Міністерство освіти і науки України
Департамент науки і освіти Харківської обласної державної адміністрації
Комунальний заклад «Харківська обласна Мала академія наук
Харківської обласної ради»

Відділення інженерії та матеріалознавства

Секція: матеріали та адитивні технології

ПРОГНОЗУВАННЯ ВЛАСТИВОСТЕЙ СПОЛУК ЗА ЇХ ІЗОТОПНИМ СКЛАДОМ

Роботу виконала:
Пчолкіна Марія Євгенівна, учениця 10 класу Комунального закладу «Харківський ліцей № 173 Харківської міської ради»

Наукові керівники:
Козуб Павло Анатолійович, доцент кафедри медіа систем і технологій Харківського національного університету радіоелектроніки, кандидат технічних наук
Печерська Валентина Іванівна, вчитель фізики, Комунального закладу «Харківський ліцей № 173 Харківської міської ради», спеціаліст вищої категорії, старший учитель кандидат фізико-математичних наук

Харків – 2024

ПРОГНОЗУВАННЯ ВЛАСТИВОСТЕЙ СПОЛУК ЗА ЇХ ІЗОТОПНИМ СКЛАДОМ

Пчолкіна Марія Євгенівна, Харківське територіальне відділення Малої академії наук України**,** Комунальний заклад «Харківський ліцей № 173 Харківської міської ради», 10 клас, м. Харків

Козуб Павло Анатолійович, доцент кафедри медіа систем і технологій Харківського національного університету радіоелектроніки, кандидат технічних наук

Печерська Валентина Іванівна, учитель фізики Комунального закладу «Харківський ліцей №173 Харківської міської ради», спеціаліст вищої категорії, старший учитель, кандидат фізико-математичних наук

Дана робота присвячена встановленню залежності між характеристиками ядер і подальшій побудові на цій залежності емпіричного виразу, що дозволить обчислювати дефект маси ядра та оцінювати його стабільність.

Вивчення процесів, що відбуваються в ядрах, слід починати з більш детального аналізу ядерних властивостей. Тому метою нашої роботи стало встановлення залежності між основними характеристиками ізотопів, а саме пошук залежності дефекту мас від кількості протонів та нейтронів.

Об’єктом дослідження є радіоактивні ізотопи, їх характеристики. Предметом дослідження є графіки залежності між властивостями радіоактивних ізотопів. Завдання роботи полягає в створенні математичних виразів за допомогою простих математичних залежностей на основі вже відомих експериментальних даних, користуючись якими, можна визначити значення дефекту маси, періоду напіврозпаду та інших характеристик ізотопу будь-якого елементу. Новизна роботи полягає в дослідженні раніше не вивченої в науці залежності дефекту маси та періоду напіврозпаду, а також створенні математичної моделі цих залежностей.

За допомогою аналізу значень мінімального дефекту маси серед ізотопів для кожного елементу та значень кількості нейтронів, за якої такий мінімум спостерігається, запропонували методи підрахунку дефекту маси з різними класами точності, що можуть використовуватись для різних цілей.

В результаті проведеної роботи вивчено основні ядерні властивості ізотопів та продемонстровано необхідність розробки методики їх оцінки. Побудовано математичні вирази чотирьох різних ступенів точності для знаходження найменшого значення дефекту маси серед ізотопів одного елементу від порядкового номера. Побудовано математичний вираз для знаходження кількості нейтронів ізотопу, що має найменше значення дефекту маси серед ізотопів одного елементу від порядкового номера елементу. Створено емпіричну формулу, що спирається на побудовані вирази і використовується для знаходження значення дефекту маси довільного нукліда від кількості протонів та нейтронів у ньому. Створено емпіричну формулу, за допомогою якої можна отримати значення десяткового логарифму періоду напіврозпаду довільного нукліда від кількості протонів та нейтронів у ньому. Показано можливість і необхідність подальших досліджень у цьому напрямі.

Ключові слова: ядерні характеристики, дефект маси, період напіврозпаду, стабільність, ізотопи, залежність між характеристиками, емпірична формула.

ЗМІСТ

ВСТУП 5

РОЗДІЛ 1 УПОРЯДКУВАННЯ ВЖЕ ІСНУЮЧИХ ТЕОРЕТИЧНИХ ВІДОМОСТЕЙ 8

1.1. Використання радіоактивних ізотопів та його перспективи 8

1.2. Основні характеристики, що застосовуються при аналізі ядер 8

1.3. Вже існуючі вирази для передбачення значення дефекту мас 11

РОЗДІЛ 2 МЕТОДИКА ПРОВЕДЕННЯ АНАЛІЗУ ЗАЛЕЖНОСТЕЙ ЯДЕРНИХ ХАРАКТЕРИСТИК ІЗОТОПІВ 13

2.1. Вихідні дані, методика обробки та представлення результатів 13

2.2. Математична модель дефекту маси для ізотопів від кількості нейтронів 15

2.3. Математична модель найменшого дефекту маси елемента від кількості протонів 19

2.4. Математична модель кількості нейтронів з мінімальним дефектом маси від кількості протонів 24

2.5. Математична модель стабільності ізотопів 28

2.6. Візуалізація запропонованих залежностей 31

2.7. Узагальнення результатів досліджень 32

ВИСНОВКИ 33

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ 34

ВСТУП

Ядерна енергетика асоціюється у багатьох людей з надскладними квантовими розрахунками, комп'ютерними моделями, але насправді ці розрахунки можуть і повинні бути відносно простими та зрозумілими.

Актуальність теми полягає в тому, що зараз людство знаходиться на етапі розвитку та покращення теоретичних уявлень щодо законів, що діють на рівні елементарних частинок, та складених з них, – ядер; розширення практичних можливостей застосування цих знань. Дійсно, енергія і властивості атомного ядра зараз надають людству багато користі: енергетика і медицина – галузі, що наразі майже неможливо уявити без використання радіоактивних ізотопів. Звичайно, їх використання не обмежується цими двома напрямами. Будівництво, аграрний сектор, біологічні і екологічні дослідження значною мірою спираються на ядерні технології. Варто сказати, що для успішного функціонування цих галузей і підвищення рівня наукових знань людства необхідно розуміти природу тих сил, що діють у ядрі. Прогрес у дослідженнях, здійснених в цій галузі, досягається комбінацією підходів, заснованих на емпіричних даних, і частково на теоретичному вивченні моделей ядер.

Мета роботи: створення простих математичних моделей дефекту маси ізотопів та періоду їх напіврозпаду з мінімальною кількістю параметрів і для максимального діапазону їх варіювання.

Завдання роботи полягає у створенні математичних виразів за допомогою простих математичних залежностей на основі вже відомих експериментальних даних користуючись якими, можна визначити значення дефекту маси, періоду напіврозпаду та інших характеристик ізотопу будь-якого елементу.

Формулюючи залежності, ми поступово покращували точність математичної формули *методом* аналізу відхилень передбачуваних значень від емпіричних даних.

Об'єктом дослідження є математичні залежності властивостей радіоактивних ізотопів від їх нуклонного складу.

Предметом дослідження є математичні вирази та послідовність обчислень за цими виразами, точність та адекватність виразів до емпіричних даних.

Наукова новизна: В роботі вперше показано запропоновано розподіл обчислень дефекту маси ізотопі на три різних за своєю суттю залежності. Показано, можливість приведення залежностей дефекту маси і періоду напіврозпаду до дуже простих математичних виразів. Запропоновано використання для обчислень дефекту маси та періоду напіврозпаду кусково-лінійних функцій, розраховано коефіцієнти для цих функцій та показано, що запропоновані вирази дають меншу похибку у порівнянні із традиційними математичними залежностями.

Практичне значення отриманих результатів: На основі отриманих виразів було створено програму обчислень дефекту маси для будь-якого ізотопу і реалізовано її у вигляді електроних таблиць Excel, а наступне включення до програми виразів щодо періоду напіврозпаду дозволить проводити розрахунки ізотопного складу продуктів напіврозпаду в залежності від часу та початкового складу вихідної сировини. Це дозволить проводити розрахунки ядерних перетворень без проведення додаткових експериментальних робіт з радіоактивними матеріалами, та проетувати нові технологічні рішення для космічної та енергетичної галузей.

Результати роботи досягались побудовою графіків, дослідженням їх геометричної будови, вибором математичних виразів, які максимально відповідають цим графікам та відображають фізичні закономірності.

Результатом роботи є залежності, які, спираючись тільки на два параметри – кількість протонів та кількість нейтронів, надають можливість визначити дефект маси і відповідно кількість енергії, необхідної для утримання ядра, а також оцінити стабільність ізотопу.

Отже, ми сформулювали єдину для всіх елементів систему виразів, за допомогою якої можна отримати значення дефекту маси та періоду напіврозпаду для кожного нукліда, маючи вихідні дані, представлені значеннями лише двох величин – кількості протонів та нейтронів. Запропонували методи підрахунку дефекту маси з різними класами точності, що можуть використовуватись для різних цілей.

