

Массовые соотношения, отражающие нуклонные корреляции, и их применение в области сверхтяжелых элементов

Симонов М.В.

МГУ им. М.В. Ломоносова, физический факультет,
кафедра общей ядерной физики, Москва, Россия

E-mail: simonov.mv16@physics.msu.ru

Физика микромира начала активно развиваться в конце 19 века. В то же время начала разрабатываться квантовая механика, законами которой описывается поведение микрочастиц, было открыто γ -излучение ядер, проложившее дорогу исследованиям в физике высоких энергий. Однако нерешенные проблемы еще остаются. К примеру, фундаментальные законы взаимодействия электрически заряженных частиц хорошо изучены, но абсолютно точно рассчитать электронную конфигурацию атома мы не в состоянии. Невозможно вывести все химические свойства атомов из положений квантовой электродинамики. Опыт и эмпирические правила позволяют описывать свойства веществ и продолжать разрабатывать теории на менее глубоком, но не менее содержательном химическом уровне.

С 30-х гг. 20-го века, когда было установлено, что ядро состоит из протонов и нейтронов, наши знания о нуклонном сердце атома заметно возросли: был уточнен характер ядерного взаимодействия, появилось представление о ядерных оболочках, деформациях ядра, уточняются описания различных мод возбуждения, механизмы распада и т.д. Наряду с развитием теории совершенствуются и экспериментальные техники: на сегодняшний день имеется возможность синтезировать весьма необычные объекты: ядра с большим нейтронным избытком, к примеру, ярко выраженное гало-ядро ${}^8\text{He}$, ${}^{11}\text{Li}$ [1] и другие относительно устойчивые ${}^{58}\text{Ca}$, ${}^{132}\text{Ag}$, ${}^{216}\text{Hg}$, ${}^{247}\text{Pu}$ [2]; гиперядра, которые позволяют сравнивать взаимодействия барионов со странность и без нее, например, ${}^3_\Lambda\text{H}$ и ${}^3_1\text{H}$; ядра сверхтяжелых элементов ${}^{245}\text{Md}$ – ${}^{294}\text{Og}$ [2], которые позволяют судить о пределах существования нуклидов и строении массивных объектов ядерных масштабов. Несмотря на такое стремительное развитие, точный вид ядерного потенциала еще не определен. Различные приближения гамильтониана ядра свидетельствуют, что ответить на вопрос о распределении сил в многонуклонной системе чрезвычайно сложно. Точно решить задачу на собственные значения оператора энергии, по-видимому, невозможно, поэтому ученые по-прежнему ищут другие способы расчета энергии связи ядра.

Масса m – одна из базовых характеристик ядра – связана с энергией связи B следующим соотношением:

$$m(N, Z)c^2 = N \cdot m_n c^2 + Z \cdot m_p c^2 - B(N, Z) \quad (1)$$

где N и Z – число нейтронов и протонов в ядре, m_n и m_p – массы нейтрона и протона, измеренные с точностью до 10^{-8} Мэв/ c^2 [3]. В контексте данной работы мы будем употреблять термины «масса» и «энергия связи» как синонимы, поскольку для конкретного ядра можно пересчитать одно в другое. Первая полуэмпирическая формула для расчета энергии связи ядра была предложена К. Вайцеккером в 1935 в рамках жидкокапельной модели ядра [4]. Она наименее точна в области легких изотопов (массовое число $A < 20$), где энергия связи очень быстро растет при добавлении нуклонов в ядро, и для особой группы ядер, которые впоследствии были названы «магическими». Особая устойчивость нуклидов с N или Z , равными 2, 8, 20, 28, 52 и 82, привела к открытию оболочечной структуры атомных ядер. Разработанная в 1984 г. модель FRDM

(Finite Range Droplet Model), объединила макроскопическую идею заряженной жидкости с микроскопическим подходом: в ней учитываются оболочечные эффекты, эффекты сверхпроводимости ядерной материи, изоспиновая асимметрия (последняя версия [5]). Сейчас ее можно считать одной из базовых формул для расчета энергии связи для всех N и Z [6]. Параллельно моделям, вдохновленным идеей жидкой капли, развивались микроскопические глобальные подходы с одно- и двухчастичными волновыми функциями, описывающими частицы в самосогласованном среднем поле (вариационный метод Хартри-Фока-Боголюбова), использующие феноменологические потенциалы, например, десятипараметрический потенциал Скирма [7]. Преимущество микроскопических подходов состоит в том, что они позволяют рассчитывать порядок заполнения оболочек, учитывая спин-орбитальное взаимодействие, тем самым предсказывая магические числа, что важно для поисков острова стабильности и других областей локальной устойчивости.

