



Unidad Académica de Estudios
N U C L E A R E S
Maestría en Ciencias Nucleares

TESIS

DETERMINACIÓN DE COEFICIENTES EN LA FÓRMULA SEMI EMPÍRICA
DE LA MASA PARA ISÓTOPOS RADIATIVOS

PRESENTA

Lic. en Mat. Diego Alberto Dávila López

Para obtener el grado de Maestro en Ciencias Nucleares
con terminal en Ingeniería Nuclear

Asesores

Dr. José Luis Pinedo Vega (UAEN-UAZ)

Dr. Carlos Ríos Martínez (UAEN-UAZ)

Dr. Fernando Mireles García (UAEN-UAZ)

Zacatecas, Zac. Agosto 2019



Consortio de
Universidades
Mexicanas

Of. No. 374/19

Zacatecas, Zac., 19 de agosto del 2019

Lic. en Mat. Diego Alberto Dávila López

Presente


La Unidad Académica de Estudios Nucleares de la Universidad Autónoma de Zacatecas a través del Programa de Maestría en Ciencias Nucleares, comunica a Usted que la Comisión revisora integrada por:

Dr. José Luis Pinedo Vega
Dr. Carlos Ríos Martínez
Dr. Fernando Míreles García
Dr. Valentín Badillo Almaraz
Dr. Eduardo Manzanares Acuña

Revisó y aprobó el trabajo de tesis "**Determinación de coeficientes en la fórmula semi-empírica de la masa para isótopos radiactivos**".

Por lo que está usted facultada por esta Unidad Académica para imprimirlo y realizar los trámites necesarios ante la Rectoría de la Universidad Autónoma de Zacatecas, para la realización de su Examen de Grado.

Atentamente


Dra. Sonia Azucena Saucedo Anaya
Responsable de Programa UAEN



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE ZACATECAS "FRANCISCO GARCÍA SALINAS"

UNIDAD ACADÉMICA DE ESTUDIOS NUCLEARES

Calle Cipres # 10, Fraccionamiento La Peñuela, Col. Centro, Zacatecas, Zac., C.P. 98000, Tel. 01(492) 922 70 43, Ext. 102
Correo Electrónico: idavila@uaz.edu.mx



Asunto: Asignación de tema de tesis

L. en M. Diego Alberto Dávila López
Alumno MCN
Presente

En relación a su comunicado, por medio del cual solicita el tema que deberá desarrollar como su tesis de maestría para obtener el grado de Maestro en Ciencias Nucleares, manifiesto lo siguiente.

Con esta fecha, se reunieron los señores Dr. José Luis Pinedo Vega y Dra. Sonia Azucena Saucedo Anaya, Responsable del Programa de Posgrado de la UAEN y estuvieron acordes en fijar a usted el siguiente

TEMA

“Determinación de coeficientes en la fórmula semi empírica de la masa para isótopos radiactivos”

Lo que comunico a usted para su conocimiento, manifestándole que para la presentación de la TESIS, esta no deberá ser impresa hasta en tanto no envíe siete copias de la misma, para ser revisada por la comisión que se nombra en su oportunidad para su aprobación o en su caso indicarle las correcciones que fueren pertinentes.

ATENTAMENTE
Zacatecas, Zac., a 25 de junio del 2019


Dra. Sonia Azucena Saucedo Anaya
Responsable de Posgrado UAEN



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE ZACATECAS "FRANCISCO GARCÍA SALINAS"

UNIDAD ACADÉMICA DE ESTUDIOS NUCLEARES

Calle Cipres # 10, Fraccionamiento La Peñuela, Col. Centro, Zacatecas, Zac., CP. 98000, Tel. 01(492) 922 70 43, Ext. 102
Correo Electrónico: idavila@uaz.edu.mx

Determinación de coeficientes en la fórmula semi empírica de la masa para isótopos radiactivos

Aprobado por el jurado:

Dr. José Luis Pinedo Vega

Dr. Carlos Ríos Martínez

Dr. Fernando Mireles García

Dra. Consuelo Letechipia de León

Dr. Valentín Badillo Almaraz

Dr. Eduardo Manzanares Acuña

Dedicatoria

A Cecilia Hernández Flores por su motivación a estudiar un posgrado, su apoyo y consejos en estos dos últimos años.

A mis padres por ser un ejemplo de superación, por todo lo que han sacrificado para que yo saliera adelante.

A mis hermanos Andrés, Víctor y en especial a Alberto que me ayudaron mucho en mi vida.

Gracias

Agradecimientos

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología CONACYT por haberme otorgado la beca nacional con la cual pude estudiar este posgrado, a la Universidad Autónoma de Zacatecas por todo lo que he podido crecer personalmente, a la Unidad Académica de Estudios Nucleares, en especial a mi asesor de Tesis el Dr. José Luis Pinedo Vega por haber confiado en mí, además al Dr. Héctor Rene Vega Carrilo y la Dra. Consuelo Letechipia de León, por todos sus aportaciones y consejos para mi trabajo de tesis con los cuales no podría haber terminado. A todos mis profesores a lo largo de mi trayectoria académica que fueron una inspiración para mí. A mis compañeros porque fuimos un grupo muy unido, además a mis amigos que apesar de todo aún seguimos con esta amistad. Y en especial a familia por estar siempre conmigo, por todo su apoyo sin el cual no podría haber llegado hasta aquí.

Resumen

En 1935 Weizsäcker desarrolló la fórmula semi empírica de la masa (FSEM), la FSEM juega un papel importante en el desarrollo de la física nuclear e involucra cinco tipos de energía donde se han realizado modificaciones a estas a lo largo de los años sin embargo, la estructura de la fórmula no ha sufrido cambios significativos hasta fecha. La literatura reporta los cálculos de los coeficientes con los trabajos de Feenberg en 1947, Green en 1954, Fermi en 1945, entre otros. Aunque los coeficientes reportan errores pequeños para algunos isótopos, en general los errores son significativamente grandes, de tal manera que con base en esto, el objetivo del presente trabajo fue calcular en forma simultánea conjuntos de coeficientes para la FSEM, usando dicha ecuación para la energía de enlace en isótopos radiactivos, tratando de reducir el error entre las masas teóricas y las masas experimentales, tomando en consideración (energía de enlace, número másico y número atómico) para isótopos radiactivos. Para el cálculo de lo anterior se empleó el software Mathematica [®] de Wolfram. Se resolvieron sistemas de ecuaciones, los conjuntos de soluciones obtenidos nos proporcionan 4 de los 5 coeficientes utilizados en la FSEM.

Palabras Clave: masa nuclear, fórmula semi empírica de la masa, gota líquida.

Abstract

In 1935 Weizsäcker developed the semi empirical mass formula (SEMF), the SEMF plays an important role in the development of nuclear physics and involves five types of energy where modifications have been made to these over the years, however, the structure of the formula has not undergone significant changes to date. The literature reports the calculations of the coefficients with the works of Feenberg in 1947, Green in 1954, Fermi in 1945, among others. Although the coefficients report small errors for some isotopes, in general the errors are significantly large; therefore, the objective of the present work was to simultaneously calculate sets of coefficients for the SEMF, using this equation for energy of binding in radioactive isotopes, trying to reduce the error between the theoretical masses the experimental masses, taking into consideration the binding energy, the mass number and the atomic number of the radioactive isotopes. To calculate the above, Wolfram's Mathematica ® software was used. Systems of equations were solved, the sets of solutions obtained provide us with 4 of the 5 coefficients used in the SEMF.

