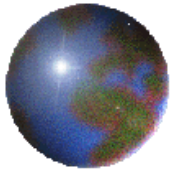


Chương 1:

CẤU TẠO NGUYÊN TỬ VÀ HỆ THỐNG TUẦN HOÀN CÁC NGUYÊN TỐ HÓA HỌC

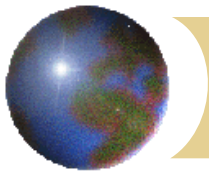
cuu duong than cong . com

(Thời lượng: 5t LT + 2t BT)



1. NHỮNG KHÁI NIỆM VÀ ĐỊNH LUẬT CƠ SỞ CỦA HÓA HỌC

cuu duong than cong . com



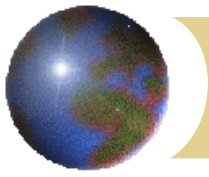
1.1 Nguyên tử và phân tử

✚ **Nguyên tử** là tiểu phân nhỏ nhất của một nguyên tố hóa học, không thể chia nhỏ hơn được nữa về mặt hóa học và trong phản ứng hóa học nguyên tử không thay đổi.

Ví dụ: Nguyên tử Na, Cu, H, O. . .

✚ **Phân tử** là tiểu phân nhỏ nhất của một chất có khả năng tồn tại độc lập và không thể chia nhỏ hơn được nữa mà không mất đi những tính chất hóa học của nó.

Ví dụ: Phân tử HCl, NaOH

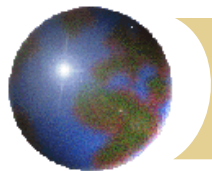


1.2 Khối lượng nguyên tử, khối lượng phân tử

- ❖ Khối lượng nguyên tử theo đơn vị thông thường (g, kg) thường rất nhỏ → sử dụng đơn vị khối lượng quy ước.
- ❖ Sử dụng 1/12 khối lượng nguyên tử ^{12}C làm đơn vị quy ước: đơn vị khối lượng nguyên tử (đvklnt).

$$1\text{đvklnt} = 1,66 \cdot 10^{-27}\text{kg}$$

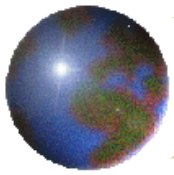
cuu duong than cong . com



1.2 Khối lượng nguyên tử, khối lượng phân tử

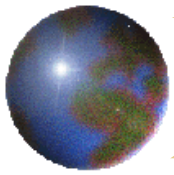
- ❖ **Khối lượng nguyên tử**
(tương đối) của một
nguyên tố là khối lượng
tính bằng đơn vị quy ước
của một nguyên tử nguyên
tố đó.

Ký hiệu	Tên gọi	KLNT (đvklnt)
H	Hydro	1
O	Oxy	16
Na	Natri	23
Fe	Sắt	56
Cu	Đồng	64
N	Nitơ	14



1.2 Khối lượng nguyên tử, khối lượng phân tử

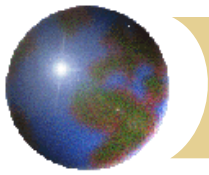
- ✚ **Khối lượng phân tử** (tương đối) của một chất là khối lượng tính bằng đơn vị quy ước của một phân tử chất đó.
- ✚ **Cách tính:** Cộng các KLNT của tất cả các nguyên tố tham gia trong phân tử.



1.3 Khái niệm mol

- ❖ Mol là lượng chất chứa $6,023 \cdot 10^{23}$ tiểu phân cấu trúc của chất. Tiểu phân này có thể là nguyên tử, phân tử hay ion...
- ❖ Số $6,022 \cdot 10^{23}$: gọi là số Avogadro (ký hiệu N_0).

cuu duong than cong . com



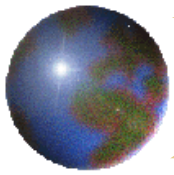
1.4 Đơn chất và hợp chất

❖ **Đơn chất** là chất mà phân tử của nó chỉ gồm các nguyên tử của **một nguyên tố** liên kết với nhau.

Ví dụ: Cu, H₂, Cl₂, O₂. . .

❖ **Hợp chất** là chất mà phân tử của nó gồm những nguyên tử của các nguyên tố **khác loại** liên kết với nhau.

Ví dụ: HCl, NaCl, H₃PO₄. . .

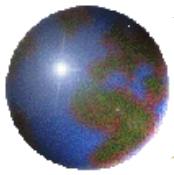


1.5 ĐỊNH LUẬT BẢO TOÀN KHỐI LƯỢNG

- ✚ Khối lượng của các chất tham gia phản ứng bằng khối lượng của các chất sản phẩm phản ứng (Lomonoxov- 1756). Ví dụ :



- ✚ Tuy đònh luật có sự hạn chế nhưng vẫn giữ nguyên giá trị và ý nghĩa với các nhà hóa học

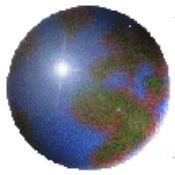


1.6 Phương trình trạng thái khí *ko*

✿ Đối với khí lý tưởng

$$PV = nRT \quad \text{hay} \quad PV = \frac{m}{M} RT$$

P	:	áp suất chất khí
V	:	thể tích
M	:	khối lượng, g
T	:	nhiệt độ tuyệt đối;
n	:	số mol khí;
R	:	hằng số khí.



1.6 Phương trình trạng thái khí

Giá trị của R =?

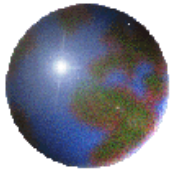
✚ Nếu P đo bằng Pa ($\text{kg.m}^{-1}\text{s}^{-1}$), V đo bằng m^3 thì $R = 8,314 \text{ J/mol.độ}$

cuu duong than cong . com

✚ Nếu P đo bằng mmHg, V đo bằng ml thì $R = 62400 \text{ mmHg/mol.độ}$

cuu duong than cong . com

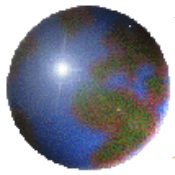
✚ Nếu P đo bằng atm, V đo bằng lít thì $R = 0,082 \text{ atm.lít/mol.độ}$



2. KHÁI NIỆM VỀ NGUYÊN TỬ

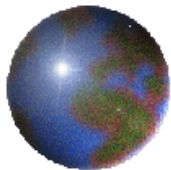
cuu duong than cong . com

cuu duong than cong . com



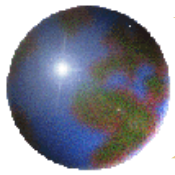
2.1 Nguyên tử và các hạt electron, proton, neutron

- ✚ **Nguyên tử** được tạo thành từ những tiểu phân nhỏ hơn là electron (ký hiệu e) và hạt nhân.
- ✚ **Electron**: mang điện tích âm. Trong nguyên tử, các electron chuyển động xung quanh hạt nhân tạo nên lớp vỏ electron.
- ✚ **Hạt nhân**: được cấu tạo chủ yếu từ các hạt proton (ký hiệu p) và neutron (ký hiệu n). Proton mang điện tích dương, còn neutron không mang điện.



2.1 Nguyên tử và các hạt electron, proton, neutron

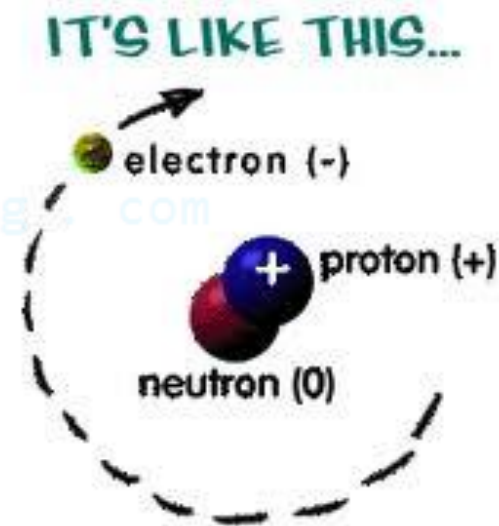
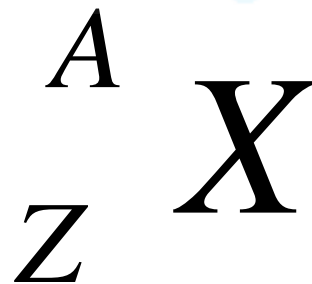
Hạt	Khối lượng		Điện tích		
	Tuyệt đối	Tương đối	Tuyệt đối		Tương đối
	Kg	đvC	Culong	Đơn vị tĩnh điện	Đơn vị e
Electron	$9,109390.10^{-31}$	0,000549	$-1,602177.10^{-19}$	$-4,802298.10^{-10}$	-1
Proton	$1,672623.10^{-27}$	1,007277	$+1,602177.10^{-19}$	$+4,802298.10^{-10}$	+1
Neutron	$1,674929.10^{-27}$	1,008665	0	0	0

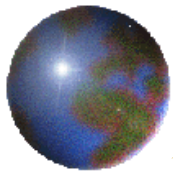


2.1 Nguyên tử và các hạt electron, proton, neutron

- ✚ Khối lượng hạt nhân = $N + Z$
- ✚ Tổng $A = N + Z$ được gọi là **số khối**
- ✚ Một nguyên tử được đặc trưng đầy đủ bằng số khối A và số Z

✚ Ký hiệu



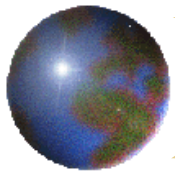


2.1 Nguyên tử và các hạt electron, proton, neutron

✚ Ví dụ: $^{35}_{17}\text{Cl}$ cho biết điều gì?

- ✓ Nguyên tố hóa học: Cl
- ✓ Số hiệu nguyên tử là 17
- ✓ Số khối là 35

Suy ra được điều gì nữa không?



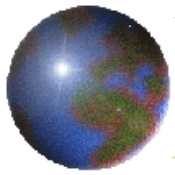
Hiện tượng \square ồng vị

- ✚ Các nguyên tử của cùng một nguyên tố có cùng số Z nhưng khác nhau về số N (nên khác về số A).

cuu duong than cong . com

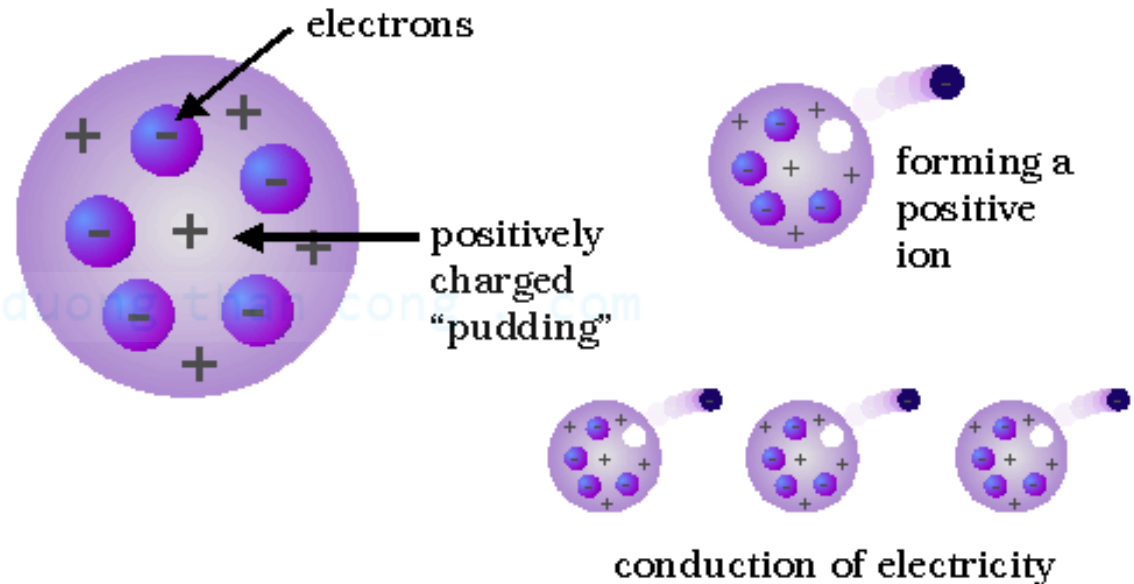
- ✚ Nguyên tử khối trung bình?

