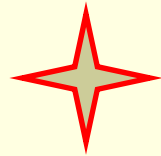


ĐẠI HỌC QUỐC GIA HCM
TRƯỜNG ĐH KHOA HỌC TỰ NHIÊN



Bài giảng

VẬT LÝ HIỆN ĐẠI



cuu duong than cong. com

HUỲNH TRÚC PHƯƠNG

Email: htphuong.oarai@gmail.com

cuu duong than cong. com

CHƯƠNG 4B

LÝ THUYẾT LƯỢNG TỬ CỦA NGUYÊN TỬ HYDRO

4B.1. Phương trình Schrodinger

Nguyên tử Hydro gồm có một hạt nhân mang điện tích $+e$ và một electron mang điện tích $-e$ chuyển động quanh hạt nhân. Hạt nhân được coi là đứng yên tại O, còn electron quay xung quanh.

 Thế năng tương tác:

$$U(r) = -k \frac{e^2}{r}$$

Trong tọa độ De-cát

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(x, y, z) + U(x, y, z) \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z) \quad (4b.1)$$

Phương pháp để giải phương trình này là tách biến

➡ $\psi(x, y, z) = X(x).Y(y).Z(z) \quad (4b.2)$

Tuy nhiên, hàm thế năng

$$U(x, y, z) = -e^2 / 4\pi\epsilon_0 \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \quad (4b.3)$$

Không thể tách biến

11/29/2017

CHƯƠNG 4B

LÝ THUYẾT LƯỢNG TỬ CỦA NGUYÊN TỬ HYDRO

4B.1. Phương trình Schrodinger

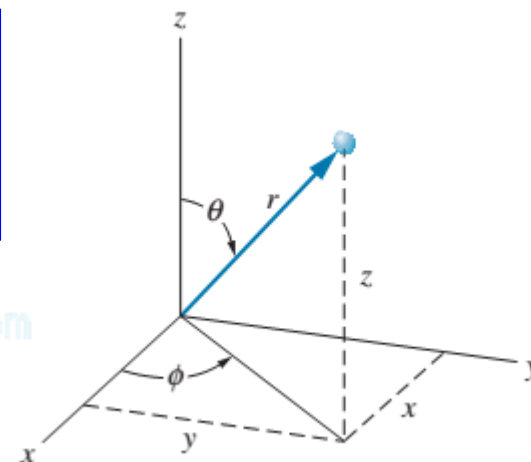
Trong tọa độ cầu:

$$x = r \sin\theta \cos\phi$$

$$y = r \sin\theta \sin\phi$$

$$z = r \cos\theta$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{1}{r^2 \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2\theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} \right] + U(r)\psi(r, \theta, \phi) = E\psi(r, \theta, \phi)$$



(4b.4)

Tách biến

$$\Psi = \Psi_{n,\ell,m_\ell}(r, \theta, \phi) = R_{n,\ell}(r) Y_{\ell,m_\ell}(\theta, \phi) \quad (4b.5)$$

Hàm xuyên tâm

Hàm cầu

CHƯƠNG 4B

LÝ THUYẾT LƯỢNG TỬ CỦA NGUYÊN TỬ HYDRO

4B.1. Phương trình Schrodinger

* Trạng thái lượng tử của một hạt chuyển động trong trường thế $U(r)$ được mô tả bởi 3 số lượng tử n , ℓ và m_ℓ .

Trong đó: n được gọi là *số lượng tử chính*, ℓ là *số lượng tử quỹ đạo* và m_ℓ là *số lượng tử từ*. Các số lượng tử bị chi phối bởi qui luật sau:

$$\square n = 1, 2, 3, \dots \infty$$

$$\square \ell = 0, 1, 2, 3, \dots n-1.$$

$$\square m_\ell = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \pm \ell$$

$$\square |m_\ell| \leq \ell.$$

- Ứng với mỗi giá trị n có n giá trị có thể có của ℓ .
- Ứng với mỗi giá trị ℓ có $(2\ell + 1)$ giá trị khác nhau của m_ℓ .

CHƯƠNG 4B

LÝ THUYẾT LƯỢNG TỬ CỦA NGUYÊN TỬ HYDRO

4B.1. Phương trình Schrodinger

* Hàm bán kính (hàm xuyên tâm):

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr}\right) + \left(-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2}\right)R(r) = ER(r)$$

* Giải phương trình R_n ta thu được năng lượng:

Năng lượng bị lượng tử hóa

$$E_n = -\left(\frac{ke^2}{2a_0}\right)\frac{1}{n^2} = -\frac{13,6(\text{eV})}{n^2} \quad (4b.6)$$

* Hàm góc (hàm cầu):

$$\frac{1}{Y(\theta, \phi) \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) Y(\theta, \phi) + \frac{1}{Y(\theta, \phi) \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} Y(\theta, \phi) = -\ell(\ell+1)$$

CHƯƠNG 4B

LÝ THUYẾT LƯỢNG TỬ CỦA NGUYÊN TỬ HYDRO

4B.1. Phương trình Schrodinger

Table 7.1 Hydrogen Atom Radial Wave Functions

n	ℓ	$R_{n\ell}(r)$
1	0	$\frac{2}{(a_0)^{3/2}} e^{-r/a_0}$
2	0	$\left(2 - \frac{r}{a_0}\right) \frac{e^{-r/2a_0}}{(2a_0)^{3/2}}$
2	1	$\frac{r}{a_0} \frac{e^{-r/2a_0}}{\sqrt{3}(2a_0)^{3/2}}$
3	0	$\frac{1}{(a_0)^{3/2}} \frac{2}{81\sqrt{3}} \left(27 - 18\frac{r}{a_0} + 2\frac{r^2}{a_0^2}\right) e^{-r/3a_0}$
3	1	$\frac{1}{(a_0)^{3/2}} \frac{4}{81\sqrt{6}} \left(6 - \frac{r}{a_0}\right) \frac{r}{a_0} e^{-r/3a_0}$
3	2	$\frac{1}{(a_0)^{3/2}} \frac{4}{81\sqrt{30}} \frac{r^2}{a_0^2} e^{-r/3a_0}$

© 2006 Brooks/Cole - Thomson

11/29/2017

Table 7.2 Normalized Spherical Harmonics $Y(\theta, \phi)$

ℓ	m_ℓ	$Y_{\ell m_\ell}$
0	0	$\frac{1}{2\sqrt{\pi}}$
1	0	$\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}} \cos \theta$
1	± 1	$\mp \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin \theta e^{\pm i\phi}$
2	0	$\frac{1}{4}\sqrt{\frac{5}{\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1)$
2	± 1	$\mp \frac{1}{2}\sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\phi}$
2	± 2	$\frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\phi}$
3	0	$\frac{1}{4}\sqrt{\frac{7}{\pi}} (5 \cos^3 \theta - 3 \cos \theta)$
3	± 1	$\mp \frac{1}{8}\sqrt{\frac{21}{\pi}} \sin \theta (5 \cos^2 \theta - 1) e^{\pm i\phi}$
3	± 2	$\frac{1}{4}\sqrt{\frac{105}{2\pi}} \sin^2 \theta \cos \theta e^{\pm 2i\phi}$
3	± 3	$\mp \frac{1}{8}\sqrt{\frac{35}{\pi}} \sin^3 \theta e^{\pm 3i\phi}$

© 2006 Brooks/Cole - Thomson

CHƯƠNG 4B

LÝ THUYẾT LƯỢNG TỬ CỦA NGUYÊN TỬ HYDRO

4B.2. Các số lượng tử và hàm sóng

Lúc này hàm sóng được biểu diễn bởi:

$$\Psi = \Psi_{n,\ell,m_\ell}(r, \theta, \phi) = R_{n,\ell}(r) Y_{\ell,m_\ell}(\theta, \phi)$$

Có 01 trạng thái

❑ Đối với trạng thái cơ bản ($n = 1$): $\ell = 0$ và $m_\ell = 0 \Rightarrow \Psi_{100}(r, \theta, \phi)$

❑ Đối với trạng thái kích thích thứ nhất ($n = 2$): $\ell = 0, 1$ và $m_\ell = 0, \pm 1$

$\Rightarrow \Psi_{200}(r, \theta, \phi) \quad \Psi_{210}(r, \theta, \phi) \quad \Psi_{21\pm 1}(r, \theta, \phi)$

Có 04 trạng thái

TÓM LẠI: Ứng với 01 giá trị n sẽ có n^2 hàm sóng, tức là có n^2 trạng thái khả dĩ có thể có của electron trong nguyên tử.

CHƯƠNG 4B

LÝ THUYẾT LƯỢNG TỬ CỦA NGUYÊN TỬ HYDRO

* Trạng thái của electron trong nguyên tử: $n \ell$

$\ell =$	0	1	2	3	4	5 ...
Kí hiệu	s	p	d	f	g	h ...

Ví dụ: $n = 1 \longrightarrow$ trạng thái: 1s

$n = 2 \longrightarrow \begin{cases} 2s \\ 2p \end{cases}$

Tất cả các trạng thái có cùng số lượng tử chính tạo thành 1 lớp vỏ.

$n = 1$	lớp vỏ K	$n = 2$	lớp vỏ L	$n = 3$	lớp vỏ M
$n = 4$	lớp vỏ N	$n = 5$	lớp vỏ O	$n = 6$	lớp vỏ P

Ví dụ: ứng với $n = 5$ có bao nhiêu giá trị có thể có của: a) l , b) m_l ?

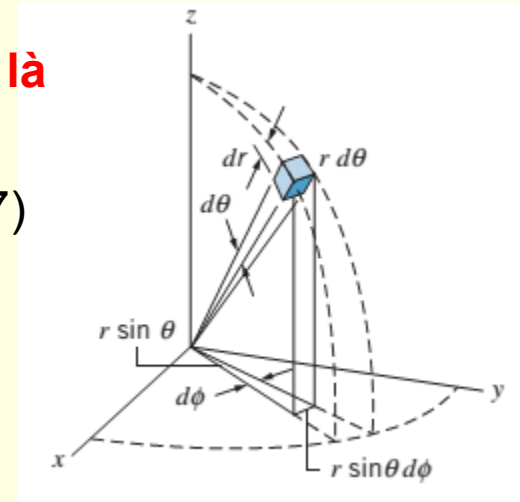
CHƯƠNG 4B

LÝ THUYẾT LƯỢNG TỬ CỦA NGUYÊN TỬ HYDRO

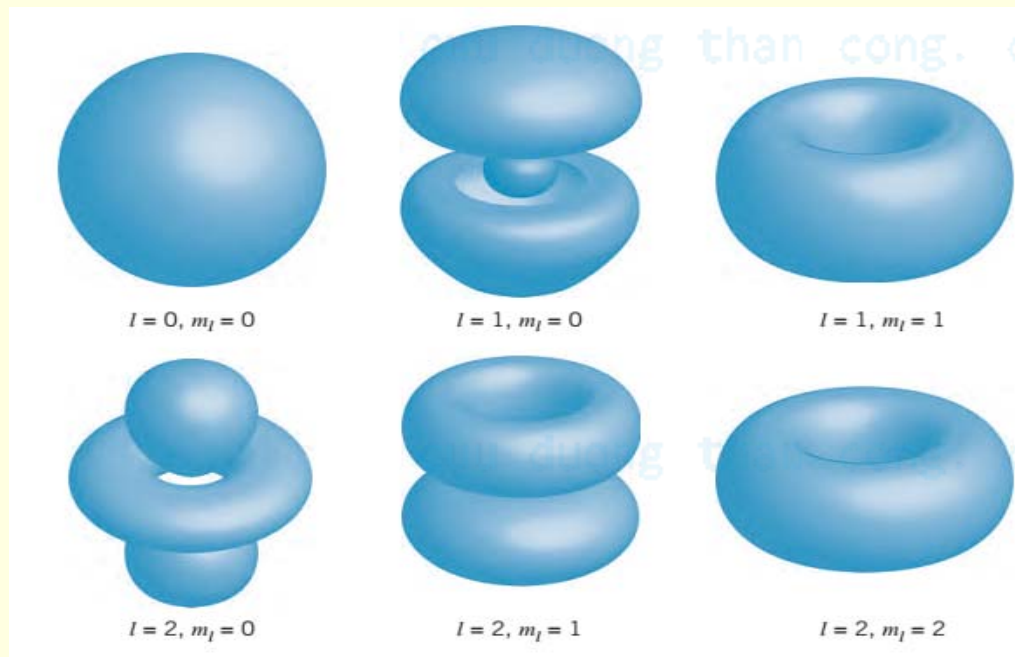
4B.3. Mật độ xác suất

Xác suất tìm thấy electron trong yếu tố thể tích dV là

$$|\Psi_{n,\ell,m_\ell}(r, \theta, \phi)|^2 dV = |R_{n,\ell}|^2 |Y_{\ell,m_\ell}|^2 r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi \quad (4b.7)$$



$$dV = r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi$$



11/29/2017

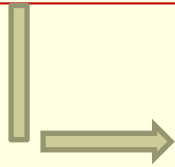
CHƯƠNG 4B

LÝ THUYẾT LƯỢNG TỬ CỦA NGUYÊN TỬ HYDRO

4B.4. Mật độ xác suất theo bán kính

Thay vì ta muốn biết hoàn toàn mật độ xác suất đến vị trí electron, nhưng ở đây ta chỉ muốn biết xác suất tìm thấy electron cách hạt nhân một khoảng nào đó là bao nhiêu, bất chấp góc θ và ϕ .

$$P(r) = r^2 |R_{n,\ell}(r)|^2 \quad (4b.8)$$

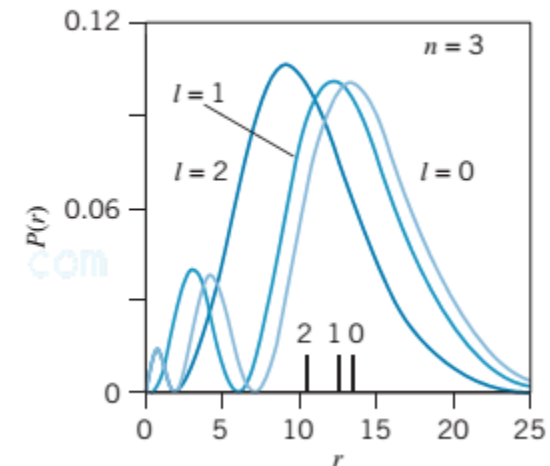
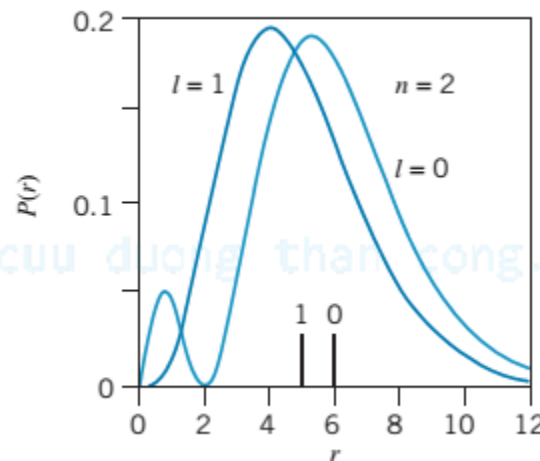
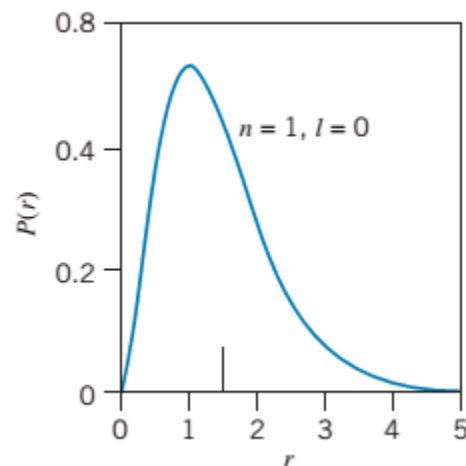


Mật độ xác suất theo bán kính r

CHƯƠNG 4B

LÝ THUYẾT LƯỢNG TỬ CỦA NGUYÊN TỬ HYDRO

4B.4. Mật độ xác suất theo bán kính



Example 7.5

Prove that the most likely distance from the origin of an electron in the $n=2, l=1$ state is $4a_0$.

Example 7.6

For the $n=2$ states ($l=0$ and $l=1$), compare the probabilities of the electron being found inside the Bohr radius.

$$\int x^n e^{-cx} dx = -\frac{e^{-cx}}{c} \times \left(x^n + \frac{nx^{n-1}}{c} + \frac{n(n-1)x^{n-2}}{c^2} + \cdots + \frac{n!}{c^n} \right)$$

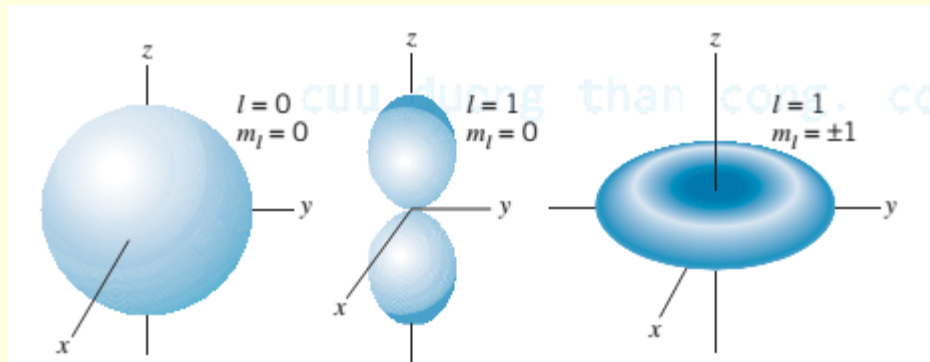
11/29/2017

CHƯƠNG 4B

LÝ THUYẾT LƯỢNG TỬ CỦA NGUYÊN TỬ HYDRO

4B.5. Mật độ xác suất phân bố góc

$$P(\theta, \phi) = |Y_{\ell, m_{\ell}}|^2 \quad (4b.9)$$



Example 7.7

For the $n = 2, l = 1$ wave functions, find the direction in space at which the maximum probability occurs when $m_l = 0$ and when $m_l = \pm 1$.

11/29/2017

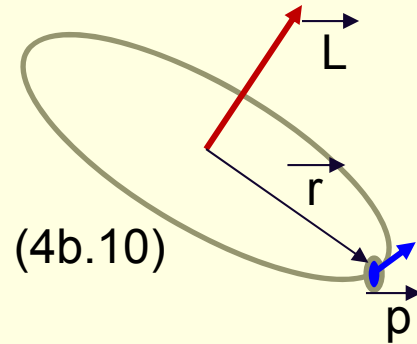
CHƯƠNG 4B

LÝ THUYẾT LƯỢNG TỬ CỦA NGUYÊN TỬ HYDRO

4B.6. MÔMEN ĐỘNG LƯỢNG QUỸ ĐẠO

Cơ học cổ điển $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$

Cơ học lượng tử $|\vec{L}| = \sqrt{\ell(\ell+1)}\hbar \quad (\ell = 0, 1, 2, \dots)$ (4b.10)



Hình chiếu của vector mô men động lượng \mathbf{L} lên trục không gian:

$$L_z = m_\ell \hbar \quad (m_\ell = 0, \pm 1, \pm 2, \dots) \quad (4b.11)$$



Lượng tử hóa không gian

Góc phân cực hợp bởi vector \mathbf{L} và L_z

$$\cos \theta = \frac{L_z}{|\vec{L}|} = \frac{m_\ell}{\sqrt{\ell(\ell+1)}} \quad (4b.12)$$

CHƯƠNG 4B

LÝ THUYẾT LƯỢNG TỬ CỦA NGUYÊN TỬ HYDRO

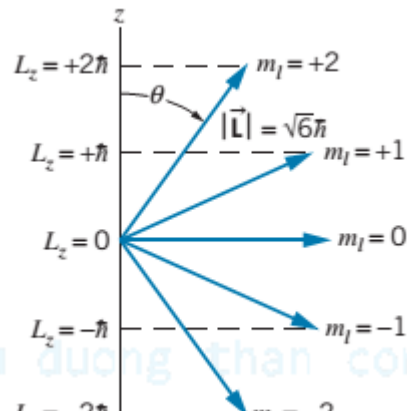
4B.6. MÔMEN ĐỘNG LƯỢNG QUỸ ĐẠO

Example 7.3

Compute the length of the angular momentum vectors that represent the orbital motion of an electron in a quantum state with $l = 1$ and in another state with $l = 2$.

Example 7.4

What are the possible z components of the vector \vec{L} that represents the orbital angular momentum of a state with $l = 2$?



Example 42.4 Space Quantization for Hydrogen

Consider the hydrogen atom in the $\ell = 3$ state. Calculate the magnitude of \vec{L} , the allowed values of L_z , and the corresponding angles θ that \vec{L} makes with the z axis.

11/29/2017

CHƯƠNG 4B

LÝ THUYẾT LƯỢNG TỬ CỦA NGUYÊN TỬ HYDRO

4B.7. MÔMEN TỪ

$$\mu_m = i.A = \frac{q}{2\pi m / p} \pi r^2 = \frac{q}{2m} rp = \frac{q}{2m} |\vec{L}| \quad (4b.13)$$

$$\vec{\mu}_m = -\frac{e}{2m} \vec{L} \quad (4b.14)$$

Hình chiếu của mô men từ lên trục không gian

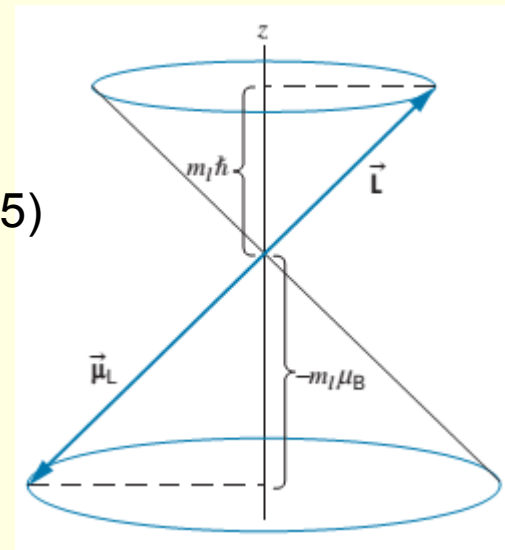
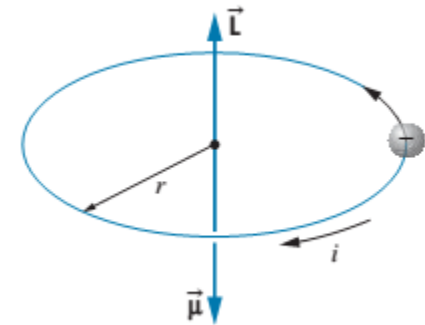
$$\mu_{mz} = -\frac{e}{2m} L_z = -\frac{e}{2m} m_\ell \hbar = -\frac{e\hbar}{2m} m_\ell = -m_\ell \mu_B \quad (4b.15)$$

Cũng bị lượng tử hóa không gian

Trong đó:
11/29/2017

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m} = 9,274.10^{-24} \text{ J/T}$$

← Magneton Bohr



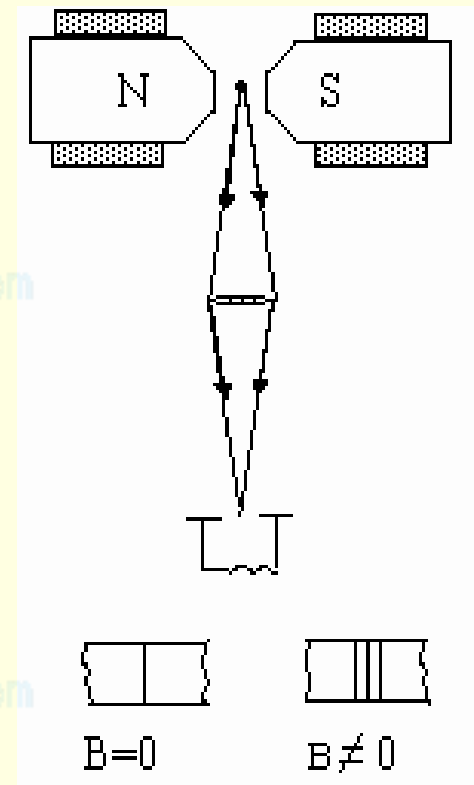
CHƯƠNG 4B

LÝ THUYẾT LƯỢNG TỬ CỦA NGUYÊN TỬ HYDRO

4B.8. HIỆU ỨNG ZEEMAN

Thí nghiệm: Đặt một nguồn khí Hydro phát sáng vào giữa hai cực của một nam châm điện, nam châm điện tạo ra một từ trường mạnh. Khi quan sát các bức xạ phát ra theo phương vuông góc với từ trường thì thấy mỗi vạch quang phổ của nguyên tử hydro tách thành 3 vạch sát nhau.

Hiệu ứng Zeeman là hiện tượng tách một vạch quang phổ trong nguyên tử thành nhiều vạch sát nhau khi nguyên tử phát sáng đặt trong từ trường.



Hình 2.9 : Hiệu ứng Zeeman

CHƯƠNG 4B

LÝ THUYẾT LƯỢNG TỬ CỦA NGUYÊN TỬ HYDRO

4B.8. HIỆU ỨNG ZEEMAN

Giải thích:

Vì electron có mômen từ μ nên khi nguyên tử Hydro đặt trong từ trường \mathbf{B} electron có thêm năng lượng phụ:

$$\Delta E = -\vec{\mu}\vec{B} \quad (4b.16)$$

Giả sử từ trường nằm dọc theo phương z

Ta có:

$$\Delta E = -\mu_{L,z}B = m_\ell \mu_B B \quad (4b.17)$$

Như vậy khi nguyên tử Hydro đặt trong từ trường, năng lượng E của electron sẽ có thêm năng lượng từ trường tác dụng và năng lượng này phụ thuộc vào số lượng tử m_ℓ :

$$E = E_0 + \Delta E = E_0 + m_\ell \mu_B B \quad (4b.18)$$

11/29/2017

CHƯƠNG 4B

LÝ THUYẾT LƯỢNG TỬ CỦA NGUYÊN TỬ HYDRO

4B.8. HIỆU ỨNG ZEEMAN

Giải thích:

Trong đó E là năng lượng của electron khi nguyên tử Hydro không đặt trong từ trường, do đó:

$$f = \frac{E_2 - E_1}{h} = \frac{E_{01} - E_{02}}{h} + \frac{(m_{\ell 2} - m_{\ell 1})}{h} \mu_B B \quad (4b.19)$$

Vì $f_0 = \frac{E_{02} - E_{01}}{h}$ nên $f = f_0 + \frac{(m_{\ell 2} - m_{\ell 1})}{h} \mu_B B \quad (4b.20)$

Theo qui tắc lựa chọn đối với số lượng tử từ m_ℓ

$$\Delta m_\ell = 0, \pm 1$$

CHƯƠNG 4B

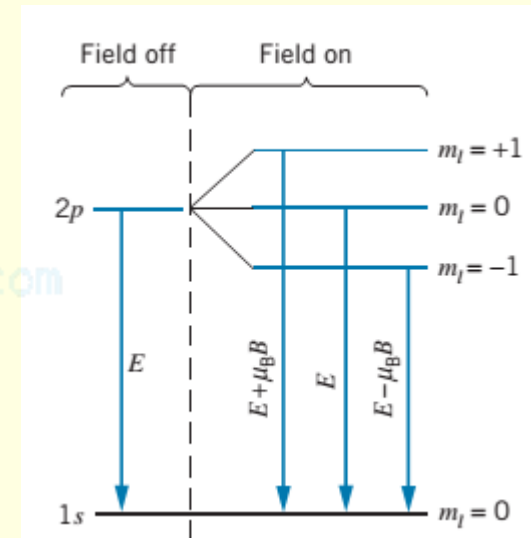
LÝ THUYẾT LƯỢNG TỬ CỦA NGUYÊN TỬ HYDRO

4B.8. HIỆU ỨNG ZEEMAN

Giải thích:

Tần số chỉ có thể có 3 giá trị

$$\begin{cases} f = f_0 - (\mu_B B / h) \\ f = f_0 \\ f = f_0 + (\mu_B B / h) \end{cases} \quad (4b.21)$$



Nghĩa là một vạch quang phổ khi không có từ trường được tách thành ba vạch khi có từ trường trong đó vạch giữa trùng với vạch cũ.

CHƯƠNG 4B

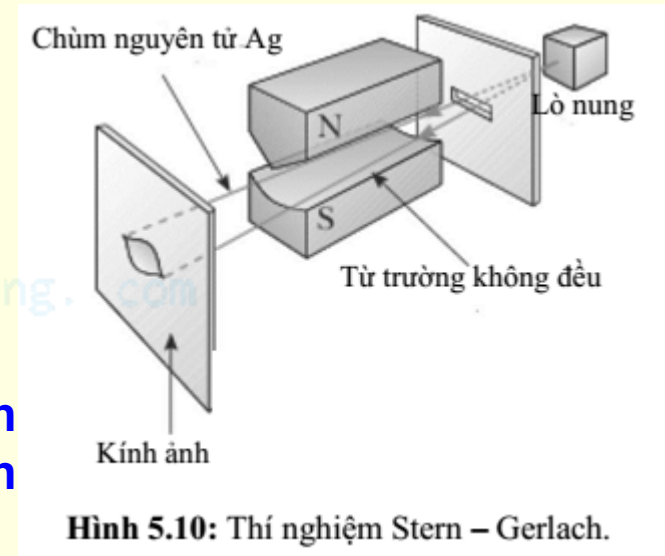
LÝ THUYẾT LƯỢNG TỬ CỦA NGUYÊN TỬ HYDRO

4B.9. SPIN CỦA ELECTRON

1. Thí nghiệm Stern-Gerlach

Chiếu chùm nguyên tử Ag vào từ trường không đều B. Quan sát thực nghiệm trên kính ảnh:

Kết quả: Trên kính ảnh xuất hiện số vạch là chẵn, bất chấp trạng thái của nguyên tử Ag



Trái với số vạch mong đợi là số lẻ (hiệu ứng Zeeman)



CHƯƠNG 4B

LÝ THUYẾT LƯỢNG TỬ CỦA NGUYÊN TỬ HYDRO

4B.9. SPIN CỦA ELECTRON

1. Thí nghiệm Stern-Gerlach

Giải thích:

Khi nguyên tử đi vào từ trường thì có sự tương tác giữa mô men từ của nguyên tử với từ trường ngoài của nam châm

Lực tác dụng:
$$F_z = -\frac{dU}{dz} = -\frac{d}{dz}(-\mu_{mz}B(z)) = \mu_{mz} \frac{dB(z)}{dz} \quad (4b.22)$$



Nguyên tử lệch hướng trong từ trường

Nếu xem electron chỉ chuyển động thuần khiết trên quỹ đạo thì ứng với một giá trị l thì có $2l + 1$ giá trị μ_{mz} , tức là có $2l + 1$ giá trị F_z



Trên màn phải xuất hiện số lẻ vạch

11/29/2017

Trong thí nghiệm quan sát được số chẵn vạch!



CHƯƠNG 4B

LÝ THUYẾT LƯỢNG TỬ CỦA NGUYÊN TỬ HYDRO

4B.9. SPIN CỦA ELECTRON

1. Thí nghiệm Stern-Gerlach

Example 7.8

In a Stern-Gerlach type of experiment, the magnetic field varies with distance in the z direction according to $dB_z/dz = 1.4 \text{ T/mm}$. The silver atoms travel a distance $x = 3.5 \text{ cm}$ through the magnet. The most probable speed of the atoms emerging from the oven is $v = 750 \text{ m/s}$. Find the separation of the two beams as they leave the magnet. The mass of a silver atom is $1.8 \times 10^{-25} \text{ kg}$, and its magnetic moment is about 1 Bohr magneton.

Đáp số: $d = 0,16 \text{ mm}$

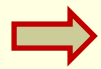
CHƯƠNG 4B

LÝ THUYẾT LƯỢNG TỬ CỦA NGUYÊN TỬ HYDRO

4B.9. SPIN CỦA ELECTRON

2. Spin của electron

Để giải thích thí nghiệm, người ta cho rằng ngoài chuyển động trên quỹ đạo quanh hạt nhân, electron còn tự quay quanh trục riêng của nó!



SPIN

Kí hiệu:

\vec{S}

Độ lớn của vector mômen spin:

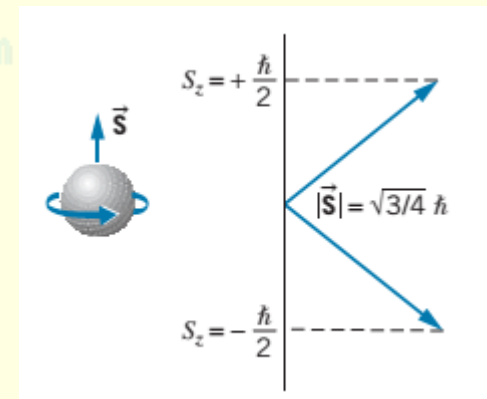
$$S = \sqrt{s(s+1)}\hbar \quad (4b.23)$$

s: số lượng tử spin

Hình chiếu của vector mômen spin lên trục z:

$$S_z = m_s \hbar$$

$m_s = \pm s$ là số lượng tử từ riêng



CHƯƠNG 4B

LÝ THUYẾT LƯỢNG TỬ CỦA NGUYÊN TỬ HYDRO

4B.9. SPIN CỦA ELECTRON

2. Spin của electron

- Ứng với một giá trị s , sẽ có $2s + 1$ giá trị m_s .
- Do chỉ có 2 sự định hướng, nên $2s + 1 = 2$
- Hay $s = 1/2$
- Vậy, $m_s = \pm 1/2$

Ví dụ: Tìm vận tốc v của electron nếu xem e^- là khối cầu bán kính $r = 5 \cdot 10^{-17} \text{m}$ và quay quanh trục qua tâm của nó. Biết mômen quán tính $I = 2/5 mr^2$

Đáp số : $v = 5,01 \cdot 10^{12} \text{ m/s}$

Mômen từ riêng:

$$\vec{\mu}_s = -\frac{e}{m_e} \vec{S} \quad (4b.24)$$

Hình chiếu của mômen từ riêng lên trục z :

$$\mu_{sz} = \mp \frac{e\hbar}{2m_e} = \mp \mu_B \quad (4b.25)$$



CHƯƠNG 4B

LÝ THUYẾT LƯỢNG TỬ CỦA NGUYÊN TỬ HYDRO

4B.10. NĂNG LƯỢNG CỦA ELECTRON

1. Mômen động lượng toàn phần

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \quad (4b.26)$$

□ Độ lớn vector mômen động lượng toàn phần

$$(4b.27) \quad J = \sqrt{j(j+1)}\hbar \quad j: \text{số lượng tử toàn phần}$$

$$j = \left| \ell \pm s \right| = \left| \ell \pm \frac{1}{2} \right| \quad (4b.28)$$

□ Hình chiếu của vector mô men động lượng toàn phần lên trục z:

$$(4b.29) \quad J_z = m_j \hbar \quad m_j = -j, -j+1, \dots, j-1, +j, \dots \text{số lượng tử từ toàn phần}$$

CHƯƠNG 4B

LÝ THUYẾT LƯỢNG TỬ CỦA NGUYÊN TỬ HYDRO

4B.10. NĂNG LƯỢNG CỦA ELECTRON

Ví dụ: Ở trạng thái $l = 1$. Tính J và J_z

Ví dụ: Tính $\vec{L} \cdot \vec{S}$ theo j, l, s

Ví dụ: Tính các giá trị có thể có của $\vec{L} \cdot \vec{S}$ ứng với $l = 1$ và $s = 1/2$

CHƯƠNG 4B

LÝ THUYẾT LƯỢNG TỬ CỦA NGUYÊN TỬ HYDRO

4B.10. NĂNG LƯỢNG CỦA ELECTRON

2. Năng lượng toàn phần của electron trong nguyên tử

Kí hiệu: $E_{n,l,j}$

Mức năng lượng: $n^2 X_j$

$l = 0$	1	2	3	4
$X = S$	P	D	F	G

Ví dụ: $n = 1, l = 0, j = \frac{1}{2} \rightarrow 1^2S_{1/2}$

$n = 2, l = 0, j = \frac{1}{2} \rightarrow 2^2S_{1/2}$

$l = 1, j = \frac{1}{2} \text{ và } j = \frac{3}{2} \rightarrow 2^2P_{1/2} \text{ và } 2^2P_{3/2}$

CHƯƠNG 4B

LÝ THUYẾT LƯỢNG TỬ CỦA NGUYÊN TỬ HYDRO

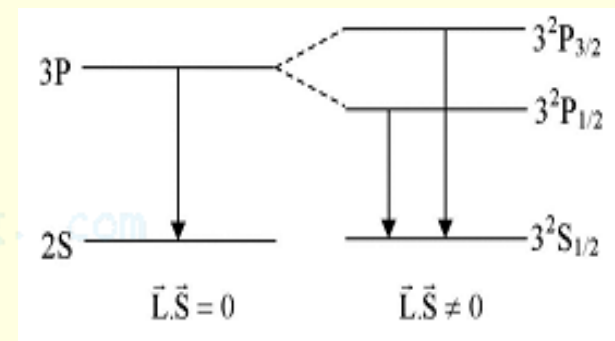
4B.10. TRẠNG THÁI VÀ NĂNG LƯỢNG CỦA ELECTRON

3. Cấu tạo bội của vạch quang phổ

- ❑ Do có sự tương tác giữa SPIN-QUỖ ĐẠO nên các mức năng lượng đều tách thành hai vạch (trừ mức S).
- ❑ Khi nguyên tử chuyển từ mức có năng lượng cao về mức năng lượng thấp phải tuân theo qui tắc lọc lựa:

$$\Delta \ell = \pm 1 \text{ và } \Delta n \neq 0$$

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



CHƯƠNG 4B

LÝ THUYẾT LƯỢNG TỬ CỦA NGUYÊN TỬ HYDRO

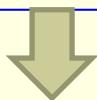
4B.11. NGUYÊN TỬ NHIỀU ELECTRON

1. Nguyên lí loại trừ Pauli

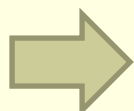
Giả sử có Z electron trong một nguyên tử tập trung trên những mức năng lượng



Z electron có khuynh hướng nhảy xuống mức năng lượng thấp nhất, trạng thái $1s$.



Nếu đúng như vậy, thì tính chất của nguyên tử (tính chất hóa học) của hai nguyên tử lân cận $Z \pm 1$ như nhau.



Trên thực tế là rất khác nhau

Neon ($Z = 10$): Khí trơ

Flo ($Z = 9$): Phản ứng mạnh



Wolfgang Pauli (1900–1958, Switzerland). His exclusion principle gave the basis for understanding atomic structure. He also contributed to the development of quantum theory, to the theory of nuclear beta decay, and to the understanding of symmetry in physical laws.

11/29/2017

CHƯƠNG 4B

LÝ THUYẾT LƯỢNG TỬ CỦA NGUYÊN TỬ HYDRO

4B.11. NGUYÊN TỬ NHIỀU ELECTRON

1. Nguyên lí loại trừ Pauli

Mỗi trạng thái lượng tử xác định bởi 4 số lượng tử n, l, m, m_s chỉ có tối đa một electron.

Hay: **Không có hai electron trong 1 nguyên tử có cùng bộ số lượng tử n, l, m, m_s**

Ví dụ: He ($Z = 2$): e^- thứ nhất ở trạng thái $1s$ có số lượng tử $n = 1, l = 0, m_l = 0, m_s = +1/2$. Như vậy e^- thứ hai có cùng n, l, m_l nhưng $m_s = -1/2$.



Wolfgang Pauli (1900–1958, Switzerland). His exclusion principle gave the basis for understanding atomic structure. He also contributed to the development of quantum theory, to the theory of nuclear beta decay, and to the understanding of symmetry in physical laws.

CHƯƠNG 4B


LÝ THUYẾT LƯỢNG TỬ CỦA NGUYÊN TỬ HYDRO

4B.11. NGUYÊN TỬ NHIỀU ELECTRON

2. Cấu trúc của nguyên tử

Lớp vỏ nguyên tử và vỏ con của nó

Các e^- có cùng số lượng tử n  có cùng khoảng cách đến hạt nhân


Có tương tác cùng điện trường, nên có cùng năng lượng


Tạo thành một lớp vỏ nguyên tử

N=	1	2	3	4	5
Lớp vỏ	K	L	M	N	O

CHƯƠNG 4B

LÝ THUYẾT LƯỢNG TỬ CỦA NGUYÊN TỬ HYDRO

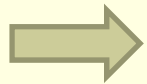
4B.11. NGUYÊN TỬ NHIỀU ELECTRON

Năng lượng của electron ngoài phụ thuộc vào n còn phụ thuộc vào l



Các electron có cùng giá trị l tập hợp thành *lớp vỏ con*

Mỗi lớp vỏ con chứa $2(2l + 1)$ electron



Số electron tối đa chứa trong một lớp vỏ nguyên tử là:

$$N = \sum_{\ell=0}^{\ell=n-1} 2(2\ell + 1) = 2[1 + 3 + 5 + \dots + 2(n-1) + 1]$$
$$= 2[1 + 3 + 5 + \dots + 2n - 1]$$

Hay:
$$N = 2 \times n \times \frac{1}{2} [1 + (2n - 1)] = 2n^2$$

11/29/2017

CHƯƠNG 4B

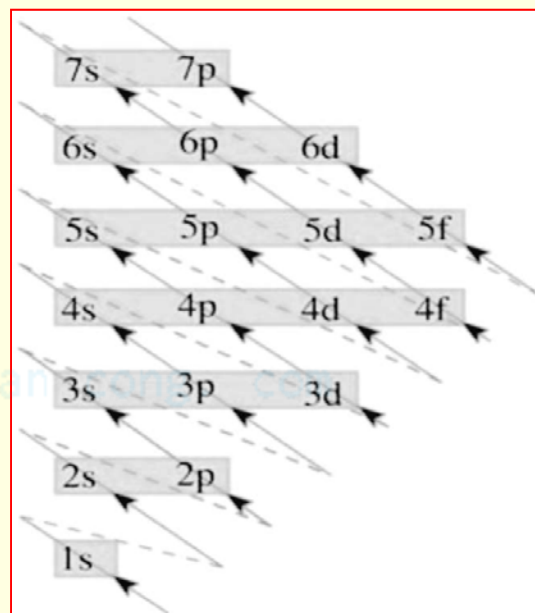
LÝ THUYẾT LƯỢNG TỬ CỦA NGUYÊN TỬ HYDRO

4B.11. NGUYÊN TỬ NHIỀU ELECTRON

TABLE 8.1 Filling of Atomic Subshells

n	l	Subshell	Capacity $2(2l+1)$
1	0	1s	2
2	0	2s	2
2	1	2p	6
3	0	3s	2
3	1	3p	6
4	0	4s	2
3	2	3d	10
4	1	4p	6
5	0	5s	2
4	2	4d	10
5	1	5p	6
6	0	6s	2
4	3	4f	14
5	2	5d	10
6	1	6p	6
7	0	7s	2
5	3	5f	14
6	2	6d	10

Dẫn đến *cấu hình electron* cho các nguyên tố. Thứ tự các lớp được sắp xếp theo thứ tự: 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s, 4d, 5p, 6s, 4f, 5d,



11/29/2017

CHƯƠNG 4B

LÝ THUYẾT LƯỢNG TỬ CỦA NGUYÊN TỬ HYDRO

4B.11. NGUYÊN TỬ NHIỀU ELECTRON

3. Bảng phân loại tuần hoàn các nguyên tố

Alkalies												Inert gases				
1s	1 H	Alkaline earths										2 He				
2s	3 Li	4 Be														
3s	11 Na	12 Mg														
4s	19 K	20 Ca														
5s	37 Rb	38 Sr														
6s	55 Cs	56 Ba														
7s	87 Fr	88 Ra														
			Transition metals													
3d	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn						
4d	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd						
5d	71 Lu	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg						
6d	103 Lr	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112 Cn						
			Lanthanides (rare earths)													
4f	57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb		
5f	89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Mv	102 No		
			Actinides													
													Halogens			
2p	5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne										
3p	13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar										
4p	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr										
5p	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe										
6p	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn										
7p	113 Uut	114 Uuq	115 Uup	116 Uuh	117 Uus	118 Uuo										