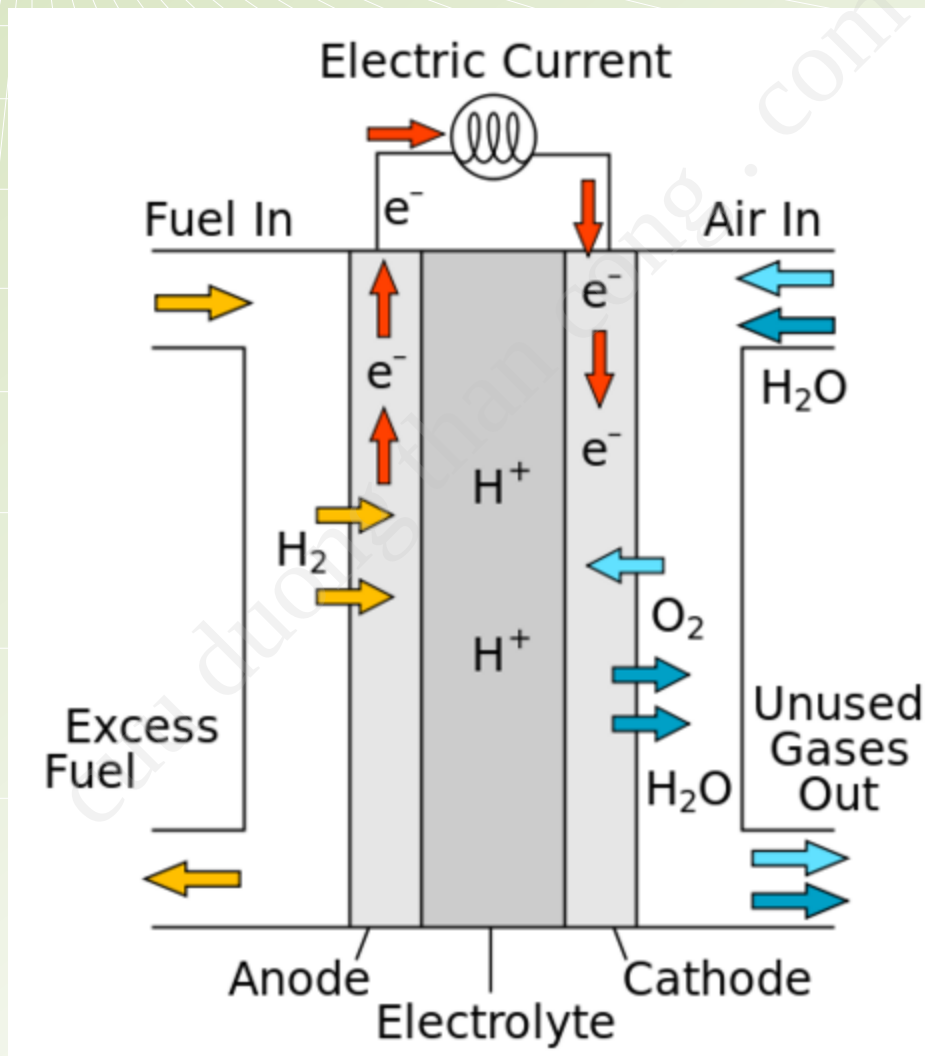


Chương 7a: Nguyên tử Hydro





Chương 7a: Nguyên tử Hydro

7.1 Phổ nguyên tử Hydro

7.2 Phương trình Schrodinger cho Hydro

7.3 Năng lượng electron

7.4 Hàm sóng electron

7.5 Mật độ xác suất electron

7.6 Hình dạng đám mây electron

7.7 Spin electron



Chương 7a: Nguyên tử Hydro

7.1 Phổ nguyên tử Hydro

7.2 Phương trình Schrodinger cho Hydro

7.3 Năng lượng electron

7.4 Hàm sóng electron

7.5 Mật độ xác suất electron

7.6 Hình dạng đám mây electron

7.7 Spin electron



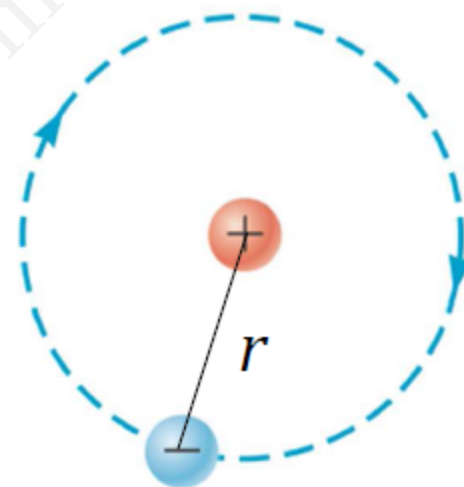
7.2 Phương trình Schrodinger cho Hydro

- Thế năng của electron chuyển động quanh nhân:

$$U = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

- Hàm sóng dừng của electron thỏa phương trình Schrödinger:

$$\Delta\Phi + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \Phi = 0$$





Chương 7a: Nguyên tử Hydro

7.1 Phổ nguyên tử Hydro

7.2 Phương trình Schrodinger cho Hydro

7.3 Năng lượng electron

7.4 Hàm sóng electron

7.5 Mật độ xác suất electron

7.6 Hình dạng đám mây electron

7.7 Spin electron



7.4 Hàm sóng electron (1)

- Hàm sóng trong tọa độ cầu có dạng:

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

- Mỗi hàm sóng hay *trạng thái* được xác định bởi một bộ ba số lượng tử (n, l, m) .

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

$$l = 0, 1, 2, \dots, n-1$$

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$$

l: số lượng tử quỹ đạo

m: số lượng tử từ



7.4 Hàm sóng electron (1)

■ Cấu trúc nguyên tử

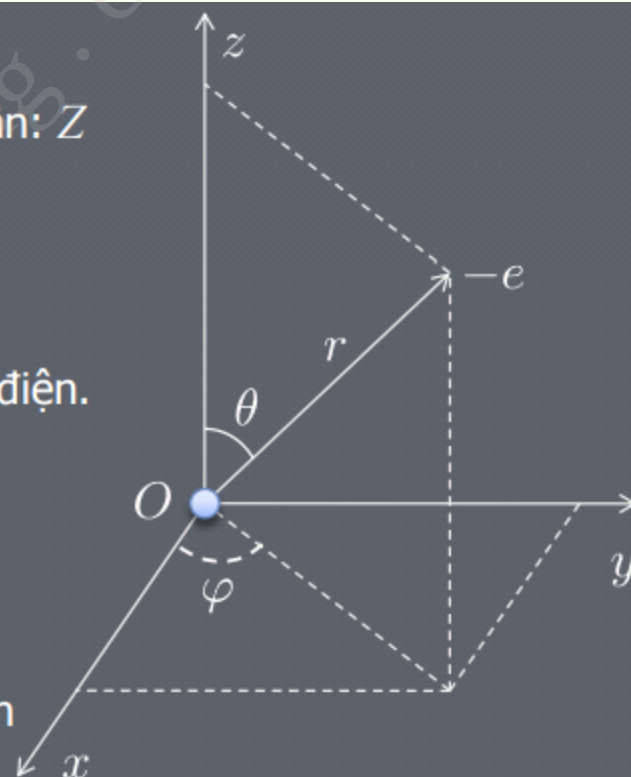
- Tổng số electron chuyển động quanh hạt nhân: Z
- Điện tích của điện tử : $-e$
- Điện tích tổng cộng của điện tử: $-Ze$
- Điện tích của hạt nhân là : $+Ze$
- Ở điều kiện thường, nguyên tử trung hòa về điện.

Nguyên tử Hydro.

■ Chuyển động của electron trong H

- Nguyên tử Hydro chỉ có 1 electron.
- Chọn hạt nhân làm gốc tọa độ.
- Thế năng tương tác giữa hạt nhân và electron (lực hút Coulomb)

$$U = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$





7.4 Hàm sóng electron (1)

- Phương trình Schrödinger cho hạt điện tử có dạng.

$$\nabla^2 \psi(\vec{r}) + \frac{2m_e}{\hbar^2} \left[E + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right] \psi(\vec{r}) = 0$$

- Chuyển hệ tọa độ de Cartesian sang hệ tọa độ cầu.

