

VẬT LÝ NGUYÊN TỬ VÀ HẠT NHÂN

Lương Văn Tùng

Mục lục

I	CẤU TRÚC NGUYÊN TỬ THEO LÝ THUYẾT CỔ ĐIỂN	7
§1	MẪU NGUYÊN TỬ CỦA THOMSON VÀ THÍ NGHIỆM RUTHERFORD VỀ TÁN XẠ HẠT ANPHA	7
1.1	MẪU NGUYÊN TỬ THOMSON	7
1.2	Thí nghiệm của Rutherford về tán xạ hạt anpha	7
1.3	Lý thuyết tán xạ hạt anpha. Công thức tán xạ Rutherford.	8
§2	MẪU HÀNH TINH NGUYÊN TỬ VÀ KÍCH THƯỚC HẠT NHÂN	11
2.1	Mẫu hành tinh nguyên tử của Rutherford	11
2.2	Kích thước hạt nhân nguyên tử	11
2.3	Hạn chế của mẫu hành tinh nguyên tử Rutherford	12
§3	QUY LUẬT QUANG PHỔ CỦA NGUYÊN TỬ HYDRO	12
3.1	Các dãy quang phổ của nguyên tử Hydrô	12
3.2	Công thức Balmer tổng quát	13
§4	THUYẾT BOHR. CẤU TRÚC NGUYÊN TỬ HYDRO VÀ CÁC ION TƯƠNG TỰ	15
4.1	Lý thuyết Bohr	15
4.2	Cấu trúc của nguyên tử Hydrô theo lý thuyết Bohr	16
4.3	Công thức Balmer tổng quát	18
4.4	Cấu trúc của các Iôn tương tự Hydrô	18
4.5	Đánh giá lý thuyết Bohr	19
§5	BÀI TẬP CHƯƠNG I	19
II	CƠ SỞ CỦA CƠ HỌC LƯỢNG TỬ	21
§1	LŨƠNG TÍNH SÓNG - HẠT CỦA HẠT VI MÔ. GIẢ THIẾT CỦA DE BROGLIE	21
1.1	Giả thuyết của De Broglie	21
1.2	Cơ bước sóng De Broglie của hạt electron	22
§2	THÍ NGHIỆM NHIỀU XẠ CHÙM ELECTRON VÀ NGUYÊN LÝ BẤT ĐỊNH HEISENBERG	22
2.1	Thí nghiệm nhiễu xạ sóng De Broglie của chùm hạt electron	22
2.2	Hệ thức bất định Heisenberg	25
§3	HÀM SÓNG CỦA HẠT VI MÔ - ĐOÁN NHẬN Ý NGHĨA THỐNG KÊ CỦA HÀM SÓNG	28
3.1	Hàm sóng của hạt tự do	28
3.2	Hàm sóng của hạt chuyển động trong trường lực	29
3.3	ý nghĩa thống kê của hàm sóng	29
§4	PHƯƠNG TRÌNH SCHRÖDINGER	31
4.1	Phương trình Schrödinger phụ thuộc thời gian	31

4.2	Phương trình Schrödinger dạng dừng	32
4.3	Một số lưu ý khi sử dụng phương trình Schrödinger	32
§5	CHUYỂN ĐỘNG CỦA HẠT TRONG GIẾNG THỂ	33
5.1	Định nghĩa giếng thế một chiều	33
5.2	Giải phương trình Schrödinger cho hạt chuyển động trong giếng thế một chiều	33
5.3	Xác suất tìm thấy hạt trong giếng thế	35
§6	HÀNG RÀO THỂ	36
6.1	Định nghĩa hàng rào thế	36
6.2	Phương trình Schrödinger cho hàng rào thế một chiều	36
§7	BÀI TẬP CHƯƠNG II	38
III	NGUYÊN TỬ HYDRO TRONG CƠ HỌC LƯỢNG TỬ	41
§1	PHƯƠNG TRÌNH SCHRÖDINGER CHO NGUYÊN TỬ HYDRO VÀ CÁC ION TƯƠNG TỰ	41
1.1	Phương trình Schrödinger cho nguyên tử Hydro và các Ion tương tự	41
1.2	Giải phương trình Schrödinger bằng phương pháp phân ly biến số	42
§2	SỐ LƯỢNG TỬ CHÍNH, NĂNG LƯỢNG TRẠNG THÁI DỪNG CỦA NGUYÊN TỬ	44
2.1	Số lượng tử chính	44
2.2	Năng lượng trạng thái dừng của nguyên tử	44
§3	LƯỢNG TỬ SỐ QUỸ ĐẠO, MOMENT QUỸ ĐẠO CỦA ELECTRON	45
3.1	Mômen quỹ đạo	45
3.2	Ký hiệu mômen quỹ đạo	45
§4	SỐ LƯỢNG TỬ TỪ, SỰ LƯỢNG TỬ HÓA KHÔNG GIAN	46
4.1	Số lượng tử từ	46
4.2	Sự lượng tử hóa không gian	46
§5	PHÂN BỐ XÁC SUẤT TÌM THẤY ELECTRON TRONG NGUYÊN TỬ	47
5.1	Mật độ xác suất: w	48
5.2	Biểu thức tính xác suất: dW	48
§6	SPIN CỦA ELECTRON. THÍ NGHIỆM STERN - GERLACH	49
6.1	Spin của electron	49
6.2	Sự lượng tử hoá không gian của spin	50
6.3	Thí nghiệm của Stern - Gerlach	51
§7	MOMENT TỪ VÀ MOMENT TỪ RIÊNG CỦA ELECTRON	52
7.1	Mômen từ của electron	52
7.2	Mômen từ riêng	53
§8	TƯƠNG TÁC SPIN- QUỸ ĐẠO	53
8.1	Khái niệm tương tác spin - quỹ đạo	53
8.2	Sự tách vạch quang phổ	53
§9	NGUYÊN TỬ TRONG TỪ TRƯỜNG NGOÀI. HIỆU ỨNG ZEEMAN THƯỜNG VÀ DỊ THƯỜNG	55
9.1	Hiệu ứng Zeeman	55
9.2	Giải thích hiệu ứng Zeeman thường bằng lý thuyết cổ điển	55
9.3	Giải thích hiệu ứng Zeeman bằng thuyết lượng tử	57
§10	BÀI TẬP CHƯƠNG III	58

IV	NGUYÊN TỬ NHIỀU ELECTRON THEO CƠ HỌC LƯỢNG TỬ	59
§1	BÀI TOÁN CẤU TRÚC NGUYÊN TỬ NHIỀU ELECTRON VÀ PHƯƠNG PHÁP GIẢI QUYẾT	59
1.1	Bài toán cấu trúc nguyên tử phức tạp	59
1.2	Phương pháp giải bài toán cấu trúc nguyên tử phức tạp	60
§2	NGUYÊN LÝ LOẠI TRỪ PAOLI VÀ CẤU TRÚC VỎ ĐIỆN TỬ CỦA NGUYÊN TỬ PHỨC TẠP	60
2.1	Nguyên lý loại trừ Paoli	60
2.2	Cấu trúc nguyên tử phức tạp	61
§3	HỆ THỐNG TUẦN HOÀN CÁC NGUYÊN TỐ HÓA HỌC CỦA MENDELEEV .	62
3.1	Hệ thống tuần hoàn	62
3.2	Dùng nguyên lý loại trừ Paoli giải thích hệ thống tuần hoàn	63
§4	TIA RÖNTGEN (TIA X)	65
4.1	Cơ chế phát xạ tia X	65
4.2	Phổ tia Röntgen	67
V	PHÂN TỬ	71
§1	CÁC DẠNG LIÊN KẾT PHÂN TỬ	71
1.1	Liên kết hoá học	71
1.2	Liên kết Iôn	71
1.3	Liên kết cộng hoá trị	71
1.4	Khái niệm hoá trị	72
§2	CÁC MỨC NĂNG LƯỢNG ELECTRON CỦA PHÂN TỬ LƯỢNG NGUYÊN TỬ	73
2.1	Năng lượng electron	73
2.2	Năng lượng dao động	73
2.3	Năng lượng quay	74
§3	PHỔ CỦA PHÂN TỬ	75
3.1	Đám phổ phân tử	75
3.2	Giải thích sự tạo thành quang phổ phân tử	75
VI	SƠ LƯỢC VỀ LASER	79
§1	PHÁT XẠ TỰ PHÁT VÀ PHÁT XẠ CƯỜNG BỨC	79
1.1	Phát xạ tự phát	79
1.2	Phát xạ cảm ứng	80
§2	NGUYÊN LÝ HOẠT ĐỘNG CỦA LASER. SỰ ĐẢO LỘN MẬT ĐỘ TRẠNG THÁI VÀ HẤP THỤ ẨM	81
2.1	Nguyên lý hoạt động của Laser (máy phát lượng tử)	81
2.2	Sự đảo lộn mật độ. Nhiệt độ tuyệt đối âm	81
2.3	Một số nguồn Laser	83
§3	MỘT SỐ TÍNH CHẤT CỦA LASER VÀ ỨNG DỤNG	84
3.1	Tính chất của Laser	84
3.2	ứng dụng của laser	85
VII	ĐẠI CƯƠNG VỀ HẠT NHÂN. NĂNG LƯỢNG LIÊN KẾT HẠT NHÂN	87
§1	CÁC ĐẶC TRƯNG CƠ BẢN CỦA HẠT NHÂN	87
1.1	Diện tích và khối lượng hạt nhân	87

1.2	Hạt nhân đồng vị	87
1.3	Đơn vị khối lượng nguyên tử	88
1.4	Các thành phần của hạt nhân	88
§2	NĂNG LƯỢNG LIÊN KẾT HẠT NHÂN	88
2.1	Độ hụt khối	88
2.2	Năng lượng liên kết hạt nhân	89
2.3	Năng lượng liên kết riêng	89
§3	CÁC ĐẶC TÍNH CỦA LỰC HẠT NHÂN	90
3.1	Các đặc tính của lực hạt nhân	90
§4	KÍCH THƯỚC HẠT NHÂN	91
4.1	Công thức tính bán kính hạt nhân	91
4.2	Một số hệ quả	92
§5	ĐẠI CƯƠNG VỀ CÁC MẪU HẠT NHÂN	92
5.1	Mẫu giọt hạt nhân	92
5.2	Mẫu lớp hạt nhân	93
VIII	HIỆN TƯỢNG PHÓNG XẠ	95
§1	ĐỊNH LUẬT PHÓNG XẠ - HỌ PHÓNG XẠ	95
1.1	Đại cương về phóng xạ	95
1.2	Định luật phóng xạ	96
1.3	Họ phóng xạ	98
§2	PHÂN RÃ ANPHA, BETA VÀ GAMMA	100
2.1	Phân rã anpha	100
2.2	Phân rã β	101
2.3	Phân rã gamma	104
§3	PHƯƠNG PHÁP VÀ DỤNG CỤ GHI NHẬN TIA BỨC XẠ	104
3.1	ống đếm Geiger	104
3.2	Đetector bán dẫn	105
3.3	Đetector nhấp nháy	106
3.4	Buồng Wilson	106
§4	ĐƠN VỊ ĐO LIỀU LƯỢNG PHÓNG XẠ	107
4.1	Đơn vị Curi (Ci)	107
4.2	Đơn vị Culông/kilôgam (C/kg)	107
4.3	Đơn vị Roentgen (Rơnghen - R)	107
4.4	Đơn vị Gray (Gy)	107
§5	BÀI TẬP CHƯƠNG VIII	107

Chương I

CẤU TRÚC NGUYÊN TỬ THEO LÝ THUYẾT CỔ ĐIỂN

§1 MẪU NGUYÊN TỬ CỦA THOMSON VÀ THÍ NGHIỆM RUTHERFORD VỀ TÁN XẠ HẠT ANPHA

1.1 MẪU NGUYÊN TỬ THOMSON

Vào cuối năm 1903 nhà Vật lý Thomson người Anh đã tìm ra hạt electron và từ đó ông đưa ra mẫu nguyên tử đầu tiên, thường gọi là mẫu hành nhân. Nội dung cơ bản của mẫu hành nhân như sau:

Nguyên tử có dạng khối cầu có kích thước cỡ Angstrom ($1\text{\AA}=10^{-10}\text{m}$),
Hình cầu này tích điện dương dạng môi trường đồng nhất,
Các electron mang điện tích âm phân bố rải rác và đối xứng trong hình cầu,
Tổng điện tích âm bằng tổng điện tích dương nên nguyên tử trung hoà về điện.

Có thể nói đây là mẫu nguyên tử đầu tiên cho ta một hình dung ban đầu về nguyên tử. Mẫu này chỉ tồn tại trong một thời gian ngắn vì có những mâu thuẫn với thực nghiệm.

1.2 Thí nghiệm của Rutherford về tán xạ hạt anpha

1.2.1. Sơ đồ thí nghiệm

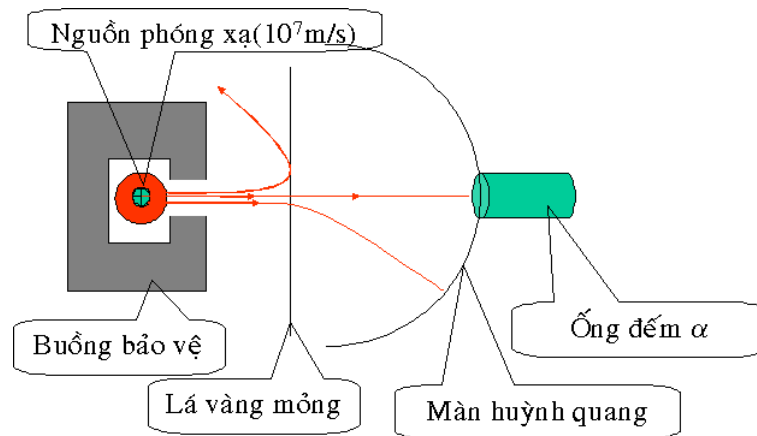
Vào năm 1911 dưới sự hướng dẫn của Rutherford các học trò của ông đã thực hiện thí nghiệm theo sơ đồ hình (1.1). Thí nghiệm được mô tả như sau:

Dùng một nguồn phóng xạ anpha đặt trong một hộp bằng chì chỉ có một khe hở nhỏ để cho ta một chùm hạt anpha mảnh. Chùm hạt anpha được bắn vào một lá vàng cực mỏng sao cho có thể xem như là một lớp nguyên tử vàng. Sau lá vàng ta đặt một mặt cầu phủ một lớp chất huỳnh quang để khi có hạt anpha đập vào sẽ thu được một chấm sáng. Dùng máy đếm để xác định số hạt anpha đập vào màn huỳnh quang để từ đó suy ra phương chuyển động của hạt anpha khi qua lá vàng. Từ kết quả thí nghiệm có thể suy ra được phân bố "vật chất" trong lá vàng hay cho ta thông tin về cấu trúc nguyên tử.

1.2.2. Kết quả thí nghiệm

Bằng thí nghiệm theo sơ đồ trên thu được các kết quả cơ bản như sau:

- Đa số hạt anpha xuyên qua lá vàng, chứng tỏ khoảng cách giữa các nguyên tử lớn hơn nhiều so với kích thước nguyên tử.
- Một số hạt anpha bị lệch hướng khi xuyên qua lá vàng chứng tỏ nó đã bị va chạm trước khi ra



Hình I.1: Sơ đồ thí nghiệm Rutherford

khỏi lá vàng.

- Có một số rất ít hạt anpha bị giạt lùi trở lại chứng tỏ nó đã bị va chạm trực diện với một hạt có khối lượng lớn so với nó.

Các kết quả này mâu thuẫn với mẫu hành nhân Thomson.

Rutherford đã giải thích kết quả thí nghiệm này như sau:

Thực tế cấu tạo nguyên tử không giống như mẫu Thomson vì nếu nguyên tử phân bố đồng nhất như mẫu Thomson thì không thể có một số hạt nhân giạt lùi như trong thí nghiệm. Như vậy nguyên tử phải có phần lõi ở giữa có kích thước nhỏ nhưng khối lượng lớn và mang điện tích dương. Chính điện tích dương này đẩy hạt anpha giạt lùi khi gặp nó.

Phần lõi này được gọi là hạt nhân nguyên tử. Hạt nhân có kích thước bé nên chỉ một số ít hạt anpha bị lệch hướng truyền; đặc biệt chỉ có rất ít hạt va chạm đối diện với hạt nhân và bị giạt lùi trở lại.

1.3 Lý thuyết tán xạ hạt anpha. Công thức tán xạ Rutherford.

Rutherford giải thích kết quả thí nghiệm trên bằng lý thuyết tán xạ được xây dựng như sau:

1.3.1. Các giả thiết gần đúng

- Lá vàng cực mỏng có thể coi như là một lớp nguyên tử sao cho mỗi hạt anpha chỉ tán xạ một lần.

- Lực gây ra tán xạ chỉ thuần túy là lực tĩnh điện (bỏ qua tương tác hấp dẫn).

Điều này hoàn toàn phù hợp vì tương tác hấp dẫn bé hơn rất nhiều so với tương tác tĩnh điện. Ta có thể thấy như sau:

$$\frac{F_E}{F_{hd}} = \frac{ke^2}{Gm_p m_e} = \frac{9 \cdot 10^9 \cdot 1,6^2 \cdot 10^{-38}}{8,86 \cdot 10^{-11} \cdot 1,67 \cdot 10^{-27} \cdot 9,1 \cdot 10^{-31}} \approx 10^{35}$$

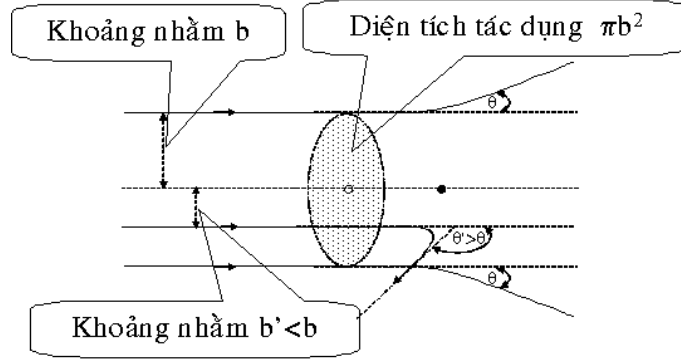
- Vì electron có khối lượng rất bé so với hạt nhân nên bỏ qua tương tác electron với hạt anpha.

- Coi điện tích hạt anpha và hạt nhân là điện tích điểm có giá trị tương ứng là $+2e$ và $+Ze$.

- Vì hạt nhân vàng có khối lượng lớn hơn rất nhiều so với khối lượng hạt anpha nên có thể xem trong quá trình va chạm hạt nhân vàng đứng yên.

1.3.2. Sơ đồ bài toán va chạm

Dựa vào các giả thuyết lý tưởng trên ta có thể vẽ được sơ đồ bài toán va chạm giữa hạt alpha và hạt nhân vàng như hình 1.2.



Hình 1.2: Sơ đồ bài toán va chạm

1.3.3. Giải bài toán

Giả sử hạt α có động năng T đang bay đến gần một hạt nhân của lá vàng theo phương cách hạt nhân một khoảng b được gọi là khoảng nhằm. Khoảng nhằm b đóng vai trò như một thông số va chạm, liên quan đến góc tán xạ θ như hình vẽ (1.2)

Khi hạt α bay đến gần hạt nhân vàng thì lực Coulumb tăng lên rất nhanh; động năng hạt α sẽ chuyển thành thế năng của trường lực Coulumb:

$$U = \frac{2kZe^2}{r} \quad (I.1)$$

Theo kết quả đã được chứng minh trong cơ học, dưới tác dụng của lực Coulumb hạt α sẽ chuyển động theo quỹ đạo Hyperbol. Quỹ đạo này nhận vị trí hạt nhân vàng làm một trong hai tiêu điểm của nó.

Góc tán xạ chính là góc hợp giữa hai đường tiệm cận của Hyperbol đó. Cũng theo kết quả tính toán trong cơ học ta có công thức tính góc tán xạ θ là:

$$\text{Cotg} \left(\frac{\theta}{2} \right) = \frac{Tb}{kZe^2} \quad (I.2)$$

Từ công thức (1.2) cho thấy muốn tính được góc tán xạ θ thì phải đo được khoảng nhằm b . Khoảng nhằm b có thể đo gián tiếp như sau:

Ta thấy nếu khoảng nhằm b giảm thì góc tán xạ θ sẽ tăng lên. Như vậy hạt α sẽ bay theo một phương nào đó trong phạm vi diện tích hình tròn πb^2 bao quanh hạt nhân thì chắc chắn sẽ bị tán xạ theo một góc $\theta' \geq \theta$. Diện tích $\sigma = \pi b^2$ được gọi là diện tích tương tác của hạt nhân.

Bây giờ ta hãy xét cụ thể với lá vàng có bề dày d . Gọi n là mật độ hạt nhân vàng thì trên một đơn vị diện tích có nd hạt nhân. Nếu cho một chùm hạt α có diện tích tiết diện là S bay đến lá vàng thì chùm hạt đó sẽ bao quanh ndS hạt nhân. Tổng diện tích tương tác của ndS hạt nhân trên là:

$$\sigma ndS = \pi b^2 ndS \quad (I.3)$$

Gọi u là tỷ số giữa các hạt α có góc tán xạ $\theta' \geq \theta$ và tổng số hạt α bay tới thì ta có:

$$u = \frac{N_{\theta' \geq \theta}}{N} = \frac{S_{tt}}{S} = nd\pi b^2 \quad (I.4)$$

Trong đó $N_{\theta' \geq \theta}$ là tổng số hạt có góc tán xạ $\theta' \geq \theta$.

N là tổng số hạt bay tới lá vàng.

S_{tt} là diện tích tác dụng.

Từ công thức (1.2) ta suy ra:

$$b = \frac{kZe^2}{T} \cotg \left(\frac{\theta}{2} \right)$$

Thay vào công thức (1.4) ta có:

$$u = nd\pi b^2 = n\pi d \left(\frac{kZe^2}{T} \right)^2 \cotg^2 \left(\frac{\theta}{2} \right) \quad (I.5)$$

Công thức (I.5) cho ta biết xác suất tìm thấy hạt α có góc tán xạ lớn hơn giá trị góc θ . Xác suất này có giá trị rất bé khi góc θ lớn. Ta hãy xét thí dụ sau để minh họa cho nhận xét đó:

Trong thí nghiệm Rutherford hạt α có động năng là $T = 7,7 \text{ MeV}$; bề dày lá vàng là $d = 3 \cdot 10^{-7} \text{ m}$, khối lượng riêng của vàng là $\rho = 1,93 \cdot 10^4 \left(\frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \right)$; nguyên tử khối $A = 197$; nguyên tử số $Z = 97$; số Avôgadrô $N_A = 6,022 \cdot 10^{23} \left(\frac{1}{\text{Mol}} \right)$. Tính xác suất u khi $\theta = 10^\circ$ và khi $\theta = 60^\circ$.

Mật độ hạt nhân vàng là:

$$n = \frac{\rho N_A}{A} \Rightarrow u = \frac{\pi \rho N_A d}{A} \left(\frac{kZe^2}{T} \right)^2 \cotg^2 \left(\frac{\theta}{2} \right)$$

Khi $\theta = 10^\circ$ ta có:

$$u = \frac{\pi \cdot 1,93 \cdot 10^4 \cdot 6,022 \cdot 10^{26} \cdot 3 \cdot 10^{-7}}{197} \left(\frac{9 \cdot 10^9 \cdot 79 \cdot 1,6^2 \cdot 10^{-38}}{7,7 \cdot 10^6 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}} \right)^2 \cotg^2 \left(\frac{10^\circ}{2} \right) \approx 1,59 \cdot 10^{-3} = 0,159\%$$

Khi $\theta = 60^\circ$ ta có:

$$u = \frac{\pi \cdot 1,93 \cdot 10^4 \cdot 6,022 \cdot 10^{26} \cdot 3 \cdot 10^{-7}}{197} \left(\frac{9 \cdot 10^9 \cdot 79 \cdot 1,6^2 \cdot 10^{-38}}{7,7 \cdot 10^6 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}} \right)^2 \cotg^2 \left(\frac{60^\circ}{2} \right) \approx 36,4 \cdot 10^{-6} = 0,00364\%$$

Rõ ràng khi góc tán xạ θ tăng thì xác suất tìm thấy hạt θ giảm rất nhanh.

Bây giờ ta tiếp tục xét số hạt anpha bay theo hướng tán xạ từ θ đến $\theta + d\theta$. Trong đó $d\theta$ là một góc vô cùng bé nằm lân cận góc θ . Để làm điều này ta hãy lấy đạo hàm biểu thức (I.5) theo θ ta được:

$$|du| = \pi dn \left(\frac{kZe^2}{T} \right)^2 \frac{\cotg \left(\frac{\theta}{2} \right)}{\sin^2 \left(\frac{\theta}{2} \right)} d\theta \quad (I.6)$$

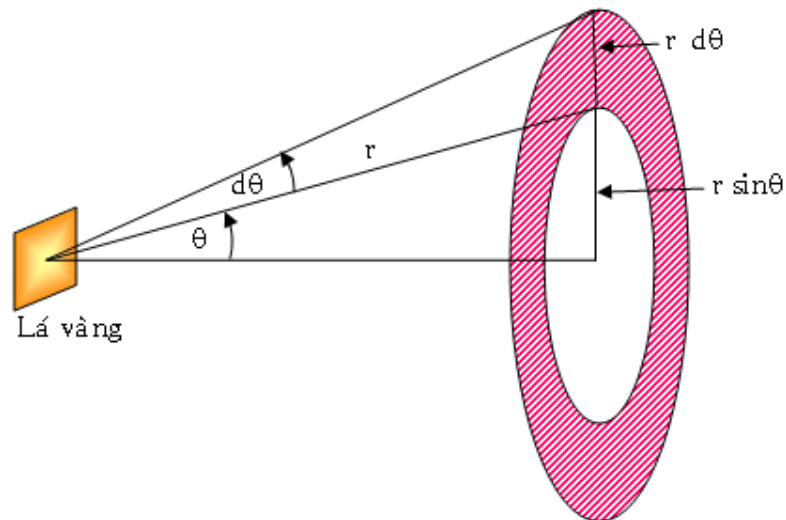
Trong thí nghiệm Rutherford ta có sơ đồ tán xạ như hình (I.3):

Từ sơ đồ hình (I.3) ta thấy dS là diện tích đối cầu mà hạt anpha có góc tán xạ từ θ đến $\theta + d\theta$ là:

$$dS = 2 \cdot \pi \cdot r^2 \cdot \sin \theta d\theta = 4\pi r^2 \sin \left(\frac{\theta}{2} \right) \cos \left(\frac{\theta}{2} \right) d\theta$$

Gọi N_o là tổng số hạt anpha đi qua lá vàng thì số hạt có góc tán xạ từ θ đến $\theta + d\theta$ là $N_o |du|$. Nếu tính trên một đơn vị diện tích thì số hạt có góc tán xạ từ θ đến $\theta + d\theta$ là:

$$N(\theta) = \frac{N_o |du|}{dS} = \frac{N_o \pi n d \left(\frac{kZe^2}{T} \right)^2 \cotg \left(\frac{\theta}{2} \right)}{4\pi r^2 \sin^3 \left(\frac{\theta}{2} \right) \cos \left(\frac{\theta}{2} \right)} d\theta = \frac{N_o n d}{r^2 \sin^4 \left(\frac{\theta}{2} \right)} \left(\frac{kZe^2}{2T} \right)^2$$



Hình 1.3: Sơ đồ tán xạ

$$\Rightarrow N(\theta) \sin^4\left(\frac{\theta}{2}\right) = \frac{N_{ond}}{r^2} \left(\frac{kZe^2}{2T}\right)^2 = Const \quad (I.7)$$

Công thức (I.7) trên là công thức Rutherford. Công thức này cho phép xác định số hạt alpha có động năng T sẽ bị tán xạ theo góc θ trên một đơn vị diện tích nghiên cứu. Công thức này phù hợp khá tốt với thực nghiệm chứng tỏ lý thuyết tán xạ của Rutherford là đúng đắn.

§2 MẪU HÀNH TINH NGUYÊN TỬ VÀ KÍCH THUỐC HẠT NHÂN

2.1 Mẫu hành tinh nguyên tử của Rutherford

Dựa vào kết quả thí nghiệm tán xạ hạt alpha của mình, Rutherford đã đưa ra mẫu nguyên tử khác với mẫu hành nhân của Thomson gọi là mẫu hành tinh nguyên tử Rutherford có các nội dung cơ bản như sau:

- Nguyên tử gồm có hạt nhân chiếm một thể tích cực nhỏ ở chính giữa. Hạt nhân mang điện tích dương và chiếm hầu hết khối lượng nguyên tử.
- Xung quanh hạt nhân là các electron chuyển động theo quỹ đạo elip hoặc tròn.
- Số electron đúng bằng nguyên tử số Z của nguyên tử. Tổng số điện tích dương của hạt nhân bằng tổng trị tuyệt đối của điện tích âm của các electron nên nguyên tử trung hoà về điện.

Mẫu hành tinh nguyên tử Rutherford là mẫu nguyên tử cổ điển thích hợp nhất cho phép áp dụng để giải thích được rất nhiều hiện tượng và tính chất vật lý nên nó được sử dụng rộng rãi cho đến ngày nay.

2.2 Kích thước hạt nhân nguyên tử

Trong thí nghiệm tán xạ Rutherford, khi góc tán xạ θ càng tăng thì sai số so với công thức tán xạ Rutherford càng tăng, góc tán xạ θ tăng đến một giá trị nào đó thì công thức tán xạ Rutherford không còn đúng nữa. Điều này cho phép ta suy ra rằng khi khoảng nhằm $b < b_0$ thì ngoài tương tác tĩnh điện giữa hạt α và hạt nhân còn xuất hiện một tương tác khác mạnh hơn tương tác điện trường. Tương tác ấy chỉ có thể xem là va chạm trực tiếp giữa hạt anpha với hạt nhân nguyên tử.

Như vậy có thể xem b_0 là kích thước hạt nhân nguyên tử. Thực nghiệm đo được kích thước này cỡ $10^{-13}m$ đến $10^{-14}m$ (cỡ femtô). Ta biết nguyên tử có kích thước cỡ $10^{-10}m$ đến $10^{-11}m$, như vậy hạt nhân bé hơn nguyên tử hàng ngàn lần.

2.3 Hạn chế của mẫu hành tinh nguyên tử Rutherford

2.3.1. Quang phổ nguyên tử phải là quang phổ vạch

Theo mẫu nguyên tử Rutherford thì các electron quay tròn (gần tròn) xung quanh hạt nhân, như vậy nó sẽ tạo thành dòng điện tròn (dòng điện phân tử). Trong trường hợp đó nó phải bức xạ năng lượng liên tục và quang phổ của nguyên tử phải là quang phổ liên tục. Thực nghiệm lại thu được quang phổ của nguyên tử là quang phổ vạch. Đây là một hạn chế của mẫu hành tinh nguyên tử Rutherford: ***không cho phép giải thích nguyên nhân gây ra quang phổ vạch của nguyên tử.***

2.3.2. Nguyên tử phải tồn tại bền vững

Theo mẫu hành tinh nguyên tử Rutherford thì electron khi quay quanh hạt nhân trong nguyên tử phải bức xạ năng lượng liên tục (sóng điện từ) như vậy năng lượng của nó phải giảm dần theo thời gian. Vận tốc quỹ đạo của electron sẽ giảm dần, nó sẽ bị rơi vào hạt nhân và nguyên tử sẽ bị huỷ trong thời gian rất bé. Như vậy nguyên tử không thể tồn tại bền vững. Điều này trái với thực tế: ***trong tự nhiên nguyên tử tồn tại vô cùng bền vững.***

Trên đây là hai hạn chế cơ bản của mẫu hành tinh nguyên tử Rutherford. Hai hạn chế này sẽ được khắc phục bởi hai định đề của Bohr mà ta sẽ có dịp đề cập đến trong phần sau. Mặc dù còn có hạn chế nhất định, nhưng mẫu hành tinh nguyên tử đã giúp ta giải thích được rất nhiều hiện tượng và tính chất vật lý. Chính vì vậy mẫu hành tinh nguyên tử Rutherford được sử dụng rộng rãi, đặc biệt là trong vật lý cổ điển như là một mô hình trực quan sáng giá nhất.

§3 QUY LUẬT QUANG PHỔ CỦA NGUYÊN TỬ HYDRO

3.1 Các dãy quang phổ của nguyên tử Hydro

Bằng thực nghiệm các nhà khoa học đã nghiên cứu khá kỹ về quang phổ của nguyên tử Hydro: quang phổ nguyên tử Hydro là quang phổ vạch và sắp xếp thành các dãy riêng biệt, gọi là các dãy quang phổ Hydro. Gồm có năm dãy cơ bản sau:

3.1.1. Dãy Lyman

Khi nghiên cứu quang phổ nguyên tử Hydro, Lyman phát hiện ra một số vạch quang phổ sắp xếp thành một dãy nằm trong miền tử ngoại có bước sóng xác định theo công thức:

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{1} - \frac{1}{n^2} \right)$$

Trong đó $R = 1,096776 \cdot 10^7 \left(\frac{1}{m} \right)$ là hằng số Rydberg.

λ là bước sóng trong dãy Lyman

n là số nguyên lớn hơn 1

3.1.2. Dãy Balmer

Đây là dãy quang phổ của nguyên tử Hydro nằm trong miền ánh sáng nhìn thấy do Balmer phát hiện từ thực nghiệm. Bước sóng của nó được xác định theo công thức:

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

Trong đó $R = 1,096776 \cdot 10^7 \left(\frac{1}{m} \right)$ là hằng số Ridberg.

λ là bước sóng trong dãy Balmer

n là số nguyên lớn hơn 2

3.1.3. Dãy quang phổ Paschen

Đây là dãy quang phổ gồm các vạch quang phổ nằm trong miền hồng ngoại gần, có bước sóng xác định từ công thức thực nghiệm:

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

Trong đó $R = 1,096776 \cdot 10^7 \left(\frac{1}{m} \right)$ là hằng số Ridberg.

λ là bước sóng trong dãy Paschen

n là số nguyên lớn hơn 3

3.1.4. Dãy Brackett

Đây là dãy quang phổ Hydro tập hợp các vạch nằm trong miền hồng ngoại xa, nghĩa là có bước sóng lớn hơn bước sóng của các vạch quang phổ trong dãy Paschen. Bước sóng của chúng được xác định theo công thức:

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

Trong đó $R = 1,096776 \cdot 10^7 \left(\frac{1}{m} \right)$ là hằng số Ridberg.

λ là bước sóng trong dãy Brackett

n là số nguyên lớn hơn 4

3.1.5. Dãy Pfum

Đây là dãy quang phổ nguyên tử Hydro nằm trong miền hồng ngoại rất xa. Bước sóng của nó xác định theo công thức:

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{5^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

Trong đó $R = 1,096776 \cdot 10^7 \left(\frac{1}{m} \right)$ là hằng số Ridberg.

λ là bước sóng trong dãy Pfum

n là số nguyên lớn hơn 5

3.2 Công thức Balmer tổng quát

Từ các công thức thực nghiệm vừa được trình bày trong phần trên, Balmer đã xây dựng một công thức cho phép xác định bước sóng của vạch quang phổ nguyên tử Hydro bất kì. Công thức đó được gọi là công thức Balmer tổng quát:

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_k^2} \right) \quad (I.8)$$

Trong đó $R = 1,096776 \cdot 10^7 \left(\frac{1}{m} \right)$ là hằng số Ridberg.

λ là bước sóng trong dãy quang phổ

n_i là số nguyên nhận các giá trị 1, 2, 3, 4, 5 ứng với các dãy quang phổ Lyman, Balmer, Paschen, Brackett, Pfum.

n_k là số nguyên, $n_k > n_i$.

Từ công thức (I.8) dễ thấy rằng ta có thể tính được khoảng bước sóng ứng với các dãy quang phổ nguyên tử Hydrô. Bước sóng sẽ có giá trị lớn nhất khi $n_k = n_i + 1$ sẽ có giá trị bé nhất khi $n_k = \infty$.

Ta hãy tính cụ thể các dãy quang phổ:

3.2.1. Bước sóng ngắn nhất của các dãy quang phổ

Từ (I.8) khi $n_k = \infty$ ta có:

$$\lambda = \frac{n_i^2}{R}$$

- Trong dãy Lyman thì $n_i = 1$ nên:

$$\lambda_{MinL} = \frac{1^2}{1,096776.10^7} = 0,091.10^{-6}(m) = 0,091(\mu m)$$

- Trong dãy Balmer thì $n_i = 2$ nên:

$$\lambda_{MinB} = \frac{2^2}{1,096776.10^7} = 0,364.10^{-6}(m) = 0,364(\mu m)$$

- Trong dãy Paschen thì $n_i = 3$ nên:

$$\lambda_{MinP} = \frac{3^2}{1,096776.10^7} = 0,819.10^{-6}(m) = 0,819(\mu m)$$

- Trong dãy Brackett thì $n_i = 4$ nên:

$$\lambda_{MinBk} = \frac{4^2}{1,096776.10^7} = 1,456.10^{-6}(m) = 1,456(\mu m)$$

- Trong dãy Pfum thì $n_i = 5$ nên:

$$\lambda_{MinPf} = \frac{5^2}{1,096776.10^7} = 2,275.10^{-6}(m) = 2,275(\mu m)$$

3.2.2. Bước sóng dài nhất trong các dãy quang phổ Hydrô

Từ công thức (I.8) ta có:

$$\lambda_{Max} = \frac{1}{R} \left(\frac{n_k^2 \cdot n_i^2}{n_k^2 - n_i^2} \right)$$

Khi n_k nhỏ nhất ta sẽ có vạch quang phổ có bước sóng dài nhất trong các dãy quang phổ tương ứng.

- Đối với dãy Lyman thì $n_i = 1$; $n_k = 2$ nên:

$$\lambda_{MaxL} = \frac{1}{1,096776.10^7} \left(\frac{2^2 \cdot 1^2}{2^2 - 1^2} \right) = 0,123.10^{-6}(m) = 0,123(\mu m)$$

- Đối với dãy Balmer thì $n_i = 2$; $n_k = 3$ nên:

$$\lambda_{MaxB} = \frac{1}{1,096776.10^7} \left(\frac{3^2 \cdot 2^2}{3^2 - 2^2} \right) = 0,656.10^{-6}(m) = 0,656(\mu m)$$

- Đối với dãy Paschen thì $n_i = 3$; $n_k = 4$ nên:

$$\lambda_{MaxP} = \frac{1}{1,096776 \cdot 10^7} \left(\frac{4^2 \cdot 3^2}{4^2 - 3^2} \right) = 1,876 \cdot 10^{-6}(m) = 1,876(\mu m)$$

- Đối với dãy Brackett thì $n_i = 4$; $n_k = 5$ nên:

$$\lambda_{MaxBk} = \frac{1}{1,096776 \cdot 10^7} \left(\frac{5^2 \cdot 4^2}{5^2 - 4^2} \right) = 4,05 \cdot 10^{-6}(m) = 4,05(\mu m)$$

- Đối với dãy Pfum thì $n_i = 5$; $n_k = 6$ nên:

$$\lambda_{MaxPf} = \frac{1}{1,096776 \cdot 10^7} \left(\frac{6^2 \cdot 5^2}{6^2 - 5^2} \right) = 7,46 \cdot 10^{-6}(m) = 7,46(\mu m)$$

Vậy các dãy quang phổ Hydro có khoảng bước sóng là:

- Dãy Lyman: $\lambda_{MinL} \div \lambda_{MaxL} = 0,091 \div 0,123(\mu m)$
- Dãy Balmer: $\lambda_{MinB} \div \lambda_{MaxB} = 0,364 \div 0,656(\mu m)$
- Dãy Paschen: $\lambda_{MinP} \div \lambda_{MaxP} = 0,819 \div 1,876(\mu m)$
- Dãy Brackett: $\lambda_{MinBk} \div \lambda_{MaxBk} = 1,456 \div 4,05(\mu m)$
- Dãy Pfum: $\lambda_{MinPf} \div \lambda_{MaxPf} = 2,257 \div 7,46(\mu m)$

Từ kết quả trên cho thấy có miền quang phổ giao nhau, chẳng hạn dãy Brackett và Pfum có một miền khá rộng bước sóng các vạch quang phổ giao nhau.

§4 THUYẾT BOHR. CẤU TRÚC NGUYÊN TỬ HYDRO VÀ CÁC ION TƯƠNG TỰ

4.1 Lý thuyết Bohr

Để khắc phục hai hạn chế cơ bản của mẫu hành tinh nguyên tử Rutherford, giải quyết bế tắc cho vật lý trong thời kỳ khó khăn, năm 1913 nhà vật lý Đan mạch vĩ đại Niels Bohr đã đề xướng ra mô hình nguyên tử Hydro. Mô hình này không những giải thích được sự tồn tại của các vạch quang phổ mà còn tiên đoán được bước sóng của chúng chính xác đến 0,02% mà không cần bất kì một tham số hiệu chỉnh nào. Nội dung cơ bản của lý thuyết Bohr là hai tiên đề.

4.1.1. Tiên đề về trạng thái dừng

Nguyên tử chỉ tồn tại trong những trạng thái có năng lượng xác định và gián đoạn, hợp thành một chuỗi các giá trị $E_1, E_2, \dots, E_n, \dots$ gọi là trạng thái dừng. Trong trạng thái dừng electron không bức xạ mà chỉ chuyển động trên quỹ đạo tròn gọi là quỹ đạo lượng tử có bán kính thoả mãn điều kiện lượng tử hoá của Bohr: Mômen động lượng $L = m_e v r = n \hbar$

Trong đó: n là số nguyên dương, $\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,055 \cdot 10^{-34} Js$ là hằng số Plank rút gọn, r là bán kính quỹ đạo Bohr, m_e là khối lượng electron, v là vận tốc electron trên quỹ đạo dừng.

Giả thuyết về lượng tử hoá năng lượng của Bohr rõ ràng là đối nghịch với lí thuyết cổ điển. Nhưng theo Bohr thì "*cứ giả thuyết như vậy để xem có gì xảy ra*". Và quả là đã có quá nhiều vấn đề xảy ra sau giả thuyết táo bạo này của Ông!

Chúng ta cần chú ý rằng trong giả thuyết này không hề đề cập đến vấn đề làm thế nào để tính được năng lượng của các trạng thái dừng nhưng sau này vận dụng tiên đề Bohr lại cho phép xác

định năng lượng trạng thái dừng của nguyên tử Hydro và các Iôn tương tự Hydro với độ chính xác cao vượt quá mong đợi của thời kì đó.

4.1.2. Tiên đề về bức xạ và hấp thụ

Nguyên tử chỉ phát xạ hay hấp thụ năng lượng dưới dạng bức xạ điện từ khi nó chuyển từ trạng thái dừng này sang trạng thái dừng khác, tức là electron chuyển từ quỹ đạo dừng này sang quỹ đạo dừng khác. Tần số của bức xạ điện từ mà nguyên tử phát xạ hay hấp thụ được tính theo biểu thức:

$$\nu = \frac{E_{n_k} - E_{n_i}}{h} \quad (I.9)$$

Trong đó $E_{n_k}; E_{n_i}$ là mức năng lượng trạng thái đầu và trạng thái cuối của nguyên tử (tức năng lượng electron). Nếu $E_{n_k} > E_{n_i}$ thì nguyên tử phát xạ năng lượng, ngược lại thì nguyên tử hấp thụ năng lượng.

4.2 Cấu trúc của nguyên tử Hydro theo lý thuyết Bohr

Trong nguyên tử nói chung, trong nguyên tử Hydro nói riêng, lực tĩnh điện (Lực Coulumb) đóng vai trò làm lực hướng tâm (như đã trình bày trong phần (1.3) lực hấp dẫn là vô cùng bé nên có thể bỏ qua).

$$|F_{hd}| = |f_{ht}| \Leftrightarrow \frac{ke^2}{r^2} = \frac{m_e v^2}{r} \Rightarrow \frac{m_e v^2}{2} = \frac{ke^2}{2r} \quad (I.10)$$

Vì năng lượng của hạt electron trong nguyên tử bao gồm động năng $E_d = \frac{m_e v^2}{2}$ và thế năng trong trường tĩnh điện $E_t = -\frac{ke^2}{r}$ nên ta có thể tính năng lượng của electron theo công thức:

$$E = E_d + E_t = \frac{m_e v^2}{2} - \frac{ke^2}{r} = -\frac{ke^2}{2r} < 0 \quad (I.11)$$

Công thức (I.11) cho thấy năng lượng electron trong nguyên tử là âm, chứng tỏ nguyên tử tồn tại bền vững.

