

锕系核的电偶极矩

石宗仁 万淑颖

(中国原子能科学研究院 北京 102413)

1993-12-23 收稿

摘要

理论和实验上证明了电偶极矩 D 同角动量 I 近似满足线性关系, 说明了 Coriolis 力和离心力对 D 的作用。第一次借权重线性最小二乘法拟合得到 31 个核实验的基态电偶极矩 D_0 。比较了宏观-微观方法, 平均场理论, 分子偶极集团模型和实验的 D_0 。

关键词 钷系核, 电偶极矩, 角动量, 宏观-微观方法, 平均场理论, 分子偶极集团模型。

1 引言

在核的体坐标系 (body frame), 如果坐标反演算符 P 和绕垂直于主轴转动 180° 算符 R 都是不对称的, 但它们的积 $P \cdot R$ 是对称的, 则称为 Simplex 对称性^[1,2]。它的几何意义是相对含主轴平面的镜像对称性, 轴对称的八极形变或奇多极形变的核一定具有 Simplex 对称性。偶偶核的 Simplex 量子数 $s = +1$, 奇偶核的 $s = \pm i$ 。

在核谱方面, Simplex 对称性的核具有三个突出的特征: 低激发能的负宇称态, 交替的正负宇称态及增强的电偶极跃迁等。锕系核, 特别是 Th 有明显的 Simplex 对称性^[2,3]。宇称破缺的静态电偶极矩 D 是一个结构灵敏的物理量, 它可以从约化的电偶极跃迁几率 $B(E1)$ 导出。对于大多数锕系核 $D \approx 0.1\text{--}0.4 e \cdot fm$ 。

理论上, 宏观-微观方法 (MMM) 和平均场理论 (MFT) 均可以计算 D , 但大多数的理论容易计算基态电偶极矩 D_0 。相反, 实验上容易从电偶极 $E1$ 和电四极 $E2$ 跃迁的分支比及基态电四极矩 Q_0 推导出较高角动量的 D 。所以, 比较理论的 D_0 与实验的 D 是很难确切地对理论进行检验。

众所周知, 由于 Coriolis 力和离心力的作用, 核集体的转动与核的内禀运动发生耦合, 结果是与内禀运动相关的物理量将与集体转动角动量 I 或转动频率 ω 有关。电偶极矩也一定与集体转动角动量有关。

本工作的目的有两个方面: 第一, 研究 Coriolis 力和离心力对电偶极矩的影响, 即从理论和实验上找出 D 同 I 的关系; 第二, 从 D 同 I 的关系中推导出基态 D_0 , 然后与 MMM、MFT 及分子偶极集团模型 (MDC) 等理论计算的 D_0 相比较, 检验理论的可靠

性。

本工作的具体步骤如下：从考虑 Coriolis 力和离心力的 $B(E1)$ 和 $B(E2)$ 的 Mikhailov 规律导出 D 同 I 的线性关系；系统分析锕系核的 $E1$ 和 $E2$ 跃迁分支比及用基态电四极矩 Q_0 得到实验上的 D 同 I 的关系；对实验上的 D 同 I 的关系作权重线性最小二乘拟合得到斜率和截距，即基态电偶极矩 D_0 ；最后比较理论和实验的 D_0 ，检验理论模型。

2 基本理论

2.1 理论的 D 同 I 的关系

电偶极或电四极约化跃迁几率 $B(E1; I_i \rightarrow I_f)$ 和 $B(E2; I_i \rightarrow I_{f'})$ 与电偶极和电四极矩 D 和 Q 分别有如下的关系：

$$B(E1; I_i \rightarrow I_f) = (3/4\pi) \cdot D^2 \langle I_i K_i 10 | I_f K_f \rangle^2, \quad (1)$$

$$B(E2; I_i \rightarrow I_{f'}) = (5/16\pi) \cdot Q^2 \langle I_i K_i 20 | I_{f'} K_{f'} \rangle^2. \quad (2)$$

当 $K_i \neq 0$, $K_f \neq 0$ 时，还存在 $(-1)^{I_i+K_i}$ 的符号相关项。本文利用考虑 Coriolis 力和离心力的 Mikhailov 规律^[4]， $B(E1)$ 和 $B(E2)$ 又可以写成

$$B(E1; I_i \rightarrow I_f) = \langle I_i K_i 10 | I_f K_f \rangle^2 \{M_1 + M_2 [I_f(I_f + 1) - I_i(I_i + 1)]\}^2, \quad (3)$$

$$B(E2; I_i \rightarrow I_{f'}) = \langle I_i K_i 20 | I_{f'} K_{f'} \rangle^2 \{M'_1 + M'_2 [I_{f'}(I_{f'} + 1) - I_i(I_i + 1)]\}^2. \quad (4)$$

