

TRƯỜNG ĐẠI HỌC VINH  
TẠP CHÍ KHOA HỌC  
Tập 46, Số 2A, 2017

VINH UNIVERSITY  
JOURNAL OF SCIENCE  
Vol. 46, No. 2A, 2017

*Tổng biên tập*  
TS. Đinh Phan Khôi

*Editor-in-Chief*  
Dinh Phan Khoi, PhD.

HỘI ĐỒNG BIÊN TẬP

EDITORIAL BOARD

*Chủ tịch*  
GS.TS. Đinh Xuân Khoa  
*Thư ký tòa soạn*  
TS. Đinh Đức Tài

*Chairman*  
Prof. Dinh Xuan Khoa, PhD.  
*Secretary of the Journal*  
Dinh Duc Tai, PhD.

*Các Ủy viên*  
TS. Mai Văn Chung  
TS. Lê Thế Cường  
PGS.TS. Đinh Trí Dũng  
PGS.TS. Phan Huy Dũng  
PGS.TS. Nguyễn Thị Bích Hiền  
PGS.TS. Nguyễn Thị Quỳnh Hoa  
PGS.TS. Phạm Minh Hùng  
TS. Thái Đức Kiên  
TS. Nguyễn Hoài Nguyên  
PGS.TS. Nguyễn Đình Nham  
PGS.TS. Nguyễn Thị Nhi  
TS. Nguyễn Thị Minh Phương  
PGS.TS. Trần Việt Quang  
TS. Phạm Thị Huyền Sang  
TS. Trần Xuân Sang  
TS. Nguyễn Thị Trang Thanh  
PGS.TS. Lê Văn Thành  
PGS.TS. Nguyễn Chiến Thắng  
GS.TS. Trần Đình Thắng  
PGS.TS. Trần Việt Thu  
TS. Bùi Đình Thuận  
TS. Trần Thị Ngọc Yến

*Members*  
Mai Van Chung, PhD.  
Le The Cuong, PhD.  
Assoc.Prof. Dinh Tri Dung, PhD.  
Assoc.Prof. Phan Huy Dung, PhD.  
Assoc.Prof. Nguyen Thi Bich Hien, PhD.  
Assoc.Prof. Nguyen Thi Quynh Hoa, PhD.  
Assoc.Prof. Pham Minh Hung, PhD.  
Thai Duc Kien, PhD.  
Nguyen Hoai Nguyen, PhD.  
Assoc.Prof. Nguyen Dinh Nham, PhD.  
Assoc.Prof. Nguyen Thi Nhi, PhD.  
Nguyen Thi Minh Phuong, PhD.  
Assoc.Prof. Tran Viet Quang, PhD.  
Pham Thi Huyen Sang, PhD.  
Tran Xuan Sang, PhD.  
Nguyen Thi Trang Thanh, PhD.  
Assoc.Prof. Le Van Thanh, PhD.  
Assoc.Prof. Nguyen Chien Thang, PhD.  
Prof. Tran Dinh Thang, PhD.  
Assoc.Prof. Tran Viet Thu, PhD.  
Bui Dinh Thuan, PhD.  
Tran Thi Ngoc Yen, PhD.

Xuất bản theo giấy phép hoạt động báo chí số 211/GP-BVHTT ngày 15 tháng 7 năm 2003 của Bộ Văn hóa - Thông tin. In 300 bản tại Công ty TNHH In Hòa Nhơn. Nộp lưu chiểu tháng 10/2017. Địa chỉ liên hệ: Phòng Khoa học và Hợp tác quốc tế, Trường Đại học Vinh 182 Lê Duẩn, TP. Vinh, tỉnh Nghệ An. Điện thoại: 0238.3856700, Fax: 0238.3855269 E-mail: tckh@vinhuni.edu.vn.

