

推广的 Thomas-Fermi 方法中 适用的新式核密度*

安宇

胡济民

(清华大学物理系 北京 100084)

(北京大学技术物理系 北京 100871)

1995-03-09 收稿

摘 要

给出一种适用于推广的 Thomas-Fermi 方法 (ETF) 的密度形式. 取 SkM* 势参量, 对几个球形核的基态性质进行了计算, 结果优于通常采用的多参数密度形式. 用期望值方法 (EVM) 给出的基态能量能重现 H-F 的计算结果.

关键词 核密度, ETF 方法, EVM 近似, 核基态性质.

1 引 言

二十年前, Vautherin 和 Brink^[1] 将 Skyrme 型^[2] 力应用于核体系, 利用这种数学处理上比较简单的等效核力形式进行 Hartree-Fock (H-F) 计算, 在研究基态核的性质方面有了很大进展. 以后这种 H-F 方法陆续应用于重核裂变位垒^[3]、超形变态核性质^[4]、巨共振求和规则 (sum rules)^[5]、有温度的“热”核^[6] 等方面, 取得了很好的结果.

尽管如此, H-F 微观计算面对实际核的应用仍有其局限性, 事实上, Skyrme 型等效核力的核参量远没有精确确定. 到目前至少有十几种较流行的 Skyrme 势参量组, 如 SIII^[7]、Ska^[8]、SkM^[9]、SkE^[10]、Z^[11]、T6^[12]、SkM*^[13] 等, 它们都是通过拟合几个球形核的结合能而选定的, 没有对大量基态核质量进行验算, 而且大部分 Skyrme 势参量组给出的核裂变位垒计算值都偏高, 对远离 β 稳定线的核性质计算结果也有歧异. 如果对大量基态核进行拟合 Skyrme 势参量计算, 便能给出合理的裂变位垒值. 用 H-F 方法将消耗大量的计算时间, 不容易实现.

应用推广的 Thomas-Fermi 方法 (ETF) 于 Skyrme 型等效核力, 可将基态平均能量表示为中子和质子密度分布的泛函, 再对该能量密度泛函做变分极小化, 就可以得到平均 H-F 能量, 加上壳修正就可以再现 H-F 壳模型计算结果^[13].

对能量密度泛函直接做变分极小化, 需要求解 Euler-Lagrange 方程^[15], 这个方法对球形核的求解也很不容易, 更难推广到变形核. ETF 方法一般先给定极小化密度的函数形式, 如对球形核试探核密度假定可取以下形式:

* 国家自然科学基金资助.

$$\rho_q = \rho_{0q} [1 + \rho_{1q} \exp(-r^2 / \beta_q^2 / R_q^2)] / \{1 + \exp[(r - R_q) / a_q]\}^{\gamma_q}, \quad (1.1)$$

其中对 neutron、质子分别取 $q=n, p$, 这样变分极小化问题就变为对 $\rho_{0q}, \rho_{1q}, a_q, \gamma_q, \beta_q$ 这 10 个参量的极小化问题 ($R_q, q=n, p$ 可分别由中子数 N 和质子数 Z 确定), 这就大大简化了计算. 由于 ETF 方法计算简便, 其应用范围容易扩展, 不仅对核基态和裂变位垒^[12-14] 的计算很成功, 而且对高自旋态^[16]、相对论推广^[17]、巨共振能量^[18, 19] 等方面也进行了广泛计算. 最近 T6 系列 Skyrme 势参量, 利用 ETF 加微观修正的方法对大量核基态实验数据拟合, 给出了 SkSC 势参量组^[20], 其中试探核密度形式利用了纯 Fermi 函数形式. 其实, 用纯 Fermi 函数代替 (1.1) 式作为试探核密度, 由轻核到重核, ETF 的极小化能量相差 2—5 MeV^[13], 这个差距可以通过调整 Skyrme 势参量的办法来补偿. 之所以用这种曲折的方法, 主要是 (1.1) 式有 10 个由极小化决定的参量, 对于拟合几千个核数据计算量仍嫌太大. 尽管这不失为一种权宜之计, 但在实际上等于放弃了对核密度的精确计算, 显然是不能令人满意的. 实际上, 即使采用式 (1.1) 比较复杂的密度形式, 其可变化的自由度仍很有限, 相应于能量极小值的核密度分布并不精确. 因此, 应该考虑影响密度分布的各种物理因素重新确定核密度.