如果分别采用 $I_f = I_i - 1$ 和 $I_{f'} = I_i - 2$ 的 $E1$ 和 $E2$ 跃迁，比较(1)和(3)以及(2)和(4)式可以得出

$$D = \sqrt{4\pi/3} \cdot (M_1 - 2M_2 I_i), \quad (5)$$

$$Q = \sqrt{16\pi/5} \cdot (M'_1 + 2M'_2 - 4M'_2 I_i), \quad (6)$$

由(5)和(6)得出 D 和 Q 随 I 呈线性关系。

如果，实验上知道了正负宇称态间的 $E1$ 跃迁的 $B(E1)$ ，从(5)式即可得到 D 同 I 的关系。事实上，实验上的 $B(E1)$ 数据很少，特别是 $1^- \rightarrow 0^+$ 跃迁的 $B(E1)$ 。

本文从一个角动量 I 的态分别到正和负宇称态的 $E1$ 和 $E2$ 相对跃迁强度比及电四极矩导出 D 同 I 的关系。从(5)和(6)式可以近似得到

$$(D/Q) \cdot Q_0 = D_0 (1 + \alpha(I - I_0)), \quad (7)$$

$$D/Q = \sqrt{5/12} \cdot \langle I_i K_i 20 | I_{f'} K_{f'} \rangle / \langle I_i K_i 10 | I_f K_f \rangle \cdot \sqrt{B(E1)/B(E2)},$$

$$B(E1)/B(E2) = A \cdot [I_r(E1)/E_r^3] / [I_r(E2)/E_r^3],$$

$$\alpha = -2M_2/(M_1 - 2M_2 I_0) + 4M'_2/(M'_1 + 2M'_2 - 4M'_2 I_0),$$

其中 $A = 0.767 \cdot 10^{-12}$; E_r 和 $E_{r'}$ 分别为 $E1$ 和 $E2$ 的跃迁能，单位是 keV; I_r 是跃迁强度； I_0 是基态角动量； D 的单位是 $e \cdot fm$ ，一般 $K_i = K_f = K$ 。如果， Q 随 I 变化小，近似取 $Q = Q_0$ ，则

$$D = D_0 + \kappa(I - I_0), \quad (8)$$

在后面的计算中采用了(8)式。

2.2 计算电偶极矩的理论

宏观-微观方法是一种好的描述 D 的方法。早期, Strutinsky(1956)^[5] 及 Bohr 和 Mottelson (1959)^[6] 利用液滴模型 (LD) 计算了 D 的宏观项, Leander (1985)^[7] 又引入壳修正计算微观项, 从而计算 D 的 MMM 得以确立。 D 可以写为

$$D = D^{\text{macr}} + D^{\text{shell}}. \quad (9)$$

Butler 和 Nazarewicz (1991)^[8] 利用小液滴模型 (DM) 计算 D 的宏观项及在下述公式(10)中用到高多极形变参数 $\beta_4, \beta_5, \beta_6, \beta_7$ 和 β_8 。在 DM 中, 宏观项又可以分为两部分

$$D^{\text{macr}} = D^{\text{LD}} + D^{\text{NS}}, \quad (10)$$

$$D^{\text{LD}} = C_r A Z e \sum_{\lambda=2}^{\lambda_{\text{max}}-1} \frac{49}{3 \sqrt{35}} \times \frac{(\lambda^2 - 1)(8\lambda + 9)}{[(2\lambda + 1)(2\lambda + 3)]^{3/2}} \beta_\lambda \beta_{\lambda+1},$$

$$D^{\text{NS}} = -C_s e \sum_{\lambda=2}^{\lambda_{\text{max}}-1} \frac{\sqrt{35}}{15} \times \frac{(\lambda^2 - 1)(\lambda + 3)}{\sqrt{(2\lambda + 1)(2\lambda + 3)}} \beta_\lambda \beta_{\lambda+1}.$$

