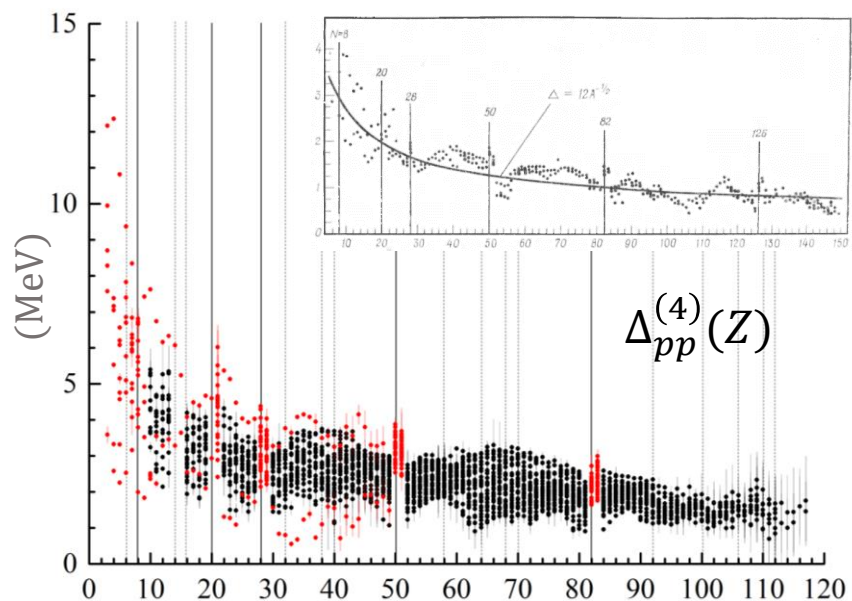
$$\Delta_{nn}^{(3)} = (-1)^N [S_n(N) - S_n(N+1)]$$

$$\Delta_{nn}^{(4)} = \frac{1}{2} [\Delta_{nn}(N) + \Delta_{nn}^{(3)}(N)]$$

$$\delta_e = \Delta_{nn}^{(3)}(N) - \Delta_{nn}(N)$$

# ПАРНЫЕ КОРРЕЛЯЦИИ НУКЛОНОВ И ОЦЕНКИ МАСС АТОМНЫХ ЯДЕР

[Bohr A., Mottelson B.R. // Nuclear Structure, v. 1, Benjamin, N.Y., 1969.]



Для  $\Delta_{pp}^{(4)}(Z)$   
и  $\delta_e(Z)$

**выделены**

точки:

$Z < 8, N < 8$

$Z = \text{маг.ч.}$

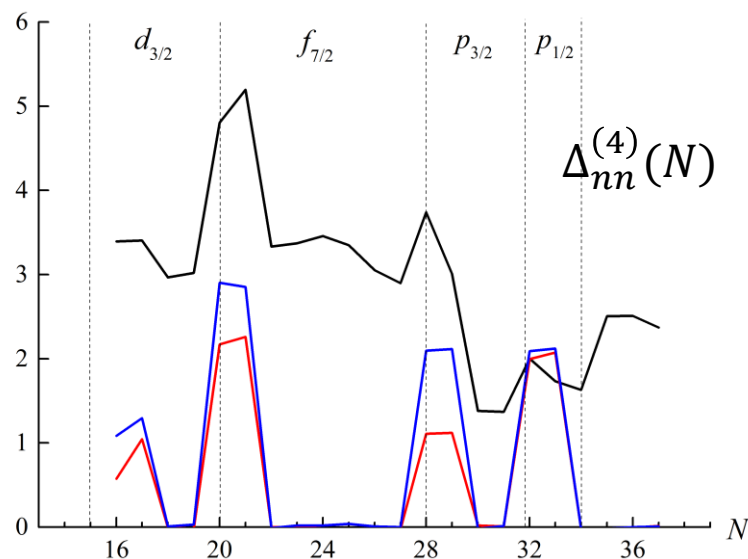
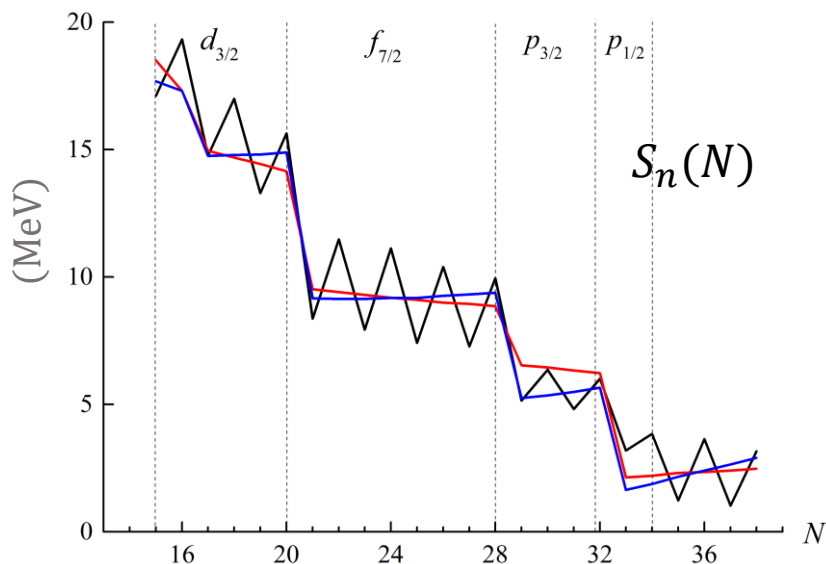
$Z+1 = \text{маг.ч.}$

$Z = N$

$Z+1 = N$

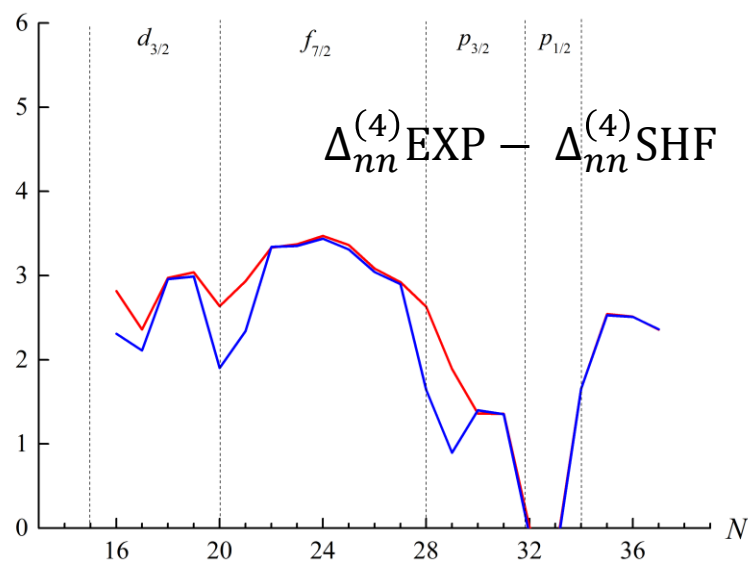
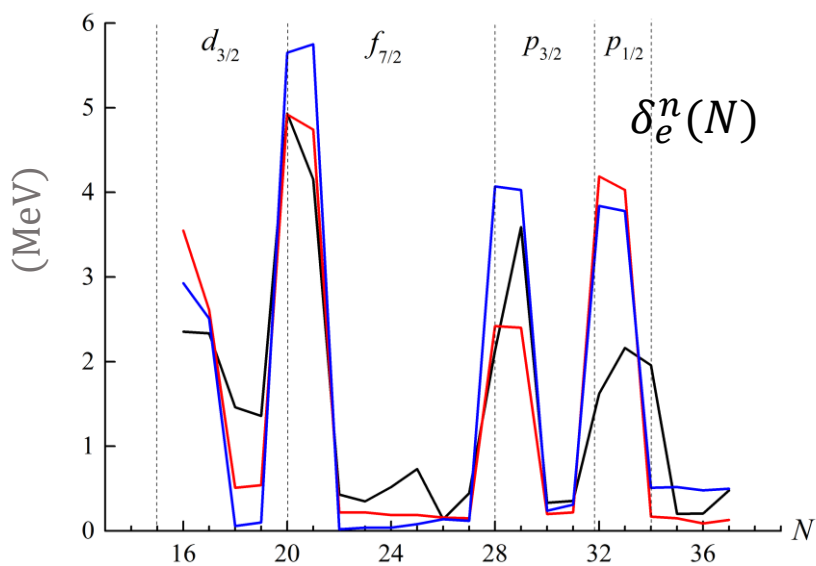
Аналогично  
для  
нейтронов

Сравнение с модельными данными (микроскопическое моделирование SHF)



Ca ( $Z = 20$ )

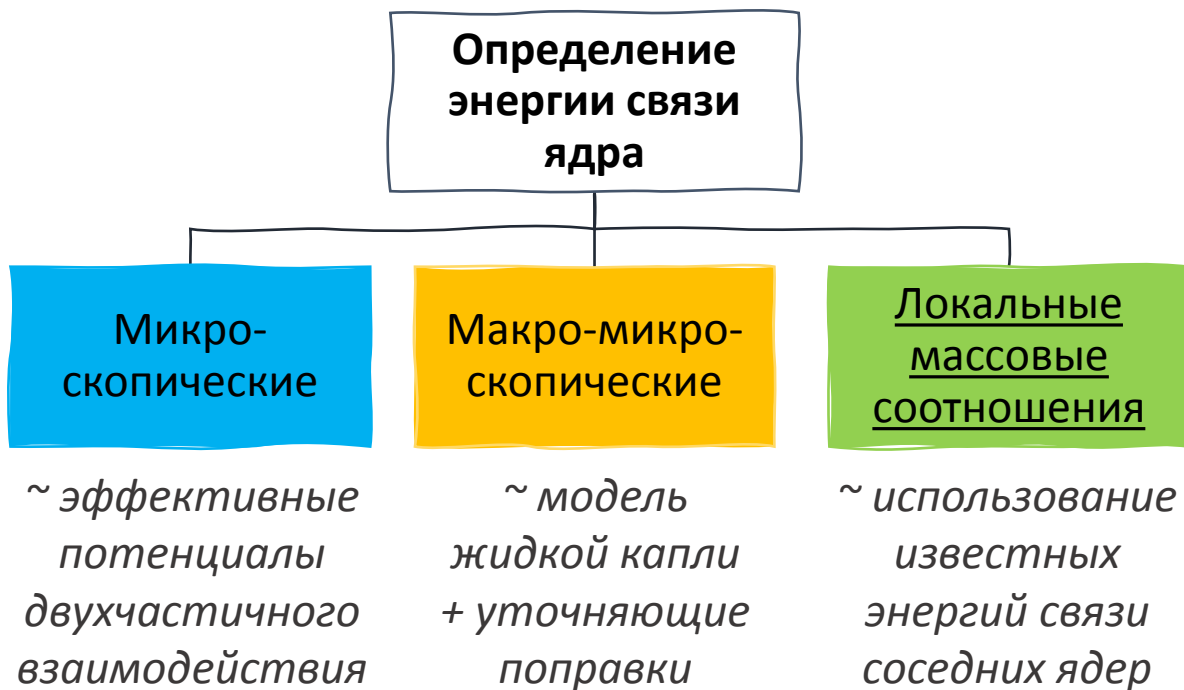
- EXP
- SHF (Skp)
- SHF (SLy4)



