

Chương 1

Cấu Tạo Nguyên tử



Chương I. CẤU TẠO NGUYÊN TỬ

I. NGUYÊN TỬ VÀ QUANG PHỔ NGUYÊN TỬ

II. CÁC THUYẾT CẤU TẠO NGUYÊN TỬ

**III. CẤU TRÚC LỚP VỎ ELECTRON
NGUYÊN TỬ THEO CƠ HỌC LƯỢNG TỬ**

IV. NGUYÊN TỬ NHIỀU ELECTRON

I. NGUYÊN TỬ VÀ QUANG PHỔ NGUYÊN TỬ

(Trang 34 SGK)

1.1. Nguyên tử

1.2. Quang phổ nguyên tử

cuu duong than cong . com

cuu duong than cong . com

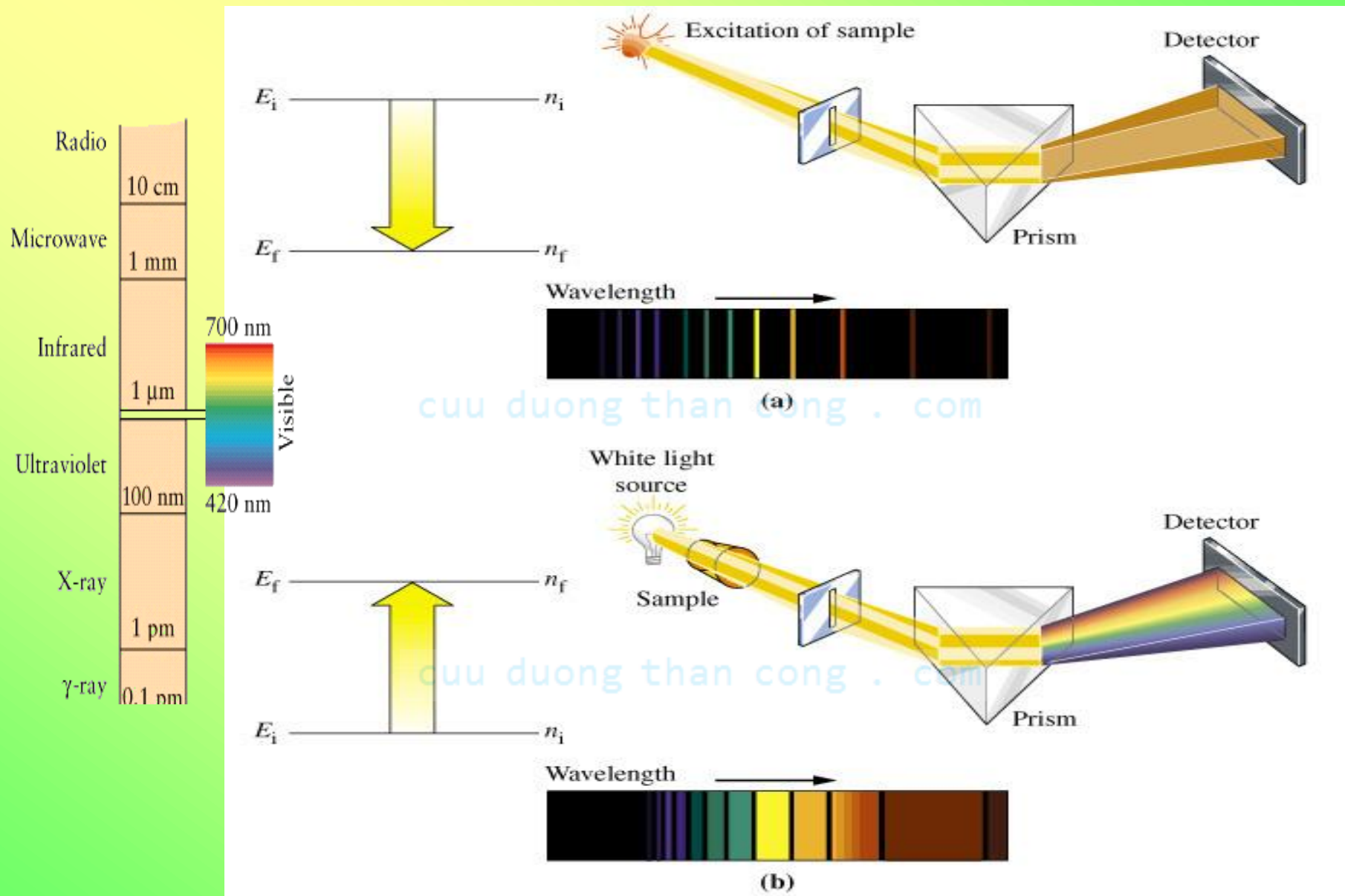


1.1. Nguyên tử (Trang 34 SGK)

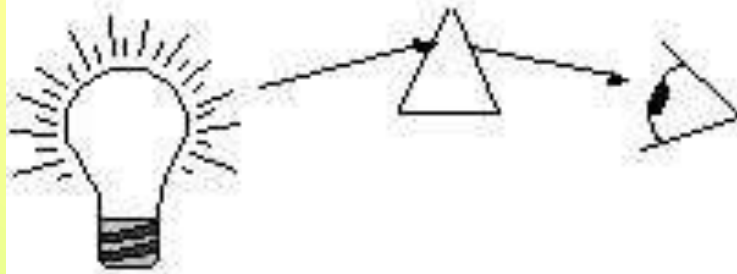
Tên	Ký hiệu	Khối lượng		Điện tích	
		(kg)	đvkln	(C)	Tương đối đ/v e
Điện tử	e	$9,1095 \cdot 10^{-31}$	$5,4858 \cdot 10^{-4}$	$-1,60219 \cdot 10^{-19}$	- 1
Proton	p	$1,6726 \cdot 10^{-27}$	1,007276	$+1,60219 \cdot 10^{-19}$	+ 1
Neutron	n	$1,6745 \cdot 10^{-27}$	1,008665	0	0



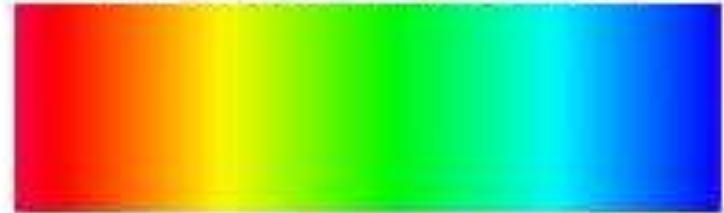
1.2. Quang phổ nguyên tử - Cách đo (Trang 38 SGK)



Các dạng quang phổ



