



VẬT LÝ 2

Khoa Vật lý



CHƯƠNG 11

VẬT LÝ

NGUYÊN TỬ

11.1. Nguyên tử Hidro

11.2. Nguyên tử kim loại kiềm

11.3. Sự lượng tử hóa của moment động lượng và moment từ. Hiệu ứng Zeeman

11.4. Spin của electron

11.5. Các trạng thái lượng tử của nguyên tử Hidro

11.6. Nguyên lý Pauli và nguyên lý năng lượng

Chương 11. VẬT LÝ NGUYÊN TỬ

11.1. Nguyên tử Hidro

(1) Nguyên tử Hidro: Gồm 01 hạt nhân mang điện tích dương $+e$ nằm ở trung tâm (proton), và 01 electron chuyển động xung quanh.

Chọn gốc toạ độ tại hạt nhân, r là khoảng cách từ hạt nhân đến electron.

Ta có: $U = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}$ là thế năng tương tác giữa hạt nhân và electron.

Phương trình Schrodinger: $\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \right] \psi = 0$

Kết quả giải phương trình trên: Xuất hiện các số lượng tử n (số lượng tử chính), l (số lượng tử quỹ đạo), m_l (số lượng tử từ).

Chương 11. VẬT LÝ NGUYÊN TỬ

11.1. Nguyên tử Hidro

(2) **Số lượng tử chính (n)**: Năng lượng của nguyên tử Hidro bị lượng tử hoá thành các mức E_n , cụ thể:

$$E_n = -\frac{m_e}{2} \left(\frac{e^2}{4\pi\hbar\epsilon_0} \right)^2 \frac{1}{n^2}, \text{ với } n = 1, 2, 3, \dots \text{ là số lượng tử chính.}$$

$$\text{Hay: } E_n = -\frac{13,6}{n^2} \text{ (eV),}$$

Trong Vật lý nguyên tử, các mức năng lượng tương ứng với $n = 1, 2, 3, 4, \dots$ được kí hiệu bằng các chữ cái K, L, M, N, ...;

→ Khi các electron ở các mức năng lượng **cao chuyển xuống mức năng lượng thấp** hơn thì **phát ra bức xạ → quang phổ vạch** (các dãy Lyman, Balmer, Paschen, Brackett, ...)

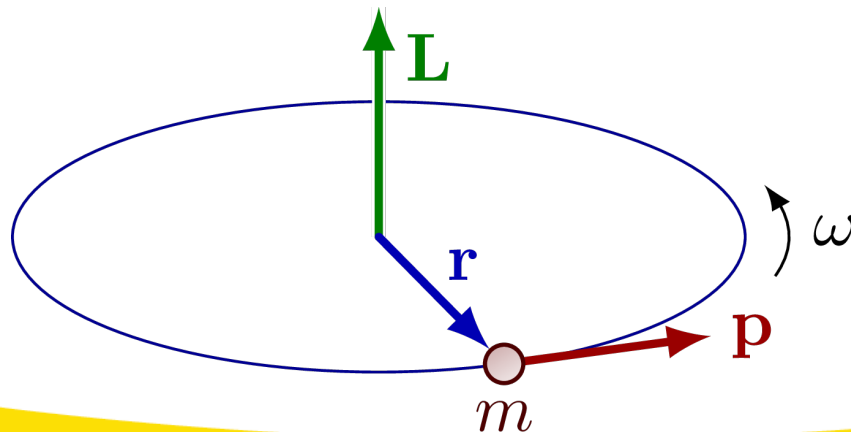
→ Khi các electron ở các mức **thấp nhận năng lượng phù hợp** thì sẽ chuyển lên **các mức cao hơn**. Năng lượng cần để electron **bứt hoàn toàn** ra khỏi nguyên tử (mức ∞) gọi là **năng lượng ion hoá**.

Chương 11. VẬT LÝ NGUYÊN TỬ

11.1. Nguyên tử Hidro

(3) Số lượng tử quỹ đạo (l): Electron quay xung quanh hạt nhân sẽ có moment quỹ đạo \vec{L} , độ lớn của \vec{L} là L cũng bị lượng tử hoá và được xác định bằng *số lượng tử quỹ đạo* l , cụ thể là: $L = \sqrt{l(l+1)}\hbar$.

Để kí hiệu cho số lượng tử quỹ đạo l , người ta sử dụng các chữ cái thường s, p, d, f, \dots tương ứng với $l = 0, 1, 2, 3, \dots, n-1$.



