

# 相对论平均场理论中 Zr 同位素链壳修正的微观研究

李茂琼<sup>①</sup>, 孙保元<sup>②</sup>, 张双全<sup>②\*</sup><sup>①</sup> 大理学院物理与电子信息学院, 大理 671000;<sup>②</sup> 北京大学物理学院, 核物理与核技术国家重点实验室, 北京 100871\* 联系人, E-mail: [sqzhang@pku.edu.cn](mailto:sqzhang@pku.edu.cn)

收稿日期: 2009-08-01; 接受日期: 2009-11-25

国家自然科学基金资助项目(批准号: 10775004)

**摘要** 基于轴对称形变约束的相对论平均场理论, 考虑微观质心修正, 计算了 Zr 同位素链偶偶核的位能曲面, 并利用 Strutinsky 壳修正方法从相应的单粒子能级中提取了壳修正能量, 研究了 Zr 同位素链的壳结构变化. 结果表明, 形变约束的相对论平均场理论能很好地描述 Zr 同位素链的基态性质. Zr 同位素链壳修正能量显示出明显的壳效应, 随中子数变化有较强的同位旋依赖性; 同时, Zr 同位素链壳修正能量具有复杂的形变依赖性, 对稳定形变原子核的形成有重要的作用.

**关键词**  
相对论平均场  
Strutinsky 壳修正  
Zr 同位素  
位能曲面  
壳结构

近年来, 随着放射性核束技术的发展, 晕核<sup>[1]</sup>、壳层结构演化等<sup>[2]</sup>一些新的核物理现象相继被发现, 极端条件下原子核结构成为当前研究的热点课题之一. 在一些核中发现的高自旋转动带、大的四极矩和强的四极跃迁几率等实验现象说明了这些核具有稳定的形变. 研究表明, 形变可以使单粒子能级的排列发生改变, 从而改变核的壳层结构, 对核的稳定性造成很大的影响. 对壳效应的研究有助于全面了解原子核的内部结构, 对揭示核子间相互作用的本质有重要的意义.

液滴模型是早期描述原子核性质的一种集体模型, 其思想起源于核力的饱和性和原子核的不可压缩性. 液滴模型能较好地解释原子核质量、半径等整体趋势, 但难于描述原子核壳结构引起的涨落. 考虑了自旋-轨道耦合相互作用的壳模型取得了很大成功,

很好给出了 2, 8, 20, 28, 50, 82, 126 等原子核幻数. 采用形变的单粒子势, 壳模型可以推广解释很多实验现象, 诸如转动带、重核裂变等. 但是, 壳模型却不能准确地给出原子核结合能等整体性质, 也不能正确描述大形变时的位能曲面.

为了同时描述原子核的整体性质以及壳层结构, Strutinsky 于 1967 年提出了一种壳修正方法, 即 Strutinsky 壳修正方法<sup>[3,4]</sup>. 将液滴模型和壳模型的优点结合在一起, 能够准确得到原子核的基态能量. Strutinsky 壳修正方法广泛应用于宏观-微观模型中计算微观能量部分以及计算超重原子核裂变过程的位能曲面等<sup>[5-11]</sup>.

微观理论方面, 建立在相对论核多体量子场论基础上的相对论平均场(Relativistic Mean Field, 以下简称 RMF)理论, 在描述原子核性质方面取得了很大

的成功<sup>[12-14]</sup>. 与非相对论平均场理论相比, RMF 理论具有更好的微观基础: 考虑了介子自由度, 用介子场的交换代替了 Hatree-Fock 理论中的有效二体相互作用, 自动给出了自旋-轨道耦合和原子核的壳结构等.

由于 Zr 同位素链的质子数对应亚满壳, 中子数包含幻数 50 和 82 等, 从而受到广泛关注, 包括其电荷方均根半径、形状共存、形状演化及相变等<sup>[15-20]</sup>. 本文基于轴对称形变约束的 RMF 理论, 得到相应原子核的单粒子能级, 利用 Strutinsky 壳修正方法提取壳修正能量, 系统研究 Zr 同位素链的壳效应.

## 1 理论框架

### 1.1 形变约束的 RMF 理论

RMF 理论的出发点是含有核子与介子自由度的有效拉格朗日密度<sup>[12-14]</sup>:

$$\begin{aligned}
 L = & \bar{\psi} \left( i\gamma^\mu \partial_\mu - M - g_\sigma \sigma - g_\omega \gamma^\mu \omega_\mu \right. \\
 & \left. - g_\rho \gamma^\mu \boldsymbol{\tau} \cdot \boldsymbol{\rho}_\mu - e\gamma^\mu A_\mu \frac{1-\tau_3}{2} \right) \psi \\
 & + \frac{1}{2} \partial_\mu \sigma \partial^\mu \sigma - \frac{1}{2} m_\sigma^2 \sigma^2 - U(\sigma) \\
 & - \frac{1}{4} \Omega_{\mu\nu} \Omega^{\mu\nu} + \frac{1}{2} m_\omega^2 \omega_\mu \omega^\mu + U(\omega) \\
 & - \frac{1}{4} \mathbf{R}_{\mu\nu} \cdot \mathbf{R}^{\mu\nu} + \frac{1}{2} m_\rho^2 \boldsymbol{\rho}_\mu \cdot \boldsymbol{\rho}^\mu - \frac{1}{4} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu}, \quad (1)
 \end{aligned}$$

