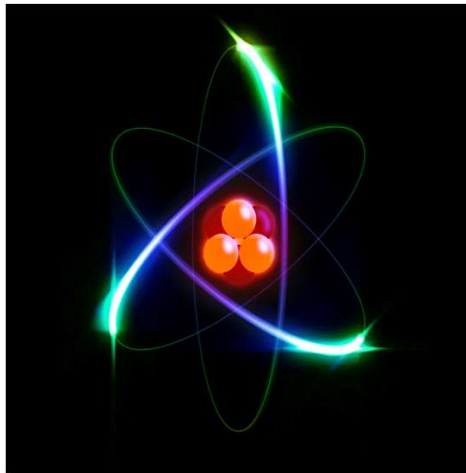
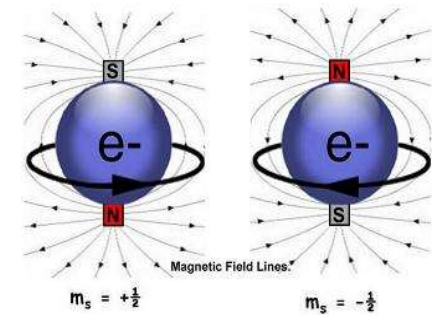
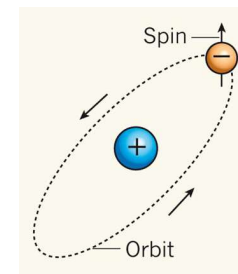
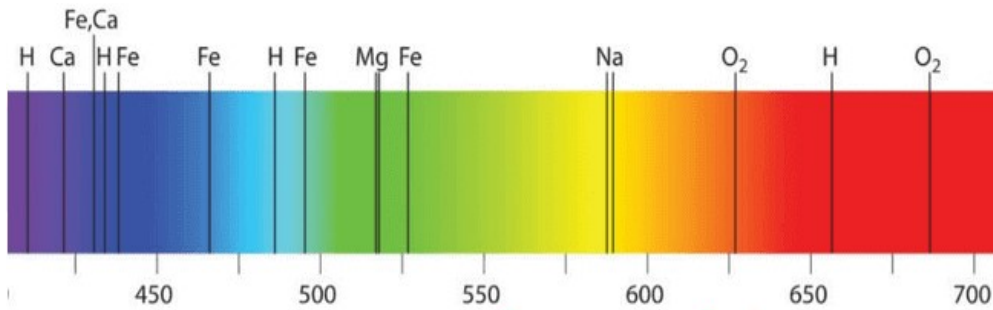
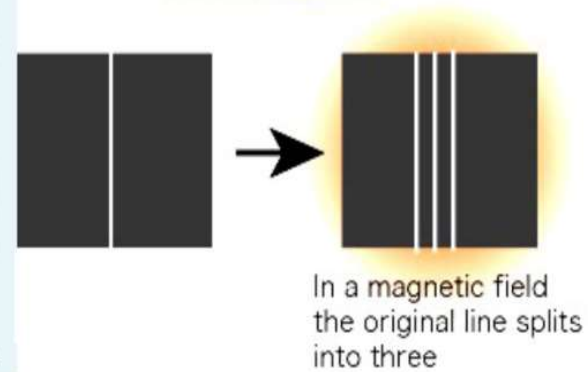


# Chương 9: Vật lí nguyên tử



ZEEMAN EFFECT



## Chương 9: Vật lí nguyên tử

1. Nguyên tử Hydro 

2. Nguyên tử kim loại kiềm 

3. Hiệu ứng Zeeman 

4. Spin của electron 



## 1. Nguyên tử Hydro

### 1. Chuyển động của điện tử trong nguyên tử Hidrô

Cấu tạo của H  $\rightarrow U = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \rightarrow \Delta\psi + \frac{2m_e}{\hbar^2} \left( E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \psi = 0$

