

PHẠM DUY LÁC

VẬT LÝ ĐẠI CƯƠNG

Phần : **Thuyết tương đối hẹp,
Lý thuyết lượng tử,
Vật lý nguyên tử,
Hạt nhân nguyên tử**



NHÀ XUẤT BẢN KHOA HỌC VÀ KỸ THUẬT HÀ NỘI - 2000

Chương I

THUYẾT TƯƠNG ĐỐI HẸP EINSTEIN (ANHSTANH)

MỞ ĐẦU

Vật lý học cổ điển dựa trên cơ sở của hai lý thuyết cơ bản: 1- cơ học Newton⁽¹⁾: gồm các định luật Newton là cơ sở cho toàn bộ cơ học và cũng là cơ sở cho nhiệt học, nếu bổ sung vào phương pháp thống kê ; 2- thuyết điện từ Maxwell⁽²⁾: gồm hệ thống phương trình Maxwell về điện từ trường là cơ sở lý thuyết tổng quát cho các hiện tượng điện từ và quang học. Vào năm 1865 phương trình Maxwell ra đời, nhưng lúc bấy giờ cấu trúc toán học quan trọng của nó vẫn chưa được hiểu đúng hoàn toàn vào thời gian đó. Thật ra, cấu trúc của phương trình Maxwell đã được nhiều nhà khoa học nghiên cứu, như Hendrich Antoon Lorentz (18.7.1853 - 4.2.1928) người Hà Lan và H. Poincaré (29.4.1854 - 17.7.1912) người Pháp, nhưng họ chỉ đưa ra khái niệm tương đối của không gian, mà chưa đi đến khái niệm tương đối của thời gian, đã phát minh ra phép biến đổi Lorentz nhưng không phát minh ra thuyết tương đối hẹp.

Vào năm 1905 Alber Einstein (Anhxtanh) (14.3.1879 - 18.4.1955) người Đức quốc tịch Mỹ (từ năm 1940) đã đưa ra thuyết tương đối hẹp đề cập đến khái niệm không gian và thời gian là tương đối và gắn liền với vật chất, nhờ đó các phương trình Maxwell mới được hiểu rõ đúng với ý nghĩa của nó.

Lý thuyết tương đối hẹp của A.Einstein được đặc trưng bởi vận tốc ánh sáng (hay vận tốc truyền tương tác). Thuyết tương đối này sử dụng được cho cả các vật chuyển động với vận tốc v cỡ vận tốc ánh sáng c ($v \sim c$), khi đó không gian, thời gian, khối lượng đều phụ thuộc vào chuyển động và cơ học Newton là trường hợp giới hạn khi áp dụng cho các vật chuyển động với vận tốc nhỏ so với vận tốc ánh sáng ($v \ll c$).

1-1 CÁC TIÊN ĐỀ EINSTEIN

Thuyết tương đối hẹp Einstein được xây dựng dựa trên hai nguyên lý (hai tiên đề) sau đây:

1. Nguyên lý tương đối (tiên đề 1): Các định luật vật lý là bất biến (có cùng dạng) trong các hệ quy chiếu quán tính ;

2. Nguyên lý vô sự bất biến của vận tốc ánh sáng (tiên đề 2): Đối với mọi hệ quán tính, vận tốc ánh sáng trong chân không đều bằng nhau và có giá trị bằng $c = 3.10^8$ m/s, không phụ thuộc vào chuyển động của nguồn sáng.

1. Isaac Newton (Nguồn) (4.1.1663 - 31.3.1727) người Anh.

2. James Clerk Maxwell (Macxoen) (13.6.1831 - 5.11.1879) người Anh (NBT).

Các định luật Newton về chuyển động là phù hợp với nguyên lý tương đối, nhưng các phương trình Maxwell cũng như phép biến đổi Galilei⁽¹⁾ lại mâu thuẫn với nguyên lý đó. Do sự khác nhau căn bản đó giữa các định luật của động lực học và của điện từ học không lý giải được nên Einstein đã đưa ra tiên đề 2 ở trên.

Ở đây còn thấy rằng, nguyên lý tương đối Einstein đã mở rộng nguyên lý tương đối Galilei. Vì nguyên lý tương đối Galilei chỉ đề cập đến các hiện tượng cơ học, còn nguyên lý tương đối Einstein đã đề cập đến các hiện tượng vật lý nói chung, trong đó có các hiện tượng cơ học.

Theo cơ học cổ điển, tương tác được truyền đi tức thời, nghĩa là vận tốc truyền tương tác lớn vô hạn. Nhưng theo thuyết tương đối Einstein, vận tốc truyền tương tác là hữu hạn và là như nhau trong tất cả các hệ quán tính. Điều này phù hợp với thực nghiệm và đó là vận tốc cực đại, và bằng vận tốc truyền ánh sáng trong chân không.

1-2. PHÉP BIẾN ĐỔI LORENTZ

1. Sự cần thiết phải thay phép biến đổi Galilei bằng phép biến đổi Lorentz

Các phép biến đổi Galilei cho biết:

- Thời gian diễn biến của một quá trình vật lý đều như nhau ($t = t'$) trong các hệ quy chiếu quán tính O và O' (thời gian có tính chất tuyệt đối, không phụ thuộc vào hệ quy chiếu).

- Khoảng cách giữa hai điểm bất kỳ trong không gian không phụ thuộc hệ quy chiếu (khoảng không gian có tính tuyệt đối, không phụ thuộc hệ quy chiếu).

- Vận tốc chuyển động của một chất điểm phụ thuộc hệ quy chiếu: vận tốc tuyệt đối \vec{v} của chất điểm bằng tổng vectơ các vận tốc tương đối \vec{v} và vận tốc theo \vec{V} của hệ quán tính O' đối với hệ O : $\vec{v} = \vec{v} + \vec{V}$

Những kết luận ở trên chỉ đúng đối với các chuyển động chậm ($v \ll c$) và mâu thuẫn với các tiên đề của thuyết tương đối Einstein. Quả vậy, theo thuyết tương đối thì thời gian không có tính tuyệt đối, khoảng thời gian diễn biến của một quá trình vật lý phụ thuộc vào các hệ quy chiếu, vận tốc truyền của ánh sáng không phụ thuộc vào hệ quán tính và đặc biệt các hiện tượng xảy ra đồng thời ở trong hệ quán tính này nói chung sẽ không xảy ra đồng thời ở trong hệ quán tính khác.

Qua đây ta thấy phép biến đổi Galilei không thỏa mãn yêu cầu của thuyết tương đối. Do đó đòi hỏi phải có biến đổi khác chuyển các tọa độ không gian và thời gian từ hệ quán tính này (O) sang hệ quán tính khác (O'), thỏa mãn yêu cầu của thuyết tương đối Einstein. H.A.Lorentz đã tìm ra phép biến đổi đó.

1. Galileo Galilei (Galilê) (16.2.1564 - 8.1.1642) người Italia (NBT).

2. Phép biến đổi Lorentz

Giả sử có hệ quy chiếu quán tính $O'x'y'z'$ chuyển động đều với vận tốc \vec{V} so với hệ quán tính $Oxyz$ theo trục Ox và ban đầu ($t = t' = 0$) hai gốc O và O' trùng nhau ($x=x'=0$) (h.1.1). Gọi x,y,z,t và x',y',z',t' là các tọa độ không gian và thời gian tương ứng trong hệ O và O' . Như vậy rõ ràng $y'=y, z'=z$. Bây giờ ta tìm mối liên hệ giữa x', t' và x, t . Giả sử tọa độ x' liên hệ với x và t theo phương trình:

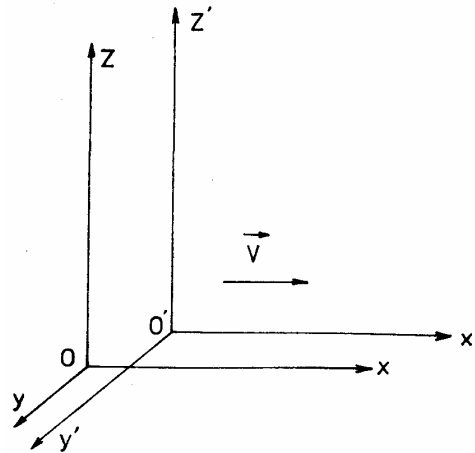
$$x' = f(x,t) \quad (1-1)$$

Dạng của phương trình (1-1) tìm được khi ta viết được phương trình chuyển động của các gốc tọa độ O và O' trong hai hệ $Oxyz$ và $O'x'y'z'$, (h.1-1).

Đối với hệ O , gốc O' chuyển động với vận tốc V , nên tọa độ của nó đối với hệ O là $x = Vt$, hay

$$x - Vt = 0 \quad (1-2)$$

Đối với hệ O' , gốc O' là đứng yên, nên tọa độ xe của nó bao giờ cũng bằng 0 ($x' = 0$)



Hình 1-1

Để phương trình (1-1) áp dụng đúng cho hệ O' , nghĩa là khi thay $x' = 0$ vào (1-1) ($x' = f(x,t) = 0$), ta phải thu được (1-2), thì $f(x, t)$ chỉ có thể khác $(x - Vt)$ một hệ số nhân α nào đó: $f(x,t) = \alpha(x - Vt)$, suy ra

$$x' = \alpha(x - Vt). \quad (1-3)$$

Đối với hệ O' , gốc O chuyển động với vận tốc $(-V)$; còn đối với hệ O , gốc O là đứng yên. Lập luận tương tự như trên, ta có:

$$x' = \beta(x' + Vt'), \quad (1-4)$$

với β là hệ số nhân.

Theo nguyên lý tương đối (tiên đề 1) mọi hệ quy chiếu quán tính đều tương đương nhau, nên từ (1-3) có thể suy ra (1-4) và ngược lại (bằng cách thay $V \Leftrightarrow -V, x' \Leftrightarrow x, t \Leftrightarrow t'$), ta rút ra $\alpha = \beta$. Trong hệ O và hệ O' , theo tiên đề 2 ta có:

$$\left. \begin{aligned} x &= ct, \\ x' &= ct'. \end{aligned} \right\} \quad (1-5)$$

Thay (1-5) vào (1-3) và (1-4), ta có:

$$\left. \begin{aligned} ct' &= \alpha(ct - Vt) = \alpha t(c - V) ; \\ ct &= \alpha(ct' + Vt') = \alpha t'(c + V). \end{aligned} \right\} \quad (1-6)$$

Từ (1-6) ta được:

$$\begin{aligned} c^2 t' t &= \alpha^2 t' t (c^2 - V^2), \\ \alpha^2 &= \frac{c^2}{c^2 - V^2} = \frac{1}{1 - \frac{V^2}{c^2}}. \end{aligned}$$

Do đó:

$$\alpha = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}}}. \quad (1-7)$$

Kết quả thu được:

$$\left. \begin{aligned} x' &= \frac{x - Vt}{\sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}}}; & x &= \frac{x' + Vt'}{\sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}}} \\ t' &= \frac{t - \frac{V}{c^2}x}{\sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}}}; & t &= \frac{t' + \frac{V}{c^2}x'}{\sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}}} \end{aligned} \right\} \quad (1-8)$$

Cuối cùng ta có phép biến đổi Lorentz:

$$\left. \begin{aligned} x' &= \frac{x - Vt}{\sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}}}; & y' &= y; & z' &= z; \\ t' &= \frac{t - \frac{V}{c^2}x}{\sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}}}, \end{aligned} \right\} \quad (1-9)$$

Cho phép biến đổi tọa độ và thời gian từ hệ O sang hệ O' ;

$$x = \frac{x' + Vt'}{\sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}}}; \quad y = y'; \quad z = z'; \quad t = \frac{t' + \frac{V}{c^2}x'}{\sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}}}, \quad (1-10)$$

Cho phép biến đổi tọa độ và thời gian từ hệ O' sang hệ O.

Như vậy qua phép biến đổi Lorentz, ta thấy được mối liên hệ mật thiết giữa không gian và thời gian. Đồng thời phép biến đổi đó đã thỏa mãn các kết luận của thuyết tương đối Einstein về tính tương đối của không gian và thời gian, và nhấn mạnh về thời gian không có tính chất tuyệt đối, mà trái lại phụ thuộc vào hệ quy chiếu, nên

thời gian trôi đi trong hai hệ O và O' sẽ khác nhau: $t \neq t'$.

Ở đây ta cần lưu ý rằng, các phương trình Maxwell là không bất biến đối với phép biến đổi Galilei nhưng chúng đều bất biến đối với phép biến đổi Lorentz (xem 1,2 của phụ lục).

Nhận xét: Từ phép biến đổi ở trên ta thấy với điều kiện $c \rightarrow \infty$ (tương ứng với quan niệm tương tác tức thời) hay điều kiện $\frac{V}{c} \rightarrow 0$ (tương ứng với sự gần đúng cổ điển), thì các công thức (1-9), (1-10) chuyển thành các công thức của phép biến đổi Galilei, còn khi $V \geq c$, trong các công thức (1-9), (1-10) các tọa độ x, x' và thời gian t, t' trở nên mất ý nghĩa vật lý (trở nên ảo hoặc mẫu số bằng 0), điều đó chứng tỏ không thể có vật thể nào chuyển động nhanh hơn hoặc bằng vận tốc ánh sáng.

1-3. KHOẢNG KHÔNG GIAN VÀ THỜI GIAN

Theo thuyết tương đối Einstein thì không gian và thời gian có tính chất tương đối và bây giờ dựa vào phép biến đổi Lorentz (1-9) hoặc (1-10) chúng ta so sánh độ dài của một vật và khoảng thời gian của một biến cố (quá trình) ở trong hai hệ quán tính O và O'.

1. Tính tương đối của khoảng không gian

Giả sử có một thước nằm dọc theo trục x và A, B là các đầu mút của thước, khi đó độ dài l của thước trong hệ O (thước đứng yên so với hệ O) bằng $x_B - x_A$ ($l = x_B - x_A$).

Gọi l' là độ dài của thước đó đo được trong hệ O' chuyển động với hệ O với vận tốc V dọc theo trục chung $x - x'$. Theo phép biến đổi Lorentz (1-9), (1-10), ta xác định được các đầu mút của thước trong hệ O' tại cùng thời điểm t' là:

$$\begin{aligned}x'_B &= x_B \cdot \sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}} - V \cdot t' ; \\x'_A &= x_A \cdot \sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}} - V \cdot t' .\end{aligned}$$

Khi đó

$$l' = x'_B - x'_A = (x_B - x_A) \sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}} ,$$

hay

$$l' = l \sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}} . \quad (1-11)$$

$$\text{Do } \sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}} < 1, \text{ ta có } l' < l.$$

Vậy độ dài (đọc theo phương chuyển động) của thước trong hệ quy chiếu mà

thước chuyển động ngắn hơn độ dài của thước đo ở trong hệ mà thước đo đứng yên, nghĩa là khi vật chuyển động thì kích thước của nó bị co ngắn theo phương chuyển động (gọi là sự co ngắn Lorentz).

Ví dụ: Một vật hình lập phương có thể tích $V = 1000 \text{ cm}^3$.

Xác định thể tích của vật đối với hệ O' chuyển động so với vận tốc $0,8c$ theo phương song song với một trong các cạnh của vật: Đối với hệ O' , độ dài của cạnh hình lập phương song song với phương chuyển động của vật là:

$$l'_x = l_x \sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}} = (10 \text{ cm}) \sqrt{1 - 0,8^2} = 6 \text{ cm}.$$

Các độ dài của các cạnh khác đều không thay đổi: $l'_y = l_y = l'_z = l_z = 10 \text{ cm}$.

Suy ra thể tích của vật đối với hệ O' là:

$$V' = l'_x l'_y l'_z = (6 \text{ cm}) \cdot (10 \text{ cm}) \cdot (10 \text{ cm}) = 600 \text{ cm}^3.$$

Do đó $V' = 0,6 V$.

Như vậy một hình lập phương chuyển động với vận tốc lớn, nó có dạng một hình hộp chữ nhật. Nếu quan sát một khối cầu chuyển động nhanh như vậy ta sẽ thấy nó có dạng một elipxôit tròn xoay. Nói một cách tổng quát, không gian có tính chất tương đối tùy thuộc vào chỗ ta quan sát nó ở trong hệ đứng yên hay chuyển động. Trường hợp giới hạn $v/c \rightarrow 0$ (vận tốc V của chuyển động nhỏ), từ công thức (I-II) ta trở về kết quả trong cơ học cổ điển với không gian được coi là tuyệt đối, không phụ thuộc vào chuyển động ($l' = l$).

2. Tính tương đối của khoảng thời gian

Giả sử trong hệ quy chiếu O' ở một điểm A có tọa độ x', y', z' , xảy ra một biến cố và kéo dài trong khoảng thời gian $\Delta t' = t'_2 - t'_1$ (được đo bởi một đồng hồ đứng yên trong hệ O'). Bây giờ ta tính khoảng thời gian kéo dài của cũng biến cố đó trong hệ O (hệ O' chuyển động với vận tốc V đối với hệ O). Từ phép biến đổi Lorentz, ta có:

$$t_1 = \frac{t'_1 + \frac{V}{c^2} x'}{\sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}}}; \quad t_2 = \frac{t'_2 + \frac{V}{c^2} x'}{\sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}}},$$

suy ra

$$\Delta t = t_2 - t_1 = \frac{t'_2 - t'_1}{\sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}}},$$

hay

$$\Delta t' = \Delta t \sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}} < \Delta t. \quad (1-12)$$

Như vậy trong hệ quy chiếu mà địa điểm xảy ra biến cố đứng yên (trong hệ O'), thời gian trôi chậm hơn so với trong hệ quy chiếu là địa điểm xảy ra biến cố chuyển động (trong hệ O). Nếu trong hệ O' có gắn một đồng hồ và trong hệ O cũng gắn một đồng hồ thì ta có thể nói: đồng hồ chuyển động chạy chậm hơn đồng hồ đứng yên. Điều đó nói lên tính chất tương đối của khoảng thời gian nó phụ thuộc vào chuyển động. Trường hợp vận tốc của chuyển động nhỏ $v \ll c$, từ công thức (1 - 12) ta trở về kết quả trong cơ học cổ điển với khoảng thời gian được coi là tuyệt đối, không phụ thuộc vào chuyển động ($\Delta t' \approx \Delta t$).

Ví dụ: Ánh sáng phát đi từ miền xa nhất của Thiên Hà chúng ta, phải mất 10^5 năm để đến Trái Đất. Nếu một hành khách du hành vũ trụ với vận tốc $v = 0,999998c$ thì sẽ mất bao lâu để đến được miền xa xôi đó và khi ấy trên Trái Đất thời gian đã trôi qua bao nhiêu năm ?

Đối với hệ đứng yên, trên mặt đất ánh sáng đã vượt qua quãng đường $d = c(\Delta t) = 10^5 c$ trong 10^5 năm (ở đây c được đo bằng km/năm). Với một khách du hành chuyển động với vận tốc v đối với Trái Đất, khoảng cách sẽ ngắn lại và bằng:

$$d' = d \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} = (10^5 c) \sqrt{1 - (0,999998)^2} \approx (10^5 c) 4,999999 \cdot 10^{-4}$$

Thời gian khách du hành đến miền xa nhất của Thiên Hà là:

$$\Delta t' = \frac{d'}{v} = \frac{(10^5 c) 4,999999 \cdot 10^{-4}}{0,999998c} = 50 \text{ năm.}$$

Khi đó trên Trái Đất thời gian đã trôi qua là:

$$\Delta t = \frac{\Delta t'}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} = \frac{50}{4,999999} \approx 10^5 \text{ năm.}$$

3. Tính tương đối của sự đồng thời

Giả sử hai biến cố A và B xảy ra đồng thời $t_A = t_B$ ở hai điểm có tọa độ x_A và x_B trong hệ O. Theo phép biến đổi Lorentz, trong hệ O' chuyển động đối với O với vận tốc v dọc theo trục chung $x - x'$, sẽ quan sát thấy biến cố A và B xảy ra ở các thời điểm:

$$t'_A = \frac{t_A - \frac{v}{c^2} x_A}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \quad \text{và} \quad t'_B = \frac{t_B - \frac{v}{c^2} x_B}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$$

Ta thấy, nếu $x_A = x_B$ thì $t'_A = t'_B$, nghĩa là nếu trong hệ O hai biến cố xảy ra đồng thời ở một địa điểm thì trong hệ O' sẽ quan sát thấy hai biến cố xảy ra đồng thời. Nói chung $x_A \neq x_B$ nên $t'_A \neq t'_B$, nghĩa là nếu trong hệ O hai biến cố xảy ra ở hai nơi khác nhau thì trong hệ O' quan sát thấy hai biến cố đó xảy ra không đồng thời.

Tóm lại, khái niệm đồng thời chỉ là một khái niệm tương đối, hai biến cố có thể đồng thời xảy ra ở một hệ quy chiếu này, nói chung có thể không đồng thời xảy ra ở trong một hệ quy chiếu khác.

4. Định lý cộng vận tốc

Từ các phép biến đổi Lorentz ta có thể tìm được quy tắc cộng vận tốc trong thuyết tương đối. Giả sử có một chất điểm chuyển động với vận tốc u và u' tương ứng ở trong các hệ quy chiếu O và O' (hệ O' chuyển động với vận tốc V so với hệ O dọc theo trục chung $x - x'$). Gọi các thành phần của u và u' tương ứng ở trong hai hệ O và O' là: u_x, u_y, u_z và u'_x, u'_y, u'_z .

Theo (1 - 9), (1 - 10), ta có:

$$dx' = \frac{dx - Vdt}{\sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}}}; \quad dt' = \frac{dt - \frac{V}{c^2}dx}{\sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}}}$$

do đó:

$$u'_x = \frac{dx'}{dt'} = \frac{dx - Vdt}{dt - \frac{V}{c^2}dx} = \frac{u_x - V}{1 - \frac{V}{c^2}u_x} \quad (1-13)$$

Tương tự ta có:

$u'_y = \frac{dy'}{dt'}$ mà $y' = y$, suy ra $dy' = dy$, cho nên

$$\left. \begin{aligned} u'_y &= \frac{dy'}{dt'} = \frac{dy}{dt'} = \frac{dy \sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}}}{dt - \frac{V}{c^2}dx} = \frac{u_y \sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}}}{1 - \frac{V}{c^2}u_x}; \\ u'_z &= \frac{u_z \sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}}}{1 - \frac{V}{c^2}u_x} \end{aligned} \right\} (1-14)$$

Bằng phép biến đổi ngược, ta có:

$$\left. \begin{aligned} u_x &= \frac{u'_x + V}{1 + \frac{V}{c^2}u'_x}; \quad u_y = \frac{u'_y \sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}}}{1 + \frac{V}{c^2}u'_x}; \\ u_z &= \frac{u'_z \sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}}}{1 + \frac{V}{c^2}u'_x} \end{aligned} \right\} (1-15)$$

($V > 0$ nếu như O' chuyển động theo chiều dương của trục x và $V < 0$ trong trường hợp ngược lại).

Các công thức (1-13.), (1-14) và (1-15) cho ta phép biến đổi các vận tốc từ hệ O sang hệ O' và ngược lại. Như vậy muốn biến đổi các vận tốc từ hệ O' sang hệ O , ta chỉ cần thay các đại lượng có dấu phẩy bằng các đại lượng không có dấu phẩy và ngược lại, đồng thời thay v bằng $(-v)$. Đó chính là các biểu thức biến đổi tương đối tính về vận tốc trong thuyết tương đối.

Khi $v \ll c$, ta trở lại công thức vận tốc trong cơ học cổ điển: $u'_x = u_x - v$; $u'_y = u_y$; $u'_z = u_z$, còn khi $u_x = c$ thì từ (1-13) ta có:

$$u'_x = \frac{c - V}{1 - \frac{V}{c^2}c} = c.$$

Như vậy đối với hệ O' , vận tốc của ánh sáng vẫn là c . Điều này biểu thị tính chất bất biến của vận tốc ánh sáng c trong chân không đối với các hệ quán tính.

1-4. ĐỘNG LỰC HỌC TƯƠNG ĐỐI TÍNH

1. Tính tương đối của khối lượng

Một trong những hệ quả quan trọng nhất của thuyết tương đối hẹp là khối lượng của một vật thay đổi theo vận tốc của nó. Để hiểu rõ vấn đề đó ta xét ví dụ đơn giản sau đây. Một viên đạn được bắn theo hướng y' vào một vật giả sử đứng yên đối với người bắn ở trong hệ O' . Khi đó thành phần theo trục y' của động lượng của viên đạn $p'_y = m'u'_y$, với m' là khối lượng của viên đạn đo được trong O' . Đối với hệ O , người bắn súng (gắn liền với hệ O' chuyển động với vận tốc v dọc theo trục chung $x - x'$, ta có $p_y = mu_y$, với m là khối lượng của viên đạn đo được trong O . Theo phép biến đổi Lorentz về vận tốc, vì $u'_x = 0$, nên ta có:

$$u_y = u'_y \frac{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}{1 + \frac{v}{c^2}u'_x} = u'_y \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}$$

và

$$p_y = mu'_y \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}$$

Vì $p'_y = m'u'_y$, nên nếu coi viên đạn có cùng khối lượng trong hai hệ O' và O , nghĩa là $m' = m$, thì $p'_y \neq p_y$. Như vậy tính chất bảo toàn của động lượng không có hiệu lực ở những vận tốc lớn. Vấn đề đặt ra là: Làm thế nào để các tính chất của động lượng vẫn có hiệu lực trong thuyết tương đối hẹp. Để giải quyết vướng mắc đó, Einstein đã chỉ ra rằng, các tính chất cổ điển của động lượng vẫn có hiệu lực đối với mọi hệ quy chiếu, nếu như khối lượng m của vật thay đổi với vận tốc u của nó theo

biểu thức:

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{u^2}{c^2}}}, \quad (1-16)$$

trong đó m - khối lượng của vật (chất điểm) trong hệ mà nó chuyển động với vận tốc u , được gọi là *khối lượng tương đối*;

m_0 - khối lượng của chính vật đó đo trong hệ mà nó đứng yên ($u = 0$), được gọi là *khối lượng nghỉ* (xem 3 của phụ lục).

2. Phương trình cơ bản của chuyển động trong thuyết tương đối

Ta có phương trình cổ điển biểu diễn định luật hai Newton:

$$\vec{F} = m \frac{d\vec{u}}{dt} \quad (1-17)$$

với khối lượng m của vật không phụ thuộc vào vận tốc chuyển động.

Phương trình dạng (1-17) không thể mô tả chuyển động của vật với vận tốc lớn được. Để chứa đựng cả các hiệu ứng tương đối tính, chúng ta cần phải đưa vào phương trình đó tính tương đối của khối lượng thay đổi theo vận tốc của vật. Từ đó suy ra rằng, biểu thức của định luật hai Newton mở rộng (tổng hợp lực tác dụng lên một vật bằng đạo hàm động lượng của vật theo thời gian) cho thuyết tương đối hẹp có dạng tổng quát:

$$\vec{F} = \frac{d}{dt} (m\vec{u}) = \frac{d}{dt} \left[\frac{m_0 \vec{u}}{\sqrt{1 - \frac{u^2}{c^2}}} \right]. \quad (1-18)$$

Đây là phương trình cơ bản của chuyển động trong thuyết tương đối hẹp.

3. Động lượng và năng lượng - khối lượng

a) *Động lượng*: Theo thuyết tương đối, động lượng của một vật chuyển động với vận tốc bằng:

$$\vec{P} = m\vec{u} = \frac{m_0 \vec{u}}{\sqrt{1 - \frac{u^2}{c^2}}}. \quad (1-19)$$

Như vậy động lượng cũng có tính tương đối và phương trình cơ bản (1-18) có thể theo dạng:

$$\vec{F} = \frac{d\vec{P}}{dt}. \quad (1-20)$$

b) *Hệ thức khối lượng - năng lượng*: Trong cơ học tương đối tính cũng như trong cơ học cổ điển, động năng w_d của một vật chuyển động bằng công của ngoại lực thực hiện để làm thay đổi vận tốc của vật từ $0(u = 0)$ đến giá trị $u(u = u)$ cho trước:

$$w_d = \int_0^u \vec{F} \cdot d\vec{s}$$

Để đơn giản, ta xét trường hợp chuyển động một chiều. Đối với chuyển động một chiều thì:

$$\begin{aligned} w_d &= \int_0^u F dx = \int_0^u \frac{d}{dt} (mu) dx = \int_0^u d(mu) \frac{dx}{dt} = \\ &= \int_0^u (mdu + udm)u = \int_0^u (mudu + u^2 dm) \end{aligned} \quad (1-21)$$

Từ công thức tính khối lượng theo vận tốc:

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{u^2}{c^2}}}$$

ta có:

$$m^2 c^2 - m^2 u^2 = m_0^2 c^2. \quad (1-22)$$

Lấy vi phân hai vế biểu thức (1-22)

$$2mc^2 dm - 2m^2 u du - 2mu^2 dm = 0. \quad (1-23)$$

Từ (1-23) ta có phương trình:

$$mudu + u^2 dm = c^2 dm. \quad (1-24)$$

Ta thấy vế trái của (1-24) chính là biểu thức dưới dấu tích phân của (1-21) và khi đó

$$w_d = \int_0^u (mudu + u^2 dm) = \int_{m_0}^m c^2 dm = mc^2 - m_0 c^2. \quad (1-25)$$

Động năng của vật biểu diễn độ biến thiên năng lượng E của vật đang chuyển động (với vận tốc u) và năng lượng E₀ của vật khi đứng yên (u = 0):

$$w_d = E - E_0$$

và như vậy:

$$E - E_0 = mc^2 - m_0 c^2. \quad (1-26)$$

Từ đây có thể viết:

$$\left. \begin{aligned} E_0 &= m_0 c^2 + C ; \\ E &= mc^2 + C , \end{aligned} \right\} \quad (1-27)$$

trong đó C - một hằng số cộng.

Do điều kiện m = 0 thì E = 0, ta rút ra C = 0. Kết quả ta nhận được hệ thức

Einstein:

$$E = mc^2. \quad (1-28)$$

Hệ thức (1-28) cho biết sự tương đương giữa khối lượng và năng lượng. Thậm chí ngay cả khi đứng yên thì vật cũng có một năng lượng (gọi là năng lượng nghỉ) $E_0 = m_0c^2$. Về mặt nguyên tắc, khối lượng của một vật có thể biến đổi hoàn toàn thành một dạng năng lượng nào đó.

Trong trường hợp $u \ll c$, sử dụng phép toán gần đúng

$$\frac{1}{\sqrt{1 - \frac{u^2}{c^2}}} \approx 1 + \frac{1}{2} \cdot \frac{u^2}{c^2},$$

từ biểu thức tính động năng của vật chuyển động theo thuyết tương đối (1-25), ta tìm lại được biểu thức động năng trong cơ học cổ điển:

$$\begin{aligned} w_d &= mc^2 - m_0c^2 = m_0c^2 \left(\frac{1}{\sqrt{1 - \frac{u^2}{c^2}}} - 1 \right) \approx \\ &\approx m_0c^2 \left(1 + \frac{1}{2} \cdot \frac{u^2}{c^2} - 1 \right) = \frac{1}{2} m_0u^2. \end{aligned} \quad (1-29)$$

c/ Hệ thức giữa động lượng và năng lượng: Vì động lượng được bảo toàn nên để tiện lợi người ta thường biểu diễn năng lượng của vật dưới dạng một hàm của động lượng của nó.

Bình phương hai vế của biểu thức

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{u^2}{c^2}}},$$

rồi nhân hai vế với c^2 ta được:

$$\begin{aligned} m^2c^4 - m^2u^2c^2 &= m_0^2c^4, \\ \text{hay } (mc^2)^2 &= (mu)^2c^2 + m_0^2c^4. \end{aligned} \quad (1-30)$$

Thay $E = mc^2$ và $|\vec{P}| = mu$ vào biểu thức (1-30) ta có :

$$E^2 = p^2c^2 + m_0^2c^4. \quad (1-31)$$

Đây là biểu thức liên hệ giữa năng lượng và động lượng của vật

d) Ý nghĩa triết học của hệ thức Einstein: Khi Einstein phát minh ra hệ thức nổi tiếng $E = mc^2$ thì nhiều nhà vật lý duy tâm cho rằng: Theo hệ thức Einstein vật chất "biến thành" năng lượng, do đó vật chất dần dần sẽ bị tiêu hao hết. Nhưng thực tế vật chất tồn tại khách quan và hệ thức $E = mc^2$ không hề chứng tỏ vật chất bị tiêu tan, mà chỉ ra mối liên hệ giữa hai thuộc tính quan trọng của vật chất: đó là khối lượng (m) đặc trưng cho tính chất bảo toàn vận động và tương tác hấp dẫn giữa các vật ; và đó là

năng lượng (E) đặc trưng cho mức độ của vận động về lượng và chất. Vì vật chất tồn tại khách quan nên hai thuộc tính nêu trên có mối liên hệ chặt chẽ với nhau.

1-5. NGUYÊN LÝ TƯƠNG ĐƯƠNG

Theo thuyết tương đối hẹp Einstein thì tất cả các định luật của tự nhiên đều phải bất biến (không đổi) đối với các phép biến đổi Lorentz và bình đẳng đối với tất cả các hệ quy chiếu quán tính. Lý thuyết điện từ Maxwell thỏa mãn các đòi hỏi của thuyết tương đối hẹp và dạng của các phương trình Maxwell cũng bất biến đối với phép biến đổi Lorentz. Trong thực tế bất kỳ vật nào (hay hạt nào) cũng chịu một tác động nào đó của môi trường vật chất và các vật xung quanh dẫn đến sự tương tác của những vật này với những vật khác (của những trường này với những trường khác). Các tương tác này liên quan đến khối lượng và năng lượng, mà phải kể đến là tương tác hấp dẫn. Song thuyết tương đối của A.Einstein lại không đề cập đến lực hấp dẫn. Trong khi đó chuyển động của các vật thể đều bị chi phối bởi trường hấp dẫn Newton. Nhưng lý thuyết hấp dẫn của Newton lại không thỏa mãn yêu cầu của thuyết tương đối hẹp. Điều đó dẫn A.Einstein nghĩ đến việc phải làm phù hợp lý thuyết hấp dẫn với thuyết tương đối của mình sao cho thuyết tương đối hẹp không chỉ áp dụng cho các hệ quán tính, mà có thể mở rộng áp dụng được cho các hệ quy chiếu không quán tính các hệ quy chiếu chuyển động có gia tốc). Từ ý tưởng đó A.Einstein phát minh ra thuyết tương đối rộng (1916) làm khuấy động cả ngành vật lý đầu thế kỷ 20.

Nội dung lý thuyết tương đối rộng bắt đầu xuất phát từ sự phân tích khối lượng quán tính m_{qt} và khối lượng hấp dẫn m_{hd} trong đó khối lượng quán tính bằng tỷ số giữa lực F tác dụng lên vật và gia tốc a mà vật thu được: $m_{qt} = \frac{F}{a}$, m_{qt} đặc trưng cho quán tính (tức là bảo toàn vận động của vật đó), còn m_{hd} thì xét trong trọng trường, được xác định từ lực hấp dẫn F_{hd} khi vật có khối lượng m_{hd} đặt trong trường hấp dẫn của vật khối lượng M gây ra:

$$F_{hd} = \frac{G \cdot m_{md} \cdot M}{R^2} \quad (G = 6,67 \cdot 10^{-11} \text{ N} \cdot \text{m}^2/\text{kg}^2)$$

là hằng số hấp dẫn ; R là khoảng cách giữa hai vật hoặc bằng tỷ số giữa trọng lực P tác dụng lên vật (trong trường hấp dẫn của Trái Đất) và gia tốc rơi tự do g của vật $m_{hd} = \frac{P}{g}$, khối lượng này đặc trưng cho khả năng hấp dẫn của vật. Nhiều kết quả thí nghiệm cho thấy: Hai khối lượng m_{qt} và m_{hd} bằng nhau (chẳng hạn từ các công trình của Newton). Sự kiện thực nghiệm đơn giản nhất biểu thị $m_{qt} = m_{hd}$ là sự kiện chuyển động rơi tự do, không phụ thuộc vào khối lượng của

$$a = \frac{m_{hd} g}{m_{qt}}$$

Rất nhiều thí nghiệm xác nhận tỷ số

$$\frac{m_{hd}}{m_{qt}} = 1$$

Với độ chính xác cao.

A.Einstein quan niệm rằng m_{qt} và m_{hd} bằng nhau là tuyệt đối và coi đó là một nguyên lý tổng quát của tự nhiên, gọi là nguyên lý tương đương. Nguyên lý tương đương này được A.Einstein minh họa bằng mô phỏng một thí nghiệm sau đây. Giả sử có một quan sát viên đứng trong một thang máy kín, đặt xa tất cả mọi neutron gây ra trường hấp dẫn. Nếu thang máy chuyển động có gia tốc lên phía trên, người quan sát trong thang máy sẽ cảm thấy như có “xuất hiện” một trường hấp dẫn hút người đó xuống phía dưới. Hoặc cho thang máy rơi tự do (với gia tốc g) trong trọng trường thì người đó cảm thấy ở trạng thái không trọng lượng, nghĩa là chuyển động có gia tốc của hệ thang máy đã “khử” được trường hấp dẫn của Trái Đất. Từ đây A. Einstein chỉ ra rằng: Không thể nào phân biệt được ta đang ở trong chuyển động quán tính hay đang nằm trong ảnh hưởng của trường hấp dẫn. Thực nghiệm được mô tả ở trên đã minh chứng cho nguyên lý về sự đồng nhất giữa khối lượng quán tính và khối lượng hấp dẫn. Và cũng chính A. Einstein đã phát biểu nguyên lý tương đương này dưới dạng khác sâu sắc hơn, như sau: "Nếu trong trường hấp dẫn (có kích thước không gian nhỏ) ta đưa vào hệ không quán tính với gia tốc thích hợp thay cho hệ quán tính thì các hiện tượng xảy ra cũng giống như trong không gian không có trường hấp dẫn".

Như vậy theo cách phát biểu này thì nguyên lý tương đương chỉ có hiệu lực trong một phạm vi không gian nhỏ, nghĩa là chỉ áp dụng với trường hấp dẫn đồng đều và không đổi, còn hệ quy chiếu tịnh tiến với gia tốc không đều tương đương với một trường hấp dẫn đồng đều nhưng biến thiên. Vì nguyên lý tương đương chỉ áp dụng được trong không gian nhỏ, nên giữa các trường hấp dẫn tương đương với các hệ quy chiếu không quán tính và các trường hấp dẫn “thực” ở trong các hệ quán tính là không tuyệt đối giống nhau. Chúng biểu hiện những tính chất khác nhau tại những khoảng cách xa vô cùng. Ở vô cực, đối với các trường gây ra trường hấp dẫn thực luôn luôn tiến tới không, trong khi đó các trường tương đương với hệ quy chiếu không quán tính lại tăng vô hạn, hoặc tối thiểu có một giá trị hữu hạn tại đó. Chẳng hạn, trong một hệ quy chiếu quay, các lực ly tâm xuất hiện tăng vô hạn khi ta đi xa trục quay ; còn trường tương đương với một hệ quy chiếu chuyển động thẳng có gia tốc đều là như nhau trong toàn không gian, kể cả ở vô cực. Các trường hấp dẫn "thực" (tồn tại trong các hệ quy chiếu quán tính) không thể khử được dù bằng bất kỳ cách chọn hệ quy chiếu nào. Trong khi đó, các trường tương đương với các hệ quy chiếu không quán tính lại biến mất khi chuyển sang hệ quy chiếu quán tính. Ở đây chúng ta cần lưu ý rằng, nguyên lý tương đương giữa các lực hấp dẫn và các lực quán tính được giới hạn trong phạm vi nào đó trong không gian và thời gian. Sự “sinh” và “hủy” trường hấp dẫn nhờ lực quán tính chỉ có thể đạt được trong không gian nhỏ và khoảng thời gian nhỏ. Chẳng hạn, các vật thể hầu như mất trọng lượng trong chiếc thang máy rơi, nhưng thực ra thang máy không thể có kích thước lớn vô hạn và sự rơi của nó không thể lớn

vô hạn được.

Với nguyên lý tương đương, giữa sự hấp dẫn và chuyển động, hay nói cách khác, giữa sự hấp dẫn và động học có mối quan hệ chặt chẽ. Do chuyển động xảy ra trong không gian và thời gian, nên có thể suy ra rằng trường hấp dẫn có ảnh hưởng đến tính chất vật lý của không gian và thời gian, phá hủy tính đồng nhất và đẳng hướng của không gian và thời gian ở trong thuyết tương đối hẹp. Vì vậy, khi nghiên cứu về không gian Einstein phải dùng hình học Riemann⁽¹⁾ trong lý thuyết tương đối rộng, thay cho việc dùng hình học Euclide⁽²⁾ trong lý thuyết tương đối hẹp.

1-6. TRƯỜNG LỰC VÀ THUYẾT TƯƠNG ĐỐI

Theo quan niệm của vật lý cổ điển thì "chất" và "trường" là hai dạng tồn tại cơ bản của chất. Đó là hai khái niệm cơ bản của lý thuyết cấu tạo vật chất mà đối với mỗi dạng vật chất đó người ta đã xây dựng nên một lý thuyết đặc trưng về chuyển động.

"Chất" là nguyên liệu để tạo nên các vật chất, có khối lượng, tập trung trong một thể tích xác định.

"Trường" được coi như một dạng vật chất đặc biệt, có nhiệm vụ thực hiện tương tác (hút, đẩy) giữa các vật cách xa nhau. Trường tồn tại liên tục ở khắp mọi nơi, có mang năng lượng nhưng không có khối lượng. Đôi khi ta cũng nhận biết được tác dụng của trường nào đó: chẳng hạn trường bức xạ nhiệt, trường hấp dẫn, trường điện từ ...

"Chất" và "trường" không thể chuyển hóa qua nhau được.

Trong lý thuyết tương đối A.Einstein đã tìm ra được công thức liên hệ giữa khối lượng và năng lượng $E = mc^2$. Công thức này chứng tỏ rằng giữa khối lượng và năng lượng có mối liên hệ mật thiết với nhau: chỗ nào có năng lượng thì chỗ đó có khối lượng và ngược lại. Như vậy, sự cách biệt giữa chất và trường theo tiêu chuẩn khối lượng cũng không còn nữa. Giữa "chất" và "trường" có thể chuyển hóa lẫn nhau (trong lý thuyết lượng tử tương đối tính).

Theo lý thuyết sự thống nhất vĩ đại về tương tác thì mọi tương tác không trực tiếp - thông qua trường tương ứng "hạt trường" tương ứng). Thực nghiệm đã chứng tỏ rằng, trong tự nhiên không tồn tại những tương tác tức thời, mà chỉ tồn tại những tương tác với vận tốc hữu hạn thông qua "trường". Vận tốc truyền tương tác theo thuyết tương đối hẹp của A. Einstein là như nhau trong các hệ quán tính và theo thực nghiệm vận tốc không đổi này là cực đại và bằng vận tốc ánh sáng trong chân không.

1. Georg Fridrich Beruhard Riemann (17.9.1826 - 20.7.1866) người Đức (NBT).

2. Euclide (oclit) (330 - 275 trước Công nguyên) người Hy Lạp cổ đại (NBT).

Chương II

LÝ THUYẾT LƯỢNG TỬ

Theo quan niệm quang học sóng thì các loại bức xạ điện từ (như tia hồng ngoại, ánh sáng nhìn thấy, tia tử ngoại, tia Roentgen⁽¹⁾, tia gamma) đều là những sóng điện từ lan truyền trong không gian, mang theo năng lượng tỷ lệ với bình phương biên độ sóng và có thể 'biến đổi liên tục. Như vậy là một vật có thể phát ra bức xạ và hấp thụ bức xạ chiếu tới những năng lượng tùy ý, liên tục. Nhưng nếu chỉ dựa vào quan niệm đó, có những hiện tượng chúng ta không giải thích được. Các hiện tượng này được giải thích trọn vẹn khi chúng ta dựa vào một quan niệm mới, đó là quan niệm lượng tử (thuyết lượng tử của M.K.E.Planck⁽²⁾).

