

BÀI GIẢNG VẬT LÝ ĐẠI CƯỜNG

Tác giả: PGS. TS Đỗ Ngọc Uẩn

Viện Vật lý kỹ thuật

Trường ĐH Bách khoa Hà nội

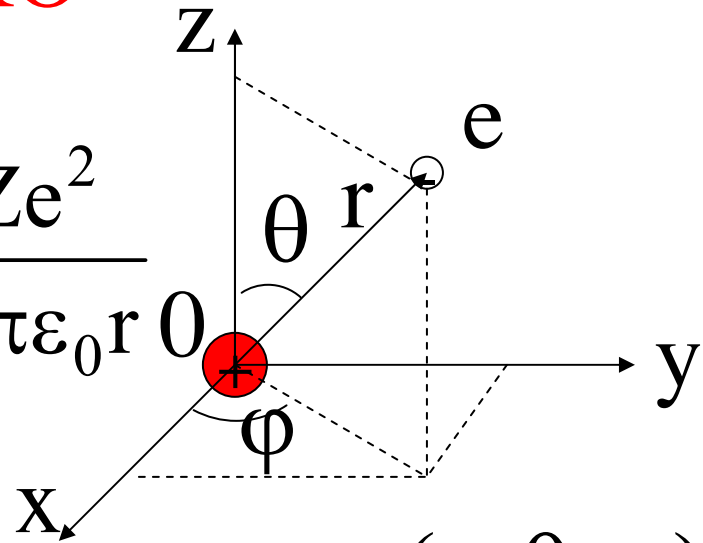
Chương 7

VẬT LÝ NGUYÊN TỬ

1. NGUYÊN TỬ HYDRO

Chuyển động của điện tử
trong nguyên tử hydro

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



$$\psi = \psi(r, \theta, \varphi)$$

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

$$x = r \cdot \sin\theta \cos\varphi \quad y = r \cdot \sin\theta \sin\varphi \quad z = r \cos\theta$$

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

$$\frac{1}{r^2 \sin^2\theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \psi = 0$$

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

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2} \left(E + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) = \lambda$$

$$\frac{1}{Y \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{Y \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \varphi^2} = -\lambda$$

$$R = R_{nl}(r) \quad Y = Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad \lambda = l(l+1)$$

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

$n = 1, 2, 3, \dots$ Số lượng tử chính

$l = 0, 1, 2, \dots, n-1$ Số lượng tử quỹ đạo

$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$ Số lượng tử từ

$$R_{1,0} = 2 \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} e^{-\frac{Zr}{a_0}} \quad Y_{0,0} = (4\pi)^{-\frac{1}{2}}$$

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

Hằng số Ritbe

1.2 CÁC KẾT LUẬN:

a. Năng lượng **gián đoạn**: Lượng tử hoá

b. Năng lượng **Ion hoá**

$$E=0-E_1=Rh=2,185 \cdot 10^{-18} \text{ J} = 13,5 \text{ eV}$$

c. **Trạng thái lượng tử**:

$$\Psi_{n,\ell,m}(r, \theta, \varphi) = R_{n\ell}(r) \cdot Y_{\ell m}(\theta, \varphi) \quad \ell \quad \text{Trạng thái}$$