РОЗДІЛ 1
УПОРЯДКУВАННЯ ВЖЕ ІСНУЮЧИХ ТЕОРЕТИЧНИХ ВІДОМОСТЕЙ

1.1. Використання радіоактивних ізотопів та його перспективи

Наразі існують два основні методи використання радіоактивних ізотопів: метод мічених атомів, що використовується та має високі перспективи у діагностичній медицині, сільському господарстві, екологічних дослідженнях та промисловості, та метод, що використовує випромінювання, створене атомом, і використовується в лікувальній медицині та ядерній енергетиці [1]. Подальші відкриття можливостей використання радіоактивних нуклідів досягається комбінацією підходів, заснованих на емпіричних даних, частково теоретичному вивченні моделей ядер [2].

Застосування деяких радіоактивних ізотопів: вивчення корозії заліза і сталі (^{59}Fe, ^{124}Sb, ^{204}Ta, ^{65}Zn); вимірювання швидкості кровотоку в організмах, дослідження роботи залоз внутрішньої секреції (^{59}Fe); діагностика та терапія захворювань щитовидної залози (^{131}J); радіаційно-хімічні дослідження (^{90}Y); вивчення взаємодії ґрунту та добрив, процесів засвоєння рослинами поживних елементів із мінеральних добрив (^{32}P, ^{45}Ca); терапія злоякісних утворень та запальних процесів (^{60}Co); ядерне паливо (^{239}Pu); знищення мікробів (^{60}Co, ^{137}Cs).

1.2. Основні характеристики, що застосовуються при аналізі ядер

Першою характеристикою, за якою можна проаналізувати властивості атома, є його маса. Майже вся маса атома зосереджена у ядрі, а електронна оболонка складає дуже малу частку від цієї маси. У ядерній фізиці масу атомних ядер вимірюють в енергетичних одиницях МеВ/с, маючи на увазі, що енергія пов'язана з масою виразом: $E = mc^2$, звідки маса дорівнює: $m = E/c^2$, а c^2 в знаменнику зазвичай опускають для стислості.

У прикладній ядерної фізики також використовується атомна одиниця маси (а.о.м.):

1 а.о.м. = M_a (^{12}C)/12 ≈1,6582·10-27 кг ≈ 931,44МеВ,

де M_a (^{12}C) - маса нейтрального атома вуглецю.

Оскільки маси протону та нейтрону близькі до цієї одиниці (m_p ≈ 1,00728 а.о.м та m_n ≈ 1,00867 а.о.м.), то маса ядра приблизно дорівнює його масовому числу.

Важливим є значення енергія зв'язку ядра (W), що визначає таку кількість енергії, яка потрібна, щоб розкласти ядро на складові, або, навпаки – енергії, що виділяється при поєднанні вільних нуклонів в один зв'язаний стан – атомне ядро.

Енергія зв’язку ядра зростає зі збільшенням сили, із якою треба утримувати нуклони, а отже і зі збільшенням кількості протонів та нейтронів у ядрі, тому зручно використовувати таку величину, як питома енергію зв'язку ε = W/A, тобто середню енергію зв'язку, що припадає на один нуклон. Більшість ядер має ε ≈ 8 МеВ.

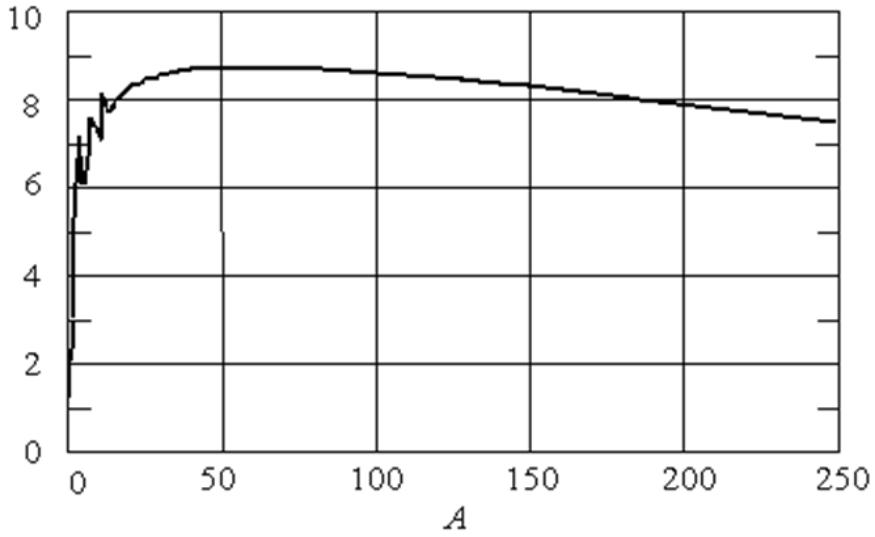


Рис. 1.1. Залежність питомої енергії зв'язку від маси ядра [3]

Дуже корисним поняттям у ядерній фізиці виявляється дефект маси ядра, який визначається різницею між масою ядра, вираженою в а.о.м. та масовим числом.

$$\Delta m = Z m_p + N m_n - M_я \qquad \text{формула (1.1)}$$

Значення дефекту маси корелює зі значенням енергії зв’язку ядра. Знаючи дефект маси ядра, можна виразити енергію зв'язку за формулою Ейнштейна у енергетичних одиницях:

$$E = \Delta m c^2 \qquad \text{формула (1.2)}$$

Період напіврозпаду є важливою характеристикою ядра, яка визначає його поведінку у часі. Ядра, схильні до радіоактивного розпаду, називаються радіоактивними. Ядра, які не мають розпаду, називають стабільними.

Радіоактивні ядра мають два основні процеси виникнення: 1) у процесі первинного синтезу хімічних елементів; 2) за допомогою розпаду первинних радіоактивних ядер, чи під впливом потоку космічних променів, що падають на Землю.

Очевидно, що необхідною, але не достатньою умовою радіоактивного розпаду є його енергетична вигідність – маса радіоактивного ядра повинна перевищувати суму мас уламка і частинок, що вилітають під час розпаду. Таким чином, будь-який радіоактивний розпад відбувається із виділенням енергії $Q>0$. Такий процес називають екзотермічним.

Як показують спостереження, радіоактивний розпад ядра - явище статистичне. Не можна передбачити, коли саме розпадеться ядро. Навіть однакові ядра розпадаються за різний час. Але середній час життя певного виду ядер, визначений за великий проміжок часу, величина є сталою для цих ядер і не залежить від зовнішніх впливів - ні від температури, ні від тиску і т.д. Тому середній час життя є фізичною характеристикою розпаду ядер.

Якщо в момент часу t є велика кількість ядер N, то за проміжок часу dt кількість ядер, що розпалися в середньому пропорційно вихідному числу ядер і часу

$$dN = -\lambda N dt, \qquad \text{формула (1.3)}$$

де коефіцієнт пропорційності λ називають постійною розпаду (λ=1/τ). Знак мінус вказує на зменшення загальної кількості ядер з часом. Результатом інтегрування є основний закон радіоактивного розпаду:

$$N = N_0 e^{-\lambda t} \qquad \text{формула (1.4)}$$

де N - кількість ядер, що не розпалися, N_0 - кількість ядер у початковий момент часу t = 0. Кількість розпалися N_p ядер визначимо прямим відніманням з початкової кількості ядер кількість ядер, що не розпалися,

$$N_p = N_0(1 - e^{-\lambda t}) \qquad \text{формула (1.5)}$$

Постійну розпаду можна пов'язати з іншими величинами, що характеризують інтенсивність процесу розпаду ядер: з періодом напіврозпаду $T_{1/2}$ і середнім часом життя τ. Періодом напіврозпаду називають час, за який кількість радіоактивних ядер зменшується вдвічі:

$$N(T_{1/2}) = \frac{1}{2} N_0 \qquad \text{формула (1.6)}$$

1.3. Вже існуючі вирази для передбачення значення дефекту мас

Для самостійного виведення залежності необхідно ознайомитись з уже відомими моделями. В середині минулого століття вже була виведена напівемпірична формула Вайцзеккера, що характеризувала залежність дефекту маси від кількості протонів і нейтронів, а також деяких емпіричних коефіцієнтів. Ця формула спиралась на крапельну модель ядра. Крапельна модель була однією з найбільш ранніх, її запропонував Нільс Бор в 1936 році. Така модель є доволі неточною, і згідно неї ядро являє собою краплю нестискаємої надгустої рідини [3] [4] [5].

Використання цієї моделі для теорії ядерних перетворень було надзвичайно важливим науковим та технологічним кроком, але для проведення технічних розрахунків вона є доволі громіздкою та неточною.

Як альтернативу можна розглядати інші напівемпіричні моделі, але досі не має загальноприйнятної простої моделі для всіх елементів періодичної системи.

РОЗДІЛ 2
МЕТОДИКА ПРОВЕДЕННЯ АНАЛІЗУ ЗАЛЕЖНОСТЕЙ ЯДЕРНИХ ХАРАКТЕРИСТИК ІЗОТОПІВ

2.1. Вихідні дані, методика обробки та представлення результатів

Для створення математичної моделі було обрано попередньо зібрані дані, які включали в себе основні характеристики ізотопів: кількість протонів, кількість нейтронів, маса ядра, дефект маси ядра, період напіврозпаду даного нукліду.