2-1. BỨC XẠ NHIỆT

1. Khái niệm về phát xạ và hấp thụ

Bình thường thì các phân tử, nguyên tử không phát ra bức xạ, nếu bị kích thích thì chúng nhận thêm năng lượng rồi chuyển từ trạng thái cơ bản (có năng lượng thấp nhất) sang trạng thái kích thích (có mức năng lượng cao hơn). Ở trạng thái kích thích một thời gian rất ngắn ($10^{-8} - 10^{-9}$ s), chúng trở về trạng thái cơ bản, khi đó năng lượng nhận được sẽ hoàn lại môi trường dưới dạng bức xạ điện từ. Để kích thích các nguyên tử hoặc phân tử, người ta có thể có nhiều cách khác nhau: *Bằng va chạm*, ví dụ va chạm giữa các nguyên tử, ion, electron trong phóng điện trong khí kém, trong phóng điện hồ quang, tia lửa điện,...; *kích thích bằng nhiệt* bằng cách đốt nóng như sợi tóc bóng đèn, các lò nhiệt; hoặc kích thích *quang học* như chiếu sáng tử ngoại vào một số chất,... Nếu năng lượng cung cấp ở *dạng nhiệt* thì bức xạ điện từ phát ra gọi là *bức xạ nhiệt* và hiện tượng đó gọi là *phát xạ nhiệt*.

Thí nghiệm chỉ ra rằng một vật đen ở nhiệt độ T phát ra những bức xạ điện từ có phổ liên tục, năng lượng của bức xạ phát ra phụ thuộc vào nhiệt độ của vật. Vật vừa phát ra bức xạ, vừa đồng thời hấp thụ năng lượng của những bức xạ chiếu tới. Khi mà năng lượng bức xạ do vật phát ra đúng bằng năng lượng vật thu vào bằng hấp thụ bức xạ dưới dạng nhiệt trong cùng một thời gian thì nhiệt độ của vật giữ không đổi. Khi đó vật ở *trạng thái cân bằng nhiệt động*.

Nếu sự cân bằng năng lượng được thực hiện đối với cả hệ thống vật và bức xạ trong một cái hốc kín cách nhiệt thì bức xạ gọi là *bức xạ cân bằng*.

2. Các đại lượng đặc trưng

a) *Năng suất phát xạ*: Xét một vật phát xạ cân bằng ở nhiệt độ T xác định.

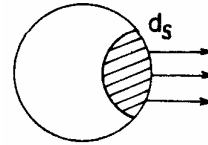
1. wilhelm Conrad Roentgen (Rơ ghen) (27.3.1845 - 1923) người Đức, khám phá ra tia Roentgen (tia X) (NBT).

2. Max Kinh Ernst Planck (Plăng) (23.4.1858 - 1947) người Đức (NBT).

Gọi $dw_p(\gamma, T)$ là năng lượng bức xạ phát ra từ một phần tử diện tích ds (h.2-1) ở mặt ngoài của vật phát xạ trong một đơn vị thời gian mang theo bởi các bức xạ điện từ có tần số từ γ đến $\gamma + d\gamma$. Đại lượng này tỷ lệ với $d\gamma$ và ds , nên ta có thể viết:

$$dwp(\gamma, T) = r(\gamma, T)d\gamma \cdot ds. \quad (2-1)$$

Như vậy năng lượng bức xạ phát ra trong một đơn vị thời gian từ một đơn vị diện tích của vật phát xạ là $r(\gamma, T)d\gamma$. Hệ số tỷ lệ $r(\gamma, T)$ gọi là *năng suất phát xạ đơn sắc* ứng với tần số bức xạ γ của vật (công suất bức xạ trong vùng phổ $d\gamma$, ở nhiệt độ T).



Hình 2-1

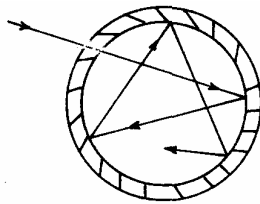
b) *Hệ số hấp thụ*: Gọi $\omega(\gamma, T)$ là công suất ứng với khoảng tần số $(\gamma, \gamma + d\gamma)$ gửi tới một đơn vị diện tích của vật

và $\omega_t(\gamma, T)$ là công suất mà một đơn vị diện tích ấy hấp thụ, thì theo định nghĩa hệ số hấp thụ đơn sắc (khả năng hấp thụ) ứng với tần số hấp thụ γ của vật là đại lượng:

$$a(\gamma, T) = \frac{\omega_t(\gamma, T)}{\omega(\gamma, T)} \quad (2-2)$$

Nói chung $a(\gamma, T) < 1$, còn vật có $a(\gamma, T) = 1$ thì $w_t(\gamma, T) = w(\gamma, T)$,

nghĩa là vật hấp thụ toàn bộ bức xạ đến vật và được gọi là *vật đen tuyệt đối*. Trong thực tế chỉ có những vật có tính chất gần với tính chất vật đen tuyệt đối. Để có một vật đen tuyệt đối, có thể dùng một cái hốc kín trên đó khoét một lỗ nhỏ, mặt trong phủ một lớp chất xốp đen, giữ nhiệt độ T không đổi (h.2-2). Khi bức xạ đến hốc, đi qua lỗ nhỏ rồi phản xạ nhiều lần trên mặt trong của hốc mà không thoát ra được khỏi hốc.



Hình 2-2

Trong từng vùng phổ công suất bức xạ của vật đen tuyệt đối không giống nhau. Vì trong quá trình phát xạ, vật phát ra một bức xạ điện từ có tần số từ nhỏ đến lớn (từ 0 đến ∞) nên năng lượng của bức xạ đối với toàn phổ liên tục chứa trong một đơn vị diện tích là:

$$R(T) = \int_0^{\infty} r(\gamma, T)d\gamma. \quad (2-3)$$

Đại lượng $R(T)$ được gọi là *năng suất phát xạ toàn phần của vật đen tuyệt đối (công suất phát xạ toàn phần)*.

3. Định luật Kirchoff⁽¹⁾

Để giữ nguyên nhiệt độ T thì công suất bức xạ toàn phần $R(T)$ của vật đen tuyệt đối phải bằng công suất tới $w(\gamma, T)$, nghĩa là:

$$R(T) = \omega(\gamma, T).$$

Đối với những vật xám (không phải là một vật đen tuyệt đối), công suất bức xạ đến vật $\omega(\gamma, T)$ được vật hấp thụ một phần (với hệ số hấp thụ $a(\gamma, T)$, nên công suất do một đơn vị diện tích của vật hấp thụ là $a(\gamma, T) \cdot \omega(\gamma, T)$). Cũng lập luận tương tự như ở trên, muốn bảo đảm cho nhiệt độ của vật không đổi thì công suất hấp thụ $a(\gamma, T) \cdot \omega(\gamma, T)$ phải bằng công suất bức xạ toàn phần $w_p(\gamma, T)$ của vật từ một đơn vị diện tích của vật bức xạ ra (khả năng bức xạ) nghĩa là:

$$a(\gamma, T) \cdot \omega(\gamma, T) = w_p(\gamma, T).$$

Do $\omega(\gamma, T) = R(T)$, nên

$$w_p(\gamma, T) = a(\gamma, T) R(T),$$

suy ra:

$$\frac{w_p(\gamma, T)}{a(\gamma, T)} = R(T). \quad (2-4)$$

Biểu thức (2-4) biểu diễn nội dung của định luật Kirchoff: "Đối với mọi vật, tỷ số giữa khả năng bức xạ và khả năng hấp thụ bằng công suất bức xạ toàn phần của vật đen".

Định luật này không những đúng cho công suất bức xạ toàn phần, mà còn đúng cho công suất bức xạ cho một vùng phổ nhất định. Đối với các vật đồng thời phát xạ và hấp thụ bức xạ nhiệt, khi trạng thái cân bằng được thiết lập thì rõ ràng vật nào hấp thụ mạnh cũng sẽ phát xạ mạnh. Nếu không như vậy thì vật tự phá hủy trạng thái cân bằng của nó mà không cần tác động của bên ngoài (điều này trái với nhiệt động lực học). Theo G.R.Kirchoff thì: Khả năng phát xạ ($r(\gamma, T)$) và khả năng hấp thụ ($a(\gamma, T)$) của một vật tỷ lệ thuận với nhau, nghĩa là:

$$\frac{r(\gamma, T)}{a(\gamma, T)} = f(\gamma, T). \quad (2-5)$$

Từ đó định luật Kirchoff có thể phát biểu như sau: "Tỷ số giữa năng suất phát xạ đơn sắc và hệ số hấp thụ đơn sắc của cùng một vật ở nhiệt độ nhất định là một hàm chỉ phụ thuộc vào tần số bức xạ γ và nhiệt độ T , mà không phụ thuộc vào bản chất của vật đó".

1. Gustave Roberl Xirchoff (1824 - 1887) người Đức (NBT).

2-2. THUYẾT LƯỢNG TỬ CỦA M.K.E.PLANCK

1. Nội dung thuyết lượng tử của M.K.E.Planck

Dựa vào lý thuyết cổ điển về bức xạ, trong đó xem năng lượng bức xạ có tính chất liên tục, John, William Strutt Rayleigh (Rê lây) (1842 - 1919) và James Hopwood Jeans (Ginx) (1877 - 1946) đã tìm được biểu thức của hàm phổ biến:

$$f(\gamma, T) = \frac{2\pi\gamma^2}{c^2} K_B T, \quad (2-6)$$

trong đó $K_B = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ J/K}$ - hằng số Boltzmann⁽¹⁾.

Công thức (2-6) phù hợp với thực nghiệm trong phạm vi các tần số nhỏ và các nhiệt độ tương đối cao, còn trong trường hợp nhiệt độ thấp và tần số lớn thì không phù hợp nữa. Vì khi tần số bức xạ lớn thì hàm $f(\gamma, T)$ càng lớn, dẫn tới, chẳng hạn năng suất phát xạ toàn phần của một vật đen tuyệt đối vô cùng lớn:

$$R(T) = \int_0^{\infty} f(\gamma, T) d\gamma = \infty.$$

Để giải quyết điều này, năm 1900 M.K.E.Planck đã phủ định lý thuyết cổ điển về bức xạ và đã đưa ra một giả thuyết mới: thuyết lượng tử năng lượng:

- Các nguyên tử, phân tử phát xạ hay hấp thụ năng lượng của bức xạ điện từ một cách gián đoạn, gồm một số nguyên lần của một lượng năng lượng nhỏ xác định, gọi là lượng tử năng lượng. Với một bức xạ điện từ có tần số γ (bước sóng λ) lượng tử năng lượng tương ứng có giá trị:

$$\varepsilon = h\gamma = h \frac{c}{\lambda}, \quad (2-7)$$

trong đó $h = 6,625 \cdot 10^{-34} \text{ J.s}$ - hằng số Planck.

2. Công thức Planck

Dựa vào thuyết lượng tử năng lượng nêu trên, M.K.E.Planck đã xác định được dạng của hàm phổ biến $f(\gamma, T)$ (tức là năng suất phát xạ đơn sắc của vật đen tuyệt đối) thay thế cho công thức (2-6):

$$f(\gamma, T) = \frac{2\pi\gamma^2}{c^2} \cdot \frac{h\gamma}{e^{h\gamma/K_B T} - 1}. \quad (2-8)$$

Đây là công thức Planck. Công thức (2-8) đúng cho mọi vùng nhiệt độ và vùng tần số khác nhau, rất phù hợp với thực nghiệm. Mặt khác, từ công thức (2-8) chúng ta có thể suy lại được công thức (2-6).

1. Ludwig Eduerd (Bonxman) (20.2.1844 - 5.9.1906) người áo (NBT)

Thật vậy, trong trường hợp nhiệt độ cao và tần số nhỏ thì:

$$\frac{h\gamma}{K_B T} \ll 1, \text{ nên } e^{\frac{h\gamma}{K_B T}} \approx 1 + \frac{h\gamma}{K_B T}$$

khi đó công thức (2- 8) sẽ trở về công thức (2- 6):

$$f(\gamma, T) = \frac{2\pi\gamma^2}{c^2} \cdot \frac{h\gamma}{\frac{h\gamma}{K_B T}} = \frac{2\pi\gamma^2}{c^2} K_B T.$$

Trong trường hợp nhiệt độ thấp và tần số lớn, nghĩa là khi

$$\frac{h\gamma}{K_B T} \gg 1,$$

chúng ta có thể bỏ qua số hạng (- 1) so với số hạng

$$e^{\frac{h\gamma}{K_B T}},$$

nhên công thức (2- 8) sẽ trở thành:

$$f(\gamma, T) = \frac{2\pi\gamma^2}{c^2} \cdot \frac{h\gamma}{\frac{h\gamma}{K_B T}} = \frac{2\pi h\gamma^3}{c^2} e^{-\frac{h\gamma}{K_B T}} \quad (2-9)$$

Đây chính là công thức Wine⁽¹⁾ đúng cho trường hợp nhiệt độ thấp và tần số cao.

Sự đúng đắn của công thức Planck dẫn chúng ta đến việc phải thừa nhận rằng năng lượng được bức xạ thành từng lượng tử riêng biệt. Mỗi lượng tử năng lượng ánh sáng có tần số γ mang một năng lượng xác định $h\gamma$. Đó chính là tính chất lượng tử của ánh sáng.

Thuyết lượng tử năng lượng của M.K.E.Planck không chỉ cho kết quả phù hợp với thực nghiệm trong trường hợp vừa xét ở trên, mà còn giúp ta giải thích nhiều hiện tượng khác nữa.

3. Các định luật bức xạ của vật đen tuyệt đối

Từ công thức Planck chúng ta có thể suy ra những hệ quả quan trọng diễn tả các quy luật phát xạ của vật đen tuyệt đối.

a) Định luật Stéfan⁽²⁾ - Boltzmann:

- Từ công thức Planck ta có thể tính năng suất phát xạ toàn phần của vật đen tuyệt đối:

1. Leo wine (1862 - 1939) người Mỹ (NBT).

2. Joseph Stfan (1835 - 1893).

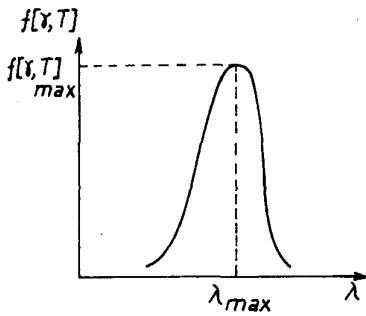
$$R(T) = \int_0^{\infty} f(\gamma, T) d\gamma = \int_0^{\infty} \frac{2\pi\gamma^2}{c^2} \cdot \frac{h\gamma}{e^{K_B T - 1}} d\gamma =$$

$$= \frac{2\pi K_B^4 T^4}{c^2 h^3} \cdot \int_0^{\infty} \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = \sigma T^4, \quad (2-10)$$

ở đây ta đã đặt biến số $x = \frac{h\gamma}{K_B T}$ và tính tích phân

$$\int_0^{\infty} \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = 6,4939.$$

Biểu thức (2-10) biểu diễn định luật Stéfan - Boltzmann với nội dung:



Hình 2-3

"Năng suất phát xạ toàn phần của một vật đen tuyệt đối tỷ lệ với lũy thừa bậc bốn của nhiệt độ tuyệt đối của vật ấy".

Ở đây $\sigma = 5,67 \cdot 10^{-8} \text{ W/m}^2\text{K}^4$ gọi là hằng số Stéfan Boltzmann. Trong vùng nhiệt độ cao, khả năng bức xạ đối với mọi vật tuân theo đúng định luật Stéfan-Boltzmann, riêng giá trị σ là thay đổi tùy theo từng vật.

Thực nghiệm cho thấy rằng sự phân bố năng lượng trong phổ bức xạ của vật đen tuyệt đối có một cực đại $f_{\max}(\gamma, T)$ ứng với bước sóng λ_{\max} của bức xạ điện từ (h.2-3). Năm 1817 L.Vine đã tìm được quy luật xác định vị trí cực đại phụ thuộc vào nhiệt độ T. Công thức diễn tả định luật Vine có dạng:

$$\lambda_{\max} = \frac{b}{T}, \quad (2-11)$$

với $b = 2,886 \cdot 10^{-3} \text{ mk}$ gọi là hằng số Vine.

Như vậy, ứng với bức xạ λ_{\max} vật đen phát xạ mạnh nhất, đó là nội dung của định luật Vine: "Đối với vật đen tuyệt đối, bước sóng λ_{\max} của chùm bức xạ đơn sắc mang nhiều năng lượng nhất tỷ lệ nghịch với nhiệt độ tuyệt đối của vật".

Từ (2-11) ta thấy rằng, khi nhiệt độ T của vật càng cao thì λ_{\max} càng bé. Đó là cơ sở để chúng ta đoán được nhiệt độ của một vật dựa trên bức xạ của vật đó. Rõ ràng là vật khi nung nóng bức xạ màu tím có nhiệt độ cao hơn khi vật bức xạ màu đỏ, vì bước sóng của màu tím nhỏ hơn bước sóng của màu đỏ.

2-3. THUYẾT PHÔTON CỦA A.EINSTEIN

Thuyết lượng tử năng lượng của M.K.E.Planck đã nêu lên tính gián đoạn của năng lượng bức xạ điện từ phát xạ hay hấp thụ, nhưng chưa đề đến bản chất cấu tạo gián đoạn của bức xạ điện từ đó. Để giải quyết khó khăn này, A.Einstein đã dựa vào thuyết lượng tử về năng lượng của M.K.E.Planck, rồi đưa ra quan niệm lượng tử mới về cấu tạo ánh sáng - thuyết photon (thuyết lượng tử ánh sáng).

1. Thuyết photon của A.Einstein

- Bức xạ điện từ được tạo thành từ các hạt gọi là lượng tử ánh sáng hay photon.
- Mỗi photon có một năng lượng xác định ε chỉ phụ thuộc vào tần số của bức xạ:

$$\varepsilon = h\nu = h \frac{c}{\lambda}, \quad (2-12)$$

trong đó $h = 6,625 \cdot 10^{-34}$ m/s.

- Trong mọi môi trường (kể cả chân không các photon chuyển động với cùng vận tốc c của ánh sáng: $c = 3 \cdot 10^8$ m/s.

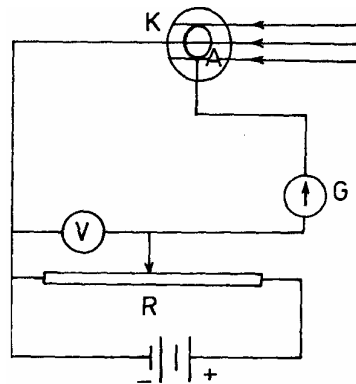
- Sự phát xạ hay hấp thụ bức xạ điện từ của một vật có nghĩa là sự phát xạ hay hấp thụ photon của vật đó.

- Cường độ bức xạ tỷ lệ với số photon phát ra từ nơtron trong một đơn vị thời gian.

Vì các photon chuyển động với vận tốc ánh sáng, nên theo thuyết tương đối hẹp, khối lượng nghỉ của chúng bằng không. Nếu một photon tồn tại thì nó sẽ chuyển động với vận tốc c của ánh sáng, nếu photon không chuyển động với vận tốc đó nữa thì nó cũng không tồn tại.

2. Hiện tượng quang điện

Sơ đồ thí nghiệm nghiên cứu hiện tượng quang điện được bố trí như hình 2-4.



Hình 2-4

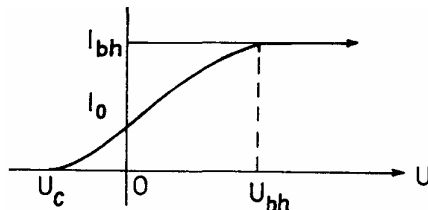
Chiếu một chùm bức xạ điện từ thích hợp vào mặt kim loại làm catôt (K) của tế bào quang điện, ta thấy trong mạch xuất hiện dòng điện gọi là dòng quang điện. Việc

có dòng quang điện chứng tỏ: electron đã bị bật ra khỏi mặt kim loại khi chiếu bức xạ điện từ thích hợp vào mặt kim loại đó. Hiện tượng như vậy gọi là hiện tượng quang điện.

Khi thay đổi tần số γ của bức xạ điện từ chiếu tới, hiệu điện thế U giữa anốt (A) và catốt, cũng như thay đổi kim loại làm catốt, kết quả thí nghiệm cho biết:

- Đối với một kim loại cho trước, tồn tại một tần số ngưỡng γ_0 đặc trưng cho kim loại đó, mà nếu bức xạ điện từ có tần số $\gamma < \gamma_0$ thì sẽ không bật được electron ra khỏi kim loại, dù cường độ bức xạ chiếu tới có giá trị như thế nào.

- Khi giữ tần số γ không đổi, dòng quang điện phụ thuộc vào hiệu điện thế U có dạng như hình 2-5.



Hình 2-5

Như vậy, khi U tăng thì I tăng và đến một giá trị nào đó $U > U_{bh}$ thì dòng quang điện có một giá trị không đổi gọi là dòng quang điện bão hòa ($I = I_{bh}$). Ngay cả khi $U = 0$, dòng quang điện vẫn có giá trị $I_0 \neq 0$. Điều này chứng tỏ các quang electron đã có sẵn động năng ban đầu khi bắn ra khỏi kim loại. Động năng này phụ thuộc vào bản chất từng kim loại và tần số γ của chùm bức xạ chiếu tới, mà không phụ thuộc vào cường độ của chùm bức xạ tới đó.

- Đối với một bức xạ điện từ chiếu tới thích hợp, số electron bật ra khỏi mặt kim loại tỷ lệ với cường độ chùm bức xạ chiếu tới.

- Dòng quang điện có thể bị triệt tiêu khi ta đặt vào giữa anốt và catốt một hiệu điện thế ngược (hiệu điện thế cản) U_c sao cho công cản của lực điện trường có độ lớn bằng động năng ban đầu cực đại của quang electron:

$$eU_c = \frac{1}{2}mv_{\text{omax}}^2$$

(e , m tương ứng là điện tích và khối lượng của electron, $U_c < 0$).

Từ các kết quả thí nghiệm về hiện tượng quang điện, cuối thế kỷ 19 Heinrich Rudolf Hertz (1857 - 1894) người Đức và Stoletov đã tìm ra các định luật quang điện sau đây:

a) *Định luật quang điện thứ nhất về giới hạn quang điện*: Đối với mỗi kim loại xác định, hiện tượng quang điện chỉ xảy ra khi bước sóng λ của chùm bức xạ điện từ chiếu tới nhỏ hơn một giá trị xác định λ_0 ứng với kim loại đó: $\lambda < \lambda_0$ ($\gamma > \gamma_0$). λ_0 được

gọi là giới hạn quang điện của kim loại.

bị *Định luật quang điện thứ hai (về dòng quang điện bão hòa)*: Cường độ dòng quang điện bão hòa tỷ lệ với cường độ của chùm bức xạ thích hợp chiếu tới.

c) *Định luật quang điện thứ ba (về động năng ban đầu cực đại của quang electron)*: Động năng ban đầu cực đại của quang electron không phụ thuộc vào cường độ của chùm bức xạ chiếu tới kim loại mà chỉ phụ thuộc vào tần số của chùm bức xạ đó và bản chất của kim loại.

3. Giải thích các định luật quang điện

Dựa vào thuyết photon của A.Einstein chúng ta mới giải thích được trọn vẹn bản chất và các định luật của hiện tượng quang điện.

a) *Giải thích định luật quang điện thứ nhất*: Vì các electron đều liên kết với mặt kim loại (tuy mức độ khác nhau), nên electron muốn thoát khỏi kim loại nó cần có năng lượng ít nhất bằng công thoát A_0 của electron đối với kim loại đó (ở đây A_0 là năng lượng cần thiết để giải phóng electron liên kết yếu nhất). Khi bức xạ điện từ tần số γ chiếu tới kim loại, mỗi electron hấp thụ một photon và electron nhận được năng lượng $\varepsilon = h\gamma$ của photon. Nếu $h\gamma > A_0$ thì electron bứt khỏi kim loại và hiện tượng quang điện xảy ra.

Từ điều kiện $h\gamma > A_0$, ta có $\gamma \geq \frac{A_0}{h}$. Đặt $\lambda_0 = \frac{A_0}{h}$ ta suy ra $\gamma \geq \gamma_0$.

Vì $\gamma = \frac{c}{\lambda}$ nên tương ứng ta có $\gamma_0 = \frac{c}{\lambda_0}$.

Kết quả: $\frac{c}{\lambda} \geq \frac{c}{\lambda_0}$ và do đó $\lambda \leq \lambda_0$.

Ở đây λ_0 chính là giới hạn quang điện của kim loại, nó phụ thuộc vào công thoát A_0 ($\lambda_0 = \frac{hc}{A_0}$), tức là phụ thuộc vào bản chất kim loại, còn $\gamma_0 = \frac{A_0}{h}$ là giá trị cực tiểu của tần số của chùm bức xạ điện từ gây ra hiện tượng quang điện.

b) *Giải thích định luật quang điện thứ hai*: Dòng quang điện bão hòa khi số quang electron thoát ra khỏi catốt đến anốt trong một đơn vị thời gian không đổi. Nhưng số quang electron thoát ra khỏi catốt tỷ lệ với số photon bị hấp thụ, mà số photon bị hấp thụ này lại tỷ lệ với cường độ chùm bức xạ chiếu tới. Như vậy, cường độ dòng quang điện bão hòa tỷ lệ với cường độ chùm bức xạ chiếu tới.

c) *Giải thích định luật quang điện thứ ba*: Năng lượng $\varepsilon = h\gamma$ mà photon nhường cho electron đi từ trong kim loại ra sát bề mặt, một phần thắng công thoát A_0 và phần còn lại chuyển thành động năng ban đầu của quang electron. Với các electron sát ngay bề mặt kim loại thì không phải tốn năng lượng để thắng lực liên kết khi đi từ trong kim

loại ra sát bề mặt kim loại, nên động năng ban đầu của các electron ở ngay sát bề mặt của kim loại là lớn nhất (cực đại) Theo định luật bảo toàn năng lượng ta có:

$$h\gamma = A_0 + \frac{1}{2} m v_{\max}^2, \quad (2-13)$$

hay

$$h \frac{c}{\lambda} = \frac{1}{2} m v_{\max}^2 + A_0. \quad (2-14)$$

Công thức (2- 13) hay (2- 14) còn gọi là phương trình Einstein: phương trình cơ bản của hiện tượng quang điện.

Từ (2- 13) ta thấy: Động năng ban đầu cực đại ($\frac{1}{2} m v_{\max}^2$) của quang electron phụ thuộc vào tần số γ của bức xạ chiếu tới và bản chất kim loại (A_0).

4. Động lực học photon

Với bức xạ điện từ tần số γ , mỗi photon tương ứng mang năng lượng $\varepsilon = h\gamma$, chuyển động với vận tốc bằng vận tốc truyền của ánh sáng c và có khối lượng nghỉ bằng không

$$(m_0 = m \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} = m \sqrt{1 - \frac{c^2}{c^2}} = 0).$$

Theo thuyết tương đối hẹp Einstein, photon có khối lượng m thì tương ứng có năng lượng: $\varepsilon = mc^2$ suy ra

$$m = \frac{\varepsilon}{c^2} = \frac{h\gamma}{c^2} = \frac{hc}{\lambda c^2} = \frac{h}{c\lambda}.$$

Mặt khác photon luôn chuyển động với vận tốc ánh sáng c , nên nó có động lượng: $P = mc = \frac{h}{c\lambda} \cdot c = \frac{h}{\lambda}$.

Mối liên hệ giữa năng lượng ε , động lượng P và khối lượng nghỉ m_0 của photon theo thuyết tương đối có dạng:

$$\varepsilon^2 = c^2 P^2 + m_0^2 c^4 = c^2 P^2; \quad P = \frac{\varepsilon}{c}.$$

5. Hiệu ứng Compton⁽¹⁾

Theo mô hình sóng ánh sáng, khi một bức xạ điện từ bị tán xạ trên một hạt điện tích thì bức xạ tán xạ theo khắp mọi phương phải có cùng tần số như bức xạ tới. Nhưng năm 1922, A. H.Compton (sinh 10.9.1892) người Mỹ đã chỉ ra rằng theo quan

1. Đây là 1 trong 2 hiệu ứng đầu tiên xác nhận đặc tính lượng tử của bức xạ điện từ như vậy A.H. Compton được giải thưởng Nobel năm 1927 (NBT).

điểm lượng tử về bức xạ điện từ thì tần số của bức xạ tán xạ phải nhỏ hơn tần số của bức xạ chiếu tới và phụ thuộc vào góc tán xạ θ .

Điều đó được A.H.Compton chỉ ra khi cho chùm tia X bước sóng λ chiếu vào paraffin, graphit. Kết quả thí nghiệm cho thấy: chùm tia X bị tán xạ và trong phổ tán xạ đó bên cạnh vạch có bước sóng λ , còn xuất hiện vạch có bước sóng $\lambda' > \lambda$ với λ' không phụ thuộc vào cấu tạo các chất, mà phụ thuộc vào góc tán xạ θ . Bằng lý thuyết và được thực nghiệm kiểm chứng A.H. Compton đã tính được độ biến thiên của bước sóng θ khi tia X bị tán xạ theo công thức:

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = 2\lambda_c \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right), \quad (2-15)$$

trong đó

$$\lambda_c = \frac{h}{m_e \cdot c} = 2,426 \cdot 10^{-12} \text{m}$$

- bước sóng Compton (đối với electron).

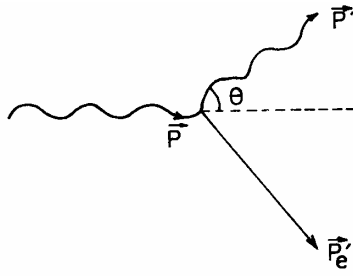
Hiệu ứng Compton được giải thích đầy đủ khi dựa vào thuyết photon của A.Einstein:

Quá trình tán xạ của chùm tia X thực chất là quá trình va chạm hoàn toàn đàn hồi giữa hai hạt photon và electron. Vạch có bước sóng bằng bước sóng λ của chùm tia X tới tương ứng với sự va chạm của photon với các electron nằm sâu trong nguyên tử liên kết mạnh với hạt nhân, còn vạch có bước sóng λ' tương ứng với sự va chạm của photon với các electron liên kết yếu với hạt nhân (các electron này coi như tự do, vì năng lượng liên kết của chúng rất yếu so với năng lượng của chùm tia X chiếu tới).

Bây giờ chúng ta dẫn đến tường minh biểu thức (2- 15). Giả sử trước va chạm, photon có động lượng là \vec{P} và năng lượng toàn phần $P \cdot c$, còn electron đứng yên có khối lượng nghỉ m_e , có động lượng bằng 0 và năng lượng toàn phần $m_e c^2$. Sau va chạm photon bị lệch đi một góc e , bước sóng thay đổi và có giá trị λ' , có động lượng \vec{P}' và năng lượng toàn phần $P' \cdot c$; còn electron bị giật lùi có động lượng \vec{P}_e và năng lượng toàn phần:

$$\text{phần } \sqrt{P_e^2 \cdot c^2 + m_e^2 \cdot c^4}$$

(xem hình 2-6).



Hình 2-6

Theo định luật bảo toàn động lượng ta có:

$$\vec{P} = \vec{P}' + \vec{P}'_e; \vec{P}'_e = \vec{P} - \vec{P}'. \quad (2-16)$$

Bình phương hai vế của phương trình (2-16), ta có:

$$P_e'^2 = P^2 + P'^2 - 2PP' \cos \theta. \quad (2-17)$$

Theo định luật bảo toàn năng lượng, ta có:

$$\left. \begin{aligned} Pc + m_e c^2 &= P'c + (P_e'^2 c^2 + m_e^2 c^4)^{1/2}; \\ P + m_e c &= P' + (P_e'^2 c^2 + m_e^2 c^2)^{1/2}; \\ (P - P') + m_e c &= (P_e'^2 c^2 + m_e^2 c^2)^{1/2}. \end{aligned} \right\} \quad (2-18)$$

Bình phương hai vế của phương trình (2-18) ta có:

$$\begin{aligned} P^2 + P'^2 - 2PP' + 2(P - P')m_e c + \\ + m_e^2 c^2 &= P_e'^2 c^2 + m_e^2 c^2. \end{aligned} \quad (2-19)$$

Khử $P_e'^2$ ở (2-17) và (2-19), ta được:

$$(P - P')m_e c = PP'(1 - \cos \theta) = 2PP' \sin^2 \frac{\theta}{2}. \quad (2-20)$$

Thay $P = \frac{h}{\lambda}$ và $P' = \frac{h}{\lambda'}$ vào (2-20), ta có :

suy ra:

$$h \left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'} \right) m_e c = 2 \frac{h^2}{\lambda \lambda'} \sin^2 \frac{\theta}{2},$$

trong đó

$$\Delta \lambda = \lambda' - \lambda = 2 \frac{h}{m_e c} \sin^2 \frac{\theta}{2} = 2 \lambda_c \sin^2 \left(\frac{\theta}{2} \right), \quad (2-21)$$

$$\lambda_c = \frac{h}{m_e c}.$$

Đó là điều cần chứng minh.

Như vậy, hiệu ứng Compton chứng tỏ ánh sáng là một chùm hạt - chùm các photon.

2-4. LƯỢNG TÍNH SÓNG HẠT CỦA VI HẠT TRONG THỂ GIỚI VI MÔ. GIẢ THUYẾT BROGLIE

1. Tính chất sóng hạt của ánh sáng

Trong vật lý cổ điển, các khái niệm sóng và hạt là các khái niệm tách biệt, loại trừ nhau: Hạt có quỹ đạo xác định cho nên những chuyển động của hạt không thể có những đặc trưng cho sóng như nhiễu xạ, giao thoa, ... Ngược lại, sóng không thể có những hiện tượng đặc trưng như hạt, ví dụ như va chạm, ... Sóng, trong cơ học lượng tử: Chuyển động của vật thể vi mô (vi hạt) đồng thời được đặc trưng bằng cả tính chất sóng và tính chất hạt. Tính chất sóng thể hiện rõ nét trong các hiện tượng như giao thoa, nhiễu xạ, ; còn tính chất hạt thể hiện rõ nét trong các hiện tượng quang điện, hiệu ứng Compton... Lượng tính sóng - hạt đó của ánh sáng đã được A.Einstein nêu lên trong thuyết lượng tử ánh sáng, trong đó ánh sáng được cấu tạo từ các hạt photon, mỗi photon mang năng lượng: $\varepsilon = h\gamma = h\omega$ (ở đây $h\gamma = \frac{\omega}{2\pi}$, còn $h = \frac{h}{2\pi} = 1,05.10^{-27}$ j.s và có

trong lượng bằng: $P = \frac{h}{\lambda} = hk$ (với $k = \frac{2\pi}{\lambda}$).

Để biểu diễn vector động lượng \vec{P} người ta còn đưa ra khái niệm vector sóng \vec{k} và định nghĩa: $\vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda} \vec{n}$

Với \vec{n} vector đơn vị theo phương truyền sóng.

Như vậy vector động lượng $\vec{P} = h\vec{k}$.

Khi đó hàm sóng phẳng đơn sắc của ánh sáng biểu diễn qua năng lượng (W) và động lượng \vec{P} của hạt photon tương ứng với sóng đó, có dạng (biểu diễn phức):

$$\psi(\vec{r}, t) = ae^{-\frac{i}{h}(\omega t - \vec{p}\vec{r})} = ae^{-i(\omega t - \vec{k}\vec{r})} \quad (2-22)$$

Từ biểu thức $W = h\gamma$ và $P = \frac{h}{\lambda}$ chúng ta thấy về trái mô tả các đặc trưng hạt (năng lượng W, động lượng \vec{P}) còn về phải thể hiện các đặc trưng của sóng (tần số γ , bước sóng λ) của photon. Mối liên hệ sóng - hạt đó được biểu thị qua hằng số Planck h.

2. Giả thuyết Broglie

Năm 1924, trên cơ sở lưỡng tính sóng - hạt của ánh sáng Louis de Broglie người Pháp đã suy rộng tính chất đó trước hết đối với electron và sau đó mở rộng cho mọi vi hạt nói chung.

L.de Broglie đưa ra giả thuyết: Mỗi vi hạt tự do có năng lượng xác định (W), động lượng xác định (P) tương ứng với một sóng phẳng đơn sắc có tần số ν , bước sóng λ thỏa mãn hệ thức liên hệ:

$$W = h\gamma \text{ hay } W = \hbar\omega ; \quad (2-23)$$

$$P = \frac{h}{\lambda} ; \vec{P} = \hbar \vec{k} \quad \left. \vphantom{P = \frac{h}{\lambda}} \right\} \quad (2-24)$$

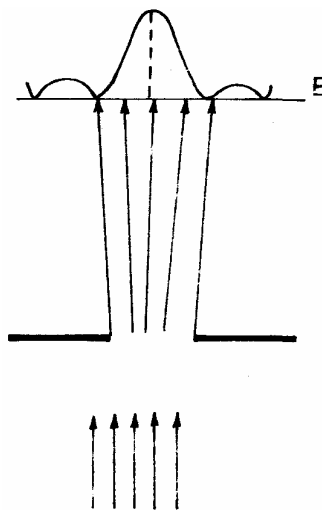
Có thể nói vi hạt ở mức độ nào đó thì giống sóng và ở mức độ nào đó thì giống hạt, mức độ đó phụ thuộc vào điều kiện mà ở đó xét vi hạt (có những thí nghiệm chỉ phát hiện thấy tính chất “sóng” và có những thí nghiệm chỉ phát hiện thấy tính chất “hạt”). Tính chất “sóng” và tính chất “hạt” của vi hạt là hai mặt đối lập, nhưng chúng kết hợp với nhau một cách biện chứng trong khuôn khổ một đối tượng vi mô thống nhất: đó là lưỡng tính “sóng - hạt”. Ở đây lưỡng tính “sóng - hạt” được hiểu như khả năng tiềm tàng của thế giới vi mô thể hiện những tính chất khác nhau của mình phụ thuộc vào điều kiện tương tác, chuyển động (chẳng hạn điều kiện quan sát). Ví dụ, khi xét tương tác thì tính chất “hạt” thể hiện rõ hơn ; còn khi chuyển động thì tính chất “sóng” thể hiện rõ hơn.

Sóng theo giả thuyết ở trên được gọi là “sóng Broglie” hay sóng “vật chất”.

3. Thực nghiệm xác nhận tính chất sóng của vi hạt

Giả thuyết Broglie về lưỡng tính “sóng - hạt” của mọi vi hạt đã được nhiều thí nghiệm xác nhận về sự đúng đắn của nó. Sau đây chúng ta có thể chỉ ra vài thí nghiệm minh họa điều đó.

a) *Thí nghiệm về nhiễu xạ của chính electron qua một khe hẹp (h.2 7)*: Chiếu một chùm electron song song qua một khe hẹp.



Hình 2-7

Trên màn huỳnh quang E, ta thu được các vân nhiễu xạ của chùm electron tương tự như vân nhiễu xạ của ánh sáng qua một khe hẹp. Khi cho từng electron riêng biệt đi qua khe hẹp và kéo dài thời gian thí nghiệm để số electron qua khe đủ lớn thì trên màn E ta vẫn thu được vân nhiễu xạ. Kết quả các thí nghiệm chứng tỏ rằng không những một chùm electron có tính chất sóng mà ngay cả từng electron chuyển động cũng có

tính chất sóng.

b) *Thí nghiệm nhiễu xạ electron trên tinh thể*: Năm 1927 Davisson và Germer người Mỹ đã nghiên cứu sự tán xạ của chùm electron trên mặt tinh thể Ni và quan sát thấy chùm electron tán xạ trên mặt tinh thể Ni dưới những góc tán xạ θ khác nhau, tạo ra bức tranh tán xạ giống hệt như hiện tượng nhiễu xạ của tia X trên mặt tinh thể Ni. Việc thu được các vân nhiễu xạ của electron, chứng tỏ có thể xem chùm electron tới mặt Ni như là một sóng có bước sóng λ_e của electron dựa vào công thức về các cực đại nhiễu xạ của Vulfo⁽¹⁾ - Bragg⁽²⁾, $2d\sin\theta = k\lambda$ trong đó d là hằng số của mạng tinh thể (khoảng cách giữa hai lớp lớn liên tiếp của tinh thể), θ là góc tán xạ của hạt, k là số nguyên (bậc nhiễu xạ). Bước sóng tính theo các kết quả trên phù hợp với giá trị của bước sóng tính theo công thức Broglie.

Năm 1927 G.P.Thomson (sinh 3.5.1892) người Anh đã nghiên cứu sự truyền electron qua một màng kim loại mỏng. Ông⁽³⁾ đã thu được ảnh nhiễu xạ tròn của chùm electron. Về sau, việc nghiên cứu hiện tượng nhiễu xạ của các vi hạt vẫn được tiếp tục, chẳng hạn hiện tượng nhiễu xạ neutron năng lượng thấp (neutron nhiệt) trên tinh thể NaCl,....

Tất cả các kết quả thực nghiệm đều xác nhận tính sóng của vi hạt và một lần nữa khẳng định thêm giá trị của giả thuyết Broglie.

2-5. HỆ THỨC BẤT ĐỊNH HEISENBERG

1. Hệ thức bất định Heisenberg

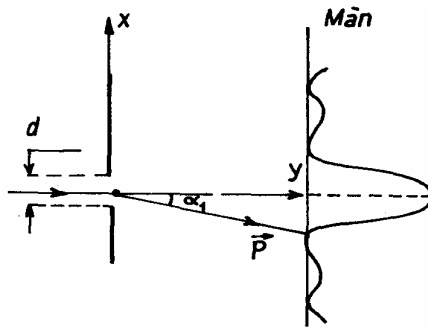
Vì vi hạt vừa có tính chất sóng vừa có tính chất hạt nên quy luật vận động của vi hạt trong thế giới vi mô khác với quy luật vận động của các hạt trong thế giới vĩ mô (chỉ có tính chất hạt đơn thuần). Hệ thức bất định Heisenberg là biểu thức toán học và là một hệ quả trực tiếp của lưỡng tính "sóng hạt" của vi hạt. Ví dụ sau đây minh họa hệ thức bất định này:

Xét hiện tượng chùm vi hạt xuyên qua một khe hẹp bề rộng d theo phương y vuông góc với mặt phẳng của khe, còn phương x song song với bề rộng của khe và cũng nằm trong mặt phẳng khe (h.2-8). Ta thấy, nếu hạt đã qua khe chắc chắn sẽ để lại một dấu vết trên màn quan sát đặt sau khe. Khi đó ta xác định được vị trí của hạt ở thời điểm đi qua khe. Khi đi qua khe, vì không biết chắc chắn hạt ở vị trí nào, nên ta chỉ có thể nói tại thời điểm đi qua khe, tọa độ x của hạt trong khe được xác định trong khoảng từ 0 đến d : $0 < x < d$.

1. Iu.V.Vulfo người Nga.

2. W.H.Bragg người Anh.

3. G.P.Thomson được bởi giải thưởng Nobel về vật lý năm 1937 (NBT).



Hình 2-8

Nói cách khác, vị trí của hạt ở trong khe được xác định với độ bất định: $\Delta x \approx d$ (khi khe càng hẹp, độ bất định về x càng nhỏ và vị trí được xác định càng chính xác). Khi hạt chưa qua khe, tuy ta hoàn toàn không biết vị trí của nó nhưng lại biết động lượng của hạt cả về độ lớn (vì đã biết năng lượng hạt) và phương (vuông góc với khe):

$$P_x = 0 ; P_y = P ; P_z = 0.$$

Do bản chất sóng của vi hạt, sau khi qua khe hạt bị nhiễu xạ theo nhiều phương α khác nhau, nên các hạt có thể rơi vào cực đại giữa hoặc cực đại phụ. Vì thế động lượng \vec{P} của hạt đổi phương sau khi qua khe và thành phần động lượng của hạt theo phương x là P_x khác 0 và có giá trị xác định trong khoảng: $0 < P_x < P \sin \alpha$.

Như vậy P_x cũng được xác định với độ bất định ΔP_x nào đó: $\Delta P_x \approx P \sin \alpha$.

Thành phần P_x có độ bất định ΔP_x nhỏ nhất ứng với trường hợp hạt rơi vào cực đại giữa và khi đó: $\Delta P_x \approx P \sin \alpha_1$, ở đây α_1 là góc nhiễu xạ ứng với cực tiểu thứ nhất ($\sin \alpha_1 = \pm \frac{\lambda}{d}$). Theo giả thuyết Broglie thì $P = \frac{h}{\lambda}$, nên $\Delta P_x = \frac{h}{\lambda} \cdot \frac{\lambda}{d} = \frac{h}{d}$. Ta nhận thấy độ bất định ΔP_x càng nhỏ khi độ rộng d của khe càng lớn.

Kết quả biểu thức của tích số của độ bất định về vị trí (tọa độ) và động lượng là:

$$\Delta x \cdot \Delta P_x \approx d \cdot \frac{h}{d} = h. \quad (2-25)$$

Lập luận tương tự ta có:

$$\Delta y \cdot \Delta P_y \approx h ; \quad (2-26)$$

$$\Delta z \cdot \Delta P_z \approx h. \quad (2-27)$$

Các biểu thức (2 - 25), (2 - 26) và (2 - 27) là các hệ thức bất định Heisenberg (vị trí và động lượng) - một trong các định luật cơ bản của cơ học lượng tử.

