

DESDE 2013 https://repository.uaeh.edu.mx/revistas/index.php/icbi/issue/archive Pädi Boletín Científico de Ciencias Básicas e Ingenierías del ICBI



Publicación semestral, Vol. 13, No. Especial (2025) 14-17

# Energías de amarre nucleares en modelos de la gota líquida Nuclear Binding energies in liquid drop models.

E. P. Mendoza <sup>1</sup><sup>a</sup>, E. Martínez <sup>1</sup><sup>a</sup>, V. E. Cerón <sup>1</sup><sup>a,\*</sup>, J. G. Hirsch <sup>1</sup>

<sup>a</sup>Área Académica de Matemáticas y Física, UAEH, Carretera Pachuca-Tulancingo Km. 4.5, C P. 42184, Mineral de la Reforma, Hidalgo, México. <sup>b</sup>Instituto de Ciencias Nucleares, Universidad Nacional Autónoma de México, 04510 México D. F., México.

## Resumen

En este trabajo se analizan las energías de amarre teóricas de tres modelos del tipo de la gota líquida, para lo cual se realiza un ajuste de las constantes asociadas a cada uno de los modelos usando MINUIT para Python. Se calculan las diferencias promedios (RMS) entre las predicciones de cada uno de los tres modelos y los datos experimentales reportados por AME2020, que incluyen 2457 nucleidos. Se observa que a medida que se incorporan correcciones al modelo de la gota el RMS disminuye. Al incluir la existencia de capas cerradas se obtiene el menor RMS, de 1.3 MeV.

Palabras Clave: Energía de amarre, modelo de la gota líquida, masa nuclear.

# Abstract

In this work, the theoretical binding energies of three liquid drop model types are analyzed. This involves adjusting the constants associated with each model using MINUIT for Python. The average differences (RMS) between the predictions of each of the three models and the experimental data reported by AME2020, which includes 2,457 nuclides, are calculated. It is observed that as corrections are incorporated into the liquid drop model, the RMS decreases. Including the existence of closed shells results in the lowest RMS, which is 1.3 MeV.

Keywords: Binding energy, liquid drop model, nuclear mass.

# 1. Introducción

El modelo de la gota líquida (LDM) es usado por los físicos nucleares para la descripción de las masas nucleares. El primer modelo de este tipo fue propuesto por Bethe-Weisäker (Bohr y Mottelson, 1998), (Amsler, 2015). La descripción de las masas nucleares en términos de los LDM proporciona las bases para describir propiedades nucleares como la saturación de la fuerza nuclear fuerte, la existencia del apareamiento entre nucleones del mismo tipo, los efectos de capa y la descripción de procesos de fusión y fisión. Los valores Q de gran cantidad de reacciones nucleares, obtenidos de las diferencias de masas entre nucleidos cercanos, deben de conocerse con extrema precisión para permitir la descripción del origen astrofísico de los elementos (Rolfs y Rodney (1988)). La teoría actual propone que muchos de los elementos pesados que podemos encontrar en la Tierra, y en general en el universo, originariamente se sintetizaron dentro de los núcleos de las estrellas. Este proceso recibe el nombre de

nucleosínstesis. Se ha reportado que la capacidad de la formulas LDM para describir las masas nucleares parecen describir con menos precisión los núcleos de capa cerrada (Hirsch et al. (2011); Hirsch (2010)), al contrario de lo que se esperaría de este tipo de modelos. Décadas de trabajo han producido fórmulas de masa microscópicas y macroscópicas (Lunney et al. (2003)). La inclusión empírica de efectos asociados a la existencia de capas cerradas en el LDM permite ajustes con desviaciones RMS de 1331 MeV (Mendoza-Temis et al., 2008). Actualmente los enfoques más exitosos parecen ser una mezcla entre los modelos microscópicos-macroscópicos, como el modelo de la gota de rango finito (Finite Range Droplet Model - FRDM) (Moller et al. (1995), Möller (2016)). Todos contienen un sector macroscópico que se asemeja a la fórmula LDM e incluyen términos de efectos de deformación, lo que les permite ajustar las masas nucleares conocidas con desviaciones pequeñas. Las predicciones de masas nucleares más precisas y sólidas las proporciona el modelo Duflo-Zucker(DZ) (Duflo y Zuker, 1995),



