

I. Sơ lược về mẫu nguyên tử Bo

Mẫu nguyên tử của Bo (Niels Bohr, 1913) ra đời nhằm khắc phục những hạn chế của mẫu hành tinh nguyên tử của Rutherford. Mẫu Rutherford không giải thích được tại sao electron quay quanh hạt nhân mà không bị rơi vào trong (do mất năng lượng vì bức xạ sóng điện từ) và không giải thích được quang phổ vạch của các nguyên tử. Mẫu nguyên tử Bo là sự kết hợp giữa mô hình hành tinh nguyên tử cổ điển và các giả thuyết lượng tử của Planck.

II. Các tiên đề của Bo về cấu tạo nguyên tử

Mô hình của Bo dựa trên hai định đề cơ bản (tiên đề) áp dụng cho nguyên tử, đặc biệt là nguyên tử Hydro.

1. Tiên đề về các trạng thái dừng

- **Nội dung:** 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.
- **Giải thích:**
 - 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.
 - Mỗi trạng thái dừng ứng với một mức năng lượng E_n và một quỹ đạo dừng có bán kính r_n tương ứng.

- Trạng thái dừng có năng lượng thấp nhất là trạng thái cơ bản. Các trạng thái dừng khác có năng lượng cao hơn gọi là các trạng thái kích thích.
- Các quỹ đạo dừng của electron trong nguyên tử Hydro được đặt tên là K, L, M, N, O, P,... ứng với các số nguyên $n = 1, 2, 3, 4, 5, 6, \dots$. Số n được gọi là số lượng tử chính.

• Ví dụ:

1. Khi electron của nguyên tử Hydro ở trạng thái cơ bản, nó đang chuyển động trên quỹ đạo K với $n = 1$. Đây là trạng thái bền vững nhất.
2. Nếu nguyên tử nhận năng lượng, electron có thể nhảy lên quỹ đạo L ($n=2$), M ($n=3$),... Đây là các trạng thái kích thích, kém bền vững hơn. Nguyên tử chỉ tồn tại ở trạng thái kích thích trong một thời gian rất ngắn (khoảng $10^{-8}s$).

2. Tiên đề về sự bức xạ và hấp thụ năng lượng của nguyên tử

- **Nội dung:** Khi nguyên tử chuyển từ trạng thái dừng có năng lượng cao (E_{cao}) sang trạng thái dừng có năng lượng thấp hơn ($E_{thấp}$), nó phát ra một photon có năng lượng đúng bằng hiệu $E_{cao} - E_{thấp}$. Ngược lại, nếu nguyên tử đang ở trạng thái dừng có năng lượng thấp ($E_{thấp}$) mà hấp thụ được một photon có năng lượng đúng bằng hiệu $E_{cao} - E_{thấp}$ thì nó sẽ chuyển lên trạng thái dừng có năng lượng cao (E_{cao}).

• Công thức:

Năng lượng photon phát ra hoặc hấp thụ:

$$\epsilon = hf = hc/\lambda = E_{\text{cao}} - E_{\text{thấp}}$$

Trong đó:

- $h \approx 6,625 \cdot 10^{-34}$ J.s là hằng số Planck.
- $c \approx 3 \cdot 10^8$ m/s là tốc độ ánh sáng trong chân không.
- f và λ là tần số và bước sóng của photon.
- $E_{\text{cao}}, E_{\text{thấp}}$ là năng lượng của nguyên tử ở trạng thái dừng tương ứng.

• **Ví dụ:**

- Ví dụ về bức xạ (phát xạ):** Một nguyên tử Hydro có electron chuyển từ trạng thái dừng với năng lượng $E_3 = -1,51$ eV về trạng thái dừng có năng lượng $E_2 = -3,4$ eV. Nguyên tử sẽ phát ra một photon có năng lượng là $\epsilon = E_3 - E_2 = (-1,51) - (-3,4) = 1,89$ eV.
- Ví dụ về hấp thụ:** Một nguyên tử Hydro đang ở trạng thái cơ bản (năng lượng $E_1 = -13,6$ eV) cần hấp thụ một photon có năng lượng tối thiểu là bao nhiêu để nhảy lên trạng thái kích thích đầu tiên (năng lượng $E_2 = -3,4$ eV)? Năng lượng cần hấp thụ là $\epsilon = E_2 - E_1 = (-3,4) - (-13,6) = 10,2$ eV. Nguyên tử chỉ hấp thụ các photon có năng lượng chính xác bằng 10,2 eV để thực hiện bước nhảy này.

III. Các công thức áp dụng cho nguyên tử Hydro

Mẫu nguyên tử Bo mô tả rất thành công và chính xác cho nguyên tử Hydro (chỉ có 1 electron).

1. Bán kính quỹ đạo dừng

- **Giải thích:** Bán kính của các quỹ đạo dừng tăng tỉ lệ với bình phương của số lượng tử chính n .

- **Công thức:**

$$r_n = n^2 * r_0$$

Trong đó:

- $n = 1, 2, 3, \dots$ là các số nguyên dương.
- $r_0 = 5,3 \cdot 10^{-11}$ m được gọi là bán kính Bo, là bán kính của quỹ đạo ở trạng thái cơ bản ($n=1$).

- **Ví dụ:**

1. Tính bán kính quỹ đạo L (ứng với $n=2$):

$$r_2 = 2^2 * r_0 = 4 * 5,3 \cdot 10^{-11} \text{ m} = 21,2 \cdot 10^{-11} \text{ m}.$$

2. Tính bán kính quỹ đạo M (ứng với $n=3$):

$$r_3 = 3^2 * r_0 = 9 * 5,3 \cdot 10^{-11} \text{ m} = 47,7 \cdot 10^{-11} \text{ m}.$$

2. Năng lượng của electron trên các quỹ đạo dừng

- **Giải thích:** Năng lượng của electron ở các trạng thái dừng là năng lượng gián đoạn và có giá trị âm, thể hiện rằng electron đang bị liên kết với hạt nhân. Khi n càng lớn, E_n càng lớn (càng gần 0). Khi $n \rightarrow \infty$, $E_n \rightarrow 0$, lúc này electron đã thoát khỏi nguyên tử và nguyên tử bị ion hóa.

- **Công thức:**

$$E_n = -E_0 / n^2$$

Trong đó:

- $n = 1, 2, 3, \dots$
- $E_0 = 13,6 \text{ eV}$ là năng lượng ở trạng thái cơ bản (với dấu dương), còn gọi là năng lượng ion hóa của nguyên tử Hydro từ trạng thái cơ bản. ($1 \text{ eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$).

• **Ví dụ:**

1. Năng lượng của electron ở trạng thái cơ bản (quỹ đạo K, $n=1$):

$$E_1 = -13,6 / 1^2 = -13,6 \text{ eV}.$$

2. Năng lượng của electron ở trạng thái kích thích thứ hai (quỹ đạo M, $n=3$):

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

3. Để ion hóa nguyên tử Hydro từ trạng thái cơ bản, cần cung cấp một năng lượng tối thiểu là: $E = E_\infty - E_1 = 0 - (-13,6) = 13,6 \text{ eV}$.

IV. Quang phổ vạch của nguyên tử Hydro

Khi các nguyên tử Hydro bị kích thích (ví dụ do nung nóng hoặc phóng điện), các electron sẽ nhảy lên các mức năng lượng cao hơn. Sau đó, chúng sẽ nhanh chóng trở về các mức năng lượng thấp hơn và phát ra các photon có bước sóng xác định, tạo thành quang phổ vạch phát xạ đặc trưng cho Hydro.

Công thức tổng quát để tính bước sóng của photon phát ra khi electron chuyển từ mức năng lượng E_m (cao) về mức E_n (thấp) với $m > n$:

$$hc/\lambda_{mn} = E_m - E_n = (-E_0/m^2) - (-E_0/n^2) = E_0 * (1/n^2 - 1/m^2)$$

Quang phổ vạch của Hydro được chia thành các dãy, tùy thuộc vào quỹ đạo dừng cuối cùng mà electron chuyển về.

Tên dãy	Vùng quang phổ	Trạng thái cuối (n)	Trạng thái đầu (m)
Dãy Laiman (Lyman)	Tử ngoại	$n = 1$	$m = 2, 3, 4, \dots$
Dãy Banme (Balmer)	Một phần nhìn thấy, một phần tử ngoại	$n = 2$	$m = 3, 4, 5, \dots$
Dãy Pasen (Paschen)	Hồng ngoại	$n = 3$	$m = 4, 5, 6, \dots$

1. Dãy Laiman (vùng tử ngoại)

- **Giải thích:** Hình thành khi electron từ các quỹ đạo bên ngoài ($m \geq 2$) nhảy về quỹ đạo K ($n = 1$).
- **Ví dụ:**
 1. Vạch đầu tiên của dãy (bước sóng dài nhất, năng lượng nhỏ nhất), ứng với sự chuyển từ L ($m=2$) về K ($n=1$):
$$hc/\lambda_{21} = E_2 - E_1 = -3,4 - (-13,6) = 10,2 \text{ eV.}$$

$$\rightarrow \lambda_{21} \approx 0,1218 \text{ }\mu\text{m.}$$
 2. Vạch cuối cùng của dãy (bước sóng ngắn nhất, năng lượng lớn nhất), ứng với sự chuyển từ vô cùng ($m=\infty$) về K ($n=1$):
$$hc/\lambda_{\infty 1} = E_{\infty} - E_1 = 0 - (-13,6) = 13,6 \text{ eV.}$$

$$\rightarrow \lambda_{\infty 1} \approx 0,0913 \mu\text{m}.$$

2. Dãy Banme (một phần trong vùng nhìn thấy)

- **Giải thích:** Hình thành khi electron từ các quỹ đạo bên ngoài ($m \geq 3$) nhảy về quỹ đạo L ($n = 2$). Bốn vạch đầu tiên của dãy này nằm trong vùng ánh sáng nhìn thấy.

- **Ví dụ:**

1. Vạch H_{α} (màu đỏ, bước sóng dài nhất): electron chuyển từ M ($m=3$) về L ($n=2$).

$$hc/\lambda_{32} = E_3 - E_2 = -1,51 - (-3,4) = 1,89 \text{ eV}.$$

$$\rightarrow \lambda_{32} \approx 0,6563 \mu\text{m}.$$

2. Vạch H_{β} (màu lam): electron chuyển từ N ($m=4$) về L ($n=2$).

$$hc/\lambda_{42} = E_4 - E_2 = -0,85 - (-3,4) = 2,55 \text{ eV}.$$

$$\rightarrow \lambda_{42} \approx 0,4861 \mu\text{m}.$$

3. Dãy Pasen (vùng hồng ngoại)

- **Giải thích:** Hình thành khi electron từ các quỹ đạo bên ngoài ($m \geq 4$) nhảy về quỹ đạo M ($n = 3$).

- **Ví dụ:**

1. Vạch đầu tiên của dãy (bước sóng dài nhất): electron chuyển từ N ($m=4$) về M ($n=3$).

$$hc/\lambda_{43} = E_4 - E_3 = -0,85 - (-1,51) = 0,66 \text{ eV}.$$

$$\rightarrow \lambda_{43} \approx 1,875 \mu\text{m}.$$

2. Vạch cuối cùng của dãy (bước sóng ngắn nhất): electron chuyển từ vô cùng ($m=\infty$) về M ($n=3$).

$$hc/\lambda_{\infty 3} = E_{\infty} - E_3 = 0 - (-1,51) = 1,51 \text{ eV.}$$

$$\rightarrow \lambda_{\infty 3} \approx 0,8204 \text{ }\mu\text{m.}$$

V. Hạn chế của mẫu nguyên tử Bo

Mặc dù là một bước tiến lớn, mẫu nguyên tử Bo vẫn còn một số hạn chế:

- Chỉ giải thích thành công cho các nguyên tử hoặc ion có 1 electron (giống Hydro) như H, He^+ , Li^{2+} , ... nhưng thất bại với các nguyên tử có nhiều electron.
- Không giải thích được tại sao các vạch quang phổ lại có cường độ sáng tối khác nhau.
- Không giải thích được cấu trúc tinh tế của các vạch quang phổ (mỗi vạch thực ra gồm nhiều vạch con rất gần nhau).
- Vẫn còn mang tính chất nửa cổ điển, nửa lượng tử, chưa phải là một lý thuyết lượng tử hoàn chỉnh.

Những hạn chế này sau đó đã được khắc phục bởi cơ học lượng tử hiện đại.