2. Ý nghĩa của hệ thức bất định

a) Trong hệ thức (2-25), nếu $\Delta x = 0$, tức là tọa độ x của vi hạt được xác định chính xác thì $\Delta P_x \approx \infty$, nghĩa là động lượng của vi hạt càng bất định. Như vậy, đối với vi hạt, do vị trí càng chính xác thì đo động lượng càng kém chính xác và ngược lại. Do

vậy, trong cùng một thí nghiệm ta đồng thời không thể xác định chính xác cả vị trí và động lượng ; độ chính xác của đại lượng này tùy thuộc độ chính xác của đại lượng kia.

b) Trong thế giới vi mô, vị trí và động lượng của vi hạt không đo được chính xác đồng thời, nên vi hạt không có quỹ đạo xác định và do đó khái niệm quỹ đạo mất ý nghĩa. Việc đo đồng thời vị trí và động lượng của vi hạt có một giới hạn về độ chính xác, giới hạn này do bản chất “sóng - hạt” của vi hạt chứ không phải do khả năng hiểu biết về thế giới vi mô của loài người bị hạn chế.

c) Do vi hạt vừa có tính chất "sóng" vừa có tính chất "hạt", nên vị trí và động lượng không được xác định chính xác đồng thời và vì thế không thể khẳng định chắc chắn rằng vi hạt ở một trạng thái nhất định nào đó, mà chỉ có thể tiên đoán khả năng vi hạt tồn tại ở trạng thái đó với một xác suất nào đó mà thôi. Vì vậy, quy luật vận động của vi hạt tuân theo quy luật thống kê.

3. Hệ thức bất định về năng lượng

Trong cơ học lượng tử, ngoài các hệ thức bất định nêu trên, người ta còn thiết lập các hệ thức bất định cho nhiều cặp biến liên hợp khác. Ví dụ hệ thức bất định giữa năng lượng W và thời gian t gọi là hệ thức bất định đối với năng lượng:

$$\Delta W \cdot \Delta t \approx h. \quad (2-28)$$

Hệ thức (2 - 28) không có nghĩa là năng lượng và thời gian không đồng thời có giá trị xác định ở một thời điểm như hệ thức bất định giữa vị trí và động lượng, mà có nghĩa là nếu năng lượng của hệ ở một trạng thái nào đó càng bất định thì hệ tồn tại ở trạng thái đó trong một thời gian rất ngắn (trạng thái không bền), còn nếu năng lượng của hệ ở một trạng thái nào đó càng xác định thì thời gian hệ tồn tại ở trạng thái đó càng lâu (trạng thái bền). Nếu hệ ở trạng thái kích thích trong khoảng thời gian ít thì khi đó hệ không thể có năng lượng xác định và độ bất định năng lượng của hệ là:

$$\Delta W = \frac{h}{\Delta t} :$$

Tuy nhiên, nếu phép đo được tiến hành trong khoảng thời gian dài vô tận $\Delta t = \infty$ thì năng lượng của hệ đo được với độ chính xác cao nhất ($\Delta W = 0$) và không có sự lệch nào về trị số năng lượng.

2-6. HÀM SÓNG VÀ Ý NGHĨA THỐNG KÊ CỦA NÓ

1. Hàm sóng

Theo giả thiết của vật lý cổ điển thì các quá trình vật lý hoàn toàn độc lập với các điều kiện quan sát và coi tác dụng của quan sát không là nhiễu loạn đáng kể đến trạng thái của hệ. Cho nên khái niệm trạng thái và các đại lượng vật lý trong vật lý cổ điển là tuyệt đối. Đồng thời vật lý cổ điển thừa nhận rằng, khi đo các đại lượng vật lý khác nhau đòi hỏi các điều kiện quan sát khác nhau (ví dụ như tọa độ và động lượng),

nhưng các kết quả đo trong các điều kiện khác nhau kết hợp được với nhau thành một bức tranh thống nhất mô tả quá trình vật lý cần nghiên cứu.

Song, khi mô tả lượng tử các hiện tượng cần phải tính đến khả năng thực hiện phép đo gắn liền với tính chất của đối tượng vi mô, mặt khác phải tính đến nhiễu loạn của phép đo đối với trạng thái của nó. Để thấu hiểu được các hiện tượng vi mô, phản ánh vận động của vi hạt tuân theo quy luật thống kê đòi hỏi phải kết hợp tính chất "sóng" và tính chất "hạt" lại với nhau. Do đó các khái niệm trạng thái và các đại lượng vật lý coi là tuyệt đối trong vật lý cổ điển, thì trong cơ học lượng tử chúng có những đặc tính tương đối. Vì vậy để mô tả trạng thái của vi hạt trong các điều kiện nhất định, trong cơ học lượng tử người ta đưa ra khái niệm mới, đó là *hàm sóng*. Ở đây hàm sóng là một điều được thừa nhận coi như một tiên đề: *Trạng thái của một vi hạt (hay một hệ hạt) ở thời điểm t được biểu diễn bởi một hàm sóng $\Psi(\vec{r}, t)$* . Các thông tin về trạng thái vi hạt chứa đựng trong hàm sóng.

Theo giả thuyết Broglie, trạng thái của vi hạt chuyển động tự do (hạt không chịu tác dụng của trường lực được mô tả bởi một hàm sóng tương tự như sóng phẳng ánh sáng đơn sắc:

$$\Psi = \Psi_0 \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}(\omega \cdot t - \vec{p} \cdot \vec{r})} = \Psi_0 \cdot e^{-i(\omega \cdot t - \vec{k} \cdot \vec{r})}, \quad (2-29)$$

trong đó Ψ_0 - biên độ của hàm sóng, được xác định như sau:

$$\begin{aligned} \Psi_0^2 &= |\Psi|^2 = \Psi \Psi^*, \\ |\Psi| &- \text{môđun của } \Psi; \\ \Psi^* &- \text{liên hợp phức của } \Psi. \end{aligned}$$

Hàm (2-29) được gọi là hàm sóng Broglie.

Nếu vi hạt là một photon thì sóng Broglie là một sóng điện từ, còn vi hạt là một electron hay mọi vi hạt vật chất khác thì Ψ là một sóng Broglie phi điện từ.

Cách biểu diễn trạng thái của vi hạt tự do bằng hàm sóng (2-29) có thể suy rộng cho hạt không tự do (hạt chuyển động trong trường lực) và thừa nhận rằng: trạng thái bất kỳ của vi hạt ở thời điểm t có thể biểu diễn bởi một hàm sóng Ψ là hàm phức tạp của tọa độ \vec{r} và thời gian t:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \Psi(x, y, z, t).$$

2. Ý nghĩa thống kê của hàm sóng

Trong vật lý cổ điển, các yếu tố ngẫu nhiên khi miêu tả đáng điệu của từng đối tượng riêng biệt đã được loại bỏ và yếu tố ngẫu nhiên chỉ xuất hiện khi nghiên cứu tập thể các hạt. Trong cơ học lượng tử, yếu tố ngẫu nhiên còn có mặt trong đáng điệu của từng đối tượng riêng biệt. Do đó cơ học lượng tử là một lý thuyết thống kê (các định

luật của thế giới vi mô là các định luật thống kê) về mặt nguyên tắc và xác suất là một trong những đặc điểm của nó.

Để giải thích ý nghĩa của hàm sóng, ta dựa vào thuyết lưỡng tính "sóng - hạt" của ánh sáng, rồi mở rộng cho lưỡng tính "sóng - hạt" của vật chất nói chung.

Cho một chùm photon truyền trong không gian. Xét một điểm M (có bán kính vectơ \vec{r} xác định) và một phần tử thể tích ΔV bao quanh điểm M trong không gian đó. Theo quan điểm sóng thì cường độ sáng (năng lượng trên một đơn vị diện tích trong một đơn vị thời gian tỷ lệ với bình phương biên độ dao động sáng Ψ_0^2 tại M, nghĩa là Ψ_0^2 càng lớn thì tại M càng sáng. Mặt khác, theo quan điểm "hạt" thì cường độ sáng tại M tỷ lệ với năng lượng của các "hạt" trong đơn vị thể tích bao quanh M, nghĩa là tỷ lệ với số "hạt" trong đơn vị thể tích đó. Như vậy bình phương biên độ dao động sáng Ψ_0^2 (hay $|\psi|^2$) tỷ lệ với số "hạt" trong một đơn vị thể tích bao quanh M. Mà số "hạt" trong đơn vị thể tích càng nhiều thì khả năng (xác suất) tìm thấy "hạt" trong đó càng lớn. Vì thế theo quan điểm lượng tử có thể nói bình phương biên độ sóng $|\psi|^2$ tại M cho ta biết xác suất tìm thấy "hạt" trong đơn vị thể tích bao quanh M và $|\psi|^2$ được gọi là *mật độ xác suất tìm thấy hạt* trong một đơn vị thể tích ở trạng thái được mô tả bởi hàm sóng $\psi(\vec{r}, t)$ (còn khi $\Delta \rightarrow 0$ ta có mật độ xác suất tìm thấy "hạt" tại M).

Khi đó xác suất tìm thấy "hạt" trong một thể tích dV nào đó bao quanh điểm $M(x, y, z)$ là:

$$|\Psi(\vec{r}, t)|^2 dV = |\Psi(x, y, z, t)|^2 dx dy dz,$$

và xác suất tìm thấy "hạt" trong toàn bộ không gian là:

$$\iiint |\Psi(\vec{r}, t)|^2 dV = \iiint |\Psi(x, y, z)|^2 dx dy dz .$$

Khi chúng ta tìm "hạt" trong toàn không gian mà ở đó "hạt" có thể tồn tại chắc chắn sẽ tìm thấy "hạt", nghĩa là xác suất tìm thấy "hạt" trong toàn không gian bằng 1:

$$\iiint |\Psi(\vec{r}, t)|^2 dV = 1. \quad (2-30)$$

Điều kiện (2-30) gọi là điều kiện chuẩn hóa của hàm sóng và hàm sóng thỏa mãn điều kiện chuẩn hóa (2-30) gọi là hàm sóng đã chuẩn hóa.

Tóm lại, ý nghĩa của hàm sóng là: hàm sóng $\psi(\vec{r}, t)$ mô tả trạng thái của vi hạt và bình phương môđun của nó $|\psi(\vec{r}, t)|^2$ cho phép ta tính xác suất tìm "hạt" tại trạng thái đó (biểu diễn mật độ xác suất tìm "hạt"). Nói cách khác, hàm sóng, $\psi(\vec{r}, t)$ mang tính

chất thống kê. Điều này phù hợp với cách giải thích của Bohr⁽¹⁾. Cách giải thích này được thừa nhận vì nó không mâu thuẫn về logic và dẫn tới kết quả phù hợp với thực nghiệm.

Chú ý rằng, khác với cơ học cổ điển, ở đó sự truyền sóng (như sóng cơ, sóng điện từ) liên quan đến chuyển động của môi trường thực trong cơ học lượng tử sóng không thể coi như sóng thực được vì $\psi(\vec{r}, t)$ là hàm phức. Mặt khác ở đây cần hiểu là: trong cơ học lượng tử quy luật thống kê có quan hệ ngay cả với từng vi hạt riêng biệt và cả hệ nhiều hạt, còn trong vật lý phân tử tính thống kê chỉ liên quan đến tập hợp nhiều hạt (nguyên tử, phân tử) mà không liên quan đến từng hạt riêng biệt.

3. Điều kiện của hàm sóng

Ngoài điều kiện chuẩn hóa của hàm sóng ở (2-30), tính chất toán học của hàm sóng còn được giới hạn bởi các điều kiện đòi hỏi về tính giới nội (hữu hạn), tính liên tục, tính đơn trị trong tất cả các vùng biến đổi của các biến độc lập của nó. Như vậy đòi hỏi hàm sóng phải thỏa mãn các điều kiện sau đây:

- Hàm sóng phải giới nội, nếu không thì tích phân (2-30) không thể giới nội.
- Hàm sóng phải đơn trị, vì theo lý thuyết xác suất, ứng với mỗi trạng thái chỉ có một giá trị xác suất tìm "hạt", nên hàm sóng phải đơn trị.
- Hàm sóng phải liên tục, vì xác suất (của một sự kiện) $|\psi|^2$ không thể thay đổi nhảy vọt.

Đạo hàm bậc nhất của hàm sóng theo thời gian phải liên tục, vì phương trình chuyển động xác định trạng thái sóng phải là phương trình tuyến tính (phương trình Schrodinger⁽²⁾ hên quan đến nguyên lý chồng chất trạng thái).

4. Nguyên lý chồng chất trạng thái

Trong cơ học lượng tử, một "hạt (hoặc một hệ "hạt") trong những điều kiện vật lý xác định có thể ở các trạng thái khác nhau, phụ thuộc vào cả các điều kiện hiện tại và cả quá trình trước đó dẫn tới các điều kiện hiện tại.

Nếu "hạt" (hoặc hệ "hạt") có thể tồn tại ở các trạng thái được mô tả bởi các hàm sóng $\psi_n(\vec{r}, t)$ thì "hạt" có thể tồn tại ở trạng thái được mô tả bởi hàm sóng $\psi(\vec{r}, t)$ là tổ hợp tuyến tính của các $\psi_n(\vec{r}, t)$:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \Psi_n(\vec{r}, t) . \quad (2-31)$$

Phát biểu ở trên chính là nội dung của nguyên lý chồng chất trạng thái trong cơ

1. Niels Bohr (Bo) (7.10.1885 – 18.8.1962) người Đan Mạch, được giải thưởng Nobel về vật lý năm 1922 (NBT).

2. Erwin Schrodinger người Áo (MBT).

học lượng tử.

Ở đây các hệ số α_n (là những số phức bất kỳ) xác định phân bố xác suất nhận được các giá trị xác định của đại lượng vật lý tương ứng. Từ (2-31) ta suy ra rằng, hàm sóng là nghiệm của những phương trình tuyến tính. Trong vật lý cổ điển, phương trình chuyển động xác định trạng thái sóng cũng là phương trình tuyến tính. Song nguyên lý chồng chất sóng lượng tử có những điểm khác hẳn với nguyên lý chồng chất sóng cổ điển. Để hiểu rõ thêm điều này ta xét ví dụ sau đây:

Giả sử hàm sóng ψ_1 mô tả trạng thái của "hạt" mà ở đó đại lượng vật lý W (năng lượng chẳng hạn) nhận được giá trị xác định W_1 "hạt" cũng có thể ở trạng thái mô tả bởi hàm sóng ψ_2 ứng với giá trị xác định W_2 . Khi chồng chất hai trạng thái này, chúng ta có được một trạng thái mới diễn tả "hạt" đang xét:

$$\Psi = a_1\psi_1 + a_2\psi_2 . \quad (2-32)$$

Trong vật lý cổ điển, khi đo đại lượng vật lý W ở trạng thái ψ thì ta được một giá trị trung bình

$$|W| = \frac{|W_1| + |W_2|}{2}$$

nào đó. Nhưng trong cơ học lượng tử, khi đo đại lượng vật lý W ở trạng thái ψ thì ta nhận được giá trị chính xác hoặc W_1 hoặc W_2 . Tuy nhiên, ở đây chúng ta không thể khẳng định chắc chắn là nhận giá trị W_1 chứ không phải là nhận giá trị W_2 và ngược lại, trong phép đo cụ thể, mà chúng ta có thể tiên đoán trước với một xác suất nào đó để nhận được các giá trị hoặc là W_1 tương ứng với xác suất $|\alpha_1|^2$ hoặc là W_2 tương ứng với xác suất $|\alpha_2|^2$.

Để diễn tả tính sóng cùng với tính chất hạt của vi hạt, cơ học lượng tử cho rằng chuyển động của các vi hạt không phải ứng với các sóng đơn sắc riêng biệt, mà là ứng với một *bó sóng* gồm một tập hợp các sóng có tần số gần nhau. Kết luận này đã được thực nghiệm xác định, chẳng hạn thí nghiệm về nhiễu xạ của electron, trong đó các vân nhiễu xạ đều có bề rộng. Điều đó chứng tỏ nhiễu xạ gây nên không phải do một sóng mà do nhiều sóng có tần số gần nhau tạo thành. Biên độ của bó sóng là tổng hợp biên độ của các sóng và thay đổi trong không gian và theo thời gian. Vận tốc chuyển động của toàn bộ bó sóng gọi là vận tốc nhóm. Vận tốc nhóm của bó sóng đúng bằng vận tốc của vi hạt chuyển động. Như vậy, chuyển động của vi hạt có thể được mô tả bởi chuyển động của cả bó sóng.

2-7. PHƯƠNG TRÌNH CƠ BẢN CỦA CƠ HỌC LƯỢNG TỬ

1. Phương trình Schrodinger không phụ thuộc thời gian

Chúng ta biết rằng hàm sóng mô tả chuyển động của vi hạt tự do có năng lượng xác định, động lượng xác định được biểu diễn dưới dạng sóng phẳng Broglie. Bây giờ

chúng ta muốn tìm hàm sóng mô tả chuyển động của vi hạt ở trong trường ngoài. Muốn thế, ta phải đi tìm phương trình cho hàm sóng. Trước hết, ta tìm phương trình cho sóng phẳng Broglie:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \Psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(wt - \vec{p} \cdot \vec{r})}$$

Khi lấy đạo hàm của hàm $\psi(\vec{r}, t) = \psi(x, y, z, t)$ theo thời gian ta có:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} W \Psi, \text{ suy ra :}$$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = W \Psi, \quad (2-33)$$

và lấy đạo hàm cấp hai của $\psi(\vec{r}, t)$ theo x,y,z, rồi cộng lại ta được:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} = -\frac{1}{\hbar^2} (P_x^2 + P_y^2 + P_z^2) \Psi = -\frac{P^2}{\hbar^2} \Psi. \quad (2-34)$$

Nhưng với hạt chuyển động tự do thì năng lượng W chính là động năng, nên:

$$W = \frac{P^2}{2m}; \quad P^2 = 2mW$$

và khi đó (2-34) trở thành:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi = W \Psi.$$

Kết quả ta có phương trình:

$$\Delta \Psi + \frac{2m}{\hbar^2} W \Psi = 0. \quad (2-35)$$

$$\text{trong đó } \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

toán tử Laplace⁽¹⁾ trong tọa độ Dercartes⁽²⁾.

Hoặc từ (2-33) ta có thể viết (2-35) dưới dạng:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi. \quad (2-36)$$

Phương trình dạng (2-35) hay dạng (2-36) chính là phương trình Schrôdinge: phương trình cơ bản của cơ học lượng tử. Đó là phương trình sóng - một phương trình vi phân có đạo hàm riêng hạng hai tuyến tính.

Ở trên ta đã đưa được ra biểu thức của hàm sóng tự do (sóng phẳng Broglie) ở

1. Pierre Si mon Laplace (23.3.1749 - 5.3.18'7) người Pháp.

2. René Dercartes (Dècac) (31.3.1596 - 11.1.1650) người Pháp (NBT).

trạng thái có năng lượng W và động lượng \vec{P} không đổi ; đó chính là trạng thái dừng (là trạng thái có năng lượng không phụ thuộc thời gian), nên trong biểu thức của hàm sóng ấy ta có thể tách riêng phần phụ thuộc tọa độ:

$$\Psi(\vec{r}) = \Psi(x,y,z) = \Psi_0 e^{\frac{i}{\hbar} \vec{P} \cdot \vec{r}}$$

và phần phụ thuộc thời gian:

$$\Psi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} W t}$$

Thay $\Psi(\vec{r},t) = \Psi(\vec{r})\Psi(t)$ vào (2-36) ta có phương trình cho phần phụ thuộc tọa độ không gian của hàm sóng:

$$\Delta\Psi(\vec{r}) + \frac{2mW}{\hbar^2} \Psi(\vec{r}) = 0 \quad (2-37)$$

Phương trình (2- 37) cho phép xác định hàm tọa độ không gian $\Psi(\vec{r})$ đối với vi hạt tự do. Bây giờ ta muốn tổng quát hóa phương trình (2- 37) cho hạt chuyển động trong trường lực. Cơ sở cho việc tổng quát hóa là việc giả thuyết W trong phương trình (2-37) là động năng. Thật vậy, trong chuyển động tự do động năng trùng với năng lượng toàn phần, và với $U(\vec{r})$ là thế năng vi hạt trong trường lực thế thì phương trình (2- 37) sẽ có dạng:

$$\Delta\Psi(\vec{r}) + \frac{2m}{\hbar^2} [W - U(\vec{r})] \Psi(\vec{r}) = 0 \quad (2-38)$$

Phương trình (2-38) là phương trình Schrödinger cần tìm đối với hạt chuyển động ở trong trường thế tùy ý, không phụ thuộc vào thời gian.

Nói chung nghiệm $\Psi(\vec{r})$ của phương trình Schrödinger ứng với bất kỳ giá trị nào của W , nhưng không phải giá trị nào của W cũng ứng với một trạng thái vật lý. Chỉ có nghiệm $\Psi(\vec{r})$ đơn trị, liên tục và hữu hạn thì mới có thể biểu diễn một trạng thái vật lý. Điều này được thỏa mãn khi W nhận những giá trị đặc biệt: là những giá trị gián đoạn và một dải những giá trị liên tục. Những giá trị gián đoạn của năng lượng W thì ứng với những nghiệm $\Psi(\vec{r})$ giảm nhanh về 0 khi tọa độ dẫn tới vô cực. Những trạng thái có năng lượng như thế gọi là *trạng thái liên kết*. Còn những giá trị liên tục của năng lượng W thì ứng với nghiệm hữu hạn ở vô cực và trạng thái tương ứng gọi là *trạng thái không bị liên kết*.

Chú ý rằng trong *trạng thái dừng* thì xác suất tìm thấy hạt ở trọng điểm nào đó của không gian không phụ thuộc vào thời gian, vì: $|\Psi(\vec{r},t)|^2 = |\Psi(\vec{r},0)|^2$, và vì thế phương trình (2- 38) còn gọi là phương trình Schrödinger dừng.

2. Phương trình Schrödinger phụ thuộc thời gian

Phương trình Schrödinger không phụ thuộc thời gian (2-38) mô tả trạng thái của một vi hạt có năng lượng không thay đổi theo thời gian, đó là phương trình mô tả đối với phần phụ thuộc tọa độ không gian $\psi(\vec{r})$ của hàm sóng. Khi thay $\mathcal{W} \cdot \Psi(\vec{r}, t)$ bằng $i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t}$ theo (2-23), ta có phương trình sóng Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\vec{r}) \right] \Psi(\vec{r}, t) . \quad (2-39)$$

Phương trình (2-39) là phương trình ứng với sự biến đổi trạng thái theo thời gian - một phương trình cơ bản của cơ học lượng tử. Phương trình này có vai trò như phương trình Newton trong cơ học cổ điển. Nói cách khác, phương trình Schrödinger mô tả sự vận động của vi hạt, nghĩa là phương trình đó xác định được giá trị $\psi(\vec{r}, t)$ tại mỗi thời điểm thời gian và tại mỗi thời điểm trong không gian. Khi biết hàm sóng $\psi(\vec{r}, t)$ tại mỗi thời điểm thì có thể suy ra hàm sóng tại một thời điểm bất kỳ sau đó nhờ phương trình (2-39).

Hàm sóng phụ thuộc thời gian $\psi(\vec{r}, t)$ cũng phải thỏa mãn những điều kiện đơn trị, liên tục và hữu hạn.

Ta biết rằng trạng thái dừng của một hạt tự do có năng lượng W và động lượng \vec{P} được biểu diễn bởi hàm sóng $\psi(\vec{r}, t) = \psi_0 \frac{e^{i\vec{P}\cdot\vec{r}}}{n} \cdot e^{iWt}$, còn trạng thái dừng của một hạt bất kỳ có năng lượng W thì được biểu diễn bởi một hàm số $\psi(\underline{r}, t)$ thỏa mãn phương trình (2-39).

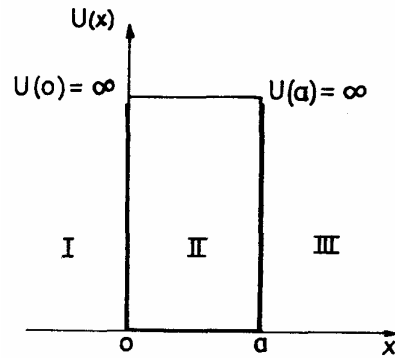
2-8. ỨNG DỤNG PHƯƠNG TRÌNH SCHRÖDINGER

Bây giờ ta ứng dụng phương trình Schrödinger giải một vài bài toán điển hình của cơ học lượng tử. Để đơn giản, ta giải bài toán dùng phương trình Schrödinger không phụ thuộc thời gian kết hợp với các điều kiện biên cho sóng, ta tìm được phổ các giá trị năng lượng của vi hạt và các hàm sóng của trạng thái dừng. Bài toán đơn giản ấy là bài toán liên quan đến chuyển động một chiều, ở đó vi hạt chuyển động trong trường thế mà thế năng của nó phụ thuộc vào tọa độ x ($U = U(x)$). Việc giải bài toán một chiều cho phép ta tìm được các đặc điểm quan trọng của nghiệm, có thể nghiên cứu kỹ các nghiệm về ý nghĩa vật lý, mà điều đó sẽ cần trong các bài toán phức tạp. Mặt khác, nhiều bài toán phức tạp, sau những phép biến đổi tương ứng sẽ dẫn đến việc giải phương trình tương tự như phương trình Schrödinger trong không gian một chiều.

1. Vi hạt ở trong giếng thế sâu vô hạn

Xét chuyển động của một vi hạt khối lượng m theo phương x trong một trường

thế mà thế năng $U(x)$ được biểu diễn như dạng hình 2-9.



Hình 2-9

Ở đây:

$$U(x) = \begin{cases} \infty & \text{khi } 0 \leq x, \text{ miền I} \\ 0 & \text{khi } 0 < x < a, \text{ miền II} \\ \infty & \text{khi } x \geq a, \text{ miền III} \end{cases}$$

Miền thế năng như vậy gọi là "giếng thế năng" một chiều sâu vô hạn. Với giếng như thế, thì hạt chỉ chuyển động tự do trong giếng (trong miền $0 < x < a$) mà không thể vượt ra ngoài giếng (ngoài biên giới $x \leq 0$ hoặc $x \geq a$). Muốn hạt vượt qua biên giới $x = 0$ hoặc $x = a$ thì phải tốn một năng lượng bằng vô cùng (∞). Như vậy ở biên $x = 0$ và $x = a$ hạt bị chặn lại. Vì thế xác suất tìm hạt ở miền $x \leq 0$ (miền I) và miền $x \geq a$ (miền III) luôn bằng 0 (không có khả năng tìm hạt ở ngoài giếng thế năng). Do đó, hàm sóng mô tả trạng thái của hạt ở hai miền này bằng 0:

$$\Psi_I = \Psi_{III} = 0.$$

vì thế năng của vi hạt bằng 0 ($U(x) = 0$) trong miền $0 < x < a$, trên phương trình Schrödinger cho vi hạt chuyển động trong giếng có dạng:

$$\Delta\Psi_{II} + \frac{2mW}{\hbar^2} \Psi_{II} = 0. \quad (2-40)$$

Mặt khác, vi hạt chỉ chuyển động theo phương x , nên hàm sóng lớn chỉ phụ thuộc x . Vì vậy, phương trình (2 - 40) có thể viết dưới dạng:

$$\frac{d^2\Psi_{II}}{dx^2} + k^2\Psi_{II} = 0, \quad (2-41)$$

trong đó

$$k^2 = \frac{2mW}{\hbar^2}.$$

Giải phương trình (2- 41) ta tìm được nghiệm tổng quát:

$$\Psi_{II}(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx), \quad (2-42)$$

trong đó A, B - hai hằng số tích phân, được xác định từ những điều kiện biên và điều kiện chuẩn hoá của hàm sóng.

Do hàm sóng có tính chất liên tục, nên khi sử dụng điều kiện liên tục của hàm sóng $\psi(x)$ tại các biên ta có:

Tại biên $x = 0$: $\psi_I(0) = \psi_{II}(0) = 0$, ta có:

$$A \sin(k \cdot 0) + B \cos(k \cdot 0) = 0, \rightarrow B = 0.$$

Vậy:

$$\psi_{II}(x) = A \sin kx.$$

Tại biên $x = a$: $\psi_{II}(a) = \psi_{III}(a) = 0$, ta có:

$$A \sin ka = 0.$$

Ở đây ta không thể cho $A = 0$, vì như thế $\psi_{II}(x) = 0$. Khi đó hàm sóng không có ý nghĩa gì. Vì vậy phải đặt điều kiện $\sin ka = 0$. Từ đó suy ra:

$$ka = n\pi,$$

trong đó $n = 1, 2, 3, \dots$

$$k = \frac{n\pi}{a} \text{ và } \Psi_{II}(x) = A \sin \frac{n\pi}{a} x.$$

Hằng số A được xác định từ điều kiện chuẩn hóa của hàm sóng:

$$\int_0^a |\Psi(x)|^2 dx = 1 \rightarrow \int_0^a A^2 \sin^2 \frac{n\pi}{a} x = 1,$$

ta tìm được:

$$A = \sqrt{\frac{2}{a}}.$$

Cuối cùng, hàm sóng được xác định hoàn toàn:

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \cdot \sin \frac{n\pi}{a} x, \quad (2-43)$$

còn năng lượng của vi hạt được suy ra từ hai biểu thức $\frac{2mW}{h^2} = k^2$ và $k = \frac{n\pi}{a}$:

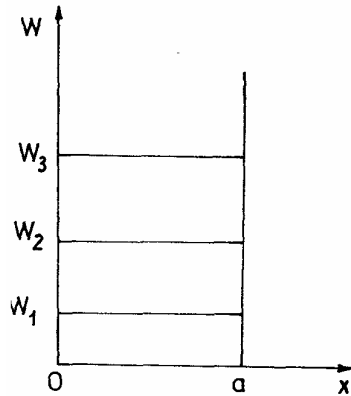
$$W_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2. \quad (2-44)$$

Từ hai biểu thức (2-43) và (2-44) ta rút ra một số kết quả quan trọng sau đây:

- a) Mỗi trạng thái của vi hạt ứng với một hàm sóng $\Psi_n(x)$
- b) Năng lượng của vi hạt chuyển động trong giếng thế năng phụ thuộc vào số nguyên n, nghĩa là năng lượng nhận những giá trị gián đoạn. Sự gián đoạn của các giá

trị năng lượng chỉ tồn tại trong lý thuyết lượng tử và được gọi là sự lượng tử hóa năng lượng. Đó là kết quả tự nhiên khi áp dụng điều kiện biên của hàm sóng cho nghiệm của phương trình Schrödinger.

Sơ đồ mức năng lượng được biểu diễn ở hình 2-10.



Hình 2-10

Khoảng cách giữa hai mức năng lượng kế tiếp nhau ứng với các số nguyên n và $(n+1)$ bằng:

$$\Delta W_n = W_{n+1} - W_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (2n+1).$$

Rõ ràng ΔW_n càng lớn khi vi hạt ở phạm vi kích thước a càng nhỏ và vi hạt có khối lượng m càng bé.

c) Mật độ xác suất tìm hạt trong giếng được xác định theo biểu thức:

$$|\Psi_n(x)|^2 = \frac{2}{a} \sin^2 \frac{n\pi}{a} x. \quad (2-45)$$

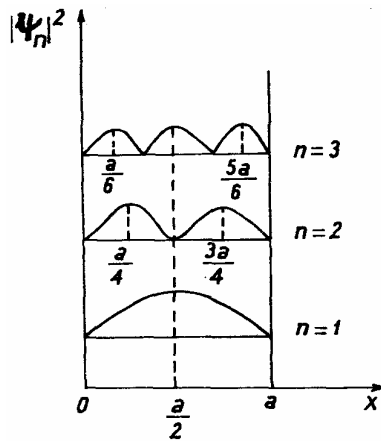
Từ (2-45) ta nhận thấy:

Khi $n = 1$, xác suất tìm thấy hạt lớn nhất ở vị trí $x = \frac{a}{2}$.

Khi $n = 2$, xác suất đó lớn nhất ở các vị trí $x = \frac{a}{4}$ và $x = \frac{3a}{4}$.

Khi $n = 3$, xác suất đó lớn nhất ở các vị trí $x = \frac{a}{6}$, $x = \frac{a}{2}$, $\frac{5a}{6}$, v.v...

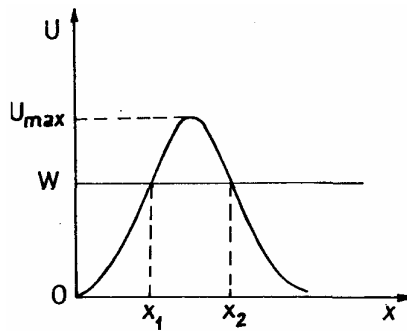
Đồ thị phân bố xác suất được biểu diễn ở hình 2-11.



Hình 2-11

2. Sự truyền qua hàng rào thế

Xét vi hạt có khối lượng m có năng lượng W chuyển động theo phương x từ trái sang phải, đập vào hàng rào thế có dạng như hình 2-12.



Hình 2-12

(Hàng rào thế là miền không gian mà tại đó thế năng lớn hơn các miền lân cận nó). Theo quan điểm của vật lý cổ điển thì một hạt có năng lượng toàn phần W nhỏ hơn thế năng U_{\max} (độ cao hàng rào) hạt không thể vượt ra khỏi hàng rào, vì khi đó động năng có giá trị âm và vận tốc ảo, nhưng đồng thời với điều đó hạt cũng không thể nâng trên hàng rào thế năng, vì điều đó “mâu thuẫn” với định luật bảo toàn năng lượng. Theo quan điểm của cơ học lượng tử thì vi hạt vẫn có khả năng xuyên qua hàng rào thế năng bằng dờn chuyển “đường ngầm” - gọi là *hiệu ứng đường ngầm*.

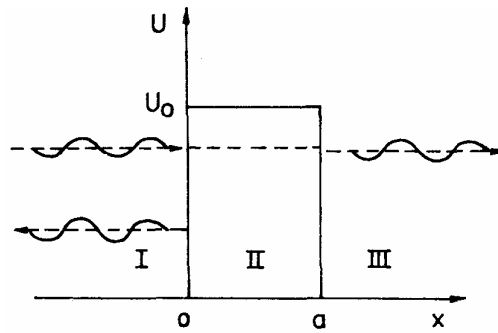
Để đơn giản, ta xét trường hợp hàng rào thế năng có độ cao U_0 có bề rộng a (h.2-13):

$$U = \begin{cases} 0 & \text{khi } x \leq 0, \text{ miền I} \\ U_0 & \text{khi } 0 < x < a, \text{ miền II} \\ 0 & \text{khi } x \geq a, \text{ miền III} \end{cases}$$

Khi đó phương trình Schrodinger mô tả trạng thái của vi hạt trong các miền có dạng:

Miền I:

$$\frac{d^2\Psi_I}{dx^2} + k_1^2\Psi_I = 0,$$



Hình 2-13

$$\text{với } k_1^2 = \frac{2mW}{\hbar^2}$$

Miền II:

$$\frac{d^2\Psi_{II}}{dx^2} - k_2^2\Psi_{II},$$

với

$$k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - W).$$

Miền III:

$$\frac{d^2\Psi_{III}}{dx^2} + k_1^2\Psi_{III} = 0.$$

Nghiệm của các phương trình tương ứng với ba miền có dạng:

$$\left. \begin{aligned} \Psi_I(x) &= A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}; \\ \Psi_{II}(x) &= A_2 e^{k_2 x} + B_2 e^{-k_2 x}; \\ \Psi_{III}(x) &= A_3 e^{ik_1(x-a)} + B_3 e^{-ik_1(x-a)} \end{aligned} \right\} \quad (2-46)$$

Các nghiệm (2-46) có nghĩa như sau:

- Đối với miền I: $A_1 e^{ik_1 x}$ đặc trưng cho sóng tới bờ rào và $B_1 e^{-ik_1 x}$ đặc trưng cho sóng phản xạ trên bờ rào ($x = 0$).

- Miền II: nghiệm không mang tính chất sóng.

- Miền III: $A_3 e^{ik_1(x-a)}$ đặc trưng cho sóng truyền qua hàng rào ($x = a$) và $B_3 e^{-ik_1(x-a)}$ đặc trưng cho sóng phản xạ từ vô cực trở về, nhưng ở vô cực không có sự phản xạ sóng, nên ta đặt $B_3 = 0$.

Các hằng số A_1, B_1, A_3 còn được gọi là biên độ sóng, được xác định từ các điều kiện biên của hàm sóng:

$$\begin{aligned}\Psi_I(0) &= \Psi_{II}(0) ; \Psi'_I(0) = \Psi'_{II}(0) ; \\ \Psi_{II}(a) &= \Psi_{III}(a) ; \Psi'_{II}(a) = \Psi'_{III}(a) .\end{aligned}$$

Từ đây ta có hệ phương trình:

$$\left. \begin{aligned}A_1 + B_1 &= A_2 + B_2 ; \\ ik_1(A_1 - B_1) &= k_2(A_2 - B_2) ; \\ A_2 e^{k_2 a} + B_2 e^{-k_2 a} &= A_3 ; \\ k_2(A_2 e^{k_2 a} - B_2 e^{-k_2 a}) &= ik_1 A_3\end{aligned}\right\} \quad (2-47)$$

Từ hai phương trình cuối của (2-47), ta tính được A_2, B_2 qua A_3 :

$$\left. \begin{aligned}A_2 &= \frac{(1 + in)}{2} e^{-k_2 a} \cdot A_3 ; \\ B_2 &= \frac{1 - in}{2} e^{k_2 a} \cdot A_3 ,\end{aligned}\right\} \quad (2-48)$$

$$\text{trong đó } n = \frac{k_1}{k_2} = \sqrt{\frac{W}{U_0 - W}}$$

và từ hai phương trình đầu của (2-47) ta tìm được:

$$A_1 = \frac{(1 - \frac{i}{n})A_2 + (1 + \frac{i}{n})B_2}{2} \quad (2-49)$$

Giả sử năng lượng W của vi hạt rất nhỏ so với độ cao của hàng rào thế năng $U_0 (W \ll U_0)$ hoặc bề rộng của hàng rào khá lớn, sao cho có điều kiện $k_2 a \gg 1$. Khi đó $e^{-k_2 a}$ nhỏ và do đó có thể bỏ qua A_2 . Kết quả, có thể tính A_1 theo A_3 qua biểu thức:

$$A_1 = \frac{(1 + \frac{i}{n})B_2}{2} = \frac{(1 + \frac{i}{n})(1 - in)e^{k_2 a}}{4} A_3 \quad (2-50)$$

Bây giờ ta tính hệ số truyền qua hàng rào thế năng (D):

Theo định nghĩa, hệ số truyền qua hàng rào

$$\begin{aligned}D &= \frac{\text{Cường độ sóng truyền qua}}{\text{Cường độ sóng tới}} = \\ &= \frac{|A_3 e^{ik_1(x-a)}|^2}{|A_1 e^{ik_1 x}|^2} = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2} \quad (2-51)\end{aligned}$$

Dựa vào (2-50) ta tính được hệ số truyền qua:

$$D = \frac{16n^2}{(1 + n^2)^2} e^{-2k_2 a} = \frac{16n^2}{(1 + n^2)^2} e^{-\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - W)}} \quad (2-52)$$

Nếu hàng rào thế năng không phải là vuông góc mà có dạng phức tạp như hình 2-12 thì công thức cho hệ số truyền qua hàng rào thế năng có dạng:

$$D = D_0 e^{-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(U(x) - W)} dx}, \quad (2-53)$$

trong đó

$$D_0 = \frac{16n^2}{(1 + n^2)^2}$$

($D_0 \approx 1$ khi U_0 cỡ 10 W).

Lưu ý rằng $U(x)$ là hàm số của x ; x_1 và x_2 là tọa độ của những điểm mà thế năng $U(x)$ bằng năng lượng toàn phần W của vi hạt.

Từ (2- 52) ta thấy, tuy năng lượng $W < U_0$ nhưng D vẫn luôn luôn khác 0, như vậy vẫn có hạt xuyên qua hàng rào thế năng dù ít hay nhiều (tùy thuộc D nhỏ hay lớn). Với vi hạt có khối lượng m xác định, D phụ thuộc vào bề rộng a của hàng rào: khi a nhỏ thì hệ số D lớn, nghĩa là hiệu ứng đường ngầm chỉ xảy ra rõ nét trong kích thước vi mô và là một hiện tượng biểu hiện rõ tính chất sóng của vi hạt, điều mà hạt vĩ mô chuyển động không thể có.

Cần chú ý rằng, theo cơ học cổ điển thì động năng (E_0) và thế năng (U) phân biệt được với nhau một cách riêng rẽ và năng lượng nhận biểu thức tổng quát $W = "E_d + U"$, trong đó động năng được xác định bởi vận tốc, thế năng được xác định bởi tọa độ của hạt, nhưng theo hệ thức bất định Heisenberg, vận tốc và tọa độ không thể đồng thời xác định, cho nên động năng và thế năng cũng không thể đồng thời xác định. Vì vậy, việc chia năng lượng toàn phần thành động năng và thế năng là hoàn toàn vô nghĩa. Do đó không thể cho rằng, khi hạt qua đường ngầm thì "động năng" có giá trị âm. Hiện tượng này được cơ học lượng tử giải thích như sau:

- Khi giải phương trình Schrödinger cho vi hạt ta thấy xác suất để tìm thấy vi hạt ở ngoài giếng thế năng tuy nhỏ nhưng vẫn có, như vậy việc vi hạt "ngấm" qua hàng rào ra ngoài là hệ quả tự nhiên của cơ học lượng tử.

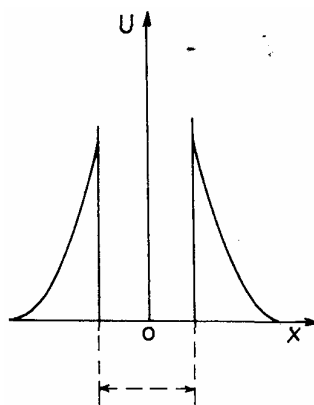
- Theo hệ thức bất định, nếu trong những điều kiện có thể mà độ bất định về tọa độ Δx lớn hơn bề rộng a của hàng rào thế năng ($\Delta x > a$), thì hạt có thể ở bên này cũng như ở bên kia của hàng rào thế năng.

- Khi độ bất định về tọa độ $\Delta x \rightarrow$ độ bất định về vận tốc Δv đủ lớn thì độ thăng giáng năng lượng ΔW đủ lớn đến mức vi hạt có năng lượng bổ sung để vượt qua hàng rào thế năng.

-Như ta đã biết, sóng điện từ (chẳng hạn như ánh sáng) khi truyền đến mặt phân cách giữa hai môi trường khác nhau, thì phản xạ một phần và một phần truyền qua môi trường thứ hai. Đối với sóng Broglie thì hàng rào thế năng cũng có vai trò tương

đương như mặt phân cách giữa hai môi trường đối với sóng điện từ. Sự tương đương đó có một ý nghĩa sâu sắc về tính chất. Vậy *tính thấm qua* là hệ quả của tính chất sóng của hạt vi mô.

Hiệu ứng đường ngầm



Hình 2-14. Kích thước hạt nhân

giữ một vai trò quan trọng trong việc giải thích các hiện tượng như sự tự phát electron (sự phát electron lạnh), sự phân rã α chuyển động của electron trong tinh thể, các điôt đường ngầm.

Ví dụ:

- *Giải thích sự phát electron lạnh*: Thông thường để electron hắt ra khỏi kim loại, kim loại cần được nung nóng để electron có đủ năng lượng thắng công cản vượt qua hàng rào thế năng. Nhưng vì có hiệu ứng đường ngầm, nên ngay ở nhiệt độ thường, electron cũng có khả năng thoát ra ngoài kim loại.

- *Hiện tượng phân rã α (${}^4_2\text{He}$)*: Các hạt proton và neutron tạo thành hạt nhân nguyên tử luôn tương tác với nhau, cho nên có thể coi chúng như nằm trong giếng có hàng rào thế năng (h.2-14). Hạt α (hạt nhân của nguyên tố He, gồm hai proton và hai neutron tạo thành) tuy có năng lượng thấp hơn chiều cao của hàng rào thế năng, nhưng do hiệu ứng đường ngầm vẫn có thể bay ra khỏi hạt nhân, tạo nên hiện tượng phân rã α

3. Dao tử điều hòa trong cơ học lượng tử

Dao động của ion xung quanh nút mạng tinh thể, dao động của nguyên tử trong phân tử, v.v... đều có thể xem là dao tử điều hòa. Như vậy, dao tử điều hòa là một hiện tượng hết sức quan trọng trong vật lý lượng tử. Dao tử điều hòa ở đây hiện theo nghĩa là các vi hạt chuyển động dưới tác dụng của lực giả đàn hồi. Giả sử khi đó vi hạt chuyển động theo phương x trong trường thế năng $U_x = \frac{1}{2} kx^2$. Vì $\omega^2 = \frac{k}{m}$, nên

$$U_x = \frac{m \omega^2 x^2}{2}, \quad (2-54)$$

trong đó m - khối lượng của hạt dao động ;

ω - tần số góc của dao động.