Щоб з даними періоду напіврозпаду можна було працювати, дані щодо часу напіврозпаду було приведено до однієї одиниці вимірювання - секунди. Але, враховуючи велику різницю між значеннями, для аналізу даних та створення залежностей було прийнято в якості основної величини використовувати логарифм часу напіврозпаду.

Будуючи таблиці, спирались на дані бази «Nuclear Wallet Cards», завіреної міжнародним агентством з атомної енергії.

Визначили, що найбільше на роботу з аналізом процесів ядер впливає його нуклонний склад, що і відіграє роль вихідних, тобто початкових даних; дефект маси, бо він визначає міру енергії, що необхідна для утримання ядра і надає інформацію щодо кількості енергії, що вивільняється в процесі реакції; логарифм періоду напіврозпаду, що є мірою стабільності ядра. Отже, наступним етапом нашої роботи стала побудова графіків, що характеризують залежність між цими обраними величинами.

Ще на початку роботи, на основі літературних даних було визначено, що залежність дефекту маси має вигляд подібних до параболи кривих. Тому логічним шагом було оцінити параметри цих парабол і знайти в них певну закономірність.

На рис. 2.1 видно: зміщення цих параболічних кривих для 40 елементів призводить до утворення єдиної спільної залежності.

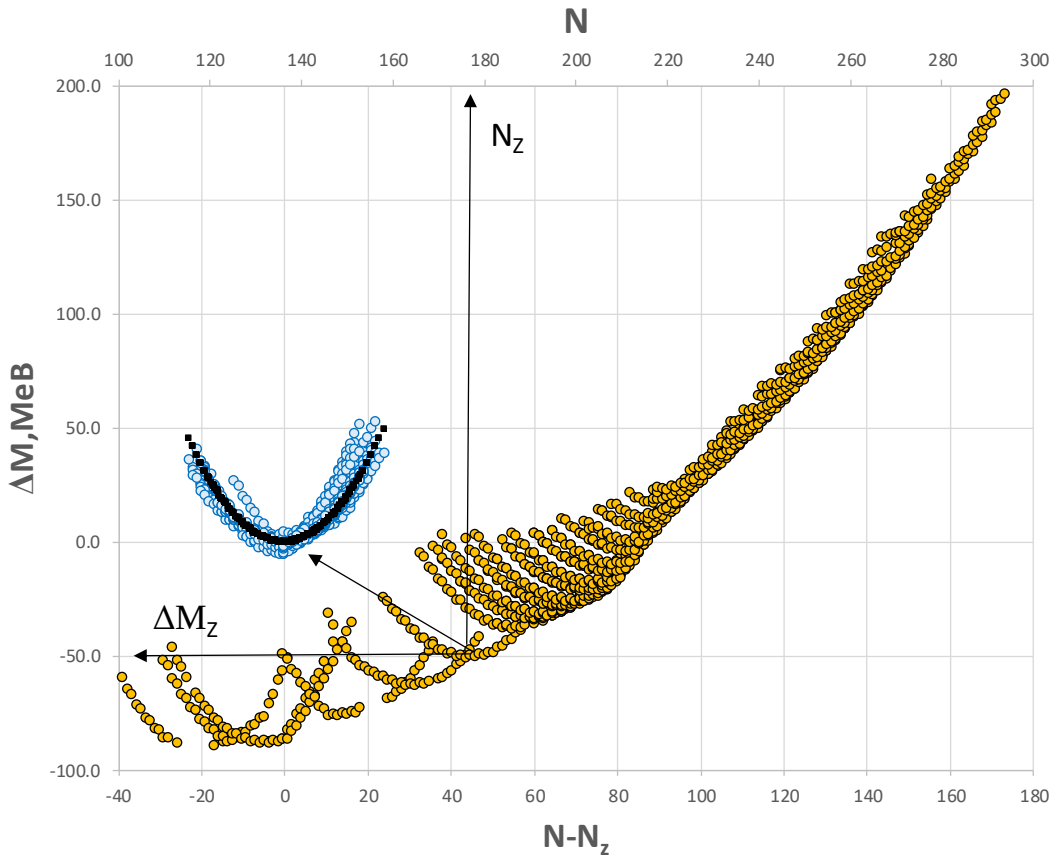


Рис. 2.1. Залежність дефекту маси від кількості нейтронів у ядрі (гірчичний колір) та зміщена (синій колір) до єдиної точки мінімуму параболи (побудовано автором)

Аналогічним чином можна спробувати описати залежність логарифму періоду напіврозпаду від кількості нейтронів та протонів, яка здається взагалі не має закономірності, але при зміщенні даних по кожному з елементів до єдиної точки, вона стає подібною до абсолютної функції

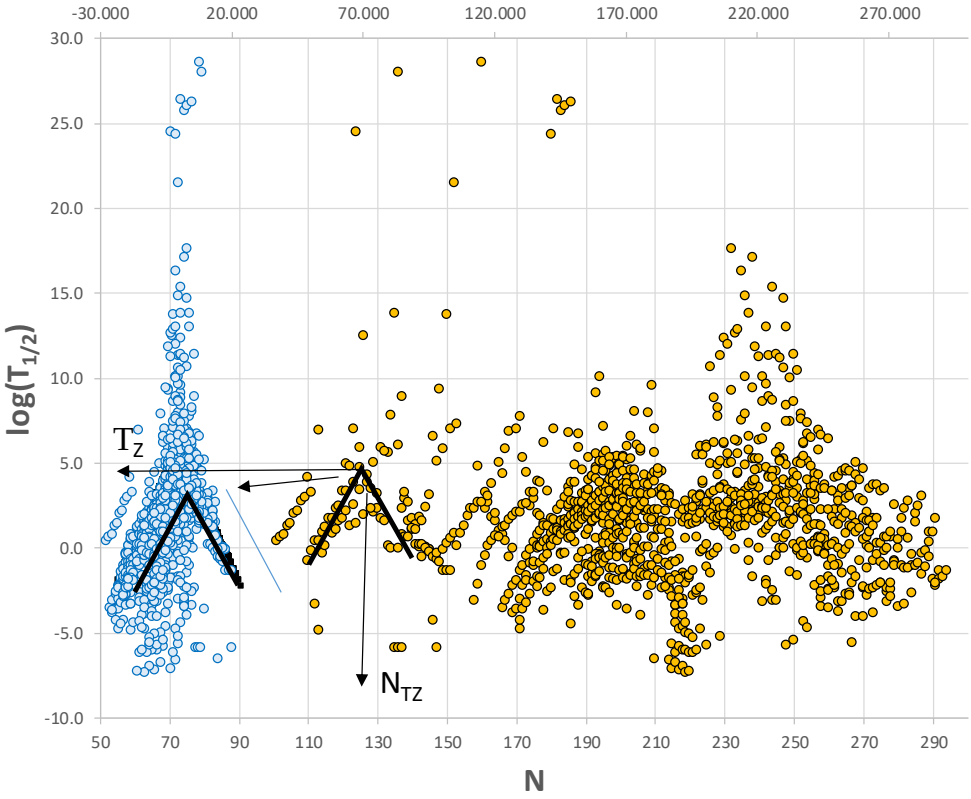


Рис. 2.2. Залежність дефекту маси від кількості нейтронів у ядрі (гірчичний колір) та зміщена (синій колір) до єдиної точки максимуму абсолютної функції. (побудовано автором)

2.2. Математична модель дефекту маси для ізотопів від кількості нейтронів

Як було показано вище, за наявності значення координат точки мінімуму можна розрахувати значення дефектів мас для будь-якого ізотопу певного елементу. При чому це можна зробити з різним ступенем точності в залежності від завдань подібних розрахунків.

Найбільш проста модель враховує лише відхилення значень N для кожного ізотопу від N_Z

$$\Delta M = \Delta M_Z + \frac{(N - N_Z)^2}{K_N^2}$$

формула (2.1)

де K_N – коефіцієнт пропорційності (МеВ$^{-1}$), який є різним для кожного з елементів;

Так для Au (Z=79) розрахунок дає ΔM_Z = -33.4, N_Z = 112 (-33.8 та 112 з попередніх розрахунків) і середня похибка розрахунків дефекту маси становить 0.48 МеВ а максимальна – 0.98 МеВ

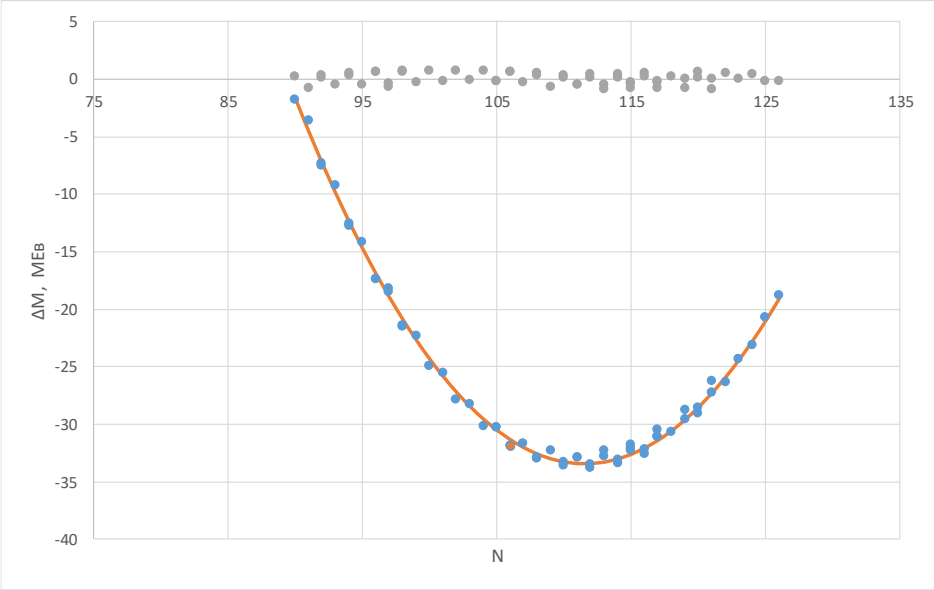


Рис. 2.3. Розрахунок значення дефекту мас ізотопів Au за формулою (2.1). (побудовано автором)

