

УДК 539.143

ОЦЕНКИ МАСС ЯДЕР И ИХ ВЛИЯНИЕ НА ВЫХОД ПРОДУКТОВ НУКЛЕОСИНТЕЗА В ОБЛАСТИ НЕЙТРОННОГО ИЗБЫТКА

© 2022 г. Е. В. Владимирова^{1, *}, М. В. Симонов², В. В. Негребецкий²,
К. А. Стопани¹, Т. Ю. Третьякова^{1, 2}

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

Научно-исследовательский институт ядерной физики имени Д.В. Скобельцына, Москва, Россия

²Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования
“Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова”, физический факультет, Москва, Россия

*E-mail: vladimirova.elena@physics.msu.ru

Поступила в редакцию 15.11.2021 г.

После доработки 06.12.2021 г.

Принята к публикации 22.12.2021 г.

С использованием метода локальных массовых соотношений, описывающих протон-нейтронные корреляции, проведены расчеты энергий связи неизвестных ядер вдали от линии стабильности. Продемонстрирована хорошая точность оценок, полученных данным методом, и предложена корректировка аппроксимации, позволяющая дополнительно повысить точность оценок. На основе полученных значений энергий связи предсказано положение границ существования атомных ядер. Показана высокая чувствительность результатов моделирования выхода продуктов нуклеосинтеза в области нейтронного избытка к выбору массовой модели.

DOI: 10.31857/S0367676522040263

ВВЕДЕНИЕ

Одной из фундаментальных характеристик атомных ядер является их масса, а также однозначно связанная с массой энергия связи ядра. Изучение систематик ядерных масс необходимо, среди прочего, для понимания ядерной структуры и для моделирования процессов нуклеосинтеза. Методы теоретических оценок энергий связи (массовые модели) отличаются широкой вариативностью и могут быть разделены на микроскопические, макро-микроскопические подходы, а также феноменологические оценки на основе локальных массовых соотношений [1, 2]. Локальные массовые соотношения представляют собой арифметические выражения, объединяющие энергии связи нескольких близко лежащих на карте изотопов ядер. Первые применения подхода связаны с работами Гарви и Келсона в конце 1960-х годов [3]. В дальнейшем метод получил значительное развитие — использовались новые массовые соотношения, уточнялось понимание эффектов, отражаемых соотношениями, а также значительно увеличивалось количество известных из эксперимента масс ядер [4, 5]. Сегодня метод локальных массовых соотношений сохраняет актуальность благодаря наглядным и нетребовательным к вычислительным мощностям расчетам, привяз-

ке к экспериментальным данным, а также высокой точности получаемых оценок [1].

Ранее методом локальных массовых соотношений на основе выражения для остаточного нейтрон-протонного взаимодействия нами были получены оценки энергий связи для ядер на протяжении всей NZ диаграммы [6–8]. В связи с выходом новой компиляции экспериментальных данных Atomic Mass Evaluation (AME2020) [9], в данной работе представлено сравнение полученных ранее результатов с новыми данными AME2020 и предложена корректировка аппроксимирующей формулы, позволяющая получить более точные оценки энергий связи неизвестных ядер. Проведенные расчеты позволили также уточнить положение границ существования ядер.

В работе проводятся сравнения с результатами оценок масс ядер в рамках макро-микроскопических расчетов модели жидкой капли с конечным радиусом действия ядерных сил FRDM [10] и модели Вайцеккера–Скирма $WS + RBF$ [11], а также микроскопических расчетов по методу Хартри–Фока с потенциалом Скирма HFB-24 [12].

В заключительной части работы с помощью новых оценок энергий связи были получены сечения и скорости реакций (n, γ) и рассчитаны вы-

Таблица 1. Среднеквадратичные отклонения оценок энергий связи в рамках различных подходов от экспериментальных данных АМЕ2020 [9]

Оценки		σ , кэВ
[6, 7]	Предыдущие результаты	381
[7]	Предыдущие результаты, дополненные использованием методов машинного обучения	376
[11]	Макро-микроскопические расчеты по модели Вайцзеккера–Скирма WS + RBF	298
[12]	Микроскопические расчеты по модели Хартри–Фока с потенциалом Скирма HFB-24	715
[10]	Макро-микроскопические расчеты по модели жидкой капли конечного радиуса FRDM	791

ходы продуктов нуклеосинтеза в ходе астрофизического r -процесса.