Việc tìm năng lượng của dao tử điều hòa là điều mà chúng ta rất quan tâm, vì biểu thức cho các mức năng lượng là biểu thức quan trọng nhất trong cơ học lượng tử.

Muốn xác định năng lượng của dao tử điều hòa ta phải giải phương trình Schrödinger . Vì xét chuyển động một chiều, nên phương trình Schrödinger cho dao tử điều hòa có dạng:

$$\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(W - \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right) \Psi(x) = 0 . \quad (2-55)$$

Hàm $\psi(x)$ thỏa mãn điều kiện liên tục, hữu hạn, đơn trị và $\psi(x) = 0$ khi $x \rightarrow \infty$.

Khi giải phương trình (2 - 55), áp dụng các điều kiện mà $\psi(x)$ thỏa mãn, ta suy ra được biểu thức năng lượng của dao tử điều hòa:

$$W_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad (2-56)$$

trong đó n - một số nguyên dương hoặc bằng 0 ($n = 0, 1, 2, 3, \dots$).

Từ biểu thức (2- 56) cho các mức năng lượng, ta thấy:

Năng lượng của dao tử điều hòa có giá trị gián đoạn và mức năng lượng được sắp xếp cách đều nhau bằng $\hbar\omega$.

Mặt khác biểu thức (2-56) xác định cách giải thích của M.K.E.Planck về tương tác của bức xạ với vật chất, miễn là thừa nhận vật chất như tập hợp các dao tử, mỗi dao tử phát ra bức xạ chính lần số của nó. Do đó sự trao đổi năng lượng bị giới hạn bởi những trị số riêng của dao tử, chỉ nhận được những đơn vị $\hbar\omega$, như vậy là đúng với giả thiết của M.K.E.Planck.

Ở đây năng lượng cực tiểu của dao tử điều hòa là $W_{\min} = \frac{1}{2} \hbar\omega$ (ứng với $n = 0$), chứ không phải bằng 0 như trong lý thuyết cổ điển và trong lý thuyết Bohr. Năng lượng cực tiểu ứng với trạng thái cơ bản của dao tử, còn những mức năng lượng cao hơn ứng với các trạng thái kích thích.

Năng lượng $W_{\min} = \frac{1}{2} \hbar\omega$ còn gọi là năng lượng “không”. Năng lượng này liên quan chặt chẽ với dao động “không” của dao tử khi $T \rightarrow 0K$. Thí nghiệm về sự tán xạ của tia X qua tinh thể ở nhiệt độ thấp xác nhận rằng, khi nhiệt độ $T \rightarrow 0K$ dao tử vẫn dao động. Nếu như ở nhiệt độ thấp mạng tinh thể không dao động thì không có tương tác giữa tia X và mạng tinh thể và do đó sẽ không có sự tán xạ. Điều này trái với kết quả thực nghiệm về sự tán xạ của tia X. Như vậy, ở nhiệt độ thấp mạng tinh thể vẫn dao động.

Việc tồn tại dao động "không" của dao tử liên quan trực tiếp với hệ thức bất định. Quả vậy, nếu ở nhiệt độ $T = 0K$ mà dao tử không dao động, thì ta xác định được chính xác đồng thời tọa độ ($x = 0$) và động lượng ($P = 0$), điều này trái với hệ thức bất định. Sự tồn tại năng lượng "không" của dao tử điều hòa là một trong những đặc trưng quan trọng nhất của tính chất sóng của vi hạt.

Chương III

VẬT LÝ NGUYÊN TỬ

Trong chương này chúng ta sẽ vận dụng những kết quả của cơ học lượng tử để nghiên cứu về đặc tính và phổ của nguyên tử. Để đơn giản, trước hết ta nghiên cứu nguyên tử hydro.

3-1. NGUYÊN TỬ HYDRO. TRẠNG THÁI VÀ NĂNG LƯỢNG CỦA ELECTRON. QUANG PHỔ

1. Chuyển động của electron trong nguyên tử hydro

Chuyển động của electron trong trường Coulomb của hạt nhân nguyên tử là một bài toán quan trọng của cơ học lượng tử. Ở đây chúng ta nghiên cứu chuyển động của electron trong trường xuyên tâm của hạt nhân (Trường lực xuyên tâm là trường mà thế năng của hạt trong trường này phụ thuộc vào khoảng cách r tới gốc tọa độ O đặt tại neutron của trường).

Chúng ta biết rằng nguyên tử hydro và các con đồng dạng (như He^+ , Li^+ , v.v...) gồm có một hạt nhân mang điện tích $+Ze$ (Z chính là số thứ tự của nguyên tố trong bảng tuần hoàn Mendeleev⁽¹⁾, đối với nguyên tử hydro $Z = 1$) và một electron mang điện tích $(-e)$ chuyển động xung quanh hạt nhân (h. 3-1).

Lực tương tác giữa hạt nhân và electron là lực hút tĩnh điện (theo định luật Coulomb):

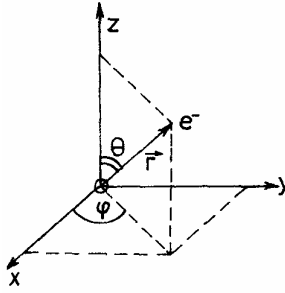
$$F = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \quad (3-1)$$

và thế năng tương tác của hạt nhân và electron có dạng:

$$U(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}, \quad (3-2)$$

trong đó r - khoảng cách từ electron đến gốc O của hệ tọa độ đặt tại hạt nhân. Hạt nhân có khối lượng lớn so với khối lượng của electron (m_e), vì vậy có thể coi hạt nhân đứng yên, còn electron chuyển động trong một trường xuyên tâm có thế năng dạng (3 - 2) Khi đó phương trình Schrödinger cho electron chuyển động trong nguyên tử hydro sẽ là:

1. Dimitri Ivanovits Medeleev (8.2.1834 - 1907) người Nga (NBT).



Hình 3-1

$$\Delta\Psi(\vec{r}) + \frac{2m_e}{\hbar^2} \left(W + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \Psi(\vec{r}) = 0 \quad (3-3)$$

Vì ở đây trường của hạt nhân là xuyên tâm có tính đối xứng cầu nên tiện nhất là sử dụng hệ tọa độ cầu (r, θ, φ) , mà chúng liên hệ tọa độ Descartes bằng các hệ thức sau đây:

$$\left. \begin{aligned} x &= r\sin\theta\cos\varphi \\ y &= r\sin\theta\sin\varphi \\ z &= r\cos\theta \\ r &= \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \end{aligned} \right\} \begin{aligned} 0 &\leq r < \infty \\ 0 &\leq \varphi \leq 2\pi \\ 0 &\leq \theta \leq \pi \\ \operatorname{tg}\varphi &= \frac{y}{x}, \cos\theta = \frac{z}{r} \end{aligned}$$

Như vậy hàm sóng sẽ là hàm của các biến số r, θ, φ :

$$\Psi(\vec{r}) = \Psi(r, \theta, \varphi).$$

Do đó phương trình Schrödinger trong tọa độ cầu có dạng:

$$\begin{aligned} &\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \Psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} \right) + \\ &+ \frac{1}{r^2 \sin^2\theta} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varphi^2} + \frac{2m_e}{\hbar^2} \left(W + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \Psi = 0 \end{aligned} \quad (3-4)$$

Để giải bài toán này, người ta dùng phương pháp phân ly biến số trong hệ tọa độ cầu. Điều này cho phép ta biểu diễn nghiệm dưới dạng:

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \cdot Y(\theta, \varphi). \quad (3-5)$$

Thay (3-5) vào phương trình (3-4), sau đó chuyển vế và chia cả hai vế phương trình nhận được cho $R(r)Y(\theta, \varphi)$ ta được:

$$\begin{aligned} &\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2m_e r^2}{\hbar^2} \left(W + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) = \\ &= - \frac{1}{Y \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) - \frac{1}{Y \sin^2\theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \varphi^2} \end{aligned} \quad (3-6)$$

Chú ý rằng hàm $R(r)$ chỉ phụ thuộc vào một biến số r nên ta thay đạo hàm riêng

$\frac{\partial}{\partial r}$ bằng đạo hàm thường $\frac{d}{dr}$. Vì vế trái của (3-6) chỉ phụ thuộc vào biến r , còn vế phải phụ thuộc vào biến θ, φ nên hai vế chỉ có thể bằng nhau khi chúng bằng cùng một hằng số λ .

Do vậy ta có thể viết:

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2m_e r^2}{\hbar^2} \left(W + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) = \lambda ; \quad (3-7)$$

$$\frac{1}{Y \sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial Y}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{Y \sin^2\theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial\varphi^2} = -\lambda . \quad (3-8)$$

Theo lý thuyết phương trình vi phân thì hai phương trình (3-7) và (3-8) có các nghiệm R, Y đơn trị, giới nội, liên tục chỉ khi λ có các giá trị xác định. Giải phương trình (3-7) ta tìm được hàm $R(r)$ phụ thuộc vào hai số nguyên không âm n, l : $R = R_{n,l}(r)$; và giải phương trình (3-8) ta tìm được $Y(\theta, \varphi)$ phụ thuộc vào hai số nguyên l, m : $Y = Y_{l,m}(\theta, \varphi)$.

$Y_{l,m}(\theta, \varphi)$ là các hàm số cầu và chính là hàm riêng của toán tử bình phương mômen động lượng:

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \Delta_{\theta, \varphi} = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right]$$

Thật vậy, phương trình (3-8) có thể viết:

$$-\left[\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right] Y = \lambda Y . \quad (3-9)$$

Nhân hai vế của phương trình (3-9) với \hbar^2 ta có:

$$-\hbar^2 \Delta_{\theta, \varphi} Y = \hbar^2 \lambda Y = \hbar^2 l(l+1)Y.$$

Suy ra:

$$\hat{L}^2 Y = \hbar^2 l(l+1)Y.$$

Rõ ràng Y là hàm riêng của toán tử bình phương mômen động lượng \hat{L}^2 . Ở đây $\lambda = l(l+1)$ và các số n, l, m lấy các giá trị:

$$n = 1, 2, 3, 4, \dots ;$$

$$l = 0, 1, 2, 3, \dots, m-1 (l \leq n-1) ;$$

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, \pm l (-l \leq m \leq l).$$

số nguyên n được gọi là số lượng tử chính.

Số nguyên l được gọi là số lượng tử quỹ đạo (phương vị).

Số nguyên m được gọi là số lượng tử từ.

Sau đây là dạng cụ thể của một vài hàm riêng $R_{n,l(r)}$ và $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$:

$$R_{1,0} = 2 \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \cdot e^{-\frac{Zr}{a_0}} ; (n = 1, l = 0)$$

$$R_{2,0} = \frac{1}{8} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \cdot \left(2 - \frac{Zr}{a_0} \right) \cdot e^{-\frac{Zr}{2a_0}} ; (n = 2, l = 0)$$

$$R_{2,1} = \frac{1}{24} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \cdot \frac{Zr}{a_0} \cdot e^{-\frac{Zr}{2a_0}} , (n = 2, l = 1)$$

với

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} ;$$

$$Y_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} ; (l = 0, m = 0)$$

$$Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta ; (l = 1, m = 0)$$

$$Y_{1,\pm 1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta \cdot e^{\pm i\varphi} ; (l = 1, m = \pm 1)$$

$$Y_{2,0} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3\cos^2\theta - 1) ; (l = 2, m = 0)$$

$$Y_{2,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \cos\theta \sin\theta \cdot e^{\pm i\varphi} ; (l = 2, m = \pm 1)$$

$$Y_{2,\pm 2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2\theta \cdot e^{\pm i2\varphi} . (l = 2, m = \pm 2)$$

Viết một cách tổng quát:

$$Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{4\pi(l+|m|)!}} \cdot P_l^{|m|}(\cos\theta) e^{im\varphi}, \quad (3-10)$$

trong đó các hàm đa thức liên kết Legendre⁽¹⁾ $P_l^{|m|}(x)$ có dạng:

$$P_l^{|m|}(x) = (1-x^2)^{\frac{|m|}{2}} \frac{d^{|m|}}{dx^{|m|}} P_l(x) ;$$

$$P_l(x) = \frac{d^l}{2^l l! dx^l} \left[(x^2 - 1)^l \right] ; x = \cos\theta ,$$

là các đa thức Legendre.

1. Adrien Marie Legendre (18.9.1752 - 10.1.1833) người Pháp (NBT).

2. Biểu thức năng lượng

Ngoài các kết quả nêu trên, người ta còn thu được biểu thức năng lượng của electron:

$$W_n = -\frac{1}{n^2} \cdot \frac{m_e e^4 Z^2}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2}$$

Đối với nguyên tử hydro $Z = 1$, ta có:

$$W_n = -\frac{1}{n^2} \cdot \frac{m_e e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} = -\frac{Rh}{n^2}, \quad (3-11)$$

trong đó

$$R = \frac{m_e e^4}{4\pi(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^3} = 3,27 \cdot 10^{15} s^{-1}$$

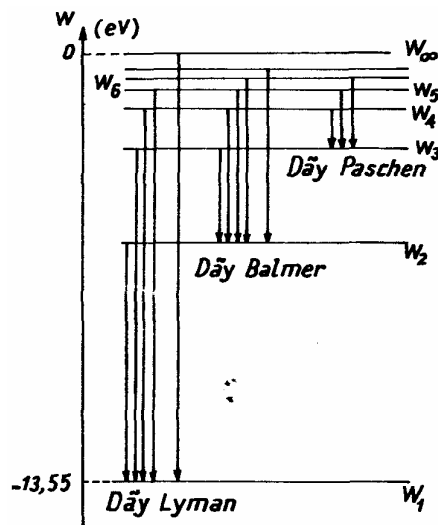
gọi là hằng số Rydberg, đã được thực nghiệm xác nhận.

Sau đây là các kết luận suy ra từ kết quả nêu trên:

3. Các kết luận

a) Các mức năng lượng của electron trong nguyên tử hydro chỉ phụ thuộc vào một số lượng tử chính n theo công thức (3-11). Theo công thức này thì năng lượng nhận những giá trị gián đoạn. hay ta nói năng lượng bị lượng tử hóa và tỷ lệ nghịch với bình phương các số nguyên. Sự gián đoạn của năng lượng chính là hệ quả của điều kiện về tính hữu hạn đối với hàm sóng ở vô cực.

Ta cũng nhận thấy năng lượng W tăng khi số lượng tử chính n tăng, nhưng luôn âm ($W < 0$) và ứng với mỗi giá trị của n ta có một mức năng lượng: với giá trị $n = 1$ tương ứng với mức năng lượng W_1 thấp nhất (mức cơ bản) của hạt trong trường Culong gọi là mức K (lớp K).



Hình 3-2

Với $n = 2$ ứng với mức năng lượng W_2 gọi là mức L ;

$n = 3$ ứng với mức năng lượng W_3 gọi là mức M ;

$n = 4$ ứng với mức năng lượng W_4 gọi là mức N, v.v...

Sơ đồ các mức năng lượng của electron trong nguyên tử hydro và cũng là mức năng lượng của nguyên tử hydro như hình 3.2.

Như vậy khi $n \rightarrow \infty$ thì khoảng cách giữa các mức năng lượng giảm đi và các mức rất gần nhau: $n \rightarrow \infty, \Delta W \rightarrow 0$ và phổ gián đoạn chuyển sang phổ liên tục.

b) Ở miền $W > 0$ thì năng lượng liên tục, các giá trị năng lượng trong miền này ứng với trạng thái electron ở ngoài nguyên tử - electron chuyển động tự do (đối với electron xa hạt nhân đến mức năng lượng của trường lực tĩnh điện không đáng kể)

Năng lượng cần thiết để đưa electron từ trạng thái liên kết có năng lượng thấp nhất U_1 ra ngoài nguyên tử, tức là đến trạng thái có năng lượng bằng 0 ($W_\infty = 0$) gọi là năng lượng ion hóa E. Như vậy thì:

$$E = W_\infty - W_1 = \frac{m_e e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} = 2,185 \cdot 10^{-18} \text{ J} = 13,55 \text{ ev.}$$

Giá trị này phù hợp với thực nghiệm.

c) Trạng thái lượng tử của vi hạt biểu diễn bởi hàm sóng ψ được xác định hoàn toàn qua tập hợp các giá trị của ba số lượng n, l và m :

$$\Psi_{n,l,m}(r,\theta,\varphi) = R_{n,l}(r) \cdot Y_{l,m}(\theta,\varphi). \quad (3-12)$$

Ứng với cùng một giá trị năng lượng W_n (cùng một mức năng lượng W_n) mà có nhiều trạng thái khác nhau, thì ta nói mức năng lượng suy biến. Bây giờ ta tính xem có bao nhiêu trạng thái ứng với cùng một mức năng lượng W_n , nghĩa là ta tính xem ứng với một giá trị n của số lượng tử chính có bao nhiêu bộ giá trị l, m khác nhau. Điều này có nghĩa là các mức năng lượng của nguyên tử hydro là suy biến theo các số lượng tử l, m .

Với một giá trị của l thì có $(2l + 1)$ giá trị khác nhau của m , tức là có $(2l + 1)$ trạng thái khác nhau. Với một giá trị của n lại có n giá trị khác nhau của l từ 0 đến $(n-1)$. Kết quả ứng với một 'trị của n có số trạng thái là:

$$\begin{aligned} \sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) &= 1 + 3 + 5 + \dots + (2n-1) = \\ &= \frac{[1 + (2n - 1)] \cdot n}{2} = n^2. \end{aligned}$$

Vậy số trạng thái lượng tử khác nhau có cùng một mức năng lượng W_n là n^2 . Ta nói rằng mức năng lượng W_n suy biến bậc n^2 .

Ví dụ: Với $n = 1$ ứng với mức năng lượng W_1 chỉ có một trạng thái lượng tử

(trạng thái cơ sở). ứng với mức năng lượng W_2 ($n=2$) có 4 trạng thái lượng tử của vi hạt ...

Các trạng thái ứng với mức năng lượng cao hơn mức W_1 gọi là các trạng thái kích thích. Theo thói quen trong quang phổ học, người ta thường dùng các ký hiệu đặc biệt của các số lượng tử n và l để ký hiệu các trạng thái. Theo các ký hiệu đó thì số lượng tử n được viết đúng là một chữ số, còn số lượng tử l được thay bằng một chữ cái: $l=0$ ký hiệu là s; $l=1$ là p; $l=2$ là d; $l=3$ là f; $l=4$ là g và cứ tiếp tục theo thứ tự ký hiệu i, j, k, ... Ví dụ, trạng thái có $n=2, l=0$ ký hiệu là 2s (gọi tắt là trạng thái 2s); trạng thái có $n=3, l=2$ ký hiệu là 3d, ...

d) Xác suất để tìm thấy electron trong phần tử thể tích dV (trong tọa độ cầu $dV = r^2 \sin\theta dr d\theta d\varphi$) có tọa độ trong khoảng $r, r + dr$; $\theta, \theta + d\theta$ và $\varphi, \varphi + d\varphi$ là:

$$\begin{aligned} |\Psi_{n,l,m}(r,\theta,\varphi)|^2 dV &= |R_{n,l}(r) \cdot Y_{l,m}(\theta,\varphi)|^2 r^2 \sin\theta dr d\theta d\varphi = \\ &= |R_{n,l}(r)|^2 r^2 dr |Y_{l,m}(\theta,\varphi)|^2 \sin\theta d\theta d\varphi. \end{aligned}$$

Như vậy, xác suất cũng tách thành hai thành phần:

1. Phần phân bố xác suất theo khoảng cách r tới tâm hạt nhân: xác suất để tìm thấy electron trong khoảng cách từ r đến $r + dr$ là:

$$d\omega_{n,l}(r) = |R_{n,l}(r)|^2 r^2 dr. \quad (3-13)$$

Gọi $\rho_{n,l}(r)$ là mật độ xác suất tìm thấy electron ở lớp cầu có bề dày dr và bán kính r , thì:

$$\rho_{n,l}(r) = \frac{d\omega_{n,l}(r)}{dr} = |R_{n,l}(r)|^2 r^2. \quad (3-14)$$

2. Phần phụ thuộc vào các góc θ, φ : xác suất để electron nằm trong góc khối $d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$ là:

$$d\omega_{l,m}(\theta,\varphi) = |Y_{l,m}(\theta,\varphi)|^2 d\Omega = |Y_{l,m}(\theta,\varphi)|^2 \sin\theta d\theta d\varphi \quad (3-15)$$

Hình 3-3 là đường biểu diễn mật độ xác suất theo bán kính r đối với một vài trạng thái. Từ hình 3-3 ta thấy, ở bất kỳ khoảng cách nào cũng có khả năng tìm thấy electron. Tuy nhiên, ở mỗi trạng thái đều có một khoảng cách ứng với xác suất tìm thấy electron là lớn nhất. Ví dụ, đối với trạng thái cơ sở ứng với mức năng lượng thấp nhất (với $n=1, l=0, m=0$) hàm $R_{n,l}(r)$ là:

$$R_{1,0} = 2 \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} e^{-\frac{Zr}{a_0}}$$

Khi đó mật độ xác suất $\rho_{1,0}^2(r)r^2$ tương ứng có dạng:

$$\rho_{1,0} = R_{1,0}^2(r)r^2 = 4 \left(\frac{Z}{a_0} \right)^3 e^{-\frac{2Zr}{a_0}} r^2$$

Để xác định bán kính r ứng với xác suất cực đại, ta cho đạo hàm $\rho_{1,0}$ theo r triệt tiêu:

$$\frac{d\rho_{1,0}}{dr} = 4 \left(\frac{Z}{a_0} \right)^3 e^{-\frac{2Zr}{a_0}} 2r \left(1 - \frac{Zr}{a_0} \right) = 0 .$$

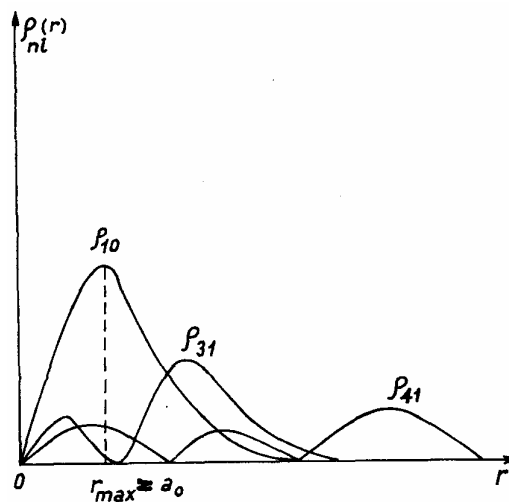
Suy ra $r = 0$ và $r = \frac{a_0}{Z}$. Với nghiệm $r = 0$, electron rơi vào hạt nhân, điều này không phù hợp với ý nghĩa vật lý. Vậy xác suất cực đại ứng với bán kính

$$r_{\max} = \frac{a_0}{Z} .$$

Đối với nguyên tử hydro $Z = 1$, khoảng cách này bằng:

$$r_{\max} = a_0 = 0,529 \cdot 10^{-10} \text{m} .$$

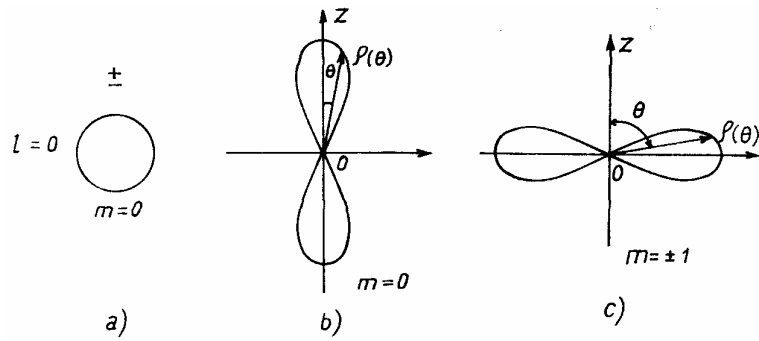
Đó chính là bán kính quỹ đạo Bohr thứ nhất (bằng bán kính của nguyên tử hydro theo quan niệm cổ điển). Theo quan niệm bán lượng tử của N.Bohr thì electron chuyển động chung quanh hạt nhân theo một quỹ đạo xác định. Nhưng theo cơ học lượng tử thì electron trong nguyên tử



Hình 3-3

không có quỹ đạo xác định, electron chuyển động xung quanh hạt nhân và phân bố bao quanh hạt nhân như một "đám mây", có chỗ dày tương ứng với chỗ xác suất tìm thấy electron lớn và chỗ thưa của "đám mây" tương ứng với chỗ xác suất tìm thấy electron nhỏ, chỗ dày đặc nhất của "đám mây" tương ứng với xác suất tìm electron cực đại .

Bây giờ ta xét sự phân bố electron theo góc theo công thức (3 - 15), trong đó $|Y_{l,m}(\theta, \varphi)|^2$ là xác suất tìm thấy electron trong một hướng xác định trên một đơn vị góc khối. Theo (3 10) $|Y_{l,m}(\theta, \varphi)|^2$ không phụ thuộc vào góc φ . Như vậy, xác suất tìm



$$|Y_{1,0}|^2 = \frac{3}{4\pi} \cos^2\theta, \quad |Y_{1,\pm 1}|^2 = \frac{3}{8\pi} \sin^2\theta$$

Hình 3- 4. a/ Sự phân bố xác suất ở trạng thái s; b) sự phân bố mật độ xác suất theo góc θ ở trạng thái p(l-1) (có ba trạng thái ứng với $m = 0; \pm 1$).

thấy electron trong góc khối $d\Omega$ không phụ thuộc vào góc φ , chỉ phụ thuộc vào góc θ và độ lớn của $d\Omega$. Điều đó chứng tỏ, sự phân bố electron xung quanh hạt nhân có tính chất đối xứng của một vật tròn xoay quanh trục mà ta chiếu mômen động lượng lên đó (chẳng hạn trục Oz). Ví dụ, ở trạng thái cơ sở $n = 1, l = 0$ (trạng thái s), ta có $|Y_0|^2 = \frac{1}{4\pi}$, từ đây suy ra xác suất không phụ thuộc vào cả góc φ lẫn góc θ tức là có tính đối xứng cầu, còn các trạng thái có lạng lượng lớn $n > 1$ thì có xuất hiện những trạng thái $l > 0$. Trong các trường hợp đó, xác suất mất đi tính đối xứng cầu (h.3-4).

e) Khi cho nguyên tử hydro phát sáng và dùng kính quang phổ quan sát, ta thấy: quang phổ là một hệ các vạch màu thanh nét. Kết quả này được giải thích như sau: bình thường electron trong nguyên tử hydro chiếm mức năng lượng thấp nhất W_1 (ở trạng thái cơ sở), khi nguyên tử bị kích thích (ví dụ bằng cách phóng điện một ống đựng khí hydro ở áp suất thấp), electron nhận thêm năng lượng rồi chuyển đổi lên trạng thái ứng với mức năng lượng W_l , cao hơn.

Ở trạng thái kích thích này một thời gian rất ngắn (cỡ 10^{-8} s), electron lại nhảy về trạng thái ứng với mức năng lượng $W_{n'}$ thấp hơn. Trong mỗi quá trình chuyển mức năng lượng từ cao về thấp như vậy, nguyên tử phát ra bức xạ điện từ (phát một photon) mang năng lượng hộ thỏa mãn biểu thức

$$h\nu = W_n - W_{n'}$$

Dựa vào (3 -11) ta suy ra được các tần số ứng với các vạch quang phổ đã phát xạ:

$$\nu = \frac{W_n - W_{n'}}{h} = R \left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad (3-16)$$

với $n' < n$.

Khi có sự chuyển từ các mức năng lượng có $n \geq 2$ về mức năng lượng có $n' = 1$, thì các vạch quang phổ phát xạ có tần số xác định theo công thức

$$\gamma = R \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad (3-17)$$

với $n = 2, 3, 4, \dots$

Các vạch quang phổ này có bước sóng trong vùng tử ngoại tạo thành dãy Lyman.

- Ứng với sự chuyển từ các mức có $n \geq 3$ về mức có $n' = 2$, tần số các vạch phát xạ được xác định theo công thức

$$\gamma = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad (3-18)$$

với $n = 3, 4, 5, \dots$

Các vạch này tạo thành dãy Balmer⁽¹⁾ có bước sóng nằm trong vùng nhìn thấy (công thức (3-18) do Balmer thiết lập năm 1885 bằng thực nghiệm, trước khi có lý thuyết Bô-m và cơ học lượng tử).

- Dãy Paschen được tạo thành ứng với sự chuyển từ mức có $n \geq 4$ về mức $n' = 3$:

$$\gamma = R \left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad (3-19)$$

với $n = 4, 5, 6, \dots$

- Tiếp theo là dãy Brackett:

$$\gamma = R \left(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad (3-20)$$

với $n = 5, 6, 7, \dots$

- Dãy Pofund:

$$\gamma = R \left(\frac{1}{5^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad (3-21)$$

với $n = 6, 7, 8, \dots$

Các vạch trong dãy Paschen, Brackett, Pofund nằm trong vùng hồng ngoại.

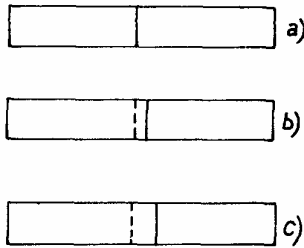
Các kết quả nêu trên hoàn toàn phù hợp với kết quả thu được từ thực nghiệm.

Sơ đồ của quang phổ hydro biểu thị ở hình 3-2.

Quang phổ của các ion tương tự hydro như He^+ , Li^{++} có cùng một dạng như quang phổ hydro đã trình bày ở trên, nhưng các vạch dịch chuyển về miền có bước sóng ngắn hơn, vì vế phải của công thức (3-16) có thêm thừa số Z^2 .

1. Balmer (1825 - 1898) người Thụy Sĩ (NBT).

Các công thức quang phổ thu được ở trên khi ta coi hạt nhân của nguyên tử đứng yên, electron chuyển động xung quanh hạt nhân dưới tác dụng của lực xuyên tâm hướng về hạt nhân: Thực chất thì hạt nhân và electron là một hệ hai hạt tương tác. Theo cơ học cổ điển, nếu hệ không bị ngoại lực tác dụng thì khối tâm của hệ đứng yên (hoặc chuyển động thẳng đều), electron (và cả hạt nhân) chuyển động xung quanh khối tâm giống như một hạt có khối lượng bằng khối lượng thu gọn của cả hệ: hạt thu gọn này chịu tác dụng của lực tương tác, và cách khối tâm một đoạn bằng khoảng cách giữa hai hạt thực mà ta xét. Trong cơ học lượng tử ta cũng chứng minh được kết quả tương tự. Vì vậy, khi xét tới chuyển động của hạt nhân ta phải tính tới chuyển động của toàn bộ hệ gồm hạt nhân và electron. Do đó, trong kết quả thu được, ta phải thay khối lượng electron m_e bằng khối lượng thu gọn m_{tg} của hệ:



Hình 3-5. Vị trí của một vạch quang phổ ứng với cùng số $n'.n$ của :
a) hydro ; b) đơteri ; c) triti.

$$m_{tg} = \frac{m_e M}{m_e + M} = \frac{m_e}{1 + \frac{m_e}{M}} = m_e \left(1 + \frac{m_e}{M}\right)^{-1} \approx m_e \left(1 - \frac{m_e}{M}\right), \quad (3-22)$$

trong đó $\frac{m_e}{M} \ll 1$, M - khối lượng của hạt nhân.

Khi đó hằng số Rydberg sẽ bằng:

$$R_M = \frac{m_{tg} e^4}{4\pi(4\pi\epsilon_0)^2 h^3} \approx R \left(1 - \frac{m_e}{M}\right) \quad (3-23)$$

Và công thức (3-16) tính tần số của vạch quang phổ được thay bằng công thức

$$\gamma = R \left(1 - \frac{m_e}{M}\right) \left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2}\right). \quad (3-24)$$

Như vậy, tần số các vạch quang phổ phụ thuộc vào khối lượng M của hạt nhân. Nhờ đó người ta dùng phương pháp quang phổ để xác định trọng lượng nguyên tử: chẳng hạn người ta đã tìm ra hai đồng vị của hydro là đơteri: $D = {}^2_1H$ và triti: $T = {}^3_1H$.

Vì khối lượng hạt nhân của hydro, đơteri và triti khác nhau, nên các vạch quang

phổ của chúng có lệch nhau chút ít (h.3- 5):

$$\left. \begin{aligned} \gamma_H &= R \left(1 - \frac{1}{1840} \right) \left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right) \\ \gamma_D &= R \left(1 - \frac{1}{3680} \right) \left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right) \\ \gamma_T &= R \left(1 - \frac{1}{5520} \right) \left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right) \end{aligned} \right\} \quad (3-25)$$

3-2. NGUYÊN TỬ KIM LOẠI KIỀM

1. Năng lượng của electron hóa trị trong nguyên tử kim loại kiềm

Ta biết rằng vành ngoài cùng của cấu tạo vành nguyên tử của các nguyên tử kim loại kiềm (Li, Na, K) cũng giống như nguyên tử hydro là vành ngoài cùng có một electron hóa trị liên kết yếu với hạt nhân. Electron hóa trị này cũng chuyển động trong trường Culong gây bởi lõi nguyên tử (gồm hạt nhân và các electron còn lại) (xem hình (3-6)). Chuyển động đó giống như chuyển động của electron trong nguyên tử hydro. Vì vậy, các tính chất hóa học cũng như tính chất quang học của các nguyên tử kim loại kiềm về cơ bản giống tính chất của nguyên tử hydro.



Hình 3-6. Mẫu vành của các nguyên tử kim loại kiềm Li, Na.

Do trong kim loại kiềm, ngoài năng lượng tương tác giữa electron hóa trị với hạt nhân, còn có năng lượng tương tác giữa electron hóa trị với các electron khác còn lại. Vì thế, năng lượng của electron hóa trị trong nguyên tử kim loại kiềm có khác đôi chút với năng lượng của electron hóa trị trong nguyên tử hydro. Sau khi bổ sung thêm phần năng lượng phụ do tương tác giữa electron hóa trị và các electron khác gây ra, biểu thức năng lượng của electron hóa trị đối với nguyên tử kim loại kiềm có dạng:

$$W_{n,l} = - \frac{1}{(n + \Delta_l)^2} \frac{m_e e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2}, \quad (3-26)$$

trong đó Δ_l - số hiệu chỉnh, phụ thuộc vào số lượng tử quỹ đạo l .

Vì vậy, với các trạng thái khác nhau (giá trị l khác nhau), số hiệu chỉnh Δ_l có giá trị khác nhau. Điều đó được thể hiện qua bảng giá trị của Δ_l , ở các trạng thái khác nhau, đối với một vài nguyên tử kim loại kiềm (bảng 3- 1).

Bảng 3 1

Z	Nguyên tố	$\Delta_s (l=0)$	$\Delta_p (l=1)$	$\Delta_d (l=2)$	$\Delta_f (l=3)$
3	Li	0,412	0,041	0,002	0,000
11	Ba	1,373	0,883	0,010	0,001
19	K	2,230	1,776	0,146	0,007
37	Rb	3,195	2,711	1,233	0,012
55	Cs	4,131	3,649	2,448	0,022

Kết quả, từ biểu thức (3-26) ta nhận thấy năng lượng của electron hóa trị phụ thuộc vào cả số lượng tử chính n và số lượng tử quỹ đạo l . Vì vậy, cách gọi mức năng lượng ở đây cũng khác đi và bây giờ mức năng lượng được ký hiệu nX với:

$$X = S \text{ khi } l = 0$$

$$X = P \text{ khi } l = 1,$$

$$X = D \text{ khi } l = 2,$$

$$X = F \text{ khi } l = 3, \dots$$

Từ đây ta có bảng về mức năng lượng và lớp (bảng 3-2).

Bảng 3 - 2

n	l	Trạng thái	Mức năng lượng	Lớp
1	0	1s	1S	K
2	0	2s	2S	L
	1	2p	2P	
3	0	3s	3S	M
	1	3p	3P	
	2	3d	3D	

2. Quang phổ của nguyên tử kim loại kiềm

Khi nguyên tử kim loại kiềm được kích thích từ bên ngoài, electron hoá trị thu thêm năng lượng rồi chuyển từ trạng thái ứng với mức năng lượng thấp sang trạng thái kích thích ứng với mức năng lượng cao hơn. Ở trạng thái kích thích một thời gian ngắn ($10^{-8}s$) electron lại chuyển về trạng thái ứng với mức năng lượng thấp hơn. Khi đó nguyên tử phát ra năng lượng dưới dạng bức xạ điện từ, nghĩa là phát ra một photon mang năng lượng $h\nu$. Ở đây, việc chuyển mức năng lượng không phải tùy ý, mà phải

tuân theo quy tắc chuyển từ mức năng lượng cao về mức năng lượng thấp tương tự như đối với quang phổ hydro. Trong cơ học lượng tử, hàm sóng mô tả hiện tượng lượng tử xảy ra thỏa mãn một số đòi hỏi nhất định gọi là quy tắc lựa chọn. Cơ học lượng tử giải thích các quá trình xảy ra đó như là hệ quả tự nhiên của các tính chất của hàm sóng. Các quy tắc lựa chọn gắn liền với các định luật bảo toàn trong các phép chuyển dời lượng tử. Các định luật bảo toàn năng lượng và xung lượng, định luật bảo toàn mômen động lượng và định luật bảo toàn chẵn lẻ của các trạng thái là những tiêu chuẩn để thiết lập các quy tắc lựa chọn. Đối với nguyên tử kim loại kiềm, vì mức năng lượng còn phụ thuộc vào số lượng tử quỹ đạo l , nên việc chuyển mức mức năng lượng còn phải tuân theo quy tắc lựa chọn:

$$\Delta l = l_2 - l_1 = \pm 1. \quad (3-27)$$

(Quy tắc lựa chọn này bảo toàn mômen động lượng và tính chẵn lẻ).

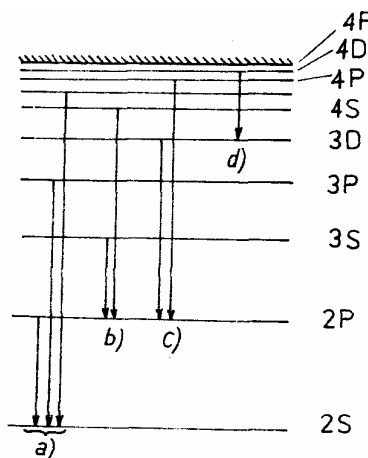
Dựa vào các quy tắc lựa chọn nêu trên ta có thể tìm được sơ đồ các vạch quang phổ của kim loại kiềm. Chẳng hạn đối với nguyên tử Li (h.3 - 7) gồm 3 electron: 2 electron gần hạt nhân chiếm mức năng lượng 1S, còn electron hóa trị khi chưa bị kích thích chiếm mức năng lượng thấp nhất 2S.

Theo quy tắc lựa chọn thì electron hoá trị ở mức năng lượng cao nP ($l = 1$ và $n = 2, 3, 4, \dots$) chuyển về mức 2S ($l=0$); mức cao nS ($l=0$ và $n = 3, 4, 5, \dots$) hay mức nD ($l=2$ và $n = 3, 4, 5, \dots$) về mức 2P ($l=1$);...

Tóm lại trong phổ kim loại kiềm có các dãy sau đây (viết theo ký hiệu các mức năng lượng):

a) *Dãy chính*: Gồm các vạch tuân theo công thức:

$$h\nu = 2S - nP \text{ đối với Li ;}$$



Hình 3-7. a/ *Dãy chính* ; b/ *dãy phụ II* ; c/ *dãy phụ I* ; d/ *dãy cơ bản*.

$$h\nu = 3S - nP \text{ đối với Na ;}$$

b) *Dãy phụ II*: Gồm các vạch tuân theo công thức:

$$h\gamma = 2P - nS \text{ đối với Li ;}$$

$$h\gamma = 3P - nS \text{ đối với Na ;}$$

c) *Dãy phụ I*: Gồm các vạch tuân theo công thức:

$$h\gamma = 2P - nD ;$$

d) *Dãy cơ bản*: Gồm các vạch tuân theo công thức:

$$h\gamma = 3D - nF ;$$

Thực nghiệm đã tìm thấy các dãy này trước, về sau thực nghiệm xác nhận còn có dãy:

$$h\gamma = 3D - nP.$$

3-3. MÔMEN ĐỘNG LƯỢNG VÀ MÔMEN TỪ QUỸ ĐẠO. HIỆU ỨNG ZEEMANN THƯỜNG

1. Mômen động lượng quỹ đạo

Theo cơ học cổ điển, electron chuyển động xung quanh hạt nhân trên quỹ đạo xác định (tròn hoặc elip) nên có mômen động lượng \vec{L} . Nhưng theo cơ học lượng tử, vì electron chuyển động xung quanh hạt nhân không theo quỹ đạo xác định, do đó ở mỗi trạng thái mômen động lượng \vec{L} không có hướng xác định. Tuy nhiên, vector mômen động lượng \vec{L} lại có giá trị xác định và tính theo độ lớn của bình phương mômen động lượng $L^2 = l(l+1)\hbar^2$ (L^2 là giá trị riêng của toán tử \hat{L}^2). Từ đây, theo cơ học lượng tử, giá trị của mômen động lượng là:

$$L = \sqrt{l(l+1)}\hbar. \quad (3-28)$$

trong đó l - số lượng tử quỹ đạo ($l = 0, 1, 2, \dots, n-1$) và liên quan tới mômen động lượng.

Như vậy mômen động lượng nhận các giá trị gián đoạn (bị lượng tử hóa). Khi nguyên tử đứng yên thì mômen động lượng của electron cũng là của nguyên tử. Mômen này có được là do chuyển động của electron xung quanh hạt nhân tạo nên, nên gọi là mômen (cơ) quỹ đạo.

Trong cơ học lượng tử người ta còn chứng minh được rằng, hình chiếu của mômen động lượng \vec{L} trên trục z bất kỳ được bảo toàn và luôn được xác định theo biểu thức:

$$L_z = m\hbar, \quad (3-29)$$

trong đó m - số lượng tử từ từ: $0, +1, +2, \dots, +l$) và liên quan đến hình chiếu của mômen động lượng trên trục z . Như vậy hình chiếu của mômen động lượng cũng bị

lượng tử hóa.

Chú ý:

- Khi $l = 0$ thì $L^2 = 0$, điều đó có nghĩa là mômen cơ học của nguyên tử ở trạng thái cơ bản (trạng thái thấp nhất) bằng 0. Kết quả này đã được thực nghiệm xác minh. Theo lý thuyết cổ điển $\vec{L} = [\vec{r} \times \vec{p}] = 0$ chỉ khi hoặc vận tốc bằng 0 ($\vec{P} = 0$) hoặc chuyển động qua tâm lực. Những trường hợp đặc biệt này người ta không xét, nghĩa là trạng thái $l = 0$ không có sự tương tự cổ điển.

- So với kết quả đã nhận được của lý thuyết Bohr $L_B^2 = \hbar^2 n^2 \varphi$ ($n_\varphi = 1, 2, 3, \dots$) thì kết quả thu được trong lý thuyết lượng tử $L^2 = \hbar^2 l^2 + \hbar l$ có thêm số hạng bổ sung $\hbar^2 l$ (mômen quỹ đạo bổ sung). Bản chất của số hạng $\hbar^2 l$ cũng như bản chất của năng lượng không của dao động tử điều hòa, liên quan đến hệ thức bất định.

2. Mômen từ quỹ đạo

Chúng ta biết rằng electron mang điện tích $-e$, chuyển động quanh hạt nhân tạo nên một dòng điện kín (dòng điện nguyên tử). Dòng điện kín này sinh ra một mômen từ đặc trưng $\vec{\mu}$ mà ta gọi là mômen từ quỹ đạo.

Theo điện động lực học thì một dòng điện kín có cường độ I bao quanh một diện tích phẳng S có mômen từ xác định theo công thức (trong hệ SI)

$$\mu = I \cdot S$$

Vectơ mômen từ $\vec{\mu}$ vuông góc với mặt phẳng của dòng điện và hướng theo chiều tiến của cái đinh ốc quay thuận theo chiều dòng điện.

