

文章编号: 1007-4627(2011)03-0257-06

基于 Weizsäcker-Skyrme 核质量公式研究原子核基态性质*

梁祚盈¹, 刘俊华^{1,2}, 刘敏¹, 王宁^{1, #}

(1 广西师范大学物理科学与技术学院, 广西 桂林 541004;

2 钦州市第三中学, 广西 钦州 535000)

摘要: 基于一个半经验的原子核宏观-微观质量公式——Weizsäcker-Skyrme 质量公式, 研究了原子核的形变、滴线、壳能隙和超重核 α 衰变能等相关性质, 发现该模型能较好地再现实验结果。与此同时, 探索了原子核对称能系数对原子核质量公式的影响和超重稳定岛的可能位置。

关键词: 原子核质量公式; 原子核形变; 滴线; 壳能隙; 超重核

中图分类号: O571.2 **文献标识码:** A

1 引言

原子核质量的研究对于核天体物理以及原子核理论的完善都十分重要。虽然在实验上, 由于技术的进步已能测量一些不稳定核的质量, 但是对于远离稳定区域的原子核仍然需要理论的预言^[1]。人们对原子核质量的研究一直都较为关注, 并提出了一系列计算核质量的模型, 如有限力程小液滴模型 (FRDM)^[2]、微观的 Hartree-Fock-Bogolyubov (HFB) 模型^[3-4] 以及基于宏观-微观方法的 Weizsäcker-Skyrme (WS) 核质量公式^[5] 等。WS 质量公式结合 Bethe-Weizsäcker 原子核液滴公式和微观的 Skyrme 能量密度泛函, 自治地考虑了宏观和微观部分的同位旋效应。该模型的参数相比 FRDM 模型减少很多, 而对已测量的 2149 个原子核的方均根偏差达到了 0.516 MeV, 比 FRDM 模型减少 21%。与 HFB 模型比较, WS 质量公式计算整个核素图核质量的 CPU 时间大大减少。同时, 公式的宏观和微观部分参数具有一致性, 因而较大地提升了宏观-微观方法外推的可靠性^[5]。为进一步检验 WS 质量公式在研究原子核结构以及超重核相关性质等方面的可靠性, 本文将利用此模型研究原子核的形变、滴线、壳修正能、壳能隙和超重核 α 衰变能等相关性质, 并与其他模型以及相应的实验数据比较。

2 WS 核质量公式

在 WS 核质量公式中, 原子核的总能量可以写为宏观部分的液滴能与微观部分 Strutinsky 壳修正能 ΔE 之和, 即

$$E(A, Z, \beta) = E_{\text{LD}}(A, Z) \prod_{k \geq 2} (1 + b_k \beta_k^2) + \Delta E(A, Z, \beta), \quad (1)$$

$E_{\text{LD}}(A, Z)$ 表示球形核的液滴能, 用 Bethe-Weizsäcker 质量公式描述, 即

$$E_{\text{LD}}(A, Z) = a_v A + a_s A^{2/3} + a_c \frac{Z(Z-1)}{A^{1/3}} \times (1 - Z^{-2/3}) + a_{\text{sym}} I^2 A + a_{\text{pair}} A^{-1/3} \delta_{\text{np}}, \quad (2)$$

其中, 同位旋不对称度 $I = (N - Z)/A$, δ_{np} 的具体形式见文献^[5]。(1) 式中 b_k 用来描述原子核形变对宏观部分能量的贡献, 写为

$$b_k = \left(\frac{k}{2}\right) g_1 A^{1/3} + \left(\frac{k}{2}\right)^2 g_2 A^{-1/3}. \quad (3)$$

在微观部分, 原子核壳修正写为

$$\Delta E = c_1 E_{\text{sh}}, \quad (4)$$

E_{sh} 表示原子核的壳能量, 由传统的 Strutinsky 方法^[6] 计算得到。其中我们取光滑参量 $\gamma = 1.2 \hbar \omega_0$,

* 收稿日期: 2010-11-01; 修改日期: 2010-12-16

* 基金项目: 国家自然科学基金资助项目(10875031, 10847004)