Keywords: nuclear mass, semi empirical mass formula, liquid drop

Índice general

Dedicatoria	5
Agradecimientos	6
Resumen	7
Abstract	8
Lista de figuras	11
Lista de tablas	12
1. Introducción	1
2. Revisión de Literatura	5
2.1. Fórmula semi empírica de la masa	5
2.1.1. Energía de volumen	5
2.1.2. Energía de superficie	6
2.1.3. Energía Coulombiana	7
2.1.4. Energía de asimetría	8
2.1.5. Efecto non-par	8
2.1.6. Construcción de la fórmula semi empírica de la masa	9
2.1.7. Radio Nuclear	9
2.1.8. Coeficiente de Tensión Superficial Nuclear	10
2.1.9. Densidad Nuclear	10
2.2. Método para el cálculo de coeficientes simultáneos	11
2.3. Permutaciones	11
2.3.1. Combinatoria	12
2.4. Sistemas de ecuaciones lineales	12
2.4.1. Sistemas de ecuaciones lineales de $m \times n$	12
2.4.2. Sistemas de ecuaciones lineales de 4×4	14
2.5. Mathematica®	14
2.5.1. Introducción	14
2.5.2. Funciones en Física Nuclear	15

<i>ÍNDICE GENERAL</i>	10
2.5.3. Funciones	15
3. Materiales y Métodos	16
3.1. Conformación y selección de una base da datos nucleares para isótopos radiactivos	16
3.1.1. Base de Datos	16
3.1.2. Selección de datos	16
3.2. Cálculo de coeficientes simultáneos	16
3.3. Cálculo de errores	17
4. Resultados y Discusión	18
4.1. Coeficientes y su optimización	18
4.1.1. Isótopos Ligeros β^-	18
4.1.2. Intermedios β^-	21
4.1.3. Ligeros β^+	23
4.1.4. Intermedios β^+	24
4.1.5. Generales	25
4.2. Comparación con otros autores	27
4.2.1. Radio, Densidad y Coeficientes de tensión superficial nuclear .	28
5. Conclusiones	29
6. Trabajos Futuros	31
Bibliografía	31
A. Isótopos Ligeros β^-	36
B. Isótopos Intermedios β^-	37
C. Isótopos Ligeros β^+	38
D. Isótopos Intermedios β^+	39
E. Isótopos Generales	40

Índice de figuras

3.1. Diagrama <i>Mathematica</i> [®]	17
---	----

Índice de tablas

2.1. Comparación de los coeficientes de la fórmula semi empírica (MeV) calculados por diferentes autores.	9
3.1. Clasificación de Isótopos	16
4.1. Coeficientes para isótopos ligeros con decaimiento β^- en unidades MeV.	18
4.2. Errores para β^- en unidades uma	19
4.3. Segundo conjunto de coeficientes para isótopos ligeros con decaimiento β^- en unidades MeV	20
4.4. Segundo conjunto de errores para β^- en unidades uma	21
4.5. Conjuntos de coeficientes para isótopos intermedios con decaimiento β^- en unidades MeV	22
4.6. Conjunto de errores para β^- intermedios en unidades uma	23
4.7. Coeficientes para isótopos ligeros con decaimiento β^+ en unidades MeV y errores en unidades uma	24
4.8. Coeficientes para isótopos intermedios con decaimiento β^+ en unidades MeV y errores en unidades uma	25
4.9. Coeficientes para isótopos ligeros e intermedios en unidades MeV y errores en unidades uma	26
4.10. Coeficientes (MeV) y errores (uma)	27
4.11. Isótopos seleccionados	28
4.12. Radio, Densidad y Coeficientes de Tensión superficial nuclear	28
A.1. Isótopos seleccionados para la combinatoria	36
B.1. Isótopos seleccionados para la combinatoria	37
C.1. Isótopos seleccionados para la combinatoria	38
D.1. Isótopos seleccionados para la combinatoria	39
E.1. Isótopos seleccionados para la combinatoria	40

Introducción

Para la descripción de la estructura nuclear y sus diversas propiedades existen varios modelos que tratan de dar una interpretación a la estructura de los núcleos atómicos, aún siendo imposible encontrar una teoría que explique todas las propiedades conocidas de éstos, sin embargo, proporcionan una descripción satisfactoria para algunas de las características y propiedades de la estructura nuclear [1]. Uno de los modelos mencionados es el Modelo de la Gota Líquida (LDM) propuesto por George Gamow en 1928 [2], que históricamente fue el primero que describió propiedades nucleares y desarrollado por Niels Bohr y John Archibald Wheeler [3], dicho modelo fue utilizado en 1935 por Weizsäcker quien desarrolla la fórmula semi empírica de la masa, la cual se define a continuación:

$$M_A(A, z) = M_0 - a_v A + a_s A^{2/3} + a_c z^2 A^{-1/3} + a_a \frac{(A - 2z)^2}{A} \pm \delta(A, z) \quad (1.1)$$

de la cual M_0 es la masa de los constituyentes, $a_v A$ representa la energía de volumen, y los términos subsiguientes son energía superficial, energía coulombiana, energía de asimetría y correcciones de paridad [4], la cual es basada en LDM, desde entonces ha sido empleada por varios autores [3, 5]. La fórmula intenta reproducir la tendencia general de las masas nucleares asumiendo una densidad uniforme en todo el núcleo para calcular las diversas contribuciones a la energía de enlace [6, 7].

La FSEM proporciona una parametrización simple de la energía de enlace para todos los núcleos conocidos [8]; es decir, es posible determinar los coeficientes, si se despeja de la FSEM la energía de enlace por nucleón [9]

$$\frac{B}{A} = a_v - a_s A^{1/3} - a_a \frac{(A - 2Z)^2}{A^2} - a_c \frac{Z^2}{A^{1/3}} \pm \delta(A, Z) \quad (1.2)$$

La FSEM juega un papel importante en el desarrollo de la física nuclear e involucra cinco tipos de energía anteriormente descritos; aunque se han sugerido modificaciones sobre la adición de diferentes términos y condiciones a lo largo de los años, la estructura de la fórmula no ha sufrido cambios significativos hasta la fecha [2, 10].

La literatura reporta los cálculos de los coeficientes con los trabajos de Feenberg en 1947 y Green en 1954 que establecen datos relevantes sobre las diferencias de energías para los núcleos espejo [5]. Podemos encontrar información complementaria que de-

terminan valores teóricos reportados en 1945 por Fermi , 1949 por Friendlander y Kennedy, 1955 por Evans y recientemente, en 2016, por Ankita y Pinedo, entre otros [2,3]. Aunque los coeficientes obtenidos son similares, no hay método estandarizado para el cálculo de estos coeficientes, ya que para los grupos de coeficientes, los valores de las masas teóricas y experimentales todavía presentan errores significativos [3]. Además Ayres define intervalos para cada coeficiente si se fija el tercer coeficiente entre 0.58 a 0.71 MeV, los demás coeficientes se encuentran: a_ν entre 13.9 a 15.8 MeV, a_s de 13.1 a 17.8 MeV y a_a de 19 a 23.7 MeV, lo cual nos proporciona una base para la búsqueda de los coeficientes [11].

Pregunta científica

¿Existe un conjunto de coeficientes adecuado, para la fórmula semi empírica de la masa, que permita reducir el error en el cálculo teórico de las masas isotópicas respecto a las masas experimentales?

Hipótesis

Existe un conjunto de coeficientes adecuado, para la fórmula semi empírica de la masa, que permita reducir el error en el cálculo teórico de las masas isotópicas respecto a las masas experimentales

Objetivo general

El objetivo del presente trabajo fue determinar 4 de los 5 coeficientes de la FSEM mediante la solución simultánea de conjuntos de coeficientes para la FSEM, tratando de reducir el error entre las masas teóricas y las masas experimentales. Por lo anterior, se resolvieron sistemas de ecuaciones de 4x4, obteniendo conjuntos de coeficientes, utilizando *Mathematica*[®] [12] se realizaron los cálculos de diversos grupos de coeficientes correspondientes, en isótopos de ciertas características ejemplos: isótopos que decaen por emisión beta y positrones.

Objetivos específicos

1. Conformar y seleccionar una base de datos nucleares para isótopos radiactivos.
2. Calcular ecuaciones en base a la fórmula semi empírica
3. Resolver sistemas de ecuaciones obtenidos para cada isótopo radiactivo.
4. Determinar las masas teóricas de los isótopos radiactivos de interés.

5. Comparar las masas teóricas con las experimentales de los isótopos radiactivos de interés.

6. Determinar los sistemas de ecuaciones que optimicen los coeficientes.

7. Comparar los coeficientes obtenidos con otros autores.

Revisión de Literatura

2.1. Fórmula semi empírica de la masa

La fórmula semi empírica de la masa (SEMF), se basa en las aproximaciones de diferentes propiedades del núcleo atómico en términos de neutrones y protones [3]. Weizsäcker quién ha propuesto el método semi empírico para calcular las energías nucleares, el cual conlleva coeficientes arbitrarios, los cuales son calculados en base a datos experimentales [13].

Conocemos que la masa atómica M de cualquier átomo, cuyo núcleo solo contiene Z protones y N neutrones se define como:

$$M(A, Z) = ZM_H + NM_n - B \quad (2.1)$$

donde M_h es la masa del hidrógeno, M_n es la masa del neutrón y B es la energía de enlace, además, el Modelo de la Gota Líquida (LDM), permite realizar un desglose de B en una serie de términos correctivos, los cuales representan algunas características generales del núcleo [14].

$$B = E_v - E_s - E_C - E_a - \delta(A, Z) \quad (2.2)$$

Entonces:

$$M(A, Z) = M_0 - E_v - E_s - E_C - E_a - \delta(A, Z) \quad (2.3)$$

Los primeros tres términos son explicados por la mecánica clásica, los cuales son: energía de volumen, energía de superficie y energía coulombiana, los dos últimos debido a la mecánica cuántica, energía debido a la asimetría y efecto non-par [2]. Cada uno de los términos tiene su aproximación en función del número atómico y el número másico [3].

