

**Bài 6.3.** Electron trong nguyên tử Hydro ở trạng thái 1 s.

- a) Tính xác suất  $w_1$  tìm electron trong hình cầu  $(0;a)$  với  $a$  là bán kính Bohr thứ nhất.
- b) Tính xác suất  $w_2$  tìm electron ngoài hình cầu đó
- c) Tính tỷ số  $w_2/w_1$

**Bài giải:**

Electron ở trạng thái 1s

Hàm sóng:  $\psi_{1,0,0} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} a^{-3/2} e^{-r/a}$

Tương tự bài 6.2 xác suất tìm thấy hạt trong hình cầu  $(0;a)$  là:

$$w_1 = \int_0^{V(a)} \frac{1}{\pi} a^{-3} e^{-2r/a} dV = \int_0^a \frac{1}{\pi} a^{-3} e^{-2r/a} 4\pi r^2 dr = \int_0^a \frac{4}{a^3} e^{-2r/a} r^2 dr$$

Đặt

$$t = \frac{r}{a} \rightarrow r = at; dr = a dt$$

$$r = 0 \rightarrow t = 0$$

$$r = a \rightarrow t = 1$$

$$w_1 = \int_0^1 4e^{-2t} t^2 dt = 0,323324$$

$$w_2 = 1 - w_1 = 0,676676$$

6

Tỷ số:

$$\frac{w_2}{w_1} = \frac{0,676676}{0,323324} = 2,096$$

**Bài 6.8.** Tìm bước sóng của các bức xạ phát ra khi nguyên tử Li chuyển trạng thái  $3s \rightarrow 2s$ , cho biết đối với Li:  $x_s = -0,41$ ;  $x_p = -0,09$ .

**Bài giải:**

Trạng thái  $3s$ :  $n = 3, l = 0$

Trạng thái  $2s$ :  $n = 2, l = 0$

Ta thấy: Trong trường hợp này  $\Delta l = 0$

nên không thể có sự chuyển mức năng lượng trực tiếp từ  $3s$  về  $2s$ ,

mà theo quy tắc lựa chọn  $\Delta l = \pm 1$  nên từ mức  $3s$  sẽ chuyển về mức  $2p$ , sau đó từ mức  $2p$  chuyển tiếp về  $2s$ .

9

Như vậy để chuyển từ mức năng lượng  $3s$  về  $2s$ , nguyên tử Liti sẽ phát ra 2 bức xạ có bước sóng lần lượt là:

$\lambda_1$  - khi chuyển từ  $3s$  về  $2p$

$\lambda_2$  - khi chuyển từ  $2p$  về  $2s$

Với trạng thái  $2p$ :  $n = 2, l = 1$

Ta tính năng lượng liên kết của 3 trạng thái:

$$W_{3s} = \frac{-Rh}{(3 + x_s)^2} = \frac{-13,6}{(3 - 0,41)^2} = -2,0274 \text{ eV}$$

$$W_{2p} = \frac{-Rh}{(2 + x_p)^2} = \frac{-13,6}{(2 - 0,09)^2} = -3,7280 \text{ eV}$$

$$W_{2s} = \frac{-Rh}{(2 + x_s)^2} = \frac{-13,6}{(2 - 0,41)^2} = -5,3795 \text{ eV}$$

10

Đối với bước sóng  $\lambda_1$  ( $3s \rightarrow 2p$ ):  $\frac{hc}{\lambda_1} = W_{3s} - W_{2p}$

$$\rightarrow \lambda_1 = \frac{hc}{W_{3s} - W_{2p}} = \frac{6,626 \cdot 10^{-34} \cdot 3 \cdot 10^8}{(-2,0274 + 3,7280) \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}} = 0,73 \cdot 10^{-6} \text{ m}$$

Đối với bước sóng  $\lambda_2$  ( $2p \rightarrow 2s$ ):  $\frac{hc}{\lambda_2} = W_{2p} - W_{2s}$

$$\rightarrow \lambda_2 = \frac{hc}{W_{2p} - W_{2s}} = \frac{6,626 \cdot 10^{-34} \cdot 3 \cdot 10^8}{(-3,7280 + 5,3795) \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}} = 0,75 \cdot 10^{-6} \text{ m}$$

**Bài 6.14.** Đối với electron hóa trị trong nguyên tử Na:

Hỏi những trạng thái năng lượng nào có thể chuyển về trạng thái ứng với  $n = 3$ ? Khi xét có chú ý cả spin.

**Bài giải:**

Với số lượng tử chính  $n = 3$

sẽ có những mức năng lượng:  $3S$  ( $l = 0$ ),  $3P$  ( $l = 1$ ),  $3D$  ( $l = 2$ ).

