

原子团簇和原子核的相似性*

王广厚 韩 民
(南京大学物理系 南京 210008)

摘 要 原子团簇(或原子簇)和原子核内部粒子之间的相互作用是根本不同的,但都是含有一定数目的多粒子系统,存在着某些相似特性,如饱和性、壳结构、幻数与同位素效应、变形特性和复合团簇(核)过程等.这些相似性是核物理学家、原子物理学家以及化学家们共同关心的问题.

关键词 原子团簇, 原子核, 相似性, 幻数.

1 引 言

原子团簇是由两个乃至上千个原子或分子,通过物理或化学结合力(主要是电磁相互作用)组成相对稳定的非刚性原子聚合物,原子核则是由核子(中子或质子)通过强相互作用(核力)组成的集合体.虽然它们内部粒子之间相互作用性质是根本不同的,但由于都是含有一定数目的多粒子系统,所以,可能存在许多相似特性.这些特性是:(1)饱和性,系统内粒子的密度是恒定的,因而系统的半径满足 $R \propto A^{1/3}$,总能量正比于 A ;(2)壳效应特征,即在有效势场中单粒子运动特性;(3)变形,呈现粒子集体运动的性质;(4)复合核(团簇)过程.

2 饱和性

在核物理中,Bethe - Weizsäcker 用液滴模型讨论原子核的形变和裂变.若核内中子数 N 和质子数 Z ,核子数则为 $A = N + Z$,于是原子核质量公式为

$$M(A, Z) = NM_n + ZM_p - E(A, Z)/c^2 \quad (1)$$

其中, M_n 和 M_p 分别是中子和质子质量.当原子核中子数等于质子数时,核的总束缚能是

$$E(A, Z) = u_v A - u_s A^{2/3} - u_c A^{5/3} \quad (2)$$

其中, u_v 为体能常数(10MeV), u_s 为表面能常数(10MeV), u_c 为库仑能常数(1MeV).

在原子团簇中,例如, ${}^4\text{He}_n$ 团簇,用格林函

数和 Monte Carlo 方法计算的总束缚能为^[1]

$$E(n) = 7.02n - 18.8n^{2/3} + 11.2n^{1/2} \quad (3)$$

其中, n 是团簇 ${}^4\text{He}_n$ 中所含原子的数目 ($20 < n < 112$).可见,表面能和体能部分与粒子数的关系同原子核相同.见(2)式,但(3)式采用了绝对单位.

液滴模型是根据多粒子系统具有饱和性特征提出的,可用来研究原子核和原子团簇的表面振荡.例如,对于 Ga_n 团簇,理论上根据液滴模型计算其振动谱^[2],实验上将直径为 70 ~ 100 Å 的 Ga 团簇嵌在多孔的玻璃中,进行中子非弹性散射测量^[3],两者比较表明,低频区域所观察到的峰是属于表面振荡的贡献.对于碱金属团簇,饱和性可用于确定凝胶球半径,此时球半径实为离子芯的分布.而球中价电子分布则是自洽的.于是可计算出每个原子的总能量,结果见图 1,其特征类似于 $-u_v n + u_s n^{2/3}$ ($u_v, u_s > 0$),不过,此时忽略了壳层效应所引起的振荡.另外,利用总能量曲线,还可以研究金属原子团簇的裂变问题.

3 幻数和稳定性

原子核中核子的状态,具有幻数特征,即壳结构,它是与对称性和相互作用密切相关的.原子簇具有类似的特征^[4].用分子束冷凝法得到钠原子簇,经电离后进行质谱分析.在钠离子簇 Na_n^+ 质谱上观察到 $n = 8, 20, 40,$

* 国家自然科学基金委资助课题

58 和 92 等幻数结构. 可以认为, 钠 3s 价电子在背景膺势中运动, 这种有效膺势类似于核物理中的 Woods Saxon 势(参见图 2)

$$U(r) = \frac{-U_0}{\exp[(r - r_0)/e] + 1} \quad (4)$$

其中, U_0 是费米能 (3.23eV) 与功函数 (2.7eV) 的和, r_0 是原子簇的有效半径. 在计算中取 $r_0 = r_n n^{1/3}$, $r_n = 3.93$ 原子单位, 参数 $e = 1.5$ 原子单位.

