

关于原子核奇偶质量差和能隙的研究*

丁斌刚¹ 张大立¹ 鲁定辉²

1 (湖州师范学院理学院 湖州 313000)

2 (浙江大学近代物理中心 杭州 310027)

摘要 系统分析了奇偶核质量差公式的适用性及与能隙参数的关系. 计算了核素Sn和Pb附近10个同位素链的中子奇偶质量差 $\Delta_n^{(3)}$, 发现壳效应、核子对相互作用、核的形变都会明显影响 $\Delta_n^{(3)}$ 的数值, 并在此基础上, 给出了一个修正的奇偶核质量差公式.

关键词 奇偶差 BCS理论 对能隙

1 引言

原子核具有奇偶质量差(以下简称奇偶差)的事实, 是核子间存在对相互作用的最直接的证据. 其他的实验结果和相关的理论研究也同样表明核子除了受到一个近似的平均场作用外, 对力是最主要的剩余相互作用, 这种相互作用甚至会引起核子填充次序的重新排列. 所以, 目前流行的大多数核理论模型, 都不得不唯象地引入了对相互作用的概念. 而这种被引入的对相互作用的大小, 都必须和奇偶差的基本事实相吻合. 所以, 对奇偶差的准确描述, 是应用各种核理论模型的首要条件.

基于偶偶核比相邻的奇A核每核子结合能下降的事实, 人们自然地定义奇偶差为偶偶核的结合能与两个相邻的奇A核的结合能的平均值之差. 即通常的三参数公式^[1]

$$\Delta_n^{(3)} = \frac{1}{2}[B(Z, N+1) - 2B(Z, N) + B(Z, N-1)], \quad (1)$$

$$\Delta_p^{(3)} = \frac{1}{2}[B(Z+1, N) - 2B(Z, N) + B(Z-1, N)], \quad (2)$$

$\Delta_n^{(3)}$ 和 $\Delta_p^{(3)}$ 就是由能量差代表的处于基态的中子和质子的奇偶差. (上标(3)是代表由三参数公式计算所得). 但由于公式(1), (2)中的结合能B(不论是采用实验值还是理论计算^[2-4])是基态原子核各种相互作用的综合反映, 奇核与偶核除了对相互作用的差异之外, 还有许多其他的相互作用差异, 其中有些差异是不能

通过公式本身的计算而抵消的, 如壳效应、中子和质子间的对作用、形变等. 其中壳效应的影响是最大的. 比如, 用公式(1)计算的¹⁶O的 $\Delta_n^{(3)}$, 即高达5.76MeV, 这决不仅仅是奇偶差的贡献. 此外, 还有一些常用的所谓的四参数公式^[5]和五参数公式^[6], 其本质和公式(1), (2)基本相同, 只不过增加了参数的取值范围, 而使最后的计算结果弱化了其他相互作用的贡献而趋于相邻核子间的奇偶差的平均值. 所以, 如何正确地计算实际的奇偶差而保证对关联理论的可靠, 仍然是一个值得研究的问题.

BCS理论^[7]是处理对关联的最常用的模型, 尽管存在粒子数不守恒的近似, 但仍以其概念上和计算上都比较简单, 能把一个复杂的相互作用多粒子体系问题化成一个独立的准粒子体系问题, 进而可方便地处理原子核的高自旋态等优点而得到广泛持久地应用. 在这个理论中, 能隙 Δ 是一个十分重要的概念, 但它不是直接来自奇偶差, 而是通过拟合实验数据确定一个平均对力强度G而得到. 所以, 这个能隙 Δ 是否就是奇偶差, 也是一个需要澄清的问题, 因为它涉及到对BCS理论的正确理解和应用.

2 奇偶差的计算结果和分析

2.1 部分原子核的奇偶差的计算

由于质子同位素链较中子同位素链有较多的元素, 更容易反映奇偶差随核子数的变化规律, 故下文

2006-06-23 收稿

* 国家自然科学基金(10475026, 10675046)和浙江省自然科学基金(Y604060)资助

以中子的奇偶差作为研究对象。

为了让质子同位素链尽可能的长,且通过幻数区以揭示壳效应,选择 Sn, Sb, Te, I, Xe 5 个相邻的同位素链从中子数 60 到 84; 选择 Pb, Bi, Po, At, Rn 5 个相

邻的同位素链从中子数 110 到 134. 利用公式 (1) 分别计算了它们的 $\Delta_n^{(3)}$, 并列出了对应的单粒子能级. 计算结果见表 1. 其中结合能 B 的实验数据来自文献 [8], 单粒子轨道取自文献 [9].