Theo điều kiện lượng tử hoá của Bohr ta có:

$$L = m_e v r = n\hbar \Rightarrow m_e v^2 = \frac{n^2 \hbar^2}{m_e r^2} \quad (I.12)$$

Kết hợp (I.10) và (I.12) ta được:

$$\frac{ke^2}{r} = \frac{n^2 \hbar^2}{m_e r^2} \Rightarrow r = \frac{n^2 \hbar^2}{k m_e e^2}$$

Vì bán kính quỹ đạo r phụ thuộc vào số nguyên n nên ta thêm chỉ số n :

$$r_n = \frac{n^2 \hbar^2}{k m_e e^2} \quad (I.13)$$

Công thức (I.13) là công thức xác định bán kính quỹ đạo dừng trong nguyên tử Hydro. Công thức này cho thấy bán kính quỹ đạo dừng không thể nhận giá trị liên tục mà chỉ có khả năng nhận một số giá trị gián đoạn, rời rạc. Đây là một tính chất hoàn toàn mới chỉ có thể nhận được từ lý

thuyết Bohr: **Tính chất lượng tử hoá quỹ đạo.**

Cũng từ (I.13) cho ta thấy bán kính quỹ đạo lượng tử tỷ lệ với bình phương các số tự nhiên. Khi $n = 1$ thì bán kính nhận giá trị nhỏ nhất và được gọi là bán kính quỹ đạo Bohr thứ nhất. Giá trị của bán kính quỹ đạo Bohr thứ nhất là:

$$r_1 \equiv a = \frac{1^2 \cdot (1,055 \cdot 10^{-34})^2}{9 \cdot 10^9 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot (1,6 \cdot 10^{-19})^2} \approx 5,3 \cdot 10^{-11}(m) = 0,53(A^\circ) \quad (I.14)$$

Tương tự ta thiết lập công thức tính vận tốc của electron trên quỹ đạo dừng như sau:

$$L = m_e v_n r_n = n\hbar \Rightarrow v_n = \frac{n\hbar}{m_e r_n}$$

Thay (I.13) vào ta được:

$$v_n = \frac{n\hbar}{m_e r_n} = \frac{n\hbar k m_e e^2}{m_e n^2 \hbar^2} = \frac{k e^2}{n\hbar} \quad (I.15)$$

(I.15) là công thức xác định vận tốc của electron trên quỹ đạo dừng. Vận tốc cũng bị lượng tử hoá. Trên một quỹ đạo xác định thì vận tốc của electron hoàn toàn xác định và không hề thay đổi theo thời gian, điều đó cũng có nghĩa là nguyên tử tồn tại bền vững. Vận tốc của electron ở quỹ đạo Bohr thứ nhất là lớn nhất. Càng "nhảy lên" quỹ đạo cao vận tốc của electron càng giảm (tỷ lệ nghịch với số nguyên n).

Ta có thể tính vận tốc electron trên quỹ đạo bất kì. Chẳng hạn trên quỹ đạo cơ bản vận tốc của nó là

$$v_1 = \frac{9 \cdot 10^9 \cdot (1,6 \cdot 10^{-19})^2}{1,1 \cdot 0,55 \cdot 10^{-34}} \approx 2183886(m/s) \quad (I.16)$$

Ta thấy rằng vận tốc này rất lớn.

Thay biểu thức bán kính quỹ đạo Bohr vào biểu thức năng lượng (I.11) ta thu được biểu thức:

$$E_n = -\frac{k e^2}{2r_n} = -\frac{k e^2 k m_e e^2}{2n^2 \hbar^2} = -\frac{k^2 e^4 m_e}{2n^2 \hbar^2} \quad (I.17)$$

Công thức này cũng cho thấy năng lượng cũng bị lượng tử hoá.

Vì vận tốc, bán kính quỹ đạo, năng lượng đều bị lượng tử hoá và đều phụ thuộc vào số nguyên dương n , nên n được gọi là lượng tử số chính.

Giá trị năng lượng của electron trên các quỹ đạo dừng là:

- Khi $n = 1$ ta có mức năng lượng thấp nhất (năng lượng cơ bản):

$$E_1 = -\frac{(9 \cdot 10^9)^2 \cdot (1,6 \cdot 10^{-19})^4 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31}}{2 \cdot 1^2 (1,055 \cdot 10^{-34})^2} \simeq -2,17 \cdot 10^{-18}(J) = -13,56(eV)$$

- Khi $n = 2$ ta có mức năng lượng kích thích thứ nhất:

$$E_2 = -\frac{(9 \cdot 10^9)^2 \cdot (1,6 \cdot 10^{-19})^4 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31}}{2 \cdot 2^2 (1,055 \cdot 10^{-34})^2} \simeq -0,5425 \cdot 10^{-18}(J) = -3,39(eV)$$

- Khi $n = 3$ ta có mức năng lượng kích thích thứ hai:

$$E_3 = -\frac{(9 \cdot 10^9)^2 \cdot (1,6 \cdot 10^{-19})^4 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31}}{2 \cdot 3^2 (1,055 \cdot 10^{-34})^2} \simeq -0,24 \cdot 10^{-18}(J) = -1,51(eV)$$

Kết quả tính toán trên cho thấy khi electron nhảy lên trạng thái kích thích càng cao thì các mức năng lượng càng xích lại gần nhau hơn. Đây là lý do vì sao ta rất khó phân biệt các mức năng lượng cao kế tiếp nhau. Cũng vì vậy ta khó quan sát được các vạch quang phổ bậc cao trong thí nghiệm. Thực tế chỉ có thể quan sát được một số vạch quang phổ ở đầu mỗi dãy quang phổ nguyên tử.

Khi cho $n \rightarrow \infty$ thì $E_n \rightarrow 0$ nghĩa là nguyên tử đã bị Ion hoá. Ta cũng có thể xem năng lượng cơ bản E_1 là năng lượng Ion hoá nguyên tử.

4.3 Công thức Balmer tổng quát

Dựa vào các kết quả trên đây và tiên đề thứ hai của Bohr ta dễ dàng suy ra công thức Banmer tổng quát như sau:

$$\begin{aligned}\nu &= \frac{c}{\lambda} = \frac{E_{n_k} - E_{n_i}}{h} = \frac{k^2 m_e e^4}{2\hbar^2 h} \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_k^2} \right) \\ \Rightarrow \frac{1}{\lambda} &= \frac{k^2 m_e e^4}{2\hbar^2 h c} \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_k^2} \right) = R \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_k^2} \right)\end{aligned}\quad (I.18)$$

Đây là công thức Balmer tổng quát, trong đó:

$$R = \frac{k^2 m_e e^4}{2\hbar^2 h c} = \frac{(9.10^9)^2 \cdot 9.1 \cdot 10^{-31} \cdot (1.6 \cdot 10^{-19})^4}{2 \cdot (1.055 \cdot 10^{-34})^2 \cdot 6.625 \cdot 10^{-34} \cdot 3 \cdot 10^8} \approx 1,091853 \cdot 10^7 (1/m)$$

là hằng số Ridberg. Giá trị tính toán này chỉ có ý nghĩa gần đúng vì các hằng số ta sử dụng ở đây có sai số.

4.4 Cấu trúc của các Ion tương tự Hyđrô

4.4.1. Ion tương tự Hyđrô là gì?

Những Ion mà chỉ có duy nhất một electron ở lớp vỏ ngoài thì gọi là Ion tương tự Hyđrô
Ví dụ He^{+1} ; Li^{+2} ,...

Xét về mặt tương tác giữa electron với hạt nhân thì Ion tương tự Hyđrô hoàn toàn tương tự nguyên tử Hyđrô vì không có tương tác nhiễu loạn giữa các electron với nhau.

4.4.2. Cấu trúc của các Ion tương tự Hyđrô

Do chỉ có duy nhất một electron ở lớp ngoài nguyên tử nên ta có thể xét cấu trúc các Ion tương tự Hyđrô hoàn toàn tương tự như xét cấu trúc của nguyên tử Hyđrô. Điều khác biệt duy nhất ở đây là điện tích hạt nhân của các Ion này là $+Ze$ thay vì điện tích $+1e$ như trường hợp của nguyên tử Hyđrô. Thực hiện tương tự như mục (4.2) ta thu được các kết quả là:

- Bán kính quỹ đạo:

$$r_n = \frac{n^2 \hbar^2}{Z k m_e e^2} \quad (I.19)$$

- Vận tốc trên quỹ đạo dừng:

$$v_n = \frac{Z k e^2}{n \hbar} \quad (I.20)$$

- Năng lượng electron trên quỹ đạo dừng:

$$E_n = -\frac{Z^2 k^2 e^4 m_e}{2 n^2 \hbar^2} \quad (I.21)$$

Các công thức (I.19; I.20; I.21) cho ta thấy bán kính quỹ đạo giảm đi Z lần, trong khi đó vận tốc tăng lên Z lần. Khoảng cách giữa các mức năng lượng thì lớn hơn so với của nguyên tử Hyđrô, và như vậy quang phổ của chúng chủ yếu nằm trong miền tử ngoại.

4.5 Đánh giá lý thuyết Bohr

Lý thuyết Bohr đã đưa ra một quan niệm Vật lý hoàn toàn mới mẻ: ***Quan niệm lượng tử hoá của nguyên tử***. Có thể nói đây là một cách mạng trong tư duy Vật lý. Nó mở đầu cho một thời đại mới của Vật lý: ***"Thời đại Vật lý lượng tử"***

Lý thuyết Bohr đã đạt được một số thành công nhất định là: *"Dùng lý thuyết Bohr có thể giải thích được bài toán cấu trúc nguyên tử đơn giản, nhất là với nguyên tử Hyđrô và các Iôn tương tự Hyđrô mà ta đã trình bày trong các phần trên. Đặc biệt nó cho phép tính toán chính xác quang phổ Hyđrô bằng cách thành lập được công thức Balmer tổng quát"*.

Tuy nhiên lý thuyết này còn có thiếu sót: *"Bản thân lý thuyết Bohr chưa nhất quán ở chỗ: khi đưa ra quan niệm lượng tử có tính cách mạng và độc đáo thì Bohr vẫn sử dụng các quy luật, các định luật của cơ học, của điện học cổ điển. Các quy tắc lượng tử gắn với hình mẫu cổ điển không theo một mối liên hệ logic nào cả. Lý thuyết Bohr cũng không thể áp dụng để giải thích cấu trúc các nguyên tử phức tạp."*

Vào thời kỳ đầu thế kỷ XX thì những thiếu sót như đã nêu là hiển nhiên vì nhận thức của Vật lý về thế giới vật chất còn nhiều hạn chế so với thế kỷ này. Cho dù chưa hoàn hảo (mà trên thế gian này làm gì có cái hoàn hảo vĩnh cửu !) nhưng lý thuyết Bohr đã là chiếc cầu nối quan trọng để khoa học Tự nhiên nói chung, Vật lý học nói riêng bước sang một trang mới.

§5 BÀI TẬP CHƯƠNG I

Bài I.1

- Vạch quang phổ phát xạ có tầm quan trọng đối với ngành thiên văn vô tuyến có bước sóng là 21cm. Hỏi photon đó có năng lượng là bao nhiêu?
- Mét được định nghĩa bằng 1.650.763,73 bước sóng của ánh sáng màu da cam do một nguồn sáng chứa nguyên tử Krypton- 86 phát xạ. Năng lượng của photon ánh sáng đó là bao nhiêu?

Bài I.2

Một nguyên tử hấp thụ một photon có bước sóng 375nm và phát xạ ngay một photon khác có bước sóng 580nm. Năng lượng thực sự mà nguyên tử đó đã hấp thụ là bao nhiêu?

Bài I.3

Tìm tỷ số giữa bước sóng ngắn nhất của dãy Balmer và bước sóng ngắn nhất của dãy Lyman?

Bài I.4

Phải thực hiện một công là bao nhiêu bởi một tác nhân bên ngoài để phá vỡ nguyên tử Hyđrô, nếu electron đang ở trạng thái cơ bản?

Bài I.5

Tính số lượng tử chính của nguyên tử Hyđrô ứng với bán kính quỹ đạo bằng 0,847nm?

Bài I.6

Xác định động năng, thế năng và cơ năng của electron trên quỹ đạo Bohr thứ nhất và thứ hai?

Bài I.7

Nguyên tử Hydro đang ở trạng thái cơ bản ($n = 1$) được kích thích bởi ánh sáng đơn sắc bước sóng λ . Kết quả nguyên tử Hydro đó phát ra ba vạch quang phổ. Hãy xác định bước sóng ánh sáng kích thích λ .

Bài I.8

Nguyên tử Hydro đang ở trạng thái kích thích thứ n . Hãy tính số vạch quang phổ mà nguyên tử đó có thể phát ra?

Bài I.9

Một nguyên tử Hydro đang ở trạng thái cơ bản thì nhận được một photon có bước sóng $\lambda = 1215\text{\AA}$ và chuyển lên trạng thái kích thích. Tính bán kính quỹ đạo Bohr của trạng thái kích thích đó?

Bài I.10

Nguyên tử Hydro chuyển động, phát xạ ra photon theo hướng hợp với phương chuyển động của nguyên tử một góc $\alpha = 45^\circ$. Bức xạ thu được ứng với sự chuyển mức năng lượng từ mức kích thích thứ nhất xuống mức cơ bản, có bước sóng là $1215,184^\circ$. Tính vận tốc chuyển động của nguyên tử.

Bài I.11

Tính độ thay đổi bước sóng photon gây ra do sự giật lùi của nguyên tử Hydro khi electron chuyển từ mức E_3 về E_2 . Trước khi bức xạ coi nguyên tử đứng yên.

Bài I.12

Nguyên tử Hydro chuyển động phát xạ photon. Dùng các định luật bảo toàn động lượng và bảo toàn năng lượng thiết lập công thức hiệu ứng Doppler trong trường hợp phi tương đối tính và trong trường hợp tương đối tính?

Chương II

CƠ SỞ CỦA CƠ HỌC LƯỢNG TỬ

§1 LƯỢNG TÍNH SÓNG - HẠT CỦA HẠT VI MÔ. GIẢ THIẾT CỦA DE BROGLIE

1.1 Giả thuyết của De Broglie

Trong tự nhiên thường có sự đối xứng. Nhận xét này đã được các nhà Vật lý khai thác triệt để và cũng đã mang lại nhiều kết quả từ đoán nhận đối xứng thật mỹ mãn. Chẳng hạn khi biết từ trường biến thiên tạo ra điện trường người ta đã dự đoán có điều ngược lại, nghĩa là điện trường biến thiên cũng tạo ra từ trường và dự đoán đó đã hoàn toàn đúng. Hoặc người ta dự đoán rằng các hạt đều có phản hạt, ngày nay ta đã tìm được nhiều cặp hạt - phản hạt. Tại trường Đại học tổng hợp California người ta đã cho xây dựng một máy gia tốc năng lượng 5GeV chỉ để kiểm tra dự đoán hạt proton có phản hạt, và người ta đã tìm thấy nó. Còn nhiều tiên đoán khác của Vật lý dựa vào tính đối xứng.

Năm 1924 Louis De Broglie, một nhà Vật lý người Pháp đã trăn trở trước sự thật là ánh sáng có tính lưỡng tính sóng - hạt trong khi đó các hạt khác, như electron chẳng hạn lại chỉ có tính chất hạt? Điều này đối mặt với sự thật là ánh sáng và các chất đều là dạng năng lượng, có thể chuyển hoá cho nhau và cùng tuân theo các đối xứng không - thời gian của lý thuyết tương đối. Từ đó ông nảy ra ý kiến cho rằng vật chất cũng có tính lưỡng tính đó, rằng các hạt, như electron chẳng hạn, cũng có tính chất sóng.

Nếu chúng ta muốn mô tả một hạt chuyển động như một sóng thì chúng ta phải trả lời được câu hỏi: bước sóng của nó bằng bao nhiêu? De Broglie cho rằng bước sóng được xác định theo hệ thức: $\lambda \cdot p = h$. ở đây p là xung lượng của hạt, λ là bước sóng của hạt, còn h là hằng số Plank.

Từ ý tưởng này ông đã đưa ra một giả thuyết táo bạo, gọi là giả thuyết De Broglie về sóng **"vật chất"**, mà sau này thường gọi là sóng ***De Broglie***:

Chuyển động tự do của một hạt vi mô có năng lượng E , xung lượng $\vec{p} = m\vec{v}$ được biểu diễn bởi một sóng phẳng lan truyền theo phương chuyển động của hạt với tần số ν và bước sóng λ được xác định theo các hệ thức:

$$E = h\nu; \quad |\vec{p}| = \frac{h}{\lambda} \quad (\text{II.1})$$

1.2 Cơ bước sóng De Broglie của hạt electron

Để có thể có số liệu tính toán về giá trị cụ thể của sóng De Broglie đối với hạt electron, người ta hình dung ra mẫu thí nghiệm như sau: cho hạt electron được tăng tốc trong điện trường có hiệu điện thế U để nó thu được năng lượng (động năng) E , từ đó áp dụng các hệ thức của De Broglie tính ra bước sóng của nó.

Cụ thể là: khi được tăng tốc trong điện trường thì công của lực điện trường chuyển thành động năng của electron nên:

$$eU = \frac{m_e v^2}{2} \Rightarrow v = \sqrt{\frac{2eU}{m_e}}$$

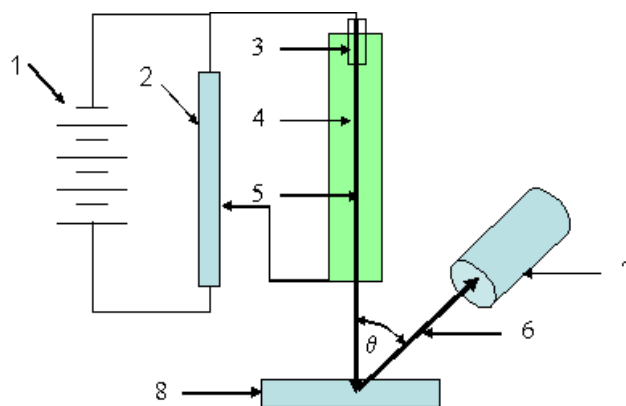
Theo công thức De Broglie ta tính được bước sóng:

$$\lambda = \frac{h}{m_e v} = \frac{h}{\sqrt{2m_e U e}} \approx \frac{6,625 \cdot 10^{-34}}{\sqrt{2.9 \cdot 1.10^{-31} \cdot 1.6 \cdot 10^{-19} \cdot \sqrt{U}}} \approx \frac{12,28}{\sqrt{U}} (A^\circ) \quad (II.2)$$

Từ bài toán trên cho thấy bước sóng De Broglie của electron có giá trị cỡ bước sóng tia X (Ronghen). Như vậy có thể sử dụng các thiết bị thí nghiệm đối với tia X cho sóng De Broglie. Đây chính là một gợi ý quan trọng cho các nhà thực nghiệm tạo thí nghiệm đo bước sóng De Broglie.

§2 THÍ NGHIỆM NHIỀU XẠ CHÙM ELECTRON VÀ NGUYÊN LÝ BẤT ĐỊNH HEISENBERG

2.1 Thí nghiệm nhiễu xạ sóng De Broglie của chùm hạt electron



- | | | |
|--------------------------|-------------------|------------------------|
| 1. Nguồn điện; | 2. Biến trở; | 3. Nguồn phát electron |
| 4. Điện trường tăng tốc; | 5. Chùm tới; | 6. Chùm nhiễu xạ |
| 7. Ống đếm hạt; | 8. Tinh thể Niken | |

Hình II.1: Thí nghiệm Davisson - Germer khi cho góc nhiễu xạ thay đổi

Để khẳng định sự đúng đắn của sóng De Broglie thì cần phải đo được bước sóng của nó từ thực nghiệm. Để đo được bước sóng ta phải có ít nhất là hai tâm nhiễu xạ cách nhau một khoảng cỡ bước sóng mà ta cần đo. Tính toán cho thấy bước sóng De Broglie của electron cỡ Ångstrom, tức cỡ bước sóng tia X nên có thể thực hiện thí nghiệm đo bước sóng nhiễu xạ của sóng De Broglie bằng các thí nghiệm áp dụng cho tia X . Đã có một số thí nghiệm thực hiện thành công việc đo

bước sóng De Broglie của hạt electron cũng như các hạt vi mô khác. Ta hãy xét một số thí nghiệm đo bước sóng De Broglie của hạt electron bằng phương pháp nhiễu xạ.

2.1.1. Thí nghiệm của Davisson - Germer

Thí nghiệm được bố trí như hình (II.1)

Thiết bị thí nghiệm này được C.J Davisson và L.H.Germer thực hiện tại Phòng thí nghiệm AT & T Bell để đo bước sóng De Broglie của hạt electron vào năm 1927 và năm 1937 Davisson đã nhận giải thưởng Nobel về công trình này. Tính đến năm 1988 phòng thí nghiệm AT & T Bell đã nhận được 7 giải thưởng Nobel.

Thí nghiệm được tiến hành như sau:

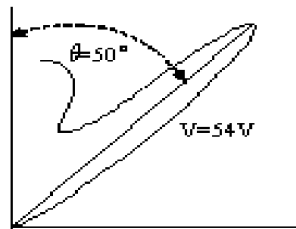
Electron được tạo ra từ nguồn electron nhờ phương pháp phát xạ nhiệt electron. Sau đó chúng được tăng tốc bằng một điện trường có thể điều khiển được. Sau khi được tăng tốc, các hạt electron đập vào bản tinh thể Niken để gây ra nhiễu xạ. Chùm tia nhiễu xạ sẽ được đo bởi máy đếm hạt (thực chất là đo dòng điện do các electron chuyển động qua nó tạo thành).

Các nhà thực nghiệm đặt cho U một giá trị tùy ý xác định nào đó rồi đọc giá trị trên máy đếm hạt khi thay đổi góc đặt θ của máy đếm hạt. Sau đó thay đổi giá trị của U rồi lặp lại thí nghiệm. Kết quả thí nghiệm cho ta đồ thị dạng như hình (II.2) ứng với hiệu điện thế $U = 54V$. Đồ thị cho thấy chùm nhiễu xạ cực đại khi $\theta = 50^\circ$. Khi thay đổi góc nhiễu xạ θ thì cường độ chùm tia nhiễu xạ thay đổi theo.

Thí nghiệm thu được kết quả nhiễu xạ giống như nhiễu xạ tia X, nghĩa là nó tuân theo điều kiện cực đại Wuff - Bragg:

$$d\sin\theta = n\lambda$$

Trong đó d là hằng số mạng. Đối với tinh thể Niken thì $d = 2,15nm$. Khi $m = 1$; góc trượt $\theta = 50^\circ$



Hình II.2: Đồ thị thí nghiệm Davisson - Germer khi giữ góc nhiễu xạ không đổi

ta có bước sóng nhiễu xạ bậc nhất là:

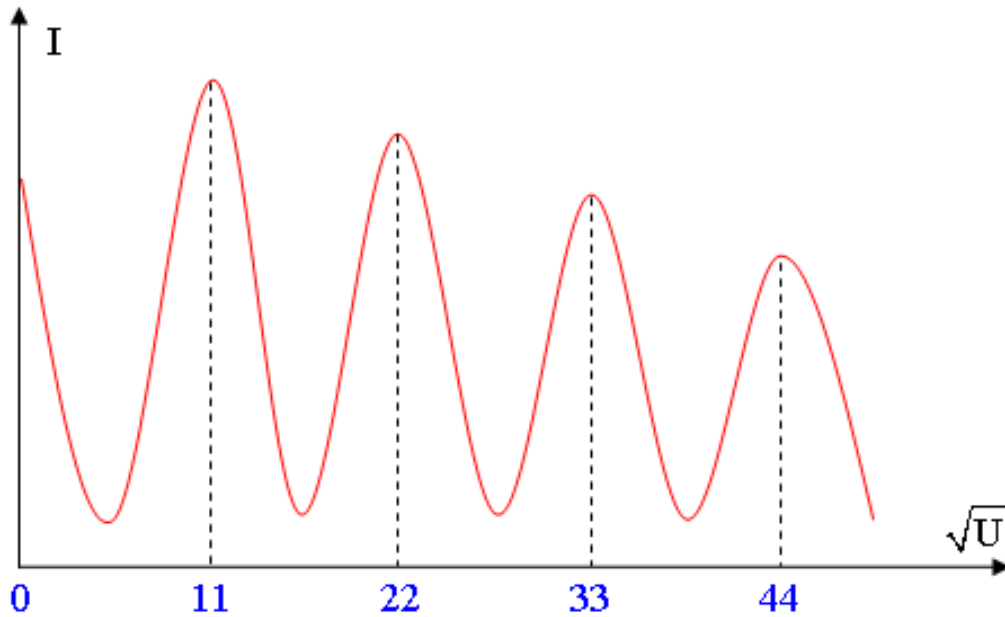
$$\lambda = \frac{d\sin 50^\circ}{1} \approx 1,65(nm)$$

Khi ta thay đổi góc nhiễu xạ θ thì ta thu được đồ thị có dạng như hình (II.2). Ta thấy rằng đồ thị có các cực đại, giá trị cường độ giảm dần theo bậc nhiễu xạ n , bước sóng nhiễu xạ lại tỷ lệ nghịch theo bậc nhiễu xạ.

Kết quả này phù hợp tốt với công thức (II.2) trong §.1:

$$\lambda \approx \frac{12,28}{\sqrt{U}}(A^\circ) = \frac{12,28}{\sqrt{54}} = 1,67nm \quad (II.3)$$

Tương tự nếu ta giữ nguyên góc nhiễu xạ nhưng thay đổi điện thế tăng tốc U thì cũng thu được chùm nhiễu xạ giống như nhiễu xạ tia X. Thí nghiệm cho phép vẽ được đồ thị như hình (II.3). Đồ

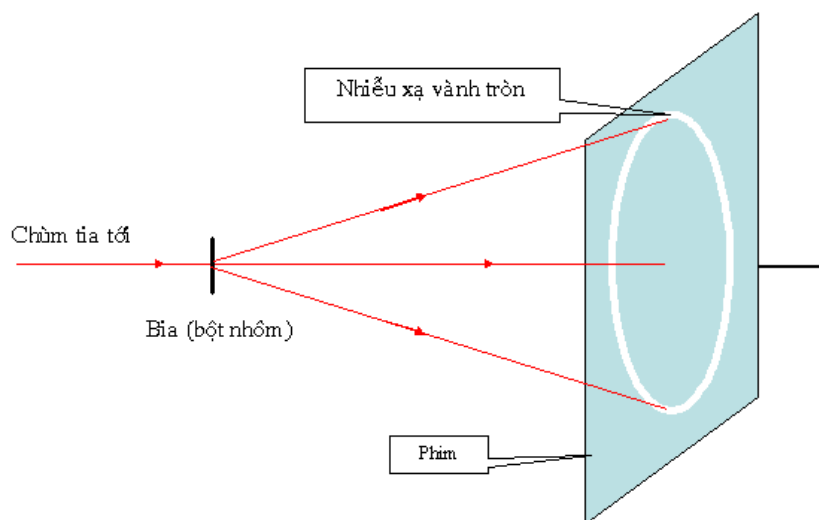


Hình II.3: Đồ thị thí nghiệm Davisson - Germer

thí này cho thấy khi thay đổi U ta thu được nhiều cực đại với $U = 11n$. Khi $n = 1$ ta có cực đại thứ nhất có cường độ mạnh nhất, $n = 2$ ta có cực đại bậc 2 yếu hơn,...

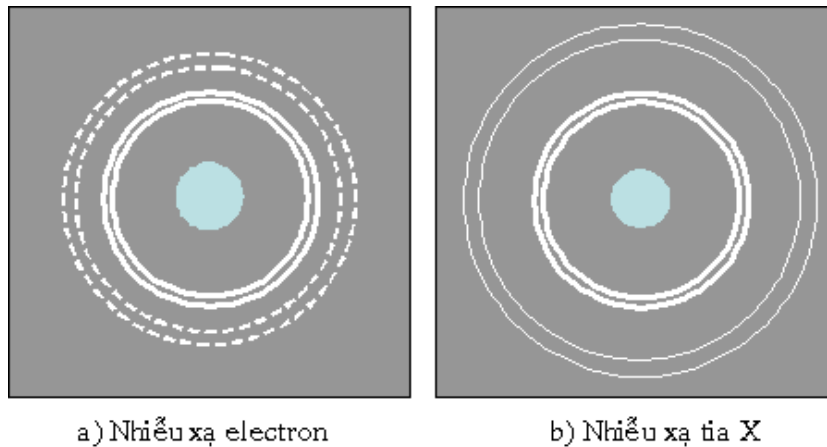
Cần chú ý rằng bước sóng De Broglie tỷ lệ nghịch với khối lượng của hạt nên khi khối lượng tăng thì bước sóng De Broglie giảm. Hạt có khối lượng lớn thì bước sóng De Broglie có giá trị bé đến mức khó phát hiện. Chính vì vậy đối với hạt vĩ mô, sóng De Broglie coi như hoàn toàn được bỏ qua.

2.1.2. Thí nghiệm nhiễu xạ của G.P. Thomson



Hình II.4: Thí nghiệm G.P. Thomson

Năm 1927 George. P. Thomson làm việc tại trường đại học Tổng hợp Aberdeen ở Scotland cũng đã khẳng định sự đúng đắn của sóng De Broglie bằng một thí nghiệm nhiễu xạ khác. Sơ đồ thí



Hình II.5: Hình ảnh nhiễu xạ trong thí nghiệm G.P. Thomson

nghiệm như hình (II. 4).

Trong thí nghiệm này, người ta dùng một chùm electron đơn năng chiếu vào bia được chế tạo từ bột Nhôm. Mặc dù bia không phải là tinh thể đơn nhất như Niken trong thí nghiệm của Davisson - Gecmer, nhưng bột Nhôm gồm các tinh thể định hướng ngẫu nhiên. Với cách định hướng như vậy, luôn luôn có một số vi tinh thể được định hướng dưới một góc thích hợp để tạo ra chùm nhiễu xạ.

Nếu tấm Nhôm đặt vuông góc với chùm tia tới như trong hình vẽ (II.4) thì chấm ứng với chùm trung tâm sẽ được bao quanh bởi các vân tròn nhiễu xạ như hình (II.5. a). Hình ảnh này có dạng giống như nhiễu xạ tia X ở hình (II.5.b). Điều này chứng tỏ có sự tồn tại của sóng De Broglie.

Sau các thí nghiệm của Davisson - Gecmer và của G.P. Thomson các nhà vật lý khác đã thực hiện được hàng loạt thí nghiệm đo bước sóng De Broglie của các hạt vi mô khác như neutron, proton. Các thí nghiệm này đã chứng tỏ mọi hạt vi mô đều có sóng De Broglie. Như vậy các hạt vi mô cũng có tính lưỡng tính sóng - hạt như photon ánh sáng. Mặc dù lúc này các nhà Vật lý cũng chưa hiểu rõ ý nghĩa của sóng De Broglie, nhưng họ hiểu rằng: Sóng De Broglie gắn liền với vi hạt, nó là một thuộc tính không thể tách rời thế giới vi hạt. Chúng ta sẽ có dịp bàn về ý nghĩa của sóng De Broglie trong những phần sau. Bây giờ ta hãy tìm hiểu các ứng dụng của sóng De Broglie trong thực tế.

2.1.3. Một số ứng dụng của sóng De Broglie

Ngày nay sóng De Broglie để nghiên cứu cấu trúc nguyên tử của chất rắn và chất lỏng. Do các electron có khả năng đâm xuyên bé nên có thể dùng sóng De Broglie của electron để nghiên cứu các tính chất bề mặt của chất rắn rất hữu hiệu. Neutron chủ yếu chỉ tương tác với hạt nhân nên dùng sóng De Broglie của neutron để nghiên cứu các hạt nhân, đặc biệt là các hạt nhân nhẹ tốt hơn nhiều khi dùng nhiễu xạ tia Ronghen.

2.2 Hệ thức bất định Heisenberg

2.2.1. Quan niệm đo các đại lượng vật lý của hệ vĩ mô và các đại lượng vật lý của hệ vi mô.

Theo quan niệm của vật lý cổ điển thì về nguyên tắc ta có thể xác định một đại lượng vật lý với độ chính xác tùy ý miễn là ta cải tiến dụng cụ đo tốt và có phương pháp đo thích hợp. Cũng theo quan niệm này ta có thể đo chính xác đồng thời nhiều đại lượng vật lý, nghĩa là các phép đo này không ảnh hưởng kết quả lẫn nhau. Theo Vật lý lượng tử thì quan niệm về vấn đề này hoàn toàn khác. Vật lý lượng tử cho rằng ta không thể xác định tùy ý mọi đại lượng vật lý, sai số ở đây không phải do sự kém chính xác của dụng cụ đo mà là gắn liền với bản chất vật lý của đại lượng đo.

Nguyên nhân của quan niệm trên có thể giải thích như sau: trong bất kì một phép đo nào ta cũng phải trích một phần năng lượng của hệ cần đo để giúp cho dụng cụ đo hoạt động (kim chỉ thị quay, hệ thống chỉ thị số hoạt động,...) chính vì vậy khi đo năng lượng của hệ có thay đổi. Đối với hệ vĩ mô thì sự mất mát năng lượng này là không đáng kể nên không ảnh hưởng đến trạng thái của hệ và như vậy phép đo có thể coi như chính xác. Đối với hệ vi mô thì điều này ngược lại: phần năng lượng trích cho bộ phận chỉ thị của dụng cụ đo là đáng kể so với năng lượng toàn hệ nên đã ảnh hưởng lớn đến trạng thái của hệ khi đo, như vậy phép đo đã gặp phải sai số đáng kể.

Do trạng thái hệ thay đổi thì làm cho một số thông số của hệ thay đổi nên việc xác định đồng thời một số đại lượng vật lý càng kém chính xác. Heisenberg đã chứng minh được sai số ít nhất trong các phép đo đồng thời các đại lượng vật lý là xác định và gọi chúng là độ bất định trong các phép đo.

2.2.2. Hệ thức bất định Heisenberg

Năm 1925, nhà Vật lý người Đức Heisenberg mà ngày nay được coi là người sáng lập ra Cơ học lượng tử, đã phát biểu một nguyên lý làm nền tảng cho quy luật của thế giới hạt vi mô. Nguyên lý này được gọi là nguyên lý bất định Heisenberg mà biểu thức của nó được gọi là hệ thức bất định Heisenberg. Nội dung nguyên lý này như sau:

Không thể xác định chính xác đồng thời toạ độ và xung lượng của một hạt vi mô. Nếu toạ độ x được xác định với độ bất định Δx và thành phần xung lượng $p_x = m.v_x$ được xác định với độ bất định Δp_x thì tích $\Delta x.\Delta p_x$ có một giá trị ít nhất bằng hằng số Plank.

$$\Delta x.\Delta p_x \geq h \quad (\text{II.4})$$

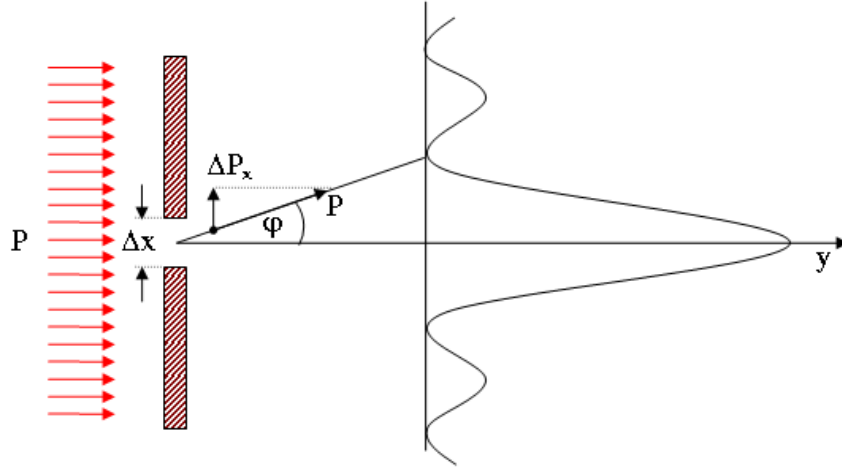
Ta có thể chứng minh được hệ thức bất định Heisenberg nếu sử dụng các khái niệm toán tử của các đại lượng vật lý, nhưng điều đó nằm ngoài yêu cầu của giáo trình này nên ta chỉ thừa nhận nó. Tuy nhiên ta cũng có thể rút ra hệ thức bất định Heisenberg từ một thí nghiệm nhiễu xạ phản ánh tính chất sóng của vi hạt.

Giả sử cho một chùm electron xung lượng \vec{p} bay theo phương Oy của một hệ toạ độ Oxy . Để tách từ chùm đó một số electron có giá trị toạ độ x xác định, ta đặt trên đường đi của chùm một màn không trong suốt có một khe hẹp để cho electron đi qua (thí nghiệm nhiễu xạ electron trên mạng tinh thể). Ta sẽ đạt được độ chính xác của phép đo vị trí của electron khi qua khe giới hạn bằng bề rộng Δx của khe. Vì rằng các electron có tính chất sóng nên khi đi qua khe sẽ xảy ra hiện tượng nhiễu xạ và ta quan sát được hình ảnh nhiễu xạ trên màn đặt ở cách xa sau khe. Hình ảnh này được ghi lại nhờ phim ảnh đặt tại vị trí màn. Thực nghiệm cho thấy hình ảnh này giống như hình ảnh nhiễu xạ ánh sáng qua một khe, tức là quan sát thấy các vạch sáng, tối xen kẽ song song với khe trên màn. Chính giữa, đối diện với khe sáng là cực đại nhiễu xạ trung tâm. Kế đến là các cực tiểu xen kẽ các cực đại phụ.

Sơ đồ thí nghiệm và hình ảnh đồ thị nhiễu xạ như hình (II.6).

Từ lý thuyết nhiễu xạ ánh sáng, ta biết góc φ giữa phương tới (vuông góc với khe) và phương lệch của hạt ứng với cực tiểu thứ nhất được xác định từ điều kiện.

$$\Delta x.\sin\varphi = \lambda \quad (\text{II.5})$$



Hình II.6: Nhiễu xạ

theo giả thiết De Broglie $\lambda = \frac{h}{p}$, thay vào ta có

$$\Delta x \cdot p \cdot \sin \varphi = h \quad (\text{II.6})$$

Chú ý rằng sau khi qua khe, electron có thể rơi vào một vị trí bất kì trên màn với một xác suất nào đó, do đó nó thay đổi phương chuyển động ban đầu (phương Oy) tức là có thể xuất hiện một thành phần xung lượng dọc theo trục Ox là p_x . Ta chưa biết chính xác giá trị thành phần này vì thế không thể nói chính xác là electron đang xét sẽ rơi vào điểm nào trên màn.

Như vậy, sau khi electron đã qua khe, ta biết được toạ độ x với độ chính xác Δx , đồng thời xuất hiện độ bất định Δp_x của thành phần xung lượng dọc theo trục Ox mà ta coi cùng bậc với p_x . Nếu ta chỉ giới hạn với các electron rơi vào màn trong bề rộng của cực đại trung tâm thì theo hình vẽ Δp_x có thể đạt giá trị $p \sin \varphi$. Vậy (II.6) trở thành: $\Delta x \cdot \Delta p_x = h$. Thực tế vẫn có một số electron (khoảng 5%) bị lệch ra ngoài nên Δp_x có thể lớn hơn $p \sin \varphi$. Như vậy ta có bất đẳng thức:

$$\Delta x \Delta p_x \geq h \quad (\text{II.7})$$

Đây chính là hệ thức bất định Heisenberg. Vì trục Ox là bất kì nên ta có thể viết cho các trục Oy, Oz

$$\Delta y \Delta p_y \geq h \quad (\text{II.8})$$

$$\Delta z \Delta p_z \geq h \quad (\text{II.9})$$

Hệ thức bất định Heisenberg có ý nghĩa sâu sắc, nó phản ánh bản chất của đối tượng vi mô và gắn tính chất sóng của hạt. Đây là tính chất phổ biến của hạt vi mô: Tính lưỡng tính sóng-hạt. Hệ thức này cho thấy nếu một phép đo toạ độ dọc theo một trục nào đó càng chính xác bao nhiêu thì phép đo xung lượng theo phương đó càng kém chính xác bấy nhiêu. Trong thí nghiệm nhiễu xạ electron vừa trình bày trên, nếu ta giảm bề rộng Δx của khe tức là làm giảm sai số phép đo toạ độ thì góc nhiễu xạ φ tăng lên nghĩa là tăng bề rộng của cực đại nhiễu xạ trung tâm và có nghĩa là electron càng lệch xa phương chuyển động ban đầu, sai số trong phép đo xung lượng tăng lên. Ngược lại, nếu càng mở rộng khe thì hình ảnh nhiễu xạ càng mờ dần và sẽ mất hẳn khi khe đủ rộng. Khi đó chùm electron sẽ đi thẳng, xung lượng của nó được xác định hoàn toàn chính xác, ngược lại toạ độ của nó lại xác định rất kém chính xác.

Hệ thức bất định Heisenberg thường được dùng dưới dạng đẳng thức và viết dưới dạng:

$$\Delta v_x = \frac{h}{m \cdot \Delta x} \quad (\text{II.10})$$

Hằng số Plank h rất bé nên độ bất định Δv của vận tốc chỉ đáng kể với những hạt có khối lượng m rất bé có nghĩa là đối với hạt vi mô. Như vậy tính chất sóng chỉ thể hiện rõ trong thế giới vi mô, còn với thế giới vĩ mô thì chỉ thể hiện tính chất hạt. Chính vì lí do này nguyên lí bất định Heisenberg được xem như là tiêu chuẩn đánh giá, phân biệt trường hợp nào hạt tuân theo quy luật lượng tử hay quy luật cổ điển. Nó xác định giới hạn áp dụng của Cơ học cổ điển, phân biệt ranh giới giữa Cơ học lượng tử và Cơ học cổ điển.

Hệ thức bất định Heisenberg cũng được viết cho bất định giữa năng lượng và thời gian. Ta có: $\Delta x = v \cdot \Delta t$, và: $\Delta p = m \cdot \Delta v$ nên: $m \cdot \Delta v \cdot \Delta t \geq h$.

Chú ý rằng:

$$E = \frac{m \cdot v^2}{2}$$

và độ bất định $\Delta E = m \cdot v \cdot \Delta v$ nên:

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq h \quad (\text{II.11})$$

ý nghĩa của hệ thức này là ở chỗ hạt có thời gian sống trung bình là Δt sẽ không có năng lượng hoàn toàn xác định, đồng thời độ bất định năng lượng

$$\Delta E = \frac{h}{\Delta t}$$

sẽ tăng khi giảm thời gian sống trung bình. Như vậy ta có thể tìm độ bất định năng lượng của hạt thông qua việc tính thời gian sống trung bình của nó.

§3 HÀM SÓNG CỦA HẠT VI MÔ - ĐOÁN NHẬN Ý NGHĨA THỐNG KÊ CỦA HÀM SÓNG

Khi Thomas Young đo được bước sóng ánh sáng vào năm 1801, ông chưa có ý niệm gì về bản chất của chùm tia sáng đập vào hai lỗ xuyên kim trong dụng cụ giao thoa của ông. Phải mất hơn nửa thế kỉ sau Maxwell mới giải thích được vấn đề này với giải thích rằng ánh sáng là sự lan truyền của trường điện-từ. Khi xét sóng vật chất hay sóng De Broglie của các hạt vi mô ta cũng chưa biết bản chất nó là gì. Nghĩa là ta chưa biết đại lượng nào trong vật chất đóng vai trò tương tự như điện- từ trường trong sóng điện từ, hay như sự dịch chuyển trong các sóng cơ, ...

Tạm thời, chúng ta gọi đại lượng mà sự biến thiên của nó theo vị trí và thời gian biểu diễn phương diện sóng của hạt là **hàm sóng** của nó và ký hiệu hàm sóng là ψ

3.1 Hàm sóng của hạt tự do

Theo giả thiết của De Broglie, một hạt tự do chuyển động với năng lượng E và xung lượng \vec{p} không đổi thì ứng với một sóng phẳng đơn sắc lan truyền theo phương chuyển động. Như vậy một cách tương tự ta có thể xem hàm sóng của sóng De Broglie có dạng tương tự như phương trình sóng phẳng. Ta biết phương trình sóng phẳng là:

$$y = A \cos\left[\omega\left(t - \frac{x}{v}\right)\right] = A \cos 2\pi \left(\frac{t}{T} - \frac{x}{\lambda}\right)$$

Chú ý rằng:

$$T = \frac{1}{\nu} = \frac{h}{E}; \quad \lambda = \frac{h}{p}$$

nên ta có:

$$y = ACos[\frac{1}{h}(Et - px)]$$

trong đó E là động năng của hạt tự do; \vec{p} là xung lượng của hạt theo phương truyền sóng x .