СРАВНЕНИЕ ПРЕДЫДУЩИХ РЕЗУЛЬТАТОВ С АМЕ2020

Большинство выражений, применяющихся в феноменологических подходах для предсказаний масс неизвестных ядер, так или иначе базируются на характеристике, связанной с описанием парных нейтрон-протонных корреляций [4, 5]. В своей работе мы используем выражение для энергии np -спаривания [13]:

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

где B — энергия связи ядра, Z и N — число протонов и нейтронов, соответственно. При наличии аналитической аппроксимации величины $\Delta_{np}(Z, N)$, а также трех известных энергий связи, может быть получена оценка для четвертой энергии связи. Метод позволяет проводить итерационные вычисления, в качестве известных энергий связи могут использоваться результаты оценок предыдущих итераций, что позволяет продвигаться вдале от экспериментально изученной области.

В наших предыдущих работах [6–8] данная методика была успешно использована для предсказания масс в области сверхтяжелых элементов и для оценки положения границ существования нейтроноизбыточных ядер. При этом в качестве аппроксимаций (1) была использована степенная зависимость от массового числа A со свободным членом и при проведении аппроксимации массив ядер был разделен на 5 интервалов для различных значений A . Базой для расчетов служила компиляция экспериментальных данных АМЕ2016 [14].

Как обычно, по сравнению с предыдущей компиляцией, в АМЕ2020 появился набор новых экспериментальных значений масс ядер. В табл. 1 для этих ядер приведены среднеквадратичные отклонения оценок энергий связи в различных подходах от экспериментальных значений АМЕ2020. Результаты, полученные нами в рассмотренном подходе, имеют хорошую точность, сопоставимую с оценками других моделей. Высокую точность по-

казывают и результаты, полученные с применением методов машинного обучения, что подтверждает эффективность предсказания энергии связи данного ядра при использовании в качестве входных параметров энергий связи соседних ядер. Соответствующий подход к предсказаниям предложен в работе [7].

КОРРЕКТИРОВКА АППРОКСИМАЦИИ

В качестве новой формулы, аппроксимирующей Δ_{np} , предлагается степенная зависимость от массового числа A с параметрами α и β :

$$\Delta_{np}^{cal}(A) = \alpha \cdot A^\beta. \quad (2)$$

В наших предыдущих работах [6, 7] показатель степени был фиксирован ($\beta = -1$ для четных значений A и $\beta = 0$ — для нечетных A). В данной работе при нахождении новой аппроксимации мы решили использовать показатель степени как подгоночный параметр, что позволило нам отказаться от разбиения массива данных на отдельные диапазоны по A .

Из аппроксимируемого массива исключены точки, соответствующие симметричным ядрам с $N = Z$, существенно отличающиеся от остальных значений Δ_{np} благодаря дополнительному вкладу энергии Вигнера (см. рис. 1). На рис. 1 также видно, что точки с $N = Z \pm 1$ не выделяются из общего массива, поэтому не должны исключаться. Отсутствие выбросов значений для магических ядер в области средних и тяжелых ядер показывает низкую чувствительность характеристики Δ_{np} к оболочечным эффектам и также позволяет не исключать точки со значениями N и Z , соответствующим магическим числам. Значения Δ_{np} для легких ядер с $A < 40$ исключены из аппроксимации из-за флуктуаций, вызванных структурными оболочечными эффектами. Как уже было отмечено, аппроксимация проводится на всем массиве ядер без разделения на интервалы, но значения для ядер с четными и нечетными массовыми числами аппроксимируются отдельно. Коэффициенты аппроксимации, полученные на основе АМЕ2020, а также предыдущих компиляций данных АМЕ2016

