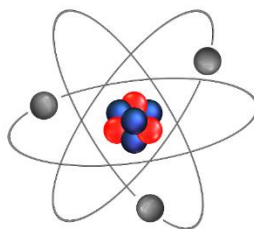


Cấu Tạo Nguyên Tử

1. Sự hình thành nguyên tử



Một nguyên tử X bao gồm hạt nhân và các electron xung quang. Trong đó

- Hạt nhân gồm các proton và neutron
- Ở trạng thái bình thường số proton (+) bằng Số electron (-)

Nguyên lý bất định heisenberg: Không thể xác định đồng thời một cách chính xác vị trí, hướng chuyển động và tốc độ của hạt vi mô (electron)

Theo quan niệm cơ học lượng tử electron có tính chất hạt và tính chất sóng với phương trình sóng là:

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

Trong đó:

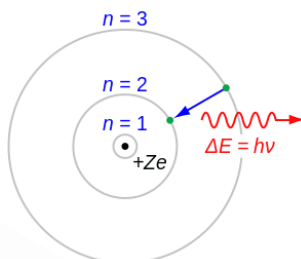
- + ψ : Hàm số sóng với biên độ 3 chiều
- + h : Hằng số Planck
- + V : Thế năng, E : Năng lượng toàn phần của hạt
- + x, y, z : Tọa độ của hạt

2. Đám mây electron (OA) và các đặc trưng của của OA

Khái niệm: Đám mây electron là vùng không gian gần hạt nhân trong đó xác suất có mặt của electron $\geq 90\%$

2.1 Các số lượng tử

a/ Số lượng tử chính n



Giá trị

n	1	2	3	4	5	6	7
Lớp	K	L	M	N	O	P	Q

Ý nghĩa:

- Xác định kích thước OA (đám mây e): n càng tăng kích thước càng lớn
- Xác định năng lượng của OA: n càng tăng năng lượng càng lớn
- Các OA hay electron có cùng số n thì gọi là các OA cùng một lớp hay các e cùng một lớp

b/ Số lượng tử phụ l

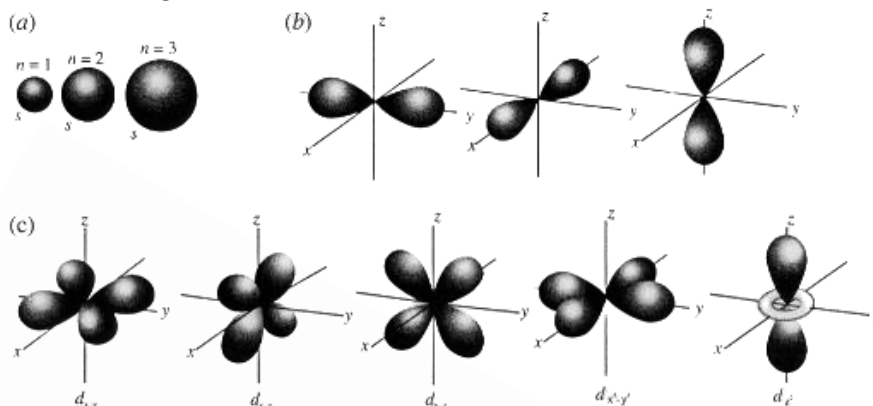
Giá trị của số lượng tử l của OA phụ thuộc vào số lượng tử n của OA đó. Tổng quát OA thuộc lớp n thì giá trị l từ 0 đến $n-1$

l	0	1	2	3	4	...
Phân lớp	s	p	d	f	g

Ví dụ: OA thuộc lớp 3 thì có giá trị l từ 0 đến 2

Ý nghĩa:

- Nó cho biết hình dạng của OA



- Xác định năng lượng của OA. Cụ thể l càng tăng thì năng lượng OA càng lớn

Nhận xét: Năng lượng một OA hoặc electron sẽ phụ thuộc vào 2 số lượng tử là n và l

Xác định kí hiệu phân lớp sau đây không tồn tại: $1p$, $2s$, $3p$, $3f$, $4g$, $5f$?