2.1.1. Energía de volumen

La energía de volumen es el término con más aportación para B , el cual considera que todos los nucleones están en contacto, ya que debe ser proporcional al volumen nuclear es decir

$$E_v = k_v V \quad (2.4)$$

donde k_v es constante proporcional, en la ecuación se acompañará el término con un signo negativo ya que debe ser equivalente a la energía necesaria para mantener los núcleos unidos, y deberá ser restada a la masa de los constituyentes.

Para V es decir el volumen nuclear debe ser proporcional al número de nucleones es decir el número atómico (A) entonces:

$$V = k_A A \quad (2.5)$$

y sustituyendo el 2.4

$$E_v = k_v k_A A = a_v A$$

$$E_v = a_v A \quad (2.6)$$

donde a_v es una constante de proporcionalidad desconocida, $a_v = k_v k_A$.

2.1.2. Energía de superficie

La energía de enlace nuclear se reducirá para núcleos pequeños según Wick, debido a la existencia de una superficie del núcleo [13]. En las suposiciones del modelo de la gota líquida, considera que si los núcleos atómicos fueran similares a una gota esférica, deberá existir una tensión superficial como en la gota esférica, es decir, en el interior las moléculas son atraídas por moléculas vecinas, por otra parte en la superficie son atraídas por moléculas en el interior de la gota [3]. En promedio, las partículas de la superficie interactúan solamente con la mitad de las partículas en el interior del núcleo, la cual tiene similitud con la tensión superficial de los líquidos [13]. Entonces la energía de superficie es una corrección al primer término ya que no todos los nucleones están en contacto, por ejemplo, los nucleones en la superficie o cerca de ella, ya que estos nucleones tienen menos interacciones que los nucleones en el centro [2, 14].

La energía de superficie γ es definida en relación entre la energía requerida para incrementar la superficie del líquido, E_s , y el incremento en la área superficial del líquido dS , es decir:

$$\gamma = \frac{E_s}{S} \quad (2.7)$$

Además que si se considera un cuerpo geométrico esférico el volumen está definido como:

$$V = \frac{4}{3}\pi R^3$$

Para este volumen, la correspondiente área superficial es

$$S = 4\pi R^2$$

y por la definición de energía de superficie de la ecuación 2.7

$$E_s = \gamma S \quad (2.8)$$

Sustituyendo la ecuación anterior de área superficial, la energía de superficie en el núcleo atómico es:

$$E_s = 4\pi\gamma R^2$$

Por la definición anterior de volumen nuclear, ecuación 2.5 e igualando al volumen esférico, es decir:

$$k_A A = \frac{4}{3}\pi R^3$$

$$R = \left(\frac{3}{4\pi}k_A A\right)^{\frac{1}{3}}$$

y regresando a la ecuación 2.8

$$E_s = \left(\frac{3}{4\pi}k_A A\right)^{\frac{2}{3}}(4\pi\gamma)$$

$$E_s = (3k_A)^{\frac{2}{3}}(4\pi)^{\frac{1}{3}}\gamma A^{\frac{2}{3}}$$

Entonces:

$$E_s = a_s A^{\frac{2}{3}} \quad (2.9)$$

donde $a_s = (3k_A)^{\frac{2}{3}}(4\pi)^{\frac{1}{3}}\gamma$

2.1.3. Energía Coulombiana

La energía coulombiana se debe a la repulsión electrostática entre los protones del núcleo. Su deducción es más comunmente encontrada en la literatura como:

$$E_c = \frac{3}{5} \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{z^2 e^2}{R}$$

la cual suele expresarse como:

$$E_c = a_c \frac{z^2}{A^{1/3}} \quad (2.10)$$

con

$$a_c = \frac{3}{5} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} e^2 \left(\frac{4\pi}{3k_A} \right)^{1/3}$$

2.1.4. Energía de asimetría

Este efecto de asimetría es explicado mediante la mecánica cuántica, ya que los dos términos anteriores fueron explicados por la clásica. Para isótopos que tienen números pares apareados de n y z , es decir, $A = 2z$ presentan mayor estabilidad ya que tienen mayor energía del enlace. Para este término de la energía de asimetría dependerá solo el exceso de neutrones $|n - z|$, es decir presentan un déficit en la energía de enlace, la fracción del volumen afectado es $\frac{|n-z|}{A}$ y el déficit total es proporcional al producto de estos:

$$E_a = -a_a |n - z| \frac{|n - z|}{A}$$

$$E = -a_a \frac{(A - 2z)^2}{A} \quad (2.11)$$

2.1.5. Efecto non-par

El efecto non-par en un núcleo, es la última aportación de la energía de enlace dado por las correlaciones de apareamiento de neutrones y protones [3, 15]. Es decir, si el número de neutrones y protones es par o impar, ya que se ha relacionado con la estabilidad de los núcleos. Para los núcleos más estables se conoce que el número de protones y neutrones tienen que ser par, por lo que el número atómico será par, así mismo para núcleos menos estables la cantidad de neutrones y protones tiene que ser ambos impares. En la literatura se encuentra como $\pm\delta(A, z)$, la mayoría de los autores reporta la aproximación de este coeficiente igual a $33,5A^{-3/4}$ para tres casos diferentes en base al número másico y atómico, para A impar se tiene $\pm\delta(A, z) = 0$ y para A par se tendrá un factor negativo si z es impar o positivo si z es par [3].

2.1.6. Construcción de la fórmula semi empírica de la masa

Para obtener la fórmula semi empírica de la masa, Evans utiliza las ecuaciones obtenidas para cada energía y las sustituye en la ecuación 2.3 para obtener:

$$M_A(A, z) = M_0 - a_v A + a_s A^{2/3} + a_c z^2 A^{-1/3} + a_a \frac{(A - 2z)^2}{A} \pm \delta(A, z) \quad (2.12)$$

Evans resume en la Tabla 2.1 varios coeficientes obtenidos por diferentes autores, aunque algunos coeficientes son similares, otros presentan diferencias significativas ya que la metodología de cálculo es diferente en cada conjunto de coeficiente.

Tabla 2.1: Comparación de los coeficientes de la fórmula semi empírica (MeV) calculados por diferentes autores.

<i>Autores</i>	<i>Coefficientes</i>				
	a_v	a_s	a_c	a_a	δ
Bethe and Bacher(1936)	13.86	13.2	0.58	19.5	
Feenberg (1939)		13.3	0.62		
Bohr & Wheeler (1939)		14.0	0.59		
Flugge (1942)	14.66	15.4	0.602	20.5	
Fermi (1945)	14.0	13.0	0.583	19.3	33.5A3/4
Metropolis & Reitweisner (1950)	14.0	13.0	0.583	19.3	33.5A3/4
Feenberg (1947)	14.1	13.1	0.585	18.1	33.5A3/4
Fowler (1947)	15.3	16.7	0.69	22.6	
Friedlander & Kennedy (1949)	14.1	13.1	0.585	18.1	132/A
Rosenfeld (1949)	14.66	15.4	0.602	20.54	
Canadian National Research(1945)	14.05	14.0	0.61	19.6	
Green (1954)	15.75	17.8	0.71	23.7	
Evans (1955)	14.1+-02	13+-1	0.595+-02	19.0+-09	
Fuente: Datos tomados de The Atomic Nucleus					

2.1.7. Radio Nuclear

Ya calculados los coeficientes, se puede regresar en las fórmulas y calcular el radio nuclear, retomando la ecuación 2.5, y dado que se considera el núcleo esférico se podría igualar al volumen esférico.

$$k_A A = \frac{4}{3} \pi R^3$$

Así

$$R = \left(\frac{3k_A A}{4\pi} \right)^{1/3} \quad (2.13)$$

donde k_A es una variable desconocida, la cual la podemos calcular apartir del coeficiente a_c despejandolo, se calcula k_A y se sustuye para el cálculo del R.

$$k_A = \frac{4\pi}{3} \left(\frac{3}{5a_c} \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right) e^2 \right)^3 \quad (2.14)$$

donde: $e_0 = 8,8541510^{-12} \frac{C^2}{Nm}$, $e = 1,60217656535x10^{-19}C$

2.1.8. Coeficiente de Tensión Superficial Nuclear

Ahora tomemos el coeficiente de energía superficial a_s , el cual contiene el coeficiente de tensión superficial γ , despejamos y el cual obtenemos que

$$\gamma = \frac{a_s}{(3k_A)^{2/3}(4\pi)^{1/3}} \quad (2.15)$$

Y calculamos k_A como 2.14.