<sup>\*</sup>Autor para correspondencia: vceron@uaeh.edu.mx

**Correo electrónico**: me397810@uaeh.edu.mx (Erick Pantaleón Mendoza-Martínez), ma421317@uaeh.edu.mx (Ezequiel Martínez-Reséndiz), vce-ron@uaeh.edu.mx (Victoria E. Cerón-Angeles), hirsch@nucleares.unam.mx (Jorge Gustavo Hirsch-Ganievich)

**Historial del manuscrito:** recibido el 09/09/2024, última versión-revisada recibida el 21/10/2024, aceptado el 21/10/2024, publicado el 26/04/2025. **DOI:** https://doi.org/10.29057/icbi.v13iEspecial.13685

con un RMS de 373 keV.

Siguiendo estos trabajos, realizamos en este artículo un análisis del poder predictivo de las masas nucleares de tres modelos tipo LDM. En la sección dos se describen las características de los modelos estudiados. En la sección tres se describen las herramientas utilizadas, con las que se calcula la desviación cuadrática media de las diferentes energías teóricas obtenidas respecto de los datos experimentales. En la sección cuatro se muestran los resultados obtenidos con el ajuste realizado tanto a los parámetros de los modelos y la dispersión encontrada. Por último se presenta las conclusiones de este trabajo.

#### 2. Modelos

Analizamos tres variantes de fórmulas tipo LDM, los modelos uno y dos fueron seleccionados ya que son los modelos estándar más manejados en la literatura, cabe resaltar que los modelo dos y tres han sido tambien analizados por (Mendoza-Temis *et al.* (2008)) usando los datos de AME2003.

# 2.1. LDM1

El modelo de la gota líquida trata al núcleo como una gota esférica de fluido nuclear incompresible. Propuesto por George Gamow en 1930 y desarrollado despues por Niels Bohr y John Archibald Wheeler. Contiene los elementos básicos necesarios para la predicción de la energía de ligadura de los nucleidos (Amsler, 2015). La fórmula es:

$$BE(A,Z) = a_v A - a_s A^{2/3} - a_c \frac{Z^2}{A^{1/3}} - s_v \frac{(A-2Z)^2}{A} - a_p \frac{\delta}{A^{1/2}}, \quad MeV$$
(1)

En esta expresión Z y A son el número atómico y el número de masa atómica, respectivamente. Las constantes asociados a cada término son:  $a_v$  a la energía de cohesión de todos los nucleidos por la fuerza nuclear fuerte,  $a_s$  a la energía de superficie,  $a_c$  a la repulsión electrostática entre los protones,  $s_v$  a la energía de asimetría entre el número de protones y de neutrones, y  $a_p$  la paridad, referida al número par o impar de protones o nucleidos: par-par, impar-impar y par-impar respectivamente. La suma de todos estos tipos de energía da como resultado la energía de ligadura total predicha para los nucleidos en este modelo.

# 2.2. LDM2

Presentamos una variación al modelo de LDM el cual tiene modificaciones a los términos de simetría y Coulomb, construidos siguiendo un tratamiento consistente con el volumen nuclear y efectos de superficie (Mendoza-Temis *et al.* (2008)). La energía de enlace está dada por

$$BE(A,Z) = a_{\nu}A + a_{s}A^{2/3} + s_{\nu}\frac{4T(T+1)}{A(1+\gamma A^{-1/3})} + a_{c}\frac{Z(Z-1)}{(1-\Lambda)A^{1/3}} + a_{p}\frac{\delta}{A^{1/3}}, \ MeV \qquad (2)$$

En este modelo la interacción de paridad está dada por  $\delta = 2, 1 \ge 0$  para nucleidos par-par, par-impar e impar -impar

respectivamente. También se incluye una corrección al radio nuclear mediante una modificación al término de Coulomb  $\Lambda = N - Z/(6Z(1 - y^{-1}A^{1/3}))$ , donde *N* es el número de neutrones, Z(Z - 1) excluye la interación columbiana consigo mismo. El término de simetría emplea T = |N - Z|/2 para tener en cuenta la energía de Wigner.

