

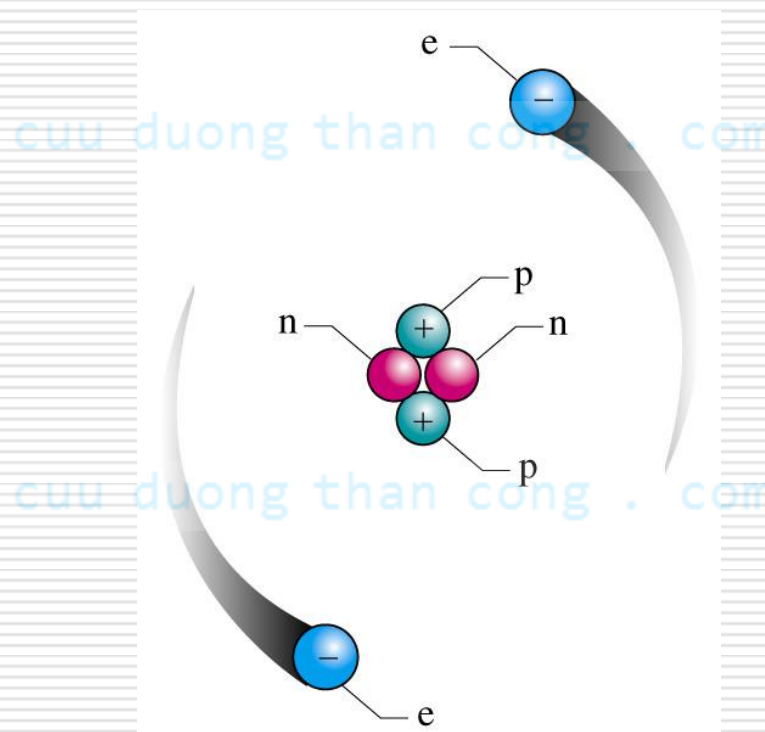
Chương 1

CẤU TẠO NGUYÊN TỬ

cuu duong than cong . com

1.1. Nguyên tử và quang phổ nguyên tử

1.1.1. Nguyên tử và các hạt electron, proton, neutron



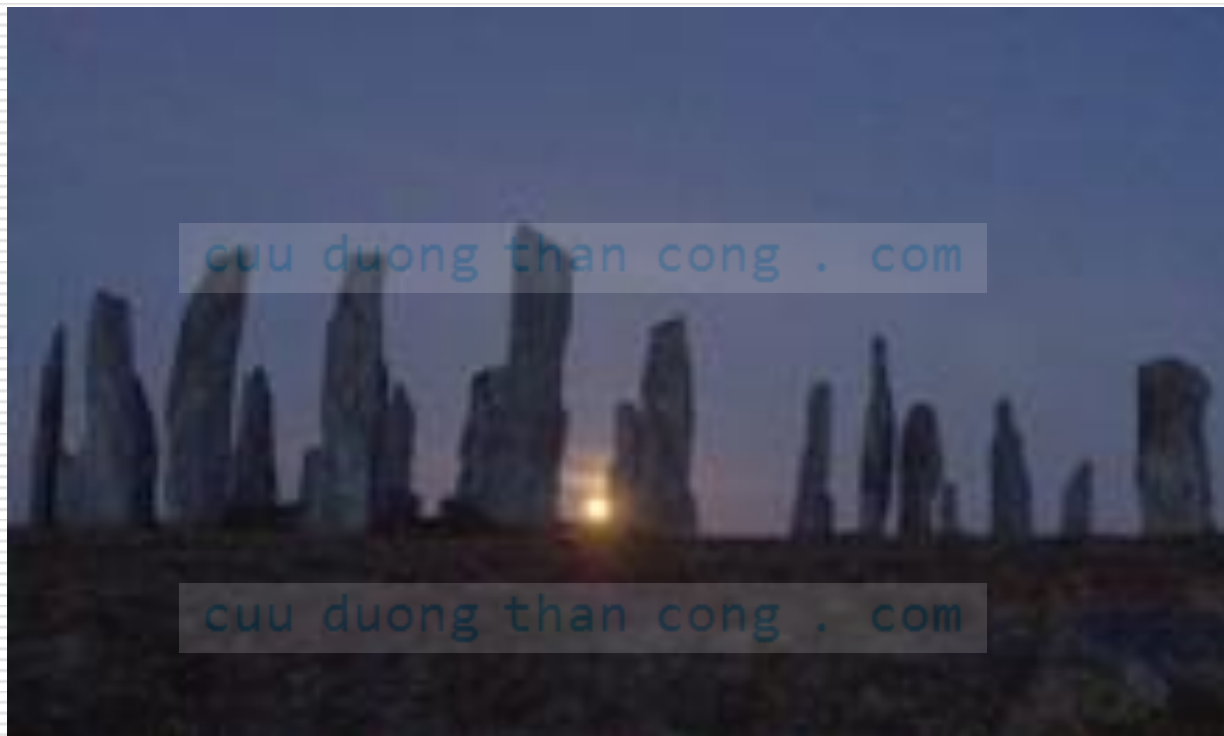
Bảng 1.1. Các hạt cơ bản cấu tạo nguyên tử.