## MỤC LỤC

	trang
1. Lê Văn An, Nguyễn Thị Hải Anh, Nguyễn Thị Thu Hằng, Một số tính chất liên đồ thị ước của không của vành $Z_{2n}$ .....	5
2. Nguyễn Tuấn Anh, Lâm Trung Hiếu, Tạ Trâm Anh, Lê Văn Đoàn, Điều kiện vận tốc nhóm ánh sáng dựa trên hiệu ứng trong suốt cảm ứng điện từ trong môi trường nguyên tử $^{87}\text{Rb}$ ba mức.....	21
3. Vũ Thị Ngọc Ánh, Nguyễn Thị Thủy, Điều kiện hội tụ đầy đủ theo trung bình của năng hai chỉ số các phần tử ngẫu nhiên độc lập nhận giá trị trong không gian Banach.....	31
4. Nguyễn Tiến Dũng, Xác định đường thế năng hiệu dụng cho trạng thái $2^1S$ của NaLi.....	43
5. Lê Thanh Hải, Nguyễn Trọng Hà, Nguyễn Hữu Cường, Phân tích độ tin cậy của dân thập không gian với biến số đầu vào ngẫu nhiên.....	50
6. Lê Thế Tâm, Nguyễn Hoa Du, Lê Thị Hồng Nhung, Dương Thị Ngọc Hằng, Phan Thị Dung, Ngô Minh Đức, Trần Thị Phương Thư, Đặc tính hệ hạt nano $\text{CoFe}_2\text{O}_4$ chế tạo bằng phương pháp thủy nhiệt và đồng kết tủa.....	58
7. Nguyễn Thị Thắm, Phạm Kim Ngọc, Nguyễn Thị Minh Nguyệt, Đồng Thị Anh Đào, Khả năng kháng khuẩn và chống oxy hóa của dịch chiết củ cải trắng ( <i>Raphanus sativus</i> L.).....	66
8. Nguyễn Văn Thịnh, Phương pháp tính toán động học hệ truyền động điện tự động số và mô phỏng trên máy tính.....	73
9. Nguyễn Lê Trâm, Định lí kiểu Bernstein trong $R^d_2$ với định thức Jacobi bị chặn.....	80

## XÁC ĐỊNH ĐƯỜNG THỂ NĂNG HIỆU DỤNG CHO TRẠNG THÁI $2^1\Pi$ CỦA NaLi

Nguyễn Tiến Dũng  
Trường Đại học Vinh

Ngày nhận bài 24/7/2017, ngày nhận đăng 02/10/2017

**Tóm tắt:** Trong bài báo này, dựa trên đường thể năng IPA với độ lệch quân phương không thứ nguyên  $\sigma = 0,29$  chúng tôi xác định được đường thể năng hiệu dụng của phân tử NaLi ở trạng thái điện tử  $2^1\Pi$ . Các kết quả thu được hoàn toàn phù hợp với dự đoán của các công trình nghiên cứu lý thuyết.

### 1. Giới thiệu

Trong phổ học phân tử hai nguyên tử, mỗi trạng thái điện tử được đặc trưng bởi đường thể năng tương tác giữa hai nguyên tử. Khi biết được tập hợp các đường thể năng này thì tần số, cường độ phổ của các dịch chuyển giữa các trạng thái điện tử (bao gồm cả các dịch chuyển dao động và dịch chuyển quay của phân tử) và năng lượng phân tử có thể được xác định. Cường độ dịch chuyển phổ cho biết thông tin về mômen lưỡng cực điện, do đó cho phép xác định các tính chất điện tử của phân tử. Đường thể năng còn cho phép xác định được những miền khoảng cách giữa các nguyên tử mà ở đó liên kết liên kết Van der Waals cảm ứng đóng vai trò chủ yếu. Xác định được đường thể năng của phân tử ở các trạng thái kích thích cho phép xác định các “kênh” dịch chuyển trong phân tử, giúp chúng ta giải thích được các quá trình sinh hóa, động học của phân tử. Vì vậy, một vấn đề quan trọng để thực hiện được điều này là phải biết được chính xác đường thể năng của các trạng thái kích thích để tìm biện pháp tối ưu nhất.

