CÔNG THỨC VẬT LÝ ĐẠI CƯƠNG PHẦN III – PH1130 (Quang lí – Vật lý Lượng tử K61)

CHƯƠNG I. GIAO THOA ÁNH SÁNG

1. Điều kiện cho cực đại giao thoa và cực tiểu giao thoa đối với hai nguồn sáng kết hợp

1.1. Cực đại giao thoa

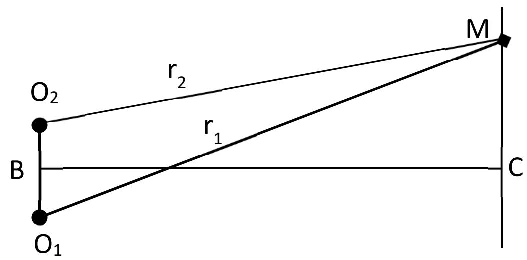
- *Hiệu quang lộ của hai sóng ánh sáng tại nơi gặp nhau bằng một số* ***nguyên lần bước sóng*** *ánh sáng:*

$$\Delta L = L_1 - L_2 = k\lambda \qquad (k = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots).$$

1.2. Cực tiểu giao thoa

- *Hiệu quang lộ của hai sóng ánh sáng tại nơi gặp nhau bằng một số* ***lẻ lần nửa bước sóng*** *ánh sáng:*

$$\Delta L = L_1 - L_2 = \left(k + \frac{1}{2}\right)\lambda \qquad (k = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots).$$



Trong đó:

L_1 : Quang lộ của tia sáng từ nguồn thứ nhất đến điểm quan sát

L_2 : Quang lộ của tia sáng từ nguồn thứ hai đến điểm quan sát

λ : Bước sóng của ánh sáng.

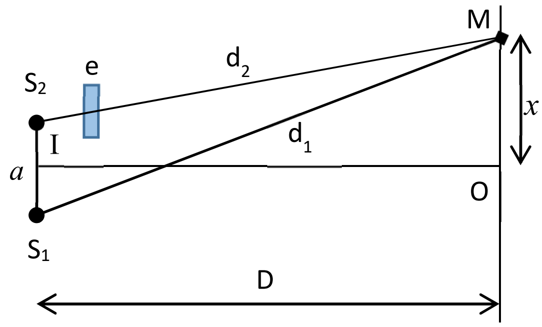
Trường hợp môi trường truyền sáng là chân không hoặc không khí thì ***hiệu quang lộ*** *sẽ* ***bằng hiệu khoảng cách*** *từ hai nguồn đến điểm quan sát:*

$$L_1 - L_2 = r_1 - r_2 .$$

2. Bài toán vân giao thoa Young

2.1. Vị trí các vân sáng bậc k trên màn

$$x_s = k\frac{\lambda D}{a} \qquad (k = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots).$$



2.2. Vị trí các vân tối thứ k trên màn

$$x_t = (2k+1)\frac{\lambda D}{2a} \qquad (k = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots).$$

2.3. Bề rộng của các vân giao thoa (khoảng vân)

$$i = \frac{\lambda D}{a}$$

2.4. Đặt bản mỏng có bề dày e, chiết suất n chắn tia sáng qua khe O_2

- Làm chậm quá trình truyền ánh sáng (chiết suất làm vận tốc truyền ánh sáng bị giảm đi)

$$n = \frac{c}{v} \Rightarrow v = \frac{c}{n}.$$

- Kéo dài đường đi của tia sáng một đoạn: $(n-1)e$ → Hiệu quang lộ thay đổi

$$\Delta L = L_1 - L_2 = d_1 - d'_2 = d_1 - \left(d_2 + (n-1)e\right) = d_1 - d_2 - (n-1)e = \frac{ax}{D} - (n-1)e. \Rightarrow \boxed{L_1 - L_2 = \frac{ax}{D} - (n-1)e}$$

