

Chương 1: Dao động - sóng.

Chương 2: Giao thoa ánh sáng.

Chương 3: Nhiễu xạ ánh sáng.

Chương 4: Tán sắc, hấp thụ và tán xạ ánh sáng.

Chương 5: Phân cực ánh sáng.

Chương 6: Thuyết tương đối hẹp Einstein.

Chương 7: Quang học lượng tử

Chương 8: Cơ học lượng tử.

Chương 9: Vật lí nguyên tử. →

Chương 10: Vật lý chất rắn và bán dẫn.



- 1. Nguyên tử Hydro**
- 2. Nguyên tử kim loại kiềm**
- 3. Hiệu ứng Zeeman**
- 4. Spin của electron**
- 5. Khái niệm về hệ thống tuần hoàn
Mendeleev**

1. Nguyên tử Hydro

1. Chuyển động của electron trong nguyên tử hidrô

Cấu tạo nguyên tử H

Thế năng tương tác:

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

Pt Schrodinger:

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

Hàm sóng trong tọa độ cầu sẽ là: $\psi = \psi(r, \theta, \varphi)$

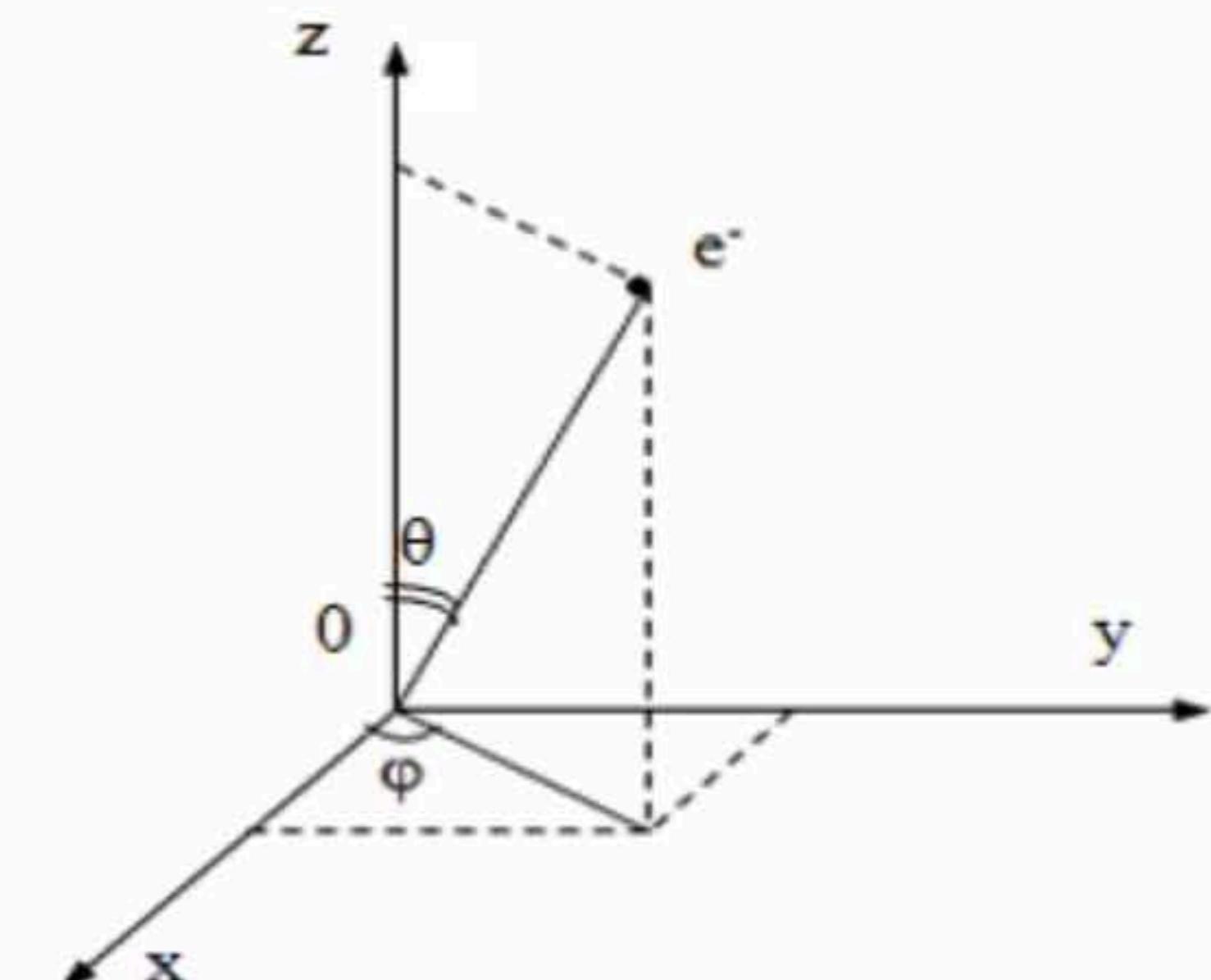
Hệ toạ độ đề các \rightarrow hệ toạ độ cầu: $x = r \sin \theta \cos \varphi,$

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

$$z = r \cos \theta$$

Toán tử Laplace trong toạ độ cầu:

$$\Delta \psi = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2}$$



1. Nguyên tử Hydro

Pt Schrodinger trong toạ độ cầu:

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

Phương trình này được giải bằng phương pháp phân li biến số:

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r).Y(\theta, \phi)$$

Giải phương trình Schrodinger → năng lượng và hàm sóng:

- Năng lượng của e:

$$E_n = -\frac{1}{n^2} \frac{m_e e^4}{2(4\pi\varepsilon_0)^2 \hbar^2} \rightarrow E_n = -\frac{R\hbar}{n^2}$$

$R = 3,27 \cdot 10^{15} \text{ s}^{-1}$: hằng số Rittbe; $n=1,2,3,\dots$: số lượng tử chính.

- Hàm sóng của e : $\psi = \psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r)Y_{l,m}(\theta, \phi)$

trong đó

$n = 1, 2, 3\dots$: số lượng tử chính

$l = 0, 1, 2, \dots, n-1$: số lượng tử Orbital

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

1. Nguyên tử Hydro



2. Các kết luận

- a. *Năng lượng của electron trong nguyên tử hidrô*
- b. *Năng lượng ion hoá của nguyên tử Hidrô*
- c. *Giải thích cấu tạo vạch của quang phổ Hidrô*
- d. *Trạng thái lượng tử của electron*
- e. *Xác suất tìm electron trong thể tích dV ở một trạng thái nào đó*

1. Nguyên tử Hydro

a. **Năng lượng của e trong nguyên tử H:**

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

- * Năng lượng chỉ phụ thuộc vào số nguyên n .
- * Ứng với mỗi số nguyên n có một mức năng lượng → năng lượng **biến thiên gián đoạn**, ta nói năng lượng bị lượng tử hóa.
- * E_n luôn âm, khi $n \rightarrow \infty$ thì $E \rightarrow 0$. Năng lượng tăng theo n
- * E_1 ứng với $n = 1$ được gọi là mức năng lượng cơ bản. Các mức năng lượng lần lượt tăng theo thứ tự $E_2 < E_3 < E_4 \dots$

Trong Vật lí nguyên tử kí hiệu: E_1 : mức K; E_2 : mức L; E_3 : mức M...

1. Nguyên tử Hydro



b. Năng lượng ion hóa của nguyên tử Hidrô

Đó là năng lượng cần thiết để electron bứt ra khỏi nguyên tử, có nghĩa là electron sẽ chuyển từ mức năng lượng cơ bản E_1 , sang mức năng lượng E_∞ :

$$E = E_\infty - E_1 = 0 \rightarrow (-Rh) = 13,5eV$$

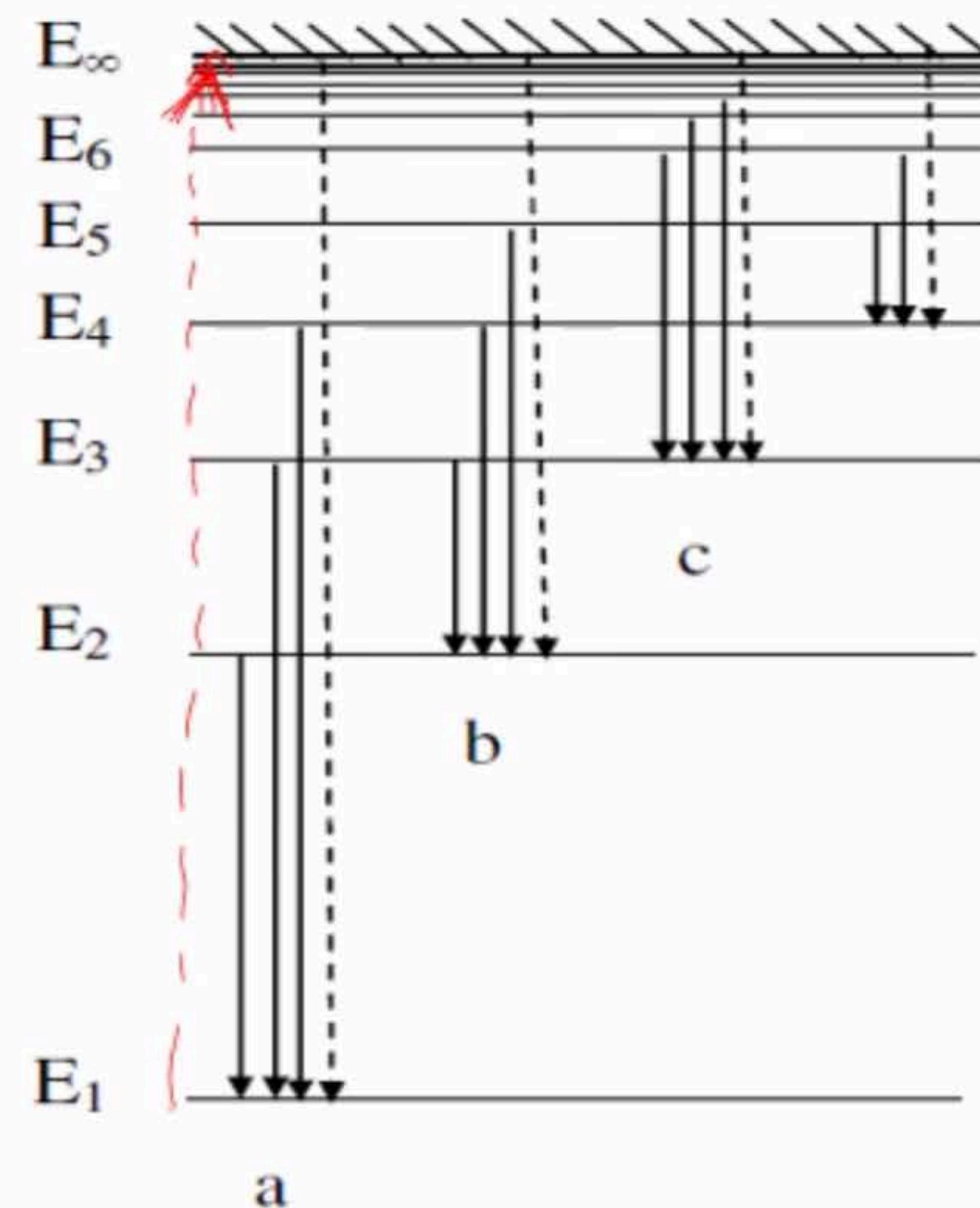
1. Nguyên tử Hydro



c. Giải thích cấu tạo vạch của quang phổ H

Trong quá trình chuyển mức từ E_n (cao) $\rightarrow E_{n'}$ (thấp) e- bức xạ năng lượng dưới dạng sóng điện từ, nghĩa là phát ra photon năng lượng :

$$h\nu_{mn} = E_n - E_{n'} = -\frac{Rh}{n^2} + \frac{Rh}{n'^2} \quad \Rightarrow \quad \nu_{mn'} = R \left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$



$n'=1, n=2,3,4\dots$ các vạch thuộc dãy Lyman (vùng tử ngoại-a).

