

II-1/ Giả thuyết về sự lượng tử hoá trong không gian

a) Momen từ của nguyên tử

Electron chuyển động trên quỹ đạo sẽ tương đương với dòng điện tròn có cường độ I . Với $I = |q|f$
 $= e.f = \frac{ev}{2\pi r}$. Do đó sẽ có momen từ $\mu = IS = I \cdot \pi r^2 = \frac{emvr}{2m} = \frac{e}{2m} L$

Ở dạng vectơ: $\vec{\mu} = -\frac{e}{2m} \vec{L}$: vectơ momen từ luôn luôn cùng phương và ngược chiều với vectơ momen động lượng \vec{L}

Tỉ số $\frac{\mu}{L}$ gọi là tỉ số từ cơ hay tỉ số từ hồi chuyển

Theo Bohr $L = n\hbar$, nên $|\vec{\mu}| = n\mu_B$, trong đó $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m} = 9,27 \cdot 10^{-24}$ J/Tesla và được gọi là

magneton Bohr, và cũng coi như đơn vị đo momen từ của nguyên tử.

Ví dụ: Hidrô ở trạng thái cơ bản có $n = 1$, tức là có momen từ bằng $1\mu_B$

b) Sự lượng tử hóa trong không gian

Để giải thích sự phân tích vạch quang phổ do tác dụng của từ trường (hiệu ứng Zeeman), Sommerfeld đã nêu lên giả thuyết về sự lượng tử hóa trong không gian: Dưới tác dụng của từ trường ngoài \vec{B} , mặt phẳng quỹ đạo của electron sẽ bị định hướng các vị trí gián đoạn trong từ trường. Vì vectơ momen động lượng \vec{L} vuông góc với mặt phẳng quỹ đạo nên \vec{L} , và do đó vectơ momen từ $\vec{\mu}$, cũng bị định hướng các vị trí gián đoạn trong từ trường, sao cho hình chiếu của \vec{L} (và $\vec{\mu}$) trên phương của từ trường (gọi là phương z) bị lượng tử hóa.

Gọi θ là góc hợp bởi \vec{L} và \vec{B} : $L_z = L\cos\theta = m_l\hbar$; m_l : số lượng tử từ quỹ đạo

Theo Sommerfeld $L = l\hbar$, nên $\cos\theta = \frac{m_l}{l}$. Mặt khác do $-1 \leq \cos\theta \leq +1$, nên $-l \leq m_l \leq +l$, tức là m_l có

$2l+1$ giá trị gián đoạn. Suy ra có $2l+1$ định hướng của mặt phẳng quỹ đạo, hay của vectơ \vec{L} trong từ trường.

Lí thuyết Cơ lượng tử cũng chứng minh rằng giữa momen từ $\vec{\mu}$ và momen động lượng \vec{L} cũng có hệ thức $\vec{\mu} = -\frac{e}{2m} \vec{L}$. Tuy nhiên do momen động lượng orbital \vec{L} bị lượng tử hóa và có giá trị là $L =$

$\sqrt{l(l+1)}\hbar$ nên giá trị của momen từ không còn là số nguyên lần μ_B , mà có biểu thức là $\mu = \sqrt{l(l+1)}\mu_B$.

Do đó đối với Hidrô ở trạng thái cơ bản có $n = 1$ thì $l = 0$, tức là có momen từ bằng 0

Trong từ trường ngoài thì lưỡng cực từ (do chuyển động quỹ đạo của electron gây ra) sẽ có năng lượng phụ (thế năng) phụ thuộc vào cả độ lớn của momen từ $\vec{\mu}$ và sự định hướng của $\vec{\mu}$ với từ trường:

$$\Delta E = \int_{90^\circ}^{\theta} \tau d\theta$$

với $\vec{\tau} = \vec{\mu} \times \vec{B}$ là ngẫu lực do từ trường đặt vào lưỡng cực từ

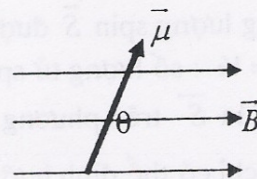
$$\Rightarrow \tau = \mu \cdot B \sin\theta$$

$$\tau_{\max} \text{ khi } \theta = 90^\circ; \text{ khi đó } \vec{\tau} \perp \vec{B}$$

$$\tau_{\min} = 0 \text{ khi } \theta = 0; \text{ khi đó } \vec{\tau} \text{ cùng phương với } \vec{B}$$

Quý ước rằng $\Delta E = 0$ khi $\theta = 90^\circ$, thì thế năng tại vị trí bất kì của momen từ là:

$$\Delta E = \mu \cdot B \int_{90^\circ}^{\theta} \sin\theta d\theta = -\mu \cdot B \cos\theta = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$$



Kết hợp với $\vec{\mu} = -\frac{e}{2m} \vec{L}$, suy ra $\Delta E = \frac{e}{2m} L.B \cos\theta$

Đồng thời $L = \sqrt{l(l+1)} \hbar$, do đó phương của \vec{L} bị lượng tử hóa đối với từ trường \vec{B} , đó là sự lượng tử hóa trong không gian. Ứng với mỗi vị trí của \vec{L} thì ΔE có 1 giá trị tương ứng

Hình chiếu của \vec{L} trên phương của từ trường (phương z) cũng bị lượng tử hóa và có giá trị : $L_z = m_l \hbar$ với m_l là số lượng tử từ

Từ $L_z = L \cos\theta$, suy ra $\cos\theta = \frac{m_l}{\sqrt{l(l+1)}}$ (khác với kết quả của Sommerfeld)

Các giá trị khả dĩ của m_l là : $-l; -l+1; \dots; 0, \dots, l$ (tức là có $2l+1$ giá trị).

Vậy $\cos\theta$ có $2l+1$ giá trị, nghĩa là có $2l+1$ định hướng của \vec{L} trong từ trường.

Từ $\Delta E = \frac{e}{2m} L.B \cos\theta = \frac{e}{2m} L_z B = \frac{e}{2m} m_l \hbar B$, suy ra $\Delta E = m_l \mu_B$

Ví dụ : Trạng thái năng lượng E ứng với $l=2$ thì m_l có 5 giá trị, và \vec{L} có 5 định hướng khác nhau trong từ trường, tức là mức năng lượng E sẽ bị phân tích thành 5 mức con trong từ trường. Mỗi mức con sẽ có năng lượng mới $E' = E + \Delta E$ và hai mức con liên tiếp sẽ có năng lượng cách nhau 1 lượng bằng μ_B .

Ngoài ra do từ trường tác động lên lưỡng cực từ 1 ngẫu lực $\vec{\tau} = \vec{\mu} \times \vec{B} = \frac{-e}{2m} \vec{L} \times \vec{B}$. Ngẫu lực này vuông góc với \vec{L} ,

do đó \vec{L} bị tuế sai chung quanh phương z với vận tốc không đổi và nghiêng 1 góc không đổi so với \vec{B} (tương tự hiệu ứng con quay)

Chú ý rằng Cơ Lượng tử không thừa nhận chuyển động quỹ đạo của electron mà chỉ thừa nhận khái niệm về orbital (đám mây electron). Do đó theo Cơ Lượng tử thì số lượng tử từ m_l xác định sự định hướng của các orbital so với phương z khi có tác dụng của từ trường và cũng gọi là sự lượng tử hóa trong không gian

II-2- Giả thuyết về spin của electron

Lí thuyết lượng tử giải thích khá thành công bài toán cấu trúc nguyên tử Hidrô. Tuy nhiên vẫn còn có những hiện tượng thực nghiệm thuộc về chính nguyên tử Hidrô (và các nguyên tử khác) mà thuyết này chưa giải quyết được.

Trước hết là cấu trúc tinh vi của vạch quang phổ. Ví dụ vạch kép trong quang phổ kim loại kiềm. Sau đó là hiệu ứng Zeeman : sự phân tích vạch quang phổ trong từ trường

Năm 1925, Uhlenbeck và Goudsmit đưa ra thuyết spin electron : Tương tự như chuyển động của quả đất xung quanh Mặt trời, ngoài chuyển động quỹ đạo thì electron còn có chuyển động spin (tự quay quanh trục).

Electron có kích thước xác định, nên trong chuyển động spin nó cũng có 1 momen động lượng riêng \vec{S} . Mặt khác, electron là 1 hạt điện nên lại có momen từ riêng $\vec{\mu}_s$

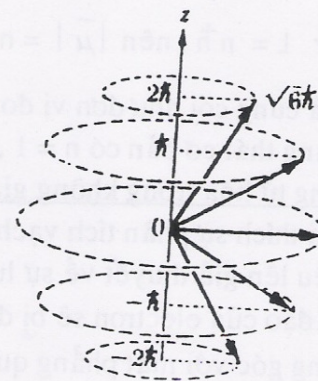
Momen động lượng spin \vec{S} được đặc trưng bởi số lượng tử s : $S = s \hbar$

với $s = \frac{1}{2}$: số lượng tử spin

Hình chiếu của \vec{S} trên phương z : $S_z = m_s \hbar$ với $m_s = \pm \frac{1}{2}$: số lượng tử spin.

Như vậy \vec{S} chỉ có thể định hướng cùng chiều hoặc ngược chiều với \vec{L} (là momen động lượng trong chuyển động quỹ đạo). Do đó momen động lượng toàn phần của electron là : $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$

\vec{J} được đặc trưng bởi số lượng tử nội j (còn gọi là số lượng tử toàn phần) : $J = j \hbar$



Với $j = l \pm s = l \pm \frac{1}{2}$

Trong trường hợp tổng quát $l \neq 0$ thì j có 2 giá trị dương phân biệt

Nếu $l = 0$, tức là không có momen động lượng quỹ đạo \vec{L} và tất nhiên không có sự định hướng của \vec{J} , thì j chỉ có 1 giá trị dương là $\frac{1}{2}$

Như vậy nếu không chú ý tới spin electron thì các mức năng lượng trong nguyên tử chỉ đặc trưng bởi 2 số lượng tử n và l (kí hiệu là E_{nl}), đó chỉ là các mức đơn.

Còn khi xét cả sự tồn tại của spin thì các mức năng lượng sẽ được đặc trưng bởi 3 số lượng tử n, l và j (kí hiệu là $E_{n,l}$ hoặc E_{nj}). Nói chung, đó là các mức kép ứng với 2 giá trị phân biệt của số lượng tử nội j : $j = l \pm \frac{1}{2}$. Trừ trường hợp $l = 0$ thì $j = \frac{1}{2}$, đó là mức đơn.

Kết quả này chính là nguyên nhân của sự tồn tại vạch kép trong quang phổ kim loại kiềm, đồng thời cũng được dùng để giải thích cấu trúc tinh vi của vạch quang phổ.

Năm 1928 Dirac thiết lập phương trình Schrodinger tương đối tính và chứng minh rằng electron có momen động lượng spin và momen từ spin, nhưng hoàn toàn khác với quan điểm của Uhlenbeck và Goudsmit, không phải do chuyển động tự quay mà là 1 thuộc tính đặc trưng gắn liền với bản chất của các hạt vi mô.

$$S = \sqrt{s(s+1)} \hbar = \frac{\sqrt{3}}{2} \hbar \quad \text{với } s = \frac{1}{2} \text{ là số lượng tử spin}$$

Như vậy số lượng tử spin s có vai trò như số lượng tử phụ l . Tuy nhiên l có thể có giá trị khác nhau đối với các electron, còn số lượng tử spin s có giá trị như nhau ($s = \frac{1}{2}$) đối với mọi electron.

Hình chiếu của \vec{S} trên phương z , đối với giả thuyết của Uhlenbeck và cả đối với cơ lượng tử, đều có giá trị: $S_z = m_s \hbar$ với $m_s = \pm s = \pm \frac{1}{2}$, gọi là số lượng tử từ spin. Như vậy m_s có vai trò như số lượng tử từ m_l . Tuy nhiên m_l có $2l+1$ giá trị, còn m_s chỉ có 2 giá trị. Như vậy m_s dùng để đặc trưng cho trạng thái spin của electron.

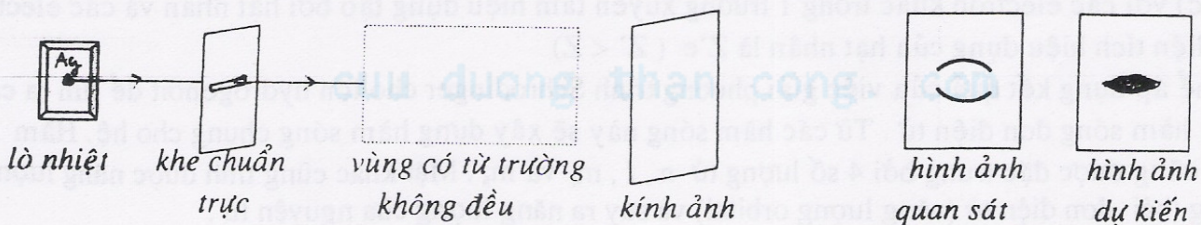
Khi nguyên tử ở trong từ trường thì cũng tương tự như trường hợp của \vec{L} có $2l+1$ cách định hướng, thì \vec{S} có $2s+1 = 2$ cách định hướng (sự lượng tử hóa trong không gian của vectơ momen động lượng spin \vec{S}). Thành phần của \vec{S} dọc theo phương z của từ trường là:

$$S_z = m_s \hbar \quad \text{với } m_s = \frac{1}{2} \text{ là số lượng tử từ spin}$$

Momen từ spin của electron: $\vec{\mu}_s = - \left(\frac{e}{m} \right) \vec{S}$. Vì $\vec{\mu}_s$ cùng phương với \vec{S} , nên $\vec{\mu}_s$ cũng có 2 cách định hướng ứng với hình chiếu của $\vec{\mu}_s$ trên phương z .

$$\mu_{sz} = - \left(\frac{e}{m} \right) S_z = \pm \frac{e\hbar}{2m} = \pm \mu_B$$

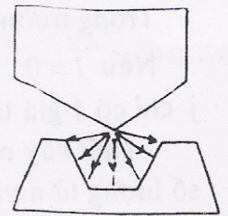
II-3 Thí nghiệm Stern- Gerlach (1921)



Các nguyên tử Ag trung hòa phát ra từ lò nhiệt, sau khi qua khe chuẩn trực trở thành 1 tia hẹp. Cho tia này qua từ trường không đều (giữa 2 cực của 1 nam châm như hình vẽ) và được hứng trên 1 kính ảnh. Toàn bộ hệ thống ở trong chân không để không ảnh hưởng tới chuyển động của chùm nguyên tử.

Lưỡng cực từ (do electron hóa trị của nguyên tử tạo ra) khi ở trong từ trường sẽ bị tác dụng 1 ngẫu lực có tác dụng hướng nó theo phương của từ trường. Vì từ trường không đều (hình vẽ), nên mỗi cực của lưỡng cực từ chịu tác dụng của các lực có độ lớn khác nhau tạo thành 1 hợp lực \vec{F} có giá trị phụ thuộc vào sự định hướng của lưỡng cực từ đối với từ trường, và vào gradient của từ trường theo hướng đó

$$F = -\mu_z \frac{\partial H}{\partial z}$$



Nếu $\vec{\mu} \parallel$ và cùng chiều với \vec{B} thì nó có xu hướng di chuyển theo chiều mà B tăng

Nếu $\vec{\mu} \parallel$ và ngược chiều với \vec{B} thì nó có xu hướng di chuyển theo chiều mà B giảm

Theo quan điểm cổ điển thì mọi định hướng đều có thể xảy ra trong chùm nguyên tử, nên trên kính ảnh sẽ có 1 vệt mở rộng theo hướng từ trường thay vì 1 vạch thẳng như khi không có từ trường.

Trong thí nghiệm này từ trường tăng theo hướng Nam – Bắc và kết quả thí nghiệm cho thấy chùm tia nguyên tử Ag bị phân tích thành 2 thành phần đối xứng trên kính ảnh. Kết quả cũng tương tự với trường hợp của các nguyên tử H, Na, K, ... Tuy nhiên trường hợp He, Hg, Zn, Cd ... thì tia nguyên tử không bị tách.

Kết quả thí nghiệm chứng tỏ :

- Sự tồn tại của spin. Thật vậy, tia nguyên tử Ag ở trạng thái bình thường có $l = 0$, nên momen động lượng quỹ đạo (orbital) $L = 0$, nên momen từ quỹ đạo $\mu_L = 0$. Nếu nguyên tử chỉ có momen động lượng quỹ đạo \vec{L} thì tia nguyên tử không bị phân tích : trái với thực nghiệm. Vậy nguyên tử phải có momen động lượng spin \vec{S} và momen từ spin $\vec{\mu}_S$.
- Có sự lượng tử hóa trong không gian của momen từ spin $\vec{\mu}_S$. Thật vậy, trên kính ảnh xuất hiện 2 vệt đối xứng, chứng tỏ rằng hình chiếu của $\vec{\mu}_S$ trên phương z chỉ nhận 2 giá trị khác nhau

II-4 - Mô hình các hạt độc lập và các trạng thái đơn điện tử

Nguyên tử Hidrô và ion hydrogenoit chỉ có 1 electron chuyển động trong trường xuyên tâm của hạt nhân, nên phương trình Schrodinger có thể giải chính xác và tìm được các hàm sóng mô tả các trạng thái dừng của electron và năng lượng tương ứng của chúng.

Trong nguyên tử phức tạp có nhiều electron thì ngoài tương tác hút giữa hạt nhân và các electron còn có tương tác đẩy giữa các electron nên biểu thức của thế năng U rất phức tạp

$$U = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{k_0 Z e^2}{r_i} \right) + \sum_{i,j} \frac{k_0 e^2}{r_{ij}} \quad N : \text{số electron}$$

làm cho việc giải phương trình Schrodinger khó khăn và không chính xác

Vì vậy phải tìm cách giải gần đúng bài toán sao cho vừa phản ánh được các đặc điểm của nguyên tử phức tạp, vừa có thể tìm được các kết quả 1 cách đơn giản dù kết quả chỉ là gần đúng.

Muốn vậy, người ta dùng mô hình các hạt độc lập, trong đó coi như mỗi electron chuyển động độc lập (không tương tác) với các electron khác trong 1 trường xuyên tâm hiệu dụng tạo bởi hạt nhân và các electron còn lại, khi đó điện tích hiệu dụng của hạt nhân là $Z'e$ ($Z' < Z$)

Từ đó có thể áp dụng kết quả của việc giải phương trình Schrodinger cho ion hydrogenoit để tìm ra các hàm sóng gọi là hàm sóng đơn điện tử. Từ các hàm sóng này sẽ xây dựng hàm sóng chung cho hệ. Hàm sóng chung này cũng được đặc trưng bởi 4 số lượng tử n, l, m_l và m_s . Mặt khác cũng tính được năng lượng ứng với các trạng thái đơn điện tử (năng lượng orbital) và suy ra năng lượng của nguyên tử.

II -5- Nguyên lý loại trừ Pauli và cấu hình electron của nguyên tử phức tạp

a) Nguyên lý loại trừ Pauli

Trong nguyên tử phức tạp thì ở trạng thái bình thường không phải mọi electron trong nguyên tử đều ở cùng trạng thái cơ bản (có năng lượng thấp nhất).

Ví dụ các nguyên tử chỉ khác nhau 1 electron như F (9 electron) ; Ne (10) ; Na (11) , ... có hóa tính hoàn toàn khác nhau điều đó cho thấy không phải mọi electron trong nguyên tử đều cùng tồn tại trong cùng 1 trạng thái lượng tử.

Mặt khác, trong quang phổ nguyên tử người ta nhận thấy thiếu 1 số vạch ứng với sự dịch chuyển giữa những trạng thái ứng với các tổ hợp nào đó của 4 số lượng tử (đó là các dịch chuyển bị cấm). Ví dụ trong quang phổ của Heli không có các dịch chuyển ứng với 2 spin song song về trạng thái cơ bản (1s)

Đặc điểm này được Pauli tìm ra năm 1925 và phát biểu thành nguyên lý : “ Trong 1 nguyên tử không thể có 2 (hay nhiều) electron cùng tồn tại trong cùng 1 trạng thái lượng tử (tức là có cùng 4 số lượng tử) ”

b) Cấu hình electron

Từ mô hình các hạt độc lập suy ra các electron có cùng số lượng tử n được coi như có cùng khoảng cách trung bình đối với hạt nhân, tức là chiếm cùng 1 lớp vỏ electron

n	1	2	3	4	5	...
Lớp	K	L	M	N	O	...

Các electron này coi như có cùng năng lượng. Năng lượng càng lớn thì khoảng cách các lớp đối với hạt nhân sẽ xa dần.

Tuy nhiên năng lượng E của nguyên tử còn phụ thuộc số lượng tử l , dù sự phụ thuộc này không lớn và không mang tính chất quyết định như trường hợp của số lượng tử n . Electron có l nhỏ thì có khả năng ở gần hạt nhân hơn so với trường hợp l lớn, tức là năng lượng toàn phần thấp hơn.

Vậy các electron trong 1 lớp có năng lượng tăng dần theo sự tăng của l . Nghĩa là mỗi lớp được chia thành các phân lớp (hay lớp con) mà trong các phân lớp đó các electron có cùng giá trị của n và l . Tất cả các lớp electron trong phân lớp sẽ có cùng năng lượng mặc dù chúng có số lượng tử m_l , m_s khác nhau (vì năng lượng không phụ thuộc m_l và m_s)

l	0	1	2	3	4	5	...
Phân lớp	s	p	d	f	g	h	...

Với 1 giá trị bất kì của l có $2l+1$ giá trị khác nhau của m_l :

$$m_l = 0 ; \pm 1 ; \pm 2 ; \dots , \pm l$$

Người ta thường biểu diễn mỗi orbital bằng 1 ô vuông gọi là ô lượng tử, mỗi ô ứng với 1 giá trị m_l và có thể chứa tối đa 2 electron có spin ngược nhau ứng với 2 giá trị $m_s = \pm \frac{1}{2}$. Vậy mỗi phân lớp chỉ chứa tối đa $2(2l+1)$ electron

Ví dụ : $l = 0$ (phân lớp s) có tối đa $2(0+1) = 2$ electron

$l = 1$ (phân lớp p) có tối đa $2(2+1) = 6$ electron

$l = 2$ (phân lớp d) có tối đa $2(4+1) = 10$ electron ...

Suy ra số electron tối đa trong 1 lớp vỏ electron là : $\sum_{l=0}^{n-1} 2(2l+1) = 2n^2$

n	1	2	3	4	5	...
Lớp	K	L	M	N	O	...
Số electron tối đa	2	8	18	32	50	...

Một cách gần đúng thì các electron thuộc cùng phân lớp (có cùng n và l) sẽ có năng lượng bằng nhau, chúng được gọi là các electron tương đương.

Sự phân bố các electron trong nguyên tử vào các trạng thái đơn điện tử (hay các orbital) ứng với các cặp n, l khác nhau gọi là cấu hình electron :

$(n, l)^\alpha \quad (n', l')^\beta \dots$ với α, β, \dots là số các electron tương đương

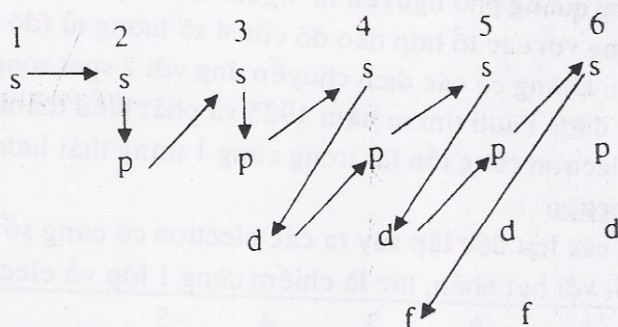
Sự phân bố electron vào các orbital tuân theo các qui tắc :

- Ở trạng thái cơ bản, các electron chiếm các mức năng lượng thấp nhất trước rồi tới các mức có năng lượng cao hơn (các electron chiếm hết lớp K rồi tới lớp L, lớp M ...)

• Trong 1 lớp, các electron vào chiếm phân lớp có năng lượng thấp nhất (s), sau đó chiếm các phân lớp có năng lượng cao hơn (p)...

• Trong 1 phân lớp có nhiều orbital thì electron sẽ vào chiếm tất cả các orbital trước khi lấp đầy (sao cho tổng số spin của chúng cực đại)

Thứ tự theo năng lượng tăng dần của các orbital cho bởi qui tắc: thực nghiệm Klechkowski



hoặc theo thứ tự $(n + l)$ tăng dần, trong đó nếu các orbital có cùng tổng $(n+l)$ thì orbital nào có n lớn hơn thì năng lượng sẽ cao hơn

N	1	2	3	4	5
L	0	0 1	0 1 2	0 1 2 3	0 1
$n + l$	1	2 3	3 4 5	4 5 6 7	5 6
orbital	1s	2s 2p	3s 3p 3d	4s 4p 4d 4f	5s 5p

Như vậy thứ tự năng lượng tăng dần của các orbital là :

$$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < \dots$$

Tuy nhiên có 1 số ngoại lệ :

Nếu $Z < 21$ thì $3d < 4s$

Nếu $Z \geq 21$ thì $3d > 4s$

Nếu $Z < 39$ thì $5s < 4d$

Nếu $Z \geq 39$ thì $5s > 4d$...

Ví dụ : Ca ($Z = 20$) có cấu hình electron $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2$

Sc ($Z = 21$) ----- $3d^1 4s^2$

II-6 Phương pháp gần đúng của Slater để xác định các mức năng lượng đơn điện tử E_{nl}

Trong mô hình các hạt độc lập sẽ tồn tại các trạng thái đơn điện tử và các orbital nguyên tử có dạng tương tự như trong nguyên tử Hidrô. Tuy nhiên thế năng U lại phụ thuộc vào điện tích hạt nhân và sự phân bố mật độ điện tích của các electron khác.

Ví dụ Natri có cấu hình electron : $[\text{Ne}] + e(3s)$. Electron 3s không chuyển động sát hạt nhân nhưng cũng không biệt lập với lớp vỏ $[\text{Ne}]$. Vì vậy trường thế ở đây không thuần túy Coulomb vì có sự xâm nhập của orbital 3s vào khung vỏ $[\text{Ne}]$, tức là gây ra hiệu ứng màn, do đó hạt nhân coi như có điện tích hiệu dụng $+Z'e$, với $Z' = Z - \sigma$ (σ gọi là hằng số màn).

Năm 1930 Slater đưa ra cách tính gần đúng năng lượng E_{nl} của các trạng thái đơn điện tử. Từ đó có thể suy ra năng lượng E của toàn bộ hệ electron trong nguyên tử : $E = \sum E_{nl}$

Trong đó : $E_{nl} = \left(\frac{Z'}{n'} \right)^2 (-13,6) \text{ eV}$ và n' : số lượng tử hiệu dụng

Để tính giá trị năng lượng E ta sẽ lần lượt thực hiện các bước sau :

a) Tìm giá trị của n' bằng cách chú ý rằng giữa n và n' có mối quan hệ

n	1	2	3	4	5	6	...
n'	1	2	3	3,7	4	4,2	...

b) Các electron được chia thành các nhóm:

(1s) ; (2s,2p) ; (3s,3p) ; (3d) ; (4s,4p) ; (4d) ; (4f) ; ...

c) Nếu electron đang xét thuộc nhóm i thì hằng số màn σ tương ứng là tổng các hằng số màn σ_j của từng electron còn lại (gọi là electron thứ j) : $\sigma = \sum \sigma_j$

- Nếu $j > i$: các electron thứ j coi như không gây ra hiệu ứng màn, nên $\sigma_j = 0$
- Nếu $j = i$ thì $\sigma_j = 0,35$.
Tuy nhiên nếu electron đang xét thuộc nhóm $1s$ thì $\sigma_j = 0,3$
- Nếu $j = i-1$ thì $\begin{cases} \sigma_j = 0,85 & \text{nếu electron đang xét là s hay p} \\ \sigma_j = 1 & \text{nếu electron đang xét là d hay f} \end{cases}$
- Nếu $j < i-1$ thì $\sigma_j = 1$

Ví dụ : Tính gần đúng năng lượng của nguyên tử Li ở trạng thái cơ bản

Vì cấu hình electron của Li ở trạng thái cơ bản là : $1s^2 2s^1$, nên năng lượng của Li là

$$E = 2E_{1s} + E_{2s}$$

Đối với orbital $1s$: $n=1$ nên $n' = 1$

$$\sigma = \sum \sigma_j = 0,3 \text{ nên } Z' = Z - \sigma = 2,7$$

$$E_{1s} = -13,6 \left(\frac{2,7}{1} \right)^2 = -99,144 \text{ eV}$$

Đối với orbital $2s$: $n=2$ nên $n' = 2$

$$\sigma = \sum \sigma_j = 2(0,85) = 1,7$$

$$E_{2s} = -13,6 \left(\frac{1,7}{2} \right)^2 = -5,746 \text{ eV}$$

$$\text{Do đó } E = 2(-99,144 \text{ eV}) - 5,746 \text{ eV} = -204,034 \text{ eV}$$

So với giá trị thực nghiệm là $E = -203 \text{ eV}$ thì sai số khoảng 0,5%

BÀI TẬP

- 1- Tìm cường độ dòng điện tròn tương ứng với chuyển động của electron trên quỹ đạo dừng bé nhất của H. Suy ra từ trường mà dòng điện tạo ra tại tâm của quỹ đạo.
- 2- Nguyên tử H đang ở trạng thái dừng $n = 4$. Tính momen từ cực đại của nguyên tử theo Bohr và so sánh với kết quả theo Cơ lượng tử
- 3- Biểu diễn sự định hướng của vectơ momen động lượng \vec{L} của electron d do tác dụng của từ trường ngoài. Theo Cơ lượng tử góc nhỏ nhất mà vectơ này hợp với từ trường là bao nhiêu?
- 4- a) Giá trị của momen động lượng spin ; momen từ spin theo Cơ lượng tử là bao nhiêu ?
b) Có bao nhiêu sự định hướng của vectơ momen động lượng spin trong từ trường ? Biểu diễn sự định hướng đó
- 5- Nếu nguyên tử có electron lấp đầy hết lớp N thì có tất cả bao nhiêu electron ?
- 6- Mức năng lượng tương ứng với $n = 3$ trong nguyên tử H sẽ bị tách ra bao nhiêu mức con trong từ trường khi không xét tới spin và khi có xét tới spin?
- 7-a) Viết cấu hình electron của nguyên tử Mg ($Z = 12$)
b) Dùng qui tắc Slater để tính gần đúng năng lượng của Mg ở trạng thái cơ bản

cuu duong than cong. com