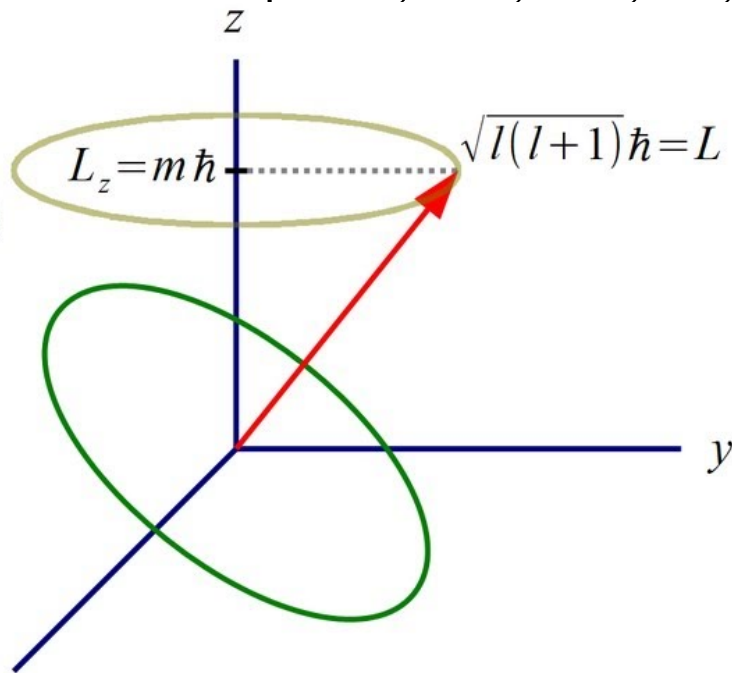
Chương 11. VẬT LÝ NGUYÊN TỬ

11.1. Nguyên tử Hidro

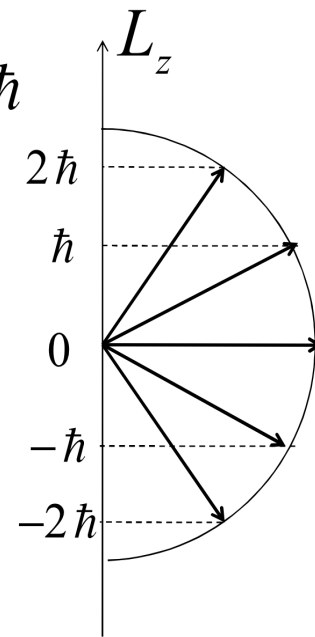
(4) **Số lượng tử từ (m_l):** Hình chiếu của moment quỹ đạo \vec{L} lên phương z bất kỳ cũng bị lượng tử hoá và được xác định bởi:

$$L_z = m_l \cdot \hbar$$

Với $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$, được gọi là *số lượng tử từ quỹ đạo*.



- Ví dụ: ứng với $l = 2$, ta có:** $L = \sqrt{l(l+1)} \hbar = \sqrt{6} \hbar$
 $m = 0, \pm 1, \pm 2$



Chương 11. VẬT LÝ NGUYÊN TỬ

11.1. Nguyên tử Hidro

VD1 (BT 11.1): Một nguyên tử hiđrô ở trạng thái với $n = 3$, $l = 2$ và $m_l = -2$.

Hãy xác định:

- a) Năng lượng của nguyên tử.
- b) Độ lớn momen quỹ đạo của electron.
- c) Thành phần z của momen quỹ đạo đó.

Giải:

$$\text{a) } E = -\frac{13,6}{n^2} = -1,51 \text{ eV}$$

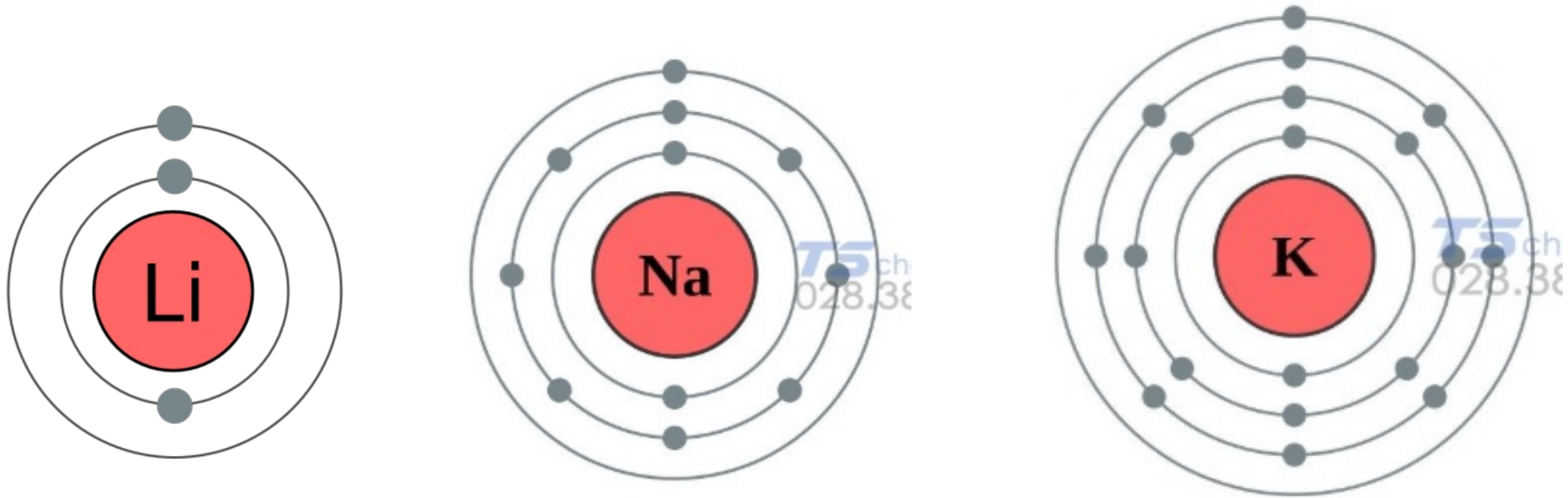
$$\text{c) } L_z = m_l \hbar = -2\hbar$$

$$\text{b) } L = \sqrt{l(l+1)}\hbar = \sqrt{6}\hbar$$

Chương 11. VẬT LÝ NGUYÊN TỬ

11.2. Nguyên tử kim loại kiềm

(1) Năng lượng của electron hoá trị trong kim loại kiềm (Li, Na, K, Rb, Cs,...)