其中核子场  $\psi$  的质量为  $M$ , 介子场  $\sigma$ ,  $\omega_\mu$  和  $\rho_\mu$  的质量分别为  $m_\sigma$ ,  $m_\omega$  和  $m_\rho$ , 相应与核子场的耦合常数为  $g_\sigma$ ,  $g_\omega$  和  $g_\rho$ ,  $\tau_3$  表示同位旋的第三分量,  $A_\mu$  为电磁场.  $\sigma$  和  $\omega$  介子场包含非线性自耦合项,

$$U(\sigma) = \frac{1}{3} g_2 \sigma^3 + \frac{1}{4} g_3 \sigma^4, \quad U(\omega) = \frac{1}{4} c_3 (\omega_\mu \omega^\mu)^2,$$

$g_2$ ,  $g_3$ ,  $c_3$  为相应的耦合常数. 介子场和电磁场张量分别为

$$\begin{cases} \Omega_{\mu\nu} = \partial_\mu \omega_\nu - \partial_\nu \omega_\mu, \\ \mathbf{R}_{\mu\nu} = \partial_\mu \boldsymbol{\rho}_\nu - \partial_\nu \boldsymbol{\rho}_\mu, \\ \mathbf{F}_{\mu\nu} = \partial_\mu \mathbf{A}_\nu - \partial_\nu \mathbf{A}_\mu. \end{cases}$$

利用变分原理, 从(1)式可导出核子的运动方程, 即 Dirac 方程

$$[\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta(M + S(\mathbf{r})) + V_0(\mathbf{r})] \psi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i \psi_i(\mathbf{r}), \quad (2)$$

其中  $\varepsilon_i$  是相应的单粒子本征能量.  $S(\mathbf{r})$  和  $V_0(\mathbf{r})$  分别

是标量势和矢量势,

$$S(\mathbf{r}) = g_\sigma \sigma(\mathbf{r}),$$

$$V_0(\mathbf{r}) = g_\omega \omega_0(\mathbf{r}) + g_\rho \tau_3 \rho_0(\mathbf{r}) + e \frac{1-\tau_3}{2} A_0(\mathbf{r})$$

以及介子和光子运动的 Klein-Gordon 方程

$$(-\nabla^2 + m_\zeta^2) \zeta(\mathbf{r}) = S_\zeta(\mathbf{r}), \quad (3)$$

其中

$$S_\zeta(\mathbf{r}) = \begin{cases} -g_\sigma \rho_s(\mathbf{r}) - g_2 \sigma^2(\mathbf{r}) - g_3 \sigma^3(\mathbf{r}), & \zeta = \sigma, \\ g_\omega j_B^\mu(\mathbf{r}) - c_3 (\omega^\nu \omega_\nu) \omega^\mu(\mathbf{r}), & \zeta = \omega^\mu, \\ g_\rho j_R^\mu(\mathbf{r}), & \zeta = \rho_3^\mu, \\ e j_c^\mu(\mathbf{r}), & \zeta = A^\mu. \end{cases}$$

上式中各种核子密度分别为

$$\begin{cases} \rho_s(\mathbf{r}) = \sum_i \bar{\psi}_i(\mathbf{r}) \psi_i(\mathbf{r}), \\ j_B^\mu(\mathbf{r}) = \sum_i \bar{\psi}_i(\mathbf{r}) \gamma^\mu \psi_i(\mathbf{r}), \\ j_R^\mu(\mathbf{r}) = \sum_i \bar{\psi}_i(\mathbf{r}) \gamma^\mu \tau_{i3} \psi_i(\mathbf{r}), \\ j_c^\mu(\mathbf{r}) = \sum_i \bar{\psi}_i(\mathbf{r}) \gamma^\mu \frac{1-\tau_{i3}}{2} \psi_i(\mathbf{r}). \end{cases}$$

以上求和不包括 Dirac 海的贡献, 即“无海”近似. 在平均场近似以及“无海”近似下, 方程(2)和(3)可通过自洽迭代进行求解. 系统的总能量为

$$E_{\text{RMF}} = E_{\text{part}} + E_\sigma + E_\omega + E_\rho + E_\gamma + E_{\text{c.m.}},$$

