

1. Mẫu nguyên tử Rutherford và những hạn chế

Đầu thế kỷ 20, nhà vật lý Ernest Rutherford đề xuất mẫu nguyên tử hành tinh, trong đó:

- Nguyên tử có cấu trúc rỗng.
- Ở tâm là hạt nhân mang điện tích dương, có kích thước rất nhỏ so với nguyên tử.
- Các electron mang điện tích âm chuyển động trên các quỹ đạo tròn xung quanh hạt nhân, giống như các hành tinh quay quanh Mặt Trời.

Tuy nhiên, mẫu này mâu thuẫn với lý thuyết điện từ cổ điển:

1. **Tính không bền vững:** Theo điện động lực học cổ điển, một điện tích chuyển động có gia tốc (chuyển động tròn) sẽ liên tục bức xạ sóng điện từ. Năng lượng của electron sẽ giảm dần, bán kính quỹ đạo sẽ nhỏ dần và cuối cùng electron sẽ rơi vào hạt nhân. Do đó, nguyên tử không thể bền vững.
2. **Quang phổ liên tục:** Vì electron liên tục mất năng lượng, tần số của sóng điện từ phát ra sẽ thay đổi liên tục, tạo ra quang phổ liên tục. Nhưng thực tế, quang phổ của các nguyên tử (khi bị kích thích) là quang phổ vạch, chỉ chứa một số tần số xác định.

2. Hai tiên đề của Bo (Bohr's Postulates)

Năm 1913, Niels Bohr đã vận dụng thuyết lượng tử ánh sáng vào hệ thống nguyên tử và đề xuất một mẫu nguyên tử mới (gọi là mẫu nguyên tử Bo), giải quyết được các khó khăn của mẫu Rutherford. Mẫu này dựa trên hai tiên đề chính.

2.1. Tiên đề về các trạng thái dừng

Nguyên tử chỉ tồn tại trong những trạng thái có năng lượng xác định, gọi là các trạng thái dừng. Khi ở trong các trạng thái dừng, nguyên tử không bức xạ năng lượng.

- Trong các trạng thái dừng của nguyên tử, electron chỉ chuyển động quanh hạt nhân trên những quỹ đạo có bán kính hoàn toàn xác định gọi là các quỹ đạo dừng.
- Đối với nguyên tử Hidro, bán kính quỹ đạo dừng được tính theo công thức: $r_n = n^2 * r_0$
- Trong đó:
 - n là số nguyên ($n = 1, 2, 3, \dots$) gọi là số lượng tử chính.
 - r_0 là bán kính Bo, là bán kính quỹ đạo ở trạng thái cơ bản ($n=1$). $r_0 = 5,3 * 10^{-11} \text{ m}$.
- Các quỹ đạo dừng có tên gọi tương ứng với các giá trị n :
 - $n = 1$: Quỹ đạo K (trạng thái cơ bản).
 - $n = 2$: Quỹ đạo L.

- $n = 3$: Quỹ đạo M.
- $n = 4$: Quỹ đạo N.
- $n = 5$: Quỹ đạo O.
- $n = 6$: Quỹ đạo P.

Ví dụ 1: Tính bán kính quỹ đạo dừng L của electron trong nguyên tử Hidro.

Quỹ đạo L ứng với $n = 2$. Áp dụng công thức: $r_2 = 2^2 * r_0 = 4 * 5,3 * 10^{-11} = 21,2 * 10^{-11} \text{ m}$.

Ví dụ 2: Một electron đang ở quỹ đạo N. Bán kính quỹ đạo này lớn gấp bao nhiêu lần bán kính Bo?

Quỹ đạo N ứng với $n = 4$. Ta có $r_4 = 4^2 * r_0 = 16 * r_0$. Vậy bán kính quỹ đạo N lớn gấp 16 lần bán kính Bo.

2.2. Tiên đề về sự hấp thụ và bức xạ năng lượng

Khi nguyên tử chuyển từ trạng thái dừng có năng lượng E_n sang trạng thái dừng có năng lượng E_m thì nó phát ra hoặc hấp thụ một photon có năng lượng đúng bằng hiệu $|E_n - E_m|$.

- **Bức xạ (phát xạ) năng lượng:** Khi nguyên tử chuyển từ trạng thái dừng có năng lượng cao (E_{cao}) xuống trạng thái dừng có năng lượng thấp hơn ($E_{\text{thấp}}$), nó sẽ phát ra một photon.
 - Công thức: $\epsilon = hf = hc/\lambda = E_{\text{cao}} - E_{\text{thấp}}$

- **Hấp thụ năng lượng:** Khi nguyên tử đang ở trạng thái dừng có năng lượng thấp ($E_{\text{thấp}}$) hấp thụ một photon, nó sẽ chuyển lên trạng thái dừng có năng

lượng cao hơn (E_{cao}).

