



# CHƯƠNG 9

# VẬT LÝ NGUYÊN TỬ

# Chương 9- Vật lí nguyên tử

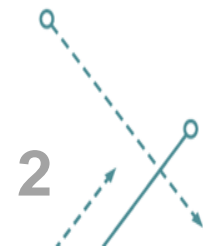
## 1. Nguyên tử Hydro

- Phương trình Schrodinger và nghiệm cho electron trong nguyên tử Hydro
- Các kết luận về nguyên tử H ( năng lượng, trạng thái, xác suất tìm thấy electron)

## 2. Nguyên tử kim loại kiềm ( biểu thức năng lượng, dãy vạch quang phổ)

## 3. Mômen động lượng quỹ đạo và mômen từ quỹ đạo của electron

## 4. Spin của electron



# 1. NGUYÊN TỬ HIĐRÔ

- Chúng ta nghiên cứu chuyển động của electron trong nguyên tử hiđrô trên cơ sở phương trình Schrodinger, phương trình cơ bản của cơ học lượng tử:

$$\Delta\psi + \frac{2m_e}{\hbar^2} (E - U)\psi = 0$$

trong đó  $U$  là thế năng tương tác giữa hạt nhân và electron.

**Bài toán đặt ra là tìm năng lượng của electron và hàm sóng của nó.**

Giải phương trình Schrodinger trong hệ tọa độ cầu, ta thu được một số kết luận.

- Cấu tạo nguyên tử H:
- Thế năng tương tác giữa hạt nhân và electron:

$$U = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

- Phương trình Schrodinger:

$$\Delta\psi(x, y, z) + \frac{2m_e}{\hbar^2} \left( E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \psi(x, y, z) = 0$$

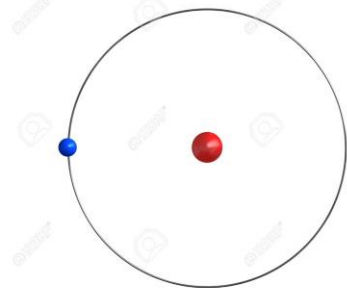
- Do U phụ thuộc r nên bài toán có tính

đối xứng cầu  $\rightarrow$  chuyển Descartes sang tọa độ cầu:

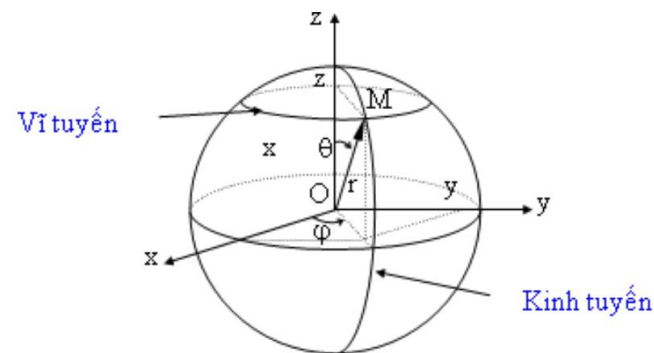
$$x = r \sin \theta \cos \varphi$$

$$y = r \sin \theta \sin \varphi$$

$$z = r \cos \theta$$

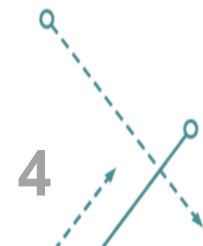


● 1Proton ● 0Neutrons ● 1Electron



$$0 \leq \theta \leq 180^\circ,$$

$$0 \leq \varphi \leq 360^\circ$$



- Toán tử Laplace trong hệ tọa độ cầu:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} + \frac{2m_e}{\hbar^2} \left( E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \psi = 0$$

Phương trình này được giải bằng phương pháp phân li biến số, nghiệm của phương trình có dạng như sau:

Hàm sóng:

$$\psi(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi)$$

(hàm xuyên tâm,

$$R_{nl}(r)$$

hàm cầu)

$$Y_{lm}(\theta, \phi)$$

Với:

$n=1,2,3\dots$  : số lượng tử chính

$l=0,1,2\dots(n-1)$  : số lượng tử quỹ đạo  
(orbital)

$m=0,\pm 1,\pm 2\dots\pm l$  : số lượng tử từ

- Năng lượng: 
$$E_n = -\frac{1}{n^2} \frac{m_e e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} = -\frac{R h}{n^2}$$

R là hằng số Rydberg (Rittbe),  $R = 3,27.10^{15} \text{ s}^{-1}$



## Kết luận cơ bản:

- a. Năng lượng của electron trong nguyên tử hiđrô phụ thuộc vào số nguyên dương  $n$ , gọi là số lượng tử chính:

$$E_n = -\frac{Rh}{n^2}$$

trong đó  $R$  là hằng số Rydberg:  $R = 3,27 \cdot 10^{15} \text{ s}^{-1}$

→ năng lượng biến thiên gián đoạn - năng lượng đã bị lượng tử hóa.

$E_n$  luôn âm và tăng theo  $n$ ,  $n \rightarrow \infty \quad E \rightarrow 0$

- b. Năng lượng ion hóa là năng lượng cần thiết để bứt electron ra khỏi nguyên tử

$$E = E_\infty - E_1 = Rh = 13,5 \text{ eV}$$



### C. Giải thích cấu tạo vạch của quang phổ Hidrô

- Khi không có kích thích bên ngoài - **là trạng thái bền.**
- Khi có kích thích bên ngoài, electron thu thêm năng lượng và nhảy lên mức năng lượng cao hơn gọi là **mức kích thích** ( $t=10^{-8}s$ ), sau đó trở về trạng thái năng lượng  $E_n$  thấp hơn và electron bức xạ năng lượng dưới dạng sóng điện từ, nghĩa là phát ra vạch quang phổ có tần số  $\nu$ :

