



关于原子核的电四极矩

翁斯灏

一、原子核的电四极矩

原子核的内禀电四极矩, 来源于核电荷的非球形分布, 一般可用并矢或 (3×3) 二秩不可约张量表示. 如果选择核自旋轴 I (沿 z 轴) 为核电四极矩主轴, 由于核对自旋轴的旋转对称性, 电四极矩仅有一个独立分量, 称为标量电四极矩,

$$Q = \frac{1}{e} \int_{V_N} \rho(3z^2 - r^2) dx dy dz$$

$$= \frac{1}{e} \int_{V_N} \rho r^2 (3\cos^2\theta - 1) dV_N,$$

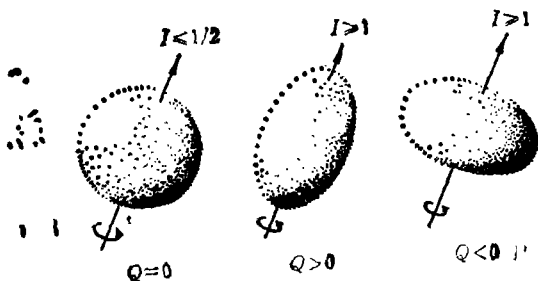


图1 原子核的电四极矩

式中 e 为质子电荷值, ρ 为 (r, θ) 处核电荷密度, r 为积分点 (x, y, z) 至核中心距离, θ 为矢径 r 与核自旋 I 的夹角, 积分遍及全核 V_N . 可见电荷呈球对称分布的核, $Q = 0$; 沿自旋轴伸长的核, $Q > 0$; 扁平的核, $Q < 0$

(图1). 根据 Q 值的大小和符号, 可推知核偏离球形的程度. 与核的线度相对应, Q 的单位为靶 (barn), $1 \text{ 靶} = 10^{-28} \text{ m}^2$. 量子力学证明, 核自旋 $I = 0$ 或 $1/2$ 的核, $Q = 0$, 只有 $I \geq 1$ 的核才有非零的电四极矩. 自然界存在的 310 种稳定核 (包括半衰期很长的放射核) 中, 有核磁矩的约 130 多种, 有核电四极矩的约 90 余种.

二、电四极超精细相互作用

核电四极矩与核外电子云在核处产生的电场梯度 (EFG) 之间, 存在电四极超精细相互作用, Casimir 得出由此产生原子能级和分子振转能级电四极超精细分裂的量子力学表示:

$$\Delta E_Q = \frac{e q_j Q}{2I(2I-1)J(2J-1)}$$

$$\cdot \left[\frac{3}{4} c(c+1) - I(I+1)J(J+1) \right]$$

$$= \frac{B}{2I(2I-1)J(2J-1)}$$

$$\cdot \left[\frac{3}{4} c(c+1) - I(I+1)J(J+1) \right].$$

作者, 上海华东师范大学物理系, 邮编: 200062

一个轴总指向地面, 这一特点将有利于无线电通信的顺利进行. 潮汐力产生恢复力矩的原理可以用一个简单模型加以说明. 设卫星具有如图 6 示的哑铃型结构, 其质量分布在两个端球 A 与 B 上, 连接杆的质量可忽略不计, A, B 距离为 l , 质量分别为 m . 当这一卫星沿轨道运行时, 若其姿态失稳, 以 OX 为轴 (OX 轴垂直图面未画出) 仰俯运动的结果, AB 线偏离 OO' 线, 转角为 θ , 质量 A 比 B 更靠近地心, 根据式 (3), 该卫星受到绕 OX 轴旋转的潮汐力矩大小为

