

# 宏观模型的微观修正

胡济民 郑春开 许甫荣

(北京大学技术物理系)

## 摘 要

本文讨论了宏观模型的微观修正。采用简单的液滴模型,通过拟合核质量,讨论了 Möller 和 Nix 给出的微观修正的普适性和可能的改进。实例计算表明这种微观修正也大体适用于我们提出的连续介质模型。对核基态讲,用本文建议的简化的微观修正方法,也能获得效果相似的微观修正。

## 一、引 言

原子核的宏观模型在核结构和核反应研究方面有广泛的应用,但是在许多情况下,要和微观修正相结合,才能取得满意的结果。在几年前,我们曾提出了一种以能量泛函为基础的宏观模型<sup>[1]</sup>,并且应用它来研究了核的基态<sup>[2]</sup>、大形变和高自旋态的性质<sup>[3]</sup>。在计算核的质量时,我们直接采用了 Möller 和 Nix 所给的核质量的微观修正<sup>[4,5]</sup>(简称为 MNC),而在研究其它问题时,都没有考虑微观修正。为了扩大这种模型的应用范围,有必要对微观修正作更详细的研究。作为第一步,本文将较详细地考察已经用过的 MNC。下面我们将分三个部分来考察这一问题。在第一部分中,我们将对这种微观修正的适用性作一番独立的考察。在第二部分中,我们将具体考察这种微观修正是否适用于我们所提出的宏观模型。最后,在第三部分中,我们将讨论若干进行微观修正的方法问题,以便于对这一问题作进一步的探讨。

## 二、MNC 及其适用性的一般讨论

在一般宏观模型中,核的基态都是球形的,因此由宏观模型计算的核基态能量应该用球形核的能量。Möller 和 Nix 把这部分能量称为核的宏观能量,  $E_{\text{mac}}$ 。如果经过壳修正(包含对修正),核基态仍为球形时,核能量的微观修正  $E_{\text{mic}}$  就等于壳修正能量。如果经壳修正后基态是非球形的,则微观修正由壳修正及由宏观模型计算的形变能相加组成。这样定义微观修正能是合理的,因为形变本身是进行微观的壳修正的结果。无论怎样说,微观修正能总是和宏观模型中能量随核形状变化的规律有关的。好在对于小的形变来说,大多数宏观模型所给出的形变能相差不大,因此这种微观修正可以说具有一定程

度的普适性。

Möller 及 Nix 于 1981<sup>[4]</sup> 及 1986<sup>[5]</sup> 年先后发表了两组微观修正数值, 后者在对修正方法上较旧方法有所改进, 其它参量亦略有调整. 为了考查这新旧两组微观修正能的适用性, 我们将采用下述含六个可调参量的液滴模型公式

$$E = a_1 A + a_2 A^{2/3} + a_3 \frac{Z^2}{A^{1/3}} (1 - 0.7636 Z^{-2/3}) + a_4 A I^2 + a_5 A^{2/3} I^2 + a_6 Z^2 / A + E_w + E_p \quad (1)$$

式中  $a_1, \dots, a_6$  是可调整参量,  $I = \frac{N-Z}{A}$ ,  $E_w$  及  $E_p$  是 Wigner 项和平均对能, 直接取自文献[4]:

$$E_w = 36 |I| + \begin{cases} 1/A & \text{当 } Z = N, \text{ 且均为奇数时} \\ 0 & \text{其它情况} \end{cases} \quad (\text{MeV})$$

$$E_p = \begin{cases} \Delta/A^{1/2} - (1/2)\delta/A & Z \text{ 与 } N \text{ 均奇} \\ (1/2)\delta/A & A \text{ 为奇} \\ -[\Delta/A^{1/2} - (1/2)\delta/A] & Z \text{ 与 } N \text{ 均偶} \end{cases}$$