作者简介: 梁祚盈(1984-), 女(汉族), 广西柳州人, 在读硕士生, 从事核质量公式研究; E-mail: 89785730@qq.com

通讯联系人: 王宁, E-mail: wangning@gxnu.edu.cn; 个人主页: http://www.imqmd.com/wangning

Gauss-Hermite 多项式 $p = 6$ 阶, $\hbar\omega_0 = 41A^{-1/3}$ MeV, 并且只考虑原子核的轴对称形变。 c_1 为比例因子, 用于调节总能量中宏观部分和微观壳修正部分的比例。

同时 WS 公式在传统液滴公式的表面对称能系数基础上提出了一个同位旋依赖的对称能系数

$$a_{\text{sym}} = c_{\text{sym}} \left[1 - \frac{\kappa}{A^{1/3}} + \frac{2 - |I|}{2 + |I|A} \right]. \quad (5)$$

引入的同位旋依赖项将导致对原子核结合能的一个修正 E_w ,

$$E_w = c_{\text{sym}} I^2 A \left[\frac{2 - |I|}{2 + |I|A} \right] \approx 2c_{\text{sym}} |I| - c_{\text{sym}} |I|^2 + \dots, \quad (6)$$

此项近似地描述了原子核的 Wigner 效应。图 1 给出了不同模型计算出的沿 β 稳定线原子核的 Wigner 能与同位旋的依赖性。直线为根据 Satula 等^[7]提出的 Wigner 能 $E_w \approx 47 |I|$ 随同位旋变化的图像, 叉点为 WS 公式的结果。其中, 系数 $c_{\text{sym}} = 30.00$ MeV 是由 2149 个原子核质量^[8]拟合得到的。由图 1 可知, WS 公式引入的同位旋依赖的对称能系数有效地描述了传统的 Wigner 能。

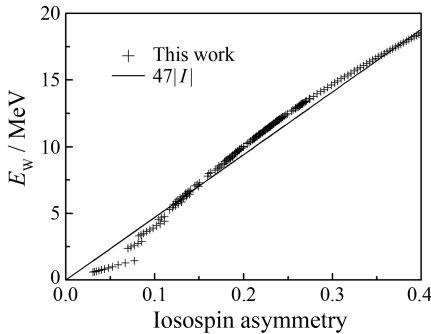


图 1 不同模型计算的沿 β 稳定线原子核的 Wigner 能

我们将不同的对称能系数代入不含壳修正的质量公式(2)中, 计算了 2149 个 N 和 $Z \geq 8$ 的实验已测量核的质量, 并与实验值比较得到方均根偏差

$$\sigma^2 = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (M_{\text{exp}}^{(i)} - M_{\text{th}}^{(i)})^2,$$

并且由 2149 个测量核拟合得到相应的液滴质量公式的最优化参数, 如表 1 所示。其中,

$$a_{\text{sym}} = c_{\text{sym}} [1 + \kappa A^{-1/3}]^{-1}$$

是由 Danielewicz 等^[9]提出的。采用此对称能系数得到的质量方均根偏差为 2.54 MeV, 采用(5)式得到的方均根偏差降到了 2.37 MeV, 这个值相对不考虑同位旋依赖的对称能系数

$$a_{\text{sym}} = c_{\text{sym}} [1 - \kappa A^{-1/3}]$$

的情况, 减小了 7%。将(5)式运用到半经验 WS 的核质量公式中, 2149 个测量核的质量方均根偏差大大减小, 达到了 0.516 MeV。另外, 对称能系数考虑了同位旋后, 拟合得到最佳的 c_{sym} 值从 26.70 MeV 变成了 30.00 MeV, 后者更接近于从 Skyrme 能量密度泛函理论计算出来的饱和密度核物质的对称能系数。

3 计算结果与分析

图 2 给出了 WS 公式计算出来的原子核四极形变和十六极形变。图 2(a)为四极形变 $|\beta_2|$ 随中子与质子数的等高线图。由此图可以看出, 理论模型计算出来的幻数核基本上都是球形的; 图 2(b)为十六极形变 β_4 随中子数的变化。可以看出, 幻数核附近 $\beta_4 \approx 0$, 对某些远离幻数的重核可能存在较大 β_4 形变。