2.1.9. Densidad Nuclear

Se encuentra en la literatura que la densidad nuclear puede definirse como:

$$\rho = \frac{M}{V}$$

se considera un volumen esférico,

$$\rho = \frac{M}{\frac{4}{3}\pi R^3}$$

donde: M es unidad de masa atómica y R en este caso es el radio unitario.

2.2. Método para el cálculo de coeficientes simultáneos

La fórmula semi empírica de la masa está dada por:

$$M(A, Z) = M_0 - a_v A + a_S A^{2/3} + a_c \frac{Z^2}{A^{1/3}} + a_a \frac{(A - 2Z)^2}{A} \pm \delta(A, Z)$$

Cuyas variables fueron anteriormente descritas, y sabemos:

$$M(A, Z) = M_0 - \frac{B_N(A, Z)}{A}$$

Igualando las ecuaciones anteriores y simplificando, obtenemos la ecuación 2.2:

$$\frac{B_N(A, Z)}{A} = a_v - a_S A^{-1/3} - a_c \frac{Z^2}{A^{4/3}} - a_a \frac{(A - 2Z)^2}{A^2} \pm \delta(A, Z)$$

Además, sabemos que $\delta(A, Z)$ depende de A y Z (pares o nones). Se puede observar que la ecuación obtenida solo depende de la energía de enlace ($B_N(A, Z)$), número atómico (Z) y número másico (A), así para cada isótopo se puede obtener una ecuación diferente, asumiendo la energía de enlace de datos experimentales [9]. Entonces al calcular la ecuación para diferentes isótopos se obtiene un listado de ecuaciones de 4 variables.

$$\begin{aligned} \frac{B_N(A_1, Z_1)}{A_1} &= a_v - a_S A_1^{-1/3} - a_c \frac{Z_1^2}{A_1^{4/3}} - a_a \frac{(A_1 - 2Z_1)^2}{A_1^2} \pm \delta(A_1, Z_1) \\ &\vdots \\ \frac{B_N(A_n, Z_n)}{A_n} &= a_v - a_S A_n^{-1/3} - a_c \frac{Z_n^2}{A_n^{4/3}} - a_a \frac{(A_n - 2Z_n)^2}{A_n^2} \pm \delta(A_n, Z_n) \end{aligned}$$

De las cuales se pueden calcular los coeficientes, resolviendo sistemas de ecuaciones de 4x4, en las combinatorias del listado anterior [3].

2.3. Permutaciones

En el lenguaje cotidiano y en el lenguaje matemático, permutar significa cambiar el orden. Entonces

Definición

Dada una colección de n elementos distintos, cualquier disposición de estos objetos se denomina permutación de la colección. Las permutaciones pueden tener diferentes longitudes, para poder obtener el número de permutaciones totales para una longitud

determinada, se conoce el siguiente teorema [16, 17].

Teorema

Para un conjunto de n elementos distintos a_1, a_2, \dots, a_n y r un entero $1 \leq r \leq n$ el número de permutaciones de tamaño r para los n objetos es:

$$P(n, r) = \frac{n!}{(n-r)!}$$

2.3.1. Combinatoria

Definición

Una combinación se define como un conjunto de objetos que no presentan un orden específico, es decir, al contrario de la permutaciones, no interesa el orden de los elementos.

Al igual que en las permutaciones, las combinaciones pueden tener diferentes longitudes, de igual manera para obtener el número de combinaciones totales para una longitud determinada será dada por el siguiente teorema [16, 17].

Teorema

Si partimos de un conjunto de n elementos, el número de combinaciones de tamaño r , que se denota como $C(n, r)$, donde $1 \leq r \leq n$

$$C(n, r) = \frac{n!}{r!(n-r)!} = \frac{P(n, r)}{r!} \quad (2.16)$$

2.4. Sistemas de ecuaciones lineales

2.4.1. Sistemas de ecuaciones lineales de $m \times n$

Un sistema de ecuaciones como:

$$\begin{aligned} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n &= b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n &= b_2 \\ &\vdots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 \dots + a_{mn}x_n &= b_m \end{aligned}$$

Donde a_{ij} y b_i ($1 \leq i \leq m$, $1 \leq j \leq n$) son elementos de un campo F (reales, enteros, entre otros) y $x_1, x_2, x_3, \dots, x_n$ son variables del sistema, de igual manera toman valores

en el campo F , se llama sistema de m ecuaciones lineales con n incógnitas sobre el campo F [18].

Además la matriz de coeficientes asociado al sistema de ecuaciones de $m \times n$ se define como:

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix}$$

El sistema de ecuaciones se puede reescribir en forma matricial, haciendo

$$X = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$$

Y

$$B = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

Entonces la ecuación matricial es:

$$AX = B$$

Definición

Una solución al sistema $AX = B$ será un vector $s \in F^n$ tal que $As = B$, es decir, que al sustituir el vector s cumpla la igualdad. Y además el conjunto de todas las soluciones del sistema se llama conjunto solución del sistema [19].

$$s = \begin{pmatrix} s_1 \\ s_2 \\ \vdots \\ s_n \end{pmatrix}$$

2.4.2. Sistemas de ecuaciones lineales de 4x4

Un caso particular de un sistema de ecuaciones no homogéneo de $m \times n$ está dado cuando $m = n = 4$ es decir:

$$a_1x_1 + a_2x_2 + a_3x_3 + a_4x_4 = C_1$$

$$b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + b_4x_4 = C_2$$

$$d_1x_1 + d_2x_2 + d_3x_3 + d_4x_4 = C_3$$

$$e_1x_1 + e_2x_2 + e_3x_3 + e_4x_4 = C_4$$

Donde:

- a_i, b_i, c_i, d_i, e_i para $i = 1, 2 \dots 4$ son constantes conocidas

- x_i para $i = 1, 2 \dots 4$ son las variables del sistema

El conjunto de soluciones al sistema serán aquellos valores de las variables x_i que sustituyéndolos en las ecuaciones nos resulta la igualdad simultáneamente [18].

2.5. Mathematica®

2.5.1. Introducción

Uno de los sistemas computacionales simbólicos es Mathematica ® el cual fue lanzado en 1998. Es una exitosa plataforma computacional, es ampliamente utilizada en varios campos científicos como matemática, ingeniería, física, diseño, estadística y geografía [20]. Proporciona acceso a algoritmos numéricos y simbólicos, herramientas gráficas, ya sean visuales, textuales, interactivos; hacer análisis o resolver objetos matemáticos, crear aplicaciones, programas, sitios web, entre otros [12, 20].

2.5.2. Funciones en Física Nuclear

En Mathematica [®] podemos encontrar funciones como `IsotopeData` y `ParticleData` aplicadas a la física nuclear, las cuales nos proporcionan diferentes propiedades acerca de los todos los isótopos y las partículas elementales [20, 21].

2.5.3. Funciones

Mathematica [®] cuenta con funciones para distintas tareas, los cuales pueden ser utilizados a conveniencia para un fin determinado, o ser base para la elaboración de funciones más complejas [12]. Algunos ejemplos son:

- `Solve [exp, vars]`

Intenta resolver el sistema *exp* de ecuaciones o desigualdades para las variables *vars*.

- `Permutations[list, n]`

Da todas las permutaciones de *lista* que contienen como máximo *n* elementos.

Materiales y Métodos

3.1. Conformación y selección de una base de datos nucleares para isótopos radiactivos

3.1.1. Base de Datos

Se utilizó la base de datos de isótopos de "IAEA" conocida como LiveChart of Nuclides [22], en la cual se obtuvieron diferentes datos nucleares de isótopos radiactivos (número másico, número atómico, energía de enlace, entre otros) los cuales se capturaron en Excel.

