

ИНСТРУМЕНТЫ НАУЧНОГО СЕРВИСА — БАЗЫ ЯДЕРНЫХ ДАННЫХ — КАК ИСТОЧНИКИ НОВОГО ЗНАНИЯ

В.В. Варламов, С.Ю. Комаров, Н.Н. Песков, М.Е. Степанов

В течение ряда лет в Центре данных фотоядерных экспериментов Научно-исследовательского института ядерной физики имени Д.В.Скобельцына Московского государственного университета имени М.В.Ломоносова как в сетевом центре ядерных данных [1] в рамках международной Сети центров ядерных данных МАГАТЭ [2] создано несколько больших (репрезентативных) реляционных баз ядерно-физической информации. Эти работы поддерживались грантами РФФИ (№№ 99-07-90015, 03-07-90431, 05-07-90329, 09-02-00368), грантом Президента РФ № НШ-1619.2003.2 для поддержки ведущих научных школ, грантом поддержки ведущих научных школ 02.120.21.485-НШ, контрактом 02.740.11.0242 по мероприятию 1.1 «Проведение научных исследований коллективами научно-образовательных центров».

Базы данных (БД) ЦДФЭ, функционирующие в среде Интернет (<http://cdfe.sinp.msu.ru>), подробно описанные в [1], содержат огромное количество разнообразных сведений об атомных ядрах и о процессах (ядерных реакциях и радиоактивных распадах), в которых ядра превращаются друг в друга, и снабжены гибкими и мощными поисковыми системами (в отдельных случаях — оригинальными, не имеющими аналогов), позволяющими осуществлять быстрый и эффективный поиск необходимой информации. Несколько БД связаны друг с другом, что обеспечивает возможности объединенного поиска различных данных, находящих широкое применение в фундаментальных и прикладных научных исследованиях, а также в учебном процессе подготовки специалистов достаточно широкого профиля [3]. Это решает одну из главных задач научного сервиса — задачу информационного обеспечения исследователей и специалистов, то есть организации для них эффективного доступа к данным и знаниям, накопленным ранее, с целью создания им комфортных условий для получения новых данных и знаний.

Вместе с тем, исследования, выполненные в ЦДФЭ с использованием возможностей созданных БД, показали, что они представляют собой средства не только информационного обеспечения научных исследований, но и собственно исследований. Одновременный доступ к огромному количеству разнообразных данных и гибкие возможности поиска позволяют на всю совокупность информации посмотреть под единым определенным углом зрения и задать этой совокупности данных вопросы, которые без этих возможностей никому «не приходили в голову». Ответы на такие вопросы, которые естественно также никому в голову не приходили, представляют собой, по существу, новые данные, новую информацию, а в конечном счете — новое знание. Зачастую даже относительно простая системная обработка известных результатов порождает (более правильно — «выявляет») принципиально новую физическую информацию, которая до выполнения обработки таких (часто — тривиальных) запросов в используемых базах данных отсутствовала (по крайней мере, в явном виде), а следовательно представляет собой неизвестные ранее результаты. Некоторые результаты такого подхода были представлены в [4, 5]. Настоящий доклад посвящен его развитию.

1. Новые характеристики атомных ядер.

1.1 Определение спина J верхнего одночастичного состояния ядра без проведения сложных и дорогих экспериментов.

Спин верхнего одночастичного состояния — очень важная характеристика ядра, определяющая, прежде всего числа нуклонов и вакансий на этом состоянии, а кроме того — возможности осуществления различных реакций, приводящих к различным состояниям конечных ядер. Для определения числа нуклонов ядерного состояния исследуют реакции нуклонного подхвата, то есть такие, в которых налетающая частица подхватывает с исследуемого состояния нуклон, а с для определения числа вакансий на состоянии — реакции срыва, то есть такие, в которых с налетающей частицы срывается нуклон и «садится» на исследуемое состояние. Характеристики передаваемых нуклонов прямо связаны со спином состояния, но в случае неполяризованных налетающих частиц дают возможность определения лишь пары ($\pm 1/2$) значений, отличающихся на 1. А поскольку такие измерения достаточно сложны, то во многих случаях значения спина остаются вообще неизвестными. Однако использование систематик — простых выборок из БД по структуре ядер (<http://cdfe.sinp.msu.ru/services/ensdfr.html>) — соответствующих распределений вероятностей возбуждения в таких реакциях состояний с разными спинами выявляет четкую закономерность, позволяющую однозначно интерпретировать значения спина — например, выбрать значение $3/2$ из пары $(1/2, 3/2)$ для ядра ^{47}V , $5/2$ из пары $(5/2, 7/2)$ для ядра ^{51}Mn , и т. п., а в некоторых случаях оценить значения, которые были неизвестны, например, $3/2$ для ядра ^{55}Mn .

