

## Strutinsky 的壳修正

Strutinsky 的壳修正方法是将原子核的总结合能写成如下公式：

$$E = E_{LD} + E_{SH} \quad (3.13)$$

其中  $E_{LD}$  是液滴质量公式，代表总结合能的光滑部分。重点是计算壳修正部分  $E_{SH} = E_{SH}(N) + E_{SH}(P)$ 。这部分就是由实际的单粒子能级的非均匀分布相对于单粒子能级的均匀分布的涨落给出。

$E_{SH}$  可由实际的单粒子能级的能量总和  $E_{s.p.}$  与均匀分布的单粒子能量的总和  $\bar{E}$  之差给出。

$$E_{SH} = E_{s.p.} - \bar{E} = \sum_{n=1}^N e_n - \int_0^N \bar{e}(n) dn \quad (3.15)$$

$e_n$  是实际的单粒子能量，求和到费米能量。可以用单粒子势 Woods-Saxon 势计算得出核子的实际的单粒子能级，第二项  $\bar{E}$  即为单粒子能量均匀光滑部分， $N$  为单粒子填充的最大能级。

$$\bar{E} = \int_0^N \bar{e}(n) dn = \int_{-\infty}^I e \bar{g}(e) de \quad (3.16)$$

要计算出  $\bar{E}$ ，关键在于计算光滑的能级密度  $\bar{g}(e)$ 。 $I$  是光滑均匀单粒子能级的费米能量。实际的单粒子能级的能量  $E_{s.p.}$  和与实际的能级密度  $g(e)$  有如下关系：

$$E_{s.p.} = \sum_{n=1}^N e_n = \int_{-\infty}^I e g(e) de \quad (3.17)$$

其中  $I$  为实际的单粒子能级的费米能量。实际的单粒子能级密度也即精确的单粒子能级密度为：

$$g(e) = \sum_{n=1}^{\infty} d(e - e_n) \quad (3.18)$$

$$g(e) = \bar{g}(e) + dg(e) \quad (3.19)$$

光滑的单粒子能级密度  $\bar{g}(e)$  应该从实际的单粒子能级  $g(e)$  抽取出来而具有光滑变化的性质。可以看到，把一个很小的量  $E_{SH}$  表示为两项很大的能量的差额，而这两项本身又包含很大的可能误差和不确定性。那么就要求所选的光滑的单粒子能级的形式能够保证不影响壳修正的值。

我们对式 3.18 用厄米 (Hermitic) 多项式展开，并借助该函数的性质，从式 3.18 中将  $\bar{g}(e)$  抽取出来。因为厄米多项式前面的低次项表示该函数具有一个缓慢变化的性质，而后面的高次项显示出函数局部剧烈变化的特征，如果在厄

米多项式展开中，仅保留前面一些低次幂项到  $p$ ，而  $p+1$  以后的高次幂项全部丢掉，即可保证抽出取来的函数具有光滑变化的性质。那么在厄米多项式展开的过程中，我们就自然的得到用高斯权重函数来光滑单粒子能级的单粒子能级密度  $\bar{g}(e)$ ，有如下形式：

$$\bar{g}(e) = \frac{1}{g} \sum_{n=1}^{\infty} d(u_n) = \frac{1}{g\sqrt{p}} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-u_n^2} \sum_{m=0}^p c_m H_m(u_n) \quad (3.20)$$

其中， $g$  是能级光滑化的参数，相当于高斯函数的展开宽度，用来控制高斯函数展布宽度； $H_m$  是厄米多项式； $p$  为厄米多项式展开的最大阶数，通常取  $p=6$ ， $g$  取  $(1-1.2)\hbar\omega_0$ ， $\hbar\omega_0 = 41A^{-1/3} \text{ MeV}$ 。

$$\bar{g}(e) \rightarrow \sum d(e - e_n) \quad , \quad \text{当 } g \rightarrow 0 \text{ 或者 } p \rightarrow \infty \quad (3.21)$$

$$u_n = \frac{e - e_n}{g} \quad (3.22)$$

$$c_m = \begin{cases} \frac{(-1)^{\frac{m}{2}}}{2^m \left(\frac{m}{2}\right)!} & m = \text{偶数} \\ 0 & m = \text{奇数} \end{cases} \quad (3.23)$$