- Xét vân sáng trung tâm:

$$\Delta L = k\lambda = 0 \Rightarrow \boxed{x_0 = \frac{(n-1)eD}{a}}$$. (Hệ vân sẽ dịch chuyển về phía khe có đặt bản mỏng)

Trong đó:

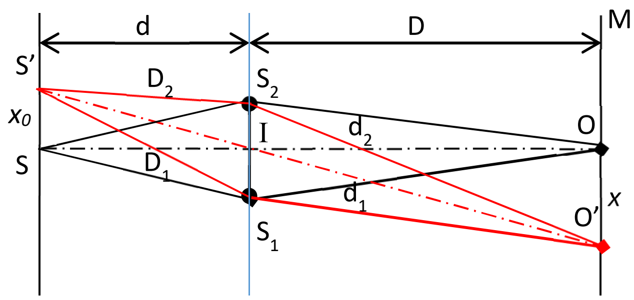
λ: Bước sóng của ánh sáng tới

a : Khoảng cách giữa hai nguồn sáng kết hợp

D : Khoảng các từ mặt phẳng chứa hai nguồn đến màn quan sát vân giao thoa.

2.5. Dịch chuyển nguồn sáng S

Khi nguồn sáng S di chuyển theo phương song song với S_1S_2 thì hệ ***di chuyển ngược chiều*** *và khoảng vân I vẫn* ***không thay đổi****.*



- Độ dời của hệ vân là: $x = \frac{x_0 D}{d}$.

Chứng minh: Hiệu quang lộ từ nguồn S’: $\Delta L = L_1 - L_2 = (D_1 - D_2) + (d_1 - d_2) = \frac{ax_0}{d} + \frac{ax}{D}$.

Tại vân sáng: $\Delta L = k\lambda$

Tại vân tối: $\Delta L = (2k+1)\frac{\lambda}{2}$

Tại vân sáng trung tâm: $\Delta L = k\lambda = \frac{ax_0}{d} + \frac{ax}{D} \Rightarrow \frac{x_0}{d} = -\frac{x}{D} \rightarrow đpcm$

3. Bài toán giao thoa trên bản mỏng có bề dày thay đổi – Vân cùng độ dày

3.1. Bản mỏng có bề dày thay đổi

- Hiệu quang lộ giữa hai tia phản xạ trên hai mặt của bản mỏng:

$$\Delta L = L_1 - L_2 = 2d\sqrt{n^2 - \sin^2 i} - \frac{\lambda}{2}.$$

Trong đó:

d : Bề dày của bản nỏng tại điểm quan sát

n : Chiết suất của bản mỏng

i : Góc tới của tia sáng trên bản mỏng.

- Điều kiện vân sáng – vân tối:

+ Vân sáng: $\Delta L = k\lambda$.

+ Vân tối: $\Delta L = \left(k + \frac{1}{2}\right)\lambda$.

3.2. Nêm không khí

- Vị trí của vân tối: $d_t = k\frac{\lambda}{2}$ $(k = 0, 1, 2, \ldots)$.

- Vị trí của vân sáng: $d_s = (2k-1)\frac{\lambda}{4}$ $(k = 1, 2, 3, \ldots)$.

3.3. Vân tròn Newton

- Vị trí của vân tối: $d_t = k\frac{\lambda}{2}$ $(k = 0, 1, 2, \ldots)$.

- Vị trí của vân sáng: $d_s = (2k-1)\frac{\lambda}{4}$ $(k = 1, 2, 3, \ldots)$.

- Bán kính của vân tối thứ k: $r_k = \sqrt{R\lambda k}$ (với R là bán kính cong của thấu kính trong bản cho vân tròn Newton).