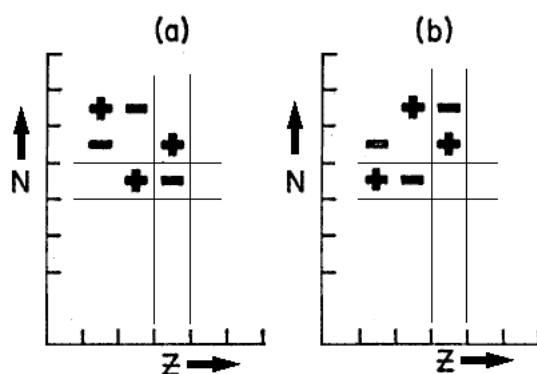


Рис. 1. Соотношения Гарви-Келсона на NZ-диаграмме: а) – поперечное, б) – продольное [9]

Кроме глобальных подходов применяют локальные методы расчета массы ядра. Массовая поверхность $m(N,Z)$ считается непрерывной, поэтому учет ее локального поведения позволяет связывать массы ядер в некоторые простые алгебраические соотношения. Одними из первых были предложены соотношения Гарви-Келсона [8], которые включают в себя массы 6 близко расположенных на NZ-диаграмме нуклидов:

$$\begin{aligned}
 \text{а) } & m(N + 2, Z - 2) - m(N, Z) + m(N, Z - 1) - m(N + 1, Z - 2) + \\
 & + m(N + 1, Z) - m(N + 2, Z - 1) = 0 \\
 \text{б) } & m(N, Z - 2) - m(N + 2, Z) + m(N + 2, Z - 1) - m(N + 1, Z - 2) + \\
 & + m(N + 1, Z) - m(N, Z - 1) = 0
 \end{aligned}
 \tag{2}$$

Рис. 1 поясняет формулы Гарви-Келсона: изображен участок карты NZ-диаграммы, где отмечены ядра, связанные в соотношениях а) и б), согласно их знакам. Формулы базируются на модели независимых частиц в самосогласованном поле и сконструирована так, чтобы сумма проекций изоспинов включенных в формулу ядер была равна 0. Предполагается, что одночастичные уровни и энергии взаимодействия лежащих на этих уровнях нуклонов медленно меняются с ростом A . Предсказательная способность соотношения Гарви-Келсона достаточно велика: стандартное отклонение значений массы, полученное из 5 экспериментальных значений, от экспериментальных значений составляет 0,16–0,27 МэВ/ c^2 для данных 1964 г. [9]. Таким образом, метод локальных массовых соотношений характеризуется хорошей точностью (для удельной энергии связи стандартное отклонение составляет от 60 до 300 кэВ [6]) и простотой расчетов. Однако если энергия перестает медленно и плавно расти, как например в области легких ядер, или мы отходим далеко от массива экспериментальных данных, то качество предсказаний с использованием массовых соотношений заметно ухудшается. Как отмечено в работе [10],

описывающую принципы составления крупнейшей систематики АМЕ16, если разделять ядра по четности N и Z , то массовая поверхность $m(N,Z)$ расслаивается на 4 достаточно гладких, идущих параллельно листа. Такое деление очень продуктивно: оно позволяет конструировать различные массовые соотношения, включая в формулы значения масс с одного листа или с разных таким образом, чтобы полученные соотношения имели практически гладкую зависимость от A , которую можно аппроксимировать и экстраполировать. Нерегулярность поведения листов массовой поверхности может свидетельствовать о новых физических эффектах поправки или о некорректности некоторых экспериментальных данных.