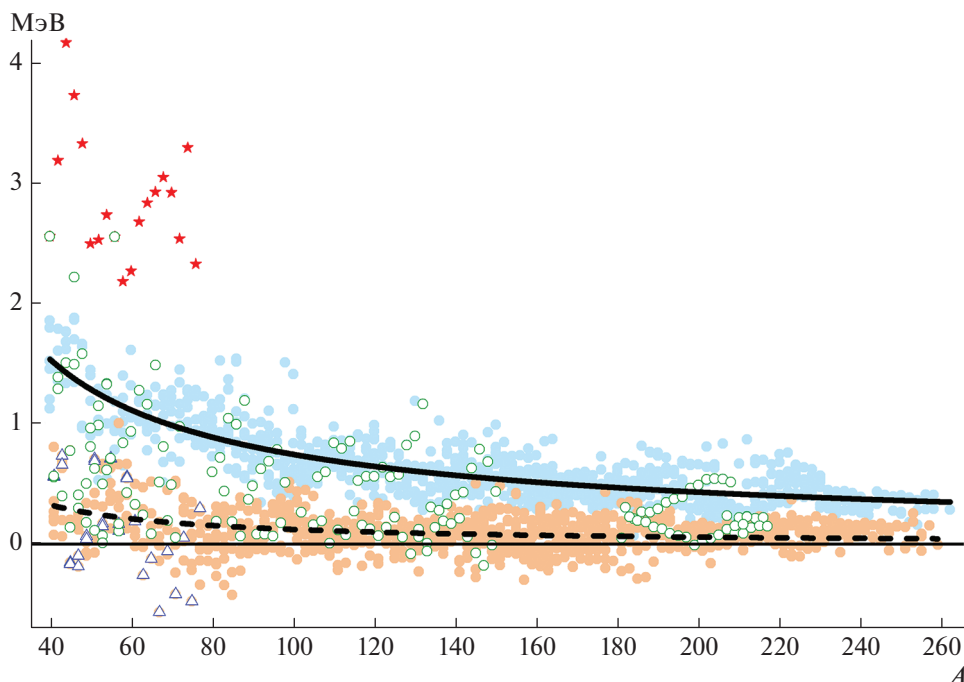


Рис. 1. $\Delta_{np}(A)$ на основе экспериментальных данных АМЕ2020 [9] (голубой круг для четных A , оранжевый круг для нечетных A , красная звезда для симметричных ядер $N = Z$, синий незакрашенный треугольник для ядер с $N = Z \pm 1$, зеленый незакрашенный круг для ядер с магическими числами по N или Z и аппроксимация Δ_{np}^{cal} (сплошная черная линия для четных A , прерывистая – для нечетных A).

[14], 2012 [15] и 2003 [16] приведены в табл. 2. Следует отметить относительное постоянство коэффициентов аппроксимации для ветви с четными значениями A и их существенные изменения для нечетных A с ростом числа экспериментальных данных.

С середины прошлого века ведется дискуссия о степенной зависимости парных нуклонных корреляций от массового числа A . К наиболее часто встречающимся вариантам зависимостей относятся степенные функции вида αA^β , где $\alpha = \text{constant}$,

$\beta = -1/3$ [17, 18], $\beta = -2/3$ [19], $\beta = -1$ [20], а также отдельные зависимости с $\beta = -1$ для четных A и $\beta = 0$ для нечетных A [5]. Зависимость A^{-1} может указывать на силы спаривания с небольшим радиусом действия, когда участвующие во взаимодействии частицы распределены по всему объему ядра [21]. Результаты этой работы показывают, что степень аппроксимации (2) вне зависимости от базы данных (от АМЕ2003 до АМЕ2020) имеет значение близкое к -1 для ядер с нечетными A (табл. 2).