Таким образом системный анализ простых выборок данных из БД позволяет достаточно точно и надежно оценивать значения спинов одночастичных состояний ядер без проведения сложных долгих и дорогих экспериментов на пучках поляризованных частиц.

1.2 Данные об энергиях и заселенностях одночастичных ядерных состояний из систематик распределений спектроскопических сил одночастичных состояний.

Эксперименты по исследованию реакций нуклонного срыва и подхвата, как правило, проводятся независимо один от другого, каждый со своими систематическими погрешностями, приводящими к расхождениям данных, которые во многих случаях существенно превосходят по величине достигаемые статистические точности результатов. Однако, совершенно очевидно, что количество нуклонов, располагающихся на конкретной оболочке ядра, исследуемое в реакциях подхвата, и количество вакансий на этой же оболочке, которое исследуется в реакциях срыва, связаны между собой жестким квантово-механическим условием для соответствующих спектроскопических сил (или факторов) $S^+(E) + S^-(E) = 2J + 1$. С использованием этого обстоятельства в принципе простой метод взаимного согласования информации из упомянутой выше БД по структуре ядер, относящейся к реакциям нуклонного срыва и подхвата на одном и том же ядре позволяет существенно (от десятков до единиц процентов) повысить точность ядерно-спектроскопических данных. А такие новые точные значения спектроскопических сил в свою очередь, позволяют использовать их для определения впервые уникальной информации об энергетических положениях и заселенностях нуклонами одночастичных состояний ядер $^{40,42,44,46,48,50,52,54}\text{Ca}$, $^{50,52,54}\text{Cr}$, $^{54,56,58}\text{Fe}$, $^{58,60,62,64}\text{Ni}$, $^{90,92,94,96}\text{Zr}$, $^{112,114,116,118,120,122,124}\text{Sn}$ и многих других, впервые исследовать целый ряд новых эффектов и получить целый ряд новых физических результатов.

Таким образом, совместный анализ простых выборок данных из БД позволяет получать информацию о характеристиках ядерных состояний, которую иным способом извлечь из экспериментально измерившихся величин не представлялось возможным.

1.3 Существование новых магических ядер из распределений энергии E первого (нижайшего) уровня со спином $J = 2^+$.

Энергия такого уровня — одна из самых очевидных и ярких характеристик ядер, которые называют магическими, то есть таких, которые по своим свойствам с (сферическая форма (меньшая деформация), меньшие размеры, большая плотность, большие энергии отделения распадов, ...) существенно отличаются от соседних. У магических ядер энергия таких состояний, намного превышает их энергию в соседних ядрах. Вот, как, например, выглядит последовательность значений энергий таких уровней у изотопов кальция, среди которых два — ^{40}Ca и ^{48}Ca — являются хорошо известными дважды-магическими ядрами: ^{36}Ca — 3029, ^{40}Ca — 18260, ^{44}Ca — 6146, ^{48}Ca — 13475, ^{52}Ca — 2563. Магичность ядра связана с заполнением определенных оболочек протонами (Z) или нейтронами (N), двойная магичность — одновременно теми и другими. Известны 7 классических магических чисел — 2, 8, 20, 28, 50, 82, 126. В координатах E-Z-N магические ядра образуют «великие стены» вдоль магических значений Z и N, дважды-магические - «башни» на пересечениях «стен».

Тривиальная выборка из созданной БД по структуре ядер значений E выявляет 2 неожиданных существенных обстоятельства.

- 1) В «великих стенах» энергий E имеются бреши, то есть существуют ядра, у которых число протонов или число нейтронов являются магическими, а ядро магических свойств не проявляет.
- 2) Кроме классических «великих стен» имеются «острова», то есть существуют ядра, которые проявляют магические свойства в случаях, когда ни число протонов ни число нейтронов в них не являются традиционными магическими.