Cơ học cổ điển coi electron như một chất điểm chuyển động trên quỹ đạo tròn, bán kính r , với vận tốc v . Khi đó cường độ dòng điện I bằng tích của độ lớn điện tích e của electron và số lần electron đi qua một điểm trong một giây (tức là tần số vòng):

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

Diện tích bao quanh bởi dòng điện:

$$S = \pi r^2.$$

Vậy mômen từ có độ lớn là:

$$\mu = I \cdot S = \frac{evr}{2}, \quad (3-30)$$

và có hướng vuông góc với mặt phẳng quỹ đạo.

Mômen cơ học có độ lớn là:

$$L = m_e v r \quad (3-31)$$

(m_e là khối lượng electron) và cùng phương nhưng ngược chiều với $\vec{\mu}$.

Từ đây, ta suy ra vectơ mômen từ $\vec{\mu}$ liên hệ với vectơ mômen động lượng cơ \vec{L} theo tỷ lệ là:

$$\vec{\mu} = -\frac{e}{2m_e} \vec{L}. \quad (3-32)$$

Theo cơ học lượng tử, công thức (3-32) có thể được chứng minh một cách đầy đủ và chặt chẽ, song ở đây ta không thể hiện điều đó. Theo quan điểm lượng tử, vì vectơ \vec{L} không có hướng xác định, do đó mômen từ $\vec{\mu}$ cũng không có hướng xác định. Nhưng hình chiếu của mômen từ lên trục z bất kỳ có giá trị bằng:

$$\mu_z = -\frac{e}{2m_e} L_z. \quad (3-33)$$

Thay $L_z = nh$ vào (3-33) ta được:

$$\mu_z = -m \frac{e\hbar}{2m_e} = -m\mu_B, \quad (3-34)$$

Với $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 10^{-23} \text{ A.m}^2$ gọi là manhêton Bohr.

Công thức (3-34) cho biết, mômen từ quỹ đạo của electron chuyển động quanh hạt nhân có hình chiếu trên trục z bằng một số nguyên lần manhêton Bohr, nghĩa là bị lượng tử hóa (vì thế số nguyên m gọi là số lượng tử từ).

Hiện tượng lượng tử hóa mômen động lượng và mômen từ quỹ đạo đã được M. A. Stern (28.6.1807 - 30.1.1894) và Gerlach xác nhận bằng thí nghiệm về sự lệch của chùm tia nguyên tử khi đi qua từ trường không đồng nhất, cũng như trong hiệu ứng Zeemann được xét sau đây.

3. Hiệu ứng Zeemann

Hiệu ứng Zeemann là hiện tượng tách các mức năng lượng của nguyên tử, phân tử và tinh thể phát sáng đặt trong từ trường. Hiệu ứng này được tìm thấy (năm 1896) khi phát hiện sự tách các vạch quang phổ phát xạ. Ở đây cần phân biệt hai loại hiệu ứng Zeemann:

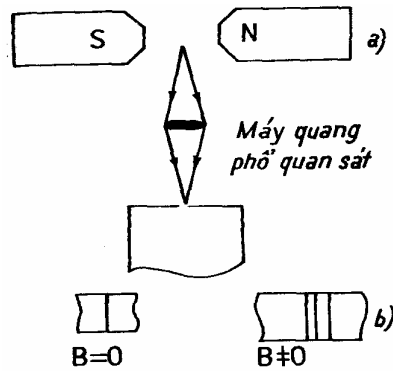
- Hiệu ứng Zeemann thường là hiện tượng tách các vạch quang phổ trong từ trường mạnh (hiện tượng này thường quan sát được đối với nguyên tử không có mômen spin).

- Hiệu ứng Zeemann dị thường là hiện tượng tách các vạch quang phổ trong từ trường yếu (hiện tượng này thường quan sát được đối với nguyên tử có mômen spin khác 0).

Để quan sát hiện tượng Zeemann thường ta đặt một notron hydro phát sáng vào trong một từ trường mạnh do một nam châm điện tạo ra (h.3-8a).

Dùng máy quang phổ quan sát các bức xạ phát ra theo phương vuông góc với

vector cảm ứng từ \vec{B} của từ trường thì thấy mỗi vạch quang phổ của nguyên tử hydro bị tách thành ba vạch sát nhau (h.3-8b).



Hình 3-8

Hiện tượng Zeemann được giải thích như sau: Vì electron có mômen từ $\vec{\mu}$ nên khi nguyên tử hydro đặt trong từ trường \vec{B} , từ trường tác dụng lên nguyên tử, do tương tác đó mà electron có thêm năng lượng phụ (bằng thế năng của hệ trong từ trường):

$$\Delta W = - (\vec{\mu} \cdot \vec{B}) .$$

Nếu ta chọn trục z hướng theo từ trường \vec{B} thì hình chiếu của $\vec{\mu}$ trên \vec{B} chính là, μ_z . Vậy:

$$\Delta W = - \mu_z B = m\mu_B B.$$

Như vậy, khi nguyên tử hydro đặt trong từ trường, năng lượng của electron không những phụ thuộc vào số lượng tử chính n mà còn phụ thuộc vào số lượng tử từ m và bằng:

$$W_{n,m}^2 = W_n + \Delta W = W_n + m\mu_B B,$$

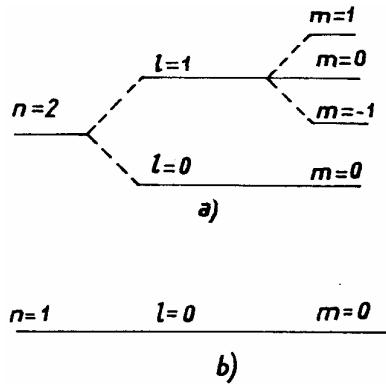
trong đó W_n - năng lượng của electron khi nguyên tử hydro không đặt trong từ trường.

Năng lượng W_n không phụ thuộc vào số lượng tử từ m: các trạng thái có cùng giá trị của số lượng tử n, nhưng có số lượng tử âm khác nhau thì có cùng một giá trị năng lượng, ta nói có sự suy biến theo số lượng tử m. Sự suy biến theo m là tính chất chung của mọi chuyển động trong trường xuyên tâm.

Khi đặt nguyên tử vào trong từ trường thì các trạng thái có cùng n nhưng khác m có năng lượng khác nhau, ta nói mất đi sự suy biến theo m. Nói cách khác, một mức năng lượng ứng với một giá trị đã cho của n khi chưa đặt trong từ trường sẽ bị tách thành nhiều mức (khi đặt trong từ trường), tùy theo số giá trị có thể có của m. Khi đó ta nói có sự tách mức năng lượng. Sự tách mức năng lượng gây nên hiện tượng tách vạch quang phổ. Những mức năng lượng bị tách ra thì cách đều nhau và khoảng cách năng lượng giữa hai mức lân cận nhau là:

$$\Delta W = \frac{e\hbar B}{2m_e} \quad (3-35)$$

Ví dụ: Xét mức năng lượng 2p, tức là $n=2, l=1$. Khi không có từ trường, mức này là chung cho các trạng thái có giá trị của số lượng tử từ $m = -1, 0, +1$. Phân tích bức xạ này trong máy phổ ta được một vạch quang phổ. Nhưng khi đặt nguyên tử trong từ trường thì mức 2p tách thành ba mức ứng với ba giá trị khác nhau của m (h.3-9a phần ứng với $l=1$); còn mức 1s (tức là mức năng lượng thấp nhất) không bị tách khi đặt trong từ trường, vì mức này chỉ ứng với một giá trị $m = 0$ (h.3-9b).



Hình 3-9

Như ta đã biết, khi electron chuyển từ trạng thái ứng với mức năng lượng W_2 sang trạng thái ứng với mức năng lượng W_1 thấp hơn thì nguyên tử sẽ phát ra bức xạ điện từ có tần số bằng:

$$\gamma' = \frac{W_2 - W_1}{h} = \frac{W_2 - W_1}{h} + \frac{(m_2 - m_1)\mu_B B}{h}$$

Nhưng $\frac{W_2 - W_1}{h} = \gamma$ là tần số của vạch quang phổ hydro khi nguyên tử hydro không đặt trong từ trường. Do đó tần số của vạch quang phổ bức xạ phát ra là:

$$\gamma' = \gamma + \frac{m_2 - m_1}{h} \mu_B B$$

Vì năng lượng của electron còn phụ thuộc vào số lượng tử từ m , nên khi electron chuyển trạng thái còn phải tuân theo quy tắc lựa chọn đối với m . Theo cơ học lượng tử, quy tắc lựa chọn đối với m là $\Delta m = 0, \pm 1$.

Từ đây ta thấy tần số γ' có thể có ba giá trị:

$$\gamma' = \begin{cases} \gamma - \frac{\mu_B}{h} B, \\ \gamma, \\ \gamma + \frac{\mu_B}{h} B. \end{cases}$$

Như vậy, một vạch quang phổ (khi không có từ trường) được tách thành ba vạch

(khi có từ trường), trong đó vạch chính giữa cùng với vạch cũ (quan sát được nhờ máy quang phổ). Khi tính toán được các mức năng lượng tách ra và biết quy luật chuyển trạng thái thì có thể suy ra được sự tách vạch quang phổ. Ngược lại quan sát được hiện tượng tách vạch quang phổ và căn cứ vào quy luật chuyển trạng thái thì ta có thể nhận biết được các mức năng lượng bị tách ra như thế nào.

Tóm lại, dưới tác dụng của một từ trường (ngoài) mỗi mức năng lượng sẽ tách thành $(2l + 1)$ mức con, cách đều nhau, với khoảng cách giữa hai mức tỷ lệ với B. Tác dụng của từ trường đã làm xuất hiện nhiều mức năng lượng và do đó phổ của nguyên tử sẽ có thêm các vạch phụ khi nguyên tử được đặt trong từ trường. Việc tách gián đoạn các vạch quang phổ là một minh chứng thực nghiệm chỉ rõ hiện tượng lượng tử hóa mômen động lượng quỹ đạo. Quả vậy, nếu t không bị lượng tử hóa, thì L_z sẽ có các giá trị bất kỳ (như trong mẫu Bohr) và các vạch quang phổ sẽ nhòe ra tạo thành một dự sáng liên tục. Suy đoán này trái với kết quả quan sát bằng thực nghiệm: các vạch quang phổ gián đoạn chứ không phải là liên tục. Điều đó chứng tỏ mômen động lượng quỹ đạo \vec{L} bị lượng tử hóa. Tuy nhiên quá trình phân tích ở trên không thể giải thích đầy đủ tất cả các vạch quang phổ quan sát được trong thí nghiệm của Zeemann. Bởi vì trong phổ có xuất hiện những vạch phụ, thuộc phạm vi của hiệu ứng Zeemann dị thường. Để giải thích hiệu ứng Zeemann chúng ta cần phải sử dụng khái niệm về spin của electron.

3-4. SPIN-MÔMEN RIÊNG VÀ MÔMEN TOÀN PHẦN CỦA ELECTRON. HIỆU ỨNG ZEEMANN DỊ THƯỜNG

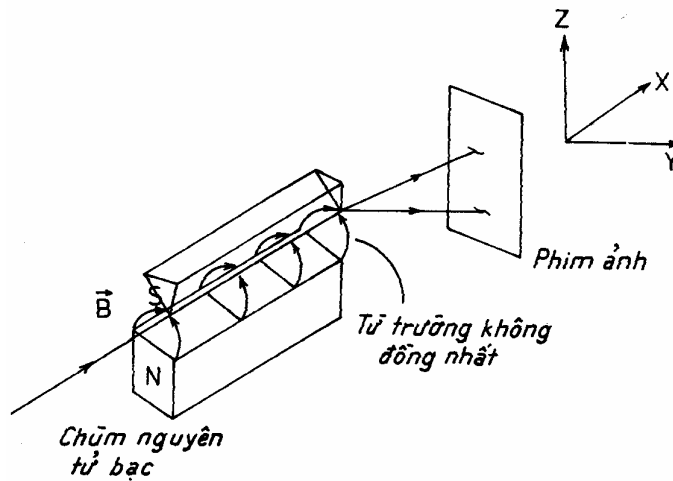
1. Các thực nghiệm chứng tỏ sự tồn tại spin của electron

a) *Thí nghiệm của M.A.Stern và Gerlach*: Cho một chùm nguyên tử bạc, với mômen động lượng quỹ đạo bằng không, đi qua một từ trường không đồng nhất (h.3-10). Từ trường không đồng nhất có tác dụng tạo ra một lực tác dụng lên các mômen từ có mặt trong chùm làm lệch hướng chúng.

Trong một từ trường đồng nhất, các mômen từ này chỉ chịu tác dụng của một ngẫu lực. Với từ trường không đồng nhất, mỗi mômen từ $\vec{\mu}_s$ còn chịu lực tác dụng của một lực làm lệch hướng F_z . Trong trường hợp ở hình 3-10, ta có:

$$F_z = \mu_s \cos\theta \frac{dB}{dZ}, \quad (3-36)$$

với θ là góc giữa $\vec{\mu}_s$ và \vec{B} , và $\frac{dB}{dZ}$ là gradien của từ trường không đồng nhất. Biểu thức (3-36) được thiết lập như sau:



Hình 3-10

Thế năng của một electron trong một từ trường là:

$$W_B = -\vec{\mu}_s \cdot \vec{B} = -\mu_{sx}B_x - \mu_{sy}B_y - \mu_{sz}B_z.$$

Trong trường hợp ở hình 3-10, $B_y \equiv 0$, còn B_x và B_z chỉ phụ thuộc vào x . ta có:

$$F_x = -\frac{\partial W_B}{\partial x} = \mu_{sx} \frac{\partial B_x}{\partial x} + \mu_{sz} \frac{\partial B_z}{\partial x};$$

$$F_y = -\frac{\partial W_B}{\partial y} = 0;$$

$$F_z = -\frac{\partial W_B}{\partial z} = \mu_{sx} \frac{\partial B_x}{\partial z} + \mu_{sz} \frac{\partial B_z}{\partial z}.$$

Nhưng dọc theo trục của chùm $\frac{\partial B_z}{\partial x} = 0$ (do đối xứng) và $\frac{\partial B_x}{\partial z} = 0$

(do phản đối xứng); mặt khác $\frac{\partial B_x}{\partial x}$ bé, do vậy:

$$F_x \approx 0; F_y = 0; F_z = \mu_{sz} \frac{\partial B_z}{\partial z} = \mu_s \cos\theta \frac{\partial B}{\partial z}.$$

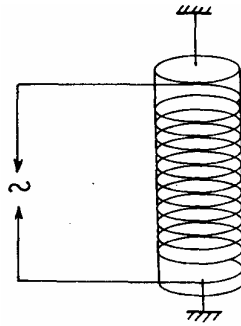
Các kết quả nhận được từ thí nghiệm của MA.Stern và Gerlach: chùm nguyên tử đi qua từ trường không đồng nhất bị tách làm hai phần (đập lên phim ảnh) chứa cùng một số nguyên tử nằm phía trên và phía dưới vết của chùm khi không có từ trường. Điều đó chứng tỏ, khi mômen động lượng quỹ đạo và do đó mômen từ tổng cộng của các nguyên tử bằng 0, thì việc làm lệch phương của chùm nguyên tử là do tác dụng của từ trường lên một loại mômen từ $\overline{\mu_s}$ nào đó khác.

b) Nhờ các quang phổ kế với độ phân giải cao, người ta thấy rằng nhiều vạch trước đây tưởng là vạch đơn, nhưng thực tế mỗi vạch đó gồm nhiều vạch với các bước sóng cách nhau cỡ một vài Å ($1 \text{ Å} = 10^{-10} \text{ m}$), ví dụ vạch vàng của nguyên tử Na được cấu tạo bởi hai vạch sát nhau (gọi là vạch kép) có bước sóng 5890.10^{-10} m và

5896.10^{-10} m. Quan sát thực nghiệm cũng cho thấy cấu trúc của các vạch quang phổ đối với các nguyên tử khác còn phức tạp hơn. Cấu trúc như thế được gọi là cấu trúc bội của phổ.

c) Thí nghiệm của A.Einstein và Đogatz nghiên cứu tỷ số $\frac{\vec{\mu}}{L}$ qua sự quay của một thanh sắt từ, treo bằng một sợi dây thạch anh khi bị từ hóa nhờ dòng điện xoay chiều bao quanh nó (h.3-11).

Khi dòng điện xoay chiều chạy vào cuộn dây, thanh sắt từ bị từ hóa. Nếu thay đổi dòng điện thì mômen từ cũng thay đổi, kéo theo sự thay đổi của mômen động lượng làm dây treo quay xoắn lại. Dựa vào độ xoắn đó, ta có thể xác định được và kiểm định được tỷ số $\frac{\vec{\mu}}{L}$. Kết quả thực nghiệm cho biết:



Hình 3-11

- Tỷ số này cũng âm như lý thuyết chỉ ra (vì electron mang điện tích âm). Điều này chứng tỏ sự từ hóa của sắt từ là do sự chuyển động của các electron gây ra.

- Nhưng theo thực nghiệm thì tỷ số $\frac{\vec{\mu}}{L} = -\frac{e}{m_e}$ chứ không bằng $-\frac{e}{2m_e}$ như lý thuyết đưa ra. Như vậy kết quả lý thuyết chỉ bằng nửa so với kết quả thực nghiệm.

Các kết quả do thực nghiệm có được ở trên chỉ được giải thích một cách đầy đủ khi thừa nhận giả thuyết rằng: electron không chỉ chuyển động xung quanh hạt nhân nguyên tử, mà còn tự nó có chuyển động riêng ứng với vận động nội tại của chính electron. Chuyển động riêng này được đặc trưng bởi đại lượng mômen động lượng riêng, còn gọi là mômen spin \vec{S} . Thực chất của việc chùm nguyên tử bị lệch phương trong thí nghiệm Stern-Gerlach, cũng như sự tách của các vạch quang phổ của nguyên tử khi đặt trong từ trường chính là việc tồn tại một mômen từ riêng $\vec{\mu}_s$ gắn liền với mômen spin \vec{S} của electron. Tương tự như mômen động lượng quỹ đạo, mômen spin và mômen từ riêng của electron cũng bị lượng tử hóa cả về độ lớn và về hướng. Hai vạch cách đều nhau mà M.A.Steru và Gerlach quan sát được chứng tỏ rằng mômen spin chỉ có thể định hướng theo hai cách khác nhau dưới tác dụng của từ trường.

Chúng ta biết rằng, với một chuyển động quỹ đạo đặc trưng bởi số lượng tử quỹ đạo l thì hình chiếu của mômen động lượng quỹ đạo lên hướng của từ trường ($L_z = m\hbar$); số lượng tử từ $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$ chỉ có thể có $(2l+1)$ giá trị gián đoạn khác nhau. Bằng cách tương tự, nếu gọi s là số lượng tử spin (gọi tắt là *spin*) thì sẽ có $2 = (2s+1)$ cách định hướng có thể của \vec{S} ; từ đó s chỉ có một giá trị duy nhất là $s = \frac{1}{2}$. Tương tự như mômen động lượng quỹ đạo, độ lớn của mômen spin cũng được xác định theo công thức (ở đây spin $s = \frac{1}{2}$ thay cho số lượng tử quỹ đạo l):

$$S = \sqrt{s(s+1)} \cdot \hbar = \sqrt{\frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right)} \cdot \hbar = \frac{\sqrt{3}}{2} \hbar . \quad (3-37)$$

Hình chiếu của mômen spin \vec{S} lên trục z có giá trị:

$$S_z = m_s \hbar ; m_s = s, s-1 = +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \quad (3-38)$$

$$S_z = \pm \frac{1}{2} \hbar , \quad - \quad (3-39)$$

với $m_s = \pm \frac{1}{2}$ gọi là *số lượng tử hình chiếu spin*.

Tương ứng với mômen spin \vec{S} , electron có mômen riêng $\vec{\mu}_s$ mà hình chiếu của nó trên trục z có giá trị:

$$\mu_{sz} = \mp \mu_B = \mp \frac{e\hbar}{2m_e} . \quad (3-40)$$

Cơ học lượng tử cũng đã chỉ ra rằng giữa \vec{S} và $\vec{\mu}_s$ tỷ lệ với nhau và theo (3-39), (3-40) thì giữa chúng có biểu thức liên hệ:

$$\vec{\mu}_s = -\frac{e}{m_e} \vec{S} . \quad (3-41)$$

Kết quả này hoàn toàn phù hợp với thực nghiệm.

Giá trị đặc biệt $\frac{1}{2}$ của spin đặc trưng cho mômen động lượng riêng của electron và người ta nói rằng spin của electron bằng $\frac{1}{2}$. Spin là một khái niệm thuần túy lượng tử và có thể coi spin là một thông số xác định bậc tự do nội tại của electron, spin cũng là một đại lượng đặc trưng cho electron như điện tích và khối lượng vốn của nó. Spin bằng $\frac{1}{2}$ tức là hạt có thể ở hai trạng thái nội tại khác nhau, ứng với hai giá trị khác nhau của hình chiếu spin m_s là $-\frac{1}{2}$ và $+\frac{1}{2}$.

Các hạt cơ bản cũng có spin và spin luôn là hằng số đối với mỗi hạt. Dựa vào spin người ta chia các hạt cơ bản làm hai loại: các hạt có spin nguyên gọi là các bonzon, các hạt có spin bán nguyên gọi là các fermion.

2. Mômen toàn phần của electron

Trong cơ học cổ điển, mômen động lượng tổng cộng là một đại lượng quan trọng vì đạo hàm của nó theo thời gian cho biết mômen lực tổng cộng tác dụng lên hệ. Tương tự, trong cơ học lượng tử do có mômen spin, nên mômen động lượng toàn phần \vec{J} của electron bằng tổng mômen động lượng quỹ đạo \vec{L} và mômen spin \vec{S} của nó: $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$, cũng đóng vai trò quan trọng. Độ lớn của \vec{J} bị lượng tử hóa theo công thức

$$J = \sqrt{j(j+1)} \hbar, \quad (3-42)$$

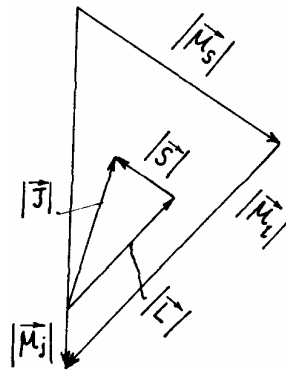
trong đó J - số lượng tử mômen động lượng toàn phần và nhận các giá trị:

$$j = \left| l \pm \frac{1}{2} \right|. \quad (3-43)$$

Cũng như trong trường hợp mômen động lượng quỹ đạo và mômen spin, thành phần của \vec{J} trên trục z cũng bị lượng tử hóa: $J_z = m_j \hbar$, (3-44) với $m_j = -j, -j+1, \dots, j$.

Theo (3-43) thì ứng với một giá ta đã cho của l có hai giá trị riêng của j (trừ trường hợp $l=0$), tức là có hai cách hợp mômen động lượng riêng với mômen động lượng quỹ đạo.

Mômen từ toàn phần của electron $\vec{\mu}_j$ cũng bằng tổng của mômen từ quỹ đạo và mômen từ riêng:



Hình 3-12

$$\vec{\mu}_j = \vec{\mu}_l + \vec{\mu}_s, \quad (3-45)$$

trong đó $\vec{\mu}_l = \vec{\mu} = - \left(\frac{e}{2m_e} \right) \vec{L}$ (theo (3-32) ;

$$\vec{\mu}_s = - \frac{e}{m_e} \vec{S} = - 2 \left(\frac{e}{2m_e} \right) \vec{S} \text{ (theo (3-41)).}$$

Hình 3- 12 biểu diễn tổng quát các vector:

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \text{ và } \vec{\mu}_j = \vec{\mu}_l + \vec{\mu}_s.$$

$$\text{Vi } \frac{|\vec{\mu}_s|}{|\vec{S}|} = 2 \frac{|\vec{\mu}_l|}{|\vec{L}|} \text{ nên}$$

tam giác tạo bởi $\vec{J}, \vec{L}, \vec{S}$ và tam giác tạo bởi $\vec{\mu}_j, \vec{\mu}_l, \vec{\mu}_s$ không đồng dạng, do đó $\vec{\mu}_j$ và \vec{J} không song song với nhau.

3. Hiệu ứng Zeemann dị thường

Theo mẫu bán cổ điển, hiệu ứng Zeemann gắn liền với chuyển động tuế sai của mômen từ $\vec{\mu}$ đối với từ trường ngoài. Ta tính được tần số góc của chuyển động tuế sai này khi xét chuyển động tuế sai của mômen động lượng quỹ đạo \vec{L} của electron trong từ trường \vec{B} :

Một mômen từ đặt trong từ trường sẽ chịu tác dụng của mômen lực:

$$\vec{M} = \vec{\mu} \wedge \vec{B} = -\frac{e}{2m_e} \vec{L} \wedge \vec{B}$$

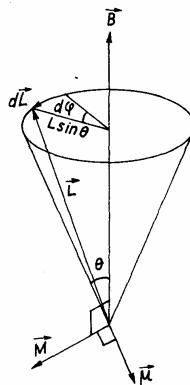
Dưới tác dụng của mômen lực \vec{M} , mômen động lượng sẽ biến thiên một lượng do xác định từ biểu thức:

$$\vec{M} = \frac{d\vec{L}}{dt} = -\frac{e}{2m_e} \vec{L} \wedge \vec{B}.$$

Độ biến thiên $d\vec{L}$ của \vec{L} vuông góc với cả \vec{L} và \vec{B} (Xem hình 3 - 13), điều đó dẫn đến chuyển động tuế sai của \vec{L} đối với hướng từ trường \vec{B} . Theo hình 3 13, ta có:

$$d\varphi = \frac{|d\vec{L}|}{L \sin\theta}$$

Từ đây ta tính được tần số góc của chuyển động tuế sai này:



Hình 3-13

$$\omega_L = \frac{d\varphi}{dt} = \frac{\left| \frac{d\vec{L}}{dt} \right|}{L \sin\theta} = \frac{\frac{eL}{2m_e} B \sin\theta}{L \sin\theta} = \frac{e}{2m_e} B .$$

Chuyển động này gọi là chuyển động tuế sai Larmor và ω_L bằng độ biến thiên của tần số góc quan sát được trong hiệu ứng Zeemann thường. Như vậy từ trường càng mạnh thì chuyển động tuế sai càng nhanh và độ tách giữa ba vạch xuất phát từ một vạch trong từ trường bằng không sẽ càng lớn.

Khi tương tác liên kết spin - quỹ đạo theo mẫu liên kết (\vec{L}, \vec{S}) mạnh so với các tương tác của một trong các vector đó và của \vec{B} (nghĩa là tương tác liên kết spin - quỹ đạo mạnh hơn hẳn tác dụng của từ trường ngoài khi từ trường ngoài yếu) thì \vec{S} và do đó \vec{L} sẽ thực hiện một chuyển động tuế sai nhanh đối với \vec{J} , điều này sinh ra một chuyển động tuế sai nhanh của $\vec{\mu}_j$ quanh \vec{J} , lúc ấy chuyển động tuế sai của hệ đối với \vec{B} sẽ chậm. Hiệu ứng Zeemann dị thường xuất hiện như vậy và cường độ của hiệu ứng đó phụ thuộc vào hình chiếu của vector mômen từ tổng cộng $\vec{\mu}_j$ trên trục của \vec{J} :

Hình chiếu của $\vec{\mu}_j$ trên trục của \vec{J} ký hiệu là $\vec{\mu}_j^*$. Ta có

$$\mu_j^* = \left(\frac{-e\hbar}{2m_e} \right) \sqrt{j(j+1)} \cdot g,$$

trong đó

$$g = 1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)}$$

được gọi là thừa số Landé.

Khi đó độ tách năng lượng có giá trị:

$$\Delta W = -\vec{\mu}_j^* \cdot \vec{B} = \frac{e}{2m_e} g B m_j \hbar = \omega_L \hbar m_j g. \quad (3-46)$$

Vì m_j : $-j, -j+1, \dots, j-1, j$ nên trong một từ trường \vec{B} cho trước, mỗi mức năng lượng bị tách thành $(2j+1)$ mức con, độ tách ứng với thừa số g ứng với mức đó. Như vậy trong hiệu ứng Zeemann dị thường số vạch quang phổ quan sát được nhiều hơn ba vạch, chứ thông phải là ba vạch như trường hợp hiệu ứng Zeemann thường. Sự tách mức năng lượng được xác định theo công thức (3-46) được gọi là hiệu ứng Zeemann dị thường.

Riêng tương tác liên kết spin - quỹ đạo \vec{L}, \vec{S} thể hiện như một hiệu ứng Zeemann nội có tác dụng phân tách mỗi mức năng lượng ứng với $\vec{L} \neq 0$ thành hai mức con, tương ứng với hai giá trị cho phép của S_z , theo công thức

$$S_z = m_s \hbar = \pm \frac{1}{2} \hbar \quad \left(m_s = s, s-1 = +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right) .$$

Nếu bỏ qua tương tác spin - quỹ đạo $\vec{L}\vec{S}$ trong từ trường mạnh, thì độ biến thiên năng lượng của hệ hoàn toàn được xác định bởi tương tác của mômen từ tổng hợp $\vec{\mu}_j$

$$[\vec{\mu}_j = \vec{\mu}_l + \vec{\mu}_s = -\frac{e}{2m_e} \vec{L} - \frac{e}{m_e} \vec{S} = -\frac{e}{2m_e} (\vec{L} + 2\vec{S})]$$

với từ trường ngoài \vec{V} và

$$\begin{aligned} dW &= -\vec{\mu}_j \cdot \vec{B} = -\mu_{jz} B = \frac{e}{2m_e} (L_z + 2S_z) B = \\ &= \frac{e\hbar}{2m_e} (m + 2m_s) B. \end{aligned}$$

Nếu không kể đến spin của hạt thì thừa số Landé $g=1$. Khi đó khoảng cách giữa hai mức tính ra là $\Delta W = \frac{e\hbar}{2m_e} B$ [như (3-35)] và ta có hiệu ứng Zeemann thường.

3-5. TRẠNG THÁI CỦA ELECTRON TRONG NGUYÊN TỬ. CẤU TẠO BỘI CỦA VẠCH PHỔ

1. Trạng thái và năng lượng của electron

a) *Trạng thái của electron*: Do vận động nội tại mà electron có mômen spin, nên để xác định trạng thái của electron, ngoài ba số lượng tử (n, l, m) còn phải đưa vào số lượng tử m_s để đặc trưng cho sự định hướng của mômen spin. Như vậy khi tính đến spin, trạng thái của electron được mô tả bởi bốn số lượng tử (n, l, m, m_s) gắn liền tương ứng với năng lượng, với mômen động lượng quỹ đạo, với thành phần trên trục z của mômen động lượng quỹ đạo và thành phần trên trục z của mômen spin của nó. Khi bốn số lượng tử đó đã biết, người ta nói trạng thái của electron được hoàn toàn xác định. Hàm sóng mô tả trạng thái của hạt khi tính đến spin không chỉ phụ thuộc vào ba thành phần không gian của nó, mà còn phụ thuộc vào "tọa độ" thứ tư đặc trưng cho trạng thái nội tại của hạt. "Tọa độ" thứ tư người ta thường chọn hình chiếu mômen spin trên trục z. Hàm sóng khi ấy là hàm của các tọa độ không gian và "tọa độ spin" $\Psi(\vec{r}, S_z, t)$. Ở đây, khác với tọa độ không gian \vec{r} nhận giá trị liên tục, còn "tọa độ spin" S_z chỉ nhận các giá trị rời rạc. Đối với electron $S_z = \pm \frac{1}{2} \hbar$.

b) *Năng lượng của electron*: Ta biết rằng ngoài tương tác Culong giữa electron với hạt nhân và giữa các electron, còn có tương tác giữa mômen động lượng quỹ đạo với mômen spin của các electron và tương tác giữa các mômen spin của các electron với nhau. Mặt khác, electron có mômen từ riêng nên còn có sự tương tác giữa mômen từ riêng và mômen từ quỹ đạo, và giữa các mômen từ riêng của các electron trong nguyên tử. Như vậy, khi tính đến spin năng lượng của electron có thêm phần năng lượng phụ. Phần năng lượng phụ này hoàn toàn phụ thuộc vào sự định hướng của mômen spin và phép tính trong cơ học lượng tử, chứng tỏ nó phụ thuộc vào số lượng

từ j . Kết quả, năng lượng toàn phần của electron trong nguyên tử phụ thuộc vào ba số lượng tử n, l và j .

2. Cấu tạo tế vi của mức năng lượng

Với một giá trị xác định của mỗi mức năng lượng (với một giá trị của số lượng tử chính n) ứng với một giá trị của số lượng tử quỹ đạo l mỗi mức năng lượng đó lại tách ra thành hai mức: một mức ứng với $j = l + \frac{1}{2}$ cao hơn mức ứng với $j = l - \frac{1}{2}$. Hai mức này rất gần nhau. Cấu trúc mức năng lượng như vậy gọi là cấu trúc tế vi của mức năng lượng.

Trong vật lý nguyên tử, mức năng lượng của electron thường được ký hiệu bằng ${}^2_n X_j$ với:

số lượng tử chính n viết bằng số $n = 1, 2, 3, \dots$

X viết bằng chữ in hoa:

$X = S, P, D, \dots$ tương ứng với $l = 0, 1, 2, \dots$

$$j = \left| l \pm \frac{1}{2} \right|$$

và chỉ số 2 ở phần trên bên trái X chỉ cấu tạo bội kép của mức năng lượng

Ngoài ra trạng thái của electron hóa trị cũng thường được ký hiệu bằng $n x_j$ (n viết bằng số, x viết bằng chữ thường). Sau đây là bảng các trạng thái và mức năng lượng có thể có của electron hóa trị trong nguyên tử hydro và kim loại kiềm (bảng 3-3).

Bảng 3 3

n	l	J	Trạng thái của electron hoá trị	Mức năng lượng	
1	0	$\pm 1/2$	$1s_{\pm 1/2}$	$1^2S_{1/2}$	
2	0	$\pm 1/2$	$2s_{\pm 1/2}$	$2^2S_{1/2}$	
		$\left\{ \begin{array}{l} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 2 \end{array} \right.$	$2p_{1/2}$	$2^2P_{1/2}$	
			$2p_{3/2}$	$2^2P_{3/2}$	
3	0	$\pm 1/2$	$3s_{\pm 1/2}$	$3^2S_{1/2}$	
		1	$1/2$	$3p_{1/2}$	$3^2P_{1/2}$
			$3/2$	$3p_{3/2}$	$3^2P_{3/2}$
	2	$3/2$	$3d_{3/2}$	$3^2D_{3/2}$	
		5/2	$3p_{5/2}$	$3^2D_{5/2}$	

Ta nhận thấy đối với các nguyên tử chỉ có một electron hóa trị (nguyên tử hydro

và nguyên tử kim loại kiềm) các mức năng lượng có cấu tạo kép. Riêng mức năng lượng $S(l=0)$ không có cấu tạo kép. Nhưng trên một mức S có hai trạng thái electron khác nhau về sự định hướng của mômen spin.

3. Cấu tạo bội của vạch quang phổ

Từ cấu tạo tế vi của mức năng lượng ta có thể giải thích được cấu tạo bội của vạch quang phổ.

Khi kể đến spin của electron thì năng lượng của electron còn phụ thuộc vào số lượng tử j , nên khi electron chuyển từ mức năng lượng cao (ứng với n lớn) về mức năng lượng thấp hơn (ứng với n' nhỏ hơn), ngoài tuân theo quy tắc lựa chọn đối với số lượng tử $l(\Delta l = \pm 1)$ electron còn phải tuân theo quy tắc lựa chọn đối với j . Theo cơ học lượng tử thì quy tắc lựa chọn đối với j là:

$$\Delta j = 0, \pm 1. \quad (3-47)$$

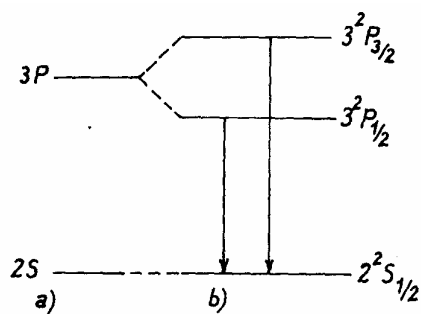
Chính điều này giúp ta giải thích cấu tạo bội của vạch phổ.

Ví dụ: Giải thích cấu tạo bội của vạch quang phổ đối với kim loại kiềm, chẳng hạn đối với Li: xét hai mức $2S$ và $3P$. -

Khi chưa tính đến spin, ta có một vạch đơn ứng với tần số γ (xem hình 3-14a):

$$h\gamma = 2S - 3P.$$

Khi tính đến spin ta có vạch kép (h.3-14b):



Hình 3-14. a/ Vạch quang phổ khi chưa tính đến spin ; b/ vạch kép khi tính đến spin.

$$h\gamma_1 = 2^2S_{1/2} - 3^2P_{1/2} ; (\Delta l = -1, \Delta j = 0)$$

$$h\gamma_2 = 2^2S_{1/2} - 3^2P_{3/2}. (\Delta l = -1, \Delta j = -1).$$

Hoặc xét vạch đơn khi chưa tính đến spin:

$$h\gamma = 2P - 3D.$$

Khi tính đến spin ta có ba vạch sát nhau gọi là vạch bội ba (xem hình 3-15):

$$h\gamma_1 = 2^2P_{1/2} - 3^2D_{5/2}$$

$$(\Delta l = -1, \Delta j = -1)$$

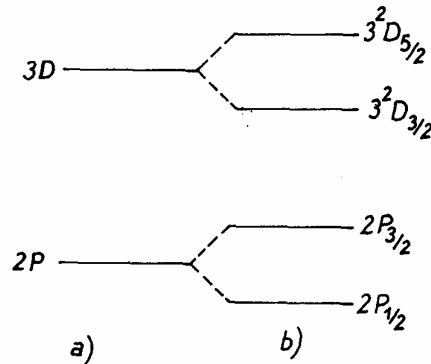
$$H\gamma_2 = 2^2P_{3/2} - 3^2D_{3/2}$$

$$(\Delta l = -1, \Delta j = 0)$$

$$H\gamma_3 = 2^2P_{3/2} - 3^2D_{5/2}$$

$$(\Delta l = -1, \Delta j = -1)$$

Thực nghiệm phân tích phổ đã chứng tỏ rằng, các phép chuyển dời là cho phép (thỏa mãn các quy tắc lựa chọn) tương ứng với các vạch thực tế quan sát được còn các phép chuyển dời bị cấm thực tế không quan sát được.



Hình 3-15. a/ Vạch quang phổ khi chưa tính đến spin ; b/ vạch bội ba khi tính đến spin.

3-6. HỆ HẠT ĐỒNG NHẤT. NGUYÊN LÝ LOẠI TRỪ PAOLI

I. Hệ hạt đồng nhất

1. Khái niệm về các hạt đồng nhất

Các hạt đồng nhất là các hạt giống hệt nhau về mọi đặc trưng cho hạt: như điện tích, khối lượng, spin, mômen từ,... sao cho trong những điều kiện như nhau thì các hạt ấy có các biểu hiện như nhau. Khái niệm đó đặc trưng cho chính các vi hạt cùng loại.

Trong cơ học lượng tử ta thường gặp hệ các hạt đồng nhất, ví dụ như hệ hạt electron, hệ hạt photon, hệ hạt proton, ... Vấn đề đặt ra là, vì các hạt giống hệt nhau nên làm thế nào để phân biệt chúng. Trong vật lý cổ điển, để phân tích các hạt trong một hệ hạt đồng nhất, người ta phân biệt các hạt theo các trạng thái của chúng, nghĩa là có thể đánh dấu từng hạt tại một thời điểm ban đầu nào đó. Về nguyên tắc, sau đó cũng có thể theo dõi quỹ đạo của từng vi hạt (vì ta biết được đồng thời tọa độ và vận tốc) và do đó chỉ rõ hạt nào ở đâu, như vậy có thể phân biệt được hạt đồng nhất này so với hạt đồng nhất kia.

Cơ học lượng tử cho rằng, không thể phân biệt được các hạt trong một hệ hạt đồng nhất. Vì theo nguyên lý bất định, ta không thể xác định thật chính xác đồng thời tọa độ và vận tốc của hạt, hơn nữa khái niệm quỹ đạo đối với mỗi hạt không có ý

nghĩa, cho nên về nguyên tắc, dù có biết vị trí của mỗi hạt tại thời điểm ban đầu, thì ở thời điểm sau đó cũng không thể biết hạt nào sẽ ở một vị trí đã cho của không gian. Mà ta chỉ có thể biết mật độ xác suất để ở vị trí đã cho có hạt, nhưng không biết đích thực hạt nào ở đó cả. Do là nội dung của nguyên lý không phân biệt được các hạt đồng nhất. Trong hệ các hạt đồng nhất chỉ tồn tại các trạng thái nào mà chúng không thay đổi khi hoán vị hai hạt bất kỳ trong hệ.

2. Tính chất của hệ các hạt đồng nhất

Hệ hạt đồng nhất có một số tính chất tổng quát sau đây:

a) Khi hoán vị các hạt trong một hệ hạt đồng nhất thì trạng thái của hệ không thay đổi.

Bây giờ chúng ta xét hàm sóng của hệ các hạt đồng nhất. Để đơn giản, trước hết ta xét một hệ có hai hạt đồng nhất. Trạng thái của mỗi hạt được đặc trưng bởi bán kính $\vec{r}(x,y,z)$, ba số lượng tử n,l,m (ký hiệu tắt là n') và hình chiếu spin s_z của hạt (ký hiệu tắt là s). Hàm sóng mô tả trạng thái của hệ hai hạt có dạng:

$$\Psi(n'_1, s_1, \vec{r}_1 ; n'_2, s_2, \vec{r}_2),$$

trong đó chỉ số 1 ứng với hạt thứ nhất, chỉ số 2 ứng với hạt thứ hai.

Nếu hoán vị vị trí hai hạt hàm sóng của hệ sẽ là $\Psi(n'_1, s_1, \vec{r}_2 ; n'_2, s_2, \vec{r}_1)$. Do trạng thái của hệ không thay đổi khi hoán vị các hạt, nghĩa là trạng thái mới có không phân biệt được so với trạng thái trước đó nên hàm sóng mô tả trạng thái mỗi hạt chỉ có thể khác nhau một thừa số λ tức là:

$$\Psi(n'_1, s_1, \vec{r}_1 ; n'_2, s_2, \vec{r}_2) = \lambda(n'_1, s_1, \vec{r}_2 ; n'_2, s_2, \vec{r}_1).$$

Vì khi hoán vị hệ không thay đổi, nên xác suất tìm hệ cũng không thay đổi, nghĩa là:

$$|\Psi(n'_1, s_1, \vec{r}_1 ; n'_2, s_2, \vec{r}_2)|^2 = |\Psi(n'_1, s_1, \vec{r}_2 ; n'_2, s_2, \vec{r}_1)|^2 ;$$

$$\lambda^2 |\Psi(n'_1, s_1, \vec{r}_2 ; n'_2, s_2, \vec{r}_1)|^2 = |\Psi(n'_1, s_1, \vec{r}_2 ; n'_2, s_2, \vec{r}_1)|^2$$

Suy ra

$$\lambda^2 = 1 \text{ và } \lambda = \pm 1.$$

Vậy ứng với hai giá trị của λ có thể có hai khả năng:

Với $\lambda = +1$

$$\Psi(n'_1, s_1, \vec{r}_1 ; n'_2, s_2, \vec{r}_2) = \Psi(n'_1, s_1, \vec{r}_2 ; n'_2, s_2, \vec{r}_1) \quad (3-48)$$

thì hàm sóng không đổi dấu khi hoán vị hai hạt (1 \leftrightarrow 2) và gọi là hàm sóng đối xứng.

Với $\lambda = -1$

$$\Psi(n'_1, s_1, \vec{r}_1; n'_2, s_2, \vec{r}_2) = -\Psi(n'_1, s_1, \vec{r}_2; n'_2, s_2, \vec{r}_1) \quad (3-49)$$

thì hàm sóng đổi dấu khi hoán vị hai hạt ($1 \leftrightarrow 2$) và gọi là hàm sóng phản đối xứng.