Tổng quát (với m là lớp):

-Tại phân lớp m_s có 1 OA:

--

Tại phân lớp m_p có 3 OA:

--	--	--

Tại phân lớp m_d có 5 OA:

--	--	--	--	--

Tại phân lớp m_f có 7 OA:

--	--	--	--	--	--	--

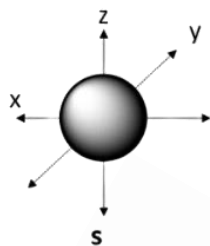
c/ Số lượng tử m_l

Giá trị của số lượng tử m_l của OA phụ thuộc vào số lượng phụ l của OA đó. Tổng quát OA có số lượng tử phụ là l thì m_l sẽ có giá trị từ $-l$ đến $+l$

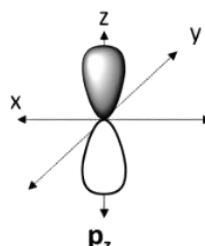
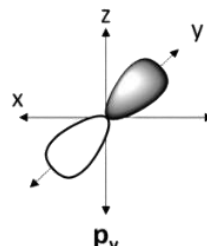
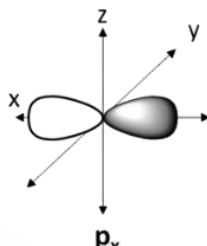
Ví dụ: OA có $l = 2$ thì giá trị m_l của OA có thể nhận từ -2 đến 2

Ý nghĩa: Xác định định hướng của OA trong không gian

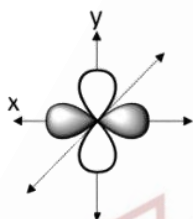
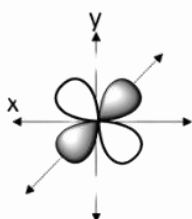
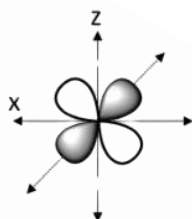
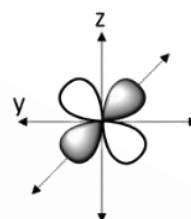
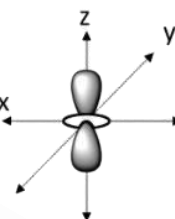
Cần nhớ, một phân lớp có tối đa $(2l+1)$ số OA và trong lớp n , có số OA tối đa là n^2



1)OA nhóm s



2)OA nhóm p

 $d_{x^2-y^2}$  d_{xy}  d_{xz}  d_{yz}  d_{z^2}

3)OA nhóm d

Lưu ý, sự định hướng p_z và d_{z^2} sẽ tương ứng với $m_l = 0$. Còn tất cả các trường hợp còn lại không quy định

Nhận xét: Với 3 bộ số lượng tử n, l, m_l ta có thể xác định được duy nhất một OA

Xác định OA có $n=3, l=2, m_l = -1$, quy định m_l đi từ $-l$ đến $+l$?

Xác định số OA có thể có tương ứng với các kí hiệu:

$$3p_x, 5s, 6d_{x^2-y^2}, n = 4, 3f$$

c/ Số lượng tử spin m_s

Xác định chiều quay của electron có giá trị bằng $-\frac{1}{2}$ hoặc $+\frac{1}{2}$

Quy ước

- Mỗi ô vuông OA sẽ chứa tối đa 2e
- $m_s = +\frac{1}{2}$ electron quay theo chiều kim đồng hồ. Khi biểu diễn trong ô vuông lượng sẽ có mũi tên hướng lên
- $m_s = -\frac{1}{2}$ electron quay theo ngược kim đồng hồ. Khi biểu diễn trong ô vuông lượng sẽ có mũi tên hướng xuống

Nhận xét: Trạng thái của một electron được xác định bằng 4 số lượng tử n, l, m_l, m_s

Ngoài ra:

- Một phân lớp có tối đa $(2l+1)$ số OA và $2(2l+1)$ số electron

Ví dụ:

- Phân lớp s (1OA): Có tối đa 2 electron
- Phân lớp p (1OA): Có tối đa 6 electron
- Phân lớp d (1OA): Có tối đa 10 electron
- Phân lớp f (1OA): Có tối đa 14 electron
- Trong lớp n, có số OA tối đa là n^2 , số electron tối đa là $2n^2$. Ví dụ ở lớp 5 thì số OA tối đa trong lớp đó là 25

Ví dụ: Cho cấu hình e của Photo ($Z=15$) như sau $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$. Hãy vẽ tất cả các OA của P

3. Cấu hình electron của nguyên tử nhiều electron

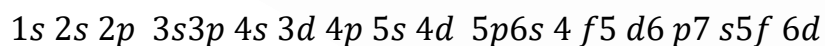
3.1 Nguyên lý bền vững

- Trong nguyên tử, điện tử được phân bố vào các OA nguyên tử sao cho tổng năng lượng của nguyên tử là thấp nhất
- Lưu ý, nguyên tử được sắp xếp sao cho tổng năng lượng là thấp nhất được gọi là trạng thái cơ bản, những trạng thái có tổng năng lượng cao hơn gọi là trạng thái kích thích

