

I- Mẫu nguyên tử Rutherford

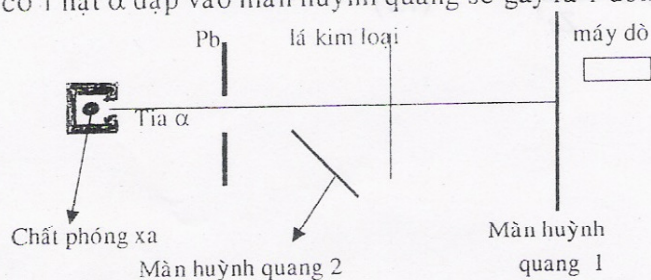
I-1/ Thí nghiệm tán xạ hạt α của Rutherford

Các nhà khoa học cổ đại cho rằng nguyên tử là phần tử nhỏ nhất không thể chia cắt được. Tuy nhiên sự phát hiện ra electron (Thomson), tia X (Röntgen), tia dương cực (Goldstein), hiện tượng quang điện (Hertz), hiện tượng phóng xạ (Becquerel) ... cho thấy trong nguyên tử còn có những phần tử nhỏ hơn.

Các electron mang điện tích âm, trong khi nguyên tử lại trung hòa điện, nên mỗi nguyên tử phải chứa vật chất mang điện dương để cân bằng điện tích âm của các electron. Hơn nữa lại rất nhẹ so với nguyên tử, nên có thể suy đoán rằng vật chất mang điện dương phải chiếm hầu hết khối lượng nguyên tử.

Năm 1898, Thomson cho rằng nguyên tử là quả cầu bằng vật chất mang điện tích dương, trong đó các electron sắp xếp đều đặn sao cho nguyên tử trung hòa điện.

Năm 1911, Rutherford đã thực hiện thí nghiệm tán xạ hạt α với sự trợ giúp của Geiger và Marsden (hình vẽ). Hạt α phát ra từ 1 nguồn chất phóng xạ, qua 1 lỗ nhỏ trên tấm chì để tạo ra 1 chùm tia α hẹp bắn vào 1 lá kim loại mỏng (vàng). Phía sau lá vàng có 1 màn huỳnh quang ZnS có thể di động. Mỗi khi có 1 hạt α đập vào màn huỳnh quang sẽ gây ra 1 đốm sáng



Kết quả thí nghiệm cho thấy hầu hết các hạt α truyền thẳng qua lá kim loại, chỉ có 1 số ít hạt bị lệch (tạo ra các chấm sáng trên màn huỳnh quang 1), trong đó có 1 số rất ít hạt bị lệch ngược trở lại (ghi nhận trên màn huỳnh quang 2)

Nếu mô hình nguyên tử của Thomson là đúng thì chỉ có 1 số rất ít hạt α có thể đi qua lá vàng; trái với thực nghiệm!

Điều này cho thấy nguyên tử hầu như trống rỗng (vì hầu hết hạt α xuyên qua lá kim loại) và giả thuyết của Thomson (phần mang điện tích dương chiếm hầu hết nguyên tử) là không đúng. Vì hạt α có khối lượng lớn (hơn 7500 lần electron) và có vận tốc rất lớn (10^6 m/s), mặt khác cường độ điện trường E tại bề mặt nguyên tử

- theo mô hình của Thomson- chỉ khoảng 10^{13} V/m, thì lực tác dụng lên hạt α khá yếu nên độ lệch của tia α do sự khúc tán là không đáng kể: trái với thực nghiệm.

Như thế các hạt α bị lệch (và đặc biệt là các hạt bị lệch 1 góc tù) là do tương tác với 1 điện tích dương có kích thước rất nhỏ có khả năng gây ra 1 điện trường lớn hơn rất nhiều (theo ước tính khoảng 10^{21} V/m).

I-2/ Mô hình nguyên tử hành tinh của Rutherford

Từ kết quả thí nghiệm trên, Rutherford đề nghị mô hình nguyên tử:

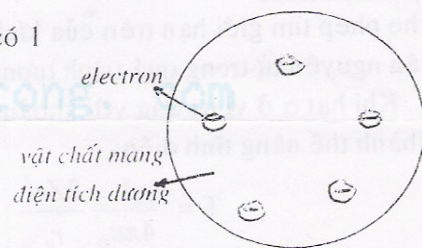
Nguyên tử hầu như trống rỗng, gồm:

- hạt nhân có kích thước rất bé so với nguyên tử, mang điện tích dương và tập trung hầu hết khối lượng của nguyên tử
- xung quanh hạt nhân là các electron, mang điện

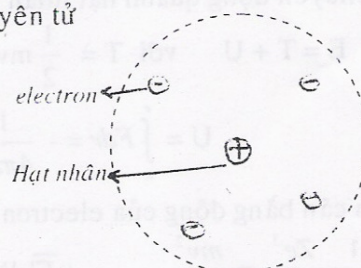
tích âm chuyển động trên các quỹ đạo tròn. Tổng điện tích âm của các electron bằng điện tích dương của hạt nhân nhưng trái dấu, nên toàn nguyên tử là trung hòa điện.

Mô hình này giống như hình ảnh thu nhỏ của Thái Dương hệ, nên được gọi là mô hình nguyên tử hành tinh

Thí nghiệm của Rutherford và các thí nghiệm tương



Mô hình nguyên tử của Thomson



Mô hình nguyên tử của Rutherford

tự sau đó cung cấp các thông tin về hạt nhân nguyên tử.

Sự tán xạ (lệch) của hạt α phụ thuộc vào điện tích của hạt nhân (ứng với các lá kim loại khác nhau) cho phép ước tính điện tích của hạt nhân. Mọi nguyên tử của cùng 1 nguyên tố đều có cùng điện tích hạt nhân và điện tích này tăng dần từ nguyên tố này tới nguyên tố khác trong bảng phân hạng tuần hoàn.