其中 D^{LD} 为液滴模型的电荷重分布项, D^{NS} 为小液滴模型引入的中子皮项, λ 为形变参数 β 的阶数, C_r 和 C_s 为可计算的常数。 D^{NS} 始终是负的, 它将减少 D^{LD} 的贡献。本文利用 Butler 的高多极形变参数 $\beta_2-\beta_8$ 计算了 D^{macr} 数值同多极形变参数阶数 λ 的关系, 对所有的核, 都有类似的变化规律, ^{224}Ra 的 D^{macr} 同 λ 的关系表示在图 1。

从图 1 可以看出, β_2, β_3 和 β_4 对 D^{LD} 和 D^{NS} 的影响大, $\beta_5-\beta_8$ 影响小, 所以 β_2, β_3 和 β_4 的数值大小对计算 D^{macr} 十分重要。这与经验的 $D^{\text{macr}} = C_{\text{LD}} A Z \{ \beta_2 \beta_3 + [88/(27 \sqrt{5})] \beta_3 \beta_4 \}$ ^[9] 结果一致, 由于中子皮项的作用, 系数 C_{LD} 为中子-质子对称能推导值 0.00069 fm 的一半。壳修正项 D^{shell} 可用变形的单粒子模型, 即 Nilsson 模型和 Strutinsky 方法计算, 简称 Nilsson-Strutinsky 方法。另外, 应注意到, 在势能面的计算中, 引入高多极形变参数 $\beta_5-\beta_8$ 会影响 $\beta_2-\beta_4$ 的数值。

如果在获得形变参数 β_1 的势能面和壳修正计算中, 引入推转项 (Cranking), 即考虑转动的作用, 也可以得到 D 同 I 的关系。

Egidio 和 Robledo^[10] 用 Gogny 相互作用力的 HF 加 BCS 及带八极和偶极算符

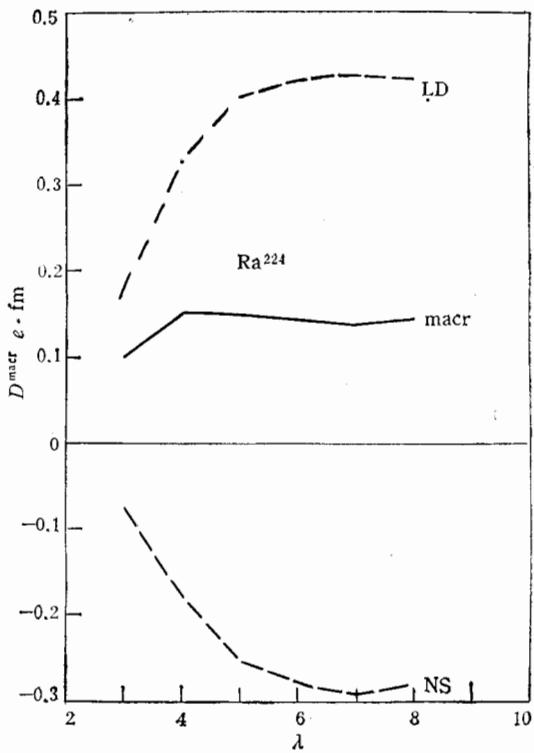


图 1 D^{macr} 同多极形变参数阶数 λ 的关系

Q_{30} 和 Q_{10} 约束的, 以及其它形变的多极算符是自由的平均场理论计算了 Ra 和 Th 的 $B(E1)$ 及 D_0 .

为了计算锕系核的 D_0 , 本文引用了 Butler 文章中表 5、6 和 7 $I = 0$ 的多极形变参数 β_2 — β_8 , 利用上述(10)式分别计算了 D^{LD} 和 D^{NS} , 以及引用了 Butler 的壳修正计算结果, 最后得到了 MMM 的 D_0 . 从 Egido 文章中的图 1, 找到最小位垒 E_B 所对应的约束八极矩 q_3 , 然后在图 5 中找到 q_3 所对应的 D_0 , 从而得到 MFT 的 D_0 . 本文也利用 Iachello^[11] 文章中 α 分子偶极集团模型公式计算了 D_0 .

3 钷系核实验数据的系统性及讨论

3.1 实验上的 D 同 I 的关系

实验数据是取自 Nuclear Data Sheets 及各种 1985 年以来的杂志. 利用 $E1$ 和 $E2$ 跃迁分支比及 Q_0 得到了从 Fr、Ra、Ac 和 Th 等 31 个核的 D 同 I 的关系, 并利用带权重的线性最小二乘法对实验数据做拟合, 它们中的一部分结果表示在图 2.