n, ℓ, m . $n=1$ cơ sở,

$n \geq 2$ mức suy biến **n^2**

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

0

s

1

p

2

d

3

f

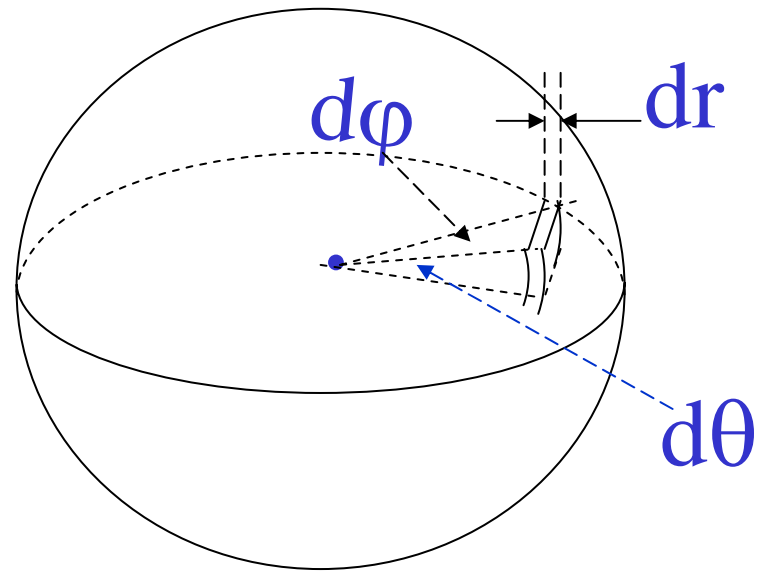
d. Mật độ xác suất tìm hạt

Xác suất tìm hạt theo thể tích:

$$\int |\psi|^2 dv = \int |\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)|^2 r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi$$

Xác suất tìm hạt theo bán kính:

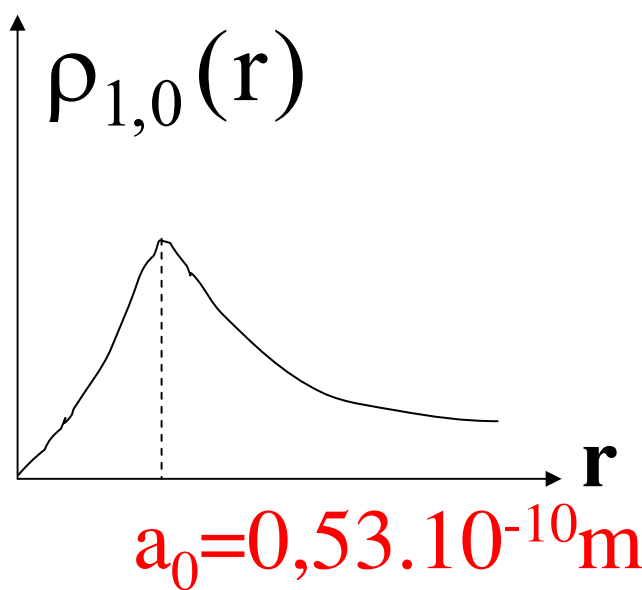
$$\int R_{nl}^2(r) r^2 dr$$



Mật độ xác suất theo bán kính

$$\rho_{1,0} = R_{1,0}^2 \cdot r^2 = 4 \left(\frac{Z}{a_0} \right)^3 e^{-\frac{2Zr}{a_0}} \cdot r^2$$

$$\frac{d\rho_{1,0}}{dr} = 4\left(\frac{Z}{a_0}\right)^3 e^{-\frac{2Zr}{a_0}} \cdot 2r \left(1 - \frac{Zr}{a_0}\right) = 0$$



Đối với H, Z=1 có r=0 và **r=a₀**.

e. Giải thích quang phổ H

a₀ = 0,53 · 10⁻¹⁰ m
Bán kính Bohr

Cực tím

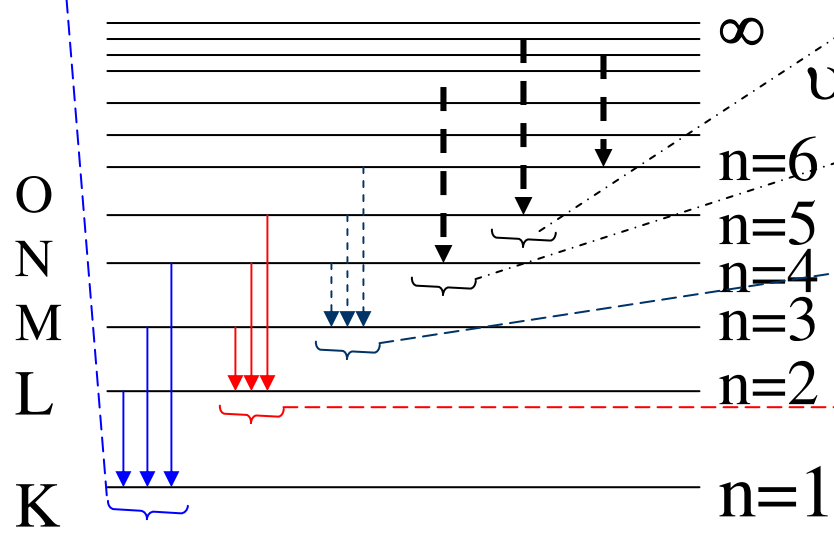
$$\nu = R \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right) \text{Liman}$$

$$\nu = R \left(\frac{1}{5^2} - \frac{1}{n^2} \right) \text{Perfund}$$

$$\nu = R \left(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{n^2} \right) \text{Bracket}$$

$$\nu = R \left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2} \right) \text{Pasen}$$

$$\nu = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \text{Banme}$$

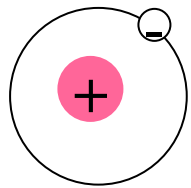


Hồng ngoại!