- Điều kiện: Năng lượng của photon phải đúng bằng hiệu năng lượng giữa hai trạng thái. $\epsilon = hf = hc/\lambda = E_{\text{cao}} - E_{\text{thấp}}$

Ví dụ 1 (Bức xạ): Một nguyên tử Hidro chuyển từ trạng thái có năng lượng $E_3 = -1,51$ eV về trạng thái có năng lượng $E_2 = -3,4$ eV. Tính bước sóng của photon được phát ra.

Năng lượng photon phát ra: $\epsilon = E_3 - E_2 = (-1,51) - (-3,4) = 1,89$ eV.

Đổi ra Joule: $\epsilon = 1,89 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J} = 3,024 \cdot 10^{-19} \text{ J}$.

Bước sóng: $\lambda = hc/\epsilon = (6,625 \cdot 10^{-34} \cdot 3 \cdot 10^8) / (3,024 \cdot 10^{-19}) \approx 0,6575 \cdot 10^{-6} \text{ m} = 0,6575 \text{ }\mu\text{m}$.

Ví dụ 2 (Hấp thụ): Nguyên tử Hidro ở trạng thái cơ bản ($E_1 = -13,6$ eV) có thể hấp thụ một photon có năng lượng 12,09 eV không? Nếu có, nó sẽ chuyển lên trạng thái nào?

Giả sử nguyên tử chuyển lên trạng thái n . Năng lượng của trạng thái đó là E_n .

Ta có: $E_n - E_1 = 12,09 \text{ eV} \Rightarrow E_n = E_1 + 12,09 = -13,6 + 12,09 = -1,51 \text{ eV}$.

Ta biết công thức năng lượng: $E_n = -13,6 / n^2 \text{ (eV)}$.

$\Rightarrow -1,51 = -13,6 / n^2 \Rightarrow n^2 \approx 13,6 / 1,51 \approx 9 \Rightarrow n = 3$.

Vì $n=3$ là một số nguyên, nên sự hấp thụ này có thể xảy ra và nguyên tử sẽ chuyển lên trạng thái dừng M.

3. Năng lượng và Quang phổ vạch của Nguyên tử Hidro

3.1. Năng lượng của electron trong nguyên tử Hidro

Năng lượng của electron ở quỹ đạo dừng thứ n được cho bởi công thức:

- $E_n = -13,6 / n^2 \text{ (eV)}$ (với $1 \text{ eV} = 1,6 * 10^{-19} \text{ J}$)

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

Giải thích:

- Dấu "-" cho thấy electron bị liên kết với hạt nhân. Muốn bứt electron ra khỏi nguyên tử (ion hóa), cần cung cấp cho nó một năng lượng tối thiểu bằng $|E_n|$.
- $n = 1$: Trạng thái cơ bản (ground state), có năng lượng thấp nhất: $E_1 = -13,6 \text{ eV}$.
- $n > 1$: Các trạng thái kích thích (excited states). Năng lượng càng cao khi n càng lớn.
- $n = \infty$: Trạng thái ion hóa, electron đã thoát khỏi nguyên tử. Năng lượng $E_\infty = 0$.

Ví dụ 1: Tính năng lượng của electron ở quỹ đạo L ($n=2$) và M ($n=3$).

$$E_2 = -13,6 / 2^2 = -3,4 \text{ eV}.$$

$$E_3 = -13,6 / 3^2 \approx -1,51 \text{ eV}.$$

Ví dụ 2: Tính năng lượng cần thiết để ion hóa nguyên tử Hidro từ trạng thái cơ bản.

Năng lượng ion hóa là năng lượng cần để đưa electron từ $n=1$ đến $n=\infty$.

$$\Delta E = E_\infty - E_1 = 0 - (-13,6) = 13,6 \text{ eV}.$$

3.2. Quang phổ vạch của nguyên tử Hidro

Mẫu nguyên tử Bo giải thích thành công sự hình thành quang phổ vạch của nguyên tử Hidro.

- **Quang phổ vạch phát xạ:** Khi một khối khí Hidro bị kích thích (bằng nhiệt hoặc điện), các nguyên tử sẽ chuyển lên các trạng thái kích thích. Sau đó, chúng nhanh chóng chuyển về các trạng thái có năng lượng thấp hơn và phát ra các photon có tần số xác định ($hf = E_{\text{cao}} - E_{\text{thấp}}$). Mỗi photon ứng với một vạch màu (hoặc vạch quang phổ) đặc trưng. Tập hợp các vạch này tạo thành quang phổ vạch phát xạ của Hidro.
- **Quang phổ vạch hấp thụ:** Khi cho ánh sáng trắng (có quang phổ liên tục) đi qua một khối khí Hidro ở trạng thái cơ bản, các nguyên tử Hidro sẽ hấp thụ các photon có năng lượng đúng bằng hiệu $E_n - E_1$. Kết quả là trên nền quang phổ liên tục của ánh sáng trắng xuất hiện các vạch tối tại đúng vị trí các vạch màu trong quang phổ phát xạ.

