

TÍNH TOÁN PHỔ NĂNG LƯỢNG CHO NGUYÊN TỐ SIÊU NẶNG E113 I VÀ E114 II

ĐINH THỊ HẠNH*, THIỀU THỊ HƯỜNG**

TÓM TẮT

Trong bài báo này, chúng tôi trình bày phổ năng lượng của nguyên tố siêu nặng E113 I và E114 II. Phương pháp Hatree-Fock tương đối tính kết hợp với những hiệu chỉnh đã được bao gồm trong tất cả các bậc của tương tác Coulomb sử dụng giản đồ Feynman và phương pháp thế. Sự tương tác Breit và bổ chính điện động lực học lượng tử đã được xem xét. Những tính toán tương tự cho Tl I, Pb II, Bi III đã sử dụng để kiểm soát độ chính xác của việc tính toán.

Từ khóa: phổ năng lượng, nguyên tố siêu nặng.

ABSTRACT

Calculating the spectra of superheavy elements E113 I and E114 II

The energy levels of the superheavy elements E113 I and E114 II are presented in this article. Dominating correlation corrections beyond the relativistic Hatree-Fock method are included in all orders in the Coulomb interaction using the Feynman diagram technique and the correlation potential method. The Breit interaction and quantum electrodynamics radiative corrections are employed. Similar calculations for Tl I, Pb II, Bi III are used to gauge the accuracy of the calculations.

Keywords: energy level, superheavy element.

1. Giới thiệu

Tìm hiểu về nguyên tố siêu nặng đang là hướng nghiên cứu thú vị của các nhà khoa học nhằm bổ sung sự hiểu biết của chúng ta trong vùng $Z=104$ đến $Z=126$. Ngoại trừ nguyên tố có số proton $Z=117$, những nguyên tố có số proton từ $Z=104$ đến 118 đã được tổng hợp [6, 9]. Ngoài ra các bằng chứng cho thấy sự tồn tại của nguyên tố $Z=122$ trong thiên nhiên đã được phát hiện và báo cáo trong công trình [7]. Cho đến nay, có nhiều nghiên cứu thực nghiệm về hướng này liên quan đến việc đo đạc các mức năng lượng cũng như khảo sát tính chất hóa học của các nguyên tố siêu nặng [10]. Tuy nhiên, tính toán lý thuyết các đặc trưng vật lý cho nguyên tố siêu nặng vẫn đang là một hướng nghiên cứu đòi hỏi nhiều nỗ lực, trong đó có việc tìm hiểu phương pháp tính phổ năng lượng.

Trong những công trình trước, chúng tôi đã tính toán các mức năng lượng của một số nguyên tố siêu nặng [2, 3, 4]. Trong công trình này, chúng tôi tiếp tục tính toán phổ năng lượng của nguyên tố siêu nặng E113 I và E114 II.

* TS, Trường Đại học Sư phạm TPHCM; Email: hanhdt@hcmup.edu.vn

** HVCH, Trường Đại học Sư phạm TPHCM

Bài báo được chia làm bốn phần. Phần một: giới thiệu, trong phần hai chúng tôi sẽ trình bày phương pháp Hartree-Fock tương đối tính (RHF) kết hợp với những hiệu chỉnh đã được bao gồm trong tất cả các bậc của tương tác Coulomb sử dụng giản đồ Feynman và phương pháp thế. Chúng tôi cũng trình bày sự tương tác Breit và bổ chính điện động lực học lượng tử. Phần ba: trình bày các kết quả tính toán được cùng với việc so sánh với thực nghiệm. Phần cuối, chúng tôi đưa ra kết luận về những kết quả đã đạt được.

2. Phương pháp tính phổ năng lượng

Chúng tôi trình bày phương pháp tính phổ năng lượng cho các nguyên tố TI I, Pb II, Bi III và so sánh với thực nghiệm để kiểm soát độ chính xác của phép tính, sau đó áp dụng cho nguyên tố siêu nặng E113 I và E114 II.