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

$$y = r \sin \theta \sin \varphi$$

$$z = r \cos \theta$$

- Toán tử nabla trong hệ tọa độ cầu:

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

- Ta có:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{r^2} \frac{\partial \psi(r, \theta, \varphi)}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi(r, \theta, \varphi)}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial \psi(r, \theta, \varphi)}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi(r, \theta, \varphi)}{\partial \theta} \right) \\ & + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi(r, \theta, \varphi)}{\partial \varphi^2} + \frac{2m_e}{\hbar^2} \left[E + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right] \psi(r, \theta, \varphi) = 0 \end{aligned}$$



7.4 Hàm sóng electron (1)

- Sử dụng phương pháp phân ly biến số.

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

- Suy ra

$$\begin{aligned} \frac{1}{R(x)} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR(r)}{dr} \right) + \frac{2m_e}{\hbar^2 r^2} \left[E + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right] = \\ = - \frac{1}{Y(\theta, \varphi) \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left[\sin \theta \frac{\partial Y(\theta, \varphi)}{\partial \theta} \right] - \frac{1}{Y(\theta, \varphi) \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y(\theta, \varphi)}{\partial \varphi^2} \end{aligned}$$

- Phương trình có nghiệm đơn trị, giới nội và liên tục khi λ xác định.

$$\begin{aligned} \frac{1}{R(x)} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR(r)}{dr} \right) + \frac{2m_e}{\hbar^2 r^2} \left[E + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right] = \lambda \\ \frac{1}{Y(\theta, \varphi) \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left[\sin \theta \frac{\partial Y(\theta, \varphi)}{\partial \theta} \right] + \frac{1}{Y(\theta, \varphi) \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y(\theta, \varphi)}{\partial \varphi^2} = -\lambda \end{aligned}$$



7.4 Hàm sóng electron (1)

- Nghiệm của phương trình vi phân có dạng.

$$\psi_{n\ell m}(r, \theta, \varphi) = R_{n\ell}(r) \cdot Y_{\ell, m}(\theta, \varphi)$$

- Số lượng tử chính : $n = 1, 2, 3, \dots$
- Số lượng tử orbital : $\ell = 0, 1, 2, 3, \dots, n - 1$
- Số lượng tử từ : $m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, \pm \ell$
- Hằng số $\lambda = \ell(\ell + 1)$

- Trong đó

$$Y_{\ell, m}(\theta, \varphi) = \epsilon \sqrt{\frac{(2\ell + 1)(\ell - |m|)!}{4\pi(\ell + |m|)!}} e^{im\varphi} P_{\ell}^m(\cos \theta)$$

$$\epsilon = (-1)^m \text{ khi } m \geq 0; \quad \epsilon = 1 \text{ khi } m < 0$$

- Đa thức Legendre

$$P_{\ell}^m(x) = (1 - x^2)^{|m|/2} \left(\frac{d}{dx} \right)^{|m|} \frac{1}{2^{\ell} \ell!} \left(\frac{d}{dx} \right)^{\ell} (x^2 - 1)^{\ell}$$



7.4 Hàm sóng electron (1)

➤ Một số dạng hàm:

$$R_{1,0} = 2 \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} e^{-\frac{Zr}{a_0}}$$

$$R_{2,0} = \frac{1}{8} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \left(2 - \frac{Zr}{a_0} \right) e^{-\frac{Zr}{2a_0}}$$

$$R_{2,1} = \frac{1}{24} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \frac{Zr}{a_0} e^{-\frac{Zr}{2a_0}}$$

$$Y_{0,0} = (2\sqrt{\pi})^{-1}$$

$$Y_{1,1} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\varphi}$$

$$Y_{1,0} = -\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$$

$$Y_{1,-1} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{-i\varphi}$$

▪ Trong đó a_0 là bán kính Bohr

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2}$$

➤ Năng lượng của electron:

$$E_n = -\frac{1}{n^2} \frac{m_e Z e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} = -\frac{1}{n^2} \frac{Z \hbar^2}{2m_e a_0^2}$$



7.4 Hàm sóng electron (1)

- Năng lượng của electron trong nguyên tử Hydro : $Z=1$

$$E_n = -\frac{1}{n^2} \frac{m_e e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} = -\frac{Rh}{n^2}$$

- Hằng số Rydberg

$$R = \frac{m_e e^4}{4\pi(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} = 3,27 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$$

➤ **Kết luận:**

- Năng lượng của electron trong nguyên tử H và trong các Ion đồng dạng với nó là gián đoạn và chỉ phụ thuộc vào số nguyên n .
- $n=1 \rightarrow$ lớp K; $n=2 \rightarrow$ lớp L; $n=3 \rightarrow$ lớp M ...
- Năng lượng Ion hóa (năng lượng để bứt điện tử ra khỏi nguyên tử) là năng lượng để đưa electron chuyển từ trạng thái E_1 lên $E_0=0$:

$$E = 0 - E_1 = \frac{m_e e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} = 2,185 \times 10^{-18} \text{ J} = 13,5 \text{ eV}$$



7.3 Năng lượng electron (2)

- Khi electron chuyển từ mức năng lượng cao về một mức thấp hơn, nguyên tử phát một photon có năng lượng:

$$\varepsilon = \frac{hc}{\lambda} = E_{n_2} - E_{n_1} = \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^2} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

- và bước sóng:

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^3 c} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \equiv R \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$



7.1 Phổ nguyên tử Hydro (1)

- Công thức Rydberg:

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

- $n_1 = 1, 2, 3, \dots$
- $n_2 > n_1$
- R là hằng số Rydberg



Johannes Rydberg
(1854-1919)



7.5 Mật độ xác suất electron (1)

- Xác suất tìm thấy e^- trong một thể tích dV :

$$|R_{nl}(r)|^2 |Y_{lm_l}(\theta, \varphi)|^2 dV$$

Mật độ xác suất

- Xác suất tìm thấy e^- trong một vỏ cầu có bề dày dr :

$$|R_{nl}(r)|^2 r^2 dr$$

Mật độ xác suất
theo khoảng cách

- Xác suất tìm thấy e^- trong một góc khối $d\Omega$:

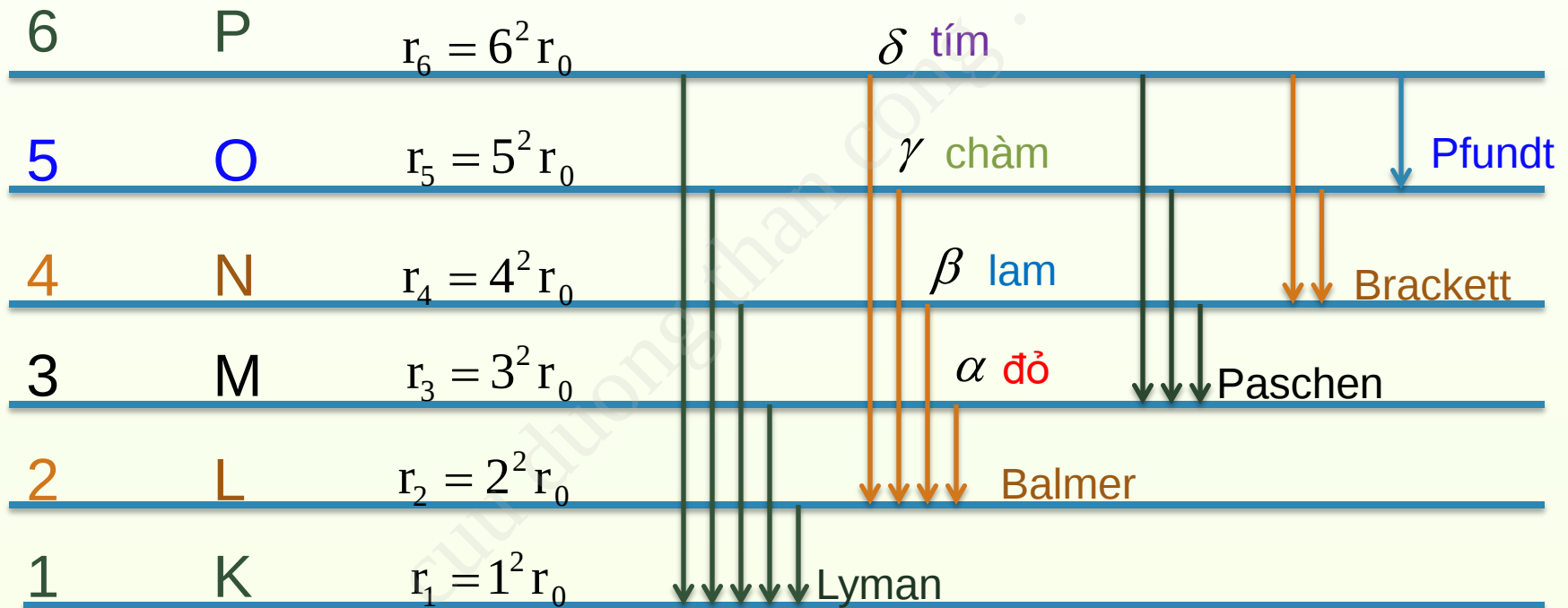
$$|Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 d\Omega$$