$$L_x = \frac{3GM}{r_0^3} I_{YZ} \quad (7)$$

其中 $I_{YZ} = \int YZ dm = (Y_A Z_A + Y_B Z_B) m$, 代入 A, B 的坐标, 可得

$$I_{YZ} = 2ml^2 \sin\theta \cos\theta = ml^2 \sin 2\theta \quad (8)$$

于是有

$$L_x = \frac{3GM}{r_0^3} ml^2 \sin^2\theta \quad (9)$$

该潮汐力矩 L_x 可使 A, B 恢复到原有的运动姿态. 对

一般刚体卫星, 例如形状为一旋转椭球体, 当对三个轴的转动惯量彼此不同时, 若 $I_{YZ} > I_{ZX} > I_{XY}$, 由于潮汐力作用的结果, 卫星将使小转动惯量轴, 即 Z 轴稳定地指向地心, 而最大转动惯量轴, 即 X 轴将与卫星轨道平面相垂直. 这种姿态控制不用加太复杂的装置, 也无需能源, 控制过程完全自动进行, 可靠性强, 适于长寿命飞行任务的卫星使用. 此外, 利用太阳引力的潮汐力对环绕太阳的人造行星进行姿态控制, 还可以使太阳能电池板稳定地朝向太阳, 以保证持续的电能供应.

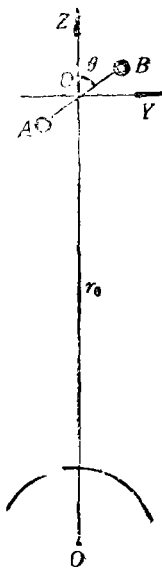


图 6

1. 就原子而言, 一个全满或半满的电子壳层有球对称的电子分布, 不会对电场梯度有贡献, 因而原子核处的电场梯度主要来源于核外未满壳层电子轨道中非球对称分布的电子, 称为价电子贡献. 由于电子轨道角动量 L 绕电子总角动量 J 进动, 电子云所产生的平均电场梯度沿 J 方向旋转对称, q_j 即为 J 方向的 EFG 主值. 考虑到价电子电场梯度会引起内电子壳层不对称电荷极化, 由此在四极核处感生电场梯度, 感生电场梯度大小正比于价电子的电场梯度, $q_j = (1-R)q_{val}$, q_{val} 即为价电子对 q_j 的贡献, $R(0 < R < 1)$ 为 Sternheimer 屏蔽因子, 反映了内电子壳层对四极

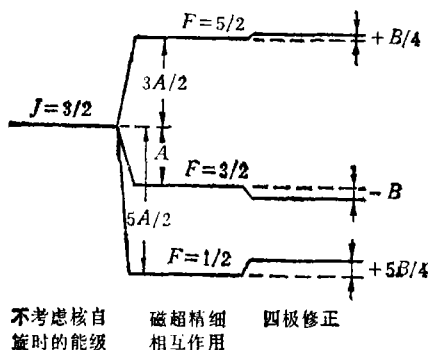


图2 原子能级的磁超精细结构及四极修正 ($J = 3/2, I = 1$)

核的屏蔽作用. 上式中 $B = eq_jQ$ 为电四极超精细耦合常数, 简称四极耦合常数; $c = F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)$, $F = I+J$ 为原子体系总角动量. F 可取 $I+J, I+J-1, \dots, |I-J|$, 当 $I < J$ 时, 有 $2I+1$ 个 F 值, 当 $J \leq I$ 时, 有 $2J+1$ 个 F 值, 不同的 F 值使能级位置沿能量增加或减小方向作不等量位移, 从而形成能级的电四极超精细结构.