3.1.2. Selección de datos

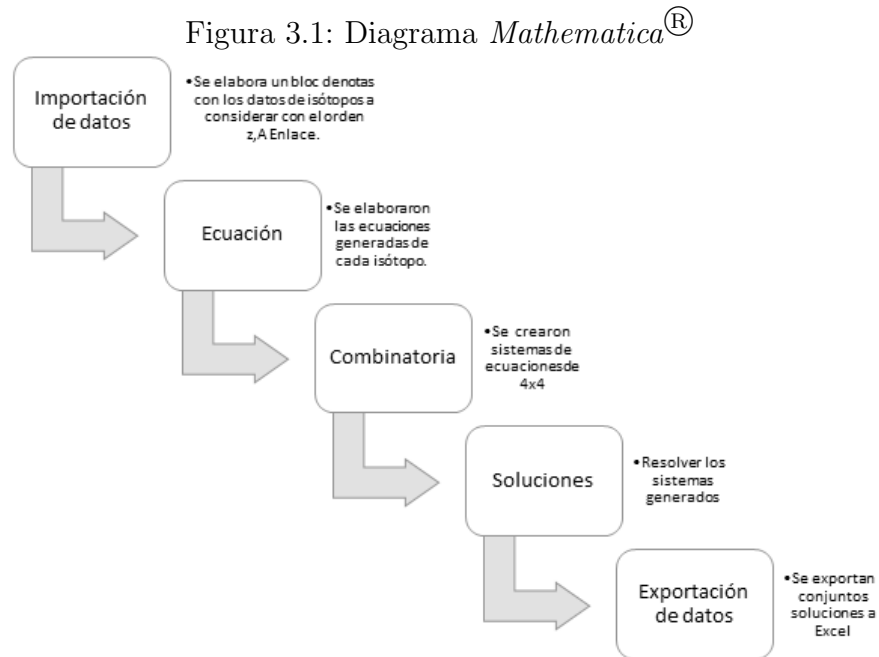
Se realizó una clasificación de los isótopos radiactivos por decaimiento (β , positrones) y estos a la vez en ligeros e intermedios, entonces se realizarán combinatorias a partir de esto, en la Tabla 3.1 se muestra como se trabaja la base de datos.

Tabla 3.1: Clasificación de Isótopos

	Decaimiento	
Isótopo	Ligero β^-	Ligero β^+
	Intermedio β^-	Intermedio β^+
	Todos	

3.2. Cálculo de coeficientes simultáneos

Después de conformar la base de datos nucleares, se pasó a realizar los programas utilizando *Mathematica*[®] versión 9, de Wolfram, para crear el listado de ecuaciones 2.2, tal como fue descrito anteriormente, seguido este proceso se calcula la combinatoria del listado, de la cual se resolvieron los sistemas de ecuaciones obtenidos, y se obtuvieron los coeficientes deseados. Los programas utilizados se encuentran en el dirección electrónica (página 31), en el Figura 3.1 se describe cronológicamente el proceso de importación y exportación de datos nucleares.



3.3. Cálculo de errores

Del conjunto de soluciones obtenidos los datos fueron exportados de *Mathematica*[®], para trabajarlos en Excel, se calcularon las masas teóricas de isótopos que se seleccionaron al azar bajo la restricción de que el Efecto non-par se tomará $\delta = 0$, al sustituir los coeficientes en la ecuación 2.12. Como solamente se considera minimizar el error generado entre el valor teórico y el valor experimental (error numérico), el error se calculó de la siguiente forma:

$$E_i = |M_{Experimental_i} - M_{Teorica_i}| \quad (3.1)$$

$$ErrorTotal = \sum_{i=1}^n \sqrt{(E_i)^2} \quad (3.2)$$

De lo anterior se podrá evaluar qué conjunto de coeficientes presenta el menor error en los isótopos seleccionados, seguido se pueden obtener un cálculo más detallado para saber como se comportan en cada grupo de isótopos (ligeros, intermedios).

Resultados y Discusión

4.1. Coeficientes y su optimización

4.1.1. Isótopos Ligeros β^-

Se trabajó con 36 isótopos radiactivos ligeros con decaimiento β^- (ver Apéndice A), la combinatoria resultante es 58905 posibles conjuntos de coeficientes, se seleccionó al azar 25 conjuntos utilizando número aleatorios generados por Excel, los coeficientes se muestran en la Tabla 4.1.

Tabla 4.1: Coeficientes para isótopos ligeros con decaimiento β^- en unidades MeV.

Conjuntos	a_v	a_s	a_c	a_a
1	16.303151	17.988840	1.535165	16.912986
2	13.716453	14.395789	0.343598	14.334538
3	15.103615	16.322625	0.982596	15.717275
4	15.346550	16.660074	1.094505	15.959436
5	13.432339	14.001141	0.212720	14.051331
6	13.048248	13.467620	0.035788	13.668465
7	16.447587	18.199337	1.593364	17.050325
8	13.863757	14.600402	0.411454	14.481372
9	17.498310	20.377593	1.470330	17.614409
10	22.317701	27.935593	2.960973	21.837721
11	16.801047	19.284111	1.254665	17.003386
12	14.248485	16.051771	0.253375	18.200193
13	16.006516	16.770388	1.181378	20.629745
14	19.209018	28.801728	0.720892	21.678422
15	17.060273	22.101546	0.674426	22.312932
16	15.769996	19.404383	0.473717	19.352741
17	13.912050	13.819398	0.454198	19.064865
18	13.624023	13.115159	0.425577	18.642740
19	15.770857	15.412795	1.170652	23.347995
20	15.183055	16.446871	0.643336	20.755734
21	17.429108	19.953217	1.328526	23.636178
22	22.523568	28.661673	2.339824	38.116331
23	18.082804	20.888011	1.654166	22.580134
24	15.594809	17.436403	0.844436	15.916772
25	15.595549	16.474909	1.034494	19.261239

Algunos coeficientes resultaron similares con los comparados Evans 1956 (Tabla 2.1). Una vez seleccionados los coeficientes se utilizaron para el cálculo de masas de 1400 isótopos de la base de datos general (ligeros e intermedios). Se calculó el error entre el valor experimental y teórico, calculado para de cada uno de los grupos de coeficientes (Tabla 4.1).

De los errores calculados el valor total (suma de los errores de ligeros e intermedios) al calcular las masas teóricas, este valor es menor si se consideran coeficientes en un intervalo, los errores se observan en la Tabla 4.2.

Tabla 4.2: Errores para β^- en unidades uma

Conjuntos	Ligeros	Intermedios	Error Total
1	14.1	270.6	284.8
2	1.9	44.5	46.5
3	7.4	124.5	131.9
4	8.8	154.1	162.9
5	3.2	79.1	82.3
6	5.3	125.9	131.2
7	14.8	284.9	299.7
8	1.6	27.0	28.6
9	9.3	171.4	180.7
10	22.2	467.9	490.2
11	7.4	128.6	136.0
12	3.6	87.0	90.6
13	6.3	139.0	145.3
14	4.8	118.7	123.5
15	3.0	58.6	61.6
16	3.0	77.0	80.0
17	2.0	16.1	18.1
18	2.1	15.5	17.6
19	5.6	138.7	144.2
20	1.6	6.1	7.7
21	6.5	131.9	138.4
22	12.7	262.3	275.0
23	10.1	216.0	226.1
24	3.8	41.3	45.0
25	5.5	109.7	115.2

De los errores obtenidos para el cálculo de masas, se observó que para el primer coeficiente aquellos que superan 19 MeV presentaron un error significativamente alto, también para aquellos cuyo valor estuvo por debajo de 13 MeV presentan un error similar. Para el comportamiento de los coeficientes, se consideraron intervalos para cada uno de los coeficientes: primero (13-19 MeV), el segundo (15-19 MeV), tercero (< 1 MeV) y cuarto (> 19 MeV).

Se observó que el conjunto 20 de la Tabla anterior se optimiza el error y estos coeficientes se encuentran en estos intervalos, como lo sugiere Ayres 1962. Por lo anterior se tomaron 10 conjuntos adicionales de los 25 iniciales pero ahora conociendo los intervalos de los coeficientes se pueden hacer restricciones a los conjuntos solución, esto hace que los conjuntos sean muy homogéneos, de igual forma fueron seleccionados al azar, en la Tabla 4.3 se reportan.

Tabla 4.3: Segundo conjunto de coeficientes para isótopos ligeros con decaimiento β^- en unidades MeV

Conjunto	a_v	a_s	a_c	a_a
26	15.594774	16.010495	0.959525	23.349727
27	15.591806	17.780664	0.681566	20.117175
28	15.595153	17.786928	0.682307	20.119767
29	15.596728	17.789552	0.682653	20.125108
30	15.599107	17.651807	0.728641	20.266348
31	14.223659	13.053124	0.719163	23.083788
32	15.875676	17.757999	0.798513	21.733781
33	15.668075	17.507682	0.735327	21.147615
34	15.262628	16.328039	0.733063	21.803529
35	15.189984	16.459608	0.644699	20.769747

Los errores obtenidos a partir de los coeficientes anteriores se observan en la Tabla 4.4, estos valores son efectivamente pequeños, tomando en consideración los intervalos, pero sólomente el conjunto 35 se obtiene menor error al conjunto 20 anteriormente visto.