I-3/ Lý thuyết của Rutherford về tán xạ hạt α

Với giả thiết hạt nhân

nguyên tử và hạt α là các điện tích điểm; hạt nhân nguyên tử đứng yên (vì hạt nhân rất lớn so với hạt α), đồng thời coi như tương tác giữa hạt α và hạt nhân nguyên tử là tương tác Coulomb

Vận dụng định luật bảo toàn động lượng và năng lượng, Rutherford

tim ra mối quan hệ giữa góc tán xạ θ và thông số va chạm b

$$\cotg \frac{\theta}{2} = \frac{2\pi\epsilon_0 m v_0^2}{Ze^2} b = \frac{4\pi\epsilon_0 b T}{Ze^2} \quad (1.1)$$

Với $T = \frac{1}{2} m v_0^2$ là động năng của hạt α

Kết quả này cho thấy thông số va chạm b càng nhỏ thì góc tán xạ θ càng lớn

Với $b = 0$ thì góc $\theta = 180^\circ$

I-4/ Kích thước hạt nhân

Từ (1.1) cho phép tìm giới hạn trên của kích thước hạt nhân, tức là khoảng cách ngắn nhất r_0 giữa hạt α và hạt nhân nguyên tử trong quá trình tương tác trực diện với $b = 0$ và góc tán xạ $\theta = 180^\circ$. Khi hạt α ở vị trí ứng với khoảng cách ngắn nhất r_0 thì động năng T của hạt α chuyển hóa hoàn toàn thành thế năng tĩnh điện:

$$T = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2Ze^2}{r_0}$$

Do đó :
$$r_0 = \frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 T}$$

Ví dụ với hạt α có động năng $T = 7,7 \text{ MeV}$ thì $r_0 = 3,8 \cdot 10^{-16} Z \text{ (m)}$

Nếu hạt nhân nguyên tử vàng (Au) có $Z = 79$ thì $r_0 = 3 \cdot 10^{-14} \text{ m}$, nghĩa là bán kính hạt nhân nguyên tử vàng có giá trị nhỏ hơn $3 \cdot 10^{-14} \text{ m}$

Sau này với các máy gia tốc có thể tạo ra các hạt α có động năng lớn hơn, người ta nhận thấy biểu thức tán xạ của Rutherford không còn hoàn toàn phù hợp với thực nghiệm. Lý do là vì khi đó khoảng cách ngắn nhất r_0 giữa hạt α và hạt nhân sẽ giảm và lực tương tác giữa 2 hạt này không còn thuần túy là lực Coulomb

I-5/ Những thiếu sót của mô hình nguyên tử hành tinh

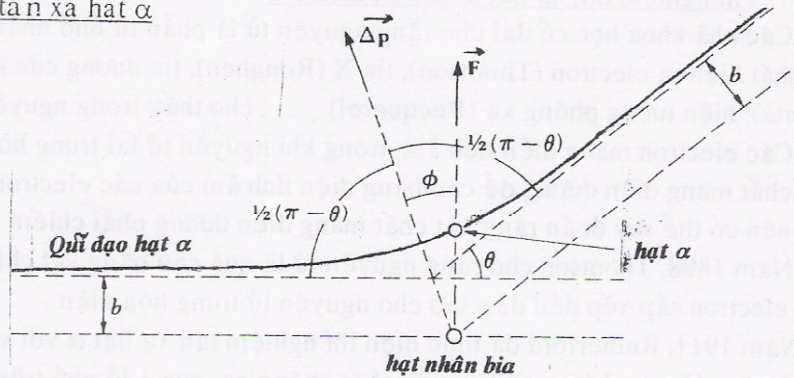
a) Khi chuyển động quanh hạt nhân trên quỹ đạo tròn thì electron có năng lượng

$$E = T + U \quad \text{với } T = \frac{1}{2} m v^2 \text{ là động năng}$$

$$U = \int_{\infty}^r F dr = - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r} \text{ là thế năng}$$

Điều kiện cân bằng động của electron trên quỹ đạo : $\vec{F} + \vec{F}' = 0$

Hay
$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r^2} = \frac{m v^2}{r} \quad (\vec{F}' \text{ là lực li tâm})$$



$$\text{Suy ra } T = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{2r} \quad \text{và do đó } E = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{2r} < 0$$

$E < 0$: đây là năng lượng liên kết của electron đối với hạt nhân nguyên tử

Theo điện động lực học, khi chuyển động quanh hạt nhân thì electron sẽ bức xạ năng lượng (dưới dạng sóng điện từ), nên năng lượng giảm dần, tức là $|E|$ tăng dần, và do đó r giảm dần. Khi đó quỹ đạo của electron sẽ là 1 đường xoắn ốc, và electron sẽ rơi vào hạt nhân trong 1 khoảng thời gian rất ngắn : mô hình nguyên tử hành tinh không tồn tại !

b) Mặt khác khi electron chuyển động quanh hạt nhân thì nó bức xạ ra sóng điện từ có tần số bằng tần số quay f .

$$\text{Từ } f = \frac{1}{T} = \frac{v}{2\pi r} = \frac{e}{2\pi r} \sqrt{\frac{Z}{4\pi\epsilon_0 mr}}, \text{ ta thấy khi } r \text{ giảm thì } f \text{ tăng}$$

Do r giảm liên tục, nên f tăng liên tục và năng lượng bức xạ liên tục, nghĩa là quang phổ phát ra là quang phổ liên tục và chuyển dần về phía bước sóng ngắn : điều này không đúng vì trong thực tế quang phổ nguyên tử là quang phổ vạch (ví dụ quang phổ của Hidrô trong vùng thấy được gồm 4 vạch : đỏ ; lam ; chàm ; tím có bước sóng không đổi)

II- Mẫu nguyên tử Bohr

II-1/ Lý thuyết BOHR về nguyên tử H

1.1 – Các tiên đề

Để giải thích các thiếu sót của mô hình nguyên tử hành tinh, Bohr đề nghị thay đổi qui luật điện từ áp dụng cho nguyên tử. Về cơ bản Bohr vẫn giữ lại các quan điểm đúng đắn của Rutherford về cấu tạo của nguyên tử, và để sửa chữa 2 thiếu sót của mô hình nguyên tử theo Rutherford, Bohr đưa ra 2 tiên đề :

a) Tiên đề 1 (về các trạng thái dừng)