CHƯƠNG II. NHIỄU XẠ ÁNH SÁNG

1. Phương pháp đới cầu Fresnel

1.1. Cách chia đới cầu

- Chọn mặt sóng cầu Σ phát ra từ nguồn O bán kính $R = OM - b$ (với $b = OM \gg \lambda$)

- Lấy M làm tâm vẽ các mặt cầu $\Sigma_0, \Sigma_1, \Sigma_2, \Sigma_3, ..., \Sigma_k$ có bán kính lần lượt là $b, b + \frac{\lambda}{2}, b + 2\frac{\lambda}{2}, b + 3\frac{\lambda}{2}, ..., b + k\frac{\lambda}{2}$

- Các mặt cầu trên sẽ chia mặt sóng cầu Σ thành các đới cầu Fresnel.

1.2. Các công thức liên quan

- Diện tích của mỗi đới cầu: $\Delta\Sigma = \frac{\pi R b}{R+b}\lambda$.

- Bán kính của đới cầu thứ k: $r_k = \sqrt{\frac{Rb\lambda}{R+b}}\sqrt{k}$. $(k = 1, 2, 3, \ldots)$.

Trong đó:

R: bán kính của mặt cầu S (mặt sóng) bao quanh nguồn điểm O
B: khoảng cách từ điểm được chiếu sáng M tới đới cầu thứ nhất
λ : bước sóng ánh sáng do nguồn S phát ra.

- Biên độ của ánh sáng tổng hợp tại M do các đới cầu Fresnel gửi tới:

$$a_n = a_1 - a_2 + a_3 - a_4 + a_5 - ... \qquad \rightarrow a_n = \frac{a_1}{2} + \left(\frac{a_1}{2} - a_2 + \frac{a_3}{2}\right) + \left(\frac{a_3}{2} - a_4 + \frac{a_5}{2}\right) + ... + \frac{a_n}{2}$$

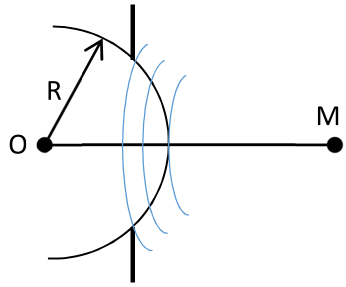
Do a thay đổi khá nhỏ nên có thể coi: $a_k = \frac{a_k - 1}{2} + \frac{a_k + 1}{2}$ nên ta có: $a_n = \frac{a_1}{2} \pm \frac{a_n}{2}$

Khi $n \rightarrow \infty$ thì $a_n \rightarrow 0$ nên ta có: $a_\infty \approx \frac{a_1}{2}$.

1.3. Nhiễu xạ gây bởi sóng cầu phát ra từ O qua một lỗ tròn nhỏ (O nằm trên trục của lỗ tròn)

Biên độ ánh sáng tổng hợp tại M (M nằm trên trục lỗ tròn) khi lỗ tròn chứa n đới cầu Fresnel :

$$a_M = a_1 - a_2 + a_3 - ... \pm a_n = \frac{a_1}{2} \pm \frac{a_n}{2}.$$

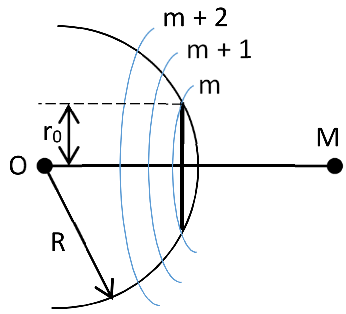


Nếu n lẻ : dấu + ; cường độ sáng tại M : $I = a_n^2 = \left(\frac{a_1}{2} + \frac{a_n}{2}\right)^2 > I_0$.

Nếu n chẵn : dấu – ; cường độ sáng tại M : $I = a_n^2 = \left(\frac{a_1}{2} - \frac{a_n}{2}\right)^2 > I_0$.

Nếu nhiều đới cầu $n \rightarrow \infty$ thì cường độ sáng tại M : $I = I_0 = a_M^2 = \frac{a_1^2}{4}$.

Một số trường hợp đặc biệt : $\begin{cases} n = 2; I \approx 0 \\ n = 1; I = a_1^2 = 4I_0 \end{cases}$.