Nếu xét sóng truyền trong không gian 3 chiều thì ta có thể viết:

$$y = ACos[\frac{1}{h}(Et - \vec{p} \cdot \vec{r})]$$

Hay chuyển sang dạng phức:

$$y = Ae^{-\frac{i}{h}[Et - (p_x \cdot x + p_y \cdot y + p_z \cdot z)]}$$

Để phân biệt phương trình sóng thông thường và hàm sóng vật chất ta kí hiệu hàm sóng là ψ thì hàm sóng tự do sẽ là:

$$\psi = Ae^{-\frac{i}{h}[Et - (p_x \cdot x + p_y \cdot y + p_z \cdot z)]} = Ae^{-\frac{i}{h}Et} e^{\frac{i}{h}[x \cdot p_x + y \cdot p_y + z \cdot p_z]} \quad (II.12)$$

Đây là biểu thức hàm sóng viết dưới dạng phân li biến số không gian và thời gian.

3.2 Hàm sóng của hạt chuyển động trong trường lực

Trong trường hợp hạt không tự do mà chuyển động trong một trường lực ngoài nào đấy thì hàm sóng của hạt trở nên phức tạp vì sóng De Broglie không còn là sóng phẳng đơn sắc như hạt tự do. Trường hợp phổ biến là hạt chuyển động trong trường lực thế (chẳng hạn hạt electron chuyển động trong trường Culông của hạt nhân). Nếu trường lực dừng thì năng lượng của hạt không thay đổi nên ta có thể viết hàm sóng dưới dạng phân li biến số:

$$\psi(\vec{r}, t) = \psi(t) \cdot \psi(\vec{r}) = e^{-\frac{i}{h}Et} \cdot \psi(\vec{r}) = e^{-\frac{i}{h}Et} \cdot \psi(x, y, z) \quad (II.13)$$

Trong đó $\psi(x, y, z)$ là thành phần hàm sóng phụ thuộc tọa độ. Dạng cụ thể của nó phụ thuộc vào trường lực ngoài mà hạt chuyển động trong đó. Để tìm được dạng cụ thể của hàm sóng khi hạt chuyển động trong trường lực thì ta phải giải một phương trình tổng quát đối với vi hạt gọi là phương trình Schrödinger mà ta sẽ xét trong bài tiếp theo.

3.3 ý nghĩa thống kê của hàm sóng

Khi đưa ra khái niệm sóng vật chất, chính De Broglie cũng chưa xác định được bản chất sóng vật chất là gì? Và như vậy cũng chưa hiểu được ý nghĩa hàm sóng là gì? Để hiểu được ý nghĩa của hàm sóng ta hãy hình dung như sau:

Ta hãy so sánh nhiễu xạ của sóng ánh sáng và nhiễu xạ của chùm hạt vi mô. Ta biết sóng là sự lan truyền trong không gian của những biến thiên theo thời gian của một đại lượng nào đó. Sóng ánh sáng là sự biến thiên tuần hoàn trong không gian của điện trường và của từ trường. Khi qua một lỗ hay một khe, sóng bị nhiễu xạ, tức là lệch khỏi phương chuyển động ban đầu. Khi đó, do sự chồng chất của các sóng nhiễu xạ lên nhau mà có thể xảy ra hiện tượng mạnh lên hoặc yếu đi của biên độ dao động tổng hợp tại các vị trí khác nhau trong không gian. Trên phim ảnh đặt sau khe nhiễu xạ, sau khi rửa ta nhận thấy các vùng tối (cực đại nhiễu xạ) xen kẽ các vùng sáng (cực tiểu nhiễu xạ). Mức độ tối của phim ảnh là do tác dụng của sóng ánh sáng tỷ lệ với năng lượng sóng tới một đơn vị diện tích tại vị trí trên phim. Năng lượng này tỷ lệ với bình phương biên độ sóng.

Đối với hiện tượng nhiễu xạ của sóng De Broglie của chùm hạt vi mô, ta cũng có thể biểu diễn qua sự phân bố trong không gian của chùm hạt vi mô. Khi một hạt rơi vào một điểm nào đó trên phim ảnh, nó cũng gây ra một vết tối (sau khi đã rửa phim). Thực nghiệm cho thấy rự rơi của từng hạt lên một vị trí nào đó là có tính chất ngẫu nhiên. Có trường hợp các hạt kế tiếp nhau rơi rất gần nhau, nhưng có những trường hợp chúng rơi rất xa nhau. Tuy nhiên nếu ta cho một số đủ lớn các hạt đi qua khe (hoặc lỗ) nhiễu xạ thì phân bố hạt rơi ở các vị trí khác nhau lại tuân theo quy luật xác định. Rửa phim ảnh hứng chùm hạt nhiễu xạ đủ lớn thì ta thu được vân nhiễu xạ tương tự như vân nhiễu xạ sóng ánh sáng. Có thể nói rằng: nơi phim ảnh sau khi rửa cho ta vết tối nghĩa là có nhiều hạt nhiễu xạ bay đến đập vào, ngược lại nơi trên phim sáng là rất ít hạt nhiễu xạ hoặc không có hạt nào đập vào. Nơi có nhiều hạt nhiễu xạ đập vào được gọi là vị trí có xác suất nhiễu xạ lớn, vị trí ít hạt đập vào nghĩa là có xác suất bé.

Như vậy, trong trường hợp nhiễu xạ của các hạt vi mô, độ đậm nhạt của các vùng khác nhau trên phim gắn với xác suất hạt rơi trên vùng đó. Đối với sóng ánh sáng, độ đậm nhạt tỷ lệ với bình phương biên độ sóng ánh sáng nên một cách tự nhiên ta cũng có thể nói độ đậm nhạt trên phim ảnh trong trường hợp nhiễu xạ của chùm hạt vi mô tỷ lệ với xác suất hạt nhiễu xạ rơi trên đó. Như vậy bình phương biên độ sóng De Broglie tỷ lệ với xác suất tìm thấy hạt vi mô. Cách giải thích này lần đầu tiên được nhà vật lý người Đức M.Born đưa ra vào năm 1924. Ban đầu cách giải thích này cũng chưa mấy thuyết phục, nhưng ngày nay đã được nhiều thực nghiệm khẳng định sự đúng đắn của nhận thức này.

Bình phương môđun hàm sóng cho ta biết xác suất tìm thấy hạt. Đó là ý nghĩa thống kê của hàm sóng vật chất.

Bây giờ ta hãy đưa vào những định nghĩa khoa học, chặt chẽ, chính xác liên quan đến xác suất tìm thấy hạt trong không gian.

Trước hết ta khẳng định lại, xác suất dw để thấy hạt trong thể tích không gian vô cùng bé dV tỷ lệ với bình phương biên độ hàm sóng và thể tích dV của miền không gian đó.

$$dw = A^2 dV \quad (II.14)$$

Mặt khác để tìm bình phương biên độ hàm sóng ta nhân hàm sóng ψ với liên hiệp phức ψ^* của nó. Thực vậy:

$$\psi \cdot \psi^* = |\psi|^2 = A e^{-\frac{i}{\hbar}[E \cdot t - (x \cdot p_x + y \cdot p_y + z \cdot p_z)]} \cdot A e^{\frac{i}{\hbar}[E \cdot t - (x \cdot p_x + y \cdot p_y + z \cdot p_z)]} = A^2$$

Vậy:

$$dw = \psi \cdot \psi^* \cdot dV = |\psi|^2 dV \quad (II.15)$$

Từ đó ta có:

$$|\psi|^2 = \frac{dw}{dV} \quad (II.16)$$

là xác suất tìm thấy hạt trong một đơn vị thể tích không gian hay mật độ xác suất.

Chú ý rằng nếu xét hạt chuyển động trong trường lực dừng thì hàm sóng có thể viết dưới dạng phân li biến số:

$$\psi = e^{-\frac{i}{\hbar} E \cdot t} \cdot \psi(x, y, z)$$

nên: $|\psi(x, y, z, t)|^2 = |\psi(x, y, z)|^2$. Nghĩa là mật độ xác suất không phụ thuộc thời gian.

Xác suất tìm thấy hạt trong toàn không gian chắc chắn bằng 1 nên ta có thể viết:

$$\int_V |\psi(x, y, z)|^2 dV = 1 \quad (II.17)$$

Công thức (II.17) được gọi là điều kiện chuẩn hoá hàm sóng.

§4 PHƯƠNG TRÌNH SCHRÖDINGER

Để tìm được hàm sóng của các hạt vi mô ta phải tìm một phương trình để khi thay điều kiện cụ thể của hạt và giải nó ta tìm được hàm sóng. Phương trình này được gọi là phương trình Schrödinger. Phương trình này do nhà vật lý người áo Erwin Schrödinger đưa ra đầu tiên vào năm 1926. Phương trình Schrödinger trong cơ học lượng tử đóng vai trò như phương trình chuyển động của Newton trong cơ học cổ điển, như phương trình Maxwell trong điện động lực học. Ta có thể thành lập được phương trình này và thừa nhận nó như một tiên đề trong cơ học lượng tử. Nguyên tắc thiết lập là xuất phát từ hàm sóng đã biết của hạt chuyển động tự do, sau đó khái quát hoá để thu được phương trình vi phân cơ bản mà có thể giải tìm nghiệm hàm cho trường hợp bất kì.

4.1 Phương trình Schrödinger phụ thuộc thời gian

Ta đã biết, hàm sóng De Broglie của hạt tự do có dạng:

$$\psi(x, y, z, t) = Ae^{-\frac{i}{\hbar}Et} e^{\frac{i}{\hbar}(x.p_x + y.p_y + z.p_z)}$$

Để tìm phương trình vi phân thoả mãn hàm sóng này ta lần lượt đạo hàm theo thời gian:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}E.\psi \quad (\text{II.18})$$

và đạo hàm theo các thành phần toạ độ x, y, z ta được:

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = \frac{i}{\hbar}p_x\psi; \quad \frac{\partial \psi}{\partial y} = \frac{i}{\hbar}p_y\psi; \quad \frac{\partial \psi}{\partial z} = \frac{i}{\hbar}p_z\psi$$

Đạo hàm lần thứ hai ta được:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\frac{p_x^2}{\hbar^2}\psi; \quad \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = -\frac{p_y^2}{\hbar^2}\psi; \quad \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = -\frac{p_z^2}{\hbar^2}\psi \quad (\text{II.19})$$

Cộng từng vế của các phương trình (II.19) ta được:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2}\psi \quad (\text{II.20})$$

Khi hạt chuyển động trong trường lực thế, năng lượng toàn phần của hạt là:

$$E = T + U = \frac{p^2}{2.m} + U \quad (\text{II.21})$$

trong đó U là thế năng của hạt là một hàm của toạ độ và thời gian, trường hợp trường dừng thì U không phụ thuộc thời gian. Nhân phải (II.21) với hàm sóng ψ ta được:

$$E\psi = \frac{p^2}{2.m}\psi + U\psi \quad (\text{II.22})$$

Từ (II.18) suy ra:

$$E\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (\text{II.23})$$

Từ (II.20) suy ra:

$$p^2\psi = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) \quad (\text{II.24})$$

Thay (II.23) và (II.24) vào (II.22) ta được:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) + U\psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + U\psi \quad (\text{II.25})$$

Phương trình này được gọi là phương trình Schrödinger tổng quát hay phương trình Schrödinger phụ thuộc thời gian.

4.2 Phương trình Schrödinger dạng dừng

Khi hạt chuyển động trong trường dừng (đây là trường hợp thường gặp trong thực tế, chẳng hạn electron chuyển động trong trường Coulomb của hạt nhân) thì hàm sóng có thể phân li biến số không gian và thời gian:

$$\psi(x, y, z, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \psi(x, y, z) \quad (\text{II.26})$$

Thay (II.26) vào phương trình Schrödinger tổng quát (II.25) ta được:

$$E\psi(x, y, z)e^{-\frac{i}{\hbar}Et} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(x, y, z)e^{-\frac{i}{\hbar}Et} + U\psi(x, y, z)e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

Hay:

$$\Delta \psi(x, y, z) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \psi(x, y, z) = 0 \quad (\text{II.27})$$

Phương trình (II.27) là phương trình Schrödinger dạng dừng, phương trình này được sử dụng rộng rãi trong nhiều bài toán của Cơ học lượng tử. Giải phương trình này cho phép ta tìm được hàm sóng phụ thuộc tọa độ không gian $\psi(x, y, z)$.

Trường hợp đặc biệt, khi hạt tự do thì thế năng $U = 0$ nên phương trình Schrödinger cho hạt tự do là:

$$\Delta \psi(x, y, z) + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi(x, y, z) = 0 \quad (\text{II.28})$$

4.3 Một số lưu ý khi sử dụng phương trình Schrödinger

4.3.1. Ta không thể chứng minh chặt chẽ phương trình Schrödinger

Phương trình Schrödinger được suy ra từ hàm sóng của hạt tự do rồi mở rộng cho trường hợp bất kì, kể cả hạt chuyển động trong trường lực dừng và hạt chuyển động trong trường lực phụ thuộc thời gian. Tuy vậy ta không thể chứng minh chặt chẽ được cách suy luận của ta là đúng. Ta thừa nhận phương trình Schrödinger như một tiên đề vì kết quả của nó phù hợp tốt với thực nghiệm. Điều này cũng tương tự như ta không thể chứng minh chặt chẽ các định luật Newton vậy.

4.3.2. Điều kiện áp dụng phương trình Schrödinger

Phương trình Schrödinger chỉ áp dụng được đối với những hạt phi tương đối tính, tức là những hạt có vận tốc chuyển động nhỏ hơn rất nhiều vận tốc ánh sáng trong chân không ($v \ll c$) vì chỉ trong trường hợp đó ta mới có:

$$E = \frac{m.v^2}{2} + U = \frac{p^2}{2m} + U$$

Nếu hạt tương đối tính thì ta phải sử dụng phương trình tương đối tính của Dirac thay cho phương trình Schrödinger.

4.3.3. Điều kiện tiêu chuẩn của hàm sóng

Khi giải phương trình Schrödinger ta chỉ thu được các nghiệm toán học thuần túy. Không phải mọi nghiệm đó đều là hàm sóng. Để nghiệm của phương trình Schrödinger là hàm sóng thì nó phải thoả mãn một số điều kiện nhất định được gọi là điều kiện tiêu chuẩn của hàm sóng. Gồm có 3 điều kiện sau:

Nghiem phải liên tục

Vì mọi điểm trong không gian phải tìm được xác suất tìm thấy hạt (có thể bằng không) nên hàm sóng phải liên tục và đạo hàm của hàm sóng cũng phải liên tục.

Nghiem phải đơn trị

Mỗi điểm trong không gian chỉ có một xác suất tìm thấy hạt nhất định nên hàm sóng phải đơn trị, tức là nghiệm phương trình Schrödinger phải đơn trị mới được sử dụng làm hàm sóng.

Nghiem phải hữu hạn

Xác suất tìm thấy hạt luôn luôn nhỏ hơn hoặc bằng 1 nên nghiệm phương trình Schrödinger phải có giá trị hữu hạn.

§5 CHUYỂN ĐỘNG CỦA HẠT TRONG GIẾNG THỂ

5.1 Định nghĩa giếng thế một chiều

Thế năng của hạt phân bố theo trục $0x$ thoả mãn:

$$U = \begin{cases} 0 & \text{khi } 0 \leq x \leq L \\ \infty & \text{khi } x < 0; \quad x > L \end{cases} \quad (\text{II.29})$$

được gọi là hố thế sâu vô hạn một chiều hay giếng thế một chiều.

5.2 Giải phương trình Schrödinger cho hạt chuyển động trong giếng thế một chiều

Ta chia không gian thành ba miền I, II và III như hình (II.7). Trong các miền I và III thế năng $U = \infty$ nên hạt không thể chuyển động được, hàm sóng ứng với hai miền này phải bằng không ($\psi_1 = \psi_3 = 0$).

Phương trình Schrödinger đối với miền II là:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi = 0 \quad (\text{II.30})$$

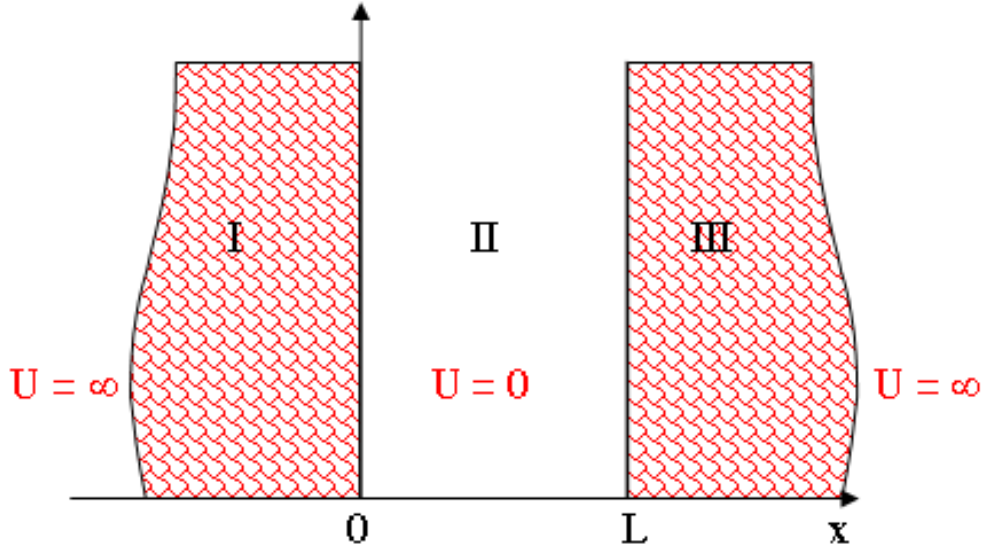
Vì $E > 0$ nên ta có thể đặt: $K^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ và phương trình (II.30) trở thành:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + K^2\psi = 0 \quad (\text{II.31})$$

Đây là phương trình vi phân hạng hai khuyết dạng quen thuộc. Nghiệm của nó có dạng:

$$\psi(x) = A \sin(Kx + \alpha) \quad (\text{II.32})$$

Trong đó K, A, α là những hằng số chưa biết, ta sẽ xác định được từ điều kiện chuẩn hoá hàm sóng và từ điều kiện biên.



Hình II.7: Giếng thế một chiều

Do hàm sóng phải liên tục nên xét tại biên: $\psi(0) = \psi_1 = 0$; $\psi(L) = \psi_3 = 0$.
 Như vậy ta có: $A \sin \alpha = 0 \Rightarrow \alpha = 0$; $A \sin KL = 0 \Rightarrow KL = n\pi \Rightarrow K = \frac{n\pi}{L}$.
 Trong đó $n = 1, 2, \dots$ là các số nguyên.

Hàm sóng sẽ là:

$$\psi_n(x) = A \sin \frac{n\pi}{L} x \quad (\text{II.33})$$

ở đây n phải khác 0 vì nếu $n = 0$ thì $\psi_n(x) = 0$. Điều này là không hợp lý.
 Dựa vào điều kiện chuẩn hoá hàm sóng ta tìm được biên độ hàm sóng A như sau:

$$\int_0^L |\psi(x)|^2 dx = A^2 \int_0^L \sin^2 \frac{n\pi}{L} x dx = 1$$

Đặt:

$$u = \frac{n\pi x}{L}$$

ta có:

$$dx = \frac{L}{n\pi} du; \quad \sin^2 u = \frac{1 - \cos 2u}{2}$$

Thay vào tích phân trên ta được:

$$A = \sqrt{\frac{2}{L}} \quad (\text{II.34})$$

Cuối cùng ta tìm được hàm sóng trong miền II là:

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi}{L} x \quad (\text{II.35})$$

Kết quả tính toán trên cho ta:

$$K^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} = \left(\frac{n\pi}{L} \right)^2 \Rightarrow E_n = \frac{n^2 \hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \quad (\text{II.36})$$

Kết quả này hoàn toàn khác biệt với kết quả có được trong Cơ học cổ điển: hạt không thể nhận năng lượng liên tục mà chỉ có thể nhận những giá trị gián đoạn, ta nói năng lượng đã bị lượng tử hoá.

Khi $n = 1$ thì năng lượng của hạt có giá trị nhỏ nhất:

$$E_1 = E_{min} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}$$

5.3 Xác suất tìm thấy hạt trong giếng thế

Ta đã tìm được hàm sóng đã được chuẩn hoá của hạt như (II.35). Dựa vào hàm sóng ta dễ dàng tìm được xác suất tìm thấy hạt ứng với trạng thái n bất kì tại vị trí bất kì trong giếng thế. Một kết quả đặc biệt đáng chú ý là: phân bố xác suất tìm thấy hạt khác hẳn nhau ứng với từng trạng thái năng lượng gián đoạn của hạt. Điều này chỉ có thể thu được khi giải bài toán theo quan điểm lượng tử. Chẳng hạn, xét hạt ở trạng thái $n = 1$, mật độ xác suất tìm thấy hạt tại vị trí $x = \frac{L}{2}$ là cực đại và bằng:

$$w = |\psi|^2 = \left(\sqrt{\frac{2}{L}} \sin \left(\frac{1 \cdot \pi L}{L \cdot 2} \right) \right)^2 = \frac{2}{L}$$

trong khi đó nếu $n = 2$ thì tại vị trí này xác suất lại bằng 0. Như vậy khi chuyển động ở mức năng lượng cơ bản thì hạt thường xuất hiện giữa giếng thế, trong khi đó, khi chuyển lên trạng thái kích thích thứ nhất thì hạt không thể ở giữa hố thế, ta nói vị trí này hạt bị cấm. Ngược lại khi $n = 2$ thì xác suất tìm thấy hạt ở các vị trí $x = \frac{L}{4}$ hoặc $x = \frac{3L}{4}$ lại có giá trị cực đại.

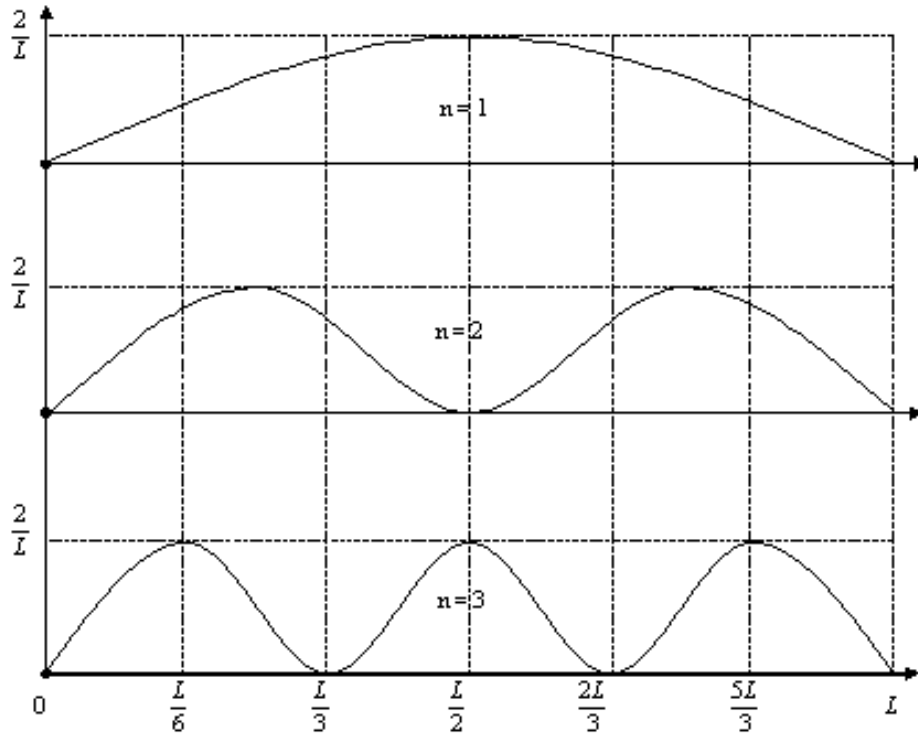
$$w = |\psi|^2 = \left(\sqrt{\frac{2}{L}} \sin \left(\frac{2 \cdot \pi L}{L \cdot 4} \right) \right)^2 = \left(\sqrt{\frac{2}{L}} \sin \left(\frac{2 \cdot \pi 3L}{L \cdot 4} \right) \right)^2 = \frac{2}{L}$$

Ta có thể biểu diễn đồ thị xác suất ứng với các trạng thái có lượng tử n như hình vẽ (II.8)

Cuối cùng chúng ta cũng cần nhận thức rằng, sự khác biệt giữa cơ học lượng tử và cơ học Newton hay cơ học cổ điển là **đối tượng** mà chúng ta mô tả.

Cơ học Newton mô tả chuyển động của những hạt vĩ mô dưới ảnh hưởng của các lực tác dụng, cho biết vị trí của hạt, vận tốc, gia tốc, xung lượng, năng lượng, ... là những **đại lượng quan sát được** hoàn toàn có thể đo lường với độ chính xác tùy ý, miễn là có những dụng cụ đo và phương pháp đo thích hợp. Và những kết quả đo lường này phù hợp tốt với các giá trị tính toán theo lý thuyết.

Cơ học lượng tử cũng mô tả quan hệ giữa các **đại lượng quan sát** của các hạt vi mô, nhưng nguyên lý bất định Heisenberg đã làm thay đổi tận gốc định nghĩa **đại lượng quan sát** trong thế giới vi mô. Theo nguyên lý này có những đại lượng không thể đo đồng thời chính xác ở bất kì thời điểm nào mà trong Cơ học lượng tử chỉ cho ta khả năng để thấy được giá trị này hay giá trị khác của **đại lượng quan sát** đó. Những đại lượng mà Cơ học lượng tử mô tả chính xác chính là **xác suất** để có được giá trị xác định nào của đại lượng quan sát. Chẳng hạn theo lý thuyết Bohr, trong nguyên tử Hydro, electron chuyển động trên quỹ đạo tròn xác định bán kính Bohr, ở trạng thái cơ bản bán kính đó là $a_o = 0,534 \text{ \AA}$. Theo Lý thuyết lượng tử, a_o là bán kính có xác suất lớn nhất khi electron ở trạng thái cơ bản, tức là hạt electron thường ở vị trí bán kính a_o nhưng vẫn có thể ở vị trí này hay vị trí khác trong nguyên tử.



Hình II.8: Xác suất tìm thấy hạt trong giếng thế

§6 HÀNG RÀO THẾ

6.1 Định nghĩa hàng rào thế

Hạt chuyển động trong không gian một chiều có thế năng phân bố:

$$U = \begin{cases} 0 & \text{khi } x < 0 \\ 0 & \text{khi } x > a \\ V_o & \text{khi } 0 \leq x \leq a \end{cases} \quad (\text{II.37})$$

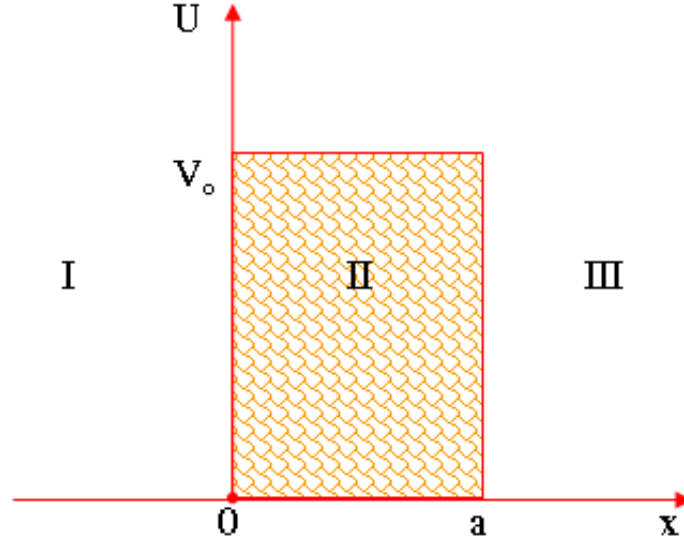
được gọi là hàng rào thế một chiều (hình II.9). Trong đó V_o là một hằng số.

6.2 Phương trình Schrödinger cho hàng rào thế một chiều

Theo quan niệm của Cơ học cổ điển thì hạt có năng lượng lớn hơn thế năng ($E > V_o$) thì có thể truyền qua hàng rào mà không bị phản xạ lại, nghĩa là hạt có thể chuyển động được cả trong ba miền. Ngược lại nếu hạt có thế năng nhỏ hơn thế năng ($E < V_o$) thì sẽ bị phản xạ lại hoàn toàn tại hàng rào thế nên nó chỉ có thể chuyển động trong một miền xác định hai bên hàng rào thế.

Ta hãy xét hạt đang chuyển động từ trái sang phải đến gặp hàng rào thế. Theo quan điểm lượng tử, ta phải giải phương trình Schrödinger. Trong miền I phương trình Schrödinger có dạng

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + \frac{2mE\psi_1}{\hbar^2} = 0 \quad (\text{II.38})$$



Hình II.9: Hàng rào thế một chiều

Trong miền II phương trình Schrödinger là

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2} + \frac{2m(E - V_o)\psi_2}{\hbar^2} = 0 \quad (\text{II.39})$$

Trong miền III phương trình Schrödinger có dạng

$$\frac{d^2\psi_3}{dx^2} + \frac{2mE\psi_3}{\hbar^2} = 0 \quad (\text{II.40})$$

Trường hợp $E < V_o$ ta đặt:

$$k_o^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}; \quad k^2 = \frac{2m(V_o - E)}{\hbar^2} \quad (\text{II.41})$$

Thay vào II.38 ta giải được nghiệm:

$$\psi_1 = e^{ik_o x} + Ae^{-ik_o x} \quad (\text{II.42})$$

ở đây ta chọn hệ số chuẩn hoá bên cạnh sóng tới ($e^{ik_o x}$) bằng 1 vì ta xét sóng truyền theo chiều dương trục $0x$. Số hạng thứ hai ($Ae^{-ik_o x}$) là thể hiện sóng phản xạ tại biên phía trái hàng rào thế. Thay (II.41) vào (II.39) ta tìm được

$$\psi_2 = Be^{kx} + Ce^{-kx} \quad (\text{II.43})$$

ở đây số hạng Be^{kx} thể hiện sóng tới trong miền II, còn số hạng Ce^{-kx} thể hiện sóng phản xạ tại biên phía phải hàng rào thế.

Thay (II.41) vào (II.40) ta tìm được

$$\psi_3 = De^{ik_o x} \quad (\text{II.44})$$

Trong hàm sóng ở miền III không có sóng phản xạ vì không gặp biên hàng rào thế.

Theo điều kiện tiêu chuẩn của hàm sóng ta có:

$$\psi_1(0) = \psi_2(0)$$

$$\begin{aligned}
\psi_1'(0) &= \psi_2'(0) \\
\psi_2(a) &= \psi_3(a) \\
\psi_2'(a) &= \psi_3'(a)
\end{aligned} \tag{II.45}$$

Từ điều kiện (II.45) ta suy ra hệ phương trình:

$$\begin{aligned}
1 + A &= B + C; \\
ik_o(1 - A) &= k(B - C); \\
Be^{ka} + Ce^{-ka} &= De^{ik_o a}; \\
k(Be^{ka} - Ce^{-ka}) &= ik_o De^{ik_o a}
\end{aligned} \tag{II.46}$$

Giải hệ phương trình (II.46) ta tìm được các hệ số A, B, C, D đều khác không. Điều này chứng tỏ ngay cả khi $E < V_o$ thì vẫn có sóng truyền qua giá trị hệ số truyền qua là:

$$T = |D|^2 = \frac{16n^2}{(1 + n^2)^2} e^{-\frac{2a}{h} \sqrt{2m(V_o - E)}} \tag{II.47}$$

Trong đó

$$n = \frac{k}{k_o} = \sqrt{\frac{V_o - E}{E}}$$

Hiện tượng hạt có thể vượt qua hàng rào ngay cả khi năng lượng của nó thấp hơn hàng rào thế được gọi là **hiệu ứng đường ngầm**. Vấn đề này sẽ được nghiên cứu chi tiết hơn trong Cơ học lượng tử.

§7 BÀI TẬP CHƯƠNG II

Bài II.1

Hạt electron chuyển động với vận tốc $2,5 \cdot 10^8 \text{ m/s}$. Tính bước sóng De Broglie của nó.

Bài II.2

Đánh giá hạt electron là loại tương đối tính hay phi tương đối tính để từ đó áp dụng công thức tính bước sóng De Broglie của nó trong trường hợp: hạt electron được tăng tốc bởi hiệu điện thế:

- $U = 1 \text{ kV}$
- $U = 100 \text{ MV}$

Bài II.3

Cần phải cung cấp thêm cho hạt electron phi tương đối tính một năng lượng là bao nhiêu để bước sóng De Broglie của nó giảm từ $15 \cdot 10^{-12} \text{ m}$ xuống 10^{-11} m ?

Bài II.4

Cho một hệ gồm một hạt neutron và một hạt proton. Hạt proton chuyển động với động năng 30 eV , còn hạt neutron đứng yên. Hãy tính bước sóng De Broglie của hai hạt trong hệ quy chiếu khối tâm của hệ hai hạt đó?

Bài II.5

Cho một hạt electron chuyển động với động năng T . Hãy thiết lập công thức tính bước sóng De Broglie của nó trong các trường hợp xem hạt là phi tương đối tính và tương đối tính. Tìm giá trị

nhỏ nhất của T để sai số trong hai trường hợp không quá 1%?

Bài II.6

Hạt vi mô có độ bất định về động lượng bằng 0,5% động lượng của nó. Tính tỷ số giữa bước sóng De Broglie λ và độ bất định về tọa độ Δx của hạt vi mô đó.

Bài II.7

Dùng hệ thức bất định, xác định giá trị nhỏ nhất khả dĩ của năng lượng electron trong nguyên tử Hydro và tính khoảng cách hiệu dụng từ electron đến hạt nhân?

Bài II.8

Độ rộng của giếng thế vô hạn phải bằng bao nhiêu để năng lượng của electron bị nhốt trong đó ở trạng thái $n = 3$ có năng lượng bằng $4,7eV$?

Bài II.9

Năng lượng ở trạng thái cơ bản của electron trong một giếng thế vô hạn là $2,6eV$. Hỏi năng lượng trạng thái cơ bản của nó sẽ là bao nhiêu nếu bề rộng giếng thế tăng lên gấp đôi.

Bài II.10

Một electron bị nhốt trong một giếng thế sâu vô hạn một chiều rộng $0,25nm$ đang ở trạng thái cơ bản ($n = 1$). Hỏi nó cần hấp thụ một năng lượng là bao nhiêu để nhảy lên mức kích thích thứ ba ($n = 4$)?

Chương III

NGUYÊN TỬ HYDRO TRONG CƠ HỌC LƯỢNG TỬ

Lý thuyết Cơ học lượng tử ra đời cung cấp cho ta những hiểu biết chính xác về thế giới **vật chất vi mô**. Nó giúp ta hiểu được cấu trúc của nguyên tử, những quy luật tương tác trong từng nguyên tử riêng rẽ và giữa các nguyên tử với nhau để tạo thành phân tử, liên kết tạo thành chất rắn, giải thích được các đặc trưng về điện, về từ của chất rắn,...

Trong chương này ta sử dụng công cụ Cơ học lượng tử để nghiên cứu nguyên tử đơn giản nhất, đó là nguyên tử Hydro - nguyên tử chỉ có duy nhất một hạt proton và một hạt electron.

§1 PHƯƠNG TRÌNH SCHRÖDINGER CHO NGUYÊN TỬ HYDRO VÀ CÁC ION TƯƠNG TỰ

1.1 Phương trình Schrödinger cho nguyên tử Hydro và các Ion tương tự

1.1.1. Phương trình Schrödinger trong hệ toạ độ Descartes

Ta xét nguyên tử Hydro và các Ion tương tự nguyên tử Hydro như He^+ , Li^{++} , ... là hệ gồm hạt electron mang điện tích $-e$ và hạt nhân mang điện tích $+Ze$, có thể xem như là hệ hai điện tích điểm.

Ta xem hạt nhân đứng yên còn electron thì chuyển động xung quanh hạt nhân dưới tác dụng của trường lực Coulomb của điện tích hạt nhân.

Hạt electron có thế năng là:

$$U = -\frac{kZe^2}{r} \quad (\text{III.1})$$

trong đó hằng số $k = 9.10^9 \left(\frac{Nm^2}{C^2} \right)$.

Thay (III.1) vào phương trình Schrödinger (II.27) ta được phương trình Schrödinger của hạt electron chuyển động trong nguyên tử Hydro và các Ion tương tự Hydro như sau:

$$\Delta\psi(x, y, z) + \frac{2m_e}{\hbar^2} \left(E + \frac{kZe^2}{r} \right) \psi(x, y, z) = 0 \quad (\text{III.2})$$

trong đó:

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (\text{III.3})$$

là toán tử Laplace.

1.1.2. Phương trình Schrödinger trong hệ tọa độ cầu

Vì trường Coulomb của điện tích hạt nhân đối xứng cầu, tức là phụ thuộc tọa độ r nên ta chuyển phương trình Schrödinger sang tọa độ cầu để thuận tiện cho việc giải phương trình. Ta đã biết quan hệ giữa các tọa độ trong hệ tọa độ Descartes và hệ tọa độ cầu là:

$$\begin{cases} x = r \sin \theta \cos \varphi \\ y = r \sin \theta \sin \varphi \\ z = r \cos \theta \end{cases} \quad (\text{III.4})$$

Từ đây ta có thể chuyển các đạo hàm theo các tọa độ x, y, z thành các đạo hàm theo các tọa độ r, θ, φ . Sau khi rút gọn và thay vào (III.3) ta được:

$$\Delta_{r,\theta,\varphi} = \frac{1}{r^2} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \quad (\text{III.5})$$

Thay (III.5) vào (III.2) ta được phương trình Schrödinger của hạt electron trong nguyên tử Hydro và các Ion tương tự Hydro trong hệ tọa độ cầu:

$$\frac{1}{r^2} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \psi(r, \theta, \varphi) + \frac{2m_e}{\hbar^2} \left(E + \frac{kZe^2}{r} \right) \psi(r, \theta, \varphi) = 0 \quad (\text{III.6})$$

1.2 Giải phương trình Schrödinger bằng phương pháp phân ly biến số

1.2.1. Phân li biến số

Phương trình (III.6) là một phương trình đạo hàm riêng phụ thuộc vào ba biến số là ba tọa độ r, θ và φ . Để giải nó ta có thể dùng phương pháp phân ly biến số để từ một phương trình chứa ba biến số chuyển thành một hệ ba phương trình, mỗi phương trình chỉ chứa một biến số. Có thể thực hiện biến đổi như sau:

Đặt: $\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \cdot \Theta(\theta) \cdot \Phi(\varphi)$ thay vào (III.6) ta được:

$$\begin{aligned} & \Theta(\theta) \Phi(\varphi) \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right) + R(r) \Phi(\varphi) \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta(\theta)}{\partial \theta} \right) \\ & + R(r) \Theta(\theta) \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \Phi(\varphi)}{\partial \varphi^2} + \frac{2m_e}{\hbar^2} \left(E + \frac{kZe^2}{r} \right) R(r) \Theta(\theta) \Phi(\varphi) = 0 \end{aligned} \quad (\text{III.7})$$

Nhân hai vế của (III.7) với

$$\frac{r^2 \sin^2 \theta}{R(r) \Theta(\theta) \Phi(\varphi)} \quad (\text{III.8})$$

ta được:

$$\frac{\sin^2 \theta}{R(r)} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right) + \frac{\sin \theta}{\Theta(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta(\theta)}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\Phi(\varphi)} \frac{\partial^2 \Phi(\varphi)}{\partial \varphi^2} + \frac{2m_e r^2 \sin^2 \theta}{\hbar^2} \left(E + \frac{kZe^2}{r} \right) = 0$$

hay:

$$\frac{\sin^2 \theta}{R(r)} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right) + \frac{2m_e r^2 \sin^2 \theta}{\hbar^2} \left(E + \frac{kZe^2}{r} \right) + \frac{\sin \theta}{\Theta(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta(\theta)}{\partial \theta} \right) = \frac{-1}{\Phi(\varphi)} \frac{\partial^2 \Phi(\varphi)}{\partial \varphi^2} \quad (\text{III.9})$$

Hai vế của phương trình (III.9) phụ thuộc vào các biến độc lập nhau nên hai vế phải luôn bằng một hằng số. Ta đặt hằng số đó là m^2 thì (III.9) viết được thành hai phương trình:

$$\frac{\sin^2\theta}{R(r)} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right) + \frac{2m_e r^2 \sin^2\theta}{\hbar^2} \left(E + \frac{kZe^2}{r} \right) + \frac{\sin\theta}{\Theta(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial \Theta(\theta)}{\partial \theta} \right) = m^2 \quad (\text{III.10})$$

$$\frac{d^2\Phi(\varphi)}{d\varphi^2} + m^2\Phi(\varphi) = 0 \quad (\text{III.11})$$

Chia (III.10) cho $\sin^2\theta$ ta được:

$$\frac{1}{R(r)} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right) + \frac{2m_e r^2}{\hbar^2} \left(E + \frac{kZe^2}{r} \right) + \frac{1}{\Theta(\theta)\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial \Theta(\theta)}{\partial \theta} \right) = \frac{m^2}{\sin^2\theta}$$

hay:

$$\frac{m^2}{\sin^2\theta} - \frac{1}{\Theta(\theta)\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial \Theta(\theta)}{\partial \theta} \right) = \frac{1}{R(r)} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right) + \frac{2m_e r^2}{\hbar^2} \left(E + \frac{kZe^2}{r} \right) \quad (\text{III.12})$$

Phương trình (III.12) cũng có hai vế phụ thuộc vào các biến độc lập nhau nên có thể đặt bằng hằng số $l(l+1)$. Khi đó phân li (III.10) thành hai phương trình:

$$\frac{m^2}{\sin^2\theta} \Theta(\theta) - \frac{1}{\sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin\theta \frac{d\Theta(\theta)}{d\theta} \right) = l(l+1)\Theta(\theta) \quad (\text{III.13})$$

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR(r)}{dr} \right) + \frac{2m_e r^2}{\hbar^2} \left(E + \frac{kZe^2}{r} \right) R(r) = l(l+1)R(r) \quad (\text{III.14})$$

Các phương trình (III.11); (III.13); (III.14) là phương trình Schrödinger của hạt electron trong nguyên tử Hydro và các Ion tương tự viết trong tọa độ cầu, dạng phân ly biến số. Trong đó m , l là các hằng số mà ta sẽ tìm hiểu ý nghĩa của nó trong các phần sau.

1.2.2. Một số kết quả

Giải phương trình (III.10) cho ta kết quả nghiệm:

$$\Phi(\varphi) = Ae^{im\varphi} \quad (\text{III.15})$$

Trong đó i là đơn vị ảo, A là hằng số sẽ được xác định từ điều kiện chuẩn hoá hàm sóng.

Vì hàm sóng đơn trị nên ta có: $\Phi(\varphi) = \Phi(\varphi + 2\pi)$, hay:

$$Ae^{im\varphi} = Ae^{im(\varphi+2\pi)} \Rightarrow e^{im2\pi} = 1 \Rightarrow m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

m được gọi là lượng tử số từ.

Việc giải phương trình (III.13) là khá phức tạp nên ta không trình bày trong giáo trình này. Nghiệm thu được dưới dạng một đa thức, được gọi là đa thức liên kết Legendre. Từ việc biện luận cho nghiệm ta thu được kết quả là hằng số l là một hằng số nguyên luôn luôn lớn hơn hoặc bằng $|m|$. Như vậy ta có thể viết:

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l \quad (\text{III.16})$$

l được gọi là lượng tử số quỹ đạo.

Tương tự nghiệm của phương trình (III.14) cũng thu được dưới dạng một đa thức được gọi là đa thức liên kết Legendre. Từ điều kiện tiêu chuẩn mà hàm sóng bán kính xuyên tâm $R(r)$ phải thoả mãn, ta tìm thấy kết quả phương trình chỉ có nghiệm với mọi giá trị liên tục dương của năng lượng E , hoặc với một số giá trị âm gián đoạn của năng lượng:

$$E_n = -\frac{k^2 m_e e^4 Z^2}{2n^2 \hbar^2} \quad (\text{III.17})$$

n là một số nguyên dương được gọi là số lượng tử chính. Từ các kết quả biện luận ta tìm được điều kiện của số lượng tử chính n là $n \geq l + 1$ hay:

$$l = 0, 1, 2, \dots, n - 1 \quad (\text{III.18})$$

Cuối cùng ta có hàm sóng phụ thuộc vào các số lượng tử :

$$\psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi) = R_{n,l}(r)\Theta_{l,m}(\theta)\Phi_m(\varphi) \quad (\text{III.19})$$

Trong đó các số lượng tử quan hệ với nhau theo các hệ thức:

$$\begin{cases} n = 1, 2, 3, \dots \\ l = 0, 1, 2, \dots, n - 1 \\ m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l \end{cases} \quad (\text{III.20})$$

§2 SỐ LƯỢNG TỬ CHÍNH, NĂNG LƯỢNG TRẠNG THÁI DỪNG CỦA NGUYÊN TỬ

2.1 Số lượng tử chính

Khi giải phương trình Schrödinger để tìm nghiệm của nó là hàm sóng thì đồng thời xuất hiện những đại lượng vật lý mô tả trạng thái của hạt vi mô. Một trong những kết quả thu được hết sức quan trọng là biểu thức (III.17) tính năng lượng gián đoạn của hạt electron. Biểu thức này hoàn toàn trùng với kết quả (I.21) thu được trong lý thuyết Bohr ở chương I. Điều thú vị là xuất phát từ hai con đường hoàn toàn khác biệt nhau mà kết quả thu được lại hoàn toàn giống nhau. Chúng ta cần hiểu rằng cả lý thuyết Bohr và thuyết lượng tử đều thu được kết quả lượng tử tương tự nhau, nhưng trong lý thuyết Bohr đã áp đặt sự lượng tử mômen xung lượng từ trước (tiên đề 2: $L = n\hbar$), còn trong Cơ học lượng tử thì kết quả này có được do việc giải phương trình Schrödinger. Sự gián đoạn của năng lượng nguyên tử Hydro và các Ion tương tự là hoàn toàn tự nhiên và nhất thiết phải xảy ra vì nó gắn với bản chất sóng của đối tượng vi mô mà Cơ học lượng tử đã mô tả.

