

一次一个铁原子

原文作者：

彼得·施韦特费格尔（Peter Schwerdtfeger），新西兰梅西大学。



第114号元素似乎触手可及，但是施韦特费格尔提醒到：它与同族更轻的元素相比是如此不同，所以在这个年轻的元素上发现出乎意料性质的性质应当是预料之中的。

元素周期表中最后的天然元素是钷。钷的半衰期与地球的年龄相当，人们只在氟碳铈矿中发现过微量的钷。第94号元素钷之后的所有元素都是在世界上的少数几个实验室中通过核融合反应得到的，最近的发现主要来自正在进行的杜布纳-利弗莫尔实验室的合作，他们于2004年发现了钷。

在重离子回旋加速器中，使用钙-48离子束轰击钷或镅的几种同位素靶标，就能通过核融合反应得到了质量数从286到289的四种第114号元素的同位素。2011年，国际纯粹与应用化学联合会同意使用杜布纳的弗廖罗夫核反应实验室的名字为第114号元素命名，该实验室以其创始人弗廖罗夫的名字命名，他是俄罗斯著名的核物理学家和自发裂变的共同发现者。钷在周期表中是第14族的最后一名成员，从碳开始的这一族元素过去到铅就结束了。

这个奇特的超重元素具有如此高的核电荷数，以至于需要花费好几个月的核融合反应来一个一个地得到这种原子。和钷数以秒计的半衰期比起来，几个月实在是太长的一段时间了。钷在好几个方面令人感到兴奋，特别是它可以帮助我们了解在高质子极限情况下的核物质。钷还能帮助我们探索在特定的质子和中子数范围内存在高核稳定性同位素的稳定岛理论。

原子核由质子和中子的壳层组成，它们非常像化学理论中我们熟悉的电子壳层。一个完全填满的壳层所含有的中子数和质子数会是所谓的“幻数”，这将赋予元素特别的稳定性。四十多年来，人们预测壳层闭合会发生在质子数为114和中子数为184时。然而，尽管在很久以前大多数科学家就壳层闭合的中子数达成了一致，但壳层闭合的质子数很大程度上取决于预测中使用的核结构模型。

不同于电子结构，核子之间的强相互作用是难以精确建模的，预测的壳层闭合质子数还有120、122甚至126。因此，完善这些核结构模型需要对超重元素的放射性衰变特性进行精确测量。目前已获得的中子数最多的钷的同位素是钷-289，含有114个质子和175个中子，但仍差9个中子才达到中子壳层闭合数，而获得钷-298的方法目前仍不明确。

秒级的核衰变时间足以完成超重元素单原子的化学反应。为了设计这样属于目前化学技术最前沿的实验，需要了解一些超重元素的化

学性质。通过使用现代相对论量子化学方法，替代了薛定谔方程的狄拉克方程为我们提供了一个理想的探究铁反应活性的工具。

已故的肯尼斯·皮策（Kenneth Pitzer）教授早在1975年就指出，强相对论效应可能导致第114号元素电子壳层闭合。大的自旋-轨道耦合作用能使 $7p_{1/2}$ 与 $7p_{3/2}$ 壳层分离（高于300 kJ/mol），而铁就拥有 $7s^2(7p_{1/2})^2$ 封闭壳体结构。因此，预测认为铁是容易挥发并且具有化学惰性的。皮策甚至认为第114号元素在室温下可能是气体，与其第14族更轻的同类铅或锡不同。

然而，块体物质的现象并不总是能够基于简单的原子性质推测出来的。我们小组最近的固态计算得到了一些令人吃惊的结果。在大块金属铁中原子间只有弱键，小于汞，但大于氫（内聚能分别为50、75 kJ/mol和16 kJ/mol）。这表明铁在室温下很可能和汞一样是金属液体。此外，由于相对论效应而稳定的铁的7s轨道可能具有化学惰性。

格格勒及其同事研究了在金表面上的第112号元素镅和第114号元素铁的吸附情况。到目前为止，只有三个吸附事件可被认为与铁原子有关，这表明第114号元素的行为更像是一种具有金属性的惰性气体。然而，这一结果还没有定论，确认实验正在进行中。铁到底能发生什么样的化学反应呢？让我们期待不可预料的新化学产生吧！