Chương 11. VẬT LÝ NGUYÊN TỬ

11.2. Nguyên tử kim loại kiềm

(1) Năng lượng của electron hoá trị trong KL kiềm (Li, Na, K, Rb, Cs,...)

$$E_{n\ell} = -\frac{1}{(n + \Delta_{\ell})^2} \frac{m_e e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2}$$

Trong đó Δ_l là số hiệu chỉnh phụ thuộc vào số lượng tử l.

| Z | Nguyên tố kim loại kiềm | 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 |

Chương 11. VẬT LÝ NGUYÊN TỬ

11.2. Nguyên tử kim loại kiềm

(1) Năng lượng của electron hoá trị trong KL kiềm (Li, Na, K, Rb, Cs,...)

Trong Vật lý nguyên tử, các mức năng lượng được kí hiệu là nX ; với n là số lượng tử chính, X phụ thuộc vào số lượng tử quỹ đạo l .

Cụ thể:

$l = 0 \quad 1 \quad 2$
 $X = S \quad P \quad D$

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

| n | l | 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 | |

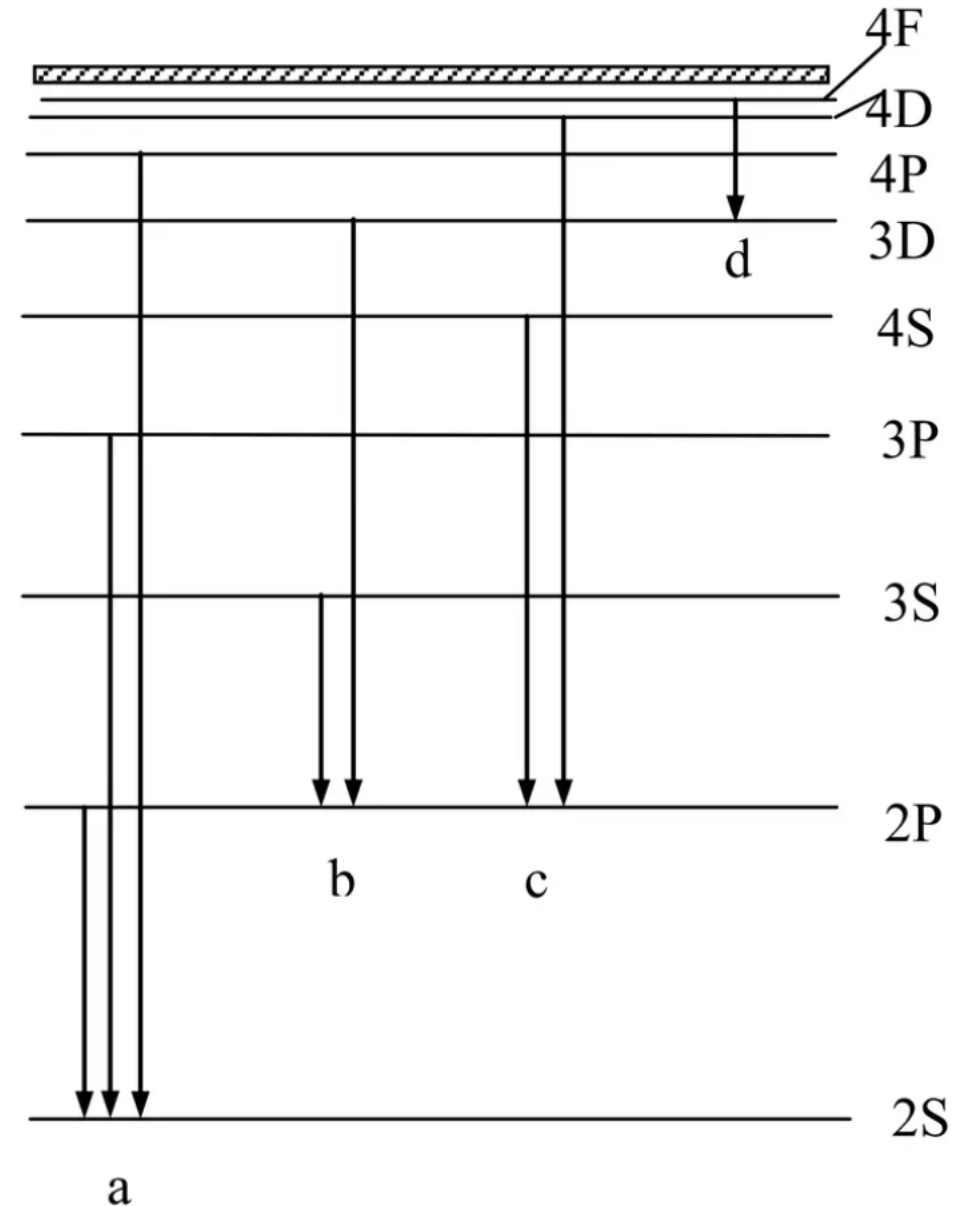
Chương 11. VẬT LÝ NGUYÊN TỬ

11.2. Nguyên tử kim loại kiềm

(2) Quang phổ của KL kiềm

Tương tự nguyên tử Hidro, các nguyên tử kiềm khi bị kích thích hoặc phát xạ cũng sẽ chuyển mức. Sự chuyển mức tuân theo quy tắc: $\Delta l = \pm 1$

Ví dụ: Nguyên tử Li có 3 e, trong đó 2 e thuộc mức 1S, e hoá trị ở mức 2S ($n = 2, l = 0$) sẽ có những khả năng chuyển mức như hình bên.