$$h\nu_{nn'} = E_n - E_{n'} = -\frac{Rh}{n^2} + \frac{Rh}{n'^2}$$

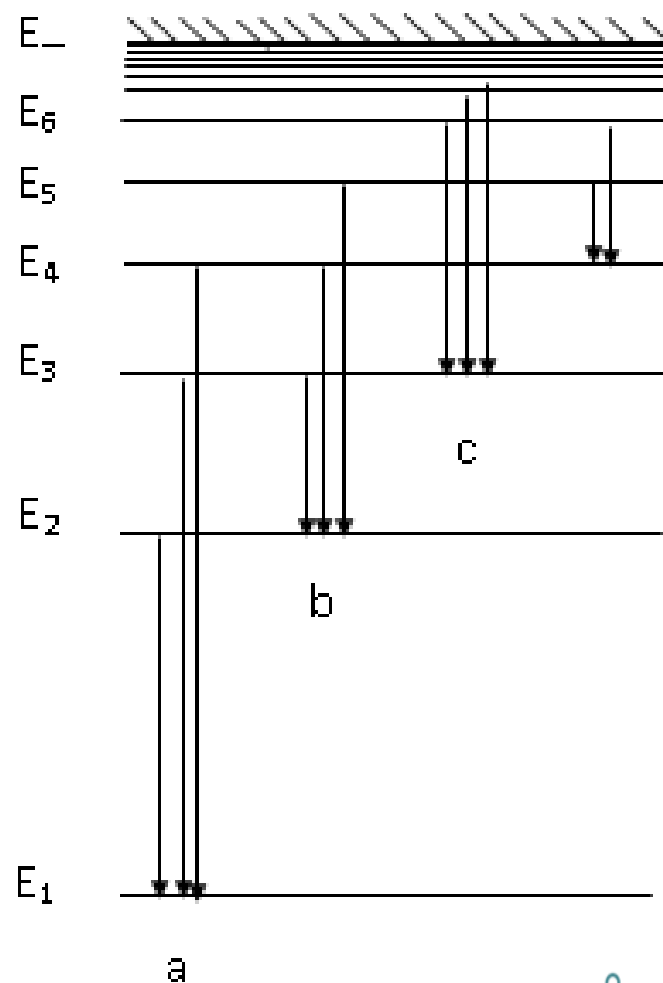
$$\nu_{nn'} = R \left( \frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$



## Sơ đồ phổ hiđrô:

- Dãy Lyman,
- Dãy Balmer,
- Dãy Paschen

- Với  $n' = 1$ ,  $n = 2, 3, 4, \dots$  ta được dãy Lyman ( vùng tử ngoại – a).
- Với  $n' = 2$ ,  $n = 3, 4, \dots$  ta được dãy Balmer (vùng ánh sáng nhìn thấy – b).
- Với  $n' = 3$ ,  $n = 4, 5, \dots$  ta được dãy Paschen nằm trong vùng hồng ngoại....





#### d. *Trạng thái lượng tử của electron*

Trạng thái của electron được mô tả bởi hàm sóng:

$$\Psi_{n\ell m}(r, \theta, \varphi) = R_{n\ell}(r)Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$$

trong đó  $n$ : số lượng tử chính,  $n = 1, 2, \dots$

$\ell$  : số lượng tử quỹ đạo,  $\ell = 0, 1, 2, \dots, (n-1)$

$m$ : số lượng tử từ,  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \ell$

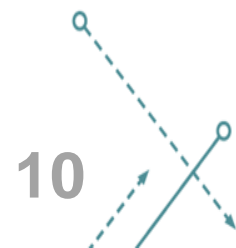
với mỗi giá trị của  $n$  ta có số trạng thái lượng tử chính là độ suy biến của mức năng lượng  $W_n$  và bằng:

$$\sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell + 1) = \frac{[1 + (2n - 1)]n}{2} = n^2$$

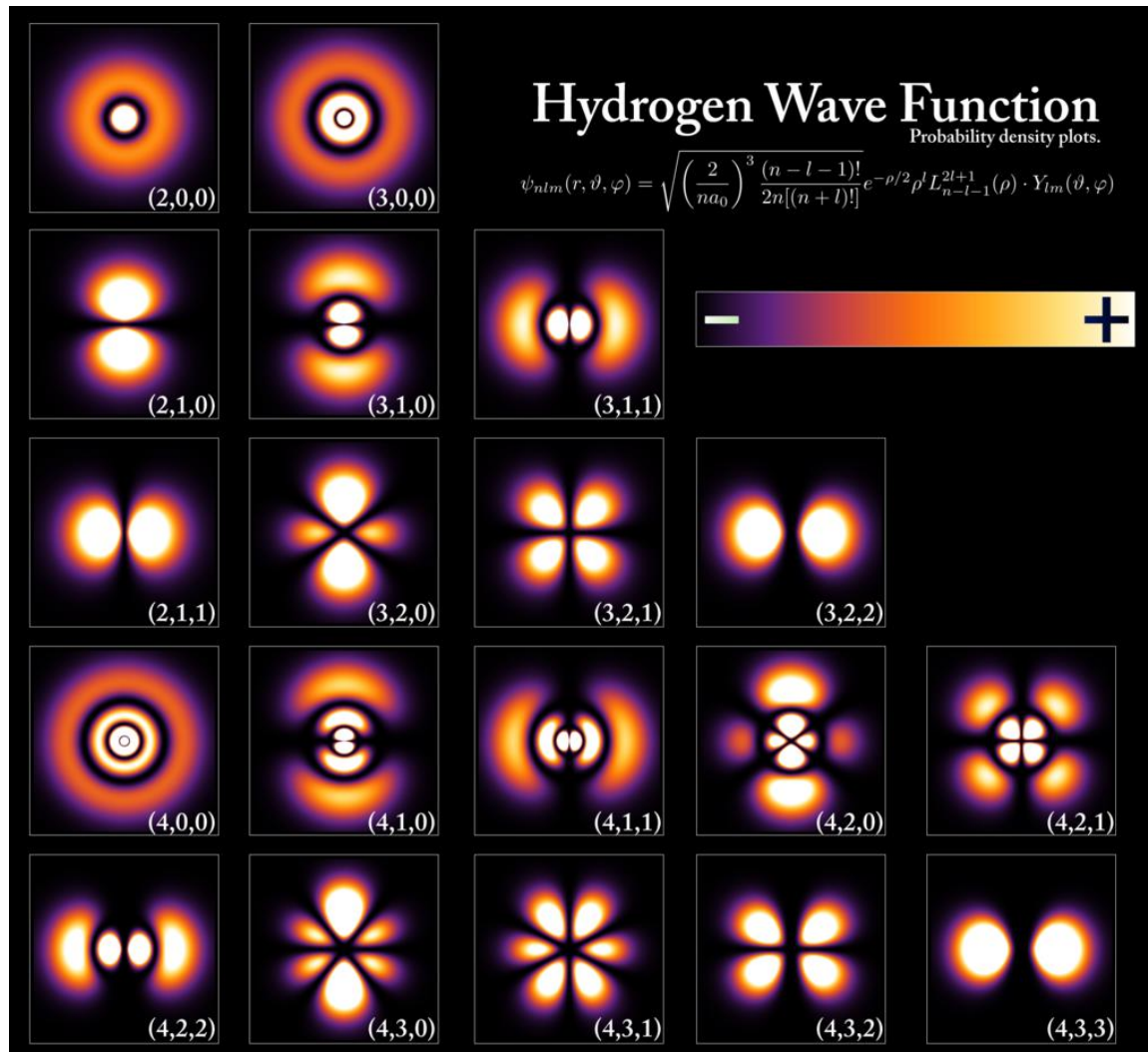
- Trạng thái lượng tử được kí hiệu theo các số lượng tử, cụ thể bằng  $nx$ ,  $n$  là số lượng tử chính, còn  $x$  tùy thuộc vào số lượng tử quỹ đạo.