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	$1,67429.10^{-27}$	1,008665	0	0	0

-
- Hạt nhân được cấu tạo chủ yếu từ các hạt proton và neutron. Khối lượng hạt nhân bằng tổng khối lượng của các hạt proton và neutron.
 - Hạt nhân là thành phần cấu tạo quyết định bản chất nguyên tử: hạt nhân không thay đổi thì nguyên tử không thay đổi.
 - Hạt nhân mang điện tích dương và có điện tích bằng điện tích của các hạt proton trong hạt nhân.

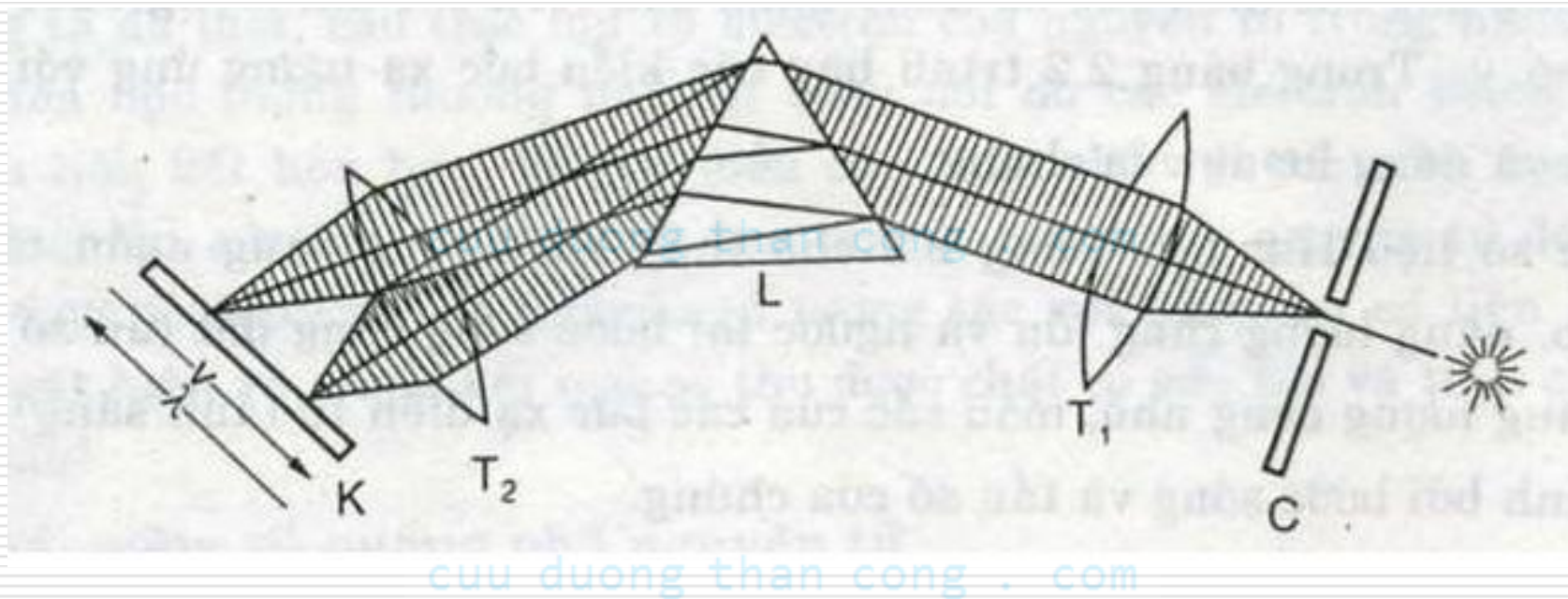
Các nguyên tử của cùng một nguyên tố luôn luôn có số hiệu nguyên tử Z giống nhau, nhưng có thể có khối lượng A khác nhau. Những nguyên tử có Z giống nhau nhưng có A khác nhau chính là các đồng vị của nguyên tố.