На карте изотопов много областей, интересных для изучения. Одна из них – область сверхтяжелых элементов с $Z > 100$ (Superheavy elements, SHE). В ней должен находиться «остров стабильности»: нуклиды на этом «острове» могут иметь периоды полураспада до 10^6 лет [11]. За последние 60 лет техники синтеза новых изотопов были значительно усовершенствованы: открыты метода горячего и холодного синтеза, самым тяжелым синтезированным изотопом стал ${}^{294}_{118}\text{Og}$ [12]. Однако массы известны далеко не у всех изотопов сверхтяжелых элементов, поэтому задача предсказания масс этих элементов остается актуальной. Одной из важных характеристик для SHE, помимо массы, является энергия α -распада: α -распад и спонтанное деление – основные каналы распада SHE; некоторые изотопы испытывают до 7 последовательных α -распадов. Из оценок энергии легко получить оценку для энергии α -распада:

$$Q_{\alpha}(Z, N) = B(Z - 2, N - 2) + B(2, 2) - B(Z, N) \quad (3)$$

Иметь оценку энергии α -распада необходимо для эксперимента, поскольку методы регистрации сверхтяжелых нуклидов основаны на измерении характеристик вылетающих α -частиц и дочерних ядер.

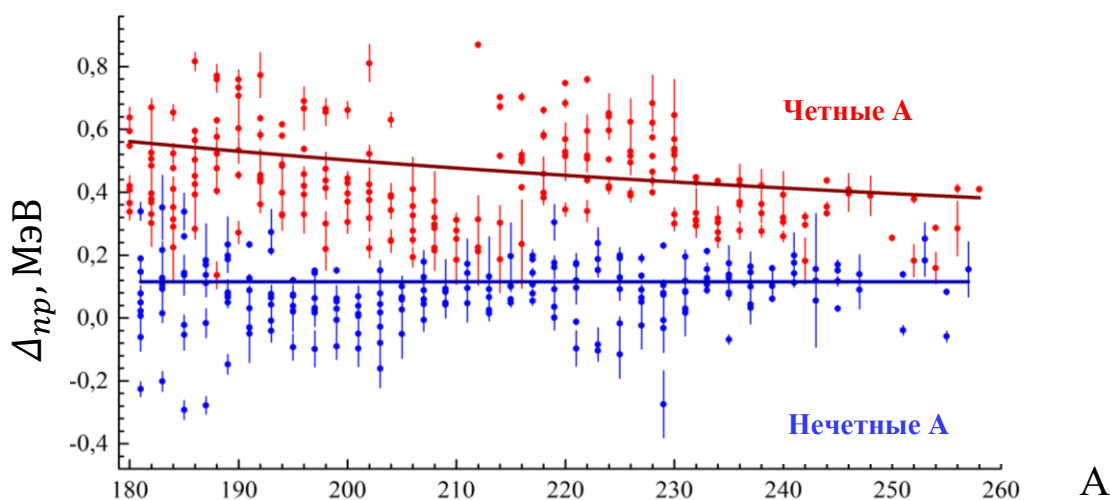


Рис. 2. Аппроксимация зависимости Δ_{np} от A . Точки – экспериментальные данные, линии – найденные аппроксимации

В нашей работе мы используем метод локальных массовых соотношений, чтобы получать оценки энергии связи для сверхтяжелых изотопов. Мы используем массовое соотношение, соответствующее остаточному взаимодействию протона и нейтрона, завершающих нуклонные оболочки ядра (впервые предложена в [13]):

$$\Delta_{np}(N, Z) = S_{np}(N, Z) - [S_p(N - 1, Z) + S_n(N, Z - 1)] = B(N, Z) + B(N - 1, Z - 1) - B(N, Z - 1) - B(N - 1, Z) \quad (4)$$

В области SHE экспериментальных данных для энергии связи не так много, поэтому удобно использовать компактные формулы, связывающие 3–4 ядра. Для наилучшего качества аппроксимации, ядра делятся на четные и нечетные по массовому числу A . Указанная характеристика является довольно гладкой [14] (см. рис. 2) и может быть аппроксимирована зависимостью типа

$$\Delta_{np}^{approx}(A) = C_1 + C_2 \cdot A^{-\gamma} \quad (5)$$

где C_1, C_2, γ – параметры аппроксимации, подобранные для ядер $A \geq 180$ за исключением области магических чисел $Z = 81, 82, 83, N = 125, 126, 127$ на основе экспериментальных данных из AME2016 [10]. Полученные значения коэффициентов и стандартное отклонение приведены в таблице 1. Найденная зависимость позволяет итерационно рассчитывать энергию связи нового ядра на основании экспериментальных

