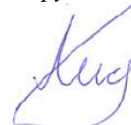


ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ
ЛАБОРАТОРИЯ ЯДЕРНЫХ ПРОБЛЕМ ИМ. В.П. ДЖЕЛЕПОВА

На правах рукописи



Лисин Сергей Сергеевич

**Анализ, оценка и систематика ядерных данных
для исследований в области ядерной
спектроскопии и структуры ядра**

Специальность 01.04.16 - физика атомного ядра и элементарных частиц

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Дубна – 2020

Работа выполнена в Петербургском институте ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт».

- | | |
|----------------------------------|--|
| Научный
руководитель | - Митропольский Иван Андреевич ,
доктор физико-математических наук,
старший научный сотрудник, Заведующий
лабораторией ядерной спектроскопии НИЦ
Курчатовский институт - ПИЯФ |
| Официальные
оппоненты | - Бобошин Игорь Николаевич , доктор физи-
ко-математических наук, ведущий специалист
МГУ им. М.И.Ломоносова, Научно-
исследовательский институт ядерной физики
имени Д.В.Скобельцина
- Власников Александр Константинович ,
кандидат физико-математических наук, доцент
СПбГУ, физический факультет |

С электронной версией диссертацией можно ознакомиться на официаль-
ном сайте Объединенного института ядерных исследований в информа-
ционно-телекоммуникационной сети «Интернет» по адресу:
<https://dissertations.jinr.ru/ru/Councils/NuclearPhysicsCouncil/dissertations>

С печатной версией диссертации можно ознакомиться в Научно-
технической библиотеке ОИЯИ (г. Дубна, Московская область,
ул. Жолио-Кюри, д. 6).

Ученый секретарь диссертационного совета ОИЯИ
по ядерной физике - ОИЯИ.03.02.2019.П,
доктор физико-математических наук

Г.А. Карамышева

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА ДИССЕРТАЦИОННОЙ РАБОТЫ

Актуальность исследования.

Понятие «ядерные данные» включает в себя числовые константы, описывающие на основании физических законов структуру и свойства атомных ядер, их превращения в распадах и ядерных реакциях. Для удовлетворения потребностей в надёжных и доступных ядерных данных в 1967 году под эгидой МАГАТЭ был организован Международный комитет по ядерным данным и Международная сеть оценщиков ядерных данных¹. В ведущих научных центрах были созданы Центры ядерных данных. Одним из них является Центр данных Петербургского института ядерной физики им.Б.П.Константинова НИЦ «Курчатовский институт».

Развитие ядерно-физических исследований, с одной стороны, доставляет новые экспериментальные данные о свойствах атомных ядер, а с другой стороны, требует все более точных ядерных констант и данных для проведения новых исследований и развития ядерных технологий. Ядерные данные по структуре ядра и распадам собираются на сайте Центра Данных Брукхейвенской Национальной лаборатории в виде совокупности текстовых массивов, которая называется файлом ENSDF (Evaluated Nuclear Structure Data File)².

Файл ENSDF хранится в виде текста, структурированного в соответствии со специально разработанным форматом³ и содержит, наряду с исходными экспериментальными значениями, оцененную с точки зрения достоверности и непротиворечивости экспериментальную информацию об основных и возбужденных состояниях атомных ядер и их распадах.

В файле ENSDF накоплен колоссальный объем актуальной ядерно-физической информации. По сути, этот файл отражает всю спектроскопическую информацию, относящуюся к структуре ядра, изучаемую в распадах и ядерных реакциях. В настоящее время приобрели актуальность задачи, связанные с совокупным анализом больших массивов ядерных данных, извлекаемых из ENSDF. Такой анализ, в принципе, может явиться средством получения новых знаний в ядерной физике.

¹ International Network of Nuclear Structure and Decay Data Evaluators (NSDD). <https://www-nds.iaea.org/nsdd/> (дата обращения 24.07.2019).

² ENSDF: Evaluated Nuclear Structure Data File <https://www.nndc.bnl.gov/ensdf/> (дата обращения 24.07.2019).

³ Tuli J.K. Evaluated Nuclear Structure Data File, A Manual for Preparation of Data Sets. BNL-NCS-51655-01/02-Rev Formal Report (February 2001)

Цели и задачи диссертационной работы

Целью диссертационной работы является разработка методики работы с большими массивами ядерных данных и ее применение для поиска универсальных информационных и программных решений различных задач в фундаментальных и прикладных ядерно-физических исследованиях при использовании принципов системного анализа, анализ данных на основе ядерных моделей, исследование систематического поведения данных и модельных параметров в больших областях ядер, оценка достоверности значений ядерных характеристик, уточнение деталей модельного описания структуры ядер.

В соответствии с этим в диссертации были поставлены следующие основные задачи:

1. Анализ файла ENSDF как информационной модели предметной области ядерных данных. Разработка программных средств подготовки данных в формате ENSDF с целью их использования в прикладных программах. Представление ядерных данных в формате, допускающем использование современных информационных технологий для выбора необходимых для прикладной задачи данных.
2. Разработка информационного представления ядерных данных для систематического анализа схем ядерных уровней, размещения переходов и вычисления энергий возбуждённых состояний.
3. Выделение в спектрах возбуждённых состояний атомных ядер вращательных полос. Анализ энергий вращательных уровней на основе феноменологических моделей и систематика модельных параметров в больших группах ядер. Уточнение первичной экспериментальной информации о вращательных полосах на основе этого анализа.
4. Информационное обеспечение исследований времён жизни ядерных состояний как основной характеристики ядерных превращений. Измерение времён жизни и изучение свойств ядерных изомеров.
5. Моделирование процессов облучения вещества нейтронами. Создание математической модели активации и распадов и соответствующего справочника ядерных данных. Уточнение параметров ядерных превращений в нейтронных потоках. Создание информационной системы, поддерживающей проведение нейтронно-активационного анализа, и локальных справочных систем, облегчающих оценку ядерных данных.

Научная новизна

Научную новизну представляют следующие результаты работы:

1. Предложена методика работы с большими массивами однородных ядерных данных, включающая создание информационной модели предмет-

ной области задачи, разработку соответствующей проблемно-ориентированной базы данных и программного интерфейса к ней.

2. Новые критерии оценки качества схем ядерных уровней позволили устранить ранее неправильно размещённые переходы и уточнить схемы уровней рассмотренных ядер. Проведена систематика энергий ядерных переходов в предположении «хаотического» распределения.

3. Выделены вращательные полосы в деформированных ядрах по всей области их существования и впервые проведено систематическое модельное описание вращательных полос в нечётно-нечётных ядрах. Предложен критерий количественной оценки качества модельного описания вращательных полос, на основе которого проведена реконструкция ряда вращательных полос в нечетно-нечетных ядрах. Проведена систематика и сравнение между собой модельных параметров в ядрах разного типа.