На рис. 4. можна побачити, що ця модель не враховує фактор парності кількості нейтронів. Залежність була модифікована до наступної моделі з урахуванням парності.

$$\Delta M = \Delta M_Z + \frac{N - N_Z}{K_N^2} + K_{od} \cdot Mod(N,2)$$

формула (2.2)

У цьому випадку середня похибка розрахунків дефекту маси зменшується до 0.24 МеВ, а максимальна похибка становить 0.62 МеВ.

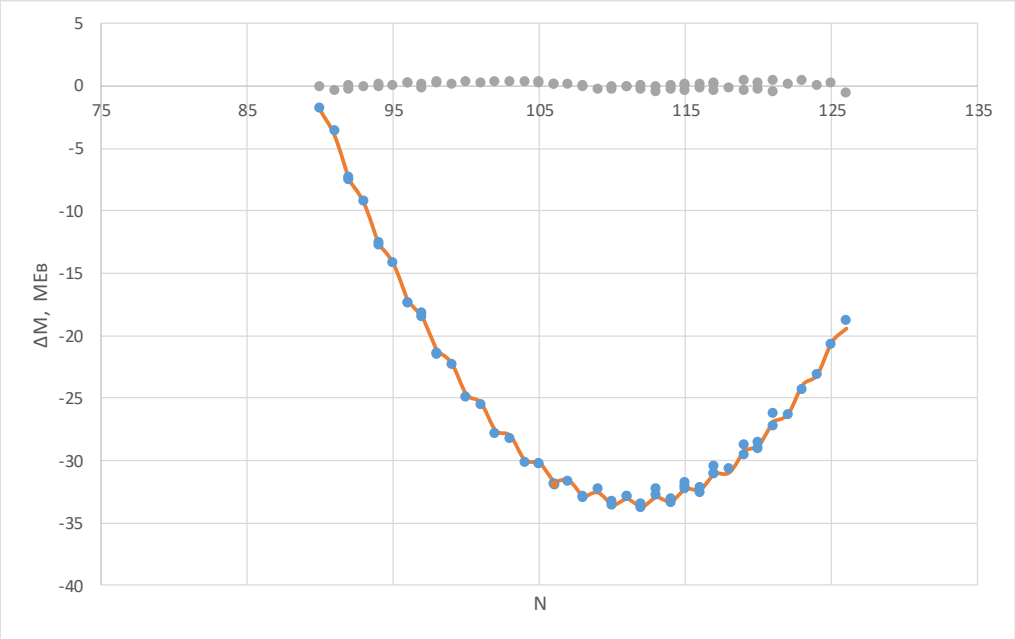


Рис. 2.4. Графік розрахованих значень дефекту мас ізотопів Au за формулою (2.2) з урахуванням парності кількості нейтронів (побудовано автором)

Розрахунки цих трьох значень для сорока елементів показали, що вони збігаються з вже відомими значеннями.

Для розрахунків використовували значення коефіцієнтів K_N=3.412 МеВ$^{-1}$ та K_{od} = -0.28 МеВ.

У результаті, всі експериментальні дані можуть бути зведені до єдиної залежності з середнім відхиленням від фактичних даних 2.42 МеВ, та максимальним відхиленням у 23 МеВ.

Водночас деякі дані мають відхилення від простої параболічної залежності, які досягають більше ніж 5-7 МеВ.

Аналіз причин відхилень показав, що це пов’язано з наявністю ще однієї закономірності. Дефект маси для важких елементів має не тільки квадратичну залежність від відхилення кількості нейтронів від оптимального значення, але лінійно підвищується при перевищенні кількості нейтронів значення N=125. Така

закономірність є сталою для усіх елементів починаючи з 80. Але його вплив стає майже непомітним для елементів з порядковим номером більше 90.

$$\Delta M = \Delta M_Z + \frac{N-N_Z}{K_N^2} + K_{od} \cdot Mod\,(N,2) + (N > 125) \cdot \frac{18.4 \cdot (N-125)}{Z-70} \quad \text{формула (2.3)}$$

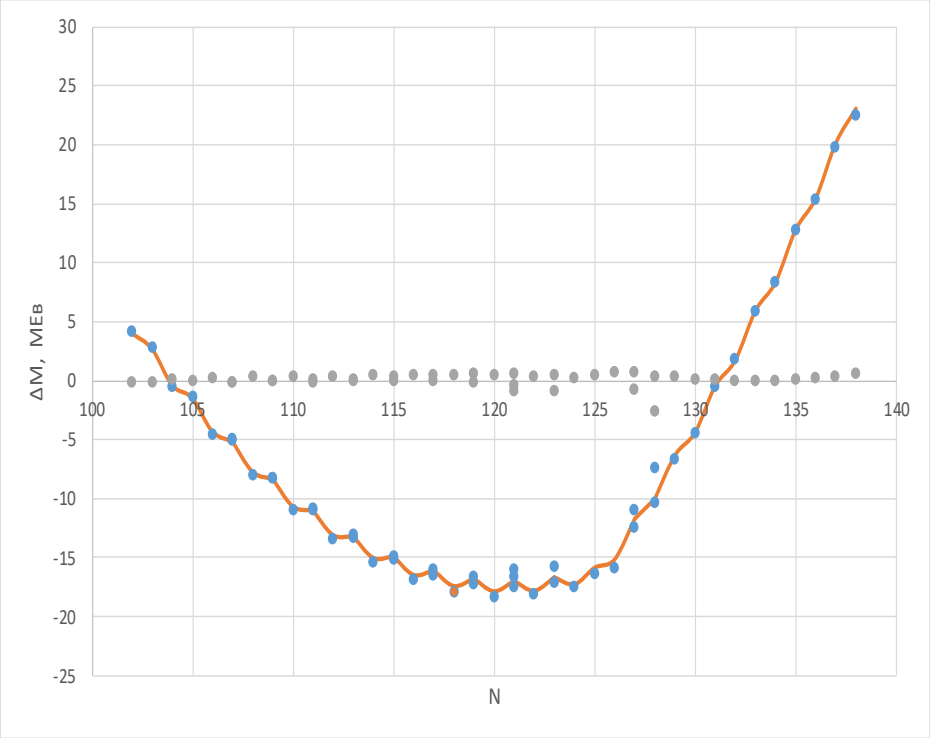


Рис. 2.5. Графік залежності для важких елементів, на прикладі Po (побудовано автором)

Було також виявлено, що існують ще декілька подібних нейтронних чисел, які спотворюють чисту квадратичну залежність. До таких чисел належать N=80 та N=40, і при їх врахуванні точність моделі значно зросла. Середня похибка розрахунків досягла 0.63 МеВ, а максимальне відхилення розрахункових даних від фактичних знизилось до 5.3 МеВ.

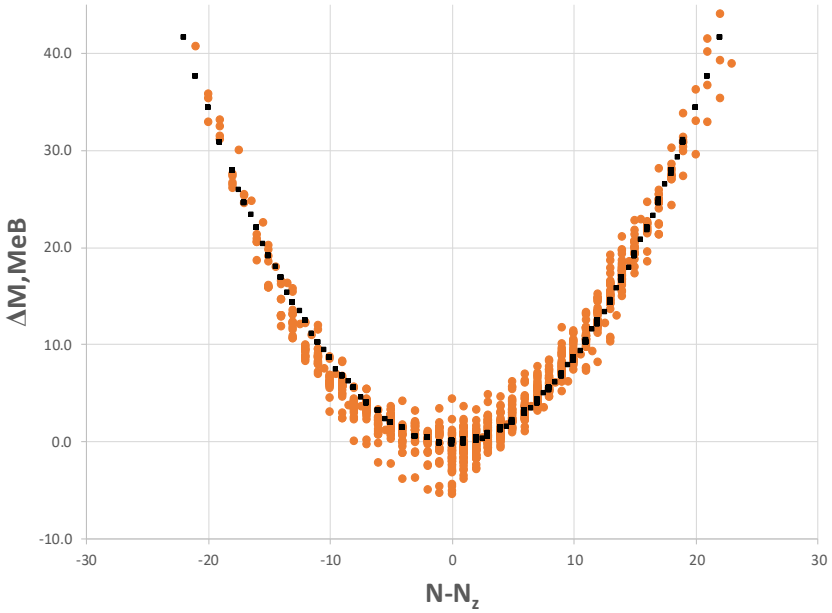


Рис. 2.6. Дані дефекту маси для всіх елементів (помаранчевим) при врахуванні додаткових членів залежності, результати підрахунків якої зображено чорним (побудовано автором)

2.3. Математична модель найменшого дефекту маси елемента від кількості протонів

Як було встановлено у попередньому розділі, залежність значення дефекту маси кожного ізотопу одного й того ж елемента від кількості нейтронів має форму квадратичної залежності. Вершина параболи, що є графіком такої квадратичної залежності, точка з найменшим дефектом маси, має унікальні значення для кожного елементу.