	C_1 (кэВ)	C_2 (кэВ)	γ	σ (кэВ)
A четные	$-0,03 \pm 0,08$	107 ± 17	1	153
A нечетные	$0,116 \pm 0,005$	–	–	111

Таблица 1. Значения коэффициентов аппроксимации $\Delta_{np}^{approx}(A)$

данных и уже полученных оценок. Энергия α -распада является массовой характеристикой, однако ее не удастся аппроксимировать, поскольку она очень чувствительна к оболочечным эффектам, поэтому оценку энергий α -распада следует рассчитывать, используя полученные значения энергии связи нуклидов. Формула Виолы-Сиборга

$$\lg(T_{1/2}^\alpha) = \frac{az+b}{\sqrt{Q\alpha}} + cZ + d + h_{parity} \quad (6)$$

где a, b, c, d и h_{parity} – параметры подгонки экспериментальных данных, позволяет на основе энергии α -распада вычислить периоды полураспада по α -каналу. Результаты расчетов энергии связи, энергии α -распада и периода полураспада по α -каналу для элементов 101–106 с $N < 158$ представлены в [15]. Приведем для примера результаты

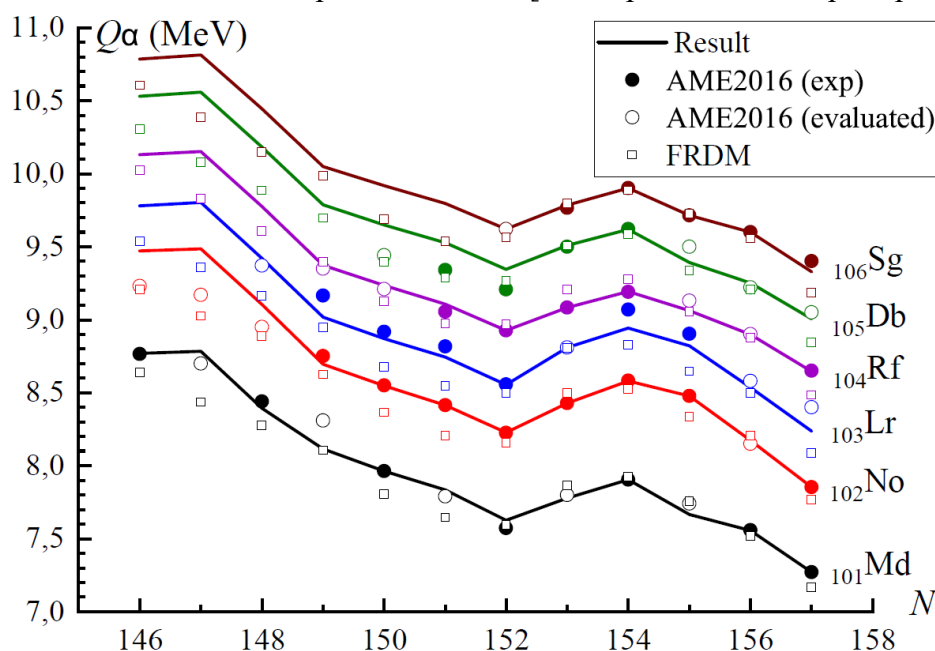


Рис. 3. Расчет энергии α -распада для 6 цепочек изотопов SHE и сравнение с данными AME16 [10] и FRDM [5]

расчета энергии α -распада (см. рис. 3). Сравнение с результатами других работ демонстрирует удовлетворительную точность используемого метода.

