

УДК 539.143

ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКИЙ ПОДХОД К ВЫЧИСЛЕНИЮ ЭНЕРГИЙ СВЯЗИ ДЛЯ СВЕРХТЯЖЕЛЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

© 2021 г. М. В. Симонов¹, Е. В. Владимирова¹, Т. Ю. Третьякова^{1,2,*}, **Б. С. Ишханов¹**

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

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

*E-mail: tretyakova@sinp.msu.ru

Поступила в редакцию 20.11.2020 г.

После доработки 28.12.2020 г.

Принята к публикации 27.01.2021 г.

Рассмотрены варианты использования метода локальных массовых соотношений в области сверхтяжелых элементов с зарядом ядра $Z > 106$. С использованием формул для оценки остаточного np -взаимодействия получены оценки для энергии связи, энергии α -распада и периода полураспада по α -каналу для изотопов $Z = 107–110$ и $N = 152–161$.

DOI: 10.31857/S0367676521050227

ВВЕДЕНИЕ

Сверхтяжелые элементы (СТЭ) с атомным номером больше 100 привлекают внимание на протяжении всего времени развития ядерной физики. Оценки в рамках модели жидкой капли приводят к ограничению на существование СТЭ с зарядом ядра $Z > 104$, однако благодаря стабилизирующим эффектам оболочек [1] время жизни известных сверхтяжелых нуклидов составляет $\sim 10^5–10^{-5}$ с. Кроме того, предсказано существование “острова стабильности” – области относительной стабильности (максимальное время жизни до 10^{10} с [2]) для ядер с зарядом $Z \sim 112–126$ и числом нейтронов $N \sim 172–184$ [3]. Высокая вероятность распада ядер СТЭ приводит к большим трудностям в измерении их характеристик. Данных по измерению спектров для СТЭ нет [4], поэтому мы можем судить о структуре ядра лишь по теоретическим прогнозам. Плотность одночастичных уровней в ядрах СТЭ крайне высока, поэтому магические числа и порядок заполнения энергетических уровней зависят от модели, в рамках которой производится расчет [5, 6]. Ядра СТЭ содержат экстремально большое число нуклонов – около 300. На стабильность многонуклонной системы в значительной степени влияет деформация [7], кроме того, в распределении плотности внутри ядра могут наблюдаться такие экзотические эффекты, как полупузыри и кольца, обусловленные сильным кулоновским отталкиванием [3]. Все указанные особенности застав-

ляют экспериментаторов прилагать значительные усилия по синтезу новых изотопов и изучению их свойств. В настоящее время ведутся попытки по синтезу 119-го и 120-го элементов [8, 9].

В нашей работе основное внимание будет уделено массе атомного ядра и энергии связи как базовым характеристикам ядра. Из 150 известных изотопов СТЭ экспериментальное значение массы ядра получено лишь для 26 нуклидов. С другой стороны, на данный момент предложено большое количество разных вариантов модельных расчетов энергии связи B . Решение уравнения Шредингера и его релятивистских аналогов с учетом реальных и даже эффективных сил пока является слишком трудоемкой задачей и для СТЭ не может применяться, так как вычислительные возможности ограничивают применимость подобных методов массовым числом $A \sim 40$ [10]. Расчеты в моделях среднего поля позволяют точно рассчитать энергию связи для отдельных ядер; средняя точность предсказаний составляет от 0.3 до 1 МэВ для полной энергии связи [11, 12]. Наиболее точные макро-микроскопические модели, такие как FRDM (для ядер с $N \geq 65$ среднеквадратичное отклонение $\sigma \sim 0.34$ МэВ [13]), для СТЭ могут давать оценки, отличающиеся от экспериментальных на 0.5–1.5 МэВ. Стоит также отметить полумпирическую модель Weizsäcker–Skyrme [14], сочетающую в себе достижения жидкокапельной модели с микроскопическими расчетами с использованием функционала плотности энергии в форме

Скирма для расчета микроскопической поправки. В своей последней итерации (WS4 + RBF), где для улучшения точности применяется метод радиальных базисных функций, который можно рассматривать как простейшую нейронную сеть, модель демонстрирует наиболее точное описание масс известных ядер среди всех массовых моделей – среднеквадратичное отклонение для СТЭ составляет 0.13 МэВ, для всех ядер – 0.16 МэВ [15].