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

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

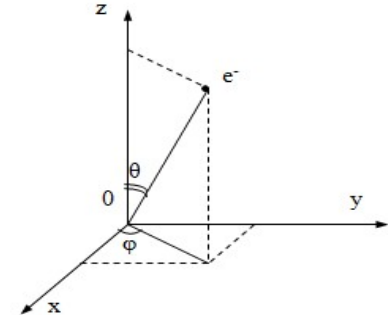
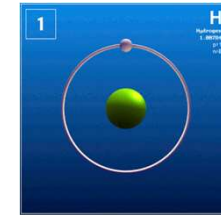
$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \cdot Y(\theta, \varphi)$$

$\Rightarrow$  - Năng lượng của e<sup>-</sup>:  $E_n = -\frac{1}{n^2} \frac{m_e e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} \Rightarrow E_n = -\frac{Rh}{n^2}$   $R = 3,27 \cdot 10^{15} s^{-1}$  hằng số Rittbe

- Hàm sóng của e<sup>-</sup>:

$$\psi = \psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi)$$

$n = 1, 2, 3 \dots$  : 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

---

## 1.2. Các kết luận

- a. Năng lượng của điện tử 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 điện tử
- e. Xác suất tìm điện tử trong thể tích  $dV$  ở một trạng thái nào đó

# 1. Nguyên tử Hydro

## a. Năng lượng của $e^-$ trong nguyên tử H:

$$E_n = -\frac{Rh}{n^2} \quad n = 1, 2, 3...$$

- ✓ Năng lượng chỉ phụ thuộc vào số nguyên  $n$ .
- ✓ Ứng với mỗi số nguyên  $n$  có một mức năng lượng  $\rightarrow$  năng lượng *biến thiên gián đoạn*, ta nói năng lượng bị lượng tử hoá.
- ✓  $E_n$  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:  $E_1, E_2, \dots$  tương ứng mức  $K, L, M \dots$

## b. Năng lượng ion hoá của nguyên tử Hidrô

Là năng lượng cần thiết để  $e^-$  bứt ra khỏi nguyên tử:  $E = E_\infty - E_1 = 0 - (-Rh) = 13,5eV$

# 1. Nguyên tử Hydro



## c. Giải thích cấu tạo vạch của quang phổ H

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

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

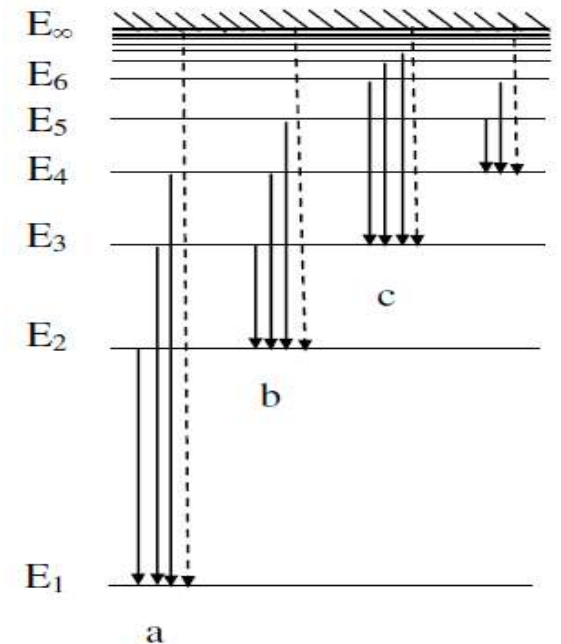
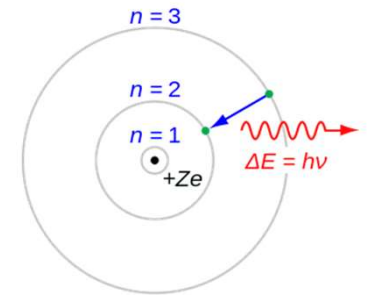
$$\Rightarrow \nu_{nn'} = R \left( \frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

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

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

$n'=3, n=4,5,6\dots$  các vạch thuộc dãy Paschen (c).