Таблица 2. Коэффициенты и среднеквадратичные отклонения аппроксимаций $\Delta_{np}^{cal}(A)$, полученных на основе АМЕ2003 [16], 2012 [15], 2016 [14] и 2020 [9]

АМЕ	Четные A				Нечетные A			
	2003	2012	2016	2020	2003	2012	2016	2020
α , МэВ	29.751	26.061	25.186	28.218	44.251	24.380	25.158	17.277
β	-0.799	-0.770	-0.764	-0.789	-1.294	-1.164	-1.167	-1.076
σ , МэВ	0.211	0.185	0.193	0.181	0.182	0.163	0.165	0.158

Таблица 3. Среднеквадратичные отклонения (кэВ) оценок по АМЕ2003 [16], 2012 [15] и 2016 [14] с использованием различных аппроксимаций $\Delta_{np}^{cal}(A)$ и теоретических оценок АМЕ от экспериментальных значений АМЕ2020 [9] для различных диапазонов ядер

$A \geq$	АМЕ2003			АМЕ2012			АМЕ2016		
	40	120	180	40	120	180	40	120	180
Δ_{np}^{cal} [6]	747	308	201	466	192	139	381	149	127
Δ_{np}^{cal} (эта работа)	664	301	201	384	190	165	372	134	108
Оценки АМЕ данных лет	455	315	178	293	169	139	223	162	169

РЕЗУЛЬТАТЫ

Для проверки нового подхода к нахождению аппроксимации $\Delta_{np}^{cal}(A)$, нами проведены оценки энергий связи на основе АМЕ2003, 2012 и 2016 с использованием двух подходов к аппроксимации (по предыдущим работам [6, 7] и в соответствии с предложенной корректировкой). Для тех новых изотопов, массы которых включены в АМЕ2020, но не входят в более ранние версии базы данных, вычислялись отклонения рассчитанных значений энергий связи от их значений в АМЕ2020. Усредненные значения отклонений оценок от экспериментальных данных АМЕ2020 приведены в табл. 3. Аппроксимация (2) позволяет получить

более точные результаты для всех рассмотренных интервалов A и входных массивов АМЕ.

На рис. 2 показано, где проходит граница области существования ядер согласно разным массовым моделям. Положение границы существования определяется теми ядрами, для которых энергии отделения протона, пары протонов, нейтрона и пары нейтронов $S_p, S_{pp}, S_n, S_{nn} > 0$ меняют значение с положительного на отрицательное (где $S_p = B(N, Z) - B(N, Z - 1)$, остальные энергии отделения определены аналогичным образом). Положение границы существования ядер в области нейтронного избытка для ядер с $Z > 50$ по предсказаниям метода локальных массовых соотношений на основе Δ_{np} при переходе к новой аппроксимации изменилось и стало ближе к