Mật độ xác suất
theo góc khối



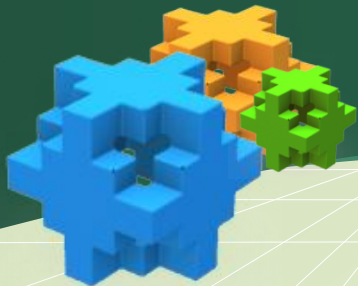
7.1 Phổ nguyên tử Hydro (2)

n Quỹ đạo Bán kính qđ $r_n = n^2 r_0$ $r_0 = 5,3 \cdot 10^{-11} \text{ m}$ Ban kinh Borh



$$\frac{hc}{\lambda} = E_f - E_i$$

Vd. 5,6,10,11,13, 15, 17, 19, 24, 28, 32,33, 35, 39.



Sơ đồ

Electron có thể:

bị kích thích đến mức NL cao hơn $E_1 \rightarrow 2 \rightarrow 3, \dots$

giải phóng NL để trở về mức thấp hơn $E \dots \rightarrow 3, \rightarrow 2 \rightarrow 1$

NL được xđ bởi $(n, l, m, j) \Rightarrow$ Quy luật chuyển mức NL:

1. Chỉ xét đến n (số lượng tử chính): $\Delta n \neq 0$

2. Chỉ xét đến cả n và l (số lượng tử quỹ đạo): $\Delta n \neq 0 \quad \Delta l = \pm 1$

3. Nếu đặt 2. vào từ trường ngoài (ko tính spin) thì phải có thêm qui tắc chọn lựa cho m (số lượng tử từ): $\Delta m = 0, \pm 1$

4. Nếu ở 2. có tính thêm spin (ko có từ trường ngoài) thì phải có thêm qui tắc chọn lựa cho j (số lượng tử toàn phần). $\Delta j = 0, \pm 1$



7.4 Hàm sóng electron (2)

- Ở mỗi trạng thái xác định bởi một bộ ba số lượng tử (n, l, m) , electron có:

- năng lượng

$$E_n = -13,6 \frac{1}{n^2} (eV)$$

- momen động lượng

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

- momen động đối với một trục z

$$L_z = \hbar m$$



7.4 Hàm sóng electron (3)

- Ở trạng thái có $l = 2$ momen động là:

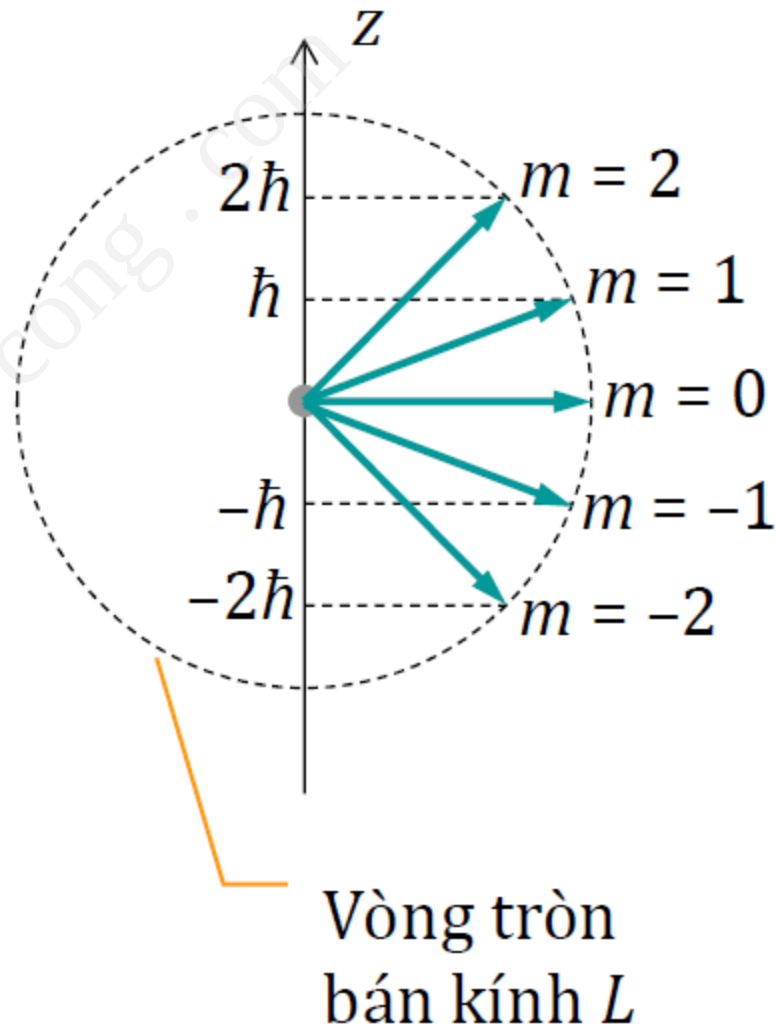
$$L = \hbar\sqrt{2 \times 3} = \hbar\sqrt{6}$$

- Hình chiếu momen động trên trục z:

$$L_z = m\hbar$$

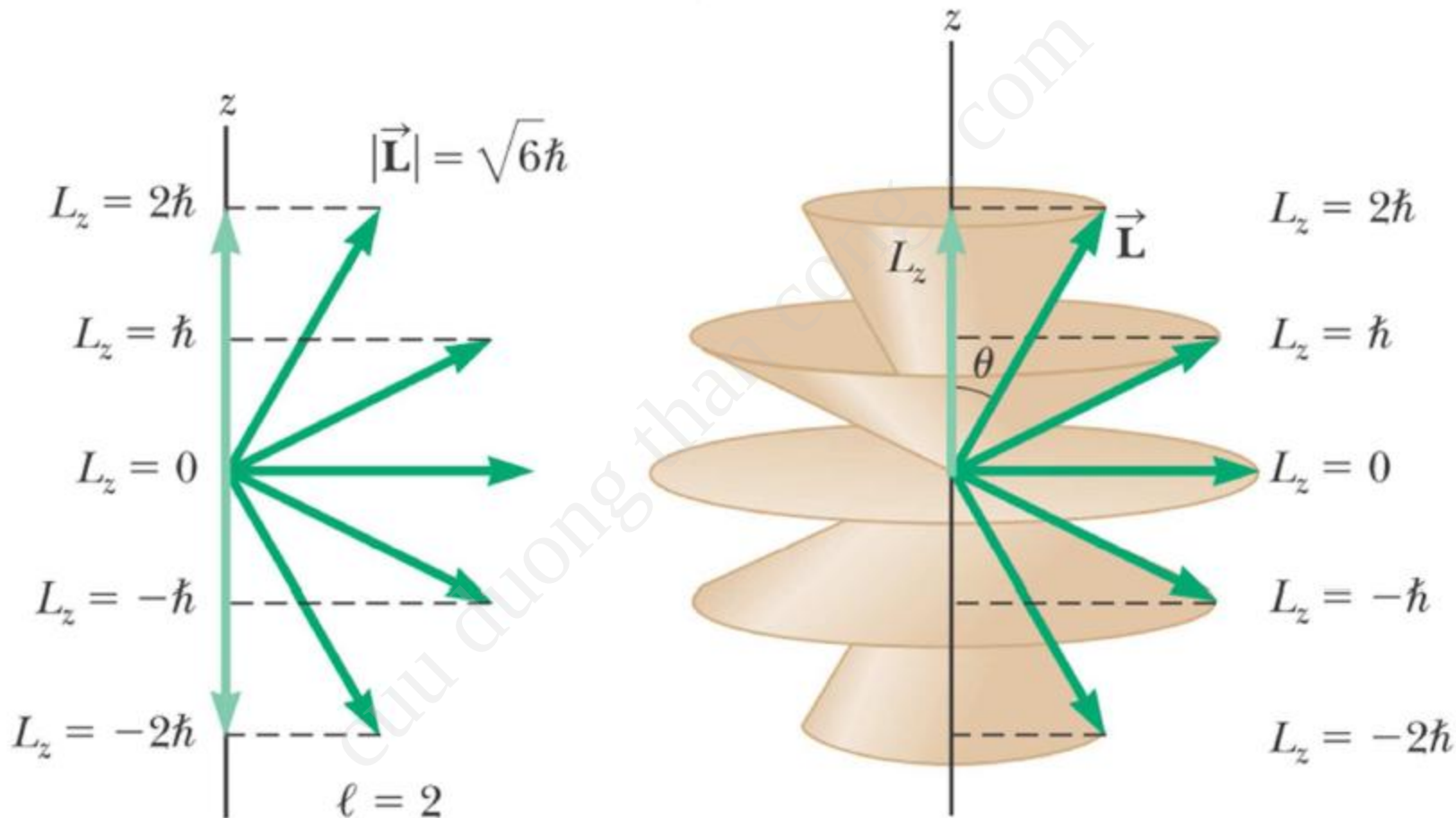
$$m = -2, -1, 0, 1, 2$$

- L chỉ có thể có một số hướng xác định – *sự lượng tử hóa không gian*.





7.4 Hàm sóng electron (4)



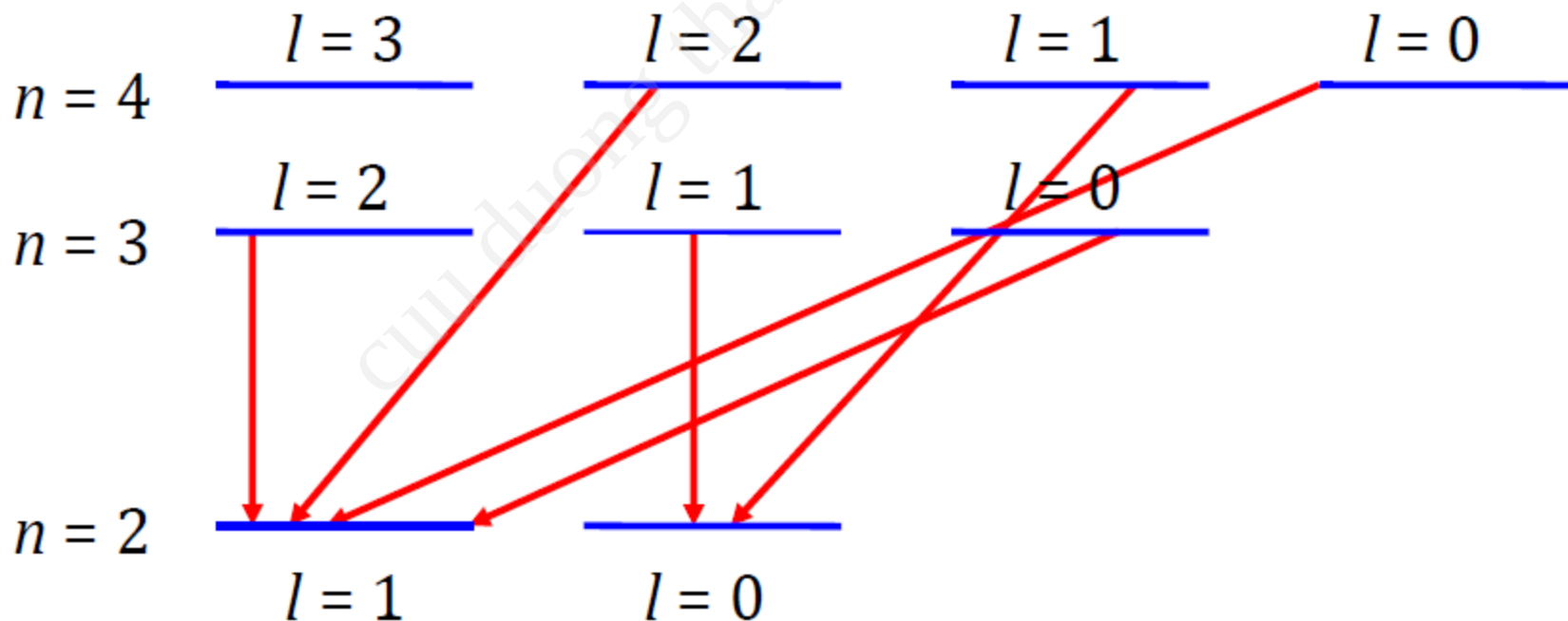
Trong không gian vectơ L nằm trên một mặt nón và quay quanh trục z .



7.4 Hàm sóng electron (5)

- Để bảo toàn momen động, electron chỉ có thể dịch chuyển giữa các trạng thái có:

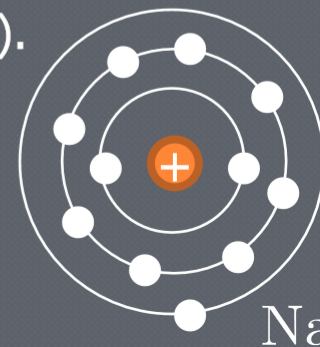
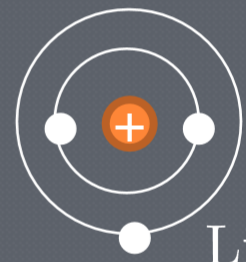
$$\Delta l = \pm 1$$



Nguyên tử kim loại kiềm

Nguyên tử kim loại kiềm

- Năng lượng của electron hoá trị trong nguyên tử kim loại kiềm.
 - Kim loại kiềm : Li, Na, K, Rb, Cs... có cấu trúc lớp điện tử ngoài cùng giống với nguyên tử H – chỉ có một electron ở vòng ngoài cùng.
 - Điện tử ngoài cùng được gọi là điện tử hoá trị.
 - Phần còn lại gọi là lõi nguyên tử (hạt nhân và các điện tử khác).
 - Tương tác giữa điện tử hoá trị và phần lõi nguyên tử rất yếu.
 - Tính chất hoá học, quang học của các nguyên tử kim loại kiềm về cơ bản giống với nguyên tử H.
 - Năng lượng của electron hoá trị trong kim loại kiềm gồm
 - Năng lượng liên kết giữa electron hoá trị và hạt nhân (giống với năng lượng của electron hoá trị của nguyên tử H).
 - Năng lượng liên kết giữa electron hoá trị và các electron khác trong nguyên tử.
- $$E_{n\ell} = -\frac{1}{(n + \Delta_\ell)^2} \frac{m_e e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2}$$
- Phần bổ chính phụ thuộc vào số lượng tử orbital ℓ .





Nguyên tử kim loại kiềm

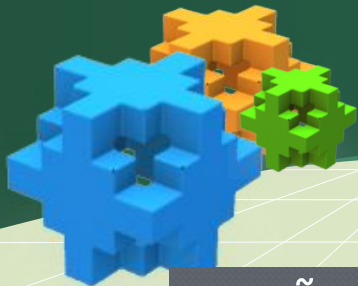
➤ Bảng giá trị phần bổ chính.