除少数奇偶核, 例如 $^{225}\text{Th}(s = +i)$ D 同 I 有显著的涨落外, 大多数 D 同 I 呈线性关系. 它说明 D 同 I 是相关的, 也说明 Mikhalov 规律基本是正确的. D 同 I 线性关系的斜率 κ 、截距 D_0^{exp} 及奇偶核的正负宇称带的 K 值以及 Simplex 量子数在表 1 中给出, 奇奇核的 s 量子数是尝试值.

从表 1 和图 2 可以看出 D 同 I 关系中的几个特点: 有些核的斜率很小, 例如 $^{221}\text{Ra}(s = +i)$, ^{223}Ac , ^{226}Th 等, 有些核的斜率很大, 例如

$^{223}\text{Th}(s = -i)$ 和 ^{224}Th 等, 对于斜率大的核, D 同 D_0 显著的不同; 有些核的斜率是负值, 即 D 随 I 的增加而减少, 如 ^{218}Ra , ^{220}Th 等; 对于奇偶核, $s = \pm i$ 的两个带的斜率和 D_0 都有显著的差异, 例如 $^{223}, ^{225}\text{Th}$ (目前, 理论计算还不能区分 $s = \pm i$ 的 D_0 , 这种差别对理论是有意义的); Ra 和 Th 的斜率同质量数 A 有明显的涨落, 特别是 Ra 的斜率. 这些都是值得研究的, 特别是负斜率.

3.2 理论的基本电偶极矩 D_0

锕系核 D_0 的 MMM、MFT 和 MDC 等理论计算的结果在表 2 中列出. MMM 的 D_0 中又分别列出了 D^{LD} 、 D^{NS} 、 D^{macro} 及 D^{shell} 值.

从表 2 可知, 液滴模型的电荷重分布项 D^{LD} 与中子皮项 D^{NS} 的符号总是相反的, 后者总是减少宏观项. 宏观项与壳修正项的符号可相同, 也可相反, ^{224}Ra 的 D_0 很小就是由于二者符号相反. 图 3 画出了 Ra 和 Th 的 MMM, MFT 的 D_0 绝对值及实验的

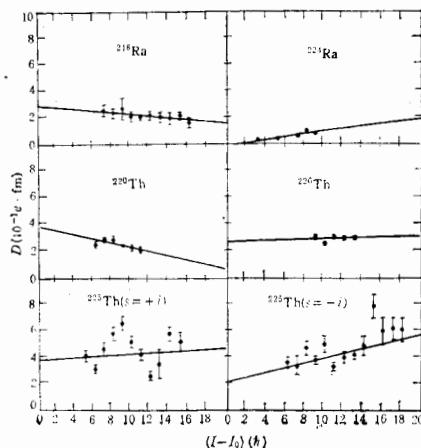


图 2 D 同 I 的关系

D_0^{exp} 同质量数 A 的关系。

表 1 D 同 I 线性关系的斜率 κ 及 D_0^{exp}

核	κ	D_0^{exp}	备注
^{216}Fr	0.042(33)	0.075(23)	
^{217}Fr	0.020(126)	0.138(121)	
^{221}Fr	-0.125(89)	0.104(9)	
^{223}Fr	0.260(22)	-0.011(3)	
^{217}Ra	0.026(85)	0.120(85)	$s = +i \quad K = 9/2$
^{218}Ra	-0.064(41)	0.291(51)	
^{219}Ra	0.056(17)	0.230(19)	$s = -i \quad K = 1/2$
^{220}Ra	0.102(24)	0.158(26)	
^{221}Ra	-0.011(31)	0.300(26)	$s = +i \quad K = 5/2$
	0.065(36)	0.253(28)	$s = -i \quad K = 5/2$
^{222}Ra	-0.138(23)	0.085(11)	
^{223}Ra	0.300(125)	0.040(33)	$s = -i \quad K = 3/2$
^{224}Ra	0.101(3)	-0.007(2)	
^{225}Ra	-0.202(74)	0.182(26)	$s = +i \quad K = 1/2$
^{226}Ra	0.133(78)	0.050(52)	
^{227}Ra	-0.510(186)	0.124(15)	$s = -i \quad K = 3/2$
^{219}Ac	0.729(42)	-0.327(26)	$s = +i \quad K = 1/2$
	-0.443(46)	0.631(34)	$s = -i \quad K = 1/2$
^{220}Ac	0.067(95)	0.276(109)	$(s = +1 \quad K = 1)^*$
	0.008(84)	0.320(92)	$(s = -1 \quad K = 1)^*$
^{223}Ac	-0.102(19)	0.024(4)	$s = -i \quad K = 5/2$
^{227}Ac	-0.010(14)	0.031(4)	$s = +i \quad K = 3/2$
^{220}Th	-0.159(41)	0.389(34)	
^{221}Th	-0.059(26)	0.408(23)	$s = -i \quad K = 1/2$
^{222}Th	-0.005(24)	0.375(29)	
^{223}Th	0.149(53)	0.296(42)	$s = +i \quad K = 5/2$
	0.532(71)	-0.050(46)	$s = -i \quad K = 5/2$
^{224}Th	0.500(112)	0.120(72)	
^{225}Th	0.045(43)	0.380(42)	$s = +i \quad K = 3/2$
	0.181(45)	0.219(50)	$s = -i \quad K = 3/2$
^{226}Th	0.020(32)	0.274(35)	