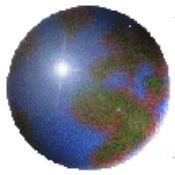
Ví dụ: Clo trong tự nhiên là hỗn hợp của hai đồng vị ^{35}Cl chiếm 75,77% và ^{37}Cl . Tính nguyên tử khối trung bình của Clo.



2.2 Thuyết cấu tạo nguyên tử Bohr

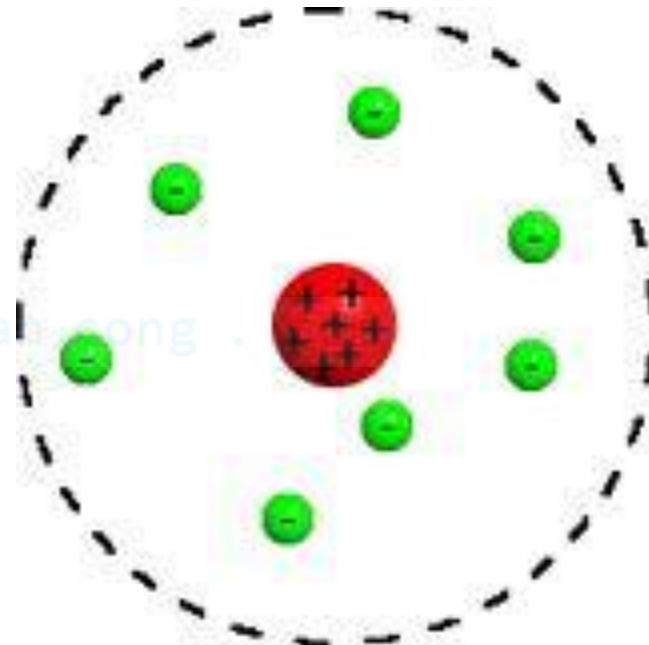
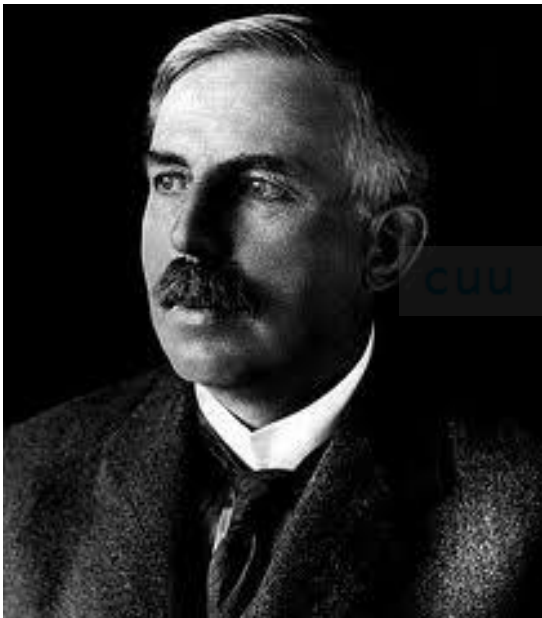
- Thuyết cấu tạo nguyên tử Thomson (1903): nguyên tử gồm các điện tích dương phân bố đồng đều trong toàn bộ thể tích nguyên tử và những electron chuyển động giữa điện tích dương đó.

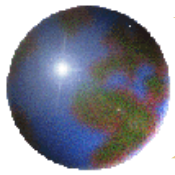




2.2 Thuyết cấu tạo nguyên tử Bohr

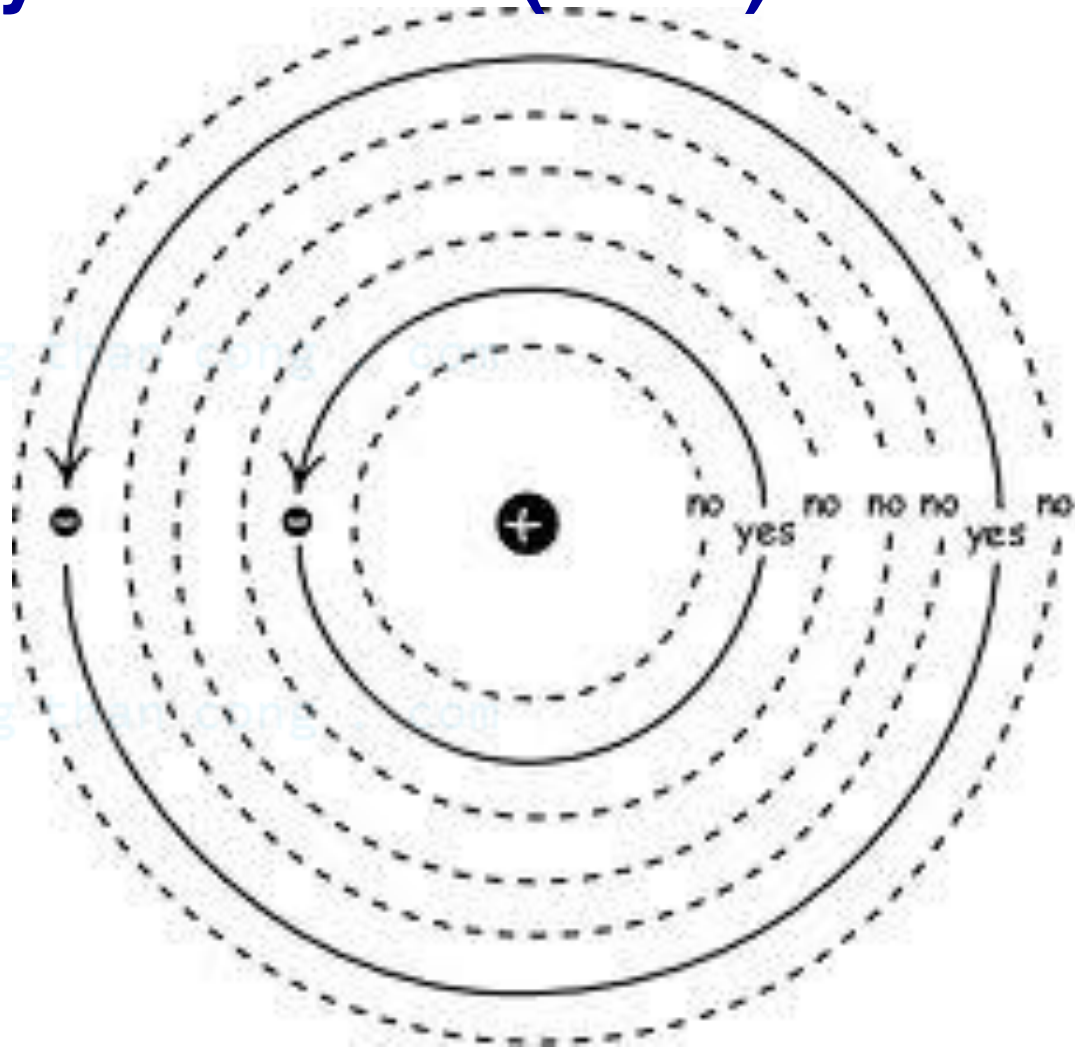
- Thuyết cấu tạo nguyên tử Rutherford (1911): nguyên tử gồm hạt nhân tích điện dương tập trung phần lớn khối lượng nguyên tử và các electron tích điện âm quay xung quanh hạt nhân.

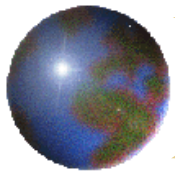




2.2 Thuyết cấu tạo nguyên tử Bohr

Thuyết cấu tạo nguyên tử Bohr (1913)

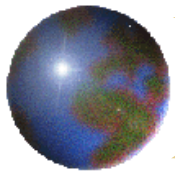




2.2 Thuyết cấu tạo nguyên tử Bohr

- ✚ Electron quay xung quanh hạt nhân **không phải trên những quỹ đạo bất kỳ mà trên những quỹ đạo tròn**, đồng tâm có bán kính nhất định gọi là những quỹ đạo bền (hay quỹ đạo cho phép).
- ✚ Khi quay trên những quỹ đạo bền này, electron không phát ra năng lượng điện tử.
- ✚ Năng lượng E chỉ phát ra hay hấp thu khi electron chuyển từ quỹ đạo bền này sang quỹ đạo bền khác và bằng hiệu số năng lượng của electron ở trạng thái đầu E_d và trạng thái cuối E_c

$$E = |E_d - E_c| = h \nu$$



2.2 Thuyết cấu tạo nguyên tử Bohr

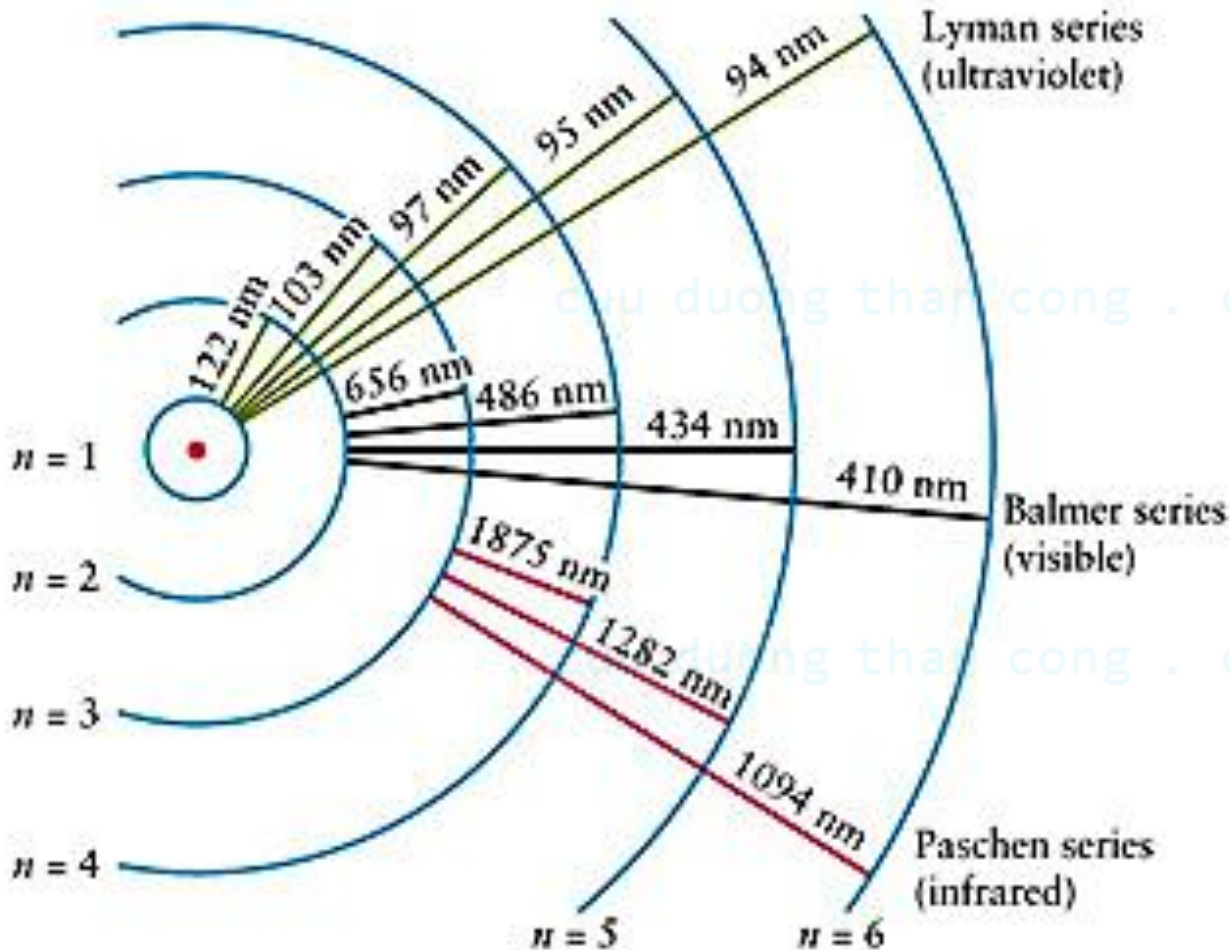
$$r = n^2 \frac{\epsilon_0 h^2}{\pi m e^2 Z} \qquad v = \frac{1}{n} \frac{Z e^2}{2 \epsilon_0 h}$$

$$E = \text{Động năng} + \text{Thế năng}$$

$$\text{Động năng} = mv^2/2 \qquad \text{Thế năng} = \frac{-Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