Ví dụ: Ứng dụng của đồng vị ^{14}C trong việc xác định niên đại các vật liệu hóa thạch.



1.1.2. Khái niệm về quang phổ nguyên tử

- Trong các phản ứng hóa học, cấu trúc lớp vỏ electron của nguyên tử thay đổi do các electron tham gia tạo LKHH. Việc nghiên cứu cấu trúc lớp vỏ electron nguyên tử được dựa trên nghiên cứu quang phổ của nguyên tử đó.
- Quang phổ nguyên tử hydro bao gồm nhiều dãy vạch khác nhau: Balmer, Lyman, Paschen, Brackett và Pfund.



Hình 1.1. Sơ đồ hoạt động của máy quang phổ.

Số sóng, bước sóng, tần số dao động, và năng lượng của các vạch quang phổ hydro:

$$\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{n_0^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (1.20)$$

$$\nu = \frac{C}{\lambda} = RC \left(\frac{1}{n_0^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (1.21)$$

$$E = h.\nu \quad (1.22)$$

trong đó: R: hằng số Rydberg ($=1096,78.10^4 \text{ m}^{-1}$); h: hằng số Planck ($=6,626076.10^{-34} \text{ J.s}$); n_0, n : những số nguyên dương có giá trị khác nhau ($n_0=1, n \geq 2$ đối với dãy Lyman; $n_0=2, n \geq 3$ đối với dãy Balmer; $n_0=3, n \geq 4$ đối với dãy Pachen; $n_0=4, n \geq 5$ đối với dãy Brackett; $n_0=5, n \geq 6$ đối với dãy Pfund).

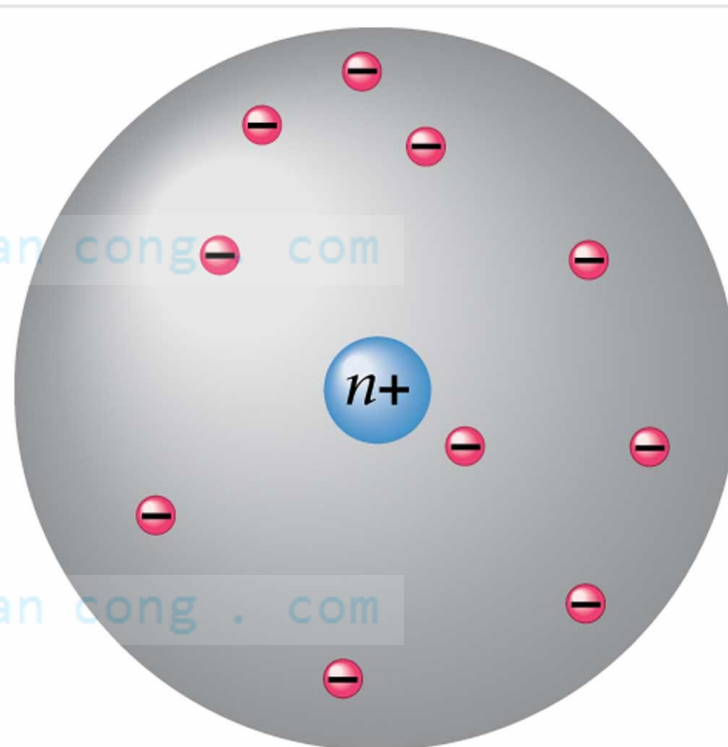
Bức xạ có bước sóng cực tiểu của
nguyên tử H phát ra khi e từ:

- a. Vô cực rơi xuống quỹ đạo 1.
- b. Quỹ đạo 1 lên quỹ đạo 2.
- c. Quỹ đạo 1 lên vô cực.
- d. Quỹ đạo 2 xuống quỹ đạo 1.