Аналогичные выборки из БД параметров формы и размеров ядер и других также демонстрируют очевидно магическое поведение таких ядер — меньшая деформация, меньшие размеры, характерные особенности в энергиях отделения нуклонов и т.п.).

Анализ (опять же с помощью информации из БД) характеристик верхних (вблизи границы Ферми) оболочек и подоболочек таких ядер выявляет некоторую существенную общую закономерность структуры таких состояний, позволяющую объяснить не только исчезновение в отдельных случаях классической магичности, но и существование новых дважды магических ядер (которых уже обнаружено достаточно много — ^{14}C , $^{14,24,28,40,48}\text{O}$, ^{30}Si , ^{30}S , ^{54}Ca , ^{96}Sr , ^{96}Zr): рассматривается наличие некоторого дополнительного взаимодействия между заполненными протонными и нейтронными оболочками, возможно связанного с эффектами протон-нейтронного спаривания.

1.4 Особенности формы ядер в основных состояниях из систематики параметров квадрупольной деформации.

Для описания формы ядра используется специальный параметр — параметр квадрупольной деформации, характеризующий отклонение этой формы от сферической. Для его определения применяются два способа, один из которых использует данные о квадрупольном моменте ядра, то есть описывает, по существу, статическую деформацию ядра, а другой — данные о соотношении вероятностей особо определенных переходов (из основного состояния — в первое возбужденное состояние с $J^\pi = 2^+_{1/2}$) в ядре, то есть описывает динамическую деформацию ядра. Создание БД «Карта параметров формы и размеров ядер»

(<http://cdfе.sinp.msu.ru/services/radchart/radmain.html>) выявило весьма интересную особенность систематизированных данных: все исследованные ядра достаточно четко могут быть распределены по двух группам. Для ядер первой из них (изотопы Ti, Cr, Zr, Nd, Sm, Gd, Dy, Er, W, Os, Ra) данные, полученные обоими способами практически совпадают, для ядер другой группы (C, Si, Ar, Ca, Fe, Ni, Zn, Ge, Se, Kr, Sr, Mo, Ru, Pd, Cd, Sn, Te, Ba, Yb, Hf, Pt, Pb) эти данные существенно (в разы) различаются.

Таким образом, простая систематика данных из БД выявляет наличие разных типов деформации ядер и ставит вопрос о природе динамической деформации — своеобразных «нулевых» колебаний ядра в основном состоянии.

2. Новые характеристики ядерных реакций.

2.1 Устранение систематических расхождений данных о сечениях фотоядерных реакций с помощью систематик.

Специалистам по фотоядерным реакциям давно и хорошо известен факт заметных расхождений, как по форме, так и по величине, энергетических зависимостей сечений реакций, полученных в разных экспериментах (наибольшее распространение получили эксперименты двух типов – на пучках тормозного γ -излучения и квазимоноэнергетических аннигиляционных фотонов, в которых формы эффективного спектра фотонов, вызывающих реакцию, существенно различны). Многочисленные ранние попытки выяснить причины таких расхождений и разработать методы для их устранения, предпринимаемые самими экспериментаторами, выполнялись в рамках различных подходов и во многих случаях приводили к диаметрально противоположным рекомендациям.

Созданная БД по ядерным реакциям (<http://cdfе.sinp.msu.ru/exfor/index.php>) позволила выполнить системный анализ зависимостей расхождений различного типа от формы спектра налетающих фотонов, условий проведения экспериментов, методов обработки и интерпретации данных. На основе различных систематик данных были предложены методы приведения результатов различных экспериментов к единой интерпретации, получения новых точных и надежных согласованных между собой данных.

Тем самым, простые систематизации наблюдавшихся расхождений результатов экспериментов позволили выявить их четкие зависимости от тех или иных условий проведения экспериментов. А учет влияния таких условий позволил, по существу, устранить проблему известных систематических расхождений.

2.2 Однозначный контроль ненадежности (недостоверности) экспериментальных данных о сечениях фотоядерных реакций с помощью простейших комбинаций данных из БД.