Trong biểu thức năng lượng (III.17) phụ thuộc vào số nguyên dương $n = 1, 2, \dots$ quyết định các trạng thái khả dĩ của hạt. Số n được gọi là số lượng tử chính. Số lượng tử chính n đặc trưng cho sự lượng tử hoá năng lượng toàn phần của nguyên tử.

2.2 Năng lượng trạng thái dừng của nguyên tử

Khi nguyên tử tồn tại ở một trạng thái có số lượng tử chính n xác định thì năng lượng của nó cũng xác định. Các năng lượng này chỉ nhận những giá trị gián đoạn, nghĩa là bị lượng tử hoá. Trạng thái như vậy của nguyên tử được gọi là trạng thái dừng, còn năng lượng của nguyên tử tương ứng với trạng thái dừng thì được gọi là năng lượng trạng thái dừng của nguyên tử.

$$E_n = -\frac{k^2 m_e e^4 Z^2}{2n^2 \hbar^2}$$

Chú ý rằng biểu thức trên chỉ áp dụng đúng cho nguyên tử Hydro và các Ion tương tự nguyên tử Hydro, là loại Ion chỉ có duy nhất một electron. Biểu thức này không áp dụng được cho các nguyên tử phức tạp, vì chúng gồm nhiều electron nên tương tác với nhau.

§3 LƯỢNG TỬ SỐ QUỸ ĐẠO, MOMENT QUỸ ĐẠO CỦA ELECTRON

3.1 Mômen quỹ đạo

Ta quay lại xét phương trình sóng bán kính xuyên tâm (III.14)

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR(r)}{dr} \right) + \frac{2m_e r^2}{\hbar^2} \left(E + \frac{kZe^2}{r} \right) R(r) = l(l+1)R(r)$$

Trong phương trình này có chứa biểu thức năng lượng E - là động năng của hạt electron. Vì electron có thể chuyển động bất kì nên động năng có thể chia thành hai phần:

- động năng chuyển động xuyên tâm theo phương bán kính r ta kí hiệu là T_{xt}
- động năng chuyển động quay quanh hạt nhân ta kí hiệu là T_q

Như vậy: $E = T_{xt} + T_q$

Thay vào phương trình xuyên tâm ta được:

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR(r)}{dr} \right) + \frac{2m_e r^2}{\hbar^2} \left\{ T_{xt} + \left[T_q - \frac{\hbar^2}{2m_e r^2} l(l+1) \right] + \frac{kZe^2}{r} \right\} R(r) = 0 \quad (\text{III.21})$$

Để loại bỏ thành phần chuyển động quay trong phương trình sóng xuyên tâm ta cho các yếu tố trong dấu móc vuông bằng không:

$$\left[T_q - \frac{\hbar^2}{2m_e r^2} l(l+1) \right] = 0 \quad (\text{III.22})$$

Chú ý rằng động năng chuyển động quay:

$$T_q = \frac{m_e v^2}{2}$$

Momen xung lượng của electron trên quỹ đạo là $L = m_e v r$ nên:

$$T_q = \frac{L^2}{2m_e r^2}$$

Thay vào (III.22) ta rút ra:

$$L = \sqrt{l(l+1)}\hbar \quad (\text{III.23})$$

Đây là biểu thức tính momen xung lượng của electron. Momen này ứng với electron chuyển động trên quỹ đạo dừng nên thường được gọi là **mômen quỹ đạo**.

Chú ý rằng l là số lượng tử quỹ đạo chỉ nhận các giá trị gián đoạn: $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$.

Như vậy ứng với một giá trị của số lượng tử chính n có n giá trị khả dĩ của momen xung lượng L . Từ đây cho phép kết luận: momen xung lượng cũng bảo toàn (vì lượng tử số quỹ đạo l xác định) và bị lượng tử hoá (vì l chỉ nhận các giá trị gián đoạn).

Cần lưu ý rằng khái niệm "quỹ đạo" ở đây chỉ có tính quy ước vì theo Cơ học lượng tử thì hạt vi mô hoàn toàn không có khái niệm quỹ đạo (bị bác bỏ bởi hệ thức bất định Heisenberg).

3.2 Ký hiệu mômen quỹ đạo

Người ta quy ước biểu diễn các trạng thái của electron trong nguyên tử ứng với momen quỹ đạo (số lượng tử quỹ đạo l) như sau:

l	0	1	2	3	4	5
Kí hiệu	s	p	d	f	g	h

Trạng thái s không có momen quỹ đạo ($L = 0$). Điều này không có nghĩa là ở trạng thái s electron không chuyển động, mà có nghĩa là các cách định hướng của vectơ momen quỹ đạo đối xứng nhau nên chúng triệt tiêu lẫn nhau. Trạng thái p momen quỹ đạo $L = \sqrt{2}\hbar$, trạng thái d momen quỹ đạo $L = \sqrt{6}\hbar, \dots$

Ngoài ra ta còn kết hợp số lượng tử chính n với số lượng tử quỹ đạo l ta có thể kí hiệu trạng thái khả dĩ của nguyên tử theo bảng sau:

l	0	1	2	3	4	5
	s	p	d	f	g	h
$n=1$	1s					
$n=2$	2s	2p				
$n=3$	3s	3p	3d			
$n=4$	4s	4p	4d	4f		
$n=5$	5s	5p	5d	5f	5g	
$n=6$	6s	6p	6d	6f	6g	6h

§4 SỐ LƯỢNG TỬ TỪ. SỰ LƯỢNG TỬ HÓA KHÔNG GIAN

4.1 Số lượng tử từ

Ta đã tìm được công thức tính momen quỹ đạo $L = \sqrt{l(l+1)}\hbar$. Nhưng momen quỹ đạo là đại lượng vectơ nên ta phải xác định cả cách định hướng của nó trong không gian.

Khi giải phương trình (III.13) người ta thu được một kết quả vật lý khác là. Nếu chọn chiều từ trường ngoài \vec{B} đặt lên nguyên tử làm trục Oz thì hình chiếu của \vec{L} lên trục Oz phải thoả mãn hệ thức:

$$L_z = m\hbar \quad (\text{III.24})$$

Trong đó m là số nguyên: $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$ được gọi là số lượng tử từ. Như vậy có $(2l + 1)$ cách định hướng của vectơ momen quỹ đạo \vec{L} .

4.2 Sự lượng tử hóa không gian

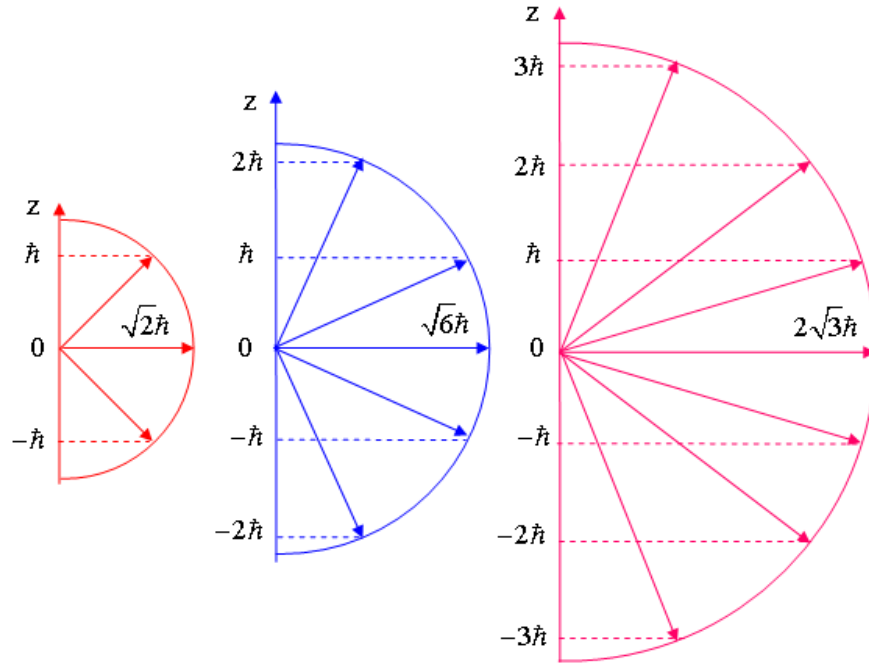
Như trên đã trình bày, vectơ momen xung lượng không thể định hướng tùy ý mà phải định hướng sao cho thoả mãn (III.24). Sự định hướng xác định trong không gian của vectơ momen xung lượng có ý nghĩa như thế nào? Điều này có liên quan trực tiếp đến từ trường ngoài. Thực vậy, khi electron quay quanh hạt nhân thì nó tạo thành dòng điện kín, tức là nó gây ra từ trường giống như lưỡng cực từ. Vì thế một electron có momen quỹ đạo \vec{L} sẽ tương tác với từ trường ngoài \vec{B} . Nếu ta hướng trục Oz song song với phương từ trường ngoài thì số lượng tử m sẽ đặc trưng cho sự định hướng khả dĩ của vectơ \vec{L} trong không gian thể hiện qua các giá trị của thành phần L_z trên phương từ trường ngoài xác định bởi (III. 24). Hiện tượng này được gọi là **sự lượng tử hoá không gian**: các phương không gian trở thành chọn lọc và gián đoạn đối với sự định hướng của vectơ momen quỹ đạo \vec{L} .

Do có $2l + 1$ giá trị của số lượng tử từ m nên sẽ có $2l + 1$ cách định hướng vectơ momen quỹ đạo \vec{L} . Khi $l = 0$ thì $m = 0$ nên $L_z = 0$. Điều này có nghĩa là momen xung lượng \vec{L} luôn vuông góc với từ trường ngoài. Khi $l = 1$ thì có 3 cách định hướng, ...

Ta có bảng tổng hợp một số giá trị của momen xung lượng ứng với số lượng tử quỹ đạo và hình chiếu của nó lên phương $0z$.

l	0	1	2	3
L	0	$\hbar\sqrt{2}$	$\hbar\sqrt{6}$	$2\sqrt{3}\hbar$
m	0	-1 ; 0 ; 1	-2 ; -1 ; 0 ; 1 ; 2	-3 ; -2 ; -1 ; 0 ; 1 ; 2 ; 3
L_z	0	$-\hbar$; 0 ; \hbar	$-2\hbar$; $-\hbar$; 0 ; \hbar ; $2\hbar$	$-3\hbar$; $-2\hbar$; $-\hbar$; 0 ; \hbar ; $2\hbar$; $3\hbar$

Từ bảng này ta vẽ được sơ đồ lượng tử hoá không gian tương ứng như hình (III.1)



Hình III.1: Sự lượng tử hoá không gian

Cuối cùng, chúng ta cần hiểu rằng nguyên tử đặc trưng bởi một giá trị m nào đó như là nguyên tử đó sẵn sàng có một hướng nhất định tương ứng của vectơ \vec{L} đối với từ trường ngoài. Như vậy, khi không có từ trường ngoài, phương $0z$ hoàn toàn có tính chất ngẫu nhiên, nhưng nếu có từ trường ngoài thì, phương $0z$ được chọn trùng với phương từ trường ngoài, sẽ trở thành một phương đặc biệt, phương ưu tiên đối với nguyên tử.

§5 PHÂN BỐ XÁC SUẤT TÌM THẤY ELECTRON TRONG NGUYÊN TỬ

Theo lý thuyết cổ điển thì electron chuyển động trên những quỹ đạo xác định, có bán kính xác định ($a_0 = 0,534\text{\AA}$) gọi là quỹ đạo Bohr.

Lý thuyết lượng tử về nguyên tử Hydro và các Ion tương tự lại cho ta kết quả hoàn toàn khác. Nguyên lý bất định Heisenberg đã khẳng định không thể xác định đồng thời chính xác tọa độ và xung lượng của hạt vi mô, như vậy là đã phủ nhận khái niệm **quỹ đạo** của hạt vi mô. Trong Vật lý lượng tử chỉ có khả năng biết chính xác **xác suất** tìm thấy hạt tại một điểm bất kì có tọa độ r, θ, φ quanh hạt nhân. Mặc dù electron luôn luôn chuyển động nhưng Vật lý lượng tử lại chỉ ra

rằng, **xác suất tìm thấy hạt** electron tại một vị trí quanh hạt nhân lại không phụ thuộc vào thời gian.

5.1 Mật độ xác suất: w

Ta biết hàm sóng mô tả trạng thái của hạt có dạng:

$$\psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi) = R_{n,l}(r)\Theta_{l,m}(\theta)\Phi_m(\varphi) \quad (\text{III.25})$$

trong đó các thành phần R, Θ, Φ đều là những hàm thoả mãn ba điều kiện tiêu chuẩn của hàm sóng. Suy ra mật độ xác suất tìm thấy electron là:

$$w = |\psi|^2 = \psi\psi^* = |R|^2|\Theta|^2|\Phi|^2 \quad (\text{III.26})$$

Trong (III.26) ta đã biết

$$\Phi_m(\varphi) = Ae^{im\varphi} \Rightarrow |\Phi_m(\varphi)|^2 = A^2 = \text{Const} \quad (\text{III.27})$$

Như vậy mật độ xác suất tìm thấy electron không phụ thuộc tọa độ φ , hay nói cách khác mật độ xác suất tìm thấy hạt có tính chất đối xứng qua trục Oz . Nghĩa là mật độ xác suất tìm thấy hạt ở mọi tọa độ góc φ là như nhau.

Mật độ xác suất $|\Theta_{l,m}(\theta)|^2$ cho ta biết mật độ xác suất theo hướng góc θ xác định trên mặt phẳng kinh tuyến. Trong giáo trình này chúng ta chưa đủ điều kiện giải tìm ra hàm $\Theta_{l,m}(\theta)$ cụ thể, tuy nhiên chúng ta thừa nhận kết quả giải của Cơ học lượng tử: Hàm $\Theta_{l,m}(\theta)$ là phức tạp, phụ thuộc vào tọa độ θ , số lượng tử quỹ đạo l và số lượng tử từ m . Tuy nhiên nếu xét trạng thái s ($l = m = 0$) thì $|\Theta_{l,m}(\theta)|^2 = \text{const}$. Như vậy ở trạng thái s mật độ xác suất tìm thấy electron không phụ thuộc tọa độ θ , nghĩa là mật độ xác suất có giá trị như nhau theo mọi hướng tại khoảng cách r cho trước tính từ tâm hạt nhân.

Như vậy, ở trạng thái s , mật độ xác suất tìm thấy hạt electron có tính chất đối xứng cầu. Kết quả này lý giải vì sao ở trạng thái s mômen xung lượng của electron bằng không. Mômen xung lượng $L = 0$ không có nghĩa là hạt electron ngừng quay mà có nghĩa là hạt electron quay đối xứng cầu nên mọi phương không gian đều bình đẳng, vectơ \vec{L} có thể định hướng xuyên tâm, dẫn đến giá trị trung bình của momen xung lượng $L = 0$.

Việc giải phương trình (III.14) cũng rất phức tạp nên ta không thực hiện trong giáo trình này. Hàm sóng xuyên tâm $R_{n,l,m}(r)$ phụ thuộc vào tọa độ bán kính r và cả ba số lượng tử n, l, m . Mọi trạng thái của nguyên tử, mật độ xác suất tìm thấy hạt electron đều phụ thuộc tọa độ bán kính r .

Tóm lại nếu xét ở trạng thái s thì mật độ xác suất tìm thấy electron trong nguyên tử là:

$$w = |R_{n,l,m}(r)|^2 \quad (\text{III.28})$$

5.2 Biểu thức tính xác suất: dW

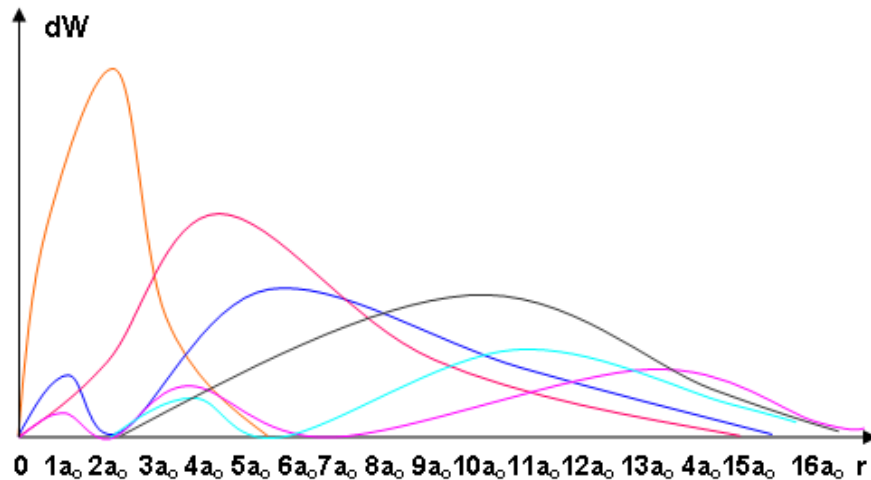
Lấy một vi phân thể tích trong hệ tọa độ cầu: $dV = r^2 \sin\theta d\theta d\varphi dr$ thì xác suất tìm thấy electron trong thể tích dV là: $|\psi|^2 dV$.

Kí hiệu dW là xác suất tìm thấy hạt electron trong thể tích giới hạn bởi hai mặt cầu bán kính r và $r + dr$ thì ta có:

$$dW = |R|^2 r^2 dr \int_0^\pi |\Theta|^2 \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} |\Phi|^2 d\varphi = |R|^2 r^2 dr \quad (\text{III.29})$$

ở đây các tích phân:

$$\int_0^\pi |\Theta|^2 \sin\theta d\theta = 1; \quad \int_0^{2\pi} |\Phi|^2 d\varphi = 1$$



Hình III.2: Đồ thị xác suất tìm thấy electron trong nguyên tử

do điều kiện chuẩn hóa.

Ta có đồ thị xác suất tìm thấy electron trong nguyên tử Hydro theo bán kính r như hình (III.2).

Đồ thị này cho thấy, xác suất tìm thấy electron chẳng những phụ thuộc vào bán kính r mà còn phụ thuộc vào các số lượng tử trạng thái của nó. Ở trạng thái $1s$, mật độ xác suất tìm thấy hạt cực đại ở vị trí $r = a_0$, trạng thái $2p$ với $m = \pm 1$ có mật độ xác suất cực đại tại $r = 4a_0$, trạng thái $3d$ với $m = \pm 2$ có mật độ xác suất cực đại tại $r = 9a_0$, trạng thái $4f$ với $m = \pm 3$ có mật độ xác suất cực đại tại $r = 16a_0$,...rất phù hợp với lý thuyết Bohr.

Tóm lại, *xác suất phân bố tìm thấy electron trong nguyên tử thay đổi tùy theo trạng thái của nguyên tử. Trường hợp tổng quát phân bố này có tính đối xứng qua trục Oz . Trường hợp đặc biệt khi nguyên tử ở trạng thái $1s$ thì phân bố này có tính chất đối xứng cầu.*

§6 SPIN CỦA ELECTRON. THÍ NGHIỆM STERN - GERLACH

6.1 Spin của electron

Có một số vấn đề mâu thuẫn giữa lý thuyết và thực nghiệm khi giải bài toán cấu trúc nguyên tử Hydro từ phương trình Schrödinger.

Mâu thuẫn thứ nhất là cấu trúc tinh vi của các vạch quang phổ. Cụ thể là khi dùng các máy quang phổ có độ phân giải cao, người ta nhận thấy mỗi vạch quang phổ Hydro thuộc dãy Balmer bị tách thành hai vạch rất sát nhau.

Chẳng hạn, vạch thứ nhất của dãy Balmer có bước sóng $\lambda = 6563\text{\AA}$ đã tách thành hai vạch có bước sóng chênh lệch nhau $\Delta\lambda = 1,4\text{\AA}$.

Mâu thuẫn thứ hai là hiện tượng tách vạch quang phổ khi đặt nguyên tử Hydro trong từ trường ngoài được gọi là hiệu ứng Zeeman thường: mỗi vạch quang phổ bị tách thành ba vạch, hai thành phần mới xuất hiện nằm đối xứng hai bên vạch ban đầu khi chưa có từ trường ngoài hoặc là hiệu ứng Zeeman dị thường: mỗi vạch bị tách thành nhiều hơn ba vạch. Trong khuôn khổ lý thuyết Cơ học lượng tử thời bấy giờ, những hiện tượng này không thể giải thích được.

Để giải quyết khó khăn trên, vào năm 1925 Goudsmith và Uhlenbeck đã đưa ra giả thuyết mới là *electron ngoài mômen quỹ đạo đã biết, còn có mômen xung lượng riêng xuất hiện*

do chuyển động tự quay của nó. Hình ảnh này giống như Trái đất, ngoài chuyển động xung quanh Mặt trời, còn chuyển động tự quay xung quanh trục của nó. Chính chuyển động tự quay này gây ra mômen xung lượng riêng gọi là **mômen spin** hay gọi tắt là **spin** của electron. Cách suy luận này hoàn toàn theo quan niệm cổ điển. Giá trị spin là:

$$S = \frac{1}{2}\hbar \quad (\text{III.30})$$

Vào năm 1928, Dirac đã thành lập được phương trình lượng tử tương đối tính. Giải phương trình này ông đã tìm được biểu thức tính **spin** của electron, nhưng không liên quan gì đến chuyển động tự quay mà nó là một thuộc tính đặc trưng của hạt vi mô, gắn liền với bản chất hạt vi mô. Cho dù hạt vi mô đứng yên hay chuyển động nó vẫn có spin, giống như khối lượng hay điện tích gắn liền với hạt vậy. Như vậy **không phải chỉ có electron mới có spin mà các hạt vi mô khác cũng có spin**. Theo lý thuyết Dirac, electron có spin là:

$$|\vec{S}| = \sqrt{s(s+1)}\hbar \quad (\text{III.31})$$

trong đó $s = \frac{1}{2}$ được gọi là **số lượng tử số spin**. Như vậy:

$$S = \frac{\sqrt{3}}{2}\hbar \quad (\text{III.32})$$

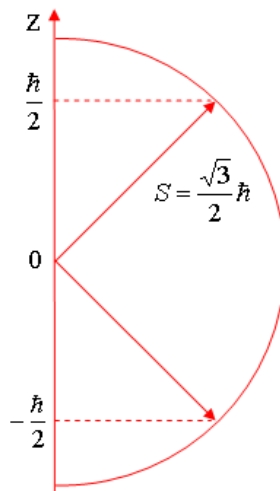
6.2 Sự lượng tử hoá không gian của spin

Tương tự như mômen quỹ đạo, khi đặt nguyên tử trong từ trường ngoài chỉ có $2l + 1$ cách định hướng trong không gian thì spin cũng chỉ có $2s + 1 = 2 \cdot \frac{1}{2} + 1 = 2$ cách định hướng trong không gian. Thành phần hình chiếu của spin lên trục $0z$ là S_z được xác định theo công thức:

$$S_z = m_s \hbar \quad (\text{III.33})$$

Trong đó $m_s = \pm s = \pm \frac{1}{2}$ được gọi là lượng tử số từ riêng.

Sự lượng tử hoá không gian của spin được mô tả trên hình (III.3)

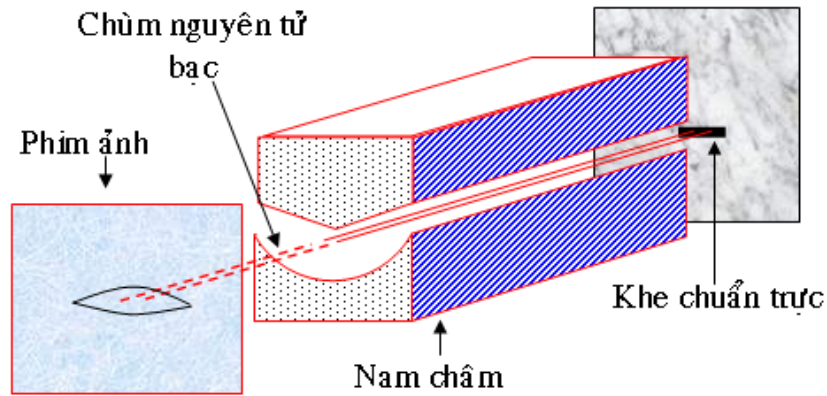


Hình III.3: Sự lượng tử hoá không gian của spin

6.3 Thí nghiệm của Stern - Gerlach

Sự tồn tại spin đã được xác nhận bằng thực nghiệm nhờ thí nghiệm đầu tiên của Stern-Gerlach được thực hiện vào năm 1929.

Thí nghiệm được mô tả như hình vẽ (III.4)



Hình III.4: Thí nghiệm Stern-Gerlach

Thí nghiệm được tiến hành như sau: Một chùm nguyên tử Bạc trung hoà được phát ra từ nguồn, cho qua khe chuẩn trực để tạo ra chùm nguyên tử Bạc song song. Chùm nguyên tử Bạc trung hoà này được cho đi qua một từ trường không đồng nhất được tạo ra bởi nam châm điện. Sau khi ra khỏi từ trường chùm nguyên tử Bạc đập lên một tấm phim ảnh để ghi lại vết của chúng. Toàn bộ hệ thống được đặt trong chân không để không làm ảnh hưởng đến chuyển động của chùm nguyên tử Bạc đang xét.

Nếu nguyên tử Bạc có mômen từ, thì nó tương đương như một lưỡng cực từ nên khi chuyển động trong từ trường nó sẽ chịu tác dụng của ngẫu lực từ hướng dọc theo từ trường. Do chuyển động trong từ trường không đều nên mỗi cực của lưỡng cực từ chịu tác dụng của một lực có cường độ khác nhau và tạo thành một hợp lực \vec{F} có giá trị phụ thuộc vào sự định hướng tương đối của lưỡng cực đối với từ trường và Gradient của từ trường theo hướng đó:

$$F = -\mu_s \frac{\partial H}{\partial z} \quad (\text{III.34})$$

ở đây μ_z là hình chiếu của vectơ mômen từ $\vec{\mu}$ trên phương từ trường ngoài do nam châm tạo ra. Rõ ràng μ_z phụ thuộc vào sự định hướng của vectơ $\vec{\mu}$ đối với từ trường ngoài.

Kết quả thí nghiệm cho thấy khi không có từ trường thì trên phim ảnh cho ta một vết thẳng, khi có từ trường thì bị tách thành hai phần rõ rệt như trên hình vẽ. Kết quả này chứng tỏ:

1. Chùm nguyên tử Bạc ngay cả ở trạng thái bình thường ($l = 0$) có mômen từ quỹ đạo bằng không vẫn có một mômen từ riêng của electron trong nguyên tử, tức **spin**.
2. Hai vết của vạch đối xứng ngược nhau hình chiếu mômen từ riêng chỉ nhận hai giá trị trái dấu nhau. Các số liệu thực nghiệm cho phép tính ra các giá trị này chính bằng manhêton Borh.
3. Kết quả thu được từ thí nghiệm này phù hợp rất tốt với kết quả tính toán theo lý thuyết.

§7 MOMENT TỪ VÀ MOMENT TỪ RIÊNG CỦA ELECTRON

7.1 Mômen từ của electron

Chuyển động của electron trong nguyên tử có thể coi như dòng điện khép kín. Dòng điện này gây ra xung quanh nó một từ trường, do đó trong chuyển động, ngoài mômen quỹ đạo đã biết, electron còn có mômen từ.

7.1.1. Mômen từ theo quan niệm cổ điển

Theo mẫu nguyên tử Rutherford thì electron chuyển động xung quanh hạt nhân theo quỹ đạo tròn, bán kính quỹ đạo là bán kính Bohr. Mômen từ của electron tương ứng với dòng điện khép kín là:

$$\mu = IS \quad (\text{III.35})$$

Trong đó I là cường độ dòng điện, $S = \pi r^2$ là diện tích giới hạn bởi dòng điện đó. Ta có thể viết lại dưới dạng:

$$\mu = I \frac{2\pi r \cdot r m_e v}{2m_e v}$$

Chú ý rằng $L = r m_e v$ là mômen quỹ đạo của electron nên ta có:

$$\mu = I \frac{LT}{2m_e}$$

ở đây:

$$T = \frac{2\pi r}{v}$$

là chu kì quay của electron quanh hạt nhân.

Chú ý rằng: $I = e\nu = \frac{e}{T}$ nên cuối cùng ta có:

$$\mu = \frac{e}{2m_e} L \quad (\text{III.36})$$

Vectơ mômen từ $\vec{\mu}$ và vectơ mômen quỹ đạo \vec{L} cùng phương nhưng ngược chiều nhau vì điện tích của electron âm, nên ta có thể viết dạng vectơ như sau:

$$\vec{\mu} = \frac{e}{2m_e} \vec{L} \quad (\text{III.37})$$

Tỷ số $\frac{e}{2m_e}$ được gọi là **tỷ số từ hồi chuyển**. Thay điều kiện lượng tử hoá của Bohr $L = n\hbar$ ta được:

$$\mu = n \frac{e\hbar}{2m_e} \quad (\text{III.38})$$

Như vậy mômen từ μ cũng bị lượng tử hoá. Giá trị nhỏ nhất của mômen từ được gọi là **manhêton Bohr** được coi như đơn vị mômen từ trong vật lý nguyên tử và hạt nhân và được kí hiệu là μ_o :

$$\mu_o = \frac{e\hbar}{2m_e} \quad (\text{III.39})$$

Trong hệ SI Manhêton Bohr có giá trị là: $\mu_o = 9,273.10^{-24} J/T$.

7.1.2. Mômen từ theo quan niệm lượng tử

Trong Cơ học lượng tử ta cũng chứng minh được mômen từ và mômen quỹ đạo quan hệ theo hệ thức (III.37). Ta thay biểu thức tính mômen quỹ đạo theo quan điểm lượng tử: $L = \sqrt{l(l+1)}\hbar$ thì ta có kết quả:

$$\mu = \sqrt{l(l+1)} \frac{e\hbar}{2m_e} \quad (\text{III.40})$$

Công thức này cho thấy giá trị mômen từ theo quan niệm lượng tử không còn là số nguyên lần Manhêton Bohr nữa.

7.2 Mômen từ riêng

Do electron là hạt mang điện và có mômen xung lượng riêng (spin) nên nó cũng sẽ có mômen từ riêng (có thể hiểu là do dòng điện tạo thành bởi sự quay của electron gây ra). Mômen từ riêng này được ký hiệu là μ_s . Lý thuyết lượng tử đã chứng minh được **tỉ số từ hồi chuyển của spin gấp hai lần tỉ số từ hồi chuyển của chuyển động quỹ đạo**. Do đó ta có hệ thức:

$$\vec{\mu}_s = \frac{e}{m_e} \vec{S} \quad (\text{III.41})$$

Vectơ mômen từ riêng $\vec{\mu}_s$ luôn ngược chiều với vectơ spin \vec{S} .

Mômen từ riêng cũng có hai cách định hướng trong không gian. Hình chiếu của mômen từ riêng lên trục ưu tiên Oz được xác định bởi biểu thức:

$$\mu_{sz} = -\frac{|e|\hbar}{m_e} S_z = \pm \frac{|e|\hbar}{2m_e} = \pm \mu_o \quad (\text{III.42})$$

Ta thấy giá trị này đúng bằng Manhêton Bohr.

§8 TƯƠNG TÁC SPIN- QUỸ ĐẠO

8.1 Khái niệm tương tác spin - quỹ đạo

Dựa vào khái niệm spin của electron ta có thể giải thích được cấu trúc tinh vi của các vạch quang phổ bằng cách xét tương tác giữa spin và mômen quỹ đạo của electron trong nguyên tử. Tương tác này được gọi là tương tác spin-quỹ đạo.

8.2 Sự tách vạch quang phổ

Nếu xét trong hệ quy chiếu gắn với electron thì chính electron chịu tác dụng của một từ trường \vec{B} gây bởi chuyển động của một proton quay quanh nó. Từ trường này tác dụng lên mômen từ riêng của electron tạo ra một năng lượng phụ

$$\Delta W = -\mu \cos\theta B \quad (\text{III.43})$$

trong đó θ là góc hợp bởi các vectơ $\vec{\mu}$ và vectơ \vec{B} . ở đây mômen từ của electron chính là mômen từ riêng μ_s . Trong bài trước ta đã biết:

$$\mu \cos\theta = \mu_{sz} = \pm \frac{e\hbar}{2m_e}$$

Thay vào (III.43) ta thu được:

$$\Delta W = \pm \frac{e\hbar}{2m_e} B \quad (\text{III.44})$$

Vận năng lượng của electron trong trạng thái lượng tử cho trước sẽ tăng thêm hoặc giảm bớt một lượng

$$\pm \frac{e\hbar}{2m_e} B$$

so với khi không có tương tác spin-quỹ đạo. Kết quả là mỗi trạng thái lượng tử tách thành hai trạng thái con, chính vì vậy mỗi vạch quang phổ tách thành hai vạch thành phần. Chính kết quả này cũng giải thích lí do số lượng tử spin bắt buộc phải bằng $\frac{1}{2}$ để chỉ có $2s + 1 = 2$ cách định hướng của vectơ spin \vec{S} .

Ta tính giá trị cụ thể của lượng năng lượng này như sau:
Vectơ cảm ứng từ do hạt proton quay quanh electron sinh ra là:

$$B = \frac{\mu_o I}{2r} = \frac{\mu_o e v}{2r} = \frac{\mu_o e k e^2}{4\pi r^2 n \hbar} \quad (\text{III.45})$$

ở đây ta đã thay công thức tính vận tốc proton (tương đối) quay quanh electron bằng công thức tính vận tốc electron quanh proton. Nếu xét ở trạng thái cơ bản ($n = 1$) thì $r = 0,53.10^{-10}m$ ta có kết quả là:

$$B = \frac{4\pi.10^{-7}(1,6.10^{-19})^3.9.10^9}{4\pi(0,53.10^{-10})^2.1,055.10^{-34}} = 12,4(T) \quad (\text{III.46})$$

Thay kết quả này vào (III.44) ta được năng lượng do tương tác spin - quỹ đạo khi electron ở trạng thái cơ bản là:

$$\Delta W = \pm \frac{e\hbar}{2m_e} B = \pm \frac{1,6.10^{-19}.1,055.10^{-34}}{2.9,1.10^{-31}}.12,4 = \pm 1,15.10^{-22}(J) \quad (\text{III.47})$$

Từ công thức (III.45) cho thấy năng lượng tương tác spin - quỹ đạo phụ thuộc vào trạng thái electron, vì bán kính Bohr tỷ lệ với bình phương số tự nhiên nên năng lượng tương tác spin - quỹ đạo sẽ tỷ lệ nghịch với số lượng tử chính của trạng thái. Chẳng hạn:

Khi $n = 2$ thì $\Delta W_2 = \Delta W_1/2 = \pm 0,575.10^{-22}(J)$; khi $n = 3$ thì $\Delta W_3 = \Delta W_1/3 = \pm 0,38.10^{-22}(J), \dots$

Năng lượng của electron trong nguyên tử Hydro ở trạng thái cơ bản là:

$$|E_1| = \frac{k^2 e^4 m_e^2 (9.10^9)^2 (1,6.10^{-19})^4 9,1.10^{-31}}{2n^2 \hbar^2 2.1^2 (1,055.10^{-34})^2} = 21700,6.10^{-22}(J) \quad (\text{III.48})$$

Năng lượng của electron trong nguyên tử Hydro ở trạng thái kích thích thứ nhất, thứ hai là:

$$|E_2| = \frac{|E_1|}{4} = 5425,15.10^{-22}(J); \quad |E_3| = \frac{|E_1|}{9} = 2411,18.10^{-22}(J)$$

Ta thấy giá trị ΔW rất nhỏ so với năng lượng chính E_n nên sự tách vạch quang phổ rất bé vì vậy rất khó phân biệt với các máy quang phổ bình thường.

Xét vạch thứ nhất trong dãy Balmer ta có bước sóng khi chưa tính đến tương tác spin - quỹ đạo là:

$$\lambda = \frac{hc}{|E_2| - |E_3|} = \frac{6,625.10^{-34}.3.10^8}{(5425,15 - 2411,18).10^{-22}} = 6594,29.10^{-10}m \quad (\text{III.49})$$

Xét vạch thứ nhất trong dãy Balmer ta có bước sóng khi có tính đến tương tác spin-quỹ đạo là:

$$\lambda = \frac{hc}{|E_2| - |E_3|} = \frac{6,625.10^{-34}.3.10^8}{(5425,15 - 2411,18 - 0,575).10^{-22}} = 6595,55.10^{-10}m \quad (\text{III.50})$$

hoặc

$$\lambda = \frac{hc}{|E_2| - |E_3|} = \frac{6,625.10^{-34}.3.10^8}{(5425,15 - 2411,18 + 0,575).10^{-22}} = 6593,03.10^{-10}m \quad (\text{III.51})$$

Bước sóng tách vạch quang phổ: $\Delta\lambda = 6595,56 - 6594,29 = 1,27\text{\AA}$. Chú ý rằng trong các tính toán trên ta chỉ lấy gần đúng vì các hằng số, \hbar, c, r, \dots chỉ gần đúng. Tuy vậy kết quả này khá phù hợp với kết quả thu được từ thực nghiệm.

§9 NGUYÊN TỬ TRONG TỪ TRƯỜNG NGOÀI. HIỆU ỨNG ZEEMAN THƯỜNG VÀ DỊ THƯỜNG

9.1 Hiệu ứng Zeeman

Khi đặt nguyên tử trong từ trường, vạch quang phổ do nguyên tử bức xạ bị tách thành ba vạch (hai vạch hai bên đối xứng nhau qua vạch ban đầu khi chưa có từ trường). Đó là hiệu ứng Zeeman thường. Hiện tượng này được Faraday dự đoán đầu tiên vào năm 1862, trước khi có lý thuyết điện từ cổ điển. Nhưng do hạn chế về kỹ thuật nên thời đó không thực hiện được bằng thực nghiệm. Mãi đến năm 1892, tức sau đó 30 năm mới được Zeeman thực hiện thí nghiệm thành công, khẳng định dự đoán này.

Để thực hiện được hiệu ứng Zeeman phải dùng một từ trường khá lớn (có cường độ ít nhất là $10^5 \frac{\text{A}}{\text{m}}$).

Ngoài hiệu ứng Zeeman thường, người ta còn quan sát được hiệu ứng Zeeman dị thường xảy ra trong cả từ trường mạnh và từ trường yếu. Khi electron chuyển từ trạng thái lượng tử này sang trạng thái lượng tử khác ($n, l, m, m_s \rightarrow n', l', m', m_s'$) theo quy tắc lượng tử thì sẽ bức xạ ra một vạch quang phổ. Nếu nguyên tử đặt trong từ trường ngoài thì do tương tác với từ trường ngoài, các số hạng sẽ bị tách ra, điều đó dẫn đến sự tách vạch. Hiện tượng đó được gọi là hiệu ứng Zeeman dị thường (khác thường). Trong hiệu ứng Zeeman dị thường, một vạch quang phổ có thể bị tách thành nhiều hơn ba vạch kế nhau nên gọi là hiệu ứng Zeeman phức tạp hay dị thường. Trong khuôn khổ giáo trình này chúng ta chỉ đi giải thích hiệu ứng Zeeman thường.

9.2 Giải thích hiệu ứng Zeeman thường bằng lý thuyết cổ điển

Trước hết ta hãy dùng lý thuyết cổ điển để giải thích hiệu ứng Zeeman thường. Theo lý thuyết cổ điển ta có thể coi nguyên tử như một lưỡng cực điện. Khi coi hạt nhân là đứng yên ta gắn nó với trục toạ độ. **Lực tương tác giữa electron và hạt nhân là một lực chuẩn đàn hồi (giả đàn hồi):** $\vec{f} = -k\vec{r}$.

Phương trình dao động tự do (trong trường lực giả đàn hồi của hạt nhân) của electron có dạng:

$$m_e \ddot{\vec{r}} + k\vec{r} = 0 \quad (\text{III.52})$$

Tần số dao động tự do của electron là:

$$\omega_o = \sqrt{\frac{k}{m_e}}$$

Nếu đưa nguyên tử vào từ trường ngoài có vectơ cường độ từ trường là \vec{H} thì electron chịu thêm lực Lorentz có biểu thức là $-e\mu_o[\vec{v} \wedge \vec{H}]$ (μ_o là hằng số từ) nên khi đó phương trình dao động của electron sẽ là:

$$m_e \ddot{\vec{r}} + k\vec{r} = -e\mu_o[\vec{v} \wedge \vec{H}] \quad (\text{III.53})$$

Hay

$$\ddot{\vec{r}} + \omega_o^2 \vec{r} = -\frac{e}{m_e} \mu_o [\vec{v} \wedge \vec{H}] \quad (\text{III.54})$$

Giả sử vectơ cường độ từ trường theo chiều trục Oz ($H_x = H_y = 0$; $H_z = H$) thì từ chiều phương trình (III.54) lên các trục tọa độ ta được 3 phương trình:

$$\ddot{x} + \omega_o^2 x = \frac{-e}{m_e} \mu_o \dot{y} H \quad (III.55)$$

$$\ddot{y} + \omega_o^2 y = \frac{e}{m_e} \mu_o \dot{x} H \quad (III.56)$$

$$\ddot{z} + \omega_o^2 z = 0 \quad (III.57)$$

Nghiệm của các phương trình (III.55) và (III.56) có thể viết dưới dạng:

$$x = ae^{i\omega t}; \quad y = be^{i\omega t} \quad (III.58)$$

Trong đó a, b là biên độ, trong trường hợp tổng quát, các biên độ này là những số phức.

Lấy đạo hàm (III.58) theo thời gian rồi thay vào (III.55) và (III.56) ta được:

$$a(\omega_o^2 - \omega^2) + 2i\omega_L \omega b = 0$$

$$b(\omega_o^2 - \omega^2) - 2i\omega_L \omega a = 0$$

Trong đó $\omega_L = \frac{e}{2m_e} \mu_o H$ được gọi là tần số Lácmo. Từ hệ hai phương trình trên ta suy ra:

$$\frac{a}{b} = -\frac{2i\omega_L \omega}{\omega_o^2 - \omega^2} = \frac{\omega_o^2 - \omega^2}{2i\omega_L \omega} \quad (III.59)$$

$$\Rightarrow (\omega_o^2 - \omega^2)^2 = 4\omega_L^2 \omega^2 \quad (III.60)$$

Phương trình (III.60) có 4 nghiệm phân biệt nhưng có hai nghiệm âm không có ý nghĩa vật lý sẽ bị loại. Hai nghiệm dương là:

$$\begin{cases} \omega_1 = -\omega_L + \sqrt{\omega_o^2 \left(1 + \frac{\omega_L^2}{\omega_o^2}\right)} \\ \omega_2 = \omega_L + \sqrt{\omega_o^2 \left(1 + \frac{\omega_L^2}{\omega_o^2}\right)} \end{cases} \quad (III.61)$$

Vì $\omega_o \gg \omega_L$ nên ta lấy gần đúng:

$$\omega_1 \approx \omega_o - \omega_L; \quad \omega_2 \approx \omega_o + \omega_L \quad (III.62)$$

Như vậy độ dịch chuyển tần số góc do tương tác với từ trường ngoài là:

$$\Delta\omega = |\omega_1 - \omega_o| = |\omega_2 - \omega_o| = \omega_L \quad (III.63)$$

Và như vậy độ dịch chuyển về tần số là:

$$\Delta\nu = \frac{\Delta\omega}{2\pi} = \frac{\omega_L}{2\pi} = \frac{e\mu_o H}{4\pi m_e} \quad (III.64)$$

Các công thức trên giải thích rõ một vạch quang phổ ứng với tần số góc ω_o bị tách thành 3 vạch $\omega_o + \omega_L$; ω_o và $\omega_o - \omega_L$.