Tiếp là dãy brackett, pfund .



# 1. Nguyên tử Hydro

## d. Trạng thái lượng tử của e:

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

$n = 1, 2, \dots$  : 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.

→ Hàm sóng phụ thuộc vào các số lượng tử  $n, l, m$ .

→ Với mỗi giá trị của  $n$  có số trạng thái lượng tử:

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

→ có  $n^2$  trạng thái lượng tử cùng mức năng lượng  $E_n$  khác nhau →  $E_n$  suy biến bậc  $n^2$

Ví dụ

n	$\ell$	m	Số trạng thái
1	0	0	1 $\psi_{100}$
2	0	0	4 $\psi_{200}$
	1	-1	$\psi_{21-1}$
		0	$\psi_{210}$
		1	$\psi_{211}$

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

Trạng thái lượng tử được kí hiệu  $nx$ ,  $x$  tùy thuộc vào số lượng tử  $l$ .

# 1. Nguyên tử Hydro



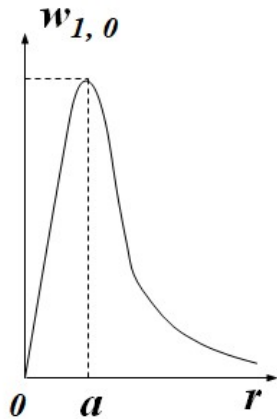
e. Xác suất tìm e- trong thể tích dV ở một trạng thái nào đó

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

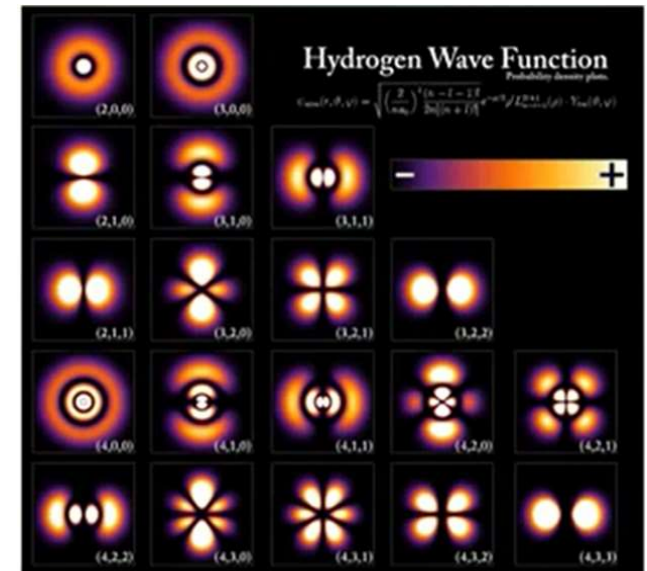
$R_{nl}^2 r^2 dr$  xác suất tìm e- tại điểm cách hạt nhân một khoảng  $r$

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

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



Xác suất cực đại ứng với bán kính  $r = a = 0,53.10^{-10}m$ , đúng bằng bán kính của nguyên tử Hidrô theo quan điểm cổ điển.



Mật độ xác suất của một e- của nguyên tử H





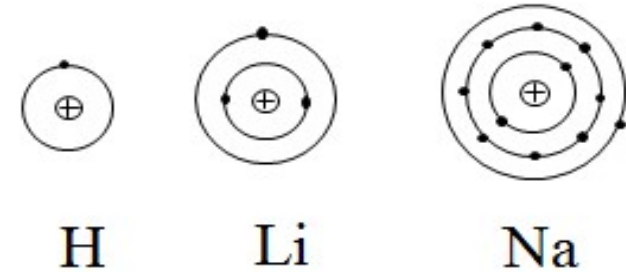
## 2. Nguyên tử kim loại kiềm

### 2.1. Năng lượng của e<sup>-</sup> hóa trị trong nguyên tử kim loại kiềm

→ Năng lượng của e<sup>-</sup> hóa trị:

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

$\Delta_l$ : số hiệu chỉnh phụ thuộc vào số lượng tử Orbital  $l$



→  $E_{nl}$  của e<sup>-</sup> hóa trị của kim loại kiềm phụ thuộc vào các số lượng  $n$  và  $l$

Kí hiệu mức năng lượng là  $nX$ ,  $X$  tùy thuộc vào số lượng tử  $l$ :

$\ell$	0	1	2	3
$X$	S	P	D	F

(Ví dụ: Mức 3D là mức năng lượng ứng với  $n=3$ ,  $l=2$ .)