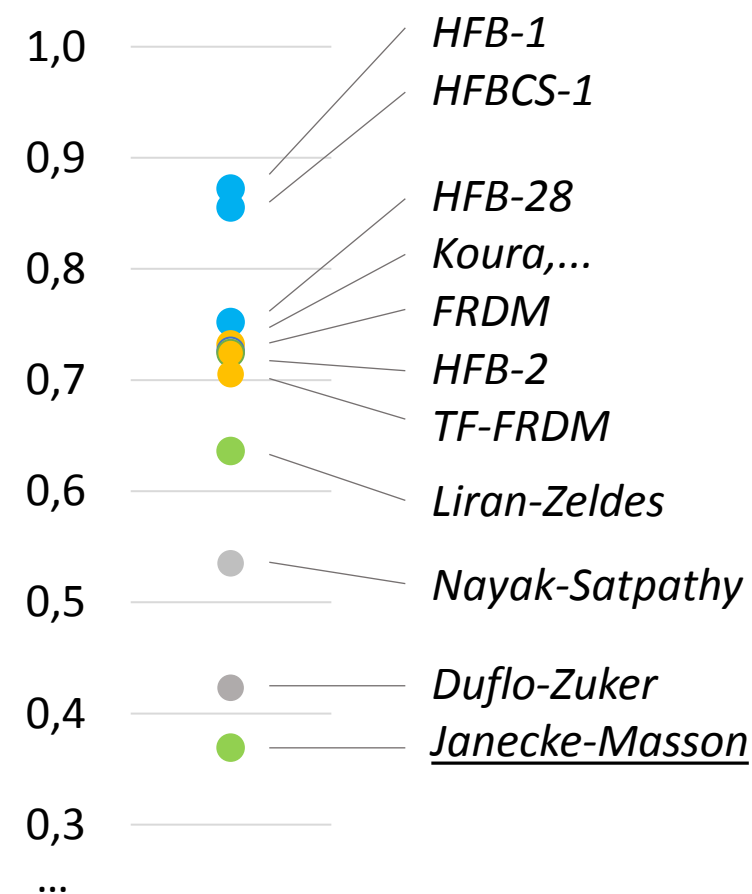
## Содержание

1. Изучение массовых соотношений, отражающих парные корреляции нуклонов
2. Оценки на основе аппроксимаций массовых соотношений для *np*-корреляций
  - положение границ существования ядер
  - характеристики  $\alpha$ -распада сверхтяжелых элементов
3. Разработка программ для работы с массовыми соотношениями

## Подходы к предсказанию энергии связи



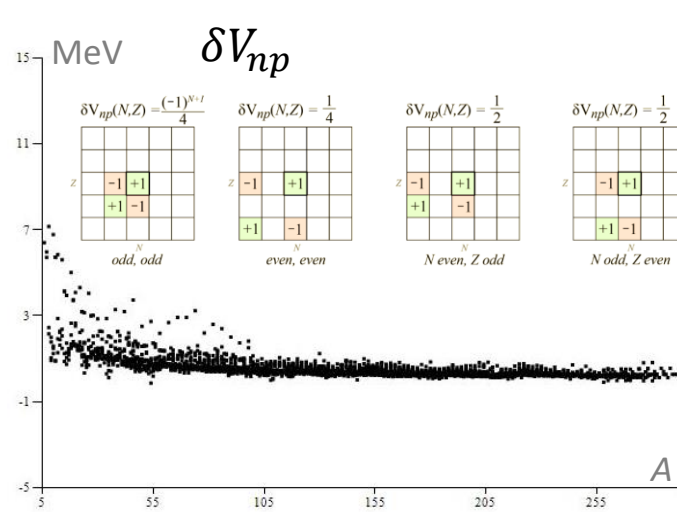
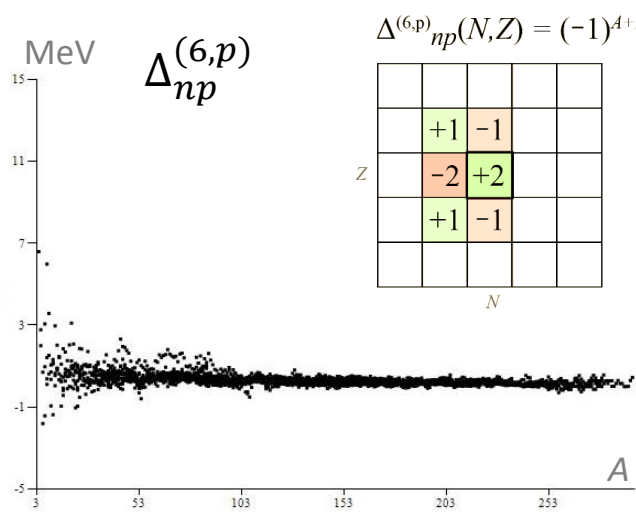
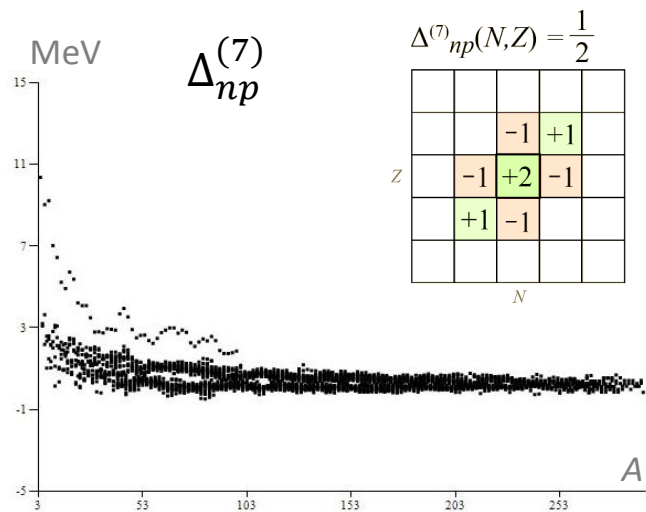
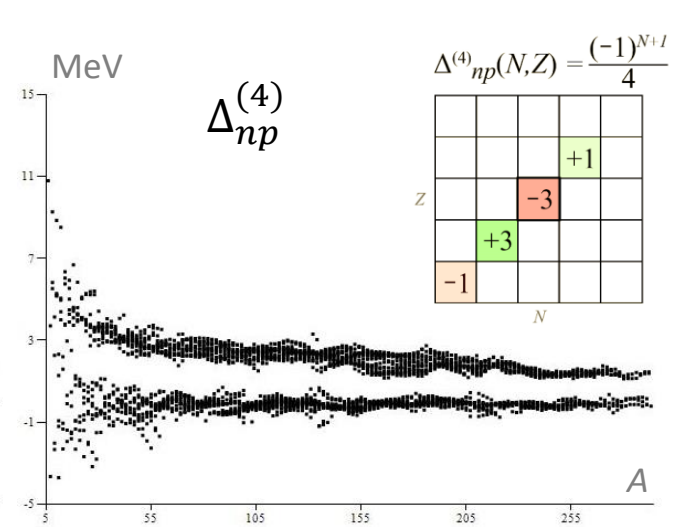
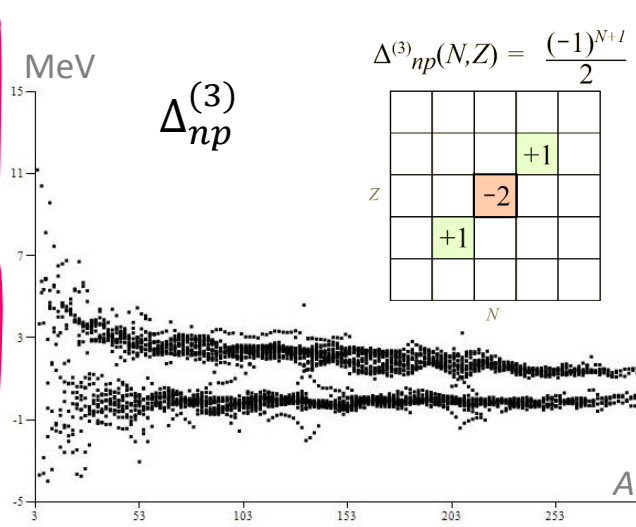
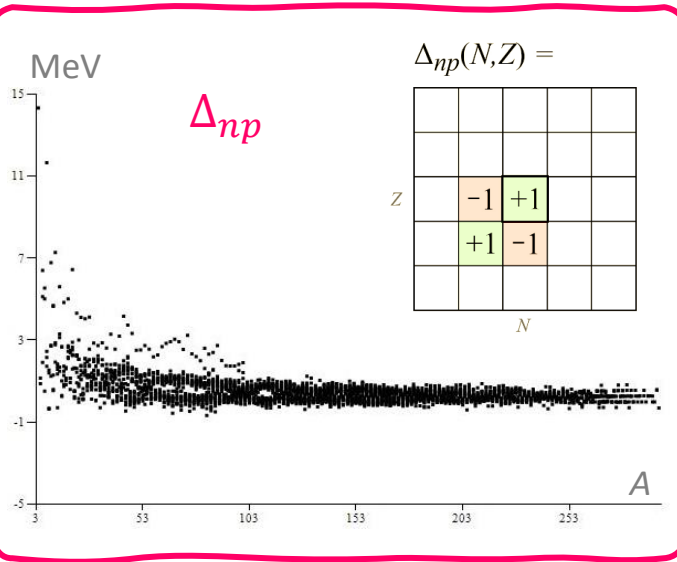
**Среднеквадратичное отклонение теоретической оценки от экспериментальных данных (2 135 точек), МэВ**



[D. Lunney, J. M. Pearson, C. Thibault. *Recent trends in the determination of nuclear masses* // Reviews Of Modern Physics 2003. Vol.75, N 3, p. 1021-1082]



# Массовые соотношения (MAREL calculations)



## Остаточное *np*-взаимодействие и оценка энергий связи

**Массовое соотношение**, описывающее *np*-корреляции:

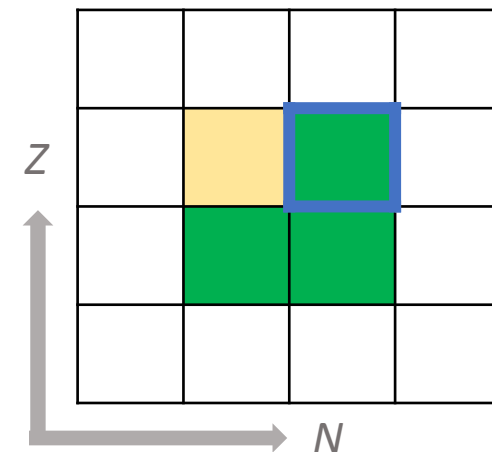
$$\Delta_{np}(Z, N) = [S_p(Z, N) - S_p(Z, N - 1)] = [B(Z, N) - B(Z, N - 1)] - [B(Z - 1, N) - B(Z - 1, N - 1)]$$

[Kravtsov V.A. Sov. Phys. JETP. 1959]