Như vậy, hàm sóng của một hệ hạt đồng nhất hoặc là hàm đối xứng, hoặc là hàm phản đối xứng khi hoán vị hai hạt. Suy rộng kết quả này cho một hệ nhiều hạt đồng nhất, ta cũng có kết quả tương tự.

b) Tính chất *đối xứng* hoặc phản đối xứng của hàm sóng phụ thuộc vào loại hạt: những hạt mô tả bởi hàm sóng đối xứng là các hạt có spin nguyên ($s = 0, 1, \dots$), những hạt này gọi là bozon (chúng tuân theo thống kê Bose-Einstein), ví dụ như hệ hạt photon, meson π ... Các hạt bozon không tuân theo nguyên lý Paoli; còn các hạt mô tả bởi hàm sóng phản đối xứng là các hạt có spin bán nguyên ($s = 1/2, 3/2, \dots$) và gọi là fermion (chúng tuân theo thống kê Fermi⁽¹⁾ - Dirac⁽²⁾, ví dụ như hệ hạt electron, proton, ... các fermion tuân theo nguyên lý Paoli.

c) Đối với một hệ, không bao giờ xảy ra sự chuyển từ trạng thái được mô tả bởi hàm sóng đối xứng sang trạng thái được mô tả bởi hàm sóng phản đối xứng và ngược lại, nghĩa là sự chuyển giữa các trạng thái của hai hệ không bao giờ xảy ra.

II. Nguyên lý loại trừ Paoli

Trên cơ sở phân tích các số liệu thực nghiệm về quang phổ đối với trường hợp nguyên tử nhiều electron, Paoli (năm 1924) đưa ra một nguyên lý quan trọng gọi là nguyên lý Paoli (nguyên lý loại trừ Paoli) với nội dung như sau. Hai electron không thể chiếm cùng một trạng thái, nói cách khác, ở mỗi trạng thái lượng tử xác định bởi bốn số lượng tử n, l, m, m_s chỉ có thể có tối đa một electron.

Dựa vào nguyên lý loại trừ Paoli ta tìm được mối liên quan giữa các kết quả thực nghiệm và cấu trúc nguyên tử, giải thích được bảng tuần hoàn của các nguyên tố.

3-7. KHÁI NIỆM VỀ HỆ THỐNG TUẦN HOÀN MENDELEEV

Trước khi cơ học lượng tử hình thành, Mendeleev đã hệ thống hoá các nguyên tố hóa học thành một bảng phân hạng tuần hoàn (vào năm 1869). Trong bảng này các nguyên tố được sắp xếp theo thứ tự nguyên tử lượng tăng (ngày nay theo thứ tự nguyên tử số tăng) và từ đó rút ra được tính chất lý học và hóa học cơ bản của chúng lặp lại một cách tuần hoàn.

Để có thể giải thích được quy luật phân bố của các electron trong bảng tuần hoàn Mendeleev, người ta dựa trên cơ sở nguyên lý loại trừ Paoli kết hợp với mẫu vỏ cấu trúc về nguyên tử. Chúng ta biết rằng, khi chưa để ý đến spin của electron với mỗi giá

1. Enrico Fermi (1901 - 1954) người Italia.

2. P.A.M.Dirac (8.8.1902 - 1984) người Anh (NBT).

trị của n cho trước thì có n giá trị của l , mỗi giá trị của l lại có $(2l+1)$ giá trị của m . Khi đề ý đến spin thì mỗi giá trị của l lại có hai giá trị của m_s (do hai khả năng định hướng của mômen spin) là $m_s = \frac{1}{2}$ và $m_s = -\frac{1}{2}$, do đó khó phân loại theo spin nữa thì mỗi giá trị của l có $2(2l+1)$ trạng thái lượng tử. Như vậy, với mỗi giá trị của n ta có thể có

$$\sum_{l=0}^{n-1} 2(2l+1) = 2n^2$$

trạng thái lượng tử. Mà theo nguyên lý loại trừ Paoli thì chỉ có thể có tối đa một electron ở mỗi trạng thái lượng tử được xác định bởi bốn số lượng tử n, l, m, m_s , nên với mỗi giá trị của n ta có thể có tối đa $2n^2$ electron.

Khi số lượng tử n của các electron giống nhau, người ta nói chúng ở trên cùng một lớp (vỏ).

Tùy theo số lượng tử n mà electron được phân bố trên các lớp khác nhau bao quanh hạt nhân:

Giá trị của n :	1	2	3	4 ...
Lớp:	K	L	M	N ...
Mỗi lớp có số electron tối đa:	2	8	18	32 ...

Đồng thời sự sắp xếp các electron tối đa trên từng lớp còn phải căn cứ vào tính chất là các electron bao giờ cũng có xu hướng chiếm trạng thái có mức năng lượng thấp nhất (n nhỏ nhất) rồi mới xếp vào trạng thái có mức năng lượng cao hơn. Vì vậy các electron được phân bố trong nguyên tử như sau:

Nguyên tử H có 1 electron ở lớp K,

Nguyên tử He có đủ 2 electron ở lớp K,

Nguyên tử Li có đủ 2 electron ở lớp K và 1 electron ở lớp L, v.v...

Trên cùng một lớp, có thể có các giá trị khác nhau của l , mỗi giá trị của l xác định một lớp con. Như vậy, mỗi lớp lại phân chia thành các lớp con và mỗi lớp con có tối đa $2(2l+1)$ electron. Ví dụ:

Lớp L ($n=2$) có hai lớp con:

- Lớp con S ($l=0$) có tối đa $2(2l+1) = 2$ electron,

- Lớp con P ($l=1$) có tối đa 6 electron.

Lớp M ($n=3$) có 3 lớp con:

- Lớp con S có tối đa 2 electron,

- Lớp con P có tối đa 6 electron,

- Lớp con D có tối đa 10 electron.

Từ lập luận trên chúng ta thấy rằng theo nguyên lý loại trừ Paoli, có thể điền đầy tối đa $2n^2$ electron vào trong $2(2l+1)$ lớp con của một lớp với số lượng tử n và l tương ứng. Sau đây là bảng phân hạng tuần hoàn minh chứng cho một số nguyên tố (bảng 3-4).

Bảng 3-4

Nguyên tố	Lớp	K	L		M		
	Lớp con	1S	2S	2P	3S	3P	3D
H	1						
He	2						
Li	2	1					
Be	2	2					
B	2	2	1				
C	2	2	2				
N	2	2	3				
O	2	2	4				
F	2	2	5				
Ne	2	2	6				
Na	2	2	6	1			
Mg	2	2	6	2			
Al	2	2	6	2	1		
Si	2	2	6	2	2		
P	2	2	6	2	3		
S	2	2	6	2	4		
Cl	2	2	6	2	5		
Ar	2	2	6	2	6		

Nhận xét rút ra từ bảng hệ thống tuần hoàn Mendeleev:

1. Tính chất lý hóa của các nguyên tố trong cùng một nhóm giống nhau do sự điền đầy của các electron gần giống nhau.

2. Ta có thể viết công thức cấu trúc lớp của nguyên tử bằng công thức ký hiệu.

Ví dụ đối với Na, ký hiệu cấu trúc đó là $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$, có nghĩa là đối với nguyên tử Na có hai electron ở trạng thái 1s, 2 electron ở trạng thái 2s, 6 electron ở trạng thái 2p và 1 electron ở trạng thái 3s.

3. Đã tiên đoán được nhiều nguyên tố mà sau này thực nghiệm mới phát hiện ra.

Chương IV

VẬT LÝ HẠT NHÂN NGUYÊN TỬ

Trong chương này chúng ta sẽ đề cập về cấu tạo và tính chất cơ bản của hạt nhân nguyên tử, những quá trình biến đổi hạt nhân, cũng như năng lượng phản ứng hạt nhân và ứng dụng của nó.

4-1. CẤU TẠO VÀ CÁC TÍNH CHẤT CƠ BẢN CỦA HẠT NHÂN NGUYÊN TỬ

1. Cấu tạo hạt nhân

Theo giả thuyết của Ivanenco - Heisenberg (năm 1932) và sau này được thực nghiệm xác nhận thì tất cả các hạt nhân đều được cấu tạo từ hai loại hạt: các hạt prôtôn (ký hiệu là p) mang điện tích dương và các notron (ký hiệu là n) không mang điện, chúng được gọi chung là các nuclon. Sau đây là bảng các đặc trưng của các nuclon (bảng 4- 1).

Trong bảng 4-1, u là đơn vị khối lượng nguyên tử,

$$u = \frac{\text{Khối lượng nguyên tử } ^{12}\text{C}}{12} = 1,660.10^{-27} \text{ kg ;}$$

$$\beta_n \text{ là manhêton hạt nhân, } \beta_n = \frac{e\hbar}{2m_p} ;$$

m_p là khối lượng nghỉ của prôtôn.

Bảng 4- 1

Hạt	Prôtôn	Notron
Điện tích	$1.6.10^{-19} \text{ c (Culong)}$	0
Khối lượng nghỉ m_0	$1,67252.10^{-27} \text{ kg}$ $1,007277 \text{ u}$	$1,67482.10^{-27} \text{ kg}$ 1.008665 u
Năng lượng nghỉ m_0c^2	938,256 MeV	939,550 MeV
Spin	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$
Mômen từ	$+ 2,7928 \beta_n$	$- 1,9128 \beta_n$

Các prôtôn có chu kỳ bán rã bằng vô cùng, chúng sẽ không bao giờ bị phân rã khi ở riêng biệt, còn các notron có thời gian bán rã chỉ là 12 phút và tính trung bình sau 12 phút một số notron được để riêng biệt bị phân rã.

Số prôtôn trong một hạt nhân bằng số thứ tự Z của nguyên tử trong bảng tuần

hoàn Mendeleev ; hạt nhân có điện tích $+Ze$, nên Z còn được gọi là điện tích hạt nhân tính theo điện tích nguyên tố. Gọi số neutron trong hạt nhân là N và tổng số các nuclon trong hạt nhân là số khối lượng A thì

$$A = Z + N.$$

Để phân biệt các hạt nhân, người ta thường ký hiệu nguyên tố tương ứng là X với số mũ A và chỉ số Z ở bên trái: A_ZX .

Ví dụ: ${}^{11}_{23}\text{Na}$ là hạt nhân natri với 11 proton ($Z = 11$), 23 nuclon ($A = 23$) và $N = A - Z = 23 - 11 = 12$ neutron.

Các hạt nhân được gộp thành ba loại:

1. *Các đồng vị*, là các hạt nhân có cùng số proton Z nhưng số neutron N khác nhau.

Ví dụ: Hydro có ba đồng vị:

Hydro: H_1^1

Đơteri: ${}^2_1\text{H}$ (còn ký hiệu là ${}^2_1\text{D}$)

Triti: ${}^3_1\text{H}$ (còn ký hiệu là ${}^3_1\text{T}$).

Người ta đã phát hiện được gần 300 đồng vị bền, hơn 60 đồng vị phóng xạ thiên nhiên và gần 3 000 đồng vị phóng xạ nhân tạo.

2. *Các idôton*, là các hạt nhân có cùng số neutron (ví dụ ${}^{13}_6\text{C}$ và ${}^{14}_7\text{N}$).

3. *Các hạt nhân đồng khối lượng*, là các hạt nhân có cùng số khối A , nhưng số Z khác nhau (ví dụ ${}^{13}_6\text{C}$ và ${}^{14}_7\text{N}$). Trong số các hạt nhân đồng khối lượng ta còn gặp những cặp hạt nhân mà số proton của hạt nhân này bằng số neutron của hạt nhân kia, mà ta gọi chúng là các *hạt nhân gương* (ví dụ: ${}^3_1\text{H} - {}^3_2\text{He}$; ${}^7_3\text{Li} - {}^7_4\text{Be}$; ${}^{11}_5\text{B} - {}^{11}_6\text{C}$, ...)

Trong các hạt nhân nhẹ, số neutron gần bằng số proton ($N \approx Z$). Nhưng khi số nuclon tăng thì số neutron trong các hạt nhân bền lớn hơn số proton ($N > Z$). Do lực đẩy Coulomb đã đẩy các proton xa nhau, nên thừa neutron trong một thể tích hạt nhân cho trước.

2. Các tính chất cơ bản của hạt nhân

Chúng ta sẽ nghiên cứu các tính chất cơ bản của hạt nhân ở trạng thái cơ sở (trạng thái với năng lượng thấp nhất). Tuy vậy, một số kết quả nhận được có thể áp dụng cho các hạt nhân ở trạng thái kích thích.

a/ *Kích thước hạt nhân:* Nếu mật độ khối lượng hạt nhân là không đổi đối với mọi hạt nhân, thì thể tích hạt nhân sẽ tỷ lệ thuận với số nuclon A (số hạt) trong hạt nhân. Với hạt nhân có dạng đối xứng cầu (coi hạt nhân như quả cầu bán kính R) thì

thể tích hạt nhân $V = \left(\frac{4}{3}\pi r_0^3\right) A$ và bán kính hạt nhân R có giá trị $R = r_0 A^{1/3}$.

Nhiều thí nghiệm đã tiến hành kiểm tra các biểu thức này và đánh giá giá trị của r_0 . Sau đây chúng ta trình bày qua một vài kết quả thực nghiệm:

- *Khảo sát tán xạ neutron*: Dùng neutron năng lượng 20 - 50 MeV bắn phá vào hạt nhân. Vì neutron không mang điện, lại có năng lượng lớn, nên nó dễ xuyên thấu vào hạt nhân và tương tác mạnh mẽ với hạt nhân. Thực nghiệm chỉ rõ: xác suất xảy ra phản ứng tỷ lệ với tiết diện hình học πR^2 của hạt nhân.

Từ xác suất phản ứng này ta có thể suy ra được bán kính R của hạt nhân:

$$R \approx 10^{-14} \text{ m đối với hạt nhân nặng như Pb, ...}$$

$$R \approx 6.10^{-15} \text{ m đối với hạt nhân trung bình như Fe, ...}$$

- *Khảo sát phản ứng hạt nhân với các hạt tích điện*: Khi dùng hạt tích điện bắn phá hạt nhân thì xuất hiện lực đẩy Culong giữa hạt nhân và hạt tích điện. Điều đó có thể coi như có một hàng rào thế năng tương tác cản trở hạt tích điện xuyên vào hạt nhân. Song do hiệu ứng đường ngầm mà hạt tích điện tuy có năng lượng nhỏ hơn hàng rào thế năng, nhưng vẫn xuyên được qua hàng rào đó, gây ra phản ứng hạt nhân. Theo thực nghiệm, xác suất xảy ra phản ứng này tỷ lệ với độ xuyên qua hàng rào thế năng. Dựa vào đó ta tính được kích thước hạt nhân:

$$R = 1,4.10^{-15} A^{1/3} \text{ m. (A là số khối của hạt nhân)}$$

- *So sánh năng lượng liên kết các hạt nhân gương*: Khi so sánh năng lượng liên kết của các hạt nhân gương, ta thấy hạt nhân nhiều proton sẽ có năng lượng hơn hạt nhân nhiều neutron; ví dụ: năng lượng liên kết của ${}^3_1\text{H}$ bằng (-8,485 MeV), còn năng lượng liên kết của ${}^3_1\text{He}$ bằng (-7,723 MeV). Sở dĩ như vậy là vì mỗi khi thay một neutron bằng một proton thì lực đẩy Culong tăng lên và gây ra một năng lượng phụ

$$\text{bằng } \frac{6}{5} \cdot \frac{Ze^2}{R} \cdot \frac{1}{4\pi\epsilon_0}.$$

Khi biết hiệu năng lượng liên kết các cặp hạt nhân gương, ta sẽ suy được bán kính hạt nhân: $R = 1,3.10^{-15} A^{1/3} \text{ m}$.

Từ các kết quả thực nghiệm bằng các phương pháp đo khác nhau, người ta thấy kích thước hạt nhân phù hợp với công thức thực nghiệm:

$$R = r_0 A^{1/3}, \quad (4-1)$$

với $r_0 = (1,2 - 1,5)10^{-15} \text{ m}$.

Các kết quả đo đạc chứng tỏ rằng giá trị của r_0 Phụ thuộc vào tính chất hạt nhân được nghiên cứu trong thí nghiệm. Khi thể tích hạt nhân được coi là vùng phân bố khối lượng thì tìm được giá trị $r_0 = 1,4.10^{-15} \text{ m}$, còn khi coi thể tích hạt nhân là vùng

phân bố điện tích thì tìm được giá trị $r_0 = 1,2 \cdot 10^{-15} \text{ m}$. Người ta gọi r_0 là bán kính điện, vì nó xác định kích thước của miền chiếm bởi các hạt tích điện trong hạt nhân. Trong thực tế các hạt tích điện của hạt nhân không phân bố một cách liên tục, mà phân bố gián đoạn từng phần một trong hạt nhân.

Từ (4-1) ta nhấn mạnh lại một kết luận quan trọng là: Mật độ khối lượng hạt nhân là không đổi đối với mọi hạt nhân.

Nếu gọi ρ là mật độ khối lượng hạt nhân, ta có:

$$\begin{aligned} \rho &= \frac{\text{Khối lượng hạt nhân}}{\frac{4}{3}\pi R^3} \approx \frac{m_p \cdot A}{\frac{4}{3}\pi(1,5)^2 A \cdot 10^{-45}} = \\ &= \frac{1,67 \cdot 10^{-27}}{\frac{4}{3}\pi(1,5)^2 \cdot 10^{-45}} \approx 10^{14} \text{ tấn/m}^3. \end{aligned}$$

Như vậy mật độ khối lượng hạt nhân cực kỳ lớn. Thực nghiệm đã chỉ ra rằng khối lượng hạt nhân không phân bố đều mà tập trung ở giữa tạo thành lõi, mật độ khối lượng giảm nhanh ở lớp mặt ngoài, nhưng không đột ngột.

b) *Spin hạt nhân*: Nuclon có một đặc trưng quan trọng là có mômen động lượng riêng hay spin. Ngoài ra do chuyển động của nuclon bên trong hạt nhân mà nó còn có mômen orbital. Vì vậy mỗi nuclon chuyển động bên trong hạt nhân sẽ có mômen động lượng toàn phần:

$$\vec{j}_i = \vec{l}_i + \vec{s}_i, \quad (4-2)$$

trong đó \vec{l}_i và \vec{s}_i - mômen orbital và mômen spin của nuclon thứ i .

Khi đó mômen động lượng toàn phần của hạt nhân sẽ bằng tổng \vec{J}_i của các nuclon trong hạt nhân:

$$\vec{J} = \sum_i \vec{J}_i, \quad (4-3)$$

trong đó \vec{J} còn được gọi là *mômen spin của hạt nhân*, nó đặc trưng cho chuyển động nội tại của hạt nhân và có giá trị tuyệt đối bằng:

$$|\vec{J}| = \sqrt{j(j+1)} \cdot \hbar, \quad (4-4)$$

với j - lượng tử spin của hạt nhân, gọi tắt là spin hạt nhân:

$$j = 0, 1, 2, 3, \dots \text{ nếu } A \text{ chẵn}$$

$$j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots \text{ nếu } A \text{ lẻ (xem bảng 4-2).}$$

c/ *Mômen từ hạt nhân*: Để giải thích cấu trúc siêu tế vi của các vạch quang phổ, Paoli đã đưa ra khái niệm hạt nhân có mômen từ. Theo Paoli thì sự tách các vạch

quang phổ là do mômen từ hạt nhân tương tác với từ trường gây bởi chuyển động của electron trong lớp vỏ nguyên tử làm cho electron có thêm năng lượng phụ. Năng lượng phụ này có trị số tùy thuộc vào trị số của mômen từ hạt nhân và sự định hướng của nó so với phương của từ trường của electron. Sự định hướng mômen từ hạt nhân so với phương từ trường của electron hóa trị chỉ có thể theo một số phương nhất định. Vì vậy năng lượng tương tác có một dãy những giá trị gián đoạn (một dãy mức). Số mức trong dãy tùy thuộc trị số spin của hạt nhân, còn khoảng cách giữa các mức thì tùy thuộc trị số mômen từ hạt nhân.

Vì các nơtron và các prôton có mômen cơ spin, nên chúng đều có mômen từ spin. Riêng prôton có mang điện tích nên còn có mômen từ orbital. Như vậy thực chất mômen từ hạt nhân là do mômen từ của các nuclon tạo ra. Vì thế mômen từ hạt nhân sẽ bằng tổng mômen từ spin của mọi nuclon và tổng mômen từ orbital của mọi prôton trong hạt nhân đó.

Với hạt nhân gồm A nuclon và Z prôton sẽ có mômen từ bằng:

$$\vec{\mu} = \sum_{i=1}^Z \vec{\mu}_{l_i}(p) + \sum_{i=1}^Z \vec{\mu}_{s_i}(p) + \sum_{i=1}^{A-Z} \vec{\mu}_{s_i}(n), \quad (4-5)$$

trong đó: $\vec{\mu}_{l_i}(p)$ - mômen từ orbital của prôton thứ i ;

$\vec{\mu}_{s_i}(p)$ mômen từ spin của prôton thứ i .

$\vec{\mu}_{s_i}(n)$ - mômen từ spin của nơtron thứ i.

Đơn vị của mômen từ hạt nhân có tên gọi là manhêton hạt nhân (ký hiệu là β_n) và có trị số bằng:

$$\beta_n = \frac{e\hbar}{2m_n} = 5,050.10^{-27} \frac{\text{jun}}{\text{Tesla}} \text{ (j/T)}. \quad (4-6)$$

Bảng 4-2

Hạt nhân	Spin	Mômen từ (đo bằng đơn vị β_n)
^2H	1	+ 0,86
^3He	1/2	- 2,13
^{27}Al	5/2	+ 3,65
^{29}Si	1/2	- 0,55
^{40}K	4	- 1,30

Bảng 4-2 cho giá trị spin và mômen từ của một số hạt nhân.

Tùy theo vectơ mômen từ cùng chiều hay ngược chiều với vectơ spin mà mômen

từ có dấu dương hay âm.

Chú ý: Mặc dù neutron không mang điện nhưng vẫn có một mômen từ.

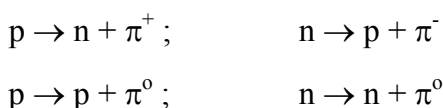
d) *Lực hạt nhân:* Lực liên kết giữa các nuclon tạo thành hạt nhân bền vững gọi là lực hạt nhân. Vì hạt nhân nguyên tử có cấu trúc khá bền vững, nên các nuclon trong hạt nhân phải hút nhau bằng những lực rất mạnh.

Bằng những thực nghiệm người ta nhận biết một số đặc tính của lực hạt nhân:

- Lực hạt nhân xuất hiện rất mạnh trong phạm vi 10^{-15} m và giảm nhanh về 0 ngoài khoảng đó. Vì thế người ta thường nói lực hạt nhân là *lực tác dụng ngắn*. Lực hạt nhân có *tính chất bão hoà*, vì mỗi nuclon chỉ tương tác với một số nuclon ở lân cận quanh nó, mà không tác dụng với mọi nuclon của hạt nhân và coi như bán kính tác dụng của lực hạt nhân.

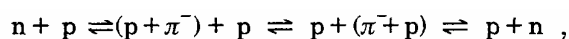
- *Lực hạt nhân không phụ thuộc điện tích:* ở cùng những trạng thái như nhau tương tác giữa các cặp nuclon (p - p, p - n, n - n) đều giống nhau.

- *Lực hạt nhân là lực trao đổi:* Các nuclon tương tác với nhau bằng cách thông qua trao đổi meson π . Có ba loại meson π , π^+ , π^0 , π^- và khối lượng hạt nhân meson π cỡ $m_\pi = (200 - 300)m_e$. Trong quá trình trao đổi đó, một neutron có thể nhả meson π âm (π^-) hoặc nuốt (hấp thụ) meson π dương (π^+) để biến thành proton và proton có thể nhả meson π dương hoặc nuốt meson π âm để biến thành neutron. Như vậy nuclon trong hạt nhân có thể ở trạng thái phân ly như sau:

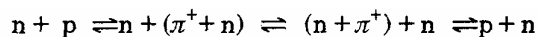


Quá trình phân ly đó xảy ra tự phát không cần cung cấp năng lượng từ bên ngoài vào. Trong quá trình xảy ra phân ly của nuclon meson π chuyển động với vận tốc bằng vận tốc ánh sáng.

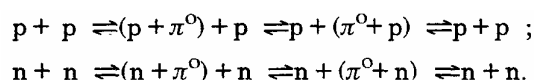
Bây giờ chúng ta xét vài ví dụ về tương tác trao đổi: Tương tác trao đổi n-p có thể thực hiện theo một trong các quá trình sau đây:



hay



và tương tác trao đổi giữa hai hạt đồng nhất p-p, n-n có thể diễn ra theo quá trình:



- *Lực hạt nhân phụ thuộc spin của các nuclon:* Thí nghiệm cho biết xác suất tán xạ neutron nhiệt ($10^{-1} - 10^{-3}$) eV trên các hạt nhân othôhydro, (phân tử hydro trong đó có hai proton có mômen spin song song) lớn hơn xác suất xảy ra tán xạ neutron đó trên

các hạt nhân parahydro (phân tử hydro trong đó có hai proton có mômen spin đối song song) khoảng 30 lần. Điều đó chứng tỏ lực hạt nhân phụ thuộc nhiều vào sự định hướng tương hỗ của mômen spin các hạt tương tác. Ở những khoảng cách nhỏ hơn 10^{-15} m nhiều lực nuclon trở thành lực đẩy.

Kết luận: Tương tác hạt nhân là một loại tương tác mạnh và phức tạp, về bản chất khác hẳn với tương tác hấp dẫn, tương tác điện từ.

e/ Khối lượng và năng lượng liên kết hạt nhân:

- *Khối lượng hạt nhân:* Bằng các phép đo chính xác người ta đã tìm thấy khối lượng nghỉ M của hạt nhân nhỏ hơn tổng khối lượng nghỉ của các nuclon tạo thành hạt nhân đó một lượng ΔM (gọi là độ hụt khối của hạt nhân ${}^A_Z X$):

$$\Delta M = Z m_p + (A - Z) m_n - M, \quad (4-7)$$

với m_p và m_n - khối lượng nghỉ của proton và neutron.

Khối lượng các hạt nhân được tính bằng đơn vị khối lượng nguyên tử, ký hiệu là u :

$$u = 1,660 \cdot 10^{-27} \text{ kg.}$$

- *Năng lượng liên kết:* Sở dĩ có độ hụt khối ΔM là do tương tác giữa các nuclon gây ra, nói cách khác, độ hụt khối này là do cần có một năng lượng âm để giữ các nuclon lại với nhau trong hạt nhân. Như vậy, độ hụt khối tương ứng với năng lượng liên kết giữa các nuclon trong hạt nhân. Theo định nghĩa năng lượng liên kết là năng lượng về trị số bằng công cần thiết để tách hạt nhân thành các nuclon riêng biệt, nghĩa là năng lượng liên kết tổng cộng của hạt nhân bằng hiệu giữa năng lượng nghỉ của các nuclon thành phần và năng lượng nghỉ của hạt nhân. Theo hệ thức Einstein thì năng lượng liên kết có trị số bằng:

$$W_{lk} = c^2 \Delta M = c^2 [Z m_p + (A - Z) m_n - M]. \quad (4-8)$$

Khi khối lượng tính ra kg thì năng lượng liên kết tính ra jun. Thường người ta tính khối lượng theo đơn vị u và năng lượng tính ra MeV.

Ví dụ về năng lượng liên kết của một vài hạt nhân (với giá trị gần đúng) xem bảng 4-3.

Bảng 4-3

Hạt nhân	Năng lượng liên kết (tính ra MeV)
${}^4_2\text{He}$	28
${}^{12}_6\text{C}$	92
${}^{16}_8\text{O}$	128
${}^{32}_{16}\text{S}$	272

Độ bền vững của hạt nhân thường được đánh giá qua năng lượng liên kết riêng

(năng lượng liên kết ứng với một nuclon):

$$\varepsilon = \frac{W_{lk}}{A} \quad (4-9)$$

Năng lượng liên kết riêng càng lớn thì hạt nhân càng bền vững.

Ví dụ: Đối với các hạt nhân nhẹ nhất, ε tăng nhanh từ 1,1 MeV (${}^2_1\text{H}$) đến 2,8 MeV (${}^3_1\text{H}$) và đạt giá trị 7 MeV (${}^4_2\text{He}$).

Đối với các hạt nhân nặng có A từ 140 đến 240 thì ε giảm rất chậm từ 8 MeV đến 7 MeV.

Đối với hạt nhân trung bình có A từ 40 đến 140 thì ε có giá trị lớn nhất nằm trong khoảng 8 - 8,6 MeV.

Điều này lý giải vì sao các hạt nhân trung bình lại bền vững nhất.

Ta thấy hầu hết các hạt nhân đều có năng lượng liên kết trong khoảng 7 - 8,6 MeV, nên giá trị trong khoảng đó có thể coi là không đổi và gọi là *giá trị bão hòa*. Giá trị bão hòa này được giải thích là do tác dụng ngắn và tính bão hòa của lực hạt nhân, còn sự giảm của năng lượng liên kết riêng trong hạt nhân nặng là do năng lượng tương tác đẩy Culong tăng lên khi tăng số proton.

4-2. CÁC MẪU HẠT NHÂN

Tất cả các tính chất quan sát được của các hạt nhân cho đến nay vẫn chưa có một lý thuyết cơ bản nào có thể giải thích được một cách đầy đủ. Mặc dù vậy người ta vẫn cố gắng đưa ra một số mẫu hạt nhân nhằm giải thích một cách thỏa đáng một số tính chất nào đó của các hạt nhân.

1. Mẫu giọt hạt nhân

Ta biết rằng, đối với một giọt chất lỏng, khối lượng riêng là một hằng số, kích thước giọt tỷ lệ với số hạt hay số phân tử của giọt và nhiệt hóa hơi hay năng lượng liên kết tỷ lệ thuận với khối lượng hay số hạt tạo thành giọt chất lỏng. Khi nghiên cứu các đặc trưng của hạt nhân liên quan đến kích thước, khối lượng và năng lượng liên kết của hạt nhân Weiszacker (năm 1935) nhận thấy rằng các đặc trưng đó của hạt nhân giống như các đặc trưng có thể tìm được ở một giọt chất lỏng. Từ đó hình thành mẫu giọt chất lỏng về hạt nhân và dẫn đến thiết lập một công thức gọi là *công thức bán thực nghiệm* về khối lượng, biểu diễn của khối lượng hạt nhân theo A và Z:

$$M = Zm_p + (A-Z)m_n - b_1A + b_2A^{2/3} + b_3Z^2A^{-1/3} + b_4(A-2Z)^2A^{-1} + b_5A^{-3/4} \quad (4-10)$$

Các hằng số b_1, b_2, b_3, b_4 (được xác định bằng thực nghiệm và giá trị của chúng có thể lấy (theo đơn vị năng lượng MeV) theo bảng 4-4, còn b_5 có giá trị như bảng 4-5.

Bảng 4-4

Hằng số	b_1	b_2	b_3	b_4
MeV	14,0	13,0	0,58	19,3

Bảng 4 5

A	Z	b_5	Số nuclon không bị ghép cặp
Chẵn	Chẵn	- 33,5 MeV	0
Lẻ		0	1
Chẵn	Lẻ	+ 33,5 MeV	2 (1 neutron và 1 proton)

Bây giờ chúng ta sẽ xem xét sự có mặt của các số hạng được hiệu chỉnh trong biểu thức (4- 1 0) .

Đầu tiên chúng ta bỏ qua năng lượng liên kết, khi đó khối lượng hạt nhân gồm khối lượng của Z proton và $N = (A-Z)$ neutron:

$$Zm_p + (A - Z)m_n$$

Nhưng khi kể đến năng lượng liên kết của hạt nhân thì giá trị khối lượng này sẽ được hiệu chỉnh. Do lực hạt nhân là lực hút nên năng lượng liên kết này phải dương (bằng công dương cần thiết để tách các nuclon), để cho khối lượng của hạt nhân nhỏ hơn tổng khối lượng của các nuclon. Theo mẫu giọt, giống như nhiệt hóa hơi, năng lượng liên kết sẽ tỷ lệ thuận với số nuclon A, do đó xuất hiện số hiệu chỉnh $-b_1A$ ($b_1 > 0$).

Trong việc hiệu chỉnh ở trên ta đã giả thiết rằng, năng lượng liên kết ứng với mỗi nuclon bằng bộ điều đó tương đương với giả thiết là các nuclon đều được liên kết một cách giống nhau bởi một số các nuclon khác. Song đối với các nuclon nằm ở mặt ngoài của hạt nhân, chúng bị liên kết yếu hơn so với các nuclon ở bên trong hạt nhân. Vì vậy, số hạng hiệu chỉnh về khối lượng $b_2A^{2/3}$ - số hạng này tỷ lệ với bề mặt của hạt nhân.

Thêm vào đó năng lượng tương tác Culong E_C của các proton cũng làm tăng khối lượng của hạt nhân lên một lượng $\frac{E_C}{C^2}$ Theo tính toán thì:

$$E_c \sim Z^2R^{-1} = Z^2 (r_0A^{1/3})^{-1} \sim Z^2A^{-1/3}.$$

Số hạng $B_3Z^2A^{-1/3}$ trong (4-10) bắt neutron từ năng lượng Culong.

Như vậy chúng ta đã trình bày được bốn số hạng trong công thức về khối lượng của hạt nhân, khi coi hạt nhân giống như một giọt chất lỏng mang điện không bị nén. Bây giờ chúng ta sẽ bổ sung thêm vào đó hai số hạng có neutron gốc lượng tử.

Người ta nhận biết rằng khi trong một hạt nhân số proton nhiều hơn số neutron (hoặc ngược lại) thì năng lượng và do đó khối lượng của hạt nhân sẽ tăng do tác động của nguyên lý Paoli. Số hiệu chỉnh này là một hàm số của số dư của proton (hoặc số dư của neutron):

$$b_4 (N-Z)^2 A^{-1} = b_4 (A-2Z)^2 A^{-1}.$$

Mặt khác, trong một hạt nhân các nuclon có xu hướng ghép thành từng cặp với các spin ngược nhau, dẫn đến làm xuất hiện một năng lượng tạo cặp có giá trị thay đổi giống như $A^{-3/4}$ và tăng theo số nuclon không bị ghép cặp - số nuclon không bị ghép cặp được xác định theo bảng 4-5.

Sau khi bổ sung số hạng này chúng ta nhận được biểu thức (4-10) của khối lượng hạt nhân.

2. Mẫu vỏ

Chúng ta có thể sử dụng mẫu giọt để giải thích một số đặc trưng của hạt nhân, ví dụ năng lượng liên kết trung bình tính cho một nuclon. Và rằng trong mẫu giọt chất lỏng, ta không nghiên cứu riêng biệt từng nuclon mà các hiệu ứng do chúng gây ra được lấy trung bình trên toàn bộ hạt nhân. Nhưng khi tính đến từng đặc điểm riêng của từng nuclon ta có thể giải thích được một số đặc trưng khác như năng lượng của các trạng thái kích thích, mômen từ hạt nhân. Vì vậy cần phải xây dựng một mẫu vi mô khác đáp ứng yêu cầu đó.

Từ các số liệu thực nghiệm thu thập được người ta đã nêu bật một điều rằng, khi số N hay Z của hạt nhân bằng 2; 8; 20; 28; 50; 82 hay 126 thì tính chất của hạt nhân thay đổi một cách đáng kể. Bởi thế các số này được gọi là các số kỳ lạ - các số *magic*. Các hạt nhân tương ứng với các số magic có các tính chất là:

1. Đặc biệt bền vững và có số lượng lớn.
2. Các nuclon cuối cùng lấp đầy các vỏ sẽ có năng lượng liên kết lớn.
3. Năng lượng có trạng thái kích thích đầu tiên ở các hạt nhân magic lớn hơn năng lượng đó ở các hạt nhân bên cạnh. Ví dụ, thiếc (Sn) có số magic $Z = 50$ có 10 đồng vị bền, năng lượng cần thiết để tách một proton vào cỡ 11 MeV và trạng thái kích thích đầu tiên của các đồng vị chẵn - chẵn (A và Z đều chẵn) cao hơn 1,2 MeV so với trạng thái cơ bản. Trong khi đó, đối với các đồng vị telur (Te) bên cạnh ($Z = 52$), năng lượng tách proton chỉ vào cỡ 7 MeV, còn trạng thái kích thích đầu tiên của các đồng vị chẵn - chẵn có năng lượng chỉ vào cỡ 0,60 MeV.

Những thăng giáng như vậy tương tự như đã quan sát được trong tính chất của nguyên tử khi các electron chiếm đầy các vỏ khác nhau của nguyên tử. Chính hiện tượng tương tự đó gợi lên một ý tưởng rằng, một số tính chất của hạt nhân có thể được giải thích trên cơ sở mẫu vỏ về cấu trúc hạt nhân.

Để hình thành cấu trúc vỏ của nguyên tử, trước hết người ta cho rằng Z electron

của một nguyên tử với điện tích hạt nhân $+Ze$ không tương tác với nhau và lần lượt chiếm các mức năng lượng của nguyên tử, sau đó bổ sung các hiệu chỉnh do ảnh hưởng của các tương tác. Trong đó hiệu ứng quan trọng nhất dẫn đến sự gần đúng bậc nhất của mẫu vỏ là tính trung bình, các electron chuyển động độc lập trong trường Coulomb của hạt nhân. Khi áp dụng phương pháp này để phát triển mẫu vỏ hạt nhân, chúng ta cần phải sử dụng một dạng thế năng khác để mô tả các lực hạt nhân có tầm tác dụng ngắn với giả thiết rằng hạt nhân có thể chuyển động trong trường lực của một dao tử điều hòa với thế năng trung bình:

$$W_t = \frac{1}{2} k R^2 = \frac{1}{2} m \omega^2 R^2.$$

Lúc đó các mức năng lượng của hạt nhân theo cơ học lượng tử có giá trị:

$$W = \left(\mathcal{N} + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega, \quad (4-11)$$

trong đó $\mathcal{N} = 2(n-1) + l$, với $l = 0, 1, 2, 3, \dots$ là số lượng tử (mômen động lượng) quỹ đạo liên hệ với vectơ mômen động lượng quỹ đạo theo biểu thức đã biết $|\vec{l}| = \sqrt{l(l+1)}\hbar$ (với các nuclon, các vectơ bị lượng tử hóa cũng như các số lượng tử được biểu diễn bằng chữ thường); còn số lượng tử $n = 1, 2, 3, 4, \dots$

Lưu ý rằng, khác với trường hợp nguyên tử hydro, đối với hạt nhân giá trị của l không bị giới hạn bởi n .

Các trạng thái của mômen động lượng quỹ đạo của nuclon có các ký hiệu phổ như sau:

Giá trị của l :	0	1	2	3	4	5 ...
Ký hiệu bằng chữ thường:	s	p	d	f	g	h ...

Khi sử dụng thế năng của dao tử điều hòa kết hợp với nguyên lý Paoli thì xác định được số nuclon cực đại trên mỗi mức năng lượng. Người ta thấy rằng, khi số nuclon bằng 2, 8, 20, 40, 70, 112, 168 thì một số mức năng lượng bị chiếm đầy, nhưng chỉ có ba số đầu là số magic.

Năm 1949 Mayer và Jensen (độc lập với nhau) đã giải thích các số magic bằng cách đưa ra giả thiết về sự tồn tại của tương tác spin - quỹ đạo ($\vec{l}\vec{s}$) ứng với một thế năng bổ sung vào thế năng của dao tử điều hòa. Vì số lượng tử spin của nuclon chỉ có giá trị $s = 1/2$ nên tương tác spin - quỹ đạo chỉ làm tách mỗi trạng thái $l > 0$ thành hai quỹ đạo với số lượng tử mômen động lượng quỹ đạo toàn phần $j = l + s$ và $j = l - s$. Độ tách năng lượng giữa chúng được xác định dựa trên việc tính giá trị của tích $\vec{l}\vec{s}$:

Ta biểu diễn $\vec{j} \cdot \vec{j} \equiv |j|^2$, với $\vec{j} = \vec{l} + \vec{s}$, ta có :

$$\begin{aligned} |\vec{j}|^2 &= (\vec{l} + \vec{s})(\vec{l} + \vec{s}) = \vec{l} \cdot \vec{l} + 2\vec{l} \cdot \vec{s} + \vec{s} \cdot \vec{s} = \\ &= |\vec{l}|^2 + 2\vec{l} \cdot \vec{s} + |\vec{s}|^2 . \end{aligned}$$

Suy ra $\vec{l} \cdot \vec{s} = \frac{1}{2} (|\vec{j}|^2 - |\vec{l}|^2 - |\vec{s}|^2)$. (4-12)

Thay $|\vec{j}|^2 = j(j+1)\hbar^2$; $|\vec{l}|^2 = l(l+1)\hbar^2$ và $|\vec{s}|^2 = s(s+1)\hbar^2$ vào (4-12) ta được :

$$\vec{l} \cdot \vec{s} = \frac{1}{2} [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)]\hbar^2 = \begin{cases} \frac{l}{2}\hbar^2 ; j = l + \frac{1}{2} \\ \frac{l+1}{-2}\hbar^2 ; j = l - \frac{1}{2} \end{cases} \quad (4-13)$$

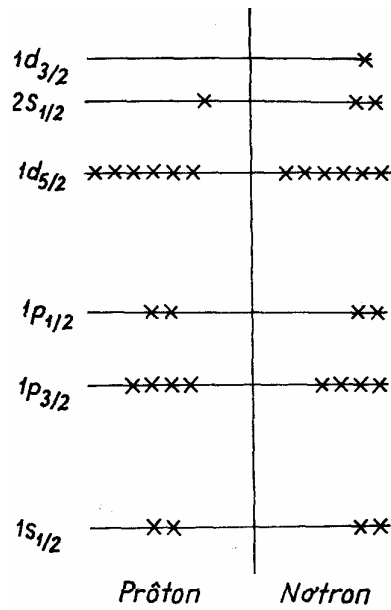
Từ (4-13) ta thấy độ tách năng lượng giữa hai quỹ đạo tỷ lệ với $(2l+1)$ và như vậy là tăng theo l .

Dựa vào ký hiệu của trạng thái mômen động lượng quỹ đạo, ta có thể ký hiệu các quỹ đạo bằng cách thêm giá trị j dưới dạng chỉ số. Ví dụ $ld^{3/2}$ biểu diễn tập hợp các số lượng tử $n = 1, l = 2, j = l - s = 3/2$. Đối với các hạt nhân, nguyên lý loại trừ Paoli được phát biểu ngắn gọn như sau: Trong một hạt nhân hai nuclon không thể cùng có bốn số lượng tử (n, l, j, m_j) . Từ đây ta thấy rằng một quỹ đạo chỉ có thể chứa tối đa $(2j+1)$ nuclon (với j cho trước thì $m_j = j, j-1, \dots, -(j-1), j$, có nghĩa là có $(2j+1)$ giá trị). Do đó nguyên lý loại trừ Paoli cho phép có $(2j+1)$ nuclon trên một quỹ đạo.

Ta biết rằng trong trường hợp nguyên tử, tương tác spin - quỹ đạo chỉ là tương tác yếu và dẫn đến cấu trúc tế vi. Nhưng trong trường hợp hạt nhân hiệu ứng này khá mạnh và gây ra các hệ tách năng lượng có thể so với khoảng cách giữa các mức năng lượng của dao tử điều hòa. Giữa tương tác spin - quỹ đạo nguyên tử và tương tác hạt nhân còn có một điều khác nhau nữa là đối với các hạt nhân, năng lượng của quỹ đạo $j = l + \frac{1}{2}$ thấp hơn năng lượng của quỹ đạo $j = l - \frac{1}{2}$ ngược với trường hợp của nguyên tử.

Theo các kết quả thực nghiệm thì các quỹ đạo được nhóm lại thành các vỏ, các vỏ bị chiếm đầy tương ứng với các số magic bằng số nuclon tổng cộng xếp trên các mức từ dưới lên trên cho đến khi gặp một khoảng cách năng lượng lớn.

Các prôtôn (và các nơtron) trên cùng một quỹ đạo có xu hướng tạo cặp với nhau với mômen động lượng bằng 0. Vì thế các hạt nhân chẵn - chẵn có mômen động lượng tổng cộng $J = \Sigma j = 0$, trong khi đó một hạt nhân lẻ một prôtôn hay một nơtron sẽ có mômen động lượng tổng cộng bằng mômen động lượng của nuclon lẻ cuối cùng (không bị ghép cặp); còn trong trường hợp hạt nhân lẻ - lẻ thì mức độ xảy ra phức tạp hơn. Ví dụ xét bài toán: Tìm các giá trị có thể có của mômen động lượng tổng cộng của trạng thái cơ bản ở hạt



Hình 4-1

nhân $^{32}_{15}\text{P}$, cấu hình trạng thái cơ bản được biểu diễn ở hình 4 -1 với giả thiết là tất cả các mức phía dưới đều bị chiếm đầy. Trong mẫu đó tất cả các nuclon đều được ghép cặp trừ prôtôn $2s_{1/2}$ và nơtron $1d_{3/2}$. Vì vậy, mômen động lượng của trạng thái cơ bản $^{32}_{15}\text{P}$ bằng tổng vectơ của các mômen động lượng của hai hạt $j = \frac{1}{2}$ và $j = \frac{3}{2}$ với prôtôn các giá trị có thể có của $m_{1/2} = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$; và với nơtron: $m_{3/2} = \frac{3}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}$.