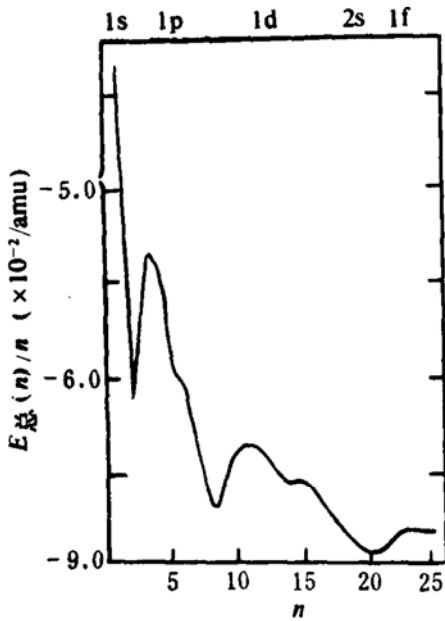


图 1 团簇中每个原子的总束缚能. 团簇呈半径 $R = 3.9n^{1/3}$ 的凝胶球

用数值方法求解薛定谔方程, 得到角动量子数 l 表征的分离电子能级, L 的简并度为 $2(2l+1)$ (包括自旋). 能级随 n 增加而缓慢下移, 对占据态本征值取和, 便可得到含有 n 个原子的原子簇的电子能量. 定义相邻两原子簇电子能量差为

$$\Delta E(n) = E(n) - E(n-1) \quad (5)$$

当一个能级填满时, 开始填充另一个能级. 电子的能量是非连续的. 如果认为离子-离子之间的结合能是 n 的连续函数, 电子能量的不连续性将反映到离子簇的总束缚能中, 于是 $\Delta E(n)$ 也会出现不连续. 这种相对稳定性的差别

(即能量差的不同), 将在离子簇质谱中以幻数形式表现出来. 计算结果得到钠离子簇 Na_n^+ 的幻数是 8, 20, 40, 58 和 92. 但是, 计算结果还多出 1d, 1f, 2d 和 3s 四个带的幻数, 即 $n = 18, 34, 68$ 和 70, 而在实验中不存在这些幻数.

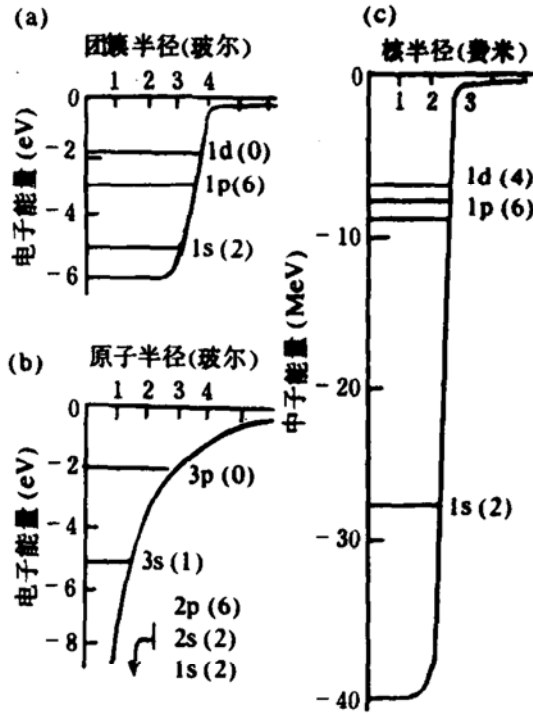


图 2 三种费米子体系的势阱及能级比较, (a) Na 团簇, (b) Na 原子, (c) Na 原子核

在忽略自旋轨道耦合的情况下, Clemenger^[5] 把 Nilsson 在核物理中研究轴对称变形核的壳模型理论, 用来讨论变形原子团簇的价电子态. 这时有有效单粒子哈密顿量是

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega_0^2 (\Omega_1^2 \rho^2 + \Omega_2^2 Z^2) - U\hbar\omega_0 \cdot (l^2 - \langle l^2 \rangle_n) \quad (6)$$

$$\rho^2 = x^2 + y^2$$

$$\langle l^2 \rangle_n = \frac{1}{2} n_1 (n_1 + 3)$$

这里, n_1 是主量子数, 椭球标度因子可用变形参数 δ 来表示. 且假定原子团簇体积不变, 即 $\Omega_1^2 \Omega_2 = 1$, 可有

$$\Omega_1 = \left[\frac{2 + \delta}{2 - \delta} \right]^{1/3}, \quad \Omega_2 = \left[\frac{2 + \delta}{2 - \delta} \right]^{-2/3} \quad (7)$$

在一级近似下, δ 的绝对值是原子团簇等势表面长主轴和短主轴的差与平均半径之比. 由于椭球振动势受 l^2 扰动, 使得在球形振动情况下总量子数 n 相同而角动量 l 不同的状态发生分裂. ω_0 是 $\delta = 0$ 、 $U = 0$ (球形) 时的特征频

率. ω_0 随 n 增加而减少, 近似与 $n^{-1/3}$ 成比例. 图 3 是能量本征值的解与变形参数 δ 的关系. 在 δ 小时, 球形表示 $|nl\rangle$ 最适合描述哈密顿的本征值, 稍微有点非球形的偏离可看作在一定 l 的轨道内存在着微扰, 使能级分裂. 按照核物理的习惯, 在 l 一定时, 最低能态的径向量子数 ν 取 1, 下一个能态 ν 取 2, 等等.