* 奇奇核的 s 量子数是尝试值

对于 Ra, 除 ^{221}Ra 和 ^{225}Ra 外, 无论数量还是变化规律, MMM 的 $|D_0|$ 与实验值相当吻合。对于 Th 元素, MMM 的 $|D_0|$ 与实验值的一致性不如 Ra 好, 特别是 ^{224}Th 明显的低于 MMM 的 $|D_0|$, 在偶偶核中, 它是极小值。理论上有待进一步研究, 特别是实验上有待丰富 ^{224}Th 的 E1 和 E2 跃迁数据。

Egidio 和 Robledo 的 MFT 的 D_0 随 A 的变化与 MMM 的一致, 但数值上系统地偏高, 除少数核很好符合外, 是实验值的两倍。与 MMM 的计算相比, 高的原因可能是 MFT 计算中只约束八极形变参数 β_3 , 为此得到的 β_2 和 β_4 等参数明显地高于 Butler

的,以致于 D^{macro} 显著地大,正如前面 2.2 中谈到的, β_2 、 β_3 、 β_4 对 D 的计算起重要的作用,它说明了在 MFT 计算中约束高多极形变参数可能是必要的。准确计算形变参数仍然是重要的。

表 2 MMM、MDC 和 MFT 等理论计算的 D_0

核	D_0 (MMM)					D_0 (MDC)	D_0 (MFT)
	L. D.	N. S.	Macro	Shell	D_0		
^{216}Ra	0.29	-0.20	0.09	0.16	0.25	3.50	0.31
^{219}Ra	0.30	-0.22	0.08	0.10	0.18	3.57	
^{220}Ra	0.35	-0.26	0.09	0.08	0.17	3.64	0.40
^{221}Ra	0.38	-0.28	0.11	0.02	0.13	3.71	
^{222}Ra	0.39	-0.28	0.12	-0.03	0.09	3.78	0.19
^{223}Ra	0.41	-0.28	0.13	-0.10	0.03	3.85	
^{224}Ra	0.42	-0.28	0.14	-0.13	0.01	3.92	-0.05
^{225}Ra	0.43	-0.29	0.14	-0.20	-0.06	3.99	
^{226}Ra	0.44	-0.28	0.15	-0.24	-0.09	4.06	-0.30
^{227}Ra	0.41	-0.26	0.15	-0.22	-0.07	4.13	
^{228}Ra							-0.40
^{223}Ac	0.40	-0.26	0.14	0.08	0.22	3.69	
^{227}Ac	0.41	-0.26	0.15	-0.15	0.00	3.96	
^{220}Th	0.29	-0.18	0.11	0.23	0.34	3.31	
^{221}Th	0.32	-0.21	0.11	0.20	0.31	3.38	
^{222}Th	0.36	-0.23	0.13	0.17	0.30	3.45	0.56
^{223}Th	0.41	-0.25	0.16	0.14	0.29	3.52	
^{224}Th	0.43	-0.27	0.17	0.10	0.27	3.59	0.49
^{225}Th	0.45	-0.27	0.18	0.04	0.22	3.66	
^{226}Th	0.45	-0.27	0.17	-0.01	0.16	3.73	0.29

