



基于库仑能经验公式及质量模型对库仑置换能的系统学研究

孟宇航^{1,2}, 王小保^{2*}, 图雅¹, 董国香^{2*}

1. 沈阳师范大学物理科学与技术学院, 沈阳 110034;

2. 湖州师范学院理学院, 湖州 313000

*联系人, 王小保, E-mail: xbwang@zjhu.edu.cn; 董国香, E-mail: gxdong@zjhu.edu.cn

收稿日期: 2019-10-03; 接受日期: 2019-12-31; 网络出版日期: 2020-05-07

国家自然科学基金(编号: U1732138, 11605054, 11505056, 11305108, 11790325, 11847315)资助项目

摘要 本文基于原子核结合能, 对库仑能经验公式进行了研究. 从最简单的经验公式出发, 唯象地增加库仑交换项、对关联修正、壳修正等, 使库仑能被更好地计算出来. 同时, 调研了常用质量模型的库仑置换能, 它与实验的系统性偏差和理论中强相互作用的同位旋破缺项的缺失有关. 对该偏差的研究发现, 微观理论的结果有明显系统学行为, 有望引入同位旋破缺项等改进, 而基于参数拟合的唯象模型系统学特征不明显, 可能是模型参数不能包含微观结构信息导致的.

关键词 库仑能经验公式, 镜像核, 库仑置换能, 质量模型

PACS: 21.10.Sf, 21.60.-n, 21.10.Dr

1 引言

原子核作为一个复杂的多体量子体系, 它的结构特性等问题很难完全清楚地被了解, 我们通过研究原子核的半径、质量、宇称、自旋、同位旋等性质来认识原子核. 在原子核的内部除了核子-核子间的相互作用, 还存在着质子-质子间的库仑相互作用^[1]. 库仑相互作用在核结构物理研究中起到很重要的作用, 同时它也是核结构研究的热点问题.

库仑置换能(Coulomb Displacement Energy, CDE)是交换质子数和中子数的镜像核的结合能之

差^[2,3], CDE可以反映库仑相互作用破坏的电荷对称性, 同时它也是一个预测未知原子核质量的可靠方法. 由于库仑能可以提供价核子的信息, 那么CDE就可以表现出镜像核之间的能级关系, 这有助于我们了解原子核的结构^[4,5]. 在理论计算中得到的CDE要比实际的CDE小几百keV^[6], 这种异常现象出现的原因是CDE的产生有两种来源: 一个是质子-质子间的库仑相互作用, 另一个是强相互作用中的同位旋破缺项(电荷依赖项). 所以根据库仑相互作用得到的CDE计算值与CDE实验值之间的差异可以帮助我们估计出同位旋破缺项的大小.

引用格式: 孟宇航, 王小保, 图雅, 等. 基于库仑能经验公式及质量模型对库仑置换能的系统学研究. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2020, 50: 072001
Meng Y H, Wang X B, Tu Y, et al. Systematic study of Coulomb displacement energy based on the Coulomb energy empirical formula and mass model (in Chinese). Sci Sin-Phys Mech Astron, 2020, 50: 072001, doi: [10.1360/SSPMA-2019-0341](https://doi.org/10.1360/SSPMA-2019-0341)

本文通过原子核质量的实验数据,详细地研究了增加不同修正项的库仑能经验公式以及不同原子核质量模型的CDE,在验证库仑能经验公式正确性的同时也可以得到精确计算库仑能的最佳经验公式.另外,由于库仑能经验公式与质量模型中得到的CDE计算值与实验值之间存在差值,我们也对该差值进行系统学研究,通过差值的大小或许可以估计出原子核强相互作用中同位旋破缺项的大小.一方面检验各个模型对库仑能、库仑置换能的计算精度;另一方面,可能通过与实验值的偏差理解同位旋破缺效应的大小,为以后进一步改进理论模型提供帮助.

2 理论框架

2.1 库仑能公式及库仑置换能

库仑能对原子核结构性质的影响不容忽视,库仑能本身较为复杂,通过库仑能经验公式精确计算库仑能的大小可以帮助我们了解库仑相互作用对原子核结构的影响.以最简单的液滴模型为例,液滴模型原子核质量公式中各项的特点是,除库仑能项以外的其他项都与质量数 A 或质子数与中子数的绝对差 $|N-Z|$ 有关.那么我们就借助镜像核 A 相同、 $|N-Z|$ 也相同的特殊性质将一组镜像核的质量公式做差,之后得到的公式中只包含库仑能项,它可以直接体现库仑相互作用的性质,得到的能量就是CDE,其定义为

$$E_{\text{CDE}} = E_{Z>N} - E_{Z<N}, \quad (1)$$

式中 $E_{Z>N}$, $E_{Z<N}$ 是一组镜像核的基态结合能,假设CDE是由库仑能完全产生的, CDE计算公式就可以表示为^[7]

$$E_{\text{CDE}} \approx -E_{\text{C}}(Z, A) + E_{\text{C}}(A-Z, A), \quad (2)$$

式中 $E_{\text{C}}(Z, A)$ 项为一组镜像核中质子数小的原子核的库仑能,以下文章中的 Z 均指代镜像核中质子数较小的那一个.按照上面公式计算, CDE的结果一般应为正值.接下来将增加了不同修正项的库仑能经验公式代入(2)式,我们可以得到不同的CDE计算公式.

