HƯỚNG DẪN GIẢI BÀI TẬP ĐỊNH HƯỚNG TUẦN 13 – 14 – 15

DẠNG 1: BÀI TOÁN NGUYÊN TỬ HIDRO

1. KIẾN THỨC CƠ BẢN:

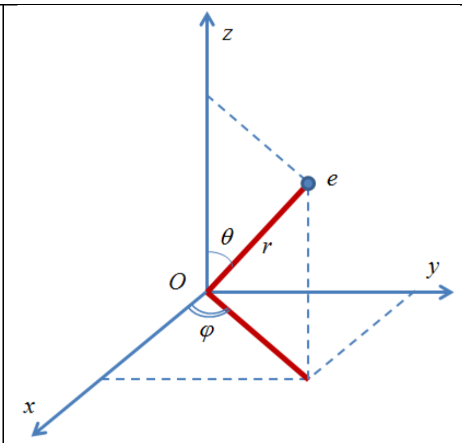
A. Bài toán nguyên tử Hidro:

- Nguyên tử Hidro gồm một hạt nhân mang điện tích +e và một electron mang điện tích –e, trong đó có thể coi hạt nhân đứng yên và electron chuyển động xung quanh. Tương tác giữa hạt nhân và điện tử là tương tác Coulomb với thế năng tương tác là:

$$U = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

→ phương trình Schrodinger của electron là:

$$\boldsymbol{\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)\psi = 0}$$



- Vì bài toán có tính chất đối xứng cầu (orbital *s*) → chuyển sang tọa độ cầu: $\psi(x,y,z) \rightarrow \psi(r,\theta,\varphi)$ trong đó:

$$\begin{cases} x = r\sin\theta\cos\varphi \\ y = r\sin\theta\sin\varphi \\ z = r\cos\theta \end{cases}$$

- Khi đó toán tử Laplace trong hệ tọa độ cầu sẽ là: (tốt nhất là cố gắng thuộc công thức toán tử Laplace này, có thể tham khảo cách chứng minh theo địa chỉ: http://planetmath.org/encyclopedia/%3Chttp://planetmath.org/?method=l2h&from=collab&id=76&op=getobj)

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

- Thay vào phương trình Schrodinger ta có:

$$\boldsymbol{\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)\psi = 0}$$

- Sử dụng phương pháp phân ly biến số:

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

Trong đó $R(r)$ là hàm xuyên tâm, $Y(\theta,\varphi)$ là hàm cầu → thay vào phương trình Schrodinger ta có:

$$\frac{1}{R}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right)+\frac{1}{Y.sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{Ysin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\varphi^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E+\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)=0$$

$$\rightarrow \frac{1}{R}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right)+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E+\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)=-\frac{1}{Y.sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right)-\frac{1}{Ysin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\varphi^2}$$

- Phương trình có nghiệm hữu hạn và đơn trị khi tồn tại một số λ sao cho:

$$\frac{1}{R}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right)+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E+\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)=\lambda$$

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

- Kết quả tính toán thu được:

- $\lambda = l(l+1)$ trong đó l là số lượng tử quỹ đạo
- Năng lượng của electron: $E_n=-\frac{1}{n^2}\frac{m_e e^4}{2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2}=-\frac{Rh}{n^2}$

  Trong đó $R=\frac{m_e e^4}{4\pi(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^3}\approx 3{,}2931.10^{15}s^{-1}$ là hằng số Rydberg.
- Hàm xuyên tâm $R(r) = R_{nl}$ chỉ phụ thuộc vào hai số lượng tử n, l
- Hàm cầu $Y(\theta,\varphi)=Y_{lm}$ chỉ phụ thuộc vào hai số lượng tử l, m
- Hàm sóng của electron có dạng:

  $$\psi=\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)=R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$$
  - n: số lượng tử chính (n = 1, 2, 3, 4,…)
  - l: số lượng tử quỹ đạo (l = 0, 1, 2,…, n – 1)
  - m: số lượng tử từ (m = 0, ±1, ±2, ±3,…, ±l
- Một số dạng cụ thể của hàm R_{nl} và Y_{lm}

$Y_{0,0}=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$	$Y_{1,0}=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}cos\theta$
$Y_{1,1}=\sqrt{\frac{3}{8\pi}}sin\theta.e^{i\varphi}$	$Y_{1,-1}=-\sqrt{\frac{3}{8\pi}}sin\theta.e^{-i\varphi}$
$R_{1,0}=2a^{-\frac{3}{2}}e^{-\frac{r}{a}}$	$R_{2,0}=\frac{1}{8}a^{-\frac{3}{2}}\left(2-\frac{r}{a}\right)e^{-\frac{r}{2a}}$