Từ đó suy ra:

$$M_j = m_{1/2} + m_{3/2} = 2, \begin{Bmatrix} 1 \\ 1 \end{Bmatrix}, \begin{Bmatrix} 0 \\ 0 \end{Bmatrix}, \begin{Bmatrix} -1 \\ -1 \end{Bmatrix}, -2.$$

Hàng trên là các giá trị của M_j tương ứng với $J = 2$, hàng dưới tương ứng với $J = 1$.

Giá trị thực nghiệm đối với trạng thái cơ bản của $^{32}_{15}\text{P}$ là $J = 1$, còn giá trị của $J = 2$ tương ứng với trạng thái kích thích thứ nhất.

4.3. HIỆN TƯỢNG PHÂN RÃ CỦA CÁC HẠT NHÂN KHÔNG BỀN

Chúng ta biết rằng các hạt nhân có các trạng thái kích thích. Khi ở các trạng thái kích thích này hạt nhân nguyên tử có thể tự phân rã bằng cách phát ra những bức xạ và biến đổi thành hạt nhân khác. Những bức xạ đó mắt ta không trông thấy được gọi là những tia phóng xạ. Nhưng có thể phát hiện được chúng, vì chúng có khả năng tác dụng lên kính ảnh, ton hóa chất khí, lệch đường đi trong điện trường, từ trường. Trong các phân rã khác nhau các định luật bảo toàn: năng lượng, động lượng và mômen động lượng, điện tích, số nuclon (số khối) được nghiệm đúng.

Thực nghiệm đã xác định bản chất của sản phẩm phân rã: gồm ba loại tia phóng xạ.

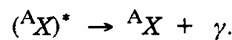
1. Phân rã gamma (γ)

Đó là quá trình phân rã mà một hạt nhân lúc đầu ở trạng thái kích thích (W_n) sẽ chuyển về một trạng thái năng lượng thấp hơn (W_n') phát ra một photon năng lượng cao gọi là tia gamma (γ). Tia gamma là bức xạ điện từ có bước sóng rất ngắn (cỡ 0,01 mm), ngắn hơn nhiều so với bước sóng của tia X. Các tia này được phát ra với năng lượng gián đoạn, điều ấy chứng tỏ hạt nhân có những mức năng lượng gián đoạn. Năng lượng của photon bằng:

$$h\gamma = W_n - W_n' . \quad (4-14)$$

Năng lượng của các tia (γ) có thể từ hàng chục KeV đến nhiều MeV, trong khi đó các photon phát ra trong các chuyển dời nguyên tử chỉ có năng lượng vào cỡ một vài eV.

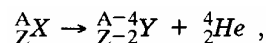
Vì các photon không mang điện tích và có khối lượng nghỉ bằng 0 nên điện tích và nguyên tử số của hạt nhân không thay đổi trong quá trình phân rã gamma. Giả sử $(^A X)^*$ là hạt nhân ở trạng thái kích thích, ký hiệu của quá trình phân rã gamma về trạng thái cơ bản là:



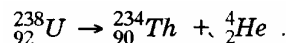
Phần lớn các hạt nhân phân rã gamma có chu kỳ bán rã rất nhỏ (cỡ 10-14s), nhỏ hơn nhiều so với chu kỳ bán rã của trạng thái kích thích của nguyên tử.

2. Phân rã anpha (α)

Khi xảy ra phân rã anpha, hạt nhân phát ra một hạt anpha - là một hạt nhân hê (^4_2He). Vì vậy trong quá trình phân rã α , hạt nhân mẹ sẽ mất hai proton và hai neutron, nguyên tử số của nó giảm đi hai đơn vị và số khối giảm đi bốn đơn vị. Lúc đó hạt nhân mẹ X và hạt nhân con Y sẽ tương ứng với các nguyên tố hóa học khác nhau. Quá trình phân rã α được ký hiệu:



trong đó các định luật bảo toàn điện tích: “Tổng điện tích trước khi phân rã hạt nhân và sau khi phân rã hạt nhân bằng nhau” và định luật bảo toàn số nuclon: “Tổng các nuclon trước khi phân rã hạt nhân và sau khi phân rã hạt nhân bằng nhau” được nghiệm đúng. Ví dụ:



Trong một hệ quy chiếu mà ở đó hạt nhân mẹ đứng yên, định luật bảo toàn năng lượng được viết dưới dạng:

$$M_X c^2 = M_Y c^2 + M_\alpha c^2 + K_Y + K_\alpha , \quad (4-15)$$

trong đó K_Y và K_α - động năng của hạt con và hạt anpha ;

M_X , M_Y và M_α - khối lượng nghỉ của hạt nhân mẹ, hạt nhân con và hạt anpha.

Vì động năng K_γ và K_α không thể âm, nên từ (4-15) ta có:

$$M_X - (M_Y + M_\alpha) = \Delta M > 0.$$

Như vậy quá trình biến đổi phân rã chỉ có thể xảy ra nếu khối lượng nghỉ của hạt nhân mẹ lớn hơn tổng khối lượng nghỉ của các sản phẩm sinh ra do biến đổi phân rã: Khi đó năng lượng tương ứng với độ hụt khối ΔM là $W = \Delta Mc^2$ sẽ chuyển hóa thành động năng của các sản phẩm phân rã: đây là năng lượng tổng cộng được giải phóng trong phản ứng, còn gọi là năng lượng phân rã (ký hiệu là Q) và

$$Q = (M_X - M_Y - M_\alpha)c^2.$$

Quá trình phân rã alpha, ngoài tuân theo định luật bảo toàn năng lượng, còn tuân theo định luật bảo toàn động lượng.

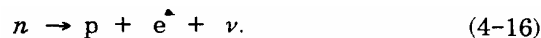
Quá trình phân rã thực chất là một quá trình biến đổi hạt nhân.

3. Phân rã beta (β) và neutrino

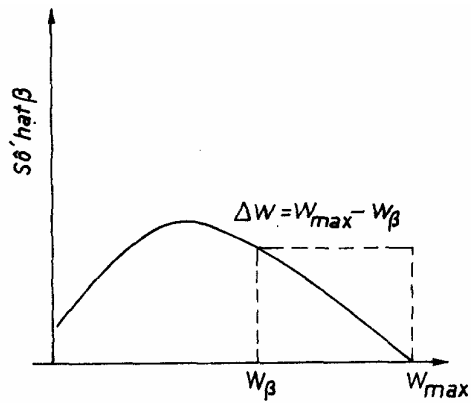
Đó là một quá trình hạt nhân xảy ra trong đó điện tích Z_e của hạt nhân thay đổi nhưng số nuclon không đổi. Phân rã beta phổ biến là phân rã beta trừ (β^-) đó chính là chùm tia electron, ví dụ khi hạt nhân phát ra một electron (e^-); phân rã hiếm gặp hơn là phân rã beta cộng (β^+), còn gọi là electron dương (e^+) hay pôziton (pôditon), ví dụ khi hạt nhân phát ra một pôziton cùng khối lượng và cùng độ lớn điện tích với electron); và phân rã cũng xảy ra khi hạt nhân bắt một electron ở vỏ trong của vỏ nguyên tử (gọi tắt là bắt electron). Trong mỗi trường hợp đó, một prôtôn biến thành một notron và ngược lại.

Trong các sản phẩm của mỗi hiện tượng phân rã trên đây đều có xuất hiện kèm theo một hạt phụ - đó là neutrino (ν). Neutrino không mang điện tích, có khối lượng nghỉ bằng 0, spin bằng 1/2, vận tốc bằng vận tốc ánh sáng c . Các neutrino chỉ tương tác rất yếu với vật chất, vì thế cực kỳ khó phát hiện.

Sự tồn tại của neutrino được Paoli đưa ra giả thiết vào năm 1930. Ví dụ phân rã beta của một notron có dạng:



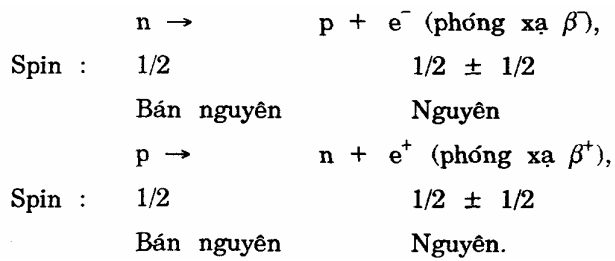
Nhưng mãi đến năm 1953 Conan và Riens mới phát hiện ra notron bằng thực nghiệm trong các lò phản ứng hạt nhân có công suất lớn. Việc giả thiết về sự tồn tại của neutrino là nhằm đảm bảo tính đúng đắn của các định luật bảo toàn năng lượng và động lượng. Nếu neutrino không tồn tại với tư cách là một sản phẩm kèm theo trong phân rã, thì trong quá trình phân rã thành hai hạt,



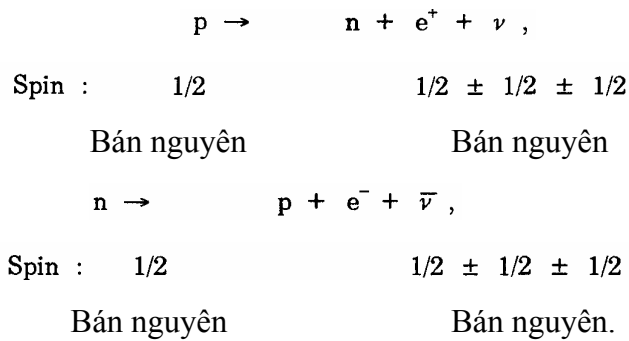
Hình 4-2

hạt electron sẽ có năng lượng xác định như trường hợp phân rã alpha và khi đó định luật bảo toàn năng lượng bị vi phạm. Vì theo thực nghiệm phổ năng lượng, các hạt β phát ra là liên tục từ 0 và bị giới hạn bởi một giá trị cực đại W_{\max} (xem hình 4-2). Trục hoành mô tả năng lượng các hạt β , trục tung mô tả số hạt β phát ra trong một đơn vị thời gian; đường cong biểu diễn phổ năng lượng β . Giá trị của W_{\max} đúng bằng năng lượng do hạt nhân giải phóng khi phân rã và phụ thuộc vào loại hạt nhân phóng xạ $W_{\max} = Q$ (ví dụ đối với phân rã β^- của ^{14}C thì $W_{\max} = 0,155 \text{ MeV}$, đối với phân rã β^+ của ^{13}N thì $W_{\max} = 1,85 \text{ MeV}$, ...).

So sánh với thực nghiệm ta thấy rằng năng lượng W_β của hạt β phát ra bao giờ cũng nhỏ hơn năng lượng W_{\max} được giải phóng. Vậy phần năng lượng $\Delta W = W_{\max} - W_\beta$ đã biến đi đâu? Để định luật bảo toàn năng lượng không bị vi phạm, chúng ta thừa nhận rằng phần năng lượng $\Delta W = W_{\max} - W_\beta$ không mất đi đâu mà chính là do hạt neutrino hay phản neutrino mang đi. Vì có thêm hạt neutrino (ν) hay hạt phản neutrino $\bar{\nu}$ kèm theo nên năng lượng W_{\max} do hạt nhân giải phóng khi phân rã được phân phối liên tục theo những tỷ lệ thay đổi giữa hạt β và hạt neutrino. Đôi khi electron chiếm hầu hết năng lượng đó, đôi khi neutrino lại chiếm hầu hết năng lượng đó. Tuy nhiên, trong mọi trường hợp, tổng năng lượng của electron và của neutrino luôn bằng W_{\max} không đổi. Ngoài ra, do hạt ban đầu có spin bằng $1/2$, việc tạo ra hai hạt mà spin mỗi hạt là $1/2$ sẽ mâu thuẫn với định luật bảo toàn mômen động lượng. Nói cách khác, định luật bảo toàn spin bị vi phạm. Theo cơ học lượng tử thì mọi quá trình biến đổi của hệ vi mô đều phải tuân theo định luật bảo toàn spin, nghĩa là spin của hệ trước và sau khi biến đổi hoặc đều là nguyên hoặc đều là bán nguyên (không có sự chuyển từ hệ nọ sang hệ kia và ngược lại). Nếu quá trình phân rã β không kèm theo phát ra neutrino thì spin của hệ trước và sau phân rã không được bảo toàn:

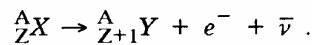


Để spin của hệ vẫn được bảo toàn, đòi hỏi trong sự biến đổi prôtôn thành notron có hạt neutrino (ν) bay ra và trong sự biến đổi notron thành prôtôn có hạt phản neutrino ($\bar{\nu}$) bay ra:

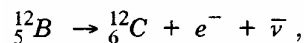


Trong thực tế có hai loại hạt neutrino: hạt neutrino (ν) và hạt phản neutrino ($\bar{\nu}$). Quá trình phân rã β^- phát ra hạt phản neutrino, còn quá trình phân rã β^+ phát ra hạt neutrino.

Một quá trình phân rã β^- nói chung được biểu diễn dưới dạng:

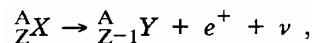


Ví dụ:



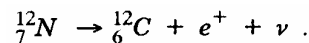
ở đây một notron đã biến thành một prôtôn.

Trong quá trình phân rã β^+ với việc phát ra một pôzitron, ta có dạng:



ở đây một prôtôn đã biến thành một notron.

Ví dụ:



Trong một hệ quy chiếu mà hạt nhân đứng yên, với cả hai quá trình phân rã beta (khối lượng $m_e = m_{e^+}$)' theo định luật bảo toàn năng lượng ta có:

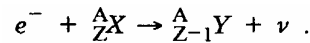
$$M_X c^2 = M_Y c^2 + m_e c^2 + K_{\text{tổng}}$$

tương ứng với một năng lượng phân rã:

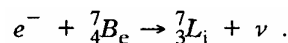
$$Q = K_{\text{tổng}} = (M_X - M_Y - m_e) c^2.$$

Xét quá trình bắt electron:

Khi thốt electron ở vỏ trong (thường là ở vỏ K) bị hạt nhân bắt, quá trình bắt electron không xảy ra việc phát xạ các hạt mang điện, mà chỉ kèm theo việc phát ra một neutrino và tiếp đó phát ra các photon tia X do electron vánh người chuyển về mức năng lượng bị trống. Các tia X được phát ra là từ hạt nhân con chứ không phải là từ hạt nhân mẹ, vì rằng chúng được tạo ra sau quá trình bắt electron. Trong quá trình bắt electron một proton biến thành neutron. Một quá trình bắt electron được biểu diễn theo dạng:



Ví dụ:



Chúng ta cần nhấn mạnh rằng, một hạt nhân được tạo thành chỉ bởi các proton và các neutron, cho nên sau quá trình phân rã beta hay bắt electron thì các hạt electron hay pozitron không tồn tại trong hạt nhân như tư cách là các hạt cấu thành hạt nhân, mà việc sản sinh ra hoặc hấp thụ electron hay pozitron chỉ kéo theo việc sắp xếp lại các nuclon trong hạt nhân vào một trạng thái năng lượng thấp hơn (trạng thái bền vững hơn) bằng việc biến đổi một proton thành một neutron hay ngược lại.

Nhận xét về tính chất chung của các tia phóng xạ:

Các tia phóng xạ có những tính chất chung sau đây: chúng có thể kích thích một số phản ứng hóa học, phá hủy tế bào, ton hóa chất khí, xuyên thấu qua vật chất. Ví dụ, tia α ion hóa chất khí mạnh nhất nhưng xuyên thấu kém (chỉ đi qua lớp không khí dày 8 cm, mà không xuyên qua được lớp giấy dày 1 mm ; tia β ion hóa chất khí kém hơn nhưng xuyên thấu mạnh hơn (tia β có thể bay trăm mét trong không khí, xuyên qua lớp giấy 1 mm nhưng không xuyên qua được tấm nhôm dày 2 mm) ; tia γ có thể coi là không có khả năng ion hóa chất khí nhưng lại xuyên thấu mạnh nhất (dễ dàng xuyên qua lớp chì dày 6 mm .

4-4. ĐỊNH LUẬT PHÂN RÃ PHÓNG XẠ. QUY TẮC DI CHUYỂN. HỌ PHÓNG XẠ, PHÓNG XẠ NHÂN TẠO. ỨNG DỤNG ĐỒNG VỊ PHÓNG XẠ

1. Định luật phân rã phóng xạ

Trong một quá trình phân rã phóng xạ, một hạt nhân đã cho tự phát ra một hạt và bản thân nó trong quá trình đó biến thành một hạt nhân khác. Dù quá trình phân rã thuộc loại nào, các quá trình phân rã hạt nhân cũng đều tuân theo định luật phân rã phóng xạ. Định luật này cho biết quy luật số hạt chưa bị phân rã sẽ giảm theo thời gian. Bây giờ ta thiết lập định luật phóng xạ đó.

Giả sử ở thời điểm t , mẫu chứa N hạt nhân phóng xạ chưa phân rã. Sau thời gian dt , số hạt nhân đã phân rã là dN , thì số hạt nhân còn lại chưa phân rã là $N - dN$. Độ

giảm số hạt nhân chưa phân rã - N tỷ lệ với số hạt nhân N và thời gian phân rã dt:

$-dN = \lambda N dt$, trong đó λ là hệ số tỷ lệ, gọi là hằng số phân rã và phụ thuộc chất phóng xạ, λ có giá trị đặc trưng đối với mỗi một hạt nhân phóng xạ và theo định nghĩa, λ là xác suất phân rã của từng hạt nhân trong một đơn vị thời gian. Do đó ta có:

$$\frac{dN}{N} = -\lambda dt. \quad (4-17)$$

Tích phân hai vế phương trình (4-17) ta được:

$$N = N_0 e^{-\lambda t}. \quad (4-18)$$

Công thức (4-18) mô tả định luật phân rã phóng xạ, trong đó N_0 là số hạt nhân phóng xạ có trong mẫu ở thời điểm $t = 0$ và N là số hạt nhân còn lại chưa phân rã ở thời điểm t bất kỳ sau đó.

Phương trình (4-18) không phải là một phương trình cho giá trị xác định mà là một phương trình có tính chất thống kê, nó cho biết số hạt nhân N hy vọng còn tồn tại ở thời điểm t .

Để đặc trưng cho tính phân rã phóng xạ mạnh hay yếu của một chất phóng xạ, người ta đưa ra đại lượng gọi là tốc độ phân rã của chất phóng xạ (hay còn gọi là độ phóng xạ), ký hiệu là H:

$$H = - \frac{dN}{dt}. \quad (4-19)$$

Theo (4-17) và (4-18) ta có:

$$H = - \frac{dN}{dt} = \lambda N = \lambda N_0 e^{-\lambda t},$$
$$H = H_0 e^{-\lambda t}. \quad (4-20)$$

Đây là một dạng khác của định luật phân rã phóng xạ. Ở đây $H_0 = \lambda N_0$ là tốc độ phân rã ở thời điểm $t = 0$ và H là tốc độ phân rã ở thời điểm t bất kỳ sau đó, nó xác định phân rã phóng xạ trong một giây.

Trong hệ SI đơn vị đo phóng xạ là phân rã trên giây (pr/s) có tên gọi là becquerel (Bq):

$$1\text{Bq} = 1(\text{pr/s}).$$

Ngoài ra người ta còn dùng đơn vị của (Ci):

$$1\text{Ci} = 3,7 \cdot 10^{10} \text{Bq}$$

(Một Curi bằng số hạt nhân phân rã trong một gam radi trong một giây).

Nhằm phân biệt tốc độ phân rã nhanh, chậm của các chất phóng xạ, người ta đặc biệt quan tâm đến một đại lượng gọi là *nửa thời gian sống* τ hay còn gọi là chu kỳ bán

rã, đó là thời gian mà sau đó N_0 giảm đi một nửa: $N = \frac{N_0}{2}$

Thay $t = \tau$ vào (4-18) ta có:

$$N = \frac{N_0}{2} = N_0 e^{-\lambda t}.$$

Suy ra

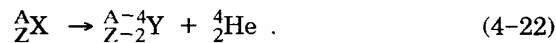
$$\tau = \frac{\ln 2}{\lambda}. \quad (4-21)$$

Đây là hệ thức giữa chu kỳ bán rã và hằng số phân rã.

2. Quy tắc di chuyển. Họ phóng xạ tự nhiên

Nói chung các chất phóng xạ không phát ra đủ ba loại tia α , β , γ . Ta thường gặp hai loại phóng xạ α và β^- và cả hai đều kèm theo phóng xạ γ .

Đối với quá trình phân rã α , chất phóng xạ con được tạo thành đứng trước chất phóng xạ mẹ hai ô trong bảng tuần hoàn Mendeleev:



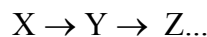
Đối với quá trình phân rã β^- , chất phóng xạ con được tạo thành đứng sau chất phóng xạ mẹ một ô trong bảng tuần hoàn Mendeleev:



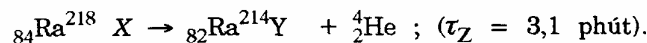
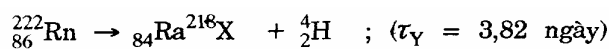
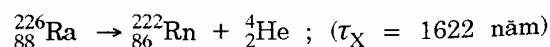
Các quy tắc (4-22) và (4-23) gọi là *quy tắc di chuyển*. Mọi quá trình biến đổi của các hạt nhân phóng xạ có thể được mô tả nhờ quy tắc di chuyển này.

Trong nhiều trường hợp hạt nhân con cũng không bền và bị phân rã thành một hạt nhân con khác tạo thành một chuỗi quá trình phóng xạ liên tiếp, hợp thành một họ phóng xạ. Các họ phóng xạ tự nhiên khởi đầu từ các nguyên tố ${}^{238}\text{U}$, ${}^{235}\text{U}$, ${}^{232}\text{Th}$, ${}^{241}\text{Am}$ và tận cùng bằng các nguyên tố bền ${}^{206}\text{Pb}$, ${}^{207}\text{Pb}$, ${}^{208}\text{Pb}$, ${}^{209}\text{Bi}$.

Bây giờ ta nghiên cứu quá trình biến đổi phóng xạ của các hạt nhân trong từng chuỗi phóng xạ:



Ví dụ ta có chuỗi:



V.V...

Nếu xảy ra hai đồng vị phóng xạ nối tiếp thì số hạt nhân của chất đồng vị con sẽ được tính theo công thức

$$N_2 = N_{02}e^{-\lambda_2 t} + \frac{\lambda N_{01}}{\lambda_2 - \lambda_1} e^{-\lambda_1 t} - e^{-\lambda_2 t},$$

trong đó N_{01} - số hạt nhân của chất đồng vị mẹ ở thời điểm ban đầu ;

N_{02} và N_2 - số hạt nhân của đồng vị con ở thời điểm ban đầu và thời điểm t .

Nếu $N_{02} = 0$, nghĩa là ở thời điểm ban đầu ($t = 0$) không có đồng vị con mà chỉ có đồng vị mẹ thì số hạt nhân con do quá trình phân rã của các hạt nhân mẹ tạo ra sẽ là:

$$N_2 = \frac{\lambda N_{01}}{\lambda_2 - \lambda_1} \cdot e^{-\lambda_1 t} - e^{-\lambda_2 t}$$

Nếu chuỗi gồm ba đồng vị phóng xạ nối tiếp nhau thì số hạt nhân của đồng vị thứ ba sẽ được tính theo công thức

$$N_3 = N_{03}e^{-\lambda_3 t} + \frac{\lambda_2 N_{02}}{\lambda_3 - \lambda_2} \cdot e^{-\lambda_2 t} - e^{-\lambda_3 t} + \frac{\lambda_1 \lambda_2 N_{01} \cdot e^{-\lambda_1 t}}{(\lambda_3 - \lambda_1)(\lambda_2 - \lambda_1)} + \frac{e^{-\lambda_2 t}}{(\lambda_1 - \lambda_2)(\lambda_3 - \lambda_2)} + \frac{e^{-\lambda_3 t}}{(\lambda_1 - \lambda_3)(\lambda_2 - \lambda_3)}.$$

Nếu $N_{03} = 0$ và $N_{02} = 0$, nghĩa là sự tích lũy các hạt nhân phóng xạ của đồng vị thứ ba chỉ do sự phân rã của đồng vị mẹ thứ nhất sinh ra, thì:

$$N_3 = -e^{-\lambda_3 t} + \frac{\lambda_1 \lambda_2 N_{01} \cdot e^{-\lambda_1 t}}{(\lambda_3 - \lambda_1)(\lambda_2 - \lambda_1)} + \frac{e^{-\lambda_2 t}}{(\lambda_1 - \lambda_2)(\lambda_3 - \lambda_2)} + \frac{e^{-\lambda_3 t}}{(\lambda_1 - \lambda_3)(\lambda_2 - \lambda_3)}.$$

Kết quả độ phóng xạ toàn phần ở thời điểm t của neutron gồm chuỗi ba hạt nhân X, Y, Z phân rã nối tiếp nhau là:

$$H = \lambda_1 N_1 + \lambda_2 N_2 + \lambda_3 N_3. \quad (4-24)$$

3. Đồng vị phóng xạ nhân tạo

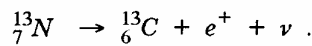
Chất đồng vị phóng xạ (không có trong tự nhiên) do con người tạo ra gọi là đồng vị phóng xạ nhân tạo.

Dùng máy gia tốc hạt người ta tạo ra được hơn 1500 đồng vị phóng xạ nhân tạo.

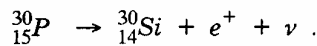
Ví dụ:

Khi bắn neutron vào $^{23}_{11}\text{Na}$ ta được đồng vị $^{24}_{11}\text{Na}$ có tính phóng xạ β^- .

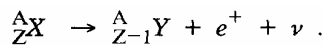
Khi bắn hạt α vào $^{10}_5\text{Al}$ ta được đồng vị $^{13}_7\text{N}$ của nitơ. Đồng vị phóng xạ này có tính phóng xạ β^+ . Quá trình phân rã của $^{13}_7\text{N}$ được diễn tả như sau:



Khi bắn phá α vào ${}^{27}_{13}\text{Al}$ ta được đồng vị ${}^{30}_{15}\text{P}$ của photpho. Đồng vị ${}^{30}_{15}\text{P}$ không bền, có tính phóng xạ β^+ :



Trong quá trình phân rã β^+ , chất phóng xạ biến thành một chất đứng trước nó một ô trong bảng tuần hoàn Mendeleev:



4. Ứng dụng đồng vị phóng xạ

Các chất phóng xạ có nhiều ứng dụng, sau đây chúng ta đưa ra một số ứng dụng trong đời sống và khoa học:

- Dùng đồng vị phóng xạ để xác định niên đại: về nguyên tắc, nếu biết chu kỳ bán rã của đồng vị phóng xạ đã cho, thì có thể đo tuổi của các khối đá (khoảng thời gian từ khi chúng được tạo thành). Áp dụng tính tuổi các khối đá ở Trái Đất, ở Mặt Trăng và cả thiên thạch nữa, tất cả các phép đo đều thống nhất khẳng định tuổi khoảng $4,5 \cdot 10^9$ năm. Chẳng hạn dùng đồng vị bền ${}^{40}\text{Ar}$ của khí trơ argon do đồng vị phóng xạ ${}^{40}\text{K}$ phân rã tạo thành có thể tính được tuổi của quặng, bằng cách đo tỷ lệ của ${}^{40}\text{Ar}$ so với ${}^{40}\text{K}$ trong quặng có liên quan: đo tỷ số $\frac{N_{\text{Ar}}}{N_{\text{K}}}$, ở đây N_{K} là số nguyên tử kim còn lại

ở thời điểm phân tích $N_{\text{K}} = N_{\text{K}_0} e^{-\lambda t}$, với N_{K_0} là số nguyên tử kèm có mặt tại thời điểm tạo ra mẫu đá đó bằng sự hóa rắn từ dạng nóng chảy; t là tuổi của mẫu đá; còn N_{Ar} là số nguyên tử argon có mặt ở thời điểm phân tích và đối với mỗi nguyên tử khi phân rã, một nguyên tử argon được tạo ra thì

$$N_{\text{Ar}} = N_{\text{K}_0} - N_{\text{K}}$$

hay

$$N_{\text{Ar}} = N_{\text{K}_0} - N_{\text{K}_0} e^{-\lambda t} = N_{\text{K}_0} (1 - e^{-\lambda t}).$$

Suy ra:

$$\frac{N_{\text{Ar}}}{N_{\text{K}}} = \frac{1 - e^{-\lambda t}}{e^{-\lambda t}} = e^{\lambda t} - 1 ;$$

$$\lambda t = \ln \left(1 + \frac{N_{\text{Ar}}}{N_{\text{K}}} \right) .$$

Thay $\lambda = \frac{\ln 2}{\tau}$ với chu kỳ bán rã của phân rã này là $\tau = 1,25 \cdot 10^9$ năm, ta có:

$$t = \frac{\tau \cdot \ln\left(1 + \frac{N_{Ar}}{N_K}\right)}{\ln 2} = \frac{1,25 \cdot 10^9 \text{ năm} [\ln(1 + 10,3)]}{\ln 2} = 4,37 \cdot 10^9 \text{ năm.}$$

Kết quả này có thể xem là giá trị gần đúng tốt cho tuổi của hệ Mặt Trời.

- Để có thể xác định niên đại, ta có thể dùng một công cụ tiện lợi là đồng vị phóng xạ cacbon ^{14}C . Cacbon trong khí quyển trao đổi với cacbon các cơ thể sống trên Trái Đất, sao cho tất cả các cơ thể sống đều chứa ^{14}C này với một tỷ lệ nhỏ nhưng cố định và duy trì sự trao đổi chừng nào cơ thể đó còn sống. Sự trao đổi với khí quyển sẽ chấm dứt sau khi cơ thể chết và từ đó lượng cacbon phóng xạ có trong cơ thể không được bổ sung nữa sẽ giảm dần với chu kỳ bán rã là $\tau = 5730$ năm. Bằng cách đo lượng cacbon phóng xạ có trong mỗi gam vật chất hữu cơ, ta có thể đo được khoảng thời gian kể từ khi cơ thể đó chết.

- Trong y học hạt nhân, người ta sử dụng những lượng nhỏ chất phóng xạ đưa vào cơ thể người như một công cụ chuẩn đoán bệnh. Các bức ảnh của y học hạt nhân cho ta thông tin về sinh lý học đó là lượng dược phẩm phóng xạ đã được trụ lại trong cơ quan mà ta cần quan tâm.

Y học hạt nhân thường sử dụng nhiều nhất hai đồng vị, đó là ^{99m}Tc ("techneti-99m") và ^{131}I ("iod - 131"). Techneti sẽ được điều khiển đi tới các vị trí trong cơ thể bằng cách gắn nó vào một hóa chất có các dược tính mong muốn. Ví dụ, nó có thể được phối hợp với phát pho hữu cơ để giúp cho vợ khám xương, hoặc nó có thể được gắn với các hạt lưu huỳnh ở dạng keo để giúp khám về gan. Đồng vị ^{131}I là một dược phẩm phóng xạ tốt để nghiên cứu tuyến giáp. Tuyến này có vị trí ở cơ, nó tiết ra hai loại hoocmôn đều chứa tốt để điều chỉnh tốc độ trao đổi chất của cơ thể. Iôt - 131 phân rã bằng tổ hợp bức xạ γ và β với chu kỳ bán rã là 8 ngày.

Đồng vị này của iôt, cũng như ^{99m}Tc được tạo ra như một sản phẩm phân hạch trong các lò phản ứng hạt nhân.

Trong giai đoạn đầu của y học hạt nhân, người ta dùng detector - các máy đếm nhấp nháy (một chất nhấp nháy - phát ra ánh sáng thấy được, khi có các hạt α , β hoặc photon đập vào) để quan sát thận và kiểm tra độ phóng xạ trong thận sau khi người bệnh đã uống được phẩm phóng xạ và nó đã được chuyển tới thận.

Ngày nay người ta dùng camera nhấp nháy cũng hoạt động theo nguyên tắc như trên nhưng hiệu quả hơn nhiều. Sau khi được phẩm phóng xạ được tiêm vào người, chất phóng xạ thường được di chuyển tới một số cơ quan, bộ phận tùy thuộc vào dược tính của chất phóng xạ. Có ít trường hợp, dược phẩm phóng xạ được hấp thụ bởi chỗ tổn thương nhanh hơn so với các mô xung quanh và điều này tạo ra những "điểm nóng" trên hình mà camera nhấp nháy chụp. Ví dụ, chẩn đoán bệnh ở xương, ruột, thận,... Trong đa số trường hợp, chỗ tổn thương hấp thụ chất phóng xạ ít hơn các mô

xung quanh và điều này dẫn đến các "điểm lạnh" trên ảnh chụp. Ví dụ, ảnh chụp tuyến giáp qua hấp thụ ^{131}I . Ở đây, "điểm lạnh" có thể xuất hiện khi hạch tuyến giáp không tạo ra được hoocmôn tuyến giáp hoặc trong ung thư phát triển nhanh đến mức vượt quá sự cung cấp máu. Ảnh chụp được thực hiện bằng cách gắn $^{99\text{m}}\text{Tc}$ vào các tiểu cầu anbumin có đường kính hơi lớn hơn một mao mạch. Các tiểu cầu này được tiêm vào tĩnh mạch ở cánh tay, đi qua tim và "cư trú" trong các mao mạch ở phổi. Bình thường phổi sẽ phóng xạ đều. Nếu có vùng trong phổi bị nghẽn mạch, các tiểu cầu không thể đi tới được vùng đó của phổi, vì vậy sẽ xuất hiện các "điểm lạnh".

- Tia β^- trong phóng xạ của $^{32}_{15}\text{P}$ được dùng làm nguyên tố phóng xạ đánh dấu để kiểm tra sự hấp thụ phân bón của cây trồng.

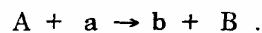
- Tia γ trong phóng xạ của $^{60}_{27}\text{Co}$ có khả năng xuyên thấu lớn dùng diệt khuẩn để bảo quản nông sản, thực phẩm, v.v...

4.5. PHẢN ỨNG HẠT NHÂN. NĂNG LƯỢNG HẠT NHÂN

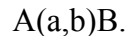
1. Phản ứng hạt nhân

Phản ứng hạt nhân là tương tác hạt nhân do hạt "đạn" bắn phá vào hạt nhân rồi dẫn đến sau phản ứng thường sinh ra hai hạt: một hạt nhân và một hạt bay ra.

Phản ứng hạt nhân được diễn tả dưới dạng một quá trình như sau:



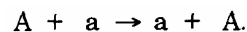
Phản ứng này có thể viết gọn:



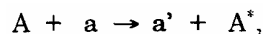
Ký hiệu nêu trên có nghĩa là hạt a bắn phá vào hạt nhân A, sẽ làm bay ra hạt b và sinh ra hạt nhân B.

Trong các thí nghiệm người ta dùng các máy gia tốc để tạo được các hạt "đạn" năng lượng lớn có thể xuyên vào hạt nhân gây ra phản ứng hạt nhân.

Người ta phân loại phản ứng hạt nhân theo hạt bắn vào (a), hạt bay ra (b) và hạt nhân B được sinh ra. Nếu hạt bắn vào và hạt bay ra giống nhau, ta có *phản ứng tán xạ* và nếu hạt nhân B ở trạng thái năng lượng thấp (trạng thái cơ bản) thì tán xạ là *đàn hồi*. Khi đó trạng thái nội tại của các hạt tương tác không thay đổi, nhưng động lượng và động năng các hạt thay đổi:



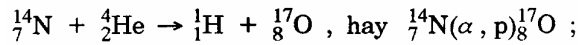
Nếu hạt nhân B ở trạng thái kích thích thì tán xạ là *không đàn hồi*. Khi đó có sự thay đổi trạng thái nội tại của các hạt tương tác:



Trong đó A^* - chỉ hạt nhân ở trạng thái năng lượng bị kích thích ;

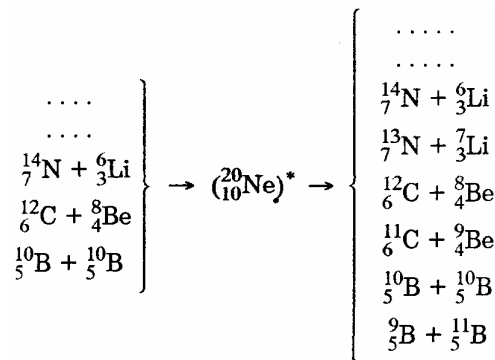
a' - chỉ hạt a ở trạng thái khác trước.

Trong phản ứng hạt nhân mà hạt a khác hạt b, hạt nhân A khác hạt nhân B, thì có sự thay đổi bản chất các hạt tương tác. Ví dụ phản ứng hạt nhân:



Ngoài ra còn có một loại phản ứng hoàn toàn khác. Ở loại phản ứng này hạt bắn vào và hạt nhân bị bắn tạo thành một hạt nhân mới gọi là *hạt nhân hợp phần* tồn tại ở trạng thái kích thích trong một thời gian ngắn rồi phân rã (cỡ 10^{-16} s, nhưng vẫn rất lớn so với thời gian hạt bắn vào đi xuyên qua hạt nhân (cỡ 10^{-21} s)).

Một hạt nhân hợp phần thường có nhiều phản ứng khác nhau tạo thành và hạt nhân hợp phần này có nhiều cách phân rã khác nhau. Ví dụ sau đây mô tả phản ứng cùng tạo thành hạt nhân hợp phần ${}^{20}_{10}\text{Ne}$ ở trạng thái kích thích $({}^{20}_{10}\text{Ne})^*$ và các dạng phân rã của hạt nhân này:



Các tương tác hạt nhân đều tuân theo các định luật bảo toàn: bảo toàn năng lượng, bảo toàn động lượng, bảo toàn số nuclon, bảo toàn điện tích. Trong những quá trình sinh-hủy, các tương tác hạt nhân còn tuân theo những định luật bảo toàn khác nữa, tùy thuộc tính chất phức tạp của quá trình phân hủy đó.

2. Năng lượng của phản ứng hạt nhân

Năng lượng hạt nhân: Năng lượng tạo thành hạt nhân bền vững được gọi là năng lượng hạt nhân. Năng lượng này có được là do các nuclon liên kết trong hạt nhân tạo ra. Vì các nuclon được giữ trong hạt nhân bởi lực hạt nhân mạnh, nên phải cần một ít triệu electron-vôn mới bứt được một trong số chúng ra.

Trong một phản ứng hạt nhân, năng lượng có thể được tỏa ra (phản ứng tỏa nhiệt) hay bị hấp thụ (phản ứng thu nhiệt). Phần năng lượng trao đổi trong phản ứng hạt nhân có được là do độ hụt khối lượng nghỉ của các hạt trước và sau phản ứng. Theo hệ thức Einstein, ta có phần năng lượng thay đổi đó là:

$$Q = c^2(M_0 - M), \quad (4-25)$$

trong đó M_0 và M - khối lượng nghỉ của các hạt trước và sau phản ứng.

Trong phản ứng tỏa nhiệt $Q > 0$, phần năng lượng Q tỏa ra gọi là năng lượng của phản ứng hạt nhân. Năng lượng tỏa ra dưới dạng động năng của các hạt sau phản ứng. Phản ứng tỏa nhiệt cũng có thể xảy ra khi hai hạt trước phản ứng đều nằm yên.

Trong phản ứng thu nhiệt $Q < 0$, để phản ứng xảy ra ta phải cung cấp năng lượng cho hệ từ bên ngoài dưới dạng truyền động năng cho các hạt tham gia phản ứng. Năng lượng nhỏ nhất cần thiết để gây ra phản ứng thu nhiệt gọi là năng lượng ngưỡng của phản ứng và được xác định theo công thức

$$W_{ng} = |Q| \frac{(M_A + m_a)}{M_A} \quad (4-26)$$

Như vậy năng lượng ngưỡng W_{ng} bao giờ cũng lớn hơn giá trị tuyệt đối của nhiệt lượng Q ($W_{ng} > |Q|$). Ví dụ trong phản ứng ${}^3\text{T}(p,n){}^3\text{He}$ thì $Q = -0,76$ MeV.

Theo (4- 26) ta có:

$$W_{ng} = 0,76 \frac{(3 + 1)}{3} \approx 1,01 \text{ MeV.}$$

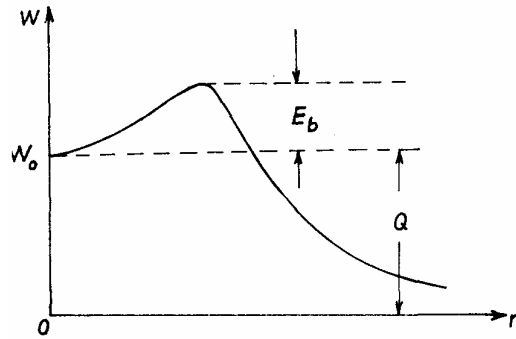
Sau đây ta xét hai loại phản ứng hạt nhân đặc biệt tỏa năng lượng: phản ứng phân hạch và nhiệt hạch.

4.6. PHẢN ỨNG PHÂN HẠCH. PHẢN ỨNG DÂY CHUYỀN VÀ Lò PHẢN ỨNG HẠT NHÂN

1. Phản ứng phân hạch

Theo thực nghiệm thì một trong các phản ứng thông dụng nhất là việc tạo ra các hạt nhân hợp phân khi một hạt nhân nặng (có số khối $A > 230$), hấp thụ một neutron nhiệt (neutron nhiệt là neutron ở trạng thái cân bằng với vật chất ở nhiệt độ phòng, có động năng trung bình chỉ cỡ 0,04 eV). Đa số các hạt nhân hợp phân đó đều vỡ thành hai mảnh hạt nhân có khối lượng trung bình và phát ra vài ba neutron thứ cấp (neutron mới) kèm theo giải phóng năng lượng. Phản ứng hạt nhân này gọi là phản ứng *phân hạch*.

Trong phản ứng phân hạch, neutron nhiệt được hấp thụ đã đưa vào hạt nhân một lượng năng lượng kích thích. Lượng năng lượng kích thích mà neutron nhiệt đưa vào hạt nhân đúng bằng công cần thiết để bứt một neutron ra khỏi hạt nhân đó, tức là bằng năng lượng liên kết W_{lk} của neutron. Sự phân hạch chỉ xảy ra nếu neutron được hấp thụ cung cấp cho hạt nhân một năng lượng kích thích W_{lk} đủ lớn để vượt qua bờ rào thế E_b . Theo cơ học lượng tử, vì còn có khả năng xuyên đường ngầm, nên W_{lk} không cần phải lớn cỡ chiều cao E_b của bờ rào thế. Hình 4-3 cho thấy, đường cong thế năng ở các giai đoạn khác nhau trong quá trình phân hạch. Ở đây r là tham số biến dạng, biểu thị phạm vi mà hạt nhân dao động chệch khỏi dạng cầu, còn khi hai mảnh đã tách rời nhau thì r chỉ là khoảng cách giữa tâm của chúng, Q là năng lượng phân rã, đó là



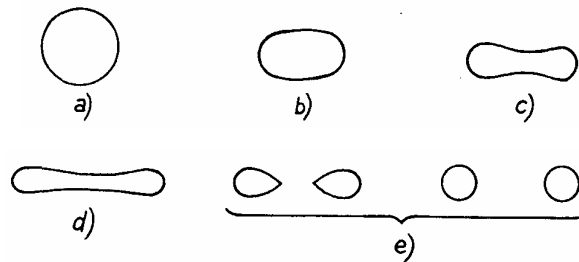
Hình 4-3

khoảng cách năng lượng giữa trạng thái ban đầu. (W_0) và trạng thái cuối cùng của hạt nhân phân hạch ; E_b là chiều cao bờ rào thế cần phải vượt qua (hay xuyên đường ngầm qua) .

Đối với các hạt nhân có $W_{lk} > E_b$ (ví dụ ^{235}U và ^{239}Pu : ^{235}U có $W_{lk} = 6,5 \text{ MeV}$ và $E_b = 5,2 \text{ MeV}$; còn ^{239}Pu có $W_{lk} = 6,4 \text{ MeV}$ và $E_b = 4,8 \text{ MeV}$) thì sự phân hạch bằng cách hấp thụ neutron nhiệt có thể xảy ra. Đối với các hạt nhân có $W_{lk} < E_b$ (ví dụ ^{238}U và ^{243}Am : ^{238}U có $W_{lk} = 4,8 \text{ MeV}$ và $E_b = 5,7 \text{ MeV}$; còn ^{243}Am có $W_{lk} = 5,5 \text{ MeV}$ và $E_b = 5,8 \text{ MeV}$), sao cho không có đủ năng lượng đối với neutron nhiệt để vượt qua hàng rào thế hoặc xuyên đường ngầm qua nó có hiệu quả, thì trong trường hợp này hạt nhân kích thích không bị phân rã mà sẽ giải phóng năng lượng kích thích bằng cách phát ra các tia gamma rồi trở về trạng thái cơ bản. Những dự đoán đó đã được khẳng định.