Các phương trình trên cũng cho phép giải thích được tính chất phân cực của các thành phần quang phổ trong hiệu ứng Zeeman. Thực vậy, thay (III.60) vào (III.59) ta được:

$$\frac{a}{b} = -i \Rightarrow a = -ib = be^{-i\frac{\pi}{2}} \quad (III.65)$$

Khi đó nghiệm của (III.58) có dạng:

$$x = be^{i(\omega t - \frac{\pi}{2})}; \quad y = be^{i\omega t} \quad (\text{III.66})$$

Các công thức (III.66) cho thấy dao động theo trục x chậm pha hơn dao động theo trục y một góc là $\frac{\pi}{2}$.

Như vậy khi quan sát hiệu ứng Zeeman theo phương song song với phương của từ trường ngoài, tức là phương Oz ta có thể đồng thời ghi nhận được bức xạ của lưỡng cực dao động theo trục x và theo trục y . Ta biết tổng hợp hai dao động vuông góc có cùng biên độ và lệch pha nhau một góc $\frac{\pi}{2}$ là một dao động tròn có chiều theo chiều kim đồng hồ. Vì vậy thành phần ω_1 phân cực tròn theo chiều kim đồng hồ. Ngược lại thành phần có tần số ω_2 cũng phân cực tròn, nhưng ngược chiều kim đồng hồ. Từ phương trình (III.57) cho thấy dao động theo phương z không bị dịch chuyển tần số. Mà lưỡng cực không bức xạ theo phương dao động nên khi quan sát theo phương z ta sẽ không nhìn thấy thành phần ở giữa là thành phần có tần số ω_o ban đầu.

Tóm lại khi quan sát theo phương song song với từ trường ngoài ta chỉ ghi nhận được hai thành phần phân cực tròn ngược chiều nhau. Điều này đã được thực nghiệm xác nhận hoàn toàn chính xác. Khi quan sát theo phương vuông góc với phương từ trường ngoài, chẳng hạn theo phương x , ta sẽ ghi nhận được bức xạ do lưỡng cực dao động theo phương y và theo phương z . Bức xạ lưỡng cực dao động theo phương y là phân cực thẳng theo phương vuông góc với phương từ trường và có tần số $\omega_1 = \omega_o - \omega_L$ và $\omega_2 = \omega_o + \omega_L$. Bức xạ của lưỡng cực dao động theo phương z cũng phân cực thẳng theo phương song song với phương từ trường và có tần số bằng ω_o . Như vậy **khi quan sát theo phương vuông góc với phương từ trường ngoài ta sẽ ghi nhận được cả ba thành phần phân cực**. Kết quả này cũng phù hợp rất tốt với thực nghiệm.

9.3 Giải thích hiệu ứng Zeeman bằng thuyết lượng tử

Ta dễ dàng chứng minh được, khi nguyên tử đặt trong từ trường ngoài, do tác dụng với từ trường, nguyên tử nhận thêm một năng lượng phụ $U = -m\mu_o H$. Như vậy năng lượng của mỗi trạng thái lượng tử của nguyên tử không những phụ thuộc vào số lượng tử chính n mà còn phụ thuộc vào số lượng tử từ m :

$$E_{n,m} = E_n - m\mu_o H \quad (\text{III.67})$$

Như vậy mỗi trạng thái với số lượng tử chính n bị tách thành một số trạng thái con tùy thuộc vào giá trị khả dĩ của m . Sự tách các mức năng lượng thành các mức con chính là nguyên nhân tách vạch quang phổ trong hiệu ứng Zeeman. Thực vậy, giả sử một vạch quang phổ nào đó lúc chưa có từ trường ngoài có tần số ν_o do nguyên tử bức xạ khi chuyển từ trạng thái dừng có mức năng lượng E_2 xuống trạng thái dừng có mức năng lượng E_1 thì ta có:

$$\nu_o = \frac{E_2 - E_1}{h} \quad (\text{III.68})$$

Khi có từ trường ngoài, do năng lượng các trạng thái dừng thay đổi nên tần số bức xạ sẽ là:

$$\nu = \nu_o + \Delta\nu = \frac{(E_2 + U_2) - (E_1 + U_1)}{h} \quad (\text{III.69})$$

Do đó:

$$\Delta\nu = \frac{U_2 - U_1}{h} = \frac{m_1 - m_2}{h} \mu_o H = \frac{\Delta m \mu_o H}{h} \quad (\text{III.70})$$

Trong Cơ học lượng tử người ta chứng minh được Δm chỉ có thể nhận ba giá trị $0; \pm 1$ nên quang phổ bị tách thành ba vạch. Khi $\Delta m = 0$ thì thu được vạch bức xạ là phân cực phẳng có phương dao động theo phương của từ trường. Khi $\Delta m = \pm 1$ thu được hai vạch phân cực tròn có phương dao động nằm trong mặt phẳng thẳng góc với từ trường, có chiều ngược nhau.

Như vậy theo Lý thuyết lượng tử ta thấy mỗi vạch quang phổ bị tách thành 3 vạch, cụ thể là: vạch phân cực phẳng nằm chính giữa, có tần số trùng với tần số vạch quang phổ khi chưa có từ trường ngoài và hai vạch đối xứng hai bên, phân cực tròn, có tần số dịch chuyển một lượng là:

$$\Delta\nu = \pm \frac{\mu_o H}{h} \quad (\text{III.71})$$

Hay dịch chuyển bước sóng:

$$\Delta\lambda = \pm \frac{\mu_o}{ch} \lambda^2 H \quad (\text{III.72})$$

Chẳng hạn xét trường hợp $\lambda = 5000\text{\AA}$ đặt trong từ trường $H = 1,56\text{A/m}$, khi thay vào công thức(III.72) ta tính được $\Delta\lambda \approx 0,23\text{\AA}$. Kết quả này phù hợp tốt với thực nghiệm chứng tỏ sự đúng đắn của cách giải thích này.

§10 BÀI TẬP CHƯƠNG III

Bài III.1

Tính mômen quỹ đạo của electron ở trạng thái $l = 5$?

Bài III.2

Electron trong nguyên tử Hydro ở trạng thái $l = 5$, tính góc lệch cực tiểu giữa vectơ mômen quỹ đạo \vec{L} và trục ưu tiên Oz ?

Bài III.3

Một trạng thái nguyên tử Hydro có số lượng tử quỹ đạo $l = 3$. Tìm các giá trị khả dĩ của các số lượng tử n, m và m_s .

Bài III.4

Nguyên tử Hydro có bao nhiêu trạng thái với $n = 5$?

Bài III.5

Tính và lập bảng giá trị cho phép của L_z, μ_z và θ đối với nguyên tử Hydro ở trạng thái $l = 3$. Tìm độ lớn của L và μ ?

Bài III.6

Viết các lượng tử số đối với tất cả các trạng thái của nguyên tử hydro có $n = 4$ và $l = 3$

Bài III.7

Một trạng thái của nguyên tử Hydro có số lượng tử từ cực đại $m_{Max} = +4$. Có thể có kết luận gì về các số lượng tử còn lại?

Bài III.8

Xác định giá trị mômen quỹ đạo \vec{L} của electron trong nguyên tử Hydro ở trạng thái kích thích, biết rằng năng lượng kích thích truyền cho nguyên tử từ trạng thái cơ bản lên là $12,09\text{eV}$.

Bài III.9

Cho biết electron trong nguyên tử Hydro đang ở trạng thái d , hãy tính góc α nhỏ nhất mà vectơ mômen quỹ đạo \vec{L} của electron hợp với phương của từ trường ngoài?

Chương IV

NGUYÊN TỬ NHIỀU ELECTRON THEO CƠ HỌC LƯỢNG TỬ

§1 BÀI TOÁN CẤU TRÚC NGUYÊN TỬ NHIỀU ELECTRON VÀ PHƯƠNG PHÁP GIẢI QUYẾT

1.1 Bài toán cấu trúc nguyên tử phức tạp

Trong chương trước ta đã xét bài toán cấu trúc nguyên tử Hydro và các Ion tương tự Hydro và đã thu được những kết quả phù hợp tốt với thực nghiệm. Bài toán cấu trúc nguyên tử Hydro và các Ion tương tự Hydro được giải một cách chính xác vì cấu trúc của chúng đơn giản chỉ có duy nhất một electron quay quanh một hạt nhân nguyên tử. Điều này không thể thực hiện được với các nguyên tử phức tạp vì các nguyên tử này sẽ có nhiều electron quay quanh hạt nhân nên ngoài lực tương tác giữa electron và hạt nhân, các electron còn tương tác với nhau gây nên những nhiễu loạn. Chính vì lý do này bài toán nghiên cứu các nguyên tử nhiều electron là vô cùng phức tạp.

Ta có thể giải bài toán nguyên tử phức tạp bằng cách giải phương trình Schrödinger. Thế năng tương tác khi đó có dạng:

$$U = \sum_{i=1}^Z \left(-\frac{kZe^2}{r_i} \right) + \sum_{i \neq j}^Z \frac{ke^2}{r_{ij}} \quad (\text{IV.1})$$

Trong đó thành phần

$$\sum_{i=1}^Z \left(-\frac{kZe^2}{r_i} \right)$$

là thế năng tương tác hút giữa các electron đang xét và hạt nhân, còn thành phần

$$\sum_{i \neq j}^Z \frac{ke^2}{r_{ij}}$$

là thế năng tương tác đẩy giữa hai electron i, j .

Từ biểu thức thế năng ta dễ thấy khó khăn đầu tiên trong việc nghiên cứu các nguyên tử phức tạp là không thể mô tả chuyển động của từng electron vì mỗi electron, ngoài tương tác với hạt nhân còn tương tác với các electron khác. Như vậy chuyển động của mỗi electron sẽ không độc lập với các electron khác trong nguyên tử. Vì vậy ta không thể nói năng lượng electron mà chỉ có thể nói năng lượng nguyên tử. Và như vậy không thể biết hàm sóng của từng electron riêng biệt mà chỉ biết hàm sóng của toàn bộ nguyên tử.

Khó khăn cơ bản thứ hai là: cho đến hiện nay ta vẫn chưa có phương pháp giải chính xác bài toán hệ ba vật hay nói rộng hơn là hệ nhiều vật. Chính vì vậy ta chỉ có thể giải gần đúng đối với bài toán cấu trúc nguyên tử phức tạp.

1.2 Phương pháp giải bài toán cấu trúc nguyên tử phức tạp

Trước khi giải bài toán cấu trúc nguyên tử phức tạp, các nhà Thiên văn đã phải giải quyết một bài toán tương tự trong hệ Mặt Trời: bài toán ba thiên thể tương tác tương hỗ hấp dẫn.

Trước hết ta cần phân biệt trong nguyên tử phức tạp có hai loại tương tác mang tính chất trái ngược nhau: hút và đẩy. Nhưng nguyên tử tồn tại bền vững, chứng tỏ lực hút giữa hạt nhân và electron là có tính chất quyết định, còn tương tác giữa các electron với nhau là phụ, có tính chất thứ yếu, có thể xem như nhiễu loạn. Vì vậy ta có thể giả thiết gần đúng rằng mỗi electron của nguyên tử chuyển động trong một trường lực chung tạo bởi hạt nhân và tập hợp các electron còn lại trong nguyên tử. Do lực hút của hạt nhân là quyết định nên ta vẫn xem trường lực này là trường lực hút đối xứng xuyên tâm với hạt nhân nguyên tử. Tuy nhiên tác dụng thực tế của trường lực này đối với mỗi electron là không phải đồng nhất. Với một electron phía ngoài, thế năng hút chủ yếu vẫn là do điện tích hạt nhân hút nó gây ra nhưng yếu hơn đối với electron phía trong. Với electron phía ngoài, thế năng bao gồm thế năng hút của hạt nhân và thế năng đẩy của các electron phía trong nên ta thay điện tích Ze bằng **điện tích hiệu dụng** Z^*e nhỏ hơn. Có thể xem gần đúng: **điện tích hiệu dụng** Z^*e bằng điện tích thực Ze trừ đi tổng điện tích các electron phía trong nằm gần hạt nhân hơn so với electron đang xét. Trường lực như vậy được gọi là **trường lực tự hợp**. Phương pháp gần đúng như vừa trình bày được hai nhà Vật lý Hartree - người Mỹ và Fork - người Nga cùng đề xuất độc lập vào năm 1930 nên được gọi là phương pháp gần đúng Hartree-Fork (Hact'ri - Phốc).

Phương pháp Hartree-Fork giúp cho việc giải bài toán cấu trúc nguyên tử nhiều electron trở nên đơn giản hơn rất nhiều vì khi đó có thể xét từng electron độc lập, chuyển động trong trường lực xuyên tâm duy nhất và bài được giải tương tự như đối với nguyên tử Hydro đã được trình bày trong chương III của giáo trình này. Điều khác biệt cơ bản ở đây là điện tích thực của hạt nhân Ze được thay bằng **điện tích hiệu dụng** Z^*e .

§2 NGUYÊN LÝ LOẠI TRỪ PAOLI VÀ CẤU TRÚC VỎ ĐIỆN TỬ CỦA NGUYÊN TỬ PHỨC TẠP

2.1 Nguyên lý loại trừ Paoli

Ta biết rằng nguyên tử phức tạp có nhiều electron. Các electron sắp xếp theo một trật tự nhất định nào đó. Sự sắp xếp này được gọi là **cấu hình điện tử của nguyên tử**. Đối với nguyên tử Hydro, chỉ có duy nhất một electron, ở trạng thái bình thường nó tồn tại ở mức năng lượng thấp nhất (tức trạng thái lượng tử thấp nhất - $n = 1; l = m = 0$). Đối với nguyên tử nhiều electron thì liệu điều này có xảy ra không? Nghĩa là có thể tồn tại cả Z electron đều ở trạng thái năng lượng thấp nhất? Có nhiều bằng chứng cho thấy giả thiết trên không đúng. Chẳng hạn ta thấy có sự khác biệt đặc biệt lớn về tính chất hoá học của một số nguyên tố mà cấu trúc nguyên tử của chúng chỉ khác nhau một electron. Ví dụ ba nguyên tố F; Ne; Na có số electron là $Z = 9; 10$ và 11 , nhưng F là chất Hallogen, Ne là khí trơ còn Na là kim loại kiềm. Ta biết cấu hình điện tử của nguyên tử quyết định tương tác của nó với nguyên tử khác, nên ta suy ra cấu hình điện tử của ba nguyên tố trên phải rất khác nhau. Chúng không thể tồn tại ở **cùng trạng thái lượng tử thấp nhất**.

Một dẫn chứng khác trong bảng hệ thống tuần hoàn Mendeleev cho thấy có những nguyên tố có số electron rất khác nhau nhưng nếu nằm trong cùng một nhóm thì lại có tính chất hoá học

rất giống nhau.

Nghiên cứu quang phổ của nguyên tử cũng cho thấy quang phổ của nguyên tử rất phức tạp, nhưng tuân theo những quy luật quang phổ xác định, chứng tỏ sự dịch chuyển trạng thái phụ thuộc vào các số lượng tử.

Dựa trên những cơ sở này, lần đầu tiên Paoli (1900 - 1958) - nhà Vật lý Thụy Sĩ đã đưa ra một nguyên lý được gọi là **nguyên lý loại trừ Paoli** có nội dung như sau: **"Trong nguyên tử không thể có hai electron hoặc nhiều hơn cùng tồn tại ở một trạng thái lượng tử"**. Điều này có nghĩa là các electron trong cùng một nguyên tử phải có ít nhất một trong bốn lượng tử số của nó (n, l, m, m_s) khác nhau.

Thực nghiệm cho thấy những hạt có spin bán nguyên như electron, neutron, proton, ... thì tuân theo nguyên lý loại trừ Paoli, còn những hạt có spin nguyên như photon, mêzon, ... thì không tuân theo nguyên lý này.

2.2 Cấu trúc nguyên tử phức tạp

áp dụng nguyên lý loại trừ Paoli ta có thể giải thích cấu trúc điện tử của nguyên tử phức tạp như sau:

Ta hình dung cấu trúc nguyên tử bằng cách coi mỗi electron chịu tác dụng của trường lực trung bình đối xứng xuyên tâm. Vị trí tương đối của electron đối với hạt nhân phụ thuộc vào mức năng lượng của nó, vì thế tất cả các electron có cùng một lượng tử số n phải được coi là có khoảng cách trung bình như nhau so với hạt nhân. Những electron như vậy được gọi là cùng một **lớp vỏ của nguyên tử**. Các lớp này được ký hiệu bằng các chữ cái như sau:

Lượng tử chính n	1	2	3	4	5	6
Ký hiệu	K	L	M	N	O	P

Như vậy các electron thuộc cùng một lớp vỏ nguyên tử sẽ có cùng năng lượng và cùng khoảng cách đối với hạt nhân. Nhưng ta cũng biết năng lượng chẳng những phụ thuộc vào số lượng tử chính n mà còn phụ thuộc vào số lượng tử quỹ đạo l , mặc dù sự phụ thuộc này không đóng vai trò quyết định. Trong một nguyên tử phức tạp, một electron có số lượng tử quỹ đạo l nhỏ có năng lượng thấp hơn, tức là nằm gần hạt nhân hơn. Như vậy electron trong hạt nhân phức tạp trong cùng một lớp vỏ có năng lượng tăng theo sự tăng của số lượng tử l . Những electron trong cùng một lớp vỏ có cùng số lượng tử quỹ đạo l tạo thành **phân lớp** hay là **lớp con**. Tất cả các electron trong cùng một phân lớp có năng lượng hoàn toàn như nhau mặc dù chúng có các số lượng tử m, m_s khác nhau, vì năng lượng không phụ thuộc các số lượng tử từ m và số lượng tử từ spin m_s .

Ta biết ứng với một số lượng tử chính n thì có n giá trị của l : $l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$.

Mỗi giá trị l lại có $2l + 1$ giá trị khác nhau của m : $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$. Đồng thời mỗi giá trị của m lại có 2 giá trị khác nhau của $m_s = \pm \frac{1}{2}$. Như vậy một phân lớp chứa tối đa là $2(2l + 1)$ electron.

Tóm lại mỗi lớp có n phân lớp; mỗi phân lớp có $2(2l + 1)$ electron.

Các phân lớp kí hiệu bằng các chữ cái: s, p, d, f, g, h, \dots . Số electron trong các phân lớp tương ứng là:

l	0	1	2	3	4	5	...
Phân lớp	s	p	d	f	g	h	...
Số electron $2(2l+1)$	2	6	10	14	18	22	...

Số electron tối đa trong một lớp vỏ là:

$$N = \sum_{l=0}^{n-1} 2(2l + 1) = 2[1 + 3 + 5 + \dots + 2(n - 1) + 1] = 2[1 + 3 + 5 + \dots + (2n - 1)] = 2n^2 \quad (\text{IV.2})$$

Bảng sau cho ta số electron tối đa có thể có trong một lớp vỏ nguyên tử

Lớp	K	L	M	N	O	P
Số electron ($2n^2$)	2	8	18	32	50	72

Các bảng trên cho ta thấy: lớp K chỉ có 1 phân lớp $1s$ có 2 electron; lớp L gồm hai phân lớp: $2s$ có 2 electron và $2p$ có 6 electron nên tổng số là $2 + 6 = 8$ electron; lớp M có 3 phân lớp: $3s$ có 2 electron, $3p$ có 6 electron và $3d$ có 10 electron nên tổng số là $2 + 6 + 10 = 18$ electron;...

Như vậy nguyên lý loại trừ Paoli đã xác định cấu trúc nguyên tử phức tạp thành từng lớp vỏ electron. Các nguyên tử càng nhiều electron (Z lớn) thì số lớp càng bị lấp đầy theo thứ tự từ trong ra ngoài. Ta thường biểu diễn cấu trúc electron theo thứ tự của từng phân lớp. Ví dụ nguyên tử Na có 11 electron có cấu trúc là: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$. Cấu trúc này cho thấy nguyên tử Na có 3 lớp electron: lớp thứ nhất có 1 phân lớp lấp đầy và có 2 electron ($1s^2$); lớp thứ hai có hai phân lớp lấp đầy tổng số 8 electron ($2s^2 2p^6$); lớp thứ 3 chưa lấp đầy, chỉ có duy nhất 1 electron ($3s^1$). Tương tự nguyên tử C gồm 6 electron nên có cấu trúc là: $1s^2 2s^2 2p^2, \dots$

§3 HỆ THỐNG TUẦN HOÀN CÁC NGUYÊN TỐ HÓA HỌC CỦA MENDELEEV

3.1 Hệ thống tuần hoàn

Năm 1869 nhà bác học người Nga Mendeleev đã thống kê tất cả các nguyên tố đã biết trong một bảng theo thứ tự tăng dần của nguyên tử số Z , gọi là bảng hệ thống tuần hoàn Mendeleev. Đặc điểm nổi bật của bảng này là tính tuần hoàn: các nguyên tố có tính chất hoá học và tính chất vật lý giống nhau xuất hiện ở những khoảng cách nhất định, nghĩa là xuất hiện những chu kỳ mà sau đó ta gặp lại các nguyên tố có tính chất lí, hoá giống như các nguyên tố đã xuất hiện trước đó. Những nguyên tố có tính chất hoá, lý tương tự hợp thành một họ. Tất cả có 8 họ (Hay nhóm). Họ I gồm Hydro và các kim loại kiềm hoạt động hoá học rất mạnh và đều có hoá trị +1. Họ VII gồm các nguyên tố halogen đều là những nguyên tố hoá trị -1. Họ thứ III, thứ IV là những họ hoạt động hoá học yếu. Họ VIII là các khí trơ, hoạt động hoá học cực kỳ yếu. Các họ được xếp theo hàng dọc của bảng. Các hàng ngang được gọi là các chu kỳ. Có tất cả 7 chu kỳ, nhưng chia thành 10 hàng do chu kỳ thứ 4 đến chu kỳ thứ 6 bị tách thành hai hàng. Trong mỗi chu kỳ ta đều gặp đầu tiên là một kim loại mạnh, đến một kim loại yếu hơn, tiếp đến là nguyên tố phi kim yếu, đến một nguyên tố phi kim mạnh và kết thúc là một khí trơ. Trong một họ cũng có thể hiện sự biến đổi đều đặn về tính chất nhưng kém rõ hơn so với chu kỳ. Chẳng hạn, khi tăng dần nguyên tử số thì họ kim loại kiềm có sự tăng về hoạt tính hoá học, còn họ halogen thì ngược lại khi tăng nguyên tử số hoạt tính hoá học lại giảm. Ngoài ra từ chu kỳ IV trở đi ta thấy có sự xuất hiện trong mỗi chu kỳ có một dãy các nguyên tố chuyển tiếp nằm giữa họ II và III. Các nguyên tố này là những kim loại có tính chất hoá học tương tự nhưng không hoàn toàn giống các nguyên tố trong họ chính. Ở chu kỳ 6 có 14 nguyên tố chuyển tiếp như thế hợp thành một nhóm Lantan (đất hiếm). Nhóm nguyên tố chuyển tiếp trong chu kỳ 7 là các nguyên tố Actini (phóng xạ).

Quy luật tuần hoàn trong hệ thống nguyên tố của Mendeleev là hết sức rõ ràng và chính xác. Nhưng vào thời kỳ đó người ta không thể giải thích được nguồn gốc của quy luật nên phải thừa nhận nó như là quy luật hiển nhiên được tìm ra bởi thiên tài của nhà bác học. Chỉ có khi Cơ học lượng tử ra đời và được ứng dụng để giải thích cấu trúc nguyên tử phức tạp thì bí mật trên mới được khám phá, làm sáng tỏ.

Bảng hệ thống tuần hoàn được bổ sung hoàn thiện cho đến nay như sau:

BẢNG HỆ THỐNG TUẦN HOÀN MENDELEEV

CK	H	N I	N II	N III	N IV	N V	N VI	N VII	N VIII		
1	1	H 1 Hydro 1,008							He 2 Heli 4,003		
2	2	Li 3 Liti 6,94	Be 4 Beri 9,01	B 5 Bo 10,81	C 6 Cácbon 12,01	N 7 Nitơ 14,007	O 8 Ôxy 15,999	F 9 Flo 18,998	Ne 10 Neôn 20,18		
3	3	Na 11 Natri 22,989	Mg 12 Magie 24,31	Al 13 Nhôm 26,98	Si 14 Silic 28,09	P 15 Phốt pho 30,97	S 16 Lưu huỳnh 32,06	Cl 17 Clo 35,45	Ar 18 Agon 39,95		
4	4	K 19 Kali 39,10	Ca 20 Canxi 40,08	Sc 21 Scandi 44,96	Ti 22 Titan 47,90	V 23 Vanadi 50,94	Cr 24 Crom 51,996	Mn 25 Mangan 54,94	Fe 26 Sắt 55,85	Co 27 Coban 58,93	Ni 28 Niken 58,71
	5	Cu 29 đồng 63,54	Zn 30 Kẽm 65,38	Ga 31 Gali 69,72	Ge 32 Gecmani 72,59	As 33 Asen 74,92	Se 34 Selen 78,96	Br 35 Brom 79,91	Kr 36 Kriptan 83,80		
5	6	Rb 37 Rubidi 85,47	Sr 38 Stronti 87,62	Y 39 Ytri 88,91	Zr 40 Ztriconi 91,22	Nb 41 Niobi 92,91	Mo 42 Molipden 95,94	Tc 43 Tecnexi (99)	Ru 44 Ruteni 101,07	Rh 45 Rodi 102,91	Pd 46 Paladi 106,4
	7	Ag 47 Bạc 107,87	Cd 48 Cadimi 112,41	In 49 Indi 114,82	Sn 50 Thiếc 118,69	Sb 51 Antimon 121,75	Te 52 Telu 127,60	I 53 Iốt 126,90	Xe 54 Xenon 131,30		
6	8	Cs 55 Xesi 132,91	Ba 56 Bari 137,31	La 57 Lantan 138,91	Hf 72 Hafin 178,49	Ta 73 Tatan 180,95	W 74 Vonfam 183,85	Re 75 Reni 186,2	Os 76 Osimi 190,2	Ir 77 Iridi 192,2	Pt 78 Platin 195,09
	9	Au 79 Vàng 196,97	Hg 80 Thủy ngân 200,59	Tl 81 Tali 204,37	Pb 82 Chì 207,2	Bi 83 Bitmút 208,98	Po 84 Poloni (209)	At 85 Atatin (210)	Rn 86 Radon 1(222)		
7	10	Fr 87 Franxi (223)	Ra 88 Radi 226,025	Ac 89 Actini (227)	Ku 104 Kusatcvi (261)	Ns 105 Ninsbori (261)	106	107	108	109	

* Họ lantan

Ce 58 Xeri 140,12	Pr 59 Prazedim 140,91	Nd 60 Neodim 144,24	Pm 61 Prometi (147)	Sm 62 Samari 150,35	Eu 63 Europi 151,96	Gd 64 Gadofni 157,25	Tb 65 Tebi 158,93	Dy 66 Diprozi 162,50	Ho 67 Honmi 164,93	Er 68 Enbi 167,26	Tm 69 Tuli 168,93	Yb 70 Ytecbi 173,04	Lu 71 Lutexi 174,97
--------------------------------	------------------------------------	----------------------------------	----------------------------------	----------------------------------	----------------------------------	-----------------------------------	--------------------------------	-----------------------------------	---------------------------------	--------------------------------	--------------------------------	----------------------------------	----------------------------------

** Họ áctini

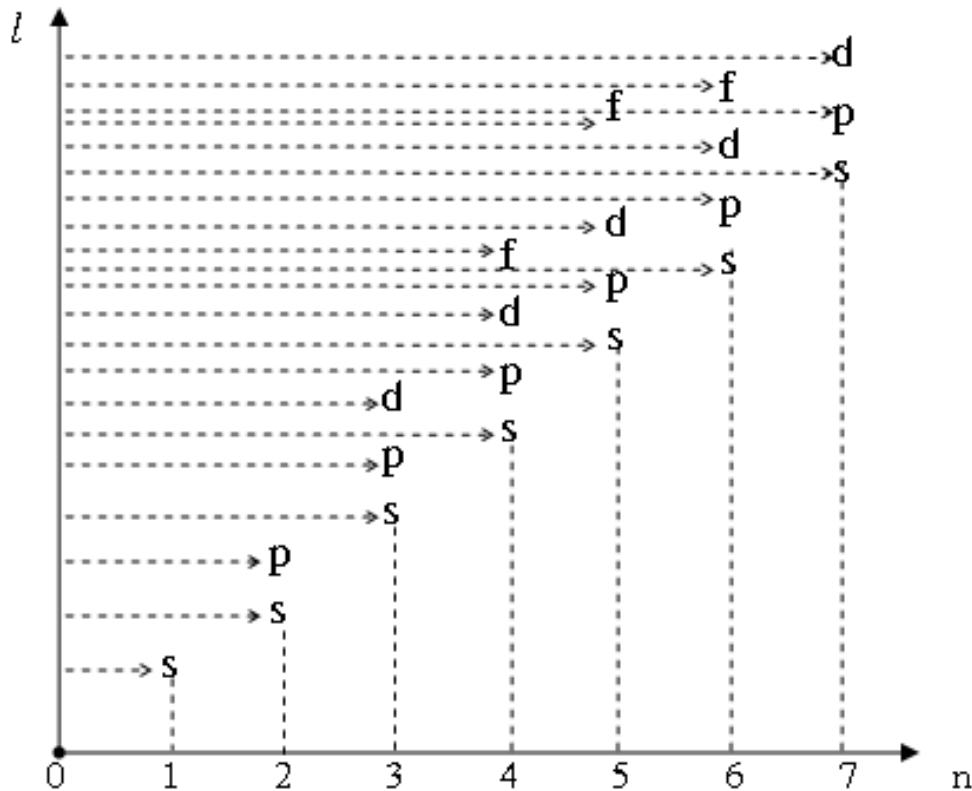
Th 90 Thory 232,04	Pa 91 Protactini (234)	U 92 Urani 238,03	Np 93 Neptuni (237)	Pu 94 Plutoni (244)	Am 95 Amerixi (243)	Cm 96 Curi (247)	Bk 97 Beckeli (247)	Cf 98 Califoni (251)	Es 99 Ensteni (254)	Fm 100 Fecmi (253)	Md 101 Medelevi (252)	No 102 Nobeli (255)	Lr 103 Lorenxi (256)
---------------------------------	-------------------------------------	--------------------------------	----------------------------------	----------------------------------	----------------------------------	-------------------------------	----------------------------------	-----------------------------------	----------------------------------	---------------------------------	------------------------------------	----------------------------------	-----------------------------------

3.2 Dừng nguyên lý loại trừ Paoli giải thích hệ thống tuần hoàn

Trước hết hãy tìm hiểu quy luật tuần hoàn của hệ thống nguyên tố có liên quan đến cấu trúc theo từng lớp vỏ của nguyên tử như thế nào. Nguyên lí Paoli cho biết số electron tối đa trong một lớp là nhất định. Nhưng ở đây còn có một nguyên lí khác chi phối, đó là nguyên lý năng lượng cực tiểu. Theo nguyên lý này, các electron phải có xu hướng chiếm các trạng thái năng lượng từ thấp đến cao, tức là trật tự nhất định của các phân lớp và lớp phải có năng lượng tăng dần. Kết quả tính toán cụ thể cho thấy số lượng tử quỹ đạo l càng lớn thì sự phụ thuộc năng lượng vào nó càng có ảnh hưởng mạnh so với số lượng tử chính n . Nguồn gốc vật lý của hiện tượng này là do các electron s ($l = 0$) có liên kết với hạt nhân mạnh hơn so với các electron $p, d, f \dots$. Điều này đã được lý giải trong nhờ vào kết quả: electron có l càng nhỏ thì xác suất tìm thấy ở gần hạt nhân càng lớn, do đó có năng lượng liên kết lớn và năng lượng toàn phần nhỏ. Chẳng hạn năng lượng mức $4s$ thì thấp hơn $3d$, mức $5s$ thấp hơn $4d$, mức $6s$ thấp hơn $4f$ và $5d$, ... Như vậy thứ tự các phân lớp được electron lần lượt chiếm đầy trong nguyên tử là:

$$1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s, 4d, 5p, 6s, 4f, 5d, 6p, 7s, 6d, 5f, 7p, 6f, 7d, \dots \quad (\text{IV.3})$$

Ta có thể minh hoạ điều này như hình vẽ (IV.1)



Hình IV.1: Quy luật phân bố lấp đầy lớp và phân lớp vỏ nguyên tử

Như vậy cấu trúc nguyên tử phức tạp không phải electron cứ lấp đầy theo thứ tự các lớp K, L, M, \dots mà có thể chưa lấp đầy lớp trong đã có một số electron lấp sang lớp ngoài. Quá trình lần lượt lấp đầy từng lớp vỏ được lặp lại và cho ta hình ảnh sắp xếp tuần hoàn của các electron thuộc lớp vỏ ngoài cùng. Tính chất của một nguyên tố do cấu trúc lớp vỏ electron ngoài cùng quyết định, do đó cấu trúc tuần hoàn của lớp vỏ ngoài dẫn đến cấu trúc tuần hoàn của bảng hệ thống nguyên tố Mendelêev.

Ta hãy xét cụ thể các chu kì:

Chu kì 1 chỉ có hai nguyên tố: Nguyên tố thứ nhất là Hydro chỉ có một electron nằm tại vị trí $1s^1$ nên chưa lấp đầy lớp K , nguyên tố thứ hai là Heli có hai electron ở vị trí $1s^2$ nên vừa lấp đầy lớp K và kết thúc chu kì 1.

Chu kì thứ hai bắt đầu từ Liti có 3 electron ($1s^2, 2s^1$), theo nguyên lí Paoli phải có 1 electron chuyển sang phân lớp $2s^1$ thuộc lớp L nên chúng tương tự Hydro, thuộc nhóm I. Kế tiếp là nguyên tố thứ tư - Beri có 4 electron ($1s^2, 2s^2$). Các nguyên tố kế tiếp lấp đầy dần lớp K . Đến nguyên tố thứ 10 - Neon có 10 electron ($1s^2, 2s^2, 2p^6$) đã lấp đầy lớp L nên kết thúc chu kì 2. Nguyên tố Neon cùng họ khí trơ với Heli.

Chu kì thứ 3 bắt đầu từ Natri có 11 electron nên phải có một electron chuyển sang phân lớp $3s^1$ của lớp $M(1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^1)$ nên lớp vỏ ngoài có 1 electron, nguyên tố Na phải thuộc nhóm I (kim loại kiềm) như Hydro và Liti. Quá trình này cứ tiếp tục cho đến nguyên tố Argon có 18 electron ($1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6$) đã lấp đầy phân lớp $3p$, lẽ ra còn phân lớp $3d$ nhưng nguyên tố tiếp theo là Kali có 19 electron thì hạt thứ 19 lại chuyển sang phân lớp $4s^1$ thuộc lớp M có năng lượng thấp hơn $3d$ nên K chuyển sang một chu kì mới, chu kì thứ 4.

Chu kì thứ tư gồm 18 nguyên tố, xuất phát từ K có 19 electron và kết thúc ở Kr có 36 electron

khi phân lớp $4d^6$ đã được lấp đầy ($1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6, 4s^2, 3d^{10}, 4p^6$).

Nguyên tố tiếp theo là Rb có 37 electron nhưng không thể chuyển sang phân lớp $4d$, mặc dù phân lớp này còn hoàn toàn trống vì phân lớp $5s$ có mức năng lượng thấp hơn $4d$ nên Rb là nguyên tố đầu tiên của chu kì thứ 5. Cứ như vậy các nguyên tố thuộc chu kì thứ năm gồm 18 nguyên tố, kết thúc ở nguyên tố Xenon có 54 electron ($1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6, 4s^2, 3d^{10}, 4p^6, 5s^2, 4d^{10}, 5p^6$) đã lấp đầy phân lớp $5p^6$.

Nguyên tố tiếp theo là Xesi có 55 electron ($1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6, 4s^2, 3d^{10}, 4p^6, 5s^2, 4d^{10}, 5p^6, 6s^1$), có electron cuối cùng chuyển sang phân lớp $6s^1$ thuộc lớp P nên là nguyên tố đầu tiên của chu kì thứ 6. Chu kì này gồm 32 nguyên tố và kết thúc ở nguyên tố Radon có 86 electron ($1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6, 4s^2, 3d^{10}, 4p^6, 5s^2, 4d^{10}, 5p^6, 6s^2, 4f^{14}, 5d^{10}, 6p^6$) sau khi đã lấp đầy phân lớp $6p^6$.

Kế tiếp là nguyên tố Franxi có 87 electron bắt đầu chiếm phân lớp $7s^1$ và là nguyên tố đầu tiên của chu kì thứ 7. Cấu trúc vỏ nguyên tử của nguyên tố Franxi là:

$$(1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6, 4s^2, 3d^{10}, 4p^6, 5s^2, 4d^{10}, 5p^6, 6s^2, 4f^{14}, 5d^{10}, 6p^6, 7s^1)$$

Chu kì thứ 7 chứa các nguyên tố nặng và còn có nhiều nguyên tố chưa được tìm thấy.

Cấu trúc tuần hoàn của lớp vỏ của nguyên tử cũng cung cấp cho ta những hiểu biết về tính chất của các nguyên tố. Hãy đem so sánh khí trơ có lớp vỏ ngoài lấp đầy với một nguyên tử kim loại kiềm có cấu trúc duy nhất một electron ở lớp vỏ ngoài cùng, liên kết rất yếu với điện tích hạt nhân, chẳng hạn xét nguyên tố Natri và Argon thuộc chu kì thứ ba. Ta có sơ đồ cấu tạo nguyên tử như hình (IV.2).

Trước hết ta thấy mỗi electron lớp ngoài cùng của nguyên tử Argon chịu tác dụng của một điện tích hiệu dụng hạt nhân lớn gấp 8 lần so với điện tích hiệu dụng tác dụng lên electron lớp vỏ ngoài cùng của nguyên tử Natri, mặc dù electron của lớp vỏ ngoài cùng của hai nguyên tố này đều thuộc lớp M . Chính vì thế nguyên tử chỉ có một electron ở ngoài vỏ bị hút rất yếu nên dễ dàng mất electron này. Hydro và các kim loại kiềm thuộc loại này nên đều có hoá trị $+1$. Các nguyên tử có lớp vỏ ngoài bị lấp đầy thì có lực hút rất mạnh do điện tích hiệu dụng của hạt nhân tác dụng lên nó rất lớn. Đây chính là những nguyên tố không trao đổi với bên ngoài - nó thuộc loại phân tử chỉ có 1 nguyên tử và hoạt động hoá học rất yếu. Các khí trơ thuộc nhóm này.

Các nguyên tử có lớp vỏ ngoài chỉ thiếu 1 electron thì do lực hút mạnh nên có xu hướng lấy thêm 1 electron để lấp đầy - chúng có hoá trị -1 . Nhóm halogen thuộc loại này.

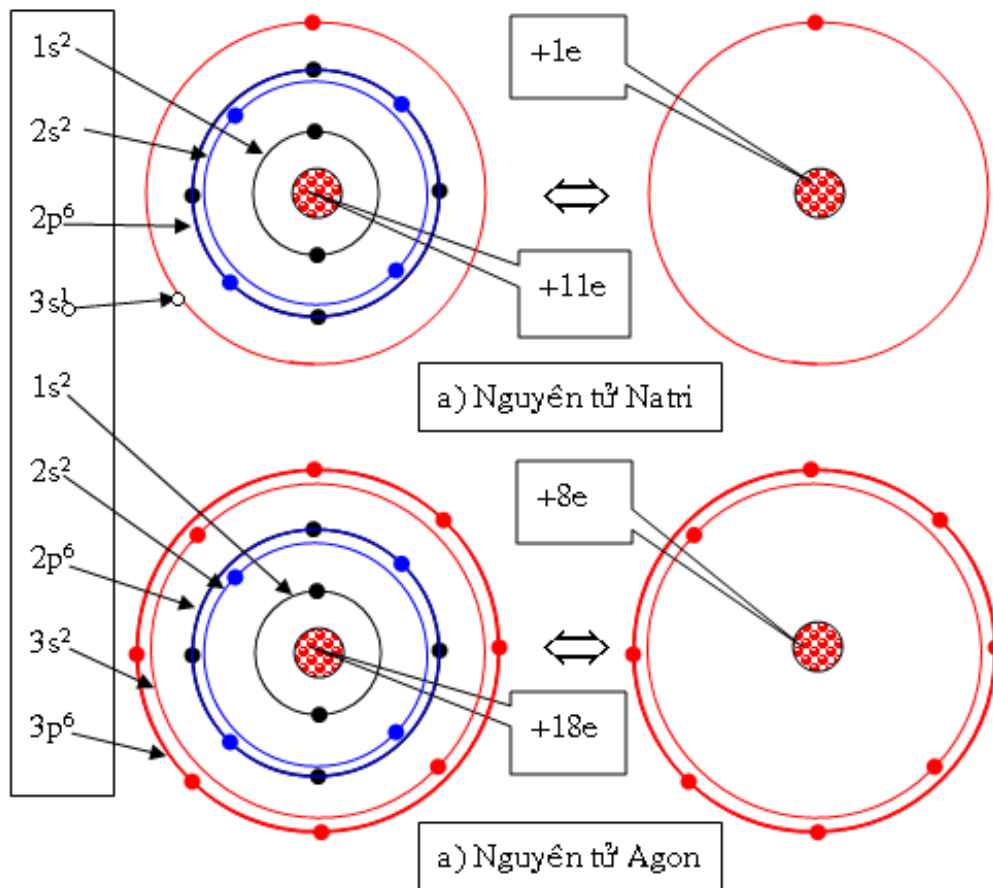
Một bằng chứng thực nghiệm khảo sát sự phụ thuộc của năng lượng Ion hóa nguyên tử vào số nguyên tử Z cho thấy: với các nguyên tố có số nguyên tử $Z = 2, 10, 18, 36, 54, 86$ năng lượng Ion hoá tăng cực trị như hình vẽ (IV.3)

§4 TIA RÕNGHEN (TIA X)

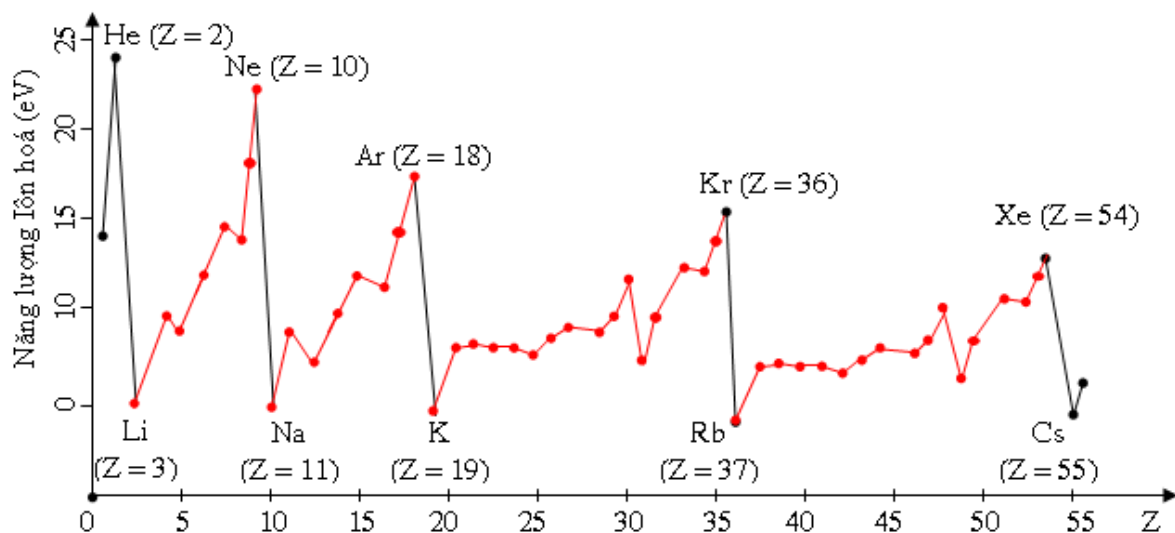
4.1 Cơ chế phát xạ tia X

Các electron ở lớp vỏ ngoài, do liên kết yếu với hạt nhân nên dễ dàng chuyển lên trạng thái kích thích khi nhận thêm năng lượng bé (cỡ vài chục eV). Khi chuyển về năng lượng ban đầu sẽ bức xạ ra photon có bước sóng vùng ánh sáng nhìn thấy.