表 1 不同对称能系数代入液滴公式(2)得到的 2149 个核质量与实验值比较偏差的方均根及相应的液滴公式的最优化参数

a_{sym} 的形式	a_v/MeV	a_s/MeV	a_c/MeV	$c_{\text{sym}}/\text{MeV}$	κ	$a_{\text{pair}}/\text{MeV}$	σ/MeV
$c_{\text{sym}} [1 + \kappa A^{-1/3}]^{-1}$	-15.68	18.96	0.72	28.31	1.48	6.76	2.54
$c_{\text{sym}} [1 - \kappa A^{-1/3}]$	-15.72	19.05	0.72	26.70	0.88	6.70	2.55
Eq. (5)	-15.70	18.89	0.72	30.00	1.59	6.96	2.37

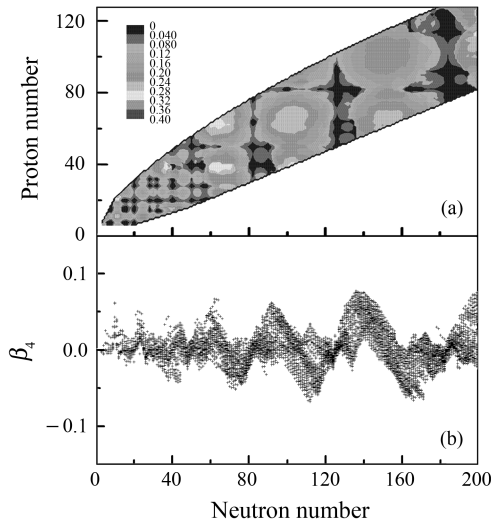


图 2 WS 公式计算的原子核四极形变和十六极形变

(a) 四极形变 $|\beta_2|$ 的等高线图, (b) 十六极形变 β_4 随中子数的变化。

原子核滴线在核物理研究中也相当重要。滴线的定义为单中子(单质子)分离能为零的轮廓线。但由于原子核的中子数和质子数只能为整数, 而单中子分离能计算式为

$$S_n = B(A, Z) - B(A - 1, Z),$$

单质子分离能计算式为

$$S_p = B(A, Z) - B(A - 1, Z - 1),$$

其中 B 是原子核结合能, 所以滴线核的 S_n 或 S_p 难以严格等于零。这就意味着滴线并非线性, 而是看起来像一个阶梯函数。本文计算滴线的方法: 对具有相同质子数 Z_i 的原子核, 找出单质子分离能 $S_p < 0$, 并且将中子数最大的核定义为质子滴线核。同理, 对于具有相同中子数 N_i 的原子核, 找出单中子分离能 $S_n < 0$, 并且质子数最大的核为 neutron 滴线核。将所有的质子滴线核及中子滴线核画在以中子数为横坐标和质子数为纵坐标的图上就得到了滴线图。

图 3 给出了基于 WS 公式计算出来的滴线与已测量核。其中, 靠近左上角的为质子滴线, 靠近右下角的为中子滴线, 方形点为测量核。从图上看, 测量核已相当靠近质子滴线, 中子滴线一侧有大面积的空白区域, 对应待发现的丰中子核素。在幻数附近, 中子滴线会出现明显的不连续。

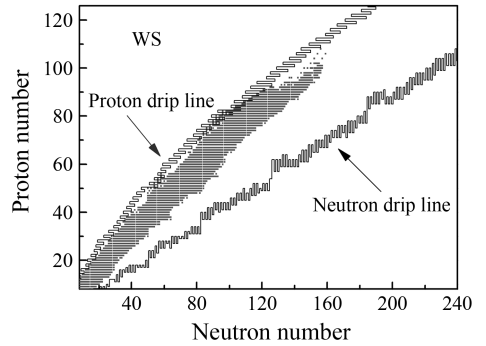


图 3 WS 公式计算出的滴线与已测量核

图 4(a) 给出了 WS 公式计算壳修正能的等高线图。此外, 超出中子、质子滴线的原子核其核子不能束缚在一起。为了看出壳修正能和滴线的位置关系, 图 4 同时给出了中子、质子滴线。如图所示, 图 4(a) 上除超重核区域外有 5 个小岛, 小岛中心对应 5 个双幻数核, 中子和质子数分别是 (50, 50),