$R_{1,0} = \frac{1}{24} a^{-\frac{3}{2}} . \frac{r}{a} . e^{-\frac{r}{2a}}$	$a = \frac{4\pi\varepsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2} = 0{,}53.10^{-10} m$ là bán kính Bohr

- Số trạng thái ứng với *n* xác định là n^2:

<table>
<tr><td>n</td><td>L</td><td>m</td><td>Năng lượng</td><td colspan="2">Số trạng thái</td></tr>
<tr><td>1</td><td>0</td><td>0</td><td>E_1</td><td colspan="2">$1 = 1^2$</td></tr>
<tr><td rowspan="2">2</td><td>0</td><td>0</td><td rowspan="2">E_2</td><td>1</td><td rowspan="2">$4 = 2^2$</td></tr>
<tr><td>1</td><td>-1
0
1</td><td>3</td></tr>
<tr><td rowspan="3">3</td><td>0</td><td>0</td><td rowspan="3">E_3</td><td>1</td><td rowspan="3">$9 = 3^2$</td></tr>
<tr><td>1</td><td>-1
0
1</td><td>3</td></tr>
<tr><td>2</td><td>-2
-1
0
1
2</td><td>5</td></tr>
</table>

- Quy tắc chuyển trạng thái trong nguyên tử Hidro: $\Delta n \neq 0$

2. BÀI TẬP MINH HỌA:

BÀI 6.3. Electron trong nguyên tử Hidro ở trạng thái 1*s*

a. Tính xác suất w_1 tìm electron trong hình cầu (0, *a*) với *a* là bán kính Bohr thứ nhất.
b. Tính xác suất w_2 tìm electron ngoài hình cầu đó.
c. Tính tỷ số w_2/w_1

Tóm tắt:
Electron trong nguyên tử Hidro: 1*s*
Cầu (0, *a*)
$a = 0{,}53.10^{-10} m$
Xác định w_1, w_2, w_2/w_1

**** Nhận xét:*** Đây là bài toán nguyên tử Hidro. Về nguyên tắc khi đề bài đã cho trạng thái của electron ta phải đi xác định các số lượng tử *n, l, m* trước tiên. Bài toán liên quan tới xác suất tìm electron → liên quan tới hàm sóng → liên quan tới $|\psi|^2$ → xác định hàm sóng → tính tích phân hàm mật độ trong khu vực cần tìm.

- Electron trong nguyên tử Hidro ở trạng thái 1*s* → $n = 1$, $l = 0$, $m = 0$ → tra bảng để xác định hàm sóng:

$R_{1,0} = 2a^{-\frac{3}{2}}e^{-\frac{r}{a}}$ và $Y_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$ → hàm sóng có dạng: $\psi_{nlm} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}a^{-\frac{3}{2}}e^{-\frac{r}{a}}$ → hàm mật độ xác suất là:

$$|\psi_{nlm}|^2 = \frac{1}{\pi}a^{-3}e^{-\frac{2r}{a}}$$

- Xác suất tìm thấy electron trong một lớp cầu mỏng nằm giữa hai bán kính (r, $r + dr$) có thể tích $dV = 4\pi r^2 dr$ (chứng minh bằng cách lấy hiệu thể tích cầu bán kính r và $r + dr$).

$$|\psi_{nlm}|^2 dV = 4a^{-3}r^2e^{-\frac{2r}{a}}dr$$

- Xác suất tìm electron trong quả cầu bán kính a là:

$$w_1 = \int_0^a 4a^{-3}r^2e^{-\frac{2r}{a}}dr$$

Đặt $t = \frac{r}{a} \rightarrow dt = adu$, đổi cận: r: 0 → a nên u: 0 → 1 → thay vào ta có:

$w_1 = \int_0^1 4t^2e^{-2t}dt$ → dạng tích phân từng phần cơ bản

→ tính toán ta thu được **w_1 = 0,323 (*)**

(*): *Đặt $u = t^2$ → $du = 2tdt$;*

$dv = 4e^{-2t}dt$ → $v = -2.\ e^{-2t}$, ta có:

$$w_1 = -2e^{-2t}t^2|_0^1 + \int_0^1 4te^{-2t}dt$$

Đặt $u = t$ → $du = dt$;

$dv = 4e^{-2t}dt$ → $v = -2.\ e^{-2t}$ ta có:

$$w_1 = -2e^{-2t}t^2|_0^1 - 2e^{-2t}t|_0^1 + \int_0^1 2e^{-2t}dt = -4e^{-2} - e^{-2t}|_0^1 = 1 - 5e^{-2} = 0,323$$

- Để thấy xác suất tìm thấy electron trong toàn bộ không gian luôn bằng 1 → xác suất tìm thấy electron bên ngoài khối cầu bán kính *a* là: $\mathbf{w_2 = 1 - w_1 = 0{,}677}$