4. Проведена модернизация алгоритма экспериментального определения времени жизни изомерных состояний ядер после захвата нейтронов. Увеличение временного разрешения позволило исследовать влияние резонансного окружения на время жизни ядерного возбуждения. Экспериментально показано увеличение наблюдаемого времени жизни изомерных состояний ^{161}Du при создании резонансных условий на основе эффекта Мессбауэра.

5. Создана наиболее полная база данных по свойствам ядерных состояний, имеющих экспериментально определенные времена жизни. Выделены изомерные состояния ядер как состояния с аномально большим временем жизни. Систематизированы свойства ядерных изомеров с учётом не только характеристик распада, но и способов их возбуждения.

6. Предложена модель процесса нейтронного облучения, включающая нейтронный захват и распады активированных ядер, которая позволяет получить оптимальный справочник гамма-излучения для целей нейтроно-активационного анализа, количественно исследовать процесс трансмутации ^{129}I в нейтронных потоках, воспроизвести аномально большое значение сечения (n,γ) реакции на тепловых нейтронах для ^{88}Zr и оценить сечения нейтронного захвата соседних ядер.

Практическая ценность

Практическая ценность результатов работы определяется чёткой направленностью на информационное обеспечение ядерно-физического эксперимента, созданием специализированных баз данных и программ-интерфейсов к ним, зарегистрированных в реестре РОСПАТЕНТа и свободно распространяемых по запросам:

1. Программа REdit – контекстно-ориентированный редактор для файлов с регулярной структурой [1].

2. База данных RENSDB – реляционное представление оцененных ядерных данных из ENSDF [2].
3. База данных ANGTOL для оценки размещений гамма-переходов в схемах ядерных уровней и программа оценки схем ядерных возбужденных состояний на основе ритцевских комбинаций: [3].
4. Программа BARON, проблемно-ориентированная база ROTAN и программа – интерфейс пользователя к базе данных ROTAN для анализа и модельного описания вращательных состояний атомных ядер [4].
5. Программный комплекс для определения времени жизни ядерных уровней методом прямой декомпозиции спектров задержанных совпадений. Проблемно-ориентированная база данных ISOTIME и интерфейс к базе данных ISOTIME по временам жизни и свойствам изомеров атомных ядер [5].
6. Программа MIR – расчет активностей и спектров гамма-излучения радионуклидов, возникающих при облучении вещества нейтронами [6].
7. Справочная программа ELENA: радиационные свойства элементов и изотопов для нейтронного анализа вещества [7]. База данных и программа-интерфейс MasCa для вычисления и графического представления данных по массам атомных ядер, энергиям связи, энергиям отделения частиц и ядерных распадов, энергетических параметров ядерных реакций [8].

Основные положения диссертации, выносимые на защиту

1. На основе анализа качества схем ядерных уровней и размещения переходов в них проведена оптимизация плохо согласованных схем ядерных уровней.
2. Впервые на основе феноменологических моделей проведено систематическое описание вращательных полос в нечётно-нечётных ядрах. Предложена реконструкция вращательных полос, объединение фрагментов и удаление «лишних» уровней. Проведено сравнение модельных параметров для ядер разных типов ядер.
3. Уточнение алгоритма определения времени жизни изомерных состояний ядер позволило экспериментально определить влияния резонансного окружения на время жизни изомерных состояний ^{161}Dy и количественно определить его роль.
4. Моделирование процесса нейтронного облучения с учетом процессов нейтронного захвата и ядерных бета-распадов позволило получить оценку эффективности трансмутации ^{129}I в нейтронном потоке и провести вычисление сечений захвата нейтронов для ^{88}Zr и соседних ядер по экспериментальным данным.
5. Созданы справочно-информационные системы по радиационным свойствам элементов и их изотопов, для вычисления ядерных масс и энер-

гий связи, энергий отделения, энергий распада и порогов ядерных реакций, информация в которых обновляется в соответствии с развитием международных баз ядерных данных.

б. На больших массивах ядерных данных исследованы распределения по значащим цифрам значений энергий переходов, уровней и времён жизни, согласующиеся с законом Бенфорда. Предложено использовать эту закономерность при оценке ядерных данных.

Апробация работы

Основные результаты диссертационной работы опубликованы в 5 статьях в реферируемых журналах [11 - 13, 18, 22], 6 препринтах ПИЯФ [9, 14, 16, 17, 22, 23], представлялись на Международных совещаниях по ядерной спектроскопии и структуре атомного ядра 2006 г., 2008 г. [15], 2009 г., 2010 г. [10, 21], 2011 г., 2014 г., 2016 г. [19], 2017 г. [20], докладывались автором на 8-ой (2010 г.) и 9-ой (2011 г.) Курчатовской молодежной научной школе, на рабочем совещании *Nuclear structure and decay data: theory and evaluation*, Trieste, Italy (2010), на IV ежегодном Молодежном научном форуме OpenScience 2017, Гатчина, 2017 [23].

Публикации автора по теме диссертации

По теме диссертации опубликовано 5 статей в реферируемых журналах, 6 препринтов ПИЯФ, получено 8 свидетельств о государственной регистрации программ ЭВМ, 5 свидетельств о государственной регистрации баз данных.

Личный вклад автора

Содержание диссертационной работы и положения, выносимые на защиту, отражают персональный вклад автора в опубликованные работы. Автор диссертационной работы принимал непосредственное участие на этапах постановки задач, разрабатывал алгоритмы расчетов по ядерным моделям, структуры баз данных, программы-интерфейсы к ним, предлагал новые информационные решения на основе системного подхода, проводил систематику ядерных данных и модельных параметров в широкой области ядер. Большинство результатов вычислений получены лично автором.

Структура и объем диссертации

Диссертационная работа состоит из введения, 5 глав, заключения и списка цитируемой литературы. Работа изложена на 149 страницах и включает 84 рисунка, 12 таблиц и список литературы из 96 наименований.

СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОЙ РАБОТЫ

Во **введении** обоснована актуальность темы разработки специализированных баз данных как инструмента работы с большими массивами ядерно-физических данных. Сформулированы цели и задачи диссертационной работы.

В **первой главе**, состоящей из четырех частей, описывается, разработанная автором методика работы с большими массивами ядерных данных сосредоточенными в ENSDF. В *первой части* рассматривается структура файла ENSDF как информационной модели ядерной спектроскопии и описан контекстно-ориентированный редактор, разработанный автором для ввода данных, редактирования и синтаксической проверки файлов в формате ENSDF.