Đối với các electron lớp trong thì vấn đề này hoàn toàn khác. Những electron lớp trong liên kết rất mạnh với hạt nhân. Để đánh bật electron lớp trong (Ion hoá lớp trong) thì phải cung cấp một năng lượng lớn đến hàng ngàn eV. Đặc biệt đối với nguyên tử nặng (số khối A lớn) thì năng lượng này vô cùng lớn. Khi các electron lớp trong của các nguyên tử nặng nhận được năng lượng đủ lớn, giúp nó chuyển lên trạng thái kích thích, sau đó chuyển về trạng thái cơ bản ban đầu sẽ bức xạ ra photon có năng lượng rất cao (hàng keV). Những photon này có bước sóng cực ngắn (cỡ angstrom). Đó chính là tia Rõnghen hay tia X.

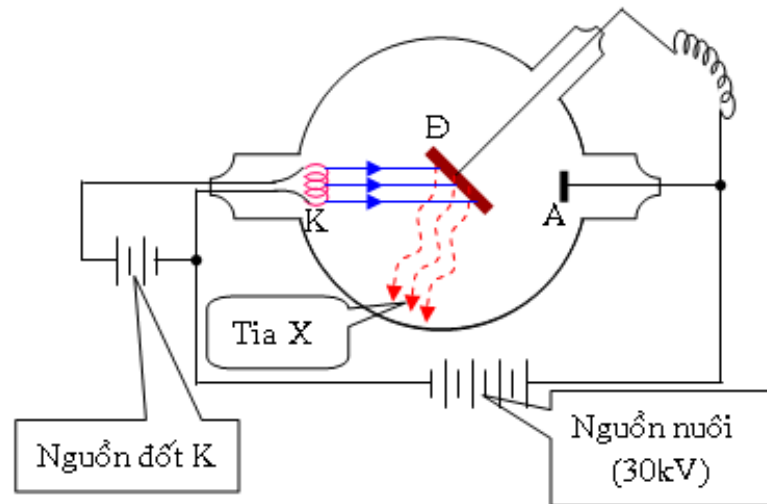


Hình IV.2: Cấu trúc các lớp vỏ nguyên tử



Hình IV.3: Sự phụ thuộc năng lượng Iôn hoá nguyên tử vào số nguyên tử Z

Để tạo ra tia X người ta dùng ống Röntgen có sơ đồ nguyên lý như hình (IV.3)
 Cấu tạo của ống phóng Röntgen gồm một bình cầu thủy tinh đã hút hết không khí (chân không).



Hình IV.4: ống phóng Rơnghen

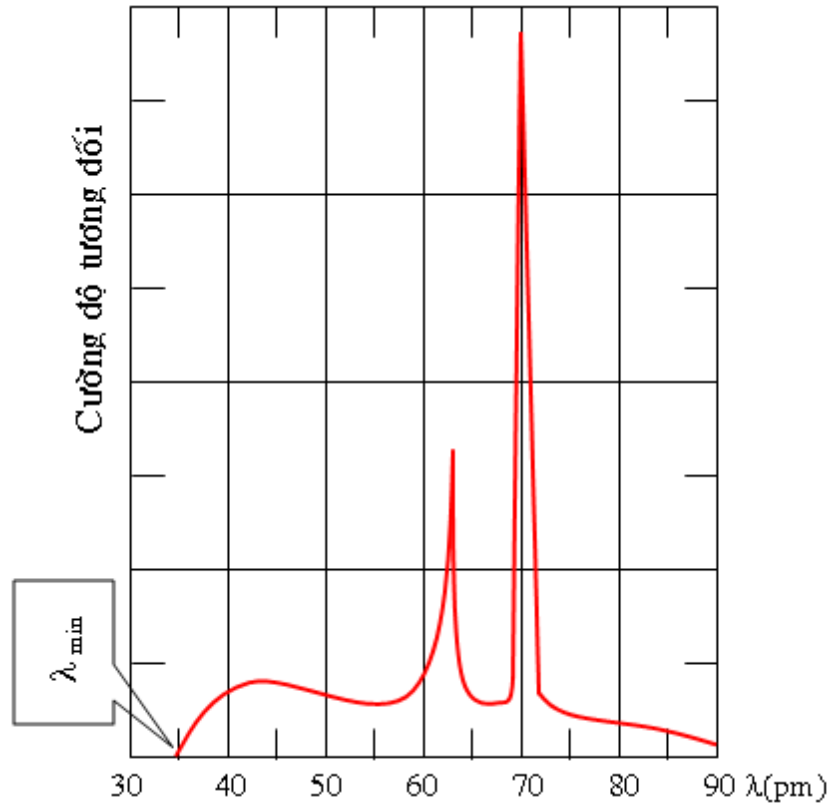
Phía trong có đặt hai cực kim loại gọi là anốt và catốt. Giữa anốt và catốt đặt thêm một cực làm bằng kim loại nặng (chẳng hạn Cr, Mo, W, \dots) gọi là đối catốt. Nguồn đốt catốt có nhiệm vụ đốt nóng K để tạo ra phát xạ nhiệt electron. Nguồn nuôi có nhiệm vụ tạo ra điện trường mạnh để tăng tốc cho các electron phát xạ chuyển động từ K sang A .

Khi chùm electron phát xạ được tăng tốc, nó sẽ thu được năng lượng lớn. Chùm electron này gặp đối catốt đập vào đối catốt với động năng rất lớn. Các electron sẽ đi sâu vào lớp electron phía trong, tương tác với các electron này và đánh bật chúng ra ngoài, gây ra một "lỗ trống" ở lớp trong. Theo nguyên lý năng lượng cực tiểu sẽ có một electron nhảy từ lớp ngoài vào chiếm chỗ lỗ trống. Sự di chuyển này sẽ kèm theo một bức xạ photon có năng lượng cao tức là tia X . Hiện tượng này được nhà Vật lý người Đức khám phá vào năm 1895. Như trình bày trên ta thấy, nguyên tố làm đối catốt càng nặng thì tia X phát ra sẽ có năng lượng càng cao, tức là bước sóng càng ngắn.

Cùng cơ chế tia X như vừa trình bày còn có một hiện tượng khác xảy ra được gọi là hiệu ứng Ôgiê (Auger - tên nhà Vật lý người Pháp). Trong hiệu ứng này, bức xạ tia X không được phát ra ngoài mà lại trực tiếp kích thích và đánh bật một electron thuộc lớp vỏ ngoài mang theo một phần năng lượng khá lớn của của photon kích thích. Có thể quan niệm hiệu ứng Ôgiê như là một hiệu ứng quang điện nội tại vì photon kích thích không phải truyền từ ngoài vào, mà phát ra từ bên trong nguyên tử.

4.2 Phổ tia Rơnghen

Dùng ống phóng tia Rơnghen ta tiến hành thí nghiệm để khảo sát phổ tia X . Thực nghiệm cho thấy phổ này gồm một nền liên tục hầu như không phụ thuộc vào bản chất của chất làm đối catốt. Trên nền phổ liên tục có một số vạch phổ gián đoạn đặc trưng cho nguyên tố làm đối catốt. Hình (IV.5) cho thấy cường độ chùm bức xạ tia X phụ thuộc vào bước sóng của nó. Với mọi chất làm đối catốt luôn luôn có một bước sóng λ_{min} chỉ phụ thuộc vào hiệu điện thế nguồn nuôi ống phát Rơnghen. Nguyên nhân phổ xuất hiện liên tục là do bức xạ hãm của các electron trên bề mặt của đối catốt, áp dụng định luật bảo toàn năng lượng ta dễ dàng tính được bước sóng cực tiểu của phổ tia X như sau:



Hình IV.5: Phổ phân bố theo bước sóng của tia X khi chùm electron có năng lượng 35keV đập vào bia (đối catốt) cấu tạo bằng nguyên tố Molipden

Khi electron được tăng tốc trong điện trường thì công của lực điện trường chuyển thành động năng của nó:

$$eV = \frac{m_e v^2}{2}$$

Khi gặp đối catốt thì nó sẽ chuyển một phần hoặc toàn bộ năng lượng này thành năng lượng tia X:

$$eV \geq h\nu = \frac{hc}{\lambda}$$

Từ đây dễ dàng thấy có giá trị giới hạn cực tiểu của bước sóng tia X là λ_{min} khi toàn bộ động năng của hạt electron chuyển thành năng lượng tia X.

$$\lambda_{min} = \frac{hc}{eV} = \frac{6,625 \times 10^{-34} \times 3 \times 10^8}{1,6 \times 10^{-19} \times V} \approx \frac{1242,18}{V} \text{Å} \quad (\text{IV.4})$$

Tuy nhiên phần quang phổ quan trọng vẫn là quang phổ vạch của tia X xuất hiện do sự chuyển mức năng lượng của electron trong nguyên tử. Sự chuyển từ các mức năng lượng cao L, M, N, P, \dots về mức năng lượng thấp hơn tạo thành các dãy quang phổ có cơ chế tương tự như cơ chế tạo thành quang phổ Hydro, chỉ có khác là hiện tượng này chỉ có thể xảy ra khi có một electron ở lớp trong bị electron tới đánh bật ra khỏi nguyên tử, tạo thành lỗ trống. Hơn nữa, năng lượng photon rất lớn nên sóng photon thu được là tia X. Quang phổ tia X thu được phụ thuộc vào bản chất của chất làm đối catốt. Nghiên cứu quang phổ tia X giúp ta hiểu được cấu hình điện tử của nguyên tử dùng làm đối catốt, cũng như xác định được các mức năng lượng khác nhau của nguyên tử.

Để tính bước sóng của các vạch quang phổ tia X, ta có thể áp dụng công thức gần đúng cho một mức năng lượng nguyên tử có dạng tương tự như công thức tính mức năng lượng nguyên tử Hydro, nhưng điện tích thực Ze được thay bằng điện tích hiệu dụng Z^*e . Công thức cụ thể là

$$E_{n,l} = -\frac{(Z^*)^2 k^2 e^4 m_e}{2n^2 \hbar^2} = -\frac{Rhc}{n^2} (Z^*)^2 \quad (\text{IV.5})$$

Do tác dụng của hiệu ứng che chắn (màn che) nên $Z^* = Z - b$ với b là hệ số che chắn phụ thuộc vào lớp nguyên tử đang xét. Ta có thể lấy b bằng tổng các electron nằm lớp trong so với lớp electron đang xét. R là hằng số Rydberg.

Tần số photon bức xạ sẽ được tính theo công thức:

$$\nu = \frac{\Delta E}{h} = Rc \left(\frac{1}{n_k^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) (Z - b)^2 \quad (\text{IV.6})$$

Các công thức (IV.5) và (IV.6) áp dụng khá đúng cho các nguyên tố có nguyên tử số trung bình trở lên ($Z > 30$).

Chương V

PHÂN TỬ

§1 CÁC DẠNG LIÊN KẾT PHÂN TỬ

1.1 Liên kết hoá học

Trong tự nhiên ta thường thấy các nguyên tử liên kết thành nhóm với nhau, ta gọi là phân tử. **Mỗi liên kết giữa các nguyên tử với nhau tạo thành phân tử, được gọi là liên kết hoá học.** Trong bài này ta sẽ tìm hiểu cơ chế tương tác để tạo nên liên kết hoá học. Vấn đề đặt ra là **lực nào giữ các nguyên tử lại với nhau trong phân tử.** Trả lời được câu hỏi này giúp ta hiểu được bản chất liên kết hoá học là gì?

Ta có thể chia lực hút giữa các nguyên tử thành ba nhóm: Lực Van - Đéc - Van; lực liên kết Iôn (liên kết dị cực); lực liên kết cộng hoá trị (liên kết đồng cực). Tất nhiên trong cùng một phân tử có thể tồn tại cả ba nhóm lực này. Chỉ có điều nếu như loại phân tử này tồn tại nhờ lực liên kết Iôn là chủ yếu thì, ngược lại có phân tử tồn tại chủ yếu nhờ lực liên kết cộng hoá trị.

Lực Van - Đéc - Van là loại lực xuất hiện do các nguyên tử ở gần nhau. Loại lực này có cường độ bé hơn rất nhiều so với lực liên kết Iôn và liên kết cộng hoá trị nên khi xét liên kết hoá học ta có thể bỏ qua nhóm lực này.

1.2 Liên kết Iôn

Các phân tử liên kết Iôn thì lực liên kết giữa chúng lực liên kết dị cực. Về bản chất đây là lực hút tĩnh điện xuất hiện giữa các điện tích trái dấu. Cơ chế hoạt động có thể mô tả như sau: Khi hai nguyên tử khác loại tiến lại gần nhau, có thể một trong hai nguyên tử nhường một hay một số electron cho nguyên tử kia. Kết quả là nguyên tử nhận electron trở thành Iôn âm, nguyên tử nhường electron trở thành Iôn dương. Hai Iôn mang điện trái dấu sẽ hút nhau, liên kết với nhau tạo thành phân tử. Chẳng hạn khi nguyên tử Na đến gần nguyên tử Cl , do nguyên tử Na có electron ngoài cùng liên kết rất yếu với hạt nhân nên sẽ tách khỏi nguyên tử Na , tiến về phía nguyên tử Cl . Khi đó sẽ xuất hiện Iôn dương Na^+ và Iôn âm Cl^- , hai Iôn này hút nhau, liên kết tạo thành phân tử $NaCl$.

1.3 Liên kết cộng hoá trị

Trong một số trường hợp ta không thể dùng khái niệm liên kết Iôn để giải thích sự tạo thành phân tử. Điển hình cho trường hợp này là các phân tử đơn chất. Ví dụ phân tử hydro (H_2), phân tử oxy (O_2),...

Điều này có thể giải thích được nhờ các đặc điểm về tương tác trong Cơ học lượng tử. Bởi vì, theo lý thuyết cổ điển không thể hiểu được tại sao một nguyên tử nào đấy lại có thể liên kết với

một số xác định các nguyên tử khác và tạo thành phân tử, ngay cả với giả thiết có tồn tại những lực cổ điển đủ để giữ các nguyên tử trong phân tử.

Liên kết đồng cực là loại liên kết trong phân tử tạo thành bởi các electron góp chung của các nguyên tử Theo Cơ học lượng tử, bản chất vật lý của liên kết cộng hoá trị như sau. Electron trong trường hạt nhân trong phân tử nằm ở trạng thái lượng tử xác định với năng lượng xác định. Nếu khoảng cách giữa các hạt nhân thay đổi thì trạng thái chuyển động của electron và năng lượng của nó cũng thay đổi. Giữa các hạt nhân có những lực đẩy, vì vậy năng lượng tương tác giữa chúng tăng lên khi khoảng cách giảm. Tuy nhiên khi khoảng cách giảm, nếu năng lượng electron giảm nhanh hơn độ tăng năng lượng tương tác giữa hai hạt nhân thì năng lượng toàn phần của hệ giảm xuống khi khoảng cách giảm. Điều đó có nghĩa là, trong hệ gồm hai hạt nhân đẩy nhau và một electron có tồn tại những lực có xu hướng làm giảm khoảng cách giữa hai hạt nhân, nghĩa là có những lực hút hoạt động, chính những lực hút này gây ra liên kết đồng cực trong phân tử. Chúng xuất hiện là do sự tồn tại của electron chung, nghĩa là do sự trao đổi electron giữa các hạt nhân, nên những lực này được gọi là **lực trao đổi lượng tử**.

Ta hãy minh hoạ điều này bằng việc xét phân tử Hydro (H_2), là phân tử liên kết đồng cực đơn giản nhất. Phân tử Hydro gồm hai proton và hai electron. Khi khoảng cách giữa hai proton không quá lớn thì các hàm sóng của hai nguyên tử tạo thành phân tử sẽ phủ lên nhau đáng kể. Điều đó có nghĩa là mỗi electron thuộc về cả hai nguyên tử, hay nói cách khác nguyên tử có sự trao đổi electron cho nhau. Nhờ vậy xuất hiện lực trao đổi gây nên liên kết đồng cực. Các phép tính chi tiết cho biết: nếu spin của hai nguyên tử đối song thì hai nguyên tử hút nhau và tạo thành phân tử Hydro; ngược lại nếu spin của hai nguyên tử song song thì ở mọi khoảng cách hai nguyên tử đều chịu lực đẩy và không thể tạo thành phân tử được. Sự tồn tại lực đẩy giữa hai nguyên tử có spin song song đã được thực nghiệm xác nhận. Vì phân tử Hydro chỉ được tạo thành khi spin của các electron là đối song nên spin toàn phần của phân tử Hydro phải bằng không. Như vậy mômen từ của phân tử Hydro cũng phải bằng không, nghĩa là Hydro là chất nghịch từ. Kết luận này đã được thực nghiệm xác nhận. Đây cũng là lý do giải thích vì sao phân tử Hydro chỉ có hai nguyên tử; nếu có ba nguyên tử Hydro thì chắc chắn có hai trong ba nguyên tử đó phải có spin song song, chúng sẽ đẩy nhau và không thể tạo thành phân tử ba nguyên tử được.

1.4 Khái niệm hoá trị

Trong các trường hợp đã xét ở phần trên ta thấy, sự kết hợp để nguyên tử tạo thành phân tử chỉ có thể xảy ra khi một trong các electron của nguyên tử này có thể trao đổi với electron có spin đối song của một nguyên tử khác. Như vậy, vấn đề rút ra là: trong nguyên tử có electron với spin tự do hay không? Nếu trong nguyên tử, tất cả các electron đều đã kết hợp thành từng cặp, có spin đối song thì không còn electron nào có thể trao đổi với một electron của một nguyên tử khác tạo thành phân tử được. Chẳng hạn, các nguyên tử khí hiếm. Tất cả các electron của chúng đều được xếp thành từng cặp có spin đối song nên spin của nguyên tử khí hiếm bằng không. Như vậy nguyên tử khí hiếm không còn một electron nào có spin tự do để có thể trao đổi với electron của một nguyên tử khác, có spin đối song. Đây là lý do vì sao phân tử khí hiếm chỉ có một nguyên tử và các nguyên tử khí hiếm không tác dụng hoá học - chúng là những khí trơ.

Hoá trị của nguyên tử được xác định bởi số electron với spin tự do có thể trao đổi với số electron tương ứng của nguyên tử khác.

Chú ý rằng các electron ở lớp vỏ ngoài cùng của nguyên tử tạo thành những cấu hình khác nhau, do đó cùng một loại nguyên tử nhưng có hoá trị khác nhau. Hơn nữa, hoá trị của nguyên tử ở trạng thái kích thích thì khác hoá trị của nguyên tử đó ở trạng thái cơ bản. Thông thường ta xét hoá trị khi nguyên tử ở trạng thái cơ bản. Bảng hoá trị của một số nguyên tố tính theo spin toàn phần như sau.

Nguyên tố	H	He	Li	C	N	O
Spin toàn phần	$\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{2}$	1	$\frac{3}{2}$	1
Hoá trị	1	0	1	2	3	2
Hợp chất	H_2	-	LiH	$[CH_4]$	NH_3	H_2O

Lý thuyết về hoá trị là phù hợp rất tốt với thực nghiệm. Trong bảng trên ta thấy nguyên tố Các-bon có hoá trị hai, nhưng thực nghiệm cho thấy nó có hoá trị bốn. Nguyên nhân là khi xét ở trạng thái cơ bản thì nguyên tố Các-bon có hoá trị hai, trong thực tế khi nguyên tử các-bon ở trạng thái kích thích thì hoá trị là bốn. Tương tự như vậy, do có trường hợp kích thích nên một loại nguyên tử có thể có nhiều hoá trị khác nhau.

§2 CÁC MỨC NĂNG LƯỢNG ELECTRON CỦA PHÂN TỬ LƯỠNG NGUYÊN TỬ

Phân tử nhiều nguyên tử là phức tạp nên ta chỉ xét trường hợp đơn giản nhất là phân tử lưỡng nguyên tử. Khi một phân tử nhận được năng lượng thì năng lượng đó có thể chuyển thành nhiều dạng:

- Biến thành động năng chuyển động tịnh tiến phân tử.
- Thay đổi trạng thái electron lớp vỏ ngoài.
- Dao động của hạt nhân.
- Làm quay phân tử.
- Làm ion hóa hoặc phân li phân tử thành nguyên tử.

Phần năng lượng chuyển động tịnh tiến là ngoại năng. Nó có thể nhận giá trị tùy ý và không ảnh hưởng gì đến phổ phân tử nên ta không xét. Phần năng lượng Ion hóa hay phân li nguyên tử cũng không ảnh hưởng đến phổ phân tử nên ta sẽ lần lượt xét ba phần năng lượng còn lại.

2.1 Năng lượng electron

Khi liên kết để tạo thành phân tử thì chỉ có những electron lớp ngoài của vỏ nguyên tử là thay đổi, còn các electron lớp trong thì vẫn không thay đổi. Sự thay đổi năng lượng của các electron hóa trị là nhỏ nên ta có thể dùng biểu thức tính năng lượng electron trong nguyên tử để xét gần đúng. Ta biết:

$$|E_n| = \frac{k^2 Z^2 m_e e^4}{2n^2 \hbar^2} = 0,013 \frac{Z^2}{n^2} (eV) \quad (V.1)$$

Ta coi $n = 1$; $Z = 1$ đến 100 thì E_n cỡ hàng eV đến hàng chục eV. Đây là mức năng lượng electron trong phân tử.

2.2 Năng lượng dao động

Các hạt nhân trong các nguyên tử liên kết thành phân tử luôn có dao động vì lực tương tác giữa chúng có xu hướng đẩy chúng về vị trí cân bằng (lực hồi phục). Các dao động này có thể xem là điều hòa. Gọi tần số dao động của hạt nhân trong phân tử là ν_{dd} thì theo Bohr hiệu các mức năng lượng dao động sẽ là: $\Delta E_{dd} = h\nu_{dd}$. Ta hãy so sánh bậc độ lớn của ΔE_{dd} với khoảng cách giữa các mức năng lượng của electron ΔE_e bằng cách coi bức xạ ánh sáng tuân theo định luật cổ điển: $\Delta E_e = h\nu_e$. Ta biết hệ dao động điều hòa khi chịu tác dụng của lực đàn hồi $f = -kx$; k là hệ số đàn hồi phụ thuộc vào bản chất lực.

Ta có thể coi hệ số đàn hồi của lực tác dụng lên electron và lên hạt nhân là như nhau: $k_e = k_{hn} = K$. Theo lý thuyết dao động ta có thể tính được tần số:

$$\nu_e = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{K}{m_e}}; \quad \nu_{dd} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{K}{m_{hn}}} \Rightarrow \frac{\Delta E_e}{\Delta E_{dd}} = \sqrt{\frac{m_{hn}}{m_e}} \quad (V.2)$$

Hạt nhân Hidrô nhẹ nhất thì gấp 1836 lần electron nên:

$$\frac{\Delta E_e}{\Delta E_{dd}} = \sqrt{\frac{m_{hn}}{m_e}} = \sqrt{1836} \approx 43$$

Các hạt nhân nặng gấp Hidrô 100 lần thì tỷ số này tăng lên 10 lần. Như vậy có thể đánh giá mức năng lượng dao động nhỏ hơn mức năng lượng electron hàng chục đến hàng trăm lần. Giá trị của nó khoảng 0,01eV đến 0,1eV hoặc nhỏ hơn.

2.3 Năng lượng quay

Theo công thức tính động năng chuyển động quay:

$$E_q = \frac{I\omega^2}{2} = \frac{L^2}{2I}$$

mà $L = \hbar\sqrt{l(l+1)}$ nên:

$$E_q = l(l+1)\frac{\hbar^2}{2I} \quad (V.3)$$

Từ công thức này ta tính được khoảng cách giữa các mức năng lượng kế nhau:

$$\Delta E_q = E_{q(l+1)} - E_{ql} = 2(l+1)\frac{\hbar^2}{2I} \quad (V.4)$$

I là mômen quán tính phân tử. Đối với phân tử lưỡng nguyên tử ta có: $I = m_1r_1^2 + m_2r_2^2$; r_1, r_2 là khoảng cách từ hai hạt nhân đến khối tâm nên ta có:

$$\frac{m_1}{m_2} = \frac{r_2}{r_1} \quad (V.5)$$

Gọi khoảng cách giữa hai hạt nhân là $r_o = r_1 + r_2$ thì:

$$I = \frac{m_1m_2}{m_1+m_2}r_o^2 \Rightarrow \Delta E_q = 2(l+1)\frac{\hbar^2(m_1+m_2)}{2m_1m_2r_o^2} \quad (V.6)$$

Xét phân tử Hydro ở trạng thái $l = 0$ ta có:

$$\Delta E_q = 2(l+1)\frac{\hbar^2(m_1+m_2)}{2m_1m_2r_o^2} = 2(0+1)\frac{\hbar^2(m_H+m_H)}{2m_Hm_Hr_o^2} = \frac{2\hbar^2}{m_Hr_o^2} \quad (V.7)$$

Lấy gần đúng: $m_H = 1,6.10^{-27}kg$ và $r_o = 10^{-10}m$ ta tính được:

$$\Delta E_q \approx 8,75.10^{-3}eV$$

Đối với các phân tử khác khối lượng và kích thước đều tăng nên giá trị ΔE_q sẽ giảm đi hàng chục đến hàng trăm lần. Như vậy ΔE_q khoảng từ $10^{-3}eV$ đến $10^{-5}eV$.

Tóm lại năng lượng trong phân tử quyết định đến phổ phân tử gồm 3 dạng.

2.3.1. Năng lượng electron

Năng lượng electron là lớn nhất, khoảng hàng eV đến hàng chục eV. Năng lượng này có ý nghĩa lớn trong phổ phân tử.

2.3.2. Năng lượng dao động hạt nhân

Năng lượng dao động của các hạt nhân bé hơn năng lượng electron, có giá trị trung bình khoảng 10^{-1} đến 10^{-2} eV.

2.3.3. Năng lượng quay phân tử

Năng lượng quay phân tử là nhỏ nhất, có giá trị khoảng 10^{-3} đến 10^{-5} eV.

Sử dụng những kết quả này ta có thể giải thích được phổ phân tử, phần này sẽ xét cụ thể trong bài tiếp theo.

§3 PHỔ CỦA PHÂN TỬ

3.1 Đám phổ phân tử

Nghiên cứu phổ bức xạ phân tử ta thấy có nhiều điều khác biệt với phổ nguyên tử. Cụ thể là, nếu phổ nguyên tử tách thành từng vạch rõ rệt (quang phổ vạch) thì quang phổ phân tử gồm những đám rộng, không có giới hạn rõ nét. Bằng máy quang phổ có năng suất phân giải cao, ta có thể thấy chúng gồm rất nhiều vạch kế sát nhau. Chính vì hình ảnh của nó như là một miền liên tục, không có bờ ranh giới rõ rệt nên người ta gọi quang phổ phân tử là **"đám phổ"**.

3.2 Giải thích sự tạo thành quang phổ phân tử

Để giải thích được sự hình thành "đám phổ" phân tử ta dựa vào các mức năng lượng phân tử đã được xét ở bài trên. Ta đã biết quang phổ nguyên tử được hình thành là do sự biến đổi trạng thái chuyển động của các electron lớp ngoài (thường gọi là electron quang học). Mặt khác ta lại biết rằng sự liên kết của các nguyên tử trong phân tử là do tương tác giữa các electron ở lớp vỏ ngoài nguyên tử. Do đó, chuyển động của các electron lớp ngoài vỏ nguyên tử trong phân tử bị thay đổi về căn bản và đồng thời cả phổ cũng bị thay đổi theo. Nguyên nhân quan trọng thứ hai là làm cho phổ phân tử khác phổ nguyên tử là do phân tử có những mức năng lượng phụ (bậc tự do phụ), đó là năng lượng quay và dao động của phân tử. Nhưng bậc tự do này cũng góp phần vào quang phổ phân tử. Thực nghiệm cho thấy phổ Ronghen của phân tử trùng với phổ Ronghen của các nguyên tử tạo thành nó. Đây là một bằng chứng thực nghiệm cho lập luận trên. Vì như ta đã biết, phổ Ronghen được tạo thành do chuyển mức năng lượng của các electron lớp trong, mà chuyển động của các electron lớp trong không bị ảnh hưởng khi nguyên tử liên kết thành phân tử.

Trong bài trước, khi nghiên cứu các mức năng lượng phân tử, ta đã giả thiết coi như các mức năng lượng electron, năng lượng chuyển động quay, năng lượng dao động là hoàn toàn độc lập nhau. Thực ra, giữa chúng có mối liên hệ với nhau nhất định. Chính vì liên hệ này mà khi phân tử chuyển mức năng lượng, bức xạ quang phổ thì cả ba mức năng lượng này đều có thể thay đổi. Như vậy ta có thể viết:

$$h\nu = \Delta E_e + \Delta E_{dd} + \Delta E_q \quad (V.8)$$

Trong đó ΔE_e là độ biến thiên năng lượng của các trạng thái electron; ΔE_{dd} là độ biến thiên năng lượng giữa các trạng thái dao động phân tử; ΔE_q là độ biến thiên năng lượng giữa các trạng thái quay phân tử.

Biểu thức (V.8) cho thấy mỗi vạch quang phổ phân tử phụ thuộc vào cả ba chuyển mức năng lượng. Như đã tính toán ở bài trên, năng lượng electron là lớn nhất nên ảnh hưởng nhiều nhất, còn năng lượng chuyển động quay là bé nhất, ít ảnh hưởng đến phổ phân tử nhất. Ta sẽ xét chi tiết hơn các phổ này.

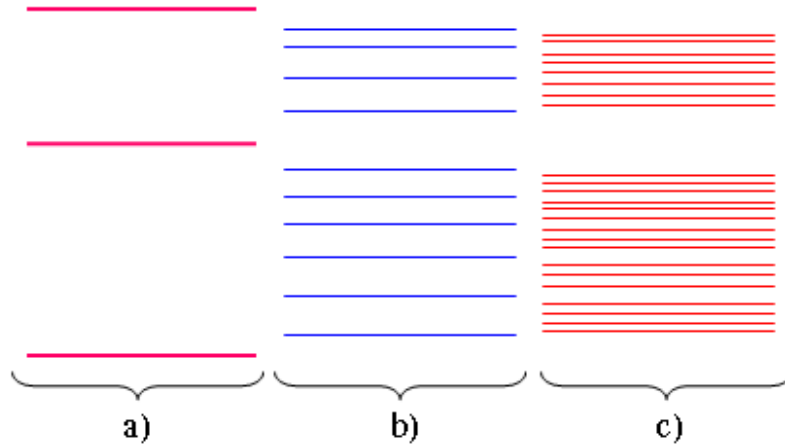
3.2.1. Phổ electron

"Phổ phân tử tạo ra do sự chuyển mức năng lượng chuyển động của electron phát xạ ra gọi là phổ electron của phân tử". Như vậy để xét phổ electron ta có thể coi như lưỡng phân tử không

chuyển động quay và dao động. Gọi E_e và E'_e là mức năng lượng electron trước và sau bức xạ quang phổ, ta có:

$$\nu_e = \frac{E'_e - E_e}{h} \quad (\text{V.9})$$

Biểu thức này cho thấy quang phổ phân tử phải là quang phổ vạch giống như quang phổ nguyên tử. Quang phổ này được mô tả trên hình (V.1.a).



Hình V.1: Phổ phân tử

3.2.2. Phổ electron - dao động

Trong thực tế, khi trạng thái chuyển động electron thay đổi, sinh ra phổ electron thì trạng thái dao động của phân tử cũng có thể bị thay đổi. Sự thay đổi trạng thái dao động của phân tử đã góp phần làm thay đổi quang phổ phát ra. Phổ bức xạ của phân tử tính đến cả phần năng lượng do thay đổi mức năng lượng dao động được gọi là phổ electron-dao động. Gọi E_{dd} và E'_{dd} là năng lượng dao động của phân tử trước và sau bức xạ thì ta có thể viết:

$$\nu_{e+dd} = \nu_e + \frac{E'_{dd} - E_{dd}}{h} \quad (\text{V.10})$$

Do sự chênh lệch năng lượng giữa các mức năng lượng dao động là bé nên giữa các vạch quang phổ electron có một hệ thống nhiều vạch quang phổ được tạo thành, nằm sát nhau, do sự chuyển mức năng lượng dao động của phân tử. Các vạch quang phổ này được mô tả trên hình (V.1.b).

3.2.3. Phổ dao động - quay

Tương tự nếu ta xét đến sự chuyển mức năng lượng chuyển động quay phân tử thì sự góp mặt của năng lượng này tạo ra các vạch quang phổ rất sát nhau nằm giữa hai vạch quang phổ electron-dao động kế nhau. Những vạch này được gọi là quang phổ dao động-quay của phân tử. Gọi E_q và E'_q là năng lượng chuyển động quay của phân tử trước và sau bức xạ thì ta có:

$$\nu_{e+dd} = \nu_e + \frac{E'_{dd} - E_{dd}}{h} + \frac{E'_q - E_q}{h} \quad (\text{V.11})$$

Hình ảnh quang phổ dao động-quay được mô tả trên hình (V.1.c).

Tóm lại, phổ phân tử bao gồm vô số vạch rất sát nhau. Chúng gần nhau đến nỗi ngay cả những máy quang phổ có năng suất phân giải cao cũng không phân biệt được. Nhìn vào nó ta có cảm giác như một "đám" sáng chồng lên nhau. Chính vì lý do này ta gọi phổ phân tử là đám phổ.

Chương VI

SƠ LƯỢC VỀ LASER

§1 PHÁT XẠ TỰ PHÁT VÀ PHÁT XẠ CƯỜNG BỨC

Ta biết theo Lý thuyết lượng tử, khi một nguyên tử nhận được năng lượng thì nó sẽ chuyển lên mức năng lượng cao hơn (trạng thái kích thích), sau đó nó sẽ chuyển về các mức năng lượng thấp hơn đồng thời phát xạ ra lượng tử (photon) ánh sáng.

Tần số photon phát xạ tuân theo công thức định đề Bohr:

$$\nu_{n_i, n_k} = \frac{E_{n_k} - E_{n_i}}{h} \quad (\text{VI.1})$$

Theo Einstein có hai cách nguyên tử chuyển trạng thái để phát xạ photon:

Cách 1 là: nguyên tử tự động chuyển đổi trạng thái với xác suất ngẫu nhiên, trong cách này sự chuyển đổi trạng thái không phụ thuộc gì vào trường ngoài nên được gọi là **phát xạ tự phát**.

Cách 2 là: Người ta dùng một từ trường ngoài có tần số đúng bằng ν_{n_i, n_k} để kích thích phát xạ. Nhờ đó các nguyên tử sẽ phát xạ đồng loạt nên được gọi là **phát xạ cưỡng bức** hay **phát xạ cảm ứng**.

1.1 Phát xạ tự phát

Trong phần này ta sẽ nghiên cứu chi tiết hơn hiện tượng phát xạ (bức xạ) tự phát. Thông thường, thời gian sống trung bình của nguyên tử bị kích thích trước khi bức xạ tự phát là khoảng 10^{-8} giây. Tuy nhiên, có một số trạng thái có thời gian sống trung bình lâu hơn, cỡ 10^{-3} giây. Như trên đã trình bày, phát xạ tự phát chỉ phụ thuộc vào nội tại từng phân tử mà không phụ thuộc vào từ trường ngoài nên ta không thể xác định chính xác thời điểm một nguyên tử cụ thể có thể thực hiện chuyển mức năng lượng để thực hiện phát xạ. Tuy nhiên chúng ta có thể xét vấn đề này theo quan điểm thống kê, nghĩa là ta không xét một nguyên tử cụ thể mà xét một tập hợp lớn nguyên tử.

Gọi xác suất trong bước chuyển tự phát từ trạng thái n_k về trạng thái n_i là A_{ki} , mật độ nguyên tử ở trạng thái kích thích n_k là N_k thì số nguyên tử dịch chuyển tự phát từ trạng thái n_k sang trạng thái n_i trong một đơn vị thể tích sau khoảng thời gian dt sẽ là:

$$dn_{ki} = N_k A_{ki} dt$$

Số lần dịch chuyển tự phát đúng bằng số nguyên tử có trạng thái n_k bị giảm đi nên:

$$dn_{ki} = -dN_k = N_k A_{ki} dt \quad \Leftrightarrow \quad \frac{dN_k}{N_k} = -A_{ki} dt$$

Tích phân hai vế ta được:

$$\int_{N_{ko}}^{N_k} \frac{dN_k}{N_k} = \int_0^t -A_{ki} dt \Leftrightarrow \ln \frac{N_k}{N_{ko}} = -A_{ki} t \Leftrightarrow N_k = N_{ko} e^{-A_{ki} t} \quad (\text{VI.2})$$

Trong đó N_{ko} là số nguyên tử ở trạng thái n_k ở thời điểm ban đầu. Mỗi photon bức xạ có năng lượng là $h\nu_{ki}$ và trong một đơn vị thời gian có số photon bức xạ là $N_k A_{ki}$ trong một đơn vị thể tích nên cường độ bức xạ tại thời điểm t là:

$$I = N_k A_{ki} h\nu_{ki} \quad (\text{VI.3})$$

Thay (VI.2) vào (VI.3) ta được:

$$I = N_k A_{ki} h\nu_{ki} = N_{ko} A_{ki} h\nu_{ki} e^{-A_{ki} t} = I_o e^{-A_{ki} t} \quad (\text{VI.4})$$

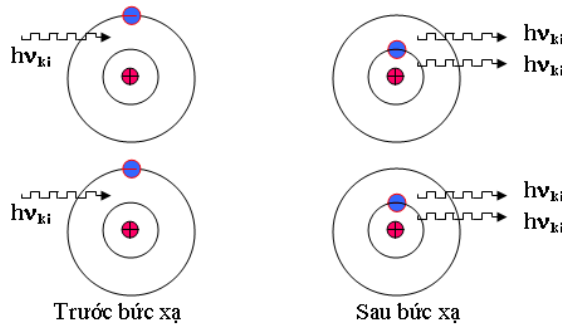
Trong đó $I_o = N_{ko} A_{ki} h\nu_{ki}$ là cường độ bức xạ tự phát ban đầu.

Như vậy: **Cường độ bức xạ tự phát của một vạch quang phổ sau khi kích thích giảm dần theo thời gian theo quy luật hàm số mũ.**

Chúng ta cần hiểu rằng, trong bức xạ tự phát, mỗi nguyên tử thực hiện dịch chuyển trạng thái là độc lập nhau, nên sóng bức xạ có phương truyền và có pha thay đổi một cách hỗn loạn. Chúng không phải là sóng kết hợp nên không thể giao thoa với nhau. Các nguồn phát sáng thông thường như đèn ống huỳnh quang, đèn tròn sợi đốt, ... đều phát sáng theo hình thức bức xạ tự phát nên ta không thể cho ánh sáng phát ra từ các loại đèn này gặp nhau để quan sát giao thoa ánh sáng được. Trong thực tế, để tạo ra giao thoa, ta phải lấy một phần hẹp của nguồn phát (khe sáng, điểm sáng, ...) rồi cho tách thành hai phần quang thông, sau đó cho hai phần này gặp nhau để tạo giao thoa. Đó là các trường hợp khe sáng Young, gương Fresnel, lưỡng lăng kính Fresnel, lưỡng thấu kính Billet, ...

1.2 Phát xạ cảm ứng

Ta hãy hình dung, một tập hợp lớn các nguyên tử đang ở trạng thái kích thích n_k , nếu ta đưa một photon có tần số $\nu_{ki} = \frac{E_{n_k} - E_{n_i}}{h}$ thì photon này sẽ tương tác với nguyên tử, cưỡng bức nguyên tử chuyển mức năng lượng để phát ra một photon giống như photon kích thích. Đó là hiện tượng phát xạ cảm ứng hay phát xạ cưỡng bức. Trong phát xạ cưỡng bức, số photon được tăng lên không những có tần số bằng nhau mà còn có phương truyền và pha giống nhau. Các photon này là photon kết hợp. Đây chính là nguyên tắc phát Laser mà ta sẽ nguyên cứu trong bài sau. Hình (VI.1) mô tả sự phát xạ cảm ứng.



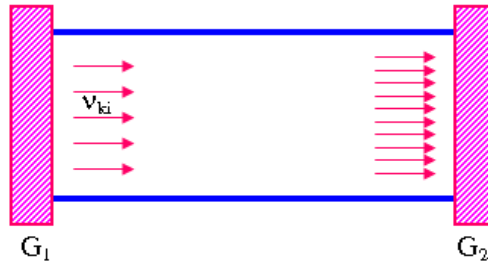
Hình VI.1: Phát xạ cảm ứng

§2 NGUYÊN LÝ HOẠT ĐỘNG CỦA LASER. SỰ ĐẢO LỘN MẬT ĐỘ TRẠNG THÁI VÀ HẤP THỤ ÂM

2.1 Nguyên lý hoạt động của Laser (máy phát lượng tử)

Laser là viết tắt của cụm từ tiếng anh: Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation, có nghĩa là khuếch đại ánh sáng bằng bức xạ cảm ứng. Einstein đưa ra khái niệm này đầu tiên vào năm 1913, nhưng đến năm 1960 mới thực hiện được cơ chế này bằng máy phát lượng tử (máy phát Laser). Ba nhà khoa học phát minh ra máy phát lượng tử là N.Baxốp (Liên xô), A.Prôkhôrop (Liên xô) và Taoxơ (Mỹ). Nhóm nhà khoa học này đã được giải thưởng Nobel Vật lý năm 1965 nhờ công trình này. Như tên gọi của nó, nguyên tắc hoạt động của Laser là dựa vào phát xạ cảm ứng.

Bộ phận cơ bản của máy phát lượng tử như hình (VI.2) còn được gọi là giao thoa kế Fabri - Perô. Trong giao thoa kế Fabri - Perô là một buồng cộng hưởng, chứa một môi trường có khả năng



Hình VI.2: Máy phát lượng tử

khuếch đại ánh sáng. Môi trường này được gọi là môi trường hoạt chất. Nếu sự khuếch đại trong môi trường hoạt chất đủ lớn để bù vào sự mất mát năng lượng khi phản xạ trên các gương $G_1; G_2$ của giao thoa kế cũng như các mất mát khác thì bức xạ cảm ứng truyền dọc theo trục của giao thoa kế sẽ được khuếch đại nhiều lần sau nhiều lần phản xạ trên các gương G_1 và G_2 . Khi bức xạ đủ lớn sẽ được đưa ra ngoài, tạo ra chùm tia của máy phát lượng tử, tức chùm Laser.

2.2 Sự đảo lộn mật độ. Nhiệt độ tuyệt đối âm

2.2.1. Sự đảo lộn mật độ

Trong mục này ta tìm điều kiện cho môi trường có thể khuếch đại ánh sáng.

Trước hết ta cần chú ý rằng trong các máy phát lượng tử chỉ những bức xạ có phương truyền dọc theo trục của máy mới có tác dụng thực sự. Như các mục trên cho ta biết, chỉ có bức xạ cảm ứng mới có phương truyền xác định, còn bức xạ tự phát thì có phương truyền hỗn loạn. Như vậy khi nghiên cứu máy phát lượng tử ta không cần quan tâm đến bức xạ tự phát.

Ta hãy xét chùm ánh sáng có tần số ν_{ki} đi vào môi trường hoạt động (hình VI.2). Khi đó có thể xảy ra bức xạ cảm ứng (nguyên tử chuyển từ mức năng lượng cao n_k xuống mức năng lượng thấp n_i và bức xạ ra photon có tần số đúng bằng tần số photon tới ν_{ki}) nhưng đồng thời cũng có thể xảy ra quá trình hấp thụ (nguyên tử nhận photon tới và chuyển từ mức năng lượng thấp n_i lên

mức năng lượng cao n_k). Với các môi trường thường gặp thì sự phân bố mật độ nguyên tử trên các mức năng lượng thoả mãn định luật phân bố Boltzmann:

$$N_k = N_i e^{\frac{E_{n_i} - E_{n_k}}{kT}} \quad (\text{VI.5})$$

Công thức này cho thấy mật độ nguyên tử ở mức năng lượng cao nhỏ hơn mật độ nguyên tử ở mức năng lượng thấp. Điều này có nghĩa là trong các môi trường bình thường hiện tượng hấp thụ chiếm ưu thế. Như vậy khi cho chùm photon tới vào môi trường bình thường thì nó bị hấp thụ nhiều hơn phát xạ nên số photon qua môi trường sẽ bị giảm đi. Môi trường bình thường không có tác dụng khuếch đại photon.

Ngược lại nếu ta tạo ra được một môi trường có mật độ nguyên tử ở trạng thái năng lượng cao (kích thích) lớn hơn mật độ nguyên tử ở trạng thái thấp thì hiện tượng bức xạ cảm ứng chiếm ưu thế. Khi đó khi cho chùm photon qua môi trường này, nó chẳng những không bị hấp thụ làm yếu đi mà còn nhờ bức xạ cảm ứng làm mạnh lên. Môi trường này đã có khả năng khuếch đại ánh sáng.

Như vậy muốn cho một môi trường có khả năng khuếch đại ánh sáng có tần số ν_{ki} thì mật độ nguyên tử ở mức cao n_k phải lớn hơn mật độ nguyên tử ở mức thấp n_i . Môi trường có tính chất như vậy được gọi là môi trường **đảo lộn mật độ**.