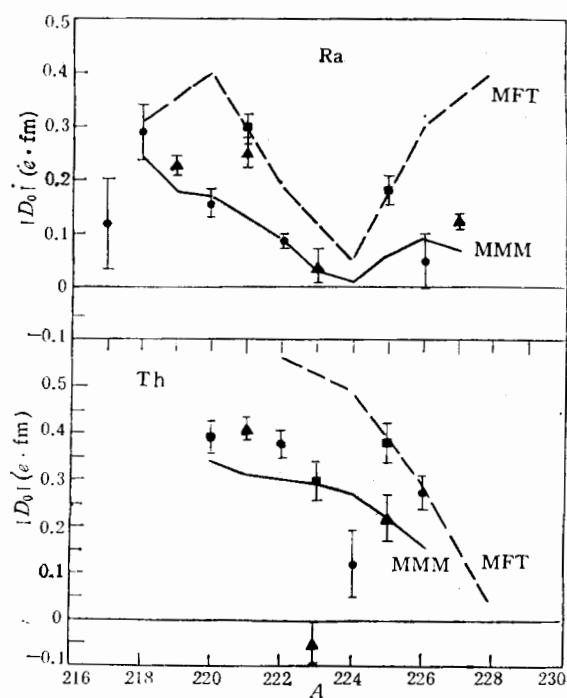
α 分子偶极集团模型计算的 D_0 高于实验值一个数量级, 它说明在锕系核的基本波函数中 α 分子偶极集团的幅度 η 小于 10%。

4 结 论

无论理论和实验电偶极矩 D 同角动量 I 都近似满足线性关系, 说明了 Coriolis 力和离心力对 D 的作用。

用实验高角动量的 D 与理论 $|D_0|$ 相比不能很好地验证理论的可靠性, 见参考文献 [8] 中的图 4。例如, 在这个图内 Ra 元素实验的 D 与理论的 $|D_0|$ 有明显的差异; 对于 Th, 理论上没有预言 ^{224}Th 的 D_0 呈极小值等。通过实验的 D 同 I 的关系, 找到 D_0^{exp} , 再与理论 $|D_0|$ 比较能够确切地表明理论的可靠性及适用性。

Butler 和 Nazarewicz 用小液滴模型引入中子皮项, 及考虑高多极形变参数计算 D^{macro} 是合适的。他们的结果极好地符合 Ra 的 D_0^{exp} , 但与 Th 的有差异。理论和实

图3 $|D_0|$ 同质量数 A 的关系

● 偶偶核; 奇偶核, ■ $s = +i$, ▲ $s = -i$.

验上,都有待进一步研究 ^{224}Th 的 D_0 极小值。

Egido 和 Robledo 的 MFT 计算也是成功的,但系统地偏高。在 MFT 中考虑高多极形变参数的约束是必要的。从他们文章的图 3 中 β_4 同八极矩 q_3 的关系可见, β_3, β_4 等明显地高于 Butler 文章中的 β_3 和 β_4 。

参 考 文 献

- [1] A. Bohr, B. R. Mottelson, *Nucl. Structure*, 2 (1975) 16.
- [2] M. Dahlinger et al., *Nucl. Phys.*, **A484** (1988) 337.
- [3] J. R. Hughes et al., *Nucl. Phys.*, **A512** (1990) 275.
- [4] A. Bohr, B. R. Mottelson, *Nucl. Structure*, 2(1975) 60.
- [5] V. M. Strutinsky, *Atomnaya Energiya*, (1956) 150; *J. Nucl. Energy*, **4** (1957) 523.
- [6] A. Bohr, B. R. Mottelson, *Nucl. Phys.*, **9** (1959) 687.
- [7] G. A. Leander, AIP conf. Proc., 125 (American Institute of Physics, New York 1985) p125.
- [8] P. A. Butler, W. Nazarewicz, *Nucl. Phys.*, **A533** (1991) 249.
- [9] G. A. Leander, "Nucl. Structure", editors R. Broglia et al., (Elsevier Science Publishers B. V. 1985) p248.
- [10] J. L. Egido, L. M. Robledo, *Nucl. Phys.*, **A494** (1989) 85.
- [11] F. Iachello, *Phys. Lett.*, **B160** (1985) 1.

Electric Dipole Moments of Actinide Region

Shi Zongren Wan Shuying

(Institute of Atomic Energy, Beijing 102413)

Received 23 December 1993

Abstract

Theoretically and experimentally, the relation between electric dipole moment D and rotation angular momentum I is linear approximately. It shows the effects to D from Coriolis and centrifugal force. Therefore, the experimental ground state electric dipole moment D_0^{exp} of 31 actinide nuclei have been obtained and compared with the theoretical D_0 calculated by macro-micro method, mean-field theory and α -molecular dipole cluster model.

Key words actinide nuclei, electric dipole moment, angular momentum, macro-micro method, mean-field theory, molecular dipole cluster model.