Tabla 4.4: Segundo conjunto de errores para β^- en unidades uma

Conjuntos	Ligeros	Intermedios	Error Total
26	4.15	82.81	86.96
27	1.69	7.75	9.44
28	1.69	7.72	9.41
29	1.69	7.69	9.39
30	2.22	12.14	14.36
31	3.36	60.64	64.00
32	2.24	19.09	21.33
33	1.87	8.08	9.95
34	2.45	25.03	27.47
35	1.62	5.99	7.61

4.1.2. Intermedios β^-

Ahora ya delimitado el problema se puede pasar isótopos intermedios con decaimiento β^- , se modificaron los programas para hacer restricciones a los coeficientes, en los intervalos donde se observa menor error, esto hace que las combinatorias totales disminuyan considerablemente, ya que tienen que pasar por 4 filtros (los intervalos anteriormente descritos).

Para los datos de β^- intermedios se tomaron 10 isótopos aleatoriamente (Apéndice B) y se realizó la combinatoria lo cual nos resultó 330 posible conjuntos pero los cuales al aplicar los filtros de los intervalos se reduce la cantidad a examinar a 17, lo cual facilita mucho el cálculo, los coeficientes obtenidos se muestran en la Tabla 4.5.

Tabla 4.5: Conjuntos de coeficientes para isótopos intermedios con decaimiento β^- en unidades MeV

Conjunto	a_v	a_s	a_c	a_a
1	15.674363	17.686988	0.700498	22.944150
2	15.082064	15.554014	0.701122	20.302430
3	14.974872	15.358862	0.682542	20.067291
4	16.103761	18.595473	0.764460	23.680080
5	15.410455	16.844906	0.689840	21.967306
6	15.222947	16.246602	0.682267	21.273252
7	14.842737	15.033420	0.666911	19.865920
8	16.159135	18.833401	0.760512	23.998264
9	15.748746	17.648754	0.731332	22.710001
10	15.938544	18.256227	0.732815	23.973532
11	15.304644	16.720200	0.658689	22.469332
12	15.873777	18.099287	0.725242	23.819843
13	15.404258	16.860538	0.672367	23.279253
14	15.496862	16.977049	0.700433	22.709553
15	15.123387	15.895408	0.673051	21.640765
16	15.210292	16.211370	0.673496	21.955883
17	15.345921	17.576735	0.639007	21.258901

Se puede observar que los conjuntos en consideración de aquí en adelante serán muy similares, esperando que los errores disminuyan. Haciendo estas restricciones se calculan las masas teóricas para estos grupos de coeficientes.

Tabla 4.6: Conjunto de errores para $\beta-$ intermedios en unidades uma

Conjuntos	Ligeros	Intermedios	Error Total
1	2.468	3.982	6.450
2	1.568	8.560	10.128
3	1.529	7.133	8.662
4	2.741	7.195	9.937
5	1.954	4.116	6.069
6	1.684	4.708	6.391
7	1.540	6.492	8.032
8	2.966	6.387	9.354
9	2.244	6.102	8.346
10	2.833	5.449	8.282
11	2.224	4.127	6.351
12	2.761	5.151	7.912
13	2.463	5.041	7.503
14	2.167	4.945	7.113
15	1.789	4.665	6.454
16	1.901	4.133	6.033
17	2.996	5.009	8.006

Se obtienen 2 conjuntos que minimizan aunque todo los grupos son buenos en general, tomaremos los dos mejores.

4.1.3. Ligeros $\beta+$

Para decaimiento $\beta+$ para isótopos ligeros se toman como base 27 isótopos (Apéndice C) y tomando en cuenta las restricciones para los intervalos, nos proporcionan 853 conjuntos, se tomaron aleatoriamente 15 grupos de coeficientes para calcular su error total, se muestran en la Tabla 4.7 con sus respectivos coeficientes.

Tabla 4.7: Coeficientes para isótopos ligeros con decaimiento $\beta+$ en unidades MeV y errores en unidades uma

Conjunto	a_v	a_s	a_c	a_a	Ligeros	Intermedios	Error Total
1	15.358478	16.713354	0.669041	22.073106	1.975	4.211	6.186
2	15.007898	16.527087	0.568600	23.015675	3.016	12.473	15.489
3	14.582732	15.232185	0.558015	23.816458	3.376	14.399	17.775
4	14.553022	15.593325	0.522105	19.898366	2.015	12.840	14.855
5	15.133583	16.418783	0.609474	22.086234	2.232	10.947	13.179
6	15.795188	17.430427	0.738041	23.615019	2.323	4.335	6.658
7	16.116972	17.275925	0.880418	20.195304	3.057	19.950	23.007
8	15.657387	17.222188	0.719138	21.636704	1.797	5.936	7.733
9	16.116972	17.275925	0.880418	20.195304	3.057	19.950	23.007
10	15.462383	16.805110	0.704319	23.371733	2.394	8.514	10.908
11	15.781808	18.540941	0.614715	19.878109	1.950	37.098	39.048
12	15.082393	16.544811	0.592373	20.944594	1.920	13.405	15.325
13	15.159861	16.441936	0.631529	19.486722	1.489	13.012	14.500
14	14.640399	15.494548	0.556095	21.607985	2.428	8.583	11.011
15	14.302641	15.113983	0.482906	22.203145	3.390	14.956	18.346

Los conjuntos resultantes nos proporciona 2 que minimizan error, en comparación a los conjuntos obtenidos, los errores son similares.

4.1.4. Intermedios $\beta+$

Para isótopos intermedios con decaimiento $\beta+$ se tomaron 15 isótopos (Apéndice D) aleatoriamente de base de datos, de estos los conjuntos solución resultantes nos proporcionan 48, se tomaron 20 que se muestran en la Tabla 4.8. Se calcularon masas con cada grupo de coeficientes y se calcularon sus errores.

Tabla 4.8: Coeficientes para isótopos intermedios con decaimiento $\beta+$ en unidades MeV y errores en unidades uma

Conjunto	a_v	a_s	a_c	a_a	Ligeros	Intermedios	Error Total
1	15.657790	16.803426	0.736947	22.954685	2.192	4.543	6.73
2	14.096126	15.383546	0.442224	19.315509	3.626	12.598	16.22
3	15.569058	16.549147	0.731711	21.861238	2.101	6.205	8.31
4	14.949871	17.784002	0.515533	21.257194	5.127	12.395	17.52
5	15.585852	16.574577	0.734038	21.944983	2.121	6.181	8.30
6	15.629543	16.640734	0.740090	22.162853	2.173	6.128	8.30
7	15.134008	16.855816	0.622503	21.452640	2.652	5.163	7.81
8	15.516560	16.394757	0.728235	21.462848	2.142	7.019	9.16
9	16.106603	18.159795	0.776278	21.496110	2.023	10.990	13.01
10	14.480491	15.005429	0.559554	19.762591	1.658	4.897	6.56
11	13.988773	15.542199	0.406200	19.034149	4.32	15.04	19.37
12	15.673755	16.853690	0.737633	23.156392	2.23	4.45	6.68
13	14.904383	15.001075	0.663637	19.038287	2.40	8.71	11.11
14	14.843678	17.429619	0.510723	20.581016	4.59	11.58	16.17
15	15.259597	17.241251	0.623831	19.787720	1.80	8.26	10.06
16	14.905082	16.349804	0.592348	22.818048	3.46	10.97	14.43
17	15.183690	17.018146	0.618487	21.299551	2.50	4.88	7.38
18	14.905082	16.349804	0.592348	22.818048	3.46	10.97	14.43
19	14.848999	16.321940	0.582464	20.267757	2.38	5.04	7.42
20	14.705405	15.616343	0.590025	19.539767	1.60	3.82	5.42

Los conjuntos soluciones deben reducir el error a décimas para ya considerar que disminuye el error, aunque para la Tabla 4.8, encontramos 2 conjuntos con el error menor, de los cuales se encuentra el mejor conjunto que disminuye este error de todos los analizados hasta ahora.

4.1.5. Generales

Por último se considera un conjunto en general, sin considerar los decaimientos, entonces se toman al azar 40 isótopos (Apéndice E) aleatoriamente, se obtuvo mas de

90000 conjuntos solución (grupos de coeficientes), pero se conocen las restricciones de nuestros coeficientes lo cual lo reduce a 15000 aproximadamente y de estos se tomaron aleatoriamente 25, la Tabla 4.1.5 muestra los conjuntos calculados seleccionados.

