

TÀI LIỆU ÔN TẬP HÓA ĐẠI CƯƠNG

CẤU TẠO NGUYÊN TỬ

Nội dung gồm 4 phần

1. Nguyên tử
2. Cấu trúc lớp vỏ electron nguyên tử theo cơ học lượng tử (*trọng tâm*)
3. Nguyên tử nhiều electron (*trọng tâm*)
4. Bài tập tự luyện

★ PHIÊN BẢN K-2022

- Tài liệu được biên soạn bởi Ban Chuyên môn – CLB Chúng Ta Cùng Tiến (CTCT).
- Đây là tâm huyết của các anh/chị/bạn trong CLB CTCT, gửi tặng đến các em, các bạn sinh viên K22 – Đại học Bách Khoa ĐHQG TP.HCM (HCMUT), vui lòng không sao chép dưới mọi hình thức. Nếu cần sử dụng lại, yêu cầu trích dẫn nguồn đầy đủ.
- Mọi ý kiến phản hồi, đóng góp xin gửi về fanpage **Chúng Ta Cùng Tiến** hoặc liên hệ trực tiếp tại Văn phòng: **Phòng 102 – Nhà thi đấu Đại học Bách Khoa**
- Group học tập: www.facebook.com/groups/chungtacungtien.group



PHẦN 1

NGUYÊN TỬ

I. NGUYÊN TỬ

- Nguyên tử là đơn vị cấu trúc nhỏ nhất của một nguyên tố hóa học, không thể chia nhỏ hơn nữa về mặt hóa học và trong các phản ứng hóa học thông thường, nguyên tử không thay đổi.

- Cấu tạo nguyên tử gồm 2 phần: + hạt nhân nguyên tử (gồm proton và neutron)
+ lớp vỏ điện tử (electron)

- Các hạt sơ cấp trong nguyên tử:

Tên	Ký hiệu	Khối lượng (<i>ít thi</i>)		Điện tích	
		kg	u	C (<i>ít thi</i>)	e
Electron	e	9.1095×10^{-31}	5.4858×10^{-4}	-1.60219×10^{-19}	-1
Proton	p	1.6726×10^{-27}	1.007276	$+1.60219 \times 10^{-19}$	+1
Neutron	n	1.6745×10^{-27}	1.008665	0	0

Các số liệu trên có thể lấy từ máy tính bỏ túi.

II. THUYẾT CẤU TẠO NGUYÊN TỬ THEO CƠ HỌC LƯỢNG TỬ

Các luận điểm của cơ học lượng tử:

- Lượng tính sóng hạt: các hạt vi mô (electron, photon) có tính chất sóng hạt.
Các bạn học thuộc là được không nhất thiết phải hiểu kĩ.
- Nguyên lý bất định Heisenberg: không thể đồng thời xác định chính xác cả vị trí và tốc độ của hạt vi mô.
Không thể dùng khái niệm quỹ đạo đối với electron mà dùng khái niệm đám mây electron.
- Phương trình sóng Schrödinger và 4 số lượng tử.
Một phương trình phức tạp khó hiểu dùng để giải quyết các hệ vi mô. Nếu hệ vĩ mô mình dùng 3 định luật Newton để chiến giữa kì Vật lý 1, thì phương trình này dùng để học lý 2.
Các bạn chỉ cần biết phương trình này thể hiện mối quan hệ giữa E (năng lượng), Ψ (hàm sóng). Trong đó hàm sóng Ψ là hàm mô tả chuyển động của hạt, còn Ψ^2 mật độ xác suất có mặt của hạt. Biết sương sương vậy được ời.

PHẦN 2

CẤU TRÚC LỚP VỎ ELECTRON NGUYÊN TỬ THEO CƠ HỌC LƯỢNG TỬ

I. NĂNG LƯỢNG ELECTRON CỦA NGUYÊN TỬ MỘT ELECTRON

$$E_n = -13.6 \times \frac{Z^2}{n^2} \text{ (eV)}$$

Trong đó: E_n : năng lượng electron ứng với số lượng tử n

Z : điện tích hạt nhân

Mách bạn: Công thức trên thường không cho thi để tính toán.

Như vậy, với các nguyên tử hoặc ion 1 electron ví dụ như H, He^+ , Fe^{25+} thì năng lượng electron chỉ phụ thuộc vào n (xét cùng 1 nguyên tử). n càng lớn năng lượng của electron cũng càng lớn. Tuy nhiên điều này không hoàn toàn đúng với nguyên tử nhiều electron như He, Fe,...

II. ORBITAL NGUYÊN TỬ

Đám mây electron hay orbital nguyên tử (AO) là vùng không gian gần nhân trong đó xác suất có mặt electron chiếm khoảng 90%.

Mật độ đám mây electron tỷ lệ thuận với xác suất có mặt của electron.

Hình dạng của đám mây electron, hay AO, được xác định bởi bề mặt tạo thành từ các điểm có mật độ xác suất có mặt electron (Ψ^2) bằng nhau.

Orbital nguyên tử là hàm sóng mô tả trạng thái của electron trong nguyên tử và được xác định bởi tổ hợp 3 số lượng tử: n , l , m_l .

III. BỘ BỐN SỐ LƯỢNG TỬ

Electron được xếp vào các lớp, trong mỗi lớp có các phân lớp, trong mỗi phân lớp có các orbital. Như vậy, cần có những thông số để xác định vị trí electron.