Bước đầu chúng tôi sử dụng phương pháp RHF để tính bộ quỹ đạo một electron. Phương trình có dạng:

$$h_0 \psi_o = \hat{h}_0 \psi_o \quad (1)$$

ở đây h_0 là Hamiltonian của Hartree-Fock tương đối tính

$$h_0 = c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + (\beta - 1)mc^2 - \frac{Ze^2}{r} + V^{N-1} \quad (2)$$

với $V^{N-1} = V_{\text{dir}} + V_{\text{exch}}$ là tổng của thế Hartree-Fock (HF) trực tiếp và trao đổi. N là số electron, $N-1$ là số electron trong lõi và Z là điện tích hạt nhân.

Để tăng độ chính xác của phương pháp tính, chúng tôi đã đưa vào các bổ chính: sự tương quan, tương tác Breit và bổ chính điện động lực học lượng tử.

2.1. Sự tương quan

Ở đây toán tử thế tương quan Σ được xây dựng sao cho giá trị trung bình của các electron hóa trị trùng với hiệu chỉnh tương quan đối với năng lượng $\delta\epsilon = \langle a | \Sigma | a \rangle$

Khi quỹ đạo của các hạt được tìm thấy trong thế HF, thì dựa vào lí thuyết nhiễu loạn cho hệ nhiều hạt mở rộng cho Σ bắt đầu từ gần đúng bậc 2 trong tương tác Coulomb, ta tính số hạng đặc trưng cho sự tương quan. Số hạng này được tính bằng tổng hữu hạn của các bộ số dựa trên phổ giả của mỗi hạt. Các bộ số này có thể tìm được từ ba giản đồ bậc cao trong thế tương quan bậc hai đó là: (a) che chắn tương tác Coulomb, (b) tương tác lỗ trống-hạt trong toán tử phân cực và (c) chuỗi của thế tương quan Σ .

Đặc biệt, (a) và (b) được xét trong giản đồ trực tiếp nhờ sử dụng kĩ thuật giản đồ Feynman. Đối với giản đồ trao đổi, chúng ta sử dụng các hệ số trong số hạng bậc hai để mô phỏng những ảnh hưởng của che chắn. Những thừa số này là: $f_0 = 0,62$, $f_1 = 0,60$, $f_2 = 0,85$, $f_3 = 0,89$, $f_4 = 0,95$, $f_5 = 0,97$, $f_6 = 1$, chỉ số dưới biểu thị tính đa cực của tương tác Coulomb. Những hệ số này đã được ước tính từ sự tính toán chính xác của bổ chính bậc cao. Chuỗi của thế tương quan (c) được xét đơn thuần bằng cách thêm Σ vào

thể HF. Năng lượng, cùng với sự tương quan được thêm vào lời giải của phương trình cho các electron hóa trị.

$$(h_o + \Sigma)\psi_a = \partial_a \psi_a \quad (3)$$

2.2. Tương tác Breit

Sử dụng toán tử Breit có dạng [1]:

$$h^B = -\frac{\boldsymbol{\alpha}_1 \cdot \boldsymbol{\alpha}_2 + (\boldsymbol{\alpha}_1 \cdot \mathbf{n})(\boldsymbol{\alpha}_2 \cdot \mathbf{n})}{2r} \quad (4)$$

ở đây $\mathbf{r} = \mathbf{n}r$, r là khoảng cách giữa các electron và $\boldsymbol{\alpha}$ là ma trận Dirac.

Tương tự với tương tác Coulomb, chúng ta xác định sự đóng góp tự hợp Hartree-Fock phát sinh từ Breit. Sự đóng góp này được tìm ra từ kết quả của phương trình (3.2) trong thể:

$$V^{N-1} = V^C + V^B \quad (5)$$

với V^C là thể Coulomb và V^B là thể Breit.