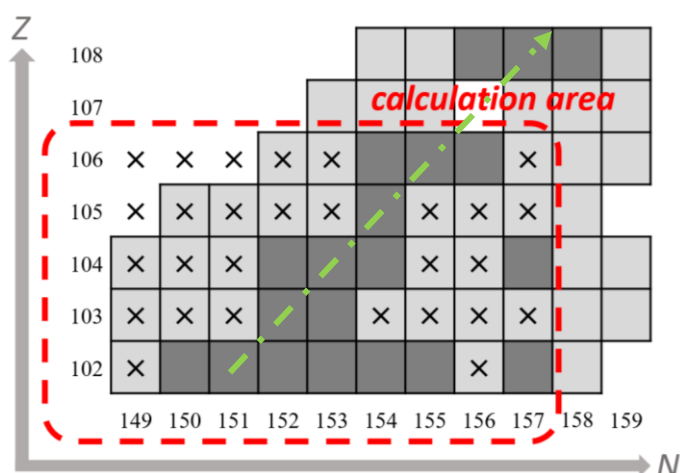


Рис. 4. Темно-серые клетки – ядра с известными массами, кресты (×) – ядра с рассчитываемыми значениями масс. Пунктиром показана линия $N-Z=49$

Однако такой подход имеет ограниченное применение: максимально достигаемые $Z = 106$ и $N = 157$ определяются распределением нуклидов с известными массами по NZ-диаграмме (см. рис. 4). Для продвижения к 110-му элементу использовалась характеристика Δ_{np}^3 , связывающие между собой 3 ядра:

$$\Delta_{np}^3(N, Z) = \frac{(-1)^{N+1}}{2} [B(N + 1, Z + 1) - 2B(N, Z) - B(N - 1, Z - 1)] \quad (7)$$

Эта корреляционная характеристика связана с расщеплением массовой поверхности между четно-четными и нечетно-нечетными ядрами, т.е. помимо протон-нейтронного спаривания она учитывает спаривание тождественных нуклонов. С точки зрения предсказания масс Δ_{np}^3 интересна благодаря своему чисто диагональному виду (диагональ – линия $N-Z=const$, см. рис. 4). Δ_{np}^3 аппроксимировались в пределах $N, Z > 84$ линейной зависимостью на всех экспериментальных данных и отдельных диагоналях. В таблице 2 представлены данные аппроксимации. Поскольку стандартное отклонение для четных A больше, чем для нечетных, то для дальнейших вычислений использовались диагонали изотопов только с нечетными A . Поскольку с ростом разности $N-Z$ значение $\Delta_{np}^{3,approx}(A)$ возрастает, то разумно использовать аппроксимации для каждой линии отдельно. Используя полученные зависимости, мы получили возможность выйти за 106 элемент, получив опорные точки для расчетов энергий связи по аппроксимации $\Delta_{np}^{approx}(A)$.

	A		N-Z			
	Четное	Нечетное	49	51	53	55
$\Delta_{np}^3 \cdot (-1), \text{МэВ}$	$-1,525 \pm 0,024$	$0,150 \pm 0,011$	$0,114 \pm 0,025$	$0,15 \pm 0,03$	$0,197 \pm 0,029$	$0,2 \pm 0,03$
Станд. отклонение, МэВ	0,226	0,115	0,117	0,107	0,117	0,117

Таблица 2. Значения коэффициентов аппроксимации $\Delta_{np}^{3,approx}(A)$

На рис. 5 приведены результаты расчетов удельной энергии связи $B(N,Z)/A$ для изотопов элементов 107–110 с $N=151–160$. Наши оценки удельной энергии связи для элементов 107–109 имеют тенденции поведения, сходные с данными AME16 и расчетами в модели FRDM. Скачок удельной энергии может быть связан с большим количеством итераций (до 8–10). Рис. 6 иллюстрирует результаты расчетов энергии α -распада для тех же ядер. Экспериментальные данные не были включены в расчет, поэтому предсказательную способность метода можно оценить, сравнивая с экспериментальными точками и результатами расчетов в AME16 и FRDM. В целом, наблюдается соответствие