其中核子场与介子场贡献的能量分别为

$$E_{\text{part}} = \sum_{i=1}^A \varepsilon_i,$$

$$E_\sigma = -\frac{1}{2} \int d^3 r \left[ g_\sigma \rho_s(\mathbf{r}) \sigma(\mathbf{r}) + \frac{1}{3} g_2 \sigma^3(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} g_3 \sigma^4(\mathbf{r}) \right],$$

$$\begin{aligned}
 E_\omega = & -\frac{1}{2} \int d^3 r \left[ g_\omega \omega_0(\mathbf{r}) j_B^0(\mathbf{r}) - g_\omega \boldsymbol{\omega}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{j}_B(\mathbf{r}) \right. \\
 & \left. - \frac{1}{2} c_3 (\omega_\mu \omega^\mu)^2(\mathbf{r}) \right],
 \end{aligned}$$

$$E_\rho = -\frac{1}{2} \int d^3 r g_\rho \rho_0(\mathbf{r}) j_R^0(\mathbf{r}),$$

$$E_\gamma = -\frac{e^2}{8\pi} \int d^3 r A_0(\mathbf{r}) j_c^0(\mathbf{r}).$$

另外, 在平均场模型中, 由于平移对称性被破坏, 因此需要进行质心修正. 本文采用微观质心修正方法<sup>[19]</sup>, 相应的修正能量为

$$E_{\text{c.m.}} = -\frac{1}{2MA} \langle \hat{p}_{\text{c.m.}}^2 \rangle.$$

形变约束计算可以通过对下式的非约束哈密顿量本征值的变分来实现<sup>[21]</sup>:

$$\langle H' \rangle = \langle H \rangle + \frac{1}{2} C_\mu (\langle Q_2 \rangle - \mu_2)^2,$$

其中  $C_\mu$  为约束计算乘子,  $\mu_2$  为给定的四极矩数值,  $Q_2$  为四极矩算符, 它与形变参数  $\beta_2$  的关系为

$$\langle Q_2 \rangle = \langle Q_2^n \rangle + \langle Q_2^p \rangle = \frac{3}{\sqrt{5\pi}} AR_0^2 \beta_2, \quad R_0 = 1.2A^{1/3}.$$

### 1.2 计算微观壳修正能量的 Strutinsky 方法

Strutinsky 方法<sup>[3,4]</sup>的主要思想是: 考虑到宏观模型对原子核结合能的大块性质和微观壳模型对壳结构性质的成功描述, 用宏观模型来代替微观模型描述原子核结合能的平均部分, 其余部分采用 Strutinsky 壳修正能量描述. Strutinsky 壳修正能量  $E_{\text{shell}}$  即微观壳模型单粒子能级之和与平滑后单粒子能级之和的差别:

$$E_{\text{shell}} = E - \tilde{E} = \sum_{i=1}^{N(Z)} \varepsilon_i - 2 \int_{-\infty}^{\bar{\lambda}} \varepsilon \tilde{g}(\varepsilon) d\varepsilon,$$

中子和质子壳修正能可以分别计算. 上式中,  $N(Z)$  为中子(质子)数,  $\varepsilon_i$  为单粒子能级的能量, 单粒子能量之和  $E = \sum_{i=1}^N \varepsilon_i$ , 平滑后的费米能  $\bar{\lambda}$  由粒子数  $N(Z) =$

$2 \int_{-\infty}^{\bar{\lambda}} \tilde{g}(\varepsilon) d\varepsilon$  确定. 平滑后的单粒子能级密度为  $\tilde{g}(\varepsilon)$ ,  $\tilde{g}(\varepsilon) = \frac{1}{\gamma} \int_{-\infty}^{\infty} g(\varepsilon') f\left[\frac{\varepsilon' - \varepsilon}{\gamma}\right] d\varepsilon'$ , 其中  $g(\varepsilon)$  为单粒子能级密度  $g(\varepsilon) = \sum_{i=1}^{\infty} \delta(\varepsilon - \varepsilon_i)$ ,  $\gamma$  为高斯分布宽度,  $f$  通常选为具有高斯形式的函数:  $f(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-x^2} P(x)$ ,

$P(x) = L_s^{1/2}(x^2)$  为  $s$  阶拉盖尔多项式. 计算中, 拉盖尔多项式的阶数  $s$  与高斯分布的宽度  $\gamma$  是两个可调参数, 但是壳修正能应与这两个量无关. 文献[22]基于相对论平均场理论系统研究 Strutinsky 壳修正能量的稳定性后发现, 稳定的壳修正能量要求  $s$  高于 3 阶, 且  $1.2\hbar\omega_0 \leq \gamma \leq 1.8\hbar\omega_0$ , 其中  $\hbar\omega_0 = 41A^{-1/3} \left(1 \pm \frac{1}{3} \frac{N-Z}{A}\right)$

MeV, 正、负号分别对应中子、质子. 在计算中, 选取  $s=3, \gamma=1.2\hbar\omega_0$ .

## 2 数值计算及结果讨论

本文基于轴对称形变约束的 RMF 理论, 选用考虑微观质心修正的 PK1 有效相互作用<sup>[23]</sup>, 计算了 Zr 同位素链偶偶核的基态位能曲面. Dirac 方程(2)和 Klein-Gordon 方程(3)采用轴对称形变谐振子基展开方法求解, 谐振子基展开的主壳数为  $N_f = N_b = 16$ . 同时采用 BCS 近似描述开壳原子核的对关联效应, 对能隙取为  $12/\sqrt{A}$  MeV. 由得到的单粒子能谱, 利用 Strutinsky 方法可以提取出核素的壳修正能量, 进而研究 Zr 同位素链的壳效应.