1.4. Nhiễu xạ gây bởi sóng cầu phát ra từ O qua một đĩa tròn nhỏ

Biên độ ánh sáng tổng hợp tại M (OM là trục của đĩa) :

$$a_M = a_{m+1} - a_{m+2} + ... \pm a_n \approx \frac{a_{m+1}}{2} \qquad \text{(do } n \text{ lớn nên } a_n \rightarrow 0\text{).}$$

Nếu đĩa tròn che khuất nhiều đới cầu thì điểm M sẽ tối dần đi $\rightarrow I_M \approx 0$.

Nếu đĩa tròn che ít đới cầu thì biên độ a_{m+1} sẽ khác rất ít so với a_1 $\rightarrow I_M = a_M^2 = \frac{a_1^2}{4} = I_0$.

2. Nhiễu xạ gây bởi sóng phẳng qua một khe hẹp chữ nhật (rọi vào theo hướng vuông góc)

Gọi φ là góc lệch của chùm tia nhiễu xạ (so với phương pháp tuyến), ta có :

$\sin\varphi = 0 \rightarrow \varphi = 0 \rightarrow$ cực đại giữa.

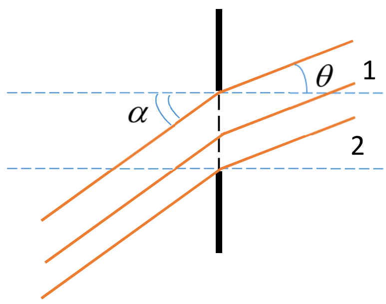
$\sin\varphi = k\frac{\lambda}{b}(k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots) \rightarrow$ cực tiểu nhiễu xạ bậc k ($k \neq 0$).

$\sin\varphi = \left(k + \frac{1}{2}\right)\frac{\lambda}{b}(k = \pm 1, \pm 2, \dots) \rightarrow$ cực đại nhiễu xạ bậc k.

3. Nhiễu xạ gây bởi sóng phẳng qua một cách tử phẳng (có chu kỳ d)

Chùm tia tới vuông góc với mặt phẳng cách tử ; góc nhiễu xạ θ ứng với các ánh sáng cực đại cho bởi :

$\sin\theta = k\frac{\lambda}{d}(k = \pm 1, \pm 2, \dots)$.



Hiệu quang lộ gữa hai tia nhiễu xạ từ hai khe hẹp kế tiếp :

$\Delta L = d\sin\alpha \text{ - } d\sin\theta$

Xét điều kiện cực đại nhiễu xạ :

$$\Delta L = d\sin\alpha \text{ - } d\sin\theta = k\lambda \rightarrow \sin\theta = \sin\alpha - \frac{k\lambda}{d}.$$

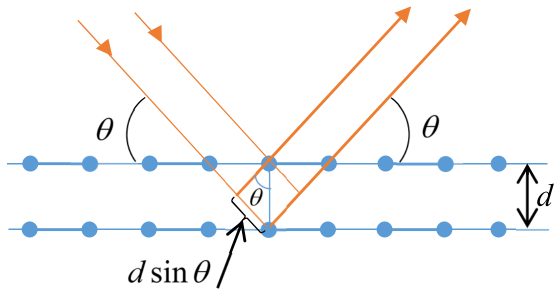
4. Nhiễu xạ của chùm tia X qua tinh thể (nhiễu xạ mạng tinh thể)