# 2.3. LDM3

Este tercer modelo de LDM es modificado para incluir correcciones de capas empíricas, con términos lineales y cuadráticos dependientes del número de neutrones  $n_v$  y protones  $n_{\pi}$  de valencia, definidos tomando en cuenta el número de partículas u hoyos en relación a las capas cerradas más cercanas a ellos (Mendoza-Temis *et al.* (2008))

$$BE(A,Z) = a_{\nu}A - a_{s}A^{2/3} - a_{c}\frac{Z(Z+1)}{A^{1/3}} + a_{p}\frac{\delta(N,Z)}{A^{1/2}} - \frac{S_{\nu}}{1 + y_{s}A^{-1/3}}\frac{4T(T+r)}{A} - a_{f}F + a_{ff}F^{2}, \ MeV$$
(3)

Con los términos lineal de F y el cuadrático FF:

$$F = \frac{n_{\nu} + n_{\pi}}{2} - \left\langle \frac{n_{\nu} + n_{\pi}}{2} \right\rangle$$

$$FF = \left(\frac{n_{\nu} + n_{\pi}}{2}\right)^2 - \left\langle \left(\frac{n_{\nu} + n_{\pi}}{2}\right)^2 \right\rangle$$
(4)

El número de neutrones de valencia  $n_v$  está definido por

 $n_{v} = N - N_{c} \text{ if } N \le N_{med}$  $n_{v} = N_{c+1} - N_{c} \text{ if } N > N_{med}$ 

Donde se utilizan los números magicos de  $N_c$ :

$$N_c = 8, 14, 28, 50, 82, 126, 184, 258, \text{ con } c = 1, 2, 3, \dots, 8$$

Y las semicapas

 $N_{med} = 11, 21, 39, 66, 104, 155, 221$ 

Existen expresiones similares para el número de protones de valencia  $n_{\pi}$ .

#### 3. El ajuste

Los coeficientes de los tres modelos LD aquí analizados fueron seleccionados para minimizar la desviación cuadrática media (RMS) mediante el uso de las energías de enlace teóricas comparadas con las energías experimentales reportadas en AME2020, (Huang *et al.* (2021)).

En los tres modelos utilizamos para  $N \ge 8$  y  $Z \ge 8$  para todas las predicciones, que son comparadas con las energías de amarre experimentales de 2458 nucleidos. La fórmula usada es

$$RMS = \left\{\frac{\sum \left[BE_{exp} - BE_{th}\right]^2}{N_{nucl}}\right\}^{1/2}$$
(5)

Donde  $N_{nucl}$  es el número total de nucleidos,  $BE_{th}$  en cada caso se remplaza por los BE(A, Z) obtenidos de los tres modelos analizados. Los resultados experimentales enlistados en AME2020,(Huang *et al.* (2021)) son de masas atómicas y no nucleares, por lo que se tiene que realizar una corrección usando las energías de enlace de los electrones para obtener valores más realistas. Este dada por la relación

$$BE_{exp}(N,Z) = BE_{EXP}^{AME}(N,Z) + [B_{el}(Z=1)]m_e - B_{el}(Z)$$
(6)

donde  $B_{el}$  es la energía de amarre del electrón, dada por la siguiente expresion (Lunney *et al.* (2003))

$$BE_{el}(Z) = 1,44381x10^{-5}Z^{2,39} + 1,55468x10^{-12}Z^{5,35} MeV$$
(7)

Para el procedimiento de minimización de los parámetros utilizamos el código MINUIT del CERN para Python (James (1994)). Este fue concebido como una herramienta para encontrar el valor mínimo de funciones multiparámetros y analizar la forma de estas funciones alrededor de los mínimos. Es especialmente útil para calcular el conjunto de parámetros con mejor ajuste y menores incertidumbres. Los valores de las desviaciones RMS para los diferentes modelos son listados más abajo. También las diferencias entre las energías son mostradas gráficamente.