2.1.1 库仑能经验公式

假设质子占据一个半径为 R_0 的均匀带电球体时,由于 R_0 与 $A^{1/3}$ 成正比,所以作为库仑相互作用直接项的原子核库仑能经验公式表示为

$$E_{\text{C}} = a_{\text{C}} \frac{Z^2}{A^{1/3}}, \quad (3)$$

将上式代入可以与库仑能有关的可计算CDE的(2)式中,可以得到

$$E_{\text{CDE}} = -\frac{a_{\text{C}}}{A^{1/3}} \left(Z^2 - (A-Z)^2 \right). \quad (4)$$

2.1.2 库仑交换项

为了更好地计算原子核的库仑能,根据量子力学中对费米子波函数需要进行反对称化的要求,文献[8]最早指出库仑能经验公式中需要加入库仑交换项,因此我们需要在原有的库仑能经验公式上加入库仑交换项^[9],库仑能公式具体形式如下:

$$E_{\text{C}} = a_1 \frac{Z^2}{A^{1/3}} \left(1 - Z^{-2/3} \right), \quad (5)$$

式中 $Z^{-2/3}$ 项为库仑交换项,将(5)式代入(2)式得

$$E_{\text{CDE}} = -\frac{a_1}{A^{1/3}} \left[\left(Z^2 - (A-Z)^2 \right) - \left(Z^{4/3} - (A-Z)^{4/3} \right) \right]. \quad (6)$$

为了进一步提高库仑能公式的精度,我们为库仑交换项单独拟合新参数,之前的库仑能公式可以表示为

$$E_{\text{C}}(Z, A) = \left(a_1 Z^2 + a_2 Z^{4/3} \right) \frac{e^2}{R(A)}, \quad (7)$$

式中 a_1 项是库仑相互作用的直接项, a_2 项是库仑交换项,另外 $R(A)$ 是原子核半径,公式如下^[10]:

$$R(A) = \sqrt{\frac{3}{5} \left[\left(r_0 A^{1/3} \right)^2 + \frac{7}{3} \pi^2 a_0^2 \right]}, \quad (8)$$

其中常数取值为 $r_0=1.15$ fm, $a_0=0.35$ fm. 该计算公式相比于原始的均方根半径公式 $r_0 A^{1/3}$,加了弥散度修正(Diffuseness-Modified Root-Mean-Square Radius Equation). 将(7)式代入CDE公式(2)得到

$$E_{\text{CDE}} = -\left[a_1 \left(Z^2 - (A-Z)^2 \right) + a_2 \left(Z^{4/3} - (A-Z)^{4/3} \right) \right] \frac{e^2}{R(A)}, \quad (9)$$

2.1.3 对修正项

考虑到质子数 Z 为奇数时, 最后一个质子的自旋没有配对从而导致了需要对原始的库仑交换项做一个修正, 虽然这一项对于重核来说不是重要的影响因素, 但是它与镜像核对能项有关^[9,11]. 所以, 我们引入对修正项将经验库仑能公式做了新的定义:

$$E_C(Z, A) = \left[a_1 Z^2 + a_2 Z^{4/3} + a_3 (1 - (-)^Z) \right] \frac{e^2}{R(A)}, \quad (10)$$

式中 a_1 项是库仑相互作用的直接项, a_2 项是根据基态波函数反对称化要求得到的库仑交换项, a_3 项是由对关联引起的修正项, 将公式(10)带入CDE公式(2)中可得到

$$E_{CDE} = - \left[a_1 (Z^2 - (A - Z)^2) + a_2 (Z^{4/3} - (A - Z)^{4/3}) + a_3 ((-)^{A-Z} - (-)^Z) \right] \frac{e^2}{R(A)}. \quad (11)$$

2.1.4 质子形状因子

在库仑能经验公式中, 还可以引入质子形状因子修正^[12], 如下库仑能经验公式可表示为

$$E_C(Z, A) = \left[a_1 Z^2 + a_2 Z^{4/3} + a_3 (1 - (-)^Z) \right] \frac{e^2}{R(A)} - f_0 \frac{Z^2}{A}, \quad (12)$$

式中最后一项为质子形状因子对库仑能的修正, 即 $E_{pf} = f_0 \frac{Z^2}{A}$, 其中 f_0 由下式给出:

$$f_0 = -\frac{1}{8} \left(\frac{145}{48} \right) \frac{r_p^2 e^2}{r_0^3}. \quad (13)$$

在文献[12]中给出常数值: $e^2 = 1.44 \text{ fm}$, $r_p = 0.80 \text{ fm}$, 将以上常数代入(13)式可得到 $f_0 = -0.229 \text{ MeV}$. 所以考虑质子形状因子的CDE计算公式变为

$$E_{CDE} = - \left[a_1 (Z^2 - (A - Z)^2) + a_2 (Z^{4/3} - (A - Z)^{4/3}) + a_3 ((-)^{A-Z} - (-)^Z) \right] \frac{e^2}{R(A)} + f_0 \frac{Z^2 - (A - Z)^2}{A}. \quad (14)$$

2.1.5 壳修正

为了使计算结果更好地接近CDE的实验值, 我们可以进一步为库仑能经验公式增加一项简单的壳修正 $a_{sh} \delta_{sh}$, 其中 a_{sh} 为参数, δ_{sh} 在中子数 N (质子数 Z)为1-2, 3-8, 9-20, 21-28, 29-50, 51-82时分别对应取值为1, 2, 3, 4, 5, 6^[13]. 该壳修正值虽然并非微观计算得到, 但是可以简单地区分处于不同幻数区间的壳层结构差别. 此外, 还有其他引入壳修正的方法, 如文献[14, 15]等提出的壳修正能. 公式(9)经过改进后的计算公式变为

$$E_{CDE} = - \left[a_1 (Z^2 - (A - Z)^2) + a_2 (Z^{4/3} - (A - Z)^{4/3}) \right] \times \frac{e^2}{R(A)} - a_{sh} (\delta_{sh,Z} - \delta_{sh,A-Z}). \quad (15)$$

想要更准确地描述CDE的性质, 将该项壳修正公式加到公式(14)后的计算公式变为

$$E_{CDE} = - \left[a_1 (Z^2 - (A - Z)^2) + a_2 (Z^{4/3} - (A - Z)^{4/3}) + a_3 ((-)^{A-Z} - (-)^Z) \right] \frac{e^2}{R(A)} + f_0 \frac{Z^2 - (A - Z)^2}{A} - a_{sh} (\delta_{sh,Z} - \delta_{sh,A-Z}). \quad (16)$$