Khi xét có tính đến spin nên ta phải xét cấu trúc tế vi (cấu trúc tinh tế),

khi đó sẽ có các trạng thái sau:

$$3^2S_{1/2} (n = 3, l = 0, j = 0 + 1/2 = 1/2)$$

$$3^2P_{1/2} (n = 3, l = 1, j = 1 - 1/2 = 1/2)$$

$$3^2P_{3/2} (n = 3, l = 1, j = 1 + 1/2 = 3/2)$$

$$3^2D_{3/2} (n = 3, l = 2, j = 2 - 1/2 = 3/2)$$

$$3^2D_{5/2} (n = 3, l = 2, j = 2 + 1/2 = 5/2)$$

Theo quy tắc lựa chọn:  $\Delta l = \pm 1; \Delta j = 0, \pm 1$

Theo đó:

Để vẽ  $3^2S_{1/2}$ :  $3^2S_{1/2} - n^2P_{1/2} (n = 3, 4, 5\ldots) (\Delta l = -1, \Delta j = 0)$

$$3^2S_{1/2} - n^2P_{3/2} (n = 3, 4, 5\ldots) (\Delta l = -1, \Delta j = -1)$$

Để vẽ  $3^2P_{1/2}$ :  $3^2P_{1/2} - n^2S_{1/2} (n = 4, 5, 6\ldots) (\Delta l = 1, \Delta j = 0)$

$$3^2P_{1/2} - n^2D_{3/2} (n = 3, 4, 5\ldots) (\Delta l = -1, \Delta j = -1)$$

Để vẽ  $3^2P_{3/2}$ :  $3^2P_{3/2} - n^2S_{1/2} (n = 4, 5, 6\ldots) (\Delta l = 1, \Delta j = 1)$

$$3^2P_{3/2} - n^2D_{3/2} (n = 3, 4, 5\ldots) (\Delta l = -1, \Delta j = 0)$$

$$3^2P_{3/2} - n^2D_{5/2} (n = 3, 4, 5\ldots) (\Delta l = -1, \Delta j = -1)$$

Để vẽ  $3^2D_{3/2}$  :

$$3^2D_{3/2} - n^2P_{1/2} (n = 4, 5, 6..)(\Delta l = 1, \Delta j = 1)$$

$$3^2D_{3/2} - n^2P_{3/2} (n = 4, 5, 6...)(\Delta l = 1, \Delta j = 0)$$

$$3^2D_{3/2} - n^2F_{5/2} (n = 4, 5, 6...)(\Delta l = -1, \Delta j = -1)$$

Để vẽ  $3^2D_{5/2}$  :

$$3^2D_{5/2} - n^2P_{3/2} (n = 4, 5, 6..)(\Delta l = 1, \Delta j = 1)$$

$$3^2D_{5/2} - n^2F_{5/2} (n = 4, 5, 6...)(\Delta l = -1, \Delta j = 0)$$

$$3^2D_{5/2} - n^2F_{7/2} (n = 4, 5, 6...)(\Delta l = -1, \Delta j = -1)$$



**Bài 6.19.** Lớp ứng với  $n = 3$  chứa đầy electron, trong số đó có bao nhiêu electron:

- a) Có cùng  $m_s = 1/2$ ;
- b) Có cùng  $m = 1$ ;
- c) Có cùng  $m = -2$ ;
- d) Có cùng  $m_s = -1/2$  và  $m = 0$ ;
- e) Có cùng  $m_s = 1/2$  và  $l = 2$ .

**Bài giải:**

Ứng với  $n = 3$ , ta có 1 bảng sau:

Lớp (số lượng tử chính n)	Lớp con (số lượng tử l)	Số lượng tử từ m	Số lượng tử hình chiếu spin	Số electron tối đa	
				Trong lớp con	Trong lớp
M(n=3)	s(l=0)	0	$\pm 1/2$	2	18
	p(l=1)	-1	$\pm 1/2$	6	
		0	$\pm 1/2$		
		1	$\pm 1/2$		
	d(l=2)	-2	$\pm 1/2$	10	
		-1	$\pm 1/2$		
		0	$\pm 1/2$		
		1	$\pm 1/2$		
		2	$\pm 1/2$		

Nhìn từ bảng dễ dàng thấy được:

- a) Số electron có cùng  $m_s = 1/2$  là 9 electron;
- b) Số electron có cùng  $m = 1$  là 4 electron;
- c) Số electron có cùng  $m = -2$  là 2 electron;
- d) Số electron có cùng  $m_s = -1/2$  và  $m = 0$  là 3 electron;
- e) Số electron có cùng  $m_s = 1/2$  và  $l = 2$  là 5 electron.