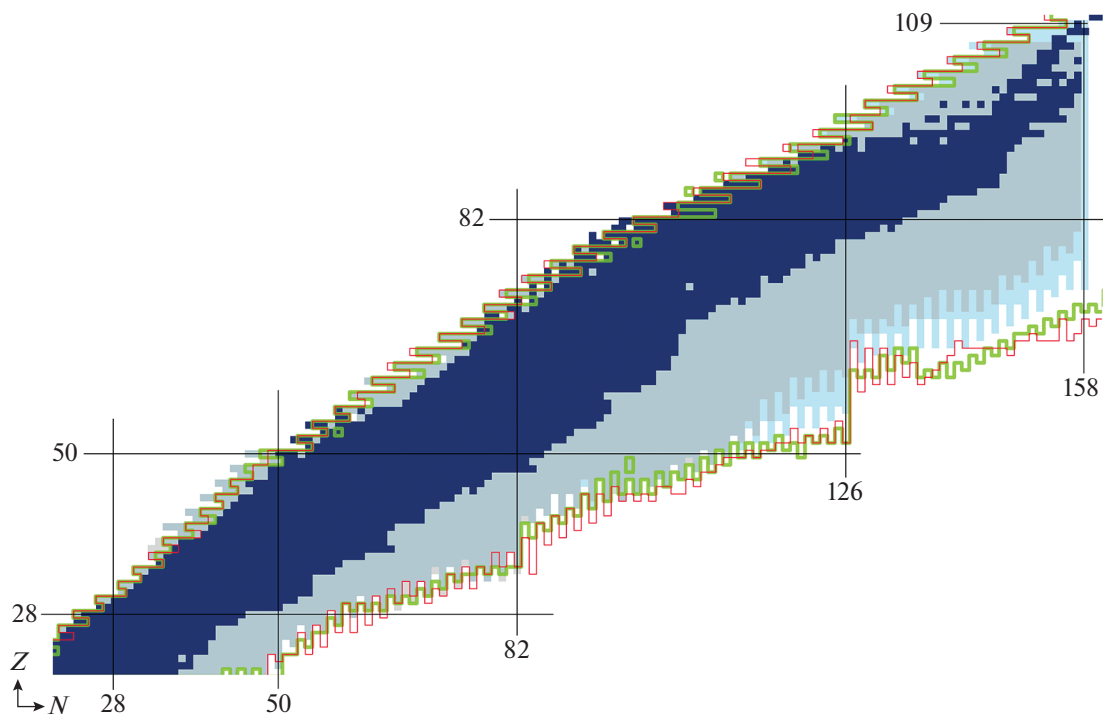


Рис. 2. Результаты для определения положения границ существования ядер на основе различных подходов к оценкам энергий связи. Темно-синяя область – экспериментальные значения АМЕ2020 [9], серая область – предыдущие результаты [6, 7], голубая область – результаты этой работы, зеленая жирная линия – результаты WS + RBF [11], красная тонкая линия – результаты HFV-24 [12].

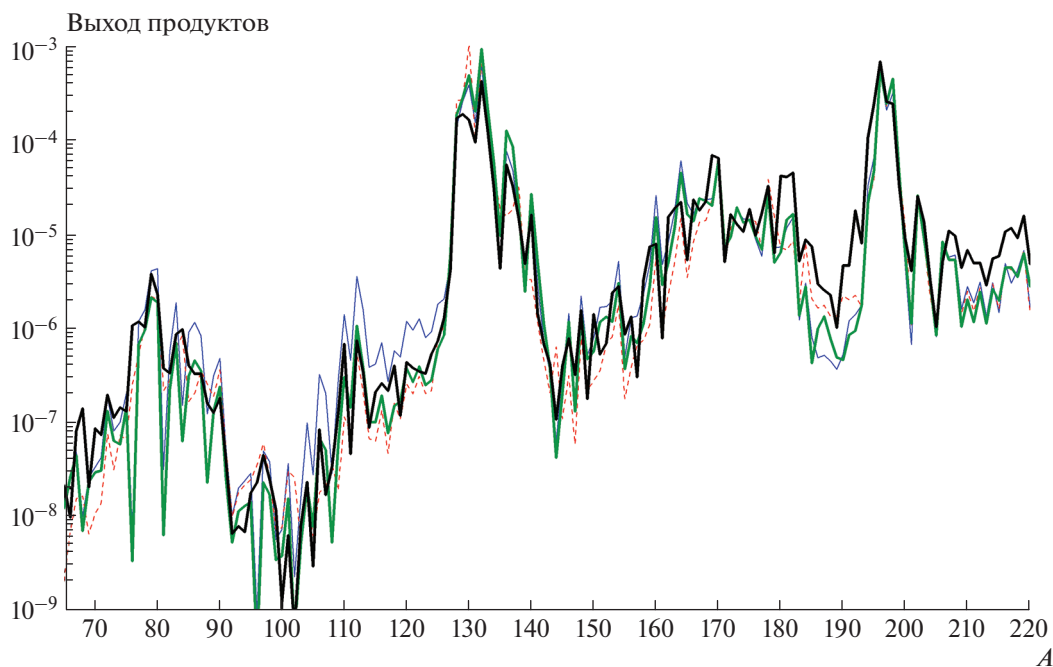


Рис. 3. Результаты для выхода r -процесса при расчетах скоростей протекания реакций (n, γ) на основе различных оценок энергий связи. Жирная черная линия для результатов этой работы, зеленая жирная линия для результатов WS + RBF [11], красная прерывистая тонкая линия для результатов HFB-24 [12], синяя тонкая линия для результатов FRDM [10].