3.3. Các dãy quang phổ chính của Hidro

Các vạch quang phổ của Hidro được sắp xếp thành các dãy có quy luật. Tên các dãy được đặt theo tên các nhà khoa học đã tìm ra chúng.

a. Dãy Laiman (Lyman Series)

- **Sự chuyển mức:** Xảy ra khi electron từ các quỹ đạo bên ngoài ($n = 2, 3, 4, \dots$) chuyển về quỹ đạo K ($n = 1$).
- **Công thức:** $hf = hc/\lambda = E_n - E_1$ (với $n \geq 2$)
- **Vị trí:** Nằm trong vùng **tử ngoại** (ultraviolet).

Ví dụ: Tính bước sóng dài nhất và ngắn nhất trong dãy Laiman.

- Vạch dài nhất (năng lượng nhỏ nhất) ứng với sự chuyển từ $n=2$ về $n=1$:

$$\Delta E = E_2 - E_1 = -3,4 - (-13,6) = 10,2 \text{ eV.}$$

$$\lambda_{\max} = hc/\Delta E = (6,625 \cdot 10^{-34} \cdot 3 \cdot 10^8) / (10,2 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}) \approx 0,1218 \mu\text{m}.$$

- Vạch ngắn nhất (năng lượng lớn nhất) ứng với sự chuyển từ $n=\infty$ về $n=1$:

$$\Delta E = E_{\infty} - E_1 = 0 - (-13,6) = 13,6 \text{ eV}.$$

$$\lambda_{\min} = hc/\Delta E = (6,625 \cdot 10^{-34} \cdot 3 \cdot 10^8) / (13,6 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}) \approx 0,0914 \mu\text{m}.$$

b. Dãy Banme (Balmer Series)

- **Sự chuyển mức:** Xảy ra khi electron từ các quỹ đạo bên ngoài ($n = 3, 4, 5, \dots$) chuyển về quỹ đạo L ($n = 2$).
- **Công thức:** $hf = hc/\lambda = E_n - E_2$ (với $n \geq 3$)
- **Vị trí:** Một phần nằm trong vùng **ánh sáng nhìn thấy** và một phần trong vùng tử ngoại gần.
- Các vạch trong vùng nhìn thấy được ký hiệu là H_{α} (đỏ), H_{β} (lam), H_{γ} (chàm), H_{δ} (tím).
 - Vạch H_{α} : chuyển từ $n=3 \rightarrow n=2$.
 - Vạch H_{β} : chuyển từ $n=4 \rightarrow n=2$.
 - Vạch H_{γ} : chuyển từ $n=5 \rightarrow n=2$.
 - Vạch H_{δ} : chuyển từ $n=6 \rightarrow n=2$.

Ví dụ: Tính bước sóng của vạch H_{α} (vạch đỏ).

Đây là sự chuyển từ $n=3$ về $n=2$.

$$\Delta E = E_3 - E_2 = -1,51 - (-3,4) = 1,89 \text{ eV}.$$

$$\lambda_{H_{\alpha}} = hc/\Delta E = (6,625 \cdot 10^{-34} \cdot 3 \cdot 10^8) / (1,89 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}) \approx 0,6575 \mu\text{m} \text{ (màu đỏ)}.$$

c. **Dãy Pasen (Paschen Series)**

- **Sự chuyển mức:** Xảy ra khi electron từ các quỹ đạo bên ngoài ($n = 4, 5, 6, \dots$) chuyển về quỹ đạo M ($n = 3$).
- **Công thức:** $hf = hc/\lambda = E_n - E_3$ (với $n \geq 4$)
- **Vị trí:** Nằm trong vùng **hồng ngoại** (infrared).

Ví dụ: Tính bước sóng của vạch đầu tiên trong dãy Pasen.

Vạch đầu tiên ứng với sự chuyển từ $n=4$ về $n=3$.

$E_4 = -13,6 / 4^2 = -0,85 \text{ eV}.$

$\Delta E = E_4 - E_3 = -0,85 - (-1,51) = 0,66 \text{ eV}.$

$\lambda = hc/\Delta E = (6,625 \cdot 10^{-34} \cdot 3 \cdot 10^8) / (0,66 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}) \approx 1,88 \text{ }\mu\text{m}$ (vùng hồng ngoại).

Bảng tóm tắt các dãy quang phổ của Hidro

Tên dãy	Mức năng lượng cuối	Mức năng lượng đầu (n)	Vùng quang phổ
Laiman (Lyman)	E_1 (Quỹ đạo K)	2, 3, 4, ...	Tử ngoại
Banme (Balmer)	E_2 (Quỹ đạo L)	3, 4, 5, ...	Nhìn thấy & Tử ngoại gần
Pasen (Paschen)	E_3 (Quỹ đạo M)	4, 5, 6, ...	Hồng ngoại