Реляционная база RENSDB описывается во *второй части*. Опыт использования ядерных данных из ENSDF в прикладных программах показал, что задача извлечения информации непосредственно из ENSDF сопряжена с написанием и отладкой достаточно объёмных программ. Изменение содержания запроса приводит к необходимости написания другой программы. Специфика научных исследований заключается ещё и в том, что и критерии выборки данных, и алгоритмы работы с ними в процессе работы меняются, так что разработчик программы должен быть готов к её постоянным модификациям.

Такая ситуация ограничивает сферу практического использования файла ENSDF, для её разрешения необходимо внедрение в научные исследования новых информационных технологий. Для выбора больших объёмов информации по сложным критериям кажется естественным, в первую очередь, воспользоваться возможностями стандартных систем управления базами данных (СУБД) и языка структурированных запросов SQL. При этом необходимым этапом является превращение файла ENSDF в реляционную базу данных.

Использование базы данных RENSDB и языка структурированных запросов SQL полностью решает проблему поиска данных в ENSDF. Однако остаётся проблема расшифровки содержимого полей структурированных записей либо комментариев с целью получения значений характеристик ядерных уровней или переходов. Эту задачу можно решить путём использования функций, встроенных в SQL или реализованных с помощью объектно-ориентированных языков программирования.

В *третьей части* изложена методика использования проблемно-ориентированных баз ядерных данных как инструмента анализа больших массивов информации.

Нами была разработана методика, позволяющая на основе реляционного аналога ENSDF – базы данных RENSDB, создавать проблемно ориентированные базы данных, нацеленных на решение конкретных задач. При этом мы руководствовались общими принципами системного подхода к решению задачи в любой предметной области.

Наша методика обладает следующими преимуществами:

- Значительное сокращение времени выполнения поставленной задачи.
- Возможность включения в процесс обработки данных расчётов из различных источников.
- Широкий охват предметной области, позволяющий кроме решения поставленной задачи получать и анализировать дополнительную информацию.
- Разработка графических интерфейсов.
- Полная сохранность первоначальной информации.

Следуя этой методике, мы создали ряд проблемно-ориентированных баз данных на основе файла ENSDF, каждая с собственным интерфейсом [9]. Следует подчеркнуть, что основной для построения проблемно-ориентированных баз является реляционная база RENSDB, которая существует независимо от поставленной задачи и поддерживается в актуальном состоянии по мере обновления файла ENSDF.

В четвертой части сформулированы выводы главы 1.

Вторая глава диссертации посвящена оценке имеющихся схем ядерных возбужденных состояний и размещению гамма-переходов в схемах ядерных уровней. Основным «информационным инструментом» является база данных ANGTOL [3].

Первая часть главы 2 посвящена статистическому анализу и систематике энергий ядерных переходов. При исследовании статистических свойств ядер часто обращаются к энергетическим распределениям расстояний между уровнями, которые позволяют судить о типе ядерного движения - регулярном или хаотическом. В связи с этим можно рассмотреть распределение гамма-переходов для всех типов возбуждения ядер [10]. Видно, что распределение носит унимодальный характер с выраженным максимумом в районе 250 кэВ. Положение максимума и ширина распределения связаны, по-видимому, с экспериментальными возможностями регистрации излучения. В отдельных нуклидах энергетическое распределение гамма-переходов напоминает глобальное распределение и может быть аппроксимировано распределением Вигнера-Дайсона для расстояний между уровнями E

$$p = \frac{E}{a^2} \exp\left(-\frac{E^2}{2a^2}\right). \quad (1)$$

Такое распределение возникает в модели случайных матриц для расстояний между уровнями⁴ и служит критерием для определения степени хаотичности ядерных спектров. Оно характеризуется единственным параметром плотности уровней a , который можно определить по экспериментальным энергиям гамма-переходов в данном ядре. На рис.1 для всех нуклидов, в схемах которых размещено не менее 10 переходов, построено распределение параметра a от массового числа A . Отчетливо видны области магических ядер с аномально малой плотностью уровней.

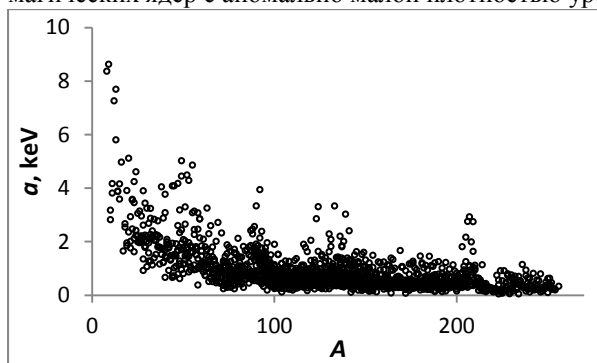


Рис.1. Зависимость параметра плотности уровней a от массового числа A .

Во второй части главы 2 проведен анализ размещения гамма-переходов в схемах ядерных уровней [11-13].

Для перехода, размещенного в схеме вычисляются величины

$$\Delta = E_G + E_{rec} - (E_{L,top} - E_{L,bot}) \quad \text{и} \quad \delta = \frac{\Delta}{dE_G} \quad (2)$$

где E_G - энергия γ -кванта, dE_G - погрешность энергии γ -кванта (если эта величина не известна, полагаем ее равной 1), E_{rec} - энергия отдачи ядра, $E_{L,top}$ - энергия уровня, с которого идет переход, $E_{L,bot}$ - энергия уровня, на который идет переход.

По виду распределения величины δ можно судить о согласованности схемы уровней или об оптимальности размещения переходов в ней. Схема согласована идеально, если невязки Δ согласуются с экспериментальными погрешностями энергий переходов, т.е. для данной схемы величина δ распределена по нормальному закону $N(0,1)$, со средним 0 и дисперсией 1. В этом случае величина Q

$$Q = \sum_{i=1}^{N_G} \delta_i^2 \quad \text{и} \quad Q_{norm} = \frac{Q}{N} \quad (3)$$

распределена по закону χ^2 со средним N и дисперсией $2N$, где N - число степеней свободы, а ожидаемое значение Q_{norm} равно 1. Критерий Пирсона

⁴ Бор О., Мотгельсон Б. Структура атомного ядра. М.: Мир, 1971. Т. 1., 456с.

χ^2 удобно использовать в форме критерия Романовского⁵, согласно которому вычисляется отклонение Q от его математического ожидания в количестве стандартных отклонений.

В результате для наборов ADOPTED LEVELS файла ENSDF 2005 г. мы отнесли размещение 81 перехода к недопустимым при общем числе размещённых переходов 204708 [11]. В версии ENSDF 2018 г. мы отнесли размещение уже 72 переходов к недопустимым, при общем числе размещённых переходов 282079. Это говорит о повышении качества построения схем ядерных уровней.

