

超重区域的预测来自 夸克-介子耦合模型 QMC π -III

Kay Marie M. Paglinawan,^{a,*} Anthony W. Thomas,^b Pierre A. M. Guichon^b
and Jirina R. Stone^c

^aPhysics Department, Silliman University, Hibbard Avenue, Dumaguete City, Philippines

^bCSSM and ARC Centre of Excellence for Dark Matter Particle Physics,
Department of Physics, University of Adelaide, SA 5005, Australia

^cDepartment of Physics (Astrophysics), University of Oxford, Oxford OX1 3RH, UK

E-mail: kaylmartinez@su.edu.ph, anthony.thomas@adelaide.edu.au

夸克-介子耦合 (QMC) 模型建立了核子的夸克结构动力学与核介质中产生的相对论平均场之间的自洽关系 [1]。该模型成功计算了有限原子核的基态可观测量, 并预测了密集核物质以及冷、非吸积中子星的性质 [2–8]。本文重点介绍了模型对超重区域最新预测, 涵盖了能量和变形。尽管使用的模型参数显著减少, 但随着模型的发展, 结果一直有所改进, 为结合能提供了更好的预测。

第十六届夸克禁闭与强子谱会议 (QCHSC24)
2024 年 8 月 19 日至 24 日
澳大利亚昆士兰州凯恩斯会议中心

*Speaker

1. 介绍

探索核子景观现有边界之外的领域仍然是理论和实验原子及核物理学中的一个持续挑战。已开发出几种理论核模型以再现各种核子观测值，并对核图上的未知区域进行预测。在超重元素 (SHEs) 区域内，世界各地的许多实验室致力于合成新元素和同位素，尽管这一发现过程非常艰难，是“逐个原子”的过程 [9]。特别是，在奥加涅农之后的新元素搜索（质子数为 $Z = 118$ ）以及接近理论上的下一个中子幻数 $N = 184$ 的区域，是非常令人兴奋和动态的研究领域。尽管这些研究在实验上极具挑战性，但对于确认长期推测的“稳定岛” [9, 10] 是否存在至关重要。

夸克-介子耦合 (QMC) 模型成功地再现了核图表中偶偶有限原子核基态性质的实验数据 [4–7]。在其发展的过程中，该模型一直改进对能量、核尺寸和形状的预测，成功捕捉到了可用实验数据所见的有限原子核的重要特征。早期版本的模型，QMC π -I，被用来预测超重元素 SHEs [11] 的结合能和变形。在本文中，我们使用最新版本的模型 QMC π -III 重新审视了超重元素区域，该版本减少了参数的数量，并纳入了额外的物理贡献。

2. 理论

最新的夸克介子耦合模型，QMC π -III，在 [5] 中进行了讨论。在本节中，我们回顾了计算中使用的 QMC 框架的相关理论及其发展。

在 QMC 模型中，核子在夸克水平上构建，并通过介子交换来描述它们的相互作用。MIT 袋模型被用来表征每个核子包含三个夸克，且认为核子袋子不重叠。由于这些相互作用，通过以下方程将粲子质量修改为有效质量：

$$M_B^* = M_B - g_\sigma \sigma + \frac{d}{2} (g_\sigma \sigma)^2. \quad (1)$$

这里， M_B^* 和 M_B 分别是有效的和原始的粲子质量。 σ 表示 σ 介子场， g_σ 表示夸克与 σ 介子的耦合，而 d 是 QMC 模型独有的标量极化率。除了负责中程吸引的 σ 介子之外，该模型还包括矢量介子 ω 来表示短程排斥，并且包含矢量等向量 ρ 介子以解释同位旋依赖。

经典的总能量以夸克和介子的能量表示，从而通过消除介子场导出了 QMC 哈密顿量。在此之后，使用哈特里-福克计算得到了 QMC 能量密度泛函 (EDF)。

QMC EDF 包含五个可调且受良好约束的参数： $G_{\mu q} = \frac{g_\mu}{m_\mu^2} (\mu = \sigma, \omega, \rho)$ ， m_σ ，和 λ_3 ，其中 g_μ 是夸克与介子耦合的量， m_μ 为介子质量，而 λ_3 负责 σ 介子的自耦合。