$\Delta = 12 \text{ MeV}$ ,  $\delta = 20 \text{ MeV}$ . 很容易看出式(1)和 Myers-Swiiatecki 质量公式<sup>[6]</sup>很相近, Wigner 项包括与否影响不大. 用公式(1)和两组微观修正能来拟合 1500 个以上的核的已知质量, 可以得到六个参量以及拟合的均方根偏差  $\delta_m$ , 结果如表 1 所示 (均以 MeV 为单位). 由表上可以看到, 即使用这样简单的质量公式, 也能得到与实验值符合得很好的结果. 人们改进质量公式, 往往不仅是为了增进与实验质量值的符合程度, 而且是为了满足其它的一些要求, 例如能给出正确的裂变位垒, 或者加进一些理论上认为应该包括进去的项目, 如零点能等. 就核质量来讲, 可以认为, 只有改进微观修正能, 才有可能较大地改善与实验质量值的符合程度. 为了更详细地考察微观修正, 我们采用了分段拟合或计算均方根偏差的办法, 其结果如表 2 所示. 在表 2 的第 I 栏中, 我们将核的质量分为 24 段, 应用表 1 的参量逐段计算了质量的均方根偏差. 可以看出这种偏差并不均匀, 在  $A$  值 230—211, 100—81 和 50—21 三个区间偏差较大, 尤其是最后一个区间偏差最大. 在表 2 的第 II 栏中, 我们用逐步扩大拟合范围的方法, 计算了在 24 个逐步扩大的范围内用拟合的方法所得的最小均方根偏差. 而在表 2 的第 III 栏中则应用表 1 中的参量计算了同一范围内的均方根偏差. 从表 2 中可看出, 对于  $A > 90$  的核, 新的微观修正要比旧的好. 实际上, 大的误差都是在  $A < 100$  的区间引入的. 如果就用式(1)和新的微观修

表 1 (能量单位: MeV)

	$a_1$	$a_2$	$a_3$	$a_4$	$a_5$	$a_6$	$\delta_m$
旧	-15.2569	16.7280	0.69383	28.2524	-37.60	-0.1170	0.704
新	-15.4041	17.5640	0.70176	29.0242	-42.17	-0.3015	0.777

正能, 以及表 1 中的参量, 在  $A > 60$  的区间, 质量的均方根偏差可以在 0.5—0.6 MeV 左右, 但不同的区间, 偏差有一些不同. 由此可见, 要着重研究  $A < 100$  区间的微观修正.

表 2 (能量单位: MeV)

I			II			III		
核质量区间	新	旧	核质量区间	新	旧	核质量区间	新	旧
260—251	0.536	0.558	260—251	0.131	0.076	260—251	0.536	0.558
250—241	0.323	0.232	260—241	0.131	0.103	260—241	0.422	0.377
240—231	0.297	0.237	260—231	0.135	0.138	260—231	0.380	0.328
230—221	0.880	0.989	260—221	0.262	0.248	260—221	0.579	0.618
220—211	0.741	0.755	260—211	0.452	0.480	260—211	0.627	0.663
210—201	0.550	0.561	260—201	0.489	0.504	260—201	0.611	0.641
200—191	0.315	0.375	260—191	0.496	0.519	260—191	0.577	0.609
190—181	0.305	0.348	260—181	0.480	0.526	260—181	0.554	0.582
180—171	0.309	0.449	260—171	0.469	0.525	260—171	0.534	0.570
170—161	0.506	0.561	260—161	0.510	0.553	260—161	0.531	0.569
160—151	0.359	0.333	260—151	0.493	0.532	260—151	0.512	0.545
150—141	0.511	0.658	260—141	0.488	0.536	260—141	0.512	0.562
140—131	0.505	0.698	260—131	0.497	0.561	260—131	0.511	0.578
130—121	0.441	0.699	260—121	0.492	0.562	260—121	0.505	0.590
120—111	0.424	0.408	260—111	0.486	0.553	260—111	0.500	0.577
110—101	0.554	0.516	260—101	0.481	0.551	260—101	0.504	0.573
100—91	0.776	0.921	260—91	0.516	0.591	260—91	0.532	0.610
90—81	1.058	0.738	260—81	0.567	0.601	260—81	0.580	0.619
80—71	0.652	0.454	260—71	0.560	0.589	260—71	0.584	0.611
70—61	0.846	0.828	260—61	0.588	0.608	260—61	0.598	0.623
60—51	0.835	0.688	260—51	0.601	0.612	260—51	0.611	0.626
50—41	1.831	1.299	260—41	0.683	0.647	260—41	0.715	0.671
40—31	1.527	0.925	260—31	0.753	0.676	260—31	0.760	0.682
30—21	1.154	1.149	260—21	0.777	0.704	260—21	0.777	0.704

特别是在  $A$  由 81 到 100 和 50 到 21 两区间的微观修正。为此,我们计算了在这两区域里每一核质量实验值与理论值的差别,我们发现差别大于 1MeV (即比平均值大)的核的分布是很有规律的,例如在  $A$  由 81 到 100 的区间有下列的分布规律:

(1) 对  $N < 50$  的核,实验值均大于理论值的,分布在  $37 < Z < 43$  和  $44 < N < 48$  之间。

(2) 对  $N > 50$  的核,实验值均小于理论值的,分布在  $35 < Z < 42$  和  $53 < N < 57$  之间,在  $N > 60$  和  $Z > 37$  的区间,又有少数核实验值大于理论值。

在  $A$  由 50 到 21 的区间,也可以看到类似的规律。用 Nix 的有限力程模型,也可得到相似的分布,这种形成结团的误差分布,显然不是宏观模型引入的,也不见得是对修正引起的。Möller 和 Nix 在计算壳修正时,主要注意了重核区。也许对轻核区参量作一些调整,可以修正这种较大的偏离。

### 三、连续介质宏观模型中应用 MNC 的根据

在计算 MNC 时,用到由 FRM 模型计算的宏观变形能,因此要判断某一宏观模型能

否适用 MNC, 就要看对于较小的形变, 能量随形变变化的规律是不是和 FRM 一致. 不难证明, 对于小的形变, FRM 模型能量随形变的变化规律是和液滴模型一致的. 实际上, 在所谓的薄壁分布 (Lepto dermos distribution) 近似下, 对所有符合薄壁条件的模型, 在球形附近, 能量随形变的变化规律都和液滴模型是一致的<sup>[7]</sup>. 对我们的宏观模型, 这一点也近似地适用. 可惜的是, 有些核的基态形变还相当大, 对于 FRM 和我们的模型, 上述近似都不很适用, 只能用数字计算的方法对这两个模型的变形能进行比较. 关于 FRM 可采用文献[5]的参量和文献[8]的计算方法进行计算. 在我们的模型里, 核子密度  $\rho_N$ ,  $\rho_Z$  以及体系的能量  $E$  是由能量泛函取极小值所决定的<sup>[1]</sup>.

$$E[\rho_N, \rho_Z] = \int [-a_1 + a_3(\rho_N - \rho_Z)^2/\rho_0^2 + Sa_3(\rho_N + \rho_Z - \rho_0)^2/\rho_0^2]\rho_0 dV \\ + \int [a_4 - a_6(\rho_N - \rho_Z)^2/\rho_0^2 - Sa_6(\rho_N + \rho_Z - \rho_0)^2/\rho_0^2]\varphi\rho_0 dV \\ + \frac{e^2}{2} \iint \frac{\rho_Z(\vec{r}_1)\rho_Z(\vec{r}_2)}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} dV_1 dV_2 \quad (2)$$

式中  $\varphi = |\nabla\rho_0|/\rho_0$

对于球形核, 密度  $\rho_0$  是费米分布

$$\rho_0 = \frac{t}{4\pi a^3} \left[ 1 + \exp\left(\frac{r - R_0}{a}\right) \right]^{-1}, \quad (3)$$

给出的,  $R_0$  由条件

$$\int \rho_0 dV = A \quad (\text{质量数}) \quad (4)$$

所决定. 其它参量均在文献[2]中给出. 在计算中, 我们将采用第四组参量. 对于变形核, 则主要通过改变  $\rho_0$  的定义而达到变形的目的. 如令

$$f(\theta) = 1 + \sum_{n=2} \alpha_n P_n \quad (5)$$

表示一轴对称形变, 则  $\rho_0$  可取如下的定义

$$\rho_0 = \frac{t}{4\pi a^3} \{1 + \exp[(r - R_0\lambda f)/a]\}^{-1}, \quad (3a)$$

或

$$\rho_0 = \frac{t}{4\pi a^3} \{1 + \exp[(r/\lambda f - R_0)/a]\}^{-1}, \quad (3b)$$

式中  $\lambda$  由条件(4)决定. 对于小的形变, 这些定义是合适的. 现将按定义 (3b) 计算的形变能与由 FRM 计算的结果比较于表 3 中. 由表可以看出, 对于小形变, 两者大体上是一致的. 因此, 用 MNC 不会引起较大的误差. 对于比较大的形变, 用上述定义就不合适, 因为在边界上的密度梯度很不均匀, 这时用下述定义<sup>[3]</sup>

$$\rho_0 = \frac{t}{4\pi a^3} \{1 + \exp[(r - \lambda R_0 f)/(a\sqrt{1 + f^2/f^2})]\}^{-1}, \quad (3c)$$

表 3  $^{238}\text{Fm}$  核的形变能  $E_d(\alpha_2, \alpha_4)$  不同模型计算结果的比较\*(能量单位: MeV)