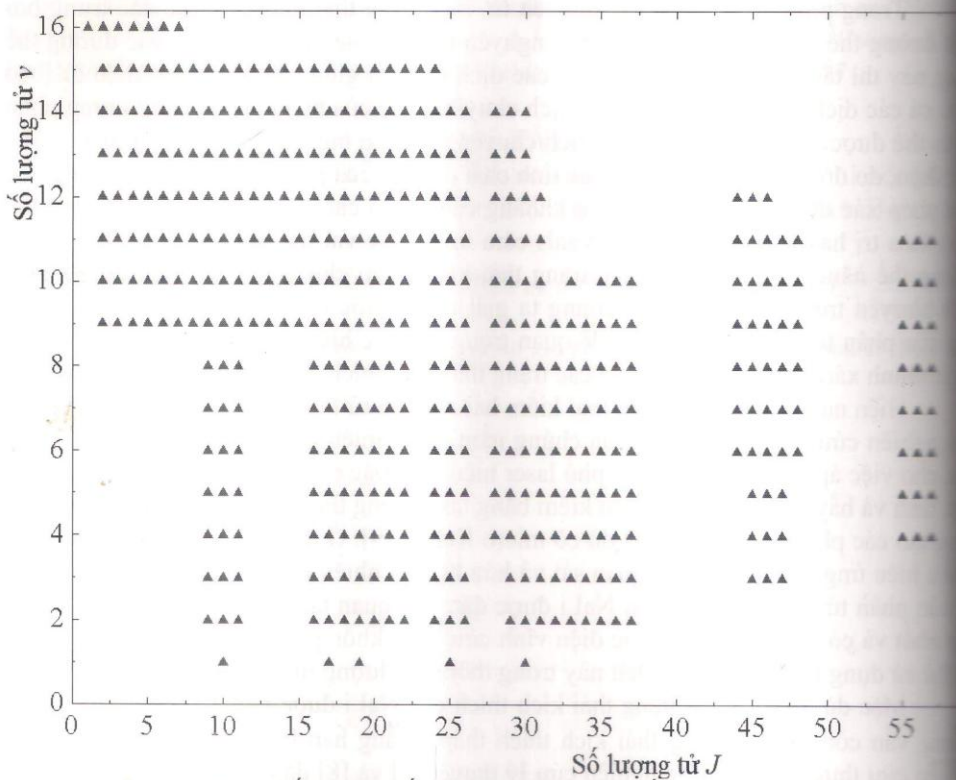
Hiện nay, các phân tử kim loại kiềm hai nguyên tử thu hút nhiều sự chú ý của các nhà nghiên cứu bởi phổ điện tử của chúng nằm trong miền UV-VIS, là đối tượng thuận lợi cho việc áp dụng các kỹ thuật phổ laser hiện đại. Đặc biệt, sự ra đời của các kỹ thuật làm lạnh và bẫy nguyên tử kim loại kiềm bằng laser trong thời gian gần đây đã mở ra khả năng tạo các phân tử lạnh ở nhiệt độ cỡ micro Kelvin [9]. Ở thang nhiệt độ thấp như vậy, nhiều hiệu ứng thú vị đã được quan sát và hứa hẹn có nhiều triển vọng ứng dụng. Trong số các phân tử kim loại kiềm thì NaLi được đặc biệt quan tâm bởi nó là phân tử dị chất phân tử và có mô men lưỡng cực điện vĩnh cửu khác không. Các nhà khoa học kỳ vọng sẽ có ứng dụng loại phân tử dị chất này trong thông tin lượng tử.

Mặc dù đã có nhiều trạng thái kích thích của NaLi được nghiên cứu thực nghiệm nhưng vẫn còn một số trạng thái kích thích thấp, chẳng hạn trạng thái  $2^1\Pi$ , chưa được nghiên cứu thực nghiệm. Các nghiên cứu lý thuyết [7] và [8] đã cho thấy đường thể năng trạng thái  $2^1\Pi$  có hai cực tiểu nên có thể lựa chọn trạng thái  $2^1\Pi$  cho làm lạnh phân tử theo thuật liên kết quang. Tuy nhiên, khi so sánh kết quả định lượng thì đường thể năng lý thuyết trong hai công trình này sai lệch nhau khá nhiều. Hơn nữa, thực tế cho thấy các đường thể năng lý thuyết thường có sai số tương đối lớn (hàng chục, thậm chí hàng trăm %) nên không thể sử dụng các kết quả tính toán đó trong việc lựa chọn tham số nghiên cứu đối với kỹ thuật liên kết quang. Về nghiên cứu thực nghiệm, cho đến nay,

trạng thái  $2^1\Pi$  mới chỉ được quan sát bằng kỹ thuật ion hóa cộng hưởng 2 photon của Kappe [3], tuy nhiên, nghiên cứu này chưa xác định được cấu trúc quay và đường thế năng. Gần đây, sử dụng kỹ thuật phổ đánh dấu phân cực, chúng tôi đã thành công trong việc phân giải phổ quay của trạng thái điện tử này [4, 6].