Chương 11. VẬT LÝ NGUYÊN TỬ

11.3. Sự lượng tử hóa của moment động lượng và moment từ. Hiệu ứng Zeeman

(1) **Moment động lượng quỹ đạo:** Electron quay xung quanh hạt nhân sẽ có moment quỹ đạo \vec{L} có hướng thay đổi, nhưng độ lớn của \vec{L} là L cố định, bị lượng tử hoá và được xác định bằng: $L = \sqrt{l(l+1)}\hbar$, với l là số lượng tử quỹ đạo.

(2) **Hình chiếu của moment quỹ đạo \vec{L} lên phương z bất kỳ cũng bị lượng tử hoá và được xác định bởi:**

$$L_z = m_l \cdot \hbar$$

Với $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$ là số lượng tử từ quỹ đạo. Như vậy, với mỗi giá trị của l thì có $2l + 1$ giá trị của m_l .

Chương 11. VẬT LÝ NGUYÊN TỬ

11.3. Sự lượng tử hóa của moment động lượng và moment từ. Hiệu ứng Zeeman

(3) **Moment từ:** Electron quay xung quanh hạt nhân sẽ tạo ra một dòng điện ngược lại. Dòng điện này có moment từ $\vec{\mu}_L = I \cdot \vec{S}$ *ngược chiều với \vec{L}* .

Dòng điện $I = e.f$, với f là tần số quay của electron, $e = 1,6 \cdot 10^{-19}$ C.

Do đó: $\mu_L = e.f.\pi.r^2$

Mặt khác, moment động lượng:

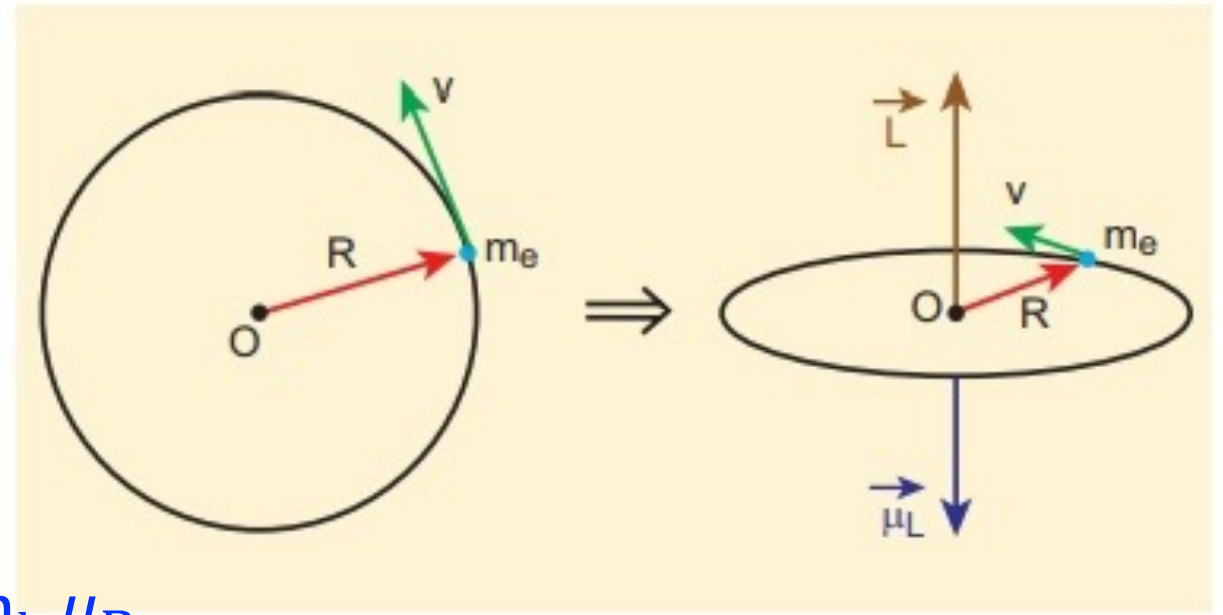
$$L = m_e.v.r = m_e.2\pi.f.r^2$$

So sánh hai biểu thức, suy ra:

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

Hình chiếu lên phương z của $\vec{\mu}_L$:

$$\mu_L = -\frac{e}{2m_e} L_z = -\frac{e}{2m_e} \cdot m_l \cdot \hbar = -m_l \cdot \mu_B$$



Chương 11. VẬT LÝ NGUYÊN TỬ

11.3. Sự lượng tử hóa của moment động lượng và moment từ. Hiệu ứng Zeeman

(3) Moment từ:

Hình chiếu lên phương z của $\vec{\mu}_L$:

$$\mu_L = -\frac{e}{2m_e} L_z = -\frac{e}{2m_e} \cdot m_l \cdot \hbar = -m_l \cdot \mu_B$$