## 4. Resultados

Se muestran los parámetros encontrados a través del ajuste realizado a las masas nucleares de los tres modelos LDM. Para los LDM1 y LDM2, que son los modelos más simples y usados en la literatura, se ajustaron 5 y 6 parámetros respectivamente, ya que se hicieron cambios en los términos de Coulomb y de simetría. De forma semejante para el modelo LDM3 se reporta el ajuste a 9 parámetros.

Tabla 1: Conjunto de parámetros, en MeV, los cuales minimizan el RMS de cada uno de los tres modelos.

Coeficientes	LDM1	LDM2	LDM3	
$a_{\nu}$	15.54	15.79	15.57	
$a_s$	16.96	18.39	17.48	
$a_c$	0.704	0.701	0.69	
$S_{\nu}$	23.04	30.64	37.1	
$a_p$	12.5	6.0	11.3	
ý	-	2.57	3.93	
r	-	-	1.43	
$a_F$	-	-	1.48	
$a_{FF}$	-	-	0.053	
RMS (keV)	3073	2457	1264	

Mientras que los coeficientes de volumen, superficie y Coulomb son muy similares en los tres modelos, el término de asimetría cambia notablemente de un modelo a otro. Los coeficientes hallados de estos modelos nos proporcionan los valores de RMS mínimos, que en su mayoría coinciden con los mínimos proporcionados para cada parámetro reportado por MI-NUIT.

De la tabla 1 podemos observar que el RMS más grande de 3 MeV es obtenido para el modelo más simple de la gota líquida, esto es el modelo LDM1, en el caso del segundo modelo, en donde anexamos modificaciones para el término de simetría y de Coulomb, está disminuyendo el RMS a 2.4 MeV, confirmando que el primer modelo requiere más modificaciones. Por otro lado el modelo con mejor ajuste es el tercero con una RMS de 1.26 MeV, lo que indica que la inclusión de términos proporcionales a  $n_{\pi} + n_{\nu}$  mejoran dicho ajuste.

Las figuras (1), (2) y (3) muestran las diferencias entre las energías de enlace experimental y las teóricas, calculadas con los tres diferentes modelos analizados. Estas energías fueron calculadas una vez hallados los parámetros, al realizar un ajuste usando los datos de los 2457 nucleidos reportados por AME2020, mediante el uso de programa MINUIT para Python. Las gráficas muestran la diferencia de energías en (MeV) con respecto al número de neutrones de los nucleidos.

En la figura (1) se observa que las diferencias de energía se distribuyen en un rango alrededor de 20 MeV. Se observa una amplia dispersion para la mayoría de los nucleidos. Sin embargo, pueden distinguirse regiones de mayor dispersion, asociadas a picos pronunciados, alrededor de 50, 82 y 126. En este caso del modelo LDM1, que corresponde al modelo de la gota líquida de Bethe-Weisäker y reportamos un RMS de 3073 MeV.



Figura 1: Diferencias de energía de enlace experimental y teórica del modelo LDM1.

En la figura (2) se observa que las diferencias de energía se encuentran en un rango de 15 MeV, en general mostrando menor dispersión que en modelo LDM1, y nuevamente se repiten diferencias pronunciadas en las regiones alrededor de los valores de 50, 82 y 126, en donde nuevamente se forman picos de dispersión. Los resultados de este modelo, pueden ser comparados con los valores de los parámetros hallados en (Mendoza-Temis *et al.*, 2008), en donde se observan diferencias considerables en los parámetros de simetría y de paridad, además en este caso encontramos una RMS de 2457 MeV, la cual es además menor que la reportada en este artículo en 234 eV.

En la figura (3) se puede observar que la mayoría de las variaciones se encuentran en un rango de 8 MeV mostrándose picos ligeramente marcados en los valores de N coincidentes con los modelos mencionados antes. Este modelo también puede ser comparado con resultados publicados en (MendozaTemis *et al.*, 2008). Los parámetros de ajuste reportados usando datos de AME03 encuentran su mayor diferencia en el término de paridad y en  $a_{ff}$ , el ajuste que se realiza a este modelo con los datos actuales reportados en AME2020, permite encontrar en este trabajo un RMS menor en 67 eV respecto al reportado.



Figura 2: Diferencias de energía de enlace experimental y teórica del modelo LDM2.