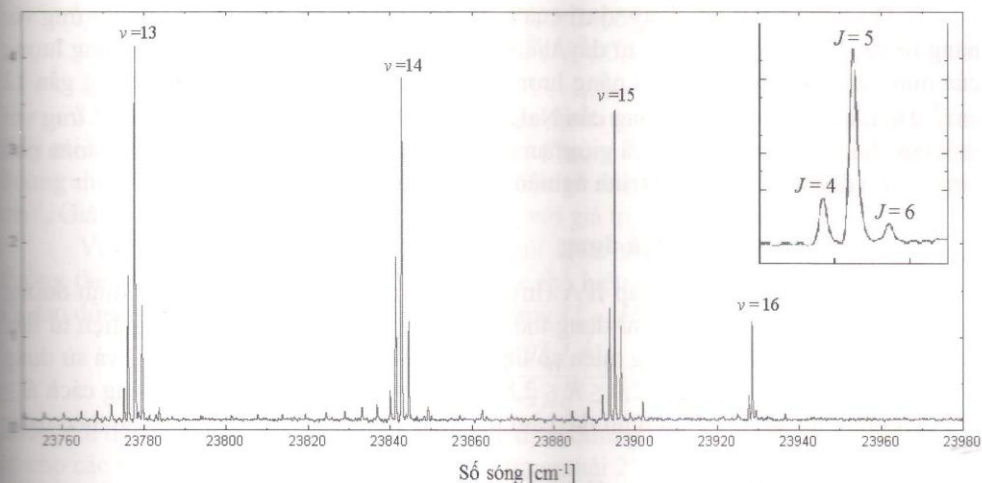
### 2. Số liệu phổ và đường thế năng RKR

Số liệu phổ sử dụng trong công trình này được đo bằng kỹ thuật đánh dấu phân cực và được mô tả chi tiết trong công trình [4] và [6]. Ở đây, số sóng của toàn bộ vạch phổ nằm trong dải dịch chuyển điện tử  $2^1\Pi \leftarrow 1^1\Sigma^+$  đã được xác định với sai số bé hơn  $0,1 \text{ cm}^{-1}$ . Chi tiết phân bố trường số liệu phổ theo số lượng tử dao động  $v$  và số lượng tử quay  $J$  được mô tả như trên hình 1.



Hình 1: Phân bố trường số liệu tương ứng với số lượng tử dao động  $v$  và số lượng tử quay  $J$  của NaLi ở trạng thái  $2^1\Pi$

Một đặc điểm quan trọng về phổ PLS của NaLi ở trạng thái  $2^1\Pi$  là chỉ quan sát được các mức dao động cao nhất  $v=15$  ứng với các mức đánh dấu có số lượng tử quay  $\geq 8$ . Tuy nhiên, đối với các mức đánh dấu có số lượng tử quay  $J \leq 7$  thì mức dao động cao nhất được quan sát là  $v=16$  (hình 2).



**Hình 2:** Một đoạn phổ PLS của NaLi ở trạng thái  $2^1\Pi$  được dò tại số sóng  $15083,76\text{ cm}^{-1}$  ứng với mức đánh dấu (0, 5). Dải phổ dao động kết thúc ở mức  $v = 16$   
 Phần phóng to (góc trên bên phải) là hình ảnh các vạch phổ P, Q và R của mức dao động  $v = 16$

Dựa trên số liệu phổ, chúng tôi đã xác định được tập hợp tối ưu các hằng số phân tử của trạng thái  $2^1\Pi$  [5]. Sử dụng các hằng số phân tử này, chúng tôi tìm thể theo phương pháp RKR được mô tả như Bảng 1.

**Bảng 1:** Thế RKR của NaLi ở trạng thái  $2^1\Pi$

$v'$	$R_{\min}[\text{Å}]$	$R_{\max}[\text{Å}]$	$U[\text{cm}^{-1}]$
-0,49976281	3,7289730		0,0
0	3,5369809	3,9453877	75,357
1	3,4088748	4,1223776	223,970
2	3,3253822	4,2557618	369,224
3	3,2598828	4,3733415	510,638
4	3,2049632	4,4837627	647,787
5	3,1574617	4,5915015	780,279
6	3,1157854	4,6995907	907,730
7	3,0790579	4,8105339	1029,733
8	3,0467620	4,9267526	1145,837
9	3,0185588	5,0509041	1255,515
10	2,9941729	5,1862115	1358,146
11	2,9732968	5,3369173	1452,981
12	2,9554741	5,5090384	1539,121
13	2,9399017	5,7118044	1615,491
14	2,9250067	5,9608047	1680,812
15	2,9073285	6,2861890	1733,575
16	2,8773205	6,7625462	1771,861