оценкам макро-микроскопических моделей. Изменения могут быть объяснены большим количеством итераций метода (до 30–40), необходимых для предсказаний в этой области. Увеличение количества шагов ослабляет связь оценок с экспериментальными данными и увеличивает зависимость от выбора аппроксимации. Еще одной причиной может являться изменение фактических значений Δ_{np} для нейтроноизбыточных ядер при том, что аппроксимация проводится на близких к линии стабильности экспериментально изученных ядрах. Несмотря на перечисленные факторы возможного снижения предсказательной способности метода в обсуждаемой области, оценки верно воспроизводят магические особенности ядер (чувствительность нейтронной границы существования ядер к магическому числу $N = 126$) даже при отсутствии оболочечных поправок к аппроксимации.

Область оценок на основе Δ_{np} ограничена ядрами с $Z \leq 109$ и $N \leq 158$ в связи с топологическими особенностями формулы (1) и доступностью экспериментальных данных. Продвижение в область более тяжелых ядер возможно при использовании дополнительных оценок на основе экспериментальных значений энергий α -распада или при применении прочих методов, например алгоритмов машинного обучения. Соответствующие расчеты на основе данных AME2016 были представлены ранее [6–8].

РАСЧЕТЫ НУКЛЕОСИНТЕЗА

Астрофизический r -процесс сегодня считается основным источником тяжелых элементов во Вселенной [22], при этом критические условия протекания обуславливают возможность только теоретического изучения этого процесса. Моделирование r -процесса во многом основано на данных о ядерных массах, экспериментальные значения которых недоступны в области протекания процесса, поэтому выбор того или иного подхода для предсказания масс неизвестных ядер приобретает важное значение.

На рис. 3 приведены массовые распределения r -изотопов в канонической модели по результатам расчетов в SkyNet [23]. Используются расчетные скорости реакций захвата нейтронов (n, γ) при температурах 0.1–10 ГК, полученные с использованием TALYS [24] на основе различных массовых моделей. Предварительное обсуждение влияния выбора параметров статистической модели на выходы изотопов в r -процессе приведено в работе [25]. Расхождения результатов распределения изотопов для некоторых массовых чисел A превышают три порядка. Наблюдаются также и качественные различия. Так, микро-макроскопические модели FRDM и WS + RBF в области $A = 70–90$ предсказывают несколько заметных провалов, которые не наблюдаются для оценок на основе Δ_{np} и HFB-24. В области $A = 100–170$ результаты FRDM имеют повышенный выход от-

носителем прочих моделей, а для изотопов с $A > 180$ концентрации FRDM, напротив, пониженный.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предсказания энергий связи методом локальных массовых соотношений на основе формулы для остаточного нейтрон-протонного взаимодействия (1) демонстрируют высокую точность, сопоставимую с точностью наиболее широко используемых в ядерной физике моделей. Предложенная в работе [7] концепция предсказания энергий связи с применением алгоритмов машинного обучения при использовании в качестве входных параметров энергий связи нескольких соседних ядер продемонстрировала хорошую предсказательную способность.

Корректировка аппроксимации остаточного нейтрон-протонного взаимодействия позволяет дополнительно повысить точность предсказаний, поэтому может быть рекомендована к дальнейшему применению для оценок энергий связи. На основе скорректированной аппроксимации и экспериментальных данных АМЕ2020 получены новые оценки энергий связи в области ядер с $Z \leq 109$ и $N \leq 158$, а также уточнено положение границ существования атомных ядер.

Продемонстрирована высокая чувствительность результатов моделирования r -процесса к выбору массовой модели. Существенные качественные и количественные отличия результирующих распределений изотопов указывают на актуальность дальнейших исследований источников наблюдаемых отличий.