Figura 3: Diferencias de energía de enlace experimental y teórica del modelo LDM3.

# 5. Conclusiones

Como se puede observar de la tabla 1, el modelo LDM1, que es el modelo más simple de la gota líquida, es el que muestra un RMS mayor comparado con los otros dos modelos, LDM2 y LDM3, que han sido modificados para incluir efectos adicionales. El ajuste obtenido en este trabajo las masas experimentales reportadas en AME2020, para los parámetros del modelo LDM2, muestra un mejor ajuste, reduciendo el RMS en 234 eV, respecto de lo reportado para dicho modelo al usar los datos de AME03. En lo que respeta al LDM3, el análisis nos permite hallar el RMS más bajo de los 3 modelos estudiados, dicho resultado se muestra reflejado en la fig. (3), la cual cuenta con el menor rango de dispersión de las diferencias de energía experimentales respecto a la teóricas. En los modelos LDM1 y LDM2, las regiones alrededor de los valores de 50, 82 y 126, números correspondientes con núcleos de capa cerrada, que es en donde se forman los picos más pronunciados y corresponden a una mayor dispersión en el RMS, en comparación con el LMD3 el cual tiene una RMS menor, lo que indica que este modelo tiene mejor ajuste que los modelos clásicos anteriores. Indicando que los modelos tipo LDM en realizadad describen con menos precisión los núcleos de capa cerrada, contrariamente a lo predicho por el modelo inicial de Weisäcker que mencionaba que el LDM describir mejor los núcleos esféricos, es decir los de capa cerrada. También hallamos que con la base actual de AME2020, que incluye 427 nucleones más, se logró reportar para el LDM1 y reducir para LDM2 y LDM3 las RMS para todos los modelos. Finalmente debido a que el LDM3 es el modelo que mejor predice la energías de amarre, se podría continuar analizando en un trabajo posterior las contribuciones de cada término del modelo y cómo se modifican las energías de amarre de los nucleidos en las diferentes regiones en las que se encuentran.

# Agradecimientos

Los autores agradecen la invitación a participar en este número especial por el XX Aniversario de la Licenciatura en Física y Tecnología Avanzada de la UAEH y se unen a las felicitaciones por su Aniversario.

## Referencias

- Amsler, C. (2015). Nuclear and Particle Physics. 2053-2563. IOP Publishing. Bohr, A. y Mottelson, B. R. (1998). Nuclear Structure, Vol. I. World Scientific, Singapore City.
- Duflo, J. y Zuker, A. P. (1995). Microscopic mass formulae. *Phys. Rev. C*, 52:R23.
- Hirsch, J. G. (2010). Nuclear physics: a short course. AIP Conf. Proc., 1271(1):3.
- Hirsch, J. G., Barbero, C., y Mariano, A. E. (2011). Nuclear masses, deformations and shell effects. J. Phys. Conf. Ser., 322:012017.
- Huang, W. J., Wang, M., Kondev, F. G., Audi, G., y Naimi, S. (2021). The AME 2020 atomic mass evaluation (I). Evaluation of input data, and adjustment procedures. *Chin. Phys. C*, 45(3):030002.
- James, F. (1994). MINUIT Function Minimization and Error Analysis: Reference Manual Version 94.1.
- Lunney, D., Pearson, J. M., y Thibault, C. (2003). Recent trends in the determination of nuclear masses. *Rev. Mod. Phys.*, 75:1021–1082.
- Mendoza-Temis, J., Morales, I., Barea, J., Frank, A., Hirsch, J. G., López Vieyra, J. C., Van Isacker, P., y Velázquez, V. (2008). Testing the predictive power of nuclear mass models. *Nucl. Phys. A*, 812:28–43.
- Möller (2016). Nuclear ground-state masses and deformations: Frdm(2012). *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 109-110:1–204.
- Moller, P., Nix, J. R., Myers, W. D., y Swiatecki, W. J. (1995). Nuclear ground state masses and deformations. *Atom. Data Nucl. Data Tabl.*, 59:185–381.
- Rolfs, C. E. y Rodney, W. S. (1988). Cauldrons in the cosmos: Nuclear astrophysics. University of Chicago press.