1. Số lượng tử chính n

- Số lượng tử chính hay còn gọi là số lớp, xác định trạng thái mức năng lượng của electron nguyên tử. n càng lớn thì năng lượng càng cao.

- Miền giá trị: $n = 1, 2, 3, \dots, \infty$.

n	1	2	3	4	5	6	7
Tên lớp	K	L	M	N	O	P	Q

- Trong lớp lượng tử n có:
 - + n phân lớp (tức n giá trị của l)
 - + n^2 orbital
 - + $2n^2$ electron (tối đa)

2. Số lượng tử orbital (số lượng tử phụ) l

- Số lượng tử phụ hay gọi là phân lớp, xác định hình dạng của đám mây electron.
- l không quyết định năng lượng của e trong nguyên tử 1 e. - Miền giá trị: $l = 0, 1, 2, \dots(n-1)$.

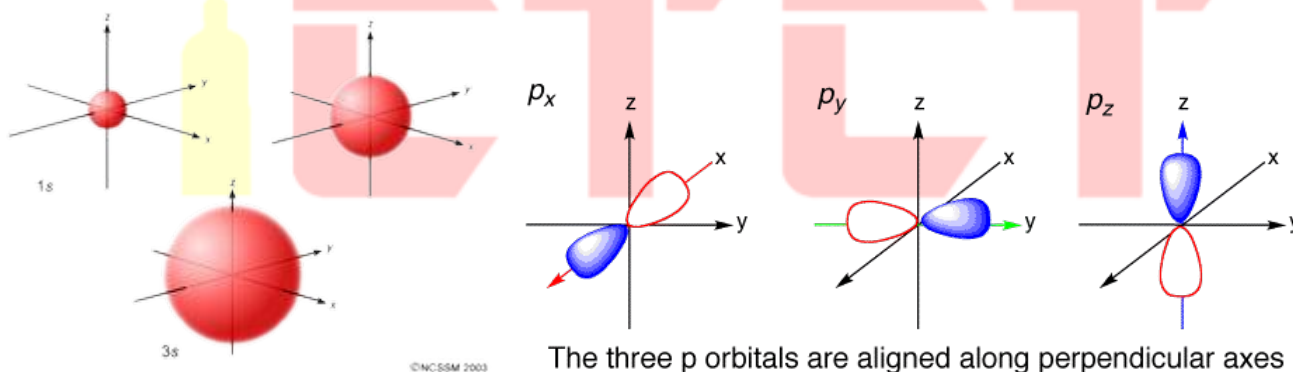
l	0	1	2	3
Tên phân lớp	s	p	d	f

- Lớp n có n phân lớp (tức l có n giá trị)

Ví dụ: $n = 3$ thì l có 3 giá trị: $l = 0, 1, 2$
- Phân lớp l có $(2l + 1)$ orbital

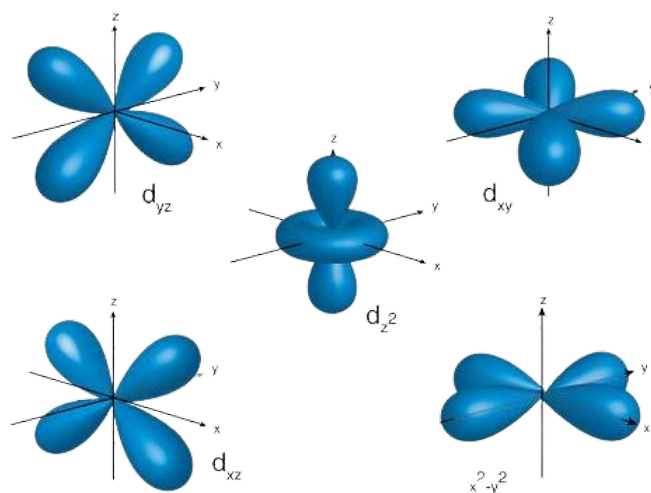
Ví dụ: phân lớp p ($l = 1$) có 3 orbital

- Hình dạng các orbital:



Orbital s có dạng hình cầu

Orbital p có dạng 2 khối cầu trái dấu

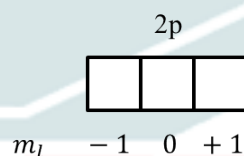


Các orbital d

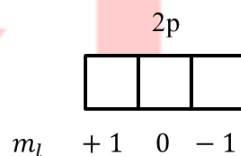
Mách bạn: Cách nhớ hình dạng orbital d: đối với các orbital d, 3 orbital d_{xy} , d_{yz} và d_{xz} có cùng kiểu hình dạng là 4 cánh hoa hướng theo chiều đường phân giác của các trục tương ứng. 2 orbital $d_{x^2-y^2}$, d_z^2 thì hướng theo trục.

3. Số lượng tử từ m_l

- Xác định tính định hướng của orbital.
- Miền giá trị: $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \pm l$
- Ứng với một giá trị l thì có $(2l + 1)$ giá trị m_l .
- Do đó ở phần 2., phần hình dạng các orbital: Orbital s có $l = 0$, m_l có 1 giá trị $m_l = 0$ nên không có sự định hướng, chỉ có 1 hình cầu. Orbital p có $l = 1$, m_l có 3 giá trị $m_l = -1, 0, +1$ nên có 3 sự định hướng, ứng với có 3 orbital.
- Thứ tự của m_l có 2 kiểu:
 - + Khi $m_l = -l, \dots + l$; ví dụ với orbital 2p ($n = 2$; $l = 1$) sẽ có:



- + Khi $m_l = +l, \dots -l$; ví dụ với orbital 2p ($n = 2$; $l = 1$) sẽ có:



Mách bạn: $m_l = -l, \dots + l$ hay $m_l = +l, \dots -l$ là do qui ước của đề bài, hãy đọc kĩ đề bài nhé.