2.1 从 QMC 导出的配对泛函

在早期版本的 QMC 模型中，核配对是通过使用 Hartree-Fock + Bardeen-Cooper-Schrieffer (HF+BCS) 体积配对的标准方式进行实现的，并且优化了两个额外的配对强度参数以配合 QMC 参数。最新版本的 QMC 模型的一个重要改进是在 Bogoliubov 理论上实现了配对，使得配对泛函可以完全用现有的 QMC 参数来表达。这一变化消除了对两个额外参数的需求。此外，现在的 QMC 配对泛函自然地依赖于密度，而早期版本中使用的体积配对并不考虑密度的变化。

2.2 对总 EDF 的其他贡献

除了平均场 QMC 泛函外，总 EDF 还包括其他贡献。这些是单介子交换，它使用局部密度近似进行评估，以及库仑相互作用，它以包含直接项和交换项的标准形式表示。此外，还应用了质心修正。这些泛函与在 $QMC\pi$ -II 中使用的那些一致，关于更多详情，请参阅 Ref.[4]。

3. 方法

使用 P.-G. Reinhard [2, 12] 修改的轴对称 HF+BCS 代码来求解有限核的 QMC EDF。模型参数使用无导数优化程序 POUNDers [13] 进行优化。参数搜索涉及拟合七十个魔法和半魔法核的已知结合能 (BE) 和均方根电荷半径 (R_{ch})，这些核的选择如 [4] 中所述。在这个模型的更新版本中，总共使用了 129 个数据点来拟合 $QMC\pi$ -III 在第 2 节讨论的五个参数。一旦确定了优化后的参数，就使用 $Z \geq 100$ 对超重区域几个核的基态性质进行了计算。为了将预测与可用数据进行比较，通过取 QMC 结果和使用最新原子质量评估 (AME) 2020[14] 的实验结果之间的差值来计算残差。

4. 结果与讨论

本节展示了在超重元素区域使用 $QMC\pi$ -III 对具有偶数质子和偶数中子的同位素（偶数 Z ，偶数 N ）进行计算的结果。在此模型的最新版本中，参数值为 $G_\sigma = 9.62\text{fm}^2$ ， $G_\omega = 5.21\text{fm}^2$ ， $G_\rho = 4.71\text{fm}^2$ ， $M_\sigma = 503\text{MeV}$ 和 $\lambda_3 = 0.05\text{fm}^{-1}$ 。再次强调，只有五个参数，因为配对强度已经完全通过现有的 QMC 参数表达出来了。

与优化的 $QMC\pi$ -III 参数相对应的核物质性质 (NMPs) 处于可接受的值范围内。NMP 的数值如下：饱和密度 $\rho_0 = 0.15\text{fm}^{-3}$ ，饱和能量 $E_0 = -15.7\text{MeV}$ ，对称能 $S_0 = 29\text{MeV}$ ，对称能斜率 $L_0 = 43\text{MeV}$ ，以及核物质的不可压缩性 $K_0 = 233\text{MeV}$ 。值得注意的是，在最新的两个版本的 QMC 模型中， K_0 的值显著下降，使其与早期版本相比进入了可接受范围。此外，在更新的 QMC 版本中， L_0 的值有所增加，使其更接近于文献 [15] 中来自地球和天文观测的数据。

4.1 结合能

核结合能 (BE) 是最容易获得的基态可观测量。在图 1 中，上图和下图分别展示了原子序数从 $Z = 100$ 到 $Z = 114$ 的元素每核子的结合能（以 MeV 为单位）以及总结合能残差（以 MeV 为单位）。这些残差是根据第 3 节中所述的方法，使用 AME 2020[14] 的数据计算得出。为了进行比较，图中还包括了 QMC 模型先前版本的结果。

如图 1 所示， $QMC\pi$ -III 在结合能预测上有所改进，实现了绝对总结合能残差小于约 1.5 兆电子伏特。每核子结合能 (B/A) 在中子数为 $N = 152$ 的 $Z = 100$ (镭)、 $Z = 102$ (铀) 和 $Z = 104$ (镭特福级元素) 同位素链，以及在中子数为 $N = 162$ 的 $Z = 106$ (seaborgium)、 $Z = 108$ (hassium) 和 $Z = 110$ (darmstadtium) 链中的急剧增加，被最新的 QMC 模型有效捕捉。这些亚壳层闭合进一步与衰变能 (Q_α) 在第 4.2 节中进行了讨论。