- Tỷ số $\mathbf{w_2/w_1 = 2{,}096}$

BÀI 6.4. Electron trong nguyên tử Hidro ở trạng thái cơ bản. Tìm giá trị trung bình của *r*, 1/*r*, $1/r^2$	
Tóm tắt: Nguyên tử Hidro ở trạng thái cơ bản Xác định <*r*>, <1/*r*>, $<1/r^2>$	

* Nhận xét: Bài toán liên qua tới việc tính giá trị trung bình của một đại lượng → ta phải nắm được cộng thức tính giá trị trung bình của một hàm *f*(*r*):

- Dạng tổng hữu hạn: $\langle f(r)\rangle = \sum_{r=0}^{\infty} f(r)P(r)$
- Dạng tích phân: $\langle f(r)\rangle = \int_V f(r)|\psi(r)|^2 dV$

- Electron trong nguyên tử Hidro ở trạng thái cơ bản → hàm sóng của electron có dạng: $\psi_{nlm} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} a^{-\frac{3}{2}} e^{-\frac{r}{a}}$

- Hàm mật độ xác suất là: $|\psi_{nlm}|^2 = \frac{1}{\pi} a^{-3} e^{-\frac{2r}{a}}$

- Áp dụng công thức: $\langle f(r)\rangle = \int_0^{\infty} f(r)|\psi(r)|^2 4\pi r^2 dr = \int_0^{\infty} f(r) 4a^{-3} r^2 e^{-\frac{2r}{a}} dr$

- Xét trường hợp f(r) = r

$$\langle r\rangle = \int_0^{\infty} 4a^{-3} r^3 e^{-\frac{2r}{a}} dr$$

Đặt $t = \frac{r}{a} \rightarrow adt = dt$. Đổi cận *r*: 0 → ∞ nên *t*: 0 → ∞ ta có:

$$\langle r\rangle = \int_0^{\infty} 4at^3 e^{-2t} dt$$

Áp dụng công thức tính tích phân từng phần và chú ý tính chất:

$$\int_a^{\infty} f(x)dx = \lim_{b\rightarrow\infty} \int_a^{b} f(x)dx$$

Ta sẽ thu được kết quả: $\langle r\rangle = \frac{3}{2}a$

- Xét trường hợp $f(r) = \frac{1}{r}$

$$\langle\frac{1}{r}\rangle = \int_0^\infty 4a^{-3}re^{-\frac{2r}{a}}dr$$

→ kết quả thu được là: $\langle\frac{1}{r}\rangle = \frac{1}{a}$

- Xét trường hợp $f(r) = \frac{1}{r^2}$:

$$\langle\frac{1}{r^2}\rangle = \int_0^\infty 4a^{-3}e^{-\frac{2r}{a}}dr$$

→ kết quả thu được là: $\langle\frac{1}{r^2}\rangle = \frac{2}{a^2}$

** Chú thích: tính tính phân: $\langle\frac{1}{r}\rangle = \int_0^\infty 4a^{-3}re^{-\frac{2r}{a}}dr$*

Đặt $t = \frac{r}{a} \to dr = adt$.

Đổi cận: r: 0 → ∞ nên t: 0 → ∞

$$\langle\frac{1}{r}\rangle = \int_0^\infty \frac{4}{a}te^{-2t}dt$$

Đặt $\begin{cases} u = t \to du = dt \\ dv = \frac{4}{a}e^{-2t}dt \to v = -\frac{2}{a}e^{-2t} \end{cases}$ ta có:

$$\langle\frac{1}{r}\rangle = -\frac{2t}{a}e^{-2t}\Big|_0^\infty + \int_0^\infty \frac{2}{a}e^{-2t}dt = -\frac{2t}{a}e^{-2t}\Big|_0^\infty - \frac{1}{a}e^{-2t}|_0^\infty$$

Xét $A = -\frac{2t}{a}e^{-2t}\Big|_0^\infty = lim_{b\to\infty} -\frac{2t}{a}e^{-2t}\Big|_0^b = lim_{b\to\infty}\left(-\frac{2b}{ae^{2b}}\right) = lim_{b\to\infty}\left(\frac{1}{ae^{2b}}\right) = 0$ (ở đây ta áp dụng quy tắc L'Hospital để giải bài toán giới hạn)

Xét $B = \frac{1}{a}e^{-2t}|_0^\infty = lim_{b\to\infty}\frac{1}{a}e^{-2t}|_0^b = \lim_{b\to\infty}\left(\frac{1}{ae^{2b}} - \frac{1}{a}\right) = -\frac{1}{a}$

Như vậy ta có: $\langle\frac{1}{r}\rangle = A - B = \frac{1}{a}$. Hai trường hợp còn lại cũng tính tương tự.