表 1 部分核的中子对能隙 $\Delta_n^{(3)}$ (能量单位: keV)

轨道	$2d_{5/2}$		$2d_{3/2}$		$3s_{1/2}$	$1h_{11/2}$						$1h_{9/2}$	
Z/N	60	62	64	66	68	70	72	74	76	78	80	82	84
^{50}Sn	1552	1522	1376	1310	1421	1469	1434	1377	1321	1288	1185	2421	915
^{51}Sb	1290	1362	1335	1235	1266	1218	1249	1246	1197	1178	1005	2023	184*
^{52}Te	1385	1684	1689	1580	1537	1452	1427	1413	1350	1245	1105	2174	731
^{53}I	1201*	1202*	1203	1385	1353	1221	1199	1159	1168	1128	1000	2004	588
^{54}Xe	1711	1625	1589	1539	1495	1440	1412	1351	1325	1251	1094	2027	1139

轨道	$3p_{3/2}$	$3p_{1/2}$	$1i_{13/2}$				$2g_{9/2}$						
Z/N	110	112	114	116	118	120	122	124	126	128	130	132	134
^{82}Pb	1336	1253	1120	1052	1000	911	831	674	1715	675	709	839*	
^{83}Bi	1105	1024	999	929	865	840	714	605	1427	403	572	688	721*
^{84}Po	1287	1258	1187	1084	1008	926	854	714	1554	827	873	897	969*
^{85}At	921	1047	989	1000	930	824	787	648	1351	579	694	782	828
^{86}Rn	1301	1210	1211	1159	1047	943	868	756	1432	886	990	1027	1038

2.2 壳结构对 $\Delta_n^{(3)}$ 的影响

从表 1 可见, 和同一个支壳层上其他中子相比, 中子的 $\Delta_n^{(3)}$ 无一例外地在幻数 82 和 126 处有突然地增大, 说明在幻数处, 由于单粒子能级急剧变化, 由公式 (1) 得到的 $\Delta_n^{(3)}$ 已不是单纯的奇偶差, 而是包括了壳效应的贡献. 而要得到满壳时真正的奇偶差, 并不容易, 因为既没有相关的实验数据, 也没有可靠的理论计算. 所以, 只能根据表 1 中已有数据进行拟合外推. 从表 1 中 $1h_{11/2}$ 和 $1i_{13/2}$ 两个轨道的数据比较发现, 除了 I_{76} 和 At_{116} 之外, 在到达满壳之前, 其余元素的 $\Delta_n^{(3)}$ 都随中子数的增加而下降. (I_{76} 和 At_{116} 两个元素的例外, 下文另有分析). 为了表示拟合外推的方法, 分别以 $1h_{11/2}$ 和 $1i_{13/2}$ 轨道上的 Sn, Pb 同位素链的 $\Delta_n^{(3)}$ 随中子数 N 的变化为例, 各自得到图 1 和图 2 以及对应的拟合曲线 (3) 和 (4):

$$Y = -3.754 + 0.16326X - 0.00127X^2, \quad (3)$$

$$Y = -37.4856 + 0.69072X - 0.00309X^2, \quad (4)$$

设扣除了壳效应影响后, 中子的奇偶差为 Δ_n . 分别将 $N=82$ 和 126 代入 (3) 和 (4) 式, 得到 $\Delta_n(50, 82)=1094\text{keV}$, $\Delta_n(82, 126)=488\text{keV}$. 设在中子幻数处壳效应引起的能差为 $\Delta\varepsilon_n$, 则有

$$\Delta\varepsilon_n = \Delta_n^{(3)} - \Delta_n \quad (5)$$

按同样的方法, 计算了其余 8 个元素在中子幻数处的 Δ_n , 并由公式 (5) 计算了 $\Delta\varepsilon_n$ 以及它们的平均值 $\Delta\varepsilon_n$, 结果见表 2.