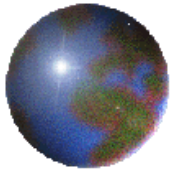
2.2 Thuyết cấu tạo nguyên tử Bohr

Cấu tạo nguyên tử Hydro theo Bohr



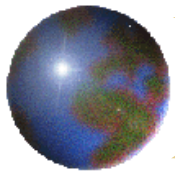
-Tính toán bán kính các quỹ đạo bên có thể có, tốc độ, năng lượng electron.

-Giải thích được bản chất quang phổ vạch nguyên tử.



3. CẤU TẠO NGUYÊN TỬ THEO CƠ HỌC LƯỢNG TỬ

cuu duong than cong . com



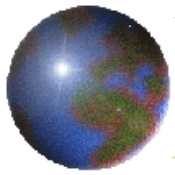
3.1 Các luận điểm cơ sở của cơ học lượng tử về sự chuyển động của hạt vi mô

✧ *Tính chất sóng hạt của các hạt vi mô*

Các hạt vi mô có cả **tính chất hạt** và **tính chất sóng**, nghĩa là chúng thể hiện đồng thời như những hạt và sóng.

❖ Phương trình thể hiện bản chất sóng – hạt:

$$\lambda \nu = c \quad E = h\nu \quad \lambda = \frac{h}{m \cdot c}$$



3.1 Các luận điểm cơ sở...

✚ Nguyên lý bất định Heisenberg (1927)

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

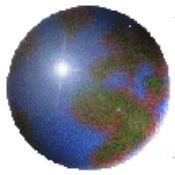
$$\Delta_x \cdot \Delta_v \geq \frac{\hbar}{m} = \frac{h}{2\pi m}$$

h : hằng số Plank ($6,626 \cdot 10^{-34}$ J.s)

m : khối lượng electron ($9,1 \cdot 10^{-31}$ kg)

Δ_x Độ bất định về vị trí.

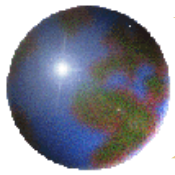
Δ_v Độ bất định về tốc độ.



3.1 Các luận điểm cơ sở...

Rút ra kết luận:

Đối với hạt vi mô, khi biết chính xác tốc độ chuyển động chúng ta không thể nói đến đường đi chính xác của nó, mà chỉ có thể nói đến *xác suất* có mặt của nó ở chỗ nào đó trong không gian.



3.1 Các luận điểm cơ sở...

❖ *Phương trình sóng Schrodinger (1926)*

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

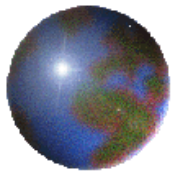
cuu duong than cong . com

m - khối lượng hạt vi mô; h - hằng số Plank;

E - năng lượng toàn phần của hạt vi mô

V - thế năng của hạt vi mô

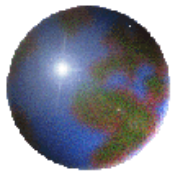
Ψ - hàm sóng đối với các biến x, y, z mô tả sự chuyển động của hạt vi mô ở điểm có tọa độ x, y, z



3.2 Trạng thái electron trong nguyên tử H và ion 1 electron. Các số lượng tử và ý nghĩa

Phương trình sóng Schrodinger đối với nguyên tử Hydro có dạng:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \Psi = 0$$



3.2 Trạng thái electron trong nguyên tử H và ion 1 electron. Các số lượng tử và ý nghĩa

✚ Giải phương trình:

Hàm sóng của electron luôn luôn chứa 3 thông số không thứ nguyên và là những số nguyên.

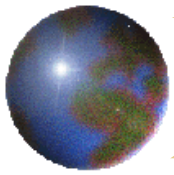
Gọi là những số lượng tử.

Ký hiệu là:

1. n

2. l

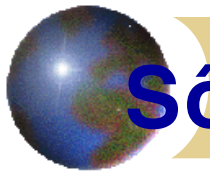
3. m_l



Đám mây electron *hay* orbital nguyên tử

□ Định nghĩa: vùng không gian gần hạt nhân, trong đó xác suất có mặt electron **khoảng 90%** và có hình dạng được xác định bởi bề mặt tạo thành từ các điểm có mật độ xác suất có mặt bằng nhau.

✿ Ví dụ: đám mây electron của electron duy nhất trong nguyên tử H có dạng khối cầu, bán kính $r = 0.53 \text{ \AA}$



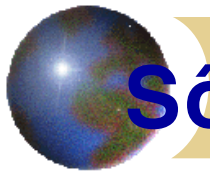
Số lượng tử chính n và mức năng lượng

- ✚ Số lượng tử chính n xác định trạng thái năng lượng của electron trong nguyên tử.

$$E_n = - \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 n^2 h^2} Z^2 = -2,18 \cdot 10^{-18} \frac{Z^2}{n^2} J = -13,6 \frac{Z^2}{n^2} eV$$

Số lượng tử chính có những giá trị nguyên dương từ 1 đến ∞

- ✚ Trạng thái năng lượng của electron được xác định bằng giá trị nhất định của n được gọi là **mức năng lượng**



Số lượng tử chính n và mức năng lượng

- ✚ Ở điều kiện bình thường electron ở mức năng lượng thấp.
- ✚ Khi hấp thu năng lượng nó sẽ chuyển lên mức năng lượng cao
Thời gian tồn tại ngắn
→ Xuất hiện các dãy quang phổ

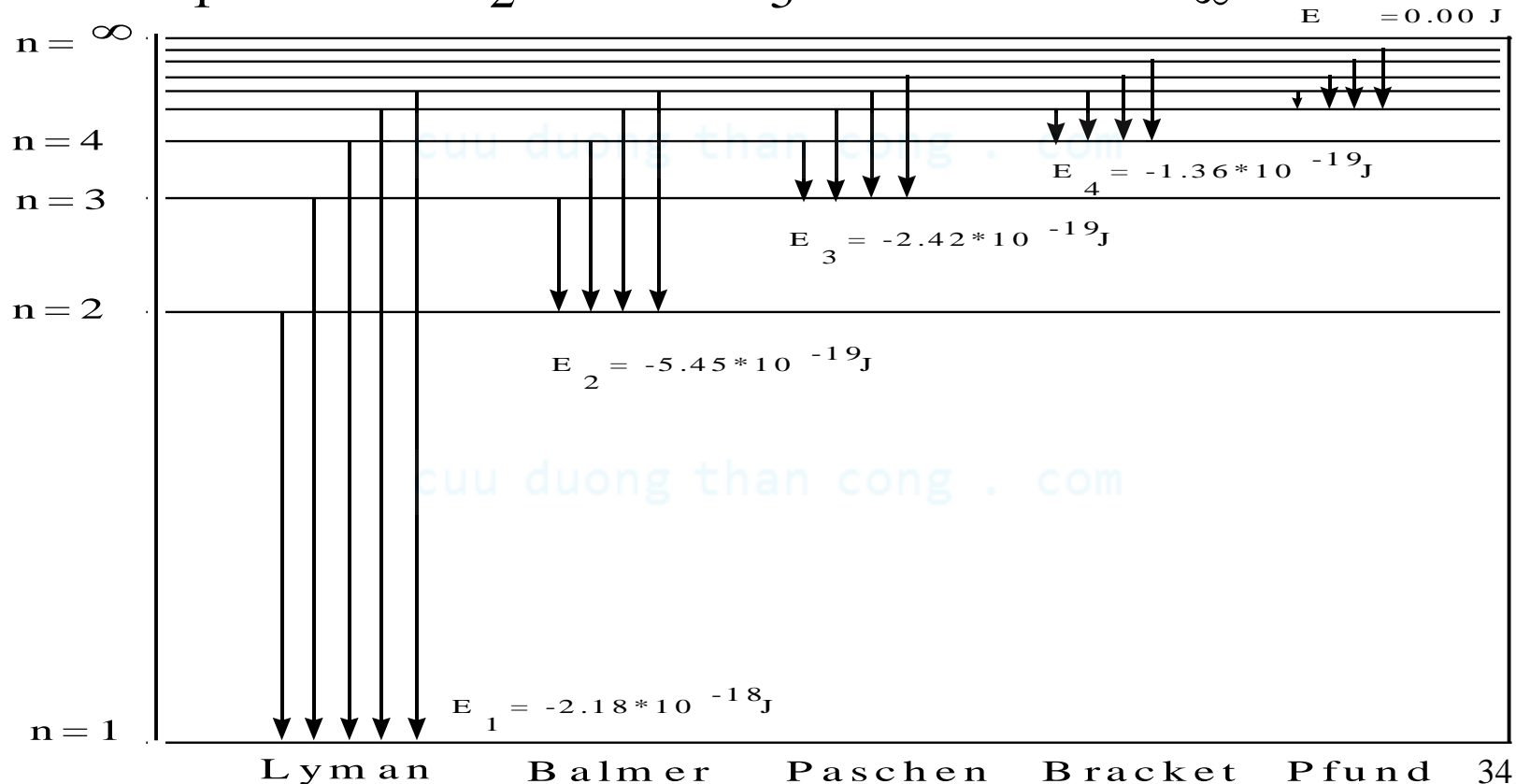


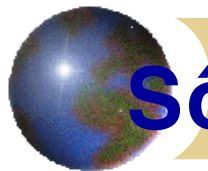
Số lượng tử chính n và mức năng lượng

Mức năng lượng có giá trị tăng theo giá trị của n :

n 1 2 3 ... ∞

E_n $E_1 < E_2 < E_3 \dots < E_\infty$





Số lượng tử chính n và mức năng lượng

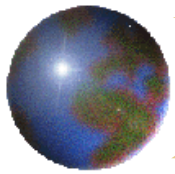
- Những electron được đặc trưng bằng cùng một số lượng tử chính n , nghĩa là cùng **mức năng lượng** hợp thành **lớp lượng tử** *hay* **lớp electron**.

cuu duong than cong . com

Số lớp lượng tử chính n	1	2	3	4	5	6...
Ký hiệu lớp electron	K	L	M	N	O	P...

cuu duong than cong . com

- Ngoài ra, số lượng tử chính n xác định kích thước đám mây electron.