В *третьей части* главы 2 рассмотрены ритцевские комбинации в схемах ядерных уровней. Ставится задача подобрать модельно независимый (независящий от значений энергий уровней) критерий проверки схемы уровней. Предложенное решение опубликовано в работах [14]. С использованием базы данных и программы [3] для всех схем ядерных уровней из массива ADOPTED LEVELS файла ENSDF, содержащих более 50 размещённых переходов, проведена проверка выполнения комбинационного правила Ритца как необходимого условия для согласованной схемы. Данная процедура может быть полезной не только в качестве модельно независимого критерия правильности построения схемы уровней, но и оценки непротиворечивости исходного материала по энергиям переходов.

Четвертая часть главы 2 посвящена вопросу оптимизации схем ядерных уровней и размещения в них переходов. Нами были просчитаны все схемы ядерных уровней из наборов ADOPTED LEVELS файла ENSDF 2005 г. [11]. В результате применения процедуры «оптимизации» почти для половины наборов были получены улучшенные значения Q , а для некоторых наборов это улучшение было весьма существенным. В 67 наборах значение Q уменьшилось более чем в 10 раз. Примеры таких схем приведены в таблице 1.

Для сравнения мы провели анализ файла ENSDF 2018 г., для которого в наборах ADOPTED LEVELS содержится 941 схема ядерных уровней со 100 и более размещёнными переходами. Применение процедуры «оптимизации» показало, что для 215 схем приведенные в ENSDF значения энергий уровней не требуют изменений, а для 558 схем можно было бы получить более качественную оценку.

Пятая часть главы 2 демонстрирует возможности базы данных ANGTOLE для поиска новых закономерностей в ядерных данных. Рассмотрена частотность появления первых значащих цифр в энергиях ядерных уровней и переходов [15]. Показано, что соответствующие распределения

⁵ Романовский В. И. Основные задачи теории ошибок. — ОГИЗ. Гостехиздат, М.-Л., 1947. — 116 с.

не являются однородными, а подчиняются закону Бенфорда⁶. Согласно ему вероятность p_k появления цифры k на первом месте

$$p_k = \lg\left(\frac{k+1}{k}\right), k = 1, 2, \dots, 9. \quad (4)$$

На рис.2 представлены распределения первых значащих цифр в известных энергиях уровней и переходов.

Таблица 1

Результат оптимизации ядерных схем уровней

Ядро	Число переходов	Число уровней	Q_{norm}	
			ENSDF	после оптимизации
²⁷ Mg	114	56	9.5	0.05
¹⁰⁹ Cd	257	135	20.4	0.67
¹¹⁶ Te	102	85	66.2	1.60
¹⁴⁷ Sm	116	94	584.5	2.86
¹⁴⁸ Dy	93	57	12.2	0.47
¹⁷¹ Hf	247	155	39.0	3.11

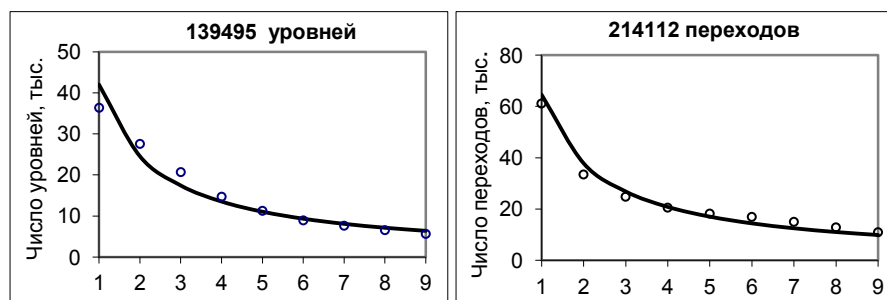


Рис.2. Распределение значений энергий уровней и переходов по первой значащей цифре

В шестой части сформулированы основные результаты и выводы главы 2.

Третья глава, состоящая из четырех частей, посвящена систематическому изучению вращательных состояний деформированных ядер,

⁶Benford F. The law of anomalous numbers // Proc. Amer. Philosoph. Soc., v.78, 1938, pp.551-572.

развитию модельных представлений о ядерном вращении, и созданию соответствующей базы данных и интерфейса к ней.

В *первой части* главы 3 для модельного описания вращательных полос в спектрах деформированных ядер использованы полиномиальная параметризация Бора-Моттельсона (BM)⁷

$$E_K(I) = E_0 + A[I(I+1) - K^2] + B[I(I+1) - K^2]^2 + \dots \quad (5)$$

и обобщение модели переменного момента инерции (VMI)⁸

$$E_K(I) = E_0 + \frac{I(I+1) - K^2}{2J_I} + \frac{c}{2}(J_I - J_0)^2, \quad \frac{\partial E_K(I)}{\partial J_I} = 0. \quad (6)$$

Для описания сигнатурных эффектов обе параметризации дополнены знакопеременными поправками. На рис.3 приведены примеры модельного описания вращательных полос в программе BARON [16].

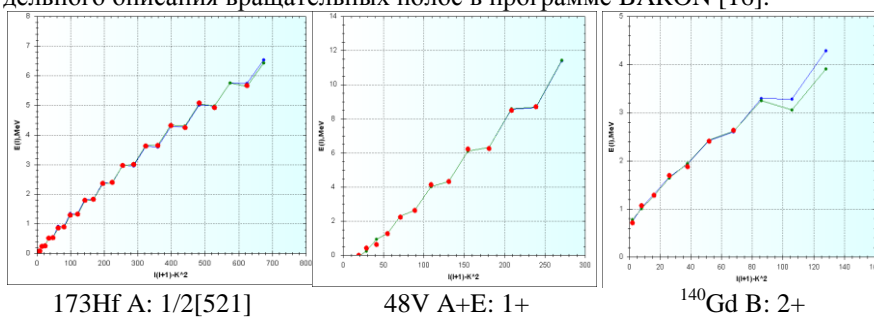


Рис.3 Модельное описание (линии) энергий вращательных уровней (точки) с сигнатурными поправками.

Вторая часть главы 3 посвящена описанию базы данных ROTAN, в которую занесена вся экспериментальная информация о вращательных состояниях ядер, содержащаяся в ENSDF, и интерфейса к ней. Использование этой базы данных позволило провести модельное описание вращательных полос и систематику их параметров. На основе феноменологических параметризаций проведена реконструкция ряда вращательных полос, объединены сигнатурные партнеры и фрагменты полос из разных областей значения спина, удалены «лишние» уровни. Результаты такой реконструкции могут быть использованы при оценке ядерных схем уровней.

В *третьей части* главы 3 содержится систематика вращательных полос и модельных параметров. На рис. 4 представлено сравнение распре-

⁷ Бор О., Моттельсон Б. Структура атомного ядра. М.: Мир, 1977. Т. 2. 664 с.