2.2 原子核的质量模型

原子核的质量(结合能)作为描述原子核性质最基础的物理量, 原子核的质量公式是核物理领域很重要的研究内容. 随着我国大型放射性束装置的应用, 实验技术在不断地更新进步, 对于原子核质量的实验测量越来越精确. 另一方面, 原子核质量公式等理论研究也一直在发展中. 一般来说, 原子核质量公式是通过拟合已知原子核的质量得到公式参数, 原则上质量公式确定了参数便可以进行外推, 计算任意原子核的质量. 对原子核质量公式的研究可以说是核物理领域的热点问题, 这对核天体、原子物理等相关学科的研究有着重要的影响作用. 所以科学家们对原子核质量公式进行了详细的分析并提出了很多成功的理论模型, 最初的液滴模型质量公

式是由Weizsäcker^[16]提出的,

$$\begin{aligned} B &= B_v + B_s + B_C + B_a + B_p \\ &= a_v A - a_s A^{2/3} - a_C \frac{Z^2}{A^{1/3}} - a_a \frac{(N-Z)^2}{A} + a_p \delta A^{-1/2}, \end{aligned} \quad (17)$$

式中体积能为 $B_v = a_v A$, 表面能为 $B_s = -a_s A^{2/3}$, 对称能为 $B_a = -a_a \frac{(N-Z)^2}{A}$, 对能为 $B_p = a_p \delta A^{-1/2}$, 库仑能为 $B_C = -a_C \frac{Z^2}{A^{1/3}}$.

液滴模型的提出有两个主要依据: 一是由原子核结合能发现原子核每个核子的平均结合能几乎是个常数, 这说明核子间的相互作用力具有饱和性; 二是原子核密度几乎是常量, 这说明原子核具有不可压缩性. 这两个性质与液体性质相似, 因此可以将原子核看成带正电的液滴, 便提出了原子核的液滴模型, 液滴模型在研究裂变过程、核反应中复合核的性质中也有较好的处理结果^[17].

液滴模型在计算中应用比较广泛, 许多文章^[18-21]都致力于液滴模型公式的形式改进, 增加各种新项的修正, 更加符合实验值. 液滴模型可以用来反映原子核性质的平均趋势, 但它不能再现原子核内的精细结构. 为了改进质量公式, 需要进一步考虑原子核的壳层结构. 在液滴模型的基础上引入壳修正等, 就是常用的宏观-微观模型.

在原子核性质的研究过程中, 科学家们建立了大量不同的原子核理论模型, 目前宏观-微观模型已在原子核质量计算、原子核基态性质等方向取得了很大的成功. 经典的宏观-微观模型例如有限力程小液滴模型(FRDM)^[12]、Weizsäcker-Skyrme模型(WS4)^[22]、KTUY05质量模型^[23]都是经典的宏观-微观模型. 以FRDM和WS4为例, FRDM(2012)经过长期发展, 不断地增加新的修正项才能够很好地计算基态质量, 而WS4是以液滴模型为基础修改的模型. 相较于FRDM, 它计算参数较少, 更易计算, 并且将宏观与微观的同位旋效应同时考虑在内, 能够更好地计算原子核的质量. 它们的原子核结合能与实验值平均相差不到1 MeV, 是非常成功的质量模型. 此外, Dufo-Zuker (DZ)质量模型^[24-26]以及ETFSI12质量模型^[27]严格讲不属于宏观-微观模型, 它们可以很好地再现原子核性质.

此外, 还有基于微观的密度泛函理论的质量计算模型, 如HFB21^[28], SLy4 DFT, SkM* DFT, SkP DFT^[29,30], RCHB^[31]等. 其中, RCHB(相对论连续谱Hartree-Bogoliubov理论)考虑了连续谱的影响, 它是较成功地描述奇特原子核以及稳定原子核的基态特性的研究理论之一.

3 结果与讨论

我们选取了两组研究对象, 一组是位于sd壳层、质量数为 $16 < A < 40$ 的57组镜像核作为sd壳研究对象, 另外一组是位于fp壳层、质量数为 $40 < A < 80$ 的85组镜像核作为fp壳层研究对象, 主要研究它们之间的结合能之差(CDE). 文章中用到的所有原子核的基态结合能实验值数据都来自于文献^[32], 将原子核结合能的实验值带入(2)式就可以获得CDE的实验值. 实验数据、估计数据的个数见表1. 在拟合公式参数时, 为避免估计值带来的偏差, 我们只采用精确的实验数据进行拟合.

公式(4), (6), (9)和(15)通过拟合实验值得到的参数见表2. 我们将四个不同的公式在sd壳、fp壳的CDE计算值与实验值之差 ΔCDE 一并画在图中, 见图1. 通过计算得到四个不同经验公式在sd, fp壳层的均方根误差见表3.

通过对图1的观察发现, 随着sd壳和fp壳质子数与中子数绝对差值 $|N-Z|$ 的增加, 公式(4)的 ΔCDE 值逐渐远离图中虚线0 MeV. 这说明公式(4)计算值与实验值之间的差距增大, 而公式(6)和(9)的计算值与实验值符合情况较好. 从表3中均方根误差的大小来看, 这三个经验公式在fp壳的符合情况要好于sd壳. 我们还发现增加了库仑交换项的公式(6)和(9)的计

表1 本文使用的镜像数据组的数目统计

Table 1 The number of data sets for mirror nuclei used in this paper

分组	sd壳实验	sd壳估计	fp壳实验	fp壳估计
$ N-Z =1$	12	0	17	3
$ N-Z =2$	11	0	9	10
$ N-Z =3$	10	0	7	11
$ N-Z =4$	5	4	0	11
$ N-Z =5$	1	7	0	9
$ N-Z =6$	1	6	0	8

