

# VẬT LÝ II

**TS. Ngô Văn Thanh,**  
*Viện Vật lý.*

***Chuyên ngành : Điện tử - Viễn thông , Công nghệ thông tin,  
Điện - Điện tử***

## *Chương 9: Nguyên tử*

---

### **Chương 9: Nguyên tử.**

9.1 Nguyên tử Hydro

9.2 Nguyên tử kim loại kiềm

9.3 Mômen động lượng và mômen từ của electron.  
Hiệu ứng Zeeman

9.4 Spin của electron

9.5 Khái niệm về hệ thống tuần hoàn Mendeleev

9.6 Hệ hạt đồng nhất

## 9.1 Nguyên tử Hydro

- 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.

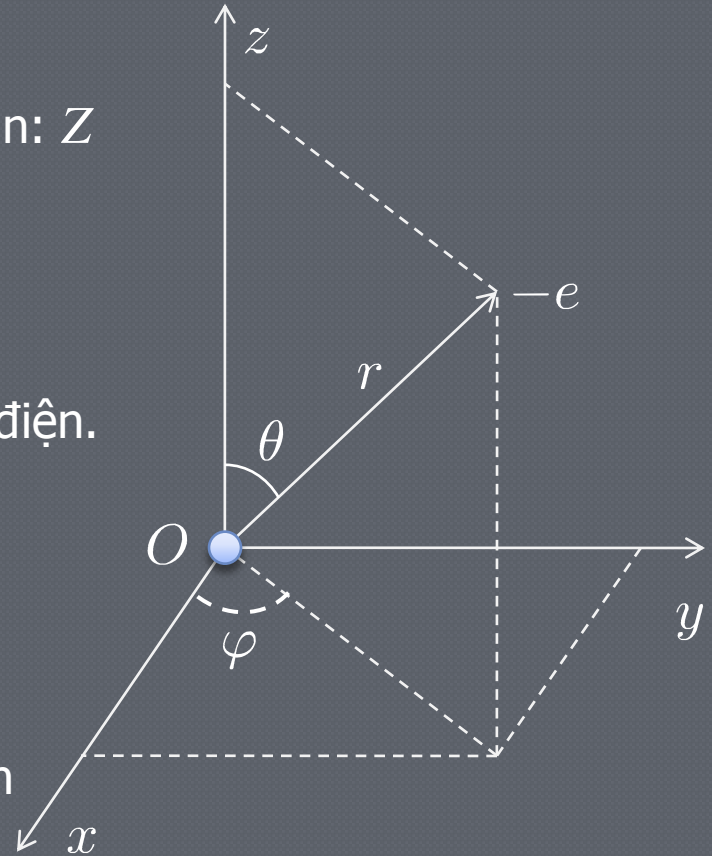
### 9.1 Nguyên tử Hydro.

- 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)

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

- Phương trình Schrödinger cho hạt điện tử có dạng.

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



## 9.1 Nguyên tử Hydro

- 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:

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

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

## 9.1 Nguyên tử Hydro

- 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  $\lambda$  xác định.

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

## 9.1 Nguyên tử Hydro

- Nghiệm của phương trình vi phân có dạng.

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

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

- Trong đó

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

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

- Đa thức Legendre

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

## 9.1 Nguyên tử Hydro

- 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:

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

## 9.1 Nguyên tử Hydro

- 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  $E_0 = 0$ :

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



## 9.1 Nguyên tử Hydro

- Số trạng thái lượng tử khả dĩ của electron trong nguyên tử H:

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

- ▶  $n = 1$ : có 1 trạng thái lượng tử gọi là trạng thái cơ bản.
  - ▶  $n = 2$ : có 4 trạng thái lượng tử.
  - ▶ Mức năng lượng  $E_n$  suy biến bậc  $n^2$
  - ▶ Các trạng thái ứng với  $n > 1$  gọi là các trạng thái kích thích.
  - ▶  $s : \ell = 0; \quad p : \ell = 1; \quad d : \ell = 2; \quad \dots$
- Phân bố xác suất tìm thấy electron trong thể tích  $dV = r^2 dr \sin \theta d\theta d\varphi$

- ▶ Thành phần xác suất tìm thấy hạt phụ thuộc vào bán kính  $r$

$$\int \omega_{n\ell}(r) dr = \int R_{n\ell}^2(r) dr$$

- ▶ Thành phần xác suất tìm thấy hạt phụ thuộc vào góc

$$\int \omega_{\ell m}(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta d\varphi = \int |Y_{\ell m}(\theta, \varphi)|^2 \sin \theta d\theta d\varphi$$

## 9.1 Nguyên tử Hydro

- Bán kính ứng với xác suất cực đại

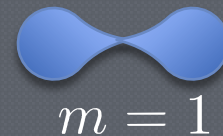
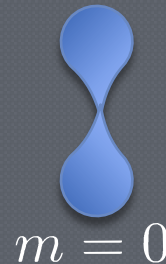
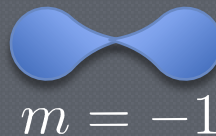
$$r_{\max} = \frac{d\omega}{dr} = \frac{a_B}{Z}$$

- Đối với nguyên tử Hydro  $r_{\max} = a_B = 0,53\text{Å}$
- Điện tử không chuyển động theo các quỹ đạo, xác suất tìm thấy electron được diễn tả bởi các đám mây bao quanh hạt nhân.

Trạng thái  $s, \ell = 0$



Trạng thái  $p, \ell = 1$



Trạng thái  $d, \ell = 2$