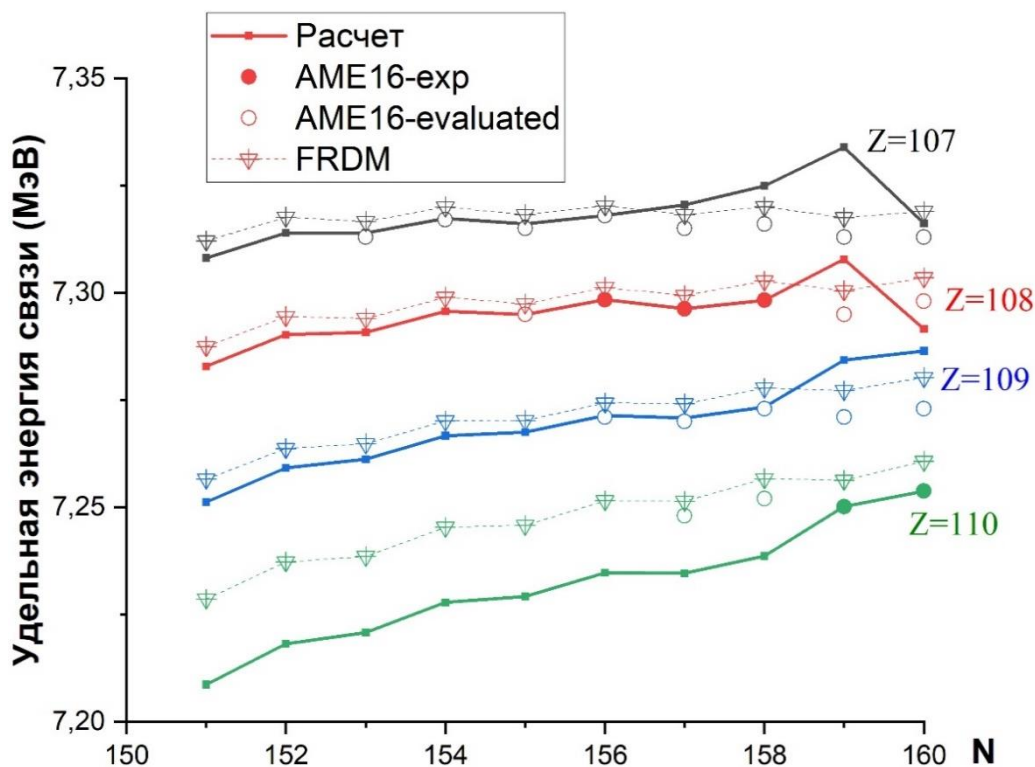


Рис. 5. Удельная энергия связи для элементов 107-110

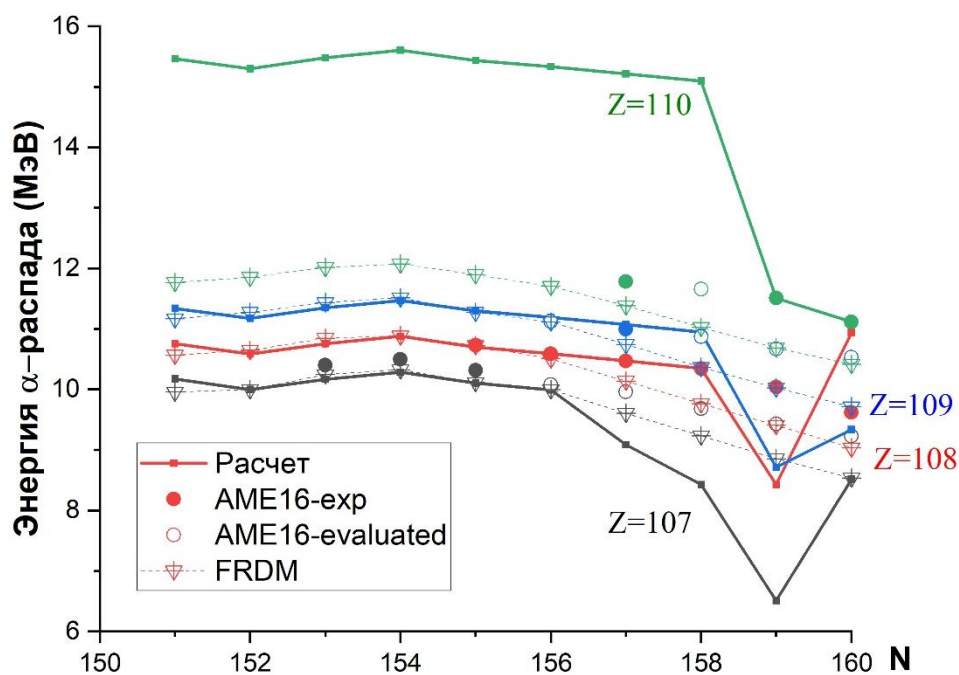


Рис. 6. Энергия α -распада для элементов 107-110

между полученными оценками и экспериментом, за исключением изотонов $N=159$ и линии изотопов ^{110}Ds . Что касается линии ^{110}Ds , то незначительные ошибки в определении удельной энергии связи, большое количество шагов – рядом с нуклидами $^{159,160}\text{Ds}$ практически на NZ -диаграмме практически нет ядер с известными массами – приводят к большим ошибкам при вычислении энергии α -распада. Провал в области $N=159$ может быть связан с достаточно большим числом шагов для $\Delta_{np}^{3,approx}(A)$ – минимум 6–7 итераций.

Таким образом, метод локальных массовых соотношений можно использовать для предсказаний в области SHE. Чтобы повысить точность получаемых оценок, следует использовать новые массовые соотношения, к примеру энергии отделения 2-х протонов или нейтронов, сразу несколько соотношения, усредняя получаемые значения.

Работа поддержана стипендией фонда «БАЗИС» для студентов старших курсов физического факультета МГУ по теоретической физике.

Автор выражает благодарность своему научному руководителю Третьяковой Татьяне Юрьевне за обсуждение работы и ценные комментарии.

Источники

1. H.-W. Hammer et al. Effective field theory description of halo nuclei. *J. Phys. G: Nuclear and Particle Physics*, 2017. V. 44, №10, 103002.
2. База данных NuDat 2.8, BNL // <https://www.nndc.bnl.gov/nudat2>
3. M. Tanabashi et al. // (Particle Data Group), *Phys. Rev. D*, 2018. 98, 030001.