Значення такої точки за координатами ΔM_z та N_z мають чітку математичну залежність від числа Z. Тобто вершини параболи, що є графіком залежності дефекту маси від кількості нейтронів, кожного елементу утворюють залежність від кількості протонів у ядрі й відповідно до потреб можуть бути розраховані з різним ступенем наближення.

Наближення 1.

Передбачає розрахунок з урахуванням лише значення Z і включає лише два члени.

$$\Delta M_Z = 42.18 + \frac{Z-95}{4.14} \cdot \frac{Z}{4.14}$$ формула (2.4)

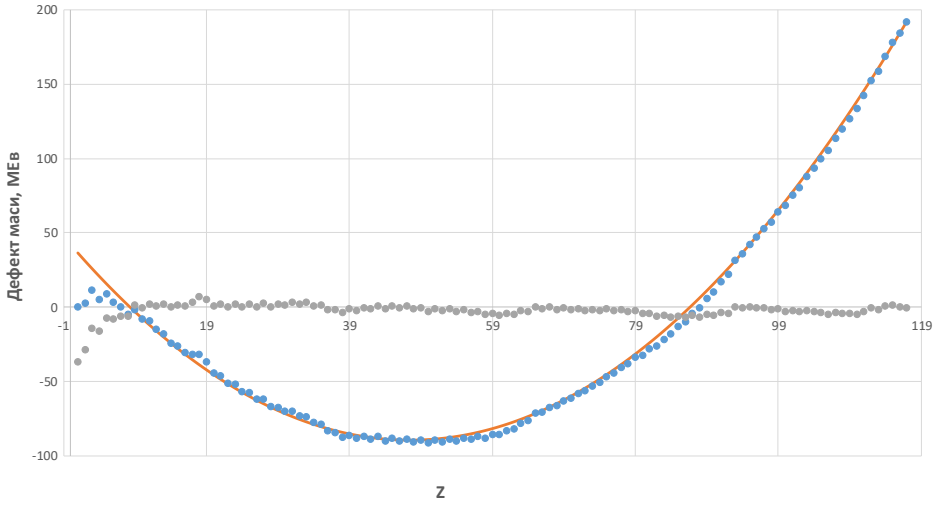


Рис. 2.7. Залежність мінімуму дефекту маси для кожного елемента від кількості протонів цього елемента. На даному графіку і далі: помаранчева лінія – розрахунки, блакитний графік – емпіричні дані, сірим – відхилення емпіричних даних від теоретичних розрахунків (побудовано автором)

Проаналізувавши рис.2.7., бачимо, що існує значне відхилення для легких елементів, зокрема для елементів з порядковими номерами 1-10. Для того, щоб позбутися такого відхилення проведемо наближення 2.

Наближення 2

Відхилення, що спостерігається для легких елементів зменшується за рахунок введення ще одного члена до формули, якою задається залежність.

$$\Delta M_Z = 40.92 + \frac{Z-95}{4.14} \cdot \frac{Z}{4.14} - \frac{36.9}{Z} \qquad \text{формула (2.5)}$$

Середнє відхилення такого наближення становить 0.29 МеВ, максимальне – 9.35 МеВ.

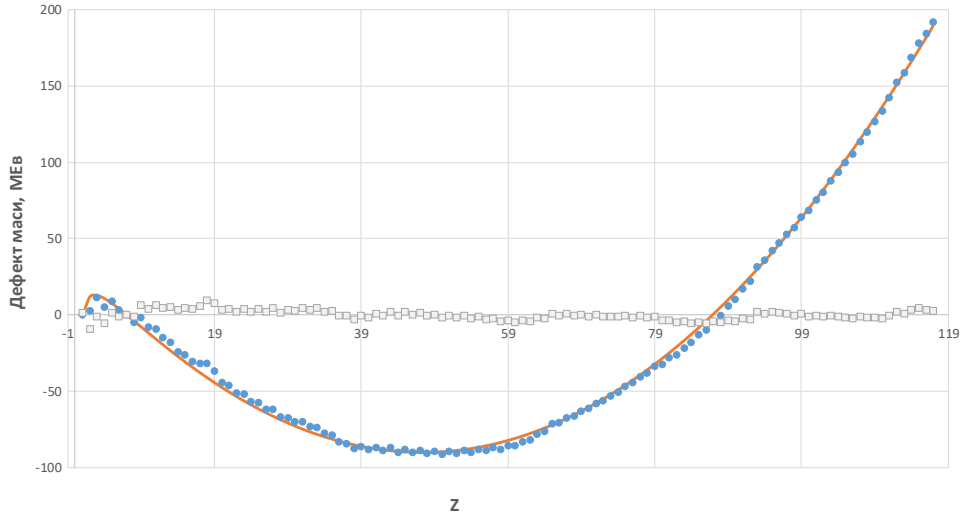


Рис. 2.8. Залежність мінімуму дефекту маси для кожного елемента від кількості протонів даного елемента з урахуванням відхилення для легких елементів (побудовано автором)

Як видно з рисунку 2.8. відхилення парних елементів систематично відрізняються від непарних.

Наближення 3

Це відхилення може бути зменшене за рахунок введення ще одного члена, що коригує вираз відповідно до парності кількості протонів.

$$\Delta M_Z = 40.19 + \frac{Z-95}{4.16} \cdot \frac{Z}{4.16} - \frac{37.3}{Z} + 1.47 \cdot Mod(Z,2) \qquad \text{формула (2.6)}$$

Середнє відхилення для цього наближення становить 0.18 МеВ, максимальне 8.35 МеВ

Як видно з рисунку 10, відхилення мають доволі закономірний характер. Саме тому вони можуть бути описані ще якимись додатковими залежностями, але для більшості обчислень зручніше буде надати значення цих відхилень у вигляді таблиць як додаткової характеристики елементу (таблиця 1).

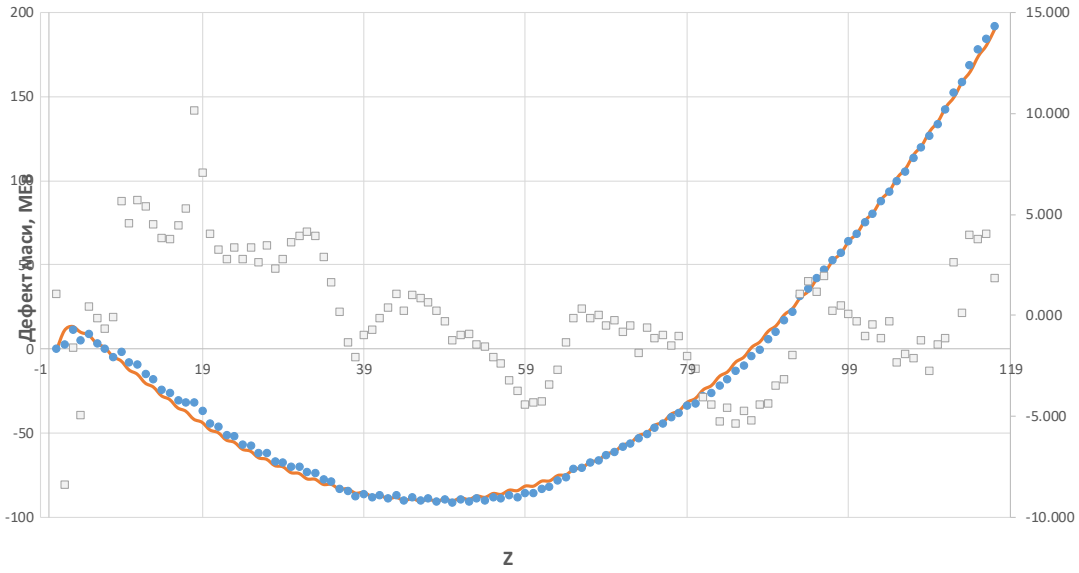


Рис. 2.9. Графік, що демонструє відхилення від теоретичної залежності, що виражена формулою (2.6) (побудовано автором)

Наближення 4

При додаванні ще одного члену, що можна знайти для кожного елемента (таблиця 2.1), отримуємо загальну формулу (2.7).

$$\Delta M_Z = 40.19 + \frac{Z-95}{4.16} \cdot \frac{Z}{4.16} - \frac{37.3}{Z} + 1.47 \cdot Mod(Z,2) + \Delta M_{\text{ост}} \qquad \text{формула (2.7)}$$