对于 Livermorium ($Z = 116$) 和 Oganesson ($Z = 118$) 的同位素链，结合能残差显示在表 1 中。再次强调，最新的 $QMC\pi$ -III 改进了结合能预测，导致总体上较小的残差。

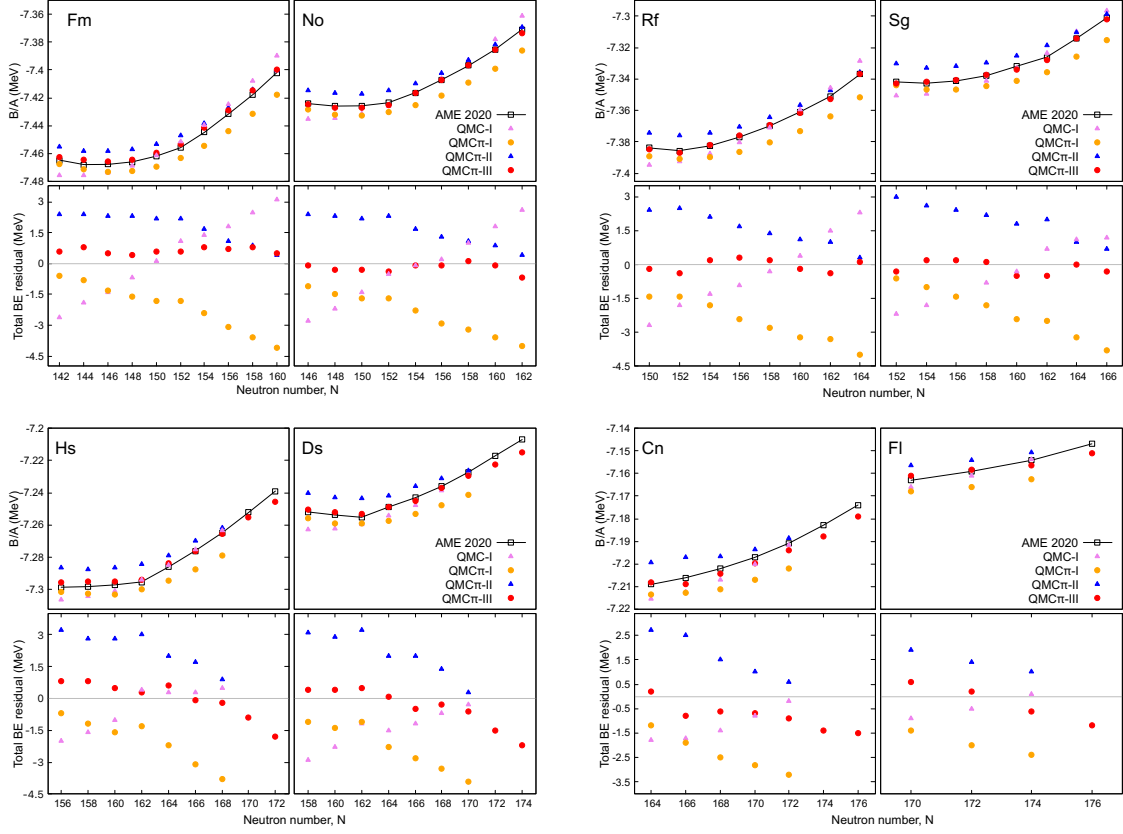


图 1: BE 每核子以兆电子伏特为单位 (上图) 和总 BE 残差以兆电子伏特为单位 (下图) 沿 $100 \leq Z \leq 114$ 链使用不同版本的量子蒙特卡罗计算的结果。黑色空心方块所示的是来自 AME 2020[14] 的实验数据。

表 1: 不同 QMC 版本的 $Z \geq 116$ 总残差 BE 比较。

Element	Z	N	QMC-I	QMC π -I	QMC π -II	QMC π -III
Lv	116	174	-0.4	-1.2	2.4	-0.3
	116	176	0.2	-1.6	2.0	-1.3
Og	118	176	-0.6	-0.8	3.5	-0.8