Nguyên tử chỉ tồn tại trong những trạng thái đặc biệt gọi là trạng thái dừng (hay trạng thái lượng tử) có năng lượng xác định, bất liên tục $E_1, E_2, E_3, \dots$. Trong các trạng thái này nguyên tử không bức xạ năng lượng và có momen động lượng bị lượng tử hóa :

$$mvr = n h \quad \text{với } h = h/2\pi \quad \text{và } n = 1; 2; 3; \dots$$

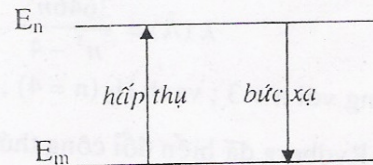
(Khi đó electron chuyển động trên những quỹ đạo đặc biệt gọi là quỹ đạo dừng hay quỹ đạo lượng tử có bán kính $r_1, r_2, \dots$ xác định)

b) Tiên đề 2 (về tần số bức xạ)

Nguyên tử có thể chuyển từ trạng thái dừng này sang trạng thái dừng khác (tức là electron có thể nhảy vọt từ quỹ đạo dừng này sang quỹ đạo dừng khác) bằng cách hấp thụ hay bức xạ năng lượng bằng đúng hiệu năng lượng ΔE giữa 2 trạng thái tương ứng.

Khi nguyên tử chuyển từ trạng thái có năng lượng cao E_n về trạng thái có năng lượng thấp hơn E_m , sẽ phát ra photon có năng lượng : $\epsilon = h\nu = \Delta E = E_n - E_m$

tức là tần số bức xạ phát ra là $\nu = \frac{\Delta E}{h}$



Ngược lại khi nguyên tử đang ở trạng thái năng lượng thấp E_m , nhận được năng lượng kích thích đúng bằng $\Delta E = E_n - E_m$ thì sẽ chuyển lên trạng thái có năng lượng E_n cao hơn

1.2- Ý nghĩa vật lý của các tiên đề

Tiên đề 1 thể hiện tính chất sóng của electron. Thật vậy nếu áp dụng quan điểm sóng vật chất De Broglie liên kết với chuyển động của electron trên quỹ đạo, thì điều kiện lượng tử hóa momen động lượng của Bohr chính là điều kiện có sóng dừng trên quỹ đạo tròn là $2\pi r = n\lambda$ với λ là bước sóng của sóng De Broglie $\lambda = h/mv$

Tiên đề 2 giải thích được nguồn gốc các vạch quang phổ : Nguyên tử ở trạng thái cơ bản khi bị kích thích sẽ chuyển lên trạng thái có năng lượng cao hơn. Sau khi tồn tại trong trạng thái kích thích 1

thời gian ngắn, nguyên tử sẽ chuyển về trạng thái có năng lượng thấp hơn và phát ra các photon có năng lượng khác nhau, tức là có tần số hoặc bước sóng khác nhau tạo thành quang phổ (vạch) của nguyên tử.

1.3- Một số kết quả lý thuyết về nguyên tử Hidrô suy ra từ thuyết Bohr

a) Bán kính các quỹ đạo dừng

Từ điều kiện cân bằng động của electron trên quỹ đạo, kết hợp với điều kiện lượng tử hóa momen động lượng của Bohr, suy ra bán kính quỹ đạo dừng thứ n :

$$r_n = \frac{n^2 h^2}{k_0 m_e e^2} \quad \text{trong đó } k_0 = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}$$

$$\text{Nếu } n = 1 \text{ thì } r_1 = \frac{h^2}{k_0 m_e e^2} = 0,53 \text{ \AA} \text{ thường}$$

được kí hiệu là a_0 , gọi là bán kính Bohr, tức là bán kính quỹ đạo dừng bé nhất của electron trong nguyên tử H. Suy ra $r_n = n^2 a_0 = 0,53n^2 (\text{\AA})$

b) Các mức năng lượng

$$\text{Từ biểu thức năng lượng } E = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{2r}$$

nếu thay r bởi biểu thức của r_n ta được:

$$E_n = -\frac{k_0^2 m_e e^4}{2n^2 h^2}$$

$$\text{Nếu } n = 1 \text{ thì } E_1 = -\frac{k_0^2 m_e e^4}{2h^2} = -13,6 \text{ eV} : \text{đó là mức cơ bản, tức là mức năng lượng thấp nhất}$$

của nguyên tử Hidrô (khi nguyên tử ở trạng thái bình thường)

$$\text{Suy ra } E_n = \frac{E_1}{n^2} = -\frac{13,6}{n^2} (\text{eV})$$

c) Các dãy quang phổ của Hidrô

Từ trước khi có thuyết Bohr, vào năm 1885 Balmer đã tìm ra các vạch quang phổ của Hidrô trong miền ánh sáng thấy được, đó là các vạch đỏ, lam, chàm và tím. Balmer gọi 4 vạch này theo thứ tự là vạch H_α , H_β , H_γ và H_δ .

Balmer đã thiết lập công thức thực nghiệm (gọi là công thức Balmer):

$$\lambda (\text{\AA}) = \frac{3646n^2}{n^2 - 4}$$

Vạch H_α ứng với $n = 3$; vạch H_β ($n = 4$); vạch H_γ ($n = 5$) và vạch H_δ ($n = 6$)

Sau đó Rydberg đã biến đổi công thức trên thành: $\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right)$ trong đó $n = 3, 4, 5, 6$

và $R = 1,09737 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$ gọi là hằng số Rydberg