Tabla 4.9: Coeficientes para isótopos ligeros e intermedios en unidades MeV y errores en unidades una

Conjunto	a_v	a_s	a_c	a_a	Ligeros	Intermedios	Error Total
1	15.595022	16.574579	0.735506	21.652633	2.18	7.41	9.59
2	15.419200	17.255156	0.671028	21.626733	2.24	3.88	6.11
3	14.932552	16.250036	0.615442	20.030109	1.95	4.14	6.09
4	14.902284	15.589161	0.637941	20.611773	1.57	3.27	4.84
5	14.467991	15.102327	0.559578	20.039710	1.98	5.56	7.54
6	15.760252	18.042946	0.700309	21.982129	2.18	4.77	6.95
7	14.653755	15.023574	0.606160	19.886241	1.47	2.99	4.47
8	16.107703	18.828270	0.762179	20.981145	2.04	8.64	10.68
9	14.766634	15.591636	0.603813	20.146348	1.63	3.42	5.05
10	15.695911	18.501239	0.658987	22.124303	3.23	5.48	8.72
11	14.994525	16.156852	0.611756	21.110529	1.88	5.46	7.34
12	15.317713	16.363491	0.678723	22.386747	2.03	3.69	5.73
13	15.147835	17.392349	0.591954	21.708205	3.65	7.33	10.98
14	14.574753	15.479666	0.571858	19.129639	1.78	4.33	6.11
15	15.180059	16.757426	0.634422	21.369789	2.19	3.91	6.11
16	15.463442	17.258550	0.672978	21.299484	1.87	4.50	6.37
17	14.653857	15.627261	0.577799	20.118818	2.08	5.02	7.10
18	14.694133	15.527859	0.593129	19.002366	1.36	4.29	5.65
19	15.031471	15.931459	0.634546	22.395585	2.200	5.151	7.35
20	14.886545	15.701887	0.622493	20.796632	1.694	3.254	4.95
21	15.900027	18.295910	0.728180	22.374909	2.347	4.297	6.64
22	15.013655	16.150558	0.636651	20.341776	1.640	3.439	5.08
23	15.220887	16.171122	0.665243	22.831656	2.218	4.543	6.76
24	15.308485	16.714740	0.677817	20.961854	1.719	4.098	5.82
25	15.815290	18.153215	0.714303	21.823633	2.162	4.591	6.75

Se observa que ya los errores en general ya son muy pequeños y muy similares, y se logra disminuir todavía el error, nada más modificando la restricción del tercer

coeficiente (.4 MeV a .8 MeV). Los mejores conjuntos que optimizan son los encontrados en la combinatoria general, entonces hay que compararlos con los coeficientes reportados en la literatura.

4.2. Comparación con otros autores

Ahora al hacer la comparación con coeficientes encontrados ya en la literatura, propuestos por varios autores con la misma base de datos con la cual se ha calculado el error, se obtiene los errores los cuales se muestran en la Tabla 4.10

Tabla 4.10: Coeficientes (MeV) y errores (uma)

Conjunto	a_v	a_s	a_c	a_a	Ligeros	Intermedios	Error Total
Mirna (Tesis UAEN)	15.593396	17.344797	0.693520	23.601209	2.5848	4.9666	7.551
Rohlf	15.750000	17.800000	0.711000	23.700000	2.714	5.236	7.949
Ankita (2016)	15.750000	18.000000	0.712000	23.900000	3.276	10.274	13.550
Arya (1966)	15.753807	17.804691	0.7103619	24.780125	3.212	8.464	11.676
Gral 4	14.902284	15.589161	0.637941	20.611773	1.57	3.27	4.84
Gral 7	14.653755	15.023574	0.606160	19.886241	1.471	2.995	4.465
Gral 20	14.886545	15.701887	0.622493	20.796632	1.694	3.254	4.95

Los errores obtenidos muestran que el conjunto 7 obtenido de la combinatoria de isótopos en general, son los coeficientes que muestran menor error, cada vez los coeficientes se fueron estabilizando para los isótopos ligeros e intermedios, ya que para la mayoría de estos coeficientes los errores aumentan para isótopos intermedios, también para errores ligeros se aproxima mejor.

Ahora los conjuntos en consideración tienen como elementos los siguientes isótopos que se muestran en la Tabla 4.11.

Tabla 4.11: Isótopos seleccionados

Combinatoria Generales		
Conjunto 4	Conjunto 7	Conjunto 20
Ca_{20}^{35} (<i>Calcio</i>)	V_{23}^{55} (<i>Vanadio</i>)	Ca_{20}^{35}
V_{23}^{55}	Co_{27}^{65} (<i>Cobalto</i>)	Ru_{44}^{119} (<i>Rutenio</i>)
Y_{39}^{83} (<i>Itrio</i>)	Rh_{45}^{125} (<i>Rodio</i>)	Rh_{45}^{101}
Pd_{46}^{109} (<i>Paladio</i>)	Sn_{50}^{121} (<i>Estaño</i>)	Sn_{50}^{121}

4.2.1. Radio, Densidad y Coeficientes de tensión superficial nuclear

Por último se tiene los calculos de radio, densidad y coeficiente de tensión superficial nuclear, retomando las fórmulas anteriormente descritas, se considera al hacer el cálculo de R como $A = 1$.

Tabla 4.12: Radio, Densidad y Coeficientes de Tensión superficial nuclear

	a_s (MeV)	a_c (MeV)	k_A	R (m)	Densidad ($\frac{T}{mm^3}$)	Coef. T. S. ($\frac{T}{mm}$)
Pinedo	17.344797	0.693520	8.09891E-45	1.24579E-15	2.05E5	1.454E+10
Rolf	17.800000	0.711000	7.51613E-45	1.21517E-15	2.20E5	1.568E+10
Ankita	18.000000	0.712000	7.48451E-45	1.21346E-15	2.21E5	1.590E+10
4	15.58916094	0.637941036	1.04055E-44	1.35433E-15	159583.3242	11057286428
7	15.0235741	0.606160081	1.21295E-44	1.42534E-15	136901.3985	9.621E+09
20	15.70188679	0.622492992	1.11995E-44	1.38794E-15	148268.6342	10604385662
Arya				1.2-1.48E-15	10^5	10^{10}

Ayra propone un intervalo para el Radio unitario, todos los radios calculados están en este intervalo propuesto, además Evans lo propone en $1,45E - 15$, lo cual para el conjunto que mínima es similar. Para la densidad todos estan en la misma magnitud, pero para la tensión lo propuesto es que este en magnitud de 10^{10} lo cual para el conjunto 7 esta una magnitud por debajo.

Conclusiones

Se determinaron 4 de los 5 coeficientes para la fórmula semi empírica de la masa utilizando datos nucleares, los cuales se encontraron que los errores generados son similares a los reportados por otros autores y se generan nuevos coeficientes los cuales reportan errores menores y similares entre ellos.

Se encontraron diferentes grupos de coeficientes que reducen el error de las masas teóricas y experimentales, para algunos coeficientes empiezan a estabilizar los errores (para que todos sean mínimos ya sean ligeros o intermedios), que al contrario para los coeficientes reportados los errores crecen en isótopos intermedios como se pudo observar, aunque los coeficientes calculados serán solo óptimos para isótopos ligeros e intermedios.

De los isótopos que minimizan los errores en el conjunto 7 (combinaciones generales Tabla 4.11) son todos isótopos intermedios, y los otros conjuntos consideran un isótopo ligero. Hay coincidencias entre los conjuntos ya que algunos isótopos los observamos en varios conjuntos con las combinatorias generales. Aunque si observamos todos los isótopos del conjunto 7 decaen por β^- y todos son intermedios, esta combinatoria también deberá estar en las que considera el decaimiento, sus energías de enlace esta por arriba de 8 MeV en este conjunto y para los demas conjuntos no. Además para la resolución de las ecuaciones, los conjuntos solución se tiene que establecer en número de decimales que toman en consideración, varios conjuntos no son distintos hasta un decimal, lo que hace que sea una muestra muy homogénea, así sus errores calculados son similares, se tiene que buscar establecer mejores filtros para los conjuntos solución, se propone los intervalos de los coeficientes entre: 14.5-16 MeV el primero, 15-18 MeV el segundo, 0.6-0.8 MeV el tercero y 19-24 MeV.

Aún así los coeficientes estan calculados en base a intermedios y ligeros, no son un ajuste ideal, ya que no es general. Aunque se tiene que para 1400 isótopos el ajuste es bueno, los ajustes para isótopos pesados suelen tener mayor error, si se compara para isótopos estables otros coeficientes se ajustan más, ya que se empiezan a elevar las energías que se aportan.