表2 库仑能经验公式参数以及标准误差(MeV)

Table 2 The parameter value in the empirical formula of Coulomb energy and its standard error (MeV)

参数	a_1	a_2	a_3	a_{sh}
Eq. (4)	0.619±0.026	-	-	-
Eq. (6)	0.687±0.009	-	-	-
Eq. (9)	0.451±0.003	-0.325±0.034	-	-
Eq. (11)	0.450±0.003	-0.321±0.033	-0.075±0.035	-
Eq. (14)	0.451±0.003	-0.480±0.033	-0.075±0.035	-
Eq. (15)	0.451±0.003	-0.327±0.034	-	-0.076±0.070
Eq. (16)	0.452±0.003	-0.481±0.033	-0.069±0.036	-0.041±0.072

表3 库仑能经验公式的均方根误差(MeV)

Table 3 The root mean squared error of the Coulomb energy empirical formula (MeV)

模型	sd	fp	sd+fp
Eq. (4)	0.578	0.575	0.577
Eq. (6)	0.305	0.228	0.273
Eq. (9)	0.243	0.175	0.215
Eq. (11)	0.231	0.171	0.206
Eq. (14)	0.233	0.17	0.207
Eq. (15)	0.239	0.171	0.211
Eq. (16)	0.227	0.175	0.205
FRDM [12]	0.739	0.452	0.585
WS4 [22]	0.880	0.471	0.666
KTUY05 [23]	0.320	0.869	0.702
DZ [24-26]	0.494	0.492	0.493
ETFSI12 [27]	1.143	1.634	1.606
HFB21 [28]	1.103	0.716	0.892
SLy4 [29,30]	1.100	1.595	1.428
SkM* [29,30]	2.124	3.239	2.851
SkP [29,30]	1.174	1.687	1.521
RCHB [31]	0.444	0.790	0.664

算值符合情况要明显好于最简形式的公式(4), 说明了库仑交换项对库仑能经验公式的修正具有很重要的影响作用. 而对比公式(9)和(6)的均方根误差, 可以发现单独拟合得到的库仑能交换项参数更加精确. 因此, 库仑能经验公式中库仑交换项是不容忽视的.

在图1中, 公式(15)的符合情况是最好的, 这说明壳修正对CDE有一定贡献, 可以帮助更好地计算CDE. 同时在公式(9)基础上引入了对修正项、质子形状因子以及壳修正这三种修正项形成新的CDE计算公式, 公式(11), (14)和(16)在线性回归分析后得到

的新参数值见表2. CDE计算值与CDE实验值进行对比, 见图2. 另外, 三个含有不同修正项的库仑能经验公式在sd, fp以及sd+fp壳层的计算值均方根误差见表3. 在表3中公式(11)的均方根误差比公式(9)的结果好, 这说明了修正项对CDE是有一定贡献的. 根据对图2的观察, 公式(11), (14)和(16)的CDE计算值与CDE实验值间的符合情况并没有很大的差异, 再由表3可以看到, 在fp壳层, 公式(11)的均方根误差和增加修正项(14)的结果接近. 在公式(14)中包含了四项, 每一项对CDE的贡献各有不同, 我们选择sd壳 $A=31$ 的一组镜像核以及fp壳 $A=51$ 的一组镜像核分析每一个作用项的大小, 见图3. 我们不难看出, 每一项都随着 $|N-Z|$ 的增大而增大, 并且CDE的主要贡献来源于 a_1 项. 由于 f_0 项本身数值偏小, 在图3中也可以看出质子形状因子修正项对CDE的贡献较小. 在图3的例子中, 约为2%. 在拟合过程中, 通过对公式参数的重新拟合, 该项对CDE计算精度的

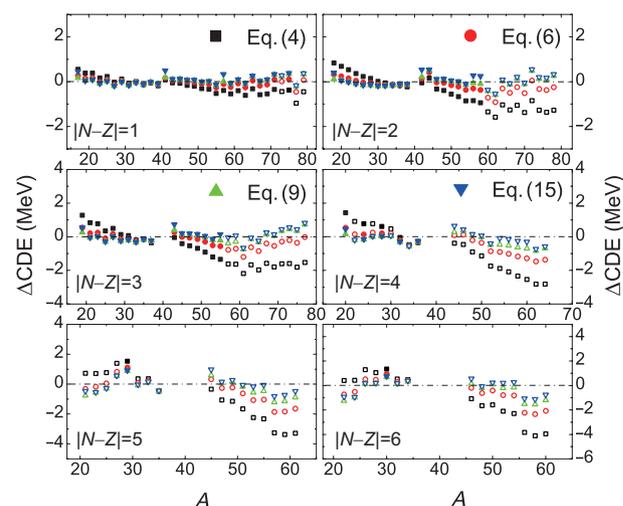


图1 (网络版彩图)公式(4), (6), (9)和(15)对sd壳、fp壳镜像核的 ΔCDE 计算值. 按照质子数与中子数的绝对差值 $|N-Z|$ 分为6组, 文献[32]质量表中的估计值用空心黑色方块表示, 实心黑色方块表示准确的实验值. 若 ΔCDE 为负, 则表明, CDE的理论计算值偏小, 反之为正

Figure 1 (Color online) The calculated ΔCDE values for mirror nuclei in sd and pf shells by eqs. (4), (6), (9) and (15). The results have been separated in six groups according to the difference between neutron and proton numbers $|N-Z|$. The estimated values in mass table in ref. [32] are indicated by the empty black square, and the experimental data have been noted by solid black squares. The negative ΔCDE indicates that the theoretical result is smaller than the experimental data, and vice versa.