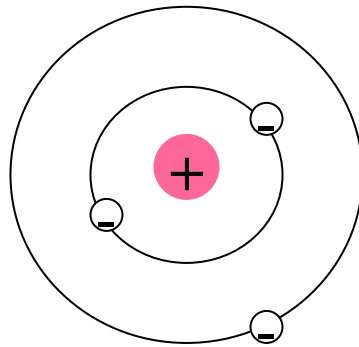
ánh sáng nhìn thấy

2. NGUYÊN TỬ KIM LOẠI KIỀM

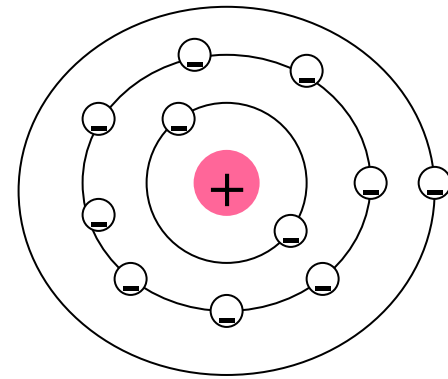
2.1. Năng lượng của điện tử hoá trị trong nguyên tử kim loại kiềm



H



Li



Na

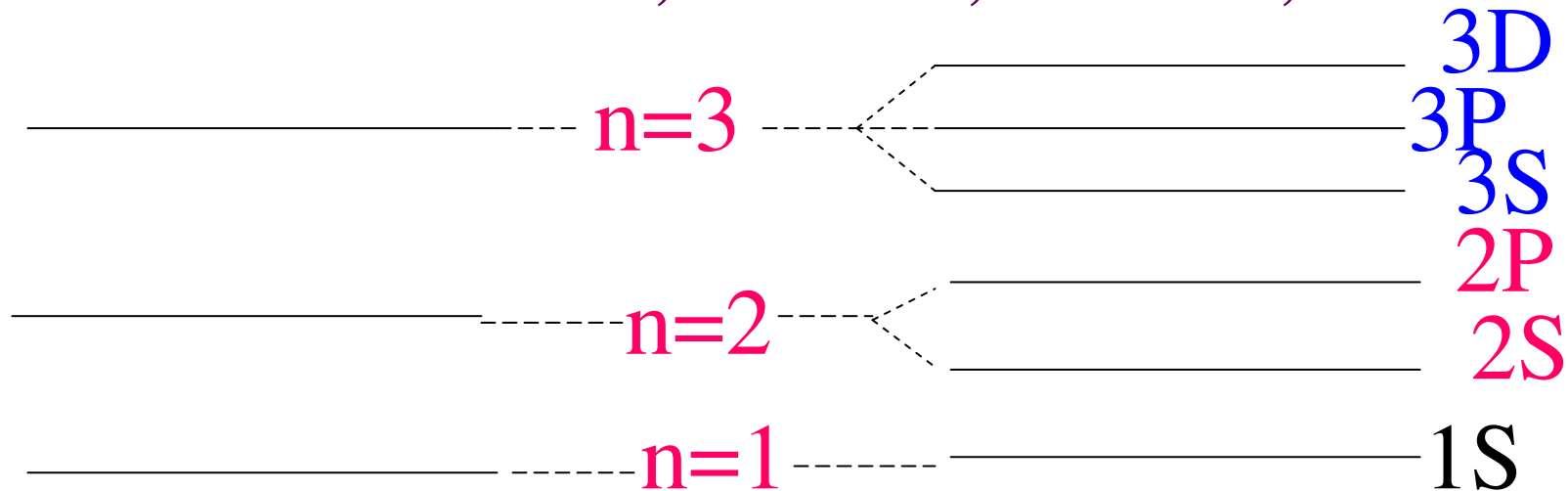
Điện tử hoá trị tương tác với hạt nhân và các điện lớp trong (với lõi nguyên tử)