DẠNG 2: NGUYÊN TỬ KIM LOẠI KIỀM

1. KIẾN THỨC CƠ BẢN

- Trạng thái của electron hóa trị trong kim loại kiềm phụ thuộc vào ba số lượng tử *n*, *l*, *m*.

- Năng lượng của electron hóa trị phụ thuộc vào hai số lượng tử *n* và *l*.

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

Trong đó số bổ chính Rydberg *x* phụ thuộc vào giá trị *l* và phụ thuộc vào từng nguyên tử.

- Tần số bức xạ phát ra do chuyển mức năng lượng của electron hóa trị là:

$$f = \frac{R}{(n_1+x_1)^2} - \frac{R}{(n_2+x_2)^2}$$

- Quy tắc chuyển trạng thái: $\Delta l = \pm 1$

- Ký hiệu các số hạng quang phổ là nX với X = S, P, D, F,… ứng với l = 0, 1, 2, 3,...

- Vạch quang phổ cộng hưởng tương ứng với sự chuyển trạng thái của nguyên tử từ trạng thái kích thích đầu tiên về trạng thái cơ bản: Li (2P→2S), Na(3P→3S)

2. BÀI TẬP MINH HỌA

BÀI 6.7. Năng lượng liên kết của electron hóa trị trong nguyên tử Li ở trạng thái 2*s* bằng 5,59*eV*; ở trạng thái 2*p* bằng 3,54*eV*. Tính các số bổ chính Rydberg đối với các số hạng quang phổ *s* và *p* của Li	
Tóm tắt: 2s → $E_{2,s}$ = 5,59*eV* 2p → $E_{2,p}$ = 3,54*eV*	

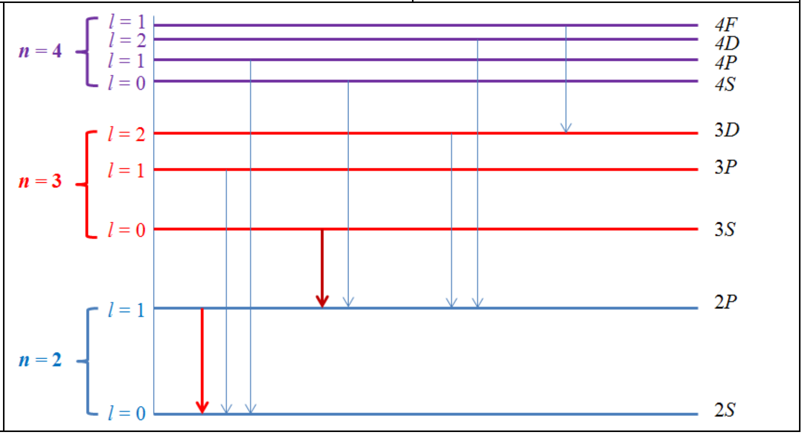
* Nhận xét: Bài toán liên quan tới công thức tính năng lượng của electron của kim loại kiềm → áp dụng công thức ta dễ dàng tìm ra được số bổ chính Rydberg cho từng trạng thái. Chú ý: *Rh* = 13,6*eV*

- Số bổ chính Rydberg đối với số hạng quang phổ *s* là:

$$E_{2,s} = \frac{Rh}{(x_S + 2)^2} = 5{,}39eV \rightarrow x_S = -0{,}41$$

- Số bổ chính Rydberg đối với số hạng quang phổ *p* là:

$$E_{2,p} = \frac{Rh}{(x_P + 2)^2} = 3{,}54eV \rightarrow x_P = -0{,}04$$

<table>
<tr><td colspan="2">BÀI 6.8. Tìm bước sóng của bức xạ phát ra khi nguyên tử Li chuyển trạng thái 3S→2S cho biết số bổ chính Rydberg đối với nguyên tử Li là:
$x_S = -0{,}41; x_P = -0{,}09$</td></tr>
<tr><td>Tóm tắt:
Chuyển trạng thái 3S→2S
$x_S = -0{,}41; x_P = -0{,}09$
$R = 3{,}29.10^{15}s^{-1}$
Xác định bước sóng bức xạ.</td><td></td></tr>
<tr><td>* Nhận xét: Theo quy tắc lọc lựa thì không thể có chuyển mức trực tiếp từ trạng thái 3S về trạng thái 2S. Quá trình chuyển trạng thái sẽ phải trải qua hai giai đoạn:
- Giai đoạn I: 3S → 2P
- Giai đoạn II: 2P → 2S</td><td>
</td></tr>
</table>

- Để đơn giản trước tiên ta xác định năng lượng ứng với các trạng thái: 2*S*, 2*P*, 3*S*