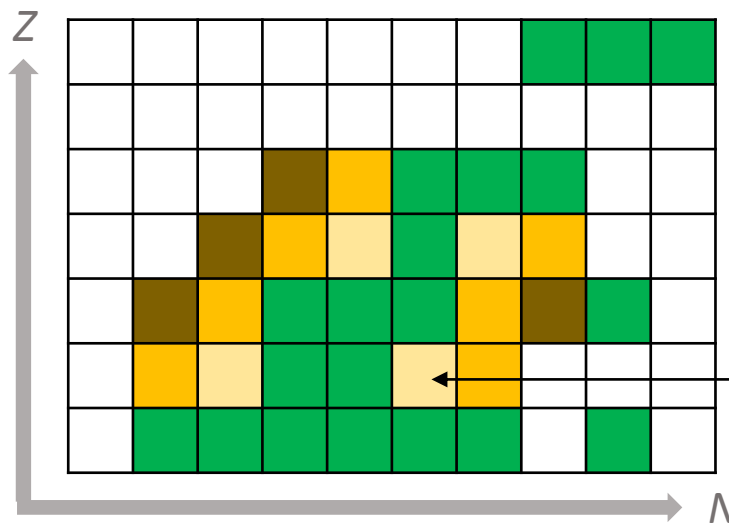
**Предсказываемая энергия связи** (1 из 4 возможных формул):

$$B_{pred}(Z, N - 1) = B(Z, N) - B(Z - 1, N) + B(Z - 1, N - 1) - \Delta_{np}^{cal}(Z, N)$$

[J. Janecke, H. Behrens // Phys. Rev. C 1974]



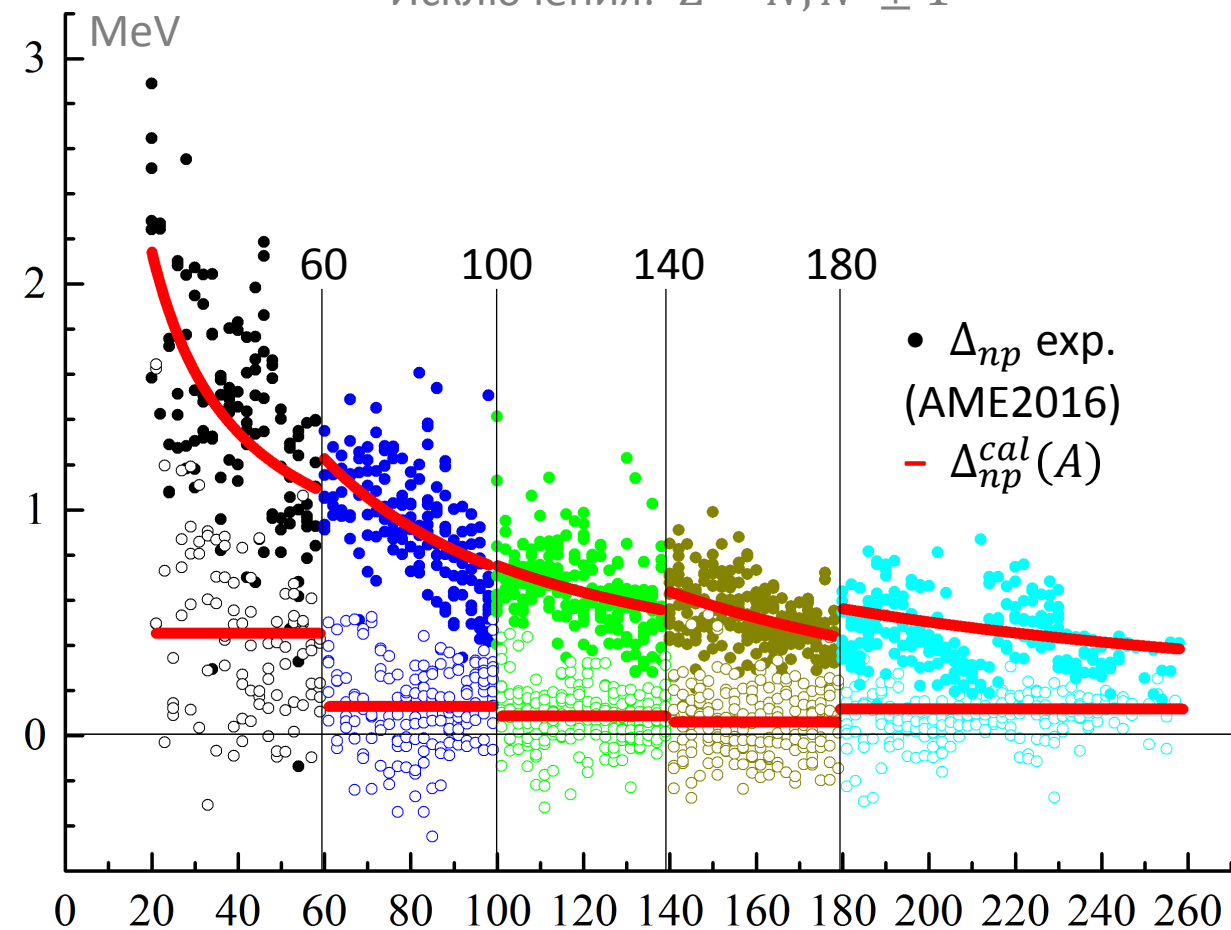
**Итерационные вычисления:**



Энергия связи такого ядра может быть выражена из двух различных  $\Delta_{np}$  => используется усреднение

## Аппроксимация

$$\Delta_{np}^{cal}(A) = C_1 + C_2 \cdot A^\gamma$$

 Исключения:  $Z = N, N \pm 1$ 


A		C1, MeV	C2, MeV	$\gamma$	RMSD, keV
20-60	e	0,543	32,0	-1	404
	o	0,453			373
60-100	e	0,010	73,1	-1	220
	o	0,128			190
100-140	e	0,041	71,2	-1	173
	o	0,086			127
140-180	e	-0,285	129,1	-1	127
	o	0,060			145
180-...	e	-0,031	106,6	-1	153
	o	0,116			111

[Jiang H., Fu G. J. et al. // Phys. Rev. C 2012]

exp. data: [Wang M., Audi G., Kondev F.G. et al.// Chin. Phys. C 2016. 41. 030003.]

## Результаты для границ существования ядер

Локализация области существования по  $S_p$ ,  $S_{pp}$ ,  $S_n$ ,  $S_{nn}$

Результат

■ На основе AME 2016

Экспериментальные данные

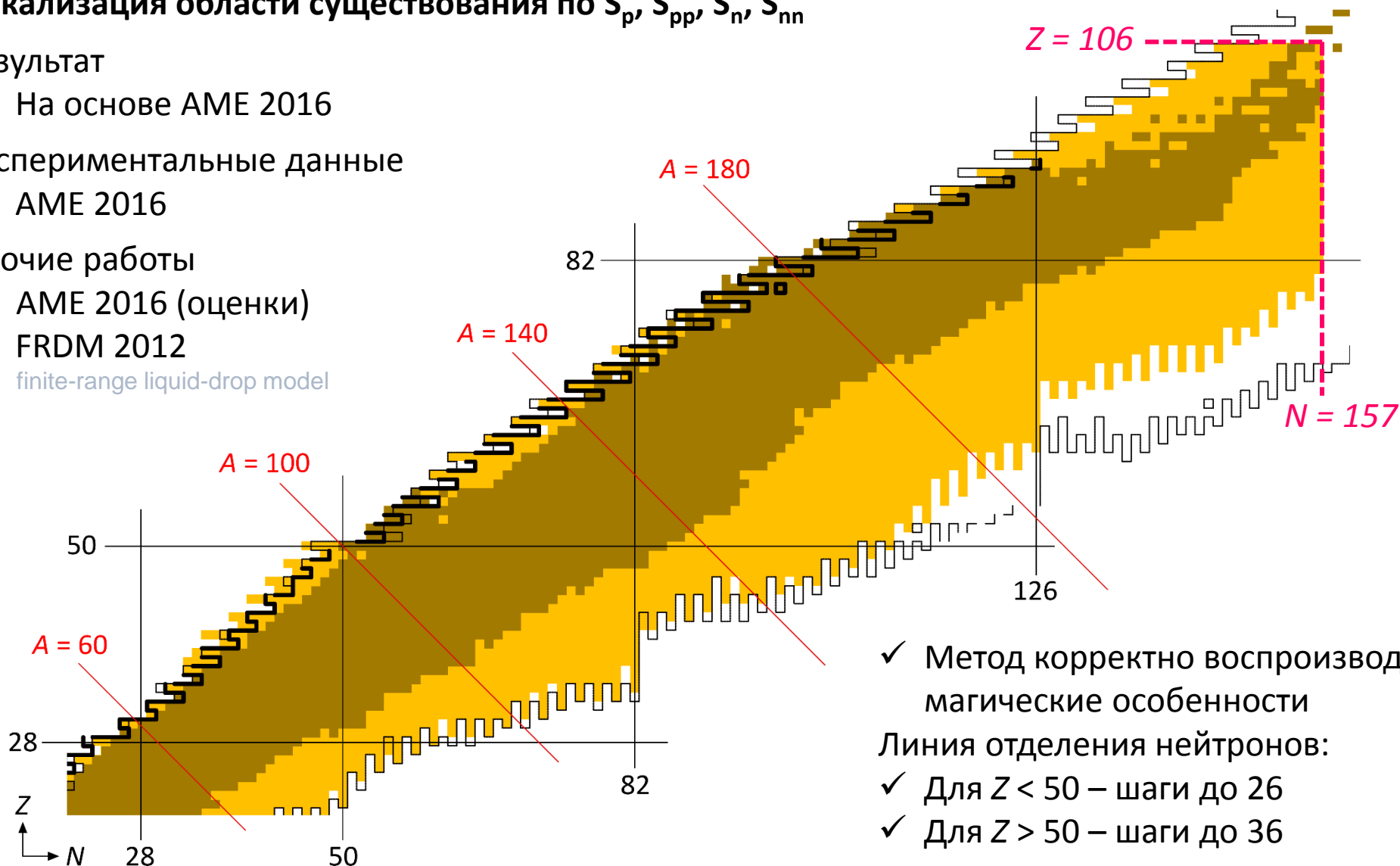
■ AME 2016

Прочие работы

— AME 2016 (оценки)

— FRDM 2012

finite-range liquid-drop model



✓ Метод корректно воспроизводит магические особенности

Линия отделения нейтронов:

✓ Для  $Z < 50$  – шаги до 26

✓ Для  $Z > 50$  – шаги до 36

## Проверка метода – оценки по AME 2003, 2012 и 2016

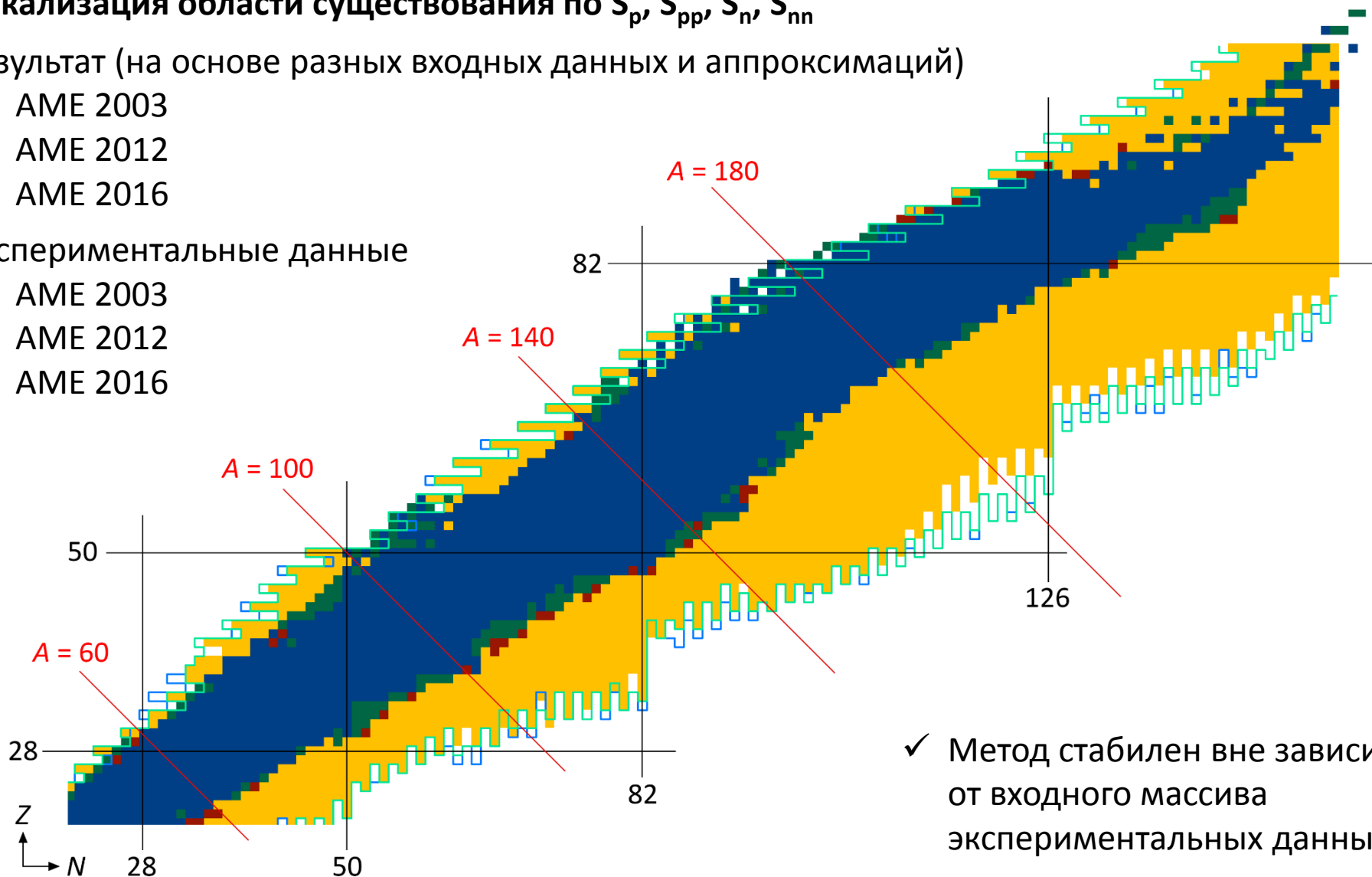
Локализация области существования по  $S_p, S_{pp}, S_n, S_{nn}$

Результат (на основе разных входных данных и аппроксимаций)

- AME 2003
- AME 2012
- AME 2016

Экспериментальные данные

- AME 2003
- AME 2012
- AME 2016

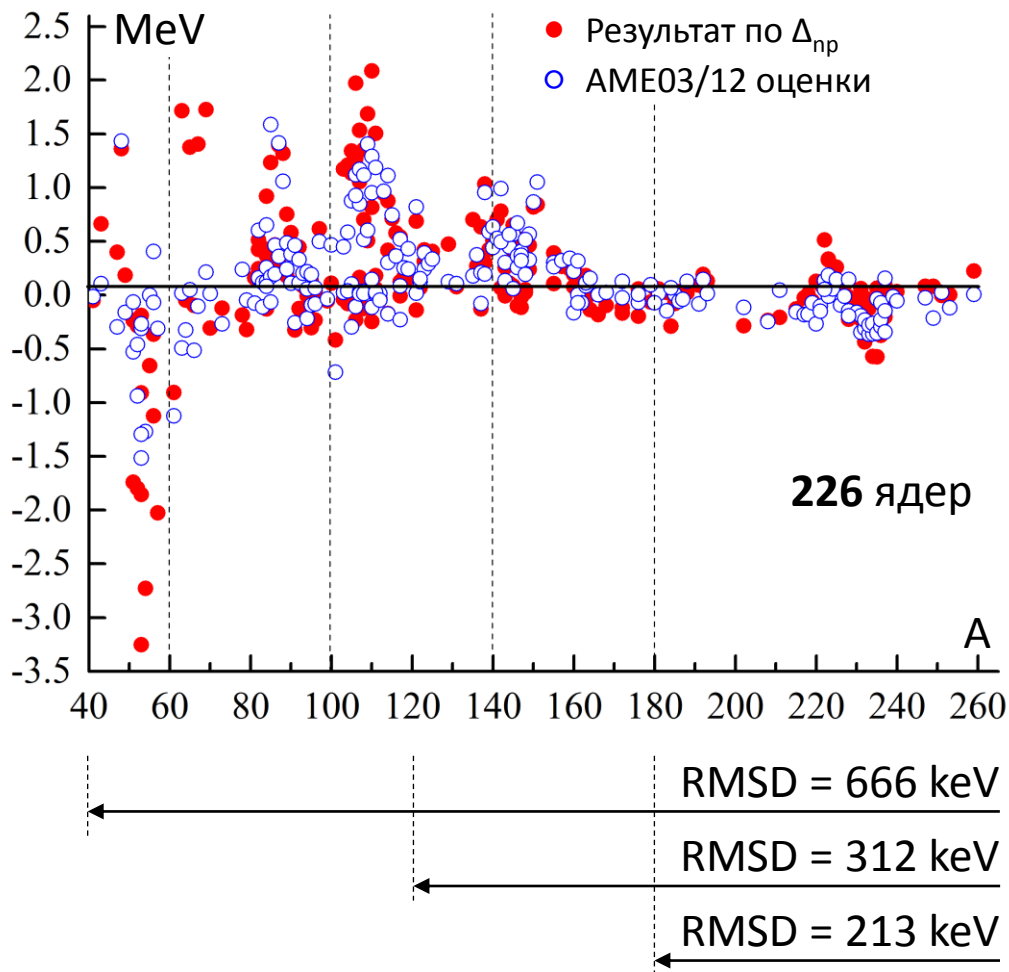


✓ Метод стабилен вне зависимости от входного массива экспериментальных данных

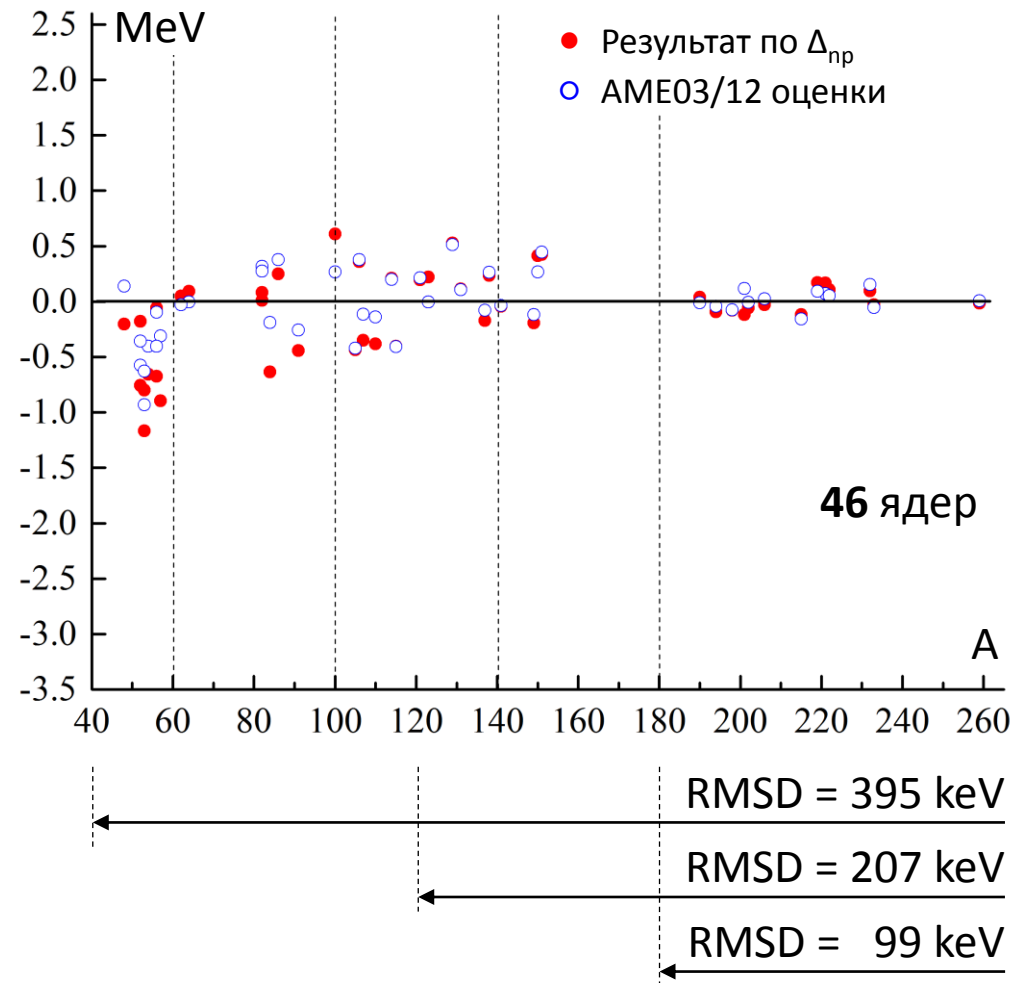
# Проверка надежности метода – оценки на основе AME 2003, 2012

Отклонения оценок от экспериментальных данных AME 2016

**AME 2003**




**AME 2012**





# Сверхтяжелые элементы

## Моды распада

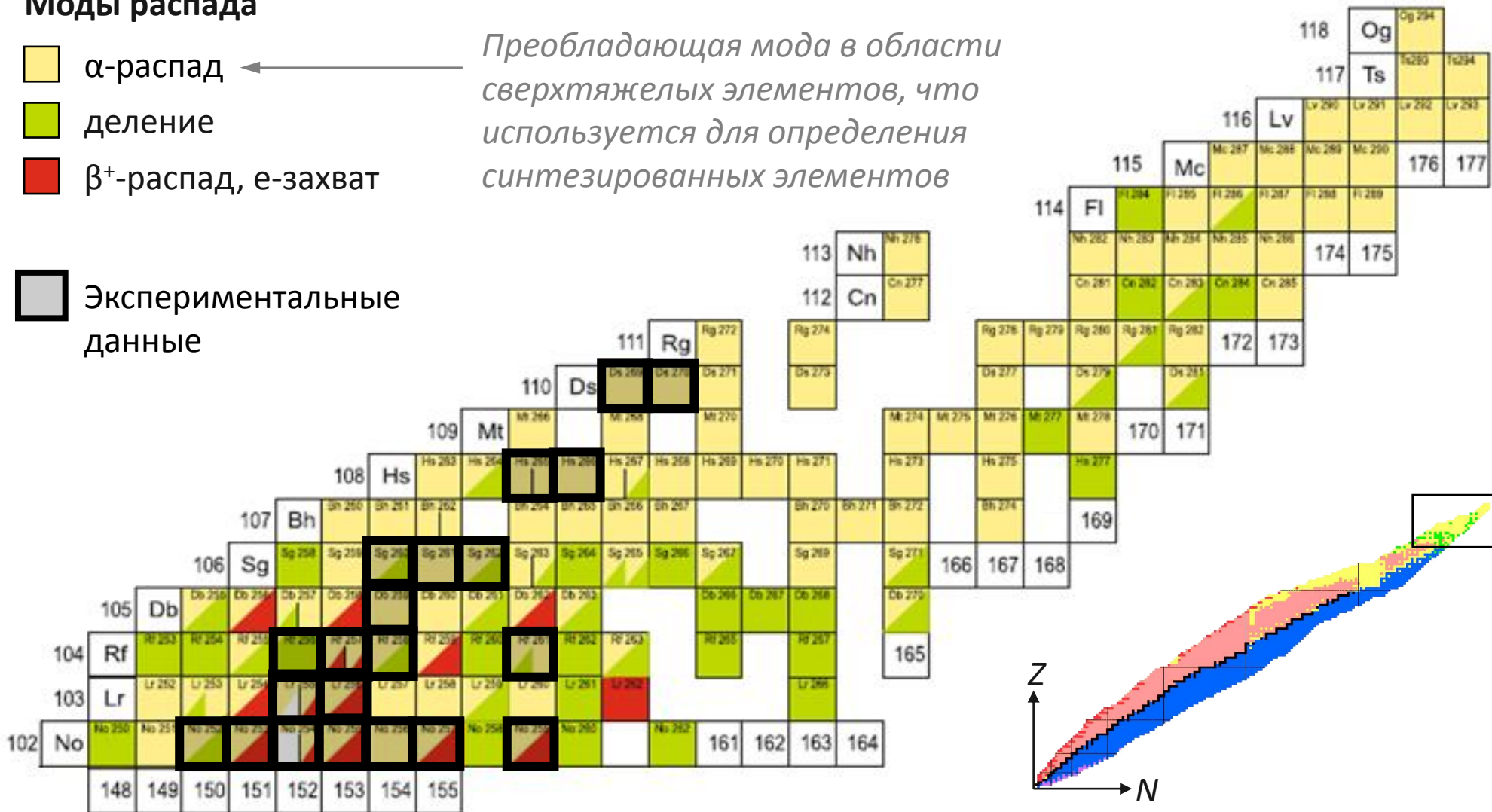
 α-распад

 деление

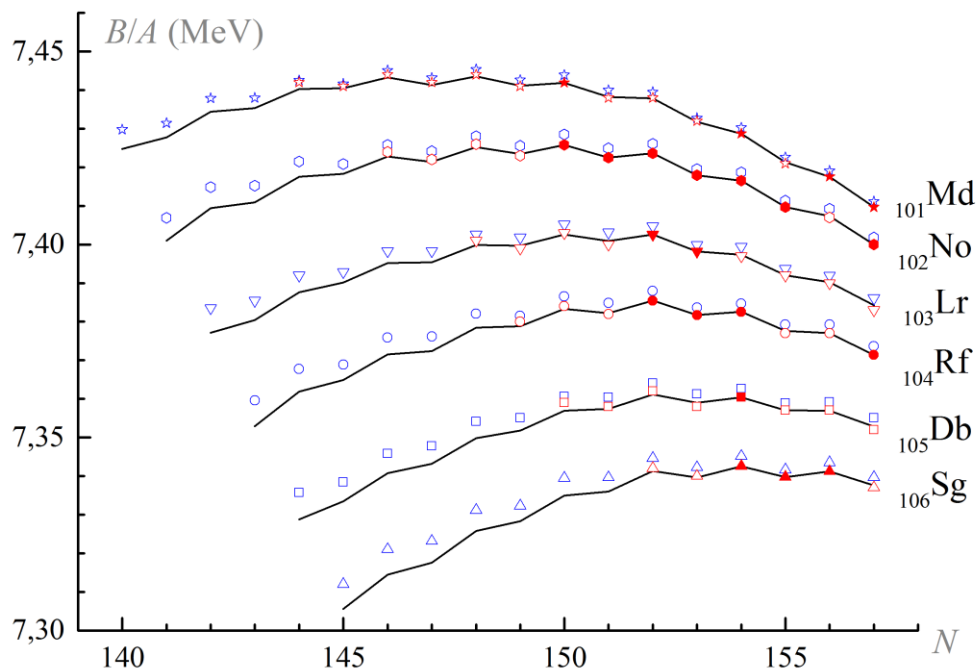
 β<sup>+</sup>-распад, e-захват

 Экспериментальные данные

*Преобладающая мода в области сверхтяжелых элементов, что используется для определения синтезированных элементов*

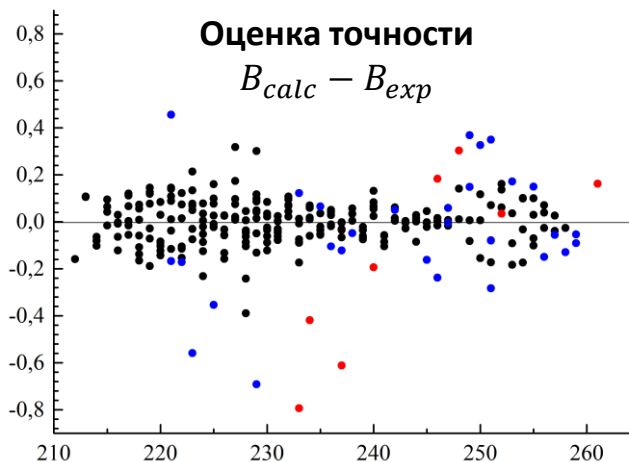


### Оценка энергий связи



#### Оценка точности

$$B_{calc} - B_{exp}$$



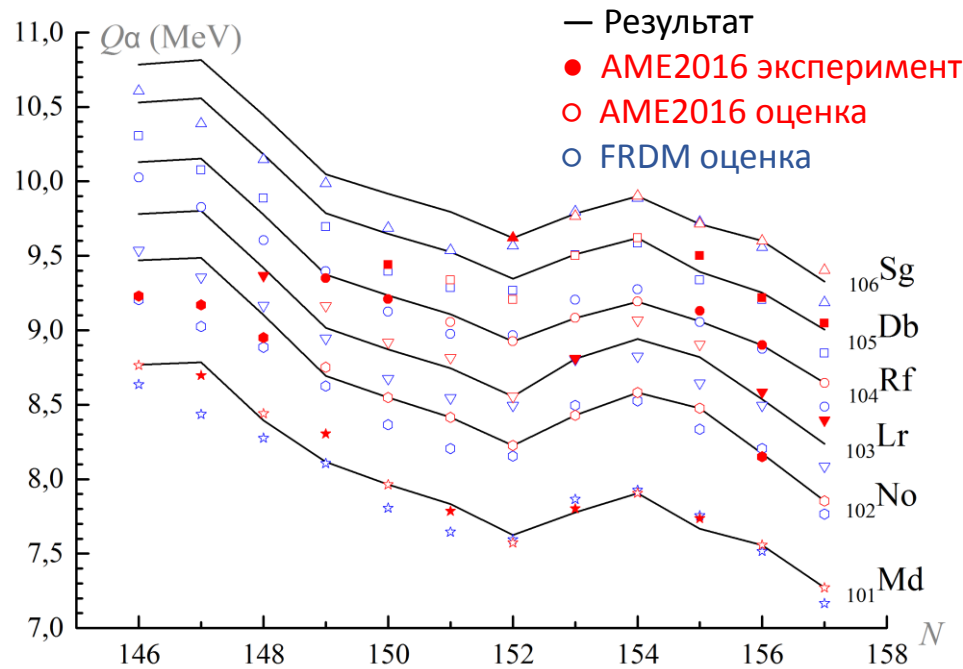
$$\sigma = 89,9 \text{ кэВ}$$

$$\sigma_{\%} \approx 0,005\%$$

$$\sigma = 137,4 \text{ кэВ}$$

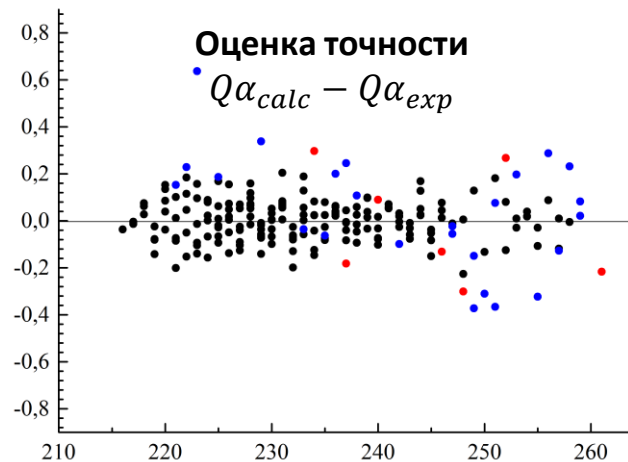
$$\sigma_{\%} \approx 0,01\%$$

### Оценка энергий $\alpha$ -распада



#### Оценка точности

$$Q_{\alpha calc} - Q_{\alpha exp}$$



● 1 шаг

● 2, 3, 4

● 5, 6, 7, 8

$$\sigma = 83,3 \text{ кэВ}$$

$$\sigma_{\%} \approx 1,5\%$$

$$\sigma = 145,5 \text{ кэВ}$$

$$\sigma_{\%} \approx 3\%$$



## Применение методов машинного обучения

**Цель:** Проверка применимости различных вариаций подходов машинного обучения для оценки энергий связи

### Результаты:

✓ Лучший результат получен с использованием **SVR** (задача регрессии для метода опорных векторов)  
 В качестве первого этапа используется библиотека Scikit-learn (Python)

✓ Лучший результат получен при использовании в качестве входных параметров энергий связи соседних ядер:  **$B(N, Z)/A$  предсказывается на основе удельных энергий связи  $B(N-2, Z-2)/A$  и  $B(N-4, Z-4)/A$**