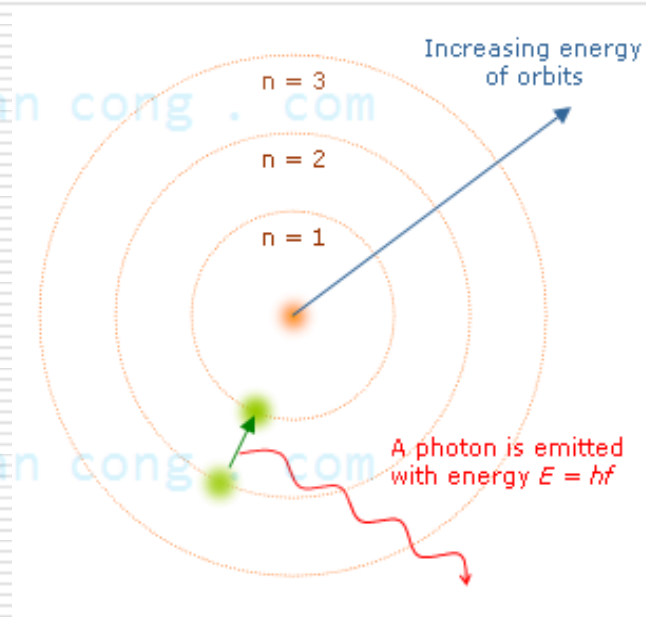
1.2. Thuyết cấu tạo nguyên tử Bohr

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

Thuyết cấu tạo nguyên tử của 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.



Thuyết cấu tạo nguyên tử của Bohr (1913):



-
- Electron quay xung quanh hạt nhân trên những quỹ đạo tròn, đồng tâm có bán kính nhất định, gọi là những quỹ đạo bền.
 - Khi quay trên những quỹ đạo bền này, electron không phát ra năng lượng điện từ.
 - Năng lượng (E) chỉ được phát ra hay hấp thụ khi electron chuyển từ quỹ đạo bền này sang quỹ đạo bền khác.

$$E = |E_d - E_c| = h\nu \quad (1.23)$$

Ưu điểm:

- Tính toán được các quỹ đạo bền có thể có trong nguyên tử, tốc độ và năng lượng của e khi chuyển động trên các quỹ đạo bền.
- Giải thích được bản chất vật lý của quang phổ vạch nguyên tử và tính toán vị trí các vạch quang phổ hydro trong vùng ánh sáng thấy được (thuộc dãy Balmer).

Nhược điểm:

- Các tiên đề của Bohr chống lại các định luật cơ học và điện từ học cổ điển, nhưng khi tính toán các lực tác dụng lên electron thì lại sử dụng những định luật này.
- Không trả lời được câu hỏi: electron ở đâu trong quá trình chuyển từ quỹ đạo này sang quỹ đạo khác.
- Không giải thích được các đặc trưng quang phổ quan trọng như cường độ và độ bội của các vạch quang phổ.
- Không cho kết quả phù hợp với thực nghiệm đối với những nguyên tử nhiều electron.

1.3. Thuyết cấu tạo nguyên tử hiện đại theo cơ học lượng tử

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

- Tính chất sóng-hạt của hạt vi mô: hệ thức De Broglie:

$$\lambda = h/(mv) \quad (1.24)$$

- Nguyên lý bất định Heisenberg:

$$\Delta x \cdot \Delta v \geq h'/m = h/(2\pi m) \quad (1.25)$$

- Phương trình sóng Schrödinger:

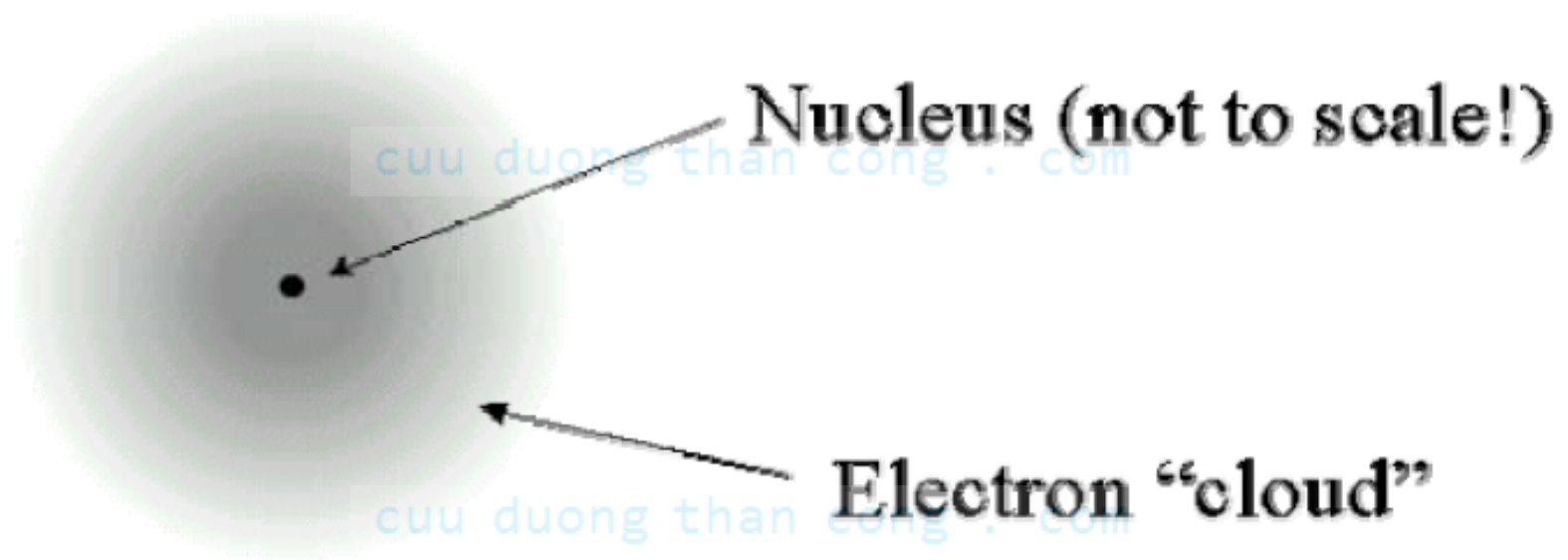
$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - V) \psi = 0 \quad (1.26)$$