Среди методов предсказания неизвестных масс ядер отдельное место занимают феноменологические подходы с использованием локальных массовых соотношений, основанные на непрерывности массовой поверхности. Энергии отделения одного или двух нуклонов и другие соотношения, составленные из энергий связи соседних ядер, на разных изолиниях ($N, Z, N-Z, A = \text{const}$) аппроксимируются гладкими зависимостями, которые экстраполируются в область неизвестных ядер [16, 17]. Могут быть также составлены алгебраические соотношения, примерно равные нулю, которые связывают массы атомных ядер [18] или энергии α -распада [19]. В систематике АМЕ2016 [20], обобщающей все экспериментальные данные по массам атомных ядер, каждому нуклиду (в том числе с неизвестной массой) приписывается такое значение массы, чтобы все связанные с ним массовые характеристики наиболее плавно зависели от N, Z и A . Точность предсказаний АМЕ2016 для СТЭ составляет $\sigma \sim 0.3-0.6$ МэВ. Несомненным преимуществом локальных подходов является прозрачность схемы и высокая точность расчетов, однако использование массовых соотношений ограничено необходимой привязкой к уже полученным экспериментальным данным, что существенно сужает область их применения.

В нашей работе для получения оценок энергии связи мы использовали локальное массовое соотношение, отражающее остаточное нейтрон-протонное взаимодействие (np -взаимодействие). Данное соотношение и связанные с ним массовые формулы успешно применяются для предсказания масс ядер с 60-х годов [17, 18, 21], однако их использование в области СТЭ ограничено $Z = 106$ и $N = 157$. Данное ограничение не имеет физической природы и обусловлено исключительно текущей ситуацией по наличию экспериментальных значений масс ядер в этой области. В настоящей работе мы предлагаем два подхода для преодоления данного ограничения и использования соотношения для np -взаимодействия для изотопов 107–110 элементов.

МАССОВОЕ СООТНОШЕНИЕ ДЛЯ ОСТАТОЧНОГО np -ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Поверхность энергии связи $B(N, Z)$ считается непрерывной, поэтому учет ее локального, вблизи определенного нуклида (N, Z), поведения позволяет связывать энергии связи ядер в некоторые линейные соотношения. В зависимости от конструкции значение алгебраического соотношения может быть постоянным или плавно изменяться с ростом A, N, Z . Если характеристика отражает расщепление массовой поверхности по четности Z или N , изотопы разделяют на две или четыре группы, чтобы избежать скачкообразного поведения соотношения.

Предсказание масс ядер с использованием алгебраических соотношений, связывающих массы лежащих рядом на NZ -диаграмме нуклидов, и есть метод локальных массовых соотношений. Для получения оценок строятся аппроксимации соотношений. Предпочтительными являются характеристики, наименее чувствительные к оболочечным эффектам. Аппроксимации массовых соотношений позволяют получать с использованием массива экспериментальных данных оценки масс неизвестных ядер, а также связанные с ними характеристики: энергии связи, энергии реакций, оценки расщепления массовой поверхности и т.д. С другой стороны, отклонение экспериментального значения от предсказательного тренда, полученного из массового соотношения, может свидетельствовать о наличии магических ядер.