Năng lượng tính tương tự như của H và thêm phần bổ chính Δ_l

$$W_{nl} = -\frac{Rh}{(n + \Delta_l)^2}$$

Δ_l phụ thuộc vào số lượng tử l và nguyên tố

Z	Nguyên tố	Δ_s	Δ_p	Δ_d	Δ_f
3	Li	-0,412	-0,041	-0,002	0
11	Na	-1,373	-0,883	-0,010	-0,001
37	Rb	-3,195	-2,711	-1,233	-0,012

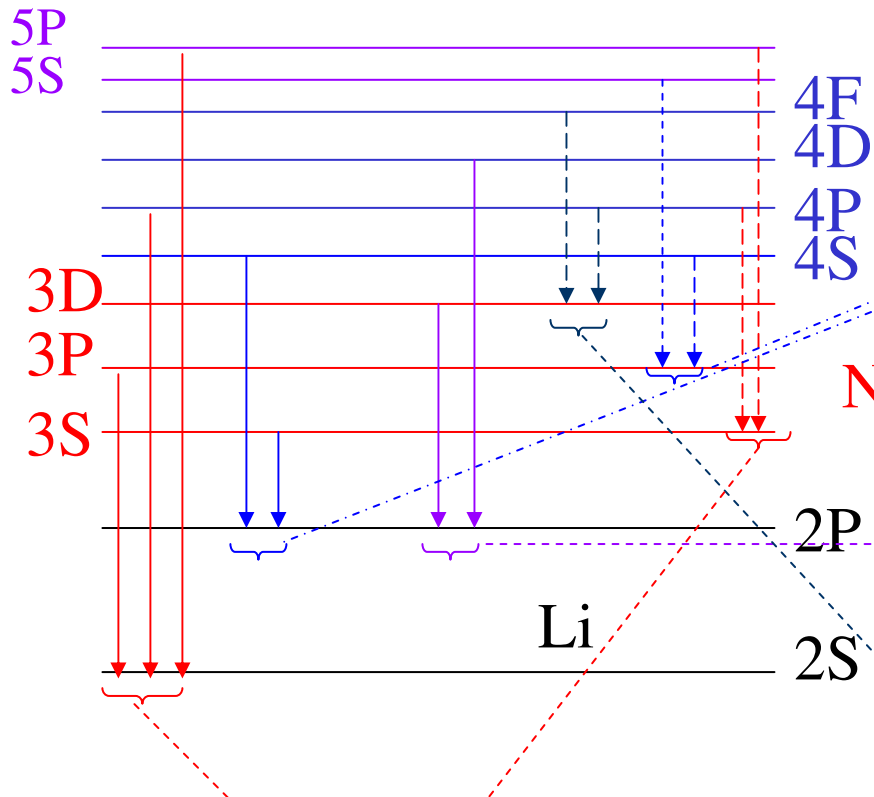


2.2. TRẠNG THÁI VÀ MỨC NĂNG LƯỢNG BỊ TÁCH

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	

2.3. QUANG PHỔ CỦA KIM LOẠI KIỀM

Khi phát xạ photon: Điện tử chuyển từ mức cao xuống thấp hơn
Và $\Delta l = \pm 1$



Dãy phụ II: $h\nu = 2P - nS$ Li
 $h\nu = 3P - nS$ Na

Dãy Phụ I: $h\nu = 2P - nD$

Dãy Cơ bản: $h\nu = 3D - nF$
 $h\nu = 3D - nP$

Dãy chính: $h\nu = 2S - nP$ Li
 $h\nu = 3S - nP$ Na

S, P, D...mức năng lượng

2.4. MÔMEN ĐỘNG LƯỢNG VÀ MÔMEN TỪ CỦA ĐIỆN TỬ CHUYỂN ĐỘNG QUANH HẠT NHÂN

Mômen động lượng/orbital: Quỹ đạo không xác định \rightarrow véc tơ mômen không xác định. Giá trị

xác định: $L = \sqrt{\ell(\ell + 1)} \cdot \hbar$

$\ell = 0, 1, 2, \dots, n-1$ Số lượng tử quỹ đạo

Hình chiếu lên phương bất kỳ:

$$L_z = m \cdot \hbar \quad m=0, \pm 1, \pm 2.. \pm \ell$$

Mômen động lượng và hình chiếu của nó đều bị lượng tử hoá

Mômen từ: Điện tử quay quanh hạt nhân gây ra dòng điện ngược chiều với chiều quay