Xét chùm tia tới tạo với mặt phẳng nguyên tử góc $\theta \to$ chùm tia tới sẽ bị nhiễu xạ tại các nút mạng $\to$ Xét hai tia nhiễu xạ trên hai lớp tinh thể gần nhau $\to$ hiệu quang lộ của hai tia nhiễu xạ trên hai lớp này là :

$$\Delta L = 2d\sin\theta$$

Điều kiện giao thoa cực đại (*định luật Bragg*) $\to$ ứng dụng để xác định khoảng cách giữa các lớp nguyên tử trong tinh thể

$$2d\sin\theta = k\lambda \qquad (k = 1, 2, 3, \ldots).$$



CHƯƠNG III. PHÂN CỰC ÁNH SÁNG

1. Định luật Malus

- NDĐL: *Khi ánh sáng truyền qua hệ kính phân cực và kính phân tích có quang trục hợp với nhau một góc* θ *thì cường độ sáng nhận được ở sau hệ hai bản thủy tinh này sẽ thay đổi tỷ lệ với* $\cos^2\theta$.

$$I_2 = I_1\cos^2\theta \ . \qquad + \text{Nếu} \begin{cases} \theta = \dfrac{\pi}{2} \to I_2 = 0 \\ \left[\begin{array}{l} \theta = 0 \\ \theta = \pi \end{array}\right. \to I_2 = I_1 \end{cases}.$$

- Chú ý: Khi ánh sáng chưa phân cực đi qua kính phân cực (giả sử ánh sáng không bị hấp thụ hay phản xạ) thì cường độ của chùm sáng giảm đi 50%.

2. Sự quay của mặt phẳng phân cực

2.1. Đối với tinh thể đơn trục

- Vector ánh sáng không bị tách thành tia thường và bất thường
- Mặt phẳng dao động sẽ bị quay đi một góc φ được xác định bởi công thức $\varphi = [\alpha]\rho d$

Trong đó:

$[\alpha]$: góc quay nghiêng

ρ : khối lượng riêng của tinh thể

d : bề dày của bản tinh thể.

2.2. Đối với các chất vô định hình *(quang hoạt)*

- Góc quay φ được xác định bởi công thức $\varphi = [\alpha]Cd$
- Ứng dụng: *để xác định nồng độ chất quang hoạt bằng phân cực kế.*

Trong đó:

C: nồng độ dung dịch

CHƯƠNG IV. QUANG HỌC LƯỢNG TỬ

1. Vật đen tuyệt đối (vật đen lý tưởng)

1.1. Định nghĩa: Vật đen tuyệt đối (VĐTĐ) là vật hấp thụ hoàn toàn năng lượng của mọi chùm bức xạ đơn sắc gửi tới nó. Hệ số hấp thụ đơn sắc của VĐTĐ không phụ thuộc vào bước sóng ánh bức xạ. Trong thực tế không có VĐTĐ mà chỉ có vật đen gần tuyệt đối.

1.2. Năng suất phát xạ toàn phần của VĐTĐ *(công thức Stefan – Boltzmann)*: Năng suất phát xạ toàn phần của VĐTĐ tỉ lệ thuận với lũy thừa bậc 4 của nhiệt độ tuyệt đối của vật đó

$R_T = \sigma T^4$. (với $\sigma = 5{,}67.10^{-8}\,\mathrm{W}/m^2.K^4$ là hằng số Stefan-Boltzmann)

1.3. Bước sóng ứng với cực đại của năng suất phát xạ đơn sắc của VĐTĐ *(định luật Wien)*:

$\lambda_{\max}T = b$ hay $\lambda_{\max} = \dfrac{b}{T}$. (với $b = 2{,}896.10^{-3}\,mK$ là hằng số Wien)

1.4. Công thức Plack về năng suất phát xạ đơn sắc của VĐTĐ

$\varepsilon_{f,T} = \dfrac{2\pi v^2}{c^2}\dfrac{hf}{e^{\frac{hf}{kT}}-1}$ hoặc $\varepsilon_{\lambda,T} = \dfrac{2\pi hc^2}{\lambda^5}\dfrac{1}{e^{\frac{hc}{\lambda kT}}-1}$.