Trong kỹ thuật ta có thể dùng nhiều phương pháp để tạo ra môi trường đảo lộn mật độ.

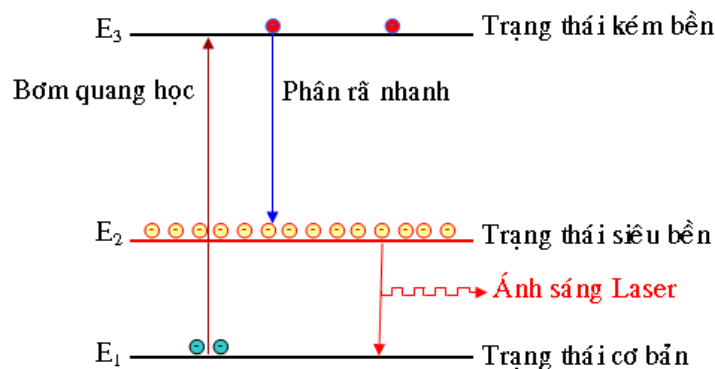
- Phương pháp bơm quang học: dùng ánh sáng để kích thích các nguyên tử của môi trường từ mức thấp lên mức cao được gọi là phương pháp **bơm quang học**.

- Phương pháp va chạm điện tử: Dùng điện tử (electron) hoặc nguyên tử để cho va chạm với nguyên tử môi trường hoạt động. Trong va chạm, các nguyên tử môi trường nhận năng lượng và chuyển lên trạng thái kích thích.

- Phương pháp phân rã phân tử: Tạo ra sự phân rã phân tử thành nguyên tử. Trong quá trình phân rã, nguyên tử nhận được năng lượng và chuyển lên trạng thái kích thích.

2.2.2. Môi trường có nhiệt độ tuyệt đối âm

Xuất phát từ công thức Boltzmann (VI.5) ta có thể nói rằng: muốn có môi trường đảo lộn mật độ, nghĩa là $N_k > N_i$ thì $T < 0$. Như vậy môi trường phải có **hiệt độ tuyệt đối âm**. Cần chú ý rằng khái niệm môi trường có nhiệt độ tuyệt đối âm mặc dù được dùng một cách rộng rãi nhưng thật ra không hoàn toàn chính xác như vậy vì không thể sử dụng khái niệm nhiệt độ đối với một môi trường không cân bằng (nhiệt độ là khái niệm có tính chất thống kê nên chỉ có thể áp dụng cho một môi trường gồm tập hợp một số lớn phân tử và ở trạng thái cân bằng nhiệt động).



Hình VI.3: Hoạt động của Laser bơm quang học

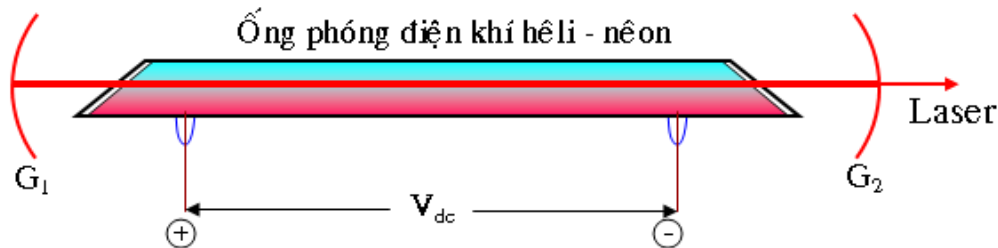
2.3 Một số nguồn Laser

2.3.1. Laser bơm quang học

Hình (VI.3) cho ta hình ảnh mô tả phương pháp tạo Laser bằng phương pháp bơm quang học. Trong loại Laser này ta dùng ánh sáng cung cấp năng lượng cho môi chất hoạt động để nó chuyển từ mức năng lượng cơ bản sang mức năng lượng kích thích E_3 , là một mức rất kém bền. Sau một thời gian rất ngắn, do phát xạ tự phát, electron sẽ chuyển về mức năng lượng E_2 , là một mức năng lượng siêu bền. Nếu các điều kiện trên thoả mãn thì E_2 có mật độ cao hơn E_1 , nghĩa là đã tạo được trạng thái đảo lộn mật độ. Sau đó nhờ photon kích thích, các trạng thái E_2 sẽ đồng loạt chuyển về trạng thái cơ bản E_1 để phát ra Laser.

2.3.2. Laser khí Heli-Neon

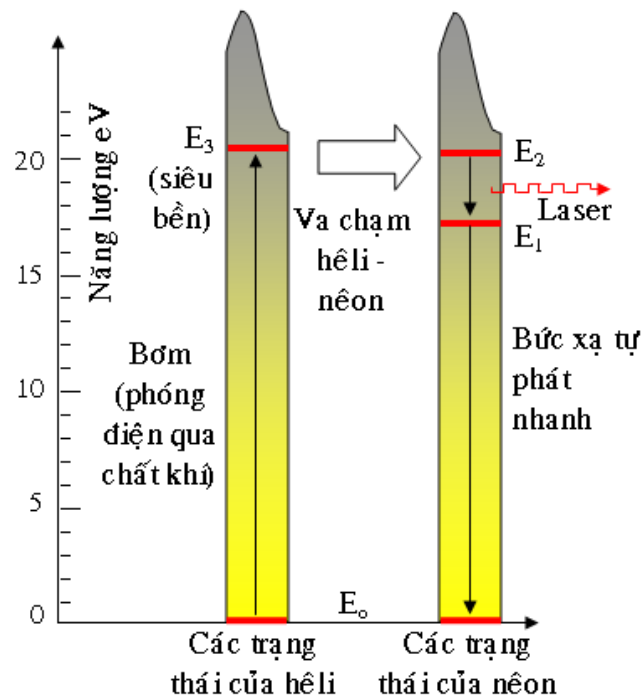
Các bộ phận cơ bản để tạo ra Laser khí Heli-Neon như hình vẽ (VI.4)
Quá trình hoạt động tạo ra Laser như sau: trong ống phóng điện có chứa hai loại khí là Heli và



Hình VI.4: Các yếu tố của laser khí Heli-Neon

Neon. Các electron và Iôn khi phóng qua Heli làm cho nó chuyển lên mức năng lượng kích thích E_3 . Đây là một mức năng lượng siêu bền nên quá trình bức xạ tự phát chuyển về E_0 rất chậm.

Mức năng lượng E_3 của Heli có năng lượng là $20,61eV$ rất gần với mức năng lượng E_2 của Neon có năng lượng là $20,66eV$ vì vậy khi nguyên tử Heli ở trạng thái siêu bền va chạm với nguyên tử ở trạng thái cơ bản thì dễ dàng nhường năng lượng cho nhau để nguyên tử Neon chuyển lên trạng thái kích thích E_2 . Hiện tượng này xảy ra liên tục gây ra trạng thái đảo lộn mật độ cho Neon. Nguyên tử Neon thực hiện bức xạ cảm ứng chuyển từ E_2 về E_1 tạo thành Laser có bước sóng là $632,8nm$. Mức E_1 của Neon là kém bền nên nhanh chóng bức xạ tự phát về mức cơ bản E_0 . Các gương G_1, G_2 là những gương cầu có tác dụng phản xạ nhiều lần để tạo ra chùm Laser mạnh. Gương G_2 có vị trí phủ "rò" để đưa một phần Laser ra ngoài sử dụng. Các gương G_1, G_2 đều là những gương cầu lõm với các tiêu điểm nằm trùng với tâm của ống phóng điện. Gương G_1 được phủ một lớp màng mỏng bằng chất điện môi với độ dày được hiệu chỉnh chính xác để làm cho nó có độ phản xạ gần như lý tưởng đối với bước sóng Laser phát ra. Trái lại gương G_2 có chứa chỗ "rò" để một phần Laser đi qua phát ra ngoài. Sơ đồ chuyển mức năng lượng được mô tả như hình (VI.5)



Hình VI.5: Sự chuyển mức năng lượng tạo thành Laser trong Laser khí Heli-Neon

§3 MỘT SỐ TÍNH CHẤT CỦA LASER VÀ ỨNG DỤNG

3.1 Tính chất của Laser

3.1.1. ánh sáng Laser có độ đơn sắc cao

Thực nghiệm cho thấy ánh sáng Laser có độ đơn sắc rất cao. Nếu ánh sáng của các vạch quang phổ chọn lọc trong ống phóng điện qua chất khí có thể có bước sóng trong vùng phổ nhìn thấy với độ chính xác khoảng 1 phần 10^6 thì độ đơn sắc của ánh sáng Laser cao hơn nhiều lần, cỡ 1 phần 10^{15} .

3.1.2. ánh sáng Laser có độ kết hợp cao

Đoàn sóng Laser có thể kéo dài tới vài trăm kilômét. Điều này có nghĩa là các vân giao thoa có thể tạo thành khi chồng chất hai chùm sóng Laser riêng biệt có hiệu quang trình (quang lộ) cỡ vài trăm kilômét. Trong khi đó, chiều dài kết hợp của ánh sáng từ các nguồn phát thông thường chỉ khoảng 1 mét.

3.1.3. ánh sáng Laser có tính định hướng cao

Ta có thể tạo nên chùm Laser gần như song song "tuyệt đối", điều đó chứng tỏ chùm sáng Laser có tính định hướng rất cao.

3.1.4. ánh sáng Laser có thể làm hội tụ với độ tụ cao

Ta có thể làm hội tụ chùm Laser để mật độ năng lượng lên đến cỡ 10^{16} W/cm^2 trong khi đó các nguồn sáng thông thường chỉ có thể tạo ra mật độ năng lượng lớn nhất khoảng 10^3 W/cm^2 .

3.2 ứng dụng của laser

Do những đặc tính đã trình bày ở phần trên nên Laser có nhiều ứng dụng trong thực tế.

Laser được ứng dụng trong lĩnh vực nghiên cứu khoa học: dùng là chuẩn tần số cũng như chuẩn thời gian. Dùng máy phát lượng tử (Laser) cho phép tạo ra đồng hồ chính xác nhất hiện nay. Từ Laser cũng cho phép xác định chính xác vận tốc ánh sáng. Xác định chính xác bước sóng cho ta thước đo độ dài chính xác nhất.

Laser được sử dụng trong thông tin liên lạc với độ bảo mật cao (do tính định hướng của nó) và tổn ít năng lượng. Hơn nữa dùng Laser trong thông tin có thể phát đi rất nhiều thông tin cùng một lúc.

Tính chất tập trung năng lượng cao của Laser cho phép nâng nhiệt độ trong một phạm vi hẹp lên rất cao nên được dùng để hàn các chi tiết máy trong chân không, đục lỗ, phẫu thuật trong y học. Laser được dùng trong kỹ thuật quang khắc để chế tạo mạch tích hợp (IC).

Do độ đơn sắc cao, Laser được sử dụng để chụp ảnh toàn ảnh (chụp Hologram).

Chương VII

ĐẠI CƯƠNG VỀ HẠT NHÂN. NĂNG LƯỢNG LIÊN KẾT HẠT NHÂN

§1 CÁC ĐẶC TRƯNG CƠ BẢN CỦA HẠT NHÂN

Thí nghiệm tán xạ hạt alpha trên nguyên tử của Rutherford đã khẳng định sự tồn tại của hạt nhân. Trong cấu trúc nguyên tử, hạt nhân được coi như một chất điểm vì có kích thước rất bé so với kích thước nguyên tử, nhưng hạt nhân lại mang toàn bộ điện tích dương và chiếm hầu hết khối lượng nguyên tử. Hạt nhân tuy bé nhưng không phải chỉ có một hạt mà còn có cấu trúc phức tạp.

1.1 Điện tích và khối lượng hạt nhân

1.1.1. Điện tích hạt nhân

Ta biết hạt nhân mang điện tích dương. Điện tích hạt nhân có giá trị là Ze , với Z là nguyên tử số hay số thứ tự nguyên tố trong bảng hệ thống tuần hoàn Mendeleev.

1.1.2. Khối lượng hạt nhân

Khối lượng hạt nhân rất lớn so với khối lượng electron nên trong những tính toán không đòi hỏi chính xác cao, ta có thể xem gần đúng khối lượng hạt nhân bằng khối lượng nguyên tử.

$$M_{hn} = m_{nt} - Zm_e \approx m_{nt} \quad (\text{VII.1})$$

1.2 Hạt nhân đồng vị

Những hạt nhân có cùng nguyên tử số Z nhưng lại có khối lượng khác nhau được gọi là các hạt nhân đồng vị, hay gọi tắt là các đồng vị.

Hầu hết các nguyên tố đều có đồng vị. Chẳng hạn, đối với Hydro có ba đồng vị khác nhau với tỷ số khối lượng xấp xỉ là 1, 2, 3. Người ta kí hiệu đồng vị nguyên tử như sau ${}_Z^AX$. Trong đó X là kí hiệu hoá học của nguyên tố, A là nguyên tử khối - là khối lượng hạt nhân tính theo đơn vị nguyên tử (chỉ lấy phần nguyên, bỏ qua phần lẻ), Z là nguyên tử số. Cũng có thể kí hiệu theo cách khác XA . Ví dụ:

$${}_1^1H; {}_1^2H; {}_1^3H; {}_3^6Li; {}_3^7Li; {}_6^{12}C; {}_6^{14}C; {}_8^{16}O; {}_8^{17}O; {}_{92}^{235}U; {}_{92}^{238}, \dots$$

hoặc

$$H1; H2; H3; Li6; Li7; C12; C14; O16; O17; U235; U238; \dots$$

1.3 Đơn vị khối lượng nguyên tử

Vì nguyên tử cũng như hạt nhân hay các hạt vi mô khác đều có khối lượng rất bé nên người ta không dùng *kg* làm đơn vị khối lượng như trường hợp đo khối lượng của các vật vĩ mô khác. Người ta thống nhất chọn một đơn vị khác thích hợp hơn gọi là đơn vị khối lượng nguyên tử, có định nghĩa như sau: **khối lượng của $\frac{1}{12}$ khối lượng đồng vị Cacbon 12 được gọi là đơn vị khối lượng nguyên tử, hay đơn vị cacbon**. Kí hiệu đơn vị nguyên tử là *u*. Thực nghiệm đo được $1\text{đvnt} (1u) = 1,661 \cdot 10^{-27}\text{kg}$.

Vì nguyên tử Cacbon được chọn làm đơn vị khối lượng nguyên tử nên chỉ có nguyên tử Cacbon mới có khối lượng là một số nguyên thực sự ($A=12,000000u$), còn các nguyên tử khác đều có khối lượng lẻ như ta thấy trong bảng khối lượng nguyên tử.

1.4 Các thành phần của hạt nhân

Mọi hạt nhân đều được cấu tạo từ hai loại hạt: proton và neutron. Đầu tiên, căn cứ vào tính chất mang điện dương của hạt nhân, người ta cho rằng hạt nhân được cấu tạo từ các hạt mang điện tích dương. Bằng các thực nghiệm người ta đã chứng minh được hạt nhân được cấu tạo bằng các hạt mang điện tích dương, gọi là hạt proton. Cũng bằng thí nghiệm bắn phá hạt nhân, Rutherford đã chứng minh được hạt nhân của nguyên tử Hydro chính là một hạt proton. Vì nguyên tử trung hoà về điện nên tổng điện tích dương của các proton cấu tạo nên hạt nhân phải bằng giá trị tổng điện tích âm của các electron ngoài vỏ hạt nhân.

Tuy nhiên khi xác định khối lượng hạt nhân cho thấy khối lượng hạt nhân $A > Z$, điều này chứng tỏ, ngoài proton còn có một hạt khác đóng góp vào khối lượng hạt nhân. Hạt này phải trung hoà về điện. Dự đoán này đã được Chadwick (Chátvích) phát hiện bằng thực nghiệm vào năm 1932 và người ta đặt tên cho nó là hạt neutron.

Hai loại hạt cấu tạo nên hạt nhân được gọi chung là nuclon. Khối lượng của các nuclon tương ứng là:

$$m_p \approx 1,007828u \approx 1,6725 \cdot 10^{-27}\text{kg}; \quad m_n \approx 1,008665u \approx 1,6748 \cdot 10^{-27}\text{kg}$$

Cả hai hạt proton và neutron đều có spin là $\frac{1}{2}$, nghĩa là chúng đều là hạt fermion.

§2 NĂNG LƯỢNG LIÊN KẾT HẠT NHÂN

2.1 Độ hụt khối

Do lực tương tác hạt nhân mà các nuclon, mặc dù có tích điện hay không tích điện vẫn liên kết với nhau bền vững. Ta biết trong mọi liên kết phải có năng lượng liên kết. Như vậy năng lượng liên kết trong hạt nhân được xác định như thế nào?

Bắt đầu nghiên cứu từ hạt nhân đơn giản nhất là hạt nhân Deuteron, là một đồng vị của Hydro. Hạt nhân này được cấu tạo bởi duy nhất một proton và một neutron và có kí hiệu hoá học là ${}^2_1\text{H}$ (hoặc ${}^2_1\text{D}$). Thực nghiệm đo được khối lượng nghỉ của hạt nhân Deuteron là $M_D = 2,01355u$. Trong khi đó tổng khối lượng nghỉ của proton và neutron là $m_p + m_n = 2,016493u$. Như vậy ở đây định luật bảo toàn khối lượng không còn áp dụng đúng vì ta thấy $m_p + m_n > M_D$. Nghiên cứu các hạt nhân khác người ta cũng rút ra kết luận tương tự: **khí các nuclon liên kết với nhau tạo thành hạt nhân thì khối lượng tĩnh của hạt nhân nhỏ hơn tổng khối lượng tĩnh của các nuclon tạo nên hạt nhân đó**. Sự chênh lệch khối lượng như thế được gọi là **sự hụt khối**. Hạt nhân Deuteron có độ hụt khối là:

$$\Delta m = (m_p + m_n) - M_D = 2,016493u - 2,01355u = 0,002943u$$

2.2 Năng lượng liên kết hạt nhân

Hiện tượng hụt khối giải thích được nhờ định luật tương đối tính về bảo toàn năng lượng của Einstein. Theo định luật này, giữa khối lượng và năng lượng có mối liên hệ:

$$E = mc^2 \quad (\text{VII.2})$$

Biểu thức này còn được gọi là hệ thức năng lượng Einstein.
Như vậy xét đối với độ hụt khối ta có:

$$\Delta E = \Delta mc^2 \quad (\text{VII.3})$$

Trong các hạt nhân bền, các nuclon phải liên kết chặt chẽ với nhau. Do đó muốn phá vỡ chúng để trở thành các proton và neutron riêng rẽ, thì ta phải tốn một năng lượng cung cấp từ ngoài cho hạt nhân, tương ứng với năng lượng ΔE . Chính năng lượng này làm tăng thêm một khối lượng:

$$\Delta m = \frac{\Delta E}{c^2} \quad (\text{VII.4})$$

Như vậy từ giá trị độ hụt khối ta có thể xác định được năng lượng cần thiết để phá vỡ hạt nhân, giá trị này ít nhất phải bằng năng lượng liên kết giữa các nuclon nhưng trái dấu. Chính vì vậy năng lượng này được gọi là năng lượng liên kết hạt nhân.

$$\Delta W = -\Delta E = -\Delta mc^2 \quad (\text{VII.5})$$

Nếu một hạt nhân có Z proton và số khối là A thì công thức tính độ hụt khối là:

$$\Delta m = Zm_p + (A - Z)m_n - M_{hn}$$

Trong đó M_{hn} là khối lượng tính của hạt nhân có nguyên tử số Z .

Thông thường, bằng thực nghiệm ta không thể đo được trực tiếp khối lượng hạt nhân (vì ta không thể Ion hoá hoàn toàn nguyên tử - chẳng hạn nguyên tử Oxy ta phải Ion hoá hết cả 8 electron ở lớp vỏ ngoài mới thành hạt nhân Oxy). Chính vì lý do này ta dùng công thức tính độ hụt khối như sau:

$$\Delta m = Zm_p + Zm_e + (A - Z)m_n - M_{hn} - Zm_e = Zm_H + (A - Z)m_n - M_{nt} \quad (\text{VII.6})$$

Trong đó m_H là khối lượng nguyên tử hydro; M_{nt} là khối lượng nguyên tử có nguyên tử số Z .
Như vậy công thức tính năng lượng liên kết sẽ là:

$$\Delta W = -[Zm_H + (A - Z)m_n - M_{nt}].c^2 \quad (\text{VII.7})$$

Ta biết 1 đơn vị khối lượng nguyên tử tương đương với một năng lượng là:

$$E_o = 1,66.10^{-27} \left(\frac{kg}{u} \right) \cdot (3.10^8)^2 \left(\frac{m}{s^2} \right)^2 = 1,494.10^{-10} \left(\frac{J}{u} \right) = 931,48 \left(\frac{MeV}{u} \right) \quad (\text{VII.8})$$

Vậy khi dùng đơn vị khối lượng nguyên tử thì công thức tính năng lượng liên kết là:

$$\Delta W(MeV) = -931,48.\Delta m(u) \quad (\text{VII.9})$$

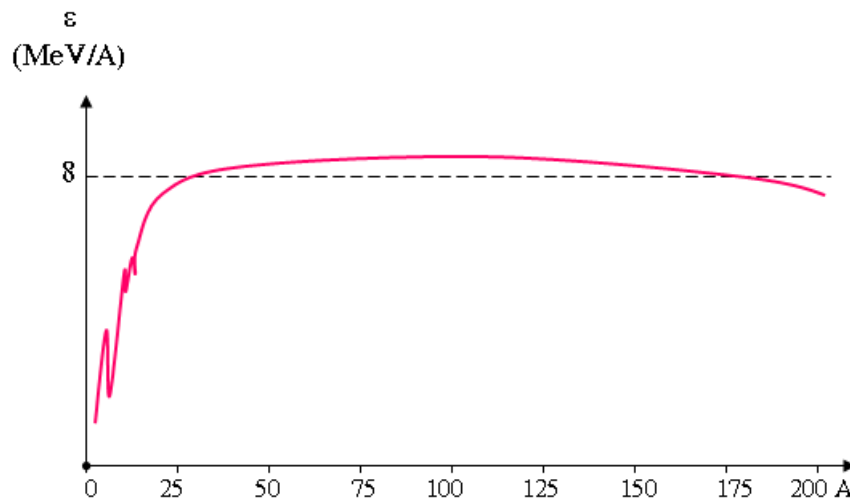
2.3 Năng lượng liên kết riêng

Dựa vào năng lượng liên kết hạt nhân ta có thể đánh giá được sự bền vững của hạt nhân. Giá trị tuyệt đối của năng lượng liên kết hạt nhân càng lớn thì hạt nhân đó càng bền. Tuy nhiên giá trị

năng lượng liên kết hạt nhân phụ thuộc vào số nuclon trong hạt nhân vì độ hụt khối hạt nhân phụ thuộc vào số nuclon. Như vậy nếu dùng năng lượng liên kết hạt nhân để so sánh sự bền vững thì không hoàn toàn chính xác: một hạt nhân nhiều nuclon có giá trị năng lượng liên kết lớn chưa hẳn đã bền hơn một hạt nhân ít nuclon có năng lượng liên kết nhỏ hơn. Từ đó người ta đưa ra khái niệm ***năng lượng liên kết riêng***, là năng lượng liên kết trung bình của một nuclon. Công thức tính năng lượng liên kết riêng là:

$$\varepsilon = \frac{\Delta W}{A} \left(\frac{\text{MeV}}{\text{nuclon}} \right) \quad (\text{VII.10})$$

Hạt nhân có giá trị năng lượng liên kết riêng càng lớn thì càng bền vững. Thực nghiệm cho thấy những hạt nhân có số khối bé ($A < 20$) hoặc có số khối lớn ($A > 200$) thì kém bền vững hơn, còn những hạt nhân trung bình ở giữa thì rất bền. Đồ thị năng lượng liên kết riêng của các hạt nhân như hình vẽ (VII.1).



Hình VII.1: Đồ thị năng lượng liên kết riêng của hạt nhân

§3 CÁC ĐẶC TÍNH CỦA LỰC HẠT NHÂN

3.1 Các đặc tính của lực hạt nhân

Ta biết hầu hết các hạt nhân trong tự nhiên đều liên kết bền vững. Điều này có nghĩa là giữa các nuclon trong hạt nhân phải tồn tại một loại lực mạnh hơn nhiều so với lực tĩnh điện để chế ngự lực đẩy Coulomb giữa các proton. Lực này được gọi là lực hạt nhân, thuộc loại tương tác mạnh. Hiện nay hiểu biết của khoa học về lực hạt nhân chưa thực sự thấu đáo, tuy nhiên người ta xác định được lực hạt nhân có những đặc tính cơ bản sau:

3.1.1. Lực hạt nhân không phụ thuộc điện tích của nuclon

Thực nghiệm cho thấy lực tương tác hạt nhân giữa các cặp nuclon là hoàn toàn tương đương nhau, nghĩa là các cặp tương tác $p - p$; $p - n$; $n - n$ là giống nhau, mặc dù có hạt mang điện, có hạt không mang điện và khối lượng của chúng cũng không hoàn toàn bằng nhau. Điều này chứng tỏ lực hạt nhân có bản chất khác với lực điện từ hay lực hấp dẫn. Cũng chính vì lý do này người ta gọi chung các hạt proton và neutron là hạt nuclon.

3.1.2. Lực hạt nhân có tính chất bão hoà

Thực nghiệm cho thấy mỗi nuclon chỉ tương tác với một số nuclon xác định khác chứ không phải tương tác với mọi nuclon khác ở gần nó trong hạt nhân. Đây là một đặc điểm hoàn toàn khác biệt so với tương tác điện từ hay tương tác hấp dẫn. Tính chất này được gọi là tính chất tác dụng bão hoà. Điều này đã được thực nghiệm xác nhận thông qua việc xác định năng lượng liên kết: nếu nuclon tác dụng với mọi nuclon khác trong hạt nhân thì năng lượng liên kết phải tỷ lệ với A^2 , nhưng thực nghiệm đo được năng lượng liên kết chỉ tỷ lệ với A .

3.1.3. Lực hạt nhân chỉ tác dụng ở khoảng cách bé

Thực nghiệm cho thấy, bán kính tác dụng của lực hạt nhân là vô cùng bé, cỡ kích thước hạt nhân (khoảng 1 fecmi tức $10^{-15}m$). Nếu khoảng cách giữa các nuclon tăng lên hơn kích thước này thì lực hạt nhân gần như không còn phát huy tác dụng, khi đó lực điện từ trở nên chiếm ưu thế.

3.1.4. Hạt lượng tử tương tác hạt nhân

Cơ chế tương tác hạt nhân thông qua sự trao đổi hạt trung gian gọi là hạt pion. Hay nói cách khác lượng tử của trường hạt nhân là hạt pion. Ta hình dung rằng để có thể tương tác với nhau, các nuclon luôn luôn truyền cho nhau và hấp thụ các hạt pion của nhau. Hạt pion kí hiệu là π . Có tất cả ba loại hạt pion, trong đó có hai hạt mang điện gọi là pion khác dấu, kí hiệu là π^\pm và một hạt không mang điện gọi là pion trung hoà, kí hiệu là π^0 . Các hạt pion có các đặc trưng như sau: Khối lượng:

$$m_{\pi^\pm} = 273, 2m_e; \quad m_{\pi^0} = 264, 2m_e$$

Điện tích:

$$q_{\pi^+} = +e; \quad q_{\pi^-} = -e$$

Thời gian sống trung bình:

$$\tau_{\pi^\pm} = 2, 5.10^{-8}s; \quad \tau_{\pi^0} = 1, 9.10^{-16}s$$

Trong đó m_e là khối lượng electron, e là điện tích electron.

Các hạt pion đều có spin bằng không, nghĩa là chúng là các hạt bozon.

§4 KÍCH THƯỚC HẠT NHÂN

4.1 Công thức tính bán kính hạt nhân

Ta biết hạt nhân có kích thước vô cùng bé, nhưng vẫn có giá trị hữu hạn xác định. Ta có nhiều phương pháp để xác định được kích thước của hạt nhân. Một trong những phương pháp đó là đo khoảng nhằm trong thí nghiệm bắn phá hạt nhân mà Rutherford đã thực hiện. Ngoài ra ta có thể dùng phương pháp bắn thẳng hạt neutron vào hạt nhân, vì hạt neutron không mang điện nên nó chỉ bị tán xạ khi gặp hạt nhân. Tổng kết các thí nghiệm người ta thấy bán kính hạt nhân phụ thuộc vào nguyên tử khối theo công thức:

$$R = R_o \sqrt[3]{A} \quad (\text{VII.11})$$

trong đó $R_o \approx 1,4 \text{ fecmi}$. Công thức này thường được gọi là công thức mũ $\frac{1}{3}$. Công thức này cho thấy với những hạt nhân nặng có số khối $A > 200$ thì bán kính cũng không lớn hơn 10 fecmi .

4.2 Một số hệ quả

4.2.1. Thể tích hạt nhân bằng thể tích 1 nuclon \times số nuclon

Từ công thức tính bán kính hạt nhân (công thức số mũ $\frac{1}{3}$) ta lấy lập phương hai vế rồi nhân với $\frac{4\pi}{3}$ ta được:

$$\frac{4\pi R^3}{3} = \frac{4\pi R_o^3}{3} A$$

Ta thấy ngay thể số hạng bên trái chính là thể tích hạt nhân, còn thừa số $\frac{4\pi R_o^3}{3}$ chính là thể tích một nuclon. Như vậy: thể tích hạt nhân bằng thể tích 1 nuclon \times số nuclon.

4.2.2. Mật độ vật chất trong mọi hạt nhân là như nhau

Vì hạt nhân có nuclon càng lớn thì có kích thước càng lớn, thể tích này bằng tổng thể tích của các nuclon tạo nên hạt nhân nên cho phép suy ra mọi hạt nhân, dù nhẹ hay nặng, đều có cùng mật độ vật chất (khối lượng riêng). Ta dễ dàng tính được mật độ vật chất trong hạt nhân:

$$\rho = \frac{m_n}{V_n} = \frac{3.m_n}{4.\pi R_o^3} = \frac{3.1,6748.10^{-27}}{4.\pi.1,4^3.10^{-45}} \approx 1,5.10^{17}(kg/m^3) \quad (VII.12)$$

Khối lượng riêng này là cực kì lớn. Ta hãy tưởng tượng nếu nén Trái đất đến khối lượng riêng như trong hạt nhân thì bán kính Trái đất sẽ là:

$$R = \sqrt[3]{\frac{3.M}{4.\pi.\rho}} = \sqrt[3]{\frac{3.5,98.10^{24}}{4.\pi.1,5.10^{17}}} \approx 212m \quad (VII.13)$$

Trong khi đó bán kính Trái đất là 6370000m.

§5 ĐẠI CƯƠNG VỀ CÁC MẪU HẠT NHÂN

Cơ học lượng tử đã giải quyết khá thành công mẫu nguyên tử, vì bản chất tương tác trong nguyên tử là tương tác tĩnh điện - là loại tương tác đơn giản mà ta đã biết khá rõ. Nhưng đối với hạt nhân thì vấn đề phức tạp hơn rất nhiều vì tương tác hạt nhân là loại tương tác hết sức đặc biệt mà hiện nay khoa học cũng hiểu nó chưa thật căn kẽ. Đã có nhiều mẫu hạt nhân khác nhau được đưa ra nhưng chưa có một mẫu nào cho phép giải thích được mọi hiện tượng xảy ra với hạt nhân. Mỗi mẫu chỉ cho phép giải thích được một số hiện tượng. Hiện nay người ta quan tâm đến hai mẫu hạt nhân là mẫu giọt và mẫu lớp.

5.1 Mẫu giọt hạt nhân

Một số tính chất của hạt nhân tương tự như tính chất của một giọt chất lỏng. Chính vì lý do này các nhà khoa học đã đưa ra mẫu giọt hạt nhân. Chẳng hạn giọt chất lỏng có dạng hình cầu thì hạt nhân cũng có dạng cầu. Trong giọt chất lỏng, các phân tử chịu tác dụng của lực phân tử ở khoảng cách gần và nó cũng chỉ tác dụng với một số phân tử các gần nó (tính tác dụng bão hoà). Điều này cũng tương tự các nuclon trong hạt nhân nếu thay thế phân tử bằng nuclon và lực tương tác phân tử bằng lực hạt nhân. Như vậy mẫu giọt hạt nhân tương tự như mẫu giọt chất lỏng. Các nuclon cũng chuyển động hỗn loạn như các phân tử chất lỏng. Khi va chạm, các nuclon trao đổi năng lượng và xung lượng cho nhau, tuy nhiên lực liên kết giữa chúng, tức là lực hạt nhân giữ chúng lại bên nhau.

Khi hạt nhân nhận được năng lượng thì nó sẽ chuyển sang trạng thái kích thích. Khi đó các nuclon sẽ dao động mạnh. Các nuclon sẽ va chạm với nhau mạnh hơn, trao đổi năng lượng xung lượng cho nhau. Có thể xảy ra trường hợp có một số nuclon ở trên bề mặt hạt nhân thu được năng lượng

lớn hơn năng lượng liên kết của hạt nhân thì chúng có thể bức xạ khỏi hạt nhân. Như vậy sự bức xạ hạt nhân cũng tương tự như sự bốc hơi của giọt chất lỏng. Tuy nhiên điểm khác biệt ở đây là, hạt nhân có thể bức xạ gamma để chuyển từ trạng thái kích thích về trạng thái cơ bản trong khi giọt chất lỏng thì không thể thực hiện được điều này.

Một tương tự cơ bản trong mẫu giọt hạt nhân và giọt chất lỏng là hiệu ứng thắt: Khi nhận được năng lượng giọt chất lỏng dao động mạnh, kết quả là hình dạng của nó bị kéo dài ra, ban đầu là hình bầu dục, sau đó là hình quả tạ. Nếu năng lượng đủ lớn thì hiệu ứng thắt tăng dần và có thể tách giọt chất lỏng thành hai hay nhiều giọt riêng biệt. Mẫu giọt hạt nhân cũng có tính chất này.

Thể tích của giọt hạt nhân chứa đầy các nuclon cũng tương tự như thể tích chất lỏng chứa đầy các phân tử chất lỏng vậy. Mẫu giọt hạt nhân có thể dùng giải thích khá trọn vẹn hiện tượng phân hạch nói riêng hay phản ứng hạt nhân nói chung mà ta sẽ khảo sát kĩ ở chương sau. Tuy nhiên mẫu này lại không thích hợp cho việc giải thích cấu trúc hạt nhân, chẳng hạn vì sao mỗi hạt nhân chỉ có số nuclon xác định.

5.2 Mẫu lớp hạt nhân

Mẫu lớp được xây dựng dựa trên tính chất bền vững của hạt nhân tuân theo dãy số Magic. Các hạt nhân Magic lặp lại tuần hoàn với các số Magic của proton: 2, 8, 20, 50 và 82 và các số Magic của neutron 2, 8, 20, 50, 82 và 126. Nghiên cứu tính chất hoá học của các nguyên tố và tính chất của hạt nhân, người ta thấy: tính chất hoá học của nguyên tố thì lặp lại tuần hoàn theo nguyên tử số Z , còn tính chất Magic của hạt nhân thì lại tuần hoàn theo giá trị nguyên tử khối A .

Sự lặp lại Magic tuần hoàn như vậy dẫn tới ý tưởng thành lập mẫu lớp. Theo mẫu lớp, các nuclon trong hạt nhân sắp xếp theo từng lớp. Mỗi lớp chứa một số nuclon xác định và các nuclon này tuân theo nguyên lý loại trừ Pauli. Số nuclon lấp đầy các lớp theo thứ tự từ trong ra ngoài, nghĩa là sau khi lấp đầy lớp trong cùng mới chuyển sang lớp thứ hai, thứ ba, ...

Hạt nhân bị lấp đầy đầu tiên là hạt nhân Heli có 4 nuclon (gồm hai proton và hai neutron). Lớp thứ hai lấp đầy cho ta hạt nhân Neon có 20 nuclon (gồm 10 neutron và 10 proton), ...

Theo quan điểm của mẫu lớp, mỗi nuclon chuyển động trong trường lực hạt nhân tạo bởi các nuclon còn lại giống như electron trong nguyên tử chuyển động trong trường tạo bởi hạt nhân và các electron khác. Khi nhận được năng lượng và bị kích thích, một số nuclon chuyển lên mức năng lượng kích thích. Sau đó chúng có thể giải phóng ra tia gamma để chuyển về trạng thái cơ bản ban đầu.

Chương VIII

HIỆN TƯỢNG PHÓNG XẠ

§1 ĐỊNH LUẬT PHÓNG XẠ - HỌ PHÓNG XẠ

1.1 Đại cương về phóng xạ

Hiện tượng hạt nhân tự động phóng ra những "hạt" mà mắt thường không nhìn thấy và biến đổi thành một hạt nhân mới được gọi là hiện tượng phóng xạ.

Hiện tượng phóng xạ tự nhiên được phát hiện khá sớm, trước cả khi khám phá ra hạt nhân nguyên tử. Năm 1896, nhà bác học Pháp Henri Becquerel tình cờ đã quan sát được hiện tượng phóng xạ của hạt nhân Urani. Sau đó rất nhiều nhà khoa học quan tâm đến việc nghiên cứu phóng xạ. Thành công nhất trong số đó phải kể đến Vợ chồng Pierre - Marie Curie và Ernest Rutherford,...

Đặc điểm căn bản của hiện tượng phóng xạ là không phụ thuộc vào điều kiện bên ngoài như nhiệt độ, áp suất,...

Bằng thí nghiệm Rutherford chứng minh được có 3 loại phóng xạ:

1.1.1. Phóng xạ anpha (α)

Bản chất của hạt anpha là hạt nhân Heli (${}^4_2\text{He}$). Hạt anpha bị lệch trong điện từ trường do có mang điện. Nó bị môi trường hấp thụ mạnh nên khả năng đâm xuyên yếu. Trong không khí hạt anpha đâm xuyên khoảng vài dm.

1.1.2. Phóng xạ beta (β)

Có hai loại hạt phóng xạ beta là hạt β^- và hạt β^+ .

Bản chất hạt β^- là hạt electron. Hạt β^- có khả năng đâm xuyên mạnh hơn hạt α rất nhiều. Có nhiều hạt nhân phóng xạ β^- như hạt nhân ${}^{14}_6\text{C}$, ${}^{210}_{82}\text{Pb}$, ${}^{214}_{83}\text{Bi}$,...

Bản chất hạt β^+ là phản electron hay pozitron. Hạt pozitron mang điện tích dương có giá trị bằng giá trị điện tích của electron. Nhiều hạt nhân phóng xạ β^- , chẳng hạn hạt nhân ${}^{11}_6\text{C}$, ${}^{30}_{15}\text{P}$,...

1.1.3. Phóng xạ gamma (γ)

Bản chất hạt gamma là photon năng lượng cao, tia gamma không mang điện nên không bị lệch hướng trong điện từ trường. Tia gamma là photon có năng lượng cao, được sinh ra do hạt nhân chuyển từ trạng thái kích thích về trạng thái năng lượng thấp hơn. Như vậy, khi phóng xạ gamma thì không sinh ra hạt nhân mới mà chỉ thay đổi trạng thái của cùng một hạt nhân.

Sau này người ta còn tìm ra một loại phóng xạ khác gọi là phóng xạ bắt K . Hiện tượng khi hạt nhân hấp thụ một electron ở các lớp trong nguyên tử (thường là lớp trong cùng tức là lớp K) để biến thành một hạt nhân khác được gọi là phóng xạ bắt K . Trong phóng xạ bắt K không có hạt nào bay ra khỏi nguyên tử mà chỉ có sự trao đổi electron giữa hạt nhân và lớp vỏ nguyên tử.

1.2 Định luật phóng xạ

1.2.1. Định luật phóng xạ

Khi có hiện tượng phóng xạ, tức là hạt nhân đã phân rã biến đổi thành một hạt nhân khác, kèm theo là phát ra tia phóng xạ. Mọi hạt nhân phân rã, dù khác nhau loại tia phóng xạ hoặc tốc độ phân rã, đều tuân theo một định luật, gọi là định luật phóng xạ.

Một đặc tính quan trọng của phóng xạ là: mọi hạt nhân phóng xạ đều có xác suất phóng xạ không chịu ảnh hưởng của điều kiện của môi trường bên ngoài như điện trường, từ trường, nhiệt độ, áp suất, ... Ngoài ra xác suất phân rã của mọi hạt cùng loại là như nhau. Ta không có cách nào biết trước được thời điểm chính xác nào đó là hạt nhân cụ thể nào đó sẽ phân rã vì quá trình phân rã của một hạt nhân xảy ra là hoàn toàn tự phát và ngẫu nhiên. Ta chỉ có thể nói được xác suất P để một hạt nhân phân rã trong khoảng thời gian vô cùng nhỏ dt thì tỷ lệ trực tiếp với khoảng thời gian đó. Như vậy ta có thể viết $P \sim dt$, hay:

$$P = \lambda dt \quad (\text{VIII.1})$$

Trong đó λ là một hằng số tỷ lệ phụ thuộc vào bản chất của chất phóng xạ, được gọi là hằng số phân rã hay hằng số phóng xạ.

Nếu ta nhân xác suất trên với N hạt nhân có khả năng phân rã có mặt ở thời điểm t lúc đó thì ta có thể tìm được số hạt nhân phân rã dN trong thời gian từ t đến $t + dt$ là:

$$dN = -\lambda N dt \quad (\text{VIII.2})$$

Dấu trừ (-) ta đưa vào để chỉ rằng, do phóng xạ, số hạt nhân phóng xạ bị giảm.

Lấy tích phân ta được:

$$\int_{N_o}^{N_t} \frac{dN}{N} = - \int_0^t \lambda dt$$

$$\ln \frac{N_t}{N_o} = -\lambda t \quad \Rightarrow \quad N = N_o e^{-\lambda t} \quad (\text{VIII.3})$$

Biểu thức (VIII.3) chính là biểu thức định luật phóng xạ. Ta có thể phát biểu như sau:

Số hạt nhân phóng xạ giảm dần theo thời gian theo quy luật hàm số mũ.

Giá trị của hằng số phân rã λ đặc trưng cho tốc độ phân rã của hạt nhân: hằng số phóng xạ càng lớn thì tốc độ phân rã của hạt nhân càng nhanh. Các hạt nhân phóng xạ khác loại thì có hằng số phân rã khác nhau. Ngoài hằng số phân rã người ta còn dùng chu kỳ bán rã T , là khoảng thời gian để một nửa hạt nhân phóng xạ bị phân rã biến đổi thành hạt nhân mới.

Từ định nghĩa ta có: $N_T = \frac{N_o}{2}$ nên ta có:

$$e^{-\lambda T} = \frac{1}{2} \quad \Rightarrow \quad T = \frac{\ln 2}{\lambda} = \frac{0,693}{\lambda} \quad (\text{VIII.4})$$

1.2.2. Thời gian sống trung bình

Thời gian tồn tại trung bình của một hạt nhân không bền được gọi là thời gian sống trung bình của hạt nhân.

Ta có thể tính thời gian sống trung bình của loại hạt nhân phóng xạ như sau: Giả sử trong khoảng thời gian t đến $t + dt$ đã có dN hạt nhân phân rã thì $dN = -\lambda N_o e^{-\lambda t} dt$. Thời gian sống trung bình của một hạt chính là tổng thời gian sống của tất cả các hạt chia cho số hạt kể từ thời điểm ban đầu nên ta có:

$$\tau = \frac{\int_0^\infty t dN}{N_o} = \frac{1}{N_o} \int_0^\infty t N_o \lambda e^{-\lambda t} dt = \lambda \int_0^\infty e^{-\lambda t} t dt = \frac{1}{\lambda} = \frac{T}{\ln 2} \quad (\text{VIII.5})$$

1.2.3. Hoạt độ phóng xạ

Các nguồn phóng xạ khác nhau thì có khả năng phóng xạ khác nhau. Để so sánh khả năng phóng xạ của các nguồn, người ta dùng hoạt độ phóng xạ được định nghĩa là số hạt nhân phân rã của nguồn trong một đơn vị thời gian. Theo định nghĩa này ta có:

$$H = -\frac{dN}{dt} = \lambda N_0 e^{-\lambda t} = H_0 e^{-\lambda t} = \lambda N \quad (\text{VIII.6})$$

Đơn vị của hoạt độ phóng xạ là Becquerel (Bq) hay phân rã/giây. Ngoài ra ta còn dùng đơn vị Curi (Ci): $1\text{Ci} = 3,7 \cdot 10^{10} \text{Bq}$

1.2.4. Quy tắc dịch chuyển

Cũng giống như nhiều hiện tượng vật lý khác, hiện tượng phóng xạ cũng tuân theo các định luật chung nhất của vật lý, đó là các định luật bảo toàn năng lượng, bảo toàn xung lượng, bảo toàn mômen xung lượng, định luật bảo toàn điện tích, định luật bảo toàn nuclon, định luật bảo toàn spin, định luật bảo toàn tính chẵn lẻ,...