4. Số lượng tử spin m_s

- Số lượng tử xác định trạng thái chuyển động riêng của electron, là sự tự quay quanh trục của chính nó, không liên quan đến chuyển động quanh hạt nhân, không liên quan đến orbital.
- Các giá trị: $m_s = \pm \frac{1}{2} \Rightarrow$ mỗi orbital chứa tối đa 2 electron
- Electron ứng với mũi tên quay lên: $m_s = +\frac{1}{2}$, ứng với mũi tên quay xuống: $m_s = -\frac{1}{2}$

Mách bạn: Điều quan trọng nhắc lại nhiều lần:

- + Muốn xác định một orbital cần 3 số lượng tử: n, l, m_l
- + Muốn xác định một electron cần 4 số lượng tử: n, l, m_l, m_s

Ví dụ 1. Có bao nhiêu bộ số lượng tử được chấp nhận trong các bộ số lượng tử sau:

(1) $n = 4; l = 3; m_l = -3.$

(2) $n = 3; l = 2; m_l = +3.$

(3) $n = 1; l = 0; m_l = 0.$

(4) $n = 0; l = -1; m_l = -1.$

(5) $n = 4; l = 0; m_l = 0; m_s = +1.$ (6) $n = 2; l = 2; m_l = 1; m_s = +\frac{1}{2}.$

A 2.**B** 3.**C** 4.**D** 5.

Giờ phải làm sao nhó?
T^T



Hem biết thì xem giải nè
mấy bạn ^^

Lời giải.

Xem lại các miền giá trị của 4 số lượng tử.

(1), (3) thỏa điều kiện.

(2) sai vì $l = 2$, m_l có giá trị vượt quá $+l = +2$.

(4) sai vì l không có giá trị âm, n phải lớn hơn 0.

(5) sai vì m_s chỉ nhận giá trị $\pm\frac{1}{2}$.

(6) sai vì $l = 2$ vượt quá $n - 1$.

Chọn đáp án **A**

Ví dụ 2. Chọn phát biểu đúng về bộ 4 số lượng tử.

A Lớp $n = 2$ có tối đa 8 electron với $m_s = +\frac{1}{2}$.

B Phân lớp có $n = 5, l = 4$ có số electron tối đa là 18.

C Có tối đa 2 electron có cùng bộ số lượng tử: $n = 4, l = 3, m_l = -2, m_s = +\frac{1}{2}$.

D Lớp $n = 5$ có tối đa 25 electron.

Lời giải.

A sai. Lớp $n = 2$ có $2^2 = 4$ orbital, mỗi orbital chứa tối đa 1 electron có $m_s = +\frac{1}{2} \Rightarrow$ có tối đa 4 electron thỏa mãn.

B đúng. Với $l = 4$ thì có 9 orbital, chứa tối đa 18 electron.

C sai. Trong một nguyên tử, ứng với một bộ 4 số lượng tử chỉ có 1 electron duy nhất.

D sai. Lớp $n = 5$ chứa tối đa $2 \times 5^2 = 50$ electron.

Chọn đáp án **B**



Tiếp tục nè ^^

PHẦN 3

NGUYÊN TỬ NHIỀU ELECTRON

I. TRẠNG THÁI NĂNG LƯỢNG CỦA ELECTRON TRONG NGUYÊN TỬ NHIỀU ELECTRON

Khác với nguyên tử một electron, nguyên tử nhiều electron có:

- Năng lượng: phụ thuộc vào cả n và l
- Lực tương tác:
 - + Lực hút hạt nhân - electron
 - + Lực đẩy electron - electron

⇒ xuất hiện **hiệu ứng chắn** và **hiệu ứng xâm nhập**.

Mách bạn: Vậy xét một nguyên tử nhiều e, nếu 2 electron có cùng n và l sẽ có cùng mức năng lượng.

1. Hiệu ứng chắn

- Các electron bên trong biến thành màn chắn lực hút của hạt nhân đối với các electron bên ngoài → electron bên ngoài có xu hướng bị đẩy ra xa nhân và năng lượng của chúng tăng lên.
- Đặc điểm:
 - + Các electron càng bên trong chắn càng mạnh, bị chắn càng yếu.
 - + Các electron càng bên ngoài bị chắn càng mạnh, chắn càng yếu (nhưng vẫn có chắn).
 - + Cùng lớp chắn yếu hơn khác lớp, cùng phân lớp chắn yếu hơn cùng lớp, cùng ô lượng tử chắn yếu hơn cùng phân lớp nhưng đẩy nhau mạnh. (khác lớp > cùng lớp > cùng phân lớp > cùng ô lượng tử)
 - + Theo chiều ns, np, nd, nf tác dụng chắn yếu dần, bị chắn tăng lên.
 - + Một phân lớp bão hòa hoặc bán bão hòa electron có tác dụng chắn rất lớn đối với lớp bên ngoài.