本文将在第二节讨论确定核密度的物理背景及具体求法, 第三节给出对球形核基态性质的计算结果, 并同 ETF、H-F 及实验结果作比较; 最后是简短的结论和建议.

2 核密度的确定方法

作为液滴模型的一种推广, 在文献[21]曾建议把核的能量密度表示为中子和质子密度分布泛函:

$$H[\rho_n, \rho_p] = H[\rho_0] + (1 - \Phi)^\sigma / \rho_0 [a_j(\rho_n - \rho_p)^2 + a_k(\rho_n + \rho_p - \rho_0)^2] + \frac{e^2}{2} \rho_p \int \frac{\rho_p(r')}{|r - r'|} dr', \quad (2.1)$$

其中 ρ_0 是费米型的参考核密度, $H[\rho_0] = a_v \rho_0 + a_s |\nabla \rho_0|$, a_v, a_s, a_j, a_k 都是可调参量, Φ 是表面修正项, 取 $\Phi = G |\nabla \rho_0| / \rho_0$, G 亦可调, 但 $\sigma = 1.0$, 对 (2.1) 式变分极小化可以得到密度分布. 用这个模型对球形核基态性质^[21]、小变形核基态性质^[22]、裂变位垒^[23] 等的计算, 都与实验符合得非常好, 表明这种模型给出的密度形式是比较实际的. 我们还曾利用 ETF 方法对该模型的微观基础进行了研究^[24], 可以证明 a_k 和 a_j 对应于 ETF 方法中压缩系数 K_∞ 除以 18 和非对称能系数 J , 而 $H[\rho_0]$ 是在 $\rho_n = \rho_p = \frac{\rho_0}{2}$ 时, Skyrme 势作用下

的 ETF 能量密度, 如果取合适的 ρ_0 形式和 G 值, 用 (2.1) 式计算的基态结合能和核均方根半径等量与 ETF 方法的计算结果很接近. 不仅如此, 这种方式给出的密度的优点在于考虑了决定核密度分布的几个主要因素, 即库仑能、对称能、压缩能以及表面效应, 这些因素基本上不依赖于参数的调整. 但是上面的那些工作有一个相同的缺点, 就是已经对 ETF 的密度泛函做了改变. 在本工作中, 仅将修改后的 (2.1) 式作为确定密度的能量密度, 保留了 ETF 能量密度泛函完全不变.

和过去不同, 取 (2.1) 式中参考密度 ρ_0 为:

$$\rho_0 = \rho_{00} / (1 + e^{\frac{u}{a}})^{\gamma}, \quad (2.2)$$

u 为参考表面到给定点的最短距离, 点在表面外时为正, 在表面内时为负, 对球形核 $u = r - R$, ρ_{00} , a , γ 是极小化参量; a_j 和 a_K 可由势参量计算出来, 再对 $(1 - \Phi)$ 稍作改动, 令 $G \frac{\gamma}{a} = 1$, σ 不再取固定值 1.0, 而作为变化的极小化参量, 这样:

$$(1 - \Phi)^{\sigma} = (1 + e^{\frac{u}{a}})^{-\sigma}, \quad \sigma < \gamma, \quad (2.3)$$

$$\text{对式 } I = \int H[\rho_n, \rho_p] d\mathbf{r}, \text{ 在条件 } \int \rho_n d\mathbf{r} = N, \int \rho_p d\mathbf{r} = Z \quad (2.4)$$

下进行变分可得:

$$\begin{cases} (1 - \Phi)^{\sigma} / \rho_0 [a_j(\rho_n - \rho_p) + a_K(\rho_n + \rho_p - \rho_0)] = \lambda_n, \\ (1 - \Phi)^{\sigma} / \rho_0 [-a_j(\rho_n - \rho_p) + a_K(\rho_n + \rho_p - \rho_0)] + \frac{e^2}{2} \int \frac{\rho_p(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' = \lambda_p. \end{cases} \quad (2.5)$$