- $E_{2,S} = -\frac{Rh}{(2+x_S)^2} = -\frac{13{,}6}{2{,}5281} = -5{,}38eV$
- $E_{2,P} = -\frac{Rh}{(2+x_P)^2} = -\frac{13{,}6}{3{,}6481} = -3{,}73eV$
- $E_{3,S} = -\frac{Rh}{(3+x_S)^2} = -\frac{13{,}6}{6{,}7081} = -2{,}03eV$

- Quá trình chuyển mức từ 3S về 2P sẽ phát ra một bức xạ có bước sóng thỏa mãn:

$$\frac{hc}{\lambda_1} = E_{3,S} - E_{2,P} = 1{,}7eV \rightarrow \lambda_1 = 0{,}73\mu m$$

- Quá trình chuyển mức từ 2P về 2S sẽ phát ra một bức xạ có bước sóng thỏa mãn:

$$\frac{hc}{\lambda_2} = E_{2,P} - E_{2,S} = 1,65eV \rightarrow \lambda_2 = 0,75\mu m$$

<table>
<tr><td colspan="2">BÀI 6.10. Bước sóng của vạch cộng hưởng của nguyên tử K ứng với sự chuyển $4P \rightarrow 4S$ bằng 7665Å; bước sóng giới hạn của dãy chính bằng 2858Å. Tính các số bổ chính Rydberg x_S và x_P đối với K.</td></tr>
<tr><td>Tóm tắt:
Chuyển trạng thái $4P \rightarrow 4S$: $\lambda_0 = 7665Å$
Dãy chính: $\lambda = 2858Å$
Xác định x_S và x_P</td><td></td></tr>
</table>

* Nhận xét: Ở đây ta thấy có hai khái niệm là vạch cộng hưởng và bước sóng giới hạn của dãy chính. Vạch cộng hưởng ứng với chuyển mức từ mức kích thích đầu tiên về trạng thái cơ bản. Bước sóng giới hạn ứng với chuyển mức từ vô cùng về trạng thái cơ bản (tất nhiên là phải đảm bảo quy tắc lọc lựa). Năng lượng ứng với mức kích thích vô cùng bằng 0 (dễ dàng chứng minh từ công thức tính năng lượng khi $n \rightarrow \infty$).

- Xét quá trình chuyển trạng thái $4P \rightarrow 4S$:

$$-\frac{Rh}{(4+x_P)^2} - \left[-\frac{Rh}{(4+x_S)^2}\right] = \frac{hc}{\lambda_0} \leftrightarrow \frac{R}{(4+\boldsymbol{x_S})^2} - \frac{R}{(4+\boldsymbol{x_P})^2} = \frac{c}{\lambda_0}$$

- Xét bước sóng giới hạn:

$$\frac{Rh}{(4+x_S)^2} = \frac{hc}{\lambda} \leftrightarrow \frac{R}{(4+\boldsymbol{x_S})^2} = \frac{c}{\lambda} \rightarrow \boldsymbol{x_S} = -2,23$$

Thay vào phương trình trên ta có: $\boldsymbol{x_P} = -1,915$

DẠNG 3: BÀI TOÁN SỐ LƯỢNG TỬ

1. KIẾN THỨC CƠ BẢN:

- Momen orbital $\vec{L}$ của electron có giá trị:

$$\begin{cases} \left|\vec{L}\right|^2 = l(l+1)\hbar^2 \\ L_Z = m.\hbar \end{cases}$$

Trong đó $l = 0, 1, 2, 3, \ldots$ và $m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \ldots$

- Momen spin $\vec{S}$ đặc trưng cho chuyển động nội tại của electron và có giá trị:

$$\begin{cases} \left|\vec{S}\right|^2 = s(s+1)\hbar^2 \\ S_Z = m_S.\hbar \end{cases}$$

Trong đó s là số lượng tử spin, còn $m_S = \pm s = \pm\frac{1}{2}$ là số lượng tử hình chiếu spin → hình chiếu lên phương z chỉ có thể lấy hai giá trị bằng: $\pm\frac{1}{2}\hbar$

- Momen toàn phần $\vec{J}$ của electrong bằng tổng hợp (vector) của momen orbital $\vec{L}$ và momen $\vec{S}$ → $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ và có giá trị:

$$\begin{cases} \left|\vec{J}\right|^2 = j(j+1)\hbar^2 \\ J_Z = m_j.\hbar \end{cases}$$

Trong đó *j* là số lượng tử toàn phần cho bởi: $j = \left|l \pm \frac{1}{2}\right|$ và mj là số lượng tử hình chiếu momen toàn phần: $m_j = 0, \pm1, \pm2, \ldots, \pm j$

l	0	1	2	3	4	…
j	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$ $\frac{3}{2}$	$\frac{3}{2}$ $\frac{5}{2}$	$\frac{5}{2}$ $\frac{7}{2}$	$\frac{7}{2}$ $\frac{9}{2}$	…