$n'=2, n=3,4,5\dots$ các vạch thuộc dãy Balmer (vùng nhìn thấy-b).

$n'=3, n=4,5,6\dots$ các vạch thuộc dãy Paschen (vùng hồng ngoại-c),

Tiếp theo là dãy brackett, pfund (vùng hồng ngoại)

1. Nguyên tử Hydro



d.Trạng thái lượng tử của electron :

Được mô tả bởi : $\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi)$

Trong đó: **n: Số lượng tử chính, $n = 1, 2\dots$**

l : số lượng tử Orbital, $l = 0, 1, 2\dots(n-1)$.

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

→ Hàm sóng phụ thuộc vào các số lượng tử n, l, m . Ứng với mỗi giá trị của n, l có n giá trị khác nhau và ứng với mỗi giá trị của l có $(2l+1)$ giá trị khác nhau của m , do đó với mỗi giá trị của n có số trạng thái lượng tử:

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

→ Với mỗi mức năng lượng E_n có n^2 trạng thái lượng tử khác nhau,

1. Nguyên tử Hydro



Ví dụ

n	ℓ	m	Số trạng thái
1	0	0	1 Ψ_{100}
2	0	0	4 Ψ_{200}
	1	-1	Ψ_{21-1}
	1	0	Ψ_{210}
		1	Ψ_{211}

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 Orbital l như sau:

ℓ	0	1	2	3
x	s	p	d	f

1. Nguyên tử Hydro

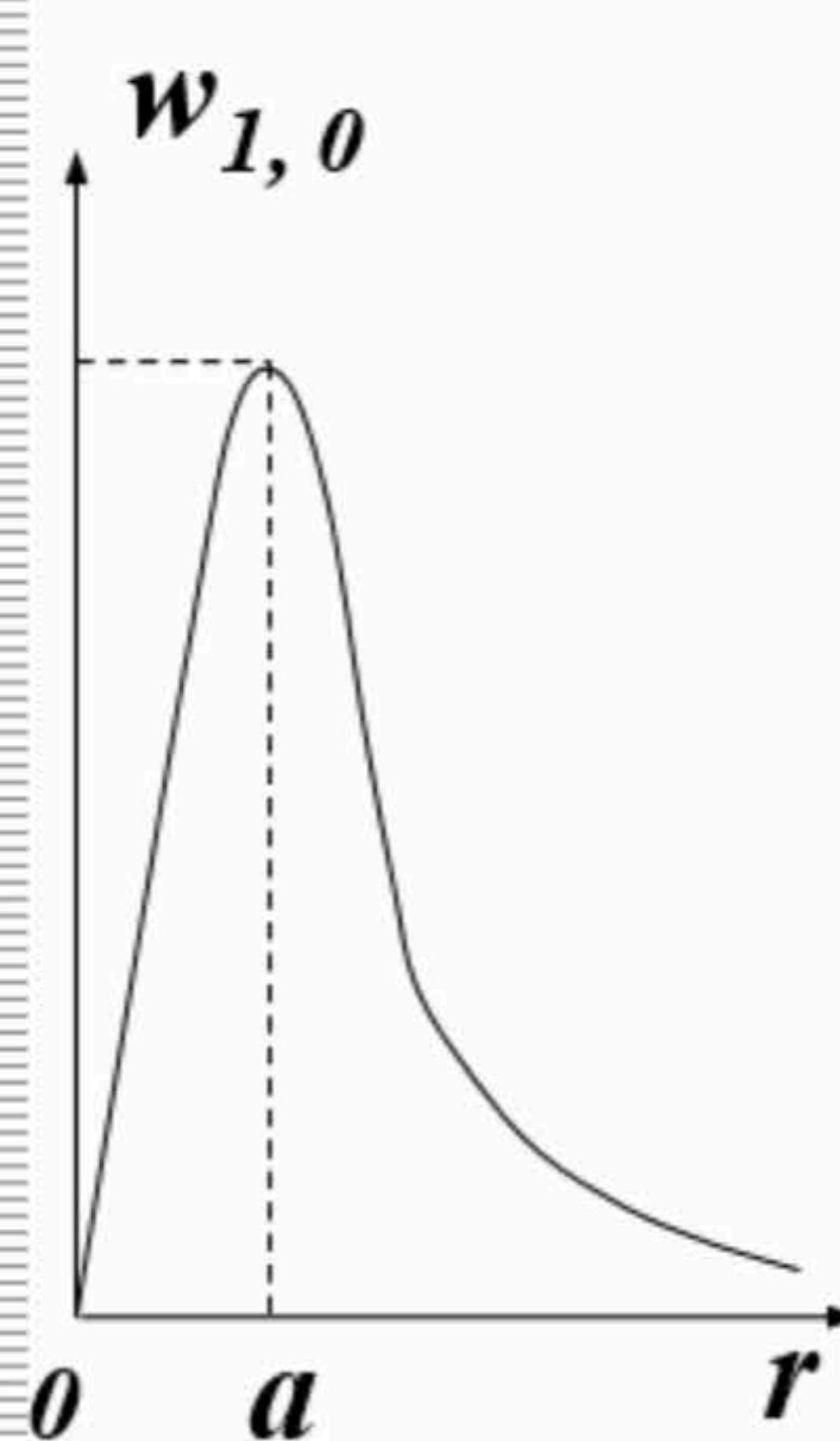
e. Xác suất tìm e trong thể tích dV ở một trạng thái nào đó

$$|\psi_{nlm}|^2 dV = |R_{nl}Y_{lm}|^2 r^2 dr \sin \theta d\theta d\phi$$

$R_{nl}^2 r^2 dr$ xác suất tìm e tại một điểm cách hạt nhân một khoảng r

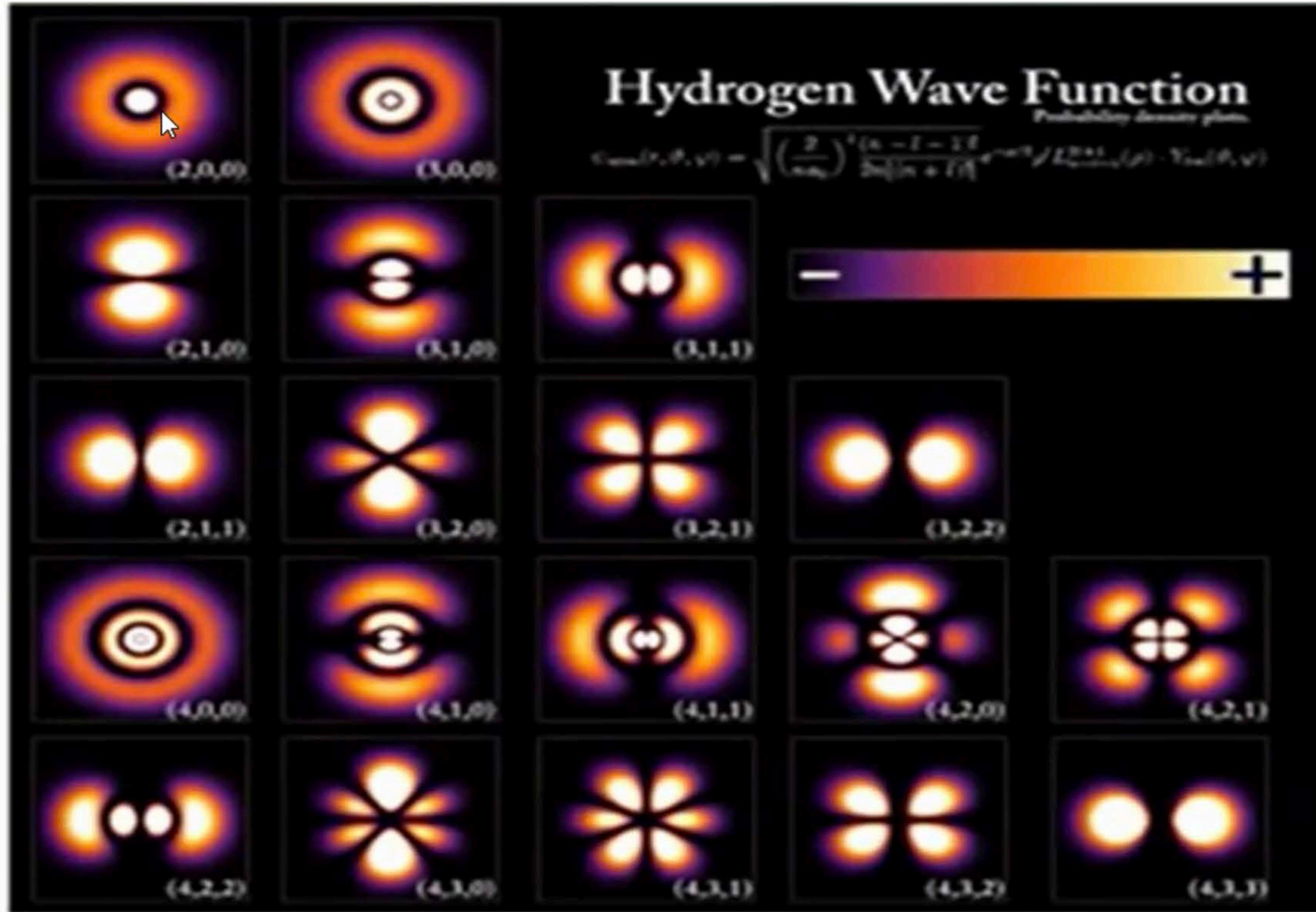
$|Y_{lm}|^2 \sin \theta d\theta d\phi$ xác suất tìm e theo các góc (θ, ϕ)

Sự phụ thuộc r của xác suất tìm hạt ở trạng thái cơ bản $n = 1, l = 0$



Xác suất cực đại ứng với bán kính $r = a = 0,53 \cdot 10^{-10} m$, đúng bằng bán kính của nguyên tử hiđrô theo quan niệm cổ điển. → e trong nguyên tử *không chuyển động theo một quĩ 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*. Kết quả này phù hợp với lượng tính sóng hạt của vi hạt.

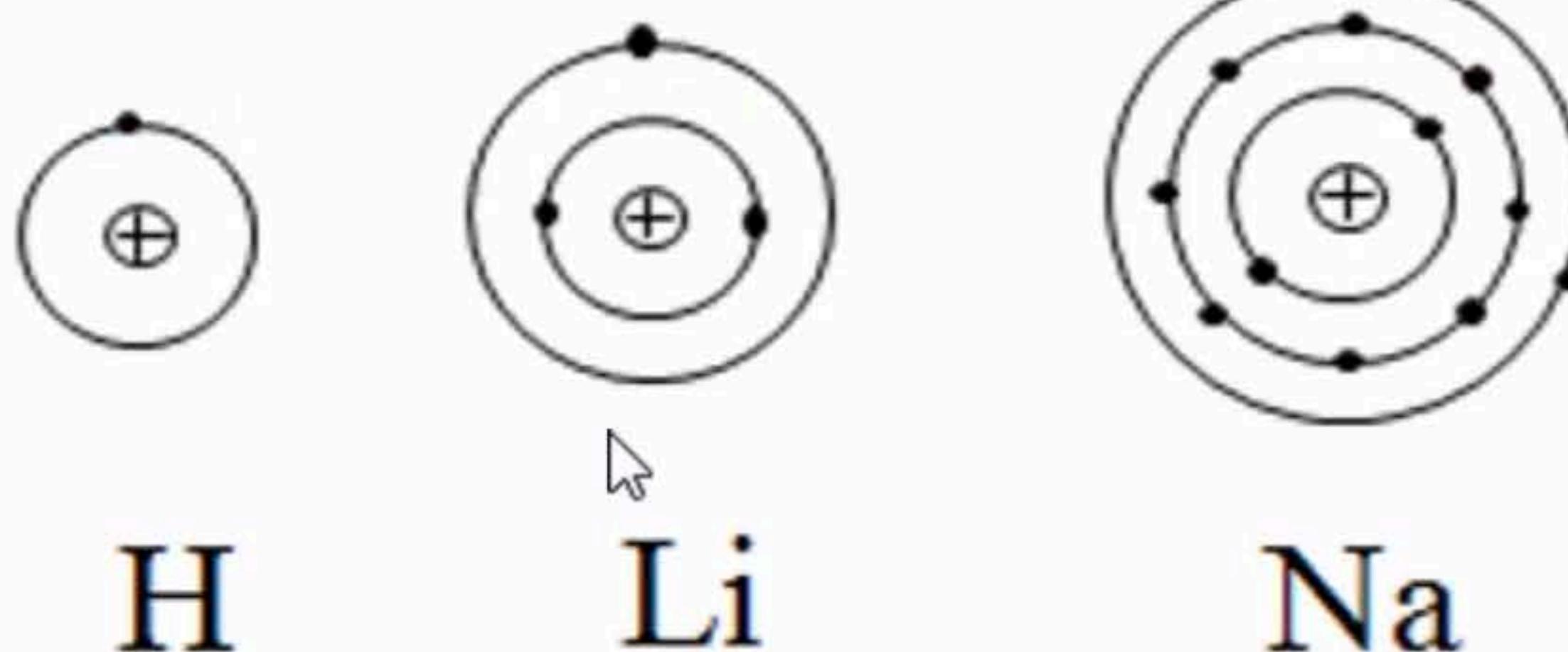
1. Nguyên tử Hydro



2. Nguyên tử kim loại kiềm

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

Ngoài năng lượng tương tác giữa hạt nhân và e⁻ hóa trị còn có năng lượng phụ gây ra bởi tương tác giữa e⁻ hóa trị với các e⁻ khác.