Số lượng tử orbital l và hình dạng đám mây electron

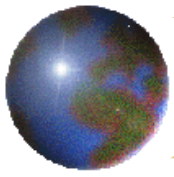
- ❖ Điều kiện lượng tử hóa: **đám mây electron không thể có hình dạng bất kỳ.**
- ❖ Hình dạng của đám mây electron được xác định hoàn toàn bằng số lượng tử orbital l.
- ❖ **Số lượng tử orbital** (*hay* số lượng tử phụ *hay* phương vị) có thể có các giá trị:

$$l = 0, 1, 2, 3, \dots, (n - 1)$$

Ví dụ: $n = 1 \rightarrow l = ?$

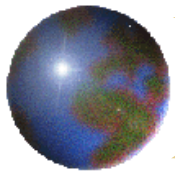
$$n = 2 \rightarrow l = ?$$

$$n = 3 \rightarrow l = ?$$



Số lượng tử orbital l và hình dạng đám mây electron

- ✚ Trạng thái năng lượng của electron của các electron ở **cùng mức năng lượng** không giống nhau hoàn toàn mà có **khác biệt chút ít**.
- ✚ Gọi trạng thái năng lượng của electron được đặc trưng bằng số lượng tử orbital l là **phân mức năng lượng**.
- ✚ l càng lớn thì phân mức năng lượng có giá trị càng cao.



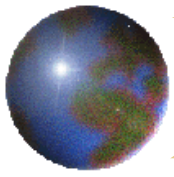
Số lượng tử orbital l và hình dạng đám mây electron

✚ Ký hiệu

Số lượng tử orbital	0	1	2	3	4	5...
Ký hiệu phân lớp electron	s	p	d	f	g	h...

Trạng thái của electron trong nguyên tử tương ứng với **những giá trị xác định của n và l** được biểu diễn bằng tổ hợp của n và l như sau: 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d, 4f...

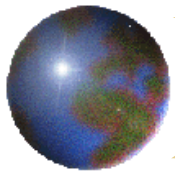
Tổ hợp này cho biết: **phân mức năng lượng** và **phân lớp electron**, **hình dạng đám mây electron**.



Số lượng tử orbital l và hình dạng đám mây electron

- ✚ Số lượng tử orbital l xác định hình dạng đám mây electron.
- ✚ Nghĩa là ứng với mỗi giá trị của l đám mây electron có hình dạng không đổi.

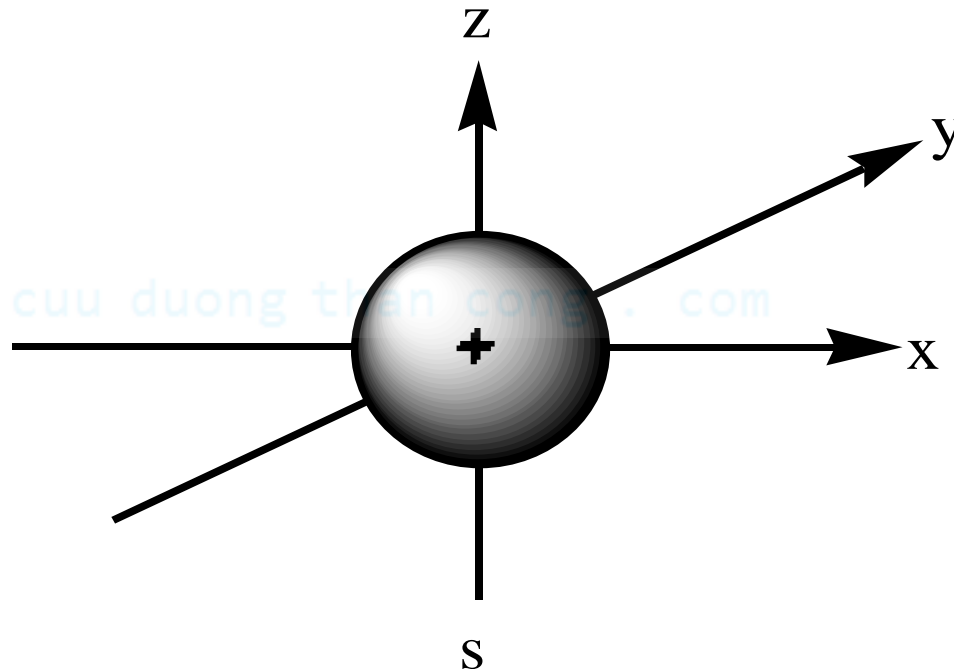
cuu duong than cong . com

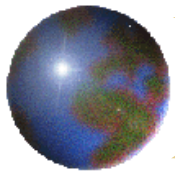


Số lượng tử orbital l và hình dạng đám mây electron

Trạng thái s ($l = 0$)

- ☼ Đám mây electron tương ứng với trạng thái s ($l = 0$) có dạng **khối cầu**.

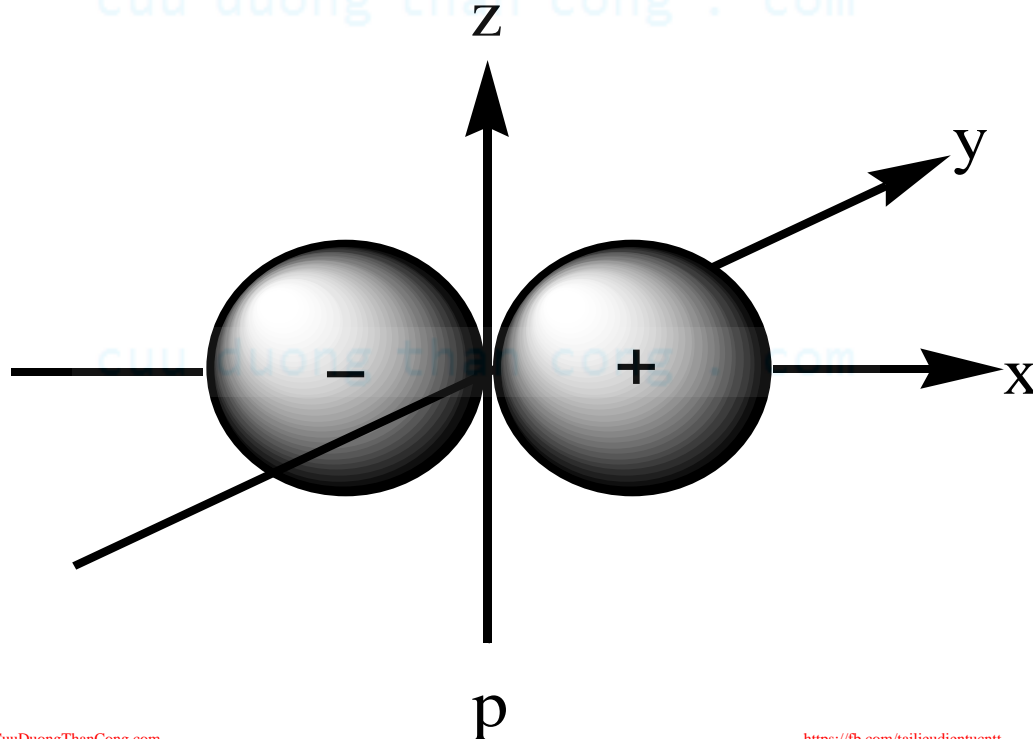


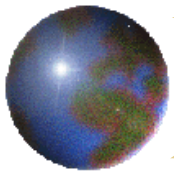


Số lượng tử orbital l và hình dạng đám mây electron

Trạng thái p ($l = 1$)

- Đám mây electron tương ứng với **trạng thái p** ($l = 1$) có dạng **2 khối cầu** biến dạng tiếp xúc nhau.

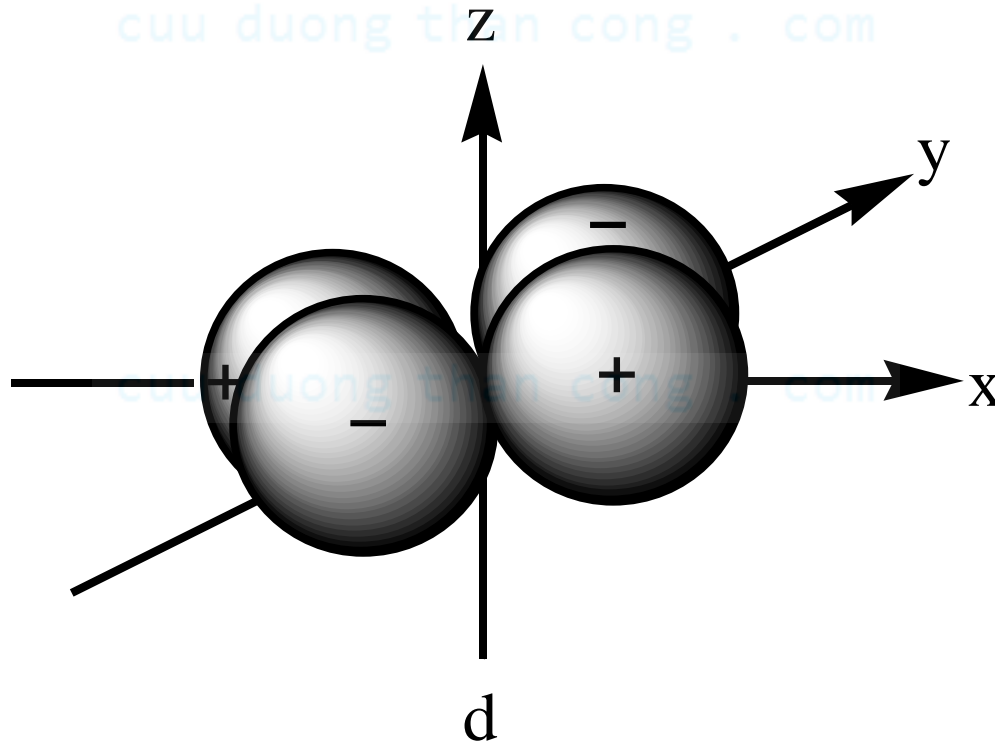


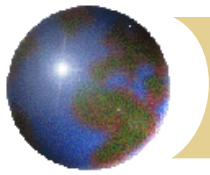


Số lượng tử orbital l và hình dạng đám mây electron

Trạng thái d ($l = 2$)

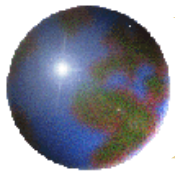
- ☼ Đám mây electron tương ứng với **trạng thái d** ($l = 2$) có dạng **4 khối cầu** biến dạng tiếp xúc nhau.





Số lượng tử từ m_l và các orbital nguyên tử

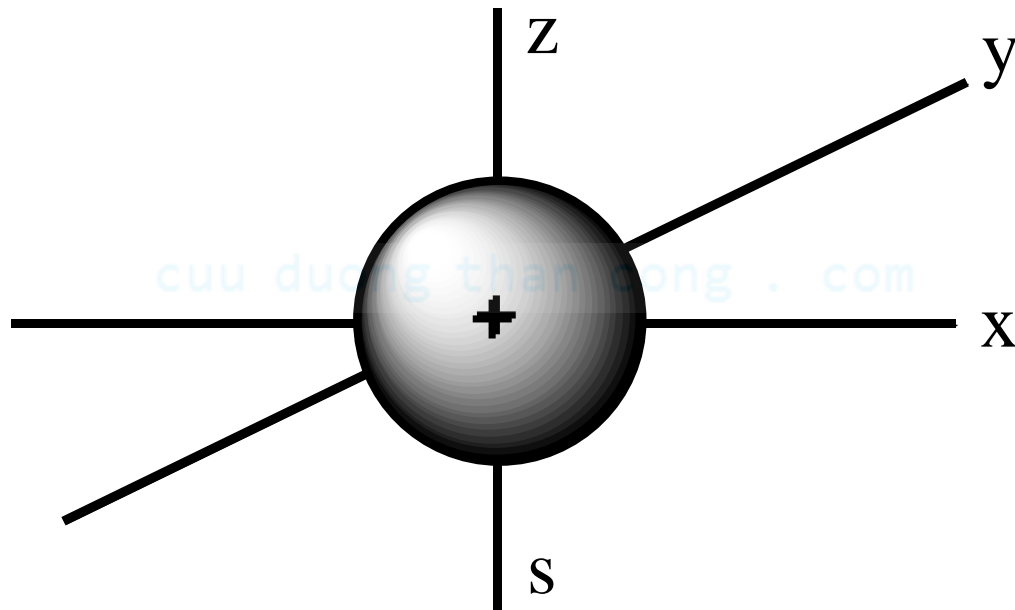
- ✚ Các đám mây electron **định hướng khác nhau** trong không gian theo những qui luật xác định bởi thông số thứ 3 là số lượng tử từ m_l .
- ✚ Số lượng tử từ m_l có những giá trị nguyên dương và âm. Cứ mỗi giá trị của l có **$(2l + 1)$** giá trị **m_l** , từ **$-l$ đến $+l$**
- ✚ Như vậy, ứng với mỗi phân mức năng lượng có **$(2l + 1)$** kiểu định hướng khác nhau của đám mây electron trong không gian.