$\varepsilon_{\lambda,T}d\lambda = -\varepsilon_{f,T}df$ (với $h = 6,625.10^{-34}Js$ là hằng số Planck)

2. Vật đen không tuyệt đối (vật xám): Năng suất phát xạ toàn phần của vật không phải là vật đen tuyệt đối $R_T^{'} = \alpha\sigma T^4$. (với α là hệ số hấp thụ)

3. Quá trình phát xạ cân bằng (xét vật ở nhiệt độ T)

3.1. Năng suất phát xạ toàn phầncủa vật ở nhiệt độ T : $R_T = \dfrac{d\Phi_T}{dS}(W/m^2)$

3.2. Hệ số phát xạ đơn sắc của vật ở nhiệt độ T : $r_{\lambda,T} = \dfrac{dR_T}{d\lambda}$

3.3. Mối quan hệ giữa năng suất phát xạ toàn phần với năng suất phát xạ đơn sắc : $R_T = \int\limits_{\lambda=0}^{\lambda=\infty} r_{\lambda,T}d\lambda.$

4. Hiện tượng quang điện

4.1. Photon

- Năng lượng của photon ứng với bức xạ điện từ đơn sắc tần số *f*: $E = hf = \dfrac{hc}{\lambda}$.
- Khối lượng của photon : $m = \dfrac{E}{c^2} = \dfrac{hf}{c^2} = \dfrac{h}{\lambda c}$.
- Động lượng của photon : $p = mc = \dfrac{h}{c}$.

4.2. Hiện tượng quang điện

- Giới hạn quang điện (giới hạn đỏ) : $\lambda_0 = \dfrac{hc}{A}$ trong đó *A* là công thoát, $h = 6,625.10^{-34}Js$ là hằng số Planck.
- Phương trình Einstein : $hf = \dfrac{hc}{\lambda} = A + W_{d\max} = A + \dfrac{1}{2}mv_{0\max}^2$.
- Hiệu điện thế hãm : $eU_h = \dfrac{1}{2}mv_{0\max}^2 \rightarrow U_h = \dfrac{1}{2e}mv_{0\max}^2$.

5. Hiệu ứng Compton

- Bước sóng Compton : $\Lambda_C = \dfrac{h}{m_e c} = 2,4.10^{-12}m.$
- Hiệu giữa bước sóng của tia tán xạ và tia tới : $\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = 2\Lambda_C \sin^2\dfrac{\theta}{2}$.

CHƯƠNG V. CƠ HỌC LƯỢNG TỬ

1. Hệ thức De Broglie

- Hạt vi mô có năng lượng xác định E, động lượng xác địnhv $\vec{p}$ tương ứng với một sóng phẳng đơn sắc có tần số dao động *f* có bước sóng λ (hay có vector sóng $\vec{k}$ với $k = \dfrac{2\pi}{\lambda}$)

$\begin{cases} E = hf = \hbar\omega \\ p = \dfrac{h}{\lambda}; \vec{p} = \hbar\vec{k} \end{cases}$. Trong đó: $\hbar$ là hằng số Planck thu gọn: $\hbar = \dfrac{h}{2\pi}$.

- Vận tốc pha: $v_F = \dfrac{\omega}{k}$.

** Một số hệ thức liên quan:*

- Hiệu điện thế để gia tốc hạt U: $eU = W_d = \dfrac{p^2}{2m}$.

- Hạt chuyển động ***cơ học phi tương đối tính (cơ học Newton)***: Khi $v << c$.

$$\boxed{\lambda = \frac{h}{mv}} \qquad \begin{cases} p = mv = \dfrac{h}{\lambda} \\ W_d = \dfrac{1}{2}mv^2 \end{cases} \mapsto p^2 = 2mW_d.$$

- Hạt chuyển động ***cơ học tương đối tính***: Khi v đủ lớn. Chú ý: khối lượng của vật sẽ là $m = \dfrac{m_0}{\sqrt{1-\left(\dfrac{v}{c}\right)^2}}$

$$\boxed{\lambda = \frac{h}{mv} = \frac{h}{\dfrac{m_0 v}{\sqrt{1-\left(\dfrac{v}{c}\right)^2}}} = \frac{hc}{\sqrt{eU(eU+2mc^2)}} = \frac{hc}{\sqrt{W_d(W_d+2mc^2)}}} \qquad \begin{cases} p = mv = \dfrac{m_0}{\sqrt{1-\left(\dfrac{v}{c}\right)^2}}v \\ W_d = m_0c^2\left(\dfrac{1}{\sqrt{1-\left(\dfrac{v}{c}\right)^2}} - 1\right) \end{cases}.$$