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	1,146	0,007
37	Rb	3,195	2,711	1,233	0,012
55	Cs	4,131	3,649	2,448	0,022

➤ Ký hiệu các mức năng lượng: nX .

$$\ell = 0 \Rightarrow X = S; \quad \ell = 1 \Rightarrow X = P; \quad \ell = 2 \Rightarrow X = D \quad \dots$$

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	$3d$	$3D$	



Nguyên tử kim loại kiềm

- Mỗi lớp K, L, M, ... được chia thành các lớp con S, P, D...
 - Mỗi lớp con có $2(2\ell + 1)$ electron.
- $n = 1$: có một lớp con S, số electron tối đa là 2 tương ứng với $\ell = 0$
- $n = 2$: có hai lớp con S và P.
 - ➡ Lớp con S tương ứng với $\ell = 0$ có 2 electron.
 - ➡ Lớp con P tương ứng với $\ell = 1$ có $2(2+1) = 6$ electron
- $n = 3$: có 3 lớp con S, P và D.
 - ➡ Lớp con S tương ứng với $\ell = 0$ có 2 electron.
 - ➡ Lớp con P tương ứng với $\ell = 1$ có $2(2+1) = 6$ electron
 - ➡ Lớp con D tương ứng với $\ell = 2$ có $2(4+1) = 10$ electron
- $n = 4$: có 4 lớp con S, P, D và F.
 - ➡ Lớp con S tương ứng với $\ell = 0$ có 2 electron.
 - ➡ Lớp con P tương ứng với $\ell = 1$ có $2(2+1) = 6$ electron
 - ➡ Lớp con D tương ứng với $\ell = 2$ có $2(4+1) = 10$ electron
 - ➡ Lớp con F tương ứng với $\ell = 3$ có $2(6+1) = 14$ electron

Nguyên tử kim loại kiềm

■ Quang phổ của các nguyên tử kim loại kiềm.

➤ Việc chuyển mức năng lượng phải tuân theo quy tắc chọn lọc:

$$\Delta l = \pm 1$$

➤ Với $l = 0$ tương ứng với mức năng lượng $2S$: chỉ có các mức nP (với $n = 2, 3, 4, \dots$) mới có thể chuyển về mức $2S$.

➤ Với $l = 1$ Các mức có thể chuyển về mức $2P$ là nS và nD .

➤ Dãy chính: có các vạch tuân theo công thức

■ Đối với Li $\nu = 2S - nP$

■ Đối với Na $\nu = 3S - nP$

➤ Dãy phụ II: có các vạch tuân theo công thức

■ Đối với Li $\nu = 2P - nS$

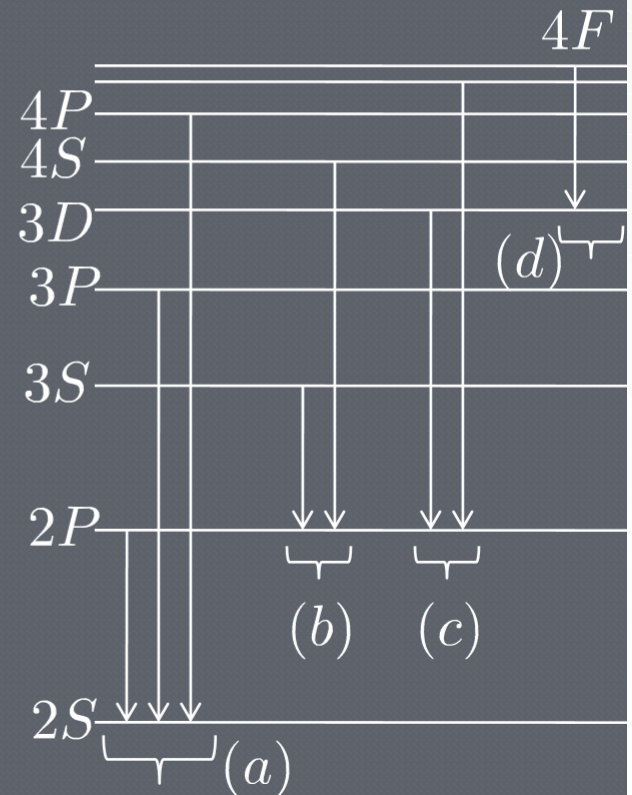
■ Đối với Na $\nu = 3P - nS$

➤ Dãy phụ I: có các vạch tuân theo công thức

$$\nu = 2P - nD$$

➤ Dãy cơ bản: có các vạch tuân theo công thức

$$\nu = 3D - nF$$

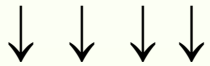




7.4 Hàm sóng electron (5)

$$n = 1, 2, 3, 4, \dots \infty.$$

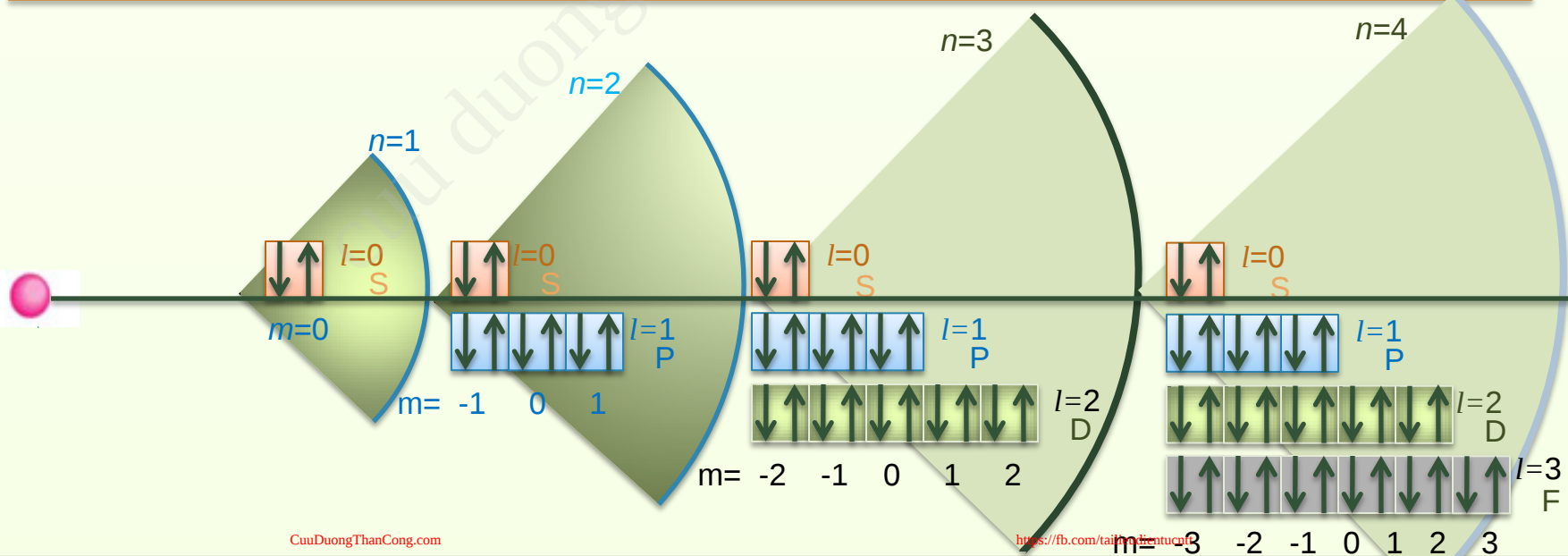
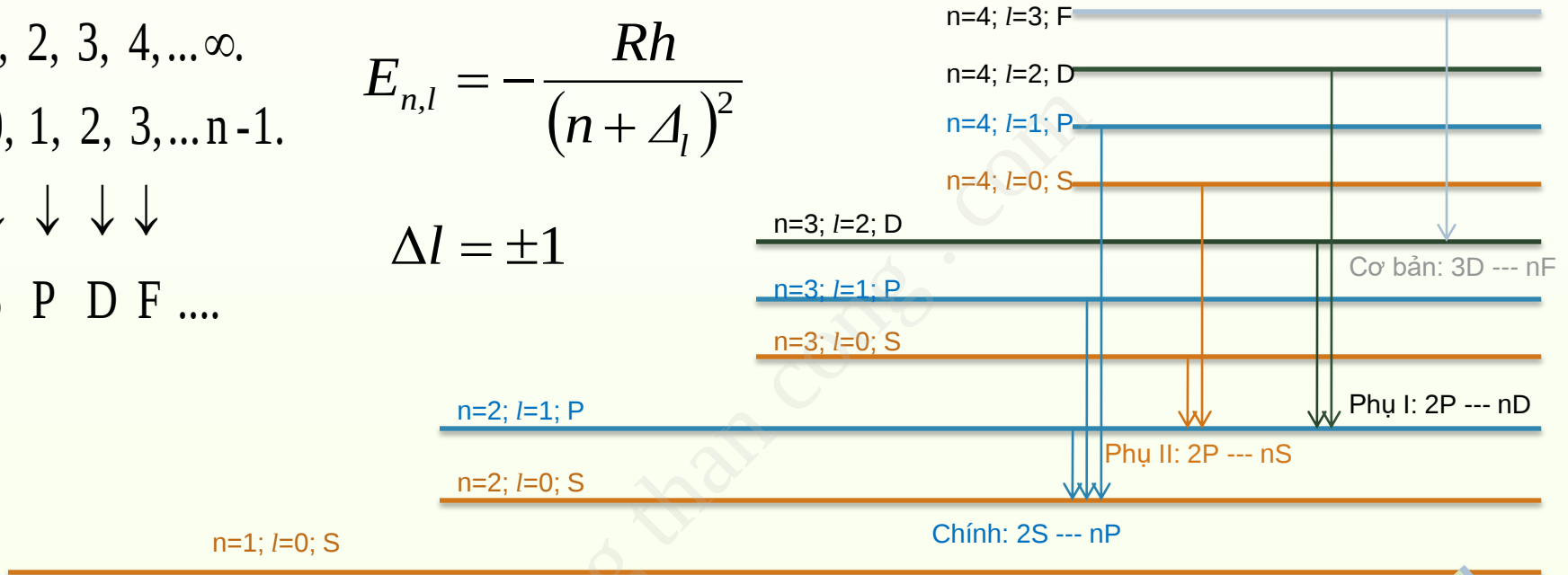
$$l = 0, 1, 2, 3, \dots n-1.$$