Основное соотношение в нашей работе отражает остаточное нейтрон-протонное (np) взаимодействие [22]:

$$\begin{aligned} \Delta_{np}(Z, N) &= S_p(Z, N) - S_n(Z-1, N) = \\ &= B(Z, N) + B(Z-1, N-1) - B(Z-1, N) - \\ &\quad - B(Z, N-1), \end{aligned} \quad (1)$$

где S_p и S_n – энергии отделения протона и нейтрона соответственно. Эмпирические значения $\Delta_{np}(Z, N)$ делятся на две группы по четности массового числа A : для четных A в области СТЭ величина $\Delta_{np} \sim 0.5$ МэВ и плавно уменьшается с ростом A , для нечетных A $\Delta_{np}(Z, N) \approx \text{const}$. Хорошим приближением для аппроксимации $\Delta_{np}(Z, N)$ при четных A является степенная зависимость с $\gamma = -1$ [17, 22]:

$$\Delta_{np}^{approx}(Z, N) = C_1 + C_2 A^\gamma. \quad (2)$$

Параметры функции приведены в табл. 1. Таким образом, с использованием аппроксимации из формулы (1) можно получить оценку любой из четырех энергий связи, например:

$$\begin{aligned} B_{pred}(Z, N) &= B(Z-1, N) + B(Z, N-1) - \\ &\quad - B(Z-1, N-1) + \Delta_{np}^{approx}(Z, N). \end{aligned} \quad (3)$$

Таблица 1. Значения коэффициентов аппроксимации $\Delta_{np}^{approx}(Z, N) = C_1 + C_2 A^\gamma$

	C_1 (кэВ)	C_2 (кэВ)	γ
A четные	-0.03 ± 0.08	107 ± 17	-1
A нечетные	0.116 ± 0.005	–	–

Табл. 2. Параметры аппроксимаций линий отделения двух нуклонов $S_{pp}(Z)$ при $N = 154$ и $S_{nn}(N)$ при $Z = 100$

	a (МэВ)	b (МэВ)
S_{pp}	-0.910 ± 0.021	100.7 ± 2.1
S_{nn}	-0.39 ± 0.03	72 ± 4

Начиная с известных значений энергии связи, итерационным путем получают оценки для новых значений, усредняя оценки для одного ядра, если возможно. Подробности итерационной процедуры, а также результаты предсказаний энергий связи для нуклидов с $Z \leq 106, N \leq 157$ приведены в нашей предыдущей работе [23]. На рис. 1 приведен фрагмент NZ -диаграммы с выделенной областью, где может быть использована данная методика (клетки, помеченные \times). Для того, чтобы получить оценки для элементов $Z = 107-110$, необходимо было использовать дополнительные данные.

ОЦЕНКИ МАССОВЫХ ХАРАКТЕРИСТИК

Для дальнейших расчетов мы использовали энергии реакций: в первом варианте это были

энергии отделения двух протонов S_{pp} и двух нейтронов S_{nn} , во втором варианте в качестве дополнительных экспериментальных данных были использованы данные по энергии α -распада Q_α . Энергии отделения

$$S_{pp}(Z, N) = B(Z, N) - B(Z - 2, N), \tag{4}$$

$$S_{nn}(Z, N) = B(Z, N) - B(Z, N - 2) \tag{5}$$

удобны тем, что практически линейно зависят от N, Z : S_{pp} от Z и S_{nn} от N . Это свойство энергий отделения позволяет получить наиболее точные аппроксимации на некоторых линиях изотопов и изотонов. Были выбраны две наиболее близкие к ядру ${}^{263}_{157}\text{Sg}$ линии изотонов $N = 154$ для S_{pp} и изотопов $Z = 100$ для S_{nn} с достаточным числом экспериментальных значений массы на этих линиях. Параметры линейных аппроксимаций