原子核与核外电子间除存在电四极超精细相互作用外, 还同时存在核磁矩的磁偶极超精细相互作用, 引起能级磁超精细分裂,

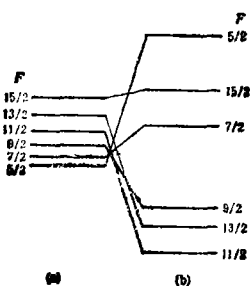


图3 分子振转能级 ($I = 5/2, J = 5$) 的 (a) 磁超精细结构; (b) 电四极超精细结构

$$\Delta E_m = \frac{AC}{2}$$

A 为磁超精细耦合常数. 因此总能级位移 $\Delta E = \Delta E_m + \Delta E_Q$, $B = 0$ (即当 $I = 0, \frac{1}{2}$, 核电荷分布球对称, $Q = 0$; 或当 $J = 0, \frac{1}{2}$, 核外电子分布球对称,

$q_j = 0$) 时, 得到纯磁超精细结构, 能级裂距满足间隔定则 $\Delta E_m(F+1) - \Delta E_m(F) = A(F+1)$; $B \neq 0$ ($Q \neq 0, q_j \neq 0$) 时, 由于 B/A 值较小, ΔE_Q 仅使谱线加宽或产生微小偏移 (图2), 因而原子光谱的超精细结构通常以磁超精细分裂为主要特征.

2. 分子中核外电子云所产生的平均电场梯度绕分子构架的转动角动量 J 旋转对称, q_j 为转动角动量 J 方向的 EFG 主值, 上述 ΔE_Q 式仍成立. 大多数分子的基态为 $^1\Sigma$ 态, 总轨道角动量为零, 电子自旋成对地抵消, 核磁矩感受不到核外电子运动所产生的磁场的作用, $A \ll B$ 几个数量级, 因而分子光谱的超精细结

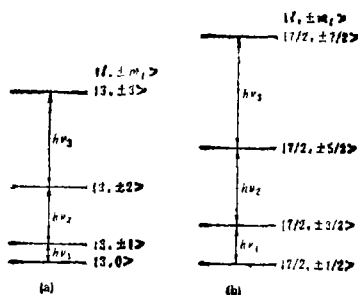


图4 核能级的四极分裂 (a) $I = 3$; (b) $I = 7/2$

构通常以电四极超精细分裂为主要特征 (图3), 这与核磁矩的贡献在原子超精细光谱机制中占优势正好相反. 分子中价电子对四极核电场梯度的贡献与成键分子轨道和配位基团轨道的重叠程度、及其各向异性布居程度有关. 对分子光谱超精细结构的观测, 能给出有关其电子结构、化学键性质以及分子对称性等方面的有用信息.

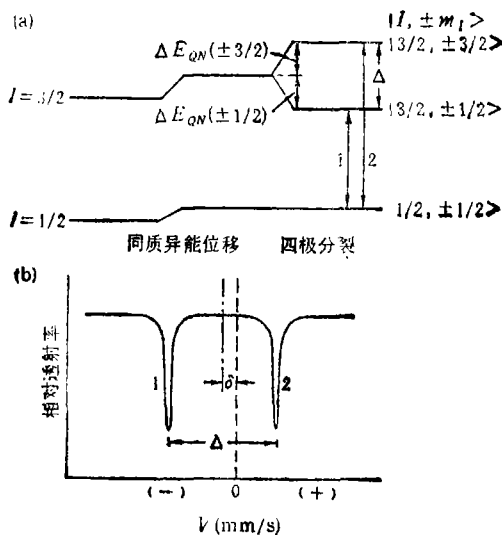


图5 自旋 $I = 3/2$ 核激发态能级的四极分裂 (a), 由此得到两条四极分裂的 Mössbauer 谱线 (b)