2.3. Bỏ chính điện động lực học lượng tử (sự dịch chuyển Lamb)

Bỏ chính điện động lực học lượng tử đối với năng lượng được tính bằng phương pháp thể phóng xạ được phát triển bởi Flambaum và Ginges [5].

Thể phóng xạ có dạng:

$$V_{rad}(r) = V_U(r) + V_g(r) + V_f(r) + V_l(r) \quad (6)$$

ở đây V_U là thể Uehling và V_g là thể phát sinh từ dạng hệ số từ.

$$V_U(r) = \frac{2\alpha}{3\pi} \Phi(r) \int_1^\infty dt \frac{\sqrt{t^2-1}}{t^2} \left(1 + \frac{1}{2t^2}\right) e^{-2trm}$$

$$V_g(r) = \frac{\alpha}{4\pi m} i\gamma \cdot \nabla \left[\Phi(r) \left(\int_1^\infty dt \frac{1}{t^2 \sqrt{t^2-1}} e^{-2trm} - 1 \right) \right]$$

Điện thể tương ứng với dạng hệ số điện được chia thành hai phần tần số thấp và cao:

$$V_l(r) = -\frac{B(Z)}{e} Z^4 \alpha^5 mc^2 e^{-\frac{Zr}{a_b}} \quad (7)$$

$$V_f(r) = -A(Z, r) \frac{\alpha}{\pi} V(r) \int_1^\infty dt \frac{1}{\sqrt{t^2-1}} \left\{ \left(1 - \frac{1}{2r^2}\right) \times \left[\ln(t^2-1) + 4 \ln\left(\frac{1}{Z\alpha} + 0,5\right) \right] - \frac{3}{2} + \frac{1}{t^2} \right\} e^{-2trm} \quad (8)$$

ở đây, $V(r)$ là thể hạt nhân. Hệ số $A(Z, r) = \frac{(1,071 - 1,976x^2 - 2,128x^3 + 0,169x^4)mr}{(mr + 0,07Z^2\alpha^2)}$

với $x = (Z - 80)\alpha$ và a_b là bán kính Borh.

Phương trình (7) và (8) được xác định một cách bán thực nghiệm bằng cách làm khớp đối với sự dịch chuyển Lamb ở trạng thái cao của ion tương tự hydro cho $Z=10$ -

100. Thế này được thêm vào thế HF, đối với các nguyên tố mà chúng ta đang xét thì thế bổ chính có dạng:

$$V^{N-1} \equiv V^{N-1} + V_{rad} \quad (9)$$

3. Kết quả

Chúng tôi đã tính toán các mức năng lượng cho những trạng thái s , $p_{1/2}$, $p_{3/2}$ và các kết quả được trình bày trong bảng 1. Chúng tôi trình bày cột RHF với kết quả tính bằng phương pháp gần đúng Hatree-Fock tương đối tính. Bên cạnh đó, cột Σ là kết quả khi chúng tôi kết hợp phương pháp gần đúng RHF với sự tương quan (bao gồm tất cả các bậc của tương tác Coulomb). Các chỉ số trong dấu ngoặc đơn chỉ tỉ lệ phần trăm độ sai lệch giữa giá trị tính toán so với thực nghiệm. Các dữ liệu ở cột thực nghiệm được lấy từ [8].

Như chúng ta đã thấy, kết quả cho Tl I là khá tốt với độ sai lệch từ 0,2 % đến 0,5 % khi so sánh với thực nghiệm, ngoại trừ trạng thái $6p_{1/2}$ (2,7 %) và $6p_{3/2}$ (2,3 %). Đối với Pb II độ sai lệch cao nhất là 1,2 % cho trạng thái $7s$, độ sai lệch thấp nhất là trạng thái $8s$ (0,1 %), các trạng thái còn lại từ 0,7 % đến 1 %. Tương tự, các kết quả cho Bi III với độ sai lệch từ 0,5 % đến 0,8 %, riêng trạng thái $8s$ và $9s$ độ sai lệch đều là 0,2 %.