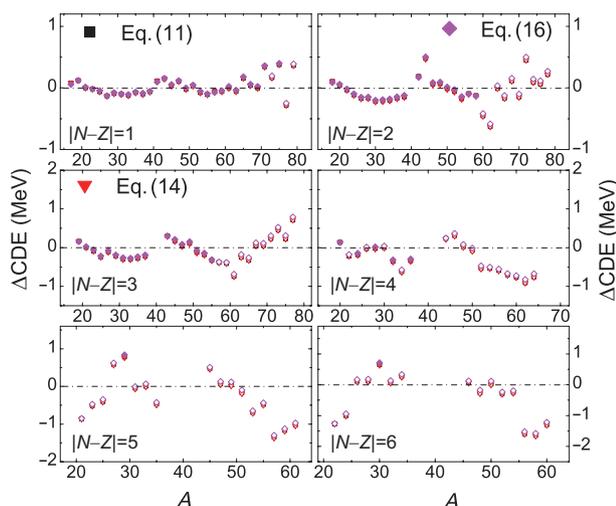


图2 (网络版彩图)如图1, 公式(11), (14)和(16)的计算值
Figure 2 (Color online) Same as Figure 1, but for CDEs by calculated eqs. (11), (14) and (16).

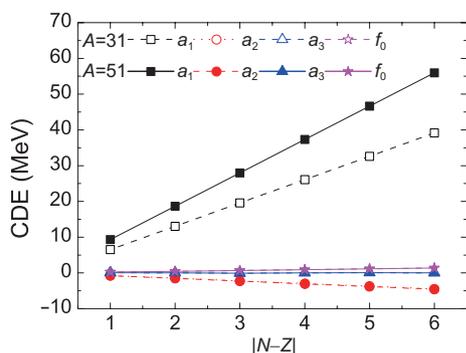


图3 (网络版彩图)公式(14)中各项对A=31, 51镜像核的CDE贡献
Figure 3 (Color online) Contributions to CDE for A=31 and 51 mirror nuclei by each term in eq. (14).

改进就更加不明显, 因此在图中较难看出质子形状因子的贡献。

同时, 在公式(14)的基础上增加壳修正项的公式(16)在图2中可以看出, 随着 $|N-Z|$ 值的增大, 它与实验值越来越靠近. 而且在表3中, 公式(14)与(16)的均方根偏差相差不多. 但在公式(15)的结果中可以看出较明显的壳修正影响, 公式(16)和(14)相比, 不是直接加上壳修正项, 而是重新调整拟合了公式参数, 因此壳修正对CDE的影响变得并不显著. 并且可以发现, 库仑经验公式在参数增加到一定程度之后, 就难以进一步显著提高精度, 一方面是由于库仑

能经验公式的主要要素已经被库仑直接项、交换项描述, 另一方面, 可能是由于拟合的精度已接近经验公式描述的极限, 无法更加精确地描述CDE的大小. 因此根据结果来看, 公式(16)是目前工作中均方根误差值较小的计算公式, 而且该公式的CDE计算值在sd壳、fp壳以及sd+fp壳上都能很好地符合CDE实验值.

我们将多个现在被广泛应用的较为成功的质量模型数据进行对比, 见图4. 根据CDE计算值与CDE实验值之间的差值, 我们可以发现对比其他质量模型的差值数据, 公式(16)得到差值的浮动很小, 较为均匀地分布在0 MeV附近, 是目前工作中发现结果最符合CDE实验值的计算公式. 我们也在表3中列出了不同模型的均方根误差, 在sd壳均方根误差最小是KTUY05质量模型, 在fp壳核素均方根误差最小的是FRDM, 整体来讲, DZ公式的均方根误差较小.

库仑置换能, 除了库仑相互作用的贡献之外, 还包含了强相互作用中同位旋破缺项的贡献, 由于在这些理论中没有包含后者, 所以对理论和实验系统差别的研究, 可以帮助我们估计出同位旋破缺项的大小. 微观模型本身的不足也可能导致CDE计算结果相对于实验值有偏差, 同时已有研究^[33-35]表明, 在原子核壳模型中引入库仑相互作用和有效同位旋破缺相互作用可以解释原子核基态和低激发态的CDE. 所以我们对这部分差异值进一步研究, 希望可以通过CDE差值来估计出同位旋破缺项的大小, 见图5和6.

为了更直观地描述CDE差值的大小, 我们研究了 ΔCDE 数值大小与 $|N-Z|$ 之间的关系, 图5描述的是本工作中拟合的不同库仑能公式得到的 ΔCDE 在sd壳和fp壳随着 $|N-Z|$ 的变化趋势. 在图5中sd壳和fp壳分别由两条线表示, 它们为包含估计数据的实验值所得结果和准确实验值的结果. 首先分析包含估计数据的结果, 由于库仑能经验公式修正项的增加使得 ΔCDE 越来越接近0 MeV, 在sd壳以及fp壳中, 公式(16)的计算结果相较于其他公式更为接近0 MeV. 但通过sd壳与fp壳的对比来看, 所有库仑能公式在图5 sd壳中的误差值相对较小, 即sd壳的CDE差值比fp壳的小. 另外, 公式(4)和(6)的计算

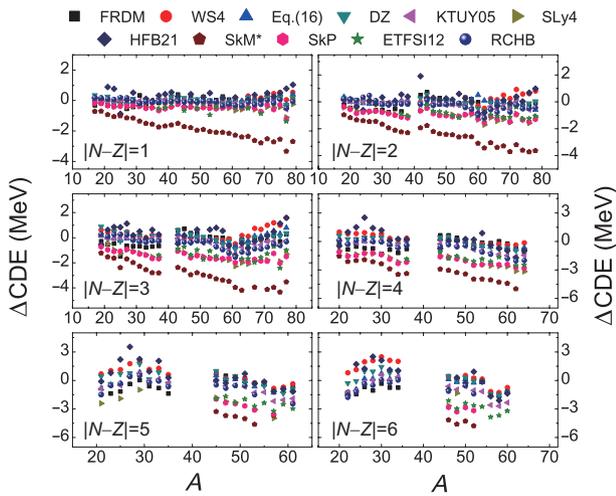


图4 (网络版彩图) sd壳和fp壳的CDE计算值与CDE实验值的差

Figure 4 (Color online) The difference between calculated and experimental CDEs for sd and pf shell nuclei.