-> mômen từ ngược chiều với mômen động lượng

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

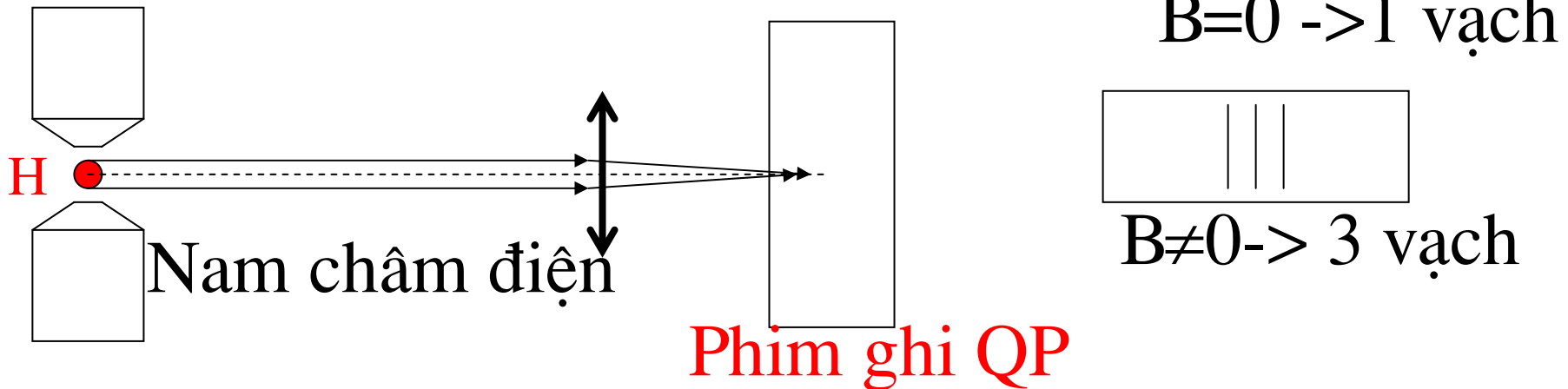
Hình chiếu của mômen từ lên z:

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

Magneton Bohr: $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 9,26 \cdot 10^{-24} \text{ Am}^2$

-> Hình chiếu của mômen từ lên z được lượng tử hoá

2.5. HIỆN TƯỢNG DIMAN/ZEEMAN:



Năng lượng tương tác giữa mômen từ của điện tử với từ trường của nam châm:

$$\Delta W = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} \quad \Delta W = -\mu_z B = m\mu_B B$$

Mức năng lượng của điện tử

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

Bức xạ khi từ mức W'_2 xuống mức W'_1 có:

$$\nu' = \frac{W'_2 - W'_1}{h} = \frac{W_2 - W_1}{h} + \frac{\Delta m \mu_B B}{h}$$

$\Delta m = 0, \pm 1$ nên có
3 vạch ứng với

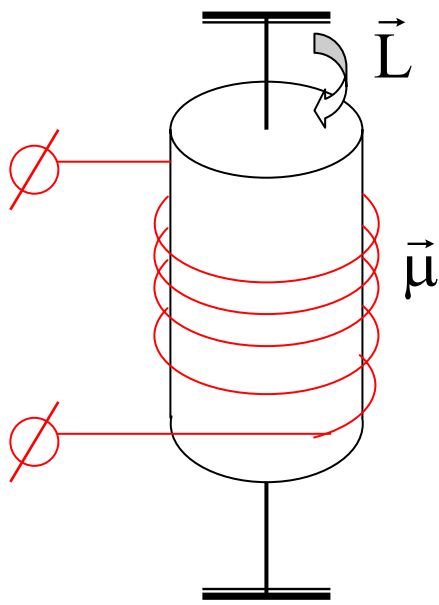
$$\nu' = \begin{cases} \nu + \frac{\mu_B B}{h} \\ \nu \\ \nu - \frac{\mu_B B}{h} \end{cases}$$