3. 电四极超精细相互作用还导致核能级的超精细分裂, 对于轴对称的 EFG, 给出

$$\Delta E_{Q_N} = \frac{e q Q}{4I(2I-1)} [3m_I^2 - I(I+1)],$$

式中 $m_I = I, I-1, \dots, -I$ 为核自旋 I 在 EFG 主轴方向的分量, 分裂能级仍保留 $|I, \pm m_I\rangle$ 二重简并. 对于整数 I , 分裂成 $I+1$ 条亚能级, 半整数 I 则为 $I+(1/2)$ 条亚能级(图 4). 这些四极亚能级间的跃迁服从选择定则 $\Delta m_I = \pm 1$, 当作用于四极核的射频电磁场能量 $h\nu$ 等于相邻两亚能级差时, 产生共振吸收现象, 这就是核四极共振(NQR), 整数自旋核可观察到 I 条谱线, 半整数自旋核则为 $I - \frac{1}{2}$ 条(图 4). 高分辨的 Mössbauer 谱学方法也能精确测量核能级四极分裂(图 5). 此外, 核电四极矩效应在核磁共振(NMR)和磁有序材料的 Mössbauer 谱中都要影响磁亚能级, 使谱线位置发生偏移.

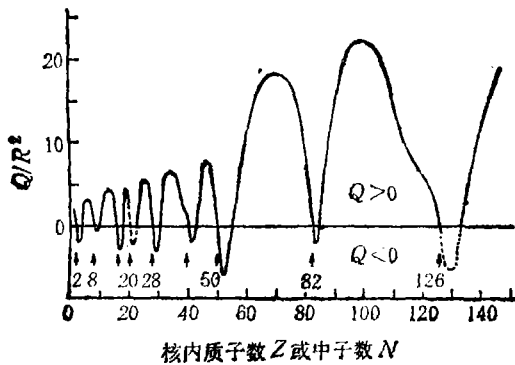


图 6 核电四极矩与核子数 ($R = 1.2A^{1/3} \times 10^{-15} \text{m}$, A 为核的质量数)

核能级的电四极超精细分裂在固体物理中常被用来研究晶体结构、化学键性质、晶体中的杂质与缺陷、相变以及晶体中的分子运动等. 晶体中核外电场梯度除价电子贡献 q_{val} 外, 四极核原子周围配位或晶格环境的非立方对称电荷分布对核处电场梯度亦有贡献, 称为配位基-点阵贡献 q_L , 因此 ΔE_{Q_N} 式中的 EFG 主值 $q = (1-R)q_{val} + (1-r_{\infty})q_L$, r_{∞} 为 Sternheimer 反屏蔽因子, 其值可正可负, 一般较大, 表明 q_L 贡献不但引起内电子壳层极化而感生电场梯度, 而且通过内电子壳层极化、畸变而得到放大.

三、核电四极矩与核结构模型

超精细相互作用的大小约为 $10^{-7} \sim 10^{-4} \text{eV}$, 相应频率范围为 $10 \text{MHz} \sim 10 \text{GHz}$, 比电子自旋-轨道精细相互作用小 3~4 个数量级. 由于常规光谱仪分辨率的限制, 直到 1935 年, Schuler 和 Schmidt 发现 ^{151}Eu 和 ^{153}Eu (I 均为 $5/2$) 可见光谱的超精细结构不符合间隔定则, 才第一次证实核电四极矩的存在. 随着原子

束、分子束实验的问世, 改用频率测量的方法, 测量灵敏度和精确度均提高 10^4 倍以上, 1939 年, Kellogg, Rabi 和 Ramsey 等精确测得 ^1H ($I=1$) 核的电四极矩为 $+0.002738$ 靶. 现在, 更可借助高分辨激光光谱、微波谱、核磁共振(NMR)、核四极共振(NQR)、Mössbauer 谱等多种物理手段测定核电四极矩 Q 值.

Townes 汇集大量实验数据, 绘制了核电四极矩与核子数的关系图(见图 6), 图中 Q 值随核子数增加按一定规律作正负变化, 反映了原子核电四极矩与核结构之间必然存在内在联系.