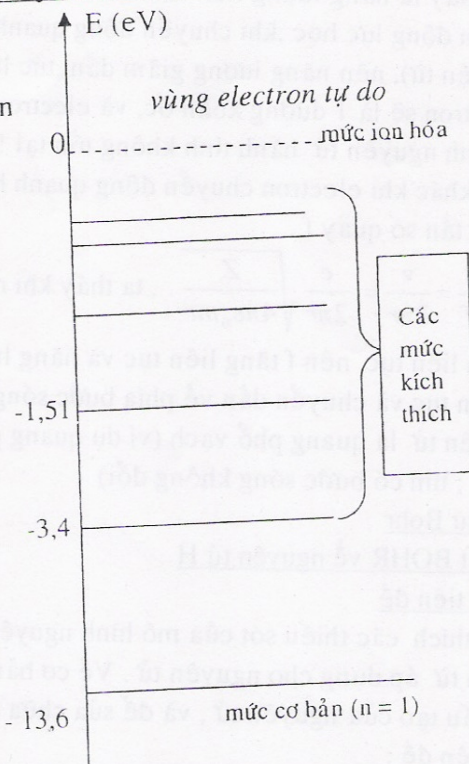
Từ tiên đề 2 của Bohr, suy ra tần số bức xạ:

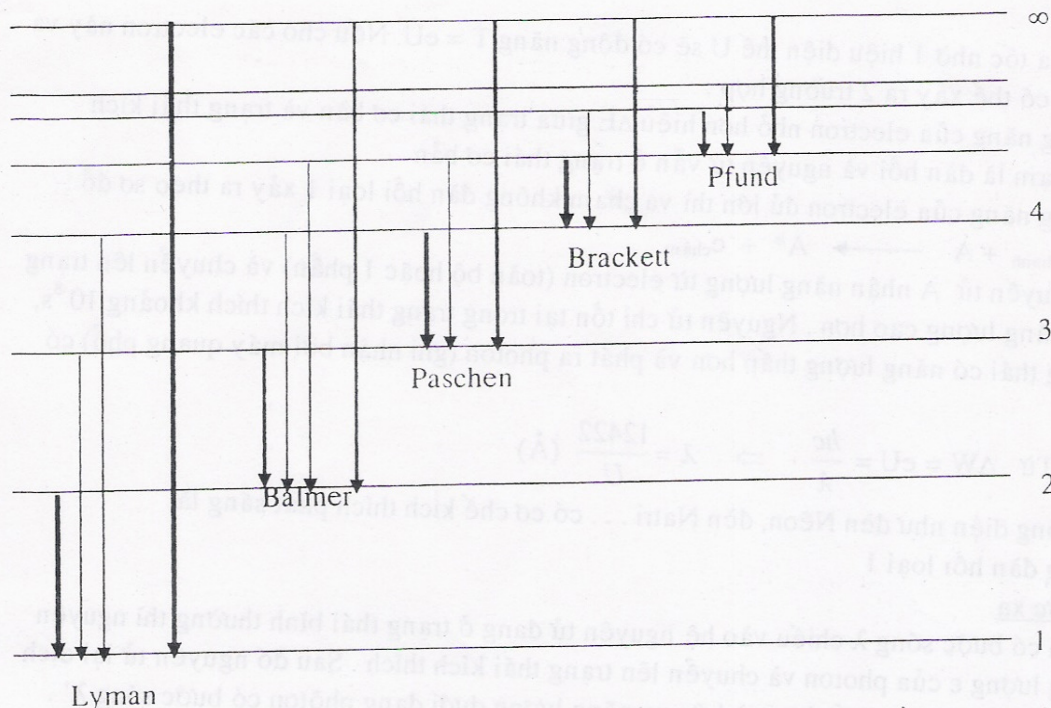
$$\nu = \frac{\Delta E}{h} = \frac{E_{n_1} - E_{n_2}}{h} = \frac{k_0^2 m_e e^4}{2hh^2} \left(\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right) \quad \text{với } n_1 > n_2$$

$$\text{hay số sóng } \bar{\nu} = \frac{1}{\lambda} = \frac{m_e e^4}{8\epsilon_0^2 ch^3} \left(\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right) = R \left(\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right)$$

trong đó R là hằng số Rydberg.

Có vô số các dịch chuyển giữa các trạng thái dừng thứ n_1 và n_2 như trên, nên quang phổ gồm rất nhiều vạch, được sắp xếp thành các dãy





Lyman

- dãy Lyman (tìm ra năm 1916) ứng với $n_2 = 1$; $n_1 = 2; 3; 4; \dots$ nằm trong miền viễn tử ngoại
- dãy Balmer (tìm ra năm 1885) ứng với $n_2 = 2$; $n_1 = 3; 4; 5 \dots$ chỉ có 4 vạch đầu tiên nằm trong miền thấy được là H_α (đỏ); H_β (lam); H_γ (chàm); H_δ (tím); các vạch còn lại nằm trong miền tử ngoại
- dãy Paschen (tìm ra năm 1908) ứng với $n_2 = 3$; $n_1 = 4; 5; 6; \dots$ nằm trong miền hồng ngoại
- dãy Brackett (tìm ra năm 1922) ứng với $n_2 = 4$; $n_1 = 5; 6; 7; \dots$ nằm trong miền hồng ngoại xa
- dãy Pfund (tìm ra năm 1924) ứng với $n_2 = 5$; $n_1 = 6; 7; 8; \dots$ nằm trong miền hồng ngoại xa

Mỗi dãy đều có 1 giới hạn về phía sóng dài ($\lambda_{\max}$) ứng với n_1 có giá trị nhỏ nhất và 1 giới hạn về phía sóng ngắn ($\lambda_{\min}$) ứng với $n_1 = \infty$

1-4/ Mở rộng thuyết Bohr cho các ion tương tự như Hidrô (ion hydrogenoit)

Các ion He^+ ; Li^{2+} ; Be^{3+} ; ... có cấu trúc tương tự như H, gồm 1 hạt nhân (có điện tích $+Ze$) và 1 electron. Do đó có thể áp dụng thuyết Bo 1 cách tương tự cho các ion này, bằng cách:

- thay thế e^2 bởi Ze^2 trong biểu thức của lực Coulomb và bán kính quỹ đạo
- thay thế e^4 bởi $Z^2 e^4$ trong biểu thức của năng lượng và số sóng