其中 λ_n 和 λ_p 是 Lagrange 因子, 由 (2.4) 式求得, 这样我们就得到了极小化密度:

$$\rho_n = \frac{1}{2} \left[\rho_0 + \frac{a_n \lambda'_p + N - Z}{K} \rho_0 \right] - a_n U_p \rho_0, \quad (2.6a)$$

$$\rho_p = \frac{1}{2} \left[\rho_0 + \frac{a_p \lambda'_p + Z - N}{K} \rho_0 \right] - a_p U_p \rho_0, \quad (2.6b)$$

$$\text{其中 } \rho_0 = \rho_0 / (1 - \Phi)^{\sigma} = \rho_{00} / (1 + e^{\frac{u}{a}})^{\gamma - \sigma}, \quad (2.6c)$$

$$a_n = \left(\frac{18}{K_{\infty}} - \frac{1}{J} \right) / 4, \quad a_p = \left(\frac{18}{K_{\infty}} + \frac{1}{J} \right) / 4, \quad (2.6d)$$

$$K = \int \frac{\rho_{00}}{(1 + e^{\frac{u}{a}})^{\gamma - \sigma}} d\mathbf{r}, \quad \lambda'_p = \int U_p \rho_0 d\mathbf{r}, \quad (2.6e)$$

$$U_p = \frac{e^2}{2} \int \frac{\rho_p(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}'. \quad (2.6f)$$

(2.6a)、(2.6b) 式的密度是迭代形式, 可用迭代法求解。我们把 (2.6a) 和 (2.6b) 式的中子、质子密度代入 ETF 能量密度, 即可计算能量, 对能量取极小值就可以得到 ρ_{00} , γ , a , σ 这 4 个参量, 同时得到极小化中子、质子密度和 H-F 平均能量值, 而不再引入任何可调参量。

3 球形核的基态性质

利用 SkM* 势参量, 我们对 (2.6) 式给出的 4 个参量迭代密度, 用 ETF 近似计算球形核的基态性质, 并与文献 [13] 用 10 参量 (式 (1.1)) 密度计算的结果作了比较。为

了表示方便, 以下均用大写字母表示文献 [13] 的结果, 如 ETF, EVM 等, 小写字母表示本文的结果, 如 etf, evm 等.

3.1 平均量

在 ETF 方法中, 没有微观修正的那部分能量称为 H-F 平均能量, 相应地, 其它物理量不妨称为平均量. 必须说明, 我们的计算选用了 $m_p = m_n = \bar{m}$ 近似, 如果取 m_p 和 m_n 的实际值, 则变分能量对轻核影响不大, 但对重核, 如 ^{208}Pb 相差 1 MeV 左右. 表 1 中 B 是平均结合能, r_c 是核电荷均方根半径, t 是中子皮厚度, 可以看到用两种不同的试探核密度给出的 ETF 基态性质比较接近, 但还是有一定偏差. 我们的结果一般要比文献 [13] 的能量低 2—4 MeV 左右, 只有 ^{132}Sn 核是一个例外, 但经过 EVM 修正后的结合能仍然非常接近 H-F 的计算值. 表 1 中两种方法给出的核电荷半径 r_c 的值对丰中子核很接近, 但对中子和质子数比较对称的核相差近 3% 左右, 而中子皮的厚度 t 值却有相反趋势, 即对丰中子核两种方法相差 30% 左右, 而中子、质子数较对称的核相差要小些.

表 1 球形核的 ETF 结合能 (MeV), 核电荷半径 (fm) 和中子皮厚度 (fm)

核素	ρ_{00} (fm ⁻³)	a (fm)	γ	$\gamma - \sigma$	B_{cl}	B_{ETF}	r_c^{cl}	r_c^{ETF}	r_c^{exp}	t^{cl}	t^{ETF}	t^{exp}
^{16}O	0.1808	0.7066	2.53	1.13	113.9	112.4	2.64	2.78	2.71	-0.05	-0.02	
^{40}Ca	0.1826	0.7257	3.00	1.39	331.5	329.8	3.37	3.47	3.48	-0.05	-0.04	-0.02±0.05
^{48}Ca	0.1767	0.6366	1.69	1.07	404.2	404.2	3.50	3.54	3.46	0.11	0.17	0.2±0.2
^{58}Ni	0.1792	0.7124	2.92	1.42	493.7	491.6	3.65		3.77	-0.01		
^{90}Zr	0.1765	0.7214	3.04	1.49	772.2	768.4	4.36	4.29	4.27	0.06	0.07	0.1±0.1
^{116}Sn	0.1741	0.7237	3.05	1.50	978.6	976.3	4.69		4.63	0.07		
^{124}Sn	0.1740	0.7276	2.67	1.35	1037.4	1036.8	4.66		4.68	0.13		
^{132}Sn	0.1713	0.6785	1.79	1.04	1078.6	1083.0	4.77	4.75		0.16	0.24	
^{140}Ce	0.1725	0.7305	3.03	1.48	1158.1	1156.0	4.85	4.89	4.88	0.10	0.14	
^{208}Pb	0.1685	0.7486	3.27	1.54	1608.4	1608.5	5.56	5.53	5.50	0.12	0.17	0.1±0.2

实验值取自文献 [13, 26], 势参量取 SkM*.

