

TÀI LIỆU THAM KHẢO NĂNG CAO

HÓA HỌC 10 CHO GÀ CHỌI

Dành cho học sinh thi học sinh giỏi cấp tỉnh, cấp quốc gia và Olympic quốc tế

Olympiad Chemistry for Grade 10 – a bilingual guide

Nguyên tử · Bảng tuần hoàn · Liên kết hóa học · Tinh thể

Oxi hóa – khử · Nhiệt động học · Động học · Halogen

Định luật có dẫn giải · Ví dụ có phân tích và lời giải · Tính toán hóa học

Bài tự luyện ba mức (tỉnh, quốc gia, quốc tế) có lời giải đầy đủ

Song ngữ Việt – Anh · Vietnamese – English

Phiên bản 1.0 – Tháng 10 năm 2026

<https://globalmarket.vin>

M U C L U C

C O N T E N T S

Chương 1. Nguyên tử và hạt nhân – Chapter 1. Atoms and nuclei	5
1.1. Thành phần, khối lượng và kích thước của nguyên tử – <i>Composition, mass and size of the atom</i>	5
1.2. Nguyên tố, đồng vị và nguyên tử khối trung bình – <i>Elements, isotopes and relative atomic mass</i>	7
1.3. Độ hụt khối và năng lượng liên kết – <i>Mass defect and binding energy</i>	9
1.4. Các kiểu phóng xạ và định luật bảo toàn – <i>Modes of radioactive decay and conservation laws</i>	14
1.5. Định luật phân rã phóng xạ – <i>The law of radioactive decay</i>	18
1.6. Phản ứng hạt nhân và năng lượng phản ứng – <i>Nuclear reactions and reaction energy</i>	22
1.7. Định tuổi bằng đồng vị và ứng dụng y học – <i>Isotopic dating and medical applications</i>	24
1.8. Bài tự luyện – <i>Practice problems</i>	29
1.9. Lời giải bài tự luyện – <i>Solutions to practice problems</i>	31
Chương 2. Cấu trúc lớp vỏ electron – Chapter 2. Electronic structure of atoms	36
2.1. Mô hình Bohr cho hệ một electron – <i>The Bohr model of one-electron systems</i>	36
2.2. Phổ vạch và năng lượng ion hóa của hệ một electron – <i>Line spectra and ionisation energy of one-electron systems</i>	38
2.3. Lưỡng tính sóng – hạt và orbital nguyên tử – <i>Wave-particle duality and atomic orbitals</i>	41
2.4. Bốn số lượng tử và hình dạng orbital – <i>The four quantum numbers and orbital shapes</i>	44
2.5. Nguyên lý, quy tắc và cấu hình electron ở trạng thái cơ bản – <i>Principles, rules and ground-state configurations</i>	46
2.6. Cấu hình ion kim loại chuyển tiếp và từ tính – <i>Configurations of transition-metal ions and magnetism</i>	49
2.7. Quy tắc Slater: điện tích hạt nhân hiệu dụng và năng lượng orbital – <i>Slater's rules: effective nuclear charge and orbital energy</i>	50
2.8. Bài tự luyện – <i>Practice problems</i>	56
2.9. Lời giải bài tự luyện – <i>Solutions to practice problems</i>	57
Chương 3. Bảng tuần hoàn và định luật tuần hoàn – Chapter 3. The periodic table and periodic law	62
3.1. Nguyên tắc sắp xếp và cấu tạo của bảng tuần hoàn – <i>Arrangement and structure of the periodic table</i>	62
3.2. Vị trí trong bảng và cấu hình electron – <i>Position in the table and electron configuration</i>	64
3.3. Bán kính nguyên tử và bán kính ion – <i>Atomic and ionic radii</i>	66

3.4. Năng lượng ion hóa – <i>Ionisation energy</i>	69
3.5. Ái lực electron và độ âm điện – <i>Electron affinity and electronegativity</i>	72
3.6. Tính kim loại, phi kim và các hợp chất cao nhất – <i>Metallic and non-metallic character, and the highest compounds</i>	76
3.7. Định luật tuần hoàn và quan hệ chéo – <i>The periodic law and diagonal relationships</i>	80
3.8. Bài tự luyện – <i>Practice problems</i>	84
3.9. Lời giải bài tự luyện – <i>Solutions to practice problems</i>	86
Chương 4. Liên kết hóa học và hình học phân tử – Chapter 4. Chemical bonding and molecular geometry	92
4.1. Quy tắc octet, công thức Lewis, điện tích hình thức và cộng hưởng – <i>The octet rule, Lewis structures, formal charge and resonance</i>	92
4.2. Liên kết ion, liên kết cộng hóa trị, liên kết σ và π , bậc và độ dài liên kết – <i>Ionic and covalent bonds, σ and π bonds, bond order and bond length</i>	97
4.3. Mô hình VSEPR và hình học phân tử – <i>The VSEPR model and molecular geometry</i>	100
4.4. Thuyết lai hóa orbital – <i>Orbital hybridisation</i>	105
4.5. Moment lưỡng cực và phân cực của phân tử – <i>Dipole moment and molecular polarity</i>	108
4.6. Thuyết orbital phân tử cho phân tử hai nguyên tử – <i>Molecular-orbital theory for diatomic species</i>	110
4.7. Liên kết hydrogen và lực van der Waals – <i>Hydrogen bonding and van der Waals forces</i>	114
4.8. Bài tự luyện – <i>Practice problems</i>	120
4.9. Lời giải bài tự luyện – <i>Solutions to practice problems</i>	122
Chương 5. Tinh thể và chất rắn – Chapter 5. Crystals and solids	129
5.1. Chất rắn tinh thể, ô mạng cơ sở – <i>Crystalline solids and the unit cell</i>	129
5.2. Tinh thể kim loại: các kiểu xếp cầu – <i>Metallic crystals: sphere packings</i>	132
5.3. Tinh thể ion – <i>Ionic crystals</i>	138
5.4. Tinh thể nguyên tử, tinh thể phân tử và so sánh các loại tinh thể – <i>Atomic and molecular crystals; comparing crystal types</i>	144
5.5. Từ dữ kiện ô mạng đến bài toán cấu trúc – <i>From cell data to structure problems</i> ..	147
5.6. Tính tham số cấu trúc bằng máy – <i>Computing structural parameters by program</i> ..	151
5.7. Bài tự luyện – <i>Practice problems</i>	154
5.8. Lời giải bài tự luyện – <i>Solutions to practice problems</i>	156
Chương 6. Phản ứng oxi hóa – khử và tính toán hóa học – Chapter 6. Redox reactions and stoichiometry	161
6.1. Số oxi hóa – <i>Oxidation numbers</i>	161
6.2. Chất oxi hóa, chất khử và các loại phản ứng – <i>Oxidants, reductants and types of reaction</i>	165
6.3. Cân bằng bằng thăng bằng electron – <i>Balancing by electron balance</i>	167
6.4. Cân bằng bằng phương pháp ion – electron – <i>Balancing by the ion-electron method</i>	170

6.5. Mol, nồng độ và các định luật bảo toàn khối lượng, nguyên tố, điện tích – <i>Amount, concentration and conservation of mass, elements and charge</i>	173
6.6. Bảo toàn electron và quy đổi hỗn hợp – <i>Electron conservation and mixture conversion</i>	177
6.7. Chuẩn độ oxi hóa – khử và bài toán nhiều giai đoạn – <i>Redox titration and multi-stage problems</i>	181
6.8. Bài tự luyện – <i>Practice problems</i>	189
6.9. Lời giải bài tự luyện – <i>Solutions to practice problems</i>	191
Chương 7. Năng lượng hóa học: enthalpy, entropy và năng lượng Gibbs – Chapter 7. Chemical energetics: enthalpy, entropy and Gibbs energy	197
7.1. Phản ứng tỏa nhiệt, thu nhiệt và enthalpy – <i>Exothermic and endothermic reactions, and enthalpy</i>	197
7.2. Định luật Hess và enthalpy tạo thành chuẩn – <i>Hess's law and the standard enthalpy of formation</i>	199
7.3. Năng lượng liên kết và biến thiên enthalpy – <i>Bond energy and enthalpy change</i> ...	202
7.4. Chu trình Born – Haber – <i>The Born – Haber cycle</i>	204
7.5. Nhiệt lượng kế và nhiệt độ ngọn lửa đoạn nhiệt – <i>Calorimetry and the adiabatic flame temperature</i>	206
7.6. Entropy – <i>Entropy</i>	209
7.7. Năng lượng Gibbs, chiều tự diễn biến và hằng số cân bằng – <i>Gibbs energy, spontaneous change and the equilibrium constant</i>	211
7.8. Bài tự luyện – <i>Practice problems</i>	218
7.9. Lời giải bài tự luyện – <i>Solutions to practice problems</i>	220
Chương 8. Tốc độ phản ứng và năng lượng hoạt hóa – Chapter 8. Reaction rates and activation energy	226
8.1. Tốc độ phản ứng – <i>Reaction rate</i>	226
8.2. Định luật tốc độ và bậc phản ứng – <i>Rate law and reaction order</i>	229
8.3. Phương trình động học tích phân và chu kỳ bán hủy – <i>Integrated rate equations and half-life</i>	232
8.4. Ảnh hưởng của nhiệt độ: Van't Hoff và Arrhenius – <i>Effect of temperature: Van't Hoff and Arrhenius</i>	237
8.5. Giảm đồ năng lượng, trạng thái chuyển tiếp và xúc tác – <i>Energy profile, transition state and catalysis</i>	242
8.6. Cơ chế phản ứng và giai đoạn quyết định tốc độ – <i>Reaction mechanism and the rate-determining step</i>	245
8.7. Phản ứng cháy nổ – <i>Combustion and explosion</i>	248
8.8. Phòng chống cháy nổ – <i>Fire and explosion prevention</i>	251
8.9. Bài tự luyện – <i>Practice problems</i>	258
8.10. Lời giải bài tự luyện – <i>Solutions to practice problems</i>	260
Chương 9. Nhóm halogen – Chapter 9. The halogens	267
9.1. Vị trí, cấu hình electron và đơn chất – <i>Position, electron configuration and the elements</i>	267
9.2. Tính chất hóa học của đơn chất – <i>Chemical properties of the elements</i>	270

9.3. Hydrogen halide và muối halide – <i>Hydrogen halides and halide salts</i>	274
9.4. Oxoacid và muối của chlorine – <i>Oxoacids and salts of chlorine</i>	279
9.5. Điều chế, ứng dụng và an toàn – <i>Preparation, uses and safety</i>	282
9.6. Sơ đồ chuyển hóa, nhận biết và tách chất – <i>Conversion schemes, identification and separation</i>	286
9.7. Bài toán định lượng nhiều giai đoạn – <i>Multi-stage quantitative problems</i>	290
9.8. Bài tự luyện – <i>Practice problems</i>	294
9.9. Lời giải bài tự luyện – <i>Solutions to practice problems</i>	296
Chương 10. Hóa học tính toán và thực hành trên máy tính – Chapter 10.	
<i>Computational chemistry and computer-based practice</i>	302
10.1. Biểu diễn cấu trúc phân tử và tệp tọa độ – <i>Representing molecular structure and coordinate files</i>	302
10.2. Độ dài liên kết, góc liên kết và góc nhị diện từ tọa độ – <i>Bond lengths, bond angles and dihedral angles from coordinates</i>	304
10.3. Moment lưỡng cực và tâm khối từ tọa độ – <i>Dipole moment and centre of mass from coordinates</i>	309
10.4. Tính năng lượng bằng máy và ý tưởng tối ưu hình học – <i>Computing energies by machine and the idea of geometry optimisation</i>	311
10.5. Thí nghiệm hóa học ảo và mô phỏng tự lập – <i>Virtual chemistry experiments and self-written simulations</i>	314
10.6. Chiến lược giải và cách kiểm tra kết quả – <i>Solving strategy and checking results</i>	318
10.7. Bài tự luyện – <i>Practice problems</i>	320
10.8. Lời giải bài tự luyện – <i>Solutions to practice problems</i>	321
Phụ lục A. Ba đề luyện thi – Appendix A. Three practice papers.....	327
A.1. Đề số 1: mức học sinh giỏi cấp tỉnh – <i>A.1. Paper 1: provincial level</i>	327
A.2. Đề số 2: mức học sinh giỏi quốc gia – <i>A.2. Paper 2: national level</i>	339
A.3. Đề số 3: mức Olympic quốc tế – <i>A.3. Paper 3: international level</i>	353
Phụ lục B. Tra cứu định luật và kết quả có tên – Appendix B. Index of named laws and results	370
B.1. Bảng tra theo chương – <i>B.1. Index by chapter</i>	370
Phụ lục C. Thuật ngữ Việt – Anh – Appendix C. Vietnamese – English glossary	381
C.1. Bảng tra từ A đến Z – <i>C.1. A to Z index</i>	381
Phụ lục D. Tài liệu đọc thêm – Appendix D. Further reading	388
D.1. Sách tiếng Anh và sách giáo khoa – <i>D.1. Books in English and textbooks</i>	388

Chương 1. Nguyên tử và hạt nhân – Chapter 1. Atoms and nuclei

Mục tiêu chương – Chapter objectives

- Ước lượng bậc độ lớn khối lượng, điện tích và kích thước của proton, neutron, electron, nguyên tử và hạt nhân.
Estimate orders of magnitude for the mass, charge and size of the proton, neutron, electron, atom and nucleus.
- Tính nguyên tử khối trung bình từ khối lượng và độ giàu đồng vị, và ngược lại tìm độ giàu từ nguyên tử khối.
Calculate the relative atomic mass from isotopic masses and abundances, and find abundances from the relative atomic mass.
- Tính độ hụt khối, năng lượng liên kết, năng lượng liên kết riêng và dùng đường cong ϵ theo A để giải thích phân hạch, nhiệt hạch tỏa năng lượng.
Calculate mass defect, binding energy and binding energy per nucleon, and use the ϵ against A curve to explain why fission and fusion release energy.
- Viết phương trình phân rã α , β^- , β^+ , bắt electron, γ ; dùng $N = N_0 \cdot 2^{-t/T}$ và $R = \lambda N$ cho một và hai chất phóng xạ.
Write equations for α , β^- , β^+ , electron capture and γ decay; use $N = N_0 \cdot 2^{-t/T}$ and $R = \lambda N$ for one and two radionuclides.
- Tính năng lượng của phản ứng hạt nhân (cả chia động năng), tuổi mẫu theo tỉ lệ hạt nhân mẹ và con, và đọc đề về đồng vị đánh dấu trong y học.
Calculate the energy of nuclear reactions (including the split of kinetic energy), the age of a sample from the parent to daughter ratio, and handle medical tracer problems.

1.1. Thành phần, khối lượng và kích thước của nguyên tử – Composition, mass and size of the atom

Nguyên tử trung hòa có hạt nhân mang điện dương ở tâm và các electron ở xung quanh. Hạt nhân gồm proton (p) và neutron (n), gọi chung là nucleon. Proton mang điện tích $+e$, neutron không mang điện, electron mang $-e$, với $e = 1,602 \cdot 10^{-19}$ C.

A neutral atom has a positively charged nucleus at its centre and electrons around it. The nucleus consists of protons (p) and neutrons (n), together called nucleons. The proton carries charge $+e$, the neutron is uncharged and the electron carries $-e$, where $e = 1.602 \cdot 10^{-19}$ C.

Hạt Particle	Ký hiệu Symbol	Điện tích Charge	Khối lượng (kg) Mass (kg)	Khối lượng (u) Mass (u)
Proton	${}_1^1\text{p}$	$+e$	$1,6726 \cdot 10^{-27}$ <i>1.6726 · 10⁻²⁷</i>	1,00728 <i>1.00728</i>
Neutron	${}_0^1\text{n}$	0	$1,6749 \cdot 10^{-27}$ <i>1.6749 · 10⁻²⁷</i>	1,00866 <i>1.00866</i>
Electron	${}_{-1}^0\text{e}$	$-e$	$9,109 \cdot 10^{-31}$ <i>9.109 · 10⁻³¹</i>	0,000549 <i>0.000549</i>

Khối lượng proton và neutron gần bằng nhau, mỗi hạt nặng hơn electron khoảng $1,8 \cdot 10^3$ lần. Vì vậy khối lượng của nguyên tử tập trung ở hạt nhân: phần của electron nhỏ hơn 0,06 % khối lượng nguyên tử, kể cả với ^1H .

The proton and neutron have almost equal masses, and each is about $1.8 \cdot 10^3$ times heavier than the electron. The mass of an atom is therefore concentrated in the nucleus: the electrons account for less than 0.06 % of it, even in ^1H .

ĐỊNH NGHĨA 1.1 (Số hiệu nguyên tử, nguyên tố) / DEFINITION 1.1 (Atomic number, element) – Số hiệu nguyên tử Z của một nguyên tử là số proton trong hạt nhân, cũng là số electron của nguyên tử trung hòa. Nguyên tố hóa học là tập hợp các nguyên tử có cùng số hiệu nguyên tử.

The atomic number Z of an atom is the number of protons in its nucleus, and also the number of electrons in the neutral atom. A chemical element is the set of atoms with the same atomic number.

Bán kính nguyên tử cỡ $10^{-10} \text{ m} = 1 \text{ Å}$ (từ khoảng 0,3 đến 3 Å tùy nguyên tố). Bán kính hạt nhân cỡ 10^{-15} m , đơn vị riêng là femtomet ($1 \text{ fm} = 10^{-15} \text{ m}$, còn gọi là fermi). Tỉ số hai bán kính cỡ 10^4 đến 10^5 .

The atomic radius is of the order of $10^{-10} \text{ m} = 1 \text{ Å}$ (roughly 0.3 to 3 Å, depending on the element). The nuclear radius is of the order of 10^{-15} m , measured in femtometres ($1 \text{ fm} = 10^{-15} \text{ m}$, also called the fermi). The ratio of the two radii is of the order of 10^4 to 10^5 .

TÍNH CHẤT 1.2 (Bán kính hạt nhân) / PROPERTY 1.2 (Nuclear radius) – Hạt nhân có số khối A được coi là quả cầu có bán kính $r_N \approx r_0 \cdot A^{1/3}$ với $r_0 \approx 1,2 \text{ fm}$. Thể tích hạt nhân tỉ lệ với A nên mật độ nucleon gần như nhau ở mọi hạt nhân.

A nucleus of mass number A is treated as a sphere of radius $r_N \approx r_0 \cdot A^{1/3}$ with $r_0 \approx 1.2 \text{ fm}$. The nuclear volume is proportional to A , so the density of nucleons is nearly the same in every nucleus.

$$r_N = r_0 \cdot A^{1/3} \quad (1.1)$$

NHẬN XÉT / REMARK – Đây là quy luật thực nghiệm, đo bằng tán xạ electron và hạt α trên hạt nhân. Nó đúng cho A từ vài chục trở lên; với hạt nhân nhẹ như ^2H sai lệch lớn hơn. Hạt nhân chỉ chiếm cỡ 10^{-14} thể tích nguyên tử (ví dụ 1.1) nhưng chứa trên 99,9 % khối lượng.

This is an empirical rule, measured by scattering electrons and α particles from nuclei. It holds for A from a few tens upwards; for light nuclei such as ^2H the deviation is larger. The nucleus fills only about 10^{-14} of the atomic volume (Example 1.1) but holds over 99.9 % of the mass.

VÍ DỤ 1.1 (Bậc độ lớn) / EXAMPLE 1.1 (Orders of magnitude) – Hạt nhân ^{64}Zn có bán kính theo công thức (1.1) với $r_0 = 1,2 \text{ fm}$. Nguyên tử Zn có bán kính 1,35 Å. (a) Tính r_N . (b) Tính tỉ số bán kính nguyên tử và bán kính hạt nhân. (c) Tính phần thể tích nguyên tử do hạt nhân chiếm. (d) Nếu hạt nhân được phóng to thành quả cầu bán kính 4,8 mm thì nguyên tử có bán kính bao nhiêu?

The ^{64}Zn nucleus has the radius given by (1.1) with $r_0 = 1.2 \text{ fm}$. A Zn atom has radius 1.35 Å. (a) Find r_N . (b) Find the ratio of the atomic radius to the nuclear radius. (c) Find the fraction of the atomic volume taken by the nucleus. (d) If the nucleus is enlarged to a sphere of radius 4.8 mm, what is the radius of the atom?

Lời giải. / Solution.

1. $A = 64$ nên $A^{1/3} = 4$ và $r_N = 1,2 \cdot 4 = 4,8 \text{ fm}$.

$A = 64$, so $A^{1/3} = 4$ and $r_N = 1.2 \times 4 = 4.8 \text{ fm}$.

2. Đổi $1,35 \text{ Å} = 1,35 \cdot 10^{-10} \text{ m}$ và $4,8 \text{ fm} = 4,8 \cdot 10^{-15} \text{ m}$. Tỉ số bán kính = $1,35 \cdot 10^{-10} / 4,8 \cdot 10^{-15} = 2,8 \cdot 10^4$.

Convert $1.35 \text{ Å} = 1.35 \cdot 10^{-10} \text{ m}$ and $4.8 \text{ fm} = 4.8 \cdot 10^{-15} \text{ m}$. The radius ratio is $1.35 \cdot 10^{-10} / 4.8 \cdot 10^{-15} = 2.8 \cdot 10^4$.

3. Thể tích tỉ lệ với lập phương bán kính, nên phần thể tích do hạt nhân chiếm là $(1/28.125)^3 \approx 4,5 \cdot 10^{-14}$.

Volume scales with the cube of the radius, so the nuclear fraction is $(1/28,125)^3 \approx 4.5 \cdot 10^{-14}$.

4. Phóng to $4,8 \text{ mm}$ lên từ $4,8 \text{ fm}$ là gấp 10^{12} lần; nguyên tử có bán kính $1,35 \cdot 10^{-10} \text{ m} \cdot 10^{12} = 135 \text{ m}$.

Enlarging 4.8 fm to 4.8 mm is a factor of 10^{12} ; the atom then has radius $1.35 \cdot 10^{-10} \text{ m} \times 10^{12} = 135 \text{ m}$.

Vậy $r_N = 4,8 \text{ fm}$; tỉ số bán kính $\approx 2,8 \cdot 10^4$; phần thể tích $\approx 4,5 \cdot 10^{-14}$; bán kính nguyên tử phóng to $\approx 135 \text{ m}$.

Hence $r_N = 4.8 \text{ fm}$; the radius ratio $\approx 2.8 \cdot 10^4$; the volume fraction $\approx 4.5 \cdot 10^{-14}$; the enlarged atom has radius $\approx 135 \text{ m}$. ■

LỖI HAY GẶP / COMMON MISTAKE – Lẫn Å với fm: $1 \text{ Å} = 10^5 \text{ fm}$, không phải 10^3 fm . Khi so sánh thể tích phải lập phương tỉ số bán kính chứ không dùng tỉ số bán kính.

Mixing up Å and fm: $1 \text{ Å} = 10^5 \text{ fm}$, not 10^3 fm . Volumes compare as the cube of the radius ratio, not the radius ratio itself.

1.2. Nguyên tố, đồng vị và nguyên tử khối trung bình – Elements, isotopes and relative atomic mass

ĐỊNH NGHĨA 1.3 (Số khối, nuclide) / DEFINITION 1.3 (Mass number, nuclide) – Số khối $A = Z + N$ là tổng số nucleon, với N là số neutron. Một loại hạt nhân xác định bởi cặp (Z, A) gọi là nuclide, ký hiệu ${}^A_ZX$, chẳng hạn ${}^{31}_{15}\text{P}$. Chỉ số Z thường được lược đi vì ký hiệu nguyên tố đã xác định Z .

The mass number $A = Z + N$ is the total number of nucleons, where N is the number of neutrons. A kind of nucleus fixed by the pair (Z, A) is a nuclide, written ${}^A_ZX$, for example ${}^{31}_{15}\text{P}$. The subscript Z is often dropped because the element symbol already fixes it.

ĐỊNH NGHĨA 1.4 (Đồng vị) / DEFINITION 1.4 (Isotopes) – Các đồng vị của một nguyên tố là những nuclide có cùng Z và khác N (khác A). Nuclide cùng A khác Z gọi là đồng khối, cùng N khác Z gọi là đồng neutron.

Isotopes of an element are nuclides with the same Z and different N (different A). Nuclides with the same A and different Z are isobars; those with the same N and different Z are isotones.

Các đồng vị của một nguyên tố có cùng cấu hình electron nên có tính chất hóa học gần như giống nhau. Khác biệt nhỏ đến từ khối lượng: tốc độ khuếch tán, tốc độ phản ứng và các hằng số vật lý của D_2O khác H_2O . Tính chất hạt nhân (có phóng xạ hay không, chu kỳ bán rã) khác nhau rõ rệt giữa các đồng vị.

Isotopes of one element have the same electron configuration, so their chemical properties are nearly identical. The small differences come from mass: diffusion rates, reaction rates and the physical constants of D₂O differ from those of H₂O. Nuclear properties (radioactive or not, half-life) differ sharply between isotopes.

ĐỊNH NGHĨA 1.5 (Đơn vị khối lượng nguyên tử) / DEFINITION 1.5 (Atomic mass unit)

– Đơn vị khối lượng nguyên tử u bằng $1/12$ khối lượng của một nguyên tử ^{12}C . Theo định nghĩa, khối lượng nguyên tử ^{12}C đúng bằng 12 u , và $1\text{ u} = 1,6605 \cdot 10^{-27}\text{ kg} \approx 931,5\text{ MeV}/c^2$.
The atomic mass unit u is $1/12$ of the mass of one ^{12}C atom. By definition the mass of a ^{12}C atom is exactly 12 u , and $1\text{ u} = 1.6605 \cdot 10^{-27}\text{ kg} \approx 931.5\text{ MeV}/c^2$.

Khối lượng nguyên tử của các nuclide khác không phải số nguyên: ^1H nặng $1,007825\text{ u}$, ^{16}O nặng $15,994915\text{ u}$. Có hai nguyên nhân: m_p khác m_n , và một phần khối lượng chuyển thành năng lượng liên kết (mục 1.3). Số khối A là số nguyên; khối lượng nguyên tử chỉ xấp xỉ $A\text{ u}$.

The atomic masses of other nuclides are not integers: ^1H is 1.007825 u and ^{16}O is 15.994915 u . There are two reasons: m_p differs from m_n , and part of the mass is converted into binding energy (Section 1.3). The mass number A is an integer; the atomic mass is only approximately $A\text{ u}$.

ĐỊNH NGHĨA 1.6 (Nguyên tử khối trung bình) / DEFINITION 1.6 (Relative atomic mass)

– Nguyên tử khối trung bình của một nguyên tố là trung bình có trọng số theo số nguyên tử của khối lượng các đồng vị. Nếu đồng vị i có khối lượng M_i (u) và chiếm phần số nguyên tử x_i với $\sum x_i = 1$ thì $A_r = \sum x_i \cdot M_i$.

The relative atomic mass of an element is the mean of its isotopic masses weighted by the number fraction of atoms. If isotope i has mass M_i (u) and number fraction x_i with $\sum x_i = 1$, then $A_r = \sum x_i \cdot M_i$.

$$A_r = \sum x_i \cdot M_i, \quad \sum x_i = 1 \quad (1.2)$$

Phổ khối ghi số ion theo tỉ số khối lượng trên điện tích: ion được tạo ra, gia tốc rồi lệch trong từ trường, ion nhẹ lệch nhiều hơn. Chiều cao pic tỉ lệ với số ion nên cho độ giàu đồng vị. Với đơn chất hai nguyên tử X_2 mà X có hai đồng vị độ giàu p và $q = 1 - p$, hai nguyên tử trong phân tử chọn đồng vị độc lập, nên ba pic (hai nhẹ, một nhẹ một nặng, hai nặng) có cường độ tỉ lệ như sau.

A mass spectrum records the number of ions against the mass to charge ratio: ions are formed, accelerated and then deflected in a magnetic field, the lighter ones more strongly. Peak height is proportional to the number of ions and so gives the isotopic abundance. For a diatomic element X_2 whose X has two isotopes of abundance p and $q = 1 - p$, the two atoms in a molecule choose isotopes independently, so the three peaks (two light, one light and one heavy, two heavy) have intensities in the following ratio.

$$p^2 : 2pq : q^2 \quad (1.3)$$

PHÂN TÍCH / ANALYSIS – Hai ẩn (hai độ giàu) cần hai phương trình: tổng bằng 1 và trung bình có trọng số bằng A_r . Dùng khối lượng đồng vị đề cho, không dùng số khối. Trước khi tính, ước lượng: A_r gần M của đồng vị nào hơn thì đồng vị đó chiếm hơn nửa. Số nguyên tử trong một mẫu đi qua số mol của hợp chất, rồi nhân hệ số công thức.

Two unknowns (two abundances) need two equations: the fractions sum to 1 and the weighted mean

equals A_r . Use the isotopic masses given, not the mass numbers. Before calculating, estimate: the isotope whose M is closer to A_r has more than half the atoms. The number of atoms in a sample goes through the amount of the compound, then the subscripts in its formula.

VÍ DỤ 1.2 (Trung bình theo trọng số) / EXAMPLE 1.2 (Weighted mean) – Antimony tự nhiên gồm ^{121}Sb ($M = 120,9038 \text{ u}$) và ^{123}Sb ($M = 122,9042 \text{ u}$), nguyên tử khối trung bình 121,76. (a) Tính phần trăm số nguyên tử của mỗi đồng vị. (b) Một mẫu 5,00 g antimony(III) sulfide Sb_2S_3 chứa bao nhiêu nguyên tử ^{123}Sb ? Dùng $A_r(\text{Sb}) = 121,76$; $S = 32$.

