

BỘ GIÁO DỤC VÀ ĐÀO TẠO
TRƯỜNG ĐẠI HỌC VINH

NGUYỄN TIẾN DŨNG

**XÁC ĐỊNH THỂ NĂNG CỦA PHÂN TỬ NaLi
Ở TRẠNG THÁI $2^1\Pi$ DỰA TRÊN SỐ LIỆU PHỔ
ĐÁNH DẤU PHÂN CỰC**

LUẬN ÁN TIẾN SĨ VẬT LÝ

NGHỆ AN, 2014

BỘ GIÁO DỤC VÀ ĐÀO TẠO
TRƯỜNG ĐẠI HỌC VINH

NGUYỄN TIẾN DŨNG

**XÁC ĐỊNH THỂ NĂNG CỦA PHÂN TỬ NaLi
Ở TRẠNG THÁI $2^1\Pi$ DỰA TRÊN SỐ LIỆU PHỔ
ĐÁNH DẤU PHÂN CỰC**

LUẬN ÁN TIẾN SĨ VẬT LÝ

Chuyên ngành: Quang học

Mã số: 62.44.01.09

Người hướng dẫn khoa học:

- 1. PGS. TS. Đinh Xuân Khoa**
- 2. TS. Nguyễn Huy Bằng**

NGHỆ AN, 2014

LỜI CẢM ƠN

Luận án được hoàn thành dưới sự hướng dẫn khoa học của PGS.TS. Đinh Xuân Khoa và TS. Nguyễn Huy Bằng. Tác giả xin được bày tỏ lòng biết ơn chân thành tới các thầy giáo, những người đã đặt đề tài, hướng dẫn tận tình và động viên tác giả trong suốt quá trình nghiên cứu.

Tác giả xin chân thành cảm ơn các thầy giáo, cô giáo, các nhà khoa học, các bạn đồng nghiệp và các NCS của khoa Vật lý & Công nghệ Trường Đại học Vinh đã đóng góp nhiều ý kiến khoa học bổ ích cho nội dung của luận án, đã tạo điều kiện thuận lợi và giúp đỡ tác giả trong thời gian học tập.

Tác giả chân thành cảm ơn Viện Hàn lâm khoa học Ba Lan và giáo sư W. Jastrzebski đã tạo điều kiện thuận lợi để triển khai các phép đo phổ NaLi ở trạng thái $2^1\Pi$.

Tác giả xin gửi lời cảm ơn sâu sắc tới bạn bè, người thân trong gia đình đã quan tâm, động viên, giúp đỡ tác giả trong quá trình nghiên cứu và hoàn thành luận án.

Xin trân trọng cảm ơn!

Tác giả

LỜI CAM ĐOAN

Tôi xin cam đoan nội dung của bản luận án này là công trình nghiên cứu của riêng tôi dưới sự hướng dẫn khoa học của PGS.TS. Đinh Xuân Khoa và TS. Nguyễn Huy Bằng. Các số liệu, kết quả trong luận án là trung thực và chưa được công bố trong bất kỳ một công trình nào khác.

Tác giả

Nguyễn Tiến Dũng

MỤC LỤC

	Trang
LỜI CẢM ƠN	iii
LỜI CAM ĐOAN	iv
MỤC LỤC.....	v
DANH MỤC CÁC KÝ HIỆU	viii
DANH MỤC CÁC HÌNH VẼ VÀ BẢNG SỐ LIỆU.....	x
TỔNG QUAN	1
Chương 1: CƠ SỞ LÝ THUYẾT PHỔ PHÂN TỬ HAI NGUYÊN TỬ....	8
1.1. Phân loại trạng thái điện tử	8
1.1.1. Các mômen góc và sự phân loại các trạng thái điện tử	8
1.1.2. Tương quan giữa các trạng thái của phân tử với nguyên tử.....	10
1.2. Mô tả phân tử theo cơ học lượng tử.....	12
1.2.1. Hamilton của phân tử hai nguyên tử	12
1.2.1. Gần đúng Born - Oppenheimer	13
1.3. Phổ của phân tử hai nguyên tử.....	16
1.3.1. Phần tử mômen lưỡng cực điện của dịch chuyển.....	16
1.3.2. Phổ dao động - quay	18
1.3.3. Phổ dao động	20
1.3.4. Phổ quay	22
1.3.5. Phổ điện tử và nguyên lý Franck - Condon.....	24
1.3.6. Tính chẵn-lẻ của các mức năng lượng.....	25

1.4. Các phương pháp xác định thế năng theo số liệu phổ.....	27
1.4.1. Xác định thế năng theo chuỗi lũy thừa	27
1.4.1.1. Khai triển thế năng theo chuỗi Taylor	27
1.4.1.2. Khai triển Dunham	31
1.4.2. Xác định thế năng theo các hàm giải tích.....	32
1.4.2.1. Thế Morse	32
1.4.2.2. Thế Hulbert-Hirschfelder	35
1.4.3. Xác định thế năng dạng số.....	36
1.4.3.1. Thế RKR	36
1.4.3.2. Thế nhiễu loạn ngược.....	37
1.5. Thế năng ngoài miền liên kết hóa học.....	40
1.6. Nhiễu loạn trong phổ phân tử.....	42
1.6.1 Nhiễu loạn điện tử	46
1.6.2 Tương tác spin-quỹ đạo	48
1.6.3 Các nhiễu loạn quay.....	49
1.7. Kết luận chương 1	51
Chương 2: PHỔ ĐÁNH DẤU PHÂN CỰC CỦA NaLi	53
2.1. Nguyên lý cơ bản của kỹ thuật PLS	53
2.2. Các sơ đồ kích thích	56
2.3. Biên độ của tín hiệu phân cực	57
2.4. Cường độ tỉ đối của các vạch phổ.....	62
2.5. Phổ PLS của NaLi	68
2.5.1. Bố trí thí nghiệm.....	68