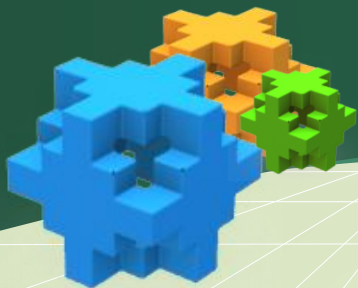


S P D F

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

$$\Delta l = \pm 1$$





Nguyên tử kim loại kiềm

■ Moment động lượng (moment orbital).

- Electron chuyển động không có quỹ đạo
- Vector moment động lượng của electron $\vec{L}$ không có hướng xác định.
- Giá trị của moment động lượng của electron lại là một đại lượng xác định và nó nhận các giá trị gián đoạn:

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

- Hình chiếu theo phương z của vector moment động lượng của electron cũng bị lượng tử hoá

$$L_z = m\hbar; \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \ell$$

■ Moment từ.

- Electron chuyển động quanh hạt nhân sẽ tạo thành dòng điện, dòng điện này có moment từ:

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



Nguyên tử kim loại kiềm

- Hình chiếu theo phương z của moment từ:

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

Maneton Bohr: $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 10^{-23} \text{ A.m}^2$

- *Hình chiếu moment từ của electron chuyển động quanh hạt nhân lên một phương bất kỳ luôn bằng số nguyên lần của một đại lượng không đổi maneton Bohr, nghĩa là nó bị lượng tử hoá.*

■ Hiệu ứng Zeeman

- Khi nguyên tử phát sáng đặt trong từ trường, vạch quang phổ bị tách thành nhiều vạch nằm sát nhau.
- Sự tách vạch phổ tuân theo quy tắc lọc lựa :
$$\Delta m = 0, \pm 1$$
- Mỗi một vạch phổ bị tách thành 3 vạch, vạch ở giữa trùng với vạch cũ (vạch khi không có từ trường).

$$\nu; \quad \nu' = \nu \pm \frac{\mu_B}{h} B$$



7.4 Hàm sóng electron (5)

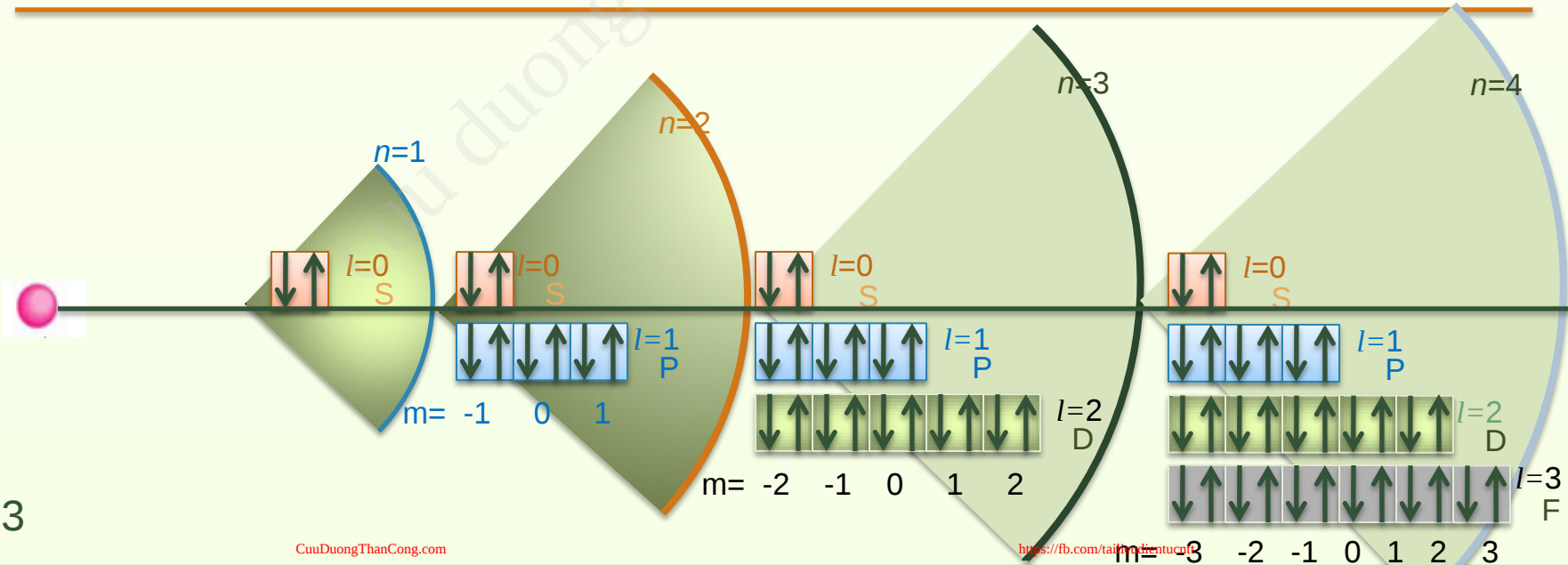
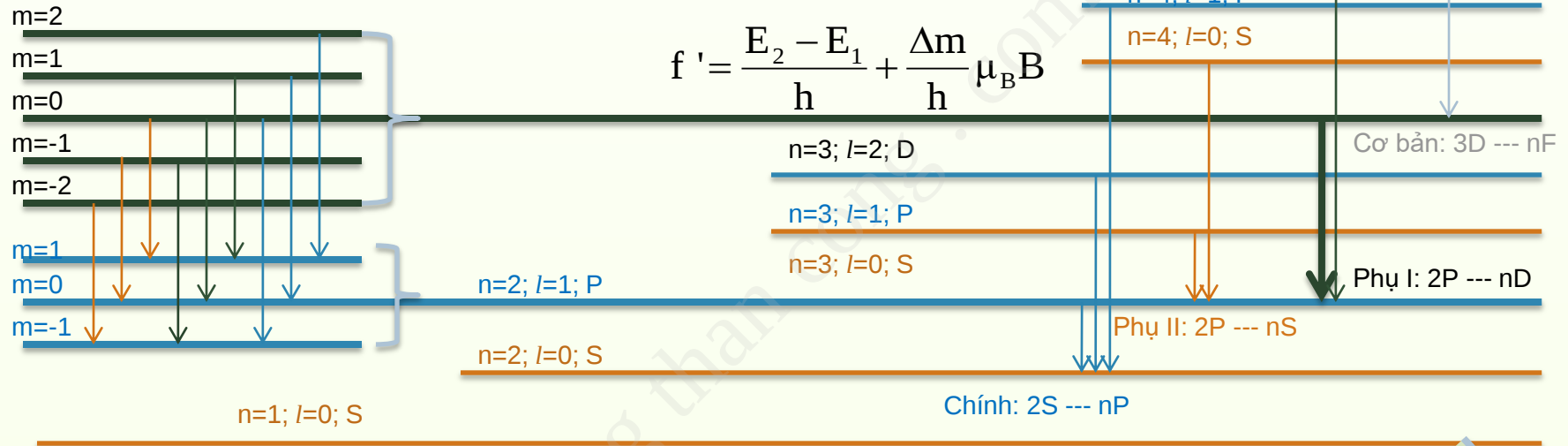
$$l \Rightarrow m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l. \Rightarrow \mu_z = m\mu_B \Rightarrow \Delta E = m\mu_B \cdot B$$