### 2.1 位能曲面与基态性质

利用形变约束的 RMF 理论计算得到 Zr 同位素链的位能曲面如图 1 中实线所示. 曲线上的最小点对应核素的基态. 为了便于比较, 图 1 中均以基态结合能作为参考零点. 计算表明, 除 <sup>88</sup>Zr 和 <sup>90</sup>Zr 基态形变为球形外, 其余同位素均有形变, 其中 <sup>86</sup>Zr 和 <sup>92</sup>Zr 位能曲面在  $\beta_2=0$  附近较软, 核的形状具有不确定性, 更精确的计算需要考虑原子核的三轴形变; <sup>82</sup>Zr 和 <sup>94</sup>Zr 具有形状共存特征, <sup>82</sup>Zr 可能为扁椭-球形-长椭形状共存, <sup>94</sup>Zr 可能为扁椭-长椭形状共存. 根据位能曲面最小值, 可以提取出各核素基态的结合能及相应的四极形变参数. 图 2 中给出了基态单核子结合能  $E/A$  理论值与实验值<sup>[24]</sup>随中子数  $N$  的变化. 采用形变约束 RMF 理论的计算结果与实验值很好地符合, 方均根误差为 0.026 MeV. 同时, 核子在  $N=50$  时束缚最强, 随着中子数的增加(或减小)逐渐变弱.

表 1 中给出了理论计算的 Zr 同位素链四极形变参数  $\beta_2$  与相应的实验值<sup>[25]</sup>. 可以看出, <sup>88</sup>Zr 和 <sup>90</sup>Zr 是很好的球形核, 随着中子数  $N$  与 50 的差别变大, 原子核形变增大. 在  $N<50$  区原子核主要为扁椭形变, 在  $N>50$  区则主要为长椭形变. 随着中子数的增加, 原子核基态形变由扁椭向长椭逐渐过渡. 另外, 除 <sup>86</sup>Zr, <sup>92</sup>Zr 及 <sup>98</sup>Zr 外, 大部分核基态形变计算值与实验结果相一致. <sup>86</sup>Zr 和 <sup>92</sup>Zr 的偏差原因是其位能曲面较软. 而对 <sup>98</sup>Zr, 在其基态  $\beta_2=0.52$  附近还存在另一极小点  $\beta_2=0.33$ , 能量仅比基态高 0.2 MeV, 其间的势垒

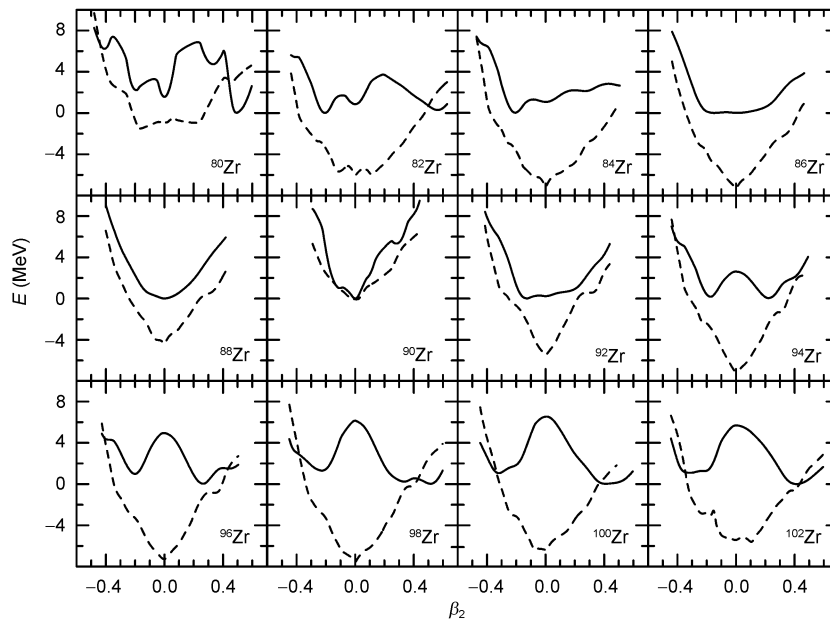


图 1 形变约束 RMF 理论给出的  $^{80}\text{Zr}$ - $^{102}\text{Zr}$  位能曲面  $E_{\text{RMF}}$ (实线)及扣除壳修正能量后的等效宏观位能曲面  $E_{\text{mac}}$ (虚线)

表 1 形变约束的 RMF 理论计算得到 Zr 同位素链偶偶核四极形变参数  $\beta_{2\text{th}}$  与实验值  $\beta_{2\text{exp}}$  的比较

A	$\beta_{2\text{th}}$	$\beta_{2\text{exp}}$	A	$\beta_{2\text{th}}$	$\beta_{2\text{exp}}$
80	0.4921	0.437	92	-0.1232	0.002
82	-0.2007	-0.232	94	0.2204	0.166
84	-0.2057	-0.224	96	0.2717	0.223
86	-0.1573	0.002	98	0.5229	0.282
88	0.0009	0.002	100	0.3969	0.359
90	0.0003	0.001	102	0.422	0.367