3. SPIN CỦA ĐIỆN TỬ

Nhờ có thiết bị quang phổ tinh vi phát hiện cấu trúc bội phổ: các vạch sát nhau: Cửa Na 28,90 và 28,96pm Thí nghiệm của Anhxtanh-Đơgát

Đo được tỷ số

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



Không đúng với hệ số $-\frac{e}{2m_e}$
từ cơ lý thuyết

Giải thích: Do vận động nội tại,
điện tử có mômen spin \vec{S}

Hình chiếu lên trục z là: $S_z = \pm \frac{\hbar}{2} = m_s \hbar.$

Số lượng tử hình chiếu spin

$$m_s = \pm \frac{1}{2}$$

$$S = \sqrt{s(s+1)} \cdot \hbar \quad s\text{-Số lượng tử spin}$$

Mômen từ riêng

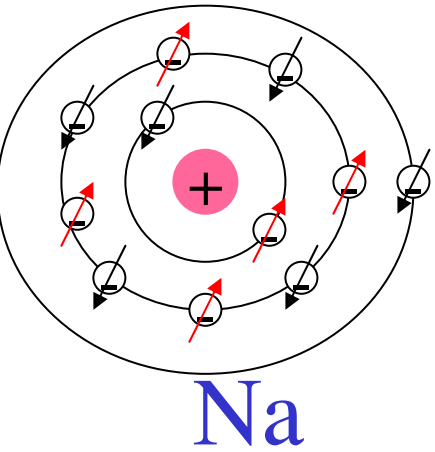
$$\mu_{sz} = \pm \mu_B = \mp \frac{e\hbar}{2m_e} \Rightarrow \vec{\mu}_s = -\frac{e}{m_e} \vec{S}$$

Đúng kết
quả thực
nghiệm

Mômen từ orbital: Mômen từ riêng

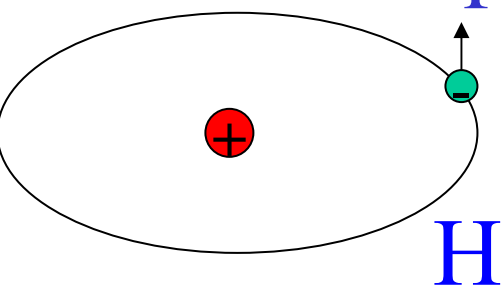
$$\vec{\mu}_L = -\frac{e}{2m_e} \vec{L}$$

(spin):
$$\vec{\mu}_S = -\frac{e}{m_e} \vec{S}$$

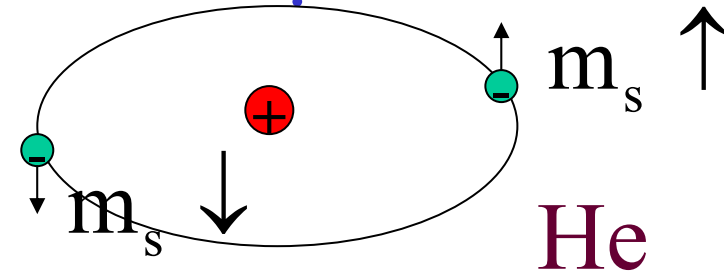


- Các điện tử có spin với số lượng tử spin $m_s \uparrow$ hoặc $m_s \downarrow$ các momen spin tạo ra các **momen từ spin riêng**.

- Momen từ **orbital** gây ra mômen cảm ứng trong từ trường đóng góp vào tính **nghịch từ**, còn momen từ **spin** đóng góp vào tính **thuận từ**



\Rightarrow Hệ số từ cơ là e/m_e .



Lẻ điện tử: **thuận từ**

Chẵn số điện tử: **nghịch từ**

4. TRẠNG THÁI VÀ NĂNG LƯỢNG ĐIỆN TỬ TRONG NGUYÊN TỬ

Do tương tác giữa mômen từ riêng và mômen từ quỹ đạo và giữa các mômen từ riêng của các điện tử trong nguyên tử, nên:

Điện tử có mômen toàn phần: $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$

Giá trị của J là $J = \sqrt{j(j+1)} \cdot \hbar$

j là số lượng tử mômen toàn phần $j = \left| \ell \pm \frac{1}{2} \right|$

Trạng thái lượng tử của điện tử trong nguyên tử gồm 4 số lượng tử: n, ℓ , m và m_s