$\alpha_2 \backslash \alpha_4$	-0.3	-0.2	-0.1	0.0	0.1	0.2	0.3
-0.08	6.76	4.04	2.43	1.92	2.28	3.16	4.23
	6.55	4.16	2.50	1.96	2.54	3.94	5.80
	7.70	4.78	2.84	2.15	2.56	3.69	5.17
-0.04	5.31	2.54	0.96	0.48	0.83	1.64	2.56
	5.34	2.75	1.05	0.50	1.00	2.28	3.97
	6.20	2.89	1.09	0.53	0.95	1.98	3.27
0.00	4.60	1.91	0.43	0.00	0.30	0.95	1.63
	4.83	2.15	0.52	0.00	0.43	1.54	2.99
	5.18	2.18	0.51	0.00	0.38	1.24	2.27
0.04	4.66	2.16	0.85	0.48	0.69	1.09	1.41
	4.89	2.40	0.94	0.50	0.86	1.71	2.79
	5.48	2.58	1.00	0.52	0.82	1.47	2.15
0.08	5.52	3.32	2.22	1.91	1.97	2.03	1.89
	5.68	3.51	2.34	2.04	2.25	2.78	3.42
	6.82	4.06	2.56	2.11	2.30	2.64	2.92

\* 表中  $\alpha_2, \alpha_4$  为表面方程按 Legendre 多项式展开的四极和十六极形变参量。第一行为给定  $\alpha_2, \alpha_4$  值时 FRM 的形变能。第二、三行分别为本文取 (3b) 和 (3c) 形式参考密度时计算的结果, 计算时所选参数使得电四极矩、电十六极矩与第一行 FRM 模型的相同。

式中  $f' = \frac{df}{d\theta}$ , 就比较合适。或者使用<sup>[7]</sup>

$$\rho_0 = \frac{t}{4\pi a^3} \{1 + \exp(u/a)\} \quad (3d)$$

则更能保证梯度的均匀, 这里  $u$  是点  $\vec{r}$  到曲面

$$R = \lambda R_0 f(\theta)$$

的最小距离, 在曲面内取负值, 在曲面外则取正值。由此可见, 对于我们的模型, 形变能是有一定的调整余地的。

#### 四、微观修正方法的讨论

对核能量进行微观修正, 就涉及到进行壳修正和对修正的方法问题。在这方面, 我们将讨论平均场的选取和对修正方法的改进这两个问题。Möller 和 Nix 所选用的平均场是一种汤川折叠势。这种势的优点在于能在边界上给出均匀而合理的梯度, 可以适用到比较大的形变。缺点是计算工作量较大, 特别是大形变的情况。因为计算核基态质量不需要很大的形变, 所以我们建议还是采用 Nilsson 势和拉伸坐标<sup>[9]</sup>。这种势便于调整参量来求得最佳的微观修正。如采用文献[9]给出的参量, 那么算得的微观修正就和 MNC 很接近。实际上, 如图 1 所示, 球形情况下, 用 Nilsson 势计算得到的单粒子能级与

Nix 等人用折叠势计算的结果<sup>[10]</sup>很接近。在小形变时,两者的能级分布也是非常相近的,这样,当然会得到同样的壳修正。如,用这两种不同的势分别计算核  $^{240}\text{Pu}$  的基态微观修正,两者的结果相差只有  $0.05\text{MeV}$ 。但是,对于较大的形变,这两种平均场所给出的单粒子能级就会有明显的区别。在那时,可以用其他合适的平均场,如由式(3c)或(3d)所给出的 Woods-Saxon 势。

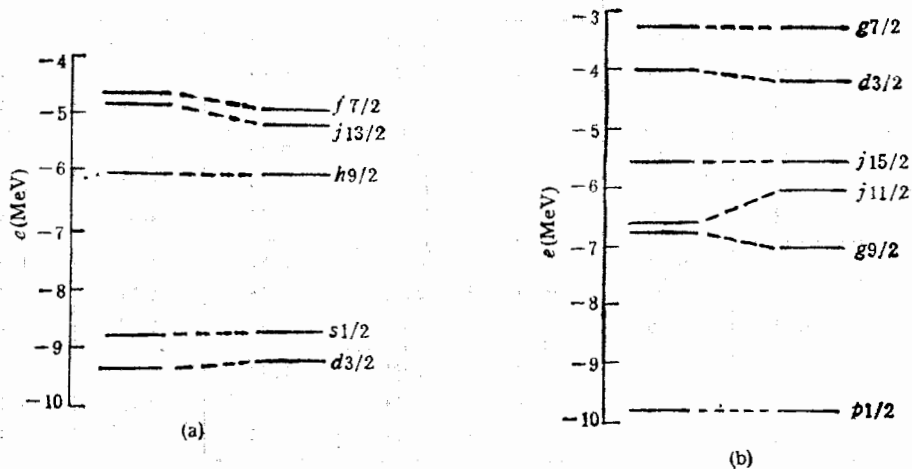


图 1(a) 球形  $^{240}\text{Pu}$  在费米面附近的质子能级。其中,左边的能级是用折叠势计算的<sup>[10]</sup>,右边的则为 Nilsson 势的结果