Ví dụ: Hiệu ứng chắn: $3s \leftrightarrow 4s > 3s \leftrightarrow 3p > 3s \leftrightarrow 3s$

2. Hiệu ứng xâm nhập

- Một electron bên trong hay bên ngoài vẫn có thời gian tồn tại gần khu vực hạt nhân → xâm nhập.
- Hiệu ứng xâm nhập làm tăng độ bền liên kết giữa electron và hạt nhân và làm giảm năng lượng của electron.
- Do ảnh hưởng của hiệu ứng chắn và hiệu ứng xâm nhập mà các phân mức năng lượng trong nguyên tử nhiều electron được sắp xếp theo chiều tăng dần mức năng lượng như sau:

$$1s < 2s < 2p < 3s < 3s < 4s < 3d < 4p < 5s < 4d < 5p < 6s < 4f \approx 5d < 6p < 7s < 5f \approx 6d$$

II. CÁC QUI LUẬT PHÂN BỐ ELECTRON VÀO CÁC ORBITAL

1. Nguyên lý loại trừ Pauli

Trong 1 nguyên tử không thể có 2 electron mà trạng thái của chúng được đặc trưng bằng cùng một bộ 4 số lượng tử.

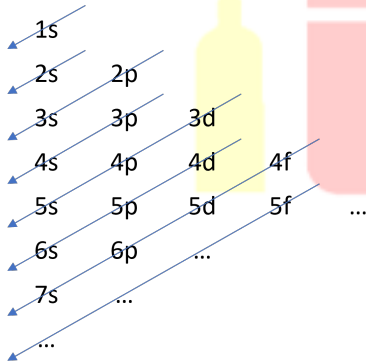
Mách bạn: Điều này có nghĩa, 1 bộ 4 số lượng tử đặc trưng cho 1 electron. Một bộ 3 số lượng tử n, l, m_l đặc trưng cho 1 orbital chứa tối đa 2 electron có spin ngược nhau ($m_s = +\frac{1}{2}$ hoặc $-\frac{1}{2}$).

Phân lớp s	1 orbital	Tối đa 2 electron
Phân lớp p	3 orbital	Tối đa 6 electron
Phân lớp d	5 orbital	Tối đa 10 electron
Phân lớp f	7 orbital	Tối đa 14 electron

2. Nguyên lý vững bền

Electron phải được phân bố vào các orbital sao cho tổng năng lượng electron của nguyên tử là thấp nhất.

Qui tắc Klechowski



- Electron được điền vào các phân lớp sao cho tổng $(n + l)$ tăng dần.

- Electron khác phân lớp có cùng $(n + l)$ thì ưu tiên điền vào n nhỏ hơn.

Lưu ý: qui tắc Klechowski là qui tắc gần đúng, có ngoại lệ.

Qui tắc Hund

Electron được phân bố sao cho tổng spin của chúng là cực đại (số electron độc thân tối đa).

Mách bạn:

+ Lớp ngoài cùng là lớp ứng với n cao nhất. \Rightarrow "electron ngoài cùng": là electron ở lớp ngoài cùng. Nếu có 2 e thì có 2 bộ 4 số lượng tử.

+ Phân lớp cuối cùng là phân lớp có mức năng lượng cao nhất. \Rightarrow "electron cuối cùng": là electron được điền vào cuối cùng khi viết cấu hình electron theo quy tắc Kechcoeski.

Ví dụ 3. Electron cuối cùng của nguyên tử X có 4 số lượng tử là $n = 3, l = 2, m_l = +1, m_s = -\frac{1}{2}$. (qui ước electron phân bố vào các orbital trong phân lớp theo thứ tự từ $+l$ đến $-l$).

Hãy xác định điện tích hạt nhân của X.

A 27.

B 22.

C 25.

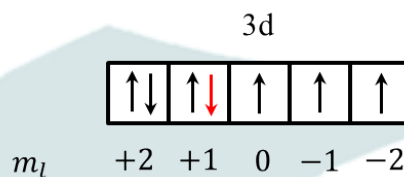
D 30.

Lời giải.

Từ các giá trị của các số lượng tử, ta dễ dàng suy được:

- $n = 3 \Rightarrow$ lớp thứ 3.
- $l = 2 \Rightarrow$ phân lớp d.
- $m_l = +1 \Rightarrow$ orbital thứ 2 trong phân lớp d.
- $m_s = -\frac{1}{2} \Rightarrow$ electron quay xuống.

Áp dụng nguyên lí Pauli, qui tắc Hund, ta tìm được cấu hình electron cuối cùng là $3d^7$.



Áp dụng qui tắc Klechcowski, ta viết cấu hình theo mức năng lượng cho đến $3d^7$.

Ta được cấu hình năng lượng của X là: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^7$.

Khi đó, $Z = 27$.

Từ cấu hình năng lượng, ta sắp xếp lại thành cấu hình electron (theo thứ tự n tăng dần) nếu đề có yêu cầu viết cấu hình e của X: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^7 4s^2$.

Chọn đáp án **A**

3. Một số ngoại lệ

- Khi electron ở phân lớp d đang xây dựng gần đạt tới cấu hình e bán bão hòa hoặc bão hòa, để đạt cấu hình bền vững electron từ phân lớp s sẽ chuyển sang d.

Ví dụ: Cr ($Z = 24$): $[Ar]3d^5 4s^1$, Cu ($Z = 29$): $[Ar]3d^{10} 4s^1$

- Electron điền vào 5d trước 4f, 6d trước 5f.