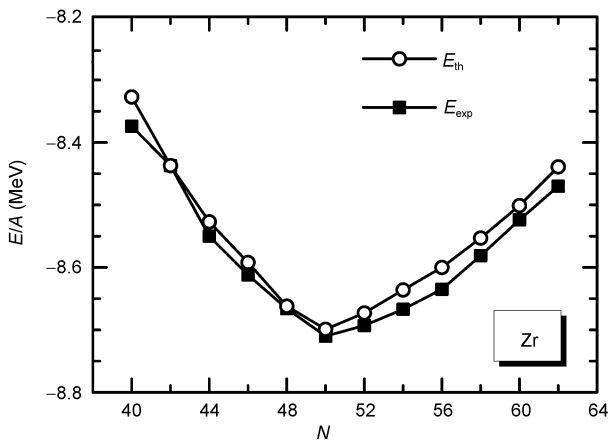


图 2 Zr 同位素链偶偶核单核子结合能随中子数的变化

高度仅为 0.65 MeV, 从而使形状出现不确定性. 事实上, 能量第二极小点对应的形变与实验值十分接近.

通过对 Zr 同位素链基态结合能与四极形变参数  $\beta_2$  的研究表明, 形变约束的 RMF 理论模型很好地描述了 Zr 同位素链的基态性质. 在此基础上, 利用 Strutinsky 方法从单粒子能级中提取核素各形变点的壳修正能量, 进而可以研究 Zr 同位素链的壳效应.

## 2.2 壳修正能量的同位旋依赖性

壳修正能量源于单粒子能级分布的不均匀性. 能级分布越均匀则壳修正能量越小, 壳效应越小; 反之则壳修正能量变大, 壳效应更加显著, 其中费米面附近单粒子能级的分布对壳修正能量起主要贡献. 另外, 壳修正能量不仅依赖于能级分布, 也依赖于费米面的位置. 在能级分布不变的情况下, 如果最后填充的粒子在能隙之下, 则壳修正能量为负, 体系较单粒子能级平滑后的体系更加束缚; 反之, 如果最后填充的粒子在能隙之上, 则壳修正能量为正, 体系不如

平滑后的体系束缚.

为研究壳效应的同位旋依赖性,我们在图3中给出了Zr同位素链在基态时中子的单粒子能谱(其中实线表示偶宇称对应的单粒子能级,虚线表示奇宇称对应的单粒子能级,实圆点表示相应的费米面).球形核 $^{88}\text{Zr}$ 和 $^{90}\text{Zr}$ 的单粒子能级分布相似,具有明显的壳层结构.而其他原子核基态由于具有明显的形变,能级之间的间隙变小,能级分布较球形时均匀很多.另外,对于中子数 $N=40$ 和 $58$ ,计算的原子核形变 $\beta_2$ 达到约 $0.5$ ,单粒子能级又出现了较为明显的壳层结构.

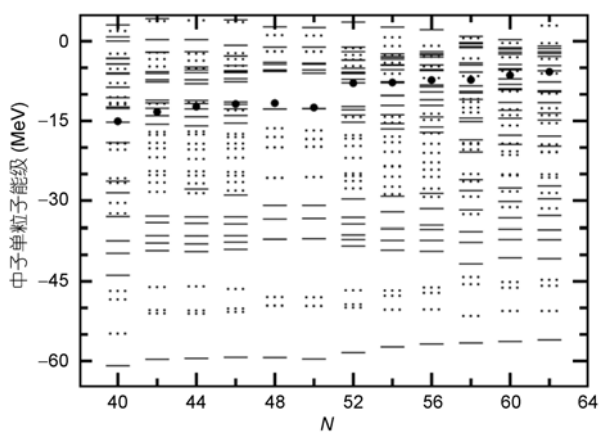


图3 形变约束RMF理论给出的Zr同位素链基态时的中子单粒子能级

实线为偶宇称,虚线为奇宇称,实圆点为相应的费米能级

图4中给出用Strutinsky方法提取的Zr同位素链基态壳修正能量随中子数的变化.中子单粒子能级分布对壳修正能量的贡献显示出明显的壳效应.在中子幻数 $N=50$ 时,中子壳修正能量 $E_{sh}^n$ 给出负的极大值,说明壳效应使体系更加束缚,这与图3中的中子单粒子分布相吻合.在 $N=46$ 时则给出正的极大值.对于球形核 $^{88}\text{Zr}$ 和 $^{90}\text{Zr}$ ,尽管能级分布相似,但 $E_{sh}^n$ 却相差近 $5\text{ MeV}$ ,这表明壳修正能量不仅依赖于能级分布,也与费米面密切相关.原子核在满壳附近增加或减少核子,对壳修正能量有显著影响.另外,大形变核 $^{80}\text{Zr}$ 和 $^{98}\text{Zr}$ 也给出了较大的 $E_{sh}^n$ ,这与图3中展示的壳层结构是一致的.对于其余的原子核, $E_{sh}^n$ 的贡献则很小.

从图4中可看出,尽管对Zr同位素链来说质子

数不变,但质子对壳修正能量的贡献 $E_{sh}^p$ 也具有明显的同位旋依赖性. $^{90}\text{Zr}$ 给出最大的正能贡献,约为 $5\text{ MeV}$ ;  $^{98}\text{Zr}$ 给出最大的负能贡献,约 $-2\text{ MeV}$ .结果表明,质子能级分布明显受到中子数变化的影响,从而影响了壳修正能量.