图 1(b) 与图 3(a) 相同情况下的中子能级

关于对修正, Möller 和 Nix 建议采用 Lipkin-Nogami 的改进了的 BCS 方法(简称 LN 方法)<sup>[11]</sup>。这种方法可以近似地保持粒子数守恒,在理论上是一种改进。但是计算工作量要大得多。表 4 列举了一些核的用两种方法计算的对修正之差。从表上可以看出当  $A > 40$  时,两种方法的差别并不大。考虑到对修正本身就是一种半唯象的理论,对作用常数是一个可调量,而且假定不同能级之间的对作用强度都相同,这本身就是一个很粗糙的近似,对 BCS 的 LN 改进似乎不一定要引入。

表 4\* (能量单位: MeV)

质量数 $A$ (质子数 $Z$ )	26 (12)	30 (14)	40 (16)	50 (18)	60 (26)	80 (32)	100 (40)	128 (56)	150 (64)	180 (76)	218 (86)	252 (100)	280 (120)
$E_{\text{BCS}} - E_{\text{LN}}$	2.03	2.21	0.60	0.53	0.42	0.10	0.33	0.54	0.45	-0.13	0.14	-0.30	0.07

\*  $E_{\text{BCS}}, E_{\text{LN}}$  分别为用一般的 BCS 方法和 LN 方法求得的对修正能。

最后,为了全面检验我们的模型,我们选择了由 Ar 到 Fm 的 100 个核,利用 Möller-Nix 所给的核基态形变<sup>[5]</sup> 和我们的模型及上述简化的微观修正方法(用 Nilsson 势及 BCS 方法),计算了这些核的基态质量,计算结果与实验值的均方根差为  $0.71\text{MeV}$ , 而文献[5]所给的这些核的均方根差为  $0.65\text{MeV}$ 。由此可见,对基态而言,用这种简化的微观

修正方法不会大大影响计算结果与实验的符合程度。对于形变较小的核态, 这种推论也许普遍适用。这种简化方法计算工作量较小, 便于调整参量, 以获得更好的微观修正, 这项工作正在进行中。

我们感谢核数据委员会对本工作的支持。

### 参 考 文 献

- [1] 胡济民, 高能物理与核物理, **5**(1981), 244.
- [2] 胡济民, 郑春开, 原子核物理, **7**(1985), 1.
- [3] 陈信义, 胡济民, 高能物理与核物理, **13**(1989), 380.
- [4] P. Möller and J. R. Nix, *Atomic Data and Nuclear Data Table*, **26**(1981), 165.
- [5] P. Möller and J. R. Nix, *Atomic Data and Nuclear Data Table*, (1986).
- [6] W. D. Myers and W. J. Swiatecki, *Nucl. Phys.*, **81**(1966), 1.
- [7] M. Brack, C. Yuet, H. B. Hakansson, *Phys. Rep.*, **123** (1985), 275.
- [8] K. J. Krappe and J. R. Nix, *Physics and Chemistry & Fission*, **1**(1973), 159, I.AEA.
- [9] S.G. Nilsson and C. F. Tsang, *Nucl. Phys.*, **A131**(1969), 1—66.
- [10] P. Möller, S. G. Nilsson and J. R. Nix, *Nucl. Phys.*, **A229**(1974), 292—319.
- [11] H. C. Pradhan, Y. Nogami and J. Law, *Nucl. Phys.*, **A201**(1973), 357.

## MICRO-CORRECTION TO THE NUCLEAR MACROSCOPIC MODEL

HU JIMIN    ZHENG CHUNKAI    XU FURONG

(Department of Technical Physics, Peking University)

### ABSTRACT

The micro-correction to the nuclear macroscopic model is studied with a simple liquid drop model by fitting the nuclear masses. It is found that the micro-correction given by Möller and Nix is generally applicable with satisfactory results. Possible regions for improvement are indicated. Sampling calculations indicate that their corrections are also applicable to the continuous medium model proposed by the authors. For nuclear ground state, it is suggested that simplified method of micro-correction calculation may give similar results.