Ví dụ: La ($Z = 57$): $[Xe]5d^1 6s^2$ (thay vì $4f^1 6s^2$), Ac ($Z = 89$): $[Rn]6d^1 7s^2$

- Một số trường hợp khác (không cần quan tâm).

4. Cấu hình electron của anion và cation

a. Anion

Khi viết cấu hình electron của anion, viết cấu hình electron của nguyên tố trước rồi thêm số electron bằng điện tích âm của anion.

Ví dụ: Viết cấu hình electron của Cl^- .

Ta viết cấu hình electron của Cl trước: $[\text{Ne}]3s^23p^5$, điện tích là $1-$ nên thêm 1 electron, được Cl^- : $[\text{Ne}]3s^23p^6$.

b. Cation

Khi viết cấu hình electron của cation, viết cấu hình e nguyên tố trước rồi bớt e ở orbital có n lớn nhất trước, nếu n bằng nhau thì bớt e có giá trị $(n + l)$ lớn nhất.

Ví dụ: Viết cấu hình electron của Fe^{2+} và Fe^{3+}

Viết cấu hình electron của Fe ($Z = 26$): $[\text{Ar}]3d^64s^2$

Fe^{2+} có điện tích là $2+$ nên bớt 2 e, được cấu hình: $[\text{Ar}]3d^6$

Fe^{3+} có điện tích là $3+$ nên bớt 3 e, được cấu hình: $[\text{Ar}]3d^5$

Ví dụ 4. Xác định bộ 4 số lượng tử của electron lớp ngoài cùng của Zn ($Z = 30$). (Qui ước:

$$m_l = -l, \dots, +l)$$

☐ (A) $n = 3, l = 2, m_l = +2, m_s = +\frac{1}{2}$.

☐ (B) $n = 4, l = 0, m_l = 0, m_s = +\frac{1}{2}$.

☒ (C) $n = 4, l = 0, m_l = 0, m_s = \pm\frac{1}{2}$.

☐ (D) $n = 3, l = 2, m_l = +2, m_s = -\frac{1}{2}$.

Lời giải.

Cấu hình electron của Zn: $[\text{Ar}]3d^{10}4s^2$

Electron ngoài cùng là electron ở phân lớp 4s.

Vậy có 2 bộ 4 số lượng tử thỏa mãn: $n = 4, l = 0, m_l = 0, m_s = \pm\frac{1}{2}$

Chọn đáp án ☒ (C)

...Ồ, hết rồi.



PHẦN 4

BÀI TẬP TỰ LUYỆN

Câu 1. Nguyên tố X là kim loại, có lớp lượng tử ngoài cùng là N và có các số lượng tử của electron cuối cùng: $m_l = +2$, $m_s = -\frac{1}{2}$. Quy ước electron phân bố vào các orbital trong phân lớp theo thứ tự từ $+l$ đến $-l$. Hãy cấu hình electron của X.

- (A) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^6 4s^2$. (B) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2$.
(C) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^1$. (D) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^7 4s^2$.

Câu 2. Orbital 1s của nguyên tử H có dạng hình cầu, nghĩa là:

- (A) Xác suất gặp electron 1s của H giống nhau theo mọi hướng trong không gian.
(B) Khoảng cách của electron 1s đến nhân H luôn luôn không đổi.
(C) Quỹ đạo chuyển động của electron là hình cầu.
(D) Electron 1s chỉ di chuyển tại vùng không gian bên trong hình cầu ấy.

Câu 3. Cho các phát biểu:

- (1) Cần phải tiêu tốn năng lượng để ghép đôi electron trong AO.
- (2) Nguyên tử mà cấu hình electron tuân theo quy tắc Kleshkovski luôn ở trạng thái cơ bản.
- (3) Nguyên tử hay ion có số lẻ electron thì luôn thuận từ (có từ tính riêng, bị nam châm hút).
- (4) Nguyên tử mà cấu hình không tuân theo nguyên lý vững bền là ở trạng thái kích thích.
- (5) Số lượng AO có trong phân lớp l bằng số lượng giá trị m_l tương ứng phân lớp đó.

Số phát biểu đúng là:

- (A) 1. (B) 2. (C) 3. (D) 4.

Câu 4. Chọn phương án **đúng**. Dự đoán nguyên tố Y (chưa phát hiện) ở chu kỳ 8, phân nhóm VIIA sẽ ở ô số bao nhiêu trong bảng hệ thống tuần hoàn.

- (A) 167. (B) 166. (C) 155. (D) 156.

Câu 5. Ion X^{3+} có cấu hình electron lớp ngoài cùng là $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5$. Bộ 4 số lượng tử của electron ngoài cùng của X là (quy ước giá trị m_l từ $-l$ đến $+l$ và điền spin dương trước, âm sau):

- (A) $n = 3$; $l = 2$; $m_l = -2$; $m_s = +\frac{1}{2}$. (B) $n = 4$; $l = 1$; $m_l = -1$; $m_s = +\frac{1}{2}$.
(C) $n = 3$; $l = 2$; $m_l = -2$; $m_s = -\frac{1}{2}$. (D) $n = 4$; $l = 0$; $m_l = 0$; $m_s = \pm\frac{1}{2}$.