Từ những kết quả đã đạt được cho Tl I, Pb II và Bi III, chúng tôi tiếp tục tính toán phổ năng lượng cho những nguyên tố siêu nặng E113 I và E114 II và kết quả cũng được trình bày trong bảng 1. Với các kết quả đã phân tích cho Tl I, Pb II và Bi III, chúng tôi dự đoán sai số cho những nguyên tố siêu nặng vào khoảng 1%.

Ngoài ra, gần đúng Breit được tính toán trong thế Breit-Hatree-Fock và kết quả được trình bày ở bảng 2. Kết quả của chúng tôi khi tính bổ chính điện động lực học lượng tử được trình bày trong bảng 3. Với gần đúng Breit và bổ chính điện động lực học lượng tử, kết quả cho Tl I, Pb II và Bi III đối với các trạng thái $7s$, $6p_{1/2}$ và $6p_{3/2}$ thì độ sai lệch đã giảm 0,2% so với chỉ tính Σ . Tuy nhiên, đối với các trạng thái còn lại thì sự đóng góp này là không đáng kể.

Bảng 1. Các mức năng lượng cho các trạng thái của Tl I, Pb II, Bi III, E113 I và E114 II. Các chỉ số trong dấu ngoặc đơn chỉ tỉ lệ phần trăm độ sai lệch giữa giá trị tính toán so với thực nghiệm.

Nguyên tử	Trạng thái	RHF	Σ	Thực nghiệm
Tl I	$7s$	21109	22846 (0,3)	22788
	$8s$	10040	10504 (0,2)	10520
	$9s$	5893	6088 (0,2)	6100
	$6p_{1/2}$	43823	50659 (2,7)	49266
	$7p_{1/2}$	14276	15023 (0,5)	15106
	$8p_{1/2}$	7599	7859 (0,5)	7898
	$6p_{3/2}$	36636	42450 (2,3)	41473
	$7p_{3/2}$	13357	14053 (0,4)	14105
	$8p_{3/2}$	7249	7497 (0,4)	7525

Pb II	$7s$	58728	62543 (1,2)	61796
	$8s$	30980	32108 (0,1)	32065
	$9s$	19246	19752 (0,7)	19899
	$6p_{1/2}$	114546	122498 (1,0)	121245
	$7p_{1/2}$	44847	46388 (0,9)	46786
	$8p_{1/2}$	25378	25962 (0,8)	26168
	$6p_{3/2}$	100787	108076 (0,8)	107164
	$7p_{3/2}$	42277	43647 (0,7)	43972
Bi III	$8p_{3/2}$	24296	24826 (0,7)	25007
	$7s$	106968	110535 (0,5)	111105
	$8s$	59632	60820 (0,2)	60953
	$9s$	38239	38798 (0,2)	38891
	$6p_{1/2}$	198738	207467 (0,6)	206180
	$7p_{1/2}$	86268	88481 (0,8)	89187
	$8p_{1/2}$	50685	51569 (0,8)	51982
	$6p_{3/2}$	178083	186286 (0,5)	185392
E113 I	$7p_{3/2}$	81493	83444 (0,7)	84052
	$8p_{3/2}$	48552	49348 (0,8)	49759
	$8s$	22238	23962	
	$9s$	10399	10846	
	$10s$	6053	6238	
	$7p_{1/2}$	55267	61722	
	$8p_{1/2}$	15290	15945	
	$9p_{1/2}$	7968	8189	
E114 II	$7p_{3/2}$	31578	36637	
	$8p_{3/2}$	12589	13261	
	$9p_{3/2}$	6953	7195	
	$8s$	60964	63878	
	$9s$	31771	32657	
	$10s$	19621	20020	
	$7p_{1/2}$	131023	138591	
	$8p_{1/2}$	46918	48321	
E114 II	$9p_{1/2}$	26179	26700	
	$7p_{3/2}$	89891	96687	
	$8p_{3/2}$	39923	41148	
	$9p_{3/2}$	23274	23754	