- Cấu trúc tế vi của các vạch quang phổ (xét đến electron)

- Ký hiệu trạng thái: nX_j
    - *n*: số lượng tử chính
    - *X*: *S, P, D*,… ứng với *l* = 0, 1, 2, 3,…
    - *j:* số lượng tử toàn phần
- Ký hiệu năng lượng E_{nlj}: n^2X_j
- **Quy tắc lựa chọn: $\Delta l = \pm1$; $\Delta j = 0, \pm1$**
- Phát xạ chuyển mức:

$$hf = E_{n_2l_2j_2} - E_{n_1l_1j_1}$$

- Trạng thái của một electron trong nguyên tử

- Được xác định bởi 4 số lượng tử: *n, l, m,* m_S (giống như vị trí của một người được xác định bởi số nhà, phố, quận, thành phố).
- Nguyên lý Pauli: trong nguyên tử có nhiều nhất là một electron ở trạng thái lượng tử xác định bởi 4 số lượng tử *n, l, m,* m_S → tức là không bao giờ có

chuyện hai electron trong nguyên tử lại có cùng bộ 4 số lượng tử (cũng giống như là không bao giờ có hai người lại giống hệt nhau về mọi thứ).

- Ứng với n xác định → sẽ có n^2 trạng thái

n	Lớp	l	Lớp con	m	m_S	Số trạng thái	
1	K	**0**	1s	**0**	$\pm 1/2$	2	2
2	**L**	**0**	**2*s***	**0**	$\pm 1/2$	2	8
		1	**2*p***	**1** **0** **-1**	$\pm 1/2$ $\pm 1/2$ $\pm 1/2$	6	
3	**M**	**0**	**3*s***	**0**	$\pm 1/2$	2	18
		1	**3*p***	**1** **0** **-1**	$\pm 1/2$ $\pm 1/2$ $\pm 1/2$	6	
		2	**3*d***	**2** **1** **0** **-1** **-2**	$\pm 1/2$ $\pm 1/2$ $\pm 1/2$ $\pm 1/2$ $\pm 1/2$	10	
4	**N**	**0**	**4*s***	**0**	$\pm 1/2$	2	8
		1	**4*p***	**1** **0** **-1**	$\pm 1/2$ $\pm 1/2$ $\pm 1/2$	6	

2. BÀI TẬP MINH HỌA:

BÀI 6.13. Nguyên tử hidro thoạt tiên ở trạng thái cơ bản hấp thụ photon năng lượng 10,2eV. Xác định độ biến thiên orbital ΔL của electron, biết rằng ở trạng thái kích thích electron ở trạng thái p.

Tóm tắt:
E = 10,2eV
Trạng thái kích thích: p
Xác định ΔL

* Nhận xét: để làm những bài toán liên quan tới số lượng tử, ta cần nắm được số lượng tử đặc trưng cho các trạng thái. Ví dụ như trạng thái s thì phải biết được l = 0, hay trạng thái p thì l = 1. Bài toán này đề cập đến khái niệm momen động lượng orbital → cần phải nhớ công thức tính momen động lượng orbital.

$$\left|\vec{L}\right|^2 = l(l+1)\hbar^2$$ và $L_Z = m\hbar$ trong đó l = 0, 1, 2,… và m = 0, ±1, ±2,…, ±l

- Ở trạng thái cơ bản → l = 0 → $L_0 = 0$

- Ở trạng thái kích thích p → l = 1 → $L = \sqrt{2}\hbar$

→ độ biến thiên $\Delta L = \sqrt{2}\hbar$

BÀI 6.14. Đối với electron hóa trị trong nguyên tử Na: Hỏi những trạng thái năng lượng nào có thể chuyển về trạng thái ứng với n = 3? Khi xét có chú ý cả spin.	
Tóm tắt: Nguyên tử Na n = 3 Xác định các trạng thái năng lượng có thể chuyển mức về trạng thái n = 3	

* Nhận xét: bài toán liên quan tới quy tắc chọn lựa. Ở đây trước hết ta cần xác định các trạng thái ứng với n = 3 (chú ý đến spin) → nói chung là cần biết suy luận những thông tin có được từ số lượng tử chính n. Ngoài ra để xét quá trình chuyển mức ta cần nắm được quy tắc lựa chọn:

- Với n = 3:

- l = 0, 1, 2
- Trạng thái: 3S, 3P, 3D (chưa tính đến spin) hoặc $3S_{\frac{1}{2}}; 3P_{\frac{1}{2}};\ 3P_{\frac{3}{2}};\ 3D_{\frac{3}{2}};\ 3D_{\frac{5}{2}}$
- Trạng thái năng lượng: $3^2S_{\frac{1}{2}}; 3^2P_{\frac{1}{2}};\ 3^2P_{\frac{3}{2}};\ 3^2D_{\frac{3}{2}};\ 3^2D_{\frac{5}{2}}$