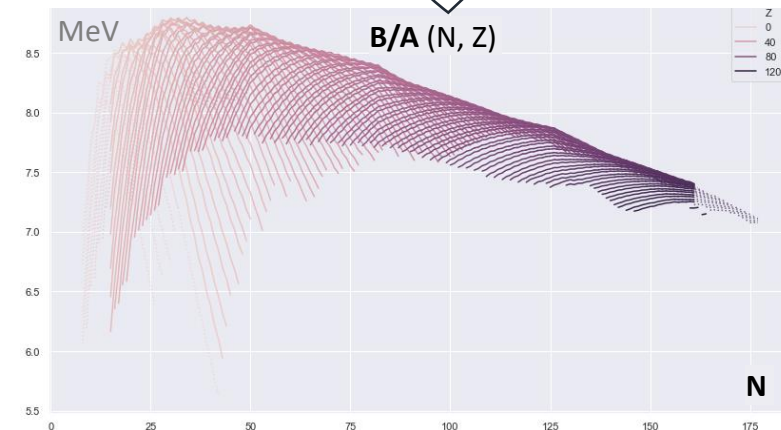
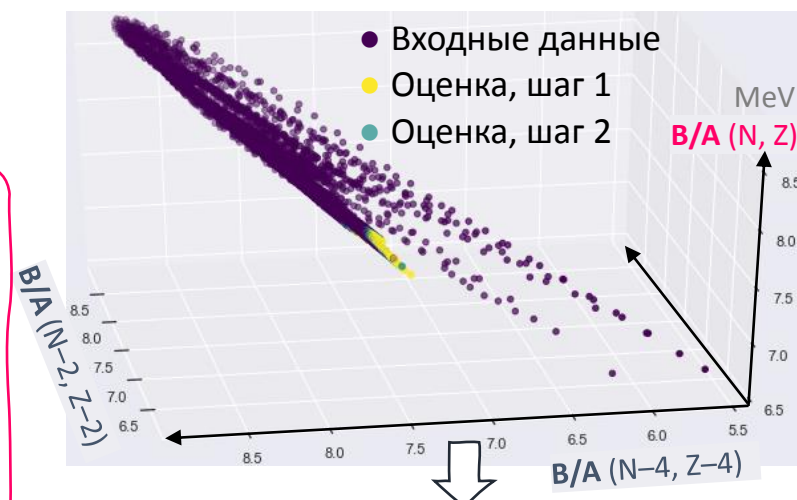
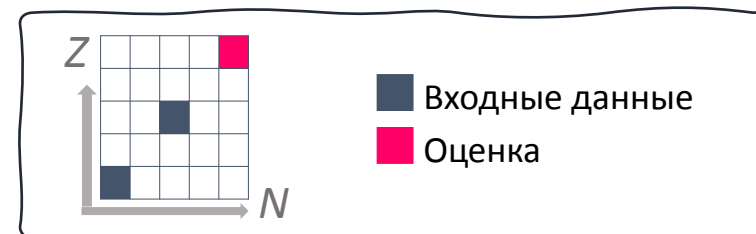
Использование в качестве входных параметров  $N, Z$  или их комбинаций для предсказания  $B, B/A, \Delta_{np}, Q_\alpha$  дали худший результат

✓ Значительное улучшение результата дало **расширение входного массива экспериментальных данных AME2016 оценками на основе  $\Delta_{np}$  (steps  $\leq 15$ )**

✓ Результат устойчив как минимум для двух итераций

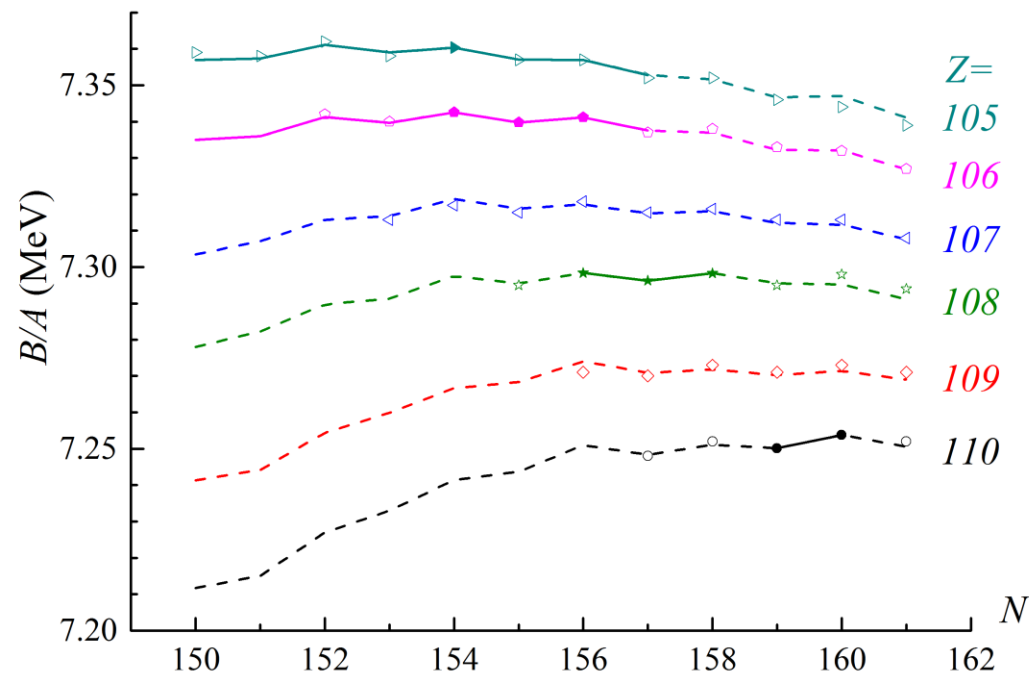
1) 3911 входных строк  $\rightarrow$  97 ядер предсказано

2) 4008 входных строк  $\rightarrow$  90 ядер предсказано

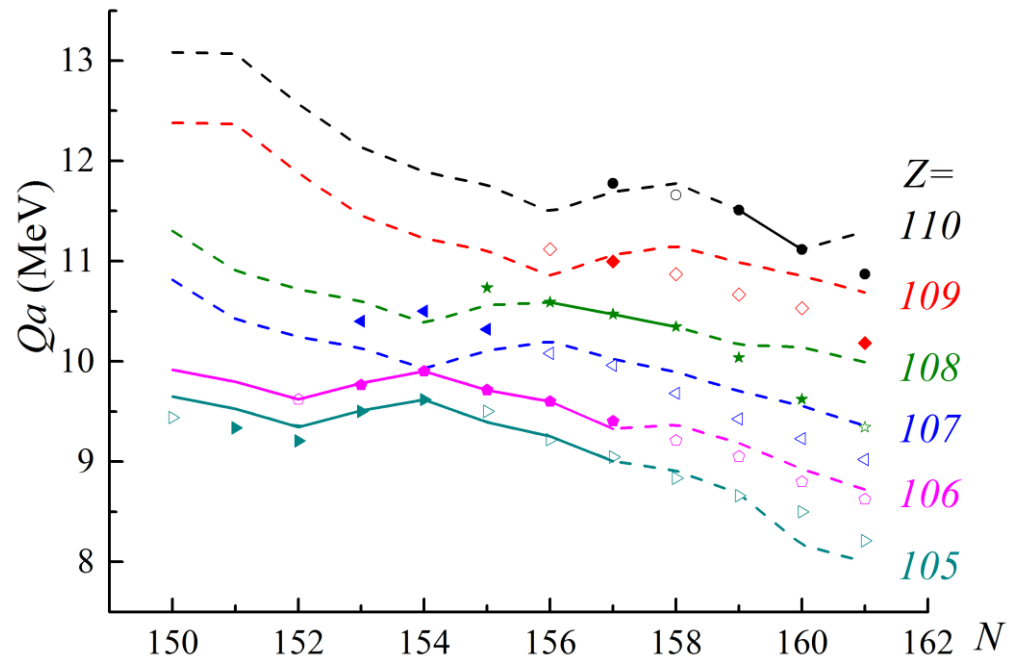


# Предсказания для SHE с методами машинного обучения

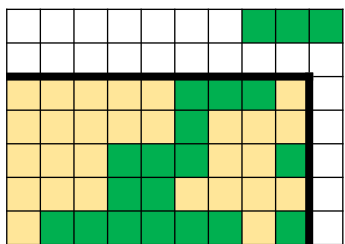
## Удельные энергии связи



## Энергии альфа-распада



Z=106



N=157

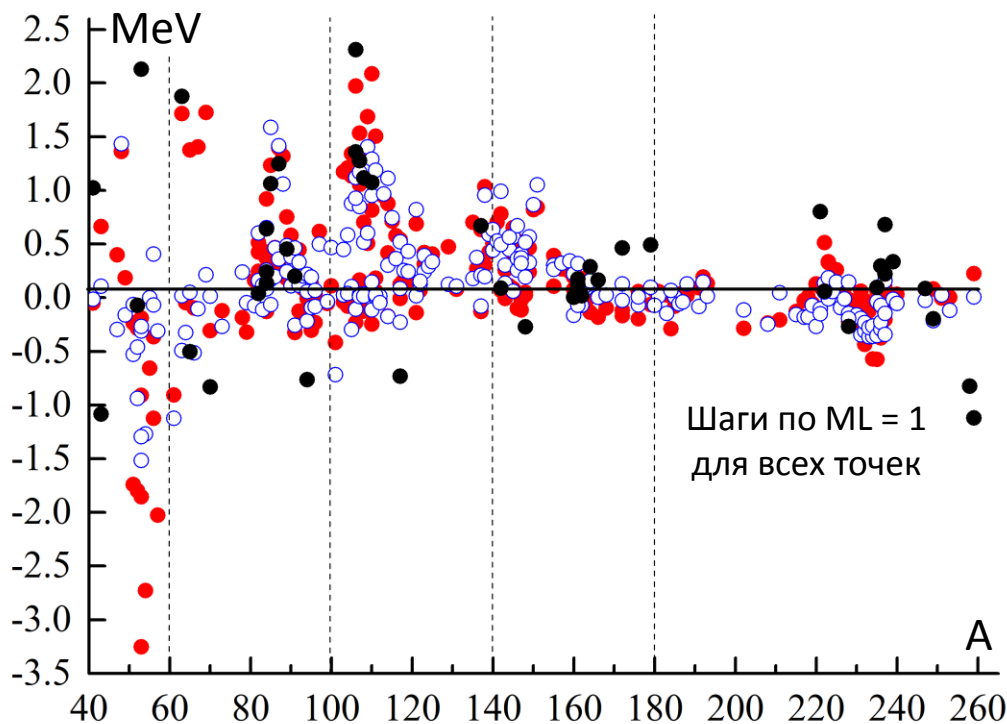
Применение методов машинного обучения позволило продвинуться за область  $Z = 106, N = 157$

- Результат по  $\Delta_{np}$
- Эксперимент + результат по ML
- Эксперимент (AME2016)
- AME2016 оценки

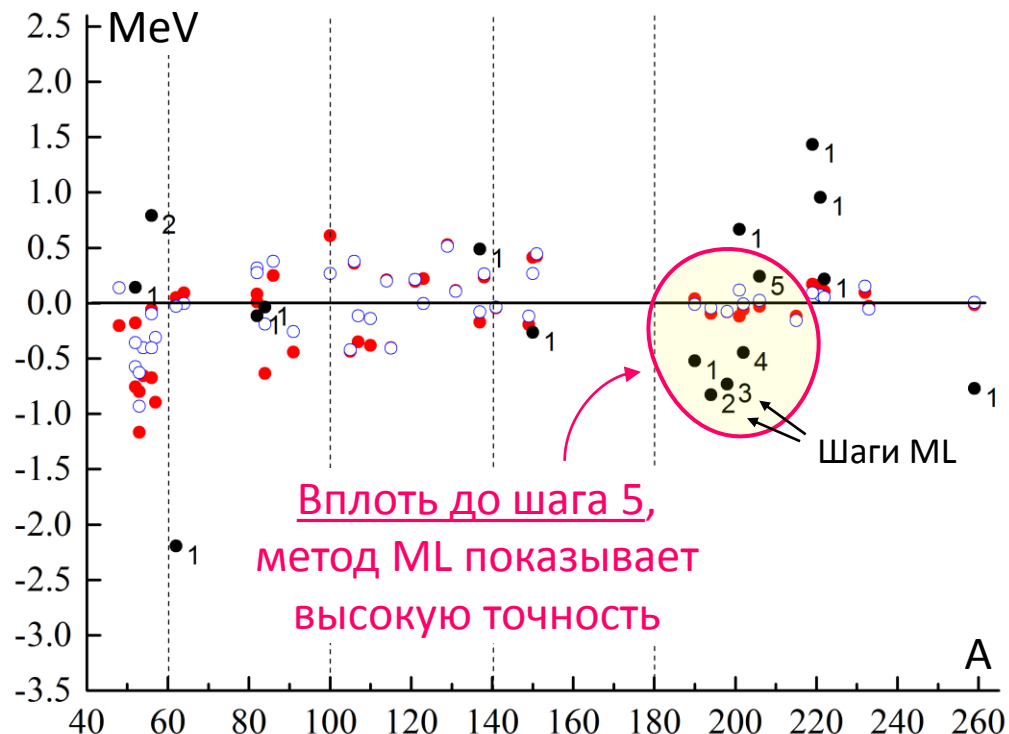
Оценки на основе предыдущих АМЕ (без расширения входного массива с  $\Delta_{np}$ )

Отклонения оценок от экспериментальных данных АМЕ 2016

**АМЕ 2003**



**АМЕ 2012**



- Результат по ML
- Результат по  $\Delta_{np}$
- АМЕ03/12 оценки

## Содержание

1. Изучение массовых соотношений, отражающих парные корреляции нуклонов
2. Оценки на основе аппроксимаций массовых соотношений для  $np$ -корреляций
  - положение границ существования ядер
  - характеристики  $\alpha$ -распада сверхтяжелых элементов
3. Разработка программ для работы с массовыми соотношениями

Выбор источника данных

- AME 2016 exp
- AME 2016 all
- Формула Вайцзеккера
- Объёмная энергия

Выбор зависимостей для построения

- B (bind energy)
- E\* (level 2+)

- |   |  |
|---|--|
| <input type="checkbox"/> Sp             | <input checked="" type="checkbox"/> Sn             |
| <input type="checkbox"/> Spp            | <input type="checkbox"/> Snn                       |
| <input type="checkbox"/> $\Delta$ pp    | <input type="checkbox"/> $\Delta$ nn               |
| <input type="checkbox"/> $\Delta(3)$ pp | <input type="checkbox"/> $\Delta(3)$ nn            |
| <input type="checkbox"/> $\Delta(4)$ pp | <input checked="" type="checkbox"/> $\Delta(4)$ nn |
| <input type="checkbox"/> $\Delta(5)$ pp | <input type="checkbox"/> $\Delta(5)$ nn            |
| <input type="checkbox"/> $\delta$ p     | <input type="checkbox"/> $\delta$ n                |

Дополнительные настройки

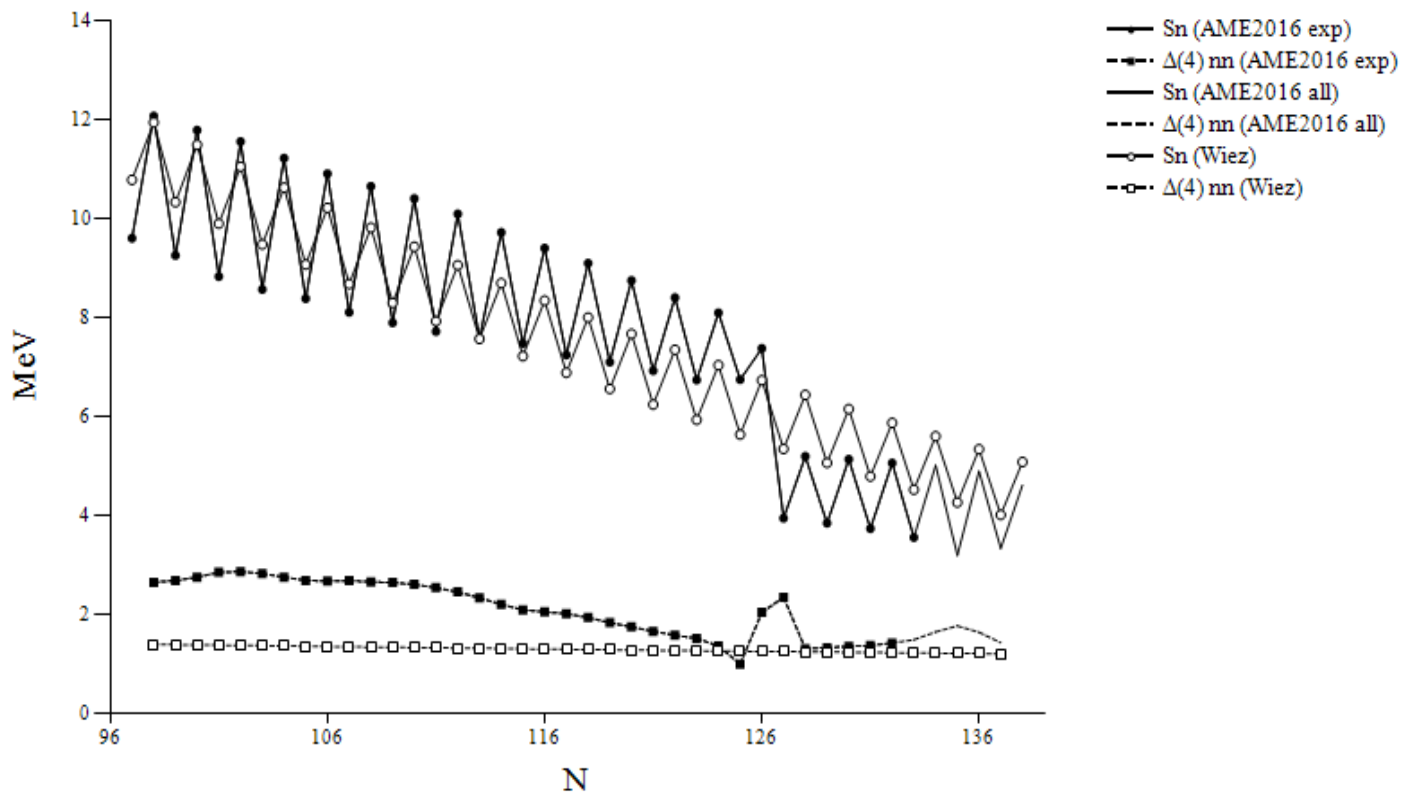
- Учесть параметры оси Y:
- Y min =  MeV
- Y max =  MeV

Построить для

Z =   чёт  неч

**Построить**

### Изотопы Z = 82 (Pb - Plumbum)



Сохранить данные в txt

Сохранить изображение

Выбор источника данных

- Поверхностная энергия
- Энергия Кулона
- Энергия симметрии

Энергия спаривания:

Madland, Nix (традиционные)

Выбор зависимостей для построения

- B (bind energy)
- E\* (level 2+)

- |   |  |
|---|--|
| <input type="checkbox"/> Sp             | <input checked="" type="checkbox"/> Sn             |
| <input type="checkbox"/> Spp            | <input type="checkbox"/> Snn                       |
| <input type="checkbox"/> $\Delta$ pp    | <input type="checkbox"/> $\Delta$ nn               |
| <input type="checkbox"/> $\Delta(3)$ pp | <input type="checkbox"/> $\Delta(3)$ nn            |
| <input type="checkbox"/> $\Delta(4)$ pp | <input checked="" type="checkbox"/> $\Delta(4)$ nn |
| <input type="checkbox"/> $\Delta(5)$ pp | <input type="checkbox"/> $\Delta(5)$ nn            |
| <input type="checkbox"/> $\delta$ p     | <input type="checkbox"/> $\delta$ n                |

Дополнительные настройки

Учесть параметры оси Y:

Y min = 0 MeV

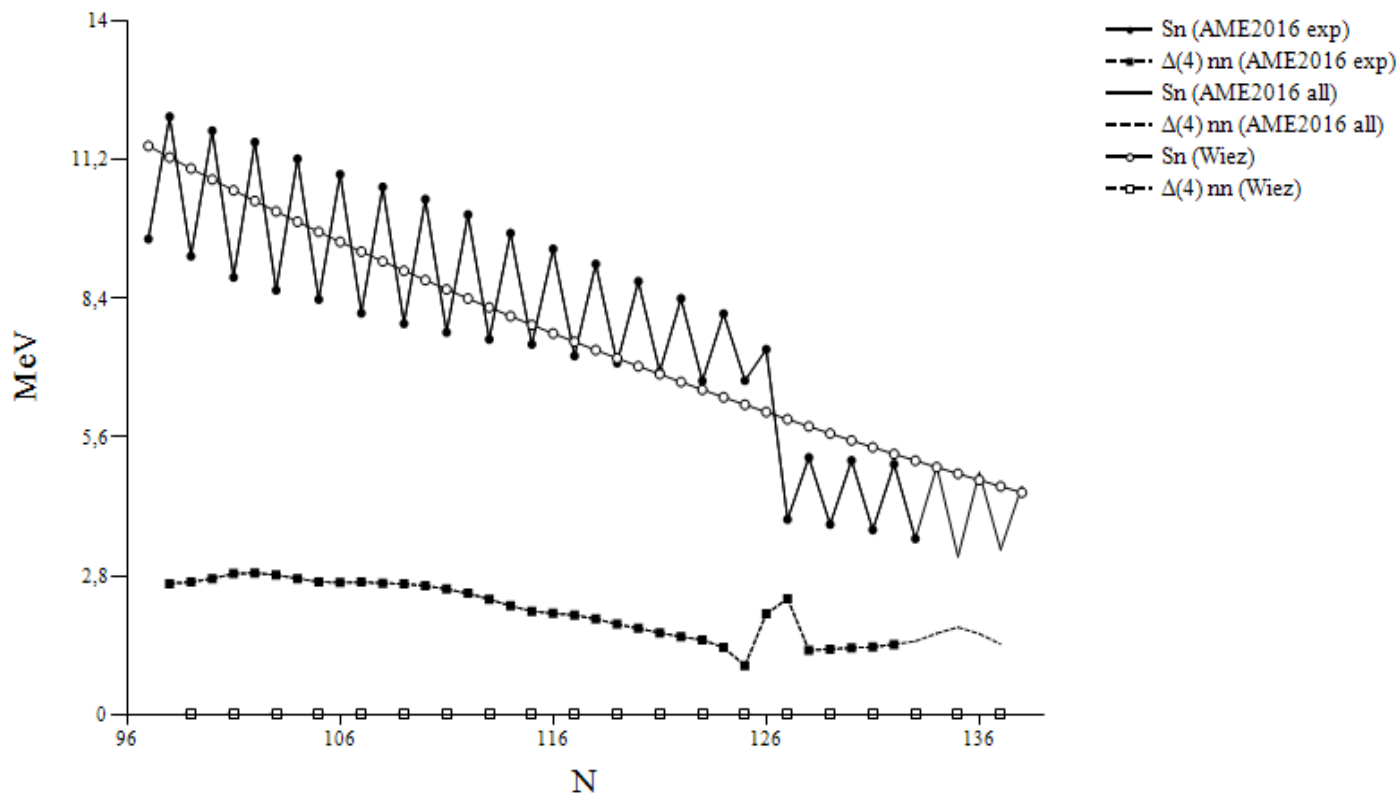
Y max = 14 MeV

Построить для: Изотопов

Z = 82  чёт  неч

Построить

### Изотопы Z = 82 (Pb - Plumbum)



Сохранить данные в txt

Сохранить изображение

Выбор источника данных

- Поверхностная энергия
- Энергия Кулона
- Энергия симметрии
- Энергия спаривания:

Madland, Nix (традиционные)