Thế năng RKR cho thấy vị trí của mức dao động cao nhất ( $v = 16$ ) tương ứng với năng lượng  $1771,86 \text{ cm}^{-1}$  (tính từ đáy thế năng RKR). Điều bất ngờ là giá trị năng lượng của mức dao động này cao hơn năng lượng phân li đã tính được trên đây khoảng gần  $12 \text{ cm}^{-1}$ . Điều này chứng tỏ thế năng của NaLi ở trạng thái  $2^1\Pi$  có một hàng rào thế ứng với một cực đại xen giữa cực tiểu và giới hạn phân li. Kết quả nghiên cứu này hoàn toàn phù hợp với dự đoán của các công trình nghiên cứu lý thuyết [7, 8].

### 3. Đường thế năng hiệu dụng

Để áp dụng phương pháp IPA (Inverted Perturbation Approach) xác định đường thế năng hiệu dụng, chúng tôi sử dụng thế RKR cộng thêm phần năng lượng điện từ làm thế gần đúng cấp không ở trong miền số liệu thực nghiệm ( $2,88 \leq R \leq 6,76 \text{ \AA}$ ) và sử dụng thế Morse cho phần ngoại suy  $2,0 \leq R \leq 2,88 \text{ \AA}$ . Đối với phần thế năng ở khoảng cách  $R \geq 6,76 \text{ \AA}$ , chúng tôi sử dụng mô hình thế cảm ứng xác định theo các hệ số tán sắc theo dạng [1]:

$$U(R) = U_\infty - \frac{C_6}{R^6} - \frac{C_8}{R^8} - \frac{C_{10}}{R^{10}} \quad (\text{với } R > R_{out}) \quad (1)$$

$$U(R) = \{U_i, R_i\} \quad (\text{với } R \leq R_{out}) \quad (2)$$

Giá trị các tham số  $C_6$ ,  $C_8$  và  $C_{10}$  được lấy từ tính toán lý thuyết bởi nhóm Bursery [1]; tham số  $U_\infty$  là giá trị thế năng ở giới hạn phân li, được xác định bởi:

$$U_\infty = T_e[2^1\Pi] + D^e[2^1\Pi] = 24059,6 \text{ cm}^{-1} \quad (3)$$

và được cố định trong quá trình làm phù hợp. Tham số  $R_{out}$  ban đầu được lựa chọn bằng giá trị lớn nhất của  $R_{max}$  trong thế năng RKR và được thay đổi trong quá trình làm phù hợp. Trong miền  $R \leq R_{out}$  thế năng được nội suy để biểu diễn dưới dạng số theo các điểm  $\{U_i, R_i\}$ . Sau vài chu trình tìm bổ chính, chúng tôi thu được đường thế năng IPA cùng hệ số lambda kép như trên bảng 2 ứng với độ lệch quân phương không thứ nguyên  $\sigma = 0,29$ .

**Bảng 2:** Thế năng IPA và hệ số lambda kép q của NaLi ở trạng thái  $2^1\Pi$

R [Å]	U [cm <sup>-1</sup> ]	R [Å]	U [cm <sup>-1</sup> ]	R [Å]	U [cm <sup>-1</sup> ]
2,0	34823,8882	3,3	22729,4579	5,0	23505,3076
2,1	33119,5763	3,4	22552,3012	5,2	23661,1771
2,2	31371,8651	3,5	22426,0730	5,4	23781,7714
2,3	29719,2695	3,6	22346,0999	5,6	23872,6004
2,4	28348,6429	3,7	22306,4918	5,8	23938,3475
2,5	27167,4940	3,8	22302,8516	6,2	24018,6258
2,6	26176,3919	3,9	2333,1360	7,1	24065,9534
2,7	25347,6186	4,0	22395,1989	8,6	24068,1703
2,8	24655,4021	4,1	22483,6399	10,1	24065,9715
2,9	24111,3227	4,2	22590,8287	12,4	24062,9823
3,0	23650,2503	4,4	22834,8481	16,0	24061,1800
3,1	23266,4208	4,6	23084,1882		
3,2	22965,2520	4,8	23311,9381		