Nguyên tử H	Ion hydrogenoit
$r_n = \frac{n^2 h^2}{k_0 m_e e^2}$	$r_n = \frac{n^2 h^2}{k_0 m_e Z e^2}$
$E_n = -\frac{m_e e^4}{8 \epsilon_0^2 h^2} \left(\frac{1}{n^2} \right)$	$E_n = -\frac{m_e Z^2 e^4}{8 \epsilon_0^2 h^2} \left(\frac{1}{n^2} \right)$
$\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda} = \frac{m_e e^4}{8 \epsilon_0^2 h^3} \left(\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right)$	$\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda} = \frac{m_e Z^2 e^4}{8 \epsilon_0^2 h^3} \left(\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right)$

Mặt khác quang phổ của các ion này cũng gồm nhiều dãy vạch. Ví dụ quang phổ của ion He^+ gồm 4 dãy vạch. Số sóng của các vạch có biểu thức:

$$\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda} = Z^2 R_{\text{He}} \left(\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right) \quad \text{với } Z = 2$$

- dãy Lyman 1 : $n_2 = 1$; $n_1 \geq 2$
- dãy Lyman 2 : $n_2 = 2$; $n_1 \geq 3$
- dãy Fowler : $n_2 = 3$; $n_1 \geq 4$
- dãy Pickering : $n_2 = 4$; $n_1 \geq 5$

III - Các cơ chế kích thích nguyên tử chủ yếu

1- Cơ chế va chạm không đàn hồi loại 1

Electron được gia tốc nhờ 1 hiệu điện thế U sẽ có động năng $T = eU$. Nếu cho các electron này va chạm với nguyên tử thì có thể xảy ra 2 trường hợp :

- Nếu động năng của electron nhỏ hơn hiệu ΔE giữa trạng thái cơ bản và trạng thái kích thích gần nhất thì va chạm là đàn hồi và nguyên tử vẫn ở trạng thái cơ bản
- Nếu động năng của electron đủ lớn thì va chạm không đàn hồi loại 1 xảy ra theo sơ đồ :



Trong đó nguyên tử A nhận năng lượng từ electron (toàn bộ hoặc 1 phần) và chuyển lên trạng thái kích thích A^* có năng lượng cao hơn. Nguyên tử chỉ tồn tại trong trạng thái kích thích khoảng $10^{-8}s$, sau đó chuyển về trạng thái có năng lượng thấp hơn và phát ra photon (ghi nhận bởi máy quang phổ) có bước sóng λ

$$\text{Từ } \Delta W = eU = \frac{hc}{\lambda} \Rightarrow \lambda = \frac{12422}{U} (\text{\AA})$$

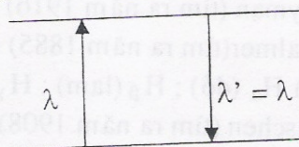
Các đèn phóng điện như đèn Nêôn, đèn Natri ... có cơ chế kích thích phát sáng là cơ chế va chạm không đàn hồi loại 1

2- Cơ chế hấp thụ bức xạ

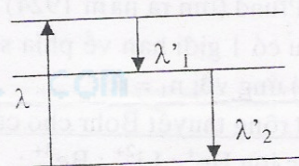
Dùng photon có bước sóng λ chiếu vào hệ nguyên tử đang ở trạng thái bình thường thì nguyên tử có thể hấp thụ năng lượng ϵ của photon và chuyển lên trạng thái kích thích. Sau đó nguyên tử lại dịch chuyển về trạng thái có năng lượng thấp hơn và bức xạ năng lượng dưới dạng photon có bước sóng λ' .

Có thể xảy ra 2 trường hợp :

- Cộng hưởng** : nếu giữa trạng thái cơ bản và trạng thái kích thích không có trạng thái trung gian. Khi đó nguyên tử chuyển từ trạng thái kích thích về trạng thái cơ bản và photon phát ra có bước sóng $\lambda' = \lambda$



- Huỳnh quang** : nếu giữa trạng thái cơ bản và trạng thái kích thích còn có 1 hay 1 số trạng thái trung gian. Khi đó nguyên tử chuyển dần từ trạng thái kích thích về trạng thái cơ bản qua các trạng thái trung gian và photon phát ra có bước sóng $\lambda'_1, \lambda'_2, \dots > \lambda$ (định luật Stokes)



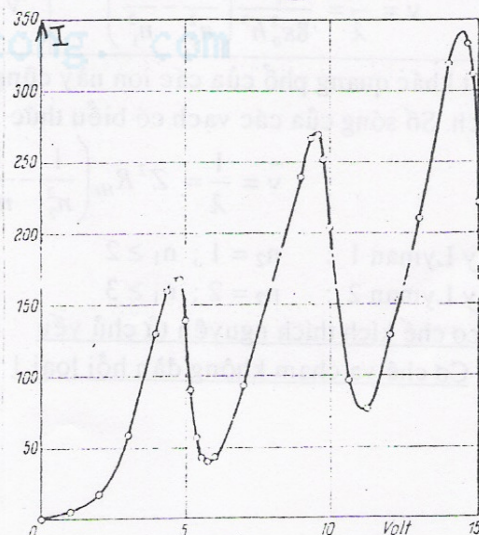
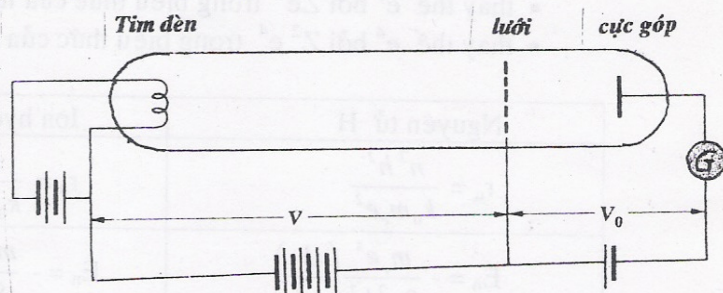
Các đèn huỳnh quang hoạt động dựa trên cả 2 cơ chế kích thích trên

IV- Thí nghiệm Franck - Hertz (1914)

Thí nghiệm được Franck và Hertz thực hiện hàng loạt dựa trên cơ chế kích thích bằng va chạm không đàn hồi giữa nguyên tử và electron gia tốc vào năm 1914, sau khi Bohr công bố lý thuyết về nguyên tử Hidrô.