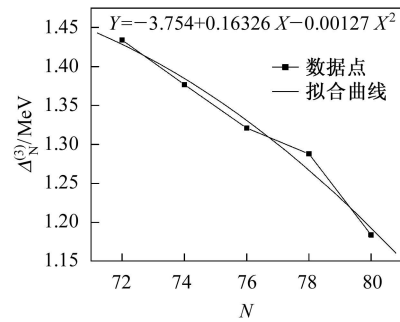


图 1 在 $1h_{11/2}$ 轨道上 Sn 同位素链的 $\Delta_n^{(3)}$ 随中子数的变化

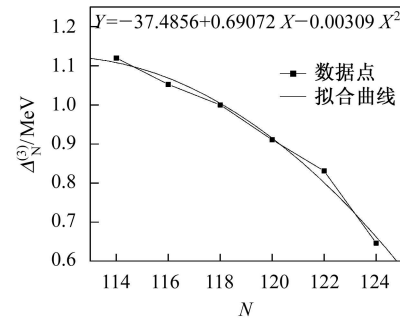


图 2 在 $1i_{13/2}$ 轨道上 Pb 同位素链的 $\Delta_n^{(3)}$ 随中子数的变化

表 2 表 1 中 10 个元素在中子幻数 82 和 126 处的 Δ_n 和 $\Delta\varepsilon_n$ 以及平均值 $\Delta\varepsilon_n$ (能量单位: keV)

元素	Sn	Sb	Te	I	Xe	平均
Δ_n	1094	853	917	878	946	938
$\Delta\varepsilon_n$	1327	1170	1257	1126	1081	1192
元素	Pb	Bi	Po	At	Rn	平均
Δ_n	488	487	620	535	647	555
$\Delta\varepsilon_n$	1227	940	934	816	785	940

表2的结果表明,随着核子数的增大, Δ_n 在减小. 有了壳效应的能差数据后,在幻数处的奇偶差可大致按如下公式计算

$$\Delta_n = \Delta_n^{(3)} - \Delta\bar{\varepsilon}_n, \quad (6)$$

公式(6)就是对奇偶差计算公式(1)在幻数处的壳修正.

从表1数据可见,对其他的支壳,如 $2d_{5/2}$, $2g_{9/2}$ 等,没有明显的壳效应,这可能是因为由壳模型构建的单粒子能级是建立在平均场近似和自旋-轨道耦合的基础上,它能够正确地反映核的幻数大壳,但对能级差较小的单粒子能级的正确描述,却无能为力. 另一个可能的原因是在非大壳的单粒子能级之间,能量差较小,能级差被其他复杂的相互作用所掩盖.

由于在同一单粒子能级上核子数较少,且原子核是一个十分复杂的体系,上述由曲线拟合外推的方法得到的 Δ_n , 是比粗糙的,而且在其他的单粒子能级上不一定有 $\Delta_n^{(3)}$ 随中子数 N 单调下降的规律,但壳效应的存在确是无可争议的,壳效应的大小也不会和上述

计算相差很多.

2.3 中子和质子的配对效应对 $\Delta_n^{(3)}$ 影响

由于对相互作用不是电磁力,而是核力的表现之一. 根据核力的电荷无关性,不成对的质子和中子也应当有对相互作用. 从表1可以发现,奇质子的 $\Delta_n^{(3)}$ 总比相邻的偶质子的 $\Delta_n^{(3)}$ 要小. 这是单个质子和中子也有对相互作用的证据. 以公式(1)为例,当 $B(Z, N)$ 对应奇 Z 偶 N 核时, $B(Z+1, N)$ 和 $B(Z-1, N)$ 对应两个相邻的奇奇核,由于它们的单质子和单中子形成对相互作用而使结合能降低(绝对值增大),最后使得 $\Delta_n^{(3)}$ 变小. 设单个质子和单个中子间的对能为 $E_{p-n}(Z, N)$, 仿照公式(1),可以得到计算公式

$$E_{p-n}(Z, N) = \frac{1}{2}[\Delta_n^{(3)}(Z+1, N) - 2\Delta_n^{(3)}(Z, N) + \Delta_n^{(3)}(Z-1, N)], \quad (7)$$

按此计算了表1中 Sb, I, Bi, At 4个奇质子的中子-质子对能 $E_{p-n}(Z, N)$ 及其平均值 $\bar{E}_{p-n}(Z, N)$. 结果见表3.