4. C.F.v. Weizsäcker. Zur Theorie der Kernmassen // *Zeitschrift für Physik*, 1935.V. 96, pp. 431–458
5. P. Möller et al. Nuclear ground-state masses and deformations: FRDM (2012) // *At. Data and Nucl. Data. Tables*, 2016. V. 109–110, pp. 1–204.
6. D. Lunney, J. M. Pearson, C. Thibault. Recent trends in the determination of nuclear masses // *Reviews Of Modern Physics* 2003. Vol.75, N3, p. 1021–1082.
7. D. Vautherin and D.M. Brink. Hartree-Fock Calculations with Skyrme's Interaction. I. Spherical Nuclei // *Phys. Rev. C*, 1972. 5, p. 626.
8. I. Kelson and G. T. Garvey. New nuclidic mass relationships // *Phys. Rev. Lett.*, 1966. V. 16, №5, p. 197.
9. G.T. Garvey et al. Set of Nuclear-Mass relation and a Resultant Mass Table // *Rev. Mod. Phys.*, 1969. V. 41, №4.
10. G. Audi, F.G. Kondev, Meng Wang, W.J. Huang, S. Naimi. // *Chin. Phys. C*, 2017. V. 41, №3, 030001.
11. Ю.Ц. Оганесян. О сверхтяжелых элементах// wwwnew.jinr.ru/section.asp?sd_id=103&language=rus
12. Yu. Ts. Oganessian et al. Superheavy nuclei: from predictions to discovery // *Phys. Scr.* 2017. 92, 023003.
13. J. Jänecke, H. Behrens. Nuclidic mass relationships and mass equations. *Physical Review C*, 1974. V. 9, №4, pp. 1276–1291.
14. Владимирова Е.В., Дашков И.Д., Ишханов Б.С., Третьякова Т.Ю. // *Известия РАН. Серия физическая*, том 82, № 6, с. 761-766
15. Е. В. Владимирова, Б. С. Ишханов, М. В. Симонов, Т. Ю. Третьякова. Оценка энергий связи сверхтяжелых ядер на основе массовых соотношений для остаточного пр-взаимодействия // *Ученые Записки Физического Факультета МГУ*. 2019. № 3. С. 1930409