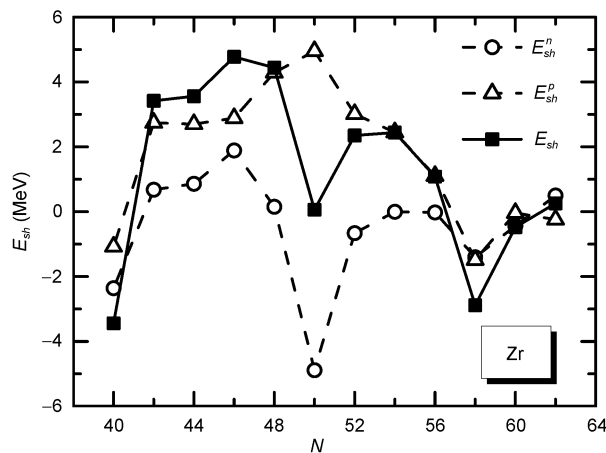


图4 用Strutinsky方法提取的Zr同位素链基态壳修正能量 $E_{sh}$ 随中子数 $N$ 的变化以及相应的质子和中子的贡献 $E_{sh}^p$ 和 $E_{sh}^n$

基态时总的壳修正能量 $E_{sh} = E_{sh}^p + E_{sh}^n$ 由质子和中子间的竞争决定.在满壳 $N=50$ 时,质子和中子的贡献相当,符号相反,总壳修正能量接近零,但与相邻原子核对比显示出明显的壳效应.另外,对 $N=40$ 和 $58$ ,由于质子和中子壳修正能量均为负,两者壳效应叠加,总壳修正能量也具有明显的壳效应.对其它大部分核,由于中子壳修正能量 $E_{sh}^n$ 较小,总壳修正能量 $E_{sh}$ 主要是质子的贡献.总体而言,对Zr同位素链, $E_{sh}$ 随中子数变化有明显的同位旋依赖性.

### 2.3 壳修正能量的形变依赖性

原子核发生形变时会引起单粒子能级分布的变化,从而导致壳结构的改变.由于壳修正能量明显依赖于原子核的单粒子能级分布,因此有必要系统研究壳修正能量的形变依赖性.在图5中给出了Zr同位素链各核素壳修正能量随形变的变化趋势.

从图5中可看出,随着中子数的增加,Zr同位素链质子壳修正能量 $E_{sh}^p$ 随形变变化趋势相似.当 $|\beta_2| < 0.37$ 时, $E_{sh}^p$ 均为正值,数值在 $0\sim 6\text{ MeV}$ 之间.而对

不同核, 中子壳修正能量  $E_{sh}^n$  随形变的变化趋势则要复杂得多. 当  $N=50$  时,  $E_{sh}^n$  在  $\beta_2=0$  时有最小值, 约  $-4.9$  MeV, 随形变增加而逐渐变大. 随着中子数增加, 在  $\beta_2=0$  附近  $E_{sh}^n$  逐渐增大, 对结合能的贡献由负变正. 在  $N=58$  时,  $E_{sh}^n$  在  $\beta_2=0$  时的值达到最大, 同时随着形变的增加具有很好的单调递减趋势. 这与单粒子能级随形变的变化以及中子费米面的变化密切相关. 事实上, 随着中子数由  $N=50$  逐渐增加到  $N=58$ , 中子开始填充  $N=50$  满壳之上的单粒子能级  $2d_{5/2}$  及  $1g_{7/2}$ , 由于填充能隙之上的粒子会贡献正的壳修正能量, 因此导致总的壳修正能量  $E_{sh}^n$  逐渐变大. 而当原子核发生形变时, 其能级分布相对趋于均匀, 壳效应逐渐消失. 对于  $N<50$  的 Zr 同位素链原子核, 随着中子数的减少, 在  $\beta_2=0$  附近中子壳修正能量  $E_{sh}^n$  也逐渐变大, 但变化较丰中子区要弱很多,  $E_{sh}^n$  随形变的变化程度也不大.

由于质子和中子共同的贡献, Zr 同位素链中总壳修正能量  $E_{sh}$  具有复杂的形变依赖性. 在  $N=50$  附近, 由于质子和中子的贡献大小相当、符号相反, 总壳修正能  $E_{sh}$  较小, 随形变变化较平坦. 当  $N>50$  时, 随着

中子数增加,  $E_{sh}$  主要由中子贡献, 在球形时具有最大值. 同时, 结果随形变而剧烈变化. 特别是在丰中子区, 在所考虑的形变区间内, 变化幅度可达  $17$  MeV. 而对于  $^{80}\text{Zr}$  到  $^{86}\text{Zr}$ , 质子和中子壳修正能量相当, 总修正能  $E_{sh}$  随形变明显振荡, 在大形变时出现极小. 特别对于  $^{80}\text{Zr}$ , 质子数和中子数相同, 可以看出质子和中子对壳修正的贡献几乎趋于一致.