图 1 是两种试探核密度给出的质子密度及核电荷密度实验值^[25], 实验值包含壳效应, 不能直接比较, 不过与计算结果还是比较接近的. 由图中可见, 不同核都有相同倾向, 即两种方法给出的密度在表面非常相似, 但中心部分明显歧离. 中心部分密度被压缩是库仑排斥力所致, 这说明 (2.6) 式密度充分体现了库仑能的影响.

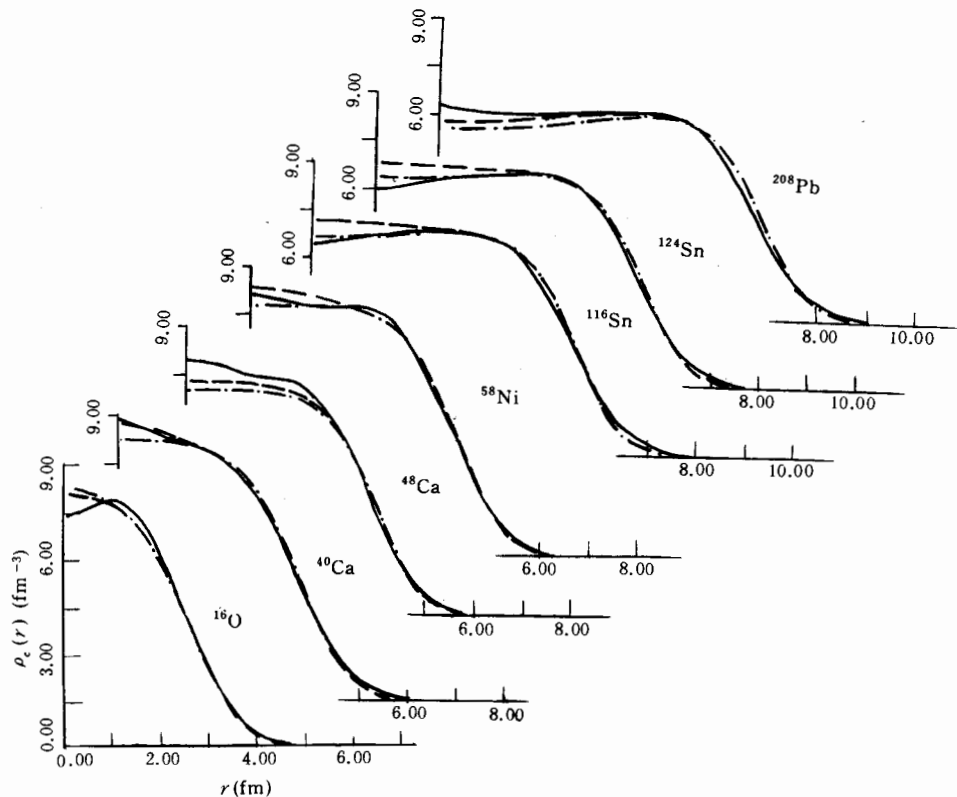


图1 球形核的质子密度分布和核电荷密度分布实验值

实验值取自文献 [26], 势参量取 SkM*. —— 实验值, - - - - - etf, ····· ETF.

3.2 微观修正

要与 H-F 方法比较, 微观修正不能忽略. 所谓微观修正就是考虑对关联和壳效应, 对关联一般用 BCS 方法处理^[26], 在本文中, 我们采用等能隙近似^[27]; 壳效应是采用期望值方法 (EVM)^[28], 即由 ETF 方法计算所得的 ρ_n 、 ρ_p , 算出平均场以及单粒子能量和波函数, 再计算体系的总能量, 这相当于 ρ_n 和 ρ_p 及平均场作为初值做一次迭代的 H-F 运算, 这样 EVM+BCS 就相当于 H-F+BCS 计算. 这种近似方法的精度完全依赖于初值 ρ_n 和 ρ_p , 因此是对核平均密度的一次确定性检验.