⁸ Mariscotti M. A. J., Scharf-Goldhaber G., Buck B. // Phys. Rev. 1969.V. 178. P. 1864.

делений моментов инерции по группам ядер. В соответствии с физическим смыслом сверхтекучей модели моменты инерции четно-четных ядер в среднем меньше моментов инерции А-нечетных ядер, а те в свою очередь меньше моментов инерции нечетно-нечетных ядер.

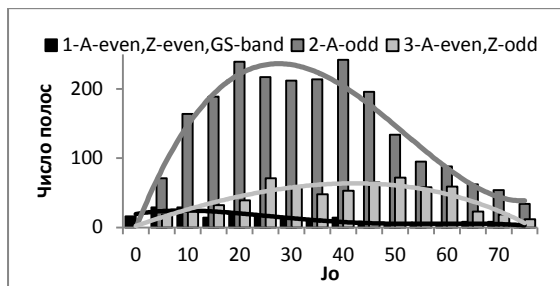


Рис.4. Сравнение моментов инерции для А-нечетных, четно-четно и нечетно-нечетных ядер в модели переменного момента инерции

В четвертой части главы 3 сформулированы результаты и основные выводы, относящиеся к описанию вращательных полос в деформированных ядрах.

Четвертая глава, состоящая из пяти частей, посвящена исследованию ядерных свойств, связанных с временем жизни.

В первой части главы 4 описывается программа TSpectr [17] для анализа спектров е-γ совпадений и примеры ее использования для обработки результатов эксперимента по исследованию распада изомеров $^{161m1,m2}\text{Dy}$ в условиях резонансного (мессбауэровский экран) окружения. Программа TSpectr в процессе декомпозиции одновременно определяет как параметры установки: полуширину и положение пика мгновенных совпадений, весовые коэффициенты фона случайных совпадений, так и постоянные распада ядер.

В эксперименте наблюдались спектры распадов изомерных состояний ядра ^{161}Dy : $^{161m1}\text{Dy}$ ($E = 25.6$ кэВ, $T_{1/2} \sim 30$ нс) и $^{161m2}\text{Dy}$ ($E = 74.6$ кэВ, $T_{1/2} \sim 3$ нс). Прямые измерения периода полураспада изомера $^{161m1}\text{Dy}$, находящегося в кристаллической решетке $^{160}\text{Gd}_2\text{O}_3$ и распадающегося в непосредственном окружении различных количеств ядер ^{161}Dy в их основных состояниях, обнаружили зависимость его наблюдаемого значения от числа ядер окружения, см. рис.5 [18].

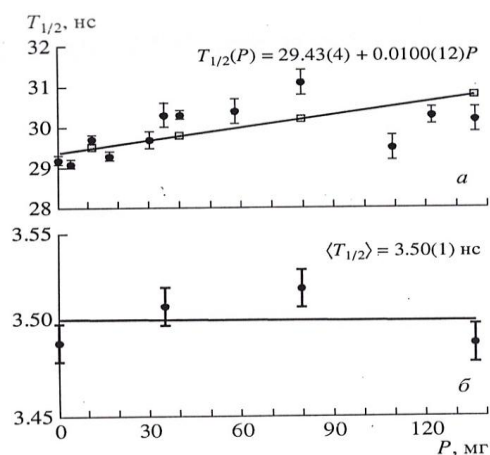


Рис.5. Влияние резонансного окружения на наблюдаемые значения $T_{1/2}$ изомеров ^{161}Dy . а - зависимость $T_{1/2}$ изомера $^{161m1}\text{Dy}$ от веса P добавки $^{161}\text{Dy}_2\text{O}_3$; б - аналогичная зависимость $T_{1/2}$ изомера $^{161m2}\text{Dy}$

Во второй части главы 4 описывается база данных ISOTIME и интерфейс к ней [19]. Она создана на основе файла ENSDF и содержит свойства ядерных состояний с известными временами жизни, включая ссылки на реакции, в которых данное состояние возбуждается, моды распада, характеристики γ -переходов, идущих с данного состояния. С помощью этой базы данных проведено систематическое изучение свойств ядерных состояний, имеющих определенное (известное) время жизни.

Сравнение файлов ENSDF версий 2007 года и 2017 года по отношению к представленной в них информации о характеристиках ядерных уровней с известным временем жизни, показывает динамику развития наших представлений в этой области за последние 10 лет.

В третьей части главы 4 с помощью базы ISOTIME систематически исследованы времена жизни ядерных состояний с точки зрения экспериментальной погрешности или неопределённости значений времени жизни. Показано, что распределение значений времен жизни по первой значащей цифре является не однородным, а подчиняется закону Бенфорда, рис. 6. Это свойство может быть использовано при оценке качества экспериментального определения ядерных времен жизни.

В четвертой части главы 4 систематизированы ядерные изомерные состояния [20], как состояния с отличной от нуля энергией возбуждения и временем жизни, заметно превышающем «одночастичные» оценки, см. таблицу 2. Для определённости выбраны изомерные состояния с временем жизни больше 1 с. По своей структуре и свойствам ядерные изомеры условно разбиты на четыре класса. Выделены основные моды распада и каналы возбуждения изомерных состояний ядер.

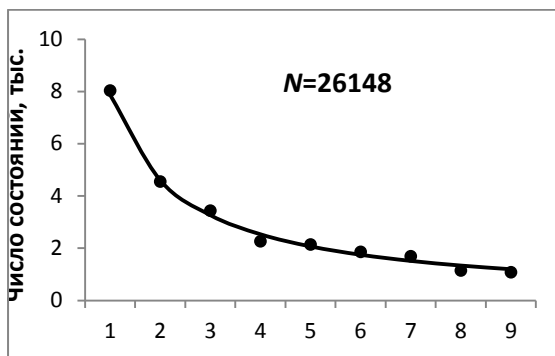


Рис. 6. Распределение времен жизни $T_{1/2}$, сек, по первой значащей цифре

Таблица 2.

Распределение числа ядерных изомеров по времени жизни

	Число изомеров	Число нуклидов
$T_{1/2} > 1 \text{ с}$	605	548
$T_{1/2} > 10^{-3} \text{ с}$	862	747
$T_{1/2} > 10^{-6} \text{ с}$	1295	1018
$T_{1/2} > 10^{-9} \text{ с}$	4003	1631

Пятая часть главы 4 содержит основные результаты и выводы, относящиеся к систематике ядерных времен жизни.

Пятая глава, состоящая из четырех частей, посвящена решению прикладной задачи использования файла ENSDF в ядерно-физических методах элементного и изотопного анализа и нейтронного облучения.