### 2.4 壳修正能量与形变核的稳定性

微观的 RMF 理论自洽给出了原子核的结合能, 恰当地考虑了原子核的壳结构效应. 为了将 RMF 计算得到的原子核总能量  $E_{\text{RMF}}$  与传统的不包含壳效应的液滴模型计算结果相比较, 通常可以从  $E_{\text{RMF}}$  中扣除壳修正能量, 所得到的值即可等效为宏观-微观模型中的宏观能量  $E_{\text{mac}}$ . 为了清晰地给出壳修正能量对位能曲面的影响, 在图 1 中也同时给出了等效宏观能量  $E_{\text{mac}}$  的位能曲面(图中虚线部分). 图 1 中显示, Zr 同位素链等效宏观能量曲线为近似的抛物线型, 曲线的极小点位于  $\beta_2=0$  或附近. 表明壳修正能量对位能曲面的影响很大, 如果忽略壳效应, 原子核将具有稳定的球形形状. 这与球形情况下原子核的表面能最小相一致. 而考虑壳修正之后, 原子核的基态可以

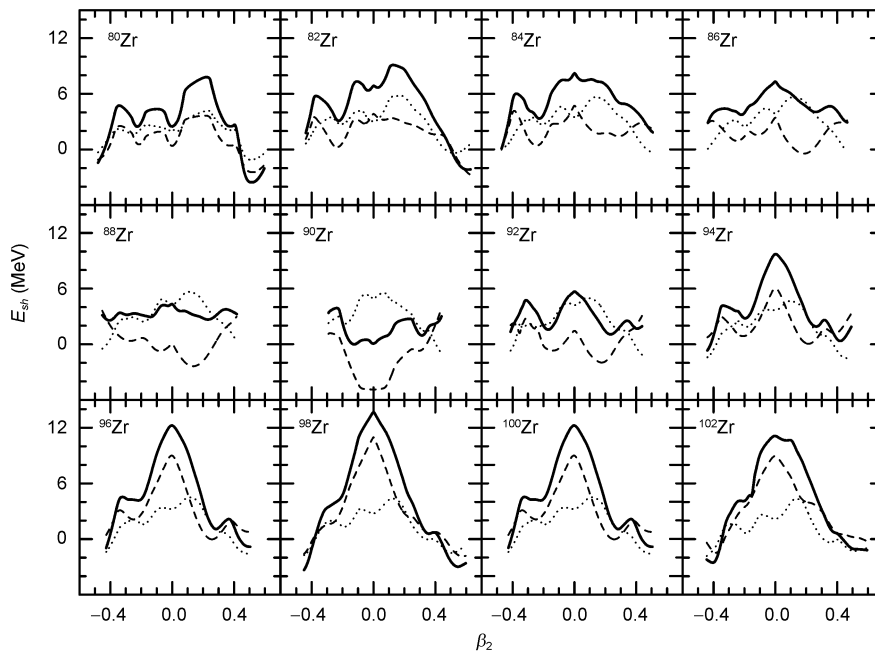


图 5 用 Strutinsky 方法提取的 Zr 同位素链壳修正能量随形变  $\beta_2$  的变化  
实线为总的壳修正能量  $E_{sh}$ , 点线(虚线)为质子(中子)的壳修正能量  $E_{sh}^{p(n)}$

具有稳定的形变, 从而使得 Zr 同位素链基态呈现出不同的形状. 因此, 壳修正能量对稳定形变原子核的形成有重要的作用.

### 3 总结

本文基于轴对称形变约束的 RMF 理论, 考虑微观质心修正, 采用 Strutinsky 方法提取壳修正能量,

对 Zr 同位素链的壳效应作了系统研究. 结果表明, Zr 同位素链基态的壳修正能量在  $N=40, 50$  和  $58$  时具有明显的壳效应, 随中子数变化有较强的同位旋依赖性; 同时, Zr 同位素链壳修正能量还具有复杂的形变依赖性. 壳修正能量随形变振荡变化, 在丰中子区变化最为剧烈, 在所考虑的形变区间内, 振荡幅度可达  $17 \text{ MeV}$ , 在大形变时出现极小. 壳修正能量对稳定形变原子核的形成有重要的作用.