$\ell$	0	1	2	3
$x$	s	p	d	f

Ví dụ: trạng thái 2s là trạng thái có  $n = 2$  và  $\ell = 0$ .



# Mật độ xác suất của 1 e trong nguyên tử Hydro



- **Xác suất tìm electron trong tọa độ cầu:**

$$|\Psi_{n\ell m}|^2 dV = |R_{n\ell} Y_{\ell m}|^2 r^2 dr \sin \theta d\theta d\varphi$$

trong đó:

$R_{n\ell}^2 r^2 dr$  chỉ phụ thuộc  $r$ , biểu diễn xác suất tìm electron tại một điểm cách hạt nhân một khoảng  $r$ .

$|Y_{\ell m}|^2 \sin \theta d\theta d\varphi$  biểu diễn xác suất tìm electron theo các góc  $(\theta, \varphi)$ .

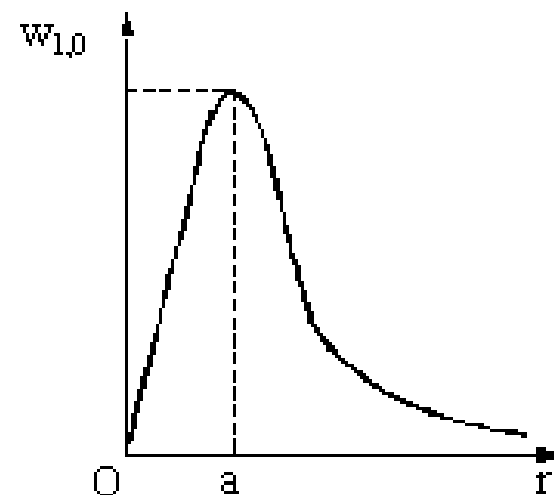
Ta xét trạng thái cơ bản ( $n = 1$ ):

$$n = 1, \ell = 0$$

$$w_{1,0} = R_{1,0}^2 r^2 = 4a^{-3} e^{-2r/a} r^2$$

Vậy xác suất cực đại ứng với bán kính  $r = a = 0,53 \cdot 10^{-10} \text{ m}$

Như vậy - electron trong nguyên tử *không chuyển động theo một quỹ đạo nhất định mà bao quanh hạt nhân như “đám mây”, đám mây này dày đặc nhất ở khoảng cách ứng với xác suất cực đại.*



Sự phụ thuộc  $r$  của xác suất tìm hạt ở trạng thái cơ bản

# Bài tập ví dụ

## Ví dụ 1:

Xác định bước sóng của vạch quang phổ thứ hai, thứ ba trong dãy Paschen trong quang phổ hiđrô.

Dãy Paschen  $n = 3$ . Bước sóng của vạch thứ hai trong dãy Paschen:

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{c}{R \left( \frac{1}{3^2} - \frac{1}{5^2} \right)} = 1,3 \cdot 10^{-6} \text{ m}$$

Bước sóng của vạch thứ ba trong dãy Paschen:

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{c}{R \left( \frac{1}{3^2} - \frac{1}{6^2} \right)} = 1,1 \cdot 10^{-6} \text{ m}$$



## Ví dụ 2:

Xác định các giá trị khả dĩ của mômen động lượng orbital của electron trong nguyên tử hydro bị kích thích, biết năng lượng kích thích  $E = 12\text{eV}$ . Cho  $R = 3,27 \cdot 10^{15} \text{ Hz}$ ,  $c = 3 \cdot 10^8 \text{ m/s}$ .

$$L = \sqrt{\ell(\ell + 1)} \hbar$$

$L \leftarrow$  Tìm  $\ell = ? \leftarrow$  tìm  $n = ?$

Sau khi bị kích thích electron hóa trị chuyển từ  $W_1$  lên mức NL cao hơn

$$W_n: E = W_n - W_1$$

$$W_n = \frac{-Rh}{n^2}$$

$\rightarrow n=3 \rightarrow \ell=0,1,2 \rightarrow$  Có 2 giá trị của  $L...$



## 2. NGUYÊN TỬ KIM LOẠI KIỀM

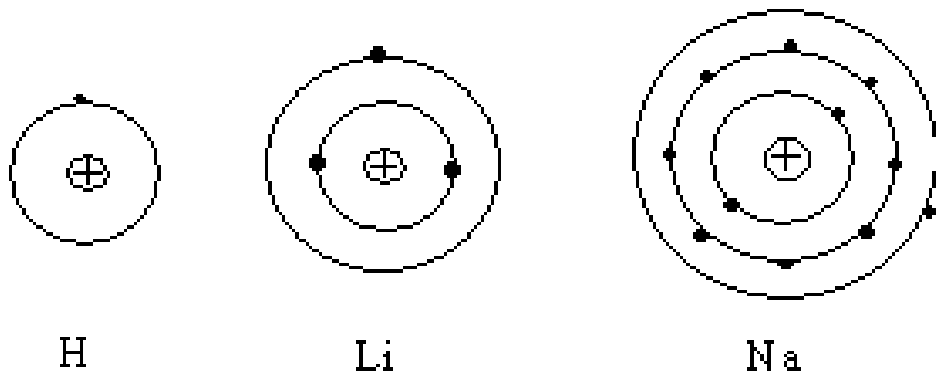
### 2. 1. Năng lượng của electron hóa trị trong nguyên tử kim loại kiềm