В *первой части* главы 5 описана специализированная база данных NAADB для нейтронно-активационного анализа. В ней сосредоточены ядерные данные с учетом специфики их использования в изотопном анализе [21]. Она содержит все данные об излучениях и взаимных превращениях ядер, имеющиеся в файле ENSDF, и дает характеристики излучений ядер, получающихся в цепочке распада продуктов реакции нейтронного захвата.

Во *второй части* проведено моделирование активности и спектров гамма-излучения радионуклидов, возникающих при облучении вещества

нейтронами. Изменение числа N_i нуклидов типа i при нейтронном облучении описывается системой дифференциальных уравнений

$$\frac{dN_i}{dt} = \sum_{j \neq i} A_{ji} N_j - B_i N_i \quad (7)$$

где для процесса захвата

$$A_{ji} = a_{ji} + b_{ji}, \quad B_i = \sum_{j \neq i} (a_{ij} + b_{ij}), \quad (8)$$

а для процесса распада

$$A_{ji} = b_{ji}, \quad B_i = \sum_{j \neq i} b_{ij} \quad (9)$$

Коэффициент a_{ji} определяет вероятность (скорость) образования нуклида i из нуклида j в результате ядерной реакции $a_{ji} \neq a_{ij}, a_{ij} = 0, b_{ij}$ – вероятность распада ядра i в $j, b_{ij} \neq b_{ji}, b_i = \sum_{j \neq i} b_{ij}$ – полная вероятность распада ядра i . Коэффициенты b_{ij} и b_{ji} в (7-9) равны, соответственно, $b_{ij} = r_{ij} \cdot \lambda_i, b_{ji} = \lambda_i$, где λ_i – постоянная распада ядра i, r_{ij} – коэффициент ветвления, т.е. отношение числа распадов ядра i в ядро j к полному числу распадов ядра i .

Число ядер N_{ji} нуклида Z_{Ai} на момент окончания облучения может быть получено путем решения системы (7) при начальных условиях:

$$N_{0i} = P_Z \cdot K_{Ai} \cdot 6.022 \cdot 10^{21} / A_i, \quad (10)$$

где P_Z – вес облучаемого элемента в граммах; A_i – массовое число изотопа i, K_{Ai} – процентное содержание изотопа i в естественной смеси элемента Z . Активность нуклида в момент времени t определяется как

$$J_\gamma = N_{ii} \cdot \lambda_i. \quad (11)$$

Интенсивность γ -линии в распаде ядра i $I_\gamma = J_\gamma \cdot \varepsilon_\gamma$, где, ε_γ – квантовый выход данной γ -линии.

Описанная процедура вычисления активностей радионуклидов дает возможность:

- рассчитывать активности при облучении с перерывами;
- вычислять не только активности ядер, образующихся непосредственно в (n, γ) реакции, но и всех нуклидов, образующих цепочку распада;
- создавать актуальный справочник гамма-излучения для данного процесса.

В качестве примера приведено решение задачи о трансмутации ^{129}I в нейтронном потоке. На рис.7 представлена цепочка превращений при трансмутации ^{129}I в нейтронном потоке, а на рис.8 – результат моделирования данной цепочки превращений. Из представленных графиков изменения содержания стабильных ядер цепочки в зависимости от полного нейтронного потока можно видеть, как радиоактивный ^{129}I превращается в стабильные изотопы Хе. Полное выгорание ^{129}I при потоке $1 \cdot 10^{15}$ тепловых нейтронов соответствует времени облучения $1.5 \cdot 10^8$ секунд, это порядка

3.17 лет. Причем выгорание более 90% произойдет при времени облучения порядка $8 \cdot 10^7$ секунд или за время порядка 2.5 лет.

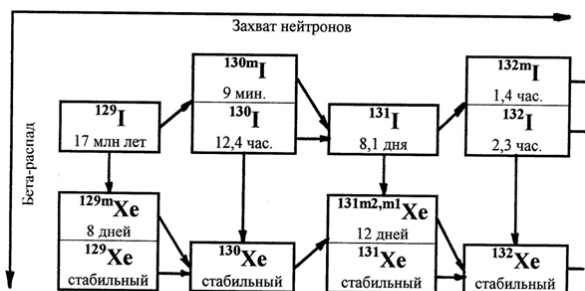


Рис. 7. Ядерные реакции при трансмутации ^{129}I в нейтронном потоке

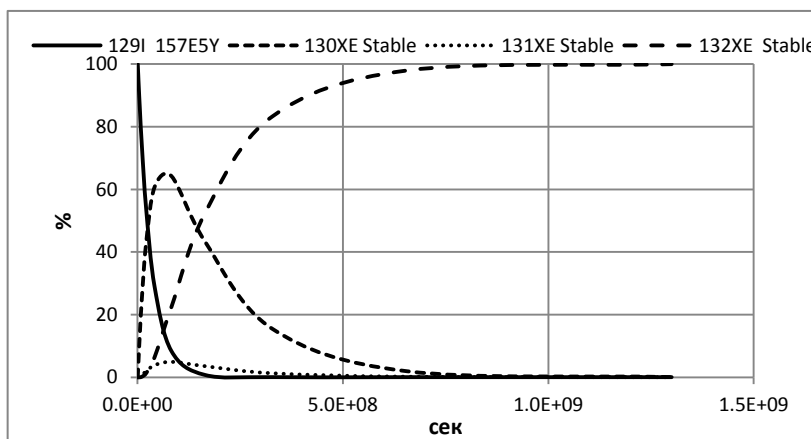


Рис. 8. Трансмутация ^{129}I в потоке тепловых нейтронов $1 \cdot 10^{15}$

В третьей части главы 5 описана справочная система ELENA [7, 22], которая является этапом информационного обеспечения исследований с нейтронами в ПИЯФ. Она ориентирована на описание радиационных свойств ядер, возникающих при облучении нейтронами.

В четвертой части описана база данных MasCa [8], предназначенная для получения информации о характеристиках ядра, связанных с его массой. Она используется для вычисления и графического представле-

ния масс атомных ядер, энергий связи, энергий отделения частиц и ядерных распадов, энергетических параметров ядерных реакций на основе таблиц атомных масс⁹.

В пятой части сформулированы основные результаты и выводы этой главы.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ ДИССЕРТАЦИИ

1. В диссертации файл ядерных данных ENSDF представлен в виде реляционной базы данных, позволяющей проводить глобальный анализ развития наших представлений о структуре ядра и свойствах радиоактивного распада. Для решения поставленных задач предложен метод создания специализированных баз данных на основе файла ENSDF и комплекса программ для работы с ядерными данными. Такое представление ядерных данных допускает использование современных информационных технологий для выбора необходимых для прикладной задачи ядерных данных.