Câu 6. Nguyên tử ^{24}Cr ở trạng thái cơ bản có bao nhiêu electron có số lượng tử từ spin $m_s = +\frac{1}{2}$ (trong cùng phân lớp, quy ước electron điền vào các orbital theo thứ tự m_l từ $-l$ đến $+l$ và điền spin dương trước, âm sau) ?

- (A) 12. (B) 13. (C) 14. (D) 15.

Câu 7. Chọn đáp án **sai**. Tính số electron tối đa trong một nguyên tử có các số lượng tử sau:

- (A) Lớp O; số electron tối đa là 32.
 (B) Lớp Q; $l=5$; số electron tối đa là 98.
 (C) Lớp N; $l=2$; $m_l = -1$; $m_s = +\frac{1}{2}$; số electron tối đa là 2.
 (D) Lớp S; số electron tối đa là 162.

Câu 8. Theo cơ học lượng tử:

- (1) Trong các nguyên tố hóa học hiện nay chỉ có một số nguyên tố có electron hóa trị có số lượng tử chính lớn nhất bằng 7.
 (2) Năng lượng và khoảng cách trung bình tới hạt nhân của electron tăng theo số lượng tử chính n .
 (3) Các orbital s dạng khối cầu có nghĩa là electron s chỉ chuyển động bên trong khối cầu ấy.
 (4) Công thức $2n^2$ cho biết số electron tối đa của lớp lượng tử n .
 (5) Sự chuyển động orbital của electron xung quanh hạt nhân được xác định bởi 4 số lượng tử: n , l , m_l và m_s .
 (6) Năng lượng của electron trên AO 3d luôn lớn hơn năng lượng của electron trên AO 3s.

Chọn số phát biểu **sai**:

- (A) 1. (B) 2. (C) 3. (D) 4.

Câu 9. Chọn phát biểu **đúng**. Theo cơ học lượng tử:

- (1) Các orbital nguyên tử d_{xz} có mật độ xác suất gặp electron cực đại dọc theo các trục Ox và Oz.
 (2) Các orbital nguyên tử d_{xy} có mật độ xác suất gặp electron cực đại dọc theo các trục Ox và Oy.
 (3) Các orbital nguyên tử d_{yz} có mật độ xác suất gặp electron cực đại dọc theo hai đường phân giác chính của mặt phẳng yOz.
 (4) Các orbital nguyên tử $d_{x^2-y^2}$ có mật độ xác suất gặp electron cực đại dọc theo các trục Ox và Oy.
 (5) Các orbital nguyên tử d_{z^2} có mật độ xác suất gặp electron cực đại dọc theo các trục Oz.

- (A) 2, 4, 5. (B) Chỉ 4,5. (C) 3, 4, 5. (D) Chỉ 5.

Câu 10. Chọn phương án **đúng**: Cho các nguyên tố: $_{15}\text{P}$, $_{22}\text{Ti}$, $_{24}\text{Cr}$, $_{25}\text{Mn}$, $_{29}\text{Cu}$. Ở trạng thái cơ bản, nguyên tố có nhiều electron có số lượng tử từ $m_s = +\frac{1}{2}$ nhất và nhiều electron có số lượng tử từ $m_s = -\frac{1}{2}$ nhất lần lượt là:

- (A) Mn, Cu. (B) Cr, P. (C) P, Mn. (D) Cr, Ti.

Câu 11. Ở trạng thái cơ bản, nguyên tử X có electron ngoài cùng ở lớp O và có các số lượng tử của electron cuối cùng: $l = 2$; $m_l = -2$; $m_s = -\frac{1}{2}$ (quy ước: trong cùng phân lớp, electron điền vào các orbital theo thứ tự m từ $-l$ đến $+l$ và điền spin dương trước, âm sau). Hãy xác định điện tích hạt nhân của X.

- (A) 26. (B) 76. (C) 44. (D) 30.

Câu 12. Trong các phát biểu sau, chọn phát biểu **đúng**:

- (1) Trong hệ hydrogenoid, năng lượng của electron chỉ phụ thuộc vào số lượng tử chính n .
- (2) Trong nguyên tử đa điện tử, năng lượng của electron phụ thuộc vào hai số lượng tử n và l .
- (3) Với mọi nguyên tử, năng lượng của phân lớp $3d$ luôn lớn hơn phân lớp $4s$.
- (4) Với mọi nguyên tử, năng lượng của phân lớp $5d$ luôn lớn hơn phân lớp $4f$.
- (5) Với mọi nguyên tử, năng lượng của phân lớp $3d$ luôn lớn hơn phân lớp $3s$.

Ⓐ 1, 2, 5.

Ⓑ Chỉ 1, 2.

Ⓒ 1, 2, 4, 5.

Ⓓ Chỉ 1.



PHẦN 5 LỜI GIẢI

Câu 13. Nguyên tố X là kim loại, có lớp lượng tử ngoài cùng là N và có các số lượng tử của electron cuối cùng: $m_l = +2$, $m_s = -\frac{1}{2}$. Qui ước electron phân bố vào các orbital trong phân lớp theo thứ tự từ $+l$ đến $-l$. Hãy xác định điện tích hạt nhân của X.

(A) 21.

(B) 29.

(C) 30.

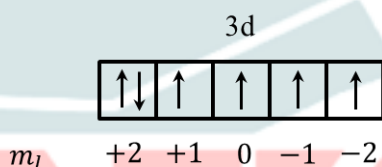
(D) 26.

Lời giải.