2. Hệ thức bất định Heisenberg

- Hệ thức giữa độ bất định về tọa độ và độ bất định về động lượng vi hạt:

$\Delta x.\Delta p_x \geq \hbar$

- Hệ thức giữa độ bất định về năng lượng và thời gian sống của vi hạt:

$\Delta E.\Delta t \geq \hbar$

3. Phương trình Schrödinger

3.1. Phương trình Schrödinger tổng quát đối với một vi hạt

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U\right)\psi.$$

- Nếu hàm thế năng U chỉ phụ thuộc vào $\vec{r}$, hàm sóng ψ có dạng hàm sóng ở trạng thái dừng:

$\psi\left(\vec{r};t\right) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\psi\left(\vec{r}\right)$, Ta có phương trình Schrödinger đối với trạng thái dừng:

$$E\psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U\left(\vec{r}\right)\right)\psi. \text{ hay } \boxed{\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E-U)\psi = 0}.$$

Trong đó toán tử $\Delta = \dfrac{\partial^2}{\partial x^2} + \dfrac{\partial^2}{\partial y^2} + \dfrac{\partial^2}{\partial z^2}$.

- Điều kiện của hàm sóng: *đơn trị, liên tục* và *dẫn tới* 0 khi $r \to \infty$.
- Phương trình Schrödinger ở trạng thái dừng là phương trình vi phân bậc 2 thuần nhất

$\psi(x) = C_1e^{i\beta x} + C_2e^{-i\beta x}$.

- *Cách giải phương trình vi phân bậc hai thuần nhất* $y'' + py' + qy = 0$ (1) với p, q là hằng số
  - B1: Giải phương trình đặc trưng: $k^2 + pk + q = 0$.
  - B2: Căn cứ vào số nghiệm của phương trình đặc trưng để kết luận nghiệm của ptvp:

    - Có hai nghiệm phân biệt $k_1; k_2$ $\to$ Nghiệm tổng quát: $y = C_1e^{k_1x} + C_2e^{k_2x}$.

    - Có nghiệm kép $k = k_1 = k_2$ $\to$ Nghiệm tổng quát: $y = (C_1 + C_2x)e^{kx}$.

- Có nghiệm phức phân biệt: $k_{1,2}=\alpha\pm\beta i$ $\rightarrow$ Nghiệm tổng quát: $y=e^{ax}\left(C_1\cos\beta x+C_2\sin\beta x\right)$.

3.2. Chú ý

- Đối với phương trình Schrödinger thì $p=0$ nên phương trình sẽ có hai nghiệm $k_{1,2}=\pm\beta i$ do đó nghiệm tổng quát của phương trình Schrödinger là: $\psi(x)=C_1e^{i\beta x}+C_2e^{-i\beta x}$.

- Điều kiện liên tục của hàm sóng và đạo hàm cấp 1 của hàm sóng tại một điểm x_0: $\begin{cases}\psi_I(x_0)=\psi_{II}(x_0)\\ \dfrac{d\psi_I(x_0)}{dx}=\dfrac{d\psi_{II}(x_0)}{dx}\end{cases}$.

4. Hạt vi mô trong giếng thế năng chiều bề cao vô hạn

- Hạt chuyển động theo phương x trong giếng thế năng định nghĩa bởi: $U(x)=\left|\begin{matrix}0 \text{ khi } 0<x<a\\ \infty \text{ khi } \begin{cases}x\le 0\\ x\ge a\end{cases}\end{matrix}\right.$.