2. Создана база данных ANGTOL для систематического анализа схем ядерных уровней, размещения электромагнитных переходов и вычисления энергий возбуждённых состояний. На ее основе оптимизированы ряд схем ядерных уровней, предложен новый метод анализа качества размещения переходов с помощью ритцевских комбинаций, исследована частотность появления значащих цифр в значениях энергий уровней и переходов. Предложен новый критерий оценки качества информации на основе закона Бенфорда.

3. В базе данных ROTAN выделены из спектров возбуждённых состояний вращательные полосы деформированных ядер. Предложено обобщение модели переменного момента инерции для нечетно-нечетных ядер с учетом сигнатурных эффектов. На основе феноменологических моделей проведен анализ энергий вращательных уровней и представлена систематика модельных параметров. На основе этого анализа предложены методы реконструкции вращательных полос.

4. Усовершенствован алгоритм обработки спектров задержанных совпадений и создана программа TSpectr для определения времени жизни ядерных состояний. Обработка экспериментальных данных с ее помощью позволила определить периоды полураспада изомерных состояний ^{161}Dy . Показано, что наблюдаемое время жизни этих состояний за счет эффекта Мессбауэра зависит от резонансных условий, создаваемых в окружении ядра. Это подтвердило ранее открытое явление для изомеров в ^{119}Sn .

⁹ W.J. Huang, G. Audi, Meng Wang, F.G. Kondev, S. Naimi, Xing Xu. The Ame2016 atomic mass evaluation Chinese Physics C. Vol. 41, No. 3 (2017) 030002, 344 p.,

5. Для систематического изучения ядерных времен жизни создана база данных ISOTIME, которая содержит информацию о свойствах состояний с измеренным временем жизни. Показана неоднородность распределения первых значащих цифр в значениях ядерных времен жизни. Такая неоднородность, соответствует закону Бенфорда и подобна энергетическим распределениям. Она связана с «лог-нормальным» распределением величин ядерных периодов полураспада. Из множества возбужденных состояний выделены ядерные изомеры, и систематизированы их свойства. Для приложений может быть полезна информация о распадных свойствах изомеров и каналах их возбуждения.

6. На основе математической модели активации и распадов при облучения вещества нейтронами создана программа MIR. Она позволяет оценить изменение активности во времени и получить актуальный справочник по гамма-излучению, сопровождающему процесс облучения и выдержки. Программа позволяет уточнять параметры ядерных превращений в нейтронных потоках. В частности, в ней количественно воспроизведено рекордно большое сечение нейтронного захвата ядром ^{88}Zr по измерениям активностей в разные моменты времени. Создана справочно-информационная система, поддерживающая проведение ядерно-физических методов анализа состава вещества и используемая при оценке ядерных данных.

СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ АВТОРА ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. Лисин С.С., Родионов А.А., Шуляк Г.И. Программа REdit – контекстно-ориентированный редактор для файлов с регулярной структурой: свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2013617336 от 09 августа 2013г. -Бюллетень Роспатента №9,2013.
2. Митропольский И.А., Кабина Л.П., Лисин С.С. База данных RENSDB – реляционное представление оцененных ядерных данных из ENSDF : свидетельство о государственной регистрации базы данных №2016621129 от 17августа 2016г.- Бюллетень Роспатента №9,2016.
3. Митропольский И.А., Кабина Л.П., Лисин С.С. База данных для оценки размещений гамма-переходов в схемах ядерных уровней: свидетельство о государственной регистрации базы данных №2019621007 от 07 июня 2019г.- Бюллетень Роспатента №6, 2019.
Митропольский И.А., Кабина Л.П., Лисин С.С. Программа оценки схем ядерных возбужденных состояний на основе ритцевских комбинаций: свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2020610321 от 13 января 2020г.- Бюллетень Роспатента №1, 2020.

4. Митропольский И.А., Кабина Л.П., Лисин С.С., Тюкавина Т.М. Программа BARON – инструмент для анализа и модельного описания ядерных вращательных полос : свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2014618686 от 28.августа 2014.- Бюллетень Роспатента №9, 2014.
Митропольский И.А., Кабина Л.П., Лисин С.С., Тюкавина Т.М. Проблемно-ориентированная база ROTAN для анализа вращательных состояний атомных ядер: свидетельство о государственной регистрации базы данных №2013620994 от 23 августа 2013г. – Бюллетень Роспатента №9,2013.
Митропольский И.А.,Кабина Л.П, Лисин С.С Программа – интерфейс пользователя к базе данных ROTAN: свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2015614692 от 23 апреля 2015г. – Бюллетень Роспатента №5, 2015.
5. Кабина Л.П., Лисин С.С., Федорова Э.И. Программный комплекс для определения времени жизни ядерных уровней методом прямой декомпозиции спектров задержанных совпадений: свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2013619755 от 14 октября 2013.- Бюллетень Роспатента №12, 2013.
Митропольский И.А., Кабина Л.П., Лисин С.С. Проблемно-ориентированная база данных ISOTIME времена жизни и свойства изомерных состояний атомных ядер: Свидетельство о государственной регистрации базы данных №2016620544 от 27апреля 2016г. – Бюллетень Роспатента №5, 2016.
Митропольский И.А., Кабина Л.П., Лисин С.С. Программа – интерфейс пользователя к базе данных ISOTIME по временам жизни и свойствам изомеров атомных ядер: Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2016614848 от 06мая 2016г. - Бюллетень Роспатента №6, 2016.
6. Кабина Л.П., Лисин С.С., Митропольский И.А Программа MIR – расчет активностей и спектров гамма-излучения радионуклидов, возникающих при облучении вещества нейтронами : свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2015618707 от 14 августа 2015г. – Бюллетень Роспатента №9, 2015.
7. Кабина Л.П., Лисин С.С., Митропольский И.А. Программа ELENA, описывающая радиационные свойства элементов и изотопов для нейтронного анализа вещества: свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2014611564 от 05 февраля 2014г. – Бюллетень Роспатента №2, 2014.
8. Кабина Л.П., Лисин С.С., Митропольский И.А. База данных масс атомных ядер, энергий связи, энергий отделения частиц и ядерных распадов,