Với $\mu_B = \frac{e}{2m_e} \cdot \hbar \approx 10^{-23} \text{ A.m}^2$

gọi là magneton Bohr

Như vậy, *hình chiếu của moment từ của electron quay quanh hạt nhân luôn là một số nguyên lần magneton Bohr (nghĩa là bị lượng tử hoá).*

Khi electron biến đổi trạng thái thì m_l phải tuân theo quy tắc lựa chọn:

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

Chương 11. VẬT LÝ NGUYÊN TỬ

11.3. Sự lượng tử hóa của moment động lượng và moment từ. Hiệu ứng Zeeman

(4) Hiệu ứng Zeeman:

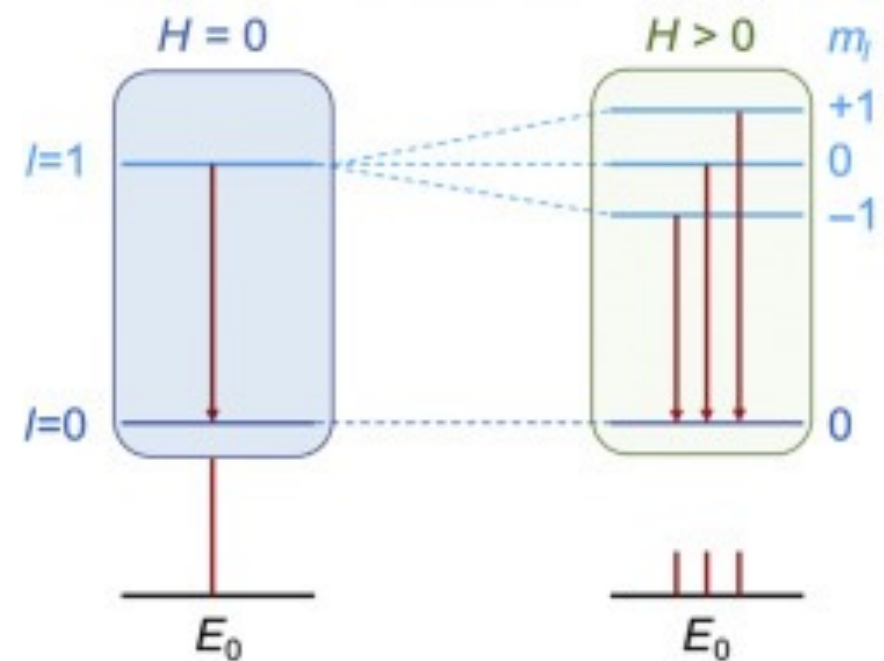
* Thí nghiệm:

So sánh phổ nguyên tử khi được đặt trong từ trường và khi từ trường ngoài bằng 0.

* Kết quả:

Phổ do nguyên tử phát ra bị tách vạch khi đặt trong từ trường $H \neq 0$.

=> Sự tách các vạch quang phổ khi nguyên tử được đặt trong từ trường gọi là hiệu ứng Zeeman.



$$E = m_l \mu_B H$$

Chương 11. VẬT LÝ NGUYÊN TỬ

11.3. Sự lượng tử hóa của moment động lượng và moment từ. Hiệu ứng Zeeman

(4) Hiệu ứng Zeeman:

* Giải thích:

Khi nguyên tử H đặt trong từ trường B, electron của nó sẽ có thêm năng lượng phụ:

$$\Delta E = -\mu_L B = m_l \cdot \mu_B B$$

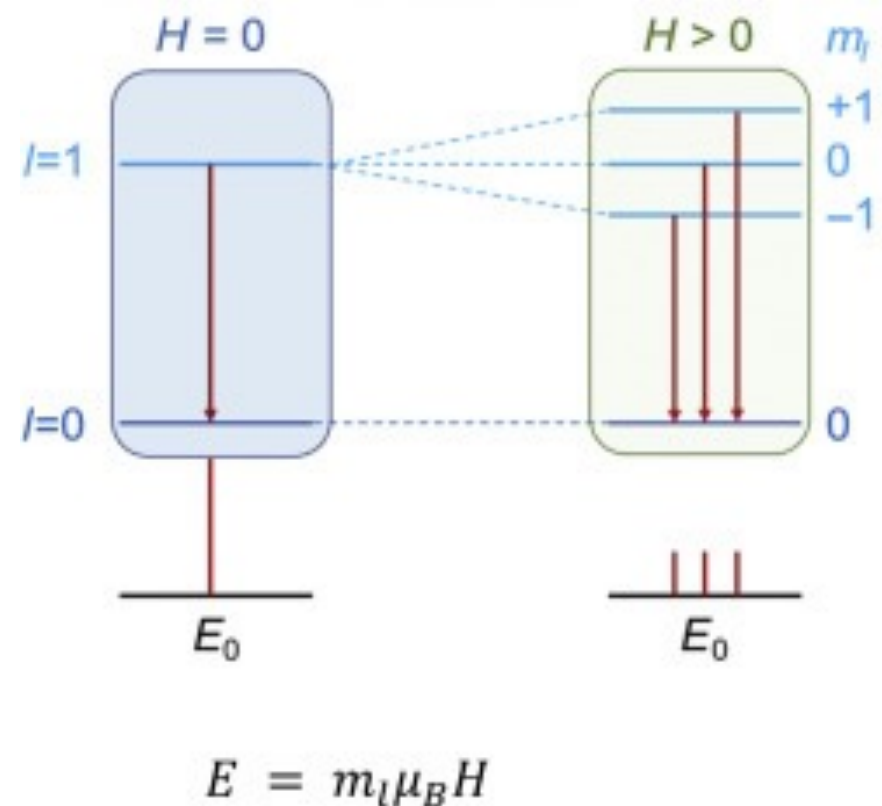
Năng lượng của electron lúc này:

$$E' = E + m_l \cdot \mu_B B$$

Khi electron chuyển mức, tần số phát ra:

$$\nu' = \frac{E'_2 - E'_1}{h} = \frac{E_2 - E_1}{h} + \frac{(m_{l2} - m_{l1})\mu_B B}{h}$$

Do $\Delta m_l = 0, \pm 1$, nên phổ bị tách thành 3 vạch.



Chương 11. VẬT LÝ NGUYÊN TỬ

11.4. Spin của electron

(1) Spin của electron:

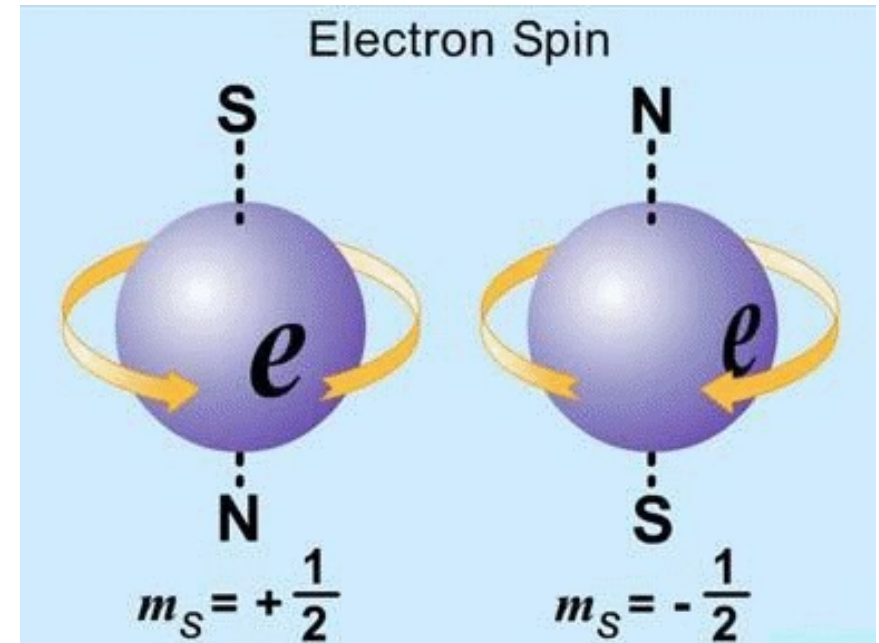
Ngoài ba số lượng tử n , l , m_l , thực nghiệm cho thấy electron còn có số lượng tử thứ 4 liên quan đến chuyển động nội tại của nó gọi là spin, ký hiệu s , giá trị $s = 1/2$.

Moment động lượng của electron liên quan đến chuyển động này được ký hiệu là S :

$$S = \sqrt{s(s+1)}\hbar, \text{ gọi là moment spin.}$$

Lúc này, hàm sóng mô tả trạng thái của vi hạt có dạng: ψ_{nlms}

Giá trị $2s+1$ được gọi là độ bội của trạng thái.



Chương 11. VẬT LÝ NGUYÊN TỬ

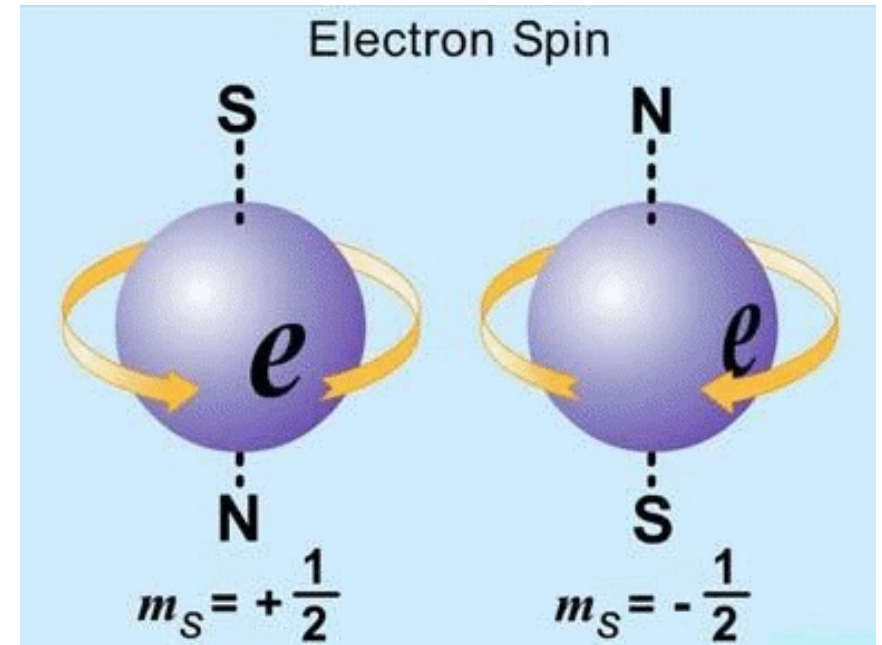
11.4. Spin của electron

(2) Thành phần hình chiếu trên phương z của moment spin:

Tương tự moment quỹ đạo, hình chiếu của moment spin cũng bị lượng tử hoá: $S_z = m_s \cdot \hbar$, với $m_s = \pm \frac{1}{2}$ gọi là số lượng tử từ spin.