Trong thí nghiệm như hình vẽ, khí hay hơi của các nguyên tố khác nhau bị bắn phá bởi các electron phát ra từ tim đèn F được gia tốc bằng hiệu điện thế U (có thể thay đổi từ 0 tới vài trăm vôn). Nếu bỏ qua vận tốc đầu của các electron thì động năng T của electron bằng công của lực điện trường : $T = eU$. Hiệu điện thế U_0 nhỏ (vài vôn) có tác dụng ngăn cản các electron có động năng quá nhỏ tới anốt, chỉ cho phép các electron có năng lượng lớn hơn 1 giá trị tối thiểu nào đó mới có thể tới được cực góp tạo thành dòng điện I qua điện kế G .

Khi tăng dần U và quan sát số chỉ I của điện kế G , người ta nhận thấy I tăng dần vì có nhiều electron tới cực góp. Tuy nhiên khi U đạt tới 1 giá trị xác định (khác nhau đối với mỗi loại nguyên tử) thì dòng điện I bị sụt



giảm đột ngột

Giải thích : - khi U nhỏ, electron có động năng nhỏ, va chạm giữa electron với nguyên tử khí hoặc hơi kim loại là va chạm đàn hồi, electron không thay đổi động năng và có thể tới cực góp tạo ra dòng điện I tăng dần

- Khi động năng T đủ lớn thì va chạm giữa electron và nguyên tử là va chạm không đàn hồi (loại I). Khi đó electron nhường toàn bộ hay 1 phần động năng cho nguyên tử để kích thích nguyên tử lên trạng thái (mức) năng lượng cao hơn trạng thái (mức) cơ bản. Do đó số electron tới cực góp bị sụt giảm, nên I giảm. Khi đó máy quang phổ ghi nhận sự xuất hiện của vạch quang phổ có bước sóng λ

thực nghiệm hệ thức $\lambda = \frac{12422}{U_1}$ (Å).

Ví dụ đối với hơi Hg thì $U_1 = 4,9\text{eV}$ thì $\lambda = 2536$ Å

Điều này chứng tỏ rằng nguyên tử đã bị kích thích lên trạng thái năng lượng cao hơn, và sau đó chuyển về trạng thái cơ bản và phát ra photon. Nói cách khác thí nghiệm đã xác nhận trong nguyên tử có trạng thái dừng như thuyết Bohr.

- Tuy nhiên các sụt giảm về cường độ dòng điện sau đó ứng với $U_2 = 2U_1$; $U_3 = 3U_1$; ... không phải ứng với sự kích thích nguyên tử lên các trạng thái dừng cao hơn, mà chỉ là do electron có động năng đủ lớn có thể gây ra 2 hoặc 3 va chạm không đàn hồi liên tiếp

V- Sự hiệu chỉnh hằng số Rydberg

Với máy quang phổ có khả năng tán sắc cao, người ta phát hiện ra có sự chênh lệch giữa giá trị lý thuyết và thực nghiệm của bước sóng của các vạch quang phổ. Vì trong thuyết Bohr đã coi như hạt nhân nguyên tử đứng yên và electron chuyển động tròn quanh hạt nhân.

Giả thuyết này không phải là vô lý bởi vì khối lượng của proton lớn gấp 1836 lần khối lượng electron. Để giải quyết sự sai biệt nói trên cần phải có 1 sự hiệu chỉnh

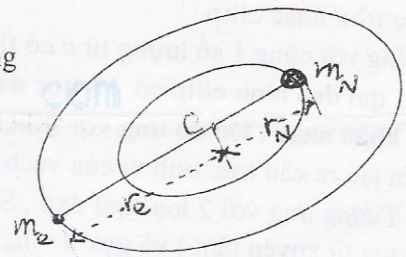
Gọi m_N là khối lượng hạt nhân; m_e là khối lượng của electron
Khối tâm chung của hệ là C . Khi đó hạt nhân không đứng yên mà cũng quay quanh C với cùng vận tốc góc ω như electron.

Bán kính quỹ đạo của electron quanh khối tâm là r_e

Bán kính quỹ đạo của hạt nhân quanh khối tâm là r_N

Ta có $m_e r_e = m_N r_N$ và $r_e + r_N = r$

$$\text{Suy ra : } r_e = \left(\frac{m_N}{m_N + m_e} \right) r \quad \text{và} \quad r_N = \left(\frac{m_e}{m_N + m_e} \right) r$$



Momen động lượng toàn phần của nguyên tử H là tổng momen động lượng của electron và của hạt

nhân : $m\omega r_e^2 + M\omega r_N^2 = n h$ trong đó $\omega = \frac{v_e}{r_e} = \frac{v_N}{r_N}$

$$\text{Hay} \quad \left(\frac{m_e m_N}{m_N + m_e} \right) \omega r^2 = n h$$

Đặt $\mu = \left(\frac{m_e m_N}{m_N + m_e} \right)$ là khối lượng thu gọn của hệ ($m_e - m_N$) và dùng để thay thế cho khối lượng

của electron trong các biểu thức lý thuyết của Bohr, suy ra :

$$E_n = - \frac{\mu e^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \left(\frac{1}{n^2} \right)$$

$$\text{Vì} \quad \frac{\mu}{m_e} = \frac{m_N}{m_N + m_e} = \frac{1836}{1837} = 0,99945. \text{ Do đó năng lượng } E \text{ sẽ tăng (} |E| \text{ giảm) khoảng } 0,055\%.$$

Khi đó giá trị của hằng số Rydberg của H sau khi hiệu chỉnh (thay m_e bởi μ) là

$$R_H = 109.677,58 \text{ cm}^{-1}$$

Khái niệm về khối lượng thu gọn giữ vai trò quan trọng trong việc phát hiện ra đồng vị deuterium $D = {}^2_1H$. Vì có khối lượng hạt nhân lớn hơn nên các vạch quang phổ của D bị dịch chuyển nhẹ về phía bước sóng ngắn so với H. Ví dụ vạch H_α của H có bước sóng là 6563Å trong khi của D là 6561Å.