**致谢** 作者衷心感谢北京大学孟杰教授在本文工作中所作的有益指导, 以及对论文初稿的仔细修改. 同时也感谢北京大学张炜博士和李剑提供相应的计算程序及帮助.

### 参考文献

- 1 Tanihata I, Hamagaki H, Hashimoto O, et al. Measurements of interaction cross sections and nuclear radii in the light p-shell region. *Phys Rev Lett*, 1985, 55: 2676—2679[DOI]
- 2 Ozawa A, Kobayashi T, Suzuki T, et al. New magic number  $N=16$  near the neutron drip line. *Phys Rev Lett*, 2000, 84: 5493—5495[DOI]
- 3 Strutinsky V M. Shell effects in nuclear masses and deformation energies. *Nucl Phys A*, 1967, 95: 420—442[DOI]
- 4 Strutinsky V M. Shell in deformed nuclei. *Nucl Phys A*, 1968, 122: 1—33[DOI]
- 5 Lü H F, Geng L S, Meng J. Fission barrier for  $^{240}\text{Pu}$  in the quadrupole constrained relativistic mean-field approach. *Chin Phys Lett*, 2006, 23: 2940—2943[DOI]
- 6 孟杰, 张炜, 张焕乔. 基于 RMF 理论对超重核结构和合成以及滴线外核的研究. *原子核物理评论*, 2003, 20: 137—147
- 7 张炜, 孟杰, 张双全. 基于相对论平均场理论对超重核冷融合反应截面的研究. *高能物理与核物理*, 2004, 28: 62—68
- 8 Juodagalvis A, Ragnarsson I, Åberg S, et al. Cranked Nilsson-Strutinsky vs the spherical shell model: a comparative study of pf-shell. *Phys Rev C*, 2006, 73: 044327[DOI]
- 9 Agrawal B K, Sil T, Samaddar S K, et al. Temperature induced shell effects in deformed nuclei. *Phys Rev C*, 2001, 64: 017304[DOI]
- 10 Ramamurthy V S, Prakash M, Kapoor S S. On the uncertainties in the shell correction by Strutinsky smearing procedure for certain shapes relevant in fission. *Phys Lett B*, 1976, 62: 124—126[DOI]
- 11 Zhang W, Zhang S S, Zhang S Q, et al. Shell correction at the saddle point for superheavy nucleus. *Chin Phys Lett*, 2003, 20: 1694—1697[DOI]
- 12 Serot B D, Walecka J D. The relativistic nuclear many-body problem. *Adv Nucl Phys*, 1986, 16: 1—327
- 13 Ring P. Relativistic mean field theory in finite nuclei. *Prog Part Nucl Phys*, 1996, 37: 193—263[DOI]
- 14 Meng J, Toki H, Zhou S G, et al. Relativistic continuum hartree bogoliubov theory for ground state properties of exotic nuclei. *Prog Part Nucl Phys*. 2006, 57: 470—563[DOI]
- 15 Gambhir Y K, Ring P, Thimet A. Relativistic mean field theory for finite nuclei. *Ann Phys*, 1990, 198: 132—179[DOI]
- 16 Hemalatha M, Bhagwat A, Shrivastava A, et al. Anomaly in the nuclear charge radii of Zr isotopes. *Phys Rev C*, 2004, 70: 044320[DOI]
- 17 Geng L S, Toki H, Meng J. A systematic study of Zr and Sn isotopes in the relativistic mean field theory. *Mod Phys Lett A*, 2004, 19: 2171—2190[DOI]
- 18 Tarasov V N, Tarasov D V, Gridnev K A, et al. Properties of Zr isotopes near the neutron drip line and beyond it. *Bull Russ Acad Sci Phys*, 2008, 72: 842—846[DOI]
- 19 Etchegoyen A, Federman P, Vergini E G. Importance of the neutron-proton interaction for Zr isotopes. *Phys Rev C*, 1989, 39: 1130—1133[DOI]
- 20 圣宗强, 郭建友. 相对论平均场理论对 Se, Kr, Sr 和 Zr 同位素链形状共存的系统研究. *物理学报*, 2008, 57: 1557—1563
- 21 Ring P, Schuck P. *The Nuclear Many-Body Problem*. New York: Springer-Verlag, 1980, 269
- 22 Niu Y F, Liang H Z, Meng J. Stability of Strutinsky shell correction energy in relativistic mean-field theory. *Chin Phys Lett*, 2009, 26: 032101[DOI]

- 23 Long W H, Meng J, Giai N V, et al. New effective interactions in relativistic mean field theory with nonlinear terms and density-dependent meson-nucleon coupling. *Phys Rev C*, 2004, 69: 034319[DOI]
- 24 Audi G, Wapstra A H, Thibault C. The AME2003 atomic mass evaluation. *Nucl Phys A*, 2003, 729: 361—366
- 25 Lalazissis G A, Raman S, Ring P. Ground-state properties of even-even nuclei in the relativistic mean-field theory. *Atom Data Nucl Data Tables*, 1999, 71: 1—40[DOI]

## Microscopic study of shell correction energy in Zr isotope chain with relativistic mean-field theory

LI MaoQiong<sup>1</sup>, SUN BaoYuan<sup>2</sup> & ZHANG ShuangQuan<sup>2\*</sup>

<sup>1</sup> *College of Physics and Electronic Information, Dali University, Dali 671000, China;*

<sup>2</sup> *School of Physics and State Key Laboratory of Nuclear Physics and Technology, Peking University, Beijing 100871, China*

The potential energy surfaces of even-even Zr isotopes are calculated with the axially deformed constrained relativistic mean-field (RMF) theory by taking the microscopic center-of-mass correction energy into account. The shell correction energy is extracted from the corresponding single-particle spectra with the Strutinsky method and used to study the evolution of shell structure in Zr isotopes. It is found that the ground state properties of Zr isotopes can be well reproduced in the constrained RMF calculation. By analysing the shell correction energy, significant shell effects with strong isospin dependence are illustrated. In addition, the shell correction energy also strongly depends on the deformation, which plays an important role in the formation of stable deformed nuclei.

**relativistic mean-field theory, Strutinsky shell correction, Zr isotope, potential energy surface, shell structure**