$m_s = -\frac{1}{2}$ gọi là spin hướng xuống,

$m_s = +\frac{1}{2}$ gọi là spin hướng lên (hình bên).



Quy tắc lựa chọn: $\Delta m_s = 0 \rightarrow$ khi chuyển mức phải đảm bảo spin không đổi.

Chương 11. VẬT LÝ NGUYÊN TỬ

11.4. Spin của electron

(3) Moment toàn phần \vec{J} :

- Trong nguyên tử Hidro, electron có cả moment quỹ đạo \vec{L} và moment spin \vec{S} . Do đó: $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ gọi là moment toàn phần.

Độ lớn của \vec{J} cũng bị lượng tử hoá theo biểu thức: $J = \sqrt{j(j+1)}\hbar$ với j được gọi là số lượng tử toàn phần: $j = l + 1/2$ hoặc $j = l - 1/2$

- Tương tự moment quỹ đạo và moment spin, hình chiếu của moment toàn phần cũng bị lượng tử hoá: $J_z = m_j \cdot \hbar$

m_j được gọi là số lượng tử từ toàn phần.

Quy tắc lựa chọn: $\Delta j = 0; \pm 1$

* Trạng thái năng lượng của nguyên tử được ký hiệu bằng **số hạng nguyên tử**:

$$n^{2s+1}l_j$$

Ví dụ: $3^2D_{5/2}$, nghĩa là $n = 3, l = 2, s = 1/2, j = 5/2$

Chương 11. VẬT LÝ NGUYÊN TỬ

11.5. Các trạng thái lượng tử của nguyên tử Hidro

| Số lượng tử | n | l | m_l | m_s |
|---------------------------|---|--|---|--|
| Ý nghĩa | Số lượng tử chính, cho biết electron thuộc lớp nào trong nguyên tử. | Số lượng tử quỹ đạo, cho biết electron thuộc phân lớp nào. | Số lượng tử từ quỹ đạo, cho biết electron có vị trí nào trong phân lớp. | Số lượng tử từ spin, cho biết chiều quay của electron. |
| Đại lượng bị lượng tử hoá | $E_n = -\frac{13,6}{n^2} \text{ (eV)}$ | $L = \sqrt{l(l+1)}\hbar$ | $L_z = m_l \cdot \hbar$ | $S_z = m_s \cdot \hbar$ |
| Giá trị | 1, 2, 3, ... | 0, 1, 2, ..., $n - 1$ | 0, ± 1 , ± 2 , ..., $\pm l$ | $\pm 1/2$ |

* Lưu ý: e trong cùng một lớp thì có cùng n , cùng một phân lớp thì có cùng n và l .

Chương 11. VẬT LÝ NGUYÊN TỬ

11.5. Các trạng thái lượng tử của nguyên tử Hidro

| n | l | m_l | m_s | Lớp | Số trạng thái trong lớp | Lớp con | Số trạng thái trong lớp con |
|-----|-----|----------------------|-----------|-----|----------------------------|------------|--------------------------------|
| 1 | 0 | 0 | $\pm 1/2$ | K | 2 | 1s | 2 |
| 2 | 0 | 0 | $\pm 1/2$ | | | 2s | 2 |
| 2 | 1 | 0, ± 1 | $\pm 1/2$ | L | 8 | 2p | 6 |
| 3 | 0 | 0 | $\pm 1/2$ | | | 3s | 2 |
| 3 | 1 | 0, ± 1 | $\pm 1/2$ | M | 18 | 3p | 6 |
| 3 | 2 | 0, ± 1 , ± 2 | $\pm 1/2$ | | | 3d | 10 |

Chương 11. VẬT LÝ NGUYÊN TỬ

11.6. Nguyên lí Pauli và nguyên lí năng lượng

(1) Nguyên lý loại trừ Pauli

- Ở mỗi trạng thái năng lượng xác định bằng 4 thông số n, l, m_l, m_s chỉ tồn tại không quá 01 electron \rightarrow số electron trong mỗi phân lớp (lớp con) là $2(2l+1)$; số electron tối đa trong một lớp là $2n^2$.
- Nguyên lý cực tiểu năng lượng: Các electron trong nguyên tử được sắp xếp từ mức năng lượng thấp đến mức năng lượng cao, nghĩa là theo thứ tự sau: $1s\ 2s\ 2p\ 3s\ 3p\ 4s\ 3d\ 4p\ 5s\ 4d\ 5p\ 6s\ 4f\ 5d\ 6p\ 7s\ 6d\ \dots$

Chương 11. VẬT LÝ NGUYÊN TỬ

VD2 (BT 11.4):

a. Từ $L = \sqrt{l(l+1)}\hbar = \sqrt{2}\hbar$. Suy ra: $l = 1$ và $l = -2$ (loại)

Với $l = 1 \rightarrow m = 0, \pm 1 \rightarrow L_z = m\hbar \rightarrow L_z = 0, \hbar, -\hbar$ nên có 3 trị của L_z ứng với 3 góc định hướng của \vec{L} đối với phương z.