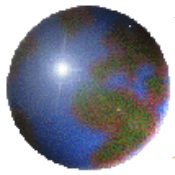


Số lượng tử từ m_l và các orbital nguyên tử

Orbital s

- Phân lớp s ($l = 0$) có một orbital (vì m_l chỉ có một giá trị $= 0$) nó có dạng khối cầu và được gọi là **orbital s**

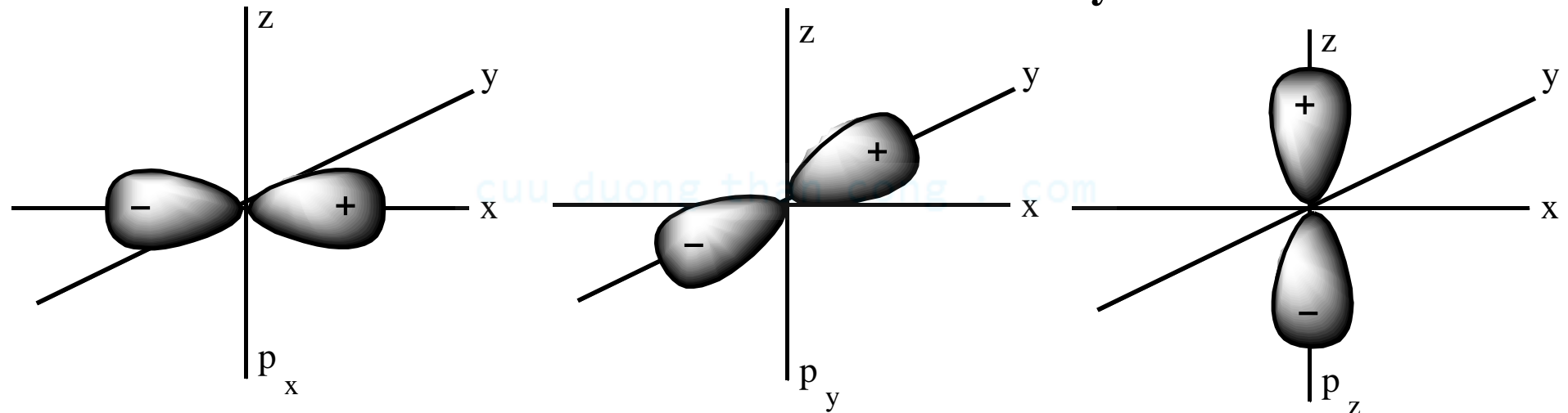


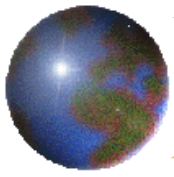


Số lượng tử từ m_l và các orbital nguyên tử

Orbital p_x , p_y , p_z

❖ Phân lớp p ($l = 1$) có ba orbital, chúng có dạng hai khối cầu tiếp xúc nhau và định hướng theo các trục x, y, z tương ứng với các giá trị $m_l = -1, 0, +1$, chúng được gọi là các orbital p_x , p_y , p_z

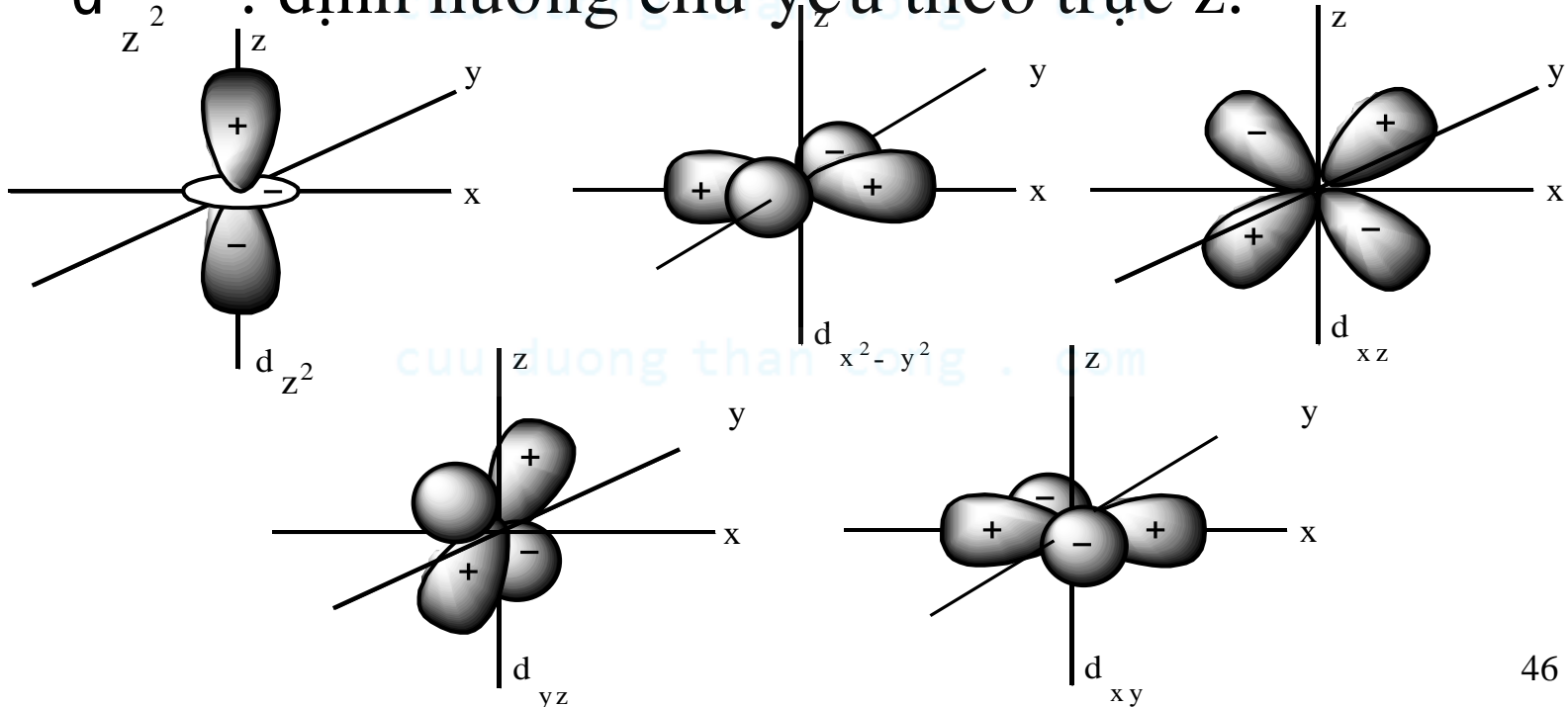


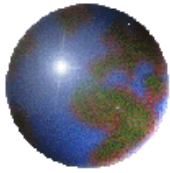


Số lượng tử từ m_l và các orbital nguyên tử

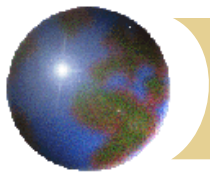
Orbital d (5 orbital)

- d_{xy} , d_{xz} , d_{yz} : định hướng theo các đường phân giác của các góc tạo bởi các trục ký hiệu tương ứng ;
- $d_{x^2-y^2}$: định hướng theo các trục x , y ;
- d_{z^2} : định hướng chủ yếu theo trục z .



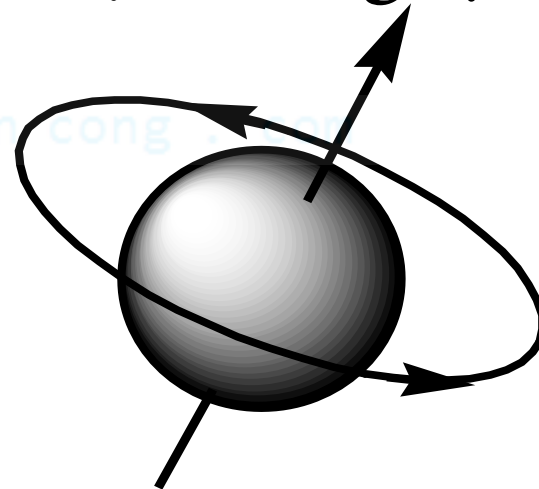
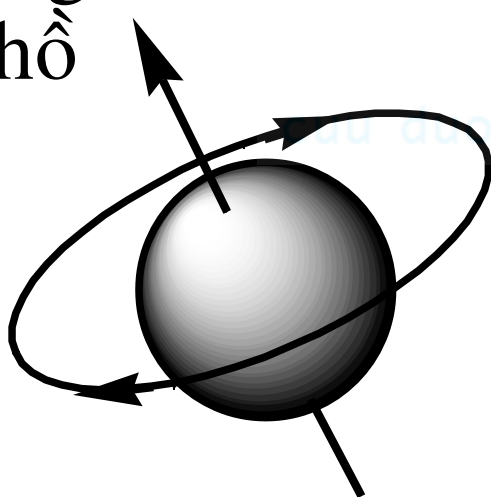


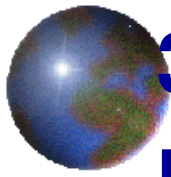
Mối liên hệ giữa các số lượng tử n , l và m_l



Số lượng tử spin m_s

- ✚ Số lượng tử spin hay số lượng tử từ spin m_s xác định **trạng thái chuyển động riêng** của electron.
- ✚ Sự chuyển động riêng của electron được giải thích bằng sự tự quay của electron quanh trục của mình.
- ✚ Số lượng tử từ spin chỉ có hai giá trị: $+1/2$ hoặc $-1/2$ ứng với chiều quay thuận và ngược chiều kim đồng hồ

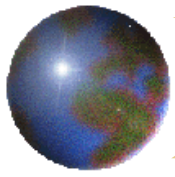




3.3 Trạng thái của electron trong nguyên tử nhiều electron và cấu hình electron của nguyên tử

Nhận xét:

- ✚ Trong nguyên tử một electron chỉ có tương tác hút giữa hạt nhân và electron.
- ✚ Trong nguyên tử chứa nhiều electron ngoài tương tác hút giữa electron và hạt nhân còn xuất hiện tương tác đẩy giữa electron và electron.