3.2 Quy tắc Klechcowski

Trong một nguyên tử nhiều electron, trật tự điền các electron theo thứ tự tăng dần của $(n+l)$. Nếu 2 phân lớp có cùng $n+l$ thì sẽ xếp dựa vào n tăng dần

Học thuộc:



3.3 Nguyên lý ngoại trừ Pauli:

- Không thể tồn tại 2 electron có đặc trưng cùng 4 số lượng tử
- Một AO chỉ có thể chứa tối đa 2 electron có spin ngược dấu
- Một phân lớp có tối đa $(2l+1)$ số OA và $2(2l+1)$ số electron

Ví dụ:

- Phân lớp s (1OA): Có tối đa 2 electron
- Phân lớp p (1OA): Có tối đa 6 electron
- Phân lớp d (1OA): Có tối đa 10 electron

- Phân lớp f (10A): Có tối đa 14 electron
- Trong lớp n, có số OA tối đa là n^2 , số electron tối đa là $2n^2$. Ví dụ ở lớp 5 thì số OA tối đa trong lớp đó là 25

Một số quy ước

- Các AO được biểu diễn bằng các ô lượng tử
- Mũi tên hướng lên chỉ các electron có $m_s = +\frac{1}{2}$ và ngược lại
- Quy ước giá trị ml từ -l đến +l hay +l đến -l sẽ tùy vào yêu cầu đề

Hai electron trong cùng 1 ô lượng tử (OA) gọi là cặp e ghép đôi. Nếu ô lượng tử chỉ có 1 e người ta gọi nó là e độc thân

Nguyên tử hay Ion nào có e độc thân thì sẽ có tính thuận từ và ngược lại

3.4 Quy ước Hund

Các electron có khuynh hướng phân bố vào các ô lượng tử sao cho tổng spin cực đại (số electron độc thân lớn nhất). Vậy trong cùng phân lớp ta sẽ điền mũi tên đi lên trước.

Ví dụ: Vẽ ô lượng tử của $3p^5$, $6f^4$ và xác định 4 số lượng tử của electron cuối cùng ?

3.5 Thực hành viết cấu hình e nguyên tử

- Những nguyên tử, Ion có số electron là $2n^2$ gọi là đạt cấu hình lớp bão hòa
- Những nguyên tử, Ion có phân lớp cuối cùng s^2, p^6, d^{10}, f^{14} gọi là đạt cấu hình phân lớp bão hòa

Đặc biệt, các nguyên tử như $Cr(3d^5 4s^1)$ với $Z=24$; $Mo(4d^5 5s^1)$ với $Z=42$;
 $Cu(3d^{10} 4s^1)$ với $Z = 29$, $Ag(4d^{10} 5s^1)$ với $Z = 47$

Viết cấu hình e của nguyên tử X ($z=34$), xác định số electron độc thân và X thuận từ hay là nghịch từ?

3.6 Cấu hình electron của Ion

Đối với cation (Ion âm), tính lại số lượng electron của Ion sau đó viết cấu hình electron của nguyên tử theo các quy tắc như bình thường.

Đối với anion, viết cấu hình e của nguyên tử như bình thường, sau đó sắp xếp lại theo thứ tự theo số lớp tăng dần. Sau đó thực hiện bỏ bớt số electron từ OA có n và l lớn nhất

Ví dụ: hãy viết cấu hình e của Cl^{1-} ($Z = 17$), Cu^{2+}

4. Lớp ngoài cùng, phân lớp cuối cùng, electron cuối cùng

- Lớp ứng với n lớn nhất trong cấu hình e ta nói là lớp ngoài cùng
- Phân lớp ứng với mức năng lượng cao nhất theo quy tắc Klechcowski gọi là phân lớp cuối cùng

Ví dụ: Xác định các số lượng tử của e lớp ngoài cùng và phân lớp cuối cùng của Cu ($Z=24$)

5. Electron hóa trị

Là electron có khả năng thực hiện liên kết hóa học, chúng thường thuộc lớp ngoài cùng hoặc phân lớp đang thực hiện xây dựng lớp vỏ điện tử. Electron hóa trị thường là $ns, np, (n-1)d, (n-2)f$

6. Đối với nguyên tử, Ion có một electron

Ví dụ: H, He^+, Li^{2+}

Mọi tính chất đều giống với nguyên tử nhiều electron nhưng khác ở quy tắc Klechcowski. Cụ thể năng lượng OA trong nguyên tử 1 e chỉ phụ thuộc vào n , mọi OA trong cùng một lớp đều có phân lớp bằng nhau

$$1s < 2s = 2p < 3s = 3p = 3d < \dots$$