Nguyên tố X có lớp lượng tử ngoài cùng là N nên X ở chu kì 4, X lại là kim loại \Rightarrow electron cuối cùng của X thuộc phân lớp 3d hoặc 4s. Mà giá trị $m_l = +2$ và $m_s = -\frac{1}{2}$ nên nó thuộc phân lớp 3d. Từ các giá trị của các số lượng tử, ta dễ dàng suy được:

- $m_l = +2 \Rightarrow$ orbital thứ 1 trong phân lớp d

- $m_s = -\frac{1}{2} \Rightarrow$ electron quay xuống



Cấu hình năng lượng của X là: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^6 \rightarrow Z = 26$.

Câu 14. Orbital 1s của nguyên tử H có dạng hình cầu, nghĩa là:

(A) Xác suất gặp electron 1s của H giống nhau theo mọi hướng trong không gian.

(B) Khoảng cách của electron 1s đến nhân H luôn luôn không đổi.

(C) Quỹ đạo chuyển động của electron là hình cầu.

(D) Electron 1s chỉ di chuyển tại vùng không gian bên trong hình cầu ấy.

Lời giải.

- Hình cầu có tính đối xứng, nên xác suất là như nhau.
- Khoảng cách electron đến hạt nhân có thể thay đổi.
- Không dùng khái niệm quỹ đạo khi nói về orbital.

Câu 15. Cho các phát biểu:

- (1) Cần phải tiêu tốn năng lượng để ghép đôi electron trong AO.
- (2) Nguyên tử mà cấu hình electron tuân theo quy tắc Kleshkovski luôn ở trạng thái cơ bản.
- (3) Nguyên tử hay ion có số lẻ electron thì luôn thuận từ (có từ tính riêng, bị nam châm hút).
- (4) Nguyên tử mà cấu hình không tuân theo nguyên lý vững bền là ở trạng thái kích thích.

(5) Số lượng AO có trong phân lớp l bằng số lượng giá trị m_l tương ứng phân lớp đó. Số phát biểu đúng là:

- (A) 1. (B) 2. (C) 3. (D) 4.

Lời giải.

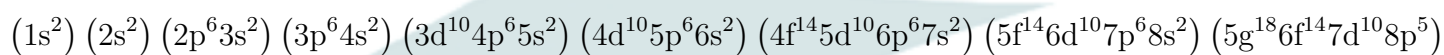
Ý (2) sai do quy tắc Kleshkovski không đúng cho mọi trường hợp, ví dụ như trường hợp cấu hình của Cr, Cu.

Câu 16. Chọn phương án **đúng**. Dự đoán nguyên tố Y (chưa phát hiện) ở chu kỳ 8, phân nhóm VIIA sẽ ở ô số bao nhiêu trong bảng hệ thống tuần hoàn.

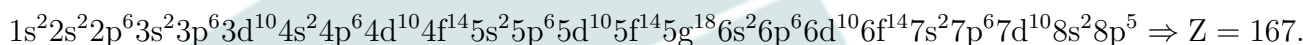
- (A) 167. (B) 166. (C) 155. (D) 156.

Lời giải.

Sử dụng đường chéo Klechkowski, electron điền theo chiều từ đuôi mũi tên đến đầu mũi tên của đường chéo, xác định được cấu hình electron là :



Khi sắp xếp lại ta được cấu hình là :

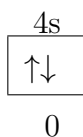


Câu 17. Ion X^{3+} có cấu hình electron lớp ngoài cùng là $1s^22s^22p^63s^23p^63d^5$. Bộ 4 số lượng tử của electron ngoài cùng của X là (quy ước giá trị m_l từ $-l$ đến $+l$ và điền spin dương trước, âm sau):

- (A) $n = 3; l = 2; m_l = -2; m_s = +\frac{1}{2}$. (B) $n = 4; l = 1; m_l = -1; m_s = +\frac{1}{2}$.
 (C) $n = 3; l = 2; m_l = -2; m_s = -\frac{1}{2}$. (D) $n = 4; l = 0; m_l = 0; m_s = \pm\frac{1}{2}$.

Lời giải.

Cấu hình electron của X: $1s^22s^22p^63s^23p^63d^64s^2$. 2 electron ngoài cùng điền vào $4s^2$.



Câu 18. Nguyên tử ^{24}Cr ở trạng thái cơ bản có bao nhiêu electron có số lượng tử từ spin $m_s = +\frac{1}{2}$ (trong cùng phân lớp, quy ước electron điền vào các orbital theo thứ tự m_l từ $-l$ đến $+l$ và điền spin dương trước, âm sau) ?

- (A) 12. (B) 13. (C) 14. (D) 15.

Lời giải.

Nguyên tử ^{24}Cr có cấu hình e: $1s^22s^22p^63s^23p^63d^64s^2$

Do đó ta thấy có tổng cộng gồm 15 electron có số lượng tử từ spin $m_s = +\frac{1}{2}$ trong nguyên tử ^{24}Cr .

Câu 19. Chọn đáp án **sai**. Tính số electron tối đa trong một nguyên tử có các số lượng tử sau:

- (A) Lớp O; số electron tối đa là 32.

- (B) Lớp Q; $l=5$; số electron tối đa là 98.
 (C) Lớp N; $l=2$; $m_l = -1$; $m_s = +\frac{1}{2}$; số electron tối đa là 2.
 (D) Lớp S; số electron tối đa là 162.