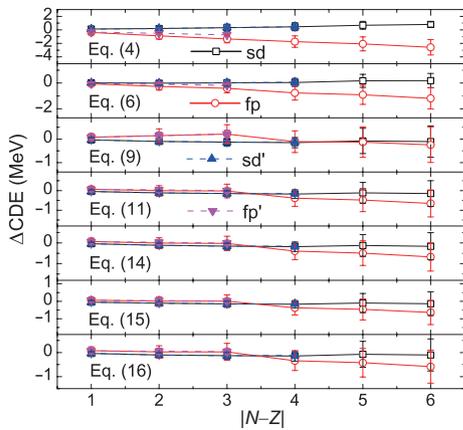


图5 (网络版彩图) ΔCDE 是CDE理论值与实验值之间的差异的平均值,其相应的标准差作为误差,图中是库仑能经验公式的 ΔCDE .实线连接的空心点表示包含文献[32]中的质量表的实验值及估计值的 ΔCDE ,sd,fp区核素在图中标记为“sd”和“fp”.去掉了估计值的 ΔCDE 由实心点且虚线连接表示,sd,fp区核素在图中标记为“sd'”和“fp'”

Figure 5 (Color online) ΔCDE is the average value obtained by the discrepancies between theoretical and experimental values, and the corresponding standard deviation is used as the error bar. In the figure, it is the ΔCDE obtained by Coulomb energy empirical formulas. Open points connected with solid lines are for the cases including both experimental and estimated values in the mass table of ref. [32]. The results for sd and fp shell nuclei are labeled as “sd” and “fp” in the plot. Filled points connected with dashed lines are for the cases excluding the estimated values. The results for sd and fp shell nuclei are labeled as “sd'” and “fp'” in the plot.

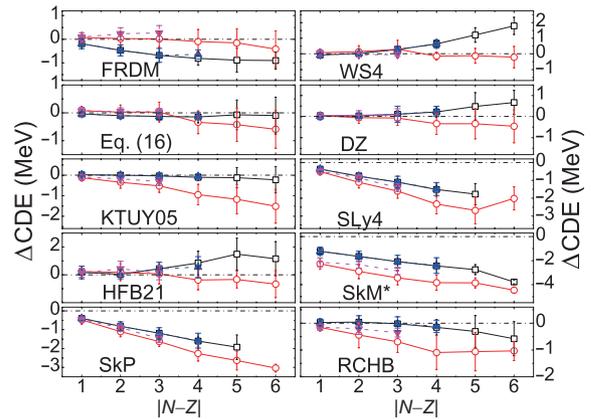


图6 (网络版彩图)如图5,质量模型得到的 ΔCDE

Figure 6 (Color online) Same as Figure 5, but for ΔCDE of mass models.

结果 ΔCDE 的绝对值随着 $|N - Z|$ 的增大而增大,但是在sd壳、fp壳中的变化趋势是相反的。

图6与5相似,但展示的是在sd壳和fp壳不同质量模型的 ΔCDE 值.从图6包含估计数据的结果来看,由质量模型得到的CDE差值浮动较大,FRDM,WS4,DZ这些模型,在sd区符合地差一点,但是在fp区的情况要好一些.HFB21,WS4,DZ这三种质量模型的 ΔCDE 值在不同壳层中随着 $|N - Z|$ 的变化趋势是相反的.值得一提的是,HFB21质量模型在计算时忽略了库仑交换能.另外,SkP DFT,SLy4 DFT,SkM* DFT这三个质量模型在sd壳、fp壳 ΔCDE 的变化趋势相同,相对实验值均偏低.FRDM质量模型的 ΔCDE 值在sd壳的 ΔCDE 值随着 $|N - Z|$ 值的增大而逐渐偏离0 MeV,但是在fp壳数值较小。

而我们所观察到的问题是一部分质量模型得到的CDE值远大于1 MeV,这主要是因为微观质量模型没有包含同位旋破缺项,所以结果偏小但给出来的CDE差值变化趋势更加符合物理,而唯象模型参数化为主,系统性趋势不明显,这里用的密度泛函类型的微观模型精度差一些,所以结果偏离1 MeV或以上。

在图5和6中,fp壳在 $|N - Z| = 4, 5, 6$ 时都是由质量表中的估计数据得到的 ΔCDE ,统计误差偏大.因此在图5和6中同时展示了去掉估计数据后只包含准确的实验值得到 ΔCDE 值.对比图中只有准确的实验值和包含估计数据的结果发现准确的实验值 Δ

CDE平均值结果要小, 相应的统计误差比包含估计数据的实验值更明显一些. 因此质量的精确测量对库仑能、CDE的研究十分重要, 而估计数据与实验值的偏差会给CDE等研究带来障碍.

Δ CDE的平均值与标准差计算结果见表4. 在表4中, SLy4, SkM* DFT, SkP DFT, RCHB这四个质量模型是基于有效核力, 都属于微观的理论工具, 它们得到的CDE都是相对于实验值偏小, 反应了同位旋破缺项的缺乏等导致结果出现系统地偏差. 而其他的唯象质量模型, 通过引入唯象参数来拟合实验数据, 尤其是本工作中拟合的库仑能经验公式精度提高到一定程度之后, 就很难进一步地改进, 所以系统性的趋势不明显, 有类似随机的误差, 难以给出系统的物理图像. 此外CDE本身比较复杂, 对相关镜像核的结构差别也比较敏感, 所以也很难使用经验公式进行精确描述.