Гигантский дипольный резонанс — мощный широкий ярко выраженный резонанс в сечении фотопоглощения, то есть в реакции взаимодействия налетающих фотонов с ядром, в котором фотон перестает существовать, поглощается ядром, которое переходит в возбужденное состояние, которое распадается с образованием различных других частиц — нейтронов, протонов, дейтронов, тритонов, α -частиц, кластеров, фрагментов деления. Сечения возможных реакций с образованием разных продуктов, так называемых парциальных, представляют особый интерес, поскольку несут в себе информацию о механизмах электромагнитных взаимодействий, конкуренции различных каналов распада ГДР. Среди них главное внимание уделяется реакциям с образованием одного и двух нейтронов (γ, n) и ($\gamma, 2n$), поскольку для большинства ядер именно такие реакции происходят с наибольшей вероятностью. Поскольку в определенных достаточно широких интервалах энергий фотонов сечения этих реакций пересекаются, существуют значительные трудности в определении того, к какой именно реакции относится детектируемый в эксперименте нейтрон — проблема определения так называемой множественности. Суть ее в том, что без специальных нетривиальных экспериментальных ухищрений каждый нейтрон из реакции ($\gamma, 2n$) будет зарегистрирован отдельно, что приведет к удвоению вклада реакции. Предпринятые экспериментаторами различные ухищрения приводят к очень большому расхождению данных о сечениях таких парциальных реакций явно систематического характера. Так, например, известно, что для двух разных методов определения множественности в двух лабораториях, в одной из них сечения реакций (γ, n) оказываются заметно большими, чем в другой, а сечения реакций ($\gamma, 2n$) напротив — меньшими. В такой ситуации вопрос о надежности данных стоит очень остро.

Упомянутая выше БД по ядерным реакциям позволяет выработать простой и предельно эффективный критерий анализа надежности (точнее, ненадежности) экспериментальных данных. Для этого достаточно построить функцию множественности $F_2 = \sigma(\gamma, 2n)/\sigma(\gamma, xn) = \sigma(\gamma, 2n)/[\sigma(\gamma, n) + 2\sigma(\gamma, 2n) + 3\sigma(\gamma, 3n) + \dots]$ — отношение сечений одной из парциальных реакций ($\gamma, 2n$) и полной реакции, непосредственно исследуемой в эксперименте. Значения функции F_2 по определению не могут принимать величин, больших 0.5. Ситуация « $F_2 > 0.5$ » для экспериментальных данных однозначно свидетельствует о ненадежности данных о сечениях обеих парциальных реакций - неоправданной (недостоверной, ошибочной) «перекачке» части нейтронов из канала (γ, n) в канал ($\gamma, 2n$).

Тем самым, простая комбинация данных из БД позволяет строго четко и однозначно исследовать надежность и достоверность экспериментальных данных. При установлении ненадежности экспериментальных данных тот же подход позволяет получать (оценивать) надежные данные с помощью использования аналогов

функции F_2 , например, рассчитанных в рамках проверенных теоретически моделей.

В рамках нового подхода оценены сечения реакций (γ, n) и $(\gamma, 2n)$, свободные от обсуждаемых недостатков экспериментальных данных, для ядер ^{75}As , ^{89}Y , ^{90}Zr , ^{115}In , ^{127}I , $^{112,114,116,117,118,119,120,122,124}\text{Sn}$, ^{133}Cs , ^{159}Tb , ^{165}Ho , ^{181}Ta , ^{197}Au , ^{208}Pb .

2.3 Определение с помощью БД параметров гигантского дипольного резонанса (ГДР), получение которых в эксперименте сильно затруднено (невозможно?).