式 3.15 和式 3.16 使得  $E_{SH}$  仅仅与费米面附近（上下一个  $g$  左右）的单粒子能级有关，即仅费米面附近的单粒子能级对壳修正能量有贡献。因此各种不同的壳位阱，给出的单粒子能级在费米面附近相差不大，那么算出的壳修正能量值也相差不大。

平均粒子数表示为：

$$\bar{n}(e) = \int_{-\infty}^{\bar{I}} \bar{g}(e') de' = \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ \frac{1}{2} [1 + \text{erf}(\bar{u}_n)] - \frac{1}{\sqrt{p}} e^{-\bar{u}_n^2} \sum_{m=1}^p c_m H_{m-1}(\bar{u}_n) \right\} \quad (3.24)$$

$$\bar{u}_n = \frac{\bar{I} - e_n}{g} \quad (3.25)$$

等式 3.24 中  $\text{erf}(\bar{u}_n)$  为误差函数。利用粒子数守恒的粒子数方程来定出光滑的费米能量  $\bar{I}$

$$\bar{n}(\bar{I}) = N$$

求出  $\bar{I}$  后代入等式 3.20 即可求得光滑单粒子能级密度  $\bar{g}(e)$ ，之后再代入到等式

3.16 即可求得光滑的单粒子能级总的能量  $\bar{E}$ ：

$$\bar{E} = \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ e_n \left[ \frac{1}{2} (1 + \operatorname{erf}(\bar{u}_n)) \right] - \frac{1}{\sqrt{p}} e^{-\bar{u}_n^2} \left( \frac{1}{2} \sum_{m=0}^p [c_m H_m(\bar{u}_n)] + e_n \sum_{m=1}^p [c_m H_{m-1}(\bar{u}_n)] + \sum_{m=2}^p [m c_m H_{m-2}(\bar{u}_n)] \right) \right\}$$

由于 Pauli 原理，最后算出的  $E_{SH}$  乘以 2 倍（占有数，每条能级可填充两个粒子）便是最终的壳修正能量。用计算机 FORTRAN 程序 WSBETA 便可以得到微观壳修正能量  $E_{SH}$ 。

相关项分别为：

$$\sum_{m=0}^p c_m H_m(u_n) \quad - \sum_{m=1}^p c_m H_{m-1}(u_n) \quad \frac{1}{2} \sum_{m=0}^p [c_m H_m(u_n)] + \sum_{m=2}^p [m c_m H_{m-2}(u_n)]$$

可以看到  $E_{SH}$  的计算正确与否，除了单粒子能级  $e_n$  的直接影响之外，还受到两个可调参量  $g$  和  $p$  影响。 $p=6$  和  $p=8$  时， $E_{SH}$  的相关项的值见下面：

$m$  取到 8 时  $c_m$  的各项值：

$$c_0 = 1 ; \quad c_2 = -\frac{1}{4} ; \quad c_4 = +\frac{1}{32} ; \quad c_6 = -\frac{1}{384} ; \quad c_8 = +\frac{1}{6144}$$

$p=6$  时，壳修正能  $E_{SH}$  的相关项的值：

$$\sum_{m=0}^6 c_m H_m(u_n) = \frac{35}{16} - \frac{35}{8} u_n^2 + \frac{7}{4} u_n^4 - \frac{1}{6} u_n^6$$

$$-\sum_{m=1}^6 c_m H_{m-1}(u_n) = \frac{19}{16} u_n - \frac{2}{3} u_n^3 + \frac{1}{12} u_n^5$$

$$\frac{1}{2} \sum_{m=0}^6 [c_m H_m(u_n)] + \sum_{m=2}^6 [m c_m H_{m-2}(u_n)] = -\frac{5}{32} + \frac{15}{16} u_n^2 - \frac{5}{8} u_n^4 + \frac{1}{12} u_n^6$$