$$S_{pp}(Z) = aZ + b, \tag{6}$$

$$S_{nn}(N) = aN + b \tag{7}$$

были получены в работе [24] и приведены в табл. 2. Экстраполируя зависимости (6) и (7) в область $Z > 106, N > 157$, мы получили 8 опорных значений энергии связи: $N = 154, Z = 107-110; Z = 100, N = 158-161$ (см. рис. 1, клетки со знаками “ S_{pp}, S_{nn} ”). Далее мы применили итерационную процедуру, описанную в предыдущем разделе (см. рис. 1, клетки, помеченные *). На данный момент в области $Z > 106, N > 157$ имеется в наличии всего пять экспериментальных значений масс изотопов $Z = 108$ и 110 . Мы провели два варианта расчета: без учета этих данных и с включением экспериментальных данных для $Z = 108$ и 110 в схему расчета. Результаты для удельной энергии связи представлены на рис. 2 (сплошная и пунктирная линии). Различие двух вариантов расчета наиболее заметно для изотопов $Z = 110$ – во втором случае получены более низкие значения для всех нуклидов в цепочке. Существенно различаются данные результаты в применении к расчету энергии α -распада

$$Q_\alpha(Z, N) = B(Z - 2, N - 2) + B(2, 2) - B(Z, N). \tag{8}$$

В случае использования экспериментальных масс наблюдается локальный пик при $N = 159$ (рис. 3а), чего не наблюдается для первого варианта расчета и в других моделях. Вероятно, это означает, что 8 опорных точек, полученные из линий отделения двух нуклонов, и пять экспериментальных значений масс лежат на разных уровнях массовой поверхности, и локальные тренды противоречат друг другу в области между этими точками. Также важно иметь ввиду указания на существование магического ядра с $Z = 108$, что несомненно должно привести к появлению обо-

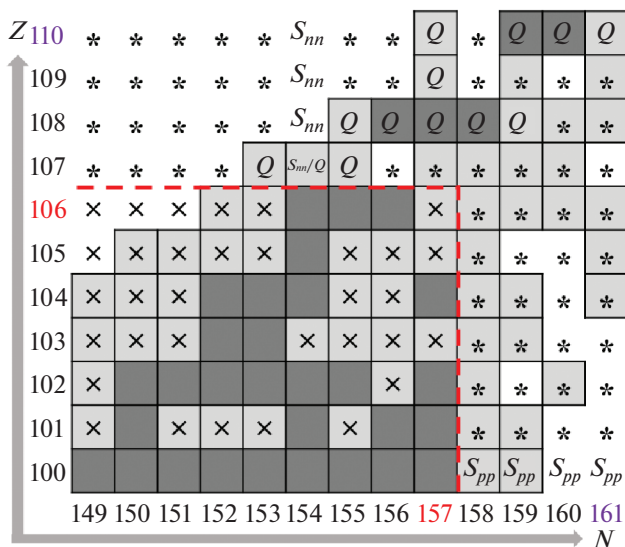


Рис. 1. Схема расчета. Темно-серым отмечены ядра, массы которых определены экспериментально; светло-серый – известные изотопы. \times – расчет до $Z \leq 106, N \leq 157$; * – расчет в области $Z > 106, N > 157$.

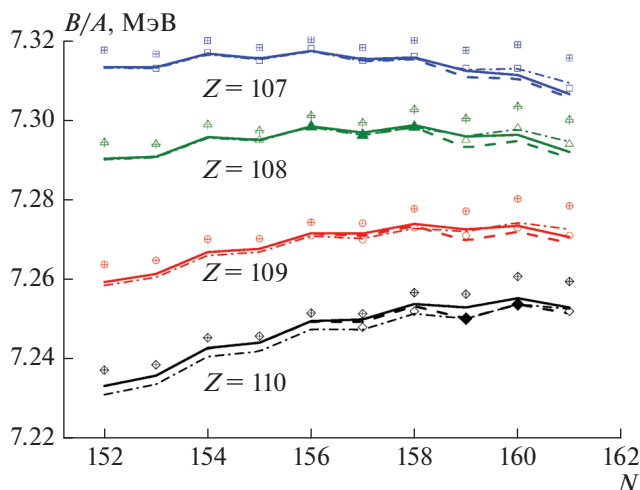


Рис. 2. Удельные энергии связи B/A для изотопов с $Z = 107$ (синие линии), 108 (зеленые), 109 (красные) и 110 (черные), полученные с использованием аппроксимаций энергий S_{pp} и S_{nn} без учета (сплошная кривая) и с учетом (штриховая) экспериментальных значений масс для изотопов $Z = 108$ и 110. Штрих-пунктирная линия – расчеты с использованием Q_α (см. текст). Данные для сравнения: экспериментальные (закрашенные символы) и оцененные (пустые символы и точечная кривая) данные AME2016 [20], перечеркнутые символы – расчеты FRDM [13].