Таблиця 2.1. Значення остаточного відхилення $\Delta M_{ост}$, meV

H	-1.05	Sc	-3.00	Nb	0.15	Pm	4.29	Tl	4.08	Md	0.80
He	8.39	Ti	-3.00	Mo	-0.41	Sm	3.45	Pb	4.45	No	1.05
Li	6.00	V	-3.00	Tc	-1.07	Eu	2.69	Bi	4.90	Lr	1.14
Be	3.00	Cr	-3.00	Ru	-1.00	Gd	1.36	Po	5.00	Rf	1.40
B	-0.44	Mn	-3.00	Rh	-1.03	Tb	0.15	At	5.30	Db	1.60
C	0.14	Fe	-3.00	Pd	-0.83	Dy	0.14	Rn	5.20	Sg	1.80
N	0.67	Co	-3.00	Ag	-0.64	Ho	0.14	Fr	5.00	Bh	2.00
O	0.09	Ni	-3.00	Cd	-0.24	Er	0.35	Ra	4.40	Hs	1.90
F	-5.67	Cu	-3.00	In	1.30	Tm	0.49	Ac	4.00	Mt	1.80
Ne	-4.58	Zn	-3.61	Sn	1.22	Yb	0.70	Th	3.51	Ds	1.50
Na	-5.71	Ga	-3.93	Sb	1.10	Lu	0.84	Pa	2.80	Rg	1.16
Mg	-5.39	Ge	-4.14	Te	1.20	Hf	1.20	U	1.90	Cn	0.50
Al	-4.53	As	-3.94	I	1.44	Ta	1.60	Np	-1.06	Nh	0.00
Si	-3.85	Se	-2.87	Xe	1.58	W	1.40	Pu	-1.20	Fl	-0.80
P	-3.76	Br	-1.62	Cs	2.05	Re	1.16	Am	-1.14	Mc	-1.30
S	-4.44	Kr	-0.19	Ba	2.40	Os	1.30	Cm	-1.00	Lv	-1.50
Cl	-5.32	Rb	1.37	La	3.20	Ir	1.40	Bk	-0.80	Ts	-1.80
Ar	-0.12	Sr	2.10	Ce	3.75	Pt	1.60	Cf	-0.49	Og	-2.00
K	-7.05	Y	0.97	Pr	4.44	Au	2.00	Es	-0.05		
Ca	-4.05	Zr	0.72	Nd	4.30	Hg	2.60	Fm	0.29		

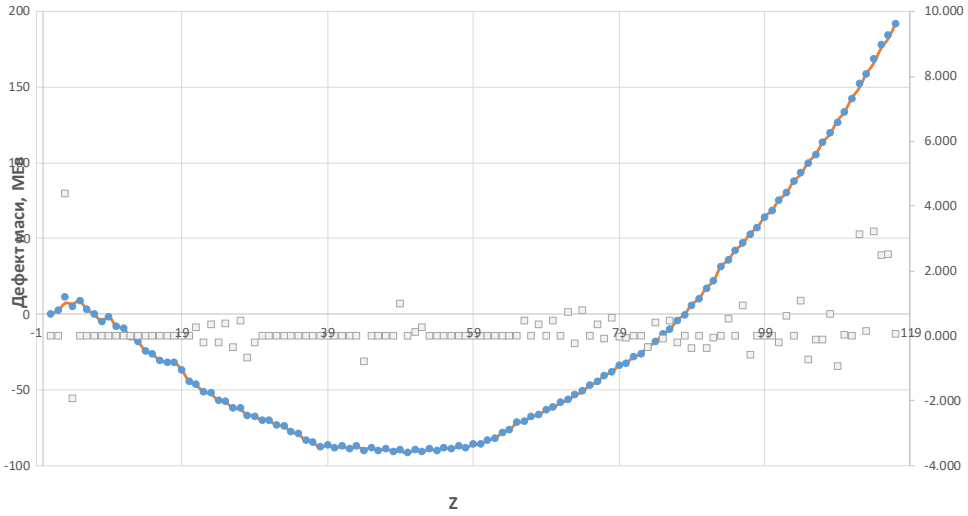


Рис. 2.10. Графік, що демонструє відхилення від теоретичної залежності, що виражена формулою (2.7) (побудовано автором)

Середнє відхилення значень від залежності, що описана цією формулою, становить 0.07 МеВ, максимальне відхилення становить 4.35 МеВ. Найбільше відхилення спостерігається для важких елементів.

2.4. Математична модель кількості нейтронів з мінімальним дефектом маси від кількості протонів

Кількість нейтронів, за якої спостерігається мінімальне значення дефекту маси для елементу, є важливою для розрахунку дефекту маси усіх ізотопів елемента та періоду напіврозпаду елементів. Як і попередній параметр, ми пропонуємо різні методи розрахунку, за допомогою яких кількість нейтронів може бути визначена з різним ступенем точності.

Найпростіша модель.

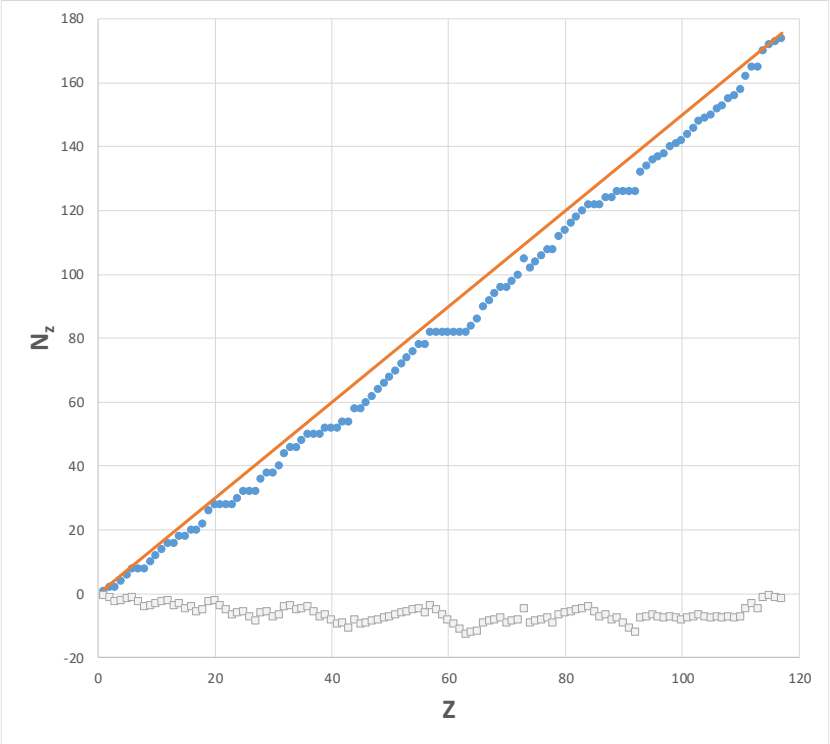


Рис. 2.11. Найпростіша залежність кількості нейтронів від кількості протонів у ядрі (побудовано автором)

З рис. 2.11. видно, що загальна залежність підпорядковується дуже простому правилу: кількість нейтронів у 1.5 разів більша за кількість протонів; але при цьому реальні значення нижчі за цю величину в середньому на 6 нейтронів, а максимальне відхилення від реальних значень буде становити 13.

$$N_Z = 1.5 \cdot Z$$ формула (2.8)

Тому як більш точне наближення ми пропонуємо у вигляді лінійної функції з меншим за значенням коефіцієнтом.

$$N_Z = 1.418 \cdot Z$$ формула (2.9)

Здійснюючи розрахунки за формулою (2.9), визначимо, середнє відхилення розрахунків від емпіричних даних становить 2.725, а максимальне – 8.9.

Для того, щоб вдосконалити формулу можна ввести у залежність квадратичний член. При його додаванні точність розрахунків стає ще більшою: із середнім відхиленням 1 та максимальним 5.

$$N_Z = 1.25 \cdot Z + \left(\frac{Z}{23.1}\right)^2 \qquad \text{формула (2.10)}$$

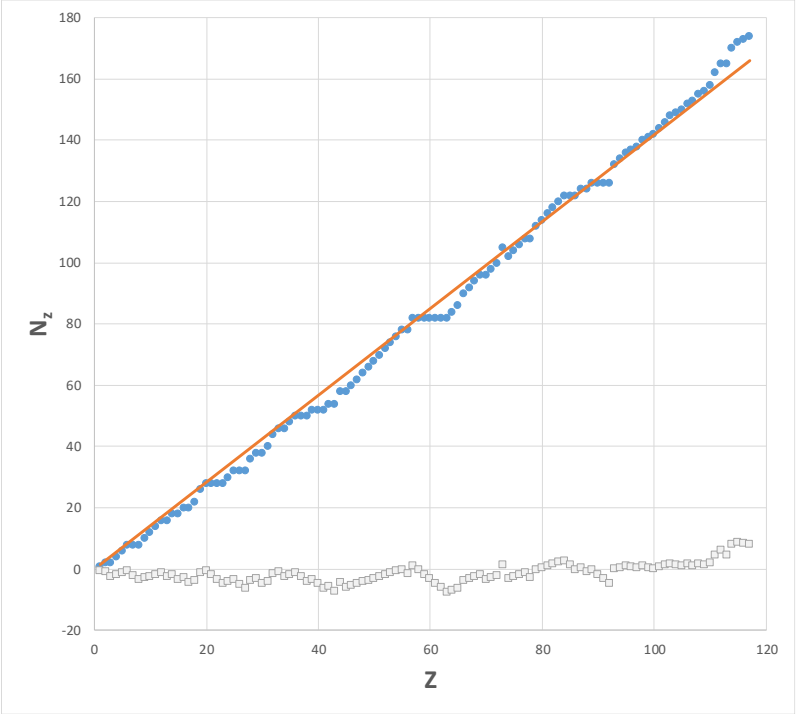


Рис. 2.12. Результати розрахунків за формулою (2.10) (побудовано автором)