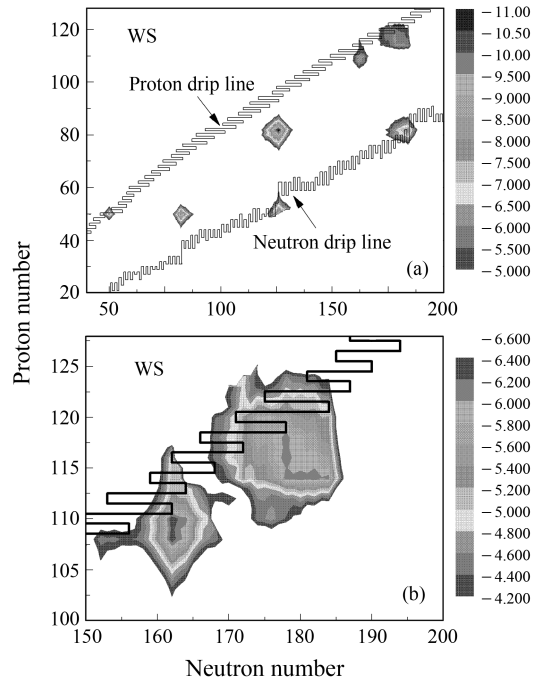


图 4 WS 公式计算的原子核修正能的等高图

(a) 原子核壳修正能 ΔE 和两侧曲折线表示质子和中子的滴线, (b) 对(a)超重核区域的放大。

(82, 50), (126, 50), (126, 82) 和 (184, 82), 可见模型很好地给出了原子核的幻数。注意到, 幻数核 (50, 50) 位于质子滴线附近, 幻数核 (126, 50) 和 (184, 82) 位于中子滴线附近。图 4(b) 图为超重核区域的壳修正能和质子滴线。考虑了原子核壳修正能和质子滴线后, 超重岛的中心位置应处在 $N =$

178, $Z=116-118$ 附近。从图中可以看出, $N \approx 178, Z=126$ 的超重核基本位于质子滴线外, 因而合成 $Z=126$ 的超重核可能性比较小。另外, 超重岛中心区域核的壳修正能大约为 -6 MeV, 与 FRDM 计算的结果(约 -9 MeV)有明显的差别^[2]。

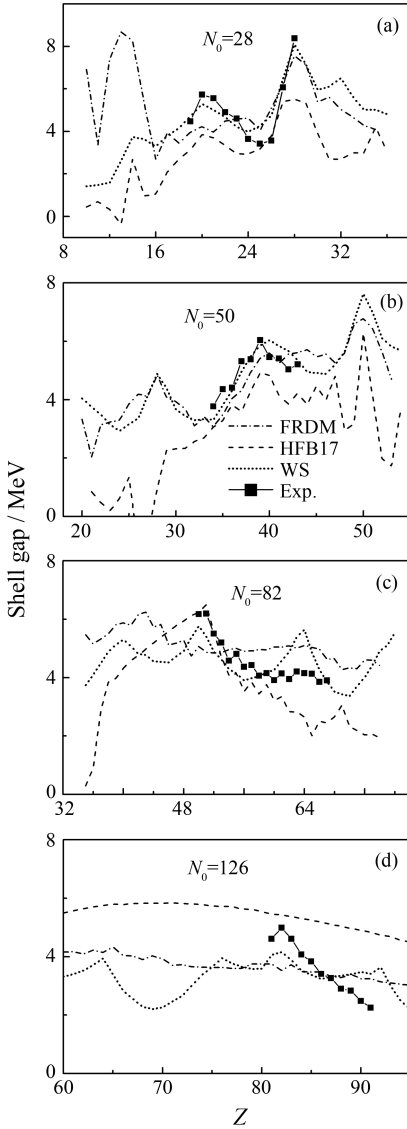


图 5 FRDM, HFB17, WS 3 个模型计算出的壳能隙与实验值的比较

为进一步检验模型, 本文研究了壳能隙。作为双中子分离能在幻数核处不连续性的量度, 壳能隙^[1]对于模型非常敏感, 可以用来检验理论模型的可靠性。如图 5, 我们利用不同模型分别计算了中