Trong phóng xạ hạt nhân, thông thường một hạt nhân phân rã thành một hạt nhân mới kèm theo một hạt nhẹ bay ra. Hạt nhân ban đầu thường được gọi là hạt nhân mẹ, hạt nhân mới sinh ra được gọi là hạt nhân con. Để có thể xác định được các hạt sinh ra trong phóng xạ nói riêng, trong phản ứng hạt nhân nói chung, ta thường áp dụng các định luật bảo toàn. Quy tắc áp dụng các định luật bảo toàn để xác định các hạt nhân mới sinh ra trong phản ứng hạt nhân được gọi là quy tắc dịch chuyển. Ta áp dụng quy tắc dịch chuyển cho các loại phóng xạ như sau:

Phân rã anpha

Hạt anpha thực chất là hạt nhân Heli (${}^4_2\text{He}$) do đó nếu hạt nhân mẹ kí hiệu là ${}^A_Z X$ sẽ phân rã hạt α thành hạt nhân Y theo quy tắc:



Ta thấy hạt nhân mới sinh ra có điện tích giảm đi 2 đơn vị và số khối giảm đi 4 đơn vị. Hạt nhân con là hạt nhân đứng trước hạt nhân mẹ 2 ô vị trí trong bảng hệ thống tuần hoàn Mendeleev. Chính vì lý do này người ta gọi đây là quy tắc dịch chuyển: có sự dịch chuyển vị trí của hạt nhân trong bảng hệ thống tuần hoàn.

Phân rã β

Phân rã β^- là tạo thành hạt electron nên ta có thể viết quy tắc dịch chuyển:



Trong phóng xạ β^- , hạt nhân con lùi lại sau hạt nhân mẹ một ô vị trí trong bảng hệ thống tuần hoàn Mendeleev và hạt nhân con đồng khối với hạt nhân mẹ.

Ngoài phóng xạ β^- , trong phóng xạ nhân tạo người ta còn tìm thấy phóng xạ β^+ . Hạt phóng ra trong phóng xạ β^+ là hạt pozitron. Quy tắc dịch chuyển của phóng xạ β^+ là:



Trong phóng xạ β^+ hạt nhân mẹ biến thành một hạt nhân con dịch chuyển về phía trước một ô vị trí trong bảng hệ thống tuần hoàn Mendeleev và hạt nhân con cũng là hạt nhân đồng khối với hạt nhân mẹ.

Phân rã γ

Phóng xạ gamma thực chất là bức xạ ra sóng điện từ có bước sóng cực ngắn, ứng với photon có năng lượng vào bậc MeV . Cơ chế phóng xạ gamma được giải thích như sau: khi hạt nhân ở trạng thái kích thích chuyển về trạng thái có mức năng lượng thấp hơn, nó sẽ giải phóng năng lượng kích thích bằng cách phát ra tia gamma. Vì photon là hạt không có khối lượng tĩnh và cũng không mang điện nên quỹ tắc dịch chuyển của phóng xạ γ là:

**1.3 Họ phóng xạ**

Trong thực tế ta gặp nhiều trường hợp, có một hạt nhân không bền bị phóng xạ tạo thành một hạt nhân mới, hạt nhân mới được tạo thành cũng không bền tiếp tục phóng xạ cho đến hạt nhân bền cuối cùng. Như vậy tạo thành một chuỗi hạt nhân phóng xạ. Tập hợp những hạt nhân, từ hạt nhân không bền đầu tiên cho đến hạt nhân bền cuối cùng trong chuỗi đó được gọi là họ phóng xạ.

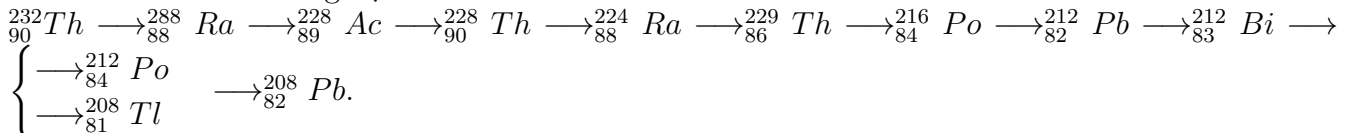
Để giải thích sự hình thành họ phóng xạ tự nhiên, các nhà khoa học cho rằng: có một sự cố vũ trụ đã xảy ra cách đây khoảng 10 tỷ (10^{10}) năm, vào lúc hình thành vũ trụ, trong đó mọi hạt nhân bền và không bền được tạo thành với một lượng khác nhau. Các hạt nhân không bền có chu kỳ bán rã bé so với khoảng thời gian hình thành vũ trụ đã phân rã hết từ lâu và trở thành hạt nhân bền. Những hạt nhân có thời gian sống trung bình hay chu kỳ bán rã bằng hoặc lớn hơn tuổi vũ trụ chưa phân rã hết nên còn tìm thấy một lượng đáng kể trong tự nhiên. Đó là trường hợp của ba hạt nhân cực nặng, đứng đầu ba họ phóng xạ tự nhiên, chúng phóng xạ, phân rã thành các hạt nhân con, các hạt nhân con này lại tiếp tục phóng xạ qua nhiều thế hệ và sẽ kết thúc ở một hạt nhân bền.

Ba họ phóng xạ tự nhiên lấy tên ba hạt nhân đầu họ là Thori (${}_{90}^{232}Th$); Urani (${}_{92}^{238}U$) và Actini (${}_{92}^{235}U$). Cả ba họ này đều kết thúc ở đồng vị bền của chì tương ứng là ${}_{82}^{208}Pb$; ${}_{82}^{207}Pb$; ${}_{82}^{206}Pb$.

Nghiên cứu các họ phóng xạ cho thấy số khối của các thành viên trong họ chỉ thay đổi do sự phóng xạ anpha, mỗi lần phóng xạ anpha số khối bị giảm đi 4 đơn vị. Như vậy có thể khẳng định của các hạt nhân trong cùng một họ phải thỏa mãn hệ thức: $A = 4n + C$; trong đó n và C là những số nguyên. Dễ dàng nghiệm lại thấy được họ Thori có $C = 0$; họ Urani có $C = 2$; họ Actini có $C = 3$. Như vậy còn có một họ phóng xạ có $C = 1$ không tìm thấy trong tự nhiên. Từ lập luận đó người ta khẳng định có một họ phóng xạ đã bị "tuyệt chủng" do chu kỳ bán rã quá bé so với tuổi vũ trụ. Ngày nay người ta đã tạo ra các thành phần của họ này từ các phản ứng hạt nhân nhân tạo và gọi là họ Nepturi có hạt nhân đầu họ là hạt nhân Nepturi (${}_{93}^{237}Np$). Như vậy có tất cả bốn họ phóng xạ, nhưng trong tự nhiên chỉ còn tồn tại ba họ mà thôi. Các thông số cơ bản của các họ là:

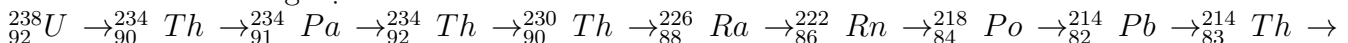
Họ Phóng xạ	HN đầu họ	T(năm)	C	$n_1 \leq n \leq n_2$	$A=4n+C$	Số hạt	Hạt nhân bền
Thori	${}_{90}^{232}Th$	$1,41.10^{10}$	0	$52 \leq n \leq 58$	$4n$	12	${}_{82}^{208}Pb$
Nepturi	${}_{93}^{237}Np$	$2,14.10^6$	1	$52 \leq n \leq 59$	$4n+1$	13	${}_{82}^{209}Pb$
Urani	${}_{92}^{238}U$	$4,51.10^9$	2	$51 \leq n \leq 59$	$4n+2$	16	${}_{82}^{206}Pb$
Actini	${}_{92}^{235}U$	$7,07.10^8$	3	$51 \leq n \leq 58$	$4n+3$	15	${}_{82}^{207}Pb$

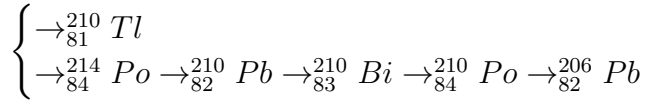
Các thành viên trong họ Thori là:



Trong họ Thori có tất cả 7 lần phóng xạ anpha và 4 lần phóng xạ β^- .

Các thành viên trong họ Urani là:





Các chất phóng xạ trong tự nhiên cho thấy có một khoảng cách cực lớn giữa các chu kỳ bán rã, từ Thori 232 có chu kỳ vô cùng lớn $T = 1,41.10^{10}$ năm tới Pôlôni có chu kỳ bán rã rất bé $T = 4.10^{-6}$ giây.

Để có thể đo được những chu kỳ quá lớn hay quá bé như vậy ta phải dùng phương pháp đo gián tiếp như sau:

Trường hợp chu kỳ lớn

Từ công thức tính hoạt độ phóng xạ: $H = \lambda.N$ ta thấy nếu biết hoạt độ phóng xạ H và số hạt nhân phóng xạ N thì ta có thể tính được hằng số phóng xạ λ .

Do chu kỳ T lớn nên nếu quan sát mẫu phóng xạ trong một khoảng thời gian t bé thì ta luôn luôn có $\lambda t \ll 1$. Khi đó $e^{-\lambda t} \approx 1 \Rightarrow N \approx N_0$. Điều này có nghĩa là do hạt phân rã chậm nên số hạt phóng xạ gần như không thay đổi theo thời gian.

Chẳng hạn, để tính chu kỳ bán rã của $U238$ ta có thể sử dụng một mẫu phóng xạ $U238$ khối lượng là $1mmg$. Quan sát trong 1 phút ta đếm được 740 phân rã. Như vậy hoạt độ phóng xạ của mẫu là $H = \frac{740}{60}(s^{-1})$. Ta tính được số hạt nhân $U238$ trong $1mmg$ mẫu là:

$$N = \frac{m.N_A}{A} = \frac{10^{-6}.6,02.10^{26}}{238} = 5,529.10^{18}(\text{hạt nhân}); \quad N_A \text{ là số Avôgadrô}$$

Hằng số phân rã là:

$$\lambda = \frac{H}{N} = \frac{740}{60.2,529.10^{18}} = 4,877.10^{-18}(s^{-1})$$

Chu kỳ bán rã:

$$T = \frac{\ln 2}{\lambda} = \frac{\ln 2}{4,877.10^{-18}} = 1,421.10^{17}(s) = 4,51.10^9(\text{năm})$$

Trường hợp chu kỳ bán rã cực ngắn

Bây giờ ta hãy xét trường hợp xác định chu kỳ bán rã của các thành viên sống cực ngắn của họ phóng xạ.

Vì các thành viên đầu họ phóng xạ có thời gian sống rất dài, nên sau khoảng thời gian đủ lớn, mọi thành phần của họ phóng xạ cùng tồn tại. Ta xét một hạt nhân thành phần A trong họ, khi A phân rã thì tạo thành hạt nhân B . Điều dễ hiểu là hạt nhân A phải phân rã nhanh hơn hạt nhân nếu chu kỳ bán rã của hạt nhân A nhỏ hơn chu kỳ bán rã của hạt nhân B . Khi thời gian đủ lớn thì hoạt độ phóng xạ của hạt nhân A không thể tiếp tục lớn hơn hoạt độ phóng xạ của hạt nhân B vì sự tồn tại của hạt nhân B phụ thuộc trực tiếp vào hoạt độ phóng xạ của hạt nhân A là hạt nhân mẹ sinh ra nó. Ta lí luận tương tự cho hạt nhân C do hạt nhân B phân rã tạo thành và có chu kỳ bán rã bé hơn chu kỳ bán rã của hạt nhân B, \dots Như vậy, sau một khoảng thời gian đủ lớn, hiện tượng cân bằng phóng xạ sẽ được thiết lập, khi đó hoạt độ phóng xạ của tất cả các thành phần phóng xạ của họ đều bằng nhau. Lúc đó cứ một hạt nhân của một thành phần nào đó được sinh ra thì một hạt nhân khác của chính thành phần này phân rã thành hạt nhân con: mỗi hạt nhân phân rã với cùng một tốc độ mà nó được tạo thành. Khi đó ta có thể viết:

$$\lambda_A N_A = \lambda_B N_B = \lambda_C N_C = \dots$$

Hay

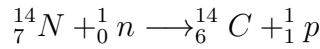
$$\frac{N_A}{T_A} = \frac{N_B}{T_B} = \frac{N_C}{T_C} = \dots \quad (\text{VIII.11})$$

Trong một họ phóng xạ, số hạt nhân của một thành phần bất kì thì tỷ lệ với chu kỳ bán rã của thành phần đó. Từ đó suy ra chu kỳ bán rã T_2 của một hạt nhân sống cực ngắn cân bằng với hạt nhân sống rất dài cùng họ có chu kỳ bán rã T_1 sẽ được tính theo công thức:

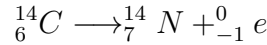
$$T_2 = \frac{N_2}{N_1} T_1$$

Trong đó N_1 , N_2 là số hạt nhân tương ứng của các thành phần có chu kỳ bán rã T_1 và T_2 của họ phóng xạ. Như vậy trong một họ phóng xạ, các hạt nhân sống lâu sẽ có nhiều còn các hạt nhân sống ngắn sẽ có ít. Dựa vào kết luận này ta có thể tính được chu kỳ bán rã của hạt nhân có chu kỳ bán rã cực ngắn dựa vào việc xác định hàm lượng hạt nhân phóng xạ trong họ. Điều này được thực hiện thuận lợi nhờ phân tích thành phần mẫu phóng xạ.

Cuối cùng chúng ta cần xác định lại, ngoài 3 họ phóng xạ ta tìm thấy trong tự nhiên và một họ phóng xạ đã được tái tạo lại trong phòng thí nghiệm, trong thiên nhiên còn tồn tại một số chất phóng xạ không thuộc một họ phóng xạ nào. Những chất phóng xạ này được sản sinh liên tục trong các va chạm của các tia vũ trụ năng lượng cực lớn với các hạt nhân trong khí quyển bao quanh trái đất. Chẳng hạn sự tạo thành đồng vị phóng xạ cacbon ($^{14}_6C$) do sự va chạm của neutron với hạt nhân Nitơ ($^{14}_7N$) có trong khí quyển theo phản ứng



Đồng vị phóng xạ ($^{14}_6C$) phân rã β^- với chu kỳ bán rã $T = 5740$ năm



Như vậy sẽ có một tỷ lệ nhỏ của các phân tử CO_2 trong không khí sẽ chứa các nguyên tử phóng xạ ($^{14}_6C$) trộn lẫn với cacbon bền ($^{12}_6C$). Các tổ chức sống của động vật, thực vật khi trao đổi CO_2 với môi trường xung quanh đã chứa cả hai loại phóng xạ và không phóng xạ trên trong cấu trúc của mình. Khi tổ chức động, thực vật này chết đi, sự hấp thụ ($^{14}_6C$) sẽ bị ngừng, nhưng quá trình phóng xạ vẫn tiếp tục xảy ra nên tỷ lệ $C14$ trong tổ chức đã chết sẽ giảm dần. Hiện tượng này cho ta một phương pháp xác định tuổi các di vật khảo cổ với độ chính xác cao.

§2 PHÂN RÃ ANPHA, BETA VÀ GAMMA

2.1 Phân rã anpha

Thực tế cho thấy, một số hạt nhân phóng xạ, đặc biệt là các hạt nhân nặng ($Z > 82$), thường xảy ra phân rã tự phát gồm một hạt nhân con và một hạt nhân nhẹ là hạt anpha (4_2He). Phương trình phóng xạ được viết theo quy tắc dịch chuyển như sau:



trong đó X là hạt nhân mẹ, Y là hạt nhân con.

Nếu hạt nhân mẹ trước khi phân rã ở trạng thái nghỉ (động năng bằng không) thì theo các định luật bảo toàn năng lượng và xung lượng ta có thể viết:

$$M_X c^2 = (M_Y + M_\alpha) c^2 + D_Y + D_\alpha \quad (\text{VIII.13})$$

$$M_\alpha v_\alpha = M_Y v_Y \quad (\text{VIII.14})$$

trong đó M là kí hiệu khối lượng tĩnh của các hạt nhân, D là động năng, v là vận tốc các hạt nhân. Có thể dùng các công thức phi tương đối tính cho động năng và xung lượng vì năng lượng

toả ra trong phóng xạ không quá 10MeV trong khi đó năng lượng tĩnh của hạt anpha rất lớn, khoảng 4GeV .

Các động năng D_Y , D_α là không thể âm, vì vậy các điều kiện sau đây phải được thoả mãn:

$$M_X > M_Y + M_\alpha \quad (\text{VIII.15})$$

Nếu bất đẳng thức trên không thoả mãn thì phóng xạ anpha không thể xảy ra.

Năng lượng toả ra trong phóng xạ được xác định theo công thức:

$$Q = D_Y + D_\alpha = (M_X - M_Y - M_\alpha)c^2 \quad (\text{VIII.16})$$

Trong phân rã anpha, có thể đo được động năng của hạt anpha bằng cách đo tầm xa của nó, hoặc bằng cách đo bán kính chính khúc của nó khi chuyển động trong từ trường, dưới tác dụng của lực Lorentz. Từ việc đo được động năng hạt anpha, ta có thể tính gần đúng năng lượng toả ra trong phân rã anpha như sau. Phương trình (VIII.14) được viết lại:

$$M_Y \left(\frac{M_Y v_Y^2}{2} \right) = M_\alpha \left(\frac{M_\alpha v_\alpha^2}{2} \right) \quad \text{hay} \quad M_Y D_Y = M_\alpha D_\alpha \quad (\text{VIII.17})$$

Khối lượng hạt nhân anpha có thể lấy gần đúng là $4\text{đvklnt}(u)$; khối lượng hạt nhân Y có thể lấy gần đúng là $(A - 4)\text{đvklnt}(u)$. Vậy ta có:

$$(A - 4)D_Y = 4D_\alpha$$

Mặt khác: $Q = D_Y + D_\alpha$ nên:

$$Q = \frac{A}{A - 4} D_\alpha \quad (\text{VIII.18})$$

Thực nghiệm cho thấy năng lượng Q toả ra trong phân rã là hoàn toàn xác định, như vậy công thức (VIII.18) cho thấy nếu ban đầu hạt nhân mẹ ở trạng thái nghỉ thì năng lượng hạt anpha sinh ra trong phân rã anpha có giá trị hoàn toàn xác định. Người ta nói rằng các hạt anpha sinh ra trong phân rã là đơn năng. Hơn nữa, $A \gg 4$ nên có thể coi $Q \approx D_\alpha$. Như vậy hầu hết năng lượng toả ra trong phân rã anpha là tạo thành động năng cho nó, còn phần năng lượng giật lùi cho hạt nhân con Y là không đáng kể. Điều này lý giải cho hiện tượng thu được trong thực nghiệm là: phần lớn các chất phóng xạ anpha cho một số nhóm hạt có động năng gián đoạn khác nhau (thể hiện ở tầm bay xa khác nhau). Động năng của mỗi nhóm hạt anpha đúng bằng hiệu mức năng lượng giữa trạng thái của hạt nhân mẹ và trạng thái cơ bản cùng một số trạng thái kích thích của hạt nhân con.

2.2 Phân rã β

Có thể định nghĩa phân rã β là quá trình phân rã, trong đó điện tích của hạt nhân thay đổi một đơn vị điện tích nguyên tố, trong khi số nuclon thì vẫn giữ nguyên. Có ba trường hợp phân rã β là phân rã β^- ; phân rã β^+ và phân rã bắt K.

Phân rã β^-

Khi hạt nhân phân rã β^- thì nó mất đi một hạt electron. Như vậy hạt nhân tăng thêm một đơn vị điện tích dương, hạt nhân dịch chuyển một ô vị trí về phía sau $Z + 1$. Tuy nhiên số khối A của hạt nhân con không khác số khối của hạt nhân mẹ. Nói cách khác phân rã β^- tạo thành một hạt nhân con đồng phân với hạt nhân mẹ, khác nhau một đơn vị điện tích.

Hiện tượng phân rã β^- được phát hiện của thế kỉ XIX. Khi đó quá trình phân rã này được biểu diễn theo phương trình:

$${}_Z^A X \longrightarrow {}_{Z+1}^A Y + {}_{-1}^0 e \quad (\text{VIII.19})$$

Năm 1914, Chadwick đã tiến hành đo phổ năng lượng của các hạt β^- bay ra và đưa ra một kết luận khá bất ngờ: phổ năng lượng của các hạt phóng xạ β^- là một đường cong liên tục. Điều này sẽ dẫn đến kết quả không thoả mãn định luật bảo toàn năng lượng và xung lượng. Cũng từ thực nghiệm này N.Bohr cho rằng trong trong lĩnh vực hạt nhân không có định luật bảo toàn năng lượng và xung lượng.

Sau đó, vào năm 1933 Pauli giải thích theo một hướng khác. Ông cho rằng, định luật bảo toàn năng lượng và xung lượng vẫn thoả mãn trong lĩnh vực hạt nhân hạt nhân. Sỡ dĩ có mâu thuẫn với thực nghiệm là do trong phân rã β^- còn có một hạt vi mô khác sinh ra mà chưa được tìm thấy. Theo tính toán của Pauli, hạt này có khối lượng nghỉ bằng không, không mang điện và có spin bằng $\frac{1}{2}$. Ông gọi hạt này là notrinô, kí hiệu là ν . Lí luận này đã được các nhà Vật lí thừa nhận. Mãi đến năm 1956 thực nghiệm mới ghi nhận được sự có mặt của notrinô, nhưng từ lâu người ta đã tin rằng có hạt notrinô và cả phản hạt notrinô, kí hiệu là $\bar{\nu}$.

Như vậy phương trình phân rã β^- là:

$${}_Z^AX \longrightarrow {}_{Z+1}^AY + {}_{-1}^0e + \bar{\nu} \quad (\text{VIII.20})$$

Thí dụ

$$\begin{aligned} {}_{19}^{40}\text{K} &\longrightarrow {}_{20}^{40}\text{Ca} + {}_{-1}^0e + \bar{\nu} \\ {}_1^3\text{H} &\longrightarrow {}_2^3\text{He} + {}_{-1}^0e + \bar{\nu} \end{aligned}$$

Phân rã β^+

Quá trình phân rã β^+ được ông bà Joliot và Irene Curie phát hiện lần đầu vào năm 1934 bằng cách bắn phá hạt nhân ${}_{5}^{10}\text{Bo}$ bằng dòng hạt α để thu được hạt nhân phóng xạ ${}_{7}^{13}\text{N}$. Hạt nhân ${}_{7}^{13}\text{N}$ phân rã β^+ cho ta hạt nhân cacbon. Quá trình biến đổi theo phương trình sau:

$$\begin{aligned} {}_2^4\text{He} + {}_5^{10}\text{Bo} &\longrightarrow {}_7^{13}\text{N} + {}_0^1n \\ {}_7^{13}\text{N} &\longrightarrow {}_6^{13}\text{C} + {}_{+1}^0e + \nu \end{aligned}$$

Chu kì bán rã của ${}_{7}^{13}\text{N}$ là 10 phút.

Phân rã bắt K

Phân rã bắt K được tìm thấy lần đầu tiên vào năm 1937 bởi L.Alvares. Đó là hiện tượng hạt nhân bắt một electron ở lớp vỏ trong cùng (lớp K) và biến thành một hạt nhân có nguyên tử số là $Z-1$. Tuy nhiên vào năm 1948, B.M. Pontekovo ghi nhận được cả sự bắt electron ở lớp L của nguyên tử. Như vậy hạt nhân có thể bắt electron không chỉ ở lớp trong cùng, nhưng do thói quen ta vẫn gọi là phóng xạ bắt K. Trong phóng xạ bắt K không có hạt nào bay ra khỏi mẫu phóng xạ, chỉ có sự biến đổi hạt nhân nguyên tử trong mẫu đó. Chẳng hạn ${}_{4}^7\text{Be}$ thực hiện phóng xạ bắt K theo phương trình:

$${}_4^7\text{Be} + {}_{-1}^0e \longrightarrow {}_3^7\text{Li} + \nu$$

Các hệ thức năng lượng - Điều kiện phân rã β

Gọi $D_Y; D_e; D_{e+}; D_\nu; D_{\bar{\nu}}$ là động năng của hạt nhân con Y, electron, pzyton; notrinô và phản notrinô, áp dụng định luật bảo toàn năng lượng cho các quá trình phóng xạ β ta có:

$$\begin{aligned} M(A, Z)c^2 &= M(A, Z+1)c^2 + m_e c^2 + D_Y + D_e + D_{\bar{\nu}} \\ M(A, Z)c^2 &= M(A, Z-1)c^2 + m_e c^2 + D_Y + D_{e+} + D_\nu \\ M(A, Z)c^2 + m_e c^2 &= M(A, Z-1)c^2 + D_Y + D_\nu \end{aligned}$$

Trong thực tế ta không thể đo trực tiếp khối lượng hạt nhân mà chỉ xác định được khối lượng các nguyên tử nên ta có thể thay thế khối lượng hạt nhân được kí hiệu là M bằng khối lượng nguyên tử kí hiệu là M_{nt} . Để làm điều này ta cộng thêm vào hai vế của hai công thức đầu một lượng là $Zm_e c^2$, còn công thức thứ ba ta thêm vào $(Z - 1)m_e c^2$ ta sẽ được:

$$M_{nt}(A, Z)c^2 = M_{nt}(A, Z + 1)c^2 + D_Y + D_e + D_{\bar{\nu}}$$

$$M_{nt}(A, Z)c^2 = M_{nt}(A, Z - 1)c^2 + 2m_e c^2 + D_Y + D_{e^+} + D_{\nu}$$

$$M_{nt}(A, Z)c^2 = M_{nt}(A, Z - 1)c^2 + D_Y + D_{\nu}$$

Do động năng không âm nên ta có điều kiện xảy ra phân rã β là:

Phân rã β^- :

$$M_{nt}(A, Z) > M_{nt}(A, Z + 1) \quad (\text{VIII.21})$$

Phân rã β^+ :

$$M_{nt}(A, Z) > M_{nt}(A, Z - 1) + 2m_e \quad (\text{VIII.22})$$

Phân rã bắt K:

$$M_{nt}(A, Z) > M_{nt}(A, Z - 1) \quad (\text{VIII.23})$$

Từ các điều kiện trên ta có các nhận xét sau đây:

1. Các biểu thức VIII.21 và VIII.23 cho thấy, không thể có hai hạt nhân đồng phân bền vững lại có điện tích sai khác nhau một đơn vị điện tích. Nếu có một hạt nhân bền thì hạt nhân còn lại sẽ phóng xạ β^- hoặc phóng xạ bắt K.

2. Điều kiện VIII.22 thoả mãn thì điều kiện VIII.23 tự động thoả mãn. Như vậy một hạt nhân có khả năng phân rã β^+ thì cũng có thể phân rã bắt K. Hay nói cách khác, một hạt nhân có thể đồng thời xảy ra phóng xạ β^+ và phóng xạ bắt K. Thí dụ, sự chuyển từ $^{52}_{25}\text{Mn}$ sang $^{52}_{24}\text{Cr}$ thì 35% là do phân rã β^+ và 65% là phân rã bắt K.

3. Một hạt nhân (A,Z) có thể thoả mãn đồng thời cả ba điều kiện trên, như vậy sẽ có thể xảy ra cả ba dạng phân rã. Chẳng hạn hạt nhân $^{64}_{29}\text{Cu}$ chuyển thành hạt nhân $^{64}_{30}\text{Zn}$ bằng phóng xạ β^- với xác suất 40%, chuyển thành $^{64}_{28}\text{Ni}$ bằng phóng xạ β^+ với xác suất là 20%, chuyển thành $^{64}_{28}\text{Ni}$ bằng phóng xạ bắt K với xác suất 40%.

Phổ năng lượng - Vai trò của nơtrino

Như đã trình bày trong phần trên phổ năng lượng của hạt β^+ hoặc β^- là đường cong liên tục, nghĩa là các hạt β không phải là hạt đơn năng như các hạt α . Năng lượng này có giá trị phân bố từ $0 \div T_{Max}$, với T_{Max} là hiệu năng lượng của hạt các hạt nhân trước và sau phóng xạ. Tính chất liên tục của phổ năng lượng được giải thích do hiện tượng phân rã β bao giờ cũng kèm theo tạo ra hạt nơtrino. Nhờ có hạt nơtrino định luật bảo toàn Spin, bảo toàn năng lượng, định luật bảo toàn xung lượng trong phóng xạ này mới được thoả mãn. Hiện tượng phân rã β khác hiện tượng phân rã α ở chỗ nó là hiện tượng phân rã nội nuclon, tức là do chính các nuclon phân rã theo các phương trình sau:

$$^1_0n \longrightarrow ^1_1p + ^0_{-1}e - \bar{\nu} \quad \text{và} \quad ^1_1p \longrightarrow ^1_0n + ^0_{+1}e + \nu \quad (\text{VIII.24})$$

Hiện nay chúng ta đã xác định được cả hạt nơtrino và phản nơtrino đều có khối lượng tính bằng không (chưa thật chắc chắn), không mang điện và có spin là $\frac{1}{2}$. Động năng và động lượng của các hạt này bay ra bù trừ cho năng lượng và động lượng của electron bay ra trong phân rã để thoả mãn các định luật bảo toàn.

2.3 Phân rã gamma

Quá trình một hạt nhân ở trạng thái kích thích, chuyển về trạng thái có mức năng lượng thấp hơn, bức xạ ra một photon có năng lượng cao gọi là phóng xạ gamma. Tia gamma là bức xạ điện từ có bước sóng ngắn hơn bước sóng tia X (nhỏ hơn $10^{-12}m$). Thực nghiệm cho thấy tia gamma được phát ra với năng lượng gián đoạn, điều này chứng tỏ hạt nhân có những năng lượng gián đoạn. Ta có thể viết biểu thức tính năng lượng của bức xạ gamma như sau:

$$h\nu = E_k - E_i \quad (\text{VIII.25})$$

Trong đó E_k là mức năng lượng trên của hạt nhân trước khi phóng xạ gamma; E_i là mức năng lượng dưới của hạt nhân sau khi đã bức xạ; ν là tần số bức xạ γ ; h là hằng số Planck. Do năng lượng của các mức năng lượng hạt nhân có giá trị lớn, giữa các mức năng lượng hạt nhân cũng cách nhau xa nên năng lượng bức xạ của hạt nhân khi chuyển mức năng lượng có giá trị từ hàng chục KeV đến hàng chục MeV lớn hơn rất nhiều photon phát ra do electron trong nguyên tử chuyển mức năng lượng.

Phân rã gamma xảy ra theo quy tắc dịch chuyển sau:



Phân rã hạt nhân cũng có chu kỳ bán rã như các phóng xạ khác, tuy nhiên, phần lớn các hạt nhân có chu kỳ bán rã gamma rất nhỏ không đo được, nó có giá trị khoảng 10^{-14} giây.

Để có nguồn phóng xạ gamma ta phải kích thích cho các hạt nhân chuyển lên trạng thái năng lượng cao. Có nhiều phương pháp kích thích như: bắn phá bằng các hạt tích điện hay trung hoà và khối hạt nhân có khối lượng cao; cho hấp thụ photon; trong các phóng xạ anpha, phóng xạ β tạo nên các hạt nhân ở trạng thái kích thích,...

§3 PHƯƠNG PHÁP VÀ DỤNG CỤ GHI NHẬN TIA BỨC XẠ

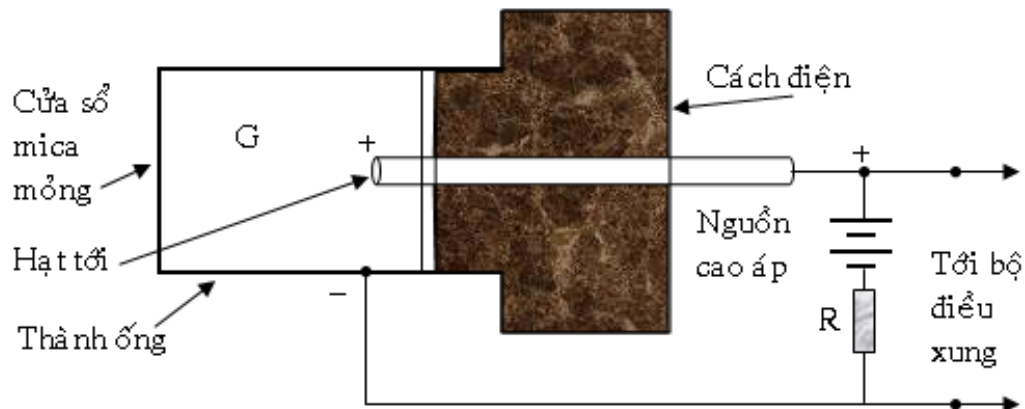
Một trong những vấn đề đặt ra là: làm cách nào đo lường bức xạ? Để thực hiện việc đo lường bức xạ, người ta dựa vào tương tác của các tia bức xạ với môi trường vật chất kèm theo nhiều hiệu ứng như: Ion hoá môi trường, bức xạ photon, bức xạ nhiệt, ... Các hiệu ứng này cho phép quan sát được bức xạ, đo lường cường độ, mật độ dòng và phổ của bức xạ. Dụng cụ để đo lường gọi tên chung là detector dựa trên các phương thức bức xạ làm Ion hoá phân tử, tạo thành một cặp ion phân tử mang điện dương và electron và để ghi nhận các điện tích này. Một số detector phổ biến nhất là ống đếm Geiger, ống đếm bán dẫn, ống đếm nhấp nháy, buồng Wilson,...

3.1 ống đếm Geiger

Cấu tạo của ống đếm Geiger như hình VIII.2.

Ống G được hàn kín và chứa khí Argon ở áp suất thấp. Cửa sổ mica mỏng ở đầu ống cho phép hạt α và β có thể xuyên qua đi từ ngoài vào chất khí argon. Tia γ có thể đi qua thành ống. Thanh kim loại giữa ống được nối với điện cực dương của nguồn cao thế. Thành ống làm bằng kim loại đủ để ngăn không cho tia α và β xuyên qua, thành này được nối với cực âm của nguồn cao thế và được nối đất.

Khi một hạt mang điện α, β, \dots đi vào ống G thì nó ion hoá các nguyên tử argon trên đường đi. Dưới tác dụng của điện trường nguồn cao thế, các ion âm và electron đi về phía thanh kim loại (cực dương), còn các ion dương đi về phía thành ống (cực âm). Do được điện trường tăng tốc, các điện tích này tiếp tục ion hoá môi trường tạo thành các điện tích thứ cấp, đến lượt các điện tích



Hình VIII.1: ống Geiger

thứ cấp lại được tăng tốc và ion hoá. Quá trình này tiếp diễn. Chỉ trong một thời gian rất ngắn, vô số các ion được tạo thành. Các ion này phóng vào các điện cực tạo thành một xung điện phóng qua điện trở R . Như vậy, hiệu điện thế giữa thành ống và thanh kim loại biến đổi rất nhanh để cung cấp một xung điện thế cho bộ đếm điện trở. Khi phóng hết các ion trong ống G thì ống lại trở nên cách điện. Khoảng thời gian phóng hết ion để ống trở nên cách điện gọi là thời gian chết. Nếu sau đó có một hạt mang điện đi vào ống G thì sẽ có hiện tượng lặp lại và bộ đếm lại ghi thêm được một hạt tiếp theo. Thực nghiệm cho thấy thời gian chết của ống đếm Geiger là khoảng $2 \cdot 10^{-4} s$. Dễ thấy rằng nếu có hạt đi vào ống trong thời gian chết thì ống đếm không phát hiện được (không đếm). Như vậy tốc độ đếm không thể vượt quá một giá trị xác định nào đó. Giá trị này khoảng $5 \cdot 10^3$ (xung/giây).

Để phép đo chính xác thì cần thực hiện phép đo trong một thời gian đủ dài vì các hạt phóng xạ được phóng ra từ một nguồn là rất hỗn loạn do phân rã ngẫu nhiên. Thời gian đo càng lớn thì hiệu quả sự bù trừ hỗn loạn càng cao và càng chính xác.

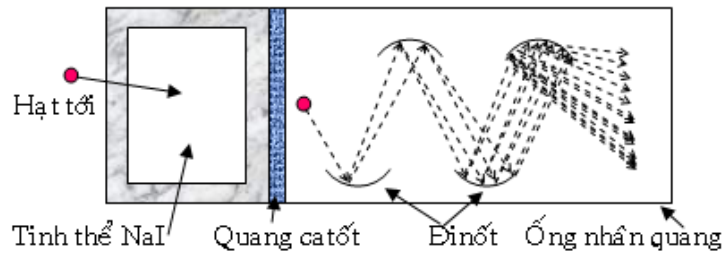
3.2 Đèctơ bán dẫn

Đèctơ bán dẫn được dùng để đo phóng xạ α . Bộ phận cơ bản của đèctơ bán dẫn là một tiếp giáp $p - n$ (điốt) được phân cực ngược. Như vậy trong điều kiện bình thường, tiếp giáp này không dẫn điện. Khi có một hạt α đi vào tiếp giáp, do tương tác sẽ xuất hiện các cặp electron - lỗ trống, bán dẫn trở thành dẫn điện và tạo ra một xung điện. Xung điện này được khuếch đại và được đếm.

Đèctơ bán dẫn có độ nhạy rất cao vì cặp electron - lỗ trống trong gecmani và silic được tạo thành chỉ với một năng lượng rất bé, khoảng $3 eV$. Đèctơ bán dẫn cũng có thể dùng để đo các bức xạ khác. Để ghi được các bức xạ khác nhau thì phải chế tạo bề dày của lớp chuyển tiếp khác nhau. Hạt tích điện nặng thì bề dày tiếp giáp khoảng $10 \mu m$, đối với bức xạ γ thì bề dày này phải khoảng vài milimet.

3.3 Đèctơ nhấp nháy

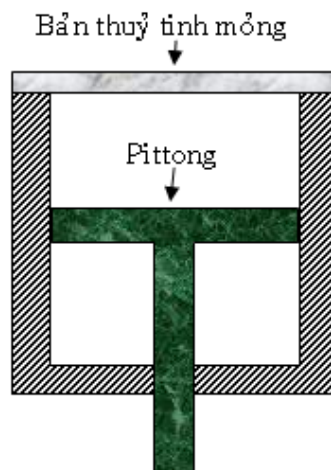
Đèctơ nhấp nháy có cấu tạo nguyên lý như hình VIII.3. Gồm hai bộ phận chính: chất huỳnh



Hình VIII.2: Đèctơ nhấp nháy

quang và bộ phận nhân quang - electron. Chất huỳnh quang thường dùng là NaI (iôđua natri). Khi một tia phóng xạ γ đi vào chất huỳnh quang nó sẽ ion hoá môi trường và kích thích phân tử. Bức xạ của các phân tử bị kích thích nằm trong miền ánh sáng nhìn thấy. Đóm sáng phát ra một phần đi vào catốt quang và từ catốt này phát sinh ra các electron quang. Số lượng electron quang được nhân lên nhờ các điện cực được nối với các thể sao cho điện thế tăng dần đến anốt. Mỗi lần một electron quang đập vào điện cực thì phát ra 2 đến 4 electron quang thứ cấp. Như vậy số electron quang được nhân lên theo cấp lũy thừa và cuối cùng được đưa vào máy đếm.

3.4 Buồng Wilson



Hình VIII.3: Buồng Wilson

Buồng Wilson là buồng ghi lại dấu vết của các hạt phóng xạ đi qua. Đây là một loại máy ghi được phát hiện từ lâu mà đến nay vẫn sử dụng phổ biến.

Buồng Wilson hoạt động dựa trên hiện tượng các ion là tâm ngưng tụ của hơi chất lỏng. Sơ đồ cấu tạo như hình VIII.4. Buồng này được cấu gồm hai bộ phận chính là buồng ngưng tụ hình trụ và pittong.

Trước khi hoạt động, trong buồng chứa đầy hơi bão hoà của một chất lỏng (nước, rượu hay cồn). Kéo nhanh pittong xuống dưới làm dẫn nở đột ngột thể tích buồng nên nhiệt độ trong buồng bị hạ thấp xuống. Buồng trở nên chứa hơi quá bão hoà. Nếu khi đó có một hạt điện tích bay qua, thì xung quanh nó sẽ xuất hiện các giọt chất lỏng li ti được tạo thành một vệt dọc theo đường bay của hạt. Muốn xác định dấu các hạt điện tích, ta tạo ra một từ trường đều hay điện trường đều. Các hạt điện tích khác dấu sẽ bị lệch hướng bay khác nhau. Ta có thể chụp ảnh các hạt li ti trên quỹ đạo của hạt hay quan sát trực tiếp bằng mắt thường.

§4 ĐƠN VỊ ĐO LIỀU LƯỢNG PHÓNG XẠ

Để đo liều lượng phóng xạ ta thường dùng các loại đơn vị sau:

4.1 Đơn vị Curi (Ci)

Đây là loại đơn vị đo liều lượng phóng xạ của một nguồn. $1\text{Curi} = 3,7 \cdot 10^{10}$ phân rã/giây.

4.2 Đơn vị Culông/kilôgam (C/kg)

Dựa vào khả năng Ion hoá không khí của bức xạ rơnghen người ta đưa ra đơn vị Culông/kilôgam là liều lượng bức xạ rơnghen (hoặc bức xạ gamma) trong không khí sao cho cứ trong một kilôgam không khí số Ion được tạo thành có điện tích tổng cộng là 1 Culông.

4.3 Đơn vị Roentgen (Rơnghen - R)

Đây là đơn vị dùng để đo liều lượng phóng xạ, tức là khả năng mà tia X hay tia γ cung cấp năng lượng cho vật liệu (môi trường) mà chúng đi qua. Rơnghen được định nghĩa là liều lượng phóng xạ có thể cung cấp 8,78mJ cho 1 kilôgam không khí khô ở điều kiện tiêu chuẩn. Thực nghiệm cho kết quả: $1R = 2,57976C/kg$.

4.4 Đơn vị Gray (Gy)

Một liều lượng 1 Gray (Gy) có nghĩa là 1 kg vật chất bị rọi phóng xạ sẽ hấp thụ một năng lượng là 1 Jun: $1Gy = 1 \frac{J}{kg}$.

§5 BÀI TẬP CHƯƠNG VIII

Bài VIII.1

Tính chu kì bán rã của Thory biết rằng cứ sau 100 ngày độ phóng xạ của nó giảm đi 1,07 lần.

Bài VIII.2

Xác định hằng số phân rã của một chất biết rằng cứ sau 1 giờ hoạt độ phóng xạ của nó giảm đi 10% và sản phẩm thu được không có tính chất phóng xạ.

Bài VIII.3

Cho 1mg Radi chứa trong một bình kín và radi phóng xạ anpha với chu kì bán rã là 1620 năm. Hãy tính lượng Heli sinh ra sau 2 năm?

Bài VIII.4

Biết hằng số phân rã của một chất là λ . Hãy xác định xác suất để hạt nhân phân rã trong khoảng thời gian từ $0 \rightarrow t$.

Bài VIII.5

Cho biết chu kì bán rã của hạt nhân $^{144}_{58}\text{Ce}$ là 285 ngày, khối lượng ban đầu của mẫu phóng xạ là 1mg. Hãy xác định có bao nhiêu hạt nhân $^{144}_{58}\text{Ce}$ phân rã sau 1 giây?

Bài VIII.6

Hoạt độ phóng xạ của một chất giảm trong hai ngày từ 4mCi còn 2,4mCi. Hỏi sau 16 ngày thì hoạt độ của mẫu này còn bao nhiêu?

Bài VIII.7

Tốc độ phóng xạ của 1g $^{226}_{82}\text{Ra}$ là 1 Ci. Trong 1 năm, cứ 1g radi sẽ cho $0,042\text{cm}^3$ Heli do phóng xạ anpha. Hãy tính:

a) Số Avôgadrô?

b) Chu kì bán rã của $^{226}_{82}\text{Ra}$?

Bài VIII.8

Lượng 2mg $^{14}_6\text{C}$ có hoạt độ phóng xạ là bao nhiêu nếu chu kì bán rã của nó là 5700 năm?

Bài VIII.9

Đo hoạt độ phóng của một mảnh gỗ từ một món đồ gỗ cổ thì thấy hoạt độ phóng xạ của $^{14}_6\text{C}$ là 3 phân rã/phút. Một mảnh gỗ mới tương đương có hoạt độ phóng xạ là 14 phân rã/phút. Biết rằng chu kì bán rã của $^{14}_6\text{C}$ là 5700 năm. Hãy tính tuổi thọ của món đồ cổ đó?