Lời giải.

- Sai. Vì lớp O có $n = 5 \Rightarrow$ Số electron tối đa là $2n^2 = 64$
- Sai. Vì ở phân lớp $l=5$, có tổng cộng hợp $2l + 1 = 11$ AO, nên sẽ có tối đa 22 electron.
- Sai. Vì bộ 4 số lượng tử chỉ đặc trưng cho 1 electron.
- Đúng. Vì lớp S có $n = 9 \Rightarrow$ Số electron tối đa là $2 \times 9^2 = 162$.

Câu 20. Theo cơ học lượng tử:

- (1) Trong các nguyên tố hóa học hiện nay chỉ có một số nguyên tố có electron hóa trị có số lượng tử chính lớn nhất bằng 7.
- (2) Năng lượng và khoảng cách trung bình tới hạt nhân của electron tăng theo số lượng tử chính n .
- (3) Các orbital s dạng khối cầu có nghĩa là electron s chỉ chuyển động bên trong khối cầu ấy.
- (4) Công thức $2n^2$ cho biết số electron tối đa của lớp lượng tử n .
- (5) Sự chuyển động orbital của electron xung quanh hạt nhân được xác định bởi 4 số lượng tử: n , l , m_l và m_s .
- (6) Năng lượng của electron trên AO 3d luôn lớn hơn năng lượng của electron trên AO 3s.

Chọn số phát biểu **sai**:

- (A) 1. (B) 2. (C) 3. (D) 4.

Lời giải.

- Ý (3) sai vì AO là vùng không gian gần nhân trong đó xác suất có mặt electron chiếm khoảng 90%.
- Ý (5) sai do số lượng tử m_s liên quan đến chuyển động tự quay quanh trục của electron.
- Ý (6) sai vì với các nguyên tử hydrogenoid thì mức năng lượng các phân lớp bị suy biến.

Câu 21. Chọn phát biểu **đúng**. Theo cơ học lượng tử:

- (1) Các orbital nguyên tử d_{xz} có mật độ xác suất gặp electron cực đại dọc theo các trục Ox và Oz.
- (2) Các orbital nguyên tử d_{xy} có mật độ xác suất gặp electron cực đại dọc theo các trục Ox và Oy.
- (3) Các orbital nguyên tử d_{yz} có mật độ xác suất gặp electron cực đại dọc theo hai đường phân giác chính của mặt phẳng yOz.
- (4) Các orbital nguyên tử $d_{x^2-y^2}$ có mật độ xác suất gặp electron cực đại dọc theo các trục Ox và Oy.
- (5) Các orbital nguyên tử d_{z^2} có mật độ xác suất gặp electron cực đại dọc theo các trục Oz.

- (A) 2, 4, 5. (B) Chỉ 4,5. (C) 3, 4, 5. (D) Chỉ 5.

Lời giải.

- Ý 3,4,5 đúng vì đối với các orbital d , 3 orbital d_{xy} d_{yz} và d_{xz} có cùng kiểu hình dạng là 4 cánh hoa

hướng theo chiều đường phân giác của các trục tương ứng. 2 orbital $d_{x^2-y^2}$ d_z^2 thì hướng theo trục.

Câu 22. Chọn phương án **đúng**: Cho các nguyên tố: $_{15}\text{P}$, $_{22}\text{Ti}$, $_{24}\text{Cr}$, $_{25}\text{Mn}$, $_{29}\text{Cu}$. Ở trạng thái cơ bản, nguyên tố có nhiều electron có số lượng tử từ $m_s = +\frac{1}{2}$ nhất và nhiều electron có số lượng tử từ $m_s = -\frac{1}{2}$ nhất lần lượt là:

- (A) Mn, Cu. (B) Cr, P. (C) P, Mn. (D) Cr, Ti.

Lời giải.

Cấu hình của Cr là : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^1$

Cấu hình của Mn là : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^2$

\Rightarrow Cr, Mn cùng có tổng cộng 15 electron có số lượng tử từ $m_s = +\frac{1}{2}$.

Cấu hình của Cu là : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^1$ có tổng cộng 14 electron có số lượng tử từ $m_s = -\frac{1}{2}$.

Câu 23. Trong các phát biểu sau, chọn phát biểu **đúng**:

- (1) Trong hệ hydrogenoid, năng lượng của electron chỉ phụ thuộc vào số lượng tử chính n .
- (2) Trong nguyên tử đa điện tử, năng lượng của electron phụ thuộc vào hai số lượng tử n và l .
- (3) Với mọi nguyên tử, năng lượng của phân lớp $3d$ luôn lớn hơn phân lớp $4s$.
- (4) Với mọi nguyên tử, năng lượng của phân lớp $5d$ luôn lớn hơn phân lớp $4f$.
- (5) Với mọi nguyên tử, năng lượng của phân lớp $3d$ luôn lớn hơn phân lớp $3s$.

- (A) 1, 2, 5. (B) Chỉ 1, 2. (C) 1, 2, 4, 5. (D) Chỉ 1.

Lời giải.

- Ý (3) sai với các nguyên tử có $Z \geq 20$.

- Ý (4) sai. Ví dụ ở các nguyên tố họ Lantanoid, electron điền vào $5d^1$ trước rồi mới điền vào phân lớp $4f$ sau.

- Ý (5) sai với các nguyên tử Hydrogenoid.

[Solution/ans]