=> năng lượng toàn phần của điện tử phụ thuộc vào 3 số lượng tử n, ℓ và j

$\ell = 0$ chỉ có 1 mức;

$\ell > 0$ tách thành 2 mức ứng với $\ell - \frac{1}{2}$ và $\ell + \frac{1}{2}$
=> Cấu trúc tế vi của mức;

Kí hiệu n^2X_j số 2 chỉ mức kép:

$n = 1, 2, 3, \dots$ Số lượng tử chính

$X = S, P, D, F, \dots$ ứng với $\ell = 0, 1, 2, 3, \dots$

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

Số trạng thái trong lớp n là $\sum_{\ell=0}^{n-1} 2(2\ell + 1) = 2n^2$

Trạng thái đũa hoá trị trong H và kloại kiềm:

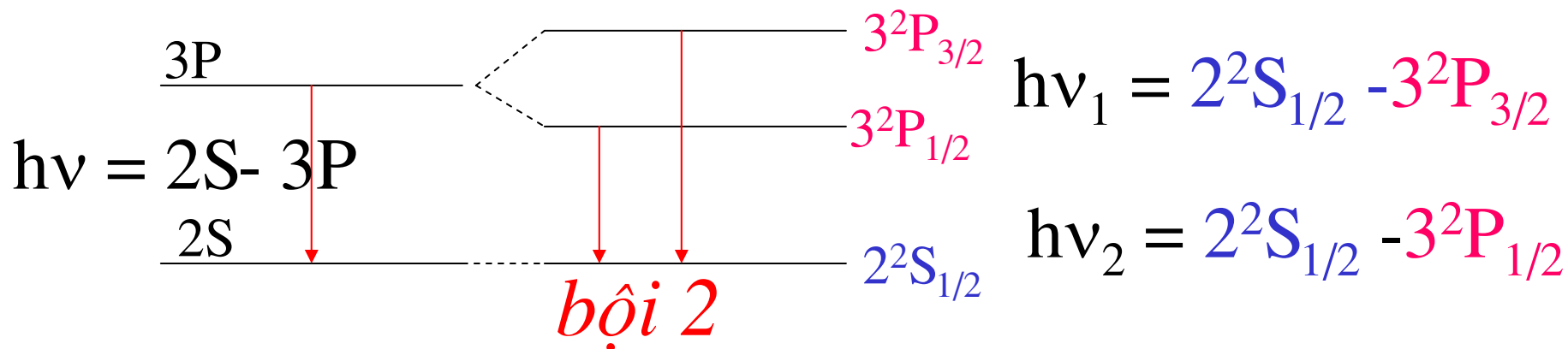
n	ℓ	j	trạng thái đũa hoá trị	Mức năng lượng
1	0	1/2	1s _{1/2}	1 ² S _{1/2}
2	0	1/2	2s _{1/2}	2 ² S _{1/2}
	1	1/2	2p _{1/2}	2 ² P _{1/2}
		3/2	2p _{3/2}	2 ² P _{3/2}
3	0	1/2	3s _{1/2}	3 ² S _{1/2}
	1	1/2	3p _{1/2}	3 ² P _{1/2}
		3/2	3p _{3/2}	3 ² P _{3/2}
	2	3/2	3d _{3/2}	3 ² D _{3/2}
		5/2	3d _{5/2}	3 ² D _{5/2}

