

TÍNH TOÁN PHỔ NĂNG LƯỢNG CHO NGUYÊN TỐ SIÊU NẶNG $Z=114$

ĐINH THỊ HẠNH*, TRẦN THANH TÂM**

TÓM TẮT

Trong bài báo này, chúng tôi trình bày phổ năng lượng của nguyên tố siêu nặng $Z=114$ với độ chính xác khá cao. Phương pháp Hartree-Fock tương đối tính và tương tác cấu hình được kết hợp với lý thuyết nhiễu loạn cho hệ nhiều hạt để xây dựng hàm sóng nhiều electron cho những electron ngoài vỏ và bao gồm sự tương quan lõi-vỏ. Những tính toán tương tự cho thiếc và chì đã được sử dụng để kiểm soát độ chính xác của phép tính.

Từ khóa: phổ năng lượng, nguyên tố siêu nặng, lý thuyết nhiễu loạn cho hệ nhiều hạt, phương pháp Hartree-Fock tương đối tính.

ABSTRACT

Calculating the spectra of superheavy elements $Z=114$

High-precision calculations of the energy levels of the superheavy element $Z=114$ are presented in this article. Relativistic Hartree-Fock and configuration interaction methods are combined with the many-body perturbation theory to construct the many-electron wave function for valence electrons and to include core-valence correlations. Similar calculations for tin, lead are used to gauge the accuracy of the calculations.

Keywords: energy level, superheavy element, many-body perturbation theory, relativistic Hartree-Fock method.

1. Giới thiệu

Nghiên cứu nguyên tố siêu nặng là một trong những hướng 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 $Z=104$ đến 118 đã được tổng hợp [8, 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 [6]. 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 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, 5]. Trong công trình này, chúng tôi tiếp tục tính toán phổ năng lượng cho nguyên tố siêu nặng $Z=114$.

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

** HVCH, Trường Đại học Sư phạm TPHCM

Trong bài báo này, chúng tôi sẽ trình bày phương pháp tương tác cấu hình kết hợp với lý thuyết nhiễu loạn cho hệ nhiều hạt (MNPT), và trình bày các kết quả tính toán được cùng với việc so sánh với thực nghiệm. Cuối cùng, chúng tôi sẽ 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 thiếu, chì và so sánh với thực nghiệm để kiểm soát độ chính xác của phép tính, sau đó áp dụng cho nguyên tố siêu nặng $Z=114$.

Ở đây, chúng tôi sử dụng sự kết hợp phương pháp tương tác cấu hình (CI) với lý thuyết nhiễu loạn cho hệ nhiều hạt (MBPT) [3, 4]. Sự tính toán được thực hiện trong gần đúng V^{N-2} . [1]

Khi đó, Hamiltonian hiệu dụng của CI cho nguyên tử trung hòa có hai electron hóa trị có dạng:

$$\hat{H}^{\text{eff}} = \hat{h}_1(r_1) + \hat{h}_1(r_2) + \hat{h}_2(r_1, r_2). \quad (1)$$

Trong đó, $\hat{h}_1(r_i)$ là Hamiltonian của một electron hóa trị:

$$\hat{h}_1 = \hat{h}_o + \hat{\Sigma}_1, \quad (2)$$

với \hat{h}_o là Hamiltonian Hartree-Fock tương đối tính:

$$\hat{h}_o = c\alpha \cdot \mathbf{p} + (\beta - 1)mc^2 - \frac{Ze^2}{r} + V^{N-2}, \quad (3)$$

và $\hat{\Sigma}_1$ là toán tử thể tương quan đặc trưng cho tương tác của các electron hóa trị với lõi.

Sự tương tác giữa các electron hóa trị được tính bằng tổng của tương tác Coulomb và toán tử bổ chính tương quan $\hat{\Sigma}_2$:

$$\hat{h}_2 = \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} + \hat{\Sigma}_2(r_1, r_2), \quad (4)$$

ở đây $\hat{\Sigma}_2$ đặc trưng cho sự che chắn tương tác Coulomb giữa các electron hóa trị bởi các electron bên trong lõi.

Hàm sóng hai electron cho những electron hóa trị có dạng tổng quát như sau:

$$\psi = \sum_i c_i \Phi_i(r_1, r_2). \quad (5)$$

Trong đó Φ_i được xây dựng từ trạng thái cơ bản của electron hóa trị đã tính trong thể V^{N-2}

$$\Phi_i(r_1, r_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_a(r_1)\psi_b(r_2) - \psi_b(r_1)\psi_a(r_2)], \quad (6)$$

với ψ_a là hàm riêng của Hamiltonian Hartree-Fock (3).