Специалистам по взаимодействиям гамма-квантов с атомными ядрами хорошо известна проблема описания большой ширины ГДР: современные теоретические модели, успешно справляясь с описанием энергии и амплитуды резонанса, приводят к заниженным значениями его ширины. В этой связи для приближения к описанию реального разброса по энергии дипольных состояний ядер необходимо привлечение дополнительных механизмов взаимодействия γ -квантов с ядрами. В 1987 г. было зарегистрировано открытие (№342, авторы – Б.С.Ишханов, И.М.Капитонов, В.Г.Неудачин, В.Г.Шевченко, П.Н.Юдин), предлагающее в качестве механизма увеличения ширины ГДР так называемое конфигурационное расщепление резонанса. Суть ее заключается в том, что в процессах фоторасщепления ядра могут принимать участие нуклоны, находящиеся на различных оболочках: переходы с внешних оболочек, заполненных лишь частично, происходят при меньших энергиях фотонов, чем переходы из внутренних заполненных оболочек. Экспериментальное исследование такого расщепления представляет собой весьма сложную задачу: необходимо одновременно изучить, какие состояния возбуждаются (сечения), в каких состояниях оказываются конечные ядра (спектры нуклонов), какие оболочки реально «работают» (угловые распределения нуклонов), вследствие чего прямых экспериментальных подтверждений получено относительно немного.

Однако в отдельных случаях возможно исследование роли различных оболочек при формировании и распаде ГДР способом, использующим лишь данные по сечениям реакций из упомянутой выше БД по ядерным реакциям. Так, например, в случае изотопов лития $^{6,7}\text{Li}$ переходы двух предусмотренных концепцией типов различаются весьма характерным образом. Поскольку ядра лития представляют собой 4 нуклона на полностью заполненной оболочке 1s (α -частица) и 2 в ^6Li (или 3 в ^7Li) нуклона на валентных 1p оболочках изотопов, два типа переходов кардинально различаются по отношению к этой «сидящей внутри» α -частицы — в одном она не затрагивается и в явном виде присутствует среди частиц-продуктов, в другом — разваливается и среди продуктов отсутствует. Исследования параметров расщепления ГДР в таком случае становится предельно простым: сечения всех реакций фоторасщепления разбиваются на 2 группы — в одной α -частица присутствует среди продуктов реакций, а в другой нет. Именно таким путем были впервые на основании экспериментальных данных оценены величины расщепления (и соотношения компонент) для изотопов $^{6,7}\text{Li}$ $\Delta E = 10.7$ и 10.8 МэВ ($R = 46.5/53.5$ и $77.0/23.0$), достаточно хорошо согласующиеся с предсказываемыми теорией значениями.

Таким образом, с использованием лишь «раскладывания по двум кучкам (с α -частицей и без нее)» данных о сечениях реакций на ядрах $^{6,7}\text{Li}$ возможно получение информации о ГДР, извлечение которой из экспериментальных данных сопряжено с огромными трудностями.

Приведенные примеры показывают, что современные БД, вопреки достаточно широко распространенному мнению, несмотря на то, что содержат известные (старые) данные, представляют собой не только (точнее — не столько) «склады готовой продукции», сколько новые надежные и достаточно оригинальные источники новых (не известных ранее) данных, новой информации и, в конечном счете, нового знания об окружающей нас действительности.

ЛИТЕРАТУРА:

1. И.Н. Бобошин, В.В. Варламов, С.Ю. Комаров, Н.Н. Песков, М.Е. Степанов, В.В. Чесноков Материалы Всероссийской научной конференции "Научный сервис в сети ИНТЕРНЕТ: многоядерный компьютерный мир", Новороссийск, 24-29 сентября 2007 г., Изд-во Московского Университета, с.318-321
2. N. Otsuka, S. Dunaeva, "International Network of Nuclear Reaction Data Centres" // INDC(NDS)-0401, IAEA, Vienna, Austria, 2010
3. В.В. Варламов, С.Ю. Комаров, Э.И. Кэбин, М.Е. Степанов Материалы Всероссийской научной конференции "Научный сервис в сети ИНТЕРНЕТ: суперкомпьютерные центры и задачи", Новороссийск, 20-25 сентября 2010 г., Изд-во Московского Университета, с.500-503
4. И.Н. Бобошин, В.В. Варламов, С.Ю. Комаров, Н.Н. Песков, М.Е. Степанов, В.В. Чесноков Труды Десятой Всероссийской научной конференции «Электронные библиотеки: перспективные методы и технологии, электронные коллекции», ОИЯИ, Дубна, 7–11 октября 2008 г., Издательство ОИЯИ, с. 259–267.
5. В.В. Варламов, И.Н. Бобошин "Базы данных как метод исследования" // Природа. 2005. № 12. с. 29