Natural antimony consists of ^{121}Sb ($M = 120.9038 \text{ u}$) and ^{123}Sb ($M = 122.9042 \text{ u}$), with relative atomic mass 121.76. (a) Find the percentage of atoms of each isotope. (b) How many ^{123}Sb atoms are in a 5.00 g sample of antimony(III) sulfide, Sb_2S_3 ? Use $A_r(\text{Sb}) = 121.76$; $S = 32$.

Lời giải. / Solution.

1. Gọi x là phần số nguyên tử của ^{121}Sb thì ^{123}Sb là $1 - x$, và $A_r = x \cdot M_1 + (1 - x) \cdot M_2$.
Let x be the number fraction of ^{121}Sb , so ^{123}Sb has $1 - x$, and $A_r = x \cdot M_1 + (1 - x) \cdot M_2$.

$$x = (M_2 - A_r) / (M_2 - M_1)$$

2. $x = (122,9042 - 121,76) / (122,9042 - 120,9038) = 1,1442 / 2,0004 \approx 0,5720$. Vậy ^{121}Sb chiếm 57,20 % và ^{123}Sb chiếm 42,80 %. Kết quả hợp lý vì 121,76 gần 120,9 hơn 122,9.

$x = (122.9042 - 121.76) / (122.9042 - 120.9038) = 1.1442 / 2.0004 \approx 0.5720$. So ^{121}Sb is 57.20 % and ^{123}Sb is 42.80 %. This is reasonable because 121.76 is closer to 120.9 than to 122.9.

3. $M(\text{Sb}_2\text{S}_3) = 2 \cdot 121,76 + 3 \cdot 32 = 339,52 \text{ g/mol}$ nên $n = 5,00 / 339,52 = 0,01473 \text{ mol}$.
 $M(\text{Sb}_2\text{S}_3) = 2 \times 121.76 + 3 \times 32 = 339.52 \text{ g/mol}$, so $n = 5.00 / 339.52 = 0.01473 \text{ mol}$.

4. Số nguyên tử $\text{Sb} = 2 \cdot 0,01473 \cdot 6,022 \cdot 10^{23} = 1,774 \cdot 10^{22}$. Số nguyên tử $^{123}\text{Sb} = 0,4280 \cdot 1,774 \cdot 10^{22} \approx 7,59 \cdot 10^{21}$.

Number of Sb atoms $= 2 \times 0.01473 \times 6.022 \cdot 10^{23} = 1.774 \cdot 10^{22}$. Number of ^{123}Sb atoms $= 0.4280 \times 1.774 \cdot 10^{22} \approx 7.59 \cdot 10^{21}$.

Vậy ^{121}Sb 57,20 %, ^{123}Sb 42,80 %; mẫu chứa $\approx 7,59 \cdot 10^{21}$ nguyên tử ^{123}Sb .

Hence ^{121}Sb is 57.20 % and ^{123}Sb is 42.80 %; the sample contains $\approx 7.59 \cdot 10^{21}$ atoms of ^{123}Sb . ■

LỖI HAY GẶP / COMMON MISTAKE – Lấy trung bình cộng hai số khối hoặc trung bình theo khối lượng thay vì theo số nguyên tử. Độ giàu đồng vị là phần số nguyên tử, không phải phần khối lượng.

Averaging the two mass numbers, or weighting by mass instead of by number of atoms. Isotopic abundance is a number fraction, not a mass fraction.

1.3. Độ hụt khối và năng lượng liên kết – Mass defect and binding energy

Khối lượng của một hạt nhân nhỏ hơn tổng khối lượng các nucleon riêng lẻ tạo thành nó. Phần chênh lệch là độ hụt khối.

The mass of a nucleus is smaller than the total mass of the separate nucleons that form it. The difference is the mass defect.

ĐỊNH NGHĨA 1.7 (Độ hụt khối) / DEFINITION 1.7 (Mass defect) – Độ hụt khối của hạt nhân ${}^A_ZX$ là $\Delta m = Z \cdot m_p + (A - Z) \cdot m_n - m_{hn}$, với m_{hn} là khối lượng hạt nhân.
The mass defect of the nucleus ${}^A_ZX$ is $\Delta m = Z \cdot m_p + (A - Z) \cdot m_n - m_{nuc}$, where m_{nuc} is the mass of the nucleus.

Bảng khối lượng cho khối lượng nguyên tử M (kể cả Z electron) chứ không cho khối lượng hạt nhân, nên cần dạng dùng được ngay.

Mass tables give the atomic mass M (including the Z electrons), not the nuclear mass, so a directly usable form is needed.

Chứng minh. / Proof.

Bỏ qua năng lượng liên kết của electron (cỡ eV đến keV, nhỏ hơn năng lượng liên kết hạt nhân hàng nghìn lần): $m_{hn} = M - Z \cdot m_e$ và $M({}^1H) = m_p + m_e$. Thay vào định nghĩa:

Neglect the binding energy of the electrons (eV to keV, thousands of times smaller than the nuclear binding energy): $m_{nuc} = M - Z \cdot m_e$ and $M({}^1H) = m_p + m_e$. Substituting into the definition:

$$\Delta m = Z \cdot (m_p + m_e) + (A - Z) \cdot m_n - (M - Z \cdot m_e + Z \cdot m_e) = Z \cdot M({}^1H) + (A - Z) \cdot m_n - M \quad (1.4)$$

Z khối lượng electron triệt tiêu, nên chỉ cần $M({}^1H)$, m_n và M của nuclide.

The Z electron masses cancel, so only $M({}^1H)$, m_n and the M of the nuclide are needed. ■

ĐỊNH LUẬT 1.8 (Hệ thức khối lượng – năng lượng (Einstein)) / LAW 1.8 (Mass–energy relation (Einstein)) – Khi một hệ giải phóng năng lượng E (nhiệt, bức xạ, động năng), khối lượng nghỉ của hệ giảm $\Delta m = E/c^2$. Năng lượng liên kết E_{lk} của hạt nhân là năng lượng tối thiểu cần cung cấp để tách nó thành các nucleon riêng lẻ đứng yên, và $E_{lk} = \Delta m \cdot c^2$. Phạm vi: mọi biến đổi, kiểm chứng thực nghiệm trong phản ứng hạt nhân.

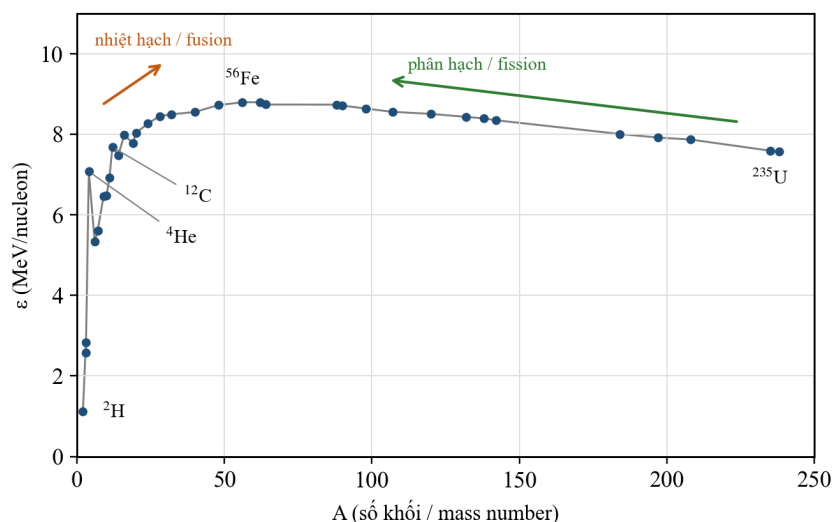
When a system releases energy E (heat, radiation, kinetic energy), its rest mass falls by $\Delta m = E/c^2$. The binding energy E_b of a nucleus is the minimum energy needed to separate it into free nucleons at rest, and $E_b = \Delta m \cdot c^2$. Scope: every transformation, confirmed experimentally in nuclear reactions.

$$E_{lk} = \Delta m \cdot c^2, \quad 1 \text{ u} \cdot c^2 \approx 931,5 \text{ MeV} \quad (1.5)$$

ĐỊNH NGHĨA 1.9 (Năng lượng liên kết riêng) / DEFINITION 1.9 (Binding energy per nucleon) – Năng lượng liên kết riêng ε là năng lượng liên kết tính trên một nucleon: $\varepsilon = E_{lk}/A$. Hạt nhân có ε càng lớn càng bền.

The binding energy per nucleon ε is the binding energy divided by the number of nucleons: $\varepsilon = E_b/A$. The larger ε is, the more stable the nucleus.

$$\varepsilon = E_{lk} / A \quad (1.6)$$



Hình 1.1. Năng lượng liên kết riêng ϵ theo số khối A , tính từ khối lượng nguyên tử của các nuclide bền (mũi tên chỉ chiều ϵ tăng).

Figure 1.1. Binding energy per nucleon ϵ against mass number A , from the atomic masses of stable nuclides (arrows show the direction in which ϵ rises).

TÍNH CHẤT 1.10 (Đường cong năng lượng liên kết riêng) / PROPERTY 1.10 (Curve of binding energy per nucleon) – Đường cong ϵ theo A có dạng: ϵ tăng nhanh từ ${}^2\text{H}$ (1,11 MeV) đến ${}^4\text{He}$ (7,07 MeV), tăng chậm đến cực đại $\approx 8,8$ MeV ở $A = 56$ đến 62 (nhóm sắt – nickel), rồi giảm dần đến $\approx 7,6$ MeV ở uranium. ${}^4\text{He}$ và ${}^{12}\text{C}$ cao hơn các hạt nhân kề bên.

The curve of ϵ against A has this shape: ϵ rises steeply from ${}^2\text{H}$ (1.11 MeV) to ${}^4\text{He}$ (7.07 MeV), rises slowly to a maximum of ≈ 8.8 MeV at $A = 56$ to 62 (the iron – nickel group), then falls gradually to ≈ 7.6 MeV at uranium. ${}^4\text{He}$ and ${}^{12}\text{C}$ lie above their neighbours.

NHẬN XÉT / REMARK – Lực hạt nhân mạnh có tầm ngắn cỡ vài fm, nên mỗi nucleon chỉ liên kết với các nucleon sát cạnh: ϵ tăng rồi bão hòa. Hạt nhân nhỏ có nhiều nucleon ở bề mặt thiếu láng giềng nên ϵ thấp. Ở hạt nhân nặng, lực đẩy Coulomb giữa các proton có tầm xa, tăng gần như theo Z^2 , kéo ϵ xuống. Hai hiệu ứng này đặt cực đại ở vùng sắt – nickel. Đây là giải thích định tính, không chứng minh.

The strong nuclear force has a range of a few fm, so each nucleon binds only to its immediate neighbours: ϵ rises and then saturates. Small nuclei have many surface nucleons that lack neighbours, so ϵ is low. In heavy nuclei the long-range Coulomb repulsion between protons grows roughly as Z^2 and pulls ϵ down. These two effects place the maximum in the iron – nickel region. This is a qualitative explanation, not a proof.

HỆ QUẢ 1.11 / COROLLARY 1.11 – Trong phản ứng hạt nhân (số nucleon bảo toàn), năng lượng tỏa ra là $Q = \sum E_{\text{lk}}(\text{sản phẩm}) - \sum E_{\text{lk}}(\text{chất đầu}) = \sum A_j \cdot \epsilon_j - \sum A_i \cdot \epsilon_i$. Phân hạch hạt nhân nặng thành các mảnh trung bình và nhiệt hạch hạt nhân nhẹ thành hạt nhân nặng hơn đều làm ϵ tăng nên $Q > 0$. Biến đổi đi ngược về phía ϵ giảm thì $Q < 0$.

In a nuclear reaction (nucleon number conserved) the energy released is $Q = \sum E_b(\text{products}) - \sum E_b(\text{reactants}) = \sum A_j \cdot \epsilon_j - \sum A_i \cdot \epsilon_i$. Fission of a heavy nucleus into medium-mass fragments and fusion of light nuclei into a heavier one both raise ϵ , so $Q > 0$. A change that moves towards lower ϵ has $Q < 0$.

Chứng minh. / Proof.

Mỗi khối lượng hạt nhân bằng tổng khối lượng nucleon trừ E_{lk}/c^2 . Số proton và số neutron tự do ở hai vế bằng nhau (bảo toàn điện tích và số nucleon), nên chỉ còn các E_{lk} . Proton hay neutron tự do có $E_{lk} = 0$ nên không đóng góp:

Each nuclear mass equals the sum of its nucleon masses minus E_b/c^2 . The numbers of protons and neutrons on the two sides are equal (charge and nucleon number are conserved), so only the E_b terms remain. A free proton or neutron has $E_b = 0$ and contributes nothing:

$$Q = \sum E_{lk}(\text{sản phẩm}) - \sum E_{lk}(\text{chất đầu}) = \sum A_j \cdot \varepsilon_j - \sum A_i \cdot \varepsilon_i \quad (1.7)$$

PHÂN TÍCH / ANALYSIS – Đề cho khối lượng NGUYÊN TỬ nên dùng dạng (1.4) với $M(^1H)$, không dùng m_p . Dùng m_p mà quên cộng electron làm sai $Z \cdot m_e$: với $Z = 15$ đã là 7,7 MeV trên khoảng 263 MeV. Độ hụt khối cỡ 10^{-1} u trên khối lượng cỡ 10^1 u, nên phải giữ ít nhất 6 chữ số thập phân của khối lượng.

The problem gives ATOMIC masses, so use form (1.4) with $M(^1H)$, not m_p . Using m_p and forgetting the electrons gives an error $Z \cdot m_e$: for $Z = 15$ that is already 7.7 MeV out of about 263 MeV. The mass defect is of the order of 10^{-1} u on masses of order 10^1 u, so keep at least 6 decimal places in the masses.

VÍ DỤ 1.3 (Hụt khối từ khối lượng nguyên tử) / EXAMPLE 1.3 (Mass defect from atomic masses) – Cho $M(^{31}P) = 30,973762$ u, $M(^1H) = 1,007825$ u, $m_n = 1,008665$ u và $1 \text{ u} = 931,5 \text{ MeV}/c^2$. Tính độ hụt khối, năng lượng liên kết và năng lượng liên kết riêng của ^{31}P .
Given $M(^{31}P) = 30.973762$ u, $M(^1H) = 1.007825$ u, $m_n = 1.008665$ u and $1 \text{ u} = 931.5 \text{ MeV}/c^2$. Find the mass defect, binding energy and binding energy per nucleon of ^{31}P .

Lời giải. / Solution.

- $^{31}_{15}P$ có $Z = 15$ và $N = 16$. Theo (1.4): $\Delta m = 15 \cdot 1,007825 + 16 \cdot 1,008665 - 30,973762$.
 $^{31}_{15}P$ has $Z = 15$ and $N = 16$. By (1.4): $\Delta m = 15 \times 1.007825 + 16 \times 1.008665 - 30.973762$.
- $15 \cdot 1,007825 = 15,117375$; $16 \cdot 1,008665 = 16,138640$; tổng 31,256015. $\Delta m = 31,256015 - 30,973762 = 0,282253$ u.
 $15 \times 1.007825 = 15.117375$; $16 \times 1.008665 = 16.138640$; sum 31.256015. $\Delta m = 31.256015 - 30.973762 = 0.282253$ u.
- $E_{lk} = 0,282253 \cdot 931,5 \approx 262,9$ MeV.
 $E_b = 0.282253 \times 931.5 \approx 262.9$ MeV.
- $\varepsilon = 262,9/31 \approx 8,48$ MeV/nucleon, phù hợp với Hình 1.1 (hạt nhân cỡ $A = 30$ nằm ở vùng 8,4 đến 8,5).
 $\varepsilon = 262.9/31 \approx 8.48$ MeV per nucleon, consistent with Figure 1.1 (nuclei near $A = 30$ lie at 8.4 to 8.5).

Vậy $\Delta m \approx 0,2823$ u, $E_{lk} \approx 262,9$ MeV, $\varepsilon \approx 8,48$ MeV/nucleon.

Hence $\Delta m \approx 0.2823$ u, $E_b \approx 262.9$ MeV, $\varepsilon \approx 8.48$ MeV per nucleon. ■

PHÂN TÍCH / ANALYSIS – Chọn công cụ theo thứ tự: (1) ϵ từ Hình 1.1 cho Q của một phân hạch; (2) đổi MeV sang J rồi nhân N_A cho một mol; (3) chia cho khối lượng mol để ra năng lượng trên gam. So hai quá trình trên cùng một gam chất mới công bằng, vì nhiệt hạch có chất đầu nhẹ.

Choose tools in order: (1) ϵ from Figure 1.1 gives Q for one fission; (2) convert MeV to J and multiply by N_A for one mole; (3) divide by the molar mass to get energy per gram. Comparing the two processes per gram of material is the fair test, because fusion starts from light reactants.

VÍ DỤ 1.4 (Phân hạch và nhiệt hạch từ đường cong ϵ) / EXAMPLE 1.4 (Fission and fusion from the ϵ curve) – Đường cong ở Hình 1.1 cho $\epsilon(^{235}\text{U}) = 7,59$ MeV và $\epsilon \approx 8,5$ MeV với các hạt nhân có A từ 90 đến 140. (a) Ước tính năng lượng tỏa khi một hạt nhân ^{235}U phân hạch thành hai mảnh (neutron tự do có $E_{\text{lk}} = 0$). (b) Lấy 200 MeV mỗi phân hạch, tính năng lượng tỏa khi phân hạch hết 1,00 g ^{235}U ($M = 235$ g/mol) và khối lượng than đá tương đương (nhiệt trị 29 MJ/kg). (c) Phản ứng $^2\text{H} + ^3\text{H} \rightarrow ^4\text{He} + ^1_0\text{n}$ có $Q = 17,6$ MeV; tính năng lượng tỏa trên 1,00 g hỗn hợp chất tham gia ($M(^2\text{H}) = 2,014$ và $M(^3\text{H}) = 3,016$ g/mol) và so với (b).

The curve in Figure 1.1 gives $\epsilon(^{235}\text{U}) = 7.59$ MeV and $\epsilon \approx 8.5$ MeV for nuclei with A from 90 to 140. (a) Estimate the energy released when one ^{235}U nucleus fissions into two fragments (a free neutron has $E_b = 0$). (b) Taking 200 MeV per fission, find the energy released by fully fissioning 1.00 g of ^{235}U ($M = 235$ g/mol) and the mass of coal with the same heat (calorific value 29 MJ/kg). (c) The reaction $^2\text{H} + ^3\text{H} \rightarrow ^4\text{He} + ^1_0\text{n}$ has $Q = 17.6$ MeV; find the energy released per 1.00 g of reactants ($M(^2\text{H}) = 2.014$ and $M(^3\text{H}) = 3.016$ g/mol) and compare with (b).

Lời giải. / Solution.

1. Số nucleon được bảo toàn ($A = 235$), nên theo (1.7): $Q \approx 235 \cdot (8,5 - 7,59) \approx 2,1 \cdot 10^2$ MeV, cùng bậc với giá trị 200 MeV thường dùng.

Nucleon number is conserved ($A = 235$), so by (1.7): $Q \approx 235 \times (8.5 - 7.59) \approx 2.1 \cdot 10^2$ MeV, the same order as the 200 MeV commonly used.

2. 1,00 g ^{235}U có $1,00/235$ mol, tức $1,00/235 \cdot 6,022 \cdot 10^{23} = 2,56 \cdot 10^{21}$ hạt nhân. Năng lượng = $2,56 \cdot 10^{21} \cdot 200 \cdot 1,602 \cdot 10^{-13}$ J = $8,2 \cdot 10^{10}$ J.

1.00 g of ^{235}U is $1.00/235$ mol, i.e. $1.00/235 \times 6.022 \cdot 10^{23} = 2.56 \cdot 10^{21}$ nuclei. Energy = $2.56 \cdot 10^{21} \times 200 \times 1.602 \cdot 10^{-13}$ J = $8.2 \cdot 10^{10}$ J.

3. Khối lượng than = $8,2 \cdot 10^{10}$ J / $2,9 \cdot 10^7$ J/kg $\approx 2,83 \cdot 10^3$ kg, khoảng 2,8 tấn.

Mass of coal = $8.2 \cdot 10^{10}$ J / $2.9 \cdot 10^7$ J/kg $\approx 2.83 \cdot 10^3$ kg, about 2.8 tonnes.

4. Một mol phản ứng dùng $2,014 + 3,016 = 5,030$ g chất đầu và tỏa $17,6 \cdot 1,602 \cdot 10^{-13} \cdot 6,022 \cdot 10^{23} = 1,70 \cdot 10^{12}$ J. Trên 1,00 g: $1,70 \cdot 10^{12}/5,030 \approx 3,4 \cdot 10^{11}$ J.

One mole of reaction uses $2.014 + 3.016 = 5.030$ g of reactants and releases $17.6 \times 1.602 \cdot 10^{-13} \times 6.022 \cdot 10^{23} = 1.70 \cdot 10^{12}$ J. Per 1.00 g: $1.70 \cdot 10^{12}/5.030 \approx 3.4 \cdot 10^{11}$ J.

Vậy phân hạch $\approx 2 \cdot 10^2$ MeV mỗi hạt nhân, 1,00 g ^{235}U tỏa $\approx 8,2 \cdot 10^{10}$ J ($\approx 2,8$ tấn than); 1,00 g hỗn hợp deuterium – tritium tỏa $\approx 3,4 \cdot 10^{11}$ J, gấp khoảng 4,1 lần.

Hence fission releases $\approx 2 \cdot 10^2$ MeV per nucleus, 1.00 g of ^{235}U releases $\approx 8.2 \cdot 10^{10}$ J (≈ 2.8 tonnes of coal); 1.00 g of deuterium – tritium mixture releases $\approx 3.4 \cdot 10^{11}$ J, about 4.1 times as much. ■

LỖI HAY GẶP / COMMON MISTAKE – Dùng m_p thay cho $M(^1\text{H})$ khi đề cho khối lượng nguyên tử, hoặc làm tròn khối lượng đến 2 đến 3 chữ số thập phân: Δm sai vì nó là hiệu của hai số gần nhau.

Using m_p instead of $M(^1\text{H})$ when atomic masses are given, or rounding masses to 2 or 3 decimals: Δm is then wrong because it is a difference of two nearly equal numbers.

PHẢI THUỘC / MEMORISE – $E_{\text{lk}} = \Delta m \cdot c^2$; $\varepsilon = E_{\text{lk}}/A$; $1 \text{ u} \approx 931,5 \text{ MeV}/c^2$; $Q = \Sigma A \cdot \varepsilon(\text{sản phẩm}) - \Sigma A \cdot \varepsilon(\text{chất đầu})$; cực đại của $\varepsilon \approx 8,8 \text{ MeV}$ ở vùng sắt – nickel.

$E_b = \Delta m \cdot c^2$; $\varepsilon = E_b/A$; $1 \text{ u} \approx 931.5 \text{ MeV}/c^2$; $Q = \Sigma A \cdot \varepsilon(\text{products}) - \Sigma A \cdot \varepsilon(\text{reactants})$; the maximum of $\varepsilon \approx 8.8 \text{ MeV}$ lies in the iron – nickel region.

1.4. Các kiểu phóng xạ và định luật bảo toàn – Modes of radioactive decay and conservation laws

ĐỊNH NGHĨA 1.12 (Phóng xạ) / DEFINITION 1.12 (Radioactivity) – Phóng xạ là quá trình hạt nhân không bền tự biến đổi thành hạt nhân khác hoặc về trạng thái năng lượng thấp hơn, kèm phát ra hạt hoặc photon. Quá trình xảy ra ngẫu nhiên cho từng hạt nhân và không phụ thuộc nhiệt độ, áp suất hay trạng thái hóa học của nguyên tử (trừ sai khác nhỏ ở bắt electron).

Radioactivity is the spontaneous change of an unstable nucleus into another nucleus, or to a state of lower energy, with emission of a particle or photon. It occurs at random for each nucleus and does not depend on temperature, pressure or the chemical state of the atom (apart from small differences in electron capture).

Kiểu Mode	Hạt phát ra Emitted	Biến đổi Change	Ví dụ Example
α	^4_2He	Z giảm 2, A giảm 4 <i>Z falls by 2, A by 4</i>	$^{241}_{95}\text{Am} \rightarrow ^{237}_{93}\text{Np} + ^4_2\text{He}$
β^-	e^- , $\bar{\nu}_e$	Z tăng 1, A giữ nguyên <i>Z rises by 1, A unchanged</i>	$^{60}_{27}\text{Co} \rightarrow ^{60}_{28}\text{Ni} + ^0_{-1}e + \bar{\nu}_e$
β^+	e^+ , ν_e	Z giảm 1, A giữ nguyên <i>Z falls by 1, A unchanged</i>	$^{11}_6\text{C} \rightarrow ^{11}_5\text{B} + ^0_{+1}e + \nu_e$
Bắt electron <i>Electron capture</i>	ν_e và tia X <i>ν_e and X-rays</i>	Z giảm 1, A giữ nguyên <i>Z falls by 1, A unchanged</i>	$^7_4\text{Be} + ^0_{-1}e \rightarrow ^7_3\text{Li} + \nu_e$
γ	photon	Z và A giữ nguyên <i>Z and A unchanged</i>	$^{137\text{m}}_{56}\text{Ba} \rightarrow ^{137}_{56}\text{Ba} + \gamma$

Trong phân rã β^- , một neutron trong hạt nhân biến thành proton: $n \rightarrow p + e^- + \bar{\nu}_e$. Trong phân rã β^+ , một proton biến thành neutron: $p \rightarrow n + e^+ + \nu_e$. Neutrino ν_e và phản neutrino $\bar{\nu}_e$ trung hòa, khối lượng gần bằng không, tương tác yếu; chúng mang một phần năng lượng và động lượng, nên động năng electron β có phổ liên tục từ 0 đến giá trị cực đại. Phân rã γ thường theo sau phân rã khác vì hạt nhân con sinh ra ở trạng thái kích thích, chẳng hạn $^{137\text{m}}\text{Ba}$ (chữ m là trạng thái bán bền) sinh ra từ ^{137}Cs .

In β^- decay a neutron in the nucleus changes into a proton: $n \rightarrow p + e^- + \bar{\nu}_e$. In β^+ decay a proton changes into a neutron: $p \rightarrow n + e^+ + \nu_e$. The neutrino ν_e and antineutrino $\bar{\nu}_e$ are neutral, almost massless and interact weakly; they carry part of the energy and momentum, so the kinetic energy of the β particle has a continuous spectrum from 0 to a maximum. γ decay usually follows another decay because the daughter nucleus is formed in an excited state, for example ^{137m}Ba (the letter m marks a metastable state) formed from ^{137}Cs .

Về khả năng xuyên: hạt α bị một tờ giấy chặn lại, hạt β đi được vài mm trong nhôm, còn photon γ xuyên sâu hơn nhiều và giảm theo hàm mũ qua chì hay bê tông. Hạt α nguy hiểm nhất khi chất phát α vào bên trong cơ thể.

In penetration, an α particle is stopped by a sheet of paper, a β particle travels a few mm in aluminium, and γ photons go much deeper and fall off exponentially through lead or concrete. An α emitter is most dangerous when it gets inside the body.

ĐỊNH LUẬT 1.13 (Định luật bảo toàn trong biến đổi hạt nhân) / LAW 1.13

(Conservation laws in nuclear change) – Trong mọi biến đổi hạt nhân, tổng số khối, tổng điện tích, tổng năng lượng toàn phần (kể cả năng lượng nghỉ), tổng động lượng và số lepton được bảo toàn. Số lepton của e^- và ν_e bằng +1, của e^+ và $\bar{\nu}_e$ bằng -1. Khối lượng nghỉ tổng cộng không bảo toàn.

In every nuclear change the total mass number, total charge, total energy (including rest energy), total momentum and lepton number are conserved. The lepton number of e^- and ν_e is +1 and that of e^+ and $\bar{\nu}_e$ is -1. The total rest mass is not conserved.

Ví dụ: trong $^{60}_{27}\text{Co} \rightarrow ^{60}_{28}\text{Ni} + ^0_{-1}e + \bar{\nu}_e$, tổng số khối ở hai vế đều 60, tổng điện tích đều 27 ($28 - 1 + 0$). Lepton: 0 ở vế trái, $+1 - 1 = 0$ ở vế phải.

Example: in $^{60}_{27}\text{Co} \rightarrow ^{60}_{28}\text{Ni} + ^0_{-1}e + \bar{\nu}_e$ the mass numbers on both sides total 60 and the charges total 27 ($28 - 1 + 0$). Lepton number: 0 on the left, $+1 - 1 = 0$ on the right.

HỆ QUẢ 1.14 / COROLLARY 1.14 – Nếu nuclide $^{A_1}_{Z_1}X$ biến thành $^{A_2}_{Z_2}Y$ sau x phân rã α , y_- phân rã β^- và y_+ phân rã β^+ (hoặc bắt electron) thì $A_1 - A_2 = 4x$ và $Z_1 - Z_2 = 2x - y_- + y_+$. Từ hai đầu mút chỉ xác định được x và hiệu $y_- - y_+$.

If the nuclide $^{A_1}_{Z_1}X$ becomes $^{A_2}_{Z_2}Y$ after x α decays, y_- β^- decays and y_+ β^+ decays (or electron captures), then $A_1 - A_2 = 4x$ and $Z_1 - Z_2 = 2x - y_- + y_+$. From the two end points only x and the difference $y_- - y_+$ can be found.

$$A_1 - A_2 = 4x, \quad Z_1 - Z_2 = 2x - y_- + y_+ \quad (1.8)$$

PHÂN TÍCH / ANALYSIS – Chỉ phân rã α đổi số khối, mỗi lần giảm 4, nên tìm x trước từ hiệu số khối. Rồi dùng điện tích để tìm hiệu $y_- - y_+$. Đề cho thêm thông tin (chỉ có β^- , hoặc thứ tự phân rã) mới tách được từng y.