5. CẤU TẠO BỘI/TẾ VI/ CỦA VẠCH PHỔ

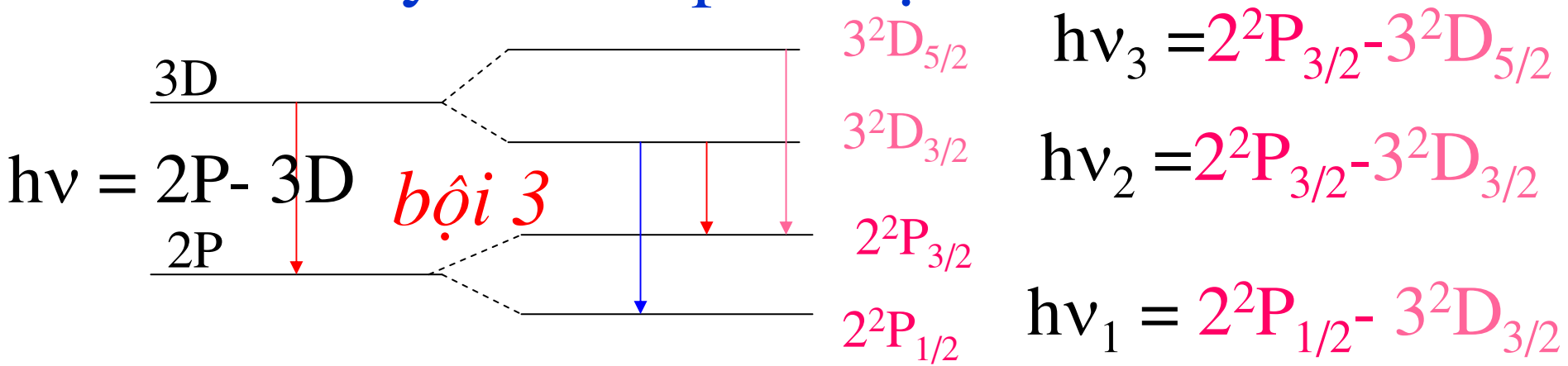
Quy tắc chuyển mức: Từ mức cao xuống mức thấp

Δn bất kỳ, $\Delta \ell = \pm 1$, $\Delta j = 0, \pm 1$

chuyển mức phát xạ $h\nu = 2S - 3P$



chuyển mức phát xạ $h\nu = 2P - 3D$

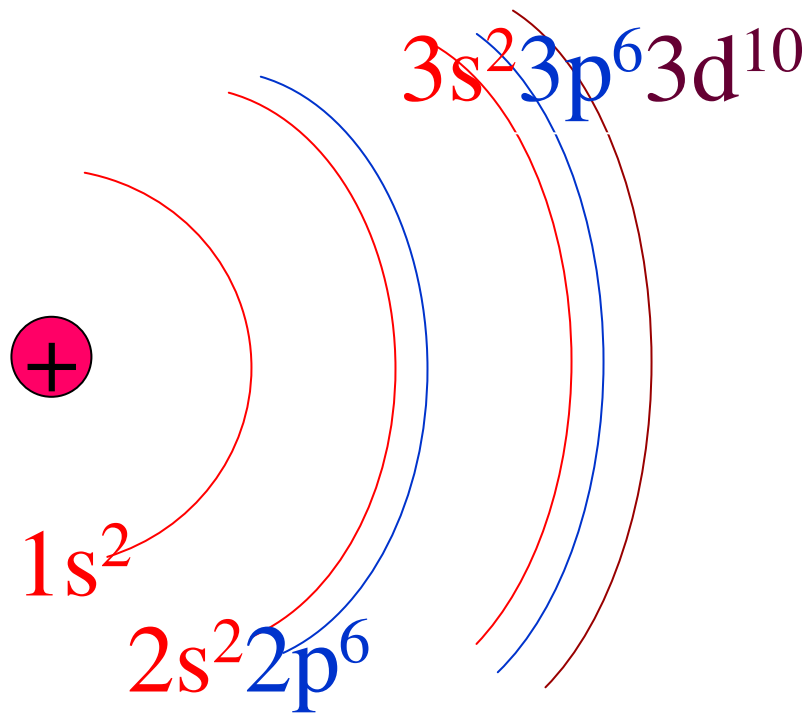


6. KHÁI NIỆM VỀ HỆ THỐNG TUẦN HOÀN MENDĚLEEP

Năm 1869 Mendēleep xây dựng hệ thống tuần hoàn các nguyên tố: tính chất hoá, lý của các nguyên tố mang tính tuần hoàn.

Nguyên lý Pauli: ở một trạng thái lượng tử gồm 4 số lượng tử n , l , m , m_s chỉ có thể có tối đa 1 điện tử

Lớp	n	Số điện tử tối đa= $2n^2$	Lớp con	Số điện tử $2(2l + 1)$
K	1	2	S $l = 0$	2
L	2	8	S $l = 0$	2
			P $l = 1$	6
M	3	18	S $l = 0$	2
			P $l = 1$	6
			D $l = 2$	10
N	4	32	S $l = 0$	2
			P $l = 1$	6
			D $l = 2$	10
			F $l = 3$	14



Ví dụ:

