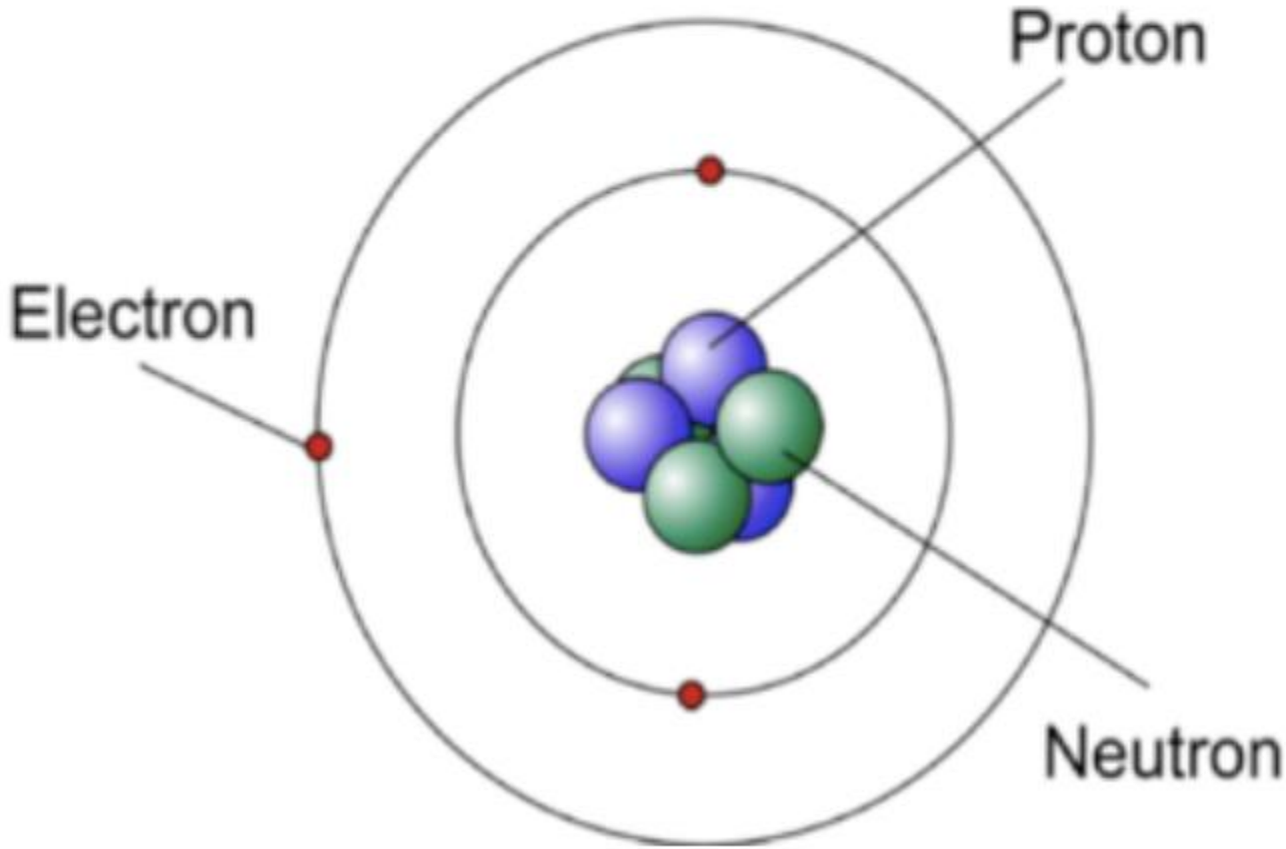
Chương 9

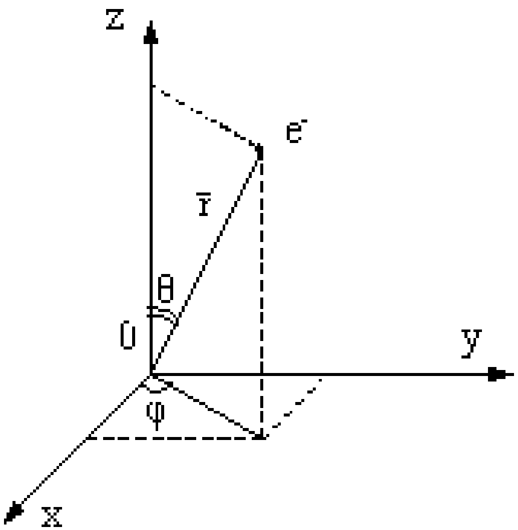
NGUYÊN TỬ


Proton
Electron
Neutron

§1. Nguyên tử hiđro

Thế năng tương tác của hạt nhân với e là:

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



Phương trình Schrodinger:

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

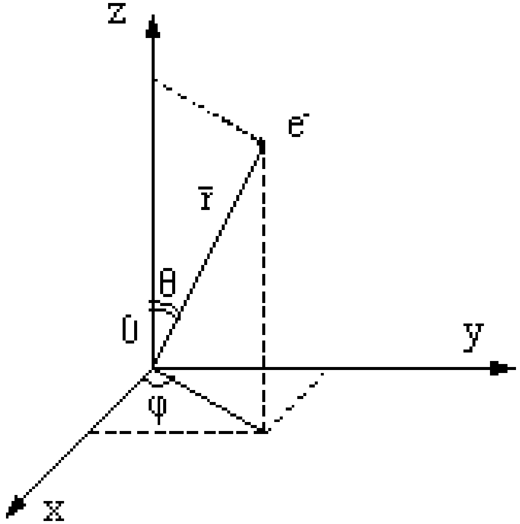
§1. Nguyên tử hiđro

Toán tử Laplace trong hệ tọa độ cầu:

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

Phương trình Schrodinder:

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



§1. Nguyên tử hiđro

Biểu thức năng lượng của electron trong nguyên tử H

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

R là hằng số Rydberg, R = $3{,}27.10^{15}s^{-1}$

Hàm sóng của electron trong nguyên tử H:

$$\Psi = \Psi_{n,\ell,m}$$

n = 1, 2, 3, 4,…. *là số lượng tử chính*

ℓ = 0, 1, 2, 3, …n-1 *là số lượng tử orbital(số lượng tử quỹ đạo)*

m = 0, ±1, ±2, …..±ℓ *là số lượng tử từ*

§1. Nguyên tử hiđro

Các kết luận:

1.Năng lượng của e trong nguyên tử hiđro biến thiên gián đoạn.

2.Năng lượng iôn hóa nguyên tử hiđro: $E = E_{\infty} - E_1 = Rh = 13{,}5eV$

3. Giải thích cấu tạo vạch của quang phổ nguyên tử hiđro:

Khi e chuyển từ mức năng lượng cao E_n xuống mức năng lượng thấp hơn $E_{n'}$ thì phát ra một phôtôn có năng lượng:

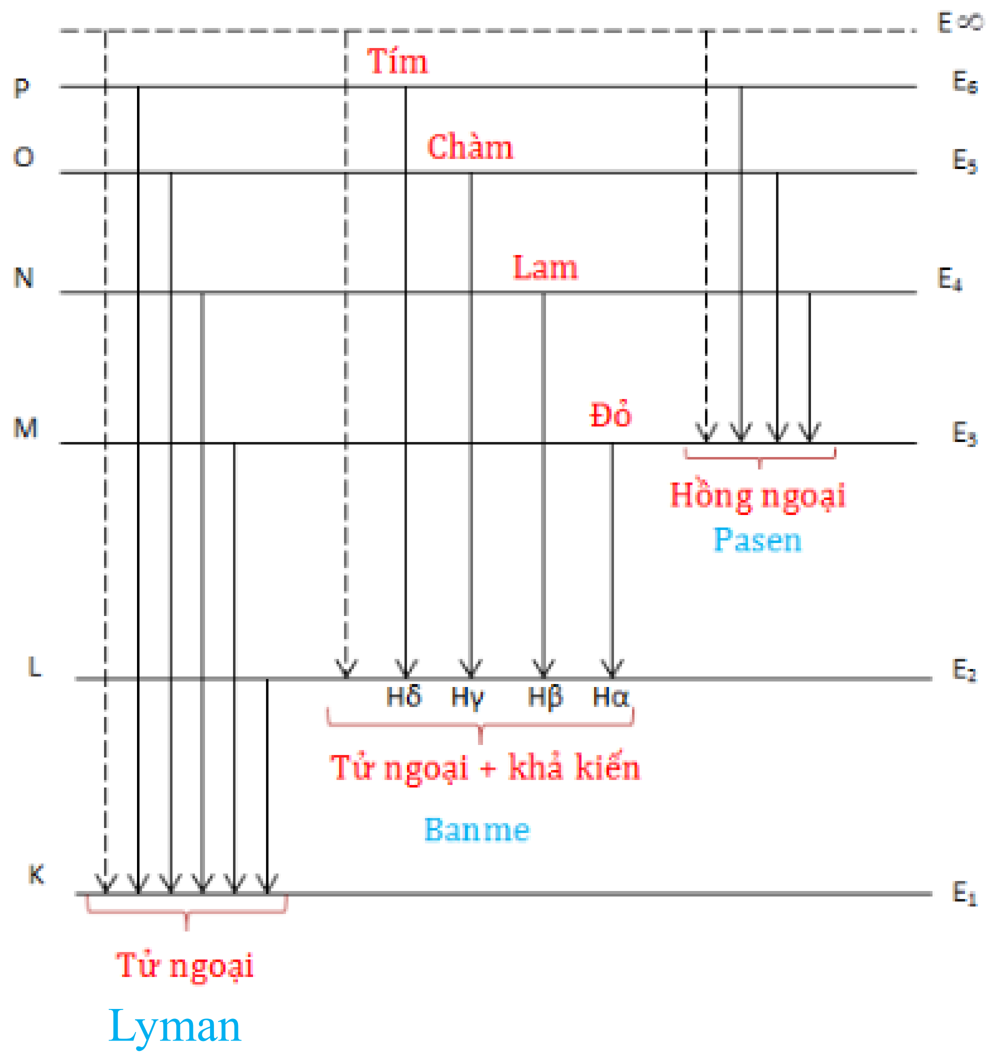
$$h\nu_{nn'} = E_n - E_{n'} = -\frac{Rh}{n^2} + \frac{Rh}{n'^2} \rightarrow \nu_{nn'} = R\left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2}\right)$$

Dãy Lyman: khi n’ = 1, n = 2,3,4,…

Dãy Balme: khi n’ = 2, n =3,4,5,6,…

Dãy Paschen: khi n’ = 3, n =4,5,6,…

§1. Nguyên tử hiđro



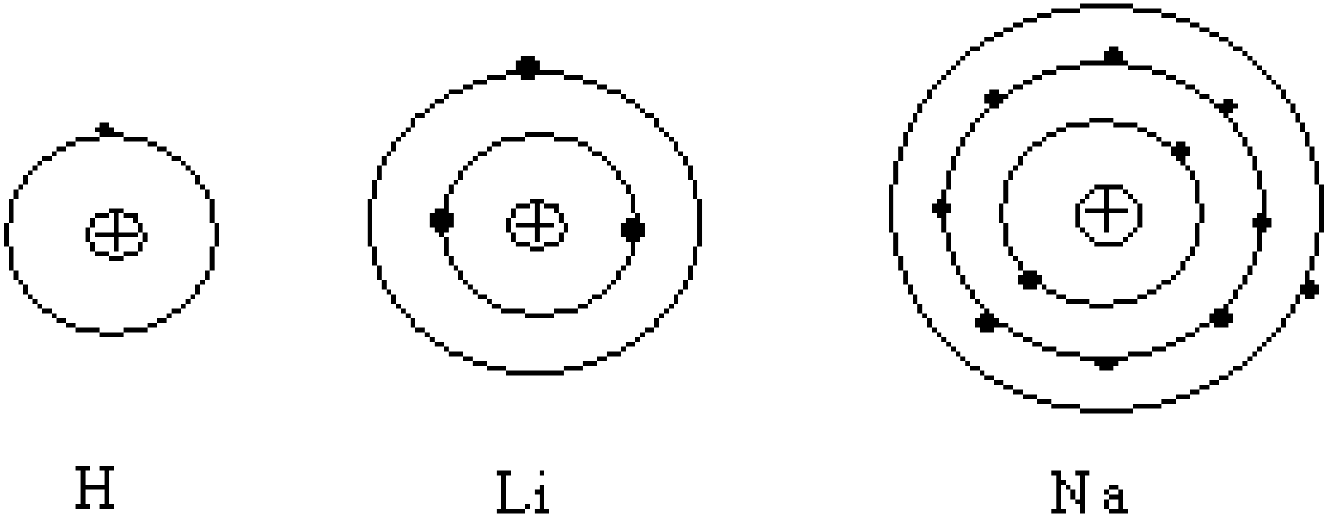
§1. Nguyên tử hiđro

4. Trạng thái lượng tử của e: Vì hàm sóng phụ thuộc vào 3 số lượng tử n, ℓ, m nên ứng với mỗi giá trị của n có số trạng thái lượng tử:

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

Như vậy ứng với mức năng lượng có n² trạng thái lượng tử khác nhau.

§2. Nguyên tử kim loại kiềm



§2. Nguyên tử kim loại kiềm

Năng lượng của e hóa trị đối với kim loại kiềm:

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

Δ_ℓ là số bổ chính Rydberg

Bảng sau cho các giá trị của số bổ chính của một số kim loại kiềm:

Z	Nguyên tố	Δ_s	Δ_p	Δ_d	Δ_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

§2. Nguyên tử kim loại kiềm

Kí hiệu trạng thái năng lượng nX

$\ell = 0$ 1 2 3

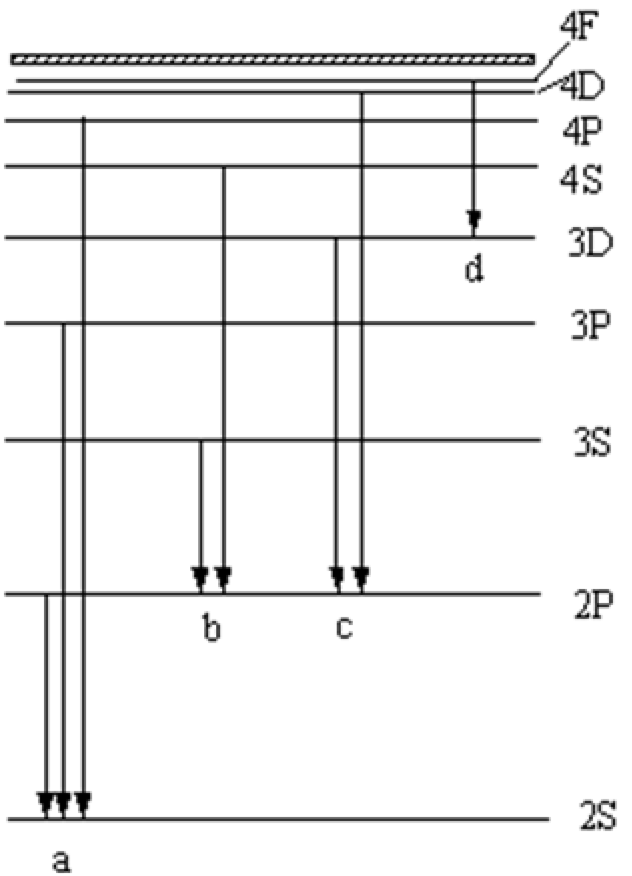
X S P D F

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

§2. Nguyên tử kim loại kiềm

Quang phổ nguyên tử kim loại kiềm

Khi e chuyển từ trạng thái có mức năng lượng cao xuống trạng thái có mức năng lượng thấp thì phải tuân theo quy tắc lựa chọn: $\Delta\ell = \pm 1$



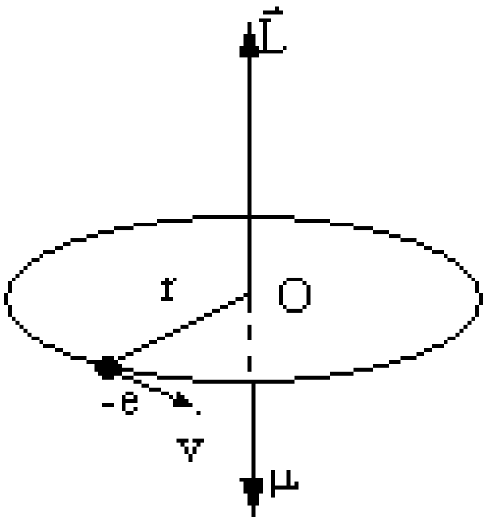
Sơ đồ quang phổ nguyên tử Li

a.dãy chính b. dãy phụ II

c.dãy phụ I d. dãy cơ bản

I. Mômen động lượng orbital $\vec{L}$

Theo quan điểm của cơ học cổ điển:



$$\vec{L} = \vec{r} \wedge m_e \vec{v}$$

$$L = r m_e v = m_e r^2 \omega = 2\pi \nu m_e r^2$$

Theo quan điểm của cơ học lượng tử:

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

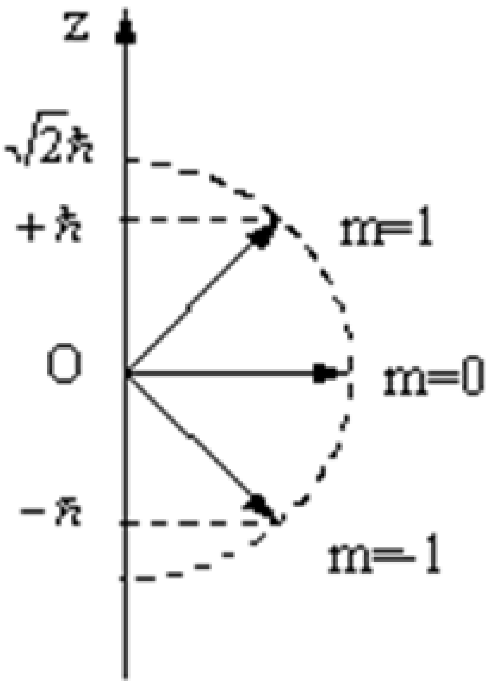
ℓ= 0, 1, 2, 3,… (n-1)

Hình chiếu của mômen động lượng orbital lên trục OZ bất kỳ:

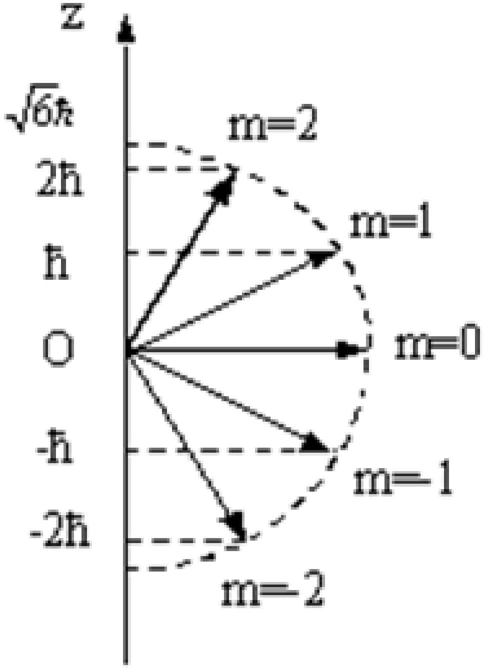
$$\boxed{L_z = m\hbar}$$

m= 0, ±1, ±2, ±3,…±ℓ

§3. Spin của electron



Sự lượng tử hóa trong không gian của L khi e ở trạng thái p

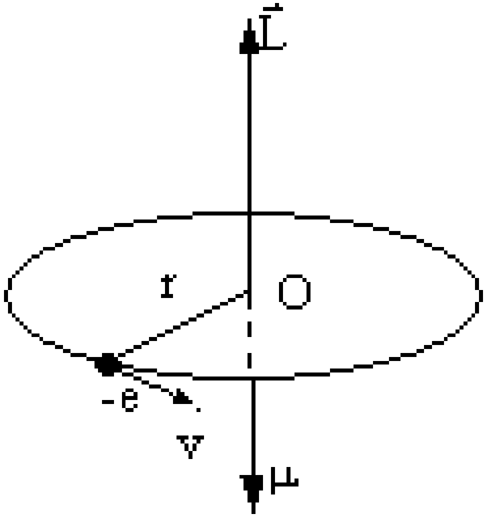


Sự lượng tử hóa trong không gian của L khi e ở trạng thái d

§3. Spin của electron

II. Mômen từ orbital $\vec{\mu}$

Theo quan điểm của cơ học cổ điển:



$$\mu = iS = ev\pi r^2$$

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

Hình chiếu cả mômen từ orbital lên trục OZ bất kỳ:

$$\mu_z = -\frac{e}{2m_e}L_z \quad \rightarrow \mu_z = -m\frac{e\hbar}{2m_e} = -m\mu_B$$

$$\text{trong đó } \mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 10^{-23}\,\text{Am}^2$$

§3. Spin của electron

III. Sự tồn tại của spin

Mômen động lượng riêng hay Spin có giá trị:

$$\boxed{S = \sqrt{s(s+1)}\,\hbar}$$

trong đó s là số lượng tử spin, đối với electron: $\boxed{s = \dfrac{1}{2}}$

Hình chiếu của spin lên trục OZ bất kỳ:

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

§3. Spin của electron

Mômen từ riêng của elctron:

$$\boxed{\overrightarrow{\mu_s} = -\frac{e}{m_e}\vec{S}}$$

IV. Trạng thái và năng lượng của electron trong nguyên tử:

Mômen động lượng toàn phần :

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

Độ lớn của mômen động lượng toàn phần:

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

$$\boxed{\text{trong đó } j = \left|\ell \pm \frac{1}{2}\right|}$$

§3. Spin của electron

Mômen từ spin của e tương tác với mômen từ orbital, do đó năng lượng của e phụ thuộc vào 3 số lượng tử n,ℓ, j

Kí hiệu trạng thái năng lượng của e: $n\,^2X_j$

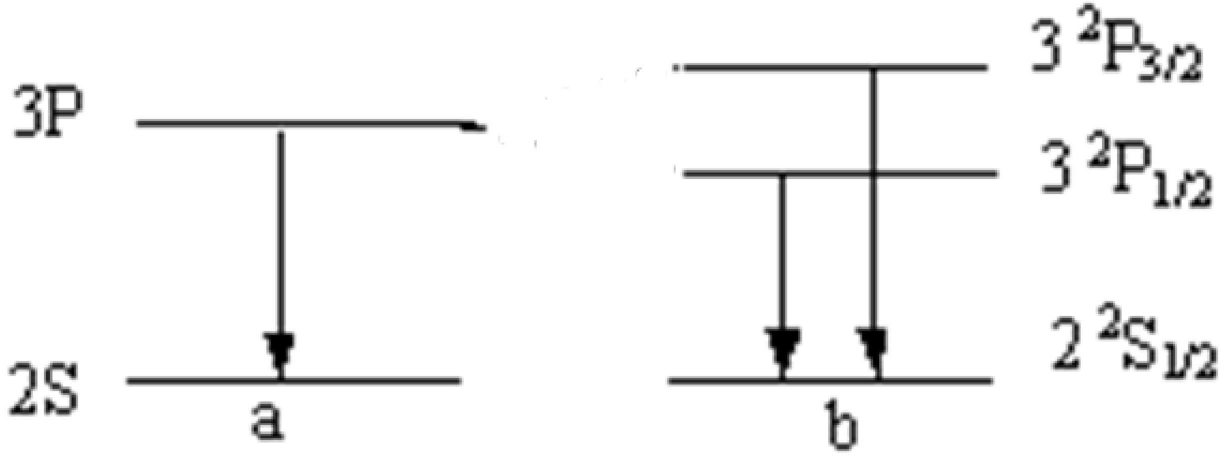
n	ℓ	j	Trạng thái của electrôn hóa trị	Mức năng lượng
1	0	1/2	$1s_{1/2}$	$1\ ^2S_{1/2}$
2	0	1/2	$2s_{1/2}$	$2\ ^2S_{1/2}$
	1	1/2	$2p_{1/2}$	$2\ ^2P_{1/2}$
		3/2	$2p_{3/2}$	$2\ ^2P_{3/2}$
3	0	1/2	$3s_{1/2}$	$3\ ^2S_{1/2}$
	1	1/2	$3p_{1/2}$	$3\ ^2P_{1/2}$
		3/2	$3p_{3/2}$	$3\ ^2P_{3/2}$
	2	3/2	$3d_{3/2}$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

§3. Spin của electron

V. Cấu tạo bội của quang phổ:

Khi elecron chuyển từ mức năng lượng cao sang mức năng lượng thấp hơn còn phải tuân theo quy tắc lựa chọn:

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



Năng lượng của electron trong nguyên tử H: $E_n = -\frac{Rh}{n^2}$

Năng lượng của e hóa trị đối với kim loại kiềm: $E_{n\ell} = -\frac{Rh}{(n+\Delta_\ell)^2}$

Khi e chuyển từ trạng thái có mức năng lượng cao xuống trạng thái có mức năng lượng thấp thì phải tuân theo quy tắc lựa chọn: $\Delta\ell = \pm 1$

Mô men động lượng Orbital: $L = \sqrt{\ell(\ell+1)}\,\hbar$

Trong đó: ℓ= 0, 1, 2, 3,… (n-1)