核壳模型认为核电四极矩是由原子核未满足壳层能级上的少数质子贡献的, 中子不带电荷, 对核电四极矩贡献为零, 满壳层能级上质子的分布是球对称的, 对核电四极矩亦无贡献. 因而, 所有质子和中子主壳层(主壳层内含有一条或若干条能量间距较小的壳层能级)都填满的双幻数核(幻数 2, 8, 20, 28, 50, 82, 116, …), 如 ^2He , ^{16}O , ^{40}Ca , ^{82}Ca , ^{208}Pb 等, 必为球形核, $Q=0$. 设未满足壳层能级角动量为 i , 质子数 n_p , 质子分布均方半径 $\langle r^2 \rangle$, 壳模型得出:

$$Q = -\langle r^2 \rangle \frac{2i-1}{2(i+1)} \left[1 - \frac{2(n_p-1)}{2i-1} \right],$$

当 $n_p < \frac{2i+1}{2}$, 即支壳层半充满前, $Q < 0$; 当 $n_p > \frac{2i+1}{2}$, 即支壳层半充满后, $Q > 0$. 因此可以预言,

质子数稍大于幻数的核, 如 ^{41}Sc , ^{63}Cu , ^{65}Cu , ^{121}Sb , ^{123}Sb , ^{209}Bi 等, $Q < 0$; 稍小于幻数的核, 如 ^{39}K , ^{41}K , ^{59}Co , ^{115}In , ^{117}In , ^{207}Tl , ^{209}Tl 等, $Q > 0$. 以上所述均与实验结果一致, 壳模型对幻数附近核素核电四极矩的预言值与实验值亦符合较好; 例如 ^{209}Bi (双幻核 + 1 个质子) 的 $Q_{\text{壳}} = -0.30$ 靶, $Q_{\text{实}} = -0.35$ 靶, ^{39}K (双幻核 + 1 个质子空穴) 的 $Q_{\text{壳}} = +0.050$ 靶, $Q_{\text{实}} = +0.055$ 靶. 但是, 当满壳层外核子数增多, 特别是对于远离幻数的核素, 如稀土元素 ($z=57\sim 71$) 和超铀元素 ($z \geq 92, N > 135$) 等, 核形变很大, 实验测得的 Q 值比壳模型理论预言值大得多, 甚至高达 20 倍以上, 例如 ^{175}Lu 的 $Q_{\text{壳}} = -0.25$ 靶, 而 $Q_{\text{实}} = +5.60$ 靶; 此外, 实验测得一些奇中子核的 Q 值亦不小, 例如 ^{17}O (双幻核 + 1 个中子) 的 $Q_{\text{壳}} = -0.026$ 靶, 表明单中子运动引起核实反冲会影响质子分布. 这说明用壳模型计算核电四极矩时, 仅考虑少数质子的贡献是不够的, 应当考虑大量核子的集体效应. 被核物理学家誉为核结构理论发展第一个里程碑的核壳模型在这里遇到了不可克服的困难, 促使以后亦被誉为核结构理论发展第二个里程碑的核集体模型的建立: 原子核内部的核子在平均核场中独立运动并形成壳层结构的同时, 整个核子系统强烈地耦合在一起, 可以产生形变, (下转第 33 页)



1 美将首次发射小行星探测器

据报道,美国将于1996年2月由“得尔塔2型”火箭发射一小行星探测器,要在近距离观测“爱神”小行星活动。此星是1898年发现,其长约35公里,宽14公里,高13公里;1975年,该星曾飞抵距地球2250万公里。定于1996年发射的探测器,将在1998年12月与爱神星会合,此时与地球距离约3.7亿公里。它们会合后,探测器将绕小行星飞行1年时间,可以无线电波向地面发回有关小行星大小、形状、质量、磁场、地质构成和结构等数据,帮助科学家研究天体的起源。

2 日制作世界上最大光学天文望远镜

据《日本经济新闻》报道,日本继前苏联、美国之后,正在建造一架名为“昴宿星”这一世界上最大的光学天文望远镜,其主镜直径为8米、厚度20厘米、重达23吨,要求温度变化在100度时,其镜面变形不超过1000万分之一,精度超过其他天体望远镜的10倍,这架由1991年开始建造的望远镜,总投资为400亿日元,将在今年底完成望远镜曲面制作及圆顶状建筑物上半部圆顶,计划明年进行望远镜筒试组装,到1999年将这架世上最大望远镜安装在夏威夷岛的冒纳凯亚山山顶,各国天文工作者可进行太阳系行星观测及银河中心的研究。