→ **Năng lượng của e⁻ hóa trị:**

$$E_{nl} = -\frac{1}{(n + \Delta_l)^2} \frac{m_e e^4}{2(4\pi\varepsilon_0)^2 \hbar^2}$$

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

Δ_l : số hiệu chỉnh phụ thuộc vào số lượng tử Orbital l

→ E_{nl} của electron hóa trị của kim loại kiềm phụ thuộc vào số lượng tử chính n và số lượng tử Orbital l

2. Nguyên tử kim loại kiềm

Bảng bô chính và ký hiệu các mức năng lượng:

Z	Nguyên tố kim loại kiềm	A_s	A_p	A_d	A_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

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

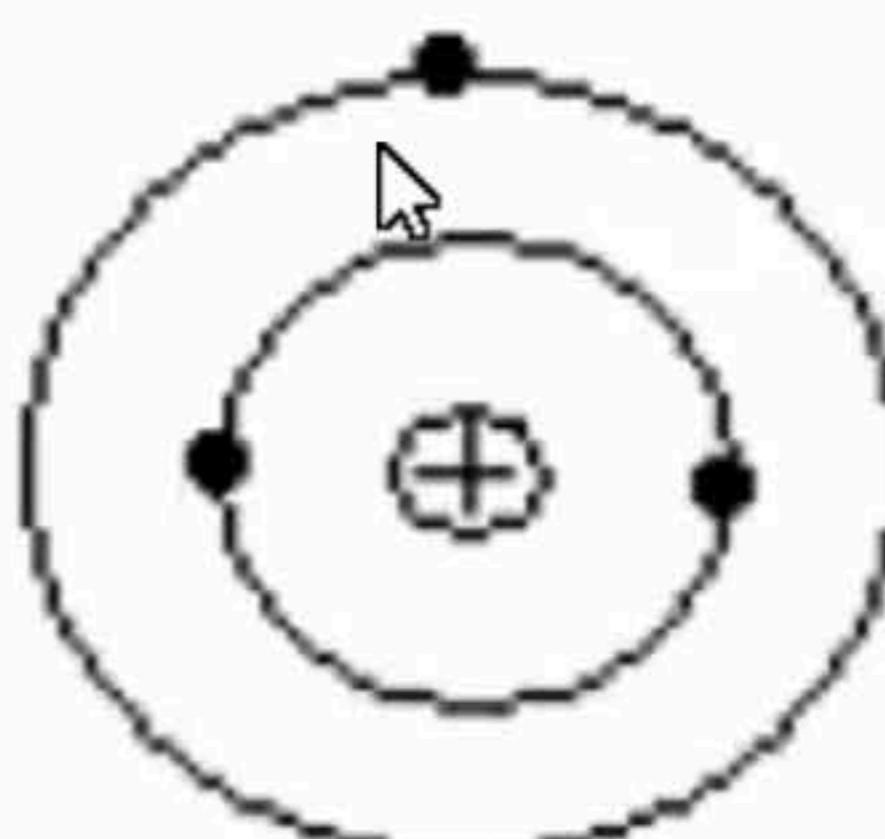
2. Nguyên tử kim loại kiềm

2. Quang phổ của nguyên tử kim loại kiềm

Chuyển mức năng lượng phải tuân theo qui tắc lựa chọn :

$$\Delta l = \pm 1$$

Ví dụ: Li: có 2 e ở gần hạt nhân chiếm mức năng lượng $1S$, còn 1 e hóa trị khi chưa bị kích thích chiếm mức năng lượng $2S$ ($n = 2, l = 0$).



Li

2. Nguyên tử kim loại kiềm

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 $nD (l=2, n=3,4...)$

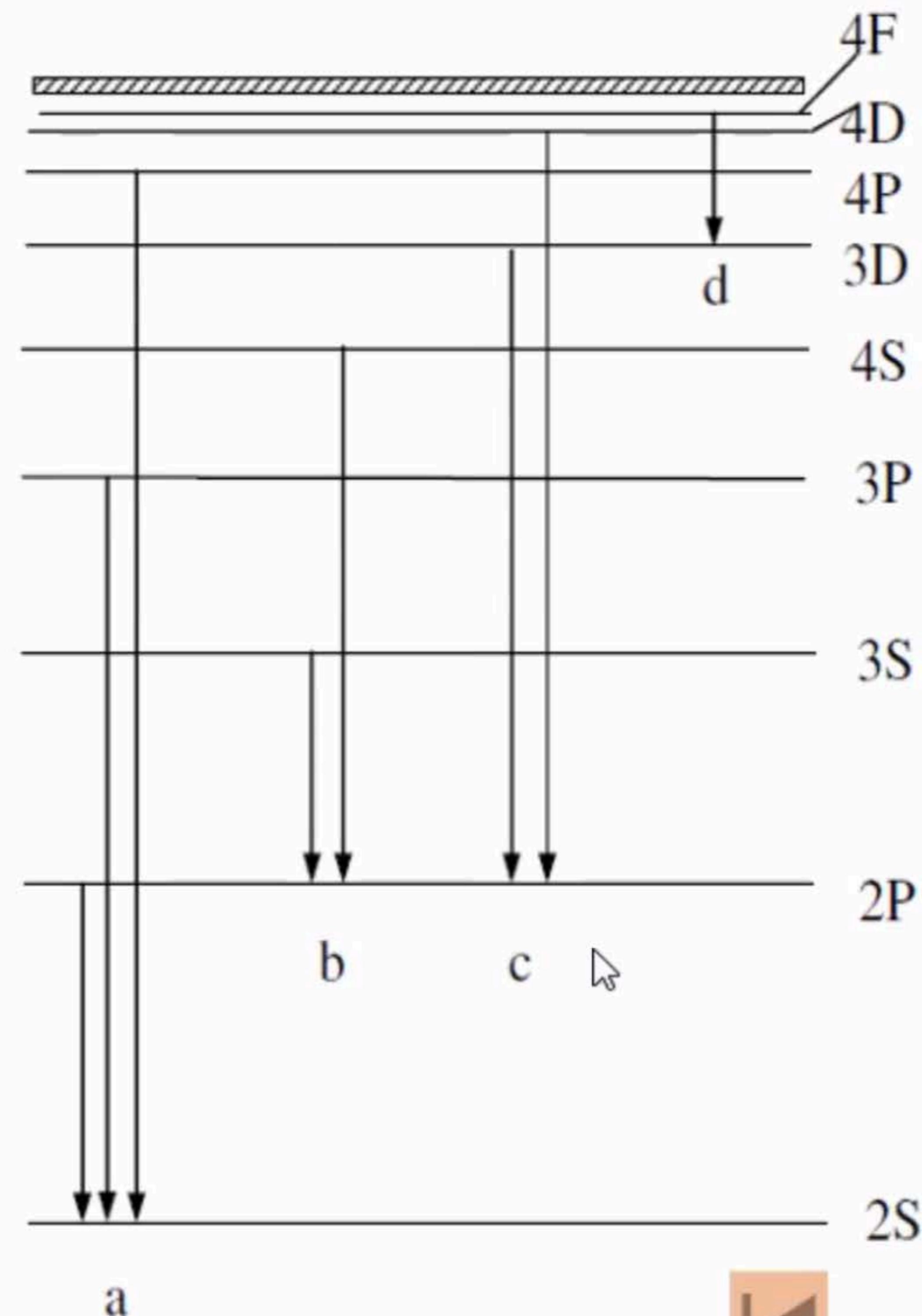
Tần số của bức xạ điện từ phát ra :

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

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

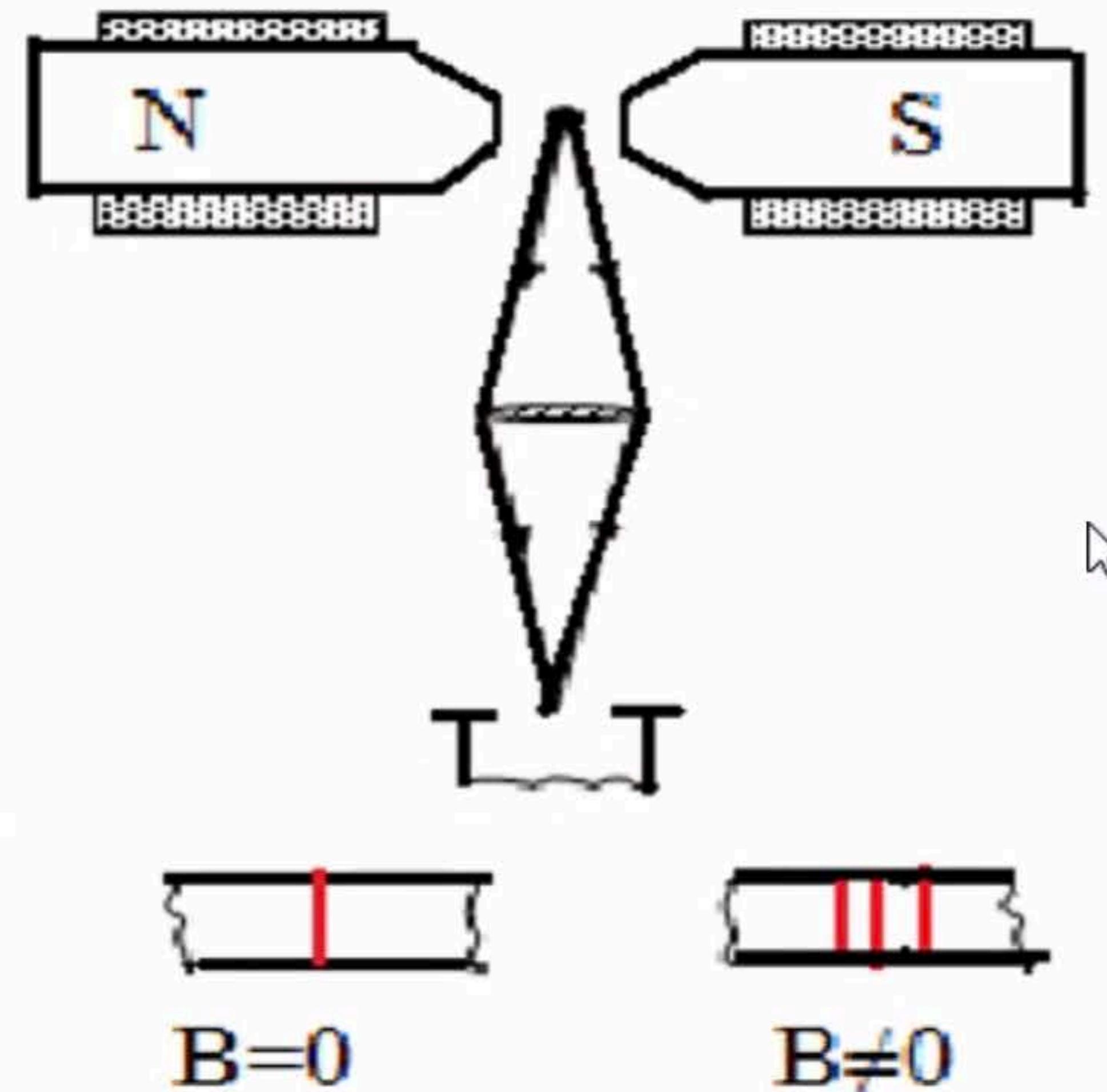
$h\nu = nD - 2P$: **các vạch** \Rightarrow **dãy phụ I (c)**

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



3. Hiệu ứng Zeeman

*** Thí nghiệm:**



→ * **Hiện tượng Zeeman:** là hiện tượng tách vạch quang phổ khi nguyên tử đặt trong từ trường.