Hình chiếu mô men động lượng Orbital: $L_z = m\hbar$

Trong đó m= 0, ±1, ±2, ±3,…±ℓ

Nếu kể đến spin, mô men động lượng toàn phần: $J = \sqrt{j(j+1)}\hbar$

$$trong\ đó\ \ j = \left|\ell \pm \frac{1}{2}\right|$$

Khi elecron chuyển từ mức năng lượng cao sang mức năng lượng thấp hơn còn phải tuân theo quy tắc lựa chọn:

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

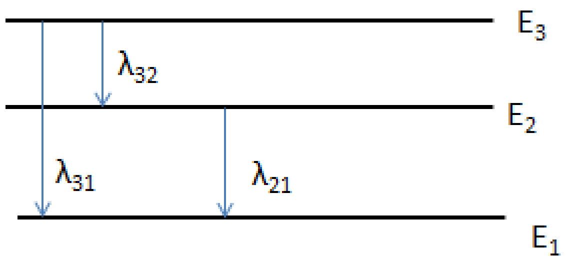
Ví dụ

Ví dụ 1. Tính năng lượng kích thích (ra eV) cần dùng để khi kích thích các nguyên tử hiđrô thì quang phổ của nó chỉ có ba vạch. Tìm bước sóng của ba vạch đó.

Để electron phát ra 3 vạch phổ thì phải cung cấp cho electron năng lượng để e chuyển từ mức năng lượng E_1 lên E_3

Bước sóng của 3 vạch đó là:

$$\frac{hc}{\lambda_{21}} = E_2 - E_1 = -\frac{Rh}{4} + \frac{Rh}{1} \rightarrow \lambda_{21} =$$



$$\frac{hc}{\lambda_{31}} = E_3 - E_1 = -\frac{Rh}{9} + \frac{Rh}{1} \rightarrow \lambda_{31} =$$

$$\frac{hc}{\lambda_{32}} = E_3 - E_2 = -\frac{Rh}{9} + \frac{Rh}{4} \rightarrow \lambda_{32} =$$

Ví dụ

Ví dụ 2. Xác định bước sóng lớn nhất và nhỏ nhất trong dãy Paschen trong quang phổ hiđrô.

Bước sóng lớn nhất trong dãy Paschen

$$\frac{hc}{\lambda_{\max}} = E_4 - E_3 = -\frac{Rh}{16} + \frac{Rh}{9} \rightarrow \lambda_{\max} = \frac{c}{R\left(\frac{1}{9} - \frac{1}{16}\right)} =$$

Bước sóng nhỏ nhất trong dãy Paschen

$$\frac{hc}{\lambda_{\min}} = E_{\infty} - E_3 = -\frac{Rh}{\infty} + \frac{Rh}{9} \rightarrow \lambda_{mim} = \frac{c}{\frac{R}{9}} =$$

Ví dụ

Ví dụ 3. Tính độ lớn và giá trị hình chiếu của mômen động lượng orbital của electrôn trong nguyên tử ở trạng thái f.

Độ lớn của momen động lượng orbital của electron ở trạng thái f:

$$L = \sqrt{\ell(\ell+1)}\,\hbar = \sqrt{12}\hbar$$

Hình chiếu của momen động lượng orbital của electron ở trạng thái f:

$$L_z = m\hbar; m = 0; \pm 1; \pm 2; \pm 3$$

$$\rightarrow L_z = 0; \pm\hbar; \pm 2\hbar; \pm 3\hbar$$

Ví dụ

Ví dụ 4. Nguyên tử Na chuyển từ trạng thái năng lượng 4S $\rightarrow$ 3S. Tìm bước sóng của các bức xạ phát ra. Cho các số bổ chính Rydberg đối với Na là

$\Delta_S = -1{,}37,\ \Delta_P = -0{,}9$

Electron hóa trị trong nguyên tử Na chuyển từ mức 4S về 3P, sau đó 3P về 3S phát ra 2 vạch quang phổ

$$\frac{hc}{\lambda_1} = E_{4S} - E_{3P} = -\frac{Rh}{(4+\Delta_S)^2} + \frac{Rh}{(3+\Delta_P)^2} \rightarrow \lambda_1 =$$

$$\frac{hc}{\lambda_2} = E_{3P} - E_{3S} = -\frac{Rh}{(3+\Delta_P)^2} + \frac{Rh}{(3+\Delta_S)^2} \rightarrow \lambda_2 =$$