$$\Delta_n(N_0, Z) = S_{2n}(N_0, Z) - S_{2n}(N_0 + 2, Z) \quad (7)$$

表 2 FRDM 和 WS 两模型计算的重核 α 衰变能与实验值的比较 MeV

A	Z	Q_{α}^{Exp}	$Q_{\alpha}^{\text{FRDM}} - Q_{\alpha}^{\text{Exp}}$	$Q_{\alpha}^{\text{WS}} - Q_{\alpha}^{\text{Exp}}$	$E_{\text{sh}}^{\text{WS}}$
261	106	9.773	-0.137	0.116	-3.950
263	106	9.447	-0.251	0.032	-3.977
271	106	8.67	-0.264	-0.070	-4.381
264	107	9.671	-0.025	0.210	-4.059
267	107	9.009	-0.543	-0.137	-4.874
270	107	9.11	-0.924	-0.396	-5.523
272	107	9.15	-0.264	-0.179	-4.800
274	107	8.93	-0.224	-0.264	-4.155
264	108	10.59	-0.014	0.008	-4.397
265	108	10.777	-0.611	-0.529	-4.417
275	108	9.44	-0.044	-0.356	-4.626
268	109	10.299	-0.263	-0.027	-4.796
274	109	9.95	0.106	0.169	-5.271
275	109	10.48	-0.414	-0.487	-4.892
276	109	9.85	0.076	-0.051	-4.676
278	109	9.69	-0.314	-0.286	-3.282
270	110	11.24	-0.926	-0.500	-5.279
279	110	9.84	-0.154	-0.019	-3.668
281	110	9.004	-0.458	-0.238	-3.625
272	111	11.029	-0.123	0.085	-5.216
278	111	10.89	0.496	0.014	-4.595
279	111	10.52	0.406	-0.094	-3.898
280	111	9.87	0.266	0.183	-3.919
282	111	9.13	-0.344	0.234	-3.604
283	112	9.67	-0.654	0.244	-4.209
285	112	9.29	-0.694	0.240	-4.243
282	113	10.83	-1.054	-0.011	-4.120
283	113	10.26	-0.904	0.243	-3.857
284	113	10.15	-1.004	0.084	-4.005
285	113	9.88	-0.904	0.074	-4.256
286	113	9.77	-0.864	-0.080	-4.475
286	114	10.33	-0.934	-0.314	-5.284
287	114	10.16	-0.854	-0.369	-4.982
288	114	10.09	-0.924	-0.498	-5.289
289	114	9.96	-1.094	-0.394	-5.325
287	115	10.74	-0.494	-0.177	-5.245
288	115	10.61	-0.484	-0.137	-5.088
289	115	10.45	-0.424	-0.141	-5.369
290	115	10.09	-0.174	0.263	-5.334
290	116	11.00	0.116	0.239	-5.587
291	116	10.89	0.226	0.335	-5.491
292	116	10.80	0.026	0.397	-5.765
293	116	10.67	0.266	0.279	-5.934
293	117	11.18	0.496	0.540	-5.740
294	117	10.94	0.736	0.517	-5.851
294	118	11.81	0.466	0.510	-5.818

子数为幻数, 即 $N_0 = 28, 50, 82$ 和 126 时的壳能隙。虚线、点虚线和实线分别代表 HFB17^[4]、FRDM 和 WS 3 个模型的计算结果, 实心方块代表实验值。由图 5 可知, 比起其他两个模型, WS 公式计算的结果与实验值大部分都符合得很好。注意到, 在 $N_0 = 82, Z = 64$ 处, WS 和 FRDM 两模型的值比实验值偏高, 而 HFB17 的值偏低。另外, 我们发现, 图 5(d) 中 HFB17 和 FRDM 两个模型都不能很好描述 $Z = 82$ 这个壳能隙。而 WS 公式计算出的值在幻数 $Z = 20, 28, 40, 50$ 和 82 处与壳能隙的实验值都符合得很好。

最后, 我们还研究了有实验数据的 46 个超重核的 α 衰变能(实验数据来自文献[10—12]), 见表 2, 其最后一列给出原子核相应的壳修正能值。由 WS 公式计算出的 Q_α 值与实验值的方均根偏差为 0.284 MeV, 比 FRDM 模型的 0.566 MeV 小了许多。由此可见, 用 WS 质量公式研究超重核是相对可靠的。