- энергетических параметров ядерных: свидетельство о государственной регистрации №2017620770 от 14 июля 2017г. – Бюллетень Роспатента №7, 2017.
- Кабина Л.П., Лисин С.С., Митропольский И.А. Программа-интерфейс MasCa для вычисления и графического представления данных по массам атомных ядер, энергиям связи, энергиям отделения частиц и ядерных распадов, энергетических параметров ядерных реакций: свидетельство о государственной регистрации №2017615009 от 02мая 2017г. – Бюллетень Роспатента №5, 2017.
9. Кабина Л.П., Лисин С.С., Митропольский И.А., Тюкавина Т.М. Опыт использования объектно-реляционных баз данных как инструмента содержательного анализа больших массивов ядерных данных // Тезисы докладов 59 международной конференции по проблемам ядерной спектроскопии и структуре атомного ядра, Чебоксары, 2009. - С.344.
- Кабина Л.П., Лисин С.С., Митропольский И.А. Проблемно-ориентированные базы данных как инструмент анализа больших массивов ядерных данных // сообщение ПИЯФ-2897, 2012. -17с.
10. Кабина Л.П., Лисин С.С., Митропольский И.А. Систематика энергий ядерных гамма-переходов // тезисы докладов 60 международной конференции по проблемам ядерной спектроскопии и структуре атомного ядра, Санкт-Петербург, 2010. - С.76.
11. Кабина Л.П., Лисин С.С., Митропольский И.А. Анализ оцененных данных о структуре ядра // тезисы докладов 56 международной конференции по проблемам ядерной спектроскопии и структуре атомного ядра, Саров, 2006, С. 79. // Известия РАН, сер. физическая, 2007. - т.71, С.1676-1681.
12. Кабина Л.П., Лисин С.С., Митропольский И.А. Проблемноориентированные базы данных на основе ENSDF и систематика ядерных данных // Вопросы атомной науки и техники. Серия: Ядерно-реакторные константы, вып. 5, 5:2, 2015. - С.11-22.
13. Kabina L.P., Khazov Yu.L., Lisin S.S., Mitropolsky I.A., Rodionov A.A. The value of χ^2 as the criterion of quality of the placement of transitions in the level scheme // Тезисы докладов 60 международной конференции по проблемам ядерной спектроскопии и структуре атомного ядра, Санкт - Петербург, 2010 - С.405.
- Кабина Л. П., Лисин С. С., Митропольский И. А., Родионов А. А., Хазов Ю. Л. Об использовании критерия χ^2 для оценки качества размещения переходов в схеме уровней // Известия РАН. сер. Физ. – 2011. - том 75 - № 7. - С. 1061–1063.
14. Kabina L.P., Lisin S.S, Mitropolsky I.A. The use of Ritz combinations for the analysis of nuclear level schemes. //Тезисы докладов 64 международ-

- ной конференции по проблемам ядерной спектроскопии и структуре атомного ядра, Минск, 2014. - С.237.
- Кабина Л.П., Лисин С.С., Митропольский И.А. Оценка схем ядерных возбужденных состояний на основе ритцевских комбинаций // Сообщение ПИЯФ-3044, 2019. - 24с.
15. Kabina L.P., Lisin S.S., Mitropolsky I.A. Evaluated nuclear structure data analysis // Meeting of the Nuclear Structure and Decay Data Network, Saint-Petersburg, Russia, June 11-15, 2007, http://nrd.pnpi.spb.ru/NSDD/Technical_discussions/technical_discussions.html (Дата обращения 19.12.2019)
- Кабина Л.П., Лисин С.С., Митропольский И.А. О частотности появления значащих цифр в ядерных данных // Тезисы докладов 58 международной конференции по проблемам ядерной спектроскопии и структуре атомного ядра, Москва, 2008. - С. 300.
16. Кабина Л.П., Лисин С.С., Митропольский И.А., Тюкавина Т.М. Программа BARON – инструмент для оценки и модельного описания ядерных вращательных полос // Сообщение ПИЯФ-3001, 2016. - 17 с.
17. Кабина Л.П., Лисин С.С., Логинов Ю.Е., Федорова Э.И. Программа анализа спектров задержанных совпадений в среде WINDOWS // тезисы докладов 61 международной конференции по проблемам ядерной спектроскопии и структуре атомного ядра, Саров, 2011. - С. 217.
- Лисин С.С. Программный интерфейс для обработки временных ядерных спектров // Сборник аннотаций работ 9-й Курчатовской молодежной научной школы, Москва, 2011. - С.164.
- Кабина Л.П., Лисин С.С., Логинов Ю.Е., Федорова Э.И. Программа анализа спектров задержанных совпадений в среде WINDOWS // сообщение ПИЯФ-3018, 2018. - 12 с.
18. Логинов Ю.Е., Зиновьев В.Г., Кабина Л.П., Лисин С.С., Малютенков Э.И. Распад изомеров $^{161\text{m1,m2}}\text{Dy}$ в условиях резонансного (мессбауэровский экран) окружения // Ядерная физика, том 76, №6, 2013. - С.715-718.
19. Кабина Л.П., Лисин С.С., Митропольский И.А. База данных и пользовательский интерфейс по временам жизни ядерных состояний // 66-я международная конференция по проблемам ядерной спектроскопии и структуре атомного ядра «Ядро-2016». Тезисы. – Саров; ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», 2016. - С.161
20. Л.П.Кабина, С.С.Лисин, И.А. Митропольский Структура и свойства ядерных изомеров // 67-я международная конференция по проблемам ядерной спектроскопии и структуре атомного ядра «Ядро-2017». Тезисы. – Алмааты, Республика Казахстан; 2017, С.115.

21. Kabina L.P., Lisin S.S, Mitropolsky I.A., Rodionov A.A. Relational database NAADB for the neutron-activation analysis purposes // тезисы докладов 60 международной конференции по проблемам ядерной спектроскопии и структуре атомного ядра, Санкт -Петербург, 2010, р.362.
22. Кабина Л.П., Лисин С.С., Митропольский И.А. Справочная система ELENA: данные о радиационных свойствах элементов и изотопов для рентгеновского и нейтронного анализа // Вопросы атомной науки и техники. Серия: Ядерно-реакторные константы, 2016, вып. 4, 4:1, с.8-14
Kabina L.P., Lisin S.S, Mitropolsky I.A. The code ELENA: radiation properties of elements and isotopes for the analysis with neutrons // тезисы докладов 64 международной конференции по проблемам ядерной спектроскопии и структуре атомного ядра, Минск, 2014, р.236.
Л.П.Кабина, С.С.Лисин, И.А.Митропольский Справочная программа ELENA: радиационные свойства элементов и изотопов для нейтронного анализа вещества // сообщение ПИЯФ, 2942(2014), 16 с.
23. Lisin S.S., Rodionov A.A. The Editor Redit for the ENSDF Format Files // Report PNPI-2850. Gatchina, 2010. – 10 p.
Лисин С.С., Родионов А.А. Новая версия редактора REdit для файлов формата ENSDF. //Тезисы докладов 61 международной конференции по проблемам ядерной спектроскопии и структуре атомного ядра, Саров,2011. - С. 273.
24. Лисин С.С. Специализированные базы данных и интерфейсы к ним для исследований в области ядерной спектроскопии и структуры ядра // Сборник тезисов IV ежегодного Молодежного научного форума OpenScience 2017, Гатчина, 2017, С.12.