Работа выполнена при поддержке Междисциплинарной научно-образовательной школы Московского университета “Фундаментальные и прикладные исследования космоса”.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Lunney D., Pearson J.M., Thibault C. // Rev. Mod. Phys. 2003. V. 75. P. 1021.
2. Sobczewski A., Litvinov Yu.A., Palczewski M. // ADNDT. 2018. V. 119. P. 1.
3. Garvey G.T., Kelson I. // Phys. Rev. Lett. 1966. V. 16. P. 197.
4. Janecke J., Behrens H. // Phys. Rev. C. 1974. V. 9. P. 1276.
5. Fu G.J., Lei Y., Jiang H. et al. // Phys. Rev. C. 2011. V. 84. Art. No. 034311.
6. Vladimirova E.V., Ishkhanov B.S., Simonov M.V. et al. // Int. J. Mod. Phys. E. 2021. V. 30. Art. No. 2150025.
7. Vladimirova E.V., Simonov M.V., Tretyakova T.Yu. // AIP Conf. Proc. 2021. V. 2377. Art. No. 070003.
8. Симонов М.В., Владимирова Е.В., Ишханов Б.С., Третьякова Т.Ю. // Изв. РАН. Сер. физ. 2021. Т. 85. С. 676; Simonov M.V., Vladimirova E.V., Tretyakova T.Yu., Ishkhanov B.S. // Bull. Rus. Acad. Sci. Phys. 2021. V. 85. P. 521.
9. Kondev F.G., Wang M., Huang W.J. et al. // Chin. Phys. C. 2021. V. 45. Art. No. 030003.
10. Moller P., Nix J.R., Myers W.D., Swiatecki W.J. // ADNDT. 1995. V. 59. P. 185.
11. Ma N.N., Zhang H.F., Bao X.J., Zhang H.F. // Chin. Phys. C. 2019. V. 43. Art. No. 044105.
12. Goriely S., Chamel N., Pearson J.M. // Phys. Rev. Lett. 2017. V. 102. Art. No. 152503.
13. Кравцов В.А. // ЖЭТФ. 1959. Т. 36. С. 1224; Kravtsov V.A. // Sov. Phys. JETP. 1959. V. 36. P. 871.
14. Audi G., Kondev F.G., Wang M. et al. // Chin. Phys. C. 2017. V. 41. Art. No. 030001.
15. Audi G., Wang M., Wapstra A.H. et al. // Chin. Phys. C. 2012. V. 36. P. 1287.
16. Audi G., Bersillon O., Blachot J., Wapstra A.H. // Nucl. Phys. A. 2003. V. 729. P. 3.
17. Wang N., Liu M. // J. Phys. Conf. Ser. 2013. V. 420. Art. No. 012057.
18. Hilaire S., Berger J.-F., Girod M. et al. // Phys. Lett. B. 2002. V. 531. P. 61.
19. Madland D.G., Nix J.R. // Nucl. Phys. A. 1988. V. 476. P. 1.
20. Jensen A.S., Hansen P.G., Jonson B., Vogel P. // Nucl. Phys. A. 1984. V. 431. P. 393.
21. Nemirovsky P.E., Adamchuk Yu.V. // Nucl. Phys. 1962. V. 39. P. 551.
22. Arnould M., Goriely S., Takahashi K. // Phys. Rep. 2007. V. 450. P. 97.
23. Lippuner J., Roberts L.F. // ApJS. 2017. V. 1. P. 233.
24. Koning A.J., Rochman D., Sublet J.-Ch. et al. // Nucl. Data Sheets. 2019. V. 1. P. 155.
25. Негребецкий В.В., Стопану К.А. // Вестн. МГУ. Сер. 3. Физ. и астрон. 2021. № 1. С. 17; Negrebetskiy V.V., Stopani K.A. // Moscow Univ. Phys. 2021. V. 76. P. 22.

Mass evaluation and its implication for the neutron-rich nucleosynthesis product yield

E. V. Vladimirova^{a, *}, M. V. Simonov^b, V. V. Negrebetskiy^b, K. A. Stopani^a, T. Yu. Tretyakova^{a, b}

^a Skobel'syn Institute of Nuclear Physics, Lomonosov Moscow State University, Moscow, 119991 Russia

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

*e-mail: vladimirova.elena@physics.msu.ru

The reliability of the local mass relations approach based on residual neutron-proton interaction formula is shown. New approximation proposed to improve prediction accuracy. New binding energy estimates are obtained and drip-lines are localized. The high sensitivity of the neutron-rich nucleosynthesis product yield to the mass model is shown.