4 总结

库仑能是核结构中重要的研究问题, 我们结合

表4 Δ CDE实验值平均值及标准差(MeV)

Table 4 The mean and standard error of Δ CDE experimental value (MeV)

模型	sd	fp	sd+fp
Eq. (4)	0.281 ± 0.138	-0.521 ± 0.164	-0.063 ± 0.425
Eq. (6)	0.024 ± 0.030	0.116 ± 0.053	-0.036 ± 0.081
Eq. (9)	-0.099 ± 0.037	0.145 ± 0.058	0.005 ± 0.130
Eq. (11)	-0.118 ± 0.044	0.031 ± 0.024	-0.054 ± 0.082
Eq. (14)	-0.116 ± 0.042	0.036 ± 0.017	-0.051 ± 0.082
Eq. (15)	-0.123 ± 0.046	0.024 ± 0.027	-0.060 ± 0.083
Eq. (16)	-0.098 ± 0.035	0.052 ± 0.015	-0.034 ± 0.080
FRDM ^[12]	-0.499 ± 0.194	0.194 ± 0.074	-0.202 ± 0.376
WS4 ^[22]	0.218 ± 0.269	-0.019 ± 0.037	0.116 ± 0.236
KTUY05 ^[23]	-0.012 ± 0.032	-0.191 ± 0.090	-0.089 ± 0.109
DZ ^[24-26]	0.107 ± 0.088	0.069 ± 0.021	0.091 ± 0.071
ETFSI12 ^[27]	-1.185 ± 0.502	-0.727 ± 0.343	-0.988 ± 0.496
HFB21 ^[28]	0.302 ± 0.201	0.240 ± 0.135	0.275 ± 0.178
SLy4 ^[29,30]	-0.932 ± 0.411	-0.920 ± 0.376	-0.927 ± 0.396
SkM* ^[29,30]	-1.837 ± 0.448	-2.443 ± 0.304	-2.096 ± 0.494
SkP ^[29,30]	-0.994 ± 0.439	-0.934 ± 0.412	-0.968 ± 0.428
RCHB ^[31]	-0.016 ± 0.062	-0.234 ± 0.088	-0.109 ± 0.131

原子核质量表中结合能的实验数据, 对含有不同修正项的库仑能公式进行了讨论并分析结果. 首先以液滴模型的库仑能经验公式为基础, 将不同的修正项加入其中形成新的库仑能公式, 通过CDE计算值与实验值的对比以及各个经验公式的均方根误差大小来判断库仑能经验公式的正确性. 而这些拟合得到的经验公式比较粗糙, 无法包含原子核的结构信息, 可以作为库仑能的经验参考.

本文公式(16)计算的结果最符合实验值, 它对应的库仑能经验公式包含库仑相互作用的直接作用项、库仑交换修正项、对关联修正项以及质子形状因子项与壳修正项. 此时的库仑能公式能够很好地解释原子核的库仑相互作用, 但CDE计算值与实验值之间仍然存在一些差异.

我们接下来继续调研了常见的质量模型, 系统分析了它们对CDE的描述情况. 一般认为, 理论模型对实验CDE的系统性差别来自于模型中缺失的强相互作用的同位旋依赖项. 我们通过库仑能经验公式及各个质量模型研究CDE理论与实验值的差异, 即 Δ CDE, 把相关数据按照 $|N - Z|$ 来进行分组(与同位旋第三分量有关), 发现随着 $|N - Z|$ 的增加, 经验公式及质量模型的 Δ CDE绝对值会增加, 可能是同位旋破缺项可随着同位旋第三分量增加而导致的.

库仑能经验公式的 Δ CDE在sd区和fp区呈现不同的系统学趋势, 而在增加了多个修正项之后, 系统偏差不明显, 可能是由于在经验公式中的唯象参数无法包含具体的核结构信息, 增加参数个数也无法进一步地提高公式精度, 从而与实验值的差别类似于随机的误差, 不能进行系统性修正. 而基于微观密度泛函理论计算的 Δ CDE, 与实验值相比系统性偏小, 随着 $|N - Z|$ 增加偏小地更多, 该系统偏差有望在原有的唯象核力中引入同位旋相关来修正, 也反应了微观理论模型对正确地理解物理图像十分重要.

此外, 我们也发现把质量表中的估计值去除之后, Δ CDE的大小及统计误差均减小了, 一方面表明, 这些估计值可能和真实的实验值有较明显的差异, 另一方面也反应了精确的实验数值对理论上研究CDE及同位旋破缺项的贡献十分重要.