表3 单个质子和单个中子间的对能 $E_{p-n}(Z, N)$ (能量单位: keV)

Z/N	60	62	64	66	68	70	72	74	76	78	80	82	$\bar{E}_{p-n}(Z, N)$
^{51}Sb	179	241	198	210	213	243	182	149	139	177	140	276	196
^{53}I	347	453	436	175	163	225	221	223	170	120	100	97	228
Z/N	110	112	114	116	118	120	122	124	126	128	130	132	$\bar{E}_{p-n}(Z, N)$
^{83}Bi	207	231	155	139	139	79	129	89	208	348	219	180	165
^{85}At	373	187	210	122	98	111	74	87	142	278	238	180	175

由表3数据可见, $\bar{E}_{p-n}(Z, N)$ 并非是可以忽略的小量. 所以在应用公式(1)时,对于奇 A 核,必须加上一项 $E_{p-n}(Z, N)$, 即

$$\Delta_n = \Delta_n^{(3)} + E_{p-n}(Z, N). \quad (8)$$

2.4 形变对 $\Delta_n^{(3)}$ 影响

大多数原子核都有形变,形变使单粒子能级分裂,不同的元素,有不同的形变,其结合能 B 也就包含了形变的影响. 所以,对形变核,用公式(1)算得的 $\Delta_n^{(3)}$ 中,还应考虑形变引起的能量修正 $\Delta\varepsilon'_n$. 即

$$\Delta_n = \Delta_n^{(3)} \pm \Delta\varepsilon'_n \quad (9)$$

但由于到目前为止,还没有权威的原子核形变的实验值,也没有关于形变的能级分裂的实验数据,故 $\Delta\varepsilon'_n$ 的值很难加以确定. 但从表1中 $1h_{11/2}$ 和 $1i_{13/2}$ 二条单粒子能级上十个同位素链的有规律的 $\Delta_n^{(3)}$ 变化趋势中可以发现,除了 I_{76} 和 At_{116} 两个核的 $\Delta_n^{(3)}$ 有突然地增大外,其余核的 $\Delta_n^{(3)}$ 都是单调减小. 查有限程液滴模型^[10]给出的四极形变 β_2 的值,列出 I_{76} 和 At_{116} 在 $1h_{11/2}$ 和 $1i_{13/2}$ 单粒子能级上相邻几个核对应的 β_2 值,为了方便,同时也列出了对应的 $\Delta_n^{(3)}$ 值(见表1).

从表4发现, I_{76} 的 $\Delta_n^{(3)}$ (1168keV) 比 I_{74} 的 $\Delta_n^{(3)}$ 大以及 At_{116} 的 $\Delta_n^{(3)}$ (1000keV) 比 At_{114} 的 $\Delta_n^{(3)}$ 大是因为由于形变的影响,使 I_{74} 的 $\Delta_n^{(3)}$ (1159keV) 和 At_{114} 的

表4 ^{53}I 和 ^{85}At 同位素链部分元素的 β_2 值和 $\Delta_n^{(3)}$ (能量单位: keV)

	N	72	73	74	75	76	77	78	79	80
^{53}I	β_2	-0.156	0.153	-0.13	-0.122	-0.113	-0.104	-0.079	-0.07	0.008
	$\Delta_n^{(3)}$	1199		1159		1168		1128		1000
	N	113	114	115	116	117	118	119	120	121
^{85}At	β_2	-0.207	0.08	0.089	0.071	0.062	0.045	-0.053	0.035	-0.053
	$\Delta_n^{(3)}$		989		1000		930		824	

$\Delta_n^{(3)}$ (989keV) 变小了. 从 β_2 的数据可以发现, 从 I_{73} 到 I_{74} 的 β_2 有一个从正形变到负形变的大小为 0.283 突变, 同样, 从 At_{113} 到 At_{114} 的 β_2 有一个从负形变到正形变的大小为 0.287 突变, 按照表 5 中 I 和 At 的 $\Delta_n^{(3)}$ 值的变化趋势, 可以推断这样大小的形变突变, 可能会引起几十个 keV 的形变能量修正. 当然, 这样的推论是十分粗糙的, 但在没有其他的更好的方法之前, 希望是一种有益的尝试和对形变能量修正的一个数量级的估计.