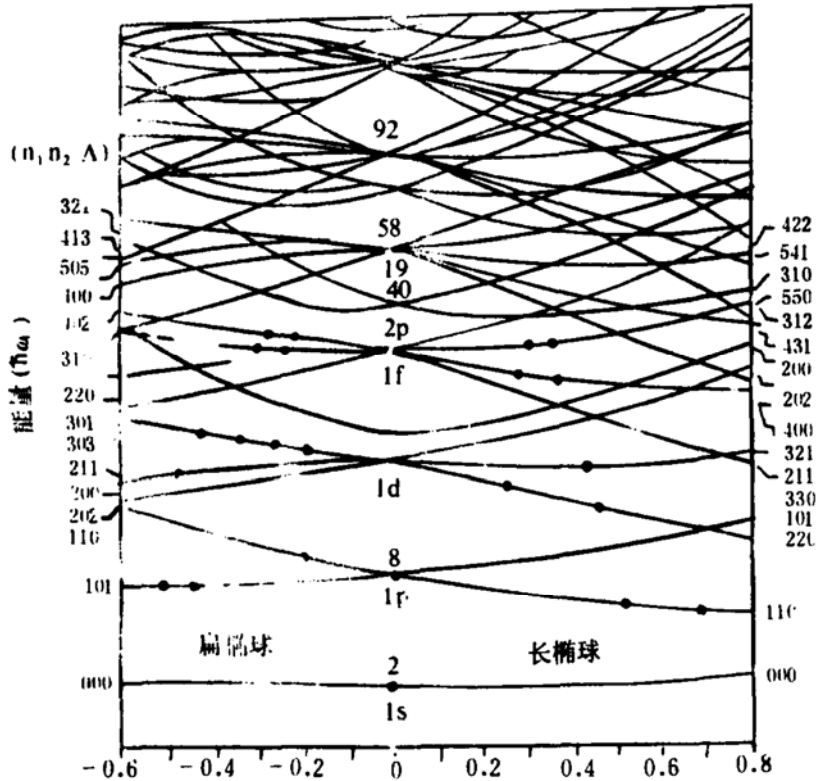


图 3 钠团簇的 Nilsson 能级图 [参数 $\delta(U=0.04)$]

图中的园点表示每个原子团簇最高占据能级的位置. 对于比较大的情况, 圆柱形表示 $|n_1 n_2\rangle$ 比较符合本征态, 这里 n_1 是总量子数, n_2 是轴量子数. Λ 是轨道角动量沿对称轴的投影. Λ 的正负号可使能级具有四重简并 (包括自旋), $\Lambda = 0$ 的能级是二重简并. 在描述基态时, 每个原子团簇都给一个 δ 值, 使单粒子能级之和为最小. 图 3 中给出用这个方法预言的各个原子簇的 δ 值. 据此模型所得到的结果, 一方面再现了主要的球形满壳层, 另一方面给出了对应于特定壳层 $|n_1 n_2 \Lambda\rangle$ 的峰位. 特别是再现了 1f 和 1g 壳层的四重图案. 与 $n = 14$ 、

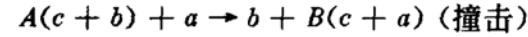
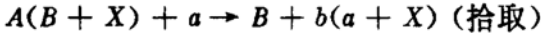
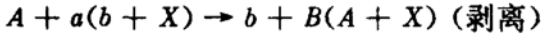
16 和 18 相对应. 而且还压制了 $n = 34$ 峰, 使之与实验更加符合.

4 原子团簇的裂变, 反应和散射

幻数的存在表明一些不稳定原子簇可能存在裂变反应, 如:



直接反应过程, 包括: (a) 非弹性散射, 集体激发和壳结构效应; (b) 转移反应, 剥离、拾取和撞击反应, 其形式分别为:



其中 A 是靶原子簇, $a(b + X)$ 为入射粒子, B 为剩余团簇, b 为出射粒子.