Only α decay changes the mass number, by 4 each time, so find x first from the mass number difference. Then use the charge to find $y_- - y_+$. The individual y values follow only if the problem adds information (only β^- occurs, or the order of decays).

VÍ DỤ 1.5 (Đếm phân rã bằng bảo toàn) / EXAMPLE 1.5 (Counting decays by conservation)

– Nuclide $^{241}_{94}\text{Pu}$ biến thành $^{229}_{90}\text{Th}$ qua x phân rã α , y_- phân rã β^- và y_+ phân rã β^+ . (a) Tìm x và $y_- - y_+$. (b) Chuỗi thật chỉ có α và β^- , theo thứ tự β^- , α , α , β^- , α . Viết năm

phương trình, ghi hạt nhân trung gian (dùng bảng tuần hoàn để đặt tên theo Z).

The nuclide $^{241}_{94}\text{Pu}$ becomes $^{229}_{90}\text{Th}$ through x α decays, y_- β^- decays and y_+ β^+ decays. (a) Find x and $y_- - y_+$. (b) The real chain has only α and β^- , in the order β^- , α , α , β^- , α . Write the five equations and name the intermediate nuclides (use the periodic table to name them from Z).

Lời giải. / Solution.

1. Số khối: $241 - 229 = 12 = 4x$ nên $x = 3$.

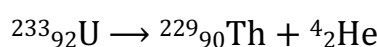
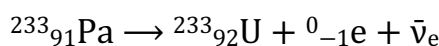
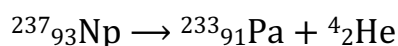
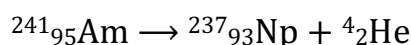
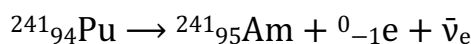
Mass number: $241 - 229 = 12 = 4x$, so $x = 3$.

2. Điện tích: $94 - 90 = 4 = 2 \cdot 3 - y_- + y_+$, suy ra $y_- - y_+ = 2$. Nghiệm không âm nhỏ nhất là $y_- = 2$, $y_+ = 0$; các nghiệm (3, 1), (4, 2)... cũng thỏa nên cần dữ kiện thêm.

Charge: $94 - 90 = 4 = 2 \times 3 - y_- + y_+$, so $y_- - y_+ = 2$. The smallest non-negative solution is $y_- = 2$, $y_+ = 0$; (3, 1), (4, 2) and so on also fit, so extra information is needed.

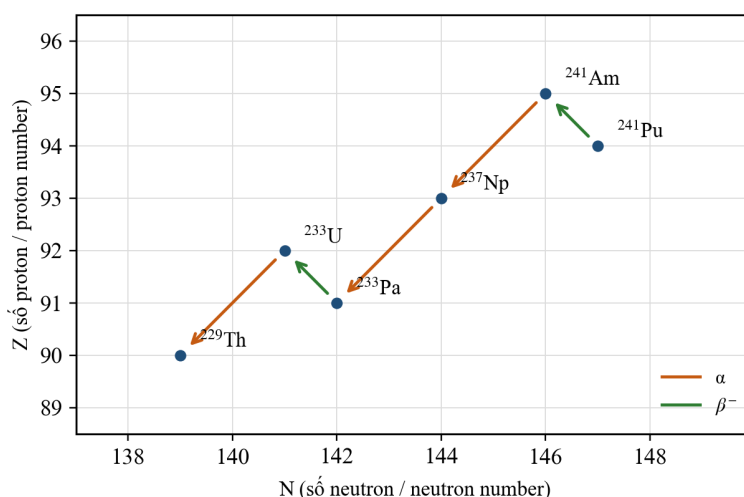
3. Với chuỗi thật (3 phân rã α , 2 phân rã β^-), Z lần lượt 94, 95 (Am), 93 (Np), 91 (Pa), 92 (U), 90 (Th) và A lần lượt 241, 241, 237, 233, 233, 229.

For the real chain (three α decays, two β^- decays), Z runs 94, 95 (Am), 93 (Np), 91 (Pa), 92 (U), 90 (Th) and A runs 241, 241, 237, 233, 233, 229.



Vậy $x = 3$, $y_- - y_+ = 2$; chuỗi thật có 3 phân rã α và 2 phân rã β^- .

Hence $x = 3$ and $y_- - y_+ = 2$; the real chain has 3 α decays and 2 β^- decays. ■



Hình 1.2. Chuỗi từ plutonium-241 đến thorium-229 trên mặt phẳng (N, Z): phân rã α dịch $(-2, -2)$, phân rã β^- dịch $(-1, +1)$ (ví dụ 1.5).

Figure 1.2. The chain from plutonium-241 to thorium-229 on the (N, Z) plane: an α decay moves $(-2, -2)$, a β^- decay moves $(-1, +1)$ (Example 1.5).

TÍNH CHẤT 1.15 (Năng lượng các kiểu phân rã) / PROPERTY 1.15 (Energy of the decay modes) – Với M là khối lượng nguyên tử trung hòa của hạt nhân mẹ (P) và hạt nhân con (D), năng lượng giải phóng: $Q_\alpha = [M(P) - M(D) - M(^4\text{He})]c^2$, $Q_{\beta^-} = [M(P) - M(D)]c^2$, $Q_{\text{EC}} = [M(P) - M(D)]c^2$, $Q_{\beta^+} = [M(P) - M(D) - 2m_e]c^2$. Phân rã chỉ xảy ra tự phát khi $Q > 0$. Với $m_e c^2 \approx 0,511 \text{ MeV}$, $2m_e c^2 \approx 1,022 \text{ MeV}$.

With M the neutral atomic mass of the parent (P) and daughter (D), the energy released is: $Q_\alpha = [M(P) - M(D) - M(^4\text{He})]c^2$, $Q_{\beta^-} = [M(P) - M(D)]c^2$, $Q_{\text{EC}} = [M(P) - M(D)]c^2$, $Q_{\beta^+} = [M(P) - M(D) - 2m_e]c^2$. Decay occurs spontaneously only if $Q > 0$. With $m_e c^2 \approx 0.511 \text{ MeV}$, $2m_e c^2 \approx 1.022 \text{ MeV}$.

Chứng minh. / Proof.

Viết khối lượng hạt nhân qua khối lượng nguyên tử: $m_{\text{hn}} = M - Z \cdot m_e$ (bỏ qua năng lượng liên kết electron). Với β^+ , hạt nhân mẹ có điện tích Z còn hạt nhân con $Z - 1$ và hạt thoát ra là positron khối lượng m_e :

Write nuclear masses through atomic masses: $m_{\text{nuc}} = M - Z \cdot m_e$ (neglecting electron binding energy). For β^+ the parent nucleus has charge Z , the daughter $Z - 1$, and the emitted particle is a positron of mass m_e :

$$Q_{\beta^+}/c^2 = [M(P) - Z \cdot m_e] - [M(D) - (Z - 1) \cdot m_e] - m_e = M(P) - M(D) - 2m_e$$

Với β^- hạt nhân con có $Z + 1$ nên electron của nguyên tử con bù đúng electron phát ra, và các m_e triệt tiêu. Bắt electron: hạt nhân mẹ nhận thêm một electron, các m_e cũng triệt tiêu. Với α , hai electron của nguyên tử ^4He bù hai electron mà nguyên tử con dư ra.

For β^- the daughter has $Z + 1$, so the electron of the daughter atom compensates the electron emitted and the m_e terms cancel. In electron capture the parent nucleus takes up an electron and the m_e terms cancel as well. For α , the two electrons of the ^4He atom account for the two extra electrons of the daughter atom. ■

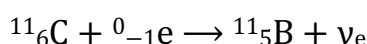
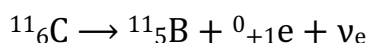
PHÂN TÍCH / ANALYSIS – Cùng bảng khối lượng nguyên tử nhưng β^+ bị trừ thêm $2m_e c^2 = 1,022 \text{ MeV}$ còn bắt electron thì không. Vì thế có hạt nhân chỉ bắt electron được. Tính hiệu $M(P) - M(D)$ trước, đổi ra MeV rồi so với $1,022 \text{ MeV}$.

From the same atomic mass table, β^+ loses an extra $2m_e c^2 = 1.022 \text{ MeV}$ while electron capture does not. Some nuclei can therefore only capture an electron. Compute $M(P) - M(D)$ first, convert to MeV, then compare with 1.022 MeV .

VÍ DỤ 1.6 (Hai điều kiện năng lượng) / EXAMPLE 1.6 (Two energy conditions) – Cho $M(^{11}\text{C}) = 11,011433 \text{ u}$, $M(^{11}\text{B}) = 11,009305 \text{ u}$, $m_e c^2 = 0,511 \text{ MeV}$ và $1 \text{ u} = 931,5 \text{ MeV}/c^2$. (a) Viết phương trình phân rã β^+ và bắt electron của ^{11}C thành ^{11}B . (b) Tính Q của từng kiểu. (c) Cho biết động năng cực đại của positron (bỏ qua động năng giật của hạt nhân con).

Given $M(^{11}\text{C}) = 11.011433 \text{ u}$, $M(^{11}\text{B}) = 11.009305 \text{ u}$, $m_e c^2 = 0.511 \text{ MeV}$ and $1 \text{ u} = 931.5 \text{ MeV}/c^2$. (a) Write the β^+ decay and electron capture of ^{11}C into ^{11}B . (b) Find Q for each mode. (c) State the maximum kinetic energy of the positron (neglect the recoil energy of the daughter nucleus).

Lời giải. / Solution.



1. $M(P) - M(D) = 11,011433 - 11,009305 = 0,002128 \text{ u}$, tức $0,002128 \cdot 931,5 = 1,982 \text{ MeV}$.
 $M(P) - M(D) = 11.011433 - 11.009305 = 0.002128 \text{ u}$, i.e. $0.002128 \times 931.5 = 1.982 \text{ MeV}$.
2. Bắt electron: $Q_{EC} = 1,982 \text{ MeV}$. Phân rã β^+ : $Q_{\beta^+} = 1,982 - 2 \cdot 0,511 = 0,960 \text{ MeV}$. Cả hai dương, nên cả hai kiểu đều xảy ra được.
Electron capture: $Q_{EC} = 1.982 \text{ MeV}$. β^+ decay: $Q_{\beta^+} = 1.982 - 2 \times 0.511 = 0.960 \text{ MeV}$. Both are positive, so both modes can occur.
3. Positron nhận động năng lớn nhất khi neutrino mang năng lượng gần 0: $T_{\max} \approx Q_{\beta^+} = 0,960 \text{ MeV}$.
The positron gets the most kinetic energy when the neutrino carries almost none: $T_{\max} \approx Q_{\beta^+} = 0.960 \text{ MeV}$.

Vậy $Q_{EC} \approx 1,98 \text{ MeV}$, $Q_{\beta^+} \approx 0,960 \text{ MeV}$ và động năng cực đại của positron $\approx 0,960 \text{ MeV}$.
Hence $Q_{EC} \approx 1.98 \text{ MeV}$, $Q_{\beta^+} \approx 0.960 \text{ MeV}$ and the maximum positron kinetic energy is $\approx 0.960 \text{ MeV}$. ■

LỖI HAY GẶP / COMMON MISTAKE – Quên trừ $2m_e c^2$ khi tính Q của phân rã β^+ , hoặc trừ nhầm vào bắt electron và β^- . Dấu của Q quyết định kiểu phân rã có xảy ra hay không.
Forgetting to subtract $2m_e c^2$ in Q for β^+ decay, or subtracting it wrongly for electron capture and β^- . The sign of Q decides whether the mode can occur.

NHẬN XÉT / REMARK – Phản neutrino và neutrino không thể bỏ khỏi phương trình: thiếu chúng thì số lepton không bảo toàn. Khi đếm số khối và điện tích có thể bỏ qua chúng vì chúng mang $A = 0$ và $Z = 0$.
The antineutrino and neutrino cannot be dropped from an equation: without them lepton number is not conserved. When counting mass number and charge they can be ignored, since they have $A = 0$ and $Z = 0$.

1.5. Định luật phân rã phóng xạ – The law of radioactive decay

ĐỊNH LUẬT 1.16 (Định luật phân rã phóng xạ) / LAW 1.16 (Law of radioactive decay)
 – Mỗi hạt nhân của một nuclide phóng xạ có cùng xác suất phân rã trong một đơn vị thời gian, ký hiệu λ (hằng số phân rã), không phụ thuộc tuổi của hạt nhân và điều kiện bên ngoài. Hệ quả là số hạt nhân chưa phân rã giảm theo hàm mũ: $N = N_0 \cdot e^{-\lambda t}$. Phạm vi: mẫu có số hạt nhân lớn (với vài hạt nhân thì dao động thống kê lớn).
Every nucleus of a radioactive nuclide has the same probability of decaying per unit time, written λ (the decay constant), independent of the age of the nucleus and of external conditions. The consequence is that the number of undecayed nuclei falls exponentially: $N = N_0 \cdot e^{-\lambda t}$. Scope: samples with a large number of nuclei (with only a few nuclei the statistical fluctuation is large).

Hằng số λ có đơn vị nghịch đảo thời gian (s^{-1} , ngày $^{-1}$). Dạng hàm mũ được phát biểu không chứng minh; nó là nghiệm của điều kiện số hạt nhân mất đi trong khoảng thời gian ngắn tỉ lệ với N .

The constant λ has units of inverse time (s^{-1} , day $^{-1}$). The exponential form is stated without proof; it is the solution of the condition that the number of nuclei lost in a short interval is proportional to N .

HỆ QUẢ 1.17 / COROLLARY 1.17 – Chu kỳ bán hủy T là thời gian để số hạt nhân giảm một nửa. Khi đó $\lambda = \ln 2/T$ và $N = N_0 \cdot 2^{-t/T}$. Thời gian sống trung bình là $\tau = 1/\lambda = T/\ln 2 \approx 1,443 \cdot T$.

The half-life T is the time for the number of nuclei to halve. Then $\lambda = \ln 2/T$ and $N = N_0 \cdot 2^{-t/T}$. The mean lifetime is $\tau = 1/\lambda = T/\ln 2 \approx 1.443 \cdot T$.

Chứng minh. / Proof.

Tại $t = T$ có $N = N_0/2$, nên $e^{-\lambda T} = 1/2$, suy ra $\lambda T = \ln 2$. Viết lại $e^{-\lambda t} = e^{-(\ln 2) \cdot t/T} = 2^{-t/T}$.

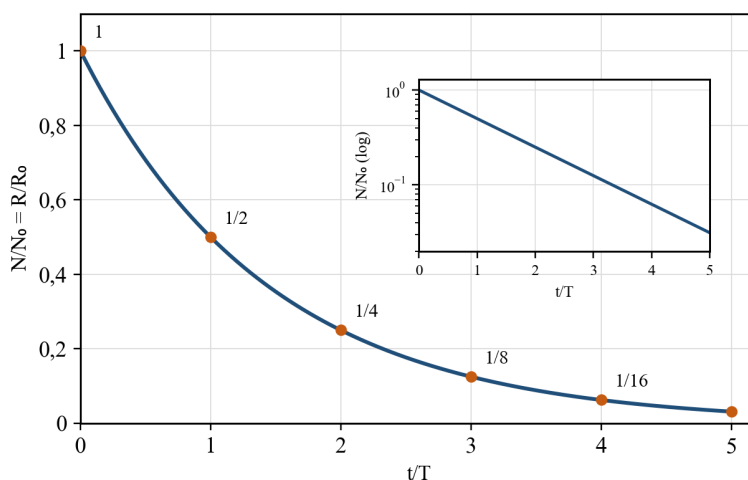
At $t = T$, $N = N_0/2$, so $e^{-\lambda T} = 1/2$, hence $\lambda T = \ln 2$. Rewriting $e^{-\lambda t} = e^{-(\ln 2) \cdot t/T} = 2^{-t/T}$.

$$N = N_0 \cdot e^{-\lambda t} = N_0 \cdot 2^{-t/T}, \quad \lambda = \ln 2 / T \quad (1.9)$$

ĐỊNH NGHĨA 1.18 (Độ phóng xạ) / DEFINITION 1.18 (Activity) – Độ phóng xạ R của một mẫu là số phân rã trong một giây: $R = \lambda N$. Đơn vị SI là becquerel (Bq, 1 Bq = 1 phân rã/s); đơn vị cũ là curie, 1 Ci = $3,7 \cdot 10^{10}$ Bq. Vì R tỉ lệ với N nên $R = R_0 \cdot 2^{-t/T}$.

The activity R of a sample is the number of decays per second: $R = \lambda N$. The SI unit is the becquerel (Bq, 1 Bq = 1 decay/s); the old unit is the curie, 1 Ci = $3.7 \cdot 10^{10}$ Bq. Since R is proportional to N , $R = R_0 \cdot 2^{-t/T}$.

$$R = \lambda N = (\ln 2 / T) \cdot N, \quad R = R_0 \cdot 2^{-t/T} \quad (1.10)$$



Hình 1.3. Số hạt nhân còn lại theo t/T : mỗi chu kỳ bán hủy giảm một nửa. Khung nhỏ: cùng đường cong trên thang logarit là đường thẳng.

Figure 1.3. Nuclei remaining against t/T : halving every half-life. Inset: the same curve on a logarithmic scale is a straight line.

NHẬN XÉT / REMARK – Sau 10 chu kỳ còn $2^{-10} \approx 0,098\%$ số hạt nhân; sau 20 chu kỳ còn cỡ 10^{-6} . Theo công thức N không bao giờ bằng 0, nhưng một mẫu hữu hạn có điểm cuối: với $N_0 = 10^{20}$ hạt nhân thì sau cỡ 66 chu kỳ ($\log_2 10^{20} \approx 66,4$) kỳ vọng còn khoảng một hạt nhân.

After 10 half-lives $2^{-10} \approx 0.098\%$ of the nuclei remain; after 20, about 10^{-6} . By the formula N never reaches 0, but a finite sample has an end point: with $N_0 = 10^{20}$ nuclei, after about 66 half-lives ($\log_2 10^{20} \approx 66.4$) one nucleus is expected to remain.

PHẢI THUỘC / MEMORISE – $N = N_0 \cdot 2^{-t/T}$; $\lambda = \ln 2/T$; $R = \lambda N$; đổi T sang giây khi cần R theo Bq; $\tau = T/\ln 2$.

$N = N_0 \cdot 2^{-t/T}$; $\lambda = \ln 2/T$; $R = \lambda N$; convert T to seconds when R is needed in Bq; $\tau = T/\ln 2$.

VÍ DỤ 1.7 (Độ phóng xạ và số hạt nhân) / EXAMPLE 1.7 (Activity and number of nuclei) – Một liều điều trị ^{131}I có độ phóng xạ $3,70 \cdot 10^8$ Bq (10,0 mCi) lúc chuẩn bị. $T = 8,02$ ngày; $M(^{131}\text{I}) = 131$ g/mol. (a) Tính λ theo s^{-1} . (b) Tính số nguyên tử và khối lượng ^{131}I trong liều. (c) Tính độ phóng xạ sau 16,0 ngày. (d) Sau bao lâu độ phóng xạ còn một phần nghìn giá trị ban đầu?

A therapeutic dose of ^{131}I has an activity of $3.70 \cdot 10^8$ Bq (10.0 mCi) when prepared. $T = 8.02$ days; $M(^{131}\text{I}) = 131$ g/mol. (a) Find λ in s^{-1} . (b) Find the number of atoms and the mass of ^{131}I in the dose. (c) Find the activity after 16.0 days. (d) After what time is the activity one thousandth of its initial value?

Lời giải. / Solution.

1. $T = 8,02 \cdot 86.400 \text{ s} = 6,929 \cdot 10^5 \text{ s}$ nên $\lambda = 0,6931/6,929 \cdot 10^5 = 1,000 \cdot 10^{-6} \text{ s}^{-1}$.

$T = 8.02 \times 86,400 \text{ s} = 6.929 \cdot 10^5 \text{ s}$, so $\lambda = 0.6931/6.929 \cdot 10^5 = 1.000 \cdot 10^{-6} \text{ s}^{-1}$.

2. $N = R/\lambda = 3,70 \cdot 10^8 / 1,000 \cdot 10^{-6} = 3,70 \cdot 10^{14}$ nguyên tử. Khối lượng = $3,70 \cdot 10^{14} / 6,022 \cdot 10^{23} \cdot 131 = 8,05 \cdot 10^{-8} \text{ g}$, cỡ 80 ng.

$N = R/\lambda = 3.70 \cdot 10^8 / 1.000 \cdot 10^{-6} = 3.70 \cdot 10^{14} \text{ atoms}$. Mass = $3.70 \cdot 10^{14} / 6.022 \cdot 10^{23} \times 131 = 8.05 \cdot 10^{-8} \text{ g}$, about 80 ng.

3. 16,0 ngày = 1,995 chu kỳ. $R = 3,70 \cdot 10^8 \cdot 2^{-1,995} \approx 9,28 \cdot 10^7 \text{ Bq}$.

16.0 days = 1.995 half-lives. $R = 3.70 \cdot 10^8 \times 2^{-1.995} \approx 9.28 \cdot 10^7 \text{ Bq}$.

4. $2^{-t/T} = 10^{-3}$ nên $t = T \cdot \log_2 1000 = 8,02 \cdot 9,966 \approx 79,9$ ngày.

$2^{-t/T} = 10^{-3}$, so $t = T \times \log_2 1000 = 8.02 \times 9.966 \approx 79.9 \text{ days}$.

Vậy $\lambda \approx 1,00 \cdot 10^{-6} \text{ s}^{-1}$; liều chứa $\approx 3,70 \cdot 10^{14}$ nguyên tử, $\approx 8,05 \cdot 10^{-8} \text{ g}$; sau 16,0 ngày $R \approx 9,28 \cdot 10^7 \text{ Bq}$; sau $\approx 79,9$ ngày R còn một phần nghìn.

Hence $\lambda \approx 1.00 \cdot 10^{-6} \text{ s}^{-1}$; the dose holds $\approx 3.70 \cdot 10^{14} \text{ atoms}$, $\approx 8.05 \cdot 10^{-8} \text{ g}$; after 16.0 days $R \approx 9.28 \cdot 10^7 \text{ Bq}$; after $\approx 79.9 \text{ days}$ R is one thousandth. ■

TÍNH CHẤT 1.19 (Phân rã nối tiếp) / PROPERTY 1.19 (Sequential decay) – Hạt nhân mẹ P (hằng số λ_1) phân rã thành hạt nhân con D (hằng số λ_2), D phân rã tiếp; lúc đầu chỉ có N_0 hạt nhân P . Khi đó $N_D = N_0 \cdot \lambda_1 / (\lambda_2 - \lambda_1) \cdot (e^{-\lambda_1 t} - e^{-\lambda_2 t})$. N_D đạt cực đại tại $t_{\max} = \ln(\lambda_2/\lambda_1) / (\lambda_2 - \lambda_1)$, và ở thời điểm đó $R_D = R_P$.

A parent P (constant λ_1) decays to a daughter D (constant λ_2), which decays further; at first there are only N_0 nuclei of P . Then $N_D = N_0 \cdot \lambda_1 / (\lambda_2 - \lambda_1) \cdot (e^{-\lambda_1 t} - e^{-\lambda_2 t})$. N_D has a maximum at $t_{\max} = \ln(\lambda_2/\lambda_1) / (\lambda_2 - \lambda_1)$, and at that moment $R_D = R_P$.

$$N_D = N_0 \cdot \lambda_1 / (\lambda_2 - \lambda_1) \cdot (e^{-\lambda_1 t} - e^{-\lambda_2 t}), \quad t_{\max} = \ln(\lambda_2/\lambda_1) / (\lambda_2 - \lambda_1) \quad (1.11)$$

Công thức (1.11) là nghiệm của hệ hai phương trình phân rã nối tiếp; ở đây phát biểu không chứng minh. Điều kiện $R_D = R_P$ tại cực đại có thể suy ngay: N_D cực đại nghĩa là D sinh ra bằng D mất đi, tức $\lambda_1 N_P = \lambda_2 N_D$.

Formula (1.11) solves the pair of sequential decay equations; it is stated here without proof. The condition $R_D = R_P$ at the maximum follows at once: N_D is at a maximum when D forms as fast as it decays, that is $\lambda_1 N_P = \lambda_2 N_D$.

PHÂN TÍCH / ANALYSIS – Đồ thị $\ln R$ theo t của một chất là đường thẳng. Hỗn hợp hai chất cho tổng hai hàm mũ: ở thời gian dài chất có chu kỳ ngắn đã tắt, chỉ còn chất chu kỳ dài nên ĐUÔI đồ thị là đường thẳng. Làm theo thứ tự: tách đuôi để tìm T_2 và $R_2(0)$; lùi về $t = 0$ để suy $R_1(0)$; trừ phần đã biết ở thời điểm sớm để tìm T_1 .

The graph of $\ln R$ against t for one species is a straight line. A mixture of two gives a sum of two exponentials: at long times the short-lived species has died out and only the long-lived one is left, so the TAIL of the graph is a straight line. Work in this order: use the tail to find T_2 and $R_2(0)$; go back to $t = 0$ to get $R_1(0)$; subtract the known part at an early time to find T_1 .

VÍ DỤ 1.8 (Tách hai thành phần phân rã) / EXAMPLE 1.8 (Separating two decay components)

– Một mẫu chứa hai chất phóng xạ độc lập, không phân rã thành nhau, hoạt độ tổng đo được 1000 Bq lúc $t = 0$, 433 Bq lúc $t = 6$ h, 50,1 Bq lúc $t = 36$ h và 25,0 Bq lúc $t = 48$ h. (a) Tìm chu kỳ bán hủy $T_1 < T_2$ và hoạt độ ban đầu của hai chất. (b) Tại thời điểm nào hoạt độ của hai chất bằng nhau?

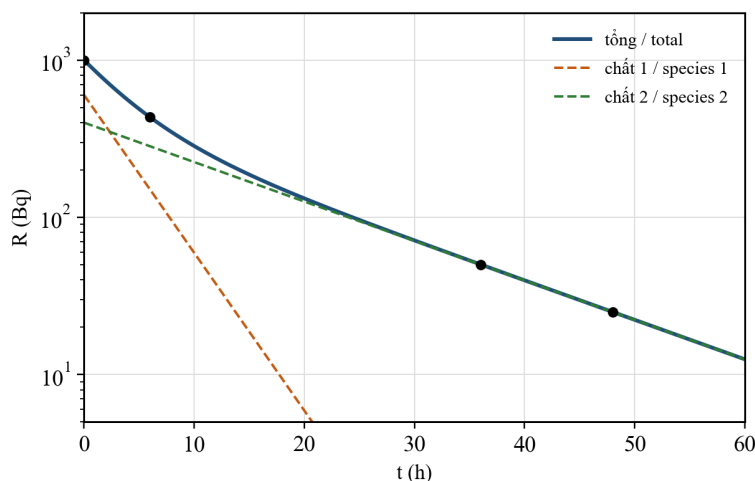
A sample contains two independent radioactive species that do not decay into each other. The total activity measured is 1000 Bq at $t = 0$, 433 Bq at $t = 6$ h, 50.1 Bq at $t = 36$ h and 25.0 Bq at $t = 48$ h. (a) Find the half-lives $T_1 < T_2$ and the initial activities of the two species. (b) At what time are the activities of the two species equal?

Lời giải. / Solution.

- Ở $t = 36$ h và 48 h chỉ còn chất 2. Hoạt độ giảm từ 50,1 xuống 25,0 trong 12 h, tức gần đúng một nửa, nên $T_2 \approx 12$ h.
At $t = 36$ h and 48 h only species 2 remains. The activity falls 50.1 to 25.0 in 12 h, almost exactly half, so $T_2 \approx 12$ h.
- Lùi về $t = 0$: $R_2(0) = 50,1 \cdot 2^{36/12} = 50,1 \cdot 8 \approx 4,0 \cdot 10^2$ Bq, nên $R_1(0) = 1000 - 400 \approx 6,0 \cdot 10^2$ Bq. Kiểm tra: ở 36 h phần chất 1 chỉ còn khoảng $600/2^{12} \approx 0,15$ Bq, bỏ qua được.
Going back to $t = 0$: $R_2(0) = 50.1 \times 2^{36/12} = 50.1 \times 8 \approx 4.0 \cdot 10^2$ Bq, so $R_1(0) = 1000 - 400 \approx 6.0 \cdot 10^2$ Bq. Check: at 36 h species 1 contributes only about $600/2^{12} \approx 0.15$ Bq, which can be neglected.
- Tại $t = 6$ h: $R_2 = 400 \cdot 2^{-6/12} = 283$ Bq, nên $R_1(6) = 433 - 283 = 150$ Bq. Tỉ số $150/600 = 1/4 = 2^{-6/T_1}$, suy ra $6/T_1 = 2$ và $T_1 = 3,0$ h.
At $t = 6$ h: $R_2 = 400 \times 2^{-6/12} = 283$ Bq, so $R_1(6) = 433 - 283 = 150$ Bq. The ratio $150/600 = 1/4 = 2^{-6/T_1}$, giving $6/T_1 = 2$ and $T_1 = 3.0$ h.
- Hoạt độ bằng nhau: $600 \cdot 2^{-t/3} = 400 \cdot 2^{-t/12}$ nên $2^{-t/4} = 2/3$, $t = 4 \cdot \log_2 1,5 \approx 2,3$ h.
Equal activities: $600 \times 2^{-t/3} = 400 \times 2^{-t/12}$, so $2^{-t/4} = 2/3$ and $t = 4 \times \log_2 1.5 \approx 2.3$ h.

Vậy $T_1 \approx 3,0$ h, $T_2 \approx 12$ h, $R_1(0) \approx 6,0 \cdot 10^2$ Bq, $R_2(0) \approx 4,0 \cdot 10^2$ Bq; hoạt độ hai chất bằng nhau lúc $t \approx 2,3$ h.