*** Giải thích:.....**

3. Hiệu ứng Zeeman

1. Mômen động lượng Orbital \vec{L}

e⁻ chuyển động quanh hạt nhân \rightarrow có mômen động lượng \vec{L}

e⁻ không theo quỹ đạo xác định $\rightarrow \vec{L}$ không có hướng xác định.

Tuy nhiên, \vec{L} lại có giá trị xác định: $L = \sqrt{l(l+1)} \hbar$

l : số lượng tử Orbital ($l = 0, 1, \dots, n-1$), liên quan đến \vec{L}

Hình chiếu \vec{L} lên một phương z bất kỳ: $L_z = m\hbar$ $m = 0, \pm 1, \dots, \pm l$

m : số lượng tử tự; $m = 0, \pm 1, \dots, \pm l$

mỗi trị số của l có $(2l + 1)$ trị số của m .

3. Hiệu ứng Zeeman

Ví dụ:

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

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

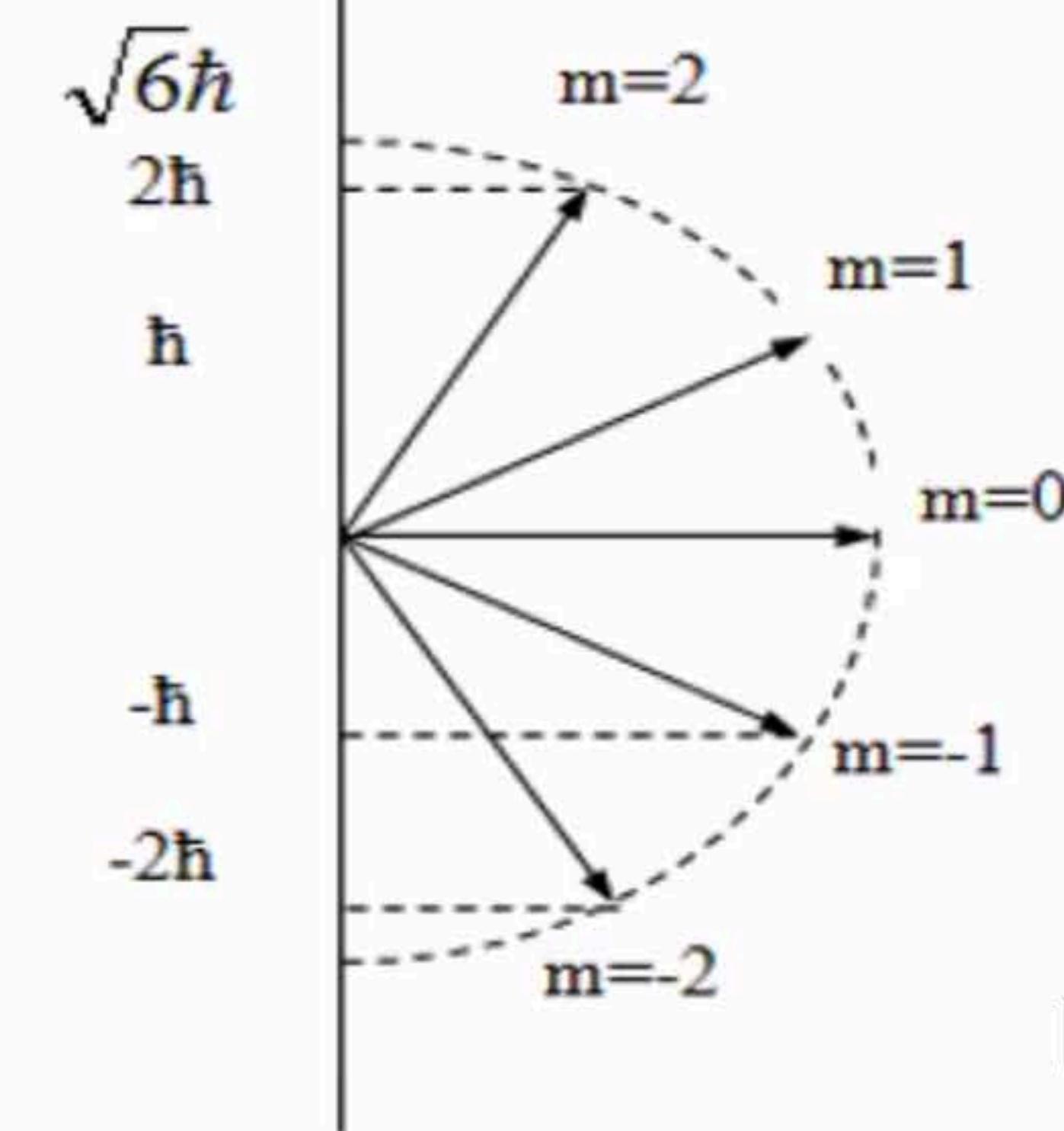
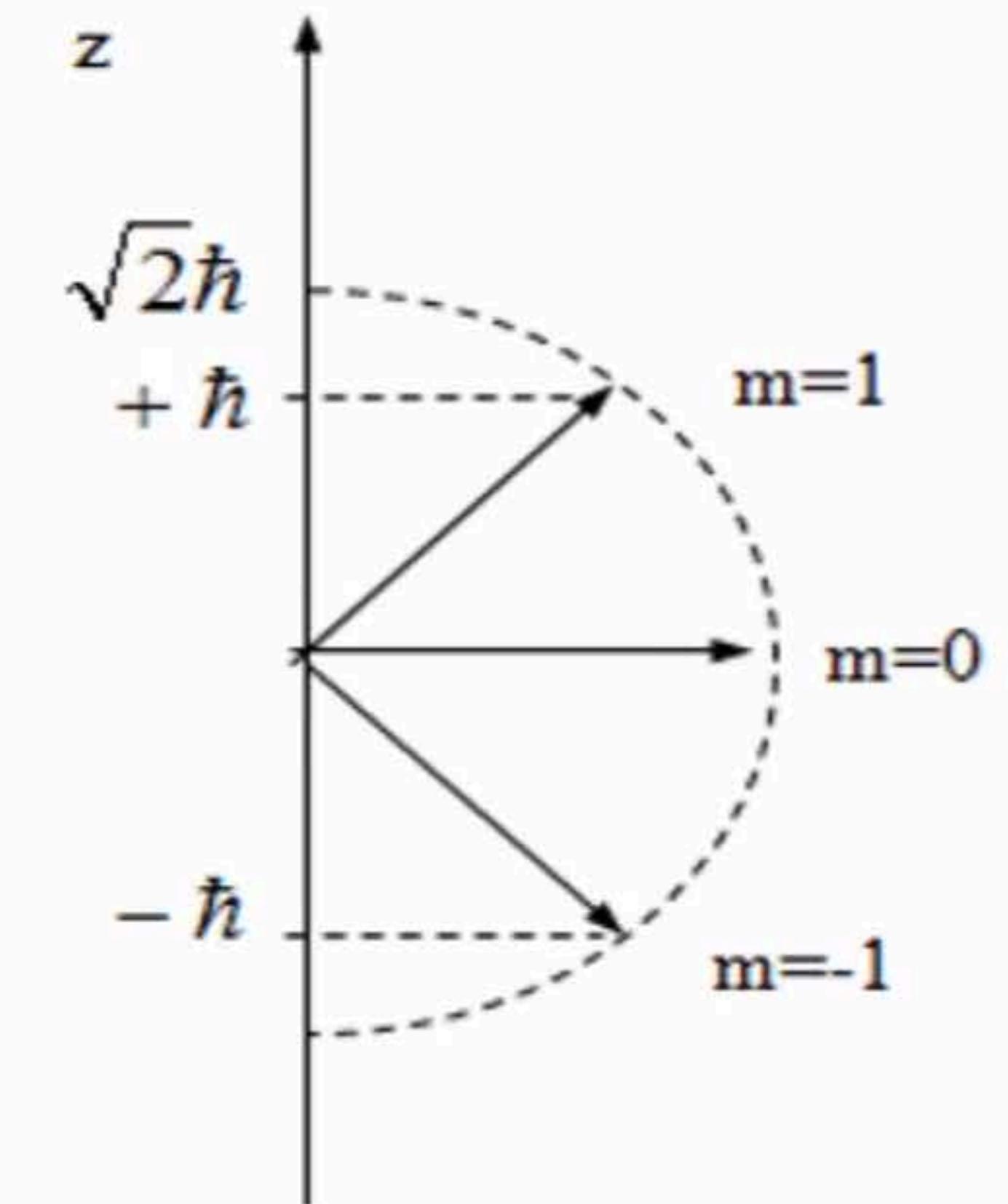
\Rightarrow 3 khả năng định hướng của \vec{L}

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

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}



3. Hiệu ứng Zeeman

2. Mômen từ: Dòng điện $i \rightarrow$ moment từ: $\vec{\mu} = i\vec{S}$

Theo quan điểm cổ điển:

+ Moment từ: $\mu = iS = efr\pi r^2$

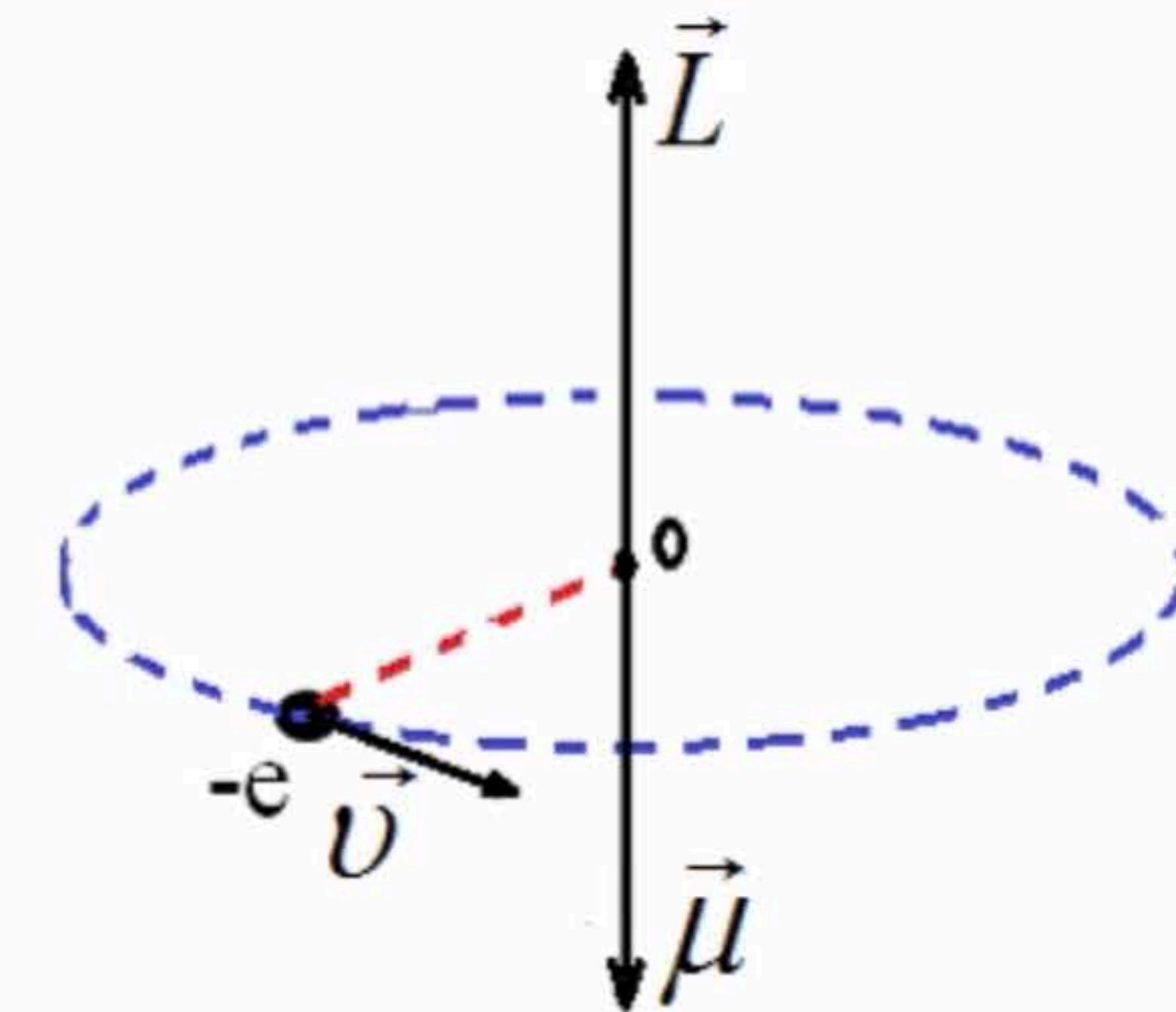
+ Moment động lượng: $L = m_e vr = m_e \omega r^2 = m_e 2\pi f r^2$

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

Chiếu của $\vec{\mu}$ lên phương z bất kì: $\mu_z = -\frac{e}{2m_e} L_z$

$$\rightarrow \mu_z = -m \frac{e\hbar}{2m_e} = -m\mu_B \quad \mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 10^{-23} Am^2 : \text{ gọi là manhétôn Bohr}$$

$\rightarrow \mu_z$ bị lượng tử hóa.

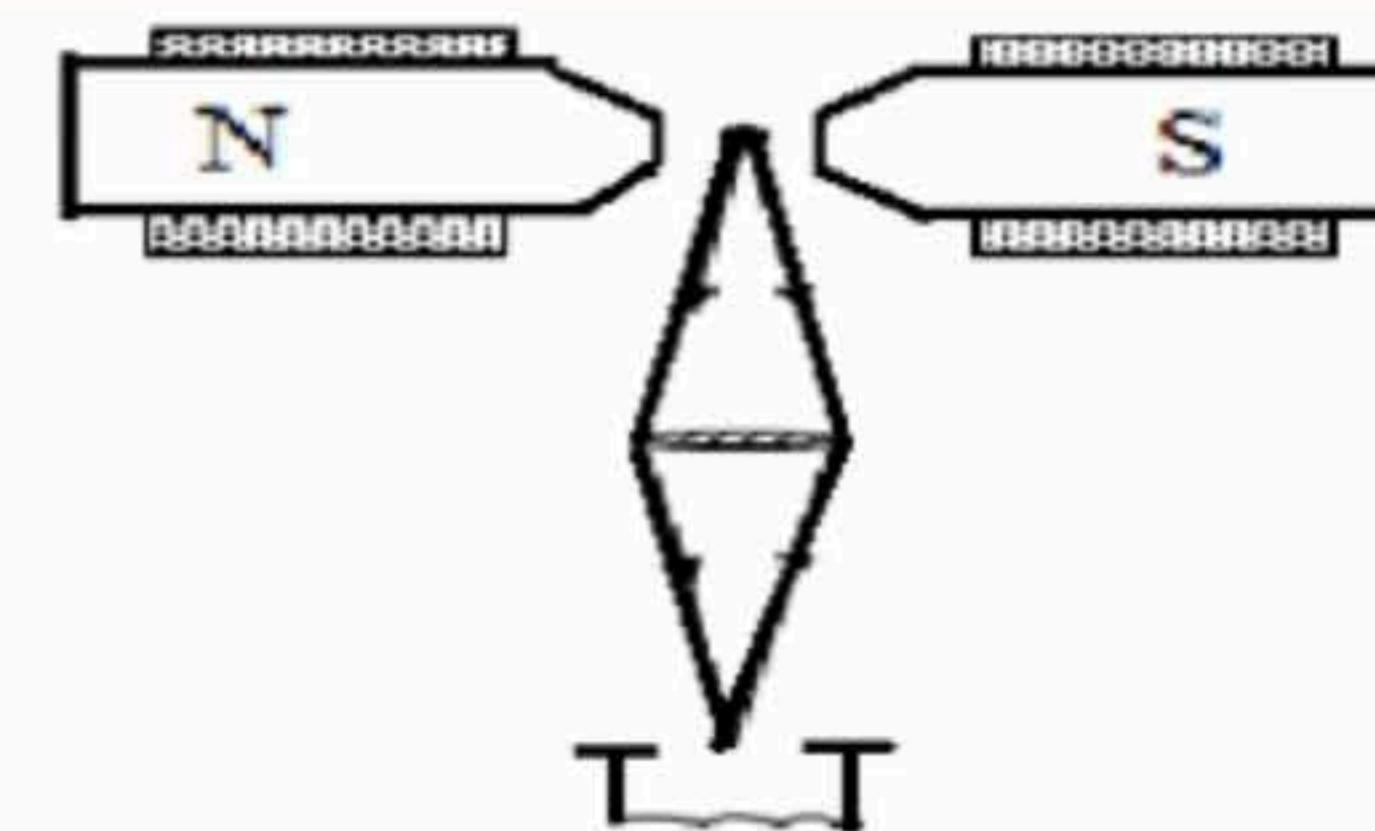


Khi e^- chuyển trạng thái phải theo qui tắc lựa chọn: $\Delta m = 0, \pm 1$

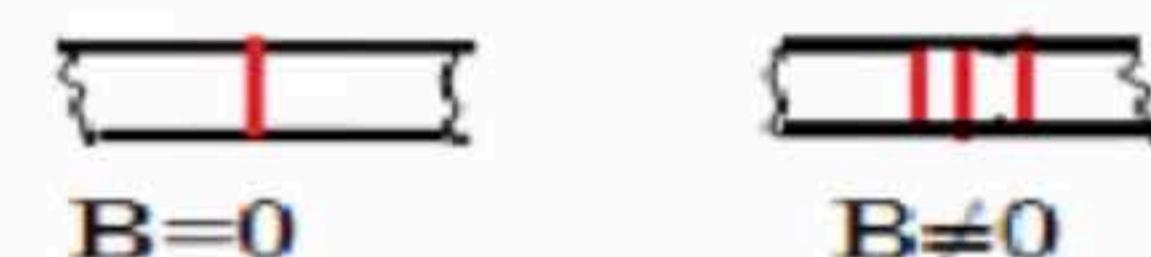
3. Hiệu ứng Zeeman

3. Giải thích hiện tượng Zeeman:

e⁻ có mômen từ $\vec{\mu}$



Trong từ trường $\Rightarrow \vec{\mu} // \vec{B}$



→ e⁻ có năng lượng phụ: $\Delta E = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$

Chọn phương z là phương của từ trường: $\vec{B} \rightarrow \Delta E = -\mu_z B = m \mu_B B$

→ khi H trong từ trường, năng lượng E' của e⁻ còn phụ thuộc vào số lượng tử từ m: $E' = E + m \mu_B B$

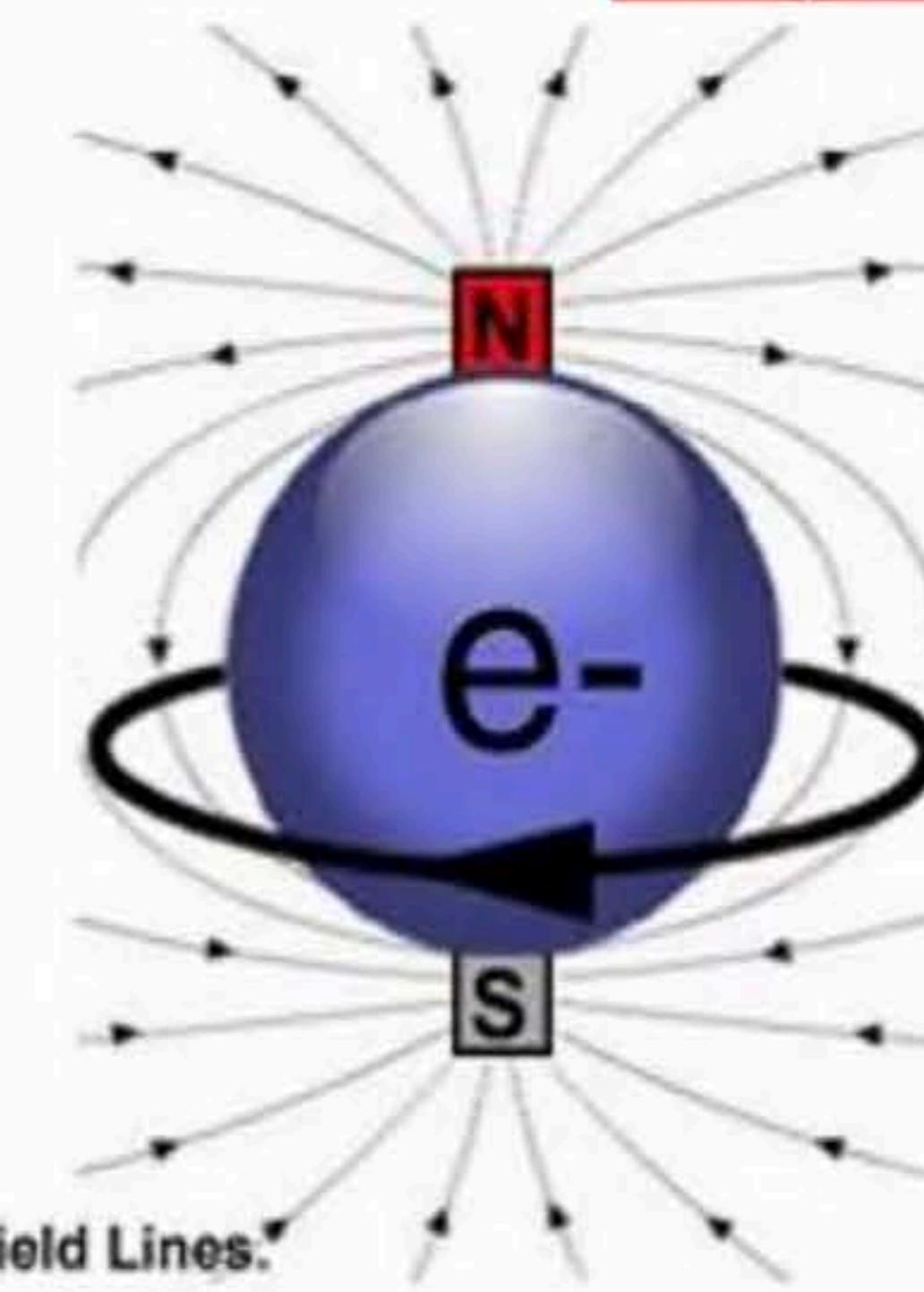
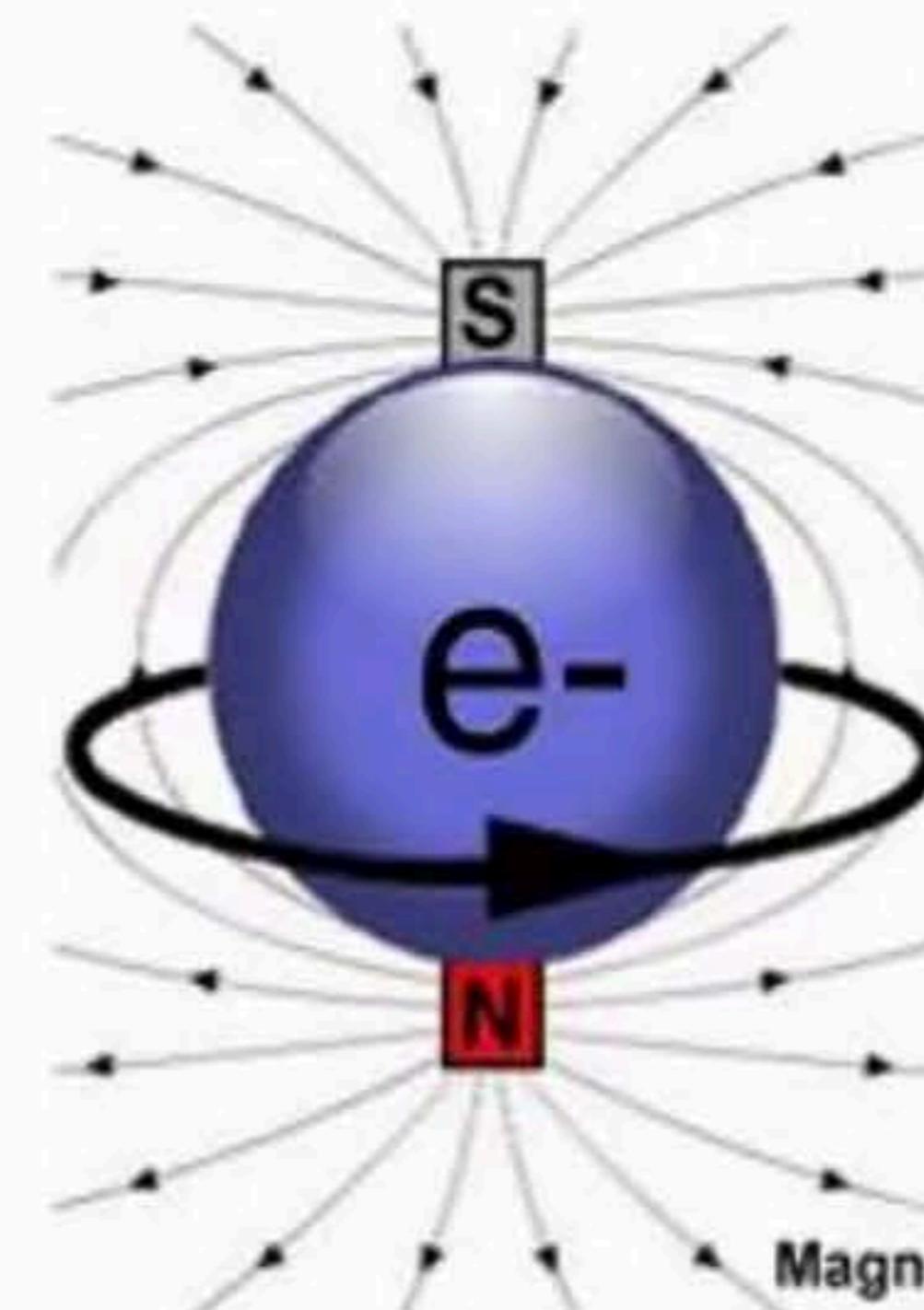
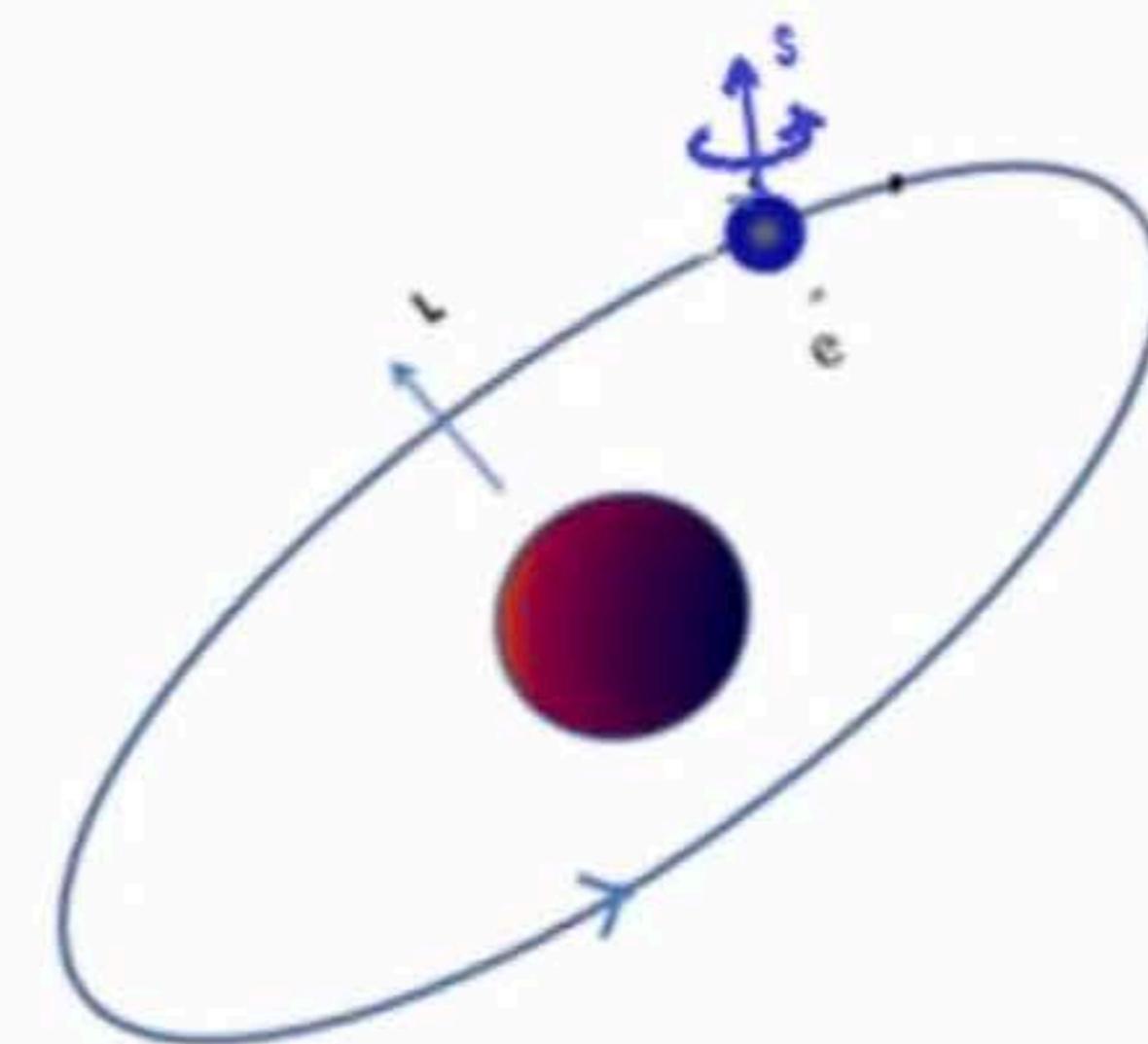
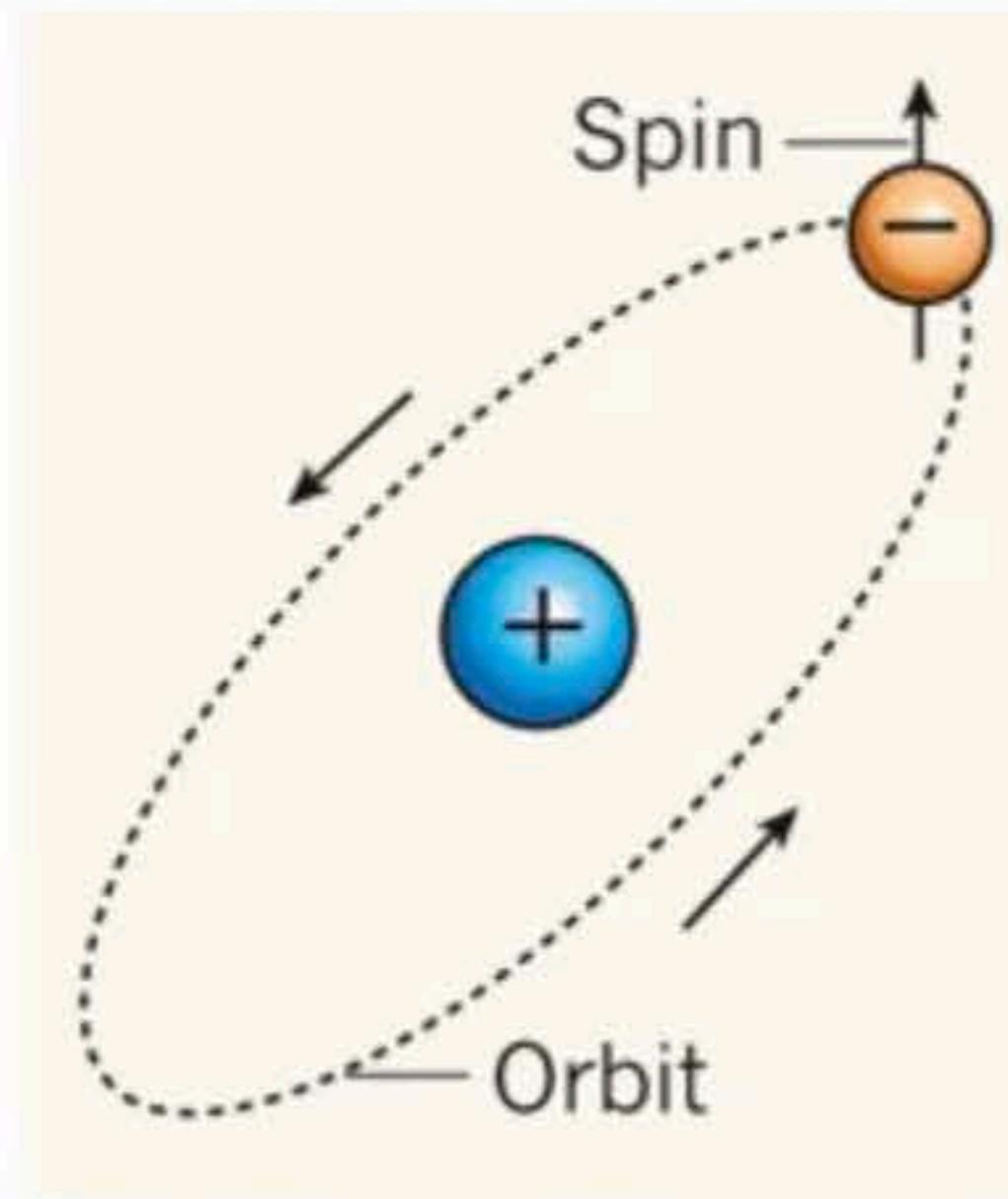
Nếu e⁻ từ $E_h \rightarrow E_l$ tần số vạch quang phổ:

$$\nu' = \frac{E_h - E_l}{h} = \frac{E_h - E_l}{h} + \frac{(m_h - m_l) \mu_B B}{h} = \nu + \frac{(m_h - m_l) \mu_B B}{h}$$