## 2. Nguyên tử kim loại kiềm



**Bảng bổ chính và ký hiệu các mức năng lượng:**

$Z$	Nguyên tố	$\Delta_s$	$\Delta_p$	$\Delta_d$	$\Delta_f$
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

$n$	$l$	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

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

Qui tắc lựa chọn:

$$\Delta l = \pm 1$$

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

Ví dụ: Li: có  $2e^-$  ở gần hạt nhân chiếm mức năng lượng  $1S$ .

$1e^-$  hóa trị khi chưa bị kích thích chiếm mức năng lượng  $2S$  ( $n = 2, l = 0$ ).

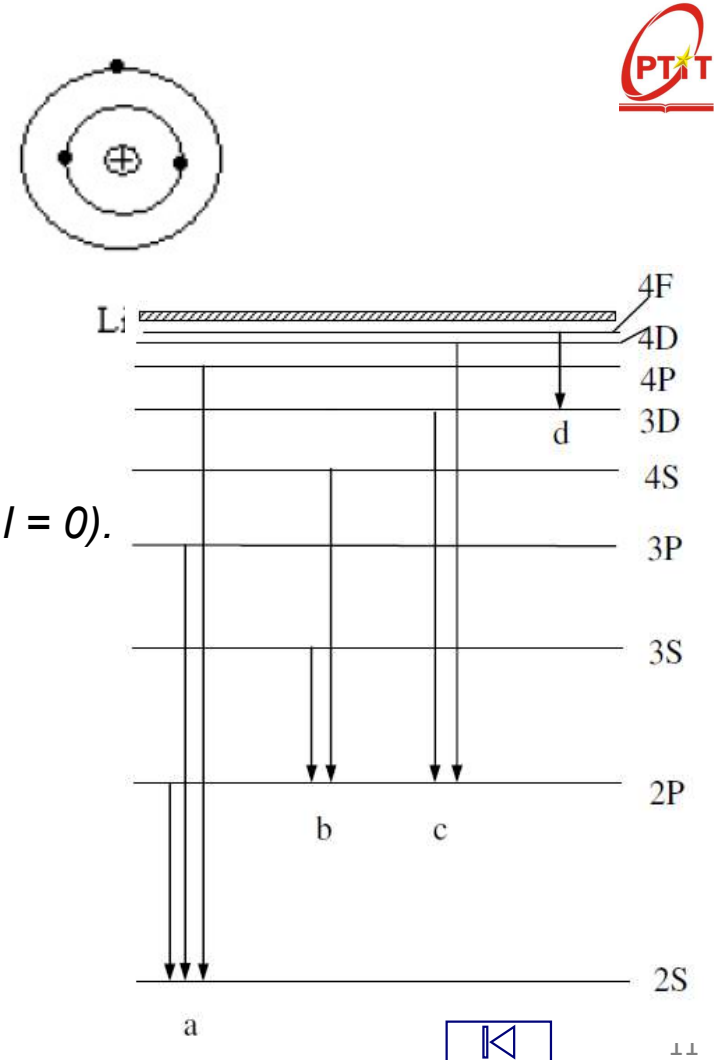
Tần số của bức xạ điện từ phát ra :

$h\nu = nP-2S$  : 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

#### Định nghĩa:

Là hiện tượng tách vạch quang phổ khi nguyên tử đặt trong từ trường.

#### 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.

Giá trị độ lớn của  $\vec{L}$ :  $L = \sqrt{l(l+1)}\hbar$  (với  $l = 0, 1, \dots, n-1$ ), liên quan đến  $\vec{L}$

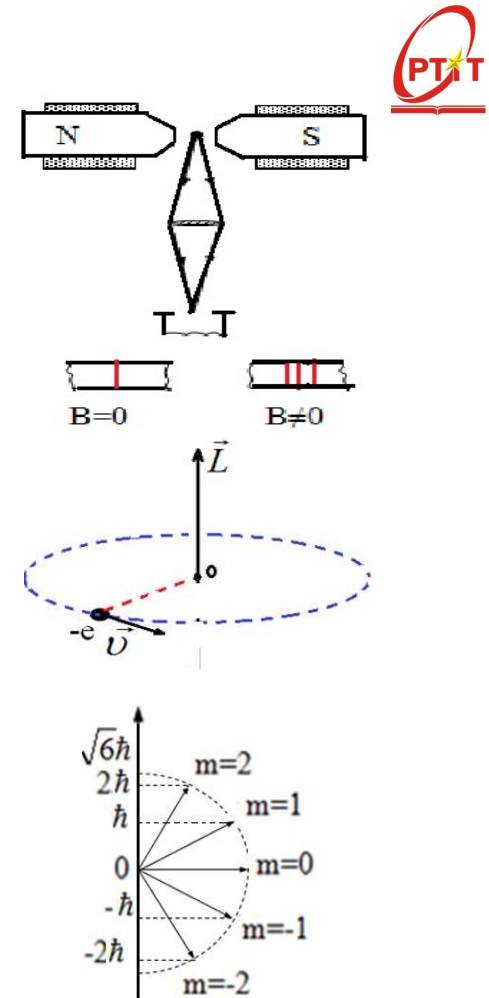
Hình chiếu  $\vec{L}$  lên một phương z bất kì:  $L_z = m\hbar$   $m = 0, \pm 1, \dots, \pm l$

$\rightarrow$  mỗi trị số của  $l$  có  $(2l + 1)$  trị số hình chiếu.

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

Hình chiếu  $\vec{L}$  lên phương z:  $L_z^0 = 0$   $L_z^1 = \hbar$   $L_z^{-1} = -\hbar$   $L_z^2 = 2\hbar$   $L_z^{-2} = -2\hbar$

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



### 3. Hiệu ứng Zeeman



#### 2. Mômen từ :

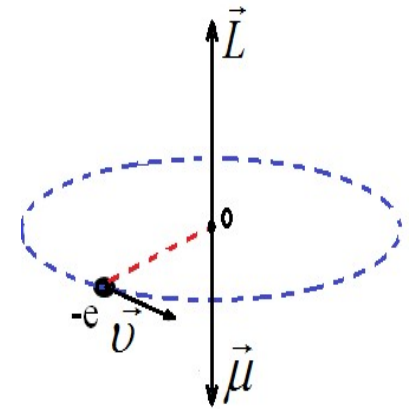
Dòng điện  $i \rightarrow$  moment từ :  $\vec{\mu} = i\vec{S}$

Theo quan điểm cổ điển:

+ Moment từ:  $\mu = iS = ef\pi r^2$

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

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



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

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

$\Rightarrow \mu_z$  bị lượng tử hóa.

### 3. Hiệu ứng Zeeman

#### 3. Giải thích hiện tượng Zeeman:

$e^-$  có mômen từ  $\vec{\mu}$  Trong từ trường  $\Rightarrow \vec{\mu} \parallel \vec{B}$

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

Chọn phương z là phương của  $\vec{B} \Rightarrow \Delta E = -\mu_z B = m\mu_B B$

$\Rightarrow e^-$  có năng lượng  $E'$  phụ thuộc vào số lượng tử từ  $m$ :  $E' = E + m\mu_B B$

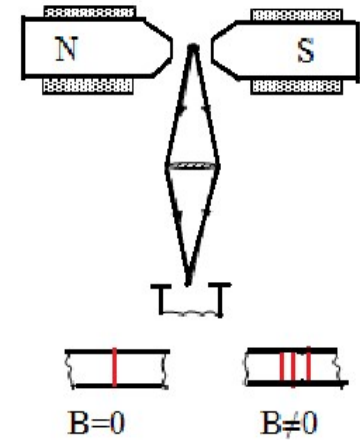
Khi  $e^-$  chuyển trạng thái  $E'_h \rightarrow E'_l$  phải theo qui tắc lựa chọn:

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

Và có tần số vạch quang phổ:

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

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



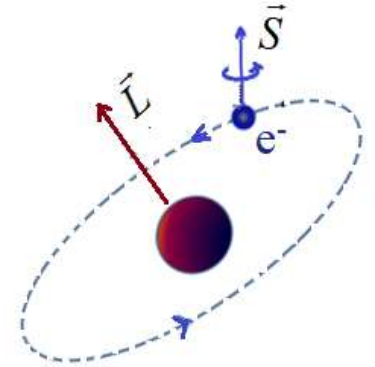
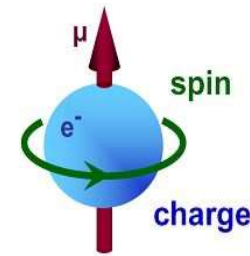
## 4. Spin của điện tử

**4.1. Định nghĩa**  $\vec{S}$  là mômen cơ riêng, đặc trưng cho sự vận động nội tại của  $e^-$  (chuyển động riêng của  $e^-$ )

❖ Sự tồn tại của spin điện tử

✓ Sự tách vạch quang phổ kim loại kiềm: Na (5890 Å, 5896 Å).

✓ Thí nghiệm Einstein và de Haas:  $\Rightarrow \frac{\mu}{L} = -\frac{e}{m_e}$

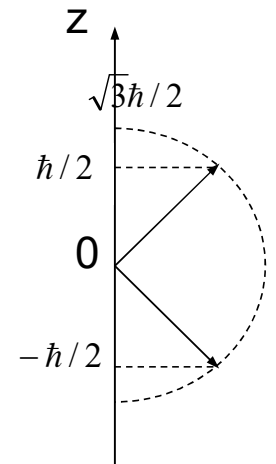


❖ Sự gián đoạn của  $\vec{S}$   $S = \sqrt{s(s+1)} \hbar$   $s = \frac{1}{2} \Rightarrow S = \frac{\sqrt{3}}{2} \hbar$

$$S_z = m_s \hbar = \pm \frac{\hbar}{2} \quad m_s = \pm \frac{1}{2} : \text{số lượng tử từ riêng.}$$

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

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



## 4. Spin của điện tử

### 4.2. Trạng thái và năng lượng của điện tử trong nguyên tử

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

$$J = \sqrt{j(j+1)}\hbar \quad j = \left| l \pm \frac{1}{2} \right| \quad \text{là số lượng tử toàn phần}$$

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

→ số trạng thái lượng tử khác nhau ứng với số lượng tử  $n$ :  $2 \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = 2n^2$

Kí hiệu trạng thái của  $e^-$ :  $nx_j$       Mức năng lượng của  $e^-$ :  $n^2 X_j$

Chỉ số **2** chỉ cấu tạo bội kép của mức **E**.



## 4. Spin của điện tử



Các trạng thái lượng tử, mức năng lượng khả dĩ của  $e^-$  hóa trị trong H và kim loại kiềm

$n$	$l$	$j$	Trạng thái của $e^-$ 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	$3p_{1/2}$	$3\ ^2P_{1/2}$
	2	3/2	$3p_{3/2}$	$3\ ^2P_{3/2}$
		3/2	$3d_{3/2}$	$3\ ^2D_{3/2}$
		5/2	$3d_{5/2}$	$3\ ^2D_{5/2}$

## 4. Spin của điện tử

### 4.3 .Giải thích vạch kép đôi trong quang phổ của kim loại kiềm

Do tương tác *spin-orbital*  $\rightarrow$  e<sup>-</sup> có năng lượng phụ, phụ thuộc vào sự định hướng của mômen spin nên phụ thuộc vào số lượng tử  $j$ .  $\rightarrow$  e<sup>-</sup> có  $E_{nlj}$

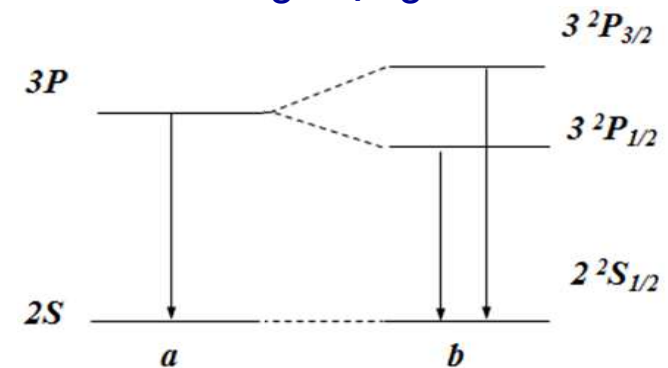
$j = \left| l \pm \frac{1}{2} \right| \rightarrow$  Mỗi mức  $E_{nlj}$  tách thành hai mức  $\rightarrow$  cấu trúc tế vi của mức năng lượng.

#### ➤ Cấu tạo bội của vạch quang phổ

Khi e<sup>-</sup> chuyển từ mức năng lượng cao sang mức thấp hơn, qui tắc lựa chọn đối với  $j$ :

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

*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:

$$h\nu_1 = 3^2P_{1/2} \rightarrow 2^2S_{1/2} \quad (\Delta l = -1, \Delta j = 0)$$

$$h\nu_2 = 3^2P_{3/2} \rightarrow 2^2S_{1/2} \quad (\Delta l = -1, \Delta j = -1)$$



## Bài tập ví dụ

---



**Bài 1:** Photon có năng lượng 16,5eV làm bật  $e^-$  ra khỏi nguyên tử H đang ở trạng thái cơ bản. Tính vận tốc của  $e^-$  khi bật ra khỏi nguyên tử H.

---

Động năng của  $e^-$  khi bật ra khỏi nguyên tử:

$$\frac{m_e v^2}{2} = h\nu - |E_1| = 16,5 - 13,5 = 3(eV) \rightarrow v = 10^6 m/s$$

### Bài 2:

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  $2,1\text{eV}$  và năng lượng liên kết của điện tử hoá trị ở trạng thái  $3S$  bằng  $5,14\text{eV}$ . (Cho hằng số Rydberg  $R = 3,29 \cdot 10^{15}\text{s}^{-1}$ ; hằng số Plank  $h = 6,625 \cdot 10^{-34}\text{J.s}$ )

Điện tử hóa trị trong nguyên tử Na thuộc lớp M ( $n = 3$ ). Trạng thái cơ bản là  $3s$  ứng với mức năng lượng  $3S$ , trạng thái kích thích thứ nhất là  $3p$ , ứng với mức năng lượng  $3P$ .

$$\text{Theo đề bài: } \frac{Rh}{(3+\Delta_s)^2} = 5,14\text{eV}, \frac{Rh}{(3+\Delta_s)^2} - \frac{Rh}{(3+\Delta_p)^2} = 2,1\text{eV} \rightarrow \frac{Rh}{(3+\Delta_p)^2} = 3,04\text{eV}$$

$$\text{Thay } R \text{ và } h : \rightarrow \Delta_p = -0,88$$

## Bài tập ví dụ



### Bài 3:

Nguyên tử hiđrô ở trạng thái cơ bản ( $n=1$ ) được kích thích bởi một ánh sáng đơn sắc có bước sóng  $\lambda$  xác định. Kết quả nguyên tử hiđrô đó chỉ phát ra ba vạch sáng quang phổ. Xác định bước sóng của ba vạch sáng đó và nói rõ chúng thuộc dãy vạch quang phổ nào? (Cho  $R = 3,29 \cdot 10^{15} \text{s}^{-1}$ )

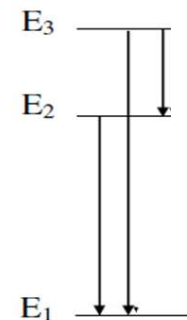
Nguyên tử phát ra ba vạch, như vậy phải ở trạng thái kích thích  $n = 3$ .  
Tần số của ba vạch sáng đó lần lượt là:

$$\nu_{31} = R \left( \frac{1}{1^2} - \frac{1}{3^2} \right) \quad \nu_{21} = R \left( \frac{1}{1^2} - \frac{1}{2^2} \right) \quad \nu_{32} = R \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{3^2} \right)$$

$$\lambda_{31} = 0,1216 \cdot 10^{-6} \text{m (dãy Lyman)}$$

$$\lambda_{21} = 0,1026 \cdot 10^{-6} \text{m (dãy Lyman)}$$

$$\lambda_{32} = 0,6565 \cdot 10^{-6} \text{m (dãy Balmer)}$$



## Bài tập ví dụ



**Bài 4:** Xác định các giá trị khả dĩ của mômen động lượng Orbital của điện tử trong nguyên tử hiđrô bị kích thích, cho biết năng lượng kích thích bằng  $E = 12\text{eV}$ .

$$L = \sqrt{\ell(\ell + 1)}\hbar \quad \ell = 0, 1, 2, \dots, n - 1 \quad E_n = -\frac{Rh}{n^2}$$

Năng lượng kích thích  $E = 12\text{eV}$  chính là năng lượng mà electron hấp thụ để nhảy từ trạng thái cơ bản lên trạng thái  $E_n \rightarrow E_n - E_1 = 12\text{eV}$

$$\begin{aligned} \rightarrow -\frac{Rh}{n^2} - \left(-\frac{Rh}{1}\right) &= 12 \rightarrow n = 3 \\ \rightarrow \ell &= 0, 1, 2 \\ \rightarrow L &= 0; \sqrt{2}\hbar; \sqrt{6}\hbar \end{aligned}$$



## Bài tập ví dụ



### Bài 5:

Gọi  $\alpha$  là góc giữa phương từ trường ngoài và mômen Orbital của electron trong nguyên tử. Tính góc  $\alpha$  nhỏ nhất, cho biết electron trong nguyên tử ở trạng thái d.

$$L = \sqrt{l(l+1)}\hbar \qquad L_z = m\hbar \qquad (m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l)$$

$$\rightarrow \cos \alpha = \frac{L_z}{L} = \frac{m\hbar}{\sqrt{l(l+1)}\hbar} = \frac{m}{\sqrt{l(l+1)}}$$

Trạng thái d  $\rightarrow l = 2$ ,  $\rightarrow$  số lượng tử  $m = 0, \pm 1, \pm 2$ .

Góc  $\alpha$  nhỏ nhất tương ứng với giá trị m lớn nhất,  $m = 2$

$$\cos \alpha = 2 / \sqrt{2.3} = 0,82 \rightarrow \alpha$$

## Bài tập ví dụ



**Bài 6:** Tìm bước sóng của các bức xạ phát ra khi nguyên tử Li chuyển trạng thái  $3S \rightarrow 2S$  cho biết các số bổ chính Rydberg đối với nguyên tử  $\Delta_s = -0,41, \Delta_p = -0,04$

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

$$E_{3S} - E_{2P} = \frac{hc}{\lambda_1} \rightarrow \lambda_1 = 0,82\mu m ;$$

$$E_{2P} - E_{2S} = \frac{hc}{\lambda_2} \rightarrow \lambda_2 = 0,68\mu m$$

