

Chương I

CẤU TẠO NGUYÊN TỬ

Chương I.

CẤU TẠO NGUYÊN TỬ

I. **NGUYÊN TỬ VÀ QUANG PHỔ NGTỬ**

II. **SƠ LƯỢC VỀ CÁC THUYẾT CẤU TẠO
NGUYÊN TỬ**

III. **CẤU TRÚC LỚP VỎ ELECTRON NGUYÊN
TỬ THEO CƠ HỌC LƯỢNG TỬ**

IV. **NGUYÊN TỬ NHIỀU ELECTRON**

I. NGUYÊN TỬ VÀ QUANG PHÔ NGUYÊN TỬ

1. Nguyên tử
2. Quang phổ nguyên tử

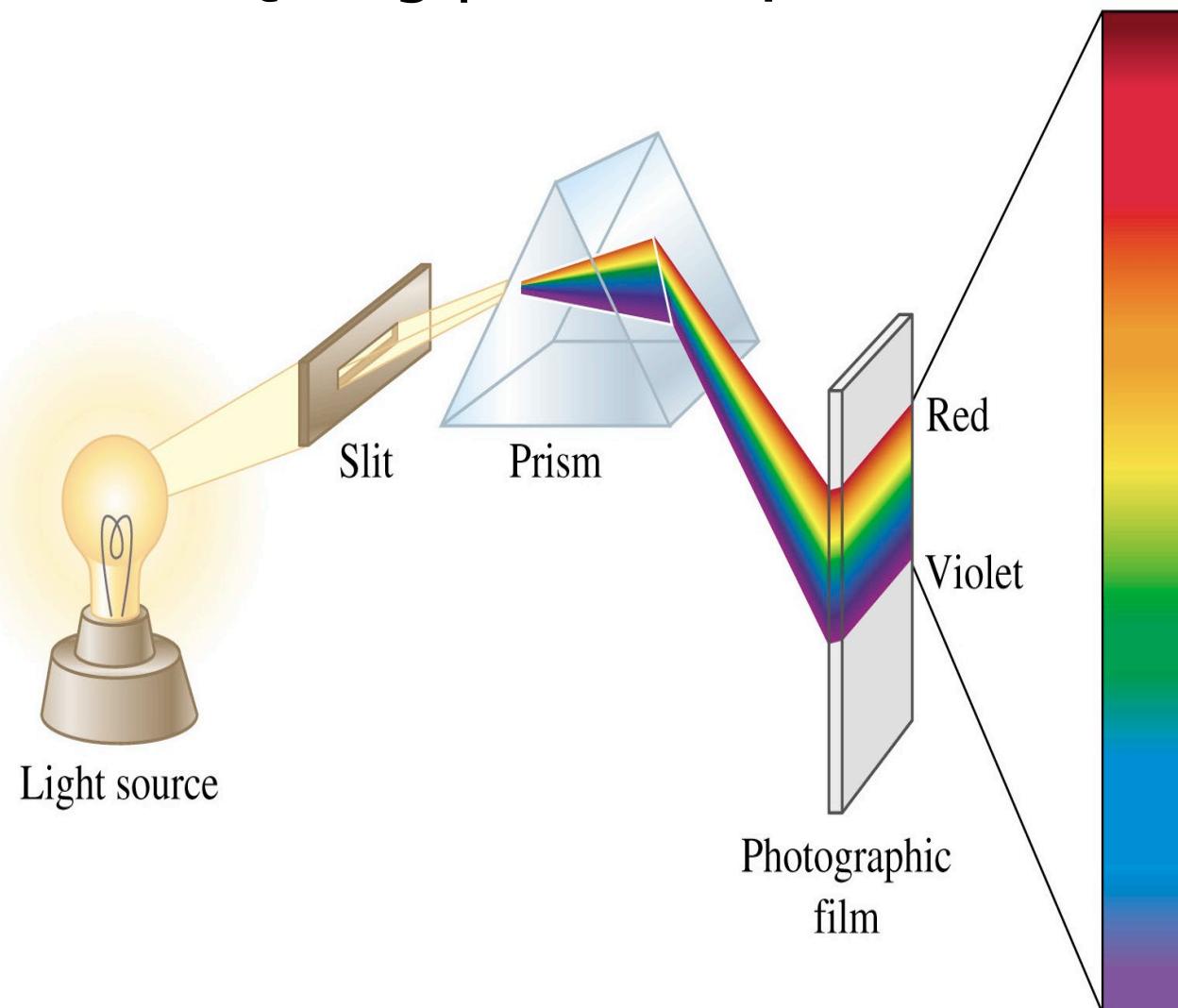
1. Nguyên tử

Tên	Ký hiệu	Khối lượng		Điện tích	
		(kg)	đvkln	(C)	Tương đối đ/v e
Điện tử	e	$9,1095 \cdot 10^{-31}$	$5,4858 \cdot 10^{-4}$	$-1,60219 \cdot 10^{-19}$	- 1
Proton	p	$1,6726 \cdot 10^{-27}$	1,007276	$+1,60219 \cdot 10^{-19}$	+ 1
Neutron	n	$1,6745 \cdot 10^{-27}$	1,008665	0	0



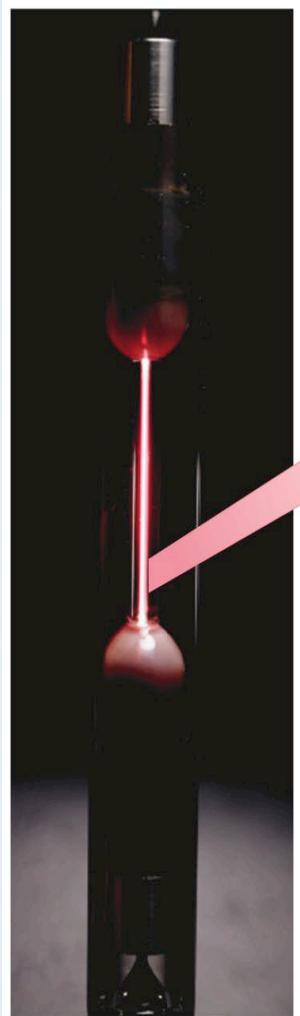
2. Quang phổ nguyên tử

Quang phổ liên tục của ánh sáng trắng

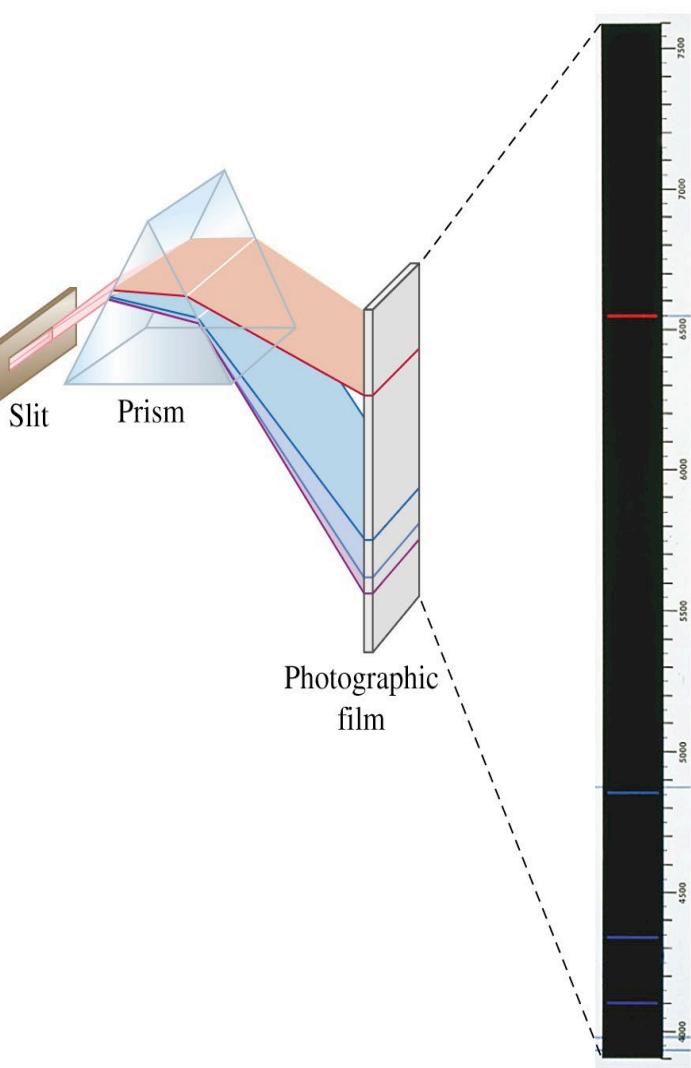


White light passed through a prism produces a *spectrum* – colors in *continuous* form.

Quang phổ vạch (Line Spectra)

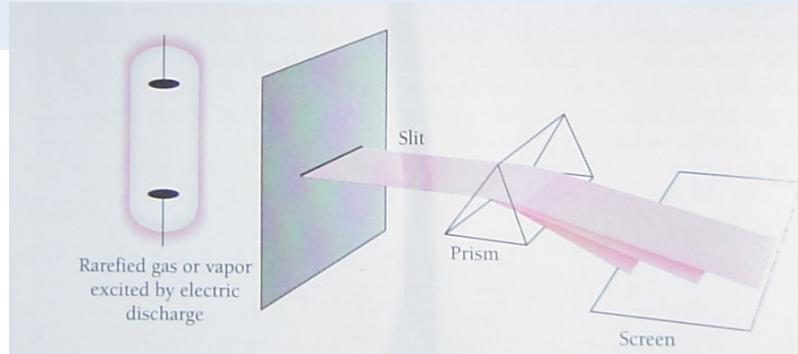
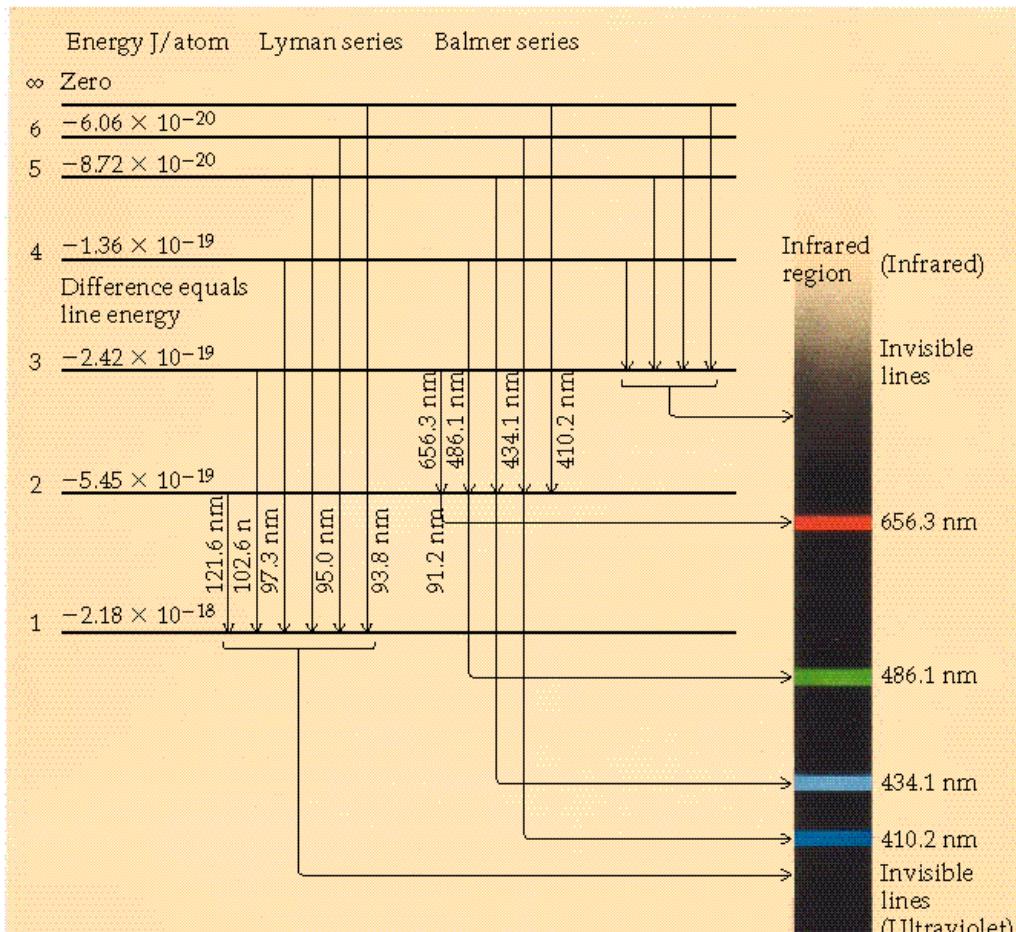


Hydrogen lamp

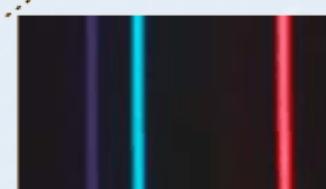


Light passed through a prism from an element produces a *discontinuous spectrum* of **specific colors**

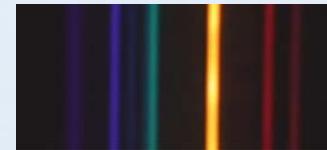
Quang phổ phát xạ ngtử (atomic emission spectra)



N_2 spectrum (with tube)



H_2



He



Ne

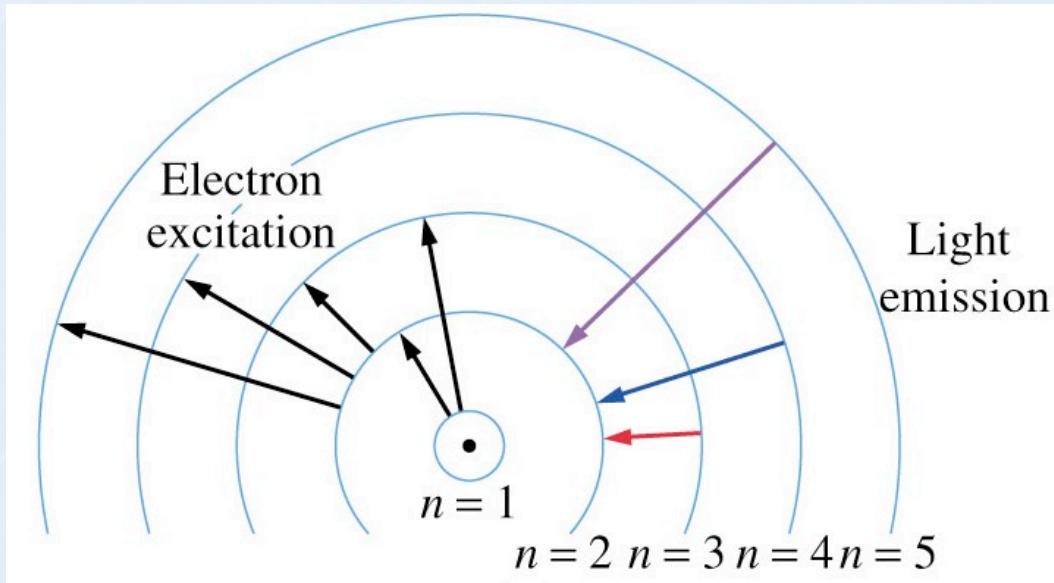


II. SƠ LƯỢC VỀ CÁC THUYẾT CẤU TẠO NGUYÊN TỬ

- 1. Thuyết cấu tạo nguyên tử của Thompson (1898)**
- 2. Mẫu hành tinh nguyên tử của Rutherford (1911)**
- 3. Mẫu nguyên tử theo Bohr (1913)**
- 4. Mẫu nguyên tử của Sommerfeld**



Niels Bohr



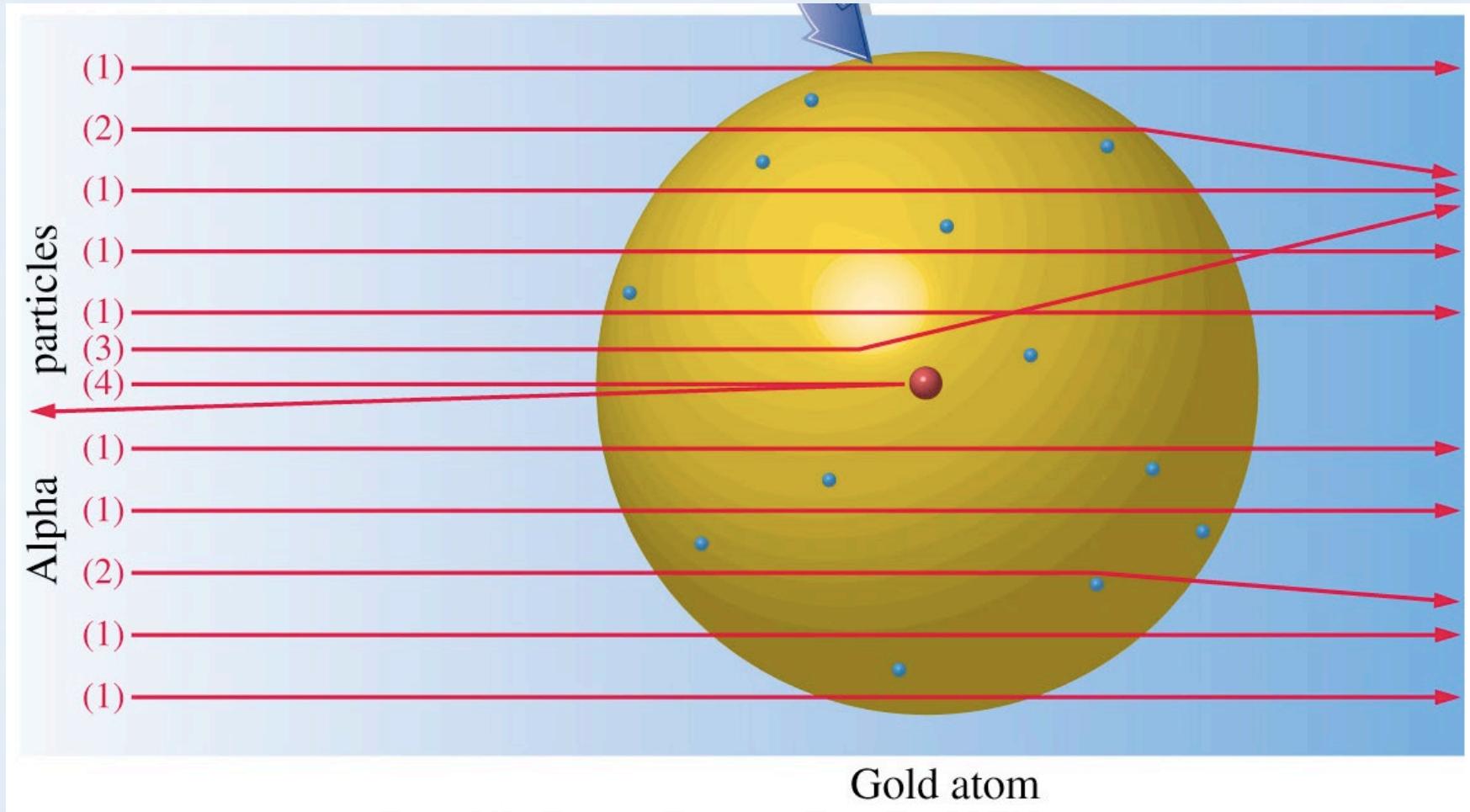
Niels Bohr



J. J. Thomson



Rutherford's Interpretation



III. CẤU TRÚC LỚP VỎ e NGUYÊN TỬ THEO CƠ HỌC LƯỢNG TỬ

1. Tính lượng nguyên của các hạt vi mô
2. Nguyên lý bất định Heisenberg và khái niệm đám mây điện tử
3. Phương trình sóng Schrödinger và 4 số lượng tử

1. Tính lưỡng nguyên của các hạt vi mô

- Các *chất vi mô* có cả *tính chất hạt* và *tính chất sóng*
 - ✓ Bản chất hạt: m, r và v xác định
 - ✓ Bản chất sóng: λ.
- Hệ thức L. de Broglie:

$$\lambda = \frac{h}{mv}$$



L. de Broglie
(1892-1987)

Ví dụ

✓Đối với electron:

- $m = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{kg}$

- $v = 10^8 \text{cm/s} \sim$

1000km/s

- $\lambda = 7,25 \cdot 10^{-8} \text{cm}$

✓Đối với hạt vĩ mô:

- $m = 1 \text{g}$

- $v = 1 \text{cm/s}$

- $\lambda = 6,6 \cdot 10^{-27} \text{cm}$



2. Nguyên lý bất định Heisenberg và khái niệm đám mây điện tử

- a. Nguyên lý bất định Heisenberg
(1927)
- b. Khái niệm đám mây electron

a. Nguyên lý bất định Heisenberg

➤ Không thể đồng thời xác định chính xác cả vị trí và tốc độ của hạt vi mô.

$$\Delta x \cdot \Delta v \geq \frac{\hbar}{m} = \frac{h}{2\pi m}$$

➤ Ví dụ: đối với electron

$$v = 10^8 \pm 10^8 \text{ cm/s}$$



$$\Delta x \geq \frac{h}{2\pi m \Delta v} = \frac{6.625 \times 10^{-34}}{2 \times 3.14 \times 9.1 \times 10^{-31} \times 10^8} = 1.16 \times 10^{-8} \text{ cm} = 1.16 \text{ \AA}^0$$

→ Khi xác định tương đối chính xác tốc độ chuyển động của electron chỉ có thể nói đến xác suất có mặt của nó ở chỗ nào đó trong không gian. ↑

Werner Heisenberg



b. Khái niệm đám mây electron

- ✓ Không thể dùng khái niệm quỹ đạo
- ✓ CHTL: khi CD xung quanh hạt nhân, e đã tạo ra một vùng không gian mà nó có thể có mặt ở thời điểm bất kỳ với xác suất có mặt khác nhau.
- ✓ Vùng không gian = đám mây e: mật độ của đám mây ~ xác suất có mặt của e.
- ✓ CHTL *Quy ước*: đám mây e là vùng không gian gần hạt nhân trong đó chứa khoảng 90% xác suất có mặt của e. Hình dạng đám mây - bề mặt giới hạn vùng không gian đó.

3. Phương trình sóng Schrödinger và 4 số lượng tử

a. Phương trình sóng Schrödinger

b. **Bốn số lượng tử**

- Số lượng tử chính n
- Số lượng tử phụ ℓ
- Số lượng tử từ m_ℓ
- Số lượng tử spin m_s

Số lượng tử chính n và các mức năng lượng

✓ Xác định:

- Trạng thái năng lượng của electron
- Kích thước trung bình của đám mây electron

$$E = -\frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 n^2 h^2} Z^2 = -2,18 \cdot 10^{-18} \frac{Z^2}{n^2} J = -13.6 \frac{Z^2}{n^2} eV$$

$$\bar{r} = \frac{a_0 n^2}{Z} \left\{ 1 + \frac{1}{2} \left[1 - \frac{l(l+1)}{n^2} \right] \right\}$$

- ✓ Giá trị: $n = 1, 2, 3, \dots, \infty$

✓ Các mức năng lượng

n	1	2	3	...	$+\infty$
Mức năng lượng	E_1	E_2	E_3	...	E_{∞}

- E_{\min} - *mức cơ bản*
- $E_{>\min}$ - *mức kích thích*

$$\Delta E = E_{kt} - E_{cb} = \frac{hc}{\lambda}$$

✓ Quang phổ nguyên tử

- Quang phổ của các nguyên tử là quang phổ vạch.
 - Quang phổ của mỗi nguyên tử là đặc trưng
- ✓ *Lớp electron*: gồm các e có cùng giá trị n

n	1	2	3	4	5	6	7
Lớp e	K	L	M	N	O	P	Q



Số lượng tử orbital l và hình dạng đám mây e

✓ Giá trị: $\ell = 0, 1, \dots, (n - 1) \rightarrow (1) n$ có (n) ℓ

✓ Xác định:

- E của đám mây trong nguyên tử nhiều e: $\ell \uparrow E \uparrow$
- Hình dạng đám mây electron

✓ *Phân lớp electron*: gồm các e có cùng giá trị n và ℓ

ℓ	0	1	2	3
Phân lớp e	s	p	d	f

→ Ký hiệu phân lớp: 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d...



■ Số lượng tử từ m_l và các AO

- ✓ Giá trị: $m_l = 0, \pm 1, \dots, \pm \ell \rightarrow$ Cứ mỗi giá trị của ℓ có $(2\ell + 1)$ giá trị của m_l .
- ✓ Xác định: hướng của đám mây trong không gian: Mỗi giá trị của m_l ứng với một cách định hướng của đám mây electron
- ✓ Đám mây electron được xác định bởi ba số lượng tử n, ℓ, m_l được gọi là *orbitan nguyên tử*(AO). Ký hiệu:

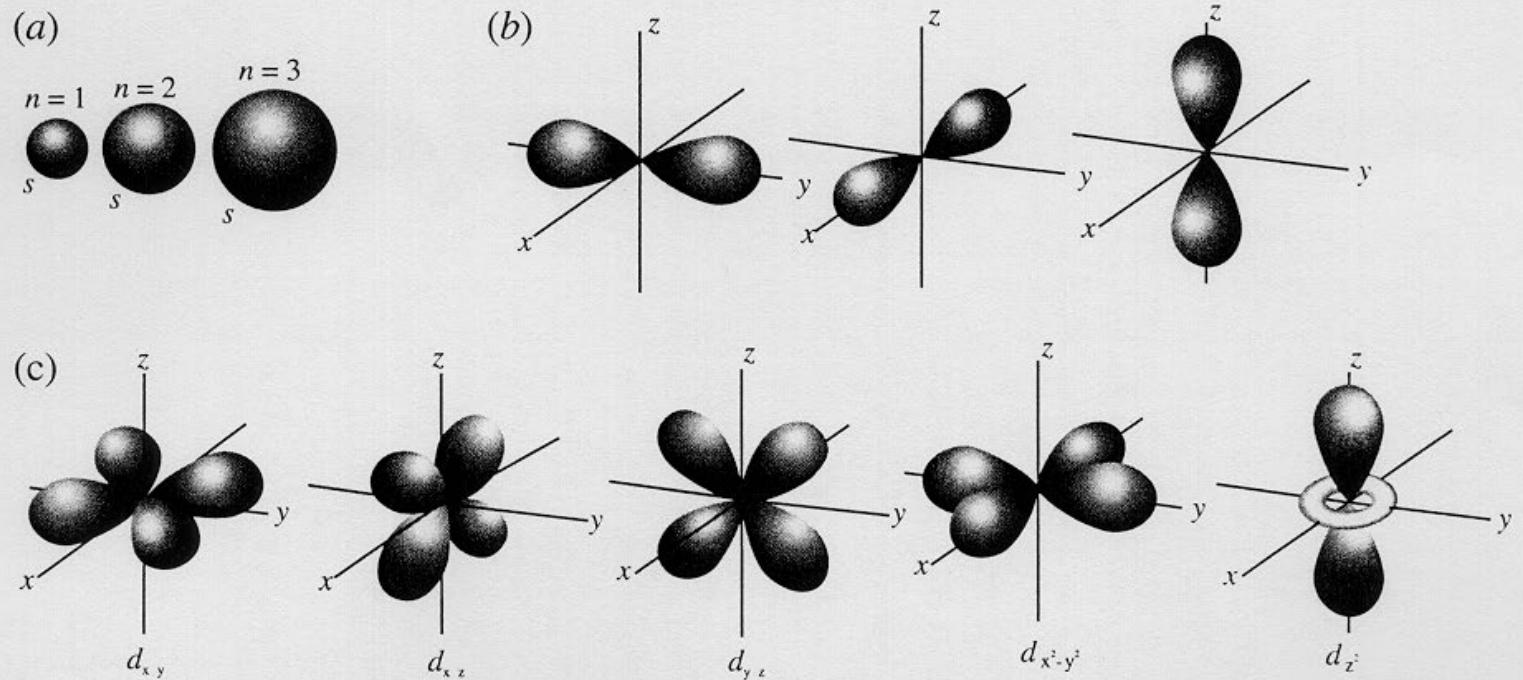
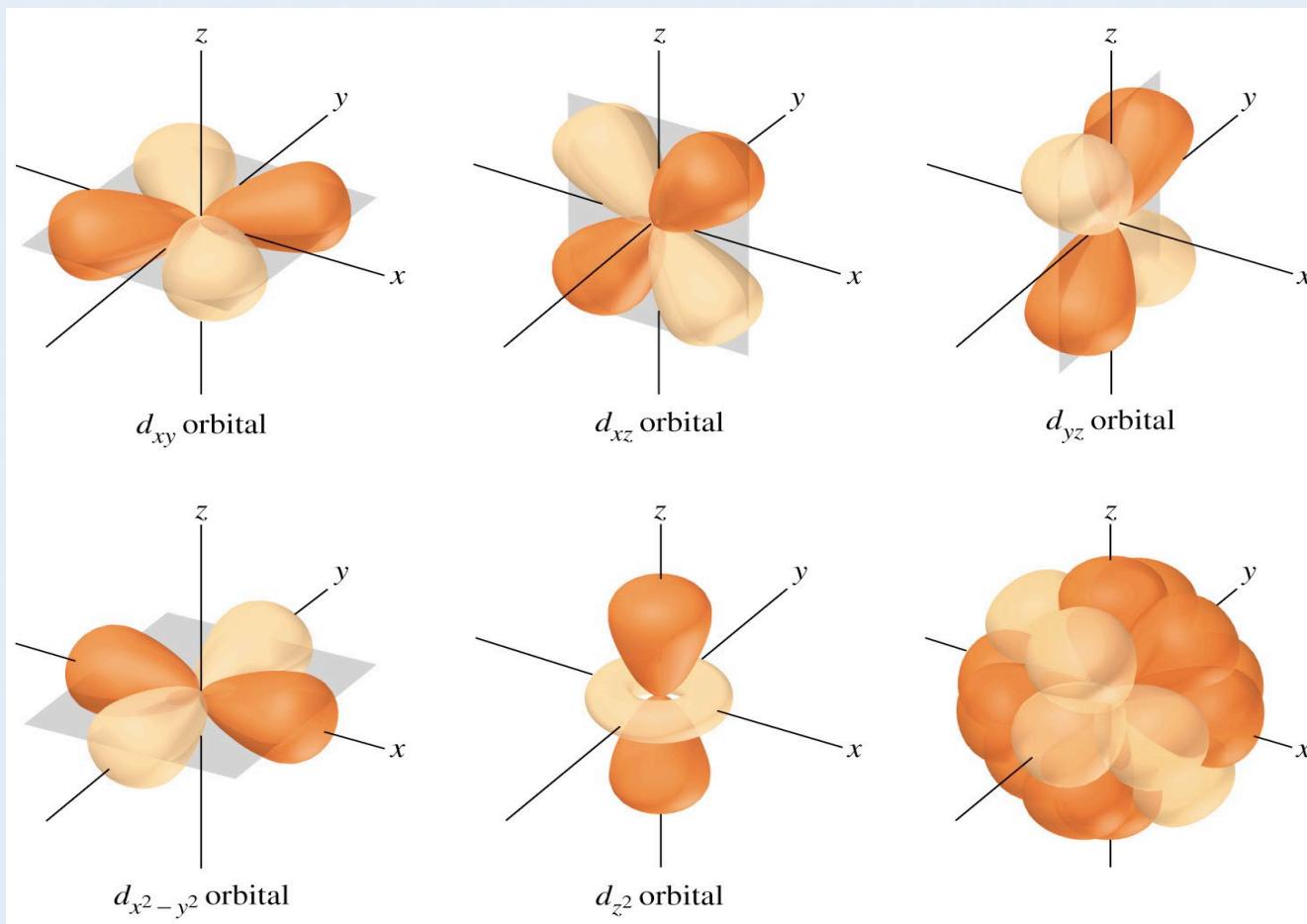
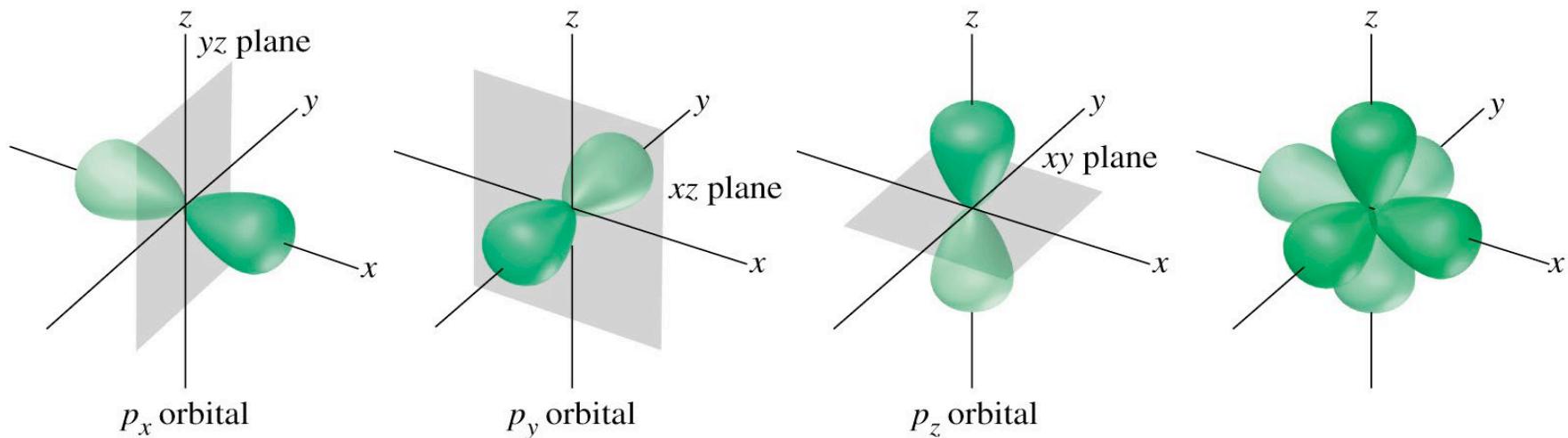
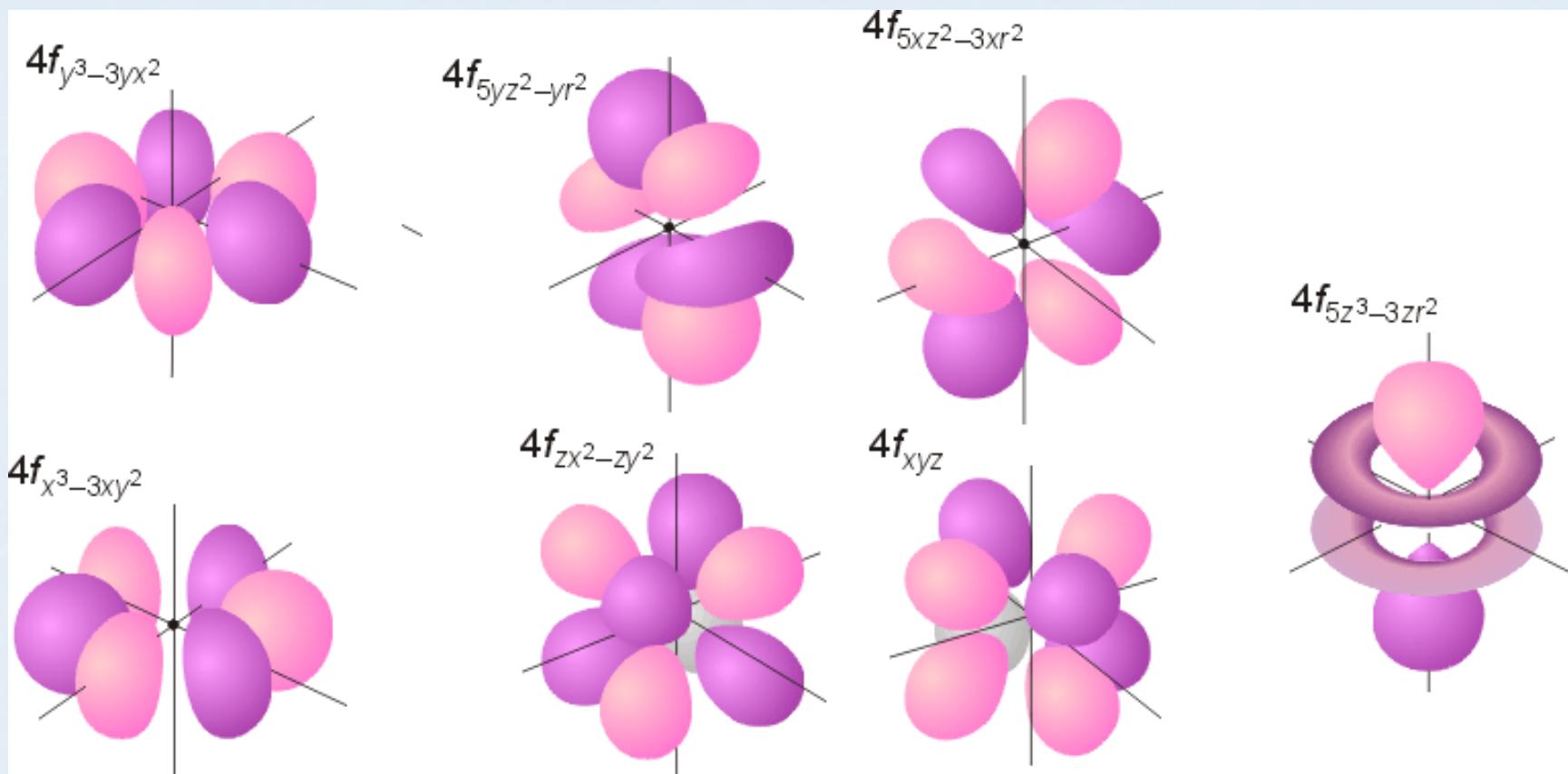


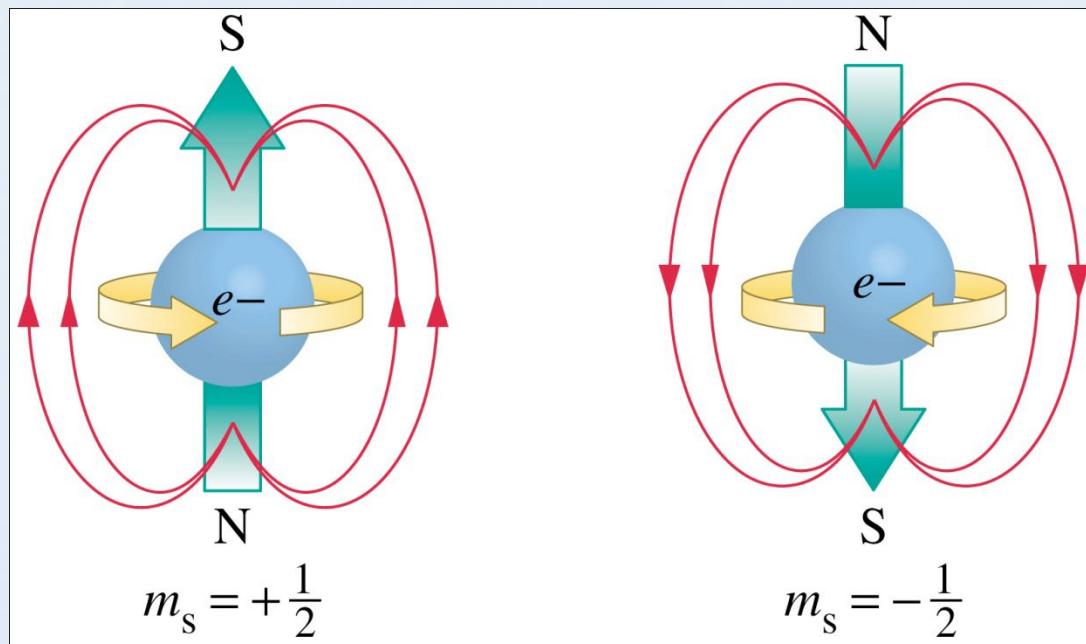
Figure 3.1 Geometry of orbitals in the s , p , and d subshells. Orbitals represent the volume of space around a nucleus in which an electron is most probably located. (a) Orbitals in the s subshells are spherical in all shells. (b) The p subshell contains three different bilobate orbitals oriented along orthogonal x , y , and z axes. (c) The d subshell contains five orbitals. The d_{xy} , d_{xz} , and d_{yz} orbitals are quadralobate and lie in the xy , xz , and yz planes, respectively, so as to bisect the angles between the orthogonal axes. The $d_{x^2-y^2}$ orbital forms a quadralobate shape with lobes aligned along the x and y axes. The d_{z^2} orbital forms a torus with a bilobate shape aligned along the z axis.





• Số lượng tử spin m_s

- ✓ Xác định: trạng thái chuyển động riêng của e – sự tự quay quanh trục của e.
- ✓ Giá trị: $m_s = \pm \frac{1}{2}$ ứng với hai chiều quay thuận và nghịch kim đồng hồ.
- ✓ Mỗi tổ hợp n, ℓ, m_ℓ, m_s tương ứng 1e.



IV. NGUYÊN TỬ NHIỀU e

1. Trạng thái năng lượng của e trong nguyên tử nhiều e.
2. Các quy luật phân bố e vào nguyên tử nhiều e.
3. **Công thức electron nguyên tử.**

Ví dụ: N $1s^2 2s^2 2p^3$



1. Tthái E của e trong ngtử nhiều e

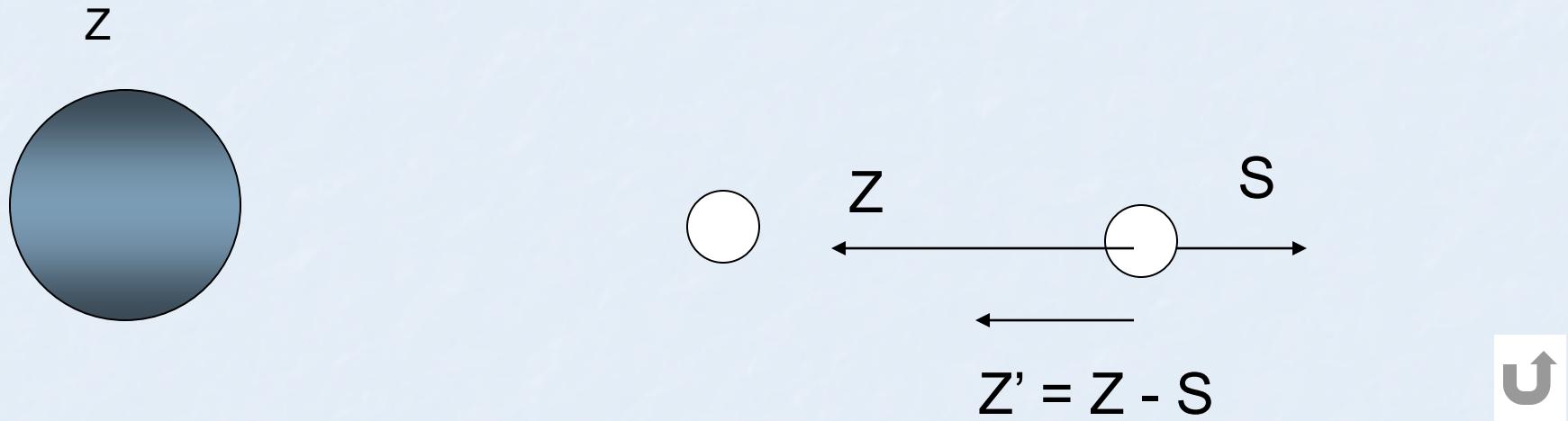
- Giống e trong nguyên tử 1e:
 - ✓ Được xác định bằng 4 số lượng tử n , ℓ , m_ℓ , m_s
 - ✓ Hình dạng, độ lớn, phân bố, định hg của các AO
- Khác nhau giữa nguyên tử 1e và nhiều e:
 - ✓ Năng lượng: phụ thuộc vào cả n và ℓ
 - ✓ Lực tương tác:
 - + lực hút hạt nhân – e
 - + lực đẩy e – e.

→ Xuất hiện hiệu ứng chấn và hiệu ứng xâm nhập

➤ Hiệu ứng chắn

- các lớp electron bên trong biến thành màn chắn làm yếu lực hút của hạt nhân đối với các electron bên ngoài. 
- Hiệu ứng chắn tăng khi:
 - ❖ số lớp electron tăng
 - ❖ số electron tăng 

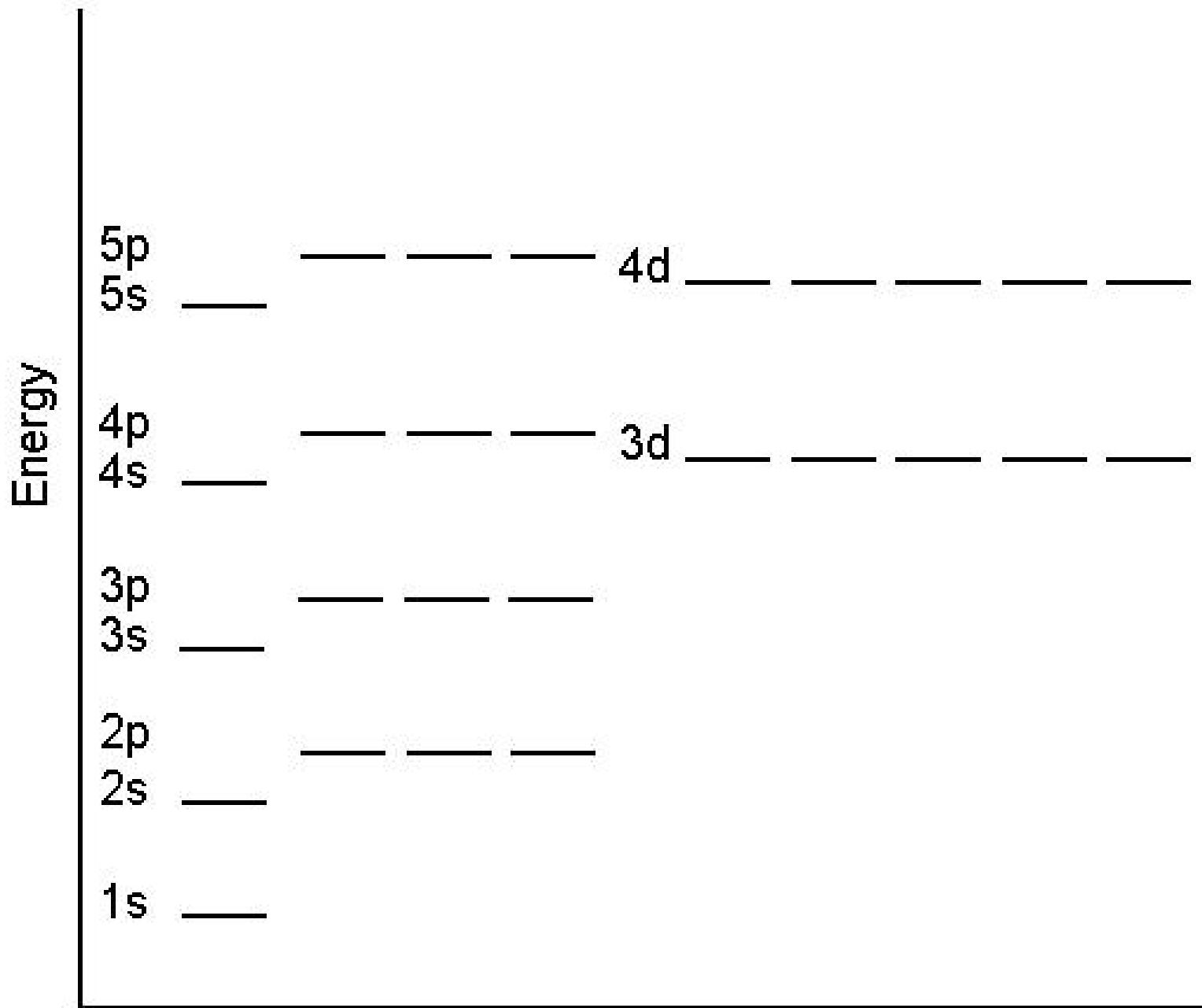
Hình: Hiệu ứng chấn



➤ Hiệu ứng xâm nhập

- ngược lại với hiệu ứng chấn: Khả năng xâm nhập giảm khi n và ℓ tăng
 - Thứ tự năng lượng của các phân lớp trong ngtử nhiều e:
 $1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < 4p < 5s < 4d < 5p < 6s < 4f < 5d < 6p < 7s < 5f \approx 6d$

Spin diagram



2. Các quy luật phân bố electron vào nguyên tử nhiều e.

a. Nguyên lý ngoại trừ Pauli

b. Nguyên lý vững bền

- Quy tắc Hund
- Quy tắc Klechcowski

a. Nguyên lý ngoại trừ Pauli

Trong 1 ngtử không thể có 2e có cùng 4 số lượng tử.

→ Một AO chứa tối đa 2e có spin ngược dấu.

Lớp n	Giá trị ℓ	Phân lớp	số f.lớp trg lớp n	Gía trị m_{ℓ}	số AO trg lớp n	số e max trg lớp n
1	0	1s	1	0	1	2
2	0	2s	2	0	4	8
	1	2p		0, ± 1		
3	0	3s	3	0	9	18
	1	3p		0, ± 1		
	2	3d		0, $\pm 1, \pm 2$		



b. Nguyên lý vững bền

- Trong $\hat{d}kbt$ ngtử phải ở trạng thái có E_{min}
- **Quy tắc Klechcowski:**

1s 2s 2p 3s 3p 4s 3d 4p 5s 4d 5p 6s 4f 5d 6p 7s 5f 6d
1 2 3 3 4 4 5 5 5 6 6 6 7 7 7 7 8 8

- ✓ *Điền e vào các phân lớp có $(n + l)$ tăng dần.*
- ✓ *Khi $(n + l) = nhau$: điền e vào phân mức có $n \uparrow$*
- **Quy tắc Hund:** *Khi e không đủ để bão hòa một phân mức: E_{min} - khi các AO được sử dụng tối đa*
- **Quy ước:** *Điền e có spin dương trước, âm sau*



n

ℓ

m_ℓ

m_s

Lớp e

Phân lớp e

AO

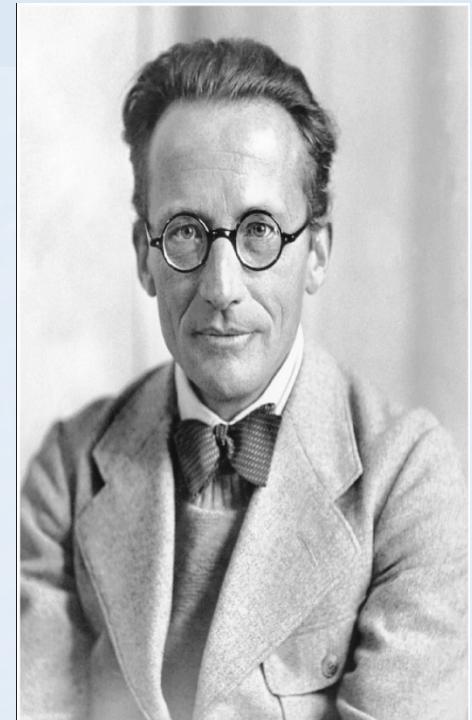
e



a. Phương trình sóng Schrödinger

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - V) \Psi = 0$$

- ✓ E – năng lượng toàn phần của hạt vi mô
- ✓ V - thế năng, phụ thuộc vào toạ độ x, y, z
- ✓ Ψ - hàm sóng đối với các biến x, y, z mô tả sự chuyển động của hạt vi mô ở điểm x, y, z.
- ✓ Ψ^2 – mật độ xác suất có mặt của hạt vi mô tại điểm x, y, z.
- ✓ $\Psi^2 dV$ – xác suất có mặt của hạt vi mô trong thể tích dV có tâm xyz



Erwin Schrödinger