- Quy tắc lựa chọn: $\boldsymbol{\Delta l = \pm 1;\ \Delta j = 0, \pm 1}$

- $\boldsymbol{\Delta l = \pm 1}$ → với S thì chỉ có P chuyển về, với P thì có S hoặc D chuyển về,…
- $\boldsymbol{\Delta j = 0, \pm 1}$ →chỉ có các mức ứng với chênh lệch momen toàn phần là 0, ±1 thì mới có thể xảy ra chuyển mức trạng thái của electron.

- Từ quy tắc lựa chọn ta có:

- Những trạng thái có thể chuyển về $3^2S_{\frac{1}{2}}$ là: $\boldsymbol{n^2P_{\frac{1}{2}}}$ **và** $\boldsymbol{n^2P_{\frac{3}{2}}}$ (với n = 3, 4, 5,…)

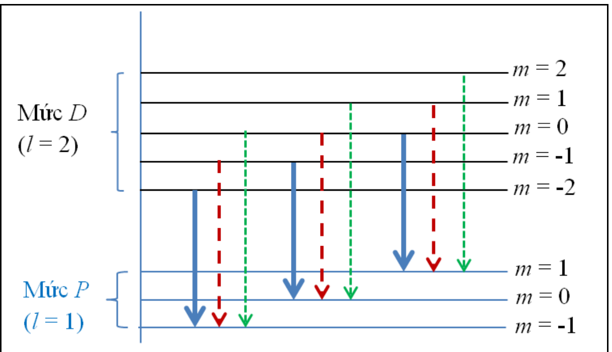
- Những trạng thái có thể chuyển về $3^2P_{\frac{1}{2}}$ là: $\boldsymbol{n^2S_{\frac{1}{2}}}$ **và** $\boldsymbol{m^2D_{\frac{3}{2}}}$ (với n = 4, 5,… và m = 3, 4, 5,…).
- Những trạng thái có thể chuyển về $3^2P_{\frac{3}{2}}$ là: $\boldsymbol{n^2S_{\frac{1}{2}}}$ **và** $\boldsymbol{m^2D_{\frac{3}{2}}}$ **và** $\boldsymbol{m^2D_{\frac{5}{2}}}$ (với n = 4, 5,… và m = 3, 4, 5,…).
- Những trạng thái có thể chuyển về $3^2D_{\frac{3}{2}}$ là $\boldsymbol{n^2P_{\frac{1}{2}}}$**;** $\boldsymbol{n^2P_{\frac{3}{2}}}$ **và** $\boldsymbol{m^2F_{\frac{5}{2}}}$ (với n = 4, 5,… và m = 4, 5, 6,…).
- Những trạng thái có thể chuyển về $3^2D_{\frac{5}{2}}$ là $\boldsymbol{n^2P_{\frac{3}{2}}}$ **và** $\boldsymbol{m^2F_{\frac{5}{2}}}$ **và** $\boldsymbol{m^2F_{\frac{7}{2}}}$ (với n = 4, 5,… và m = 4, 5, 6,…).

BÀI 6.15. Khảo sát sự tách vạch quang phổ: *mD – nP* dưới tác dụng của từ trường yếu.	
Tóm tắt: Vạch quang phổ: *mD – nP*	

* Nhận xét: Bài toán tách mức năng lượng trong từ trường → liên quan tới hiện tượng Zeeman thường → sự tách mức chỉ phụ thuộc vào số lượng tử *l*. Số mức bị tách dưới tác dụng của từ trường là 2*l* + 1. Các mức này có đặc điểm là cách đều nhau.

- Mức *P* → *l* = 1 → tách thành 2*l* + 1 = 3 mức

- Mức *D* → *l* = 2 → tách thành 2*l* + 1 = 5 mức

- Sự chuyển mức năng lượng đều tuân theo quy tắc lựa chọn: Δm = 0, ±1 → do các mức năng lượng bị tách là cách đều nhau nên vạch quang phổ *mD – nP* chỉ thực sự tách thành 3 vạch quang phổ khác nhau (như hình vẽ).	