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

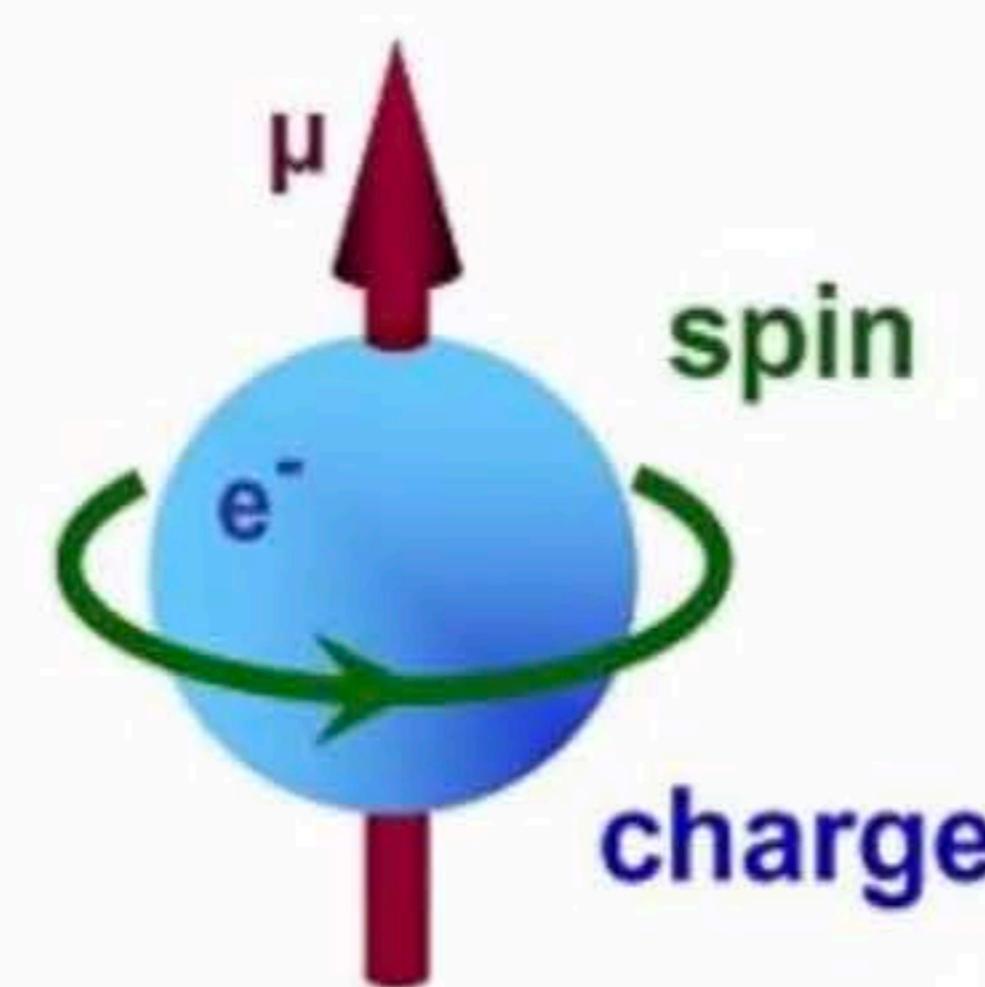
(Do qui tắc lựa chọn đối với m: $\Delta m = 0, \pm 1$)

4. Spin của electron

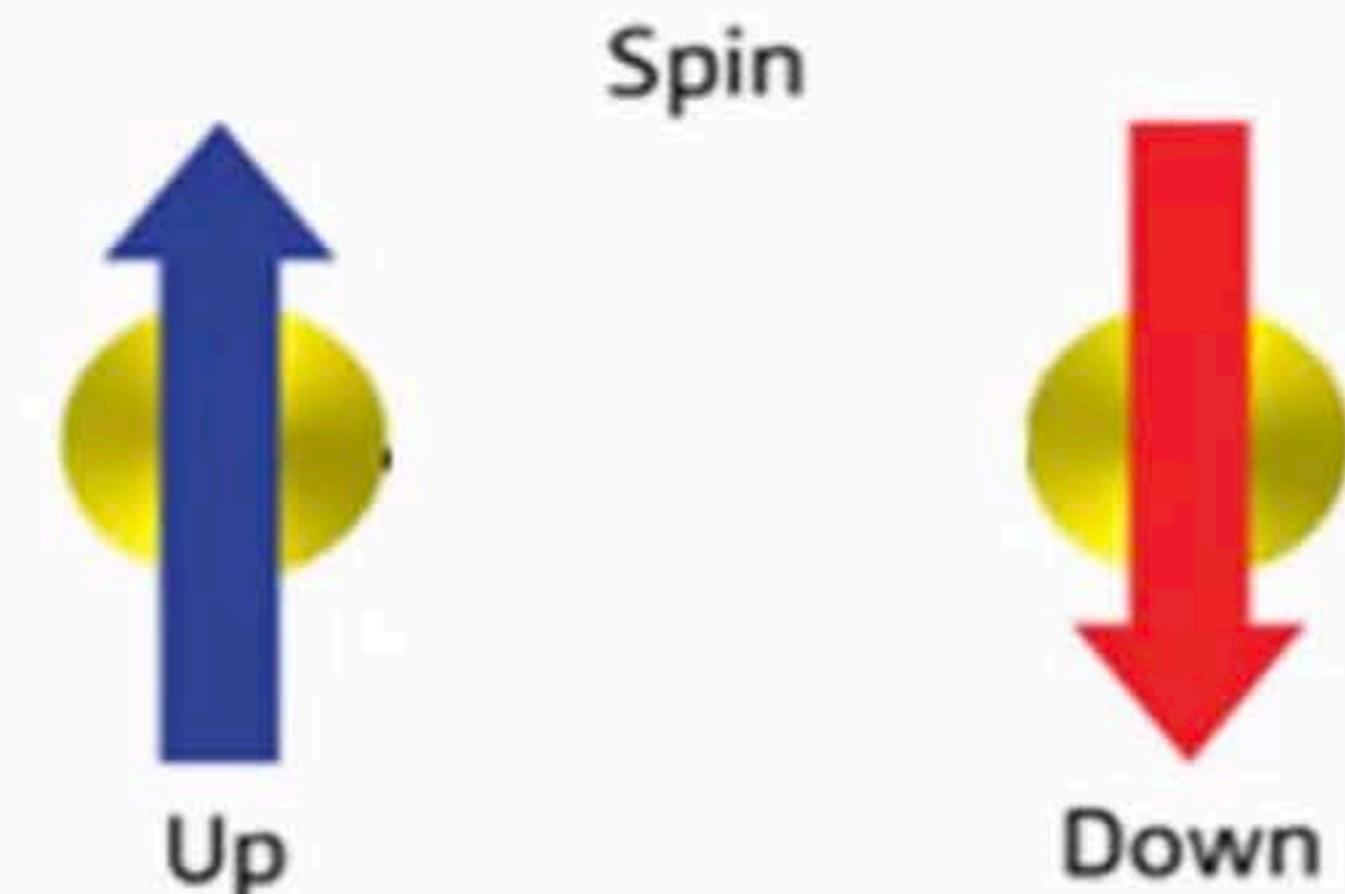


$$m_s = +\frac{1}{2}$$

$$m_s = -\frac{1}{2}$$



Kí hiệu: \vec{S}



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

4. Spin của electron

b.1. Thí nghiệm Einstein và de Haas

a. Sự tách vạch quang phổ kim loại kiềm:

Với máy quang phổ có năng suất phân giải cao → Vạch quang phổ không phải là vạch đơn mà 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.

→ được gọi là vạch kép đôi.

→ Mức năng lượng của nguyên tử kim loại kiềm không chỉ phụ thuộc vào hai số lượng tử n và l mà thêm một số lượng tử s tương ứng với một bậc tự do ảnh hưởng đến năng lượng của e^- trong kim loại kiềm

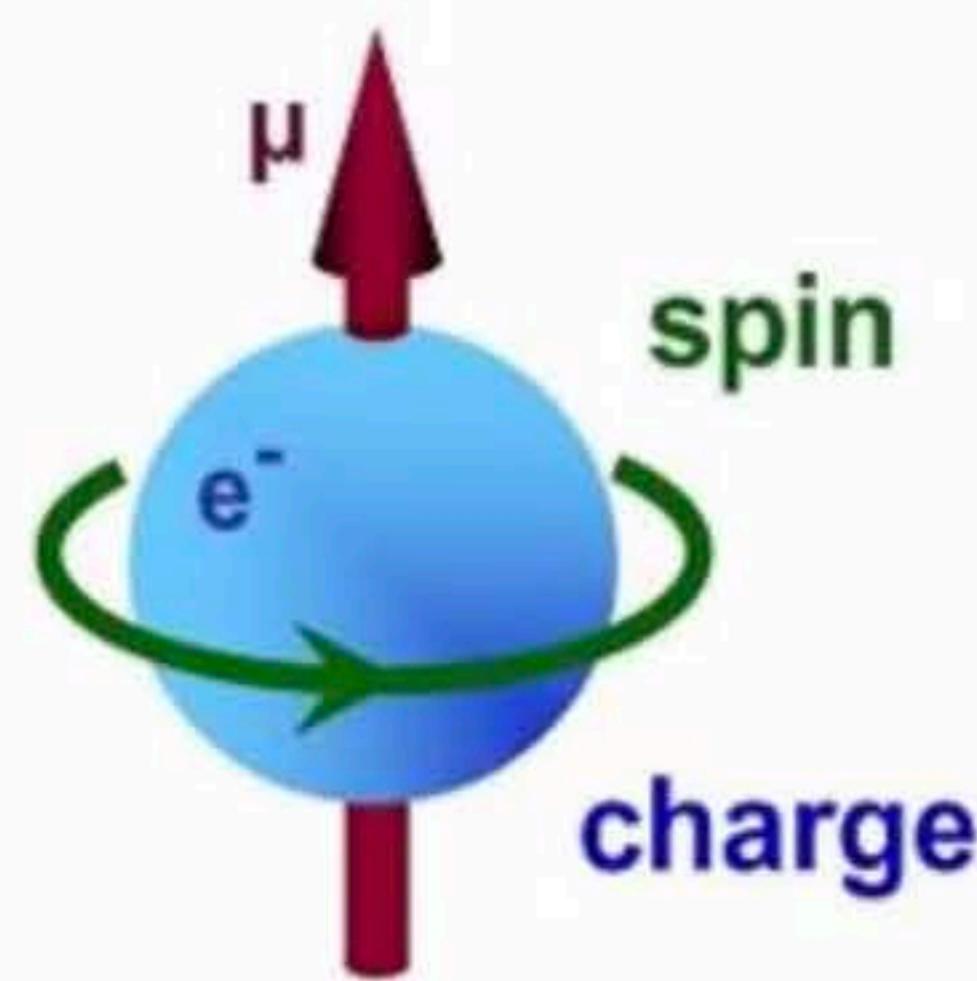
4. Spin của electron

Nếu i thay đổi, μ cũng thay đổi, do đó L cũng thay đổi. Dây treo sẽ bị xoắn lại. Đo góc xoắn này ta có thể xác định được và kiểm nghiệm tỉ số μ/L

Kết quả: tỉ số μ/L không bằng $-e/2m_e$ mà bằng $-e/m_e$. 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 μ/L phải bằng $-e/m_e$

Kết luận: ngoài chuyển động quanh hạt nhân, e^- còn tham gia chuyển động riêng liên quan tới sự vận động nội tại của e^- nữa, chuyển động này được đặc trưng bởi mômen cơ riêng, gọi là spin. Kí hiệu: \vec{S}

$$\vec{S} \text{ Có giá trị gián đoạn } S = \sqrt{s(s+1)} \hbar \quad s = \frac{1}{2} \rightarrow S = \frac{\sqrt{3}}{2} \hbar$$