Hệ số c_i cũng như năng lượng của hai electron được tìm ra từ kết quả bài toán trị riêng của ma trận

$$(H^{\text{eff}} - E)X = 0, \quad (7)$$

ở đây $H_{ij}^{\text{eff}} = \langle \Phi_i | \hat{H}^{\text{eff}} | \Phi_j \rangle$ và $X = \{c_1, c_2, \dots, c_n\}$.

Phần phức tạp nhất của việc tính toán là tính toán tử thế tương quan $\hat{\Sigma}_1$ và $\hat{\Sigma}_2$. Chúng tôi sử dụng MBPT và kĩ thuật giản đồ Feynman để tính toán tử tương quan $\hat{\Sigma}_1$ và $\hat{\Sigma}_2$ [3, 4]. Lí thuyết nhiễu loạn cho hệ nhiều hạt mở rộng cho việc hiệu chỉnh toán tử tương quan $\hat{\Sigma}$ bắt đầu từ gần đúng bậc hai trong tương tác Coulomb. Việc bao gồm gần đúng bậc hai của toán tử tương quan $\hat{\Sigma}_1^{(2)}$, $\hat{\Sigma}_2^{(2)}$ trong Hamiltonian hiệu dụng (1) tính toán cho hầu hết tương quan lõi và vỏ. Tuy nhiên, để làm tăng độ chính xác của phép tính, chúng tôi sử dụng kĩ thuật giản đồ Feynman để xét những đóng góp của tương quan bậc cao đối với $\hat{\Sigma}_1$ tương ứng với phần tương tác trực tiếp, phần tương tác trao đổi được tính gần đúng bằng cách đưa vào hệ số che chắn f_k (bảng 1). Thế tương quan $\hat{\Sigma}_2$ cũng với cách làm tương tự như phần tương tác trao đổi của $\hat{\Sigma}_1$. Tuy nhiên, các giá trị của hệ số f_k ở đây có khác (bảng 1). Các hệ số này được tìm thấy bằng việc so sánh $\hat{\Sigma}_1$ trong gần đúng bậc hai và tất cả các bậc với cả hai sự che chắn và tương tác hạt-lỗ trống được bao gồm.

Bảng 1. Hệ số f_k đối với các tương quan bậc cao được đưa vào $\hat{\Sigma}_1$ và $\hat{\Sigma}_2$ như là hàm số phụ thuộc vào tính đa cực k của tương tác Coulomb

k	0	1	2	3	4	5	6
Σ_1^{exch}	0.62	0.60	0.85	0.89	0.95	0.97	1.00
Σ_2	0.90	0.72	0.98	1.00	1.02	1.02	1.00

3. Kết quả

Kết quả tính toán của chúng tôi cho Sn, Pb và nguyên tố siêu nặng $Z=114$ được trình bày trong bảng 2. Chúng tôi trình bày cột CI với kết quả tính bằng phương pháp CI kết hợp với MBPT. Bên cạnh đó, cột $\hat{\Sigma}^{(2)}$ là kết quả khi chúng tôi có tính đến thế tương quan bậc hai, cột $\hat{\Sigma}$ thể hiện kết quả khi xét đến tương quan bậc cao. 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 [7].

Như chúng ta thấy trong bảng 2, kết quả cho hai nguyên tố thiếc và chì khi tính bằng phương pháp CI thì độ sai lệch khá cao so với thực nghiệm (vào khoảng 10%).

Khi xét đến thể tương quan bậc hai thì kết quả đã được cải thiện, độ sai lệch giảm đi. Ví dụ như với thiếc, độ sai lệch cao nhất là 4,4% ở trạng thái $5p6p$ ($J = 0$) và thấp nhất là 1,5% ứng với trạng thái $5p^2$ ($J=1$); đối với chì, độ sai lệch vào khoảng 4% cho tất cả các cấu hình ngoại trừ cấu hình $6p^2$ ($J=1$) có độ sai lệch chỉ 0,1% khi so sánh với thực nghiệm. Ngoài ra, khi chúng tôi tính đến tương quan cho tất cả các bậc thì độ chính xác so với thực nghiệm được tăng lên. Đặc biệt với chì, sự sai lệch chỉ còn 0,3% và 0,4% cho hai cấu hình $6p7s$ ($J = 0$) và $6p7s$ ($J = 1$). Những cấu hình còn lại như $6p^2$ ($J=2$), $6p7p$ ($J = 0, 1$) sự sai lệch cũng vào khoảng 1%.