Ще більше підвищити точність розрахунку можна, використовуючи табличні значення відхилень (таблиця 2)

$$N_Z = 1.5 \cdot Z - \Delta N_{ост} \qquad \text{формула (2.11)}$$

Таблиця 2.2

Значення остаточного відхилення $N_{ост}$

H	0.5	Sc	3.5	Nb	9.5	Pm	9.5	Tl	5.5	Md	7.5
He	1.0	Ti	5.0	Mo	9.0	Sm	11.0	Pb	5.0	No	7.0
Li	2.5	V	6.5	Tc	10.5	Eu	12.5	Bi	4.5	Lr	7.5
Be	2.0	Cr	5.0	Ru	10.0	Gd	12.0	Po	4.0	Rf	7.0
B	1.5	Mn	5.5	Rh	9.5	Tb	11.5	At	5.5	Db	7.5
C	1.0	Fe	7.0	Pd	9.0	Dy	9.0	Rn	5.0	Sg	7.0
N	2.5	Co	6.5	Ag	8.5	Ho	8.5	Fr	6.5	Bh	7.5
O	4.0	Ni	6.0	Cd	8.0	Er	8.0	Ra	8.0	Hs	7.0
F	3.5	Cu	5.5	In	7.5	Tm	7.5	Ac	7.5	Mt	7.5
Ne	3.0	Zn	7.0	Sn	7.0	Yb	7.0	Th	9.0	Ds	7.0
Na	2.5	Ga	6.5	Sb	6.5	Lu	8.5	Pa	10.5	Rg	5.5
Mg	2.0	Ge	4.0	Te	6.0	Hf	8.0	U	12.0	Cn	5.0
Al	3.5	As	3.5	I	5.5	Ta	9.5	Np	7.5	Nh	4.5
Si	3.0	Se	5.0	Xe	5.0	W	9.0	Pu	7.0	Fl	4.0
P	4.5	Br	4.5	Cs	4.5	Re	8.5	Am	6.5	Mc	3.5
S	4.0	Kr	4.0	Ba	4.0	Os	8.0	Cm	7.0	Lv	3.0
Cl	5.5	Rb	5.5	La	3.5	Ir	7.5	Bk	7.5	Ts	2.5
Ar	5.0	Sr	7.0	Ce	5.0	Pt	7.0	Cf	7.0	Og	2.0
K	2.5	Y	6.5	Pr	6.5	Au	6.5	Es	7.5		
Ca	2.0	Zr	8.0	Nd	8.0	Hg	6.0	Fm	7.0		

У цьому випадку середня похибка розрахунків становить значення менше одного, а максимальне відхилення дорівнює 5 для одно елементу – Танталу.

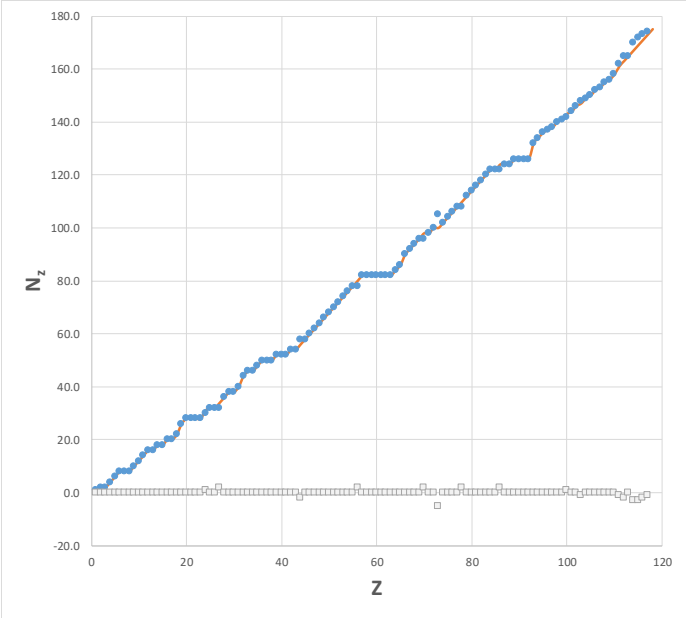


Рис. 2.13. Результати розрахунків за формулою (2.11) (побудовано автором)

2.5. Математична модель стабільності ізотопів

В якості головної характеристики стабільності ізотопів було прийнято значення десяткового логарифму періоду напіврозпаду. Чим воно більше тим більш стабільним є ізотоп, Так, для прикладу, час напіврозпаду рівний 1 року буде давати логарифм 7.5, рівний 1 секунді – 0, а 1 мс – -3 (див. таблицю 3).

Таблиця 2.3

Таблиця співставлення логарифму та часу напіврозпаду

Час		Час в секундах	Значення десяткового логарифму
1,00	нс	0,000000001	-9,00
1,00	мкс	0,000001	-6,00
1,00	мс	0,001	-3,00
1,00	с	1	0,00
1,00	хв	60	1,78
1,00	година	3600	3,56
1,00	доба	86400	4,94
1,00	рік	31536000	7,50

Було виявлено, що як і для дефекту маси, для значення періоду напіврозпаду існує дуже проста залежність, яка підходить для приблизно 70% всіх нестабільних ізотопів.

$$\lg T = 7.2 - 2.92 \cdot |N - N_T| \qquad \text{формула (2.12)}$$

Відхилення від цієї залежності спостерігається для ізотопів з числами N_T близькими до N_T, де точка N_T – вершина графіку залежності логарифму періоду напіврозпаду. Таке відхилення може спостерігатись і як збільшення значень lgT за легких елементів, так і зменшення за важких елементів.

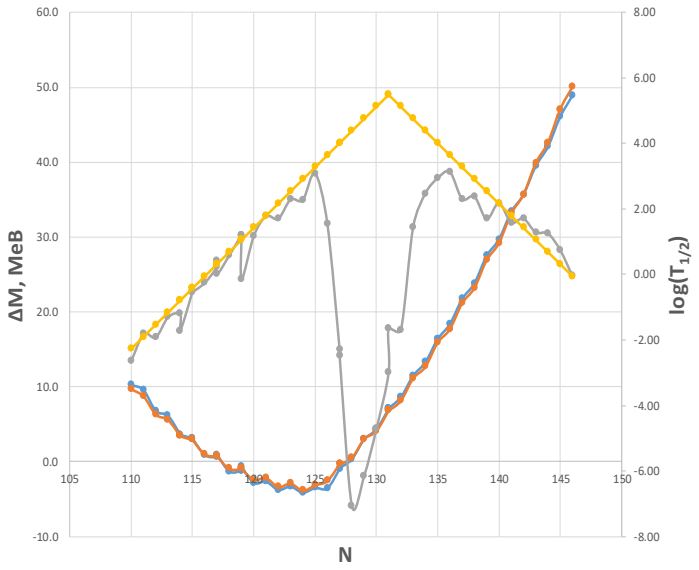


Рис. 2.14. Приклад графіку для Fr. Елементи графіку: сірий графік позначає залежність значень емпіричних даних логарифму періоду напіврозпаду від кількості нейтронів; жовтий графік – залежність значень логарифму періоду напіврозпаду, розрахованих за допомогою формули (20); блакитний графік – залежність емпіричних даних дефекту маси; помаранчевий графік – залежність даних дефекту маси, розрахованих нами за формулами, запропонованими в попередніх підрозділах (побудовано автором)

Слід зазначити, що значення точки N_T майже для всіх досліджених елементів ($Z>50$) не збігаються з точкою N_Z, яка відповідає мінімуму дефекту маси. Але навіть якщо врахувати цю складову, можна побачити (рис. 16), що формула (20) дозволяє розрахувати верхню межу часу напіврозпаду ізотопів зліва від точки N_Z, та вказує на можливість існування більш стабільних ізотопів справа від цієї точки.