Tính chất hóa học của kim loại kiềm về cơ bản giống của nguyên tử H, nhưng năng lượng của electron hóa trị phụ thuộc thêm cả vào số lượng tử  $\ell$

$\Delta_\ell$ : số hiệu chỉnh phụ thuộc vào số lượng tử Orbital

$$E_{n\ell} = - \frac{R_h}{(n + \Delta_\ell)^2}$$

Mẫu vỏ nguyên tử của các kim loại kiềm



Bảng 1

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

Giá trị của số hiệu chính cho một số nguyên tố kim loại kiềm ở các trạng thái khác nhau

- Trong vật lí nguyên tử trạng thái lượng tử được kí hiệu bằng  $n\ell$ , còn mức năng lượng là  $n\ell$ ,  $n$  là số lượng tử chính, còn  $\ell$  và  $\ell$  tùy thuộc số lượng tử orbital:

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

Ví dụ: mức 3D là mức năng lượng ứng với  $n = 3$ ,  $\ell=2$

## 2. 2. Quang phổ của nguyên tử kim loại kiềm

Sự chuyển mức năng lượng tuân theo qui tắc:  $\Delta l = \pm 1$

**Ví dụ**, nguyên tử Li gồm 3 electron: 2 electron ở gần hạt nhân chiếm mức năng lượng 1S, còn electron hóa trị khi chưa bị kích thích chiếm mức năng lượng 2S ( $n = 2, l = 0$ )

Theo qui tắc lựa chọn, electron hoá trị ở mức cao chuyển về mức:

- 2S ( $l = 0$ ) thì mức cao hơn chỉ có thể là mức nP ( $l = 1, n = 2, 3, 4 \dots$ )
- 2P ( $l = 1$ ) thì mức cao hơn chỉ có thể là mức nS ( $l = 0, n = 3, 4 \dots$ )

Hoặc nD ( $l=2, n=3,4\dots$ )

Theo qui tắc lựa chọn e ở mức cao chuyển về mức:  $\Delta l = \pm 1$

\*  $2S (l = 0)$ ,

chỉ có thể là mức  $nP (l = 1, n = 2, 3, 4)$

\*  $2P (l = 1)$ ,

chỉ có thể là mức  $nS (l = 0, n = 3, 4...)$

hay mức  $nD (l = 2, n = 3, 4...)$

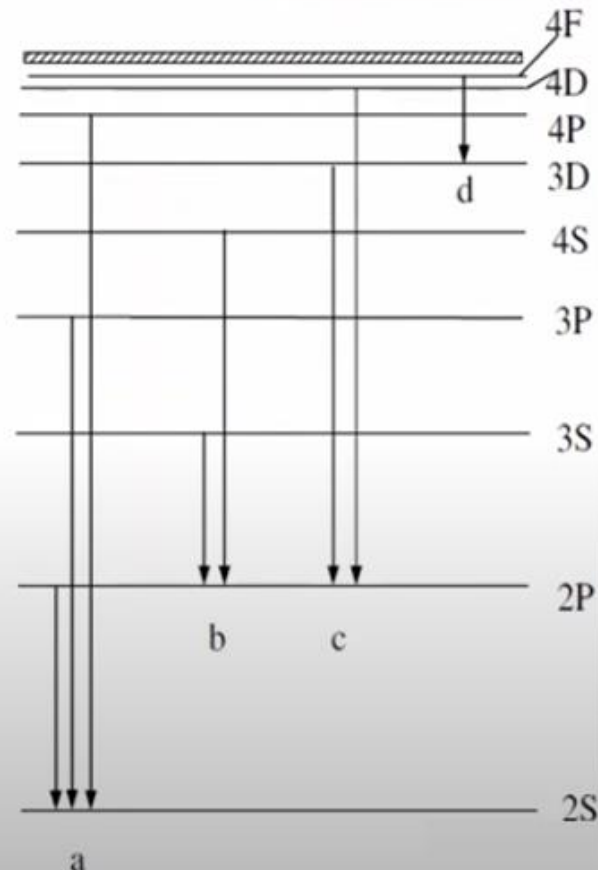
Tần số của bức xạ điện từ phát ra :

$h\nu = nP - 2S$  : các vạch  $\Rightarrow$  dãy chính(a)

$h\nu = nS - 2P$  : các vạch  $\Rightarrow$  dãy phụ II (b)

$h\nu = nD - 2P$ : các vạch  $\Rightarrow$  dãy phụ I (c)

$h\nu = nF - 3D$ : các vạch  $\Rightarrow$  dãy cơ bản (d)



## BÀI TẬP CHO KIM LOẠI KIỀM:

### Bài tập 1.

Tìm số bổ chính Rydberg đối với số hạng 3P của nguyên tử Na, biết rằng thế kích thích đối với trạng thái thứ nhất bằng 2,1eV và năng lượng liên kết của electron hoá trị ở trạng thái 3S bằng 5,14eV. Cho hằng số Rydberg  $R = 3,29.10^{15}s^{-1}$ ,  $h = 6,625.10^{-34}J.s$ ,  $c = 3.10^8 m/s$ .

$$E_{nl} = -\frac{Rh}{(n + \Delta_l)^2}$$

Natri có 11 electron

Thế năng kích thích thứ 1  $\rightarrow W_t$  kích thích e hóa trị chuyển từ mức 3S lên 3P:

$$W_t = W_{3P} - W_{3S}$$

$$W_{e \text{ hóa trị } 3S} = W_{\infty} - W_{3S} \rightarrow W_{3S}$$

$$\rightarrow W_{3S} \rightarrow \Delta_p$$



## Bài tập 2.

Bước sóng của vạch cộng hưởng của nguyên tử Kali ứng với sự chuyển dời  $4P \rightarrow 4S$  bằng  $7665\text{Å}$ . Bước sóng giới hạn của dãy chính bằng  $2858\text{Å}$ .

Tìm số bổ chính Rydberg  $\Delta_s$  và  $\Delta_p$  đối với kali. Cho  $R = 3,27 \cdot 10^{15} \text{ Hz}$ ,  $c = 3 \cdot 10^8 \text{ m/s}$ ,  $1\text{Å} = 10^{-10}\text{m}$ .

Kali có 19 e  $\rightarrow 1s2s2p3s3p4s3d4p$  ( do có sự chồng chất các mức năng lượng khi lên mức cao)  $\rightarrow$  e hóa trị của Kali nằm ở 4S.

$$\lambda_{\max} = 7665\text{Å} \leftrightarrow W_{\min} = \frac{hc}{\lambda_{\max}} = W_{4P} - W_{4S} \text{ (do từ 3D về 4S thì không phát } \lambda \text{)}$$

$$\lambda_{\min} = 2858\text{Å} \leftrightarrow W_{\max} = \frac{hc}{\lambda_{\min}} = W_{\infty} - W_{4S} \rightarrow W_{4S} \rightarrow \Delta_s$$

$$\rightarrow W_{4P} \rightarrow \Delta_p$$

## 3. MÔMEN ĐỘNG LƯỢNG VÀ MÔMEN TỪ CỦA ELECTRÔN

### 3. 1. Mômen động lượng orbital

- Electrôn chuyển động quanh hạt nhân nên có mômen động lượng
- Electrôn chuyển động không theo quỹ đạo xác định nên vector  $L$  không có hướng

Tuy nhiên hình chiếu của nó lên một phương  $z$  bất kì luôn được xác định:

$$L = \sqrt{\ell(\ell + 1)} \hbar$$

$$\ell = 0, 1, 2, \dots, (n-1)$$

$$L_z = m\hbar$$

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, \pm \ell$$

Mỗi trị số của  $\ell$  có  $(2\ell + 1)$  trị số của  $m$ .





### 3. 2. Mômen từ

- Electrôn quay quanh hạt nhân tạo thành một dòng điện  $i$ , có chiều ngược với chiều chuyển động của electrôn.
- Dòng điện  $i \rightarrow$  Moment từ  $\mu = iS = ef\pi r^2$

Moment động lượng  $L = m_e v r = m_e \omega r^2 = m_e 2\pi f r^2$

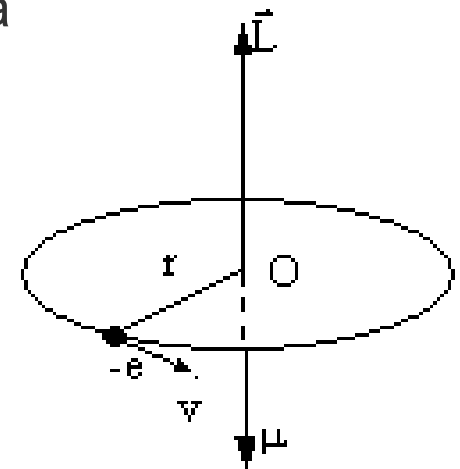
$$\rightarrow \mu = -\frac{e}{2m_e} L$$

- Chiếu moment từ lên phương z bất kì:

$$\mu_z = -\frac{e}{2m_e} L_z \rightarrow \mu_z = -m\mu_B \rightarrow \mu_z \text{ bị lượng tử hóa.}$$

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

- Khi electrôn chuyển trạng thái thì  $m$  phải tuân theo qui tắc lựa chọn:  $\Delta m = 0, \pm 1$

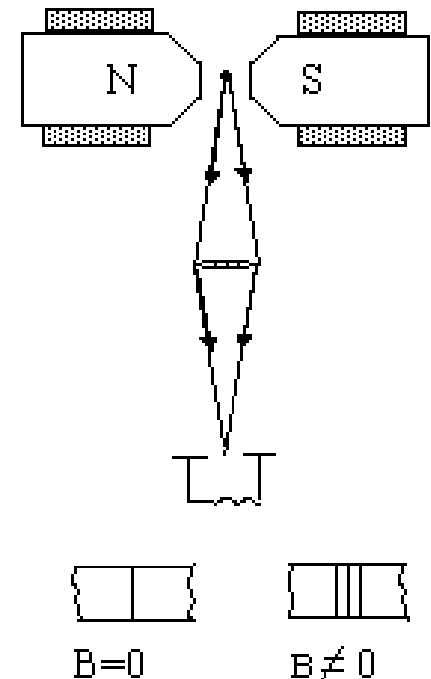


Mô hình nguyên tử cổ điển

### 3. 3. Hiện tượng Zeeman

Thí nghiệm: Đặt nguồn khí hiđrô phát sáng vào giữa hai cực của nam châm điện (hình). Nếu quan sát các bức xạ phát ra theo phương vuông góc với vectơ từ trường  $B$  thì thấy mỗi vạch quang phổ của nguyên tử hiđrô bị tách thành ba vạch sát nhau.

***Hiện tượng tách vạch quang phổ khi nguyên tử phát sáng đặt trong từ trường được gọi là hiện tượng Zeeman.***



## Giải thích hiện tượng Zeeman:

- Vì electron có mômen từ nên khi nguyên tử hiđrô được đặt trong từ trường B, mômen từ có khuynh hướng sắp xếp theo phương song song với do đó electron có thêm năng lượng phụ: (z là phương của vecto từ trường B)

$$\Delta E = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} \Rightarrow \Delta E = -\mu_z B = m \mu_B B \quad (1)$$

$$E' = E + m \mu_B B \quad (2)$$

$$\nu' = \frac{E'_2 - E'_1}{h} = \frac{E_2 - E_1}{h} + \frac{(m_2 - m_1) \mu_B B}{h} \quad (3)$$

$$\frac{E_2 - E_1}{h} = \nu \quad (4)$$

$$\Rightarrow \nu' = \nu + \frac{(m_2 - m_1) \mu_B B}{h}; \Delta m = 0, \pm 1 \quad (5)$$

$$\Rightarrow \nu' = \begin{cases} \nu - \frac{\mu_B B}{h} \\ \nu \\ \nu + \frac{\mu_B B}{h} \end{cases}$$



**Ví dụ:**

$$l = 1, m = 0, \pm 1 \Rightarrow L = \sqrt{2}\hbar$$

Hình chiếu  $\vec{L}$  lên  $z$ :  $L_z^0 = 0 \quad L_z^1 = \hbar \quad L_z^{-1} = -\hbar$

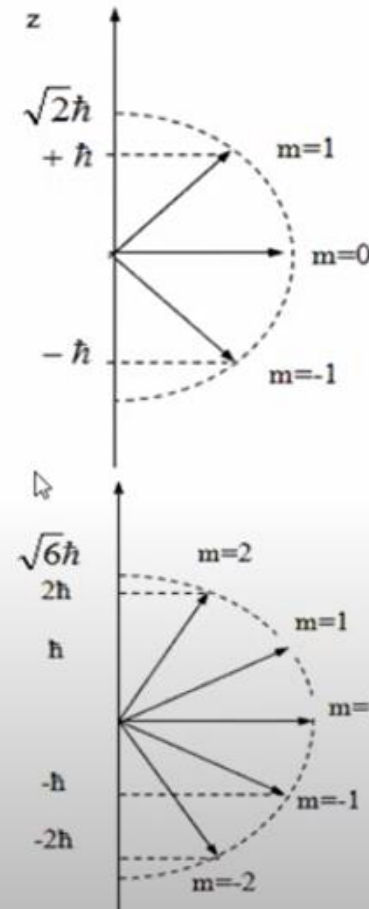
$\Rightarrow$  3 khả năng định hướng của  $\vec{L}$

$$l = 2, m = 0, \pm 1, \pm 2 \Rightarrow L = \sqrt{6}\hbar$$

Hình chiếu  $\vec{L}$  lên  $z$ :  $L_z^0 = 0 \quad L_z^1 = \hbar \quad L_z^{-1} = -\hbar$

$$L_z^2 = 2\hbar \quad L_z^{-2} = -2\hbar$$

$\Rightarrow$  5 khả năng định hướng của  $\vec{L}$



## 4. SPIN CỦA ELECTRÔN

### 1. Sự tách vạch quang phổ kim loại kiềm:

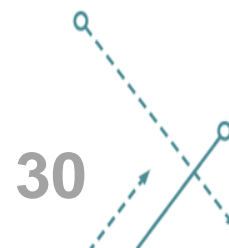
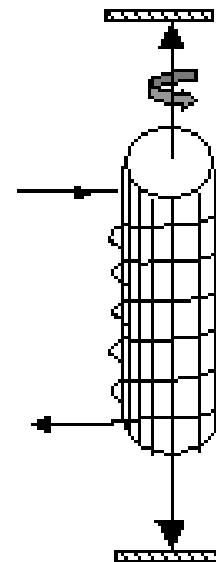
Với máy quang phổ có năng suất phân giải cao  $\rightarrow$  vạch quang phổ không phải là vạch đơn mà là vạch gồm rất nhiều vạch nhỏ nét hợp thành.

Ví dụ vạch vàng của nguyên tử Na được cấu tạo bởi hai vạch sát nhau có bước sóng **5890 Å và 5896 Å**. Vạch như vậy được gọi là vạch kép đôi.

$\rightarrow$  Sự tách vạch như vậy chứng tỏ rằng mức năng lượng của nguyên tử kim loại kiềm còn phụ thuộc vào một đại lượng nào đó nữa đã làm thay đổi chút ít năng lượng của mức. Đại lượng này có độ lớn rất nhỏ.

## 4.2. Thí nghiệm Einstein và de Haas

- Treo một thanh sắt từ vào một sợi dây thạch anh. Thanh sắt sẽ được từ hóa nhờ dòng điện chạy qua cuộn dây bao quanh thanh (hình).
- Khi  $I=0$ , các vectơ mômen từ của các nguyên tử sắt từ đã được định hướng một cách ngẫu nhiên  $\rightarrow$  tác dụng từ của chúng bị triệt tiêu ở tất cả mọi điểm bên ngoài thanh sắt.
- Khi  $I \neq 0$ , các vectơ mômen từ nguyên tử sẽ sắp xếp thẳng hàng theo hướng của từ trường ngoài  $\rightarrow$  các mômen động lượng nguyên tử cũng xếp thẳng hàng nhưng theo hướng ngược lại.
- Vì thanh sắt được cô lập với bên ngoài (hệ kín) nên mômen động lượng được bảo toàn và cả thanh sắt phải quay đi.



Nếu  $i$  thay đổi  $\rightarrow \mu$  thay đổi  $\rightarrow L$  thay đổi. Dây treo bị xoắn lại. Đo góc xoắn này ta có thể tìm được  $L$  và kiểm nghiệm  $\mu/L$ .

**Nếu thừa nhận sự từ hóa chất sắt từ không phải do chuyển động quỹ đạo của electron mà do spin electron** thì người ta nhận được tỉ số  $\mu / L$  phải bằng  $-e/m_e$ , phù hợp với kết quả thực nghiệm. ( không phải là  $-e/2m_e$ )

**Kết luận:** ngoài chuyển động quanh hạt nhân, electron còn tham gia chuyển động riêng liên quan tới sự vận động nội tại của electron

