

HÓA ĐẠI CƯƠNG – PHẦN CẤU TẠO

Chương 12: Hệ số chắn - Quy tắc Slater

Đại học Khoa Học Tự Nhiên tp HCM
2012

Mô hình tính năng lượng electron trong nguyên tử nhiều electron

Mô hình để đánh giá lực hút của hạt nhân lên một electron nào đó trong nguyên tử:

- các electron ở xa nhân hơn electron đang xét sẽ không ảnh hưởng tới sức hút của nhân với electron đang xét,
- các electron ở gần nhân hơn electron đang xét sẽ gây nên hiệu ứng chắn (screening effect, shielding effect), làm cho nhân hút electron này với điện tích hiệu dụng Z_{eff} yếu hơn Z của hạt nhân.

Qui tắc Slater: là qui tắc kinh nghiệm để tính điện tích hiệu dụng (Z_{eff}) của nhân tác dụng lên electron trong nguyên tử nhiều electron, trong đó:

$$Z_{\text{eff}} = Z - S$$

Z : điện tích hạt nhân của nguyên tử

S : hằng số chắn

Tính Z_{eff}

$$Z_{\text{eff}} = Z - S$$

Z: điện tích hạt nhân của nguyên tử

S: hằng số chắn

Giá trị của S được ước tính như sau:

1. Viết cấu hình electron nguyên tử theo các nhóm với trật tự như sau:
(1s), (2s, 2p), (3s, 3p), (3d), (4s, 4p), (4d), (4f), (5s, 5p)...
2. Đối với electron đang xét, các electron ở nhóm phía ngoài theo trật tự của dãy trên: không có hệ số chắn.
3. Nếu electron đang xét thuộc về nhóm (ns, np):
 - Mỗi electron trong cùng nhóm (ns, np) đóng góp $S = 0,35$
 - Mỗi electron trong lớp (n-1) đóng góp $S = 0,85$.
 - Mỗi electron trong lớp (n-2) trở vào trong đóng góp $S = 1$.
4. Nếu electron đang xét là electron nd hoặc nf:
 - Mỗi electron trong nhóm nd và nf đóng góp $S = 0,35$.
 - Tất cả các electron ở các nhóm bên trong theo trật tự dãy (1) đóng góp $S = 1$.

Áp dụng qui tắc Slater

- Năng lượng của các phân lớp electron trong nguyên tử được tính theo công thức sau:

$$E = -13,6 \frac{Z_{eff}^2}{n^2} (eV)$$

Với:	n	1	2	3	4	5	6
	n*	1	2	3	3,7	4	4,2

- Năng lượng nguyên tử: tổng năng lượng các electron trong nguyên tử
- Năng lượng ion hóa thứ nhất: $I_1 = E_{M+} - E_M$

Lưu ý: qui tắc Slater chỉ có tính kinh nghiệm, gần đúng

Bài tập

- Dùng qui tắc Slater, xét 2 cấu hình electron có thể có của K:
(1) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^1$, và (2) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1$, xem cấu hình electron nào là bền hơn.
- So sánh năng lượng orbital của 2 cấu hình của Mn ($Z = 25$):
(1) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^2$ và (2) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^7$.
- Tính năng lượng của Fe và Fe^{2+} , chứng tỏ rằng nguyên tố d có electron điền vào các vân đạo ns trước $(n-1)d$, nhưng khi mất electron, sẽ mất electron ns trước.
- Xác định năng lượng ion hóa thứ nhất của nguyên tử Si ($Z = 14$) và so sánh với giá trị thực nghiệm (8,2 eV).
- So sánh năng lượng ion hóa nguyên tử của K và Ca.
- So sánh Z_{eff} (4s) của các nguyên tử K, Ca, Sc, Ti, V.