表 2 列出了两种试探密度给出的 EVM+BCS 计算值和 H-F+BCS 计算值. 一般来说, 核平均密度越合适, EVM 值将越接近 H-F 值, 由表 2 可见, (2.6) 式作为试探密度给出的 ETF 密度似乎更合理, 因为相应的 EVM 能量值更接近 H-F 能量值. 而且 (2.6) 式作为试探密度的优越性还在于, 用这种密度形式对 ETF 能量做极小化运算时, 对不同的原子核参量变化一般较小. 由表 1 中列出的 4 个参量值可见, 尽管粒子数 A 从 16 变到 208, N/Z 从 1 变到 1.6, ρ_0 和 a 及 γ - σ 的变化不大, 唯一变化较大的是 γ . 因此当进行大范围计算时, 不必对每个核逐一确定参数, 实际上这些参数值可以用简单公

式表示.

表2 球形核 EVM 结合能 (MeV)

核素	B_{exp}	$B_{\text{H-F}}$	B_{evm}	B_{EVM}
^{16}O	127.6	127.6	127.3	127.4
^{40}Ca	342.1	341.1	340.2	340.4
^{46}Ca	416.0	420.1	420.2	418.4
^{58}Ni	506.5	509.0	509.0	
^{90}Zr	783.9	784.0	785.5	
^{116}Sn	988.7	982.2	982.2	
^{124}Sn	1050.0	1048.9	1048.4	
^{132}Sn	1102.7	1110.8	1110.8	1108.3
^{140}Sn	1172.7	1169.3	1169.8	
^{208}Pb	1636.5	1636.6	1637.2	1633.7

实验值取自文献 [13], 势参量取 SkM*.

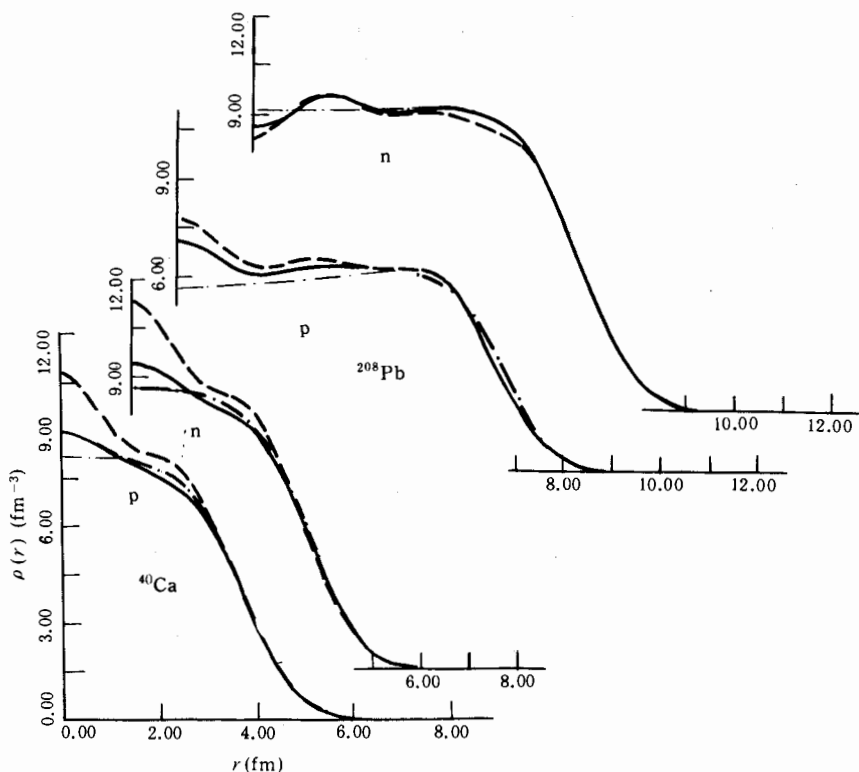


图2 用 etf, evm, H-F 方法分别给出 ^{40}Ca 和 ^{208}Pb 的中子、质子密度分布

—— H-F, ----- evm, - - - - - etf.