复合团簇过程 $A + a \rightarrow C^* \rightarrow B + b$, 其中 C^* 为亚稳团簇, 寿命为 τ , 在核物理中, 1eV 中子与核碰撞时间为 $\sim 10^{-18}\text{s}$, 形成复合核的寿命为 $\sim 10^{-15}\text{s}$; 在原子团簇物理中, 1eV 的 H^+ 同尺寸为 10 \AA 原子团簇碰撞时间为 10^{-12}s , 形成复合团簇的寿命是 $10^{-7} \sim 10^{-9}\text{s}$, 复合团簇的寿命远比碰撞时间长. 因此, 有可能直接测量团簇寿命, 从而, 进一步获取原子团簇的尺寸和团簇内原子之间相互作用特征的信息. 这同核物理中, Bohr, Breit 和 Wigner 等人引入复合核过程, 建立色散关系, 得到复合核亚稳态寿命和能量的情形十分相似^[6].

5 奇偶性和同位素效应

原子核由于核子存在对关联, 其稳定性存在奇偶性, 往往以含有偶数个核子的原子核较稳定. 溅射产生离子簇也存在奇偶性. 用能量为 8keV 中性氩原子轰击多晶铜, 产生大量异同位素离子簇 (hetero-isotopic cluster), $[\text{Cu}(65)_1(63)_1]^+$, $[\text{Cu}(63)_2(65)_1]^+$, \dots , 和同位素相同离子簇 (homo-isotopic clusters), 如 $\text{Cu}(63)_2^+$, $\text{Cu}(65)_2^+$, $\text{Cu}(63)_3^+$, \dots . 若取 $I(n)$ 是原子数相同的离子簇 Cu_n^+ 产额之和, $I_{\text{he}}(n)$ 是异同位素离子簇产生的强度, 两者比值 $R = I_{\text{he}}(n)/I(n)$ 包含着离子簇形成过程中的同位素效应^[7].

参数 I 和 I_{he} 随铜离子簇所含原子数 n 的变化具有如下特征:

$$I(\text{Cu}_{2p+1}^+) > I(\text{Cu}_{2p}^+) \quad (8)$$

$$I_{\text{he}}(\text{Cu}_{2p+1}^+) > I_{\text{he}}(\text{Cu}_{2p}^+)$$

$$R(\text{Cu}_{2p+1}^+) > R(\text{Cu}_{2p}^+)$$

这表明: (1) 异同位素离子簇是择优发射的, (2) 离子簇的稳定性与构成簇的同位素性质有关.

溅射铜离子簇发射强度的奇偶变化特征

在 70 年代已经观察到, 但当时并未注意到同位素的影响. 为了解释这种奇偶变化, 人们曾采用线性链模型和 Hückel 近似来计算价电子束缚能, 得离子簇束缚能随 n 呈奇偶变化, 可是这种模型不能解释溅射 Na_n^+ 发射强度为什么不存在奇偶性. 并且线性链模型对大多数离子簇的结构也不尽合理. 如果从同位素效应角度来看, Na_n^+ 不呈奇偶性是因为钠靶只有一个同位素 ^{23}Na , 而铜靶有 ^{65}Cu 和 ^{63}Cu 两种同位素.

6 结 论

原子团簇 (离子簇是带电团簇) 是介于气态和固态之间的过渡状态, 具有一系列既不同于单个原子分子又不同于大块固体的奇异性. 尤其令人惊奇的是, 原子核的某些特性, 如幻数和同位素效应, 也在物质这一层次 (原子团簇的性质) 中反映出来, 而构成原子团簇的原子间相互作用是电磁相互作用. 难怪丹麦哥本哈根大学玻尔研究所的核物理学家 S. Bjørnholm 教授惊呼^[8]: J. 汤姆逊的“李梅布丁” (plum pudding) 原子核模型是否复活了? 如果用电子波代替电子, 正电荷凝胶球代替“布丁”能否给出金属原子团簇的主要特征? 美国加州大学 (伯克利) 著名物理学家 W. D. Knight 教授明确指出^[9], 团簇物理学发展已经从核物理学的类比中收益极大.