表 2 列出了使用各种核模型预测和 AME 2020[14] 计算的均方根 BE 残差, 总共涉及 60 个已知的偶数 Z 、偶数 N 超重元素。值得注意的是, $QMC\pi$ -III 模型展现了卓越的准确性, 其均方根残差约为 0.7 MeV, 而其他模型产生的残差则超过 7 MeV。

4.2 Q_α 能量

在超重区域, 大多数同位素会发生 α 衰变。从原子核中移除一个 α 粒子所需的能量, 记为 Q_α , 可以通过母同位素与衰变产物之间的能量差来计算, 这些衰变产物是女儿核和 α 粒子。这种关系由以下方程表示:

$$Q_\alpha(Z, N) = BE(Z, N) - BE(Z - 2, N - 2) - BE(2, 2), \quad (2)$$

表 2: 使用各种核模型和最新的 AME 2020[14] 计算的 60 种已知偶数 Z 、偶数 $NSHEs$ 的均方根 BE 残差的比较。

Nuclear model	root-mean-square BE residual
$QMC\pi$ -III	0.7 MeV
$QMC\pi$ -II	2.0 MeV
UNEDF1	1.4 MeV
DDME δ	2.3 MeV
FRDM	2.6 MeV
SVmin-HFBTHO	7.1 MeV

其中 $BE(2,2) = -28.296\text{MeV}$ 表示 α 粒子 (氦-4) 的结合能。

图 2 显示了 $QMC\pi$ -III 对 Q_α 能量的预测, 用实心符号表示并以虚线连接。相比之下, AME 2020[14] 的实验数据由带有垂直误差棒的空心符号表示。值得注意的是, 在中子数 $N = 152$ 和 $N = 162$ 处的亚壳层闭合被 $QMC\pi$ -III 模型很好地捕捉到了。闭合壳层从超重元素同位素链中观察到的实验数据中的 Q_α 能量突然下降中显而易见。在壳层闭合处, Q_α 值预期会低于随后的同位素, 因为从紧随闭壳层之后的原子核移除一个 α 粒子需要更多的能量。

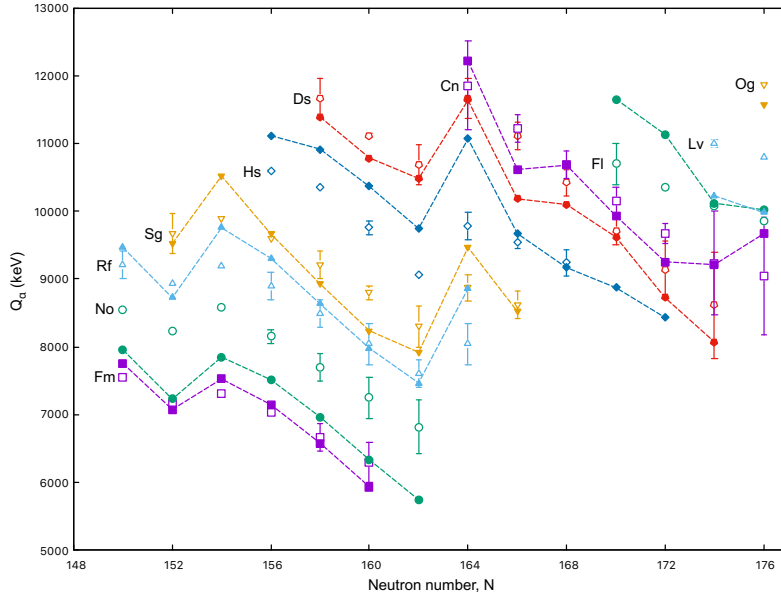


图 2: Q_α 能量的 $QMC\pi$ -III 预测与 AME 2020[14] 数据比较。 $QMC\pi$ -III 的结果以实心符号表示, 并用虚线连接, 而实验数据和误差则以空心符号和垂直误差棒表示。

4.3 四极形变

目前, 尚无关于 SHE 形状的可用实验数据。因此, 模型 $QMC\pi$ -III 预测的变形性质与其它核模型的结果进行了比较。在图 3 中, 四极形变参数 β_2 的值来自各种模型, 并针对中子数 N 绘制了从 $Z = 100$ 到 $Z = 114$ 的同位素链。 $QMC\pi$ -III 模型预测形状共存, 表明一些超