3 澳首次实用巴基球技术

据《科技日报》报道,澳大利亚国立大学生物医学工程师比·伯奇,将一种称为“锆气”的含有巴基球和放射性锆微粒的全体注入人体内,用有关仪器进行扫描造影,便可诊断动脉堵塞、骨髓病、多种传染病和胃病。这是人类首次实用巴基球技术。但有关“锆气”中巴基球与锆元素微粒的结合方式尚待研究。

4 欧洲强子对撞机计划遇到困难

据英国《新科学家》周刊报道,继美国宣布取消超级超导对撞机计划之后,欧洲强子对撞机计划遇到了困难,承担建造任务的许多欧洲国家不能保证所需费用的提供。尽管这台对撞机建成后,能够产生质子束,并使这些质子束围绕一条27公里长的环型隧道快速运动,增加其能量,可望探测出希格斯粒子。据了解,日本已拒绝提供帮助,若给其他国际性参与附加先决条件,该计划有可能被推迟数年。但高能物理研究要走出困境,尚需加强国际合作,科学家目前唯一希望就是欧洲这台强子对撞机计划能够实施。

5 日本学者展望 21 世纪生物技术发展趋势

据报道,日本三菱综合研究所牧野升认为,21世纪生物技术将在以下三个领域获得发展:医治癌症、艾滋病和老年性痴呆症等难治病领域;仿生

学着重研究生物机能,开发工业产品;基因重组领域将成为数千亿日元的产业。

6 日本学者谈论日美荣获诺贝尔奖悬殊原因

据《科技日报》报道,1987年诺贝尔医学奖获得者进利根泽在分析最近25年日美两国学者荣获诺贝尔奖人数的比例是3:77。他认为如此悬殊的原因有三:其一,日本各科研机构间的骨干交流薄弱,处于半封闭的“近亲繁殖”状态;其二,日本各科研机构的领导权威过高,学位和职称的作用过大,青年人的创造精神受到严重压抑;其三,尚未建立真正有效的优胜劣汰制度,不适应工作者难以辞退,真正有才干者难以施展抱负。

7 美研制出新型太阳能电池

据报道,美国国家再生能源实验室学者诺菲,花了近十年的时间,研制出一种新型多晶薄膜太阳能电池,其光电转换效率达15.9%,采用的多晶材料为铜铟镓联硒化合物。由于比单晶材料的成本低四、五倍,这种新型太阳能电池的应用范围将随工艺参数的进一步改进而大大拓宽。

8 《中国科学报》评论 93 年生物技术十项成就

《中国科学报》曾于今年2月2日发表署名文章,认为1993年生物技术领域在国际上的研究非常活跃,成果累累,其重要进展表现在以下十个方面:治疗艾滋病的新药已有成效;生产高效抗癌药物的微生物将投放市场;人类未来食品的小球藻大有开发潜力;真菌制剂的研制获得重视;微生物与控制生育发挥作用;生物固氮研究又有新进展;海水种植作物开发新品种;生物燃料的发展前景十分乐观;发展环保产业已成世界潮流;保护海洋势在必行。

9 澳学者发现气温变化与人类活动相关

(上接第47页)

并共同参与转动、振动等集体运动。这中间,原子核电四极矩的实验数据起了非常重要的作用,1975年度Nobel物理奖得主Rainwater回首往事时说,当初构思其椭球核模型时,曾得到Townes图极大启发。目前关于核结构的理论虽有新的发展,但还停留在半唯象阶段,还不十分成熟。但可以认为,核电四极矩效应在有关原子核结构及核内部运动状态的理论 and 实验研究中,将继续作出其独有的贡献。