Từ những kết quả đã đạt được cho Sn và Pb, chúng tôi tiếp tục tính toán phổ năng lượng cho nguyên tố siêu nặng có $Z=114$ và kết quả được trình bày trong bảng 2. Với các kết quả đã phân tích cho Sn và Pb, chúng tôi dự đoán sai số cho nguyên tố $Z=114$ vào khoảng 1%.

Bảng 2. Các mức năng lượng cho các cấu hình của Sn, Pb và nguyên tố $Z=114$. Các chỉ số trong dấu ngoặc đơn chỉ tỉ lệ phần trăm độ sai lệch giữa giá trị tính toán so với thực nghiệm. Đơn vị: cm^{-1} .

Nguyên tử	Cấu hình	J	CI	$\Sigma^{(2)}$	Σ	Thực nghiệm
Sn	$5p^2$	0	0	0	0	0
	$5p^2$	1	1560 (7.8)	1717 (1,5)	1691 (0,1)	1692
	$5p^2$	2	3292 (4.0)	3588 (4,5)	3495 (2,0)	3428
	$5p6s$	0	30970 (10.6)	36064 (4,0)	35235 (1,7)	34641
	$5p6s$	1	31243 (10.5)	36369 (4,0)	35561 (1,8)	34914
	$5p6s$	2	34827 (9.8)	40192 (3,9)	39333 (1,8)	38629
	$5p6p$	1	37874 (10.6)	44120 (4,0)	43402 (2,4)	42342
	$5p6p$	0	39186 (9.8)	45446 (4,4)	44707 (2,9)	43430
Pb	$6p^2$	0	0	0	0	0
	$6p^2$	1	7382 (5.6)	7812 (0,1)	7841 (0,3)	7819
	$6p^2$	2	10414 (2.2)	11046 (3,5)	10810 (1,5)	10650
	$6p7s$	0	31207 (10.7)	35483 (4,2)	35052 (0,3)	34960
	$6p7s$	1	31526 (10.7)	36840 (4,2)	35442 (0,4)	35287
	$6p7p$	1	38351 (10.6)	44883 (4,4)	43634 (1,6)	42919
	$6p7p$	0	39702 (10.6)	46241 (4,0)	45146 (1,7)	44401
	$6p7s$	2	44201 (8.3)	49991 (3,6)	48661 (1,0)	48189
E114	$7p^2$	0	0	0	0	
	$7p^2$	1	27905	27121	29005	
	$7p^2$	2	30526	30075	31866	
	$7p8s$	0	41493	45879	46288	
	$7p8s$	1	41808	46255	46626	
	$7p8p$	1	48714	54668	54385	
	$7p8p$	0	59708	55738	55398	
	$7p8p$	2	52150	57963	57744	

4. Kết luận

Chúng tôi đã trình bày phương pháp và các kết quả tính toán phổ năng lượng cho các nguyên tố Sn, Pb và nguyên tố siêu nặng $Z=114$. Đối với nguyên tố $Z=114$, độ sai số được dự đoán khoảng 1%. Kết quả tính toán này có thể có ích cho thực nghiệm và việc nghiên cứu tính chất hóa học của 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. V. A. Dzuba (2005), “ V^{N-M} approximation for atomic calculations”, *Phys. Rev. A* **71**, 032512.
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. Đinh Thị Hạnh, Thiều Thị Hương (2015), “Tính toán phổ năng lượng cho nguyên tố siêu nặng E113 I và E114 II”, *Tạp chí Đại học Sư phạm TP HCM*, (67), tr. 50-56.
6. 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.
7. C. E. Moore, “Atomic Energy Levels”, *Natl. Bur. Stand. (U.S.) Circ. No. 467* (U.S. GPO, Washington, D.C., 1958), Vol. III.
8. S. Hofmann and G. Munzenberg (2000), “The discovery of the heaviest elements”, *Rev. Mod. Phys.* **72**, 733.
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: 21-10-2015; ngày phản biện đánh giá: 05-11-2015;
ngày chấp nhận đăng: 22-12-2015)