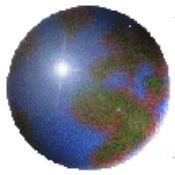
Trạng thái năng lượng của electron trong nguyên tử nhiều electron

✚ Trạng thái electron trong nguyên tử nhiều electron cũng được xác định hoàn toàn bởi bốn số lượng tử.

cuu duong than cong . com

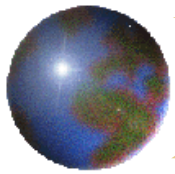
✚ Trạng thái năng lượng được xác định **không** những bằng số lượng tử chính n mà còn bởi cả số lượng tử orbital l

cuu duong than cong . com



Hiệu ứng chắn

- ❖ Hiệu ứng chắn đặc trưng cho **tương tác đẩy** của các lớp electron bên trong đối với các electron bên ngoài.
- ❖ Các electron bên ngoài hình như bị hạt nhân hút bởi điện tích $Z^* < Z$ của hạt nhân. Z^* gọi là điện tích hiệu dụng.
- ❖ $S = Z - Z^*$ gọi là **hiệu ứng chắn** (hay **hằng số chắn**) có ý nghĩa cho biết electron bên ngoài đã bị các lớp electron bên trong chắn một đại lượng là bao nhiêu đơn vị proton



QUY TẮC THỰC NGHIỆM SLATER

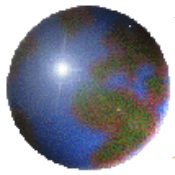
xác định hiệu ứng chắn

Viết cấu hình electron nguyên tử dưới dạng các nhóm:

$(1s)(2s2p)(3s3p)(3d)(4s4p)(4d)(4f)(5s5p)...$

Sau đó xét tiếp 3 trường hợp:

1. Đối với các electron trên các orbital ns, np
2. Đối với các electron trên các orbital nd, nf
3. Đối với electron trên orbital $1s$

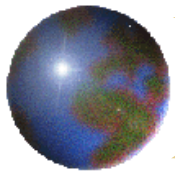


QUY TẮC THỰC NGHIỆM SLATER

xác định hiệu ứng chắn

1. Đối với các electron trên orbital ns , np :

- Đối với các electron bên phải nhóm:
không xét
- Các electron còn lại của nhóm: mỗi electron **góp 0,35** (đơn vị proton)
- Các electron ở lớp $(n-1)$: mỗi electron góp 0,85 (đơn vị proton)
- Các electron ở lớp $(n-2)$ và sâu hơn: mỗi electron góp 1 (đơn vị proton)



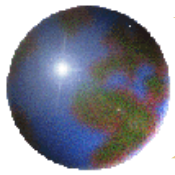
QUY TẮC THỰC NGHIỆM SLATER

xác định hiệu ứng chắn

2. Đối với các electron trên orbital nd, nf

- Các $1a, 1b$ vẫn áp dụng
- Các quy tắc $1c, 1d$ thay đổi như sau: đối với tất cả các electron bên trái nhóm: mỗi electron **góp 1** (đơn vị proton)

3. Đối với electron trên orbital $1s$: **góp 0,3** đơn vị proton

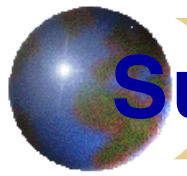


Hiệu ứng xâm nhập

- ✚ Các electron lớp bên ngoài **có thể xuyên qua các electron lớp bên trong** để xâm nhập vào gần hạt nhân.

cuu duong than cong . com

- ✚ Hiệu ứng xâm nhập ngược với hiệu ứng chắn.
- ✚ Electron xâm nhập càng mạnh thì sẽ bị hút càng mạnh và có năng lượng càng thấp.



Sự sắp xếp electron trong nguyên tử và cấu hình electron nguyên tử

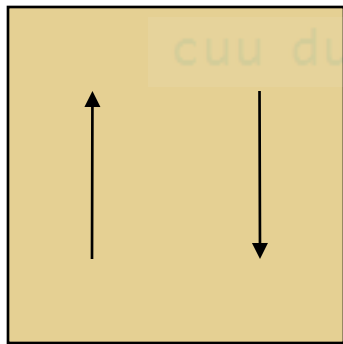
✚ **Nguyên lý ngoại trừ Pauli:** Trong nguyên tử không thể có 2 electron có cùng bốn số lượng tử (*khẳng định không thể có hai electron cùng có mặt một lúc tại thời điểm nào đó trong nguyên tử*).

➤➤➤ Mỗi orbital nguyên tử được đặc trưng bằng ba số lượng tử n , l , m_l nhất định chỉ có thể chứa **tối đa 2 electron** có spin khác nhau.

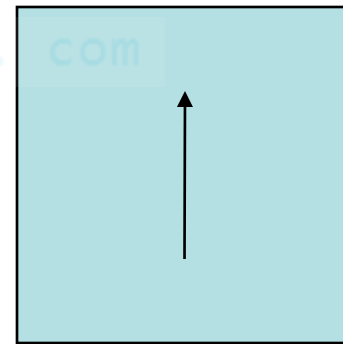


Sự sắp xếp electron trong nguyên tử và cấu hình electron nguyên tử

- ✚ Biểu diễn orbital bằng ô vuông (ô lượng tử) còn electron bằng mũi tên nhỏ.



Electron ghép đôi



Electron độc thân



Sự sắp xếp electron trong nguyên tử và cấu hình electron nguyên tử

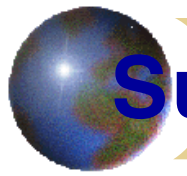
- ✚ Tính toán số electron tối đa trong lớp và phân lớp:

Trong lớp: $2n^2$

Trong phân lớp: $2(2l + 1)$

- ✚ Ví dụ:

Trong lớp M, trong phân lớp p, d có tối đa bao nhiêu electron?



Sự sắp xếp electron trong nguyên tử và cấu hình electron nguyên tử

- ✚ Nguyên lý vững bền: trạng thái bền vững nhất của electron trong nguyên tử là trạng thái ứng với năng lượng nhỏ nhất.

cuu duong than cong . com

➤➤➤ Trong nguyên tử các electron trước hết phải chiếm trạng thái có năng lượng thấp rồi mới đến trạng thái có năng lượng cao.

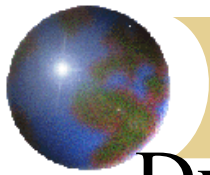
Như vậy: các electron lần lượt sắp vào các orbital có năng lượng từ **thấp đến cao**.



Sự sắp xếp electron trong nguyên tử và cấu hình electron nguyên tử

❖ **Quy tắc Hund:** trạng thái bền của nguyên tử tương ứng với sự sắp xếp electron thế nào cho trong giới hạn một phân mức năng lượng **giá trị tuyệt đối của tổng spin electron phải cực đại.**

➤➤➤ Trong giới hạn một phân lớp lượng tử các electron sẽ sắp xếp trên các orbital nguyên tử thế nào cho **số electron độc thân là cực đại.**

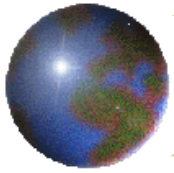


Quy tắc Kleshkovski

Dựa vào n và l để suy đoán trật tự sắp xếp electron vào các orbital nguyên tử:

✚ I: Sự sắp xếp electron vào các orbital nguyên tử theo chiều tăng điện tích hạt nhân nguyên tử xảy ra theo thứ tự từ những orbital có tổng số giá trị hai số $(n + l)$ **nhỏ hơn đến lớn hơn**.

✚ II: Sự sắp xếp electron vào các orbital nguyên tử có tổng số giá trị hai số lượng tử $(n + l)$ **như nhau** sẽ xảy ra theo hướng **tăng dần giá trị số lượng tử chính n** .



Quy tắc Kleshkovski

✚ Ví dụ 1: K ($Z=19$)

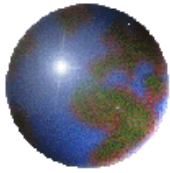
Electron thứ 19 sẽ sắp vào orbital 3d hay 4s?

cuuduongthancong.com

✚ Ví dụ 2: Sc ($Z=21$)

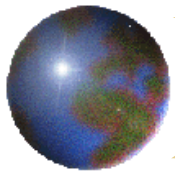
Electron thứ 21 sẽ sắp vào orbital 3d, 4p hay 5s (có $n+1$ như nhau)?

cuuduongthancong.com



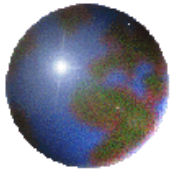
✚ Sơ đồ đơn giản trình bày trật tự sắp xếp electron vào các orbital nguyên tử?

cuu duong than cong . com

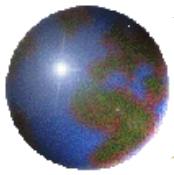


Cấu hình electron nguyên tử

- ✚ Để biểu diễn cấu trúc electron trong nguyên tử người ta hay dùng cấu hình electron nguyên tử.
- ✚ Cấu hình electron được biểu diễn bằng **tập hợp các ký hiệu trạng thái lượng tử của nguyên tử có chứa electron**, kèm theo ký hiệu này có ghi số electron được sắp xếp vào trạng thái đó dưới dạng số mũ.
- ✚ Ví dụ: N ($Z = 7$): $1s^2 2s^2 2p^3$



IV. HỆ THỐNG TUẦN HOÀN CÁC NGUYÊN TỐ HÓA HỌC



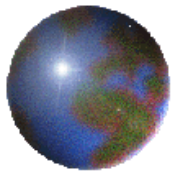
4.1 Định luật tuần hoàn

✚ Định luật:

Tính chất của các đơn chất cũng như dạng và tính chất của các hợp chất của những nguyên tố hóa học phụ thuộc vào **điện tích hạt nhân** nguyên tử của nguyên tố.

✚ Rút ra:

Điện tích hạt nhân nguyên tử là đại lượng **quyết định** và **đặc trưng** cho tính chất nguyên tố



4.2 Hệ thống tuần hoàn và cấu trúc electron nguyên tử

✚ Nhóm

- Các nhóm nguyên tố được bố trí thành cột dọc và có STT từ I đến VIII.
- Trong mỗi nhóm chia thành **phân nhóm chính** và **phân nhóm phụ**.
- Phân nhóm chính gồm những nguyên tố điển hình của nhóm, bắt đầu từ những nguyên tố chu kỳ 2 tạo thành cột dọc dài hơn
- Phân nhóm phụ bắt đầu từ những nguyên tố ở chu kỳ 4
- Lưu ý: phân nhóm phụ nhóm III có **phân nhóm phụ thứ cấp**

<http://www.ktf-split.hr/periodni/en/>

LANTHANIDE

Copyright © 1998-2003 EniG (eni@ktf-solit.hr)