## Kết luận:

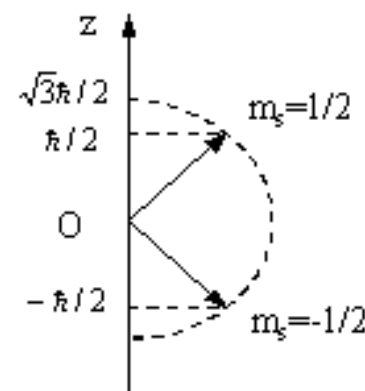
- Ngoài chuyển động quay quanh hạt nhân electron còn tham gia thêm chuyển động do vận động nội tại, được đặc trưng bởi spin, kí hiệu  $\vec{S}$
- Độ lớn của momen cơ riêng  $\vec{S}$**  và hình chiếu của nó lên phương z được xác định theo các hệ thức:

$$S = \sqrt{s(s+1)} \hbar = \frac{\sqrt{3}}{2} \hbar \quad S_z = m_s \hbar = \pm \frac{\hbar}{2}$$

trong đó  $s$  là số lượng tử spin ( $s=1/2$ ),

$m_s$  là số lượng tử hình chiếu spin

Khác với số lượng tử từ,  $m_s$  chỉ lấy hai giá trị  $\pm 1/2$

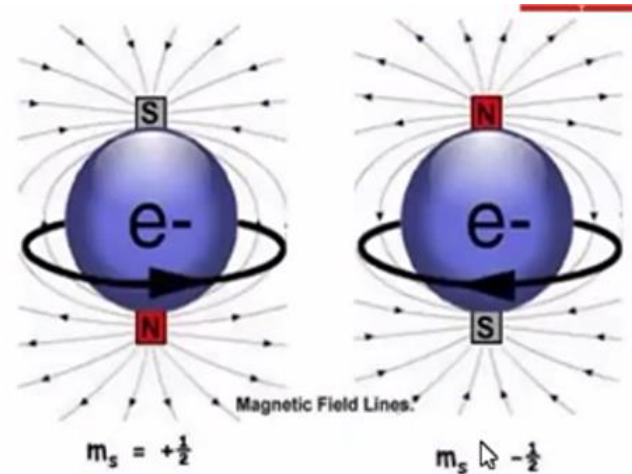
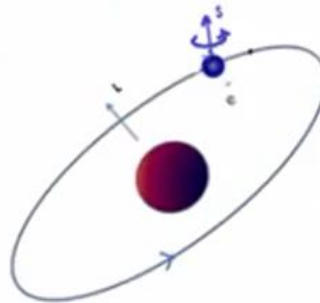
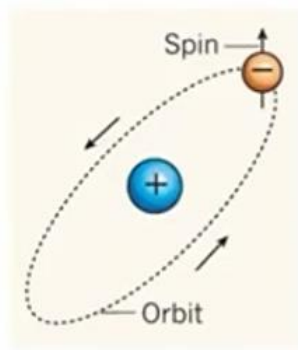


- ứng với mômen cơ riêng  $\vec{S}$ , spin electron có mômen từ riêng  $\vec{\mu}_s$ :

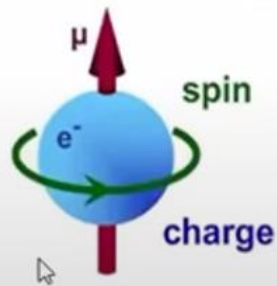
$$\vec{\mu}_s = -\frac{e}{m_e} \vec{S}; \quad \mu_{sz} = -\frac{e}{m_e} S_z = \mp \frac{e\hbar}{2m_e} = \mp \mu_B$$







Kí hiệu:  $\vec{S}$



Spin



Là mômen cơ riêng, đặc trưng cho sự vận động nội tại của  $e^-$   
(chuyển động riêng của  $e^-$ )

## 4. 2. Trạng thái và năng lượng của electron trong nguyên tử

- Do có spin nên mômen động lượng toàn phần của electron:

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

$$J = \sqrt{j(j+1)}\hbar$$

trong đó ***j* là số lượng tử toàn phần** được xác định bởi:  $j = \left| \ell \pm \frac{1}{2} \right|$

Tức là mỗi mức năng lượng xác định tách thành hai mức tương ứng với mỗi giá trị  $j$ .

**Trạng thái lượng tử của electron phụ thuộc vào 4 số lượng tử:  $n, l, m, m_s$  hay  $n, l, m, j$**

- Nếu kể đến spin thì do  $m_s$  có 2 giá trị :  $\pm 1/2$  nên ứng với số lượng tử chính  $n$  , có  $2n^2$  trạng thái lượng tử khác nhau:

$$2 \sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell + 1) = 2n^2$$



Trạng thái của electron được kí hiệu bằng:  $n\ell_j$ , mức năng lượng của electron kí hiệu bằng:  $n^2X_j$

$n$  là số lượng tử chính,  $X = S, P, D, F, \dots$  tùy thuộc  $\ell = 0, 1, 2, 3, \dots$  Chỉ số 2 ở phía trên bên trái chữ  $X$  chỉ cấu tạo bội kép của mức năng lượng.

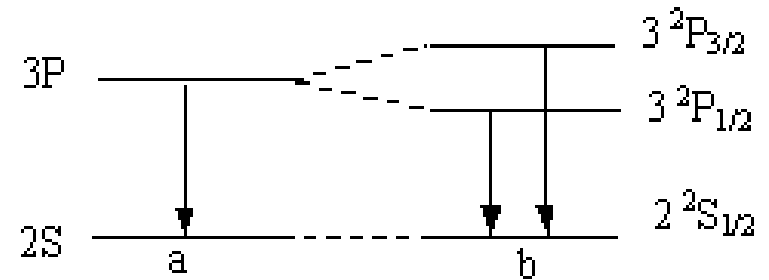
$n$	$\ell$	$j$	Trạng thái của electron hóa trị	Mức năng lượng
1	0	1/2	$1s_{1/2}$	$1^2S_{1/2}$
2	0	1/2	$2s_{1/2}$	$2^2S_{1/2}$
	1	1/2	$2p_{1/2}$	$2^2P_{1/2}$
		3/2	$2p_{3/2}$	$2^2P_{3/2}$
3	0	1/2	$3s_{1/2}$	$3^2S_{1/2}$
	1	1/2	$3p_{1/2}$	$3^2P_{1/2}$
		3/2	$3p_{3/2}$	$3^2P_{3/2}$
	2	3/2	$3d_{3/2}$	$3^2D_{3/2}$
		5/2	$3d_{5/2}$	$3^2D_{5/2}$

**Bảng 3** nêu các trạng thái lượng tử và mức năng lượng khả dĩ của electron hóa trị trong nguyên tử hiđrô và kim loại kiềm.