Đại lượng ψ^2 cho biết mật độ xác suất có mặt của hạt vi mô tại điểm có tọa độ x, y, z .

1.3.2. Trạng thái của electron trong nguyên tử một electron và các số lượng tử

Kết quả giải phương trình Schrödinger cho thấy hàm sóng ψ của electron luôn chứa 3 thông số không thứ nguyên, gọi là những số lượng tử: **n** ; **l** , và **m_l** . Những thông số này đặc trưng cho trạng thái của electron trong nguyên tử. Ngoài ra, số lượng tử thứ tư **m_s** , cũng đặc trưng cho sự chuyển động riêng của electron.

-
- Theo quan niệm cơ học lượng tử, khi chuyển động xung quanh hạt nhân trong nguyên tử, e tạo nên vùng không gian xung quanh hạt nhân được gọi là đám mây e (hay orbital nguyên tử).
 - Đám mây e được quy ước là vùng không gian gần hạt nhân với xác suất có mặt e $\sim 90\%$, và có hình dạng được xác định bởi bề mặt gồm các điểm có mật độ xác suất có mặt bằng nhau.



The mass of an atom is extremely small. The units of mass used to describe atomic particles is the **atomic mass unit** (or **amu**).

Số lượng tử chính n : xác định trạng thái năng lượng của e trong nguyên tử; $n = 1, 2, 3, \dots, \infty$. n cũng xác định kích thước đám mây electron.

Những e có cùng giá trị n , nghĩa là cùng mức năng lượng, tạo thành lớp lượng tử hay lớp e. Để thuận tiện, người ta dùng các ký hiệu sau:

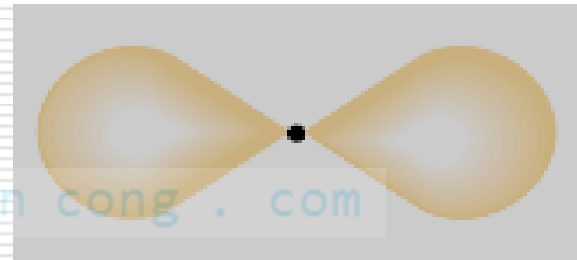
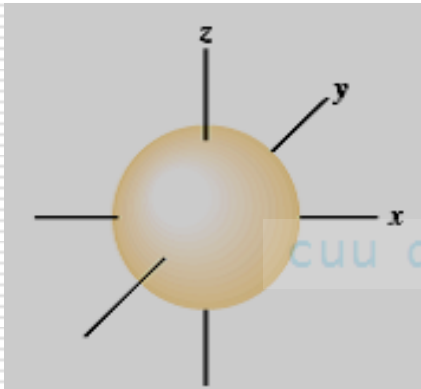
Số lượng tử chính	1	2	3	4	5	6	7
Ký hiệu lớp e	K	L	M	N	O	P	Q

Số lượng tử orbital l : xác định hình dạng đám mây electron. Đối với mỗi giá trị n , l có các giá trị: $l = 0, 1, 2, \dots, (n-1)$.