ACTINIDE

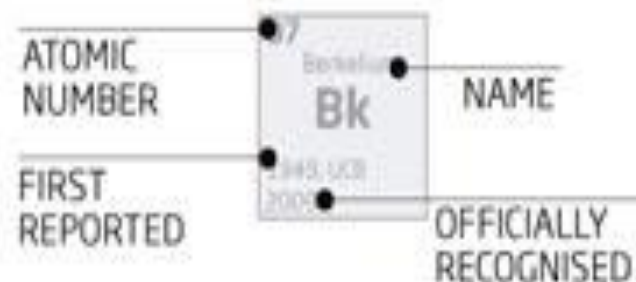
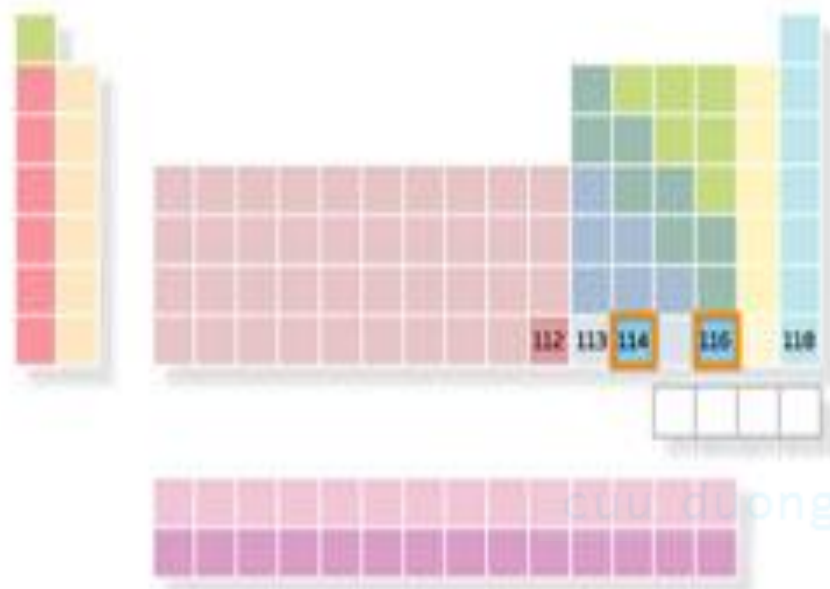
89 (227)	90 232.04	91 231.04	92 238.03	93 (237)	94 (244)	95 (243)	96 (247)	97 (247)	98 (251)	99 (252)	100 (257)	101 (258)	102 (259)	103 (262)
Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr
ACTINIUM	THORIUM	PROTACTINIUM	URANIUM	NEPTUNIUM	PLUTONIUM	AMERICIUM	CURIUM	BERKELIUM	CALIFORNIUM	EINSTEINIUM	FERMIUM	MENDELEVIUM	NOBELIUM	LAWRENCIUM

CuuDuongThanCong.com

<https://fb.com/tailieudientucntt>

Reaching the outer limits of the periodic table

©NewScientist



cuuduongthancong.com

REJECTED

APPROVED

APPROVED

REJECTED

112
Copernicium
Cn
1996, GSI
2009

113
Ununtrium
Uut
2003, JINR

114
Ununquadium
Uuq
1999, JINR
2011

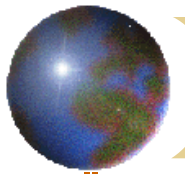
115
Ununpentium
Uup
2004, JINR

116
Ununhexium
Uuh
2001, JINR
2011

117
Ununseptium
Uus
N/A

118
Ununoctium
Uuo
2006, JINR

JINR = joint institute for Nuclear Research, Dubna, Russia.
GSI = Institute for Heavy Ion Research, Darmstadt, Germany
<https://fb.com/tailieudientucntt>



4.2 Hệ thống tuần hoàn và cấu trúc electron nguyên tử

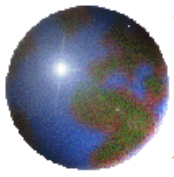
✚ Chu kỳ

Chu kỳ của nguyên tố được bố trí theo hàng ngang và có STT từ 1 đến 7.

✚ Số nguyên tố trong mỗi chu kỳ tuân theo quy luật nhất định:

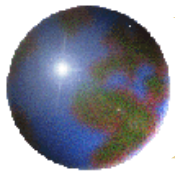
Ba chu kỳ đầu là **chu kỳ nhỏ**. Chu kỳ 1 là **chu kỳ đặc biệt** gồm 2 nguyên tố, 2 chu kỳ còn lại mỗi chu kỳ có 8 nguyên tố.

Chu kỳ 4, 5 có 18 nguyên tố (8 nguyên tố phân nhóm chính và 10 nguyên tố phân nhóm phụ).



4.2 Hệ thống tuần hoàn và cấu trúc electron nguyên tử


- ✚ Chu kỳ 6 có 32 nguyên tố (8 nguyên tố phân nhóm chính; 10 nguyên tố phân nhóm phụ và 14 nguyên tố Lantanit).
- ✚ Chu kỳ 7 là **chu kỳ dở dang** gồm 28 nguyên tố (2 nguyên tố phân nhóm chính, 8 nguyên tố phân nhóm phụ và 14 nguyên tố Actinit).

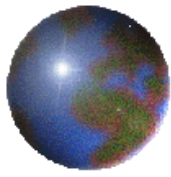


Nguyên tố s, p, d và f

- Nguyên tố s: những nguyên tố có electron ngoài cùng sắp xếp vào orbital s.
- Định nghĩa tương tự cho các nguyên tố p.
- Nguyên tố d: electron xếp vào phân lớp d lớp kế ngoài cùng, nghĩa là các orbital $(n-1)d$
- Nguyên tố f: electron sắp xếp vào phân lớp f lớp thứ 3 kể từ ngoài vào, nghĩa là các orbital $(n-2)f$

Ví dụ:

 $_{11}\text{Na}$: nguyên tố s; $_{15}\text{P}$: nguyên tố p; $_{21}\text{Sc}$: nguyên tố d



4.3 Cấu trúc hệ thống tuần hoàn dưới ánh sáng cấu tạo nguyên tử

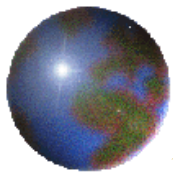
✚ Chu kỳ

Chu kỳ là dãy liên tục các nguyên tố, bắt đầu từ nguyên tố s, kết thúc bằng nguyên tố p và giữa những nguyên tố này có thể có các nguyên tố d và f.

Số thứ tự của chu kỳ trùng với số lượng tử chính n đặc trưng cho các electron lớp ngoài cùng của các nguyên tố.

➤➤ Số thứ tự chu kỳ bằng với số lớp electron có trong nguyên tử.

Ví dụ: $_{11}\text{Na}$ có chu kỳ là bao nhiêu trong bảng HTTH?



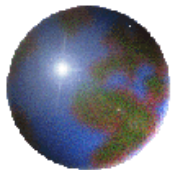
4.3 Cấu trúc hệ thống tuần hoàn dưới ánh sáng cấu tạo nguyên tử

✚ Nhóm

Nhóm gồm các nguyên tố có số electron ở lớp ngoài cùng (nguyên tố s và p) hoặc của những phân lớp ngoài cùng (nguyên tố d) giống nhau và bằng số thứ tự của nhóm.

Những electron lớp ngoài cùng gọi là **electron hóa trị** vì có khả năng tham gia tạo liên kết.

➤➤ Số nhóm của nguyên tố bằng **tổng số electron lớp ngoài cùng** (nguyên tố s và p). Riêng đối với nguyên tố d có ngoại lệ, tính theo bảng sau:



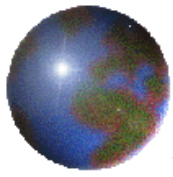
4.3 Cấu trúc hệ thống tuần hoàn...



Cấu hình electron của nhóm

Nhóm	Nguyên tố s và p	Nguyên tố d
I	ns^1	$(n-1)d^{10}ns^1$
II	ns^2	$(n-1)d^{10}ns^2$
III	ns^2np^1	$(n-1)d^1ns^2$
IV	ns^2np^2	$(n-1)d^2ns^2$
V	ns^2np^3	$(n-1)d^3ns^2$
VI	ns^2np^4	$(n-1)d^5 ns^1$
VII	ns^2np^5	$(n-1)d^5ns^2$
VIII	ns^2np^6	$(n-1)d^{6,7,8}ns^2$

Lưu ý: nhóm IB (ví dụ: $_{29}\text{Cu}$) và VIB (ví dụ: $_{24}\text{Cr}$)



4.3 Cấu trúc hệ thống tuần hoàn dưới ánh sáng cấu tạo nguyên tử

✚ Phân nhóm

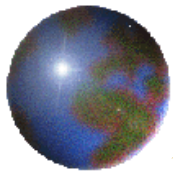
Phân nhóm gồm các nguyên tố có cấu trúc electron lớp ngoài cùng giống nhau.

cuuduongthancong.com

Phân nhóm chính (A): các nguyên tố s và p.

Phân nhóm phụ (B): các nguyên tố d, f.

cuuduongthancong.com



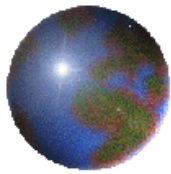
4.3 Cấu trúc hệ thống tuần hoàn dưới ánh sáng cấu tạo nguyên tử



Ô

Ô là vị trí cụ thể của mỗi nguyên tố, chỉ rõ tọa độ của nguyên tố trong bảng hệ thống tuần hoàn.

Số thứ tự của ô chính là số điện tích hạt nhân hay số electron có trong nguyên tử của nguyên tố.



4.3 Cấu trúc hệ thống tuần hoàn dưới ánh sáng cấu tạo nguyên tử



Tóm lại

Khi xác định vị trí của nguyên tố trong bảng HTTH phải xác định được các yếu tố sau:

cuu duong than cong . com

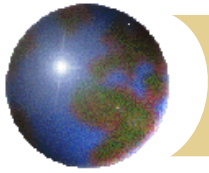
❖ Chu kỳ

❖ Nhóm

❖ Phân nhóm

❖ Số thứ tự của ô

duong than cong . com



Ví dụ :

1) Cho ion A^{3+} có 20e, viết cấu hình electron của A. Hãy cho biết vị trí của A trong bảng phân loại tuần hoàn.

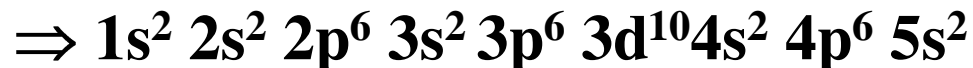
$$A^{3+} \text{ có } 20e \Rightarrow A \text{ có } z = 23$$

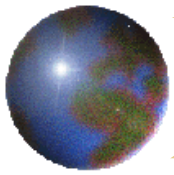


\Rightarrow A thuộc chu kỳ 4, nhóm VB

2) Nguyên tố B thuộc chu kỳ 5, nhóm IIA, viết cấu hình e của B

$$\Rightarrow n = 5 ; 2A : 5s^2$$





Ví dụ :

Ví dụ 2 :

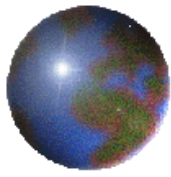
1) Cho nguyên tố X có $z = 26$, viết công thức e của X, X^{2+} , X^{3+} , ion nào bền hơn ?

cuuduongthancong.com

2) Cho X có 4 số lượng tử của e cuối cùng như sau :

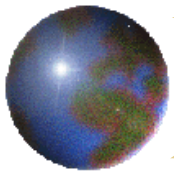
$n = 3$ $l = 2$ $ml = 0$ $m_s = +\frac{1}{2}$, . Viết công

thức e của X, vị trí ? (Biết ml xếp tăng dần)



4.4 Các tính chất biến đổi tuần hoàn của các nguyên tố

- a. Tính kim loại – phi kim
- b. Bán kính nguyên tử - ion
- c. Năng lượng ion hóa
- d. Ái lực điện tử
- e. Độ âm điện
- f. Số oxi hóa

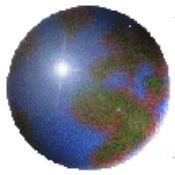


a. Tính kim loại - phi kim

✚ Theo các **nhóm**, từ **trên xuống**, **tính kim loại của nguyên tố tăng**, tính phi kim loại giảm và do đó tính khử của nguyên tử tăng và tính oxy hóa giảm.

cuu duong than cong . com

✚ Trong một chu kỳ theo chiều tăng dần điện tích hạt nhân, các nguyên tố có **tính kim loại giảm**, như vậy tính khử giảm và tính oxy hóa tăng lên



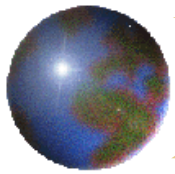
b. Bán kính nguyên tử và ion (r)

✚ Là đại lượng qui ước vì không thể xác định chính xác.

cuu duong than cong . com

✚ Đối với nguyên tử tự do: khoảng cách từ hạt nhân đến vị trí cực đại xa nhất của xác suất có mặt electron của electron ngoài cùng.

cuu duong than cong . com



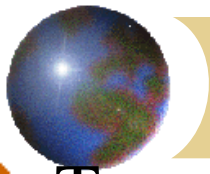
b. Bán kính nguyên tử và ion (r)

- Trong các chu kỳ đi từ **trái sang phải** bán kính nguyên tử **giảm dần**.