Aunque la elaboración de programas en Wolfram facilitó mucho los calculos así como

en Excel, el proceso en particular es muy largo, se tienen que tomar muestras para la calculo de masas, solo se alcanzó analizar solamente isótopos ligeros e intermedios, pero cuando se alarga la base de datos este proceso es en exceso largo.

Trabajos Futuros

1 Completar la base de datos nucleares para realizar las combinatorias en general, para poder realizar el ajuste en general.

2 Considerar solo los isótopos para los cuales la energía de enlace supere los 8 MeV, se observa mejor ajuste en estos.

3 Considerar los intervalos propuestos en las conclusiones de este trabajo, con los cuales el proceso de combinatoria se minimiza bastante 14.5-16 MeV el primero, 15-18 MeV el segundo, 0.6-0.8 MeV el tercero y 19-24 MeV.

4 Hacer una análisis de componentes principales, ya que el quinto coeficiente no aporta mucho al cálculo, y es posible que el coeficiente sea despreciable estadísticamente.

Nota: Todos los calculos realizados, las bases de datos utilizadas, programas de Wolfram los puede encontrar en:

<https://drive.google.com/drive/folders/1AYv9BEe0y9fVxNVCjVDFLP36nnkBTLSd?usp=sharing>

Bibliografía

- [1] N.D. Cook. *Models of the Atomic Nucleus: With Interactive Software*. Springer Berlin Heidelberg, 2005.

- [2] Ankita and B. Suthar. Nuclear binding energy using semi empirical mass formula. *AIP Conference Proceedings*, 1728(1), 2016.

- [3] Jose-Luis Pinedo Vega, Carlos Ríos Martínez, Mirna Patricia Talamantes-Carlos, Fernando García, Ignacio Dávila-Rangel, Valentín Badillo-Almaraz, and Giannouli Myrsini. Semi-empirical nuclear mass formula: Simultaneous determination of 4 coefficients. 1:1–10, 01 2016.

- [4] M. Bauer and V. Canuto. The semi-empirical mass formula and the superfluid model of nuclei. *Nuclear Physics*, 72(1):33–48, 1965.

- [5] A. G. W. Cameron. A revised semiempirical atomic mass formula. *Canadian Journal of Physics*, 35(9):1021–1032, 1957.

- [6] William D. Gunter and Robert A. Hubbs. Revised weizsäcker semiempirical formula for diffuse nuclear surfaces. *Physical Review*, 113(1):252–255, 1959. PR.

- [7] R. S. Gowda N. K. Yadav and P. S. Mishra. Nuclear radius correction to bethe-weizsacker mass formula. 2017.
- [8] N. J. Davidson, S. S. Hsiao, J. Markram, H. G. Miller, and Tzeng Yiharn. A semi-empirical determination of the properties of nuclear matter. *Nuclear Physics A*, 570(1):61–68, 1994.
- [9] Sekyu Ohh. *Range of usefulness of Bethe's semiempirical nuclear mass formula*. Oregon State College, 1956.
- [10] Ning Wang, Min Liu, and Xizhen Wu. Modification of nuclear mass formula by considering isospin effects. *Physical Review C*, 81(4):044322, 2010. PRC.
- [11] R. Ayres, W F. Hornyak, L Chan, and H Fann. A new semi-empirical mass formula. *Nuclear Physics*, 29:212–240, 02 1962.
- [12] S. Wolfram. *An Elementary Introduction to the Wolfram Language*. Wolfram Media, Incorporated, 2015.
- [13] H. A. Bethe and R. F. Bacher. Nuclear physics a. stationary states of nuclei. *Reviews of Modern Physics*, 8(2):82–229, 1936. RMP.

- [14] Robley Evans. The atomic nucleus. *AIChE Journal*, 2(3):11S–12S, 1956.
- [15] Chun-Wang Ma, Fei Niu, Chun-Yuan Qiao, Yi-Fei Niu, and Ting-Zhi Yan. Pairing energy of fragments produced in intermediate-energy heavy-ion collisions. *Phys. Rev. C*, 94:024615, Aug 2016.
- [16] R.P. Grimaldi. *Matemáticas discreta y combinatoria: introducción y aplicaciones*. Addison-Wesley Iberoamericana, 1997.
- [17] Dennis D. Wackerly, William Mendenhall Iii, and Richard L. Scheaffer. *Estadística matemática con aplicaciones*. Cengage, Mexico, 2008.
- [18] S.H. Friedberg, A.J. Insel, and L.E. Spence. *Linear Algebra*. Pearson Education, 2003.
- [19] S.I. Grossman and J.L. Farah. *Álgebra lineal*. Editorial Iberoamericana, 1988.
- [20] Christian Bengs and Malcolm H. Levitt. Spindynamica: Symbolic and numerical magnetic resonance in a mathematica environment. *Magnetic Resonance in Chemistry*, 56(6):374–414, 2018.
- [21] J.G.S. León. *Mathematica más allá de las matemáticas, 2da Edición*. 2015.

- [22] International Atomic Energy Agency. <https://www-nds.iaea.org/relnsd/vcharthtml/vcharthtml.html>, 2014.

Isótopos Ligeros β^-

Tabla A.1: Isótopos seleccionados para la combinatoria

Número Atómico	Número Másico	Energía de Enlace (MeV)
3	9	5.037768
3	11	4.15538
4	11	5.95254
5	13	6.49642
5	15	5.88
5	17	5.27
6	15	7.10017
6	17	6.558
7	17	7.2862
7	19	6.9485
7	21	6.609
8	19	7.56649
8	21	7.3894
8	23	7.163
9	21	7.73829
9	23	7.6223
9	25	7.336
10	23	7.955256
10	25	7.8398
10	27	7.52
10	29	7.167
11	25	8.1014
11	27	7.95695
11	29	7.68215
11	31	7.3987
12	27	8.263852
12	29	8.1132
12	31	7.86919
12	33	7.63645
12	35	7.356
13	29	8.348464
13	31	8.22552
13	33	8.02062
13	35	7.78712
13	37	7.531
14	31	8.458291

Isótopos Intermedios β^-

Tabla B.1: Isótopos seleccionados para la combinatoria

Número Atómico	Número Másico	Energía de Enlace (MeV)
25	57	8.7367
23	57	8.5348
26	59	8.7548
28	73	8.4577
41	105	8.4317
44	115	8.3475
42	99	8.6078
42	101	8.5729
30	73	8.6483
42	107	8.4423

Isótopos Ligeros β^+

Tabla C.1: Isótopos seleccionados para la combinatoria

Número Atómico	Número Másico	Energía de Enlace (MeV)
4	7	5.371548
6	9	4.33742
6	11	6.676456
7	13	7.238863
8	13	5.8118
8	15	7.46369
9	17	7.542328
10	17	6.640499
10	19	7.567343
11	21	7.765547
12	21	7.10503
12	23	7.901115
13	23	7.335727
13	25	8.021136
14	23	6.565
14	25	7.4801
14	27	8.124341
15	27	7.6634
16	27	6.977
16	29	7.7485
16	31	8.2818
17	31	7.86921
17	33	8.304755
18	33	7.928955
18	35	8.327461
19	35	7.96584
19	37	8.339847

Isótopos Intermedios β^+

Tabla D.1: Isótopos seleccionados para la combinatoria

Número Atómico	Número Másico	Energía de Enlace (MeV)
34	65	8.17
47	97	8.4224
30	57	8.231
48	107	8.533351
35	77	8.66681
34	69	8.503707
39	77	8.278
32	63	8.4187
34	73	8.64156
27	53	8.47766
30	57	8.231
46	93	8.319
28	59	8.736588
41	91	8.6709
39	87	8.674844

Isótopos Generales

Tabla E.1: Isótopos seleccionados para la combinatoria

Número Atómico	Número Másico	Energía de Enlace (MeV)
23	55	8.6377
34	73	8.64156
33	77	8.695978
27	65	8.65688
46	99	8.53793
45	125	8.126
45	89	8.191
1	3	2.827265
7	13	7.238863
46	109	8.544882
50	121	8.485201
44	119	8.224
49	117	8.50386
53	117	8.40441
20	35	7.487
50	105	8.39723
51	119	8.48791
51	131	8.392552
53	117	8.40441
34	95	8.112
49	129	8.33878
46	101	8.56086
28	65	8.73624
53	139	8.265609
44	97	8.604279
22	55	8.516
26	53	8.6488
39	83	8.57366
45	113	8.45682
8	19	7.56649
53	139	8.265609
45	97	8.5599
41	101	8.53483
49	109	8.5131
21	57	8.151
52	133	8.389025
37	79	8.601142
45	101	8.58822
12	23	7.901115
49	119	8.48614