лочечных эффектов, нарушающих гладкое поведение разностных характеристик.

Для уточнения наших оценок, мы решили принять во внимание экспериментальные данные для энергии α -распада. Альфа-распад – основной (наряду со спонтанным делением) канал распада ядер СТЭ. Для изотопов $Z = 107–110$ имеется 15 экспериментально измеренных значений Q_α , 13 из них можно использовать для получения опорных точек (см. рис. 1, клетки со знаком “Q”):

$$B_{pred}(Z, N) = B(Z - 2, N - 2) + B(2, 2) - Q_\alpha(Z, N). \quad (9)$$

Предсказания для остальных изотопов получены по схеме, изложенной выше, с использованием массового соотношения Δ_{np} . Результат расчета удельной энергии связи приведен на рис. 2 (штрих-пунктирная линия). Следует отметить существенное уменьшение полученных значений для всей цепочки изотопов $Z = 110$. При этом общие тенденции поведения остаются прежними. Использование экспериментальных данных по энергии α -распада позволяет получить более надежные зависимости $Q_\alpha(N)$, не имеющие резких скачков и хорошо согласующиеся с экспериментом (см. рис. 3б). Таким образом, полученные данные свидетельствуют о том, что экспериментальные значения Q_α могут быть использованы для расширения области применения локальных массовых

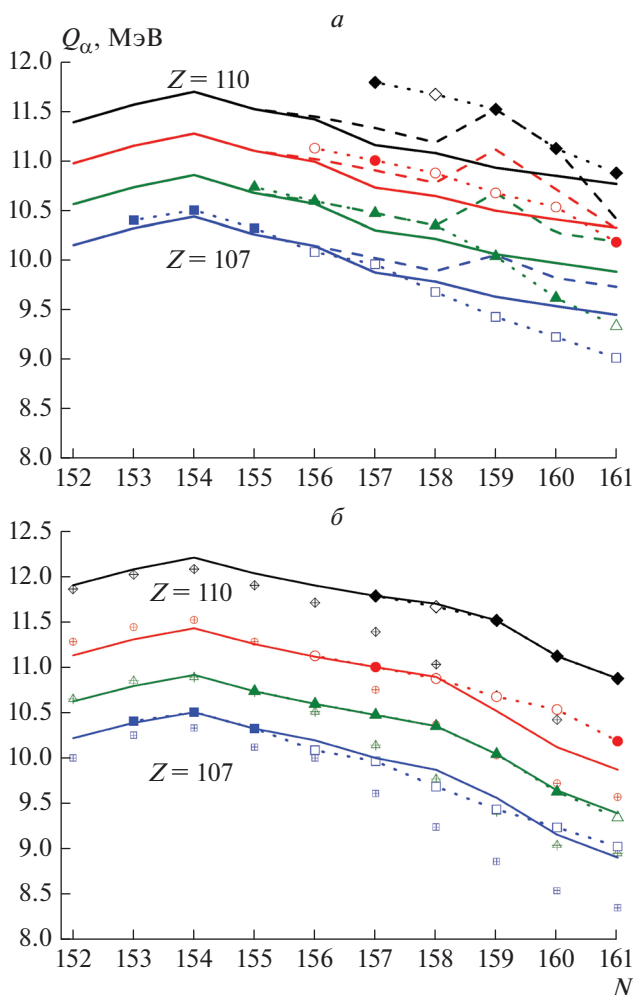


Рис. 3. Энергии α -распада Q_α для изотопов с $Z = 107$ (синие линии), 108 (зеленые), 109 (красные) и 110 (черные). Оценки получены а) с использованием аппроксимаций энергий S_{pp} и S_{nn} без учета (сплошная кривая) и с учетом (штриховая) экспериментальных значений масс для изотопов $Z = 108$ и 110, б) с использованием известных Q_α (сплошная кривая). Данные для сравнения: экспериментальные (закрашенные символы) и оцененные (пустые символы и точечная кривая) данные AME2016 [20], перечеркнутые символы – расчеты FRDM [13].