Nguyên tố	Li	Be	B	C	N	O	F
Bán kính, Å	1.52	1.13	0.88	0.77	0.70	0.66	0.64

Sự giảm diễn ra rõ ràng trong những chu kỳ nhỏ, không rõ ràng ở chu kỳ lớn.

Nguyên tố	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	
Bán kính, Å	2.27	1.97	1.61	1.45	1.31	1.25	1.37	1.24	
Nguyên tố	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br
Bán kính, Å	1.25	1.25	1.28	1.34	1.22	1.22	1.21	1.17	1.14



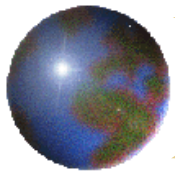
b. Bán kính nguyên tử và ion (r)

Trong nhóm **chính** khi đi từ **trên xuống** bán kính nguyên tử **tăng dần**

Trong phân nhóm **phụ** đi từ trên xuống: từ nguyên tố thứ 1 đến nguyên tố thứ 2 tăng, sang nguyên tố thứ 3 không tăng.

Lý do: sự co lantanit hay actinit

Phân nhóm IVB	
Nguyên tử	Bán kính A ^o
Ti	1.45
Zr	1.59
Hf	1.56



b. Bán kính nguyên tử và ion (r)

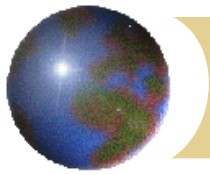
Sự thay đổi bán kính ion các nguyên tố cũng tuân theo những qui luật trên

❖ Đối với các ion dương của cùng nguyên tố, bán kính giảm theo chiều tăng điện tích ion.

Ion	Cr^{2+}	Cr^{3+}
R	0,83 Å	0,64 Å

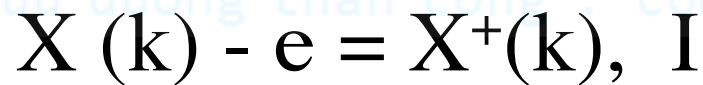
❖ Đối với các ion trong cùng phân nhóm có điện tích giống nhau: bán kính tăng theo chiều tăng điện tích hạt nhân nguyên tử.

❖ Đối với các ion đẳng electron: theo chiều tăng điện tích hạt nhân bán kính ion sẽ giảm khi điện tích ion tăng đối với ion dương và khi điện tích ion giảm đối với ion âm. K^+ : 2.27, Ca^{2+} : 0.99, S^{2-} : 1.81, Cl^- : 1.84

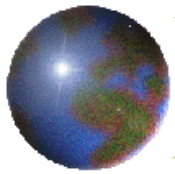


c. Năng lượng ion hóa (I)

- ✚ Năng lượng ion hóa I là năng lượng cần tiêu tốn để **tách một electron** ra khỏi nguyên tử ở thể khí không bị kích thích.

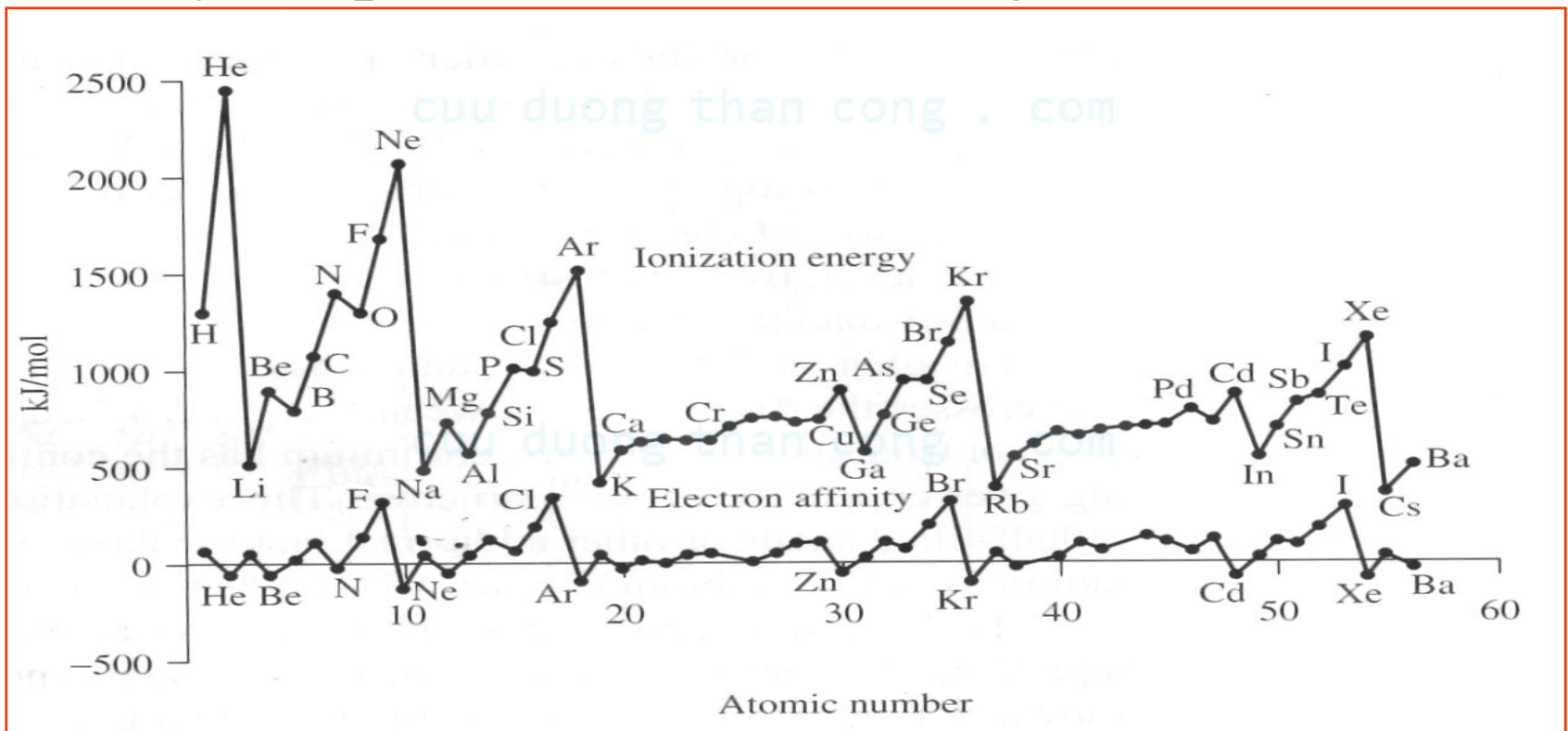


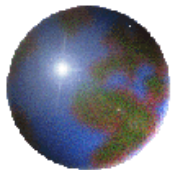
- ✚ Như vậy năng lượng ion hóa là đại lượng đặc trưng cho **khả năng nhường electron**. I càng **nhỏ** tính **kim loại** và tính **khử** càng **mạnh**.
- ✚ I phụ thuộc vào cấu trúc electron nguyên tử



c. Năng lượng ion hóa (I)

- ✚ Đối với nguyên tử nhiều electron $I_1 < I_2 < I_3 \dots$
- ✚ Chu kỳ: Tăng từ đầu đến cuối chu kỳ.
- ✚ Lưu ý: cặp Be – B, N – O, Mg – Al, P – S ...



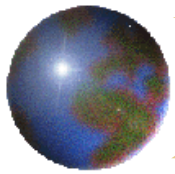


c. Năng lượng ion hóa (I)

- ❖ Phân nhóm chính: theo chiều tăng điện tích hạt nhân năng lượng ion hóa giảm.
- ❖ Phân nhóm phụ: theo chiều tăng điện tích hạt nhân năng lượng ion hóa tăng.

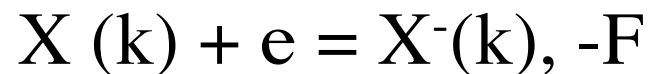
cuu duong than cong . com

Phân nhóm VA			Phân nhóm VB		
Nguyên tố	Z	$I_1(\text{eV})$	Nguyên tố	Z	$I_1(\text{eV})$
As	33	9,81	V	23	6,74
Sb	51	8,64	Nb	41	6,88
Bi	83	7,29	Ta	73	7,89

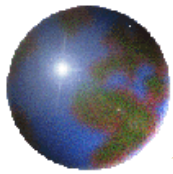


d. Ái lực electron (F)

- ❖ Ái lực electron F là đại lượng đặc trưng cho **khả năng nhận electron** của nguyên tử, đặc trưng cho tính phi kim.
- ❖ Ái lực electron là năng lượng phát ra hay thu vào khi kết hợp một electron vào nguyên tử ở thể khí không bị kích thích.

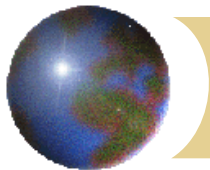


- ❖ Quá trình kết hợp thêm electron vào nguyên tử phát ra năng lượng \rightarrow F có giá trị âm.
- ❖ F càng âm nguyên tử càng dễ nhận electron, do đó tính phi kim loại và tính oxy hóa càng mạnh.



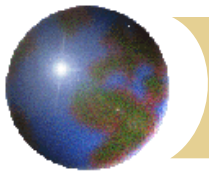
d. **Ái lực electron (F)**

- ✚ Theo chu kỳ: từ trái sang phải, F tăng.
- ✚ Theo nhóm: từ trên xuống dưới , F giảm
- ✚ F lớn nhất: các nguyên tố p nhóm VII (các halogen).
- ✚ F nhỏ nhất: s^2, p^3, s^2p^6



e. Độ âm điện χ

- ✚ Độ âm điện cho biết khả năng của nguyên tử một nguyên tố **hút mật độ electron về phía mình** khi tạo liên kết với nguyên tử của nguyên tố khác.
- ✚ Trong chu kỳ: theo chiều tăng điện tích hạt nhân độ âm điện tăng
- ✚ Trong nhóm: theo chiều này độ âm điện giảm.
- ✚ Như vậy nguyên tố nhóm I (kim loại kiềm) có χ nhỏ nhất và các nguyên tố nhóm VII (các halogen) có χ lớn nhất.

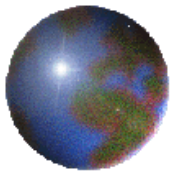


f. Số oxy hóa

- ✚ Hóa trị của một nguyên tố được xác định bằng số liên kết hóa học mà một nguyên tử nguyên tố đó tạo nên trong phân tử.

cuu duong than cong . com

- ✚ Số oxy hóa là điện tích dương hay âm của nguyên tố trong hợp chất được tính với giả thiết hợp chất được tạo thành từ các ion



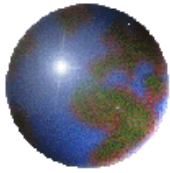
f. Số oxy hóa

✚ Số oxy hóa dương cao nhất: tăng dần theo chu kỳ và bằng số thứ tự của nhóm

[cuu duong than cong . com](http://cuuduongthancong.com)

✚ Số oxy hóa âm thấp nhất: giảm dần theo chu kỳ và có trị số bằng 8 trừ đi số thứ tự nhóm.

[cuu duong than cong . com](http://cuuduongthancong.com)



THANK YOU!

cuu duong than cong . com

cuu duong than cong . com