Sau đây chúng ta đưa ra một mẫu mô hình diễn tả quá trình phân hạch hạt nhân:

Khi một hạt nhân nặng giả sử là ^{235}U , hấp thụ một neutron chậm (có động năng cỡ động năng neutron nhiệt) (xem hình 4-4a)



Hình 4-4

tạo thành hạt nhân ^{236}U ở trạng thái kích thích cao, có năng lượng dư và dao động rất mạnh (xem hình 4-4b). Chuyển động dao động mạnh này của hạt nhân giống như một giọt chất lỏng tích điện dao động mạnh và dù spin hay muon cũng sẽ dẫn đến tạo thành dạng thắt cổ chai, rồi bắt đầu tách thành hai "khối cầu" tích điện xa dần ra (xem hình 4-4c) . Khi có các điều kiện thích hợp thì lực đẩy tĩnh điện giữa hai "khối cầu" đó đẩy chúng duỗi dài ra xa nhau (xem hình 4-4d) và làm đứt chỗ thắt cổ chai. Hai mảnh này tách ra và các neutron được phát ra, vì còn mang một số năng lượng kích thích còn dư,

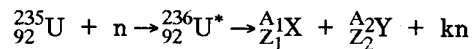
nên chúng bay ra xa nhau và sự phân hạch đã xảy ra (xem hình 4-4e).

Ta có thể quan sát được hai mảnh bay ra ở phản ứng phân hạch hạt nhân trong thí nghiệm buồng sương. Hai mảnh này tạo thành hai vết để lại trong khí của buồng sương. Các vết này không có chiều dài như nhau, ngụ ý rằng hai mảnh không có cùng khối lượng và động năng; còn khối lượng và động năng của hai mảnh như nhau là một sự kiện rất hiếm hoi.

Năng lượng phân hạch hạt nhân:

Khi hạt nhân phân hạch thì khối lượng tổng cộng các mảnh vỡ ra luôn luôn nhỏ hơn khối lượng hạt nhân nặng ban đầu dẫn đến tỏa năng lượng. Phần năng lượng tỏa ra tương ứng với độ hụt khối đó gọi là năng lượng phân hạch hạt nhân.

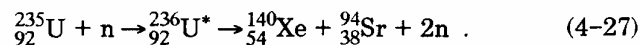
Ví dụ: Hạt nhân $^{235}_{92}\text{U}$ hấp thụ neutron nhiệt tạo thành hạt nhân $^{236}_{92}\text{U}$ ở trạng thái kích cao, rồi vỡ thành hai mảnh $^{A_1}_{Z_1}\text{X}$, $^{A_2}_{Z_2}\text{Y}$ và giải phóng ra hai, ba neutron:



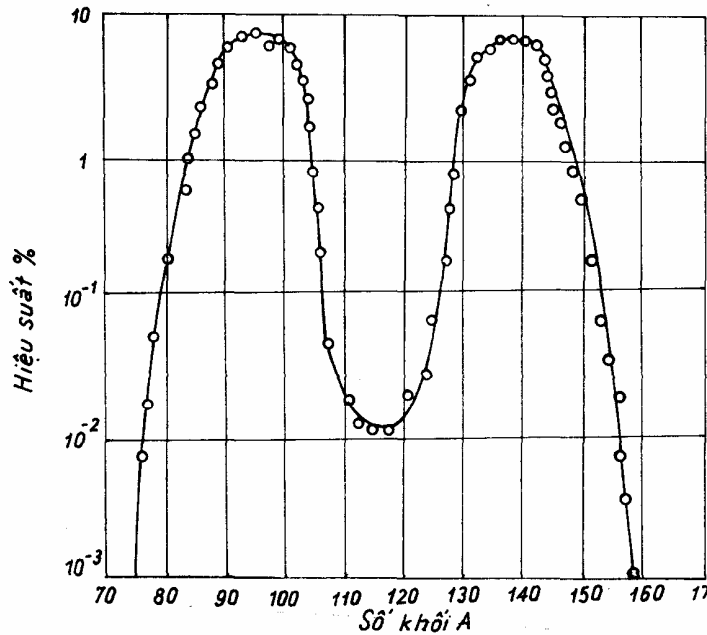
trong đó $Z_1 + Z_2 = 92$; $A_1 + A_2 + k = 236$, với $k = 1, 2, 3$.

Tùy theo điều kiện của phản ứng mà hai mảnh $^{A_1}_{Z_1}\text{X}$, $^{A_2}_{Z_2}\text{Y}$ là những hạt nhân của nhiều chất khác nhau. Xác suất xuất hiện hai hạt nhân $^{A_1}_{Z_1}\text{X}$, $^{A_2}_{Z_2}\text{Y}$ phụ thuộc vào số khối A của chúng. Hình 4-5 biểu diễn sự phân bố số khối A của các mảnh được tạo ra khi ^{235}U được bắn phá bởi các neutron nhiệt (tương ứng với sự phân hạch được mô tả bằng phương trình (4-27)). Từ đồ thị ở hình 4-5 ta thấy các số khối có xác suất lớn nhất tập trung xung quanh $A \approx 95$ và $A \approx 140$; còn xác suất cực tiểu khi $A = 118$ (bằng nửa số khối của hạt nhân ^{236}U).

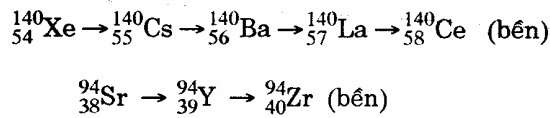
Như vậy hai mảnh vỡ ra trong phân hạch hạt nhân bằng nhau là rất ít xảy ra. Sau đây là một ví dụ phân hạch điển hình: một hạt nhân ^{235}U hấp thụ một neutron nhiệt rồi phân hạch thành hai mảnh và hai mảnh này lại nhanh chóng phát ra hai neutron nhanh để lại ^{140}Xe và ^{94}Sr như hai mảnh phân hạch. Ta có:



Cả ^{140}Xe và ^{94}Sr đều rất không bền, chúng phân rã β^- cho tới khi có một sản phẩm bền cuối cùng:



Hình 4-5. (thang của trục tung là thang lôgarit).



Trong mọi trường hợp phản ứng phân hạch, hạt nhân gian đều tỏa ra năng lượng. Năng lượng phân hạch của mỗi hạt nhân toán khoảng 200 MeV, lớn hơn nhiều so với năng lượng vài MeV được trải phóng trong các phản ứng hạt nhân tỏa nhiệt điển hình. Năng lượng phân hạch 200 MeV được phân bố như sau:

- Động năng các mảnh phân hạch: 170 MeV ;
- Năng lượng các neutron phân hạch: 5 MeV ;
- Năng lượng tia γ : 10 MeV
- Năng lượng tia β : 5 MeV ;
- Năng lượng các neutrino phát ra: 10 MeV.

Ta thấy trong nhiều phản ứng phân hạch, hạt nhân hợp phần dễ được tạo thành với neutron nhiệt (có động năng trung bình cỡ 0,04 eV). Các neutron sinh ra trong mỗi phân hạch đều có động năng vào cỡ 2 MeV, vì vậy cần làm chậm neutron đến năng lượng nhiệt để dễ dàng gây ra các phản ứng phân hạch khác.

2. Phản ứng dây chuyền và lò phản ứng hạt nhân

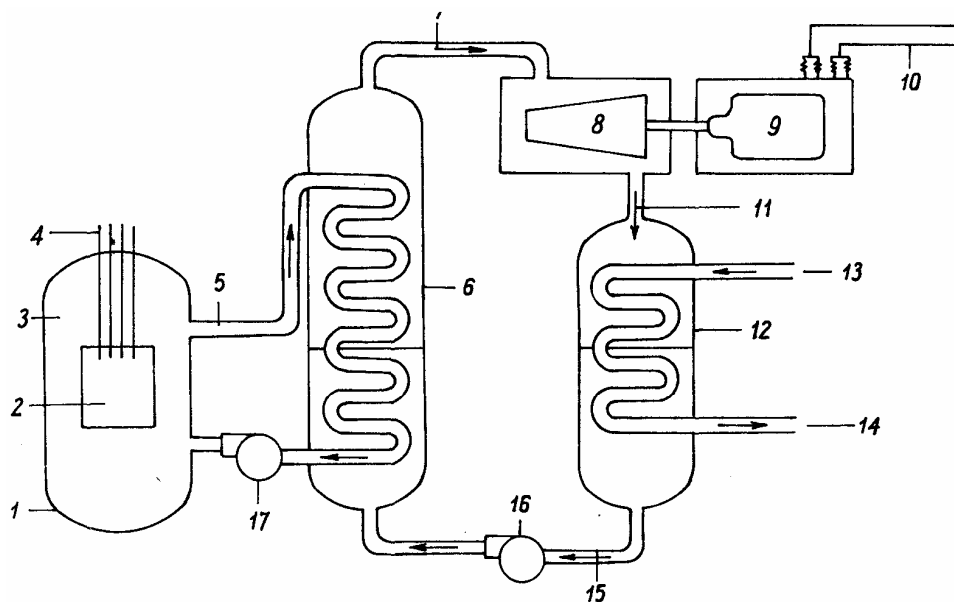
a/ *Phản ứng dây chuyền*: Năng lượng phân hạch của một hạt nhân tỏa ra tuy lớn nhưng năng lượng tỏa ra của chỉ một hạt nhân thôi thì chưa đủ để sử dụng. Để sử dụng trên quy mô lớn, năng lượng được tỏa ra trong quá trình phân hạch, ta phải tạo ra được nhiều phân hạch kế tiếp nhau nối thành chuỗi lan khắp nhiên liệu hạt nhân. Quá trình phân hạch như vậy gọi là phản ứng dây chuyền. Phản ứng dây chuyền có thể xảy ra rất

nhanh (như bom hạt nhân) hoặc có thể điều khiển được (như trong lò phản ứng hạt nhân). Nhưng muốn phản ứng dây chuyền thực hiện được thì số neutron mới được tạo ra trung bình lớn hơn số neutron bị mất đi, san cho tất cả các neutron sau đó lại có thể bắn phá các hạt nhân gian khác gần đó và phản ứng như thế cứ tiếp diễn thành một dây chuyền.

b) *Lò phản ứng hạt nhân*: Trong các neutron mới được sinh ra có một số neutron bị mất mát đi không tham gia vào phản ứng dây chuyền. Số neutron bị mất này do bị rò rỉ ra ngoài lò phản ứng, ra khỏi vùng hoạt động, bị hấp thụ do tạp chất trong nhiên liệu, do ^{238}U mà không gây phân hạch hoặc mất đi neutron do chất làm chậm,...

Như vậy để có phản ứng dây chuyền, ta phải xây dựng lò phản ứng hạt nhân hoạt động sao cho số neutron bị mất đi do nhiều nguyên nhân khác nhau nhỏ đến mức mong muốn và ít nhất số neutron mới sinh ra bằng số neutron mất đi. Chúng ta hình dung rằng, trong một lò phản ứng hạt nhân với công suất đầu ra không đổi, giả sử có một mẫu gồm 1000 neutron nhiệt ở trong vùng hoạt động của lò phản ứng. Các neutron này sẽ tạo ra 1330 neutron do phân hạch bởi tương tác với nhiên liệu ^{235}U và hơn 40 neutron bằng các phân hạch của ^{238}U , như thế đã tạo ra 370 neutron nhanh mới. Chính đúng một số như thế neutron sẽ bị mất do các nguyên nhân kể trên, còn lại 1000 neutron tiếp tục phản ứng dây chuyền. Kết quả ta thu được cái lợi là mỗi neutron trong số 370 neutron mới được sinh ra trong quá trình phân hạch đã góp 200 MeV vào vùng hoạt động của lò và làm cho lò nóng lên. Điều quan trọng mà ta quan tâm khi xây dựng lò phản ứng hạt nhân là tỷ số của số neutron có mặt ở đầu một thế hệ nào đó và số neutron có mặt ở đầu một thế hệ kế tiếp, tỷ số này gọi là hệ số nhân k của lò phản ứng. Nếu $k = 1$, sự hoạt động của lò phản ứng gọi được là *tới hạn*. Đây là phản ứng dây chuyền điều khiển được trong lò phản ứng để sản xuất ra năng lượng đều ổn định. Thực tế lò phản ứng được xây dựng sao cho vượt hạn ($k > 1$), để cố hoạt động tới hạn ta phải điều chỉnh hệ số nhân neutron bằng cách đưa các *thanh điều khiển* có khả năng hấp thụ mạnh neutron vào trong vùng hoạt động của lò (các thanh này chứa các vật liệu như cadmi), còn để bù lại số neutron bị mất do các sản phẩm phân hạch (có khả năng hấp thụ neutron) tích tụ lại trong vùng hoạt động của lò (có xu hướng cho lò hoạt động *dưới hạn* $k < 1$) ta rút các thanh điều khiển ra ở vị trí thích hợp.

Trong gian tự nhiên có chứa 0,7% đồng vị ^{235}U và 99,3% đồng vị ^{238}U . Các neutron nhiệt chỉ làm phân hạch ^{235}U , mà không làm phân hạch ^{238}U . Trong lúc đó, sự phân hạch được gây ra một cách có hiệu quả nhất là bởi các neutron nhiệt. Nhưng các neutron được



Hình 4-6. 1- Bình lò phản ứng ; 2- vùng hoạt động của lò phản ứng ; 3- nước tải nhiệt ; 4- các thanh điều khiển ; 5- nước nóng ; 6- máy sinh hơi ; 7- hơi áp suất cao ; 8- tuabin ; 9- máy phát điện ; 10- điện năng ; 11- hơi áp suất thấp ; 12- bộ ngưng tụ hơi ; 13- lối vào của chất làm mát ; 14- lối ra của chất làm mát ; 15- nước áp suất thấp ; 16- bơm nước áp suất cao ; 17- bơm nước mát.

tạo ra từ sự phân hạch là các neutron nhanh với động năng cỡ 2 MeV. Vì vậy các neutron nhanh cấp được làm chậm lại tới năng lượng nhiệt bằng cách trộn nhiên liệu man với chất làm chậm, chất này làm chậm các neutron bằng những va chạm đàn hồi và không làm mất đi các neutron bằng cách hấp thụ chúng mà không gây phân hạch. Mặt khác, để lò phản ứng hạt nhân hoạt động có hiệu quả, ta phải làm giàu nhân tạo nhiên liệu hạt nhân để cho nó chứa nhiều ^{235}U (khoảng 3% ^{235}U). Nhưng khi có một khối lượng ^{235}U đủ lớn thì phản ứng dây chuyền tự phát có thể xảy ra và chỉ sau một thời gian ngắn một nhiệt lượng lớn được tỏa ra và gây ra vụ nổ hạt nhân. Đó là nguyên tắc chế tạo bom hạt nhân. Khối lượng tối thiểu của gian để xảy ra phản ứng dây chuyền tự phát gọi là *khối lượng tới hạn* (đối với ^{235}U nguyên chất là 1 kg, đối với plutôni ^{239}Pu nguyên chất là 1,235 kg).

Hình 4-6 cho một sơ đồ đơn giản hóa của một nhà máy điện hạt nhân hoạt động dựa trên lò phản ứng kiểu nước nén.

Trong lò phản ứng này, nước vừa được dùng như chất làm chậm, vừa như một môi trường tải nhiệt. Nước ở nhiệt độ và áp suất cao (cỡ 600 k và 150 atm) luân chuyển qua lò phản ứng và truyền nhiệt từ vùng hoạt động của lò tới máy sinh hơi nước tạo ra hơi nước có áp suất cao làm quay tua bin chạy máy phát điện. Hơi nước áp suất thấp từ tua bin được ngưng tụ thành nước rồi được bơm về máy sinh hơi. Các quá trình như thế tiếp tục tạo thành chu kỳ hoạt động của lò. Chất thải phóng xạ là điều cần lưu ý trong xây dựng nhà máy điện nguyên tử, vì nó nguy hại đến môi trường sống của con người.

4-7. PHẢN ỨNG NHIỆT HẠCH

1. Phản ứng nhiệt hạch

Phản ứng kết hợp hai nuclon hay hai hạt nhân nhẹ với nhau để tạo thành một hạt nhân nặng hơn và giải phóng năng lượng gọi là phản ứng nhiệt hạch (hay sự tổng hợp hạt nhân).

Ví dụ: Phản ứng kết hợp một proton và một neutron phản ứng nhiệt hạch điển hình) để tạo thành một đơteron:



Phản ứng kết hợp hai đơteron tạo thành một hạt α :



Tuy một phản ứng kết hợp hạt nhân tỏa năng lượng ít hơn một phản ứng phân hạch (có 200 MeV), nhưng nếu tính năm lượng tỏa ra trên một đơn vị khối lượng thì phản ứng nhiệt hạch tỏa năng lượng nhiều hơn phản ứng phân hạch (vì khối lượng của các hạt tương tác trong phản ứng nhiệt hạch quá nhỏ).

Ví dụ: 1 kg hỗn hợp đồng vị hydro nặng tỏa ra năng lượng 9,2.107 kWwh, còn 1 kg ${}^{235}\text{U}$ chỉ tỏa ra 2,8.107 kWh.

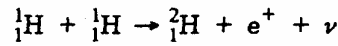
Năng lượng được giải phóng trong phản ứng nhiệt hạch có thể được giải thích như sau: Đối với các hạt nhân có số khối A nhỏ thì năng lượng liên kết của một nuclon tăng khi số khối A tăng. Do đó năng lượng liên kết của một nuclon của một hạt nhân nặng hơn được tạo thành từ sự ứng hợp hai hạt nhân nhẹ hơn sẽ lớn hơn so với mỗi hạt nhân thành phần hợp thành. Năng lượng liên kết cao hơn có nghĩa là khối lượng nghỉ nhỏ hơn và độ hụt khối đã biến đổi thành năng lượng được giải phóng.

Các phản ứng . tổng hợp hạt nhân rất khó xảy ra, vì các hạt nhân có lực đẩy Culong rất lớn ngăn cản chúng đến gần nhau. Để hai hạt nhân tiến đến gần nhau lọt vào vùng tác dụng của lực hút hạt nhân và tổng hợp với nhau, chúng phải được cung cấp một năng lượng rất lớn để thắng lực đẩy Culong. Việc cung cấp năng lượng cho các hạt nhân bằng cách nâng cao nhiệt độ của khối vật liệu để các hạt nhân có động năng chuyển động nhiệt đủ lớn xuyên qua được bờ rào thế Culong (bờ rào thế này phụ thuộc điệ tích và bán kính của hai hạt nhân tương tác) . Ví dụ, đối với hai đơteron thì bờ rào thế đó cao khoảng 200 KeV và bờ rào thế đó cao lên tương ứng đối với các hạt có điện tích cao hơn.

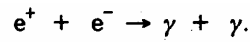
Trong vũ trụ có tồn tại những phản ứng nhiệt hạch. Chẳng hạn, phản ứng tổng hợp trong Mặt Trời là một quá trình gồm nhiều bước, trong đó hydro được đốt cháy thành heli (nhiệt độ ở tâm Mặt Trời là $1,5.10^7$ K). Trong các nghiên cứu nhiệt hạch, nhiệt độ thường được cho dưới dạng động năng, nên người ta thường nói "nhiệt độ ở tâm Mặt Trời là 1,3 KeV tính theo hệ thức $K = kT$, ở đây k là hằng số Boltzmann").

Quá trình này được thực hiện bởi chu trình proton- proton (p-p):

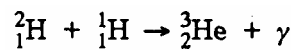
Đầu tiên là va chạm nhiệt của hai proton để tạo thành đơteron (${}^2_1\text{H}$), đồng thời tạo ra một pôzitron (e^+) và một neutrino (ν):



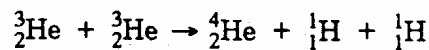
Pôzitron rất nhanh gặp một electron tự do trong Mặt Trời và chúng hủy nhau với năng lượng ứng với khối lượng nghỉ của chúng chuyển thành hai photon gamma (γ):



Khi đơteron đã được tạo ra, nó nhanh chóng va chạm với các proton khác để tạo thành hạt nhân ${}^3_2\text{He}$ và photon γ :

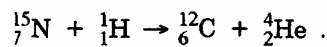
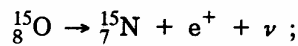
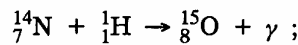
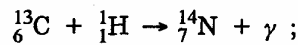
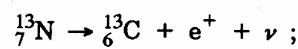
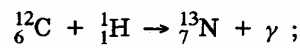


Cuối cùng có thể hai hạt nhân ${}^3_2\text{He}$ sẽ gặp nhau và tạo thành hạt α (${}^4_2\text{He}$) và hai proton:



Kết quả năng lượng tổng cộng tỏa ra theo những bước ứng sẽ trong một chu trình proton - proton là 26,7 MeV.

Theo Bethe thì phản ứng nhiệt hạch trong lòng các vì sao được giả thiết xảy ra theo chu trình cacbon sau đây:

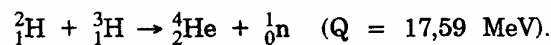
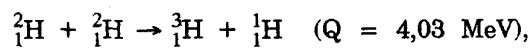
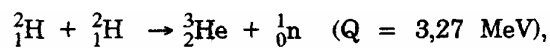


Nhìn tổng quát lại, chúng ta thấy chu trình cacbon rất cuộc chính là sự tổng hợp bốn proton tạo thành một hạt α (${}^4_2\text{He}$) - hạt nhân hêli). Mỗi hạt nhân hêli tạo thành sẽ tỏa ra năng lượng 26 MeV và cứ 4 gam được tạo thành thì tỏa ra năng lượng 700 000 kWh. Như vậy phản ứng nhiệt hạch là một trong những neutron năng lượng của Mặt Trời và các vì sao.

2. Phản ứng nhiệt hạch không điều khiển và điều khiển được

a) *Phản ứng nhiệt hạch không điều khiển*: Phản ứng nhiệt hạch xảy ra chỉ tồn tại trong một khoảng thời gian rất ngắn (cỡ 10^{-6} s) rồi tắt hẳn, gọi là phản ứng nhiệt hạch không điều khiển. Để phản ứng nhiệt hạch xảy ra, cần có nhiệt độ cao trong một khối vật liệu (lớn hơn cỡ 10^8 K). Dùng bom hạt nhân có thể tạo được nhiệt độ cao đó. Phản ứng nhiệt hạch không điều khiển, được vận dụng làm bom nhiệt hạch (hay còn gọi là bom khinh khí - bom H).

b) *Phản ứng nhiệt hạch điều khiển được*: Muốn tạo được một lò phản ứng nhiệt hạch duy trì và điều khiển được là điều cực kỳ khó khăn. Phản ứng theo chu trình proton - proton chỉ thành công ở trong Mặt Trời do ở đó mật độ pa tũn là cực lớn. Phản ứng này không phù hợp đối với một lò phản ứng nhiệt hạch ở Trái Đất, vì mật độ proton không lớn, làm phản ứng xảy ra rất chậm. Tuy vậy, con người vẫn hy vọng trong tương lai tìm ra một neutron năng lượng mới thay cho các nhiên liệu hóa thạch được đốt hết, đó là neutron năng lượng nhiệt hạch. Các phản ứng đáng chú ý nhất để có thể sử dụng được trên Trái Đất là các phản ứng đơteron - đơteron và đơteron - triton:



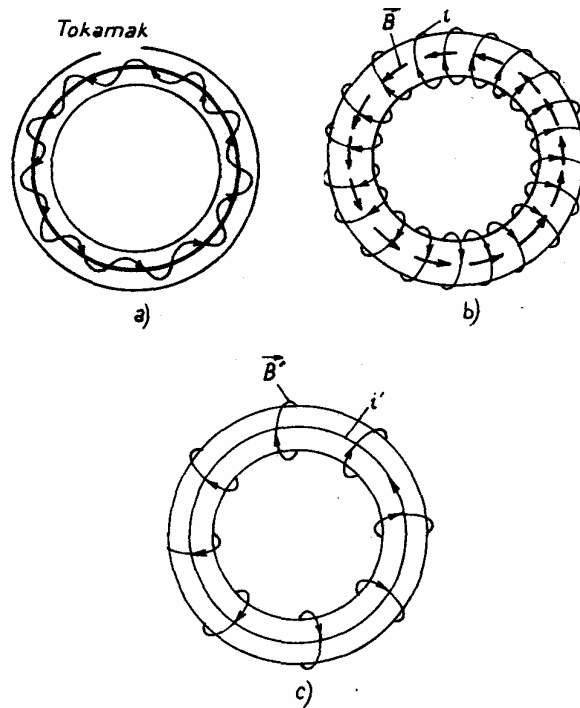
Hy vọng nêu trên là lớn vì sự tổng hợp các đơteri (hạt nhân của nó được gọi là đơteron) được lấy từ nước biển là vô hạn. Để có một lò phản ứng nhiệt hạch hoạt động thành công, cần có ba điều kiện:

1. *Mật độ hạt (n) cao*: Mật độ các hạt (chẳng hạn như đơteron) cần phải đủ lớn để cho tần số va chạm tương tác đơteron - đơteron là bảo đảm đủ lớn. Khi ở nhiệt độ cao khí đơteri sẽ bị ion hóa hoàn toàn thành plasma trung hòa gồm các hạt nhân đơteron và các electron (trạng thái gồm các hạt nhân thuần túy và các electron tự do gọi là plasma).

2. *Nhiệt độ plasma (T) cao*: Khi plasma ở nhiệt độ cao thì các đơteron va chạm sẽ có đủ năng lượng xuyên qua bờ rào thế Culong, nếu không bờ rào thế giữ chúng tách xa nhau. Trong các phòng thí nghiệm, người ta tạo ra được plasma ở nhiệt độ cỡ $23 \cdot 10^7$ K.

3. *Thời gian giữ plasma τ dài*: Nếu plasma được giữ nóng đủ lâu thế bảo đảm cho mật độ và nhiệt độ của nó đủ cao nhằm tạo đủ số nhiên liệu được tổng hợp.

Một lò phản ứng nhiệt hạch hoạt động được cần phải thỏa mãn điều kiện (gọi là tiêu chuẩn Lawson):



Hình 4-7

$$n\tau > \sim 10^{20} \text{ s.m}^{-3} \quad (4-28)$$

và cần phải có nhiệt độ plasma T cao hơn $\sim 10^8 \text{ K}$ ($kT \approx 9 \text{ KeV}$).

Từ (4-28) gọi cho chúng ta thấy có thể lựa chọn hoặc việc giữ được nhiều hạt trong thời gian ngắn hoặc giữ được ít hạt trong thời gian dài. Thực tế không thể có một bình chứa rắn nào có thể chịu được một nhiệt độ cao của phản ứng nhiệt hạch, vì vậy cần phải sử dụng các kỹ thuật trí tuệ để giữ plasma theo yêu cầu đặt ra. Một trong những kỹ thuật đó là: lò phản ứng tổng hợp thử nghiệm buồng từ hình phỏng xuyên (tên viết tắt là *tokamak*) Trong lò phản ứng kiểu này, từ trường giữ plasma là một vỏ bao các đường sức (trên hình 4-7a đường xoắn xung quanh hình xuyên chỉ bản chất của từ trường giữ; còn vòng tròn in đậm chỉ plasma được giữ). Từ trường này tổng hợp từ từ trường phỏng xuyên do các dòng điện cuốn quanh hình xuyên tạo ra (h.4-7b) và từ trường hình phỏng poloid do dòng điện được cảm ứng trong plasma tạo ra (h.4-7c). Chính dòng điện được cảm ứng trong plasma cũng được dùng để đốt nóng plasma.

Đến nay con người đã cố gắng đạt nhiều kết quả, song việc xây dựng một nhà máy điện nhiệt hạch vẫn chưa thực hiện được và hy vọng trong một vài chục năm tới điều này sẽ trở thành hiện thực. Một kỹ thuật khác để giữ plasma tạo ra phản ứng nhiệt hạch là tổng hợp nhiệt hạch bằng tia laze được gọi là sự giữ bằng quán tính. Với kỹ thuật này, nhiên liệu đơteri-triti được "bắn" bằng các xung laze cực mạnh từ các phía, làm cho nó nén lại vừa làm tăng nhiệt độ (lên tới 10^8 K) vừa làm tăng mật độ (lên cỡ 10^3 lần) tạo ra phản ứng nhiệt hạch đơteri-triton trước khi các hạt tương tác rời nhau.

Sự giữ bằng quán tính sẽ làm cho lò phản ứng hoạt động với mật độ lớn hơn nhiều và trong một thời gian ngắn hơn nhiều so với các thiết bị giữ bằng từ trường như các tokamak. Dù rằng tính khả thi của sự tổng hợp nhiệt hạch công suất vẫn còn chưa được minh chứng, nhưng chúng ta vẫn còn nhiều hy vọng vào việc hình thành nhà máy điện nhiệt hạch trong thời gian gần đây.

PHỤ LỤC

1. Chỉ ra rằng phương trình truyền sóng điện từ:

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} = 0 \quad (1)$$

là không bất biến đối với các phép biến đổi Gaulei.

Giải: Ta chỉ ra dạng phương trình (1) sẽ thay đổi khi phương trình được biểu diễn qua các biến số mới x', y', z', t' . Từ các kết quả của các phép biến đổi Gahlei, ta có:

$$\begin{aligned} \frac{\partial x'}{\partial x} &= 1, \quad \frac{\partial x'}{\partial t} = -v, \quad \frac{\partial t'}{\partial t} = \frac{\partial y'}{\partial y} = \frac{\partial z'}{\partial z} = 1, \\ \frac{\partial x'}{\partial y} &= \frac{\partial x'}{\partial z} = \frac{\partial y'}{\partial x} = \frac{\partial t'}{\partial x} = \dots = 0; \end{aligned} \quad (2)$$

và từ quy tắc đạo hàm các hàm số kép, ta có:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi}{\partial x} &= \frac{\partial \phi}{\partial x'} \frac{\partial x'}{\partial x} + \frac{\partial \phi}{\partial y'} \frac{\partial y'}{\partial x} + \frac{\partial \phi}{\partial z'} \frac{\partial z'}{\partial x} + \frac{\partial \phi}{\partial t'} \frac{\partial t'}{\partial x} = \frac{\partial \phi}{\partial x'} \\ \text{và} \quad \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} &= \frac{\partial^2 \phi}{\partial x'^2} \end{aligned} \quad (3)$$

Tương tự:

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = \frac{\partial^2 \phi}{\partial y'^2}, \quad \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} = \frac{\partial^2 \phi}{\partial z'^2} \quad (4)$$

Mặt khác:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi}{\partial t} &= -v \frac{\partial \phi}{\partial x'} + \frac{\partial \phi}{\partial t'}, \quad \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 \phi}{\partial t'^2} = \\ &= -2v \frac{\partial^2 \phi}{\partial x' \partial t'} + v^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x'^2} \end{aligned} \quad (5)$$

Thay các biểu thức (2) - (5) vào phương trình sóng (1), ta có:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x'^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y'^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial z'^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial t'^2} + \\ + \frac{1}{c^2} \left(2v \frac{\partial^2 \phi}{\partial x' \partial t'} - v^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x'^2} \right) = 0 \end{aligned} \quad (6)$$

Ta thấy dạng phương trình (6) khác với dạng phương trình (1), như vậy phương trình truyền sóng điện từ là không bất biến đối với các phép biến đổi Gahlei.

Phương trình sóng điện từ được suy ra từ các phương trình Maxwell. áp dụng các tính toán ở trên cho các phương trình Maxwell, chúng ta thấy rằng các phương trình Maxwell cũng không bất biến với các phép biến đổi Galilei.

2. Chỉ ra rằng phương trình sóng điện từ

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} = 0 \quad (7)$$

là bất biến đối với phép biến đổi Lorentz .

Giải: Ta chỉ ra phương trình (7) giữ nguyên dạng khi được biểu diễn qua các tọa độ x', y', z', t' . áp dụng các biến đổi Lorentz ta có:

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial x'}{\partial x} &= \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}, & \frac{\partial x'}{\partial t} &= \frac{v}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}; \\ \frac{\partial t'}{\partial x} &= \frac{-\frac{v}{c^2}}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}, & \frac{\partial t'}{\partial t} &= \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}; \\ \frac{\partial y'}{\partial y} &= \frac{\partial z'}{\partial z} = 1; & \frac{\partial x'}{\partial y} = \frac{\partial x'}{\partial z} = \frac{\partial y'}{\partial x} = \dots &= 0, \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

và theo quy tắc lấy đạo hàm các hàm số kép:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi}{\partial x} &= \frac{\partial \phi}{\partial x'} \frac{\partial x'}{\partial x} + \frac{\partial \phi}{\partial y'} \frac{\partial y'}{\partial x} + \frac{\partial \phi}{\partial z'} \frac{\partial z'}{\partial x} + \frac{\partial \phi}{\partial t'} \frac{\partial t'}{\partial x} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \frac{\partial \phi}{\partial x'} + \frac{-\frac{v}{c^2}}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \frac{\partial \phi}{\partial t'} \end{aligned} \quad (9)$$

Đạo hàm (9) lần nữa theo x ta có:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} &= \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x'^2} + \frac{v^2}{c^4} \frac{\partial^2 \phi}{\partial t'^2} \right) - \\ &\quad - \frac{2v}{c^2 - v^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x' \partial t'} \end{aligned} \quad (10)$$

Tương tự:

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial \phi}{\partial t} &= \frac{-v}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \frac{\partial \phi}{\partial x'} + \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \frac{\partial \phi}{\partial t'}; & \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} &= \\ &= \frac{1}{\left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)} \left(v^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x'^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial t'^2} \right) - \frac{2v}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x' \partial t'}; \\ \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} &= \frac{\partial^2 \phi}{\partial y'^2}; & \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} &= \frac{\partial^2 \phi}{\partial z'^2} \end{aligned} \right\} \quad (11)$$

Thay vào phương trình sóng ta được:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} &= \\ &= \frac{\partial^2 \phi}{\partial x'^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y'^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial z'^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial t'^2} \end{aligned} \quad (12)$$

Kết quả phương trình sóng điện từ là bất biến đối với phép biến đổi Lorentz.

3. Hãy chỉ rõ hệ thức khối lượng - vận tốc của A.Einstein cho phép giải quyết mâu thuẫn xuất hiện khi vật chuyển động với vận tốc lớn.

Đối với hệ O' , do $u'_x = 0$, khối lượng của viên đạn sẽ là:

$$m' = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{u'^2}{c^2}}} = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{u'^2 + u_y'^2}{c^2}}} = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{u_y'^2}{c^2}}}, \quad (13)$$

còn đối với hệ O , do $u_x = V$, nên khối lượng ta viên đạn là:

$$m' = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{u^2}{c^2}}} = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{u_x^2 + u_y^2}{c^2}}} = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{V^2 + u_y^2}{c^2}}}. \quad (14)$$

Áp dụng phép biến đổi Lorentz và dùng biến đổi

ta có:

$$\begin{aligned} 1 - \frac{V^2}{c^2} - \frac{u_y^2}{c^2} &= 1 - \frac{V^2}{c^2} - \frac{1}{c^2} \left(u'_y \sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}} \right)^2 = \\ &= \left(1 - \frac{V^2}{c^2} \right) \left(1 - \frac{u_y'^2}{c^2} \right), \end{aligned} \quad (15)$$

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}} \sqrt{1 - \frac{u_y'^2}{c^2}}} = \frac{m'}{\sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}}}. \quad (16)$$

Từ đó ta được:

$$\begin{aligned} P_y = m u'_y \sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}} &= \left(\frac{m'}{\sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}}} \right) u'_y \sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}} = \\ &= m' u'_y = P'_y. \end{aligned} \quad (17)$$

Như vậy động lượng của viên đạn bảo toàn (theo phương γ).

Điều đó có hiệu lực khi cho rằng khối lượng của vật biến đổi theo vận tốc chuyển động của nó.

MỤC LỤC

Chương I.....	2
THUYẾT TƯƠNG ĐỐI HẸP	2
EINSTEIN (ANHSTANH)	2
MỞ ĐẦU	2
1-1 CÁC TIÊN ĐỀ EINSTEIN	2
1-2. PHÉP BIẾN ĐỔI LORENTZ	3
1. Sự cần thiết phải thay phép biến đổi Galilei bằng phép biến đổi Lorentz.....	3
2. Phép biến đổi Lorentz.....	4
1-3. KHOẢNG KHÔNG GIAN VÀ THỜI GIAN.....	6
1. Tính tương đối của khoảng không gian.....	6
2. Tính tương đối của khoảng thời gian.....	7
3. Tính tương đối của sự đồng thời	8
4. Định lý cộng vận tốc.....	9
1-4. ĐỘNG LỰC HỌC TƯƠNG ĐỐI TÍNH.....	10
1. Tính tương đối của khối lượng.....	10
2. Phương trình cơ bản của chuyển động trong thuyết tương đối	11
3. Động lượng và năng lượng - khối lượng	11
1-5. NGUYÊN LÝ TƯƠNG ĐƯƠNG.....	14
1-6. TRƯỜNG LỰC VÀ THUYẾT TƯƠNG ĐỐI.....	16
Chương II.....	17
LÝ THUYẾT LƯỢNG TỬ	17
2-1. BỨC XẠ NHIỆT.....	17
1. Khái niệm về phát xạ và hấp thụ	17
2. Các đại lượng đặc trưng	17
3. Định luật Kirchoff	19
2-2. THUYẾT LƯỢNG TỬ CỦA M.K.E.PLANCK.....	20
1. Nội dung thuyết lượng tử của M.K.E.Planck.....	20
2. Công thức Planck.....	20
3. Các định luật bức xạ của vật đen tuyệt đối.....	21
2-3. THUYẾT PHÔTON CỦA A.EINSTEIN	23
1. Thuyết photon của A.Einstein	23
2. Hiện tượng quang điện	23
3. Giải thích các định luật quang điện.....	25
4. Động lực học photon	26
5. Hiệu ứng Compton().....	26
2-4. LƯỜNG TÍNH SÓNG HẠT CỦA VI HẠT TRONG THẾ GIỚI VI MÔ. GIẢ THUYẾT BROGLIE.....	29
1. Tính chất sóng hạt của ánh sáng.....	29
2. Giả thuyết Broglie	29
3. Thực nghiệm xác nhận tính chất sóng của vi hạt	30
2-5. HỆ THỨC BẤT ĐỊNH HEISENBERG	31
1. Hệ thức bất định Heisenberg	31
2. Ý nghĩa của hệ thức bất định	32
3. Hệ thức bất định về năng lượng	33
2-6. HÀM SÓNG VÀ Ý NGHĨA THỐNG KÊ CỦA NÓ	33
1. Hàm sóng.....	33
2. Ý nghĩa thống kê của hàm sóng.....	34
3. Điều kiện của hàm sóng	36
4. Nguyên lý chồng chất trạng thái.....	36
2-7. PHƯƠNG TRÌNH CƠ BẢN CỦA CƠ HỌC LƯỢNG TỬ.....	37
1. Phương trình Schrodinger không phụ thuộc thời gian	37

2. Phương trình Schrödinger phụ thuộc thời gian	40
2-8. ỨNG DỤNG PHƯƠNG TRÌNH SCHRÖNGER	40
1. Vi hạt ở trong giếng thế sâu vô hạn	40
2. Sự truyền qua hàng rào thế	44
3. Dao tử điều hòa trong cơ học lượng tử	48
Chương III	51
VẬT LÝ NGUYÊN TỬ	51
3-1. NGUYÊN TỬ HYDRO. TRẠNG THÁI VÀ NĂNG LƯỢNG CỦA ELECTRON. QUANG PHỔ	51
1. Chuyển động của electron trong nguyên tử hydro	51
2. Biểu thức năng lượng	55
3. Các kết luận	55
3-2. NGUYÊN TỬ KIM LOẠI KIỀM	62
1. Năng lượng của electron hóa trị trong nguyên tử kim loại kiềm	62
2. Quang phổ của nguyên tử kim loại kiềm	63
3-3. MÔMEN ĐỘNG LƯỢNG VÀ MÔMEN TỪ QUỸ ĐẠO. HIỆU ỨNG ZEEMANN THƯỜNG	65
1. Mômen động lượng quỹ đạo	65
2. Mômen từ quỹ đạo	66
3. Hiệu ứng Zeemann	67
3-4. SPIN-MÔMEN RIÊNG VÀ MÔMEN TOÀN PHẦN CỦA ELECTRON. HIỆU ỨNG ZEEMANN DỊ THƯỜNG	70
1. Các thực nghiệm chứng tỏ sự tồn tại spin của electron	70
2. Mômen toàn phần của electron	74
3. Hiệu ứng Zeemann dị thường	75
3-5. TRẠNG THÁI CỦA ELECTRON TRONG NGUYÊN TỬ. CẤU TẠO BỘI CỦA VẠCH PHỔ	77
1. Trạng thái và năng lượng của electron	77
2. Cấu tạo tế vi của mức năng lượng	78
3. Cấu tạo bội của vạch quang phổ	79
3-6. HỆ HẠT ĐỒNG NHẤT. NGUYÊN LÝ LOẠI TRỪ PAOLI	80
1. Khái niệm về các hạt đồng nhất	80
2. Tính chất của hệ các hạt đồng nhất	81
3-7. KHÁI NIỆM VỀ HỆ THỐNG TUẦN HOÀN MENDELEEV	82
Chương IV	86
VẬT LÝ HẠT NHÂN NGUYÊN TỬ	86
4-1. CẤU TẠO VÀ CÁC TÍNH CHẤT CƠ BẢN CỦA HẠT NHÂN NGUYÊN TỬ	86
1. Cấu tạo hạt nhân	86
2. Các tính chất cơ bản của hạt nhân	87
4-2. CÁC MẪU HẠT NHÂN	93
1. Mẫu giọt hạt nhân	93
2. Mẫu vỏ	95
4 3. HIỆN TƯỢNG PHÂN RÃ CỦA CÁC HẠT NHÂN KHÔNG BÊN	98
1. Phân rã gamma (γ)	99
2. Phân rã alpha (α)	99
3. Phân rã beta (β) và neutrino	100
4-4. ĐỊNH LUẬT PHÂN RÃ PHÓNG XẠ. QUY TẮC DI CHUYỂN. HỌ PHÓNG XẠ, PHÓNG XẠ NHÂN TẠO. ỨNG DỤNG ĐỒNG VỊ PHÓNG XẠ	103
1. Định luật phân rã phóng xạ	103
2. Quy tắc di chuyển. Họ phóng xạ tự nhiên	105
3. Đồng vị phóng xạ nhân tạo	106
4. Ứng dụng đồng vị phóng xạ	107

4-5. PHẢN ỨNG HẠT NHÂN. NĂNG LƯỢNG HẠT NHÂN.....	109
1. Phản ứng hạt nhân	109
2. Năng lượng của phản ứng hạt nhân	110
4 6. PHẢN ỨNG PHÂN HẠCH. PHẢN ỨNG DÂY CHUYỀN VÀ Lò PHẢN ỨNG HẠT NHÂN.....	111
1 Phản ứng phân hạch.....	111
2. Phản ứng dây chuyền và lò phản ứng hạt nhân	114
4-7. PHẢN ỨNG NHIỆT HẠCH.....	117
1. Phản ứng nhiệt hạch	117
2. Phản ứng nhiệt hạch không điều khiển và điều khiển được	119
PHỤ LỤC	122
1 . Chỉ ra rằng phương trình truyền sóng điện từ:	122
2. Chỉ ra rằng phương trình sóng điện từ.....	123
3. Hãy chỉ rõ hệ thức khối lượng - vận tốc của A.Einstein cho phép giải quyết mâu thuẫn xuất hiện khi vật chuyển động với vận tốc lớn.....	124
MỤC LỤC	125

PHẠM DUY LÁC

VẬT LÝ ĐẠI CƯƠNG

Chịu trách nhiệm xuất bản:

PGS. TS TÔ ĐĂNG HẢI

Biên tập:

NGUYỄN BÁ ĐỘ

Vẽ bìa:

HƯƠNG LAN

NHÀ XUẤT BẢN KHOA HỌC VÀ KỸ THUẬT

70 Trần Hưng Đạo – Hà Nội

In 1 .000 bản, khổ 14,5 x 20,5 cm tại Công ty In KHKT - Hà Nội

Số in: 267-Giấy phép xuất bản số: 84-23, Cục XB cấp ngày 24-1-2000

In xong và nộp lưu chiểu tháng 9 năm 2000.