соотношений, построенных на основе формулы для Δ_{np} .

На рис. 4 приведены значения логарифма периода полураспада $\lg(T_{1/2})$ (в секундах) по α -каналу, полученные на основе предсказанных значений Q_α с использованием систематики Вайолы–Сиборга [25]

$$\lg(T_{1/2}) = \frac{(aZ + b)}{\sqrt{Q_\alpha}} + (cZ + d) + h_{log} \quad (10)$$

в параметризации [26]: $a = 1.389$, $b = 13.862$, $c = -0.1086$ и $d = -41.458$, фактор h_{log} равен 0,

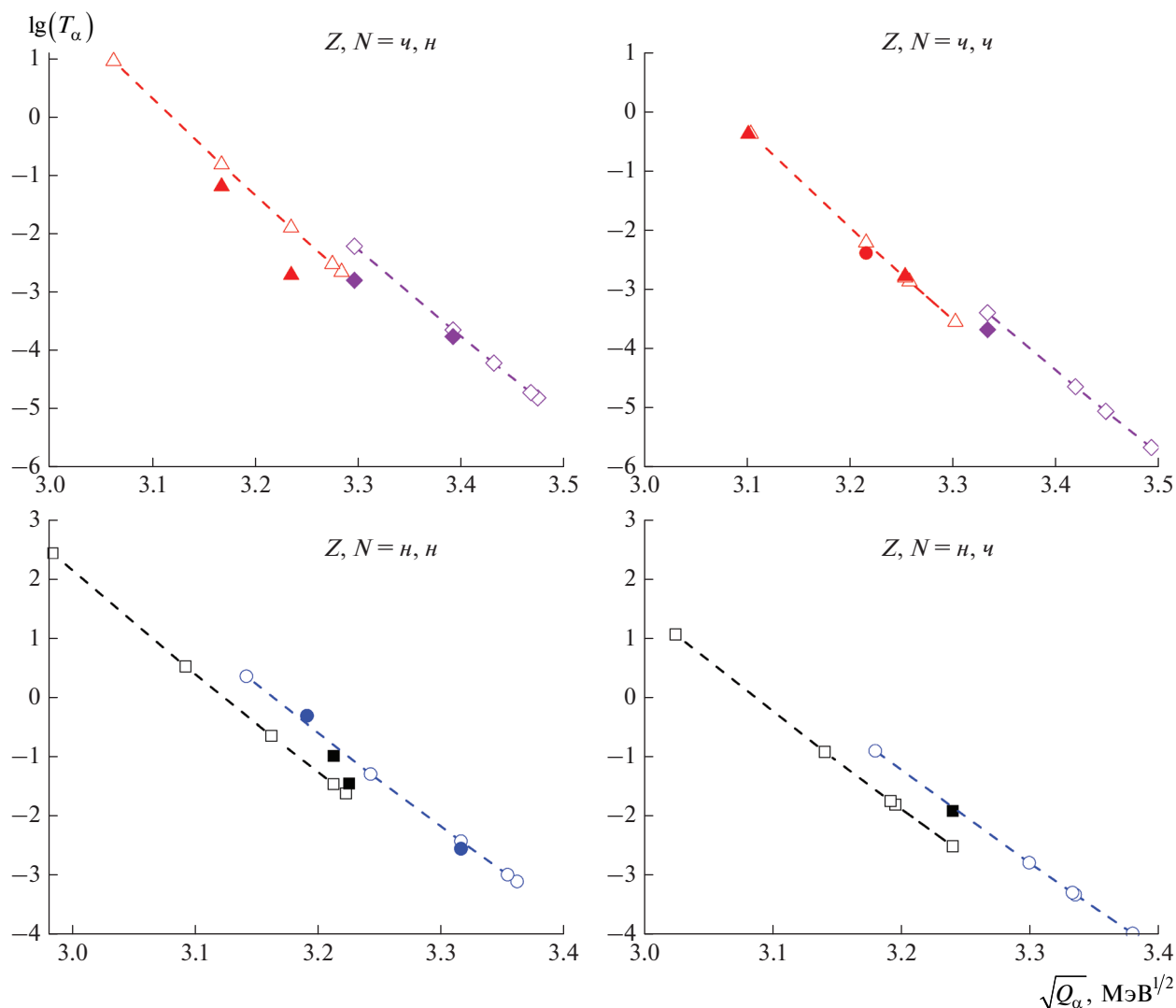


Рис. 4. Оценка логарифма период полураспада $\lg(T_{1/2})$ по α -каналу для изотопов с $Z = 107$ (■), 108 (▲), 109 (●), 110 (◆): закрасенные символы – экспериментальные значения [27], пустой маркер – оценка. Все изотопы разделены на 4 группы по четностям Z, N ядра: ч – четные, н – нечетные.

0.641, 0.437 и 1.024 для четно-четных, четно-нечетных (четных по Z), нечетно-четных и нечетно-нечетных ядер, соответственно. Расчетные значения совпадают с экспериментальными данными [27] в пределах одного порядка для периода полураспада.

Описанный выше подход, основанный на локальных массовых соотношениях, характеризуется прозрачностью схемы вычислений и хорошей точностью и позволяет в перспективе охватить все ядра вплоть до $Z = 118$.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе получены оценки удельной энергии связи B/A для нуклидов с $Z = 107-110$ и $N = 152-$

161 с использованием аппроксимаций выражения для остаточного np -взаимодействия Δ_{np} , а также энергий отделения двух протонов S_{pp} ($N = 154$) и двух нейтронов S_{nn} ($Z = 100$). Продемонстрированные отклонения значений удельных энергий связи и энергий α -распада от монотонной зависимости, возникающие при учете имеющихся экспериментальных значений масс для изотопов $Z = 108$ и 110 , свидетельствуют о проявлении оболочечных эффектов в данной области.

Использование экспериментальных значений энергии α -распада Q_α позволяет существенно расширить область применения локальных массовых соотношений, основанных на формуле для Δ_{np} и эффективно учесть изменения структуры ядер с

увеличением массового числа. На основе B/A проведены расчеты энергии α -распада Q_α , также с использованием систематики Виолы–Сиборга получены оценки периода полураспада T_α для СТЭ с $Z = 107–110$. Качество предсказаний по методу локальных массовых соотношений сравнимо с оценками АМЕ16. Метод локальных массовых соотношений прост в использовании и весьма точен при небольшом количестве шагов.