Bảng 2. Các bổ chính đối với các mức năng lượng từ sự tính toán của tương tác Breit (BI), n là số lượng tử chính của trạng thái cơ bản. Đơn vị (cm^{-1})

Trạng thái	Tl I	Pb II	Bi III	E113 I	E114 II
$(n+1)s$	13	37	51	25	61
$(n+2)s$	4	12	22	7	22
$(n+3)s$	2	6	11	3	11
$np_{1/2}$	129	238	358	348	549
$(n+1)p_{1/2}$	15	47	89	30	86
$(n+2)p_{1/2}$	6	19	39	11	35
$np_{3/2}$	41	91	148	37	91
$(n+1)p_{3/2}$	7	22	43	7	25
$(n+2)p_{3/2}$	3	9	19	3	11

Bảng 3. Giá trị bổ chính phóng xạ (QED) đối với các mức năng lượng của Tl I, Pb II, Bi-III, E113 I và E114 II. Đơn vị cm^{-1}

Nguyên tử	Trạng thái	Giá trị bổ chính
Tl I	7s	19
	8s	6
	9s	3
Pb II	7s	53
	8s	18
	9s	9
Bi III	7s	69
	8s	28
	9s	16
E113 I	8s	33
	9s	10
	10s	4
E114 II	8s	75
	9s	27
	10s	13

4. Kết luận

Chúng tôi đã trình bày phương pháp và các kết quả tính toán phổ năng lượng cho các nguyên tố siêu nặng E113 I và E114 II với sai số được dự đoán khoảng 1%. Kết quả này có thể có ích cho thực nghiệm và việc nghiên cứu tính chất hóa học của hai nguyên tố này.

Ghi chú: Nghiên cứu này được tài trợ bởi Quỹ phát triển khoa học và công nghệ quốc gia (NAFOSTED) trong đề tài mã số “103.01-2013.38”.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. G. Briet (1932), “The starting point for this Hamiltonian is the Breit Hamiltonian” *Phys. Rev.* 34, 553 (1929); 36, 383 (1930); 39, 616.
2. T. H. Dinh, V. A. Dzuba, V. V. Flambaum and J. S. M. Ginges (2008), “Calculations of the spectra of superheavy elements $Z=119$ and $Z=120+$ ”, *Phys. Rev. A* 78, 022507.
3. T. H. Dinh, V. A. Dzuba, V. V. Flambaum and J. S. M. Ginges (2008), “Calculation of the spectrum of the superheavy element $Z=120$ ”, *Phys. Rev. A* 78, 054501.
4. T. H. Dinh, V. A. Dzuba and V. V. Flambaum (2008), “Calculation of the spectra for the superheavy element $Z=112$ ”, *Phys. Rev. A* 78, 062502.
5. V. V. Flambaum and J. S. M. Ginges (2005), “The radiative potential method for calculations of QED radiative corrections to energy levels and electromagnetic amplitudes in many-electron atoms”, *Phys. Rev. A* 72, 052115.
6. S. Hofmann and G. Munzenberg (2000), “*The discovery of the heaviest elements*”, *Rev. Mod. Phys.* 72, 733.
7. A. Marinov et al. (2010), “Evidence for the possible existence of a long-lived superheavy nucleus with atomic mass number $A = 292$ and atomic number $Z=122$ in natural Th”, *Int. J. Mod. Phys. E* 19, 131.
8. C. E. Moore (1958), “Atomic Energy Levels”, Natl. Bur. Stand. (U.S.) Circ. No. 467 (U.S. GPO, Washington, D.C., Vol. III).
9. Y. Oganessian (2006), “Synthesis and decay properties of the heaviest nuclei”, *Phys. Scr.* T125, 57.
10. M. Schadel (2006), “Chemistry of Superheavy Elements”, *Angew. Chem. Int. Ed.* 45, 368.

(Ngày Tòa soạn nhận được bài: 28-11-2014; ngày phản biện đánh giá: 26-12-2014;
ngày chấp nhận đăng: 12-02-2015)