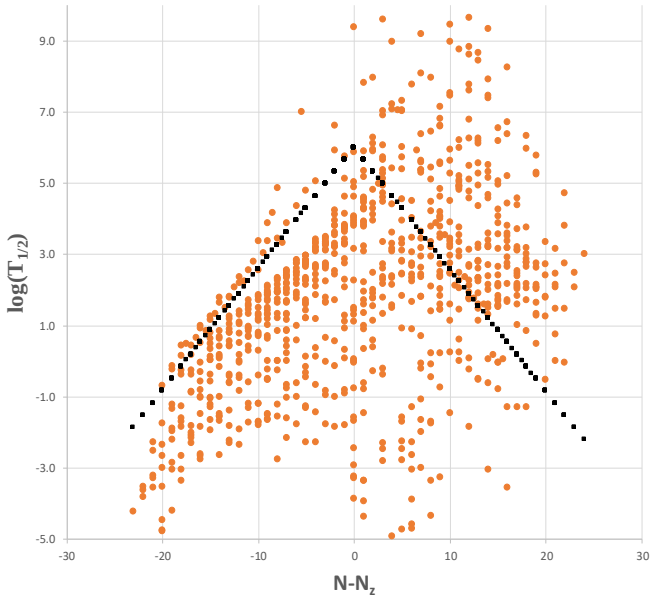


Рис. 2.15. Графік, що відображує значення логарифмів періоду напіврозпаду (помаранчевим) і значення, розраховані за математичною моделлю (чорним) (побудовано автором)

Використовуючи замість N_Z зміщення N_T, а також виключивши з розгляду ізомери ізотопів з меншим періодом напіврозпаду, а також ізотопів з дуже великим періодом напіврозпаду, залежність, виражена формулою (20), має вигляд показаний на рис. 17.

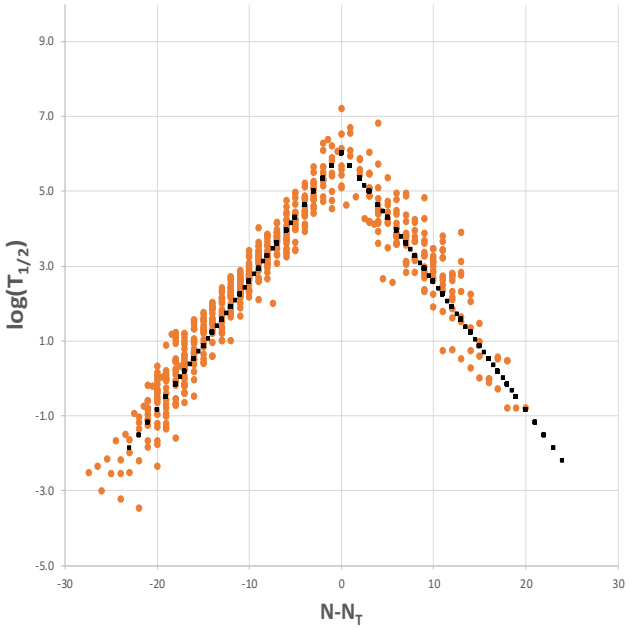
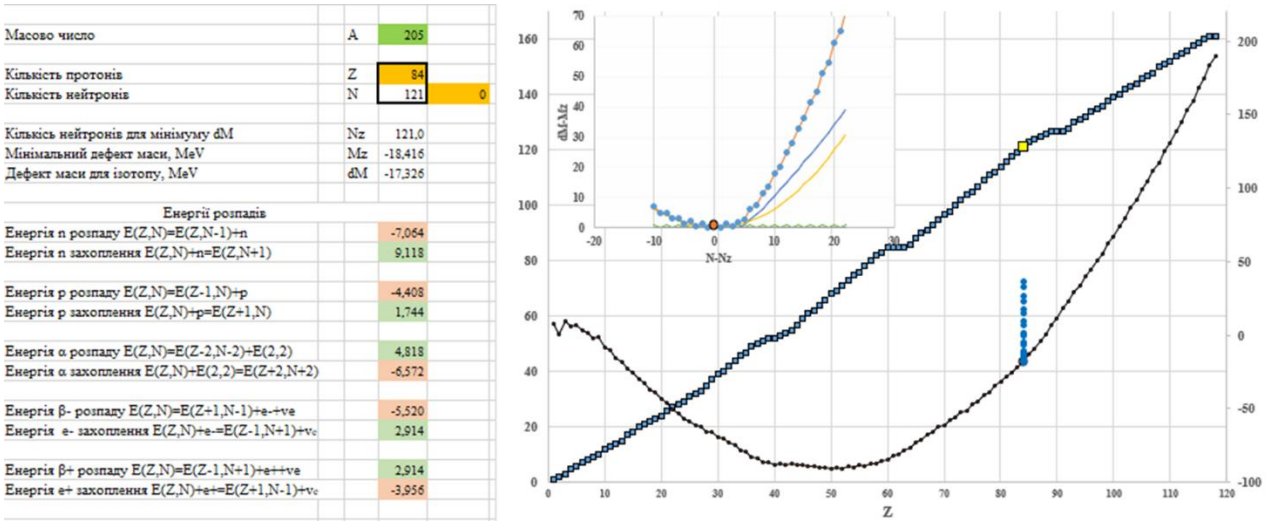


Рис. 2.16. Скоригований графік, що відображує значення логарифмів періоду напіврозпаду (помаранчевим) і значення, розраховані за математичною моделлю (чорним) (побудовано автором)

2.6. Візуалізація запропонованих залежностей

На основі дослідження, та отриманих в результаті формул, створено систему в програмі Microsoft Excel, що будує графік для усіх ізотопів введеного порядкового номера, а також відображає графіки, що відповідають усім трьом етапам дослідження: побудова залежності найменшого дефекту маси елемента від кількості протонів; побудова залежності кількості нейтронів з мінімальним дефектом маси від кількості протонів; побудова залежності дефекту маси для ізотопів від кількості нейтронів. При введенні до системи порядкового номера та кількості нейтронів відображає розрахований дефект маси та енергії можливих розпадів цього радіонукліда.



Масово число	A	205	
Кількість протонів	Z	84	
Кількість нейтронів	N	121	0
Кількісь нейтронів для мінімуму dM	Nz	121,0	
Мінімальний дефект маси, MeV	Mz	-18,416	
Дефект маси для ізотопу, MeV	dM	-17,326	
Енергії розпадів			
Енергія n розпаду E(Z,N)=E(Z,N-1)+n		-7,064	
Енергія n захоплення E(Z,N)+n=E(Z,N+1)		9,118	
Енергія p розпаду E(Z,N)=E(Z-1,N)+p		-4,408	
Енергія p захоплення E(Z,N)+p=E(Z+1,N)		1,744	
Енергія α розпаду E(Z,N)=E(Z-2,N-2)+E(2,2)		4,818	
Енергія α захоплення E(Z,N)+E(2,2)=E(Z+2,N+2)		-6,572	
Енергія β- розпаду E(Z,N)=E(Z+1,N-1)+e-+ve		-5,520	
Енергія e- захоплення E(Z,N)+e-=E(Z-1,N+1)+ve		2,914	
Енергія β+ розпаду E(Z,N)=E(Z-1,N+1)+e++ve		2,914	
Енергія e+ захоплення E(Z,N)+e+=E(Z+1,N-1)+ve		-3,956	

Рис. 2.16. Розроблена система, для автоматичної побудови графіків та розрахунку дефекту мас (побудовано автором)

2.7. Узагальнення результатів досліджень

Таким чином, в результаті проведених досліджень було встановлено можливість побудови узагальненої математичної моделі для розрахунку дефекту маси ізотопів будь-якого складу, а також можливість оцінку періоду напіврозпаду.

У запропонованій математичній моделі для дефекту мас враховано ефект парності протонів та нейтронів та виявлено причину відхилення залежностей від чіткої параболи для деяких елементів.

Було також виявлено, що зміни наведених параметрів статистично значимо корелюють з числами електронних оболонок хімічних елементів 2, 10, 18, 36, 54, 86.

Зазначені вище факти вимагають продовження досліджень у цьому напрямку.

ВИСНОВКИ

В результаті проведеної роботи вивчено основні ядерні властивості ізотопів, та показано необхідність розробки методики їх оцінки.

Побудовано математичні вирази чотирьох різних ступенів точності для знаходження найменшого значення дефекту маси серед ізотопів одного елемента від порядкового номера елемента.

Побудовано математичний вираз для знаходження кількості нейтронів ізотопу, що має найменше значення дефекту маси серед ізотопів одного елемента від порядкового номера елемента.

Створено емпіричну формулу, що спирається на побудовані вирази, і використовується для знаходження значення дефекту маси довільного нукліда від кількості протонів та нейтронів у ньому.

Створено емпіричну формулу, що визначає значення десяткового логарифму періоду напіврозпаду довільного нукліда від кількості протонів та нейтронів у ньому.

Показано можливість і необхідність подальших досліджень у цьому напрямі.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Management of radioactive waste from the use of radionuclides in medicine: колект. моногр. Австрія, Вена: Waste Technology Section International Atomic Energy Agency, 2000.
2. Aage Bohr, Ben R. Mottelson. Nuclear structure. В 2 т. Т.1. Single-Particle Motion. Сінгапур, Сінгапур: World Scientific Publishing, 1999. 2-8 с.
3. Isao Tanihata, Hiroshi Toki, Toshitaka Kajino. Handbook of Nuclear Physics. Сінгапур, Сінгапур: Springer Nature Singapore Pte Ltd, 2023. 375 с.
4. Marcello Baldo. Nuclear Methods and the Nuclear Equation of State. Сінгапур, Сінгапур: World Scientific Publishing, 1999. 8 с.
5. Walter Greiner, Joachim A. Maruhn. Nuclear models. Німеччина, Франкфурт: Springer, 1996. 99-100 с.