2.5.2. Tạo các phân tử NaLi	71
2.5.3. Quy trình đo phổ NaLi.....	72
2.6. Định cỡ phổ PLS.....	73
2.7. Kết luận chương 2	77
Chương 3: XÁC ĐỊNH THỂ NĂNG CỦA PHÂN TỬ NaLi	78
3.1. Số liệu phổ thực nghiệm	78
3.2. Xác định thể năng của NaLi ở trạng thái $2^1\Pi$.....	82
3.2.1. Các hằng số phân tử.....	82
3.2.2. Thế RKR.....	88
3.2.3. Thế IPA.....	92
3.3. Xác định mật độ cư trú các mức dao động ở trạng thái $2^1\Pi$.....	101
3.4. Kết luận chương 3	103
KẾT LUẬN CHUNG	105
CÁC CÔNG TRÌNH KHOA HỌC ĐÃ CÔNG BỐ.....	107
TÀI LIỆU THAM KHẢO	109
Phụ lục I	116
Phụ lục II	117
Phụ lục III	118

DANH MỤC CÁC KÝ HIỆU

Ký hiệu	Đơn vị	Ý nghĩa
PLS		Phổ đánh dấu phân cực (Polarization Labeling Spectroscopy)
RSE		Phương trình Schrodinger bán kính (Radial Schrodinger Equation)
FC		Hệ số Franck – Condon
S_{JJ}		Hệ số Honl – London
R_e	Å	Khoảng cách giữa hai hạt nhân ở vị trí cân bằng (độ dài liên kết)
R	Å	Khoảng cách giữa hai hạt nhân
$U(R)$	cm^{-1}	Hàm thế năng phân tử
$T(v, J)$	cm^{-1}	Số hạng phổ
ω_e	cm^{-1}	Hằng số dao động
B_e	cm^{-1}	Hằng số quay
$\omega_e x_e$	cm^{-1}	Bổ chính bậc nhất cho hằng số dao động
D_e	cm^{-1}	Hằng số liên kết giữa dao động và quay
T_e	cm^{-1}	Năng lượng điện tử
PEC	cm^{-1}	Đường thế năng (Potential Energy Curve)
D^e	cm^{-1}	Năng lượng phân ly
IPA		Phương pháp nhiễu loạn ngược (Inverted Perturbation Approach)
R_{LR}	Å	Bán kính Leroy
q_{kl}	cm^{-1}	Hệ số lambda-kép
σ		Độ lệch quân phương không thứ nguyên
$\Delta u(i)$	cm^{-1}	Sai số của phép đo thứ i
$C_6,$ $C_8,$ C_{10}	$\text{cm}^{-1}(\text{Å})^6$ $\text{cm}^{-1}(\text{Å})^8$ $\text{cm}^{-1}(\text{Å})^{10}$	Các hệ số tán sắc

U_∞	cm^{-1}	Giá trị thế năng ở giới hạn phân li ($R \rightarrow \infty$)
$R_{min},$ R_{max}	Å	Khoảng cách hai hạt nhân tương ứng với điểm quay đầu trái và phải
RKR	cm^{-1}	Thế năng RKR (do Rydberg, Klein và Rees đề xuất)
WKB		Gần đúng chuẩn cổ điển (do Wentzel, Brillouin and Keller đề xuất)

DANH MỤC CÁC HÌNH VẼ VÀ BẢNG SỐ LIỆU

TT	Tên hình	Trang
1.	Hình 1. Các PEC ở trạng thái bội đơn của phân tử NaLi được tính toán bởi Mabrouk [40].	3
2.	Hình 2. Các đường thế năng của trạng thái $4^1\Sigma^+$ và $3^1\Pi$, $4^1\Pi$, $6^1\Pi$, $7^1\Pi$ phân tử NaLi được tính toán lý thuyết (màu xanh) và thực nghiệm (chấm đỏ).	5
3.	Hình 1.1. Giản đồ quy tắc Hund (a) cho liên kết giữa các mômen góc.	10
4.	Hình 1.2. Phân bố độ cư trú của các mức dao động của phân tử	22
5.	Hình 1.3. Phân bố các mức quay của HCl ở nhiệt độ $T = 300$ K	24
6.	Hình 1.4. Tính chẵn lẻ của các mức quay của các trạng thái bội đơn $^1\Sigma^+$, $^1\Sigma^-$, $^1\Pi$.	26
7.	Hình 1.5. Dạng điển hình của thế năng phân tử	28
8.	Hình 1.6. Mô hình thế Morse của phân tử hai nguyên tử	34
9.	Hình 1.7. Sự nhiễu loạn của các mức quay trong trạng thái $4^1\Delta_g$ của Li_2 .	44
10.	Hình 2.1. Sơ đồ nguyên lí của PLS.	53
11.	Hình 2.2. Sự tích lũy (làm nghèo) các mức Zeeman ở trạng thái trên (trạng thái dưới) do bơm quang học $J'' = 2$ lên $J' = 1$.	54
12.	Hình 2.3. Sự phụ thuộc tiết diện hấp thụ vào M_J đối với các dịch chuyển P, Q, R.	55
13.	Hình 2.4. Năm sơ đồ kích thích có thể đóng góp vào tín hiệu phổ phân cực	56
14.	Hình 2.5. Sự thay đổi phân cực của chùm dò khi chùm bơm phân cực tròn.	59
15.	Hình 2.6. Sự thay đổi phân cực của chùm dò khi chùm bơm phân cực thẳng.	61