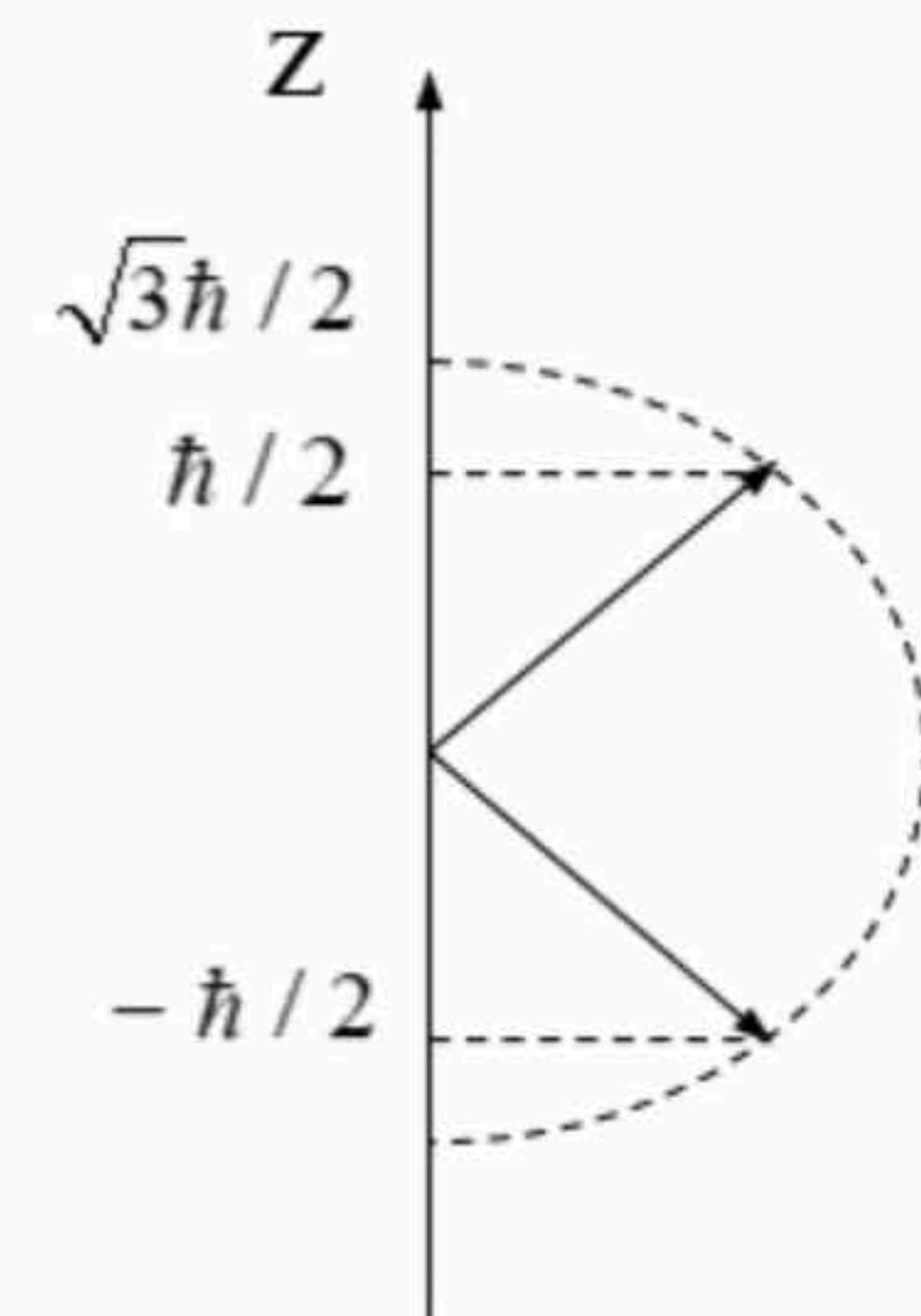
4. Spin của electron

Vì số lượng tử spin $s = \frac{1}{2}$ nên gọi tắt spin của e^- bằng $\frac{1}{2}$ hoặc e^- có spin bán nguyên.

Hình chiếu của mômen \vec{S} theo phương z bất kì bằng:

$$S_z = m_s \hbar = \pm \frac{\hbar}{2}$$

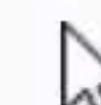
m_s : số lượng tử từ riêng, nó chỉ có hai giá trị $\pm \frac{1}{2}$



Mômen cơ riêng \vec{S} \rightarrow e^- có mômen từ riêng $\vec{\mu}_s$ $\vec{\mu}_s = -\frac{e}{m_e} \vec{S}$
:

Hình chiếu của mômen từ riêng trên trục z:

$$\mu_{sz} = -\frac{e}{m_e} S_z = \mp \frac{e\hbar}{2m_e} = \mp \mu_B$$



4. Spin của electron

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

Mômen động lượng toàn phần của electron: $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$

Cơ học lượng tử đã chứng minh được giá trị: $J = \sqrt{j(j+1)}\hbar$

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

Trạng thái lượng tử của e^- phụ thuộc vào 4 số lượng tử: n, l, m, m_s hay n, l, m, j .

Üng với số lượng tử chính n , có $2n^2$ trạng thái lượng tử khác nhau:

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

4. Spin của electron

Trạng thái của e^- được kí hiệu: nx_j , mức năng lượng của e^- : n^2X_j ,

n : số lượng tử chính, $X = S, P, D, F \dots$ tùy thuộc $l = 0, 1, 2, \dots$

Chỉ số 2 ở phía trên bên trái chữ X chỉ cấu tạo bởi kép của mức E .

Các trạng thái lượng tử, mức năng lượng khả dĩ của e^- hóa trị trong H, kí kiêm:

<i>n</i>	<i>l</i>	<i>j</i>	<i>Trạng thái của electron hóa trị</i>	<i>Mức năng lượng</i>
1	0	1/2	1s _{1/2}	1 ² S _{1/2}
2	0	1/2	2s _{1/2}	2 ² S _{1/2}
	1	1/2	2p _{1/2}	2 ² P _{1/2}
		3/2	2p _{3/2}	2 ² P _{3/2}
3	0	1/2	3s _{1/2}	3 ² S _{1/2}
	1	1/2	3p _{1/2}	3 ² P _{1/2}
	2	3/2	3p _{3/2}	3 ² P _{3/2}
		3/2	3d _{3/2}	3 ² D _{3/2}
		5/2	3d _{5/2}	3 ² D _{5/2}

4. Spin của electron

Giải thích vạch kép đôi trong quang phổ của kim loại kiềm:

Các e^- chuyển động quanh hạt nhân tạo ra một từ trường đặc trưng bởi mômen từ của các electron. Mômen từ spin của electron tương tác với từ trường đó, tương tác này được gọi là **tương tác spin-orbital**. → có một năng lượng phụ bổ sung vào biểu thức năng lượng của e^- . Năng lượng phụ này phụ thuộc vào sự định hướng của mômen spin → năng lượng còn phụ thuộc vào số lượng tử toàn phần j .

→ **Năng lượng toàn phần** của electron phụ thuộc vào n, l , và j : E_{nlj}

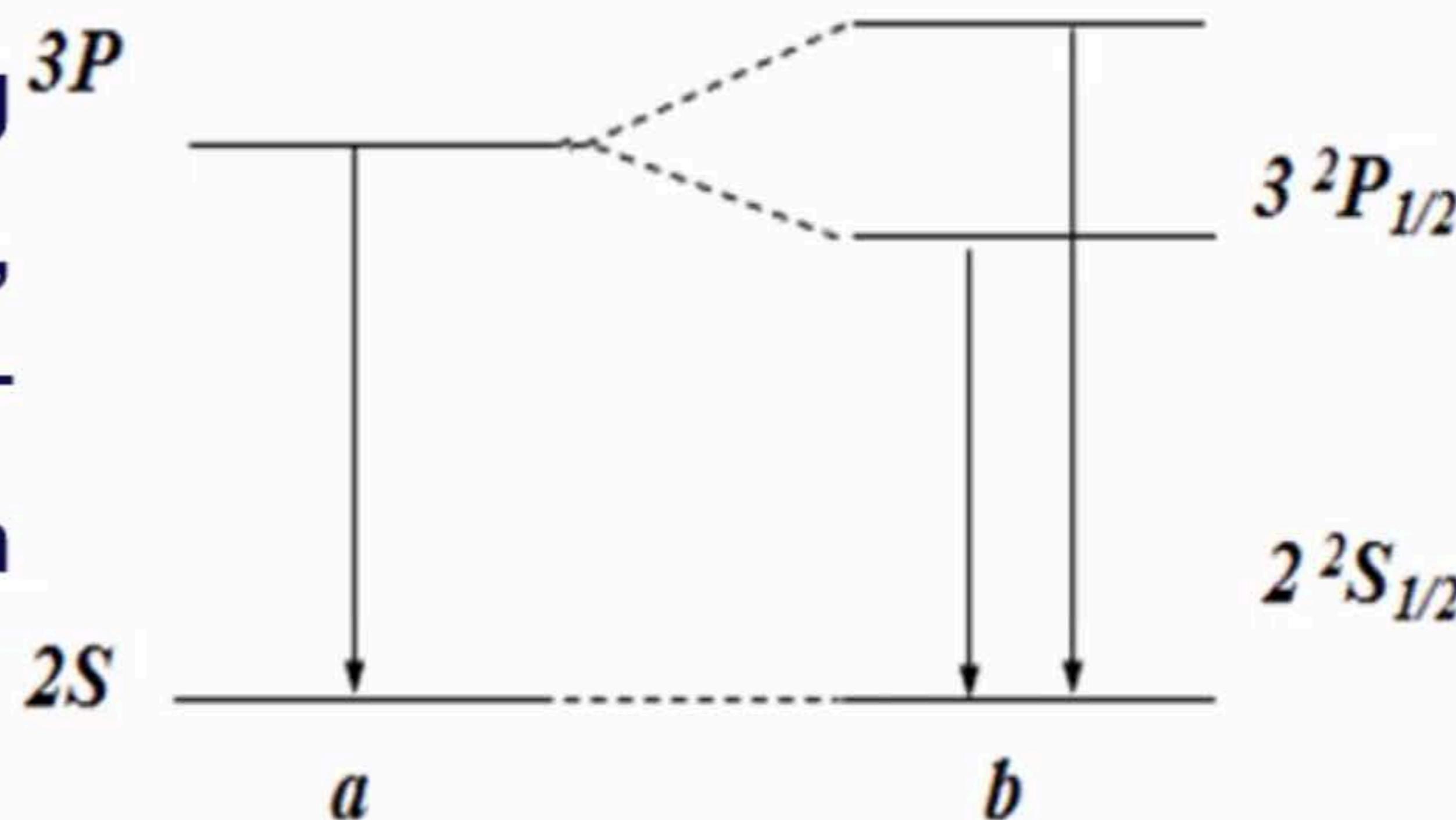
Mỗi mức E xác định tách thành hai mức $j = l-1/2$ và $j = l+1/2$, trừ mức S ($l = 0$), chỉ có một mức. Khoảng cách giữa hai mức năng lượng này rất nhỏ. → cấu trúc tế vi của mức.

4. Spin của electron

3. Cấu tạo bội của vạch quang phổ

Khi e^- chuyển từ mức năng lượng 3P cao sang mức năng lượng thấp hơn, ngoài qui tắc lựa chọn đối với l , e^- còn phải tuân theo qui tắc lựa chọn đối với j :

$$\Delta j = 0, \pm 1$$



Xét sự tách vạch của quang phổ kim loại kiềm:

a, Khi chưa xét đến spin, vạch đơn có tần số ứng với chuyển mức: $h\nu = 3P \rightarrow 2S$

b, khi xét đến spin, \rightarrow vạch kép: $h\nu_1 = 3^2P_{1/2} \rightarrow 2^2S_{1/2}$ ($\Delta l = -1, \Delta j = 0$)
 $h\nu_2 = 3^2P_{3/2} \rightarrow 2^2S_{1/2}$ ($\Delta l = -1, \Delta j = -1$)



- 1- Các kết luận của cơ học lượng tử trong việc nghiên cứu nguyên tử Hiđrô về: Năng lượng của electron trong nguyên tử Hiđrô, cấu tạo vạch của quang phổ Hiđrô và độ suy biến của mức năng lượng E_n .
- 2- Sự khác nhau giữa nguyên tử Hiđrô và nguyên tử kim loại kiềm về mặt cấu tạo. Từ đó viết biểu thức năng lượng của electron hóa trị trong nguyên tử kim loại kiềm.
- 3- Trình bày và giải thích hiệu ứng Zeeman.
- 4- Biểu thức độ lớn mômen spin của electron và hình chiếu của nó trên phương z. Biểu thức độ lớn của mômen từ và biểu diễn hình chiếu của qua manhêtôn Bohr.



Bài tập



(H)
Photon có năng lượng 16,5eV làm bật electron ra khỏi nguyên tử đang ở trạng thái cơ bản. Tính vận tốc của electron khi bật ra khỏi nguyên tử (H)

Mức c.cấp để e ra khỏi ntu: $E_f - E_i = \Delta E = h\nu = 16,5\text{ eV}$
→ theo ft vđ ch. huo', $h\nu = A + E_f \rightarrow E_f = h\nu - A = 16,5 - 13,5 \text{ eV}$