重元素表现出两个或多个对应于形变能最小值的形状。在图中，第一个极小值由填充的红色符号表示，而紧密相邻的第二个极小值则以空心红色符号显示，并标记为“ $QMC\pi$ -III*”。

$QMC\pi$ -III 的结果与其他模型的结果紧密一致，预测 Fm、Rf 和 No 同位素链的形状直到大约 $N = 170$ 都是拉长形。超过这个范围后，形状从 $N = 172$ 到 $N = 180$ 转变为扁平形。此外， $QMC\pi$ -III 对所述同位素在 $172 \leq N \leq 180$ 的范围内给出了第二个拉长形的最小值。在预测的壳闭合 $N = 184$ 处， $QMC\pi$ -III 预测球形和扁球形共存，而其他大多数模型仅预测球形。对于 Sg 链，主要最小值表明从长轴椭球形到球形的转变持续到大约 $N = 180$ ，随着链的进一步延伸，甚至出现了更多长轴椭球形。

对于 Hs、Ds、Cn 和 Fl 链， $QMC\pi$ -III 主要预测了长椭球形状，并且随着原子序数 Z 的增加，形状共存现象得以发展。然而，在预期的 $N = 184$ 闭壳层处， $QMC\pi$ -III 主要产生长椭球形状，而其他模型则继续预测 $N = 184$ 同中子异位素为球形。

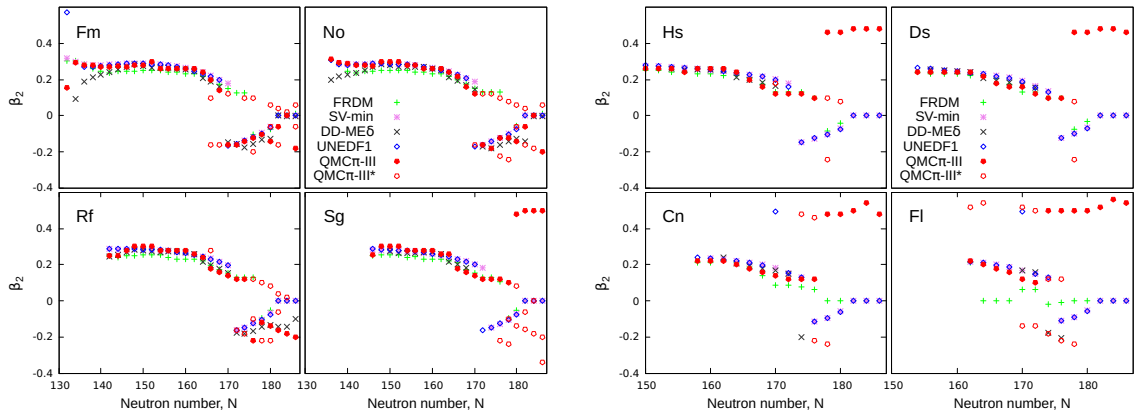


图 3: 变形参数 β_2 沿着 $Z = 100$ 到 $Z = 114$ 同位素链的几个核模型值对比。对于 $QMC\pi$ -III，第一个最小值显示为填充的红色符号，而其他非常接近第一个最小值则显示为空心红色符号，并标记为“ $QMC\pi$ -III*”。

5. 总结和结论性评论

在核素图的超重区域，科学家们探索未知领域时寄予了很大期望。由于可用数据有限，理论预测依赖于不断完善的核模型，以期更好地理解质子和中子数量极大时的核子间相互作用。

QMC 模型在该核素图的这一区域展示了令人印象深刻的结果，特别是在能量可观测量的预测方面。该模型对于总结合能的残差小于 1.5 MeV ，并为 Q_α 能量提供了准确的估计，从而捕捉到了预期的亚壳层闭合。此外，尽管 QMC 模型的参数远少于其他核模型，它仍能够提供相当的成果来描述核形状和变形。因此，在当前范围之外的区域使用 QMC 模型进行进一步的理论探索至关重要，以推动显著的见解和进展。