图2是将 ^{40}Ca 和 ^{208}Pb 两核用4参数迭代密度给出的 etf、evm 和 H-F 的密度分布做

比较, 明显可见, 这三种不同方法给出的密度分布在表面很接近, 但在中心部分质子密度比起 H-F 的结果 *evm* 稍高, 而 *etf* 稍低. 显然, 作为平均值, 取 *etf* 更为合理.

4 结 论

通过以上验算可知, (2.6) 式四参数迭代密度充分考虑了库仑能、弹性能和对称能的相互作用, 比较接近实验结果. 对球形核用它作为试探密度做 ETF+EVM 计算几乎准确地重现 H-F 结果, 另一方面, 这种试探密度只有规律变化的四个极小化参量, 迭代运算只需 5、6 次即可, 即使对大变形核也只需 7 到 8 次迭代就可达到所需精度, 收敛很快, 因此比六参数或更多参数的密度形式计算要快.

参 考 文 献

- [1] D. Vautherin, D. M. Brink, *Phys. Rev.*, **C5**(1972) 626.
- [2] T. H. R. Skyrme, *Phil. Mag.*, **1**(1956) 1043; *Nucl. Phys.*, **9**(1959) 615.
- [3] H. Flocard *et al.*, *Nucl. Phys.*, **A231**(1974) 176.
- [4] P. Bonche *et al.*, *Nucl. Phys.*, **A443**(1985) 39; **A500**(1989) 308; **A519**(1990) 509.
- [5] J. P. Blaizot, *Phys. Rep.*, **64**(1980) 171.
- [6] P. Bonche, D. Vautherin, *Nucl. Phys.*, **A372**(1981) 496.
- [7] M. Beiner *et al.*, *Nucl. Phys.*, **A238**(1975) 29.
- [8] S. Köhler, *Nucl. Phys.*, **A258**(1976) 301.
- [9] H. Krivine *et al.*, *Nucl. Phys.*, **A336**(1980) 155.
- [10] M. Waroquier *et al.*, *Nucl. Phys.*, **A404**(1983) 269; **A404**(1983) 298.
- [11] J. Friedrich, P. -G. Reinhard, *Phys. Rev.*, **C33**(1986) 335.
- [12] A. K. Dutta *et al.*, *Nucl. Phys.*, **A458**(1986) 77.
- [13] M. Brack *et al.*, *Phys. Rep.*, **123**(1985) 275.
- [14] F. Tondour *et al.*, *Nucl. Phys.*, **A470**(1987) 93.
- [15] M. Centelles *et al.*, *Nucl. Phys.*, **A510**(1990) 397.
- [16] 沈肖雁、胡济民, 高能物理与核物理, **15**(1991) 720.
- [17] V. V. Anisovich *et al.*, *Nucl. Phys.*, **A539**(1992) 501.
- [18] P. Gleissl *et al.*, *Ann. of Phys.*, **197**(1990) 250.
- [19] E. Lipparini, S. Strigari, *Phys. Rep.*, **175**(1989) 103.
- [20] J. M. Pearson *et al.*, *Nucl. Phys.*, **A528**(1991) 1.
- [21] 胡济民、郑春开, 原子核物理, **7**(1985) 1.
- [22] 郑春开, 高能物理与核物理, **14**(1990) 753.
- [23] 陈新义、胡济民, 高能物理与核物理, **15**(1991) 279.
- [24] 胡济民、安宇, 高能物理与核物理, **16**(1992) 857.
- [25] H. Devries *et al.*, *Atomic Data and Nuclear Data Table*, **36**(1987) 495.
- [26] D. Vautherin, *Phys. Rev.*, **C7**(1973) 296.

- [27] J. Blocki, M. Flocard, *Nucl. Phys.*, **A273** (1976) 45.
[28] O. Bohigas *et al.*, *Phys. Lett.*, **64B** (1976) 381.

A New Form of Nuclear Densities Suitable for Applications of Extended Thomas-Fermi Approximation

An Yu

(Department of Modern Physics, Tsinghua University, Beijing 100084)

Hu Jimin

(Department of Technical Physics, Beijing University, Beijing 100871)

Received 9 March 1995

Abstract

A form of densities suitable for applications of extended Thomas-Fermi (ETF) method is proposed. With SkM* force parameters, ground state properties of some spherical nuclei are calculated. The results, in a general way, are better than those with ordinarily parametrized densities. Further application of the expectation value method (EVM) can also reproduce Hartree-Fock (H-F) results.

Key words nuclear density, ETF method, EVM approximation, nuclear ground state property.