3 奇偶差和 BCS 理论中 Δ 的关系

在 BCS 理论中, Δ 是一个重要的物理量, 它被定义为

$$\Delta = G \sum_i u_i v_i, \quad (10)$$

其中 G 代表对相互作用的平均强度, u_i 和 v_i 是单粒子态空着和被占据的几率幅. 但公式 (11) 本身并没有直接赋予 Δ 明显的物理意义. Δ 的物理意义, 在于准粒子激发. 在作了许多近似后 (有些近似还可能没有足够的理由加以忽略), 独立的准粒子体系的能量算符可表示为

$$\hat{H} = \sum_i E_i (\alpha_i^+ \alpha_i + \alpha_i^- \alpha_i^-), \quad (11)$$

其中

$$E_i = \sqrt{(\varepsilon_i - \lambda)^2 + \Delta^2}, \quad (12)$$

代表一个准粒子的能量. 因为 BCS 理论下的基态就是准粒子系统的真空态, 所以, 在这种近似下, 体系的激发能就可以认为是各种形式的准粒子激发. 在费米面附近, $(\varepsilon_i - \lambda) \approx 0$, $E_i \approx \Delta$. 所以, (11), (12) 两式表明, Δ 代表着在费米面附近产生的一个准粒子的激发能. 对于偶偶核, 只有二准粒子、四准粒子、六准粒子……激发, 可以用 $\alpha_{\nu_0}^+ \alpha_{\nu_0}^+ |BCS\rangle$ 及 $\alpha_{\mu_0}^+ \alpha_{\nu_0}^+ |BCS\rangle$ 描述它的第一内禀激发态, 即二准粒子激发, 对应的能量分别为 $2E_{\nu_0}$ 和 $E_{\mu_0} + E_{\nu_0}$. 由于在费米面附近, $\Delta \gg |(\varepsilon_{\nu_0} - \lambda)|$, 因而 $E \geq \Delta$. 所以在偶偶核基态和准粒子低激发态之间形成了一个大于或等于 2Δ 的能隙. 这就是 Δ 在 BCS 理论中的物理意义. 由此可见, 在 BCS 理论中引入的 Δ 并不等于奇偶差, 奇偶差只是对能隙的近似, 这是应用该理论时必须注意的地方, 也是该理论本身的不足之处. 因为奇偶差的本质来自堵塞效应, 但要用 BCS 方法来处理却极为困难^[11].

另一个必须澄清问题是如何理解双幻核的 Δ 为零的问题. 根据公式 (10), 当原子核处于双满壳层时, 在费米面以下的能级全被占据, u_i 为零, 在费米面以上的能级全是空着, v_i 为零, 则会得到能隙 Δ 应为零的结论. 但我们认为这种推论方法是不可靠的, 因为 BCS 波函数不满足粒子数守恒的要求, 这意味着由这样的波函数描述的体系一定具有如是的性质: 多一个或少一个粒子对体系不会有太大的影响. 但在幻数处, 原子核的性质随核子数的变化有较大的突变, 建立在 BCS 近似上的公式 (10) 已不再适用. 但尽管如此, 仍然可以认为双幻核的 Δ 为零, 这是因为对相互作用是一种表面相互作用, 费米面附近能级对此都有贡献, 而不是只有最后一对核子才有对相互作用 (最后一对核子的对作用是对应着奇偶差). 对于双幻核, 核子之间也有对相互作用, 但由于费米面位于两个满壳之间, 费米面附近能级密度很小, 对相互作用很难使得费米面下面的核子对散射到费米面上面去, 因此对力的总体表现很小, 对能隙为零. 也就是说, 由于轨道和自旋的强相互作用使得在幻数处的单粒子能级有很大的能隙, 而使对能隙趋向于零. 但这不等于双幻核的奇偶差为零, 因为奇偶差是偶偶核相对于奇 A 核而言, 最后二个同类核子多了对相互作用. 所以, 只要是偶偶核, 不论最后二个同类核子是否处于闭壳上, 都应当有对相互作用. 表 1 的计算结果已经证明了这一点. 由此可见, 对于双幻核, 不能认为奇偶差仍然近似等于对能隙.