Với $m = -1 \rightarrow \cos \theta_1 = -\frac{1}{\sqrt{2}} \rightarrow \theta_1 = 135^\circ$

Với $m = 0 \rightarrow \cos \theta_2 = 0 \rightarrow \theta_2 = 90^\circ$

Với $m = 1 \rightarrow \cos \theta_3 = \frac{1}{\sqrt{2}} \rightarrow \theta_3 = 45^\circ$

b. Với $l = 1$ thì $j = \left| l \pm \frac{1}{2} \right| = \frac{1}{2}$ và $\frac{3}{2}$

Suy ra: $J_1 = \sqrt{j_1(j_1+1)}\hbar = \frac{\sqrt{3}}{2}\hbar$ và $J_2 = \frac{\sqrt{15}}{2}\hbar$

c. Ta có: $L = \sqrt{l(l+1)}\hbar = \sqrt{2}\hbar \rightarrow l = 1 \rightarrow m_l = -1, 0, 1$

Hình chiếu momen động lượng: $L_z = m_l\hbar = -\hbar, 0, \hbar$

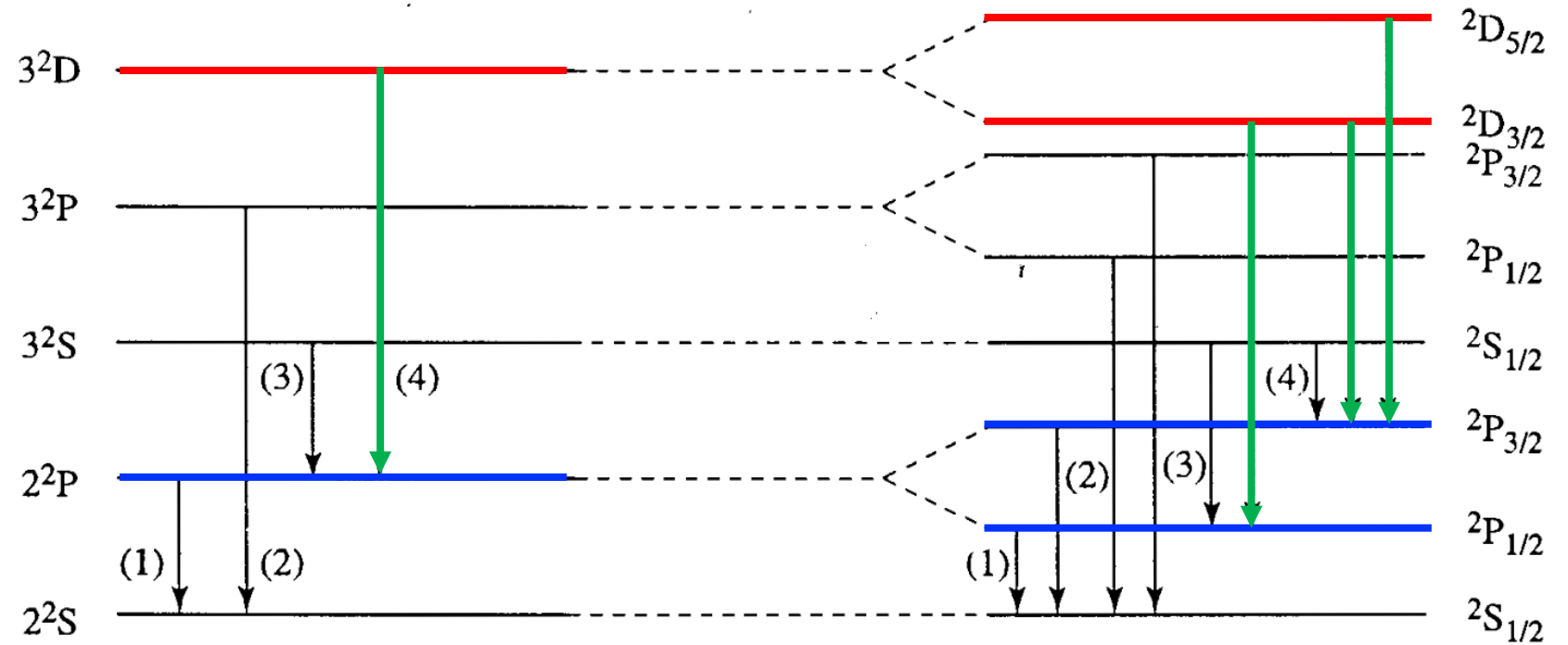
Khi chuyển về trạng thái cơ bản: $l' = 0 \rightarrow m'_l = 0 \rightarrow L'_z = 0$

Độ biến thiên: $\Delta L_z = L_z - L'_z = -\hbar, 0, \hbar$

Chương 11. VẬT LÝ NGUYÊN TỬ

VD3 (BT 11.3):

Giải:



Không kể spin

$$\Delta S = 0$$

$$\Delta L = \pm 1$$

Kể đến spin

$$\Delta S = 0$$

$$\Delta L = \pm 1$$

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