Hence $T_1 \approx 3.0$ h, $T_2 \approx 12$ h, $R_1(0) \approx 6.0 \cdot 10^2$ Bq, $R_2(0) \approx 4.0 \cdot 10^2$ Bq; the two activities are equal at $t \approx 2.3$ h. ■



Hình 1.4. Hoạt độ tổng của hai chất phóng xạ trên thang logarit (ví dụ 1.8): đuôi là đường thẳng của chất chu kỳ dài; chấm đen là số liệu đo.

Figure 1.4. Total activity of two radioactive species on a logarithmic scale (Example 1.8): the tail is the straight line of the long-lived species; black dots are the measurements.

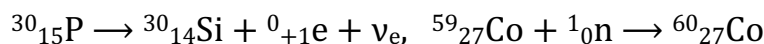
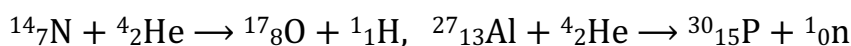
LỖI HAY GẶP / COMMON MISTAKE – Tính R theo Bq với T để nguyên ngày hoặc năm: λ phải theo s^{-1} . Một lỗi nữa là viết $N = N_0 \cdot e^{-t/T}$, lẫn chu kỳ bán hủy T với thời gian sống trung bình τ .

Calculating R in Bq with T left in days or years: λ must be in s^{-1} . Another error is writing $N = N_0 \cdot e^{-t/T}$, mixing up the half-life T with the mean lifetime τ .

1.6. Phản ứng hạt nhân và năng lượng phản ứng – Nuclear reactions and reaction energy

Phản ứng hạt nhân nhân tạo là phản ứng trong đó hạt nhân bia bị bắn bằng hạt (α , proton, neutron, hạt nhân nhẹ) để tạo hạt nhân mới. Ký hiệu rút gọn $X(a, b)Y$ nghĩa là bia X, hạt tới a, hạt bay ra b, sản phẩm Y. Các phương trình sau đều bảo toàn số khối và điện tích.

An artificial nuclear reaction bombards a target nucleus with a particle (α , proton, neutron, light nucleus) to form a new nucleus. The short notation $X(a, b)Y$ means target X, incoming particle a, outgoing particle b, product Y. The following equations all conserve mass number and charge.



Hai phương trình cuối cho thấy hạt nhân tạo ra có thể phóng xạ: ^{30}P phân rã β^+ , còn ^{60}Co (chu kỳ 5,27 năm) phân rã β^- rồi phát hai tia γ cỡ 1,2 và 1,3 MeV dùng trong xạ trị. Bắn neutron vào bia để tạo đồng vị phóng xạ là cách điều chế phần lớn đồng vị y học.

The last two equations show that the product can itself be radioactive: ^{30}P decays by β^+ , and ^{60}Co (half-life 5.27 years) decays by β^- and then emits two γ rays of about 1.2 and 1.3 MeV used in radiotherapy. Irradiating a target with neutrons is how most medical radioisotopes are made.

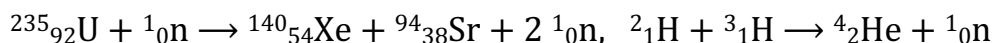
ĐỊNH NGHĨA 1.20 (Năng lượng phản ứng) / DEFINITION 1.20 (Reaction energy) – Năng lượng của phản ứng hạt nhân $A + B \rightarrow C + D$ là $Q = (m_A + m_B - m_C - m_D)c^2$. $Q > 0$: phản ứng tỏa năng lượng; $Q < 0$: phản ứng thu năng lượng. Q cũng bằng độ tăng tổng động năng: $Q = \Sigma T(\text{sau}) - \Sigma T(\text{trước})$. Khi số proton hai vế bằng nhau và không có positron hay electron riêng, dùng khối lượng nguyên tử (với proton viết thành ^1H).

The energy of the nuclear reaction $A + B \rightarrow C + D$ is $Q = (m_A + m_B - m_C - m_D)c^2$. $Q > 0$: the reaction releases energy; $Q < 0$: it absorbs energy. Q also equals the gain in total kinetic energy: $Q = \Sigma T(\text{after}) - \Sigma T(\text{before})$. When the number of protons is the same on both sides and no positron or free electron appears, use atomic masses (writing a proton as ^1H).

$$Q = (\Sigma M(\text{trước}) - \Sigma M(\text{sau})) \cdot c^2, \quad \Sigma T(\text{sau}) - \Sigma T(\text{trước}) = Q \quad (1.12)$$

Phân hạch hạt nhân nặng và nhiệt hạch hạt nhân nhẹ là hai phản ứng tỏa năng lượng theo hệ quả 1.11:

Fission of a heavy nucleus and fusion of light nuclei are the two reactions that release energy, as Corollary 1.11 shows:



Mỗi phân hạch sinh trung bình khoảng hai đến ba neutron, có thể gây phân hạch tiếp: đó là phản ứng dây chuyền. Nhiệt hạch cần hai hạt nhân mang điện dương tiến sát nhau, vượt lực đẩy Coulomb, nên cần nhiệt độ cỡ 10^8 K.

Each fission releases on average two to three neutrons, which can cause further fissions: this is the chain reaction. Fusion needs two positively charged nuclei to approach closely against the Coulomb repulsion, which needs temperatures of about 10^8 K.

PHÂN TÍCH / ANALYSIS – Hai bước, dùng hai định luật khác nhau. Năng lượng: Q từ khối lượng. Động lượng: neutron nhiệt có động năng coi bằng 0 và hạt nhân bia đứng yên, nên hai sản phẩm bay ngược chiều với động lượng bằng nhau về độ lớn; mà $T = p^2/2m$ nên hạt nhẹ hơn nhận phần lớn hơn của Q . Khối lượng nguyên tử thay cho khối lượng hạt nhân trong bước thứ hai chỉ sai cỡ 0,01 %.

Two steps, using two different laws. Energy: Q from the masses. Momentum: the thermal neutron's kinetic energy is taken as 0 and the target nucleus is at rest, so the two products fly apart with momenta equal in magnitude; since $T = p^2/2m$ the lighter one gets the larger share of Q . Using atomic masses in place of nuclear masses in the second step is wrong by only about 0.01 %.

VÍ DỤ 1.9 (Năng lượng và động lượng) / EXAMPLE 1.9 (Energy and momentum) –

Neutron nhiệt (động năng coi bằng 0) bị ^{10}B hấp thụ: $^{10}_5\text{B} + ^1_0\text{n} \rightarrow ^7_3\text{Li} + ^4_2\text{He}$. Cho $M(^{10}\text{B}) = 10,012937$ u, $m_n = 1,008665$ u, $M(^7\text{Li}) = 7,016003$ u, $M(^4\text{He}) = 4,002603$ u, $1 \text{ u} = 931,5 \text{ MeV}/c^2$. (a) Tính Q . (b) Tính động năng của ^7Li và của hạt α (cơ học cổ điển).

A thermal neutron (kinetic energy taken as 0) is absorbed by ^{10}B : $^{10}_5\text{B} + ^1_0\text{n} \rightarrow ^7_3\text{Li} + ^4_2\text{He}$. Given $M(^{10}\text{B}) = 10.012937 \text{ u}$, $m_n = 1.008665 \text{ u}$, $M(^7\text{Li}) = 7.016003 \text{ u}$, $M(^4\text{He}) = 4.002603 \text{ u}$, $1 \text{ u} = 931.5 \text{ MeV}/c^2$. (a) Find Q . (b) Find the kinetic energies of ^7Li and of the α particle (classical mechanics).

Lời giải. / Solution.

- Số proton hai vế bằng nhau (5 và 3 + 2) nên dùng khối lượng nguyên tử. Tổng khối lượng trước: $10,012937 + 1,008665 = 11,021602$ u; sau: $7,016003 + 4,002603 =$

11,018606 u.

The number of protons is the same on both sides (5 and 3 + 2), so atomic masses may be used. Mass before: $10.012937 + 1.008665 = 11.021602$ u; after: $7.016003 + 4.002603 = 11.018606$ u.

2. $\Delta = 0,002996$ u nên $Q = 0,002996 \cdot 931,5 \approx 2,79$ MeV > 0.

The difference is 0.002996 u, so $Q = 0.002996 \times 931.5 \approx 2.79$ MeV > 0.

3. Động lượng ban đầu bằng 0 nên $p_{\text{Li}} = p_{\alpha} = p$. Với $T = p^2/(2m)$: $T_{\alpha}/T_{\text{Li}} = m_{\text{Li}}/m_{\alpha}$, và $T_{\alpha} + T_{\text{Li}} = Q$.

The initial momentum is 0, so $p_{\text{Li}} = p_{\alpha} = p$. With $T = p^2/(2m)$: $T_{\alpha}/T_{\text{Li}} = m_{\text{Li}}/m_{\alpha}$, and $T_{\alpha} + T_{\text{Li}} = Q$.

$$T_{\alpha} = Q \cdot m_{\text{Li}} / (m_{\text{Li}} + m_{\alpha}), \quad T_{\text{Li}} = Q \cdot m_{\alpha} / (m_{\text{Li}} + m_{\alpha})$$

4. $T_{\alpha} = 2,79 \cdot 7,016/(7,016 + 4,003) \approx 1,78$ MeV; $T_{\text{Li}} = 2,79 \cdot 4,003/11,019 \approx 1,01$ MeV.

$T_{\alpha} = 2.79 \times 7.016/(7.016 + 4.003) \approx 1.78$ MeV; $T_{\text{Li}} = 2.79 \times 4.003/11.019 \approx 1.01$ MeV.

Vậy $Q \approx 2,79$ MeV; hạt α mang $\approx 1,78$ MeV và ${}^7\text{Li}$ mang $\approx 1,01$ MeV.

Hence $Q \approx 2.79$ MeV; the α particle carries ≈ 1.78 MeV and ${}^7\text{Li}$ carries ≈ 1.01 MeV. ■

NHẬN XÉT / REMARK – Phản ứng này được dùng trong liệu pháp bắt neutron của boron: hợp chất chứa ${}^{10}\text{B}$ tập trung ở khối u, neutron nhiệt chiếu vào gây phản ứng, và hai sản phẩm nặng chỉ đi được cỡ đường kính một tế bào nên năng lượng tỏa ngay tại chỗ.

This reaction is used in boron neutron capture therapy: a ${}^{10}\text{B}$ compound concentrates in the tumour, thermal neutrons are directed at it, and the two heavy products travel only about one cell diameter, so the energy is deposited on the spot.

LỖI HAY GẶP / COMMON MISTAKE – Lẫn dấu của Q: Q là khối lượng trước trừ khối lượng sau. Phản ứng thu năng lượng ($Q < 0$) cần hạt tới có động năng lớn hơn $|Q|$, vì một phần động năng phải ở lại thành động năng của sản phẩm.

Confusing the sign of Q: Q is mass before minus mass after. An endothermic reaction ($Q < 0$) needs an incoming particle with kinetic energy greater than $|Q|$, because part of that energy must remain as kinetic energy of the products.

1.7. Định tuổi bằng đồng vị và ứng dụng y học – Isotopic dating and medical applications

Nguyên tắc định tuổi: một hệ đóng, tại thời điểm $t = 0$ bắt đầu giữ nguyên các hạt nhân, thì tỉ lệ hạt nhân phóng xạ còn lại hoặc tỉ lệ hạt nhân con tích lũy cho biết thời gian đã trôi qua. Với ${}^{14}\text{C}$, sinh vật sống trao đổi với khí quyển nên giữ tỉ lệ ${}^{14}\text{C}/{}^{12}\text{C}$ của khí quyển; sau khi chết ${}^{14}\text{C}$ chỉ giảm theo định luật 1.16, nên $t = (T/\ln 2) \cdot \ln(N_0/N)$. Với khoáng vật, ta đo cả hạt nhân mẹ và hạt nhân con.

The principle of dating: in a closed system that begins to retain its nuclei at $t = 0$, the fraction of radioactive nuclei left, or of daughter nuclei accumulated, gives the elapsed time. For ${}^{14}\text{C}$, a living organism exchanges with the atmosphere and keeps its ${}^{14}\text{C}/{}^{12}\text{C}$ ratio; after death ${}^{14}\text{C}$ only decreases according to Law 1.16, so $t = (T/\ln 2) \cdot \ln(N_0/N)$. For minerals, both the parent and the daughter nuclei are measured.

Hệ System	Chu kỳ bán hủy Half-life	Vật liệu phù hợp Suitable material
^{14}C	$5,7 \cdot 10^3$ năm $5.7 \cdot 10^3$ years	vật liệu hữu cơ đến cỡ vài chục nghìn năm <i>organic matter up to some tens of thousands of years</i>
$^{40}\text{K} \rightarrow ^{40}\text{Ar}$	$1,25 \cdot 10^9$ năm $1.25 \cdot 10^9$ years	khoáng vật chứa K, đá núi lửa <i>K-bearing minerals, volcanic rock</i>
$^{87}\text{Rb} \rightarrow ^{87}\text{Sr}$	$4,97 \cdot 10^{10}$ năm $4.97 \cdot 10^{10}$ years	đá cổ, cần hiệu chỉnh ^{87}Sr ban đầu <i>old rocks, with a correction for initial ^{87}Sr</i>

ĐỊNH LÝ 1.21 (Công thức tuổi mẹ – con) / THEOREM 1.21 (Parent – daughter age formula) – Một khoáng vật đóng kín, lúc hình thành không chứa hạt nhân con D. Mỗi hạt nhân mẹ phân rã sinh ra D với xác suất b (hệ số nhánh; $b = 1$ nếu chỉ có một kiểu phân rã). Nếu hiện có P hạt nhân mẹ và D hạt nhân con thì tuổi $t = (1/\lambda) \cdot \ln[1 + D/(b \cdot P)]$.

A closed mineral contains no daughter nuclei D when it forms. Each decaying parent nucleus gives D with probability b (the branching fraction; $b = 1$ if there is only one mode). If P parent nuclei and D daughter nuclei are present now, the age is $t = (1/\lambda) \cdot \ln[1 + D/(b \cdot P)]$.

Chứng minh. / Proof.

Số hạt nhân mẹ đã phân rã là $P_0 - P = P \cdot (e^{\lambda t} - 1)$, vì $P = P_0 \cdot e^{-\lambda t}$. Một phần b trong số đó thành D:

The number of parent nuclei that have decayed is $P_0 - P = P \cdot (e^{\lambda t} - 1)$, since $P = P_0 \cdot e^{-\lambda t}$. A fraction b of them became D:

$$D = b \cdot P \cdot (e^{\lambda t} - 1) \Rightarrow t = (1/\lambda) \cdot \ln[1 + D/(b \cdot P)] \quad (1.13)$$

NHẬN XÉT / REMARK – Ba điều kiện cần đúng: hệ đóng (không mất hay nhận P, D), lúc đầu không có D hoặc biết lượng D ban đầu để trừ, và chu kỳ bán hủy hợp với tuổi cần đo, khoảng từ một phần mười đến vài chục chu kỳ. Ngoài khoảng đó tỉ lệ đo được quá gần 0 hoặc quá gần giới hạn nên sai số tương đối lớn.

Three conditions must hold: the system is closed (no gain or loss of P or D), there is no D at the start or the initial D is known and subtracted, and the half-life suits the age being measured, from about a tenth of a half-life to a few tens. Outside that range the measured ratio is too close to 0 or too close to its limit and the relative error is large.

PHÂN TÍCH / ANALYSIS – Đề cho tỉ lệ con/mẹ hiện tại và hệ số nhánh, nên dùng thẳng (1.13). Thứ tự: tính λ từ T, tính $D/(b \cdot P)$, lấy ln, chia λ . Kiểm tra bậc độ lớn: tỉ lệ nhỏ thì $\ln(1 + x) \approx x$ và tuổi chỉ vài phần mười chu kỳ.

The problem gives the present daughter to parent ratio and the branching fraction, so use (1.13) directly. Order: find λ from T, compute $D/(b \cdot P)$, take the logarithm, divide by λ . Check the order of magnitude: for a small ratio $\ln(1 + x) \approx x$ and the age is only a few tenths of a half-life.

VÍ DỤ 1.10 (Tuổi từ tỉ lệ con/mẹ) / EXAMPLE 1.10 (Age from the daughter to parent ratio) – Một mẫu khoáng vật đóng kín chứa ^{40}K và ^{40}Ar với số nguyên tử $^{40}\text{Ar}/^{40}\text{K} = 0,0150$. ^{40}K có $T = 1,25 \cdot 10^9$ năm; cứ 100 hạt nhân ^{40}K phân rã thì 10,5 hạt nhân tạo ^{40}Ar (bắt electron), phần còn lại tạo ^{40}Ca . Lúc đầu khoáng vật không chứa ^{40}Ar . Tính tuổi của khoáng vật, và tuổi sẽ sai bao nhiêu lần nếu coi mọi hạt nhân ^{40}K phân rã thành ^{40}Ar .

A closed mineral sample contains ^{40}K and ^{40}Ar with the atom ratio $^{40}\text{Ar}/^{40}\text{K} = 0.0150$. ^{40}K has $T = 1.25 \cdot 10^9$ years; of every 100 ^{40}K nuclei that decay, 10.5 form ^{40}Ar (electron capture) and the rest form ^{40}Ca . The mineral held no ^{40}Ar at the start. Find the age of the mineral, and by what factor the age would be wrong if every ^{40}K nucleus were assumed to decay to ^{40}Ar .

Lời giải. / Solution.

- $\lambda = \ln 2/T = 0,6931/(1,25 \cdot 10^9) = 5,545 \cdot 10^{-10} \text{ năm}^{-1}$. Hệ số nhánh $b = 0,105$.
 $\lambda = \ln 2/T = 0.6931/(1.25 \cdot 10^9) = 5.545 \cdot 10^{-10} \text{ year}^{-1}$. The branching fraction is $b = 0.105$.
- $D/(b \cdot P) = 0,0150/0,105 = 0,1429$, nên $e^{\lambda t} = 1,1429$ và $\lambda t = \ln 1,1429 = 0,1335$.
 $D/(bP) = 0.0150/0.105 = 0.1429$, so $e^{\lambda t} = 1.1429$ and $\lambda t = \ln 1.1429 = 0.1335$.
- $t = 0,1335/(5,545 \cdot 10^{-10}) \approx 2,41 \cdot 10^8 \text{ năm}$.
 $t = 0.1335/(5.545 \cdot 10^{-10}) \approx 2.41 \cdot 10^8 \text{ years}$.
- Nếu coi $b = 1$: $\lambda t = \ln 1,0150 = 0,01489$ và $t = 2,68 \cdot 10^7 \text{ năm}$, nhỏ hơn đúng giá trị khoảng 9 lần ($2,41 \cdot 10^8/2,68 \cdot 10^7 \approx 9,0$).
If $b = 1$ is assumed: $\lambda t = \ln 1.0150 = 0.01489$ and $t = 2.68 \cdot 10^7 \text{ years}$, smaller than the correct value by about a factor of 9 ($2.41 \cdot 10^8/2.68 \cdot 10^7 \approx 9.0$).

Vậy tuổi khoáng vật $\approx 2,41 \cdot 10^8 \text{ năm}$; bỏ qua hệ số nhánh làm tuổi thấp hơn khoảng 9 lần.
Hence the age of the mineral is $\approx 2.41 \cdot 10^8 \text{ years}$; ignoring the branching fraction makes the age about 9 times too low. ■

LỖI HAY GẶP / COMMON MISTAKE – Quên hệ số nhánh b khi chỉ một phần hạt nhân mẹ sinh ra hạt nhân con đang đo, hoặc quên rằng khí ^{40}Ar thoát ra làm tuổi tính ra thấp hơn tuổi thật.

Forgetting the branching fraction b when only part of the parent nuclei form the daughter being measured, or forgetting that escape of ^{40}Ar gas makes the calculated age lower than the true age.

Đồng vị đánh dấu dùng trong y học dựa trên hai điều: đồng vị phóng xạ có tính chất hóa học như đồng vị bền, nên cơ thể xử lý chúng như nhau; và bức xạ của chúng đo được từ bên ngoài ngay cả ở lượng nhỏ. Vì vậy chất chứa nguyên tố phóng xạ đi đúng vị trí mà chất thường đi.

Medical tracers rest on two facts: a radioactive isotope has the same chemistry as a stable isotope, so the body treats them alike; and its radiation can be measured from outside even at small amounts. A compound carrying a radioactive atom therefore goes to the same places as the ordinary compound.

Đồng vị chọn dùng có chu kỳ bán hủy cỡ vài giờ đến vài ngày: đủ dài để chế tạo, vận chuyển và đo, đủ ngắn để hoạt độ trong cơ thể giảm nhanh. ^{18}F ($T = 109,7$ phút) là chất phát β^+ dùng trong chụp cắt lớp positron: positron gặp electron và hủy thành hai photon 511 keV bay ngược chiều, hai đầu dò ghi cùng lúc cho biết đường đi của chúng. ^{131}I ($T =$

8,02 ngày) tập trung ở tuyến giáp vì tuyến này hấp thụ iodine, và dùng để chẩn đoán hay điều trị. ^{60}Co phát tia γ dùng trong xạ trị.

The isotope chosen has a half-life of a few hours to a few days: long enough to make, transport and measure, short enough for the activity in the body to fall quickly. ^{18}F ($T = 109.7 \text{ min}$) is a β^+ emitter used in positron emission tomography: the positron meets an electron and annihilates into two 511 keV photons flying in opposite directions, and two detectors recording them at the same moment fix their line of flight. ^{131}I ($T = 8.02 \text{ days}$) concentrates in the thyroid, which absorbs iodine, and is used for diagnosis and treatment. ^{60}Co emits γ rays used in radiotherapy.

NHẬN XÉT / REMARK – Khi đo thể tích máu bằng pha loãng đồng vị, nồng độ hoạt độ của mẫu phải được so với hoạt độ tiêm vào sau khi hiệu chỉnh phân rã: $R = R_0 \cdot 2^{-t/T}$ tại thời điểm lấy mẫu, nếu không thể tích bị đánh giá sai.

When blood volume is measured by isotope dilution, the activity concentration of the sample must be compared with the injected activity after correcting for decay, $R = R_0 \cdot 2^{-t/T}$ at the time of sampling; otherwise the volume is misjudged.

Bảng chiến lược – Strategy table

Dấu hiệu trong đề <i>Sign in the problem</i>	Công cụ nên thử <i>Tool to try</i>	Ví dụ <i>Example</i>
Cho A_r và khối lượng đồng vị, hỏi độ giàu <i>Given A_r and isotopic masses, asked for abundances</i>	Hai phương trình: $\sum x = 1$ và $A_r = \sum x \cdot M$ <i>Two equations: $\sum x = 1$ and $A_r = \sum x \cdot M$</i>	Ví dụ 1.2 <i>Example 1.2</i>
Cho khối lượng nguyên tử, hỏi E_{lk} hoặc ϵ <i>Given atomic masses, asked for E_b or ϵ</i>	$\Delta m = Z \cdot M(^1\text{H}) + N \cdot m_n - M$	Ví dụ 1.3 <i>Example 1.3</i>
So năng lượng phân hạch, nhiệt hạch <i>Comparing fission and fusion energy</i>	$Q = \sum A \cdot \epsilon(\text{sau}) - \sum A \cdot \epsilon(\text{trước})$, rồi đổi sang J/g <i>$Q = \sum A \cdot \epsilon(\text{after}) - \sum A \cdot \epsilon(\text{before})$, then convert to J/g</i>	Ví dụ 1.4 <i>Example 1.4</i>
Cho đầu và cuối chuỗi, hỏi số phân rã <i>Given the start and end of a chain, asked for the decays</i>	Bảo toàn số khối rồi điện tích: $4x$ và $2x - y_- + y_+$ <i>Conserve mass number, then charge: $4x$ and $2x - y_- + y_+$</i>	Ví dụ 1.5 <i>Example 1.5</i>
Hạt nhân có thể phân rã β^+ hay chỉ bắt electron <i>Can a nucleus decay by β^+ or only by capture</i>	So $M(P) - M(D)$ với $2m_e c^2 = 1,022 \text{ MeV}$ <i>Compare $M(P) - M(D)$ with $2m_e c^2 = 1.022 \text{ MeV}$</i>	Ví dụ 1.6 <i>Example 1.6</i>
Cho số hạt hay khối lượng, hỏi Bq <i>Given the number of atoms or the mass, asked for Bq</i>	$R = \lambda N$ với T đổi ra giây <i>$R = \lambda N$ with T in seconds</i>	Ví dụ 1.7 <i>Example 1.7</i>

Dấu hiệu trong đề <i>Sign in the problem</i>	Công cụ nên thử <i>Tool to try</i>	Ví dụ <i>Example</i>
Đồ thị $\ln R$ không thẳng <i>The $\ln R$ graph is not straight</i>	Tách đuôi của chất chu kỳ dài, rồi trừ <i>Take the tail of the long-lived species, then subtract</i>	Ví dụ 1.8 <i>Example 1.8</i>
Hai hạt nhân đứng yên tạo hai hạt, hỏi động năng <i>Two nuclei at rest form two particles, asked for kinetic energies</i>	Q từ khối lượng, rồi p bằng nhau để chia Q <i>Q from the masses, then equal p to share Q</i>	Ví dụ 1.9 <i>Example 1.9</i>
Cho tỉ lệ con/mẹ trong khoáng vật <i>Given the daughter to parent ratio in a mineral</i>	$t = (1/\lambda) \cdot \ln[1 + D/(bP)]$	Ví dụ 1.10 <i>Example 1.10</i>

Thuật ngữ <i>Term (Vietnamese)</i>	Tiếng Anh <i>English</i>	Giải thích ngắn <i>Short definition</i>
Nucleon	Nucleon	proton hoặc neutron trong hạt nhân <i>a proton or neutron in the nucleus</i>
Số hiệu nguyên tử	Atomic number	số proton Z trong hạt nhân <i>the number Z of protons in the nucleus</i>
Số khối	Mass number	tổng số nucleon $A = Z + N$ <i>the total number of nucleons $A = Z + N$</i>
Nuclide	Nuclide	loại hạt nhân xác định bởi Z và A <i>a kind of nucleus fixed by Z and A</i>
Đồng vị	Isotope	nuclide cùng Z khác A <i>nuclides with the same Z and different A</i>
Đồng khối	Isobar	nuclide cùng A khác Z <i>nuclides with the same A and different Z</i>
Đơn vị khối lượng nguyên tử	Atomic mass unit	u, bằng 1/12 khối lượng nguyên tử ^{12}C <i>u, one twelfth of the mass of a ^{12}C atom</i>
Nguyên tử khối trung bình	Relative atomic mass	trung bình khối lượng đồng vị theo số nguyên tử <i>the mean isotopic mass weighted by atoms</i>
Phổ khối	Mass spectrum	số ion theo tỉ số khối lượng trên điện tích <i>ion count against mass to charge ratio</i>
Độ hụt khối	Mass defect	tổng khối lượng nucleon trừ khối lượng hạt nhân <i>total nucleon mass minus nuclear mass</i>

Thuật ngữ <i>Term (Vietnamese)</i>	Tiếng Anh <i>English</i>	Giải thích ngắn <i>Short definition</i>
Năng lượng liên kết	Binding energy	năng lượng tách hạt nhân thành nucleon <i>energy to separate a nucleus into nucleons</i>
Năng lượng liên kết riêng	Binding energy per nucleon	năng lượng liên kết chia cho A <i>binding energy divided by A</i>
Phân hạch	Fission	hạt nhân nặng vỡ thành các mảnh trung bình <i>a heavy nucleus splits into medium-mass fragments</i>
Nhiệt hạch	Fusion	hạt nhân nhẹ hợp thành hạt nhân nặng hơn <i>light nuclei join into a heavier one</i>
Phóng xạ	Radioactivity	hạt nhân tự biến đổi và phát bức xạ <i>spontaneous change of a nucleus with emission</i>
Bắt electron	Electron capture	hạt nhân nhận một electron của lớp vỏ <i>the nucleus takes in a shell electron</i>
Hằng số phân rã	Decay constant	xác suất phân rã của một hạt nhân trong một đơn vị thời gian <i>probability of decay of one nucleus per unit time</i>
Chu kỳ bán hủy	Half-life	thời gian để số hạt nhân giảm một nửa <i>time for the number of nuclei to halve</i>
Độ phóng xạ	Activity	số phân rã mỗi giây, đơn vị Bq <i>decays per second, unit Bq</i>
Đồng vị đánh dấu	Tracer	đồng vị phóng xạ dùng để theo dõi một chất <i>a radioactive isotope used to follow a substance</i>

1.8. Bài tự luyện – Practice problems

Mức 1 – Học sinh giỏi cấp tỉnh – Level 1 – Provincial olympiad

Bài 1.1 / Problem 1.1 – Brom tự nhiên gồm ^{79}Br ($M = 78,9183 \text{ u}$) và ^{81}Br ($M = 80,9163 \text{ u}$); nguyên tử khối trung bình 79,904. (a) Tính phần trăm số nguyên tử của mỗi đồng vị. (b) Đơn chất Br_2 cho ba pic ở số khối 158, 160, 162 trên phổ khối. Coi hai nguyên tử trong phân tử chọn đồng vị độc lập, tính tỉ lệ cường độ ba pic (theo phần trăm tổng).

Natural bromine consists of ^{79}Br ($M = 78.9183 \text{ u}$) and ^{81}Br ($M = 80.9163 \text{ u}$); its relative atomic mass is 79.904. (a) Find the percentage of atoms of each isotope. (b) Elemental Br_2 gives three peaks at mass numbers 158, 160, 162 in the mass spectrum. Taking the two atoms in a molecule to choose isotopes independently, find the intensity ratio of the three peaks (as percentages of the total).

Bài 1.2 / Problem 1.2 – Cho $M(^{12}\text{C}) = 12,000000 \text{ u}$, $M(^{13}\text{C}) = 13,003355 \text{ u}$, $m_n = 1,008665 \text{ u}$, $M(^1\text{H}) = 1,007825 \text{ u}$, $1 \text{ u} = 931,5 \text{ MeV}/c^2$. (a) Tính năng lượng tối thiểu để tách một neutron khỏi ^{13}C . (b) Tính ϵ của ^{13}C và so sánh với kết quả (a).

Given $M(^{12}\text{C}) = 12.000000 \text{ u}$, $M(^{13}\text{C}) = 13.003355 \text{ u}$, $m_n = 1.008665 \text{ u}$, $M(^1\text{H}) = 1.007825 \text{ u}$, $1 \text{ u} = 931.5 \text{ MeV}/c^2$. (a) Find the minimum energy needed to remove one neutron from ^{13}C . (b) Find ε of ^{13}C and compare with (a).

Bài 1.3 / Problem 1.3 – Chu kỳ bán hủy của ^{32}P là 14,3 ngày. (a) Tính phần hạt nhân còn lại sau 30,0 ngày. (b) Sau bao lâu độ phóng xạ còn 5,00 % giá trị ban đầu? (c) Tính độ phóng xạ ban đầu của 1,00 μg ^{32}P ($M = 32 \text{ g/mol}$).

The half-life of ^{32}P is 14.3 days. (a) Find the fraction of nuclei left after 30.0 days. (b) After what time is the activity 5.00 % of its initial value? (c) Find the initial activity of 1.00 μg of ^{32}P ($M = 32 \text{ g/mol}$).

Mức 2 – Học sinh giỏi quốc gia – Level 2 – National olympiad

Bài 1.4 / Problem 1.4 – Cho $M(^7\text{Be}) = 7,016929 \text{ u}$, $M(^7\text{Li}) = 7,016003 \text{ u}$, $m_e c^2 = 0,511 \text{ MeV}$, $1 \text{ u} = 931,5 \text{ MeV}/c^2$, $T(^7\text{Be}) = 53,2$ ngày. (a) Viết phương trình phân rã β^+ và bắt electron của ^7Be thành ^7Li . (b) Tính Q của từng kiểu và cho biết kiểu nào xảy ra được. (c) Tính độ phóng xạ của 1,00 μg ^7Be ($M = 7,017 \text{ g/mol}$).

Given $M(^7\text{Be}) = 7.016929 \text{ u}$, $M(^7\text{Li}) = 7.016003 \text{ u}$, $m_e c^2 = 0.511 \text{ MeV}$, $1 \text{ u} = 931.5 \text{ MeV}/c^2$, $T(^7\text{Be}) = 53.2 \text{ days}$. (a) Write the β^+ decay and electron capture of ^7Be into ^7Li . (b) Find Q for each mode and say which can occur. (c) Find the activity of 1.00 μg of ^7Be ($M = 7.017 \text{ g/mol}$).

Bài 1.5 / Problem 1.5 – Nhánh $^2\text{H} + ^2\text{H} \rightarrow ^3\text{He} + ^1_0\text{n}$ có $M(^2\text{H}) = 2,014102 \text{ u}$, $M(^3\text{He}) = 3,016029 \text{ u}$, $m_n = 1,008665 \text{ u}$, $1 \text{ u} = 931,5 \text{ MeV}/c^2$. (a) Tính Q . (b) Trong nước tự nhiên cứ 10.000 nguyên tử hydrogen có 1,56 nguyên tử deuterium. Giả sử toàn bộ deuterium trong 1,00 kg nước ($M(\text{H}_2\text{O}) = 18,0 \text{ g/mol}$) tham gia nhánh trên. Tính năng lượng tỏa ra. (c) Khối lượng than (29 MJ/kg) có nhiệt tương đương.

The branch $^2\text{H} + ^2\text{H} \rightarrow ^3\text{He} + ^1_0\text{n}$ has $M(^2\text{H}) = 2.014102 \text{ u}$, $M(^3\text{He}) = 3.016029 \text{ u}$, $m_n = 1.008665 \text{ u}$, $1 \text{ u} = 931.5 \text{ MeV}/c^2$. (a) Find Q . (b) In natural water there are 1.56 deuterium atoms per 10,000 hydrogen atoms. Assume all the deuterium in 1.00 kg of water ($M(\text{H}_2\text{O}) = 18.0 \text{ g/mol}$) takes part in this branch. Find the energy released. (c) Find the mass of coal (29 MJ/kg) with the same heat.

Bài 1.6 / Problem 1.6 – Một nhà máy phân hạch có công suất nhiệt 3,00 GW ($3,00 \cdot 10^9 \text{ W}$). Mỗi phân hạch ^{235}U tỏa 200 MeV, toàn bộ thành nhiệt. (a) Tính số phân hạch mỗi giây. (b) Tính khối lượng ^{235}U phân hạch mỗi ngày ($M = 235 \text{ g/mol}$). (c) Tính khối lượng than (29 MJ/kg) cho cùng lượng nhiệt trong một ngày.

A fission power plant has a thermal power of 3.00 GW ($3.00 \cdot 10^9 \text{ W}$). Each ^{235}U fission releases 200 MeV, all as heat. (a) Find the number of fissions per second. (b) Find the mass of ^{235}U fissioned per day ($M = 235 \text{ g/mol}$). (c) Find the mass of coal (29 MJ/kg) giving the same heat in one day.

Mức 3 – Olympic quốc tế – Level 3 – International olympiad

Bài 1.7 / Problem 1.7 – Cơ thể một người nặng 70 kg chứa 140 g kali. Trong kali tự nhiên, ^{40}K chiếm 0,0117 % số nguyên tử, $T = 1,25 \cdot 10^9$ năm ($1 \text{ năm} = 3,156 \cdot 10^7 \text{ s}$), $A_r(\text{K}) = 39,1$. (a) Tính số hạt nhân ^{40}K và độ phóng xạ do ^{40}K trong cơ thể. (b) Khi Trái Đất hình thành cách đây $4,5 \cdot 10^9$ năm, ^{40}K chiếm bao nhiêu phần trăm số nguyên tử kali? Coi số nguyên tử các đồng vị kali khác không đổi.

The body of a 70 kg person contains 140 g of potassium. In natural potassium ^{40}K makes up 0.0117 % of the atoms, $T = 1.25 \cdot 10^9 \text{ years}$ ($1 \text{ year} = 3.156 \cdot 10^7 \text{ s}$), $A_r(\text{K}) = 39.1$. (a) Find the number of ^{40}K nuclei and the activity due to ^{40}K in the body. (b) When the Earth formed $4.5 \cdot 10^9 \text{ years}$ ago, what percentage of the potassium atoms was ^{40}K ? Take the numbers of atoms of the other potassium isotopes as unchanged.

Bài 1.8 / Problem 1.8 – ^{241}Pu ($T = 14,3$ năm) phân rã β^- thành ^{241}Am ($T = 432,6$ năm), coi là 100 % và bỏ qua mọi sản phẩm sau ^{241}Am . Lúc đầu mẫu chỉ có ^{241}Pu . (a) Viết phương trình phân rã của ^{241}Pu . (b) Tìm thời điểm lượng ^{241}Am đạt cực đại. (c) Tìm tỉ số $N(^{241}\text{Am})/N_0(^{241}\text{Pu})$ tại thời điểm đó. (d) Tìm tỉ số độ phóng xạ của ^{241}Am lúc đó với độ phóng xạ ban đầu của ^{241}Pu .

^{241}Pu ($T = 14.3$ years) decays by β^- into ^{241}Am ($T = 432.6$ years), taken as 100 %, and all products after ^{241}Am are ignored. At first the sample holds only ^{241}Pu . (a) Write the decay equation of ^{241}Pu . (b) Find the time at which the amount of ^{241}Am is greatest. (c) Find the ratio $N(^{241}\text{Am})/N_0(^{241}\text{Pu})$ at that time. (d) Find the ratio of the activity of ^{241}Am at that time to the initial activity of ^{241}Pu .

Bài 1.9 / Problem 1.9 – Cho khối lượng nguyên tử (u): ^{16}O 15,994915; ^{32}S 31,972071; ^{28}Si 27,976927; ^{56}Ni 55,942128; ^{40}Ca 39,962591; ^{20}Ne 19,992440; $1 u = 931,5 \text{ MeV}/c^2$. (a) Tính Q của $^{16}\text{O} + ^{16}\text{O} \rightarrow ^{32}\text{S}$ và $^{28}\text{Si} + ^{28}\text{Si} \rightarrow ^{56}\text{Ni}$. (b) Chỉ dùng đường cong ε (Hình 1.1), dự đoán dấu và độ lớn của Q cho $^{40}\text{Ca} \rightarrow 2 ^{20}\text{Ne}$, rồi kiểm bằng khối lượng (coi đây là phép tính hình thức về năng lượng). (c) Giải thích các dấu của Q ở (a) và (b) bằng đường cong ε .

Given atomic masses (u): ^{16}O 15.994915; ^{32}S 31.972071; ^{28}Si 27.976927; ^{56}Ni 55.942128; ^{40}Ca 39.962591; ^{20}Ne 19.992440; $1 u = 931.5 \text{ MeV}/c^2$. (a) Find Q for $^{16}\text{O} + ^{16}\text{O} \rightarrow ^{32}\text{S}$ and $^{28}\text{Si} + ^{28}\text{Si} \rightarrow ^{56}\text{Ni}$. (b) Using only the ε curve (Figure 1.1), predict the sign and size of Q for $^{40}\text{Ca} \rightarrow 2 ^{20}\text{Ne}$, then check with the masses (treat this as a formal energy calculation). (c) Explain the signs of Q in (a) and (b) with the ε curve.

1.9. Lời giải bài tự luyện – Solutions to practice problems

Bài 1.1 – Problem 1.1

1. Gọi x là phần số nguyên tử ^{79}Br : $x = (80,9163 - 79,904)/(80,9163 - 78,9183) = 1,0123/1,9980 \approx 0,5067$. Vậy ^{79}Br chiếm 50,67 % và ^{81}Br chiếm 49,33 %.

Let x be the number fraction of ^{79}Br : $x = (80.9163 - 79.904)/(80.9163 - 78.9183) = 1.0123/1.9980 \approx 0.5067$. So ^{79}Br is 50.67 % and ^{81}Br is 49.33 %.

2. Theo (1.3) với $p = 0,5067$, $q = 0,4933$: pic 158 (hai ^{79}Br): $p^2 = 0,2567$; pic 160 (một ^{79}Br , một ^{81}Br): $2pq = 0,4999$; pic 162 (hai ^{81}Br): $q^2 = 0,2434$.

By (1.3) with $p = 0.5067$, $q = 0.4933$: peak 158 (two ^{79}Br): $p^2 = 0.2567$; peak 160 (one ^{79}Br , one ^{81}Br): $2pq = 0.4999$; peak 162 (two ^{81}Br): $q^2 = 0.2434$.

Vậy ^{79}Br 50,67 %, ^{81}Br 49,33 %; cường độ ba pic 158 : 160 : 162 $\approx 25,7$ % : 50,0 % : 24,3 %.

Hence ^{79}Br is 50.67 %, ^{81}Br is 49.33 %; the intensities of peaks 158 : 160 : 162 are ≈ 25.7 % : 50.0 % : 24.3 %. ■

Bài 1.2 – Problem 1.2

1. Tách một neutron: $^{13}\text{C} \rightarrow ^{12}\text{C} + n$. Năng lượng cần là $(M(^{12}\text{C}) + m_n - M(^{13}\text{C}))c^2 = (12,000000 + 1,008665 - 13,003355) \cdot 931,5 = 0,005310 \cdot 931,5 \approx 4,95 \text{ MeV}$.

Removing a neutron: $^{13}\text{C} \rightarrow ^{12}\text{C} + n$. The energy needed is $(M(^{12}\text{C}) + m_n - M(^{13}\text{C}))c^2 = (12.000000 + 1.008665 - 13.003355) \times 931.5 = 0.005310 \times 931.5 \approx 4.95 \text{ MeV}$.

2. ^{13}C có $Z = 6$, $N = 7$: $\Delta m = 6 \cdot 1,007825 + 7 \cdot 1,008665 - 13,003355 = 6,046950 + 7,060655 - 13,003355 = 0,104250 u$ nên $E_{\text{lk}} = 0,104250 \cdot 931,5 \approx 97,1 \text{ MeV}$ và $\varepsilon = 97,1/13 \approx 7,47 \text{ MeV/nucleon}$.

^{13}C has $Z = 6$, $N = 7$: $\Delta m = 6 \times 1.007825 + 7 \times 1.008665 - 13.003355 = 6.046950 + 7.060655 - 13.003355 = 0.104250 \text{ u}$, so $E_b = 0.104250 \times 931.5 \approx 97.1 \text{ MeV}$ and $\varepsilon = 97.1/13 \approx 7.47 \text{ MeV per nucleon}$.

3. Năng lượng tách neutron cuối (4,95 MeV) thấp hơn nhiều so với ε (7,47 MeV): neutron thứ bảy là neutron lẻ, không ghép cặp được trong ^{13}C nên liên kết yếu hơn mức trung bình của các nucleon đã ghép cặp.

The energy to remove the last neutron (4.95 MeV) is well below ε (7.47 MeV): the seventh neutron is unpaired in ^{13}C and is bound more weakly than the average of the paired nucleons.

Vậy cần $\approx 4,95 \text{ MeV}$ để tách một neutron khỏi ^{13}C , còn $\varepsilon \approx 7,47 \text{ MeV/nucleon}$.

Hence $\approx 4.95 \text{ MeV}$ is needed to remove one neutron from ^{13}C , while $\varepsilon \approx 7.47 \text{ MeV per nucleon}$.

■

Bài 1.3 – Problem 1.3

1. Sau 30,0 ngày: $N/N_0 = 2^{-30,0/14,3} = 2^{-2,098} \approx 0,234$, tức 23,4 %.

After 30.0 days: $N/N_0 = 2^{-30,0/14,3} = 2^{-2,098} \approx 0.234$, i.e. 23.4 %.

2. $2^{-t/T} = 0,0500$ nên $t = T \cdot \log_2 20 = 14,3 \cdot 4,322 \approx 61,8$ ngày.

$2^{-t/T} = 0.0500$, so $t = T \times \log_2 20 = 14.3 \times 4.322 \approx 61.8 \text{ days}$.

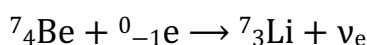
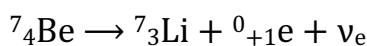
3. $N = 1,00 \cdot 10^{-6}/32 \cdot 6,022 \cdot 10^{23} = 1,88 \cdot 10^{16}$. $T = 14,3 \cdot 86.400 = 1,236 \cdot 10^6 \text{ s}$ nên $\lambda = 5,61 \cdot 10^{-7} \text{ s}^{-1}$ và $R_0 = \lambda N = 5,61 \cdot 10^{-7} \cdot 1,88 \cdot 10^{16} \approx 1,06 \cdot 10^{10} \text{ Bq}$.

$N = 1.00 \cdot 10^{-6}/32 \times 6.022 \cdot 10^{23} = 1.88 \cdot 10^{16}$. $T = 14.3 \times 86,400 = 1.236 \cdot 10^6 \text{ s}$, so $\lambda = 5.61 \cdot 10^{-7} \text{ s}^{-1}$ and $R_0 = \lambda N = 5.61 \cdot 10^{-7} \times 1.88 \cdot 10^{16} \approx 1.06 \cdot 10^{10} \text{ Bq}$.

Vậy còn $\approx 23,4 \%$ sau 30,0 ngày; độ phóng xạ còn 5,00 % sau $\approx 61,8$ ngày; $R_0 \approx 1,06 \cdot 10^{10} \text{ Bq}$.

Hence $\approx 23.4 \%$ remains after 30.0 days; the activity is 5.00 % after $\approx 61.8 \text{ days}$; $R_0 \approx 1.06 \cdot 10^{10} \text{ Bq}$. ■

Bài 1.4 – Problem 1.4



1. $M(P) - M(D) = 7,016929 - 7,016003 = 0,000926 \text{ u}$, tức $0,000926 \cdot 931,5 = 0,863 \text{ MeV}$. Bắt electron: $Q_{EC} = 0,863 \text{ MeV} > 0$. Phân rã β^+ : $Q_{\beta^+} = 0,863 - 1,022 = -0,159 \text{ MeV} < 0$.

$M(P) - M(D) = 7.016929 - 7.016003 = 0.000926 \text{ u}$, i.e. $0.000926 \times 931.5 = 0.863 \text{ MeV}$.

Electron capture: $Q_{EC} = 0.863 \text{ MeV} > 0$. β^+ decay: $Q_{\beta^+} = 0.863 - 1.022 = -0.159 \text{ MeV} < 0$.

2. Chỉ bắt electron xảy ra được; phân rã β^+ bị cấm về năng lượng.

Only electron capture can occur; β^+ decay is forbidden by energy.

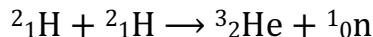
3. $N = 1,00 \cdot 10^{-6}/7,017 \cdot 6,022 \cdot 10^{23} = 8,58 \cdot 10^{16}$. $T = 53,2 \cdot 86.400 = 4,596 \cdot 10^6 \text{ s}$ nên $\lambda = 1,508 \cdot 10^{-7} \text{ s}^{-1}$ và $R = \lambda N \approx 1,29 \cdot 10^{10} \text{ Bq}$.

$N = 1.00 \cdot 10^{-6}/7.017 \times 6.022 \cdot 10^{23} = 8.58 \cdot 10^{16}$. $T = 53.2 \times 86,400 = 4.596 \cdot 10^6 \text{ s}$, so $\lambda = 1.508 \cdot 10^{-7} \text{ s}^{-1}$ and $R = \lambda N \approx 1.29 \cdot 10^{10} \text{ Bq}$.

Vậy ${}^7\text{Be}$ chỉ phân rã bằng bắt electron ($Q_{\text{EC}} \approx 0,863 \text{ MeV}$, $Q_{\beta^+} \approx -0,159 \text{ MeV}$); $1,00 \mu\text{g}$ có $R \approx 1,29 \cdot 10^{10} \text{ Bq}$.

Hence ${}^7\text{Be}$ decays only by electron capture ($Q_{\text{EC}} \approx 0.863 \text{ MeV}$, $Q_{\beta^+} \approx -0.159 \text{ MeV}$); $1.00 \mu\text{g}$ has $R \approx 1.29 \cdot 10^{10} \text{ Bq}$. ■

Bài 1.5 – Problem 1.5



1. Số proton hai vế đều 2 nên dùng khối lượng nguyên tử: $\Delta = 2 \cdot 2,014102 - 3,016029 - 1,008665 = 0,003510 \text{ u}$, $Q = 0,003510 \cdot 931,5 \approx 3,27 \text{ MeV}$.

The number of protons is 2 on both sides, so atomic masses may be used: $\Delta = 2 \times 2.014102 - 3.016029 - 1.008665 = 0.003510 \text{ u}$, $Q = 0.003510 \times 931.5 \approx 3.27 \text{ MeV}$.

2. $n(\text{H}_2\text{O}) = 1000/18,0 = 55,6 \text{ mol}$ nên $n(\text{H}) = 111,1 \text{ mol}$ và $n(\text{D}) = 111,1 \cdot 1,56 \cdot 10^{-4} = 0,01733 \text{ mol}$, tức $1,044 \cdot 10^{22}$ nguyên tử. Mỗi phản ứng dùng hai nguyên tử D nên có $5,22 \cdot 10^{21}$ phản ứng.

$n(\text{H}_2\text{O}) = 1000/18.0 = 55.6 \text{ mol}$, so $n(\text{H}) = 111.1 \text{ mol}$ and $n(\text{D}) = 111.1 \times 1.56 \cdot 10^{-4} = 0.01733 \text{ mol}$, i.e. $1.044 \cdot 10^{22}$ atoms. Each reaction uses two D atoms, so there are $5.22 \cdot 10^{21}$ reactions.

3. Năng lượng = $5,22 \cdot 10^{21} \cdot 3,27 \cdot 1,602 \cdot 10^{-13} \text{ J} \approx 2,73 \cdot 10^9 \text{ J}$.

Energy = $5.22 \cdot 10^{21} \times 3.27 \times 1.602 \cdot 10^{-13} \text{ J} \approx 2.73 \cdot 10^9 \text{ J}$.

4. Khối lượng than = $2,73 \cdot 10^9 / 2,9 \cdot 10^7 \approx 94 \text{ kg}$.

Mass of coal = $2.73 \cdot 10^9 / 2.9 \cdot 10^7 \approx 94 \text{ kg}$.

Vậy $Q \approx 3,27 \text{ MeV}$; $1,00 \text{ kg}$ nước tỏa $\approx 2,73 \cdot 10^9 \text{ J}$, tương đương $\approx 94 \text{ kg}$ than.

Hence $Q \approx 3.27 \text{ MeV}$; 1.00 kg of water releases $\approx 2.73 \cdot 10^9 \text{ J}$, equivalent to $\approx 94 \text{ kg}$ of coal. ■

Bài 1.6 – Problem 1.6

1. Năng lượng mỗi phân hạch: $200 \cdot 1,602 \cdot 10^{-13} = 3,204 \cdot 10^{-11} \text{ J}$. Số phân hạch mỗi giây: $3,00 \cdot 10^9 / 3,204 \cdot 10^{-11} \approx 9,36 \cdot 10^{19}$.

Energy per fission: $200 \times 1.602 \cdot 10^{-13} = 3.204 \cdot 10^{-11} \text{ J}$. Fissions per second: $3.00 \cdot 10^9 / 3.204 \cdot 10^{-11} \approx 9.36 \cdot 10^{19}$.

2. Một ngày có 86.400 s : $9,36 \cdot 10^{19} \cdot 86.400 = 8,09 \cdot 10^{24}$ phân hạch, tức $8,09 \cdot 10^{24} / 6,022 \cdot 10^{23} = 13,4 \text{ mol}$, khối lượng $13,4 \cdot 235 \approx 3,16 \cdot 10^3 \text{ g}$.

One day has $86,400 \text{ s}$: $9.36 \cdot 10^{19} \times 86,400 = 8.09 \cdot 10^{24}$ fissions, i.e. $8.09 \cdot 10^{24} / 6.022 \cdot 10^{23} = 13.4 \text{ mol}$, mass $13.4 \times 235 \approx 3.16 \cdot 10^3 \text{ g}$.

3. Nhiệt trong một ngày: $3,00 \cdot 10^9 \cdot 86.400 = 2,59 \cdot 10^{14} \text{ J}$. Khối lượng than = $2,59 \cdot 10^{14} / 2,9 \cdot 10^7 \approx 8,9 \cdot 10^6 \text{ kg}$, tức khoảng $8,9 \cdot 10^3 \text{ tấn}$.

Heat in one day: $3.00 \cdot 10^9 \times 86,400 = 2.59 \cdot 10^{14} \text{ J}$. Mass of coal = $2.59 \cdot 10^{14} / 2.9 \cdot 10^7 \approx 8.9 \cdot 10^6 \text{ kg}$, i.e. about $8.9 \cdot 10^3$ tonnes.

Vậy $\approx 9,36 \cdot 10^{19}$ phân hạch mỗi giây; $\approx 3,16 \text{ kg}$ ${}^{235}\text{U}$ mỗi ngày; than tương đương $\approx 8,9 \cdot 10^3 \text{ tấn}$.

Hence $\approx 9.36 \cdot 10^{19}$ fissions per second; $\approx 3.16 \text{ kg}$ of ${}^{235}\text{U}$ per day; equivalent coal $\approx 8.9 \cdot 10^3$ tonnes. ■

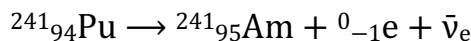
Bài 1.7 – Problem 1.7

1. $n(K) = 140/39,1 = 3,58$ mol nên số nguyên tử $K = 3,58 \cdot 6,022 \cdot 10^{23} = 2,156 \cdot 10^{24}$.
 $N(^{40}K) = 2,156 \cdot 10^{24} \cdot 1,17 \cdot 10^{-4} = 2,52 \cdot 10^{20}$.
 *$n(K) = 140/39,1 = 3,58$ mol, so the number of K atoms is $3,58 \times 6,022 \cdot 10^{23} = 2,156 \cdot 10^{24}$.
 $N(^{40}K) = 2,156 \cdot 10^{24} \times 1,17 \cdot 10^{-4} = 2,52 \cdot 10^{20}$.*
2. $T = 1,25 \cdot 10^9 \cdot 3,156 \cdot 10^7 = 3,945 \cdot 10^{16}$ s nên $\lambda = 0,6931/3,945 \cdot 10^{16} = 1,757 \cdot 10^{-17} \text{ s}^{-1}$.
 $R = \lambda N = 1,757 \cdot 10^{-17} \cdot 2,52 \cdot 10^{20} \approx 4,4 \cdot 10^3 \text{ Bq}$.
 $T = 1,25 \cdot 10^9 \times 3,156 \cdot 10^7 = 3,945 \cdot 10^{16}$ s, so $\lambda = 0,6931/3,945 \cdot 10^{16} = 1,757 \cdot 10^{-17} \text{ s}^{-1}$. $R = \lambda N = 1,757 \cdot 10^{-17} \times 2,52 \cdot 10^{20} \approx 4,4 \cdot 10^3 \text{ Bq}$.
3. Thời gian $4,5 \cdot 10^9$ năm bằng 3,6 chu kỳ, nên ^{40}K khi đó nhiều gấp $2^{3,6} = 12,13$ lần hiện nay. Gọi tổng số nguyên tử kali hiện nay là 1 thì ^{40}K hiện nay là $x = 1,17 \cdot 10^{-4}$.
The time $4,5 \cdot 10^9$ years is 3.6 half-lives, so ^{40}K was then $2^{3,6} = 12,13$ times its present amount. Let the present total number of potassium atoms be 1, so ^{40}K now is $x = 1,17 \cdot 10^{-4}$.

$$f = x \cdot 2^{3,6} / (1 - x + x \cdot 2^{3,6})$$
4. $f = 1,17 \cdot 10^{-4} \cdot 12,13 / (1 - 1,17 \cdot 10^{-4} + 1,17 \cdot 10^{-4} \cdot 12,13) = 1,419 \cdot 10^{-3} / 1,001302 = 1,417 \cdot 10^{-3}$, tức 0,142 %.
 $f = 1,17 \cdot 10^{-4} \times 12,13 / (1 - 1,17 \cdot 10^{-4} + 1,17 \cdot 10^{-4} \times 12,13) = 1,419 \cdot 10^{-3} / 1,001302 = 1,417 \cdot 10^{-3}$, i.e. 0.142 %.

Vậy cơ thể có $\approx 2,52 \cdot 10^{20}$ hạt nhân ^{40}K với độ phóng xạ $\approx 4,4 \cdot 10^3 \text{ Bq}$; khi Trái Đất hình thành ^{40}K chiếm $\approx 0,142 \%$ số nguyên tử kali.

Hence the body holds $\approx 2,52 \cdot 10^{20}$ ^{40}K nuclei with an activity of $\approx 4,4 \cdot 10^3 \text{ Bq}$; when the Earth formed ^{40}K made up $\approx 0,142 \%$ of the potassium atoms. ■

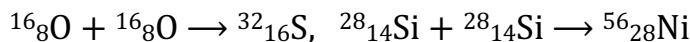
Bài 1.8 – Problem 1.8

1. $\lambda_1 = 0,6931/14,3 = 4,847 \cdot 10^{-2} \text{ năm}^{-1}$; $\lambda_2 = 0,6931/432,6 = 1,602 \cdot 10^{-3} \text{ năm}^{-1}$. Ở đây $\lambda_1 > \lambda_2$; công thức (1.11) vẫn đúng với vai trò mẹ – con như đề (mẹ là ^{241}Pu).
 $\lambda_1 = 0,6931/14,3 = 4,847 \cdot 10^{-2} \text{ year}^{-1}$; $\lambda_2 = 0,6931/432,6 = 1,602 \cdot 10^{-3} \text{ year}^{-1}$. Here $\lambda_1 > \lambda_2$; formula (1.11) still holds with the parent and daughter roles as stated (the parent is ^{241}Pu).
2. Cực đại của N_D : $t_{\max} = \ln(\lambda_1/\lambda_2)/(\lambda_1 - \lambda_2) = \ln 30,25/(4,847 \cdot 10^{-2} - 1,602 \cdot 10^{-3}) = 3,4096/4,687 \cdot 10^{-2} \approx 72,7$ năm. (Biểu thức đối xứng theo hai hằng số, nên cho cùng $t_{\max}$ dù λ_1 lớn hơn hay nhỏ hơn.)
Maximum of N_D : $t_{\max} = \ln(\lambda_1/\lambda_2)/(\lambda_1 - \lambda_2) = \ln 30,25/(4,847 \cdot 10^{-2} - 1,602 \cdot 10^{-3}) = 3,4096/4,687 \cdot 10^{-2} \approx 72,7$ years. (The expression is symmetric in the two constants, so it gives the same $t_{\max}$ whichever is larger.)
3. Tại $t_{\max}$: $e^{-\lambda_1 t} = e^{-3,526} = 0,02942$ và $e^{-\lambda_2 t} = e^{-0,1166} = 0,8900$. $N_D/N_0 = \lambda_1/(\lambda_2 - \lambda_1) \cdot (0,02942 - 0,8900) = (-1,0342)(-0,8606) \approx 0,890$.
At $t_{\max}$: $e^{-\lambda_1 t} = e^{-3,526} = 0,02942$ and $e^{-\lambda_2 t} = e^{-0,1166} = 0,8900$. $N_D/N_0 = \lambda_1/(\lambda_2 - \lambda_1) \times (0,02942 - 0,8900) = (-1,0342)(-0,8606) \approx 0,890$.
4. Tại cực đại $R_{\text{Am}} = R_{\text{Pu}}(t) = R_0 \cdot e^{-\lambda_1 t} = R_0 \cdot 0,02942 \approx 0,0294 \cdot R_0$.
At the maximum $R_{\text{Am}} = R_{\text{Pu}}(t) = R_0 \cdot e^{-\lambda_1 t} = R_0 \times 0,02942 \approx 0,0294 \cdot R_0$.

Vậy lượng ^{241}Am cực đại sau $\approx 72,7$ năm, bằng $\approx 0,890$ số hạt nhân ^{241}Pu ban đầu; lúc đó độ phóng xạ của $^{241}\text{Am} \approx 0,0294$ độ phóng xạ ban đầu của ^{241}Pu .

Hence the amount of ^{241}Am peaks after ≈ 72.7 years at ≈ 0.890 of the initial number of ^{241}Pu nuclei; its activity is then ≈ 0.0294 of the initial activity of ^{241}Pu . ■

Bài 1.9 – Problem 1.9



- Số proton hai vế bằng nhau nên dùng khối lượng nguyên tử. Với $\text{O} + \text{O}$: $\Delta = 2 \cdot 15,994915 - 31,972071 = 0,017759 \text{ u}$, $Q = 0,017759 \cdot 931,5 \approx 16,5 \text{ MeV}$.
The number of protons is equal on both sides, so use atomic masses. For $\text{O} + \text{O}$: $\Delta = 2 \times 15.994915 - 31.972071 = 0.017759 \text{ u}$, $Q = 0.017759 \times 931.5 \approx 16.5 \text{ MeV}$.
- Với $\text{Si} + \text{Si}$: $\Delta = 2 \cdot 27,976927 - 55,942128 = 0,011726 \text{ u}$, $Q = 0,011726 \cdot 931,5 \approx 10,9 \text{ MeV}$.
For $\text{Si} + \text{Si}$: $\Delta = 2 \times 27.976927 - 55.942128 = 0.011726 \text{ u}$, $Q = 0.011726 \times 931.5 \approx 10.9 \text{ MeV}$.
- Từ Hình 1.1: $\epsilon(^{40}\text{Ca}) \approx 8,55 \text{ MeV}$, $\epsilon(^{20}\text{Ne}) \approx 8,03 \text{ MeV}$. Theo (1.7): $Q \approx 40 \cdot (8,03 - 8,55) \approx -21 \text{ MeV}$, âm.
From Figure 1.1: $\epsilon(^{40}\text{Ca}) \approx 8.55 \text{ MeV}$, $\epsilon(^{20}\text{Ne}) \approx 8.03 \text{ MeV}$. By (1.7): $Q \approx 40 \times (8.03 - 8.55) \approx -21 \text{ MeV}$, negative.
- Kiểm bằng khối lượng: $\Delta = 39,962591 - 2 \cdot 19,992440 = -0,022289 \text{ u}$, $Q = -0,022289 \cdot 931,5 \approx -20,8 \text{ MeV}$, khớp dự đoán.
Check with masses: $\Delta = 39.962591 - 2 \times 19.992440 = -0.022289 \text{ u}$, $Q = -0.022289 \times 931.5 \approx -20.8 \text{ MeV}$, matching the prediction.
- Giải thích: hợp hai hạt nhân nhẹ hơn vùng sắt – nickel ($A = 16$ và 28) làm ϵ tăng (7,98 lên 8,49 và 8,45 lên 8,64) nên $Q > 0$; chia ^{40}Ca (gần đỉnh đường cong) thành hai hạt nhân ^{20}Ne nằm thấp hơn làm ϵ giảm nên $Q < 0$.
Explanation: joining two nuclei lighter than the iron – nickel region ($A = 16$ and 28) raises ϵ (7.98 up to 8.49 and 8.45 up to 8.64), so $Q > 0$; splitting ^{40}Ca (near the top of the curve) into two ^{20}Ne nuclei, which lie lower, lowers ϵ , so $Q < 0$.

Vậy $Q \approx +16,5 \text{ MeV}$ ($\text{O} + \text{O}$), $\approx +10,9 \text{ MeV}$ ($\text{Si} + \text{Si}$) và $\approx -20,8 \text{ MeV}$ (^{40}Ca thành hai ^{20}Ne); dấu của Q theo chiều thay đổi của ϵ .

Hence $Q \approx +16.5 \text{ MeV}$ ($\text{O} + \text{O}$), $\approx +10.9 \text{ MeV}$ ($\text{Si} + \text{Si}$) and $\approx -20.8 \text{ MeV}$ (^{40}Ca into two ^{20}Ne); the sign of Q follows the direction of change of ϵ . ■

Chương 2. Cấu trúc lớp vỏ electron – Chapter 2. Electronic structure of atoms

Mục tiêu chương – Chapter objectives

- Tính mức năng lượng, bán kính quỹ đạo và bước sóng vạch phổ của nguyên tử hydrogen và ion một electron bằng mô hình Bohr.
Calculate energy levels, orbit radii and spectral-line wavelengths for hydrogen and one-electron ions with the Bohr model.
- Dùng hệ thức de Broglie và hàm sóng để giải thích vì sao quỹ đạo Bohr được thay bằng orbital.
Use the de Broglie relation and the wavefunction to explain why Bohr orbits give way to orbitals.
- Suy ra bộ bốn số lượng tử hợp lệ, số orbital và số electron tối đa của lớp và phân lớp.
Decide which sets of four quantum numbers are allowed and count the orbitals and electrons in a shell or subshell.
- Viết cấu hình electron của nguyên tử và ion đến $Z = 54$, gồm các ngoại lệ, và đếm electron độc thân.
Write electron configurations of atoms and ions up to $Z = 54$, including the exceptions, and count unpaired electrons.
- Tính Z_{eff} và năng lượng orbital theo quy tắc Slater, ước tính năng lượng ion hóa.
Calculate Z_{eff} and orbital energies with Slater's rules and estimate ionisation energies.

2.1. Mô hình Bohr cho hệ một electron – The Bohr model of one-electron systems

Nguyên tử hydrogen và các ion chỉ còn một electron (He^+ , Li^{2+} , Be^{3+} , ...) gồm một hạt nhân điện tích $+Ze$ và một electron. Mô hình Bohr xử lý hệ này bằng cơ học cổ điển cộng ba định đề lượng tử hóa, và tái hiện đúng các mức năng lượng cùng vị trí vạch phổ của hệ một electron.

The hydrogen atom and every ion left with a single electron (He^+ , Li^{2+} , Be^{3+} , ...) consist of a nucleus of charge $+Ze$ and one electron. Bohr's model treats the pair with classical mechanics plus three quantisation postulates, and it reproduces the energy levels and the line positions of one-electron systems.

ĐỊNH LUẬT 2.1 (Định đề Bohr) / LAW 2.1 (Bohr postulates) – (i) Electron chuyển động tròn quanh hạt nhân đứng yên và chỉ tồn tại trên những quỹ đạo dừng; ở quỹ đạo dừng nó không bức xạ. (ii) Ở quỹ đạo dừng thứ n , mô-men động lượng của electron bằng n lần $h/(2\pi)$, với $n = 1, 2, 3, \dots$ (iii) Khi chuyển giữa hai trạng thái dừng có năng lượng E_i và E_f , hệ phát hoặc hấp thụ một photon có năng lượng $h\nu = |E_i - E_f|$. Phạm vi: hệ có đúng một electron, hạt nhân coi là đứng yên.

(i) The electron moves in a circle around a stationary nucleus and exists only on stationary orbits, where it does not radiate. (ii) On the n -th stationary orbit the angular momentum of the electron is n times $h/(2\pi)$, $n = 1, 2, 3, \dots$ (iii) In a jump between two stationary states of energy E_i and E_f the system emits or absorbs one photon of energy $h\nu = |E_i - E_f|$. Scope: exactly one electron, nucleus taken as stationary.

$$m_e \cdot v \cdot r = n \cdot h / (2\pi) \quad (2.1)$$

HỆ QUẢ 2.2 / COROLLARY 2.2 – Quỹ đạo dừng thứ n của hệ một electron điện tích hạt nhân $+Ze$ có bán kính $r_n = n^2 \cdot a_0 / Z$ và năng lượng $E_n = -E_H \cdot Z^2 / n^2$, trong đó $a_0 = 0,529 \text{ Å}$ là bán kính Bohr và $E_H = 13,6 \text{ eV}$. Mốc năng lượng $E = 0$ ứng với electron đứng yên ở vô cực.

The n -th stationary orbit of a one-electron system with nuclear charge $+Ze$ has radius $r_n = n^2 \cdot a_0 / Z$ and energy $E_n = -E_H \cdot Z^2 / n^2$, where $a_0 = 0.529 \text{ Å}$ is the Bohr radius and $E_H = 13.6 \text{ eV}$. The zero of energy is an electron at rest infinitely far away.

Chứng minh. / Proof.

Lực hút Coulomb là lực hướng tâm của chuyển động tròn đều, với $k = 1/(4\pi\epsilon_0)$:

The Coulomb attraction is the centripetal force of the uniform circular motion, with $k = 1/(4\pi\epsilon_0)$:

$$k \cdot Z \cdot e^2 / r^2 = m_e \cdot v^2 / r \quad (2.2)$$

Từ (2.1) rút $v = n \cdot h / (2\pi \cdot m_e \cdot r)$, thế vào (2.2) và giải r :

From (2.1), $v = n \cdot h / (2\pi \cdot m_e \cdot r)$. Substitute into (2.2) and solve for r :

$$r_n = n^2 \cdot h^2 / (4\pi^2 \cdot m_e \cdot k \cdot Z \cdot e^2) = n^2 \cdot a_0 / Z \quad (2.3)$$

Với $a_0 = h^2 / (4\pi^2 \cdot m_e \cdot k \cdot e^2) \approx 0,529 \text{ Å}$. Từ (2.2), động năng $E_k = m_e v^2 / 2 = kZe^2 / (2r)$; thế năng $E_p = -kZe^2 / r$. Vậy:

Here $a_0 = h^2 / (4\pi^2 \cdot m_e \cdot k \cdot e^2) \approx 0.529 \text{ Å}$. From (2.2) the kinetic energy is $E_k = m_e v^2 / 2 = kZe^2 / (2r)$ and the potential energy is $E_p = -kZe^2 / r$. Hence:

$$E = E_k + E_p = -k \cdot Z \cdot e^2 / (2r)$$

Thay r_n từ (2.3): $E_n = -(k \cdot e^2 / (2a_0)) \cdot Z^2 / n^2$. Giá trị $E_H = k \cdot e^2 / (2a_0) \approx 13,6 \text{ eV}$.

Substituting r_n from (2.3): $E_n = -(k \cdot e^2 / (2a_0)) \cdot Z^2 / n^2$. The constant $E_H = k \cdot e^2 / (2a_0)$ is about 13.6 eV .

$$E_n = -E_H \cdot Z^2 / n^2 \quad (2.4)$$

■

NHẬN XÉT / REMARK – Năng lượng E_n luôn âm: electron bị liên kết. Mức thấp nhất $n = 1$ là trạng thái cơ bản, các mức $n \geq 2$ là trạng thái kích thích, và khoảng cách giữa hai mức kề nhau thu hẹp dần khi n tăng, tiến tới giới hạn $E = 0$. Bán kính tăng theo n^2 còn năng lượng giảm theo $1/n^2$; cả hai đều tỉ lệ với Z (bán kính theo $1/Z$, năng lượng theo Z^2).

The energy E_n is always negative: the electron is bound. The lowest level $n = 1$ is the ground state, levels $n \geq 2$ are excited states, and neighbouring levels crowd together as n grows, towards the limit $E = 0$. Radius grows as n^2 and energy falls as $1/n^2$; both depend on Z (radius as $1/Z$, energy as Z^2).

PHẢI THUỘC / MEMORISE – $a_0 = 0,529 \text{ Å}$; $E_H = 13,6 \text{ eV}$; $r_n = 0,529 \cdot n^2 / Z (\text{Å})$; $E_n = -13,6 \cdot Z^2 / n^2 (\text{eV})$.

$a_0 = 0.529 \text{ Å}$; $E_H = 13.6 \text{ eV}$; $r_n = 0.529 \cdot n^2 / Z (\text{Å})$; $E_n = -13.6 \cdot Z^2 / n^2 (\text{eV})$.

2.2. Phổ vạch và năng lượng ion hóa của hệ một electron – *Line spectra and ionisation energy of one-electron systems*

HỆ QUẢ 2.3 (Công thức Rydberg) / COROLLARY 2.3 (Rydberg formula) – Photon phát ra khi hệ một electron chuyển từ mức n_i xuống mức n_f ($n_i > n_f$) có số sóng $1/\lambda = R_H \cdot Z^2 \cdot (1/n_f^2 - 1/n_i^2)$, với hằng số Rydberg $R_H = 1,097 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$.

The photon emitted when a one-electron system drops from level n_i to level n_f ($n_i > n_f$) has wavenumber $1/\lambda = R_H \cdot Z^2 \cdot (1/n_f^2 - 1/n_i^2)$, with the Rydberg constant $R_H = 1.097 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$.

Chứng minh. / *Proof.*

Theo định đề (iii) và (2.4), năng lượng photon bằng hiệu hai mức:

By postulate (iii) and (2.4) the photon energy is the difference of the two levels:

$$h \cdot c / \lambda = E_H \cdot Z^2 \cdot (1/n_f^2 - 1/n_i^2)$$

Chia hai vế cho $h \cdot c$, đặt $R_H = E_H / (h \cdot c)$. Bằng số: $13,6 \times 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ J} / (6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s} \times 2,998 \cdot 10^8 \text{ m/s}) \approx 1,097 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$.

Divide both sides by $h \cdot c$ and put $R_H = E_H / (h \cdot c)$. Numerically: $13.6 \times 1.602 \cdot 10^{-19} \text{ J} / (6.626 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s} \times 2.998 \cdot 10^8 \text{ m/s}) \approx 1.097 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$.

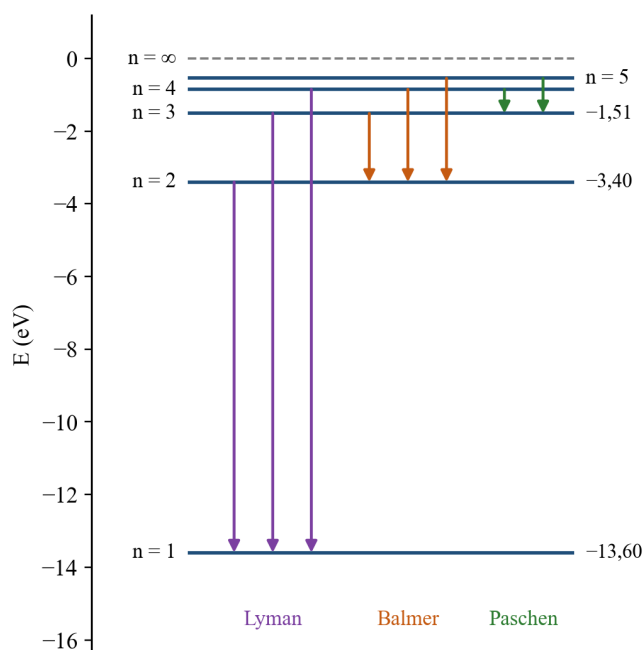
$$1/\lambda = R_H \cdot Z^2 \cdot (1/n_f^2 - 1/n_i^2) \quad (2.5)$$

■

Các vạch cùng n_f hợp thành một dãy: dãy Lyman ($n_f = 1$, vùng tử ngoại), dãy Balmer ($n_f = 2$, chủ yếu vùng khả kiến), dãy Paschen ($n_f = 3$, hồng ngoại gần). Trong một dãy, vạch có $n_i = n_f + 1$ có bước sóng dài nhất; giới hạn dãy ứng với $n_i \rightarrow \infty$ cho bước sóng ngắn nhất. Khi cần năng lượng photon theo eV, dùng hệ thức:

Lines with the same n_f form a series: Lyman ($n_f = 1$, ultraviolet), Balmer ($n_f = 2$, mostly visible), Paschen ($n_f = 3$, near infrared). Within a series the line with $n_i = n_f + 1$ has the longest wavelength, and the series limit $n_i \rightarrow \infty$ gives the shortest. For a photon energy in eV use:

$$E (\text{eV}) \cdot \lambda (\text{nm}) \approx 1240 \quad (2.6)$$



Hình 2.1. Mức năng lượng của nguyên tử hydrogen và các chuyển mức tạo ba dãy vạch.

Figure 2.1. Energy levels of the hydrogen atom and the transitions forming three line series.

ĐỊNH NGHĨA 2.4 (Năng lượng ion hóa) / DEFINITION 2.4 (Ionisation energy) – Năng lượng ion hóa là năng lượng tối thiểu cần để tách electron khỏi hệ ở trạng thái xác định ra vô cực. Với hệ một electron ở mức n : $IE_n = -E_n = 13,6 \cdot Z^2/n^2$ eV; ở trạng thái cơ bản $IE = 13,6 \cdot Z^2$ eV.

Ionisation energy is the minimum energy needed to remove the electron of a system in a given state to infinity. For a one-electron system in level n : $IE_n = -E_n = 13.6 \cdot Z^2/n^2$ eV; in the ground state $IE = 13.6 \cdot Z^2$ eV.

NHẬN XÉT / REMARK – Mô hình Bohr chỉ đúng cho hệ một electron. Với nguyên tử nhiều electron nó không tính được năng lượng, vì electron đẩy nhau. Ngay với hydrogen, khái niệm quỹ đạo có bán kính xác định bị cơ học lượng tử bỏ: trạng thái cơ bản của H có mô-men động lượng quỹ đạo bằng 0, không bằng $h/(2\pi)$ như Bohr đã đặt ra. Các mức năng lượng E_n thì vẫn đúng.

The Bohr model holds only for one-electron systems. For atoms with several electrons it cannot give energies, because electrons repel one another. Even for hydrogen, quantum mechanics drops the idea of an orbit of definite radius: the ground state of H has zero orbital angular momentum, not $h/(2\pi)$ as Bohr assumed. The energy levels E_n remain correct.

PHÂN TÍCH / ANALYSIS – Đề hỏi bán kính, năng lượng hoặc bước sóng của ion một electron: đưa Z và n vào (2.3), (2.4), (2.5), mọi đại lượng còn lại là phép thế số. Với bước sóng, kiểm tra kết quả bằng đường vòng: tính ΔE rồi chia 1240 cho nó.

The question asks for the radius, energy or wavelength of a one-electron ion: insert Z and n into (2.3), (2.4), (2.5) and the rest is substitution. For a wavelength, check by the detour: compute ΔE and divide 1240 by it.

VÍ DỤ 2.1 (Bohr cho ion một electron) / EXAMPLE 2.1 (Bohr model for a one-electron ion) – Ion Be^{3+} ở trạng thái $n = 3$. Tính: a) bán kính quỹ đạo; b) năng lượng của electron; c) năng lượng cần để tách electron khỏi trạng thái này; d) bước sóng photon phát ra khi electron chuyển từ $n = 3$ về $n = 2$. Cho $a_0 = 0,529 \text{ \AA}$, $R_H = 1,097 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$.

The ion Be^{3+} is in the state $n = 3$. Find: a) the orbit radius; b) the electron energy; c) the energy needed to remove the electron from this state; d) the wavelength of the photon emitted in the jump $n = 3$ to $n = 2$. Take $a_0 = 0.529 \text{ \AA}$, $R_H = 1.097 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$.

Lời giải. / Solution.

Be có $Z = 4$. Áp dụng (2.3) và (2.4).

Be has $Z = 4$. Apply (2.3) and (2.4).

1. $r_3 = 0,529 \times 3^2/4 \approx 1,19 \text{ \AA}$.

$r_3 = 0.529 \times 3^2/4 \approx 1.19 \text{ \AA}$.

2. $E_3 = -13,6 \times 4^2/3^2 \approx -24,2 \text{ eV}$.

$E_3 = -13.6 \times 4^2/3^2 \approx -24.2 \text{ eV}$.

3. $IE_3 = -E_3 \approx 24,2 \text{ eV}$.

$IE_3 = -E_3 \approx 24.2 \text{ eV}$.

4. $1/\lambda = 1,097 \cdot 10^7 \times 16 \times (1/4 - 1/9) \approx 2,438 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$, suy ra $\lambda \approx 4,10 \cdot 10^{-8} \text{ m}$.

$1/\lambda = 1.097 \cdot 10^7 \times 16 \times (1/4 - 1/9) \approx 2.438 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$, so $\lambda \approx 4.10 \cdot 10^{-8} \text{ m}$.

Vậy $r_3 \approx 1,19 \text{ \AA}$, $E_3 \approx -24,2 \text{ eV}$, $IE_3 \approx 24,2 \text{ eV}$ và $\lambda \approx 41,0 \text{ nm}$ (tử ngoại).

Hence $r_3 \approx 1.19 \text{ \AA}$, $E_3 \approx -24.2 \text{ eV}$, $IE_3 \approx 24.2 \text{ eV}$ and $\lambda \approx 41.0 \text{ nm}$ (ultraviolet). ■

PHÂN TÍCH / ANALYSIS – Chỉ một ẩn Z , và Z phải nguyên. Vạch đầu của dãy Lyman là chuyển $2 \rightarrow 1$. Đưa λ vào (2.5) để có Z^2 , rồi làm tròn tới số nguyên và kiểm lại bằng cách tính ΔE .

There is one unknown, Z , and it must be an integer. The first Lyman line is the jump 2 to 1 . Put λ into (2.5) to get Z^2 , round to an integer and check by computing ΔE .

VÍ DỤ 2.2 (Tìm Z từ vạch Lyman) / EXAMPLE 2.2 (Finding Z from a Lyman line) –

Vạch đầu tiên của dãy Lyman của một ion một electron có bước sóng $4,86 \text{ nm}$. Xác định ion đó. Cho $R_H = 1,097 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$.

The first line of the Lyman series of a one-electron ion has wavelength 4.86 nm . Identify the ion. $R_H = 1.097 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$.

Lời giải. / Solution.

Vạch ứng với $n_i = 2$, $n_f = 1$. Theo (2.5):

The line has $n_i = 2$, $n_f = 1$. By (2.5):

$$1/\lambda = R_H \cdot Z^2 \cdot (1 - 1/4) = (3/4) \cdot R_H \cdot Z^2$$

1. $Z^2 = 4/(3 \cdot R_H \cdot \lambda) = 4/(3 \times 1,097 \cdot 10^7 \times 4,86 \cdot 10^{-9}) \approx 25,0$, suy ra $Z = 5$.

$Z^2 = 4/(3 \cdot R_H \cdot \lambda) = 4/(3 \times 1.097 \cdot 10^7 \times 4.86 \cdot 10^{-9}) \approx 25.0$, so $Z = 5$.

2. Kiểm tra: $\Delta E = 13,6 \times 25 \times 3/4 = 255 \text{ eV}$, $\lambda = 1240/255 \approx 4,86 \text{ nm}$. Khớp đề.

Check: $\Delta E = 13.6 \times 25 \times 3/4 = 255 \text{ eV}$ and $\lambda = 1240/255 \approx 4.86 \text{ nm}$. This matches the data.

Vậy $Z = 5$, ion là B^{4+} .

Hence $Z = 5$ and the ion is B^{4+} . ■

2.3. Lượng tính sóng – hạt và orbital nguyên tử – *Wave-particle duality and atomic orbitals*

ĐỊNH LUẬT 2.5 (Giả thuyết de Broglie) / LAW 2.5 (de Broglie hypothesis) – Mọi hạt vi mô có động lượng $p = m \cdot v$ đều đi kèm một sóng vật chất có bước sóng $\lambda = h/p$. Giả thuyết được xác nhận bằng nhiễu xạ electron qua tinh thể; phạm vi: hạt có khối lượng nghỉ, tốc độ nhỏ hơn nhiều so với c .

Every microscopic particle of momentum $p = m \cdot v$ is accompanied by a matter wave of wavelength $\lambda = h/p$. The hypothesis is confirmed by electron diffraction in crystals; scope: particles with rest mass, at speeds much below c .

$$\lambda = h/(m \cdot v) \quad (2.7)$$

Với vật thể thường, h quá nhỏ nên λ nhỏ không đo được. Với electron, λ cùng cỡ với khoảng cách giữa các nguyên tử, vì vậy hiệu ứng sóng chi phối chuyển động của nó trong nguyên tử.

For an everyday object h is so small that λ is unmeasurably small. For an electron λ is of the order of interatomic distances, so wave effects govern its motion inside an atom.

HỆ QUẢ 2.6 / COROLLARY 2.6 – Quỹ đạo Bohr thứ n chứa đúng n bước sóng de Broglie: $2\pi r = n \cdot \lambda$. Điều kiện này tương đương định đề (ii) của Bohr.

The n -th Bohr orbit holds exactly n de Broglie wavelengths: $2\pi r = n \cdot \lambda$. This condition is equivalent to Bohr's postulate (ii).

Chứng minh. / *Proof.*

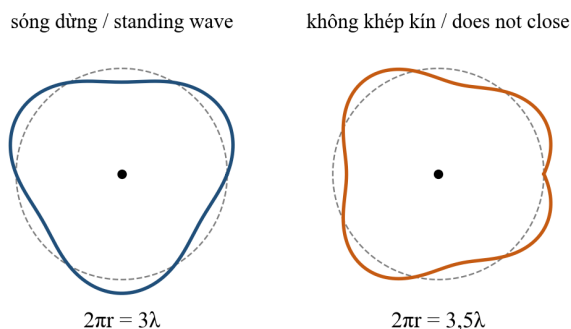
Sóng chạy quanh quỹ đạo chỉ khép kín được nếu chu vi bằng số nguyên lần bước sóng; nếu không, sau mỗi vòng sóng lệch pha và triệt tiêu:

A wave travelling round the orbit closes on itself only if the circumference is a whole number of wavelengths; otherwise it is out of phase after each turn and cancels:

$$2\pi \cdot r = n \cdot \lambda \quad (2.8)$$

Thế $\lambda = h/(m_e \cdot v)$: $2\pi \cdot r = n \cdot h/(m_e \cdot v)$, tức $m_e \cdot v \cdot r = n \cdot h/(2\pi)$, đúng là (2.1).

Substituting $\lambda = h/(m_e \cdot v)$: $2\pi \cdot r = n \cdot h/(m_e \cdot v)$, that is $m_e \cdot v \cdot r = n \cdot h/(2\pi)$, which is (2.1). ■



Hình 2.2. Sóng de Broglie quanh quỹ đạo: số nguyên bước sóng cho sóng dừng, số không nguyên thì sóng tự triệt tiêu.

Figure 2.2. De Broglie wave round an orbit: a whole number of wavelengths gives a standing wave, a fractional number cancels itself.

ĐỊNH LUẬT 2.7 (Nguyên lý bất định Heisenberg) / LAW 2.7 (Heisenberg uncertainty principle) – Không thể xác định đồng thời chính xác vị trí và động lượng của một hạt vi mô: $\Delta x \cdot \Delta p \geq h/(4\pi)$. Đây là nguyên lý thực nghiệm của cơ học lượng tử, không chứng minh ở đây. *Position and momentum of a microscopic particle cannot both be known exactly at the same time: $\Delta x \cdot \Delta p \geq h/(4\pi)$. This is a principle of quantum mechanics, not proved here.*

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq h/(4\pi) \quad (2.9)$$

ĐỊNH NGHĨA 2.8 (Orbital nguyên tử) / DEFINITION 2.8 (Atomic orbital) – Orbital nguyên tử là hàm sóng ψ mô tả trạng thái của một electron trong nguyên tử. Bình phương $|\psi|^2$ tại một điểm tỉ lệ với mật độ xác suất tìm thấy electron ở điểm đó. Hình biểu diễn orbital là vùng không gian quanh hạt nhân chứa khoảng 90 % xác suất. *An atomic orbital is the wavefunction ψ describing the state of one electron in an atom. The square $|\psi|^2$ at a point is proportional to the probability density of finding the electron there. The picture of an orbital is the region around the nucleus holding about 90 % of the probability.*

VÍ DỤ 2.3 (Sóng dừng trên quỹ đạo Bohr) / EXAMPLE 2.3 (Standing wave on a Bohr orbit) – Electron của nguyên tử H ở $n = 3$. Tính động năng của nó, bước sóng de Broglie, và kiểm tra rằng chu vi quỹ đạo bằng 3 bước sóng. Cho $m_e = 9,109 \cdot 10^{-31}$ kg, $a_0 = 0,529$ Å. *The electron of a hydrogen atom is in level $n = 3$. Find its kinetic energy and de Broglie wavelength, and check that the orbit circumference equals 3 wavelengths. $m_e = 9.109 \cdot 10^{-31}$ kg, $a_0 = 0.529$ Å.*

Lời giải. / Solution.

Theo (2.4) và (2.2), $E_k = -E_3 = 13,6/9 \approx 1,511$ eV.

By (2.4) and (2.2), $E_k = -E_3 = 13.6/9 \approx 1.511$ eV.

$$\lambda = h/p = h/\sqrt{(2 \cdot m_e \cdot E_k)}$$

- $E_k = 1,511 \times 1,602 \cdot 10^{-19} = 2,421 \cdot 10^{-19}$ J; $p = \sqrt{(2 \times 9,109 \cdot 10^{-31} \times 2,421 \cdot 10^{-19})} \approx 6,641 \cdot 10^{-25}$ kg·m/s.
 $E_k = 1.511 \times 1.602 \cdot 10^{-19} = 2.421 \cdot 10^{-19}$ J; $p = \sqrt{(2 \times 9.109 \cdot 10^{-31} \times 2.421 \cdot 10^{-19})} \approx 6.641 \cdot 10^{-25}$ kg·m/s.

$$2. \lambda = 6,626 \cdot 10^{-34} / 6,641 \cdot 10^{-25} \approx 9,98 \cdot 10^{-10} \text{ m} = 9,98 \text{ Å}, \text{ nên } 3\lambda \approx 29,9 \text{ Å}.$$

$$\lambda = 6.626 \cdot 10^{-34} / 6.641 \cdot 10^{-25} \approx 9.98 \cdot 10^{-10} \text{ m} = 9.98 \text{ Å}, \text{ so } 3\lambda \approx 29.9 \text{ Å}.$$

$$3. r_3 = 0,529 \times 9 = 4,761 \text{ Å}, \text{ chu vi } 2\pi \cdot r_3 \approx 29,9 \text{ Å}.$$

$$r_3 = 0.529 \times 9 = 4.761 \text{ Å}, \text{ circumference } 2\pi \cdot r_3 \approx 29.9 \text{ Å}.$$

Vậy $E_k \approx 1,51 \text{ eV}$, $\lambda \approx 9,98 \text{ Å}$ và $2\pi \cdot r_3 = 3\lambda$ trong sai số làm tròn.

Hence $E_k \approx 1.51 \text{ eV}$, $\lambda \approx 9.98 \text{ Å}$ and $2\pi \cdot r_3 = 3\lambda$ within rounding. ■

PHÂN TÍCH / ANALYSIS – Đề cho cả năng lượng photon lẫn năng lượng ion hóa: electron bắn ra mang phần năng lượng dư. Lập cân bằng năng lượng, tính động năng, sau đó mới dùng $\lambda = h/(m \cdot v)$. Mọi đại lượng đổi sang SI trước khi tính v.

The data give both a photon energy and an ionisation energy: the ejected electron carries the surplus. Write the energy balance, get the kinetic energy, and only then use $\lambda = h/(m \cdot v)$. Convert everything to SI before computing v.

VÍ DỤ 2.4 (Quang ion hóa và sóng de Broglie) / EXAMPLE 2.4 (Photoionisation and the de Broglie wave)

– Nguyên tử H ở $n = 2$ hấp thụ một photon bước sóng 250 nm. a) Electron có bị bứt ra không, và động năng khi bứt ra là bao nhiêu eV? b) Tính tốc độ và bước sóng de Broglie của electron đó. c) Bước sóng dài nhất của photon còn ion hóa được H ở $n = 2$. Cho $m_e = 9,109 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$.

A hydrogen atom in $n = 2$ absorbs a photon of wavelength 250 nm. a) Is the electron ejected, and with what kinetic energy in eV? b) Find its speed and de Broglie wavelength. c) The longest photon wavelength that still ionises H from $n = 2$. $m_e = 9.109 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$.

Lời giải. / Solution.

1. $E_{\text{photon}} = 1240/250 \approx 4,96 \text{ eV}$; $IE_2 = 13,6/4 = 3,40 \text{ eV}$. Vì $4,96 > 3,40$ nên electron bị bứt ra, với $E_k = 4,96 - 3,40 \approx 1,56 \text{ eV}$.

$E_{\text{photon}} = 1240/250 \approx 4.96 \text{ eV}$; $IE_2 = 13.6/4 = 3.40 \text{ eV}$. Since $4.96 > 3.40$ the electron is ejected, with $E_k = 4.96 - 3.40 \approx 1.56 \text{ eV}$.

2. $E_k = 1,56 \times 1,602 \cdot 10^{-19} = 2,50 \cdot 10^{-19} \text{ J}$; $v = \sqrt{(2E_k/m_e)} = \sqrt{(2 \times 2,50 \cdot 10^{-19} / 9,109 \cdot 10^{-31})} \approx 7,41 \cdot 10^5 \text{ m/s}$.

$E_k = 1.56 \times 1.602 \cdot 10^{-19} = 2.50 \cdot 10^{-19} \text{ J}$; $v = \sqrt{(2E_k/m_e)} = \sqrt{(2 \times 2.50 \cdot 10^{-19} / 9.109 \cdot 10^{-31})} \approx 7.41 \cdot 10^5 \text{ m/s}$.

3. $\lambda = h/(m_e \cdot v) = 6,626 \cdot 10^{-34} / (9,109 \cdot 10^{-31} \times 7,41 \cdot 10^5) \approx 9,8 \cdot 10^{-10} \text{ m} = 0,98 \text{ nm}$.

$\lambda = h/(m_e \cdot v) = 6.626 \cdot 10^{-34} / (9.109 \cdot 10^{-31} \times 7.41 \cdot 10^5) \approx 9.8 \cdot 10^{-10} \text{ m} = 0.98 \text{ nm}$.

4. Ngưỡng ion hóa: $\lambda_{\text{max}} = 1240/3,40 \approx 365 \text{ nm}$.

Threshold: $\lambda_{\text{max}} = 1240/3.40 \approx 365 \text{ nm}$.

Vậy electron bị bứt ra với $1,56 \text{ eV}$, $v \approx 7,41 \cdot 10^5 \text{ m/s}$, $\lambda \approx 0,98 \text{ nm}$; bước sóng dài nhất ion hóa được là 365 nm .

Hence the electron leaves with 1.56 eV , $v \approx 7.41 \cdot 10^5 \text{ m/s}$ and $\lambda \approx 0.98 \text{ nm}$; the longest ionising wavelength is 365 nm . ■

2.4. Bốn số lượng tử và hình dạng orbital – The four quantum numbers and orbital shapes

ĐỊNH NGHĨA 2.9 (Số lượng tử) / DEFINITION 2.9 (Quantum numbers) – Trạng thái của electron trong nguyên tử được xác định bởi bốn số lượng tử. Số lượng tử chính n quyết định lớp và phần lớn năng lượng. Số lượng tử phụ (orbital) l quyết định phân lớp và hình dạng orbital. Số lượng tử từ m_l quyết định hướng của orbital trong không gian. Số lượng tử từ spin m_s cho hướng spin của electron.

The state of an electron in an atom is fixed by four quantum numbers. The principal quantum number n sets the shell and most of the energy. The azimuthal (orbital) quantum number l sets the subshell and the shape of the orbital. The magnetic quantum number m_l sets the orientation of the orbital in space. The spin quantum number m_s gives the spin direction of the electron.

ĐỊNH LUẬT 2.10 (Quy tắc giá trị số lượng tử) / LAW 2.10 (Quantum-number rules) – Giá trị cho phép của các số lượng tử: $n = 1, 2, 3, \dots$; với mỗi n , $l = 0, 1, \dots, n - 1$; với mỗi l , $m_l = -l, -l + 1, \dots, 0, \dots, +l$; $m_s = +1/2$ hoặc $-1/2$. Các phân lớp $l = 0, 1, 2, 3$ được gọi là s, p, d, f.

Allowed values of the quantum numbers: $n = 1, 2, 3, \dots$; for each n , $l = 0, 1, \dots, n - 1$; for each l , $m_l = -l, -l + 1, \dots, 0, \dots, +l$; $m_s = +1/2$ or $-1/2$. The subshells $l = 0, 1, 2, 3$ are called s, p, d, f.

HỆ QUẢ 2.11 / COROLLARY 2.11 – Phân lớp l có $2l + 1$ orbital, chứa tối đa $2(2l + 1)$ electron. Lớp n có n^2 orbital và chứa tối đa $2n^2$ electron.

A subshell l has $2l + 1$ orbitals and holds at most $2(2l + 1)$ electrons. A shell n has n^2 orbitals and holds at most $2n^2$ electrons.

Chứng minh. / Proof.

Với l cho trước, m_l nhận các giá trị từ $-l$ đến $+l$, tức $2l + 1$ giá trị, mỗi giá trị là một orbital; mỗi orbital có hai giá trị m_s . Trong lớp n , l chạy từ 0 đến $n - 1$, nên số orbital là tổng của cấp số cộng:

For a given l , m_l runs from $-l$ to $+l$, which is $2l + 1$ values, each an orbital; each orbital has two values of m_s . In shell n , l runs from 0 to $n - 1$, so the number of orbitals is the sum of an arithmetic progression:

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = 1 + 3 + 5 + \dots + (2n - 1) = n^2 \quad (2.10)$$

Nhân đôi cho hai hướng spin được $2n^2$ electron.

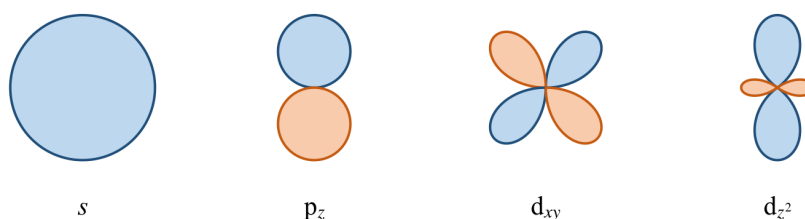
Doubling for the two spin directions gives $2n^2$ electrons. ■

Phân lớp Subshell	l	Số orbital Orbitals	Số electron tối đa Maximum electrons	Giá trị m Values of m
s	0	1	2	0
p	1	3	6	-1, 0, +1
d	2	5	10	-2, -1, 0, +1, +2
f	3	7	14	-3, ..., +3

TÍNH CHẤT 2.12 (Hình dạng và mặt nút) / PROPERTY 2.12 (Shape and nodes) –

Orbital s có dạng cầu. Ba orbital p (p_x , p_y , p_z) có hai thùy đối xứng qua hạt nhân, dọc ba trục tọa độ. Năm orbital d có bốn thùy (d_{xy} , d_{xz} , d_{yz} , $d_{x^2-y^2}$) hoặc hai thùy kèm một vòng (d_{z^2}). Orbital (n, l) có $n - 1$ mặt nút, trong đó l mặt nút đi qua hạt nhân và $n - l - 1$ mặt nút cầu; $|\psi|^2$ bằng 0 trên mặt nút.

The s orbital is spherical. The three p orbitals (p_x , p_y , p_z) have two lobes on either side of the nucleus along the coordinate axes. The five d orbitals have four lobes (d_{xy} , d_{xz} , d_{yz} , $d_{x^2-y^2}$) or two lobes with a ring (d_{z^2}). An orbital (n, l) has $n - 1$ nodal surfaces: l pass through the nucleus and $n - l - 1$ are spherical; $|\psi|^2$ is zero on a node.



Hình 2.3. Phần góc của orbital s, pz, dxy và dz² (mặt cắt; xanh là pha dương, cam là pha âm).

Figure 2.3. Angular part of the s, pz, dxy and dz² orbitals (cross-section; blue is positive phase, orange negative).

PHÂN TÍCH / ANALYSIS – Đề đếm electron theo một điều kiện lên số lượng tử. Liệt kê theo từng n và l, loại cặp vi phạm quy tắc giá trị, rồi đếm số orbital thỏa điều kiện m_l ; mỗi orbital cho một electron ứng với m_s đã cho.

The question counts electrons under a condition on the quantum numbers. List by n and l, drop pairs that break the value rules, then count the orbitals that satisfy the m_l condition; each orbital gives one electron for a stated m_s .

VÍ DỤ 2.5 (Đếm theo số lượng tử) / EXAMPLE 2.5 (Counting by quantum numbers) –

a) Trong nguyên tử, tối đa bao nhiêu electron có đồng thời $n \leq 4$, $m_l = +1$ và $m_s = -1/2$? b) Trong lớp $n = 4$, có bao nhiêu bộ bốn số lượng tử (n, l, m_l, m_s) hợp lệ với $m_l \leq 0$?

a) At most how many electrons in an atom can have $n \leq 4$, $m_l = +1$ and $m_s = -1/2$ at once? b) In the shell $n = 4$, how many valid sets (n, l, m_l, m_s) have $m_l \leq 0$?

Lời giải. / Solution.

1. Để $m_l = +1$ cần $l \geq 1$. $n = 2$: $l = 1$ (1 orbital); $n = 3$: $l = 1, 2$ (2 orbital); $n = 4$: $l = 1, 2, 3$ (3 orbital). Tổng 6 orbital.

$m_l = +1$ needs $l \geq 1$. $n = 2$: $l = 1$ (1 orbital); $n = 3$: $l = 1, 2$ (2 orbitals); $n = 4$: $l = 1, 2, 3$ (3 orbitals). Total 6 orbitals.

2. Mỗi orbital có đúng một electron với $m_s = -1/2$, nên đáp số a) là 6 electron.

Each orbital has exactly one electron with $m_s = -1/2$, so the answer to a) is 6 electrons.

3. Với $n = 4$: $l = 0$ có $m_l = 0$ (1 giá trị); $l = 1$ có $-1, 0$ (2); $l = 2$ có $-2, -1, 0$ (3); $l = 3$ có $-3, \dots, 0$ (4). Tổng 10 orbital.

For $n = 4$: $l = 0$ has $m_l = 0$ (1 value); $l = 1$ has $-1, 0$ (2); $l = 2$ has $-2, -1, 0$ (3); $l = 3$ has $-3, \dots, 0$ (4). Total 10 orbitals.

4. Mỗi orbital cho hai giá trị m_s : $10 \times 2 = 20$ bộ.

Each orbital gives two values of m_s : $10 \times 2 = 20$ sets.

Vậy a) 6 electron; b) 20 bộ.

Hence a) 6 electrons; b) 20 sets. ■

LỖI HAY GẶP / COMMON MISTAKE – Cho phép $l = n$ (ví dụ ghi 3d ở lớp $n = 2$, hay phân lớp 2d). Phân lớp d chỉ có từ $n = 3$ và f chỉ có từ $n = 4$.

Allowing $l = n$ (for example writing 2d). The d subshell exists only from $n = 3$ and f only from $n = 4$.

LỖI HAY GẶP / COMMON MISTAKE – Quên rằng m_s nhân đôi số trạng thái: lớp n có n^2 orbital nhưng $2n^2$ bộ số lượng tử.

Forgetting that m_s doubles the count: shell n has n^2 orbitals but $2n^2$ sets of quantum numbers.

2.5. Nguyên lý, quy tắc và cấu hình electron ở trạng thái cơ bản – Principles, rules and ground-state configurations

ĐỊNH LUẬT 2.13 (Nguyên lý loại trừ Pauli) / LAW 2.13 (Pauli exclusion principle) –

Hai electron trong cùng một nguyên tử không thể có cùng bộ bốn số lượng tử. Hệ quả: mỗi orbital chứa tối đa hai electron, và hai electron đó có spin ngược chiều.

No two electrons in the same atom can have the same four quantum numbers. Consequently each orbital holds at most two electrons, and those two have opposite spins.

ĐỊNH LUẬT 2.14 (Quy tắc Hund) / LAW 2.14 (Hund's rule) – Trong các orbital có cùng năng lượng, electron chiếm riêng từng orbital với spin song song trước, chỉ ghép đôi khi mọi orbital đã có một electron. Phạm vi: các orbital suy biến của cùng một phân lớp.

Among orbitals of equal energy, electrons occupy separate orbitals with parallel spins first, and pair up only when every orbital already holds one. Scope: the degenerate orbitals of one subshell.

ĐỊNH LUẬT 2.15 (Nguyên lý vững bền) / LAW 2.15 (Aufbau principle) – Ở trạng thái cơ bản, electron lần lượt chiếm các orbital có năng lượng từ thấp lên cao, mỗi orbital theo nguyên lý Pauli.

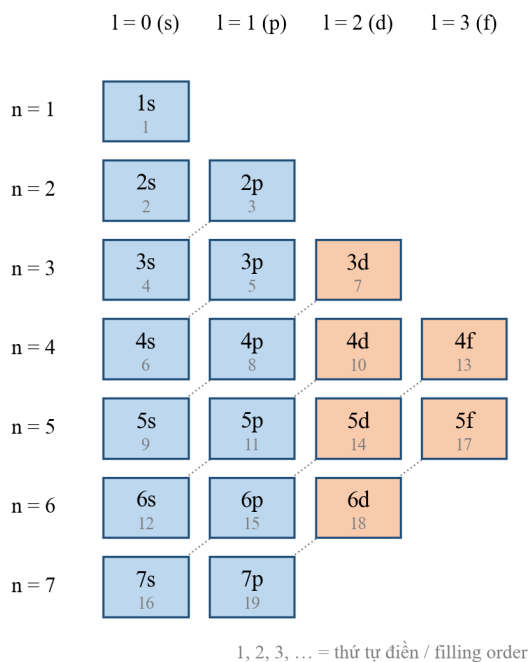
In the ground state electrons fill orbitals from lowest to highest energy, each orbital obeying the Pauli principle.

ĐỊNH LUẬT 2.16 (Quy tắc Klechkowski) / LAW 2.16 (Madelung (Klechkowski) rule) –

Thứ tự năng lượng các phân lớp tăng theo tổng $n + l$; hai phân lớp cùng $n + l$ thì phân lớp có n nhỏ hơn thấp hơn. Thứ tự điền: 1s 2s 2p 3s 3p 4s 3d 4p 5s 4d 5p 6s 4f 5d 6p 7s 5f 6d 7p. Đây là quy tắc thực nghiệm, có ngoại lệ (tính chất 2.17).

The energy order of subshells rises with $n + l$; for equal $n + l$ the subshell with smaller n is lower.

Filling order: 1s 2s 2p 3s 3p 4s 3d 4p 5s 4d 5p 6s 4f 5d 6p 7s 5f 6d 7p. This is an empirical rule with exceptions (property 2.17).



Hình 2.4. Các phân lớp theo lớp n và loại l ; số nhỏ là thứ tự điền theo $n + l$, đường chấm nối các phân lớp cùng $n + l$.

Figure 2.4. Subshells by shell n and type l ; the small number is the filling order by $n + l$, dotted lines join subshells of equal $n + l$.

Cấu hình electron viết các phân lớp theo n tăng dần, số electron ghi làm chỉ số trên: nitrogen $1s^2 2s^2 2p^3$, viết gọn $[\text{He}] 2s^2 2p^3$. Dạng ô orbital cho thấy spin: ở N, ba electron $2p$ nằm riêng trong ba ô, cùng chiều ($\uparrow \uparrow \uparrow$), theo quy tắc Hund. Phosphorus ở $3p$ là 3 electron độc thân; sulfur ở $3p$ có 4 electron: $\uparrow \downarrow \uparrow \uparrow$, hai electron độc thân.

An electron configuration lists the subshells by increasing n with the electron count as a superscript: nitrogen $1s^2 2s^2 2p^3$, abbreviated $[\text{He}] 2s^2 2p^3$. The orbital-box form shows spin: in N the three $2p$ electrons sit in three separate boxes with parallel spins ($\uparrow \uparrow \uparrow$), following Hund's rule. Phosphorus has 3 unpaired electrons in $3p$; sulfur has 4 electrons in $3p$: $\uparrow \downarrow \uparrow \uparrow$, so 2 unpaired.

TÍNH CHẤT 2.17 (Ngoại lệ cấu hình) / PROPERTY 2.17 (Configuration exceptions) –

Ngoại lệ trong dãy $3d$, $4d$: khi các phân lớp $(n-1)d$ và ns gần nhau về năng lượng, nguyên tử có thể chuyển một electron từ ns sang $(n-1)d$ để đạt d^5 (nửa đầy) hoặc d^{10} (đầy). Các ngoại lệ trong phạm vi $Z \leq 54$: Cr $3d^5 4s^1$, Cu $3d^{10} 4s^1$, Nb $4d^5 5s^1$, Mo $4d^5 5s^1$, Ru $4d^7 5s^1$, Rh $4d^8 5s^1$, Pd $4d^{10}$, Ag $4d^{10} 5s^1$.

Exceptions in the $3d$ and $4d$ rows: when the $(n-1)d$ and ns subshells are close in energy, an atom may move one electron from ns to $(n-1)d$ to reach d^5 (half full) or d^{10} (full). The exceptions with $Z \leq 54$ are: Cr $3d^5 4s^1$, Cu $3d^{10} 4s^1$, Nb $4d^5 5s^1$, Mo $4d^5 5s^1$, Ru $4d^7 5s^1$, Rh $4d^8 5s^1$, Pd $4d^{10}$, Ag $4d^{10} 5s^1$.

Z	Nguyên tố Element	Cấu hình rút gọn Short configuration	Electron độc thân Unpaired electrons
21	Sc	$[\text{Ar}] 3d^1 4s^2$	1

Z	Nguyên tố <i>Element</i>	Cấu hình rút gọn <i>Short configuration</i>	Electron độc thân <i>Unpaired electrons</i>
22	Ti	[Ar]3d ² 4s ²	2
23	V	[Ar]3d ³ 4s ²	3
24	Cr	[Ar]3d ⁵ 4s ¹	6
25	Mn	[Ar]3d ⁵ 4s ²	5
26	Fe	[Ar]3d ⁶ 4s ²	4
27	Co	[Ar]3d ⁷ 4s ²	3
28	Ni	[Ar]3d ⁸ 4s ²	2
29	Cu	[Ar]3d ¹⁰ 4s ¹	1
30	Zn	[Ar]3d ¹⁰ 4s ²	0
39	Y	[Kr]4d ¹ 5s ²	1
40	Zr	[Kr]4d ² 5s ²	2
41	Nb	[Kr]4d ⁴ 5s ¹	5
42	Mo	[Kr]4d ⁵ 5s ¹	6
43	Tc	[Kr]4d ⁵ 5s ²	5
44	Ru	[Kr]4d ⁷ 5s ¹	4
45	Rh	[Kr]4d ⁸ 5s ¹	3
46	Pd	[Kr]4d ¹⁰	0
47	Ag	[Kr]4d ¹⁰ 5s ¹	1
48	Cd	[Kr]4d ¹⁰ 5s ²	0

NHẬN XÉT / REMARK – Quy tắc $n + 1$ cho thứ tự điền, nhưng không phải thứ tự năng lượng tuyệt đối trong mọi nguyên tử. Danh sách ngoại lệ ở tính chất 2.17 xác định bằng thực nghiệm; phải thuộc, không suy ra từ quy tắc.

The $n + 1$ rule gives a filling order, not the energy order in every atom. The exceptions in property 2.17 are fixed by experiment: they must be memorised, not derived from the rule.

PHÂN TÍCH / ANALYSIS – Các dữ kiện đếm theo loại electron (s, p, d) và số electron độc thân. Số electron s chia nhỏ ứng viên: đếm s theo cấu hình rút gọn. Sau đó chỉ cần xét các nguyên tố ứng viên, nhớ rằng ngoại lệ Cr và Cu thay đổi cả số s lẫn số electron độc thân.

The data count electrons by type (s, p, d) and unpaired electrons. The s count narrows the candidates: count s from the configuration. Then check only the candidates, remembering that the exceptions Cr and Cu change both the s count and the unpaired count.

VÍ DỤ 2.6 (Xác định nguyên tố từ cấu hình) / EXAMPLE 2.6 (Identifying an element from its configuration) – Nguyên tử của nguyên tố X ($Z \leq 54$) ở trạng thái cơ bản có tổng 7 electron thuộc các phân lớp s và có 6 electron độc thân. Xác định X và viết cấu hình electron.
An atom of element X ($Z \leq 54$) in the ground state has 7 electrons in s subshells in total and 6 unpaired electrons. Identify X and write its configuration.

Lời giải. / Solution.

1. Các phân lớp s đầy trước 4s là 1s, 2s, 3s: 6 electron. Tổng 7 nghĩa là 4s có đúng 1 electron và 5s trống.
The s subshells before 4s are 1s, 2s, 3s: 6 electrons. A total of 7 means 4s holds exactly 1 electron and 5s is empty.
2. Ứng viên: K ($[\text{Ar}]4s^1$, 1 electron độc thân), Cr ($[\text{Ar}]3d^5 4s^1$, 6 electron độc thân), Cu ($[\text{Ar}]3d^{10} 4s^1$, 1 electron độc thân).
Candidates: K ($[\text{Ar}]4s^1$, 1 unpaired), Cr ($[\text{Ar}]3d^5 4s^1$, 6 unpaired), Cu ($[\text{Ar}]3d^{10} 4s^1$, 1 unpaired).
3. Chỉ Cr có 6 electron độc thân: $3d^5$ cho 5 và $4s^1$ cho 1.
Only Cr has 6 unpaired electrons: $3d^5$ gives 5 and $4s^1$ gives 1.

Vậy X là Cr ($Z = 24$), cấu hình $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^1$.

Hence X is Cr ($Z = 24$), with configuration $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^1$. ■

2.6. Cấu hình ion kim loại chuyển tiếp và từ tính – Configurations of transition-metal ions and magnetism

TÍNH CHẤT 2.18 (Cấu hình cation) / PROPERTY 2.18 (Cation configurations) – Khi tạo cation, electron bị mất trước hết là electron ở lớp n lớn nhất (với kim loại chuyển tiếp: electron ns trước, rồi mới tới $(n-1)d$). Khi tạo anion, electron thêm vào orbital trống có năng lượng thấp nhất.

When a cation forms, electrons are lost first from the shell with the largest n (for transition metals: ns electrons first, then $(n-1)d$). When an anion forms, electrons are added to the lowest empty orbital.

Lý do nằm ở quy tắc Slater (mục 2.7): khi 3d đã có electron, nó bị hạt nhân hút mạnh hơn 4s nên nằm thấp hơn 4s. Dạng viết: Fe: $[\text{Ar}]3d^6 4s^2 \rightarrow \text{Fe}^{2+}: [\text{Ar}]3d^6$ (không phải $3d^4 4s^2$).

The reason lies in Slater's rules (section 2.7): once 3d holds electrons, the nucleus pulls on it harder than on 4s, so it lies below 4s. Written out: Fe: $[\text{Ar}]3d^6 4s^2 \rightarrow \text{Fe}^{2+}: [\text{Ar}]3d^6$ (not $3d^4 4s^2$).

ĐỊNH NGHĨA 2.19 (Thuận từ và nghịch từ) / DEFINITION 2.19 (Paramagnetism and diamagnetism) – Chất thuận từ bị hút vào từ trường vì có electron độc thân; chất nghịch từ có mọi electron ghép đôi và bị đẩy nhẹ ra khỏi từ trường. Với ion có n electron độc thân, moment từ chỉ-spin là $\mu_s = \sqrt{n(n+2)}$ magneton Bohr (BM).

A paramagnetic substance is drawn into a magnetic field because it has unpaired electrons; a diamagnetic substance has all electrons paired and is weakly repelled. For an ion with n unpaired electrons the spin-only magnetic moment is $\mu_s = \sqrt{n(n+2)}$ Bohr magnetons (BM).

$$\mu_s = \sqrt{n(n+2)} \quad (\text{BM}) \quad (2.11)$$

VÍ DỤ 2.7 (Cấu hình ion và từ tính) / EXAMPLE 2.7 (Ion configurations and magnetism)

– Viết cấu hình electron của các ion Mn^{2+} , Co^{2+} , Cu^+ , V^{3+} ở trạng thái khí cô lập; cho biết số electron độc thân, tính chất từ và moment từ chỉ-spin; xếp các ion theo moment từ tăng dần.

Write the electron configurations of the gaseous ions Mn^{2+} , Co^{2+} , Cu^+ , V^{3+} ; give the number of unpaired electrons, the magnetic behaviour and the spin-only moment; rank the ions by increasing moment.

Lời giải. / Solution.

1. Mn ($Z = 25$) $[Ar]3d^5 4s^2$; Mn^{2+} mất 2 electron 4s: $[Ar]3d^5$, 5 electron độc thân, $\mu_s = \sqrt{35} \approx 5,92$ BM.
Mn ($Z = 25$) $[Ar]3d^5 4s^2$; Mn^{2+} loses the two 4s electrons: $[Ar]3d^5$, 5 unpaired, $\mu_s = \sqrt{35} \approx 5.92$ BM.
2. Co ($Z = 27$) $[Ar]3d^7 4s^2$; Co^{2+} : $[Ar]3d^7$, 3 electron độc thân (ô: $\uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow \uparrow \uparrow$), $\mu_s = \sqrt{15} \approx 3,87$ BM.
Co ($Z = 27$) $[Ar]3d^7 4s^2$; Co^{2+} : $[Ar]3d^7$, 3 unpaired (boxes: $\uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow \uparrow \uparrow$), $\mu_s = \sqrt{15} \approx 3.87$ BM.
3. Cu ($Z = 29$) $[Ar]3d^{10} 4s^1$; Cu^+ mất electron 4s: $[Ar]3d^{10}$, 0 electron độc thân, nghịch từ, $\mu_s = 0$.
Cu ($Z = 29$) $[Ar]3d^{10} 4s^1$; Cu^+ loses the 4s electron: $[Ar]3d^{10}$, 0 unpaired, diamagnetic, $\mu_s = 0$.
4. V ($Z = 23$) $[Ar]3d^3 4s^2$; V^{3+} : $[Ar]3d^2$, 2 electron độc thân, $\mu_s = \sqrt{8} \approx 2,83$ BM.
V ($Z = 23$) $[Ar]3d^3 4s^2$; V^{3+} : $[Ar]3d^2$, 2 unpaired, $\mu_s = \sqrt{8} \approx 2.83$ BM.

Vậy Cu^+ (0) < V^{3+} (2,83) < Co^{2+} (3,87) < Mn^{2+} (5,92 BM); chỉ Cu^+ nghịch từ, ba ion còn lại thuận từ.

Hence Cu^+ (0) < V^{3+} (2.83) < Co^{2+} (3.87) < Mn^{2+} (5.92 BM); only Cu^+ is diamagnetic, the other three are paramagnetic. ■

LỖI HAY GẶP / COMMON MISTAKE – Lấy cấu hình nguyên tử trung hòa để suy ra cấu hình ion: Fe^{3+} viết thành $3d^3 4s^2$. Phải bỏ 4s trước, được $3d^5$.

Building an ion from the neutral-atom pattern: writing Fe^{3+} as $3d^3 4s^2$. The 4s electrons go first, giving $3d^5$.

LỖI HAY GẶP / COMMON MISTAKE – Đếm electron độc thân bằng cách đếm số electron d mà không áp dụng quy tắc Hund: d^7 có 3 electron độc thân chứ không phải 7, vì 4 electron đã ghép đôi.

Counting unpaired electrons as the number of d electrons without Hund's rule: d^7 has 3 unpaired electrons, not 7, because 4 of them are paired.

2.7. Quy tắc Slater: điện tích hạt nhân hiệu dụng và năng lượng orbital –

Slater's rules: effective nuclear charge and orbital energy

Trong nguyên tử nhiều electron, mỗi electron bị các electron khác che chắn bớt lực hút của hạt nhân. Lực hút còn lại tác dụng lên electron tương đương với một hạt nhân có điện tích thu nhỏ.

In a many-electron atom each electron is partly shielded from the nucleus by the others. The remaining attraction is equivalent to that of a nucleus with a reduced charge.

ĐỊNH NGHĨA 2.20 (Điện tích hạt nhân hiệu dụng) / DEFINITION 2.20 (Effective nuclear charge) – Điện tích hạt nhân hiệu dụng của một electron là $Z_{\text{eff}} = Z - S$, trong đó S là hằng số chắn, tổng đóng góp che chắn của các electron còn lại.

The effective nuclear charge of an electron is $Z_{\text{eff}} = Z - S$, where S is the shielding constant, the total shielding contributed by the other electrons.

$$Z_{\text{eff}} = Z - S \quad (2.12)$$

ĐỊNH LUẬT 2.21 (Quy tắc Slater) / LAW 2.21 (Slater's rules) – Chia electron thành các nhóm theo thứ tự (1s)(2s,2p)(3s,3p)(3d)(4s,4p)(4d)(4f)(5s,5p)... Với electron đang xét: electron ở nhóm bên phải đóng góp 0. Mỗi electron khác cùng nhóm đóng góp 0,35 (riêng nhóm 1s: 0,30). Nếu electron xét thuộc nhóm ns, np: mỗi electron ở lớp $n - 1$ đóng góp 0,85, mỗi electron ở lớp $n - 2$ trở vào đóng góp 1,00. Nếu electron xét thuộc nhóm nd hoặc nf: mọi electron ở các nhóm bên trái đóng góp 1,00.

Group the electrons in the order (1s)(2s,2p)(3s,3p)(3d)(4s,4p)(4d)(4f)(5s,5p)... For the electron under study: electrons in groups to the right contribute 0. Each other electron in the same group contributes 0.35 (0.30 for the 1s group). If the electron is in an ns or np group, each electron in shell $n - 1$ contributes 0.85 and each electron in shell $n - 2$ or lower contributes 1.00. If it is in an nd or nf group, all electrons in groups to the left contribute 1.00.

TÍNH CHẤT 2.22 (Năng lượng orbital theo Slater) / PROPERTY 2.22 (Slater orbital energy) – Năng lượng của electron là $E = -E_H \cdot (Z_{\text{eff}}/n_{\text{eff}})^2$, với $n_{\text{eff}} = 1, 2, 3, 3.7, 4.0, 4.2$ ứng với $n = 1, 2, 3, 4, 5, 6$. Năng lượng toàn phần của nguyên tử ước tính bằng tổng E của mọi electron, và năng lượng ion hóa bằng hiệu $E_{\text{tổng}}$ của ion với $E_{\text{tổng}}$ của nguyên tử. Đây là phương pháp bán thực nghiệm: sai lệch từ vài phần trăm (Ca, Rb) đến hàng chục phần trăm (Na, Mg, Al).

The energy of an electron is $E = -E_H \cdot (Z_{\text{eff}}/n_{\text{eff}})^2$, with $n_{\text{eff}} = 1, 2, 3, 3.7, 4.0, 4.2$ for $n = 1, 2, 3, 4, 5, 6$. The total energy of the atom is estimated as the sum of E over all electrons, and the ionisation energy is the difference between E_{total} of the ion and of the atom. This is a semi-empirical method: the error ranges from a few per cent (Ca, Rb) to tens of per cent (Na, Mg, Al).

$$E = -E_H \cdot (Z_{\text{eff}}/n_{\text{eff}})^2 \quad (\text{eV}) \quad (2.13)$$

$$IE \approx E_{\text{tổng}}(\text{ion}) - E_{\text{tổng}}(\text{nguyên tử}) \quad (2.14)$$

PHÂN TÍCH / ANALYSIS – Hỏi so sánh mức năng lượng của hai phân lớp trong cùng nguyên tử: tính Z_{eff} cho một electron ở mỗi phân lớp theo (2.12) và quy tắc Slater, rồi E theo (2.13). Chú ý n_{eff} của 4s là 3,7, khác 4, và 3d dùng $n = 3$.

The question compares two subshell energies in one atom: compute Z_{eff} for one electron in each subshell by (2.12) and Slater's rules, then E by (2.13). Note that n_{eff} for 4s is 3.7, not 4, and 3d uses $n = 3$.

VÍ DỤ 2.8 (Slater: 4s so với 3d ở K) / EXAMPLE 2.8 (Slater: 4s versus 3d in K) – Với nguyên tử K ($Z = 19$), dùng quy tắc Slater so sánh năng lượng của electron 4s và của electron giả thiết ở 3d. Từ đó cho biết electron cuối cùng của K vào phân lớp nào.

For the K atom ($Z = 19$), use Slater's rules to compare the energy of a 4s electron with that of a hypothetical 3d electron. Say which subshell the last electron of K enters.

Lời giải. / Solution.

1. Electron 4s trong $[Ar]4s^1$: nhóm 3s, 3p (8 electron) ở lớp $n - 1$ đóng góp 0,85; lớp $n - 2$ (1s, 2s, 2p: 10 electron) đóng góp 1,00. $S = 8 \times 0,85 + 10 = 16,8$, $Z_{\text{eff}} = 19 - 16,8 = 2,2$.

A 4s electron in $[Ar]4s^1$: the 3s, 3p group (8 electrons) in shell $n - 1$ contributes 0.85 each; shell $n - 2$ (1s, 2s, 2p: 10 electrons) contributes 1.00 each. $S = 8 \times 0.85 + 10 = 16.8$, $Z_{\text{eff}} = 19 - 16.8 = 2.2$.

2. $E(4s) = -13,6 \times (2,2/3,7)^2 \approx -4,81 \text{ eV}$.

$E(4s) = -13.6 \times (2.2/3.7)^2 \approx -4.81 \text{ eV}$.

3. Electron 3d giả thiết ($[Ar]3d^1$): mọi electron ở các nhóm bên trái (18 electron) đóng góp 1,00; $S = 18$, $Z_{\text{eff}} = 1,0$.

A hypothetical 3d electron ($[Ar]3d^1$): all 18 electrons in groups to the left contribute 1.00; $S = 18$, $Z_{\text{eff}} = 1.0$.

4. $E(3d) = -13,6 \times (1,0/3)^2 \approx -1,51 \text{ eV}$.

$E(3d) = -13.6 \times (1.0/3)^2 \approx -1.51 \text{ eV}$.

Vậy 4s ($-4,81 \text{ eV}$) thấp hơn 3d ($-1,51 \text{ eV}$); electron cuối của K vào 4s, cấu hình $[Ar]4s^1$.
Hence 4s (-4.81 eV) lies below 3d (-1.51 eV); the last electron of K enters 4s, giving $[Ar]4s^1$.

■

PHÂN TÍCH / ANALYSIS – Muốn biết electron nào mất trước ở Ti, tính Z_{eff} và E cho một electron 4s và một electron 3d trong Ti ($[Ar]3d^2 4s^2$). Phân lớp có năng lượng cao hơn là phân lớp mất electron trước. Cần thận ở nhóm 3d, electron 4s không che chắn 3d.

To see which electron Ti loses first, compute Z_{eff} and E for one 4s and one 3d electron in Ti ($[Ar]3d^2 4s^2$). The subshell of higher energy loses its electron first. In the 3d group the 4s electrons do not shield 3d.

VÍ DỤ 2.9 (Slater và thứ tự mất electron) / EXAMPLE 2.9 (Slater and the order of electron loss) – Với Ti ($Z = 22$, $[Ar]3d^2 4s^2$) tính Z_{eff} và năng lượng của một electron 4s và một electron 3d theo Slater. Giải thích vì sao Ti^{2+} có cấu hình $[Ar]3d^2$.

For Ti ($Z = 22$, $[Ar]3d^2 4s^2$) find Z_{eff} and the energy of one 4s and one 3d electron by Slater's rules. Explain why Ti^{2+} has the configuration $[Ar]3d^2$.

Lời giải. / Solution.

1. Electron 4s: electron 4s còn lại 0,35; lớp $n - 1$ (3s, 3p, 3d: $2 + 6 + 2 = 10$ electron) $10 \times 0,85 = 8,5$; lớp $n - 2$ trở vào $10 \times 1,00 = 10$. $S = 18,85$; $Z_{\text{eff}} = 3,15$.

4s electron: the other 4s electron 0.35; shell $n - 1$ (3s, 3p, 3d: $2 + 6 + 2 = 10$ electrons) $10 \times 0.85 = 8.5$; shell $n - 2$ and below $10 \times 1.00 = 10$. $S = 18.85$; $Z_{\text{eff}} = 3.15$.

2. $E(4s) = -13,6 \times (3,15/3,7)^2 \approx -9,86 \text{ eV}$.

$E(4s) = -13.6 \times (3.15/3.7)^2 \approx -9.86 \text{ eV}$.

3. Electron 3d: electron 3d còn lại 0,35; 18 electron ở 1s đến 3p đóng góp $18 \times 1,00$; electron 4s không tính. $S = 18,35$; $Z_{\text{eff}} = 3,65$.

3d electron: the other 3d electron 0.35; the 18 electrons from 1s to 3p contribute 18×1.00 ; the 4s electrons count 0. $S = 18.35$; $Z_{\text{eff}} = 3.65$.

4. $E(3d) = -13,6 \times (3,65/3)^2 \approx -20,1 \text{ eV}$.

$E(3d) = -13,6 \times (3,65/3)^2 \approx -20,1 \text{ eV}$.

Vậy trong Ti, 3d (−20,1 eV) thấp hơn 4s (−9,86 eV): hai electron 4s, ở mức cao hơn, mất trước, nên Ti^{2+} là $[\text{Ar}]3d^2$.

Hence in Ti the 3d level (−20.1 eV) lies below 4s (−9.86 eV): the two 4s electrons, being higher, go first, so Ti^{2+} is $[\text{Ar}]3d^2$. ■

VÍ DỤ 2.10 (Năng lượng ion hóa theo Slater) / EXAMPLE 2.10 (Ionisation energy by Slater's rules) – Dùng quy tắc Slater ước tính năng lượng ion hóa thứ nhất và thứ hai của Li ($1s^2 2s^1$), so với thực nghiệm 5,39 eV và 75,64 eV. Hai kết quả cho biết gì về số electron hóa trị của Li?

Use Slater's rules to estimate the first and second ionisation energies of Li ($1s^2 2s^1$) and compare with experiment, 5.39 eV and 75.64 eV. What do the two results say about the number of valence electrons of Li?

Lời giải. / Solution.

1. Li: electron 2s có $S = 2 \times 0,85 = 1,70$, $Z_{\text{eff}} = 1,30$. $E(2s) = -13,6 \times (1,30/2)^2 \approx -5,75 \text{ eV}$. Bỏ electron 2s không đổi E của 1s, nên $\text{IE}_1 \approx 5,75 \text{ eV}$ (thực nghiệm 5,39 eV, lệch khoảng 7 %).

Li: the 2s electron has $S = 2 \times 0.85 = 1.70$, $Z_{\text{eff}} = 1.30$. $E(2s) = -13.6 \times (1.30/2)^2 \approx -5.75 \text{ eV}$. Removing it does not change E of 1s, so $\text{IE}_1 \approx 5.75 \text{ eV}$ (experiment 5.39 eV, about 7 % off).

2. $\text{Li}^+ (1s^2)$: mỗi electron 1s có $S = 0,30$; $Z_{\text{eff}} = 2,70$; $E_{\text{tổng}} = 2 \times (-13,6 \times 2,70^2) \approx -198,3 \text{ eV}$.

$\text{Li}^+ (1s^2)$: each 1s electron has $S = 0.30$; $Z_{\text{eff}} = 2.70$; $E_{\text{total}} = 2 \times (-13.6 \times 2.70^2) \approx -198.3 \text{ eV}$.

3. $\text{Li}^{2+} (1s^1)$: hệ một electron, $E = -13,6 \times 3^2 = -122,4 \text{ eV}$. $\text{IE}_2 = -122,4 - (-198,3) \approx 75,9 \text{ eV}$ (thực nghiệm 75,64 eV).

$\text{Li}^{2+} (1s^1)$: a one-electron system, $E = -13.6 \times 3^2 = -122.4 \text{ eV}$. $\text{IE}_2 = -122.4 - (-198.3) \approx 75.9 \text{ eV}$ (experiment 75.64 eV).

Vậy $\text{IE}_1 \approx 5,75 \text{ eV}$, $\text{IE}_2 \approx 75,9 \text{ eV}$. Bước nhảy $\text{IE}_2/\text{IE}_1 \approx 13$ cho thấy electron thứ hai nằm ở lớp trong, nên Li chỉ có 1 electron hóa trị.

Hence $\text{IE}_1 \approx 5.75 \text{ eV}$ and $\text{IE}_2 \approx 75.9 \text{ eV}$. The jump $\text{IE}_2/\text{IE}_1 \approx 13$ shows that the second electron sits in an inner shell, so Li has only 1 valence electron. ■

NHẬN XÉT / REMARK – Slater cho kết quả tốt với K, Ca, Rb nhưng lệch nhiều với Na, Mg, Al và phi kim chu kỳ 3. Một hạn chế của phương pháp: nó gán chung Z_{eff} cho electron s và p cùng lớp, nên bỏ qua việc orbital s xuyên sâu vào gần hạt nhân hơn orbital p.

Slater's rules work well for K, Ca and Rb but deviate strongly for Na, Mg, Al and the period 3 non-metals. One limitation: the method gives s and p electrons of the same shell a common Z_{eff} , and so ignores that an s orbital penetrates closer to the nucleus than a p orbital.

LỖI HAY GẶP / COMMON MISTAKE – Tính hằng số chắn cho electron nd mà vẫn cho electron ns, np cùng lớp che chắn 0,85. Với nd, nf: mọi electron ở nhóm bên trái, kể cả ns, np cùng lớp, đóng góp 1,00.

Computing S for an nd electron while still giving the ns, np electrons of the same shell 0.85. For nd and nf, every electron in the groups to the left, including ns and np of the same shell, contributes 1.00.

LỖI HAY GẶP / COMMON MISTAKE – Dùng n thay cho n_{eff} khi $n \geq 4$: 4s phải dùng $n_{\text{eff}} = 3,7$, không phải 4.

Using n instead of n_{eff} for $n \geq 4$: 4s needs $n_{\text{eff}} = 3.7$, not 4.

Bảng chiến lược – Strategy table

PHẢI THUỘC / MEMORISE – Thứ tự điền: 1s 2s 2p 3s 3p 4s 3d 4p 5s 4d 5p 6s 4f 5d 6p 7s. Khi tạo ion dương của kim loại chuyển tiếp, electron ns bị lấy trước electron $(n-1)d$. Ngoại lệ thường gặp: Cr, Cu, Mo, Ag (d^5s^1 , $d^{10}s^1$).

Filling order: 1s 2s 2p 3s 3p 4s 3d 4p 5s 4d 5p 6s 4f 5d 6p 7s. When a transition metal forms a cation, the ns electrons are removed before the $(n-1)d$ electrons. Common exceptions: Cr, Cu, Mo, Ag (d^5s^1 , $d^{10}s^1$).

Dấu hiệu trong đề <i>Sign in the problem</i>	Công cụ nên thử <i>Tool to try</i>	Ví dụ <i>Example</i>
Ion một electron, cho n, Z, hoặc λ <i>One-electron ion, given n, Z or λ</i>	(2.3), (2.4), (2.5) và hệ thức 1240 <i>(2.3), (2.4), (2.5) and the 1240 relation</i>	2.1, 2.2
Electron bị bứt ra, hỏi tốc độ, λ <i>Ejected electron, asks for speed or λ</i>	Cân bằng năng lượng, rồi $\lambda = h/(m \cdot v)$ <i>Energy balance, then $\lambda = h/(m \cdot v)$</i>	2.3, 2.4
Đếm electron theo n, l, m_l , m_s <i>Counting electrons by n, l, m_l, m_s</i>	Liệt kê (n, l), loại cặp sai, đếm orbital <i>List (n, l), drop invalid pairs, count orbitals</i>	2.5
Tìm nguyên tố từ số electron s, p, d, độc thân <i>Find an element from s, p, d and unpaired counts</i>	Cấu hình rút gọn, thu ứng viên, xét ngoại lệ <i>Short configuration, narrow candidates, check exceptions</i>	2.6
Cấu hình ion, từ tính <i>Ion configuration, magnetism</i>	Bỏ ns trước, Hund, $\mu_s = \sqrt{n(n+2)}$ <i>Remove ns first, Hund, $\mu_s = \sqrt{n(n+2)}$</i>	2.7
So sánh mức năng lượng hai phân lớp <i>Compare two subshell energies</i>	Z_{eff} theo Slater, $E = -13,6(Z_{\text{eff}}/n_{\text{eff}})^2$ <i>Slater Z_{eff}, $E = -13.6(Z_{\text{eff}}/n_{\text{eff}})^2$</i>	2.8, 2.9
Ước tính IE, bước nhảy IE <i>Estimating IE, IE jump</i>	Hiệu $E_{\text{tổng}}$ của ion và nguyên tử <i>Difference of E_{total} of ion and atom</i>	2.10

Thuật ngữ <i>Term (Vietnamese)</i>	Tiếng Anh <i>English</i>	Giải thích ngắn <i>Short definition</i>
Mô hình Bohr	Bohr model	mô hình hệ một electron có quỹ đạo dừng lượng tử hóa <i>one-electron model with quantised stationary orbits</i>
Quỹ đạo dừng	Stationary orbit	quỹ đạo mà electron không bức xạ <i>orbit on which the electron does not radiate</i>
Bán kính Bohr	Bohr radius	bán kính quỹ đạo $n = 1$ của H, 0,529 Å <i>radius of the $n = 1$ orbit of H, 0.529 Å</i>
Hằng số Rydberg	Rydberg constant	$R_H = 1,097 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$ <i>$R_H = 1.097 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$</i>
Dãy Lyman	Lyman series	các vạch chuyển về $n = 1$, tử ngoại <i>lines ending at $n = 1$, ultraviolet</i>
Năng lượng ion hóa	Ionisation energy	năng lượng tách electron ra vô cực <i>energy to remove an electron to infinity</i>
Bước sóng de Broglie	de Broglie wavelength	$\lambda = h/(m \cdot v)$ của hạt vi mô <i>$\lambda = h/(m \cdot v)$ of a microscopic particle</i>
Nguyên lý bất định	Uncertainty principle	giới hạn độ chính xác đồng thời của x và p <i>limit on knowing x and p together</i>
Orbital nguyên tử	Atomic orbital	hàm sóng của một electron trong nguyên tử <i>wavefunction of one electron in an atom</i>
Số lượng tử chính	Principal quantum number	n , xác định lớp electron <i>n, fixes the electron shell</i>
Số lượng tử từ	Magnetic quantum number	m_l , hướng của orbital <i>m_l, orientation of the orbital</i>
Mặt nút	Nodal surface	mặt mà $ \psi ^2$ bằng 0 <i>surface where $\psi ^2$ is zero</i>
Nguyên lý loại trừ Pauli	Pauli exclusion principle	không hai electron cùng bốn số lượng tử <i>no two electrons share four quantum numbers</i>
Quy tắc Hund	Hund's rule	spin song song trước khi ghép đôi <i>parallel spins before pairing</i>
Nguyên lý vững bền	Aufbau principle	điền electron từ mức thấp lên cao <i>filling from the lowest level upwards</i>
Electron độc thân	Unpaired electron	electron chiếm riêng một orbital <i>electron alone in an orbital</i>
Thuận từ	Paramagnetic	có electron độc thân, bị từ trường hút <i>has unpaired electrons, drawn into a field</i>

Thuật ngữ <i>Term (Vietnamese)</i>	Tiếng Anh <i>English</i>	Giải thích ngắn <i>Short definition</i>
Hằng số chắn	Shielding constant	S trong $Z_{\text{eff}} = Z - S$ <i>S in $Z_{\text{eff}} = Z - S$</i>
Điện tích hạt nhân hiệu dụng	Effective nuclear charge	điện tích hạt nhân mà electron cảm nhận <i>nuclear charge felt by an electron</i>

2.8. Bài tự luyện – Practice problems

Mức 1 – Học sinh giỏi cấp tỉnh – Level 1 – Provincial olympiad

Bài 2.1 / Problem 2.1 – Một ion một electron ở mức $n = 3$ có năng lượng $-122,4 \text{ eV}$. a) Xác định ion. b) Tính năng lượng ion hóa từ trạng thái cơ bản. c) Tính bán kính quỹ đạo $n = 1$ (Å) và bước sóng của vạch $2 \rightarrow 1$ (nm). Cho $a_0 = 0,529 \text{ Å}$, $R_H = 1,097 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$.

A one-electron ion in level $n = 3$ has energy -122.4 eV . a) Identify the ion. b) Find the ionisation energy from the ground state. c) Find the radius of the $n = 1$ orbit (Å) and the wavelength of the line 2 to 1 (nm). $a_0 = 0.529 \text{ Å}$, $R_H = 1.097 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$.

Bài 2.2 / Problem 2.2 – Viết cấu hình electron (dạng đầy đủ hoặc rút gọn [khí hiếm]) của Mo ($Z = 42$), ion Ag^+ ($Z = 47$) và ion Co^{3+} ($Z = 27$) ở trạng thái khí. Cho số electron độc thân, tính chất từ, và moment từ chỉ-spin của Co^{3+} .

Write the electron configuration (full or noble-gas abbreviated) of Mo ($Z = 42$), the ion Ag^+ ($Z = 47$) and the ion Co^{3+} ($Z = 27$) in the gas phase. Give the number of unpaired electrons, the magnetic behaviour, and the spin-only moment of Co^{3+} .

Bài 2.3 / Problem 2.3 – a) Bộ số lượng tử (n, l, m_l, m_s) nào sau đây hợp lệ: $(3, 3, 0, +1/2)$; $(4, 2, -3, +1/2)$; $(2, 1, 0, -1/2)$; $(5, 0, 0, 0)$? b) Lớp $n = 5$ chứa tối đa bao nhiêu electron, trong đó bao nhiêu electron có $l = 3$? c) Lớp $n = 4$ có bao nhiêu electron với $m_l = 0$?

a) Which of these sets (n, l, m_l, m_s) is valid: $(3, 3, 0, +1/2)$; $(4, 2, -3, +1/2)$; $(2, 1, 0, -1/2)$; $(5, 0, 0, 0)$? b) How many electrons can the shell $n = 5$ hold, and how many of them have $l = 3$? c) How many electrons of the shell $n = 4$ have $m_l = 0$?

Mức 2 – Học sinh giỏi quốc gia – Level 2 – National olympiad

Bài 2.4 / Problem 2.4 – Một mẫu khí chứa ion N^{6+} bị kích thích lên $n = 5$ rồi phát xạ về mọi mức thấp hơn. a) Có tối đa bao nhiêu vạch, bao nhiêu vạch thuộc dãy kết thúc ở $n = 1$? b) Tính bước sóng dài nhất và ngắn nhất trong các vạch đó, và năng lượng photon ứng với vạch ngắn nhất. Cho $R_H = 1,097 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$.

A gas sample containing N^{6+} ions is excited to $n = 5$ and emits in drops to every lower level. a) What is the largest number of lines, and how many belong to the series ending at $n = 1$? b) Find the longest and shortest wavelengths among them, and the photon energy of the shortest. $R_H = 1.097 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$.

Bài 2.5 / Problem 2.5 – Nguyên tử hydrogen Rydberg ở $n = 100$. Tính: a) bán kính quỹ đạo (μm) và năng lượng liên kết (meV); b) bước sóng, tần số của photon khi electron chuyển từ $n = 100$ xuống $n = 99$ và vùng phổ của nó. Cho $a_0 = 0,529 \text{ Å}$, $h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$, $c = 2,998 \cdot 10^8 \text{ m/s}$.

A Rydberg hydrogen atom is in $n = 100$. Find: a) the orbit radius (μm) and the binding energy (meV);

b) the wavelength and frequency of the photon emitted in the drop from $n = 100$ to $n = 99$ and its spectral region. $a_0 = 0.529 \text{ \AA}$, $h = 6.626 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$, $c = 2.998 \cdot 10^8 \text{ m/s}$.

Bài 2.6 / Problem 2.6 – Nguyên tử của nguyên tố X ($Z \leq 54$) ở trạng thái cơ bản có 24 orbital chứa electron (kể cả orbital chỉ có một electron) và 5 electron độc thân. a) Chứng minh bằng vét cạn rằng X là duy nhất, và xác định X. b) Viết cấu hình ion X^{2+} và X^{7+} , số electron độc thân của mỗi ion.

An atom of element X ($Z \leq 54$) in the ground state has 24 orbitals containing electrons (counting orbitals with a single electron) and 5 unpaired electrons. a) Show by exhaustive search that X is unique, and identify X. b) Give the configurations of X^{2+} and X^{7+} and the number of unpaired electrons in each ion.

Mức 3 – Olympic quốc tế – Level 3 – International olympiad

Bài 2.7 / Problem 2.7 – Dùng quy tắc Slater ($n_{\text{eff}} = 3,7$ cho $n = 4$) ước tính năng lượng ion hóa thứ nhất và thứ hai của Ca ($Z = 20$, $[\text{Ar}]4s^2$). So với thực nghiệm 6,11 eV và 11,87 eV, tính sai lệch tương đối, và giải thích vì sao $IE_2 > IE_1$ dù cả hai đều tách electron 4s.

Use Slater's rules ($n_{\text{eff}} = 3.7$ for $n = 4$) to estimate the first and second ionisation energies of Ca ($Z = 20$, $[\text{Ar}]4s^2$). Compare with experiment, 6.11 eV and 11.87 eV, give the relative deviations, and explain why $IE_2 > IE_1$ although both remove a 4s electron.

Bài 2.8 / Problem 2.8 – Áp dụng mô hình Bohr với khối lượng rút gọn $\mu = m_1 \cdot m_2 / (m_1 + m_2)$ thay cho m_e : $E_n = -13,6 \cdot (\mu/m_e) / n^2 \text{ eV}$, $r_n = n^2 \cdot a_0 \cdot (m_e/\mu)$. Cho $m_\mu = 206,77 m_e$, $m_p = 1836,15 m_e$. a) Positronium (e^- và e^+): tính E_1 , r_1 và bước sóng vạch $2 \rightarrow 1$. b) Hydrogen muon (μ^- và proton): tính μ/m_e , E_1 và r_1 (pm); r_1 nhỏ hơn bán kính Bohr bao nhiêu lần?

Apply the Bohr model with the reduced mass $\mu = m_1 \cdot m_2 / (m_1 + m_2)$ in place of m_e : $E_n = -13.6 \cdot (\mu/m_e) / n^2 \text{ eV}$, $r_n = n^2 \cdot a_0 \cdot (m_e/\mu)$. Take $m_\mu = 206.77 m_e$, $m_p = 1836.15 m_e$. a) Positronium (e^- and e^+): find E_1 , r_1 and the wavelength of the 2 to 1 line. b) Muonic hydrogen (μ^- and a proton): find μ/m_e , E_1 and r_1 (pm); by what factor is r_1 smaller than the Bohr radius?

Bài 2.9 / Problem 2.9 – Năng lượng trao đổi tỉ lệ với số cặp electron cùng chiều spin: $N_c = C(n_\uparrow, 2) + C(n_\downarrow, 2)$. Với mỗi cặp cấu hình sau, tính N_c (chỉ tính các electron d và s ngoài cùng) và cho biết N_c có ủng hộ cấu hình thực nghiệm không: a) Cr: $3d^5 4s^1$ so với $3d^4 4s^2$; b) Cu: $3d^{10} 4s^1$ so với $3d^9 4s^2$; c) Pd: $4d^{10}$ so với $4d^8 5s^2$. Kết luận về giá trị của tiêu chí này.

Exchange energy is proportional to the number of pairs of electrons with the same spin: $N_p = C(n_\uparrow, 2) + C(n_\downarrow, 2)$. For each pair of configurations below calculate N_p (counting only the outer d and s electrons) and say whether N_p supports the observed configuration: a) Cr: $3d^5 4s^1$ against $3d^4 4s^2$; b) Cu: $3d^{10} 4s^1$ against $3d^9 4s^2$; c) Pd: $4d^{10}$ against $4d^8 5s^2$. Draw a conclusion about this criterion.

2.9. Lời giải bài tự luyện – Solutions to practice problems

Bài 2.1 – Problem 2.1

$$E_3 = -13,6 \cdot Z^2 / 9 = -122,4 \text{ eV}$$

1. $Z^2 = 122,4 \times 9 / 13,6 = 81$, nên $Z = 9$: ion là F^{8+} .

$Z^2 = 122,4 \times 9 / 13,6 = 81$, so $Z = 9$: the ion is F^{8+} .

2. $IE = 13,6 \times 81 = 1101,6 \text{ eV} \approx 1,10 \cdot 10^3 \text{ eV}$.

$IE = 13,6 \times 81 = 1101,6 \text{ eV} \approx 1,10 \cdot 10^3 \text{ eV}$.