### 4. 3. Cấu tạo bội của vạch quang phổ

Hình:

- Vạch quang phổ khi chưa xét đến spin
- Vạch kép khi có xét đến spin.



Khi chuyển từ mức năng lượng cao sang mức năng lượng thấp, các số lượng tử phải tuân theo qui tắc lựa chọn:

$$\Delta \ell = \pm 1; \quad \Delta j = 0, \pm 1$$

## Giải thích bảng tuần hoàn Mendeleev

Sự phân bố các electron trong bảng tuần hoàn dựa trên hai nguyên lý: nguyên lý cực tiểu năng lượng và nguyên lý loại trừ Pauli:

- **Nguyên lý cực tiểu năng lượng:** Mọi hệ vật lí đều có xu hướng chiếm trạng thái có năng lượng cực tiểu. Trạng thái đó là trạng thái bền.
- **Nguyên lý loại trừ Pauli:** Mỗi trạng thái lượng tử xác định bởi 4 số lượng tử  $n$ ,  $\ell$ ,  $m$ ,  $m_s$  chỉ có tối đa một electron.
- **Cấu hình electron** là sự phân bố các electron trong nguyên tử theo các trạng thái với các số lượng tử  $n$ ,  $\ell$  khác nhau.



## Cấu hình electron trong nguyên tử

1. Tập hợp các electron có cùng số lượng tử chính  $n$  tạo thành lớp của nguyên tử. Ví dụ : Lớp K ứng với  $n = 1$ , lớp L ứng với  $n = 2$ ...
2. Số electron tối đa có trong một lớp bằng  $2n^2$  (theo nguyên lí Pauli).
3. Năng lượng lớp K nhỏ hơn lớp L. Các electron sẽ lấp đầy lớp K trước rồi mới đến lớp L.
4. Tập hợp các electron có cùng giá trị  $\ell$  tạo thành một lớp con. Trong mỗi lớp con có số electron tối đa  $2(2\ell + 1)$

Ví dụ: Lớp con S ( $\ell = 0$ ) có tối đa  $2(0+1) = 2e^-$

Lớp con ( $\ell = 1$ ) có tối đa  $2(2+1) = 6e^-$

Ta viết được cấu hình electron trong nguyên tử.

Ví dụ cấu hình electron của nguyên tử C:  $1s^2 2s^2 2p^2$

## BÀI TẬP CHO KIM LOẠI KIỀM:

### BT1.

Tìm số bổ chính Rydberg đối với số hạng 3P của nguyên tử Na, biết rằng thế kích thích đối với trạng thái thứ nhất bằng 2,1eV và năng lượng liên kết của electron hoá trị ở trạng thái 3S bằng 5,14eV. Cho hằng số Rydberg  $R = 3,29.10^{15} \text{s}^{-1}$ ,  $h = 6,625.10^{-34} \text{J.s}$ ,  $c = 3.10^8 \text{ m/s}$ .

$$E_{n\ell} = -\frac{Rh}{(n + \Delta_{\ell})^2}$$

Natri có 11 electron

Thế năng kích thích thứ 1  $\rightarrow W_t$  kích thích e hóa trị chuyển từ mức 3S lên 3P:

$$W_t = W_{3P} - W_{3S}$$

$$W_{e \text{ hóa trị } 3S} = W_{\infty} - W_{3S} \rightarrow W_{3S}$$

$$\rightarrow W_{3S} \rightarrow \Delta_p$$

## BT2.

Bước sóng của vạch cộng hưởng của nguyên tử Kali ứng với sự chuyển dời  $4P \rightarrow 4S$  bằng  $7665\text{\AA}$ . Bước sóng giới hạn của dãy chính bằng  $2858\text{\AA}$ .

Tìm số bổ chính Rydberg  $\Delta_s$  và  $\Delta_p$  đối với kali. Cho  $R = 3,27 \cdot 10^{15} \text{ Hz}$ ,  $c = 3 \cdot 10^8 \text{ m/s}$ ,  $1\text{\AA} = 10^{-10}\text{m}$ .

Kali có 19 e  $\rightarrow 1s2s2p3s3p4s3d4p$  ( do có sự chồng chất các mức năng lượng khi lên mức cao)  $\rightarrow$  e hóa trị của Kali nằm ở 4S.

$$\lambda_{\max} = 7665\text{\AA} \leftrightarrow W_{\min} = \frac{hc}{\lambda_{\max}} = W_{4P} - W_{4S} \text{ (do từ 3D về 4S thì không phát } \lambda \text{)}$$

$$\lambda_{\min} = 2858\text{\AA} \leftrightarrow W_{\max} = \frac{hc}{\lambda_{\min}} = W_{\infty} - W_{4S} \rightarrow W_{4S} \rightarrow \Delta_s$$

$$\rightarrow W_{4P} \rightarrow \Delta_p$$



### BT3.

Gọi  $\alpha$  là góc giữa phương của từ trường ngoài và mômen động lượng orbital  $\vec{L}$  của electron trong nguyên tử. Tính góc  $\alpha$  nhỏ nhất, cho biết electron trong nguyên tử ở trạng thái d.

$$L = \sqrt{\ell(\ell + 1)} \hbar$$

$$L_z = m\hbar$$

e ở trạng thái d  $\rightarrow l=2 \rightarrow m= 0, \pm 1, \pm 2 \rightarrow 5$  giá trị của  $L_z \rightarrow$  có 5 hướng  $\vec{L}$

$L_1 = 0 \rightarrow$  vecto  $L_1$  vuông góc với B ( trục chiều z)

$L_2 = +1$  hít  $\rightarrow$  vecto  $L_2$  lệch một góc dương so với B nhưng cùng độ lớn vecto  $L_1$

$L_{3,4,5} =$  tương tự.

hình  $\rightarrow \alpha_{\min}$  ứng với  $L_{4,5} (m=\pm 2)$  và B :  $\cos \alpha_{\min} = \frac{L_z}{L} = \frac{\text{hít} \cdot m_{\max}}{\text{hít} \sqrt{l(l+1)}}$