Sau đây là hằng số Rydberg của 1 số nguyên tử:

Nguyên tử	D	T	He	Li	Be
$R(\text{cm}^{-1})$	109.707,42	109.717,55	109.722,27	109.728,8	109.730,7

VI- Thành công và hạn chế của thuyết Bohr

Thuyết Bohr đã góp phần quan trọng trong việc phát triển lý thuyết về cấu tạo nguyên tử, chứng tỏ sự hạn chế của vật lý cổ điển trong thế giới vi mô, nêu được tính chất lượng tử trong các hệ vi mô, giải thích được nguồn gốc các vạch quang phổ, xác định năng lượng ứng với các trạng thái dừng...

Tuy nhiên thuyết Bohr không thể coi là 1 lý thuyết hoàn chỉnh vì trong quá trình triển khai lý thuyết đã sử dụng các tiên đề lượng tử đồng thời lại kết hợp với các lý thuyết cổ điển

Ngay đối với nguyên tử Hidrô, thuyết Bohr cũng không thể xác định được cường độ, bề rộng các vạch quang phổ; không giải thích được cấu tạo tinh vi của các vạch quang phổ...

Thuyết Bohr hoàn toàn thất bại đối với các nguyên tử khác, như Heli...

Do đó thuyết Bohr chỉ được coi như 1 giai đoạn quá độ để đi tới Cơ Lượng Tử là ngành cơ học mới, hoàn chỉnh, có thể áp dụng cho mọi hệ vi mô.

VII- Mẫu nguyên tử theo Sommerfeld

Khi dùng máy quang phổ có năng suất tán sắc cao người ta nhận thấy vạch quang phổ đơn sắc (theo Bohr) lại là 1 tập hợp các vạch rất sát nhau. Hiện tượng này gọi là cấu trúc tinh vi của vạch quang phổ. Để giải thích hiện tượng này Sommerfeld cho rằng electron có thể chuyển động xung quanh hạt nhân trên các quỹ đạo tròn hoặc ellip:

Ứng với cùng 1 số lượng tử n có thể có n quỹ đạo khác nhau, trong đó chỉ có 1 quỹ đạo tròn bán kính r và $n-1$ quỹ đạo hình ellip có $\frac{1}{2}$ trục dài a và $\frac{1}{2}$ trục ngắn b ; trên mỗi quỹ đạo thì electron sẽ có 1 năng lượng khác nhau. Do đó ứng với 1 dịch chuyển giữa 2 trạng thái năng lượng bất kỳ sẽ là 1 tập hợp các dịch chuyển tạo ra cấu trúc tinh vi của vạch quang phổ

Tương ứng với 2 loại quỹ đạo, Sommerfeld đưa ra 2 số lượng tử: n_ϕ (số lượng tử phương vị) và n_r (số lượng tử xuyên tâm) và gọi $n = n_\phi + n_r$ là số lượng tử chính ($n = 1; 2; 3; \dots$)

Kích thước của các quỹ đạo xác định bởi n_ϕ và n : $\frac{b}{a} = \frac{n_\phi}{n}$

Nếu $n_\phi = n$ thì $b = a$: quỹ đạo tròn

Nếu $n_\phi < n$ thì $b < a$: quỹ đạo ellip

Mặt khác $b \neq 0$, do đó $n_\phi \neq 0$ và có các giá trị từ 1, 2, ..., n tức là có n giá trị tương ứng với n quỹ đạo khác nhau. Như vậy n_ϕ xác định hình dạng và kích thước quỹ đạo; n_ϕ càng nhỏ thì quỹ đạo càng dẹt

Chú ý: Sau này căn cứ trên kết quả thực nghiệm về quang phổ, số lượng tử n_ϕ được thay thế bởi l và gọi là số lượng tử phụ hay số lượng tử quỹ đạo: $l = n_\phi - 1$

Như vậy l cũng có n giá trị: $l = 0; 1; 2; \dots; n-1$

Quỹ đạo ứng với $l = 0$ gọi là quỹ đạo s (electron tương ứng cũng gọi là electron s)

Quỹ đạo ứng với $l = 1$ gọi là quỹ đạo p (electron tương ứng cũng gọi là electron p)

Quỹ đạo ứng với $l = 2$ gọi là quỹ đạo d (electron tương ứng cũng gọi là electron d)

Quỹ đạo ứng với $l = 3$ gọi là quỹ đạo f (electron tương ứng cũng gọi là electron f)...

Ứng với 1 số lượng tử chính n sẽ có n quỹ đạo hợp thành 1 lớp. Kích thước của các quỹ đạo trong cùng 1 lớp được đặc trưng bởi số lượng tử n . Từ hệ thức: $\frac{b}{a} = \frac{n_\phi}{n} = \frac{l+1}{n}$ ta thấy

Khi $l = 0$ thì $b = \frac{a}{n}$; khi $l = 1$ thì $b = \frac{2a}{n}$; khi $l = 2$ thì $b = \frac{3a}{n}$; ... và khi $l = n-1$ thì $b = a$

Như vậy số lượng tử phụ l đặc trưng cho hình dạng của quỹ đạo và xác định momen động lượng quỹ đạo

Tuy nhiên giá trị của $\frac{1}{2}$ trục lớn a theo tính toán của Sommerfeld lại trùng với bán kính quỹ đạo dừng r trong lý thuyết Bohr. Mặt khác năng lượng của electron trên các quỹ đạo tròn và ellip ứng với cùng 1 giá trị n lại giống nhau và có cùng biểu thức tương tự như năng lượng E_n trong thuyết Bohr, như vậy không thể giải thích được cấu trúc tinh vi của vạch phổ.

Để khắc phục nhược điểm này, Sommerfeld thực hiện sự hiệu chỉnh khối lượng electron theo thuyết tương đối (trên quỹ đạo ellip, khi electron tiến dần về phía hạt nhân thì vận tốc sẽ tăng nên khối lượng của nó sẽ tăng theo thuyết tương đối, và bán kính chính khúc sẽ nhỏ dần.

Mặt khác quỹ đạo của các electron sẽ không khép kín nữa, mà có dạng như hình vẽ. Chuyển động của electron có thể được biểu diễn như 1 chuyển động tuế sai theo 1 quỹ đạo phẳng kín với vận tốc góc xác định. Đồng thời vì năng lượng phụ thuộc vào khối lượng và sự biến thiên của vận tốc, khối lượng càng lớn khi quỹ đạo càng dẹt, nên trong cùng 1 lớp thì năng lượng của electron trên các quỹ đạo sẽ có giá trị hơi khác nhau. Sự hiệu chỉnh này dẫn tới kết quả là năng lượng của electron sẽ phụ thuộc vào cả 2 số lượng tử n và n_ϕ , có biểu thức gần đúng:

$$E_{n, n_\phi} = E_n (1 + \varepsilon)$$

Trong đó E_n là biểu thức năng lượng theo thuyết Bohr

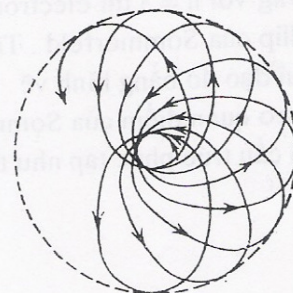
ε là số hạng hiệu chỉnh có giá trị rất nhỏ

$$\varepsilon = \frac{\alpha^2 Z^2}{n} \left(\frac{1}{l+1} - \frac{3}{4n} \right)$$

với $\alpha = \frac{2\pi e^2}{ch} = \text{hằng số (gọi là hằng số cấu trúc tinh vi)}$

Như vậy ứng với 1 số lượng tử n , thay vì chỉ có 1 trạng thái (mức) năng lượng theo thuyết Bohr, thì sẽ có n trạng thái năng lượng rất gần nhau và do đó vạch phổ có cấu trúc phức tạp (tinh vi)

Cách giải thích này của Sommerfeld trong 1 số trường hợp không hoàn toàn phù hợp với thực nghiệm. Trên thực tế, cấu trúc tinh vi của vạch quang phổ chỉ có thể được giải thích dựa vào quan điểm về spin electron.



BÀI TẬP

- 1- Từ hệ thức tán xạ của Rutherford $\cotan \frac{\theta}{2} = b T_\alpha / k_0 Z e^2$ (trong đó θ là góc tán xạ; b là tham số va chạm; T_α là động năng của hạt α) suy ra giới hạn trên của bán kính hạt nhân
- 2- Viết biểu thức của vận tốc v , gia tốc a của electron trên quỹ đạo dừng thứ n trong nguyên tử Hidrô
- 3- Nguyên tử tồn tại trong trạng thái kích thích khoảng 10^{-8} s. Hỏi electron trong nguyên tử H có thể quay bao nhiêu vòng trên quỹ đạo dừng $n = 2$ trước khi chuyển về trạng thái cơ bản.
- 4- So sánh giới hạn sóng ngắn và dài của dãy Lyman và Balmer của Hidrô.
- 5- Tìm năng lượng tối thiểu cần để kích thích nguyên tử H (đang ở trạng thái cơ bản) để nguyên tử phát ra
 - a) Vạch H_β
 - b) 10 vạch quang phổ
 - c) Vạch tử ngoại đầu tiên trong dãy Balmer
 - d) tất cả các dãy quang phổ
- 6- Nếu thực hiện quá trình kích thích nguyên tử H để nó phát ra vạch hồng ngoại đầu tiên bằng:
 - a) cơ chế va chạm không đàn hồi loại 1 với electron gia tốc. Cho $v_0 = 0$. Tìm thế gia tốc electron
 - b) cơ chế hấp thụ bức xạ. Bước sóng λ của bức xạ phải thỏa điều kiện gì?
- 7- Kích thích nguyên tử H (đang ở trạng thái cơ bản) bằng năng lượng 12,74 eV thì nguyên tử chuyển lên trạng thái dừng nào? Trong điều kiện đó nguyên tử có thể phát ra các vạch trong dãy quang phổ nào?
- 8- Từ thuyết Bohr suy ra:
 - a) bán kính quỹ đạo dừng bé nhất của ion Li^{2+} ($Z = 3$)
 - b) tìm vận tốc và gia tốc của electron trên quỹ đạo đó
 - c) Tính năng lượng ion hóa và thế ion hoá của ion này. Coi như $R_{\text{Li}} = R_{\text{H}}$

- 9-a) Chuyển dời nào trong quang phổ của He^+ là tương ứng với vạch thứ 1 trong dãy Lyman của Hidrô nếu coi như $R_{\text{He}} \approx R_{\text{H}}$. Chuyển dời đó ứng với vạch quang phổ nào của ion He^+
- b) Dùng giá trị đúng của R_{He} và R_{H} , suy ra sai biệt về bước sóng của 2 vạch đó
- Cho $R_{\text{H}} = 109.677,58 \text{ cm}^{-1}$; $R_{\text{He}} = 109.722,27 \text{ cm}^{-1}$
- 10- Vạch thứ 2 trong dãy Fowler của ion He^+ tương ứng với vạch quang phổ nào của Hidro
- 11- Vạch thứ 2 trong dãy lyman của H tương ứng với chuyển dời nào trong quang phổ của ion Li^{2+} ($Z=3$)
- 12- So sánh bước sóng dài nhất và ngắn nhất trong dãy Pickering của ion He^+
- 13- Ứng với $n = 3$ thì electron trong nguyên tử H có thể có các quỹ đạo dừng nào theo thuyết quỹ đạo ellip của Sommerfeld. Tính giá trị của $\frac{1}{2}$ trục lớn a và $\frac{1}{2}$ trục nhỏ b của quỹ đạo ellip. Biểu diễn các quỹ đạo đó bằng hình vẽ
- 14- Theo quan điểm của Sommerfeld về thuyết quỹ đạo ellip thì vạch H_{β} trong quang phổ của nguyên tử H có cấu trúc phức tạp như thế nào?