4 小结

从原子核奇偶差的基本定义出发, 分析了计算奇偶差的常见公式, 认为公式 (1) 和 (2) 并不代表了真正的奇偶差, 而是基态原子核各种相互作用的综合反映. 通过计算 Sn 和 Pb 等 10 个同位素链的中子奇偶差 $\Delta_n^{(3)}$, 发现在幻数处, $\Delta_n^{(3)}$ 均有突然的增大, 说明公式 (1) 中包含了壳效应; 而奇 A 核的 $\Delta_n^{(3)}$ 均比相邻的偶偶核的要小, 说明质子和中子间也有对相互作用; 同时, 核的形变也影响公式 (1) 计算的准确性. 在此基础上, 对公式 (1) 作了适当的修正. 由于奇偶差和原子核的对关联紧密相连, 故分析了处理对关联的最常见的理论——BCS 模型中的一个重要的物理量 Δ 和奇偶差的关系, 分析表明, Δ 只是近似的代表着奇偶差. 而对幻数核, 公式 (10) 已不再适用. 但对能隙仍可以认为是零.

参考文献(References)

- 1 Satula W, Dobaczewski, Nazarewicz. Phys. Rev. Lett., 1998, **81**: 3599—3602
- 2 REN Zhong-Zhou, XU Gong-Ou. Phys. Lett., 1990, **B237**: 1
- 3 REN Zhong-Zhou, XU Gong-Ou. Phys. Rev., 1988, **C38**: 1078
- 4 DONG Tie-Kuang, REN Zhong-Zhou. Phys. Rev., 2005, **C72**: 064331
- 5 Bohr A, Mottelson B R. Nuclear Structure. Vol. 1. Benjamin, New York. 1969, 169
- 6 HU Ji-Min, YANG Bo-Jun, ZHENG Chun-Kai. Atomic Nucleus Theory. Beijing: Atomic Energy Press, 1987. 70 (in Chinese)
(胡济民, 杨伯君, 郑春开. 原子核理论. 北京: 原子能出版社, 1987. 70)
- 7 Bardeen J, Cooper L N, Schrieffer J R. Phys. Rev., 1957, **106**: 162; **108**: 1175
- 8 Audi A, Wapstra A H, Thibault C. Nucl. Phys., 2003, **A729**: 337—676
- 9 ZENG Jin-Yan, SUN Hong-Zhou. Structure Theory of Atomic Nucleus. Shanghai: Science and Technique Publisher of Shanghai, 1987. 67 (in Chinese)
(曾谨言, 孙洪洲. 原子核结构理论. 上海: 上海科技出版社, 1987. 67)
- 10 Moeller P, Nix J R, Myers W D et al. At. Data Nucl. Data Tables, 1995, **59**: 67—227
- 11 ZENG Jin-Yan, SUN Hong-Zhou. Structure Theory of Atomic Nucleus. Shanghai: Science and Technique Publisher of Shanghai, 1987. 287 (in Chinese)
(曾谨言, 孙洪洲. 原子核结构理论. 上海: 上海科技出版社, 1987. 287)

Odd-Even Staggering of Nuclear Masses and Energy Gap Parameter*

DING Bin-Gang¹ ZHANG Da-Li¹ LU Ding-Hui²

¹ (College of Science, Huzhou Teacher's College, Huzhou 313000, China)

² (Institute of Modern Physics, Zhejiang University, Hangzhou 310027, China)

Abstract We systematically analyze the formula of the mass difference between the odd and even nuclei and its connection to the energy gap parameter. By calculating the mass difference of ten isotope chains near Sn and Pb, we find that all the shell structure, the pairing interaction and the nuclear deformation affect the value of $\Delta_n^{(3)}$ considerably. A modified formula of mass difference is proposed.

Key words odd-even mass difference, the BCS theory, pairing energy gap