参考文献

- 1 Cole B J. Coulomb contribution to shell-model binding energies. *J Phys G-Nucl Phys*, 1985, 11: 351–358
- 2 Dong J M, Shang X L, Zuo W, et al. An effective Coulomb interaction in nuclear energy density functionals. *Nucl Phys A*, 2019, 983: 133–144
- 3 O’Leary C D, Bentley M A, Appelbe D E, et al. Mirror symmetry up to the band termination in ^{49}Mn and ^{49}Cr . *Phys Rev Lett*, 1997, 79: 4349–4352
- 4 Fortune H T. Mirror energy differences of $2s_{1/2}$, $1d_{5/2}$, and $1f_{7/2}$ states. *Phys Rev C*, 2018, 97: 034301
- 5 Gadea A, Lenzi S M, Lunardi S, et al. Observation of ^{54}Ni : Cross-conjugate symmetry in $f_{7/2}$ mirror energy differences. *Phys Rev Lett*, 2006, 97: 152501
- 6 Kaneko K, Sun Y, Mizusaki T, et al. Variation in displacement energies due to isospin-nonconserving forces. *Phys Rev Lett*, 2013, 110: 172505
- 7 Fu G J, Cheng Y Y, Zhang Y H, et al. New local mass relation for isobaric analogue states and isospin-nonconserving forces. *Phys Rev C*, 2018, 97: 024339
- 8 Bethe H A, Bacher R F. Nuclear Physics A. Stationary states of nuclei. *Rev Mod Phys*, 1936, 8: 82–229
- 9 Nolen Jr, J A, Schiffer J P. Coulomb energies. *Annu Rev Nucl Sci*, 1969, 19: 471–526
- 10 Brown B A. Lecture notes in nuclear structure physics. National Super Conducting Cyclotron Laboratory, 2005
- 11 Sengupta S. Coulomb energies of mirror nuclei. *Nucl Phys*, 1960, 21: 542–554
- 12 Möller P, Sierk A J, Ichikawa T, et al. Nuclear ground-state masses and deformations: FRDM (2012). *Atomic Data Nucl Data Tables*, 2016, 109: 1–204
- 13 Bao M, Lu Y, Zhao Y M, et al. Simple relations between masses of mirror nuclei. *Phys Rev C*, 2016, 94: 044323
- 14 Yuan C. Uncertainty decomposition method and its application to the liquid drop model. *Phys Rev C*, 2016, 93: 034310
- 15 Dieperink A E L, Van Isacker P. The symmetry energy in nuclei and in nuclear matter. *Eur Phys J A*, 2007, 32: 11–18
- 16 Weizsäcker C F. Zur theorie der kernmassen. *Zeitsch für Phys A Hadrons Nucl*, 1935, 96: 431–458
- 17 Saunders W A. Metal-cluster fission and the liquid-drop model. *Phys Rev A*, 1992, 46: 7028–7041
- 18 Pomorski K, Dudek J. Nuclear liquid-drop model and surface-curvature effects. *Phys Rev C*, 2003, 67: 044316
- 19 Royer G, Rousseau R. On the liquid drop model mass formulae and charge radii. *Eur Phys J A*, 2009, 42: 541–545
- 20 Strutinsky V M, Ivanjuk F A. A new definition of shell corrections to the liquid drop energy. *Nucl Phys A*, 1975, 255: 405–418
- 21 Jänecke J. Coulomb energies of spherical nuclei. *Nucl Phys A*, 1972, 181: 49–75
- 22 Wang N, Liu M, Wu X, et al. Surface diffuseness correction in global mass formula. *Phys Lett B*, 2014, 734: 215–219
- 23 Koura H, Tachibana T, Uno M, et al. Nuclidic mass formula on a spherical basis with an improved even-odd term. *Prog Theor Phys*, 2005, 113: 305–325
- 24 Duflo J, Zuker A P. Microscopic mass formulas. *Phys Rev C*, 1995, 52: R23–R27
- 25 Mendoza-Temis J, Hirsch J G, Zuker A P. The anatomy of the simplest Duflo-Zuker mass formula. *Nucl Phys A*, 2010, 843: 14–36
- 26 Barbero C, Hirsch J G, Mariano A E. Deformation and shell effects in nuclear mass formulas. *Nucl Phys A*, 2012, 874: 81–97
- 27 Aboussir Y, Pearson J M, Dutta A K, et al. Nuclear mass formula via an approximation to the Hartree-Fock method. *Atomic Data Nucl Data Tables*, 1995, 61: 127–176
- 28 Gorieli S, Chamel N, Pearson J M. Further explorations of Skyrme-Hartree-Fock-Bogoliubov mass formulas. XII. Stiffness and stability of neutron-star matter. *Phys Rev C*, 2010, 82: 035804
- 29 Stoitsov M V, Dobaczewski J, Nazarewicz W, et al. Systematic study of deformed nuclei at the drip lines and beyond. *Phys Rev C*, 2003, 68: 054312
- 30 Dobaczewski J, Stoitsov M V, Nazarewicz W. Skyrme-HFB deformed nuclear mass table. *AIP Conf Proc*, 2004, 726: 51–56
- 31 Xia X W, Lim Y, Zhao P W, et al. The limits of the nuclear landscape explored by the relativistic continuum Hartree-Bogoliubov theory. *Atomic Data Nucl Data Tables*, 2018, 121: 1–215
- 32 Wang M, Audi G, Kondev F G, et al. The AME2016 atomic mass evaluation (II). Tables, graphs and references. *Chin Phys C*, 2017, 41: 030003
- 33 Bentley M A, Lenzi S M. Coulomb energy differences between high-spin states in isobaric multiplets. *Prog Particle Nucl Phys*, 2007, 59: 497–561
- 34 Ormand W E. Mapping the proton drip line up to $A=70$. *Phys Rev C*, 1997, 55: 2407–2417
- 35 Ormand W E, Brown B A. Empirical isospin-nonconserving hamiltonians for shell-model calculations. *Nucl Phys A*, 1989, 491: 1–23

Systematic study of Coulomb displacement energy based on the Coulomb energy empirical formula and mass model

MENG YuHang^{1,2}, WANG XiaoBao^{2*}, TU Ya¹ & DONG GuoXiang^{2*}

¹*School of Physical Science and Technology, Shenyang Normal University, Shenyang 110034, China;*

²*School of Science, Huzhou University, Huzhou 313000, China*

In this study, starting from the nuclear binding energy, we studied the empirical formula of the Coulomb energy systematically. Beginning with the simplest empirical formula, we added the Coulomb exchange term, pairing correlation, and shell correction, to calculate the Coulomb energy more precisely. In addition, we investigated the Coulomb displacement energy of widely used mass models. The discrepancies between the calculation results and experimental data might be caused by the missing of the isospin breaking terms of strong interactions in theory. By investigating these discrepancies, we found that the results obtained by microscopic theories presented a distinctive systematical behavior. Thus, these theories can be improved by including isospin breaking terms. However, in the results obtained by phenomenological models, the systematical behavior is unclear. This occurs because it is difficult for the information of the microscopic nuclear structure to be absorbed into the parameters of phenomenological models.

Coulomb energy empirical formula, mirror nuclei, Coulomb displacement energy, mass model

PACS: 21.10.Sf, 21.60.-n, 21.10.Dr

doi: [10.1360/SSPMA-2019-0341](https://doi.org/10.1360/SSPMA-2019-0341)