Предполагается дальнейшее развитие метода локальных массовых соотношений, а также исследование новых характеристик, отражающих поведение массовой поверхности, и получение предсказаний для массовых характеристик для изотопов вплоть до $Z = 118$.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Strutinsky V.M.* // Nucl. Phys. A. 1968. V. 122. No. 1. P. 1.
2. *Hoffman S.* // J. Phys. G. 2015. V. 42. Art. No. 114001.
3. *Guiliani S.A., Matheson Z., Nazarewicz W. et al.* // Rev. Mod. Phys. 2019. V. 91. Art. No. 011001.
4. *Tuli J.K.* Nuclear wallet cards. 8th Edition. N.Y.: National Nuclear Data Center, Brookhaven National Laboratory, 2011. 121 p.
5. *Cwiok S., Dobaczewski J., Heenen P.-H. et al.* // Nucl. Phys. A. 1996. V. 611. No. 2–3. P. 211.
6. *Dobaczewski J., Afanasjev A.V., Bender M. et al.* // Nucl. Phys. A. 2015. V. 944. P. 388.
7. *Ackermann D., Theisen Ch.* // Phys. Scr. 2017. V. 92. Art. No. 083002.
8. *Hoffman S. Heinz S., Mann R. et al.* // Eur. Phys. J. A. 2016. V. 52. No. 6. Art. No. 180.
9. *Oganessian Yu.Ts., Dmitriev S.N., Utyonkov V.K.* // Proc. EXON 2018. (Petrozavodsk, 2018). P. 431.
10. *Lonardon D., Lovato A., Pieper S.C., Wiringa R.B.* // Phys. Rev. C. 2017. V. 96. Art. No. 024326.
11. *Sobiczewski A., Litvinov Yu.A., Palczewski M.* // Atom. Nucl. Data Tables. 2018. V. 119. P. 1.
12. *Lunney D., Pearson J.M., Thibault C.* // Rev. Mod. Phys. 2003. V. 75. No. 3. P. 1021.
13. *Möller P., Sierk A.J., Ichikawa T., Sagawa H.* // Atom. Nucl. Data Tables. 2016. V. 109–110. P. 1.
14. *Wang N., Liu M., Wu X.* // Phys. Rev. C. 2010. V. 81. Art. No. 044322.
15. *Wang N., Liu M., Wu X., Meng J.* // Phys. Lett. B. 2014. V. 734. P. 215.
16. *Jensen A.S., Hansen P.G., Jonson B.* // Nucl. Phys. A. 1984. V. 431. No. 3. P. 393.
17. *Jiang H., Fu G.J., Sun B. et al.* // Phys. Rev. C. 2012. V. 85. Art. No. 054303.
18. *Kelson I., Garvey G.T.* // Phys. Rev. Lett. 1966. V. 16. No. 5. P. 197.
19. *Bao M., He Z., Zhao Y.M., Arima A.* // Phys. Rev. C. 2014. V. 90. Art. No. 024314.
20. *Audi G., Kondev F.G., Meng Wang et al.* // Chin. Phys. C. 2017. V. 41. Art. No. 030001.
21. *Janecke J., Behrens H.* // Phys. Rev. C. 1974. V. 9. No. 4. P. 1276.
22. *Ishkhanov B.S., Sidorov S.V., Tretyakova T.Yu., Vladimirova E.V.* // Chin. Phys. C. 2019. V. 43. Art. No. 014104.
23. *Владимирова Е.В., Ишханов Б.С., Симонов М.В., Третьякова Т.Ю.* // Учен. зап. физ. фак-та МГУ. 2019. № 3. С. 1930409.
24. *Владимирова Е.В., Ишханов Б.С., Симонов М.В., Третьякова Т.Ю.* // Учен. зап. физ. фак-та МГУ. 2020. № 3. С. 2030201.
25. *Viola V.E., Seaborg G.T.* // J. Inorg. Nucl. Chem. 1966. V. 28. No. 3. P. 741.
26. *Parkhomenko A., Sobiczewski A.* // Acta Phys. Pol. B. 2005. V. 36. No. 10. P. 3095.
27. <http://www.nndc.bnl.gov/ensarchivals>.

Phenomenological approach to extrapolation of nuclear binding energies for superheavy elements

M. V. Simonov^a, E. V. Vladimirova^a, T. Yu. Tretyakova^{a, b, *}, B. S. Ishkhanov

^aDepartment of Nuclear Physics, Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University, Moscow, 119991 Russia

^bSkobel'tzyn Institute of Nuclear Physics, Lomonosov Moscow State University, Moscow, 119991 Russia

*e-mail: tretyakova@sinp.msu.ru

We consider the possibility for using the method of local mass relations in the region of superheavy elements with a nuclear charge $Z > 106$. Using formulas which connect with the residual neutron-proton interactions, we predict binding energies, α -decay energies, and evaluate half-lives along the α -channel for isotopes $Z = 107–110$ and $N = 152–161$.