- Hàm sóng có dạng: $\psi_n(x)=\sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin\left(\dfrac{n\pi}{a}x\right)$ tương ứng với năng lượng $E_n=\dfrac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}n^2$, $(n=1,2,3,...)$

CHƯƠNG VI. NGUYÊN TỬ - PHÂN TỬ

1. Nguyên tử Hydro

1.1. Phương trình Schrödinger và nghiệm

- Hàm sóng ψ và năng lượng của electron trong nguyên tử hydro là nghiệm của phương trình Schrödinger.

- Thế năng tương tác giữa hạt nhân và electron: $U=-\dfrac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$.

- Phương trình Schrödinger có dạng: $\Delta\psi(x,y,z)+\dfrac{2m_e}{\hbar^2}\left(E+\dfrac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)\psi(x,y,z)=0$. $Z=1$ (hydro)

- Do U phụ thuộc r nên bài toán có tính đối xứng cầu → chuyển hệ tọa độ Descartes sang tọa độ cầu:

$$\begin{cases}x=r\sin\theta\cos\varphi\\ y=r\sin\theta\sin\varphi\\ z=r\cos\theta\end{cases}.$$

1.2. Phương trình Schrödinger trong hệ tọa độ cầu:

- $\dfrac{1}{r^2}\dfrac{\partial}{\partial r}\left(r^2\dfrac{\partial\psi}{\partial r}\right)+\dfrac{1}{r^2\sin\theta}\dfrac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\dfrac{\partial\psi}{\partial\theta}\right)+\dfrac{1}{r^2\sin^2\theta}\dfrac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}+\dfrac{2m}{\hbar^2}\left(E+\dfrac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)\psi=0$

- Sử dụng phương pháp phân ly biến số: $\psi(r,\theta,\varphi)=R_{nl}(r).Y_{lm}(\theta,\varphi)$

Trong đó:

$R_{nl}(r)$ là ***hàm xuyên tâm, chỉ phụ thuộc vào độ lớn của r***

$Y_{lm}(\theta,\varphi)$ là ***hàm cầu, phụ thuộc vào các góc θ và φ***

$n=1,2,3,4...$ là ***số lượng tử chính***

$l=0,1,2,3,...,n-1$ là ***số lượng tử quỹ đạo (orbital)***

$m=0,\pm1,\pm2,...,\pm l$ là ***số lượng tử từ***

1.3. Năng lượng của electron

$E_n=-\dfrac{1}{n^2}\dfrac{m_e e^4}{2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2}=-\dfrac{Rh}{n^2}$. với R là hằng số Rydberg: $R=\dfrac{m_e e^4}{4\pi(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^3}=3,29.10^{15}s^{-1}$.

1.4. Một số dạng cụ thể của hàm R_{nl} và Y_{lm}.

(Tra giáo trình)

2. Nguyên tử kim loại kiềm

- Trạng thái của electron hóa trị trong kim loại kiềm phụ thuộc vào ba số lượng tử *n, l, m*.
- Năng lượng của electron hóa trị phụ thuộc vào hai số lượng tử *n* và *l*.

$$E_{n,l} = -\frac{Rh}{(n+x)^2}.$$

Trong đó số bổ chính Rydberg *x* phụ thuộc vào giá trị *l* và phụ thuộc vào từng nguyên tử.

- Tần số bức xạ phát ra do chuyển mức năng lượng của electron hóa trị là:

$$f = \frac{R}{(n_1+x_1)^2} - \frac{R}{(n_2+x_2)^2}$$

- Quy tắc chuyển trạng thái: $\Delta l = \pm 1$
- Ký hiệu các sô hạng quang phổ là nX với X = S, P, D, F,... ứng với l = 0, 1, 2, 3,...
- Vạch quang phổ cộng hưởng tương ứng với sự chuyển trạng thái của nguyên tử từ trạng thái kích thích đầu tiên về trạng thái cơ bản: Li(2P→2S), Na(3P→3S)