致谢

Pierre A. M. Guichon 和 Jirina R. Stone 感谢阿德莱德大学 CSSM 的热情款待。这项工作得到了澳大利亚研究理事会通过发现项目 DP230101791 (AWT) 的支持。

参考文献

- [1] P. A. M. Guichon, J. R. Stone, and A. W. Thomas. *Quark-Meson-Coupling (QMC) model for finite nuclei, nuclear matter and beyond*. *Prog. Part. Nucl. Phys.* **100** (2018), pp. 262 – 297. DOI: 10.1016/j.pnpnp.2018.01.008.
- [2] J. R. Stone, P. A. M. Guichon, P. G. Reinhard, and A. W. Thomas. *Finite Nuclei in the Quark-Meson Coupling Model*. *Phys. Rev. Lett.* **116** (9 2016), p. 092501. DOI: 10.1103/PhysRevLett.116.092501.
- [3] J. Stone, P. Guichon, and A. Thomas. *Superheavy Nuclei in the Quark- Meson-Coupling Model*. *EPJ Web Conf.* **163** (2017), p. 00057. DOI: 10. 1051/epjconf/201716300057.
- [4] K. L. Martinez, A. W. Thomas, J. R. Stone, and P. A. M. Guichon. *Parameter optimization for the latest quark-meson coupling energy-density functional*. *Phys. Rev. C* **100** (2 2019), p. 024333. DOI: 10.1103/PhysRevC.100.024333.
- [5] K. L. Martinez, A. W. Thomas, P. A.M. Guichon, and J. R. Stone. *Tensor and pairing interactions within the QMC energy density functional*. *Phys. Rev. C* **102** (2020), 034304. DOI:10.1103/PhysRevC.102.034304.
- [6] K. L. Martinez, A. W. Thomas, J. R. Stone, and P. A.M. Guichon. *Exploring the latest quark-meson coupling model for finite nuclei*. *J. Phys. Conf. Ser.* **1643** (2020), 012161. DOI: 10.1088/1742-6596/1643/1/012161.
- [7] A. W. Thomas, P. A. M. Guichon, J. Leong, K. L. Martinez-Paglinawan, and J. R. Stone. *A powerful new energy density functional*. *J. Phys. Conf. Ser.* **2586** (2023) 012055. DOI: 10.1088/1742-6596/2586/1/012055.
- [8] S. Antić, J. R. Stone, J. C. Miller, K. L. Martinez, P. A. M. Guichon, and A. W. Thomas. *Outer crust of a cold, nonaccreting neutron star within the quark-meson-coupling model*. *Phys. Rev. C* **102** (2020), 065801. DOI:10.1103/PhysRevC.102.065801.
- [9] O.R. Smits, C.E. Düllmann, P. Indelicato, W. Nazarewicz, and P. Schwerdtfeger. *The quest for superheavy elements and the limit of the periodic table*. *Nat. Rev. Phys.* **6** (2024), 86 – 98. <https://doi.org/10.1038/s42254-023-00668-y>.
- [10] W. Nazarewicz. *The limits of nuclear mass and charge*. *Nat. Phys.* **14** (2018), 537 – 541. <https://doi.org/10.1038/s41567-018-0163-3>.
- [11] J. R. Stone, K. Morita, P.A.M. Guichon, and A. W. Thomas. *Physics of even-even superheavy nuclei with $96 < Z < 110$ in the quark-meson-coupling model*. *Phys. Rev. C* **100** 4 (2019) 044302. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.100.044302>.
- [12] P. G. Reinhard, Private communication.
- [13] M. Kortelainen, T. Lesinski, J. Moré, W. Nazarewicz, J. Sarich, N. Schunck, M. V. Stoitsov, and S. Wild. *Nuclear energy density optimization*. *Phys. Rev. C* **82** (2010), 024313.

- [14] Meng Wang, W. J. Huang, F.G. Kondev, G. Audi, and S. Naimi. *The AME 2020 atomic mass evaluation (II). Tables, graphs and references. Chinese Physics C* **45** (2021) 3. DOI: 10.1088/1674-1137/abddaf.
- [15] B. Li and X. Han. *Constraining the neutron-proton effective mass splitting using empirical constraints on the density dependence of nuclear symmetry energy around normal density. Phys. Lett. B* **727** (2013), pp. 276 – 281.