Выбор зависимостей для построения

- |  |  |
|--|--|
| <input checked="" type="checkbox"/> Sp | <input checked="" type="checkbox"/> Sn |
| <input type="checkbox"/> Spp           | <input type="checkbox"/> Snn           |
| <input type="checkbox"/> Δ pp          | <input type="checkbox"/> Δ nn          |
| <input type="checkbox"/> Δ(3) pp       | <input type="checkbox"/> Δ(3) nn       |
| <input type="checkbox"/> Δ(4) pp       | <input type="checkbox"/> Δ(4) nn       |
| <input type="checkbox"/> Δ(5) pp       | <input type="checkbox"/> Δ(5) nn       |
| <input type="checkbox"/> δp            | <input type="checkbox"/> δn            |
| <input type="checkbox"/> Sd            | <input type="checkbox"/> Sα            |
| <input type="checkbox"/> Δ np          | <input type="checkbox"/> Δ(7) np       |

Дополнительные настройки

Учесть параметры оси Y:

Y min = 0 MeV

Y max = 10 MeV

Построить для: Изотопов

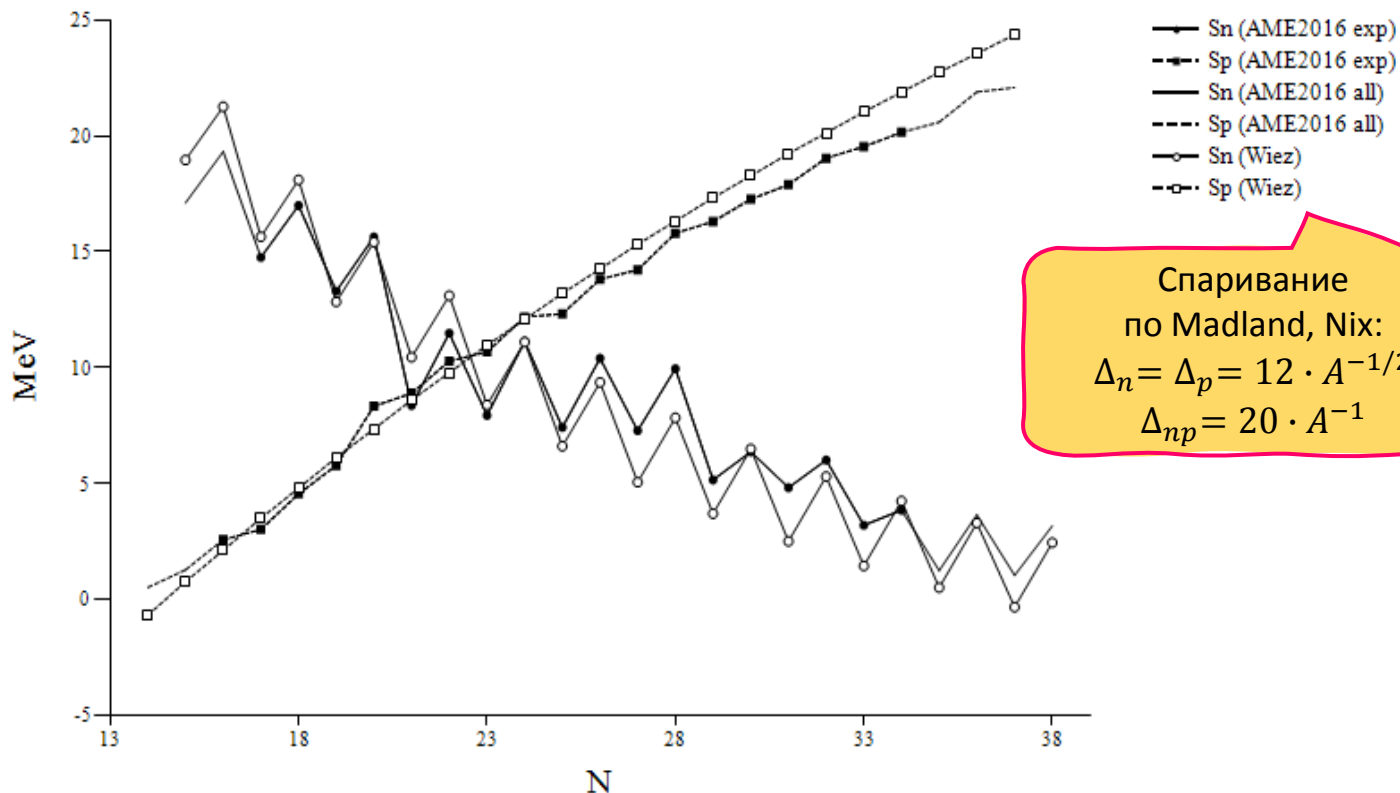
Z = 20  чёт  неч

**Построить**

Сохранить данные в txt

Сохранить изображение

Изотопы Z = 20 (Ca - Calcium)



Выбор источника данных

- Поверхностная энергия
- Энергия Кулона
- Энергия симметрии
- Энергия спаривания:

Madland, Nix (CPC19)

Выбор зависимостей для построения

- |  |  |
|--|--|
| <input checked="" type="checkbox"/> Sp | <input checked="" type="checkbox"/> Sn |
| <input type="checkbox"/> Spp           | <input type="checkbox"/> Snn           |
| <input type="checkbox"/> Δ(3) pp       | <input type="checkbox"/> Δ(3) nn       |
| <input type="checkbox"/> Δ(4) pp       | <input type="checkbox"/> Δ(4) nn       |
| <input type="checkbox"/> Δ(5) pp       | <input type="checkbox"/> Δ(5) nn       |
| <input type="checkbox"/> δp            | <input type="checkbox"/> δn            |
| <input type="checkbox"/> Sd            | <input type="checkbox"/> Sα            |
| <input type="checkbox"/> Δ np          | <input type="checkbox"/> Δ(7) np       |

Дополнительные настройки

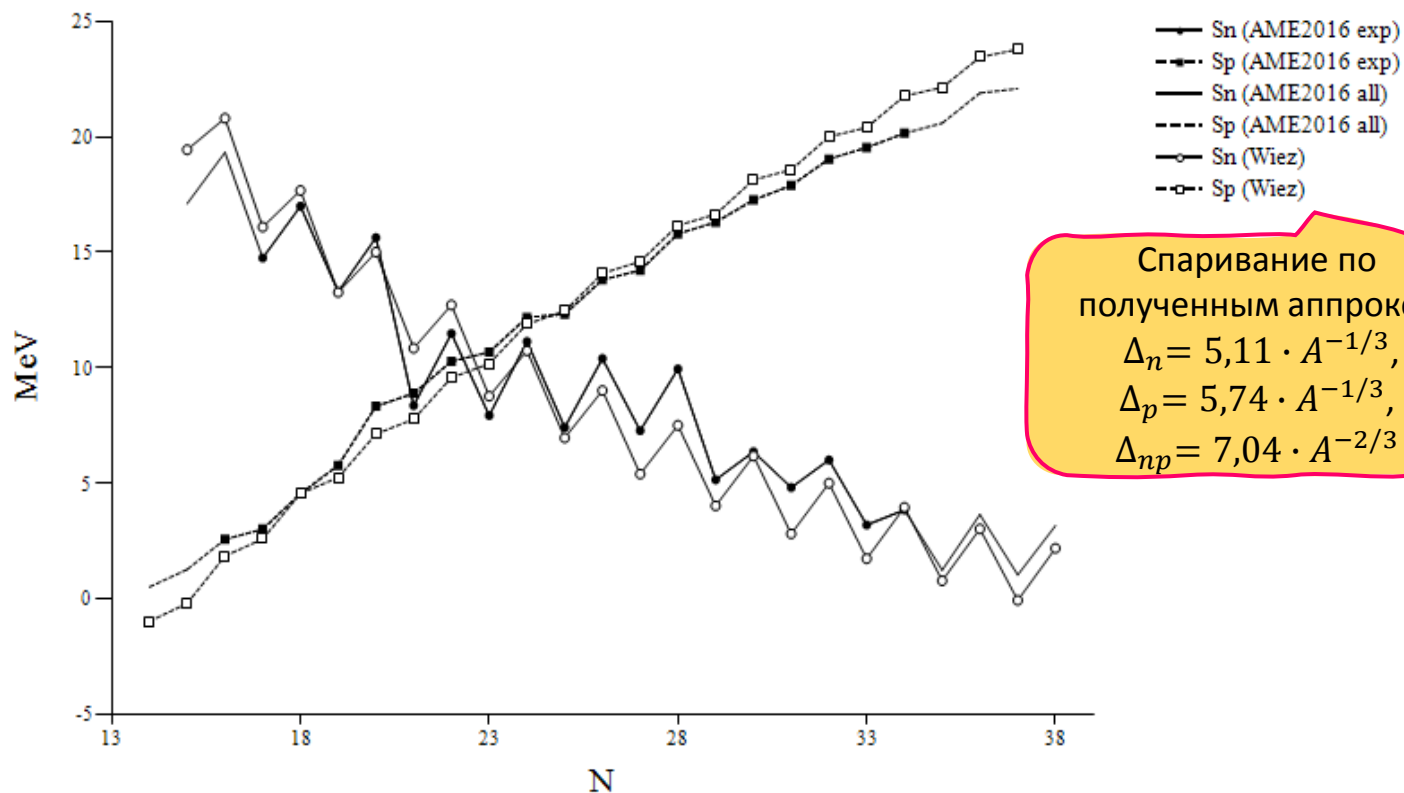
- Учесть параметры оси Y:
- Y min = 0 MeV
- Y max = 10 MeV

Построить для Изотопов

Z = 20  чёт  неч

Построить

Изотопы Z = 20 (Ca - Calcium)



Спаривание по полученным аппрокс.:  
 $\Delta_n = 5,11 \cdot A^{-1/3}$ ,  
 $\Delta_p = 5,74 \cdot A^{-1/3}$ ,  
 $\Delta_{np} = 7,04 \cdot A^{-2/3}$

Сохранить данные в txt      Сохранить изображение



## Текущие результаты

- 1. Изучены массовые соотношения, отражающие парные корреляции нуклонов**
  - Показана взаимосвязь соотношений, проявления спаривания и оболочечной структуры
  - Получены аппроксимации различных массовых соотношений
- 2. На основе массовых соотношений для  $n\bar{p}$ -корреляций получены оценки энергий связи для сверхтяжелых элементов и положения границ существования ядер; проверена применимость методов машинного обучения для оценок масс ядер**
- 3. Разработаны программы для работы с массовыми соотношениями**
  - Интерфейсная программа MaRel: расчет и визуализация массовых соотношений
  - Консольная программа для расчета энергий связи на всем массиве  $NZ$ -диаграммы

### Дальнейшие планы:

4. Продвижение в более тяжелые ядра с использованием энергии альфа-распада
5. Уточнение аппроксимации на всем массиве  $A$ , уточнение положение границ существования + возможное применение оценок для расчетов процессов нуклеосинтеза
6. Развитие применения методов машинного обучения

**Выражаю искреннюю благодарность за оказанную помощь в работе,  
обсуждение полученных результатов и ценные замечания  
доценту Д.Е. Ланскому и доценту М.Е. Степанову,  
С.А. Каряевой за помощь в освоении машинного обучения,  
а также отдельную искреннюю благодарность Т.Ю. Третьяковой**

**Также искренне благодарю соавторов публикаций,  
составляющих основу представленной работы,  
С.В. Сидорова, М.В. Симонова, И.Д. Дашкова**

**С искренней благодарностью и уважением  
к профессору Борису Саркисовичу Ишханову**

---