4 结论

本文基于一个半经验的宏观微观原子核质量公式——Weizsäcker-Skyrme 质量公式, 对原子核的基态性质进行了系统的研究, 给出了原子核的四极与十六极形变、中子与质子滴线、壳修正能、壳能隙以及 46 个超重核的 α 衰变能等, 并与其他模型(FRDM、HFB17)以及相应的实验数据进行了比较。结果表明, 该模型能较好地描述原子核的形变、滴线、壳修正能等; 同时能很好地描述质子幻数 $Z = 20, 28, 40, 50, 82$ 处的壳能隙。利用该模型计算出的 46 个超重核的 α 衰变能的方均根偏差达到了 0.284 MeV, 比 FRDM 模型的 0.566 MeV 减小将近一半。我们进一步的研究表明, 考虑原子

核同位旋对称性引起的镜像核约束以及原子核残余修正对于改善原子核质量公式的精度有重要作用。考虑镜像核约束以及原子核残余修正后该质量公式对 2149 个原子核的方均根偏差可以降低到 336 keV^[14]。由该模型得到的原子核质量表见: <http://imqmd.com/>。

参考文献 (References):

- [1] Lunney D, Pearson J M, Thibault C. *Rev Mod Phys*, 2003, **75**: 1021.
- [2] Möller P, Nix J R, Myers W D, *et al.* *At Data Nucl Data Tables*, 1995, **59**: 185.
- [3] Goriely S, Samyn M, Pearson J M. *Phys Rev*, 2007, **C75**: 064312.
- [4] Goriely S, Chamel N, Pearson J M. *Phys Rev Lett*, 2009, **102**: 152503.
- [5] Wang Ning, Liu Min, Wu Xizhen. *Phys Rev*, 2010, **C81**: 044322.
- [6] Strutinsky V M, Ivanjuk F A. *Nucl Phys*, 1975, **A255**: 405.
- [7] Satula W, Dean D J, Gary J, *et al.* *Phys Lett*, 1997, **B407**: 103.
- [8] Audi G, Wapstra A H, Thibault C. *Nucl Phys*, 2003, **A729**: 337.
- [9] Danielewicz P, Lee J. *Nucl Phys*, 2009, **A818**: 36.
- [10] Wang Ning, Zhao K, Scheid W, *et al.* *Phys Rev*, 2008, **C77**: 014603.
- [11] Oganessian Yu Ts, Abdullin F Sh, Bailey P D, *et al.* *Phys Rev Lett*, 2010, **104**: 142502.
- [12] Dong Jianmin, Zuo W, Gu J, *et al.* *Phys Rev*, 2010, **C81**: 064309, references therein.
- [13] Zhang Dida, Ma Zhongyu, Chen Baoqiu, *et al.* *Phys Rev*, 2010, **C81**: 044319, references therein.
- [14] Liu Min, Wang Ning, Deng Y G, Wu X Z. to appear in *Phys Rev C*.

Study on Ground State Properties of Nuclei with Weizsäcker-Skyrme Nuclear Mass Formula^{*}

LIANG Zuo-ying¹, LIU Jun-hua^{1, 2}, LIU Min¹, WANG Ning^{1, #}

(1 *Department of Physics, Guangxi Normal University, Guilin 541004, Guangxi, China;*

2 *The Third Middle School of Qinzhou, Qinzhou 535000, Guangxi, China*)

Abstract: Based on a semi-empirical macroscopic-microscopic nuclear mass formula——Weizsäcker-Skyrme mass formula, some ground properties of nuclei, such as the deformations, the drip lines, the shell gaps of nuclei and the α -decay energies of some super-heavy nuclei have been studied. The experimental data can be reasonably well reproduced with this formula. In addition, the nuclear symmetry energy coefficient and the central position of super-heavy stability island were investigated.

Key words: nuclear mass formula; nuclear deformation; drip line; shell gap; super-heavy nucleus

* **Received date:** 1 Nov. 2010; **Revised date:** 16 Dec. 2010

* **Foundation item:** National Natural Science Foundation of China(10875031, 10847004)

Corresponding author: Wang Ning, E-mail: wangning@gxnu.edu.cn, Homepage: <http://www.imqmd.com/wangning>