参 考 文 献

- 1 Pandharipande V R, et al. Phys. Rev. Lett., 1983, 50, 1676
- 2 Tamura A, et al. Surf. Sci., 1984, 136: 437
- 3 Bogomolov V N, et al. Soviet Phys. — Solid State, 1971, 13: 1256
- 4 Knight W D, et al. Phys. Rev. Lett., 1984, 52: 2141
- 5 Clemenger K. Phys. Rev., 1985, B32: 1359
- 6 Bohr A, et al. Mat. Fys. Medd. Dcen. Vid. Selsk., 1953, 27(16)
- 7 Wang G H, et al. Phys. Rev., 1988, B37: 9093
- 8 Bjørnholm S. Contemporary Physics, 1990, 31: 309
- 9 Cohen M L, et al. Physics Today, Dec. 1990, 42

Some Similarities between Atomic Clusters and Nuclei

Wang Guanghou Han Min

(Department of Physics, Nanjing University, Nanjing 210008)

Abstract Both atomic clusters (microclusters) and nuclei are systems of the finite number of particles but with different interaction forces among the component particles, and have some similarities in their properties, such as saturation, shell structures, magic numbers, isotopic effect, deformation and compound clusters (nuclear) process, etc. The similarities rivet attention in many scientific communities from nuclear, atomic and molecular, and condensed matter physics as well as chemistry.

Key Words atomic cluster, nucleus, similarity, magic numbers.

第五届国际慢正电子束技术会议 在美国杰克逊市举行

第五届国际慢正电子束技术会议于1992年8月5~11日在美国怀俄明州北部的杰克逊市举行。会议由美国爱达荷国家工程实验室(Idaho National Engineering Laboratory)负责组织。来自美、英、日、德、俄、法、加、丹、比、荷、瑞士、捷克、波兰、印度及中国的共110名代表出席了会议。这次会议是正电子学界重要的系列会议之一,每两年举行一次。前四届我国均未派员参加,本届会议仅武汉大学王少阶前往与会。

会议的主要议题是交流两年来慢正电子束技术及应用的最新进展。会议分下述专题:(1)缺陷深度分布;(2)慢正电子束中的正电子寿命技术;(3)表面研究;(4)强正电子束装置;(5)正电子显微镜;(6)慢正电子束工艺和技术;(7)基础物理研究。

大会报告34篇,张贴报告40篇。此外,专题讲座5个,并针对一些活跃的研究领域组织了圆点讨论。近两年来,强正电子束和正电子显微镜的研究进展引人注目。在强正电子束方面,除正在运行的美国布鲁克海文国家实验室、劳伦斯利物莫国家实验室、德国的慕尼黑大学和日本筑波大学等单位的装置外,又提出两项新束建设计划。一项是美国爱达荷国家工程实验室。另一项是日本原子能研究所。前者将以反应堆为基础,得到约 10^6 居里的 ^{58}Co 正电子源,然后慢化得到束流强度 $\sim 10^{12}$ e^+/s 。后者以功率为100KW,能量为100~150 MeV的直线加速器和靶系统产生单能正电子束,计划得到 10^{10} e^+/s 的束流强度。这两项计划都拟建成国际规模的正电子工厂。主要用于先进材料的检测与处理,特别是微电子学、薄膜、金属涂层、纳米结构、高分子材料等。在正电子显

微镜研究方面,美国密执安大学和布朗代斯大学均取得很好进展。1988年,这两个学校都建成了正电子再发射显微镜。它们提供的微观成像技术是与任何电子显微镜都不同的。可用于超薄薄膜或临界厚度膜的研究、硅/金属界面生长动力学及表面与近表面缺陷测绘等。目前,密执安大学正在研制的正电子显微镜希望达到的分辨率是10Å,以致具有单层深度分辨本领,对厚样品可进行无损检验分析,特别是对缺陷灵敏,此外,还可用于生物系统复杂分子的动力学相互作用研究。总之,这些进展表明,正电子湮没这门学科具有极大的活力,正向更深层次发展,必将会对材料科学、生命科学乃至原子物理、天体物理等学科做出更大的贡献。

在此次大会上,武汉大学王少阶提交了两篇报告,一篇是“用正电子湮没研究物理吸附表面的缺陷和相变”,作为大会口头报告;另一篇是“中国的慢正电子束研究”,作为张贴报告。担任会议主席一次。在大会口头报告中,还专门介绍了中国正电子湮没研究概况和将于1994年在北京召开的第十届国际正电子湮没会议的筹备情况,引起与会代表的广泛兴趣。参加本次会议的还有18名年青中国学者,他们分别来自美国、日本、瑞士等国的大学或研究所,大部分是在读博士生,也有3名博士后。他们中有3人在会上作了学术报告。还有不少人提供了张贴报告。来自国内和海外的中国学者聚集一堂,座谈讨论,为发展我国的正电子学科献计献策。

下届会议将于1994年在日本举行。

(武汉大学物理系 王少阶供稿)