BÀI 6.18. Có bao nhiêu electron *s*, electron *p* và electron *d* trong lớp *K, L, M*	
Tóm tắt: Lớp *K, L, M*	

Xác định số electron *s, p, d*	

* Nhận xét: Bài toán này là bài toán lý thuyết. Dựa vào bảng trạng thái của electron trong nguyên tử ta dễ dàng giải quyết. Tuy nhiên, nếu không thuộc bảng trạng thái thì ta phải biết suy luận ra số trạng thái dựa vào một số đặc điểm sau:

- Lớp *K, L, M* tương ứng với *n* = 1, 2, 3,….
- Electron *s, p, d* tương ứng với *l* = 0, 1, 2,…, ***n* – 1** → có *n* giá trị
- Số lượng tử hình chiếu orbital *m* = 0, ±1, ±2,…,**±*l*** → có 2*l* + 1 giá trị
- Ứng với mỗi giá trị *m* sẽ có hai giá trị $m_S = \pm\frac{1}{2}$

- Ở đây ta giải quyết bài toán theo hướng suy luận chứ không sử dụng bảng (sử dụng bảng thì quá dễ nên không còn gì để nói ☺).

- Lớp *K*: → *n* = 1 → *l* = 0 (electron *s*) → có 1 giá trị *m* (ứng với 2 giá trị m_S) → có 2 electron *s*, không có electron *p* và *d*

- Lớp *L*: → *n* = 2 → *l* = 0 (electron *s*) → có 1 giá trị *m* → 2 electron *s*

l = 1 (electron *p*) → có 3 giá trị *m* → 6 electron *p*

- Lớp M: → *n* = 3 → *l* = 0 (electron *s*) → có 1 giá trị *m* → 2 electron *s*

l = 1 (electron *p*) → có 3 giá trị *m* → 6 electron *p*

l = 2 (electron *d*) → có 5 giá trị *m* → 10 electron *d*

BÀI 6.19. Lớp ứng với n = 3 chứa đầy electron, trong số đó có bao nhiêu electron:

a. Có cùng m_S = ½
b. Có cùng *m* = 1
c. Có cùng *m* = -2
d. Có cùng $m_S = -\frac{1}{2}$ và *m* = 0
e. Có cùng $m_S = \frac{1}{2}$ và *l* = 2

Tóm tắt: n = 3 chứa đầy electron Xác định số electron thỏa mãn điều kiện *a, b, c, d, e*	

* Nhận xét: Kết hợp bảng + kỹ năng đếm → giải quyết gọn

n	Lớp	*l*	Lớp con	*m*	m_S	Số trạng thái	
3	**M**	**0**	**3*s***	**0**	$\pm 1/2$	2	18
		1	**3*p***	**1**	$\pm 1/2$	6	

				0 **-1**	$\pm 1/2$ $\pm 1/2$		
		2	**3*d***	**2** **1** **0** **-1** **-2**	$\pm 1/2$ $\pm 1/2$ $\pm 1/2$ $\pm 1/2$ $\pm 1/2$	10	

Ta có kết quả

Điều kiện	a	b	c	d	e
Số electron	9	4	2	3	5

BÀI 6.20. Trong nguyên tử các lớp K, L, M đều đầy. Xác định:

a. Tổng số các electron trong nguyên tử
b. Số electron *s*, số electron *p*, số electron *d*
c. Số electron *p* có *m* = 0

Tóm tắt: Lớp *K*, *L*, *M* chứa đầy electron Xác định số electron thỏa mãn điều kiện *a*, *b*, *c*	

* Nhận xét: tương tự bài 6-19

n	Lớp	*l*	Lớp con	*m*	m_S	Số trạng thái	
1	K	**0**	1*s*	**0**	$\pm 1/2$	2	2
2	**L**	**0**	**2*s***	**0**	$\pm 1/2$	2	8
		1	**2*p***	**1** **0** **-1**	$\pm 1/2$ $\pm 1/2$ $\pm 1/2$	6	
3	**M**	**0**	**3*s***	**0**	$\pm 1/2$	2	18
		1	**3*p***	**1** **0** **-1**	$\pm 1/2$ $\pm 1/2$ $\pm 1/2$	6	
		2	**3*d***	**2** **1** **0** **-1** **-2**	$\pm 1/2$ $\pm 1/2$ $\pm 1/2$ $\pm 1/2$ $\pm 1/2$	10	

Ta có kết quả:

Điều kiện	a	b	c
Số electron	28	6(s); 12(p); 10(d)	4

BÀI 6.21. Viết cấu hình electron đối với các nguyên tử sau đây ở trạng thái cơ bản a. Bo b. Cacbon c. Natri	
Tóm tắt: Trạng thái cơ bản: *B, C, Na* Viết cấu hình.	

* Nhận xét: bài toán này cũng khá cơ bản. Điểm chú ý của bài này là điều kiện trạng thái cơ bản → lúc đó nguyên tử B, C, Na ở trạng thái trung hòa về điện.

- Nguyên tử B có Z = 5 → cấu hình: $1s^2 2s^2 2p^1$

- Nguyên tử C có Z = 6 → cấu hình: $1s^2 2s^2 2p^2$

- Nguyên tử Na có Z = 11 → cấu hình: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$