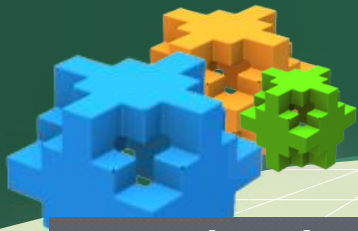
$$\Delta m = 0; \pm 1$$

$$\mu_B = 10^{-22} \text{ A.m}^2$$

$$E' = E + m\mu_B B$$

$$f' = \frac{E_2 - E_1}{h} + \frac{\Delta m}{h} \mu_B B$$





Nguyên tử kim loại kiềm

■ Khái niệm Spin:

- Trên thực tế, các vạch phổ không phải là các vạch đơn mà nó được hợp thành bởi nhiều vạch nhỏ. Các vạch phổ này gọi là vạch phổ kép.
 - Ví dụ: vạch phổ màu vàng của Na gồm 2 vạch có bước sóng $5890 \text{ \AA}$ và $5896 \text{ \AA}$.
- Thực nghiệm chứng tỏ rằng: moment từ lớn gấp 2 lần so với lý thuyết:

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

- Moment từ liên quan đến sự chuyển động quay của các hạt mang điện:
 - Chỉ sử dụng sự chuyển động của electron quanh hạt nhân không thể giải thích được hiện tượng này.
 - Người ta giả thiết rằng, electron có thêm phần chuyển động tự quay quanh một trục riêng của nó.
 - Thành phần đóng góp vào moment từ sẽ có thêm thành phần moment spin, moment spin đóng vai trò như moment động lượng riêng.



Nguyên tử kim loại kiềm

- Hình chiếu của moment spin:

$$S^z = \pm \frac{\hbar}{2} = m_s \hbar; \quad m_s = \pm \frac{1}{2}$$

- m_s : số lượng tử hình chiếu spin.
- Spin là một khái niệm thuần túy lượng tử, không có khái niệm spin trong cơ học cổ điển. Giá trị của moment spin:

$$S = \sqrt{s(s+1)}\hbar; \quad s = \frac{1}{2}$$

- s : số lượng tử spin.
- Hình chiếu của moment từ riêng của spin trên trục z :

$$\mu_s^z = \mp \mu_B = \mp \frac{e\hbar}{2m}$$

- Vector moment từ:

$$\vec{\mu}_s = -\frac{e}{m_e} \vec{S}$$

- Giá trị này hoàn toàn phù hợp với thực nghiệm



Nguyên tử kim loại kiềm

■ Trạng thái và năng lượng của electron trong nguyên tử:

- Moment toàn phần của electron:

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

- Giá trị của moment toàn phần

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

- Số lượng tử moment toàn phần

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

- Trạng thái của electron trong nguyên tử được xác định bởi 4 số lượng tử:
 n, ℓ, m, m_s

- Các tương tác:

- Tương tác giữa moment từ quỹ đạo và moment từ riêng
- Tương tác giữa các moment từ riêng của các electron trong nguyên tử.
- Khi tính đến spin, có thêm phần năng lượng bổ sung phụ thuộc vào hướng của spin.
- Năng lượng toàn phần của electron trong nguyên tử phụ thuộc vào 3 số lượng tử n, ℓ, j



Nguyên tử kim loại kiềm

- Mỗi mức năng lượng trước đây bị tách thành hai mức tương ứng với

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

- Cấu trúc năng lượng này gọi là cấu trúc tế vi, khoảng cách giữa hai mức năng lượng này không lớn lắm.
- Ký hiệu các mức năng lượng của electron: $n^2 X_j$
 - Số lượng tử chính: $n = 1, 2, 3, \dots$
 - Chỉ số 2 thể hiện cấu tạo bội kép của mức năng lượng.
 - Các trạng thái $X = S, P, D, \dots$ tương ứng với $\ell = 0, 1, 2, \dots$
 - Số lượng tử moment toàn phần

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

- Ký hiệu cho trạng thái của electron hóa trị: nx_j



Nguyên tử kim loại kiềm

- Bảng các trạng thái và các mức năng lượng của electron hóa trị trong nguyên tử H và kim loại kiềm.

n	ℓ	j	Trạng thái của electron hóa trị	Mức năng lượng (với hệ số $-h$)
1	0	$\pm 1/2$	$1s_{\pm 1/2}$	$1^2S_{1/2}$
2	0	$\pm 1/2$	$2s_{\pm 1/2}$	$2^2S_{\pm 1/2}$
	1	$\begin{cases} 1/2 \\ 3/2 \end{cases}$	$2p_{1/2}$	$2^2P_{1/2}$
			$2p_{3/2}$	$2^2P_{3/2}$
3	0	$\pm 1/2$	$2s_{\pm 1/2}$	$2^2S_{\pm 1/2}$
	1	$\begin{cases} 1/2 \\ 3/2 \end{cases}$	$3p_{1/2}$	$3^2P_{1/2}$
			$3p_{3/2}$	$3^2P_{3/2}$
	2	$\begin{cases} 3/2 \\ 5/2 \end{cases}$	$3d_{3/2}$	$3^2D_{3/2}$
			$3d_{5/2}$	$3^2D_{5/2}$



Nguyên tử kim loại kiềm

■ Cấu tạo bội của vạch phổ:

- Tương tự đối với số quy tắc chọn lọc đối với số lượng tử quỹ đạo, khi electron chuyển mức cũng phải tuân theo quy tắc chọn lọc đối với số lượng tử j .

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

- Ví dụ: Xét chuyển mức của dãy chính ($\Delta \ell = -1$): $\nu = 2S - 3P$

- $\Delta j = 0$, ta có

$$\nu_1 = 2^2S_{1/2} - 3^2P_{1/2}$$

- $\Delta j = -1$, ta có:

$$\nu_2 = 2^2S_{1/2} - 3^2P_{3/2}$$

- Xét vạch: $\nu = 2P - 3D$

- $\Delta j = -1$, ta có

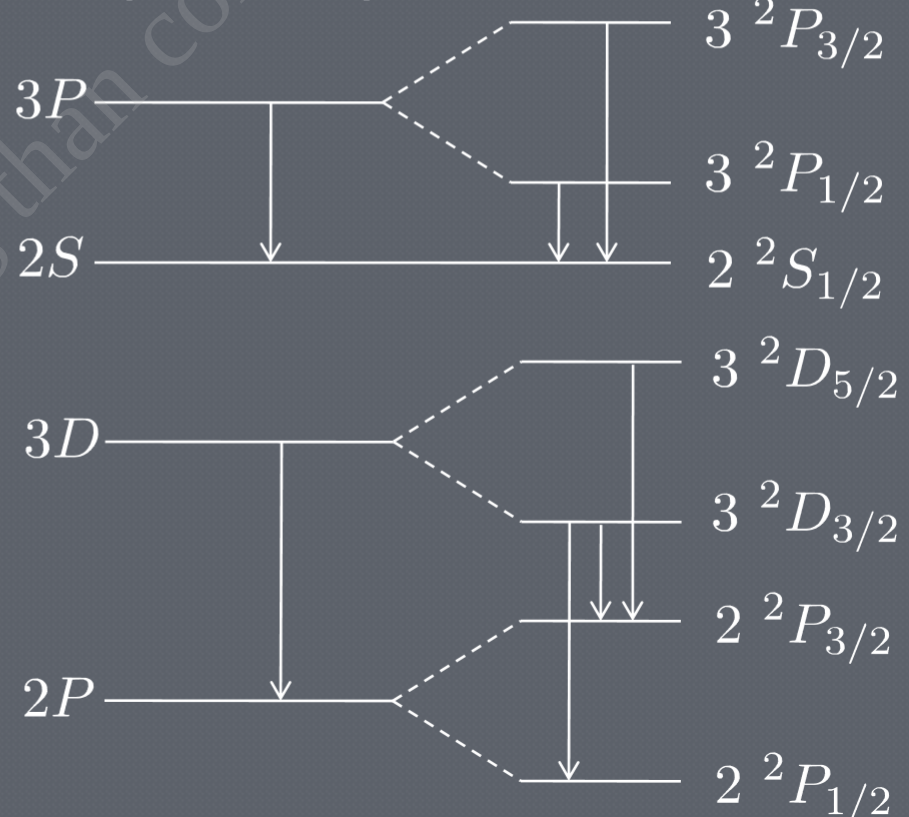
$$\nu_1 = 2^2P_{1/2} - 3^2D_{3/2}$$

- $\Delta j = 0$, ta có:

$$\nu_2 = 2^2P_{3/2} - 3^2D_{3/2}$$

- $\Delta j = 1$, ta có:

$$\nu_3 = 2^2P_{3/2} - 3^2D_{5/2}$$





7.4 Hàm sóng electron (5)

$$L = \hbar \sqrt{l(l+1)} \quad L_z = m\hbar$$

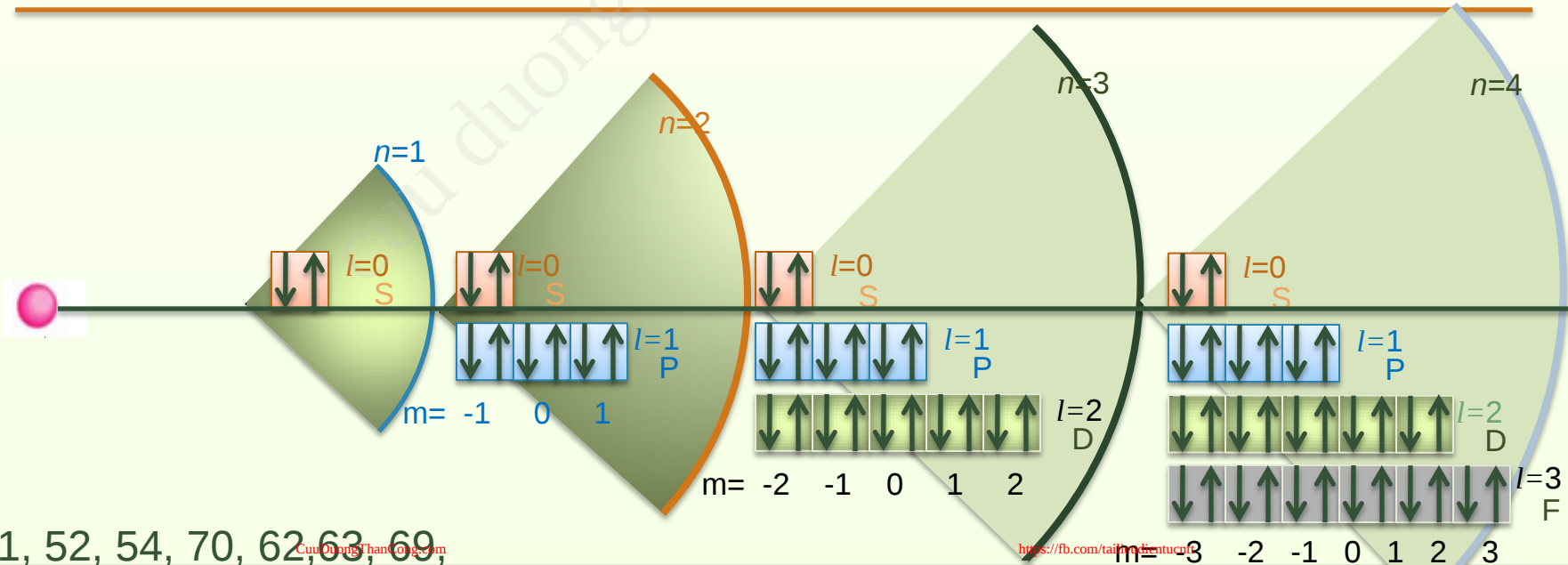
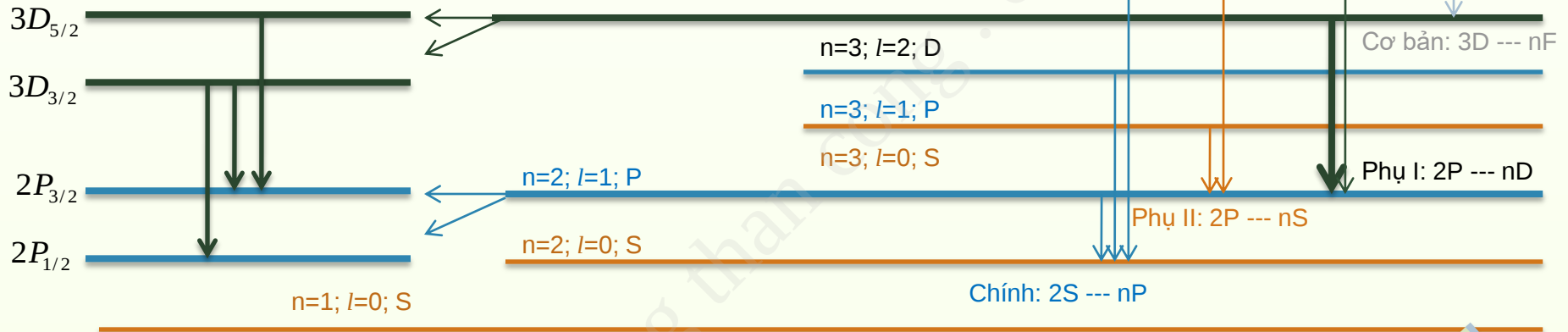
$$S = \hbar \sqrt{s(s+1)} \quad S_z = m_s \hbar$$

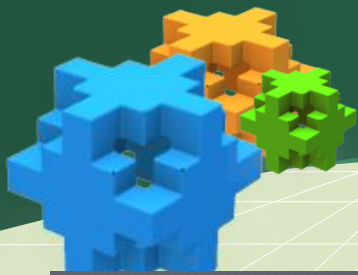
$$s = 1/2 \quad m_s = \pm 1/2$$

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

$$j = \left| l \pm \frac{1}{2} \right|$$

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





Nguyên tử kim loại kiềm

■ Nguyên lý loại trừ Pauli:

- Ở mỗi trạng thái lượng tử xác định bởi 4 số lượng tử n, ℓ, m, m_s chỉ có thể có tối đa một electron.
- Từ công thức tính số các trạng thái lượng tử của electron ứng với mỗi giá trị n

$$\sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell + 1) = n^2$$

- Nếu tính đến số lượng tử spin, mỗi một giá trị ℓ , có hai giá trị $m_s = \pm 1/2$ tức là có $2n^2$ trạng thái lượng tử. Tức là với mỗi giá trị n có tối đa $2n^2$ electron.
- Các lớp electron quanh hạt nhân:
 - $n = 1$ tương ứng với lớp K, có tối đa 2 electron.
 - $n = 2$ tương ứng với lớp L, có tối đa 8 electron.
 - $n = 3$ tương ứng với lớp M, có tối đa 18 electron.
 - $n = 4$ tương ứng với lớp N, có tối đa 32 electron.

Nguyên tử kim loại kiềm

Khái niệm về hệ thống tuần hoàn Mendéléev

Nguyên tố	Lớp	K	L		M		
	Lớp con	1S	2S	2P	3S	3P	3D
H		1					
He		2					
Li		2	1				
Be		2	2				
B		2	2	1			
C		2	2	2			
N		2	2	3			
O		2	2	4			
F		2	2	5			
Ne		2	2	6			
Na		2	2	6	1		
Mg		2	2	6	2		
Al		2	2	6	2	1	
Si		2	2	6	2	2	
P		2	2	6	2	3	
S		2	2	6	2	4	
Cl		2	2	6	2	5	
Ar		2	2	6	2	6	