$p=8$  时，壳修正能  $E_{SH}$  的相关项的值：

$$\sum_{m=0}^8 c_m H_m(u_n) = \frac{315}{128} - \frac{105}{16} u_n^2 + \frac{63}{16} u_n^4 - \frac{3}{4} u_n^6 + \frac{1}{24} u_n^8$$

$$-\sum_{m=1}^8 c_m H_{m-1}(u_n) = \frac{187}{128} u_n - \frac{233}{192} u_n^3 + \frac{29}{96} u_n^5 - \frac{1}{48} u_n^7$$

$$\frac{1}{2} \sum_{m=0}^8 [c_m H_m(u_n)] + \sum_{m=2}^8 [m c_m H_{m-2}(u_n)] = -\frac{35}{256} + \frac{35}{32} u_n^2 - \frac{35}{32} u_n^4 + \frac{7}{24} u_n^6 - \frac{1}{48} u_n^8$$

```

SUBROUTINE STRUT(GAMM,IA,NN,ENC,ESM)
PARAMETER(NBCS=272)
DIMENSION E(NBCS), ENC(NBCS)
DATA SIPI/0.5641896/  !1/SQRT(PI)
DO J=1,NBCS
E(J)=ENC(J)
ENDDO

IP=6  ! p=6, 8, 10...
K=NBCS
HW0=41./FLOAT(IA)**0.3333
GAMMA=HW0 *GAMM  ! GAMM ~ 1.2
ESP=0.D0
DO I=1,NN/2
ESP=ESP+E(I)
END DO
ESP=ESP*2
IF(MOD(NN,2).EQ.1)ESP=ESP+E(NN/2+1)
ASN=DBLE(NN)/2
EF=0.5*(E(NN/2)+E(NN/2+1))

ITER=0
100 CONTINUE
ITER=ITER+1
111 CONTINUE
DN=0.
AN=0.
EN=0.
DO 200 I=1,K
X=(EF-E(I))/GAMMA
PHI=ERF(X)
X2=X*X
X4=X2*X2
X6=X2*X2*X2
X8=X6*X2
X10=X8*X2
EX=SIPI*EXP(-X2)
EXG=EX/GAMMA

IF(IP.EQ.6)THEN
ANY=(1.+PHI)/2.+(1./12.*X2*X2-2./3.*X2+19./16.)*X*EX
ENY=(1./12.*X2*X2*X2-5./8.*X2*X2+15./16.*X2-5./32.)*EX*GAMMA +E(I)*ANY
DNY=(35./16.-35./8.*X2+7./4.*X2*X2-1./6.*X2*X2*X2)*EXG
ENDIF

```

IF(IPEQ.8)THEN

ANY=(1.+PHI)/2. +(-1./48.\*X6+29./96.\*X4-233./192.\*X2+187./128.)\*X\*EX

ENY=(-1./48.\*X8+7./24.\*X6-35./32.\*X4+35./32.\*X2-35./256.)\*EX\*GAMMA+E(I)\*ANY

DNY=(315./128.-105./16.\*X2+63./16.\*X4-3./4.\*X6+1./24.\*X8)\*EXG

ENDIF

IF(IPEQ.10)THEN

ANY=(1.+PHI)/2. +( 1./240.\*X8-23./240.\*X6+167./240.\*X4-359./192.\*X2+437./256.)\*X\*EX

ENY=(1./240.\*X10-3./32.\*X8+21/32.\*X6-105./64.\*X4+315./256.\*X2

& -63./512.)\*EX\*GAMMA+E(I)\*ANY

DNY=(693./256.-1155./128.\*X2+231./32.\*X4-33./16.\*X6+11./48.\*X8 -1./120.\*X10)\*EXG

ENDIF

DN=DN+DNY

AN=AN+ANY

EN=EN+ENY

200 CONTINUE

ESR=EN

AS=AN

202 DNN=ASN-AS

DF=DNN/DN

EFST=EF

IF(ABS(DNN).LT.1.E-3) GOTO 300

EF=EF+DF

GOTO 100

300 CONTINUE

ESM=EN\*2

ESM=ESP-ESM

END