$$q = 8,252 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^{-1}; R_{\text{out}} = 11,92928 \text{ \AA}; U_{\infty} = 24059,6 \text{ cm}^{-1};$$

$$C_6 = -2,538 \cdot 10^7 \text{ cm}^{-1} (\text{\AA})^6; C_8 = 1,902 \cdot 10^9 (\text{\AA})^8; C_{10} = 1,556 \cdot 10^{10} (\text{\AA})^{10};$$

$$T_e = 22299,93 \text{ cm}^{-1}; R_e = 3,7595 \text{ \AA}.$$

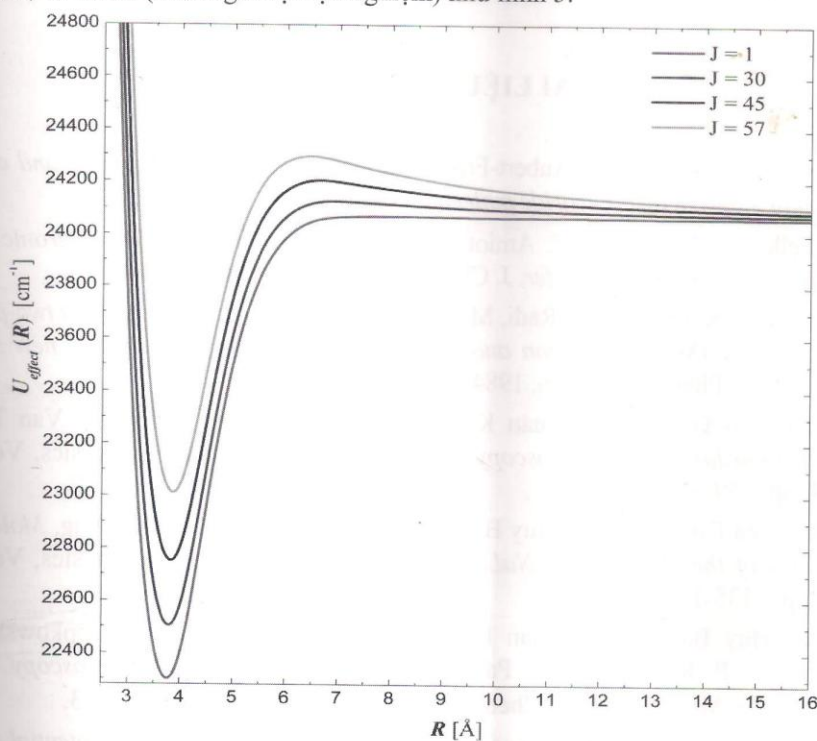
Chú ý rằng, đối chiếu mức dao động cao nhất  $v = 16$  với thể IPA ở Bảng 2 cho thấy miền phổ thực nghiệm trải rộng đến giá trị  $R_{\text{max}} = 7,1 \text{ \AA}$  của thể IPA. Ngoài ra, từ đường thể năng thu được, giá trị năng lượng điện tử của trạng thái  $2^1\Pi$  bằng  $22299,93 \text{ cm}^{-1}$ . Giá trị  $R_{\text{out}}$  được làm phù hợp tốt nhất ứng với giá trị  $11,92928 \text{ \AA}$ .

Với đường thể năng thu được, chúng tôi khảo sát ảnh hưởng của sự quay lên đường thể năng của phân tử. Sử dụng biểu thức thể hiệu dụng mô tả chuyển động quay và dao động của hạt nhân trong thể năng hiệu dụng  $U_{\text{effect}}(R)$

$$U_{\text{effect}}(R) = U(R) + \frac{\hbar^2 J(J+1)}{2\mu R^2} \tag{4}$$

chúng tôi đã viết chương trình máy tính để xác định đường thể năng hiệu dụng dưới dạng số cho các trạng thái quay của phân tử NaLi ở trạng thái  $2^1\Pi$ .

Để trực quan, chúng tôi vẽ đường thể năng hiệu dụng ứng với các trạng thái quay  $J = 1, 30, 45$  và  $57$  (là các giá trị thực nghiệm) như hình 3.



**Hình 3:** Thể hiệu dụng của NaLi ở trạng thái  $2^1\Pi$  ở các trạng thái quay  $J = 1, 30, 45$  và  $57$

Từ hình 3 ta thấy, thể năng hiệu dụng của phân tử ứng với các trạng thái quay khác nhau là khác nhau. Các trạng thái quay càng cao, đường thể năng càng nâng do cộng thêm số hạng quay tỉ lệ nghịch với  $R^2$ . Trên phương diện vật lí, các trạng thái quay càng cao thì lực li tâm càng lớn và sẽ kéo hai nguyên tử ra xa nhau. Vì vậy, ứng với cùng

một mức dao động, các trạng thái quay càng lớn thì khả năng phân tử bị phân ly càng cao.

Mặt khác, từ các đường thế năng hiệu dụng cho thấy có tồn tại một hàng rào thế có cực đại cao hơn giới hạn phân li, phù hợp với các dự đoán của các công trình nghiên cứu lý thuyết [7, 8].

Từ đây, ta có thể giải thích được lý do không quan sát được các dịch chuyển phổ ứng với mức dao động  $v = 16$  tại các giá trị lớn của  $J$  là các mức này nằm trên hàng rào thế.

#### 4. Kết luận

Dựa trên 732 vạch phổ trải rộng đến gần giới hạn phân li, đường thế năng trạng thái điện tử  $2^1\Pi$  của phân tử NaLi đã được xác định theo phương pháp IPA với độ chính xác cao. Sử dụng đường thế năng này chúng ta xác định được đường thế năng hiệu dụng với các trạng thái quay khác nhau. Từ các đường thế năng này, ta giải thích được tại sao không quan sát được các mức quay ứng với số lượng tử  $J$  lớn tại mức dao động  $v = 16$ . Kết quả nghiên cứu này hoàn toàn phù hợp với dự đoán của các công trình nghiên cứu lý thuyết [7, 8].

### TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] B. Bussery, Y. Achkar, M. Aubert-Frocon, *Calculated long-range ground and excited molecular states of alkali hydride molecules*, Chem. Phys. 116 319, 1987.
- [2] C. E. Fellows, J. Vergès and C. Amiot, *The  $Na^7Li\ 3^1\Sigma^+(C)$  and  $1^1\Pi(B)$  electronic states through collision energy transfer*, J. Chem. Phys., 93, 6281-6290, 1990.
- [3] M. M. Kappe, K. O. Marti, P. Radi, M. Schöp, and E. Scgumacher, *Resonant two-photon ionization of LiNa, Observation and preliminary characterization of five new singlet states*, Chem. Phys. Lett., 107, 6, 1984.
- [4] Nguyen Tien Dung, Dinh Xuan Khoa, Nguyen Huy Bang and Pham Van Trong, *Polarization labelling spectroscopy for NaLi*, Communications in Physics, Vol. 21, No. 4, pp. 359-364, 2011.
- [5] Nguyen Tien Dung, Nguyen Huy Bang, Dinh Xuan Khoa, Le Canh Trung, *Molecular constants of the  $2^1\Pi$  state of NaLi molecule*, Communications in Physics, Vol. 23, No. 2, pp. 135-138, 2013.
- [6] Nguyen Huy Bang, Dinh Xuan Khoa, Nguyen Tien Dung, J. Szczepkowski, W. Jastrzebski, P. Kowalczyk, A. Pashov, *Polarization labelling spectroscopy of the  $D^1\Pi$  state in  $Na^7Li$  molecule*, Chemical Physics Letters 586, 16-20, 2013.
- [7] N. Mabrouk and H. Berriche, *Theoretical study of the NaLi molecule: potential energy curves, spectroscopic constants, dipole moments and radiative lifetimes*, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 41, 155101, 2008.
- [8] I. D. Petsalakis, D. Tzeli and G. Theodorakopoulos, *Theoretical study on the electronic states of NaLi*, J. Chem. Phys., 129, 054306, 2008.



- [9] Nguyen Huy Bang et. al., *Polarization labelling spectroscopy of highly excited NaLi states*, Journal Chemical Physics, 130, 124307, 2009.

## SUMMARY

### DETERMINATION OF THE EFFECTIVE POTENTIAL CURVE FOR THE $2^1\Pi$ STATE OF NaLi

In this paper, basing on the potential curve for the  $2^1\Pi$  state of NaLi with the dimensionless root mean of squares of deviation  $\sigma = 0.29$ , we determined the effective potential curve for different rotational states. This study results are consistent with the predictions of theoretical works.