Các electron có cùng giá trị l sẽ tạo thành phân mức năng lượng:

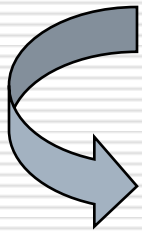
Số lượng tử orbital	0	1	2	3	4	5
Ký hiệu phân mức NL	s	p	d	f	g	h

Các đám mây electron tương ứng trạng thái s ($l=0$) có dạng khối cầu; trạng thái p ($l=1$) có dạng 2 khối cầu biến dạng tiếp xúc nhau; d ($l=2$) có dạng 4 khối cầu biến dạng tiếp xúc nhau; ...



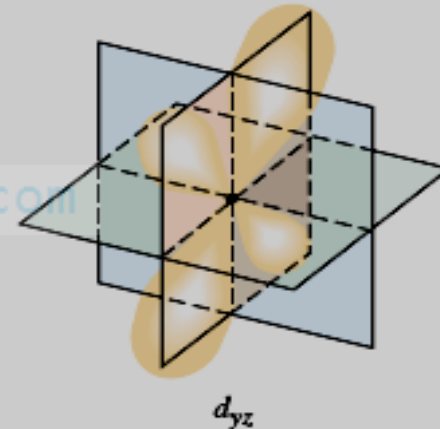
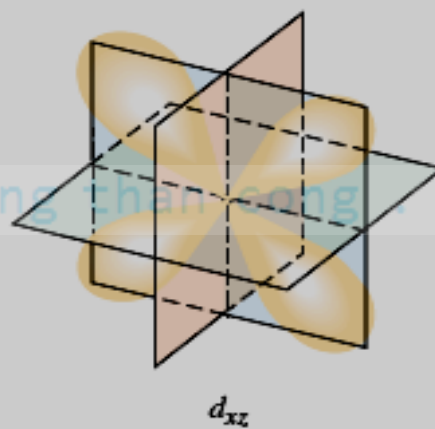
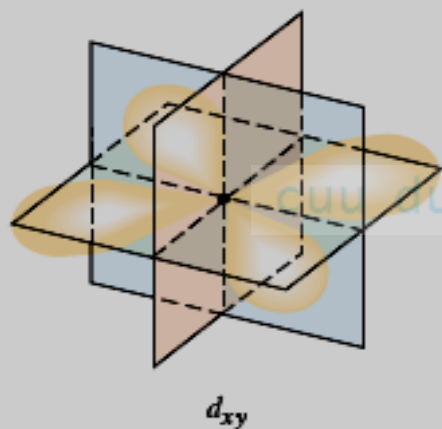
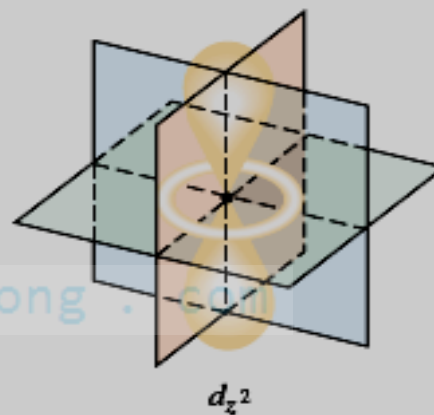
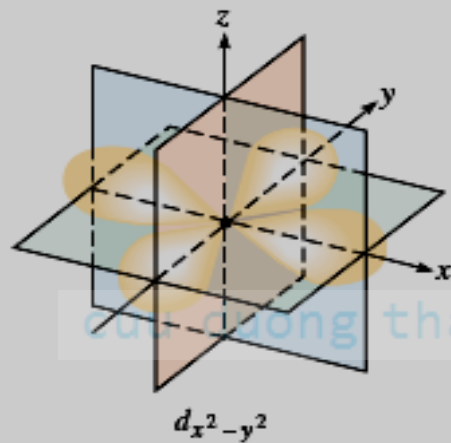
Số lượng tử từ m_l : xác định sự định hướng của các đám mây electron trong không gian. Ứng với mỗi giá trị l , m_l có các giá trị: $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$.

cuuduongthancong.com



Như vậy, trạng thái của electron trong nguyên tử được đặc trưng bởi những giá trị nhất định của n , l và m_l .

cuuduongthancong.com



Chọn đáp án đúng:

- a. Xác xuất phân bố electron $3d_{yz}$ theo trục x lớn nhất.
- b. Xác xuất phân bố electron $3d_{xy}$ theo trục x và y lớn nhất.
- c. Xác xuất phân bố electron $3d_{z^2}$ theo trục z lớn nhất.
- d. Xác xuất phân bố electron $3d_{x^2-y^2}$ theo những đường phân giác giữa hai trục x và y lớn nhất.

Bảng 1.2. Mối liên hệ giữa n , l và đám mây electron.

n	Lớp lượng tử	l	Phân lớp lượng tử	Đám mây electron		
				Ký hiệu	Hình dạng	Định hướng
1	K	0	s	1s	Khối cầu	1s
2	L	0	s	2s	Khối cầu	2s
		1	p	2p	2 khối cầu	$2p_x, 2p_y, 2p_z$
3	M	0	s	3s	Khối cầu	3s
		1	p	3p	2 khối cầu	$3p_x, 3p_y, 3p_z$
		2	d	3d	4 khối cầu	$3d_{xy}, 3d_{xz}, 3d_{yz}, 3d_{x^2-y^2}, 3d_{z^2}$

Số lượng tử spin m_s : xác định trạng thái chuyển động riêng của electron, chỉ có hai giá trị là $+1/2$ và $-1/2$ ứng với hai chiều quay thuận và nghịch theo chiều quay của kim đồng hồ.

cuu duong than cong . com

2.3.3. *Trạng thái của electron trong nguyên tử nhiều electron và cấu hình electron của nguyên tử*

Hiệu ứng chắn:

- Các electron lớp trong chắn các electron lớp ngoài.
- Phân lớp electron bão hòa / bán bão hòa chắn mạnh các electron lớp ngoài.
- Các electron cùng một lớp chắn yếu hơn, khả năng chắn giảm dần theo chiều tăng giá trị l .

Hiệu ứng xâm nhập:

- Các electron lớp ngoài có thể xâm nhập vào gần hạt nhân.
- Các electron cùng một lớp có khả năng xâm nhập giảm dần theo chiều tăng giá trị l .

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

Nguyên lý ngoại trừ Pauli: trong nguyên tử không thể có 2 electron có cùng 4 số lượng tử → mỗi orbital nguyên tử chỉ có thể chứa tối đa 2 electron có spin khác nhau. Như vậy, số electron tối đa trên phân lớp s là 2, trên phân lớp p là 6, trên phân lớp d là 10, ..., trên phân lớp x_l là $2(2l+1)$ → số electron tối đa trên lớp K là 2, trên lớp L là 8, trên lớp M là 18, ..., trên lớp x_n là $2n^2$.

Nguyên lý vững bền: trạng thái bền vững nhất của electron trong nguyên tử là trạng thái tương ứng với giá trị năng lượng nhỏ nhất → các electron trước hết phải chiếm trạng thái có năng lượng thấp rồi mới đến trạng thái có năng lượng cao.

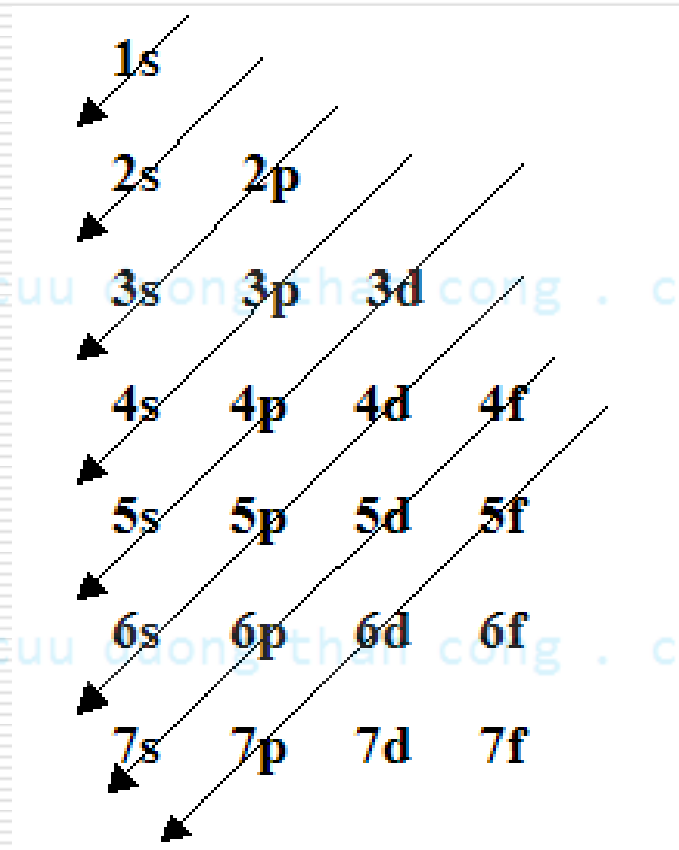
$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < 4p < 5s < 4d < 5p < 6s < 4f \cong 5d < 6p < 7s < 5f \cong 6d < 7p$

Quy tắc Hund: trạng thái bền của nguyên tử tương ứng với sự sắp xếp electron sao cho trong giới hạn một phân mức năng lượng, giá trị tuyệt đối của tổng spin của electron là cực đại → trên cùng phân lớp lượng tử, các electron sẽ sắp xếp trong các orbital nguyên tử sao cho số electron độc thân là cực đại.

cuu duong than cong . com

Quy tắc Kleshkovski: Sự sắp xếp các 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 $(n+l)$ nhỏ hơn đến những orbital có tổng $(n+l)$ lớn hơn. Nếu các orbital có $(n+l)$ giống nhau thì theo hướng tăng dần số lượng tử chính n .

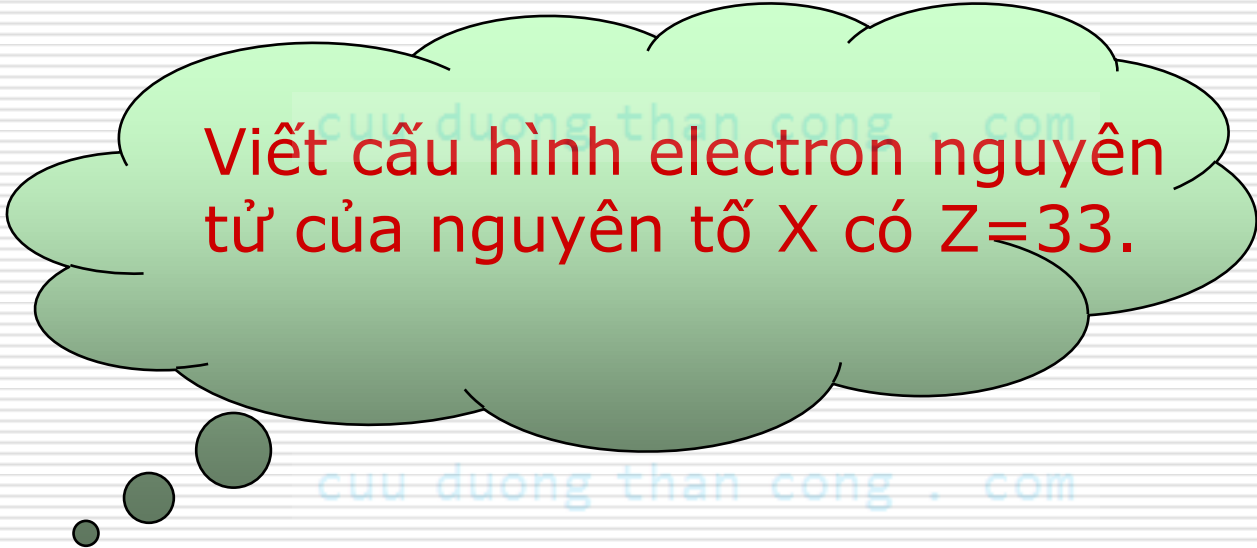
cuu duong than cong . com



Cấu hình electron nguyên tử được biểu diễn bằng tập hợp các ký hiệu trạng thái lượng tử của nguyên tử có chứa electron, đồng thời kèm theo ký hiệu này có ghi số electron được sắp xếp vào trạng thái đó dưới dạng số mũ.

Ví dụ: K ($Z=19$): $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1$

cuu duong than cong . com



Viết cấu hình electron nguyên tử của nguyên tố X có $Z=33$.

Cho biết số tối thiểu các số lượng tử để xác định orbital 2s.

a. n, l, m_l

b. n, l, m_l, m_s

c. n, l

d. n, m_l

Electron cuối của nguyên tử S ($Z=16$) có bộ các số lượng tử sau (quy ước các electron điền vào các orbital theo thứ tự m_l từ $+l$ đến $-l$).

a. $n=3, l=2, m_l=-2, m_s=+1/2$.

b. $n=3, l=2, m_l=+2, m_s=-1/2$.

c. $n=3, l=1, m_l=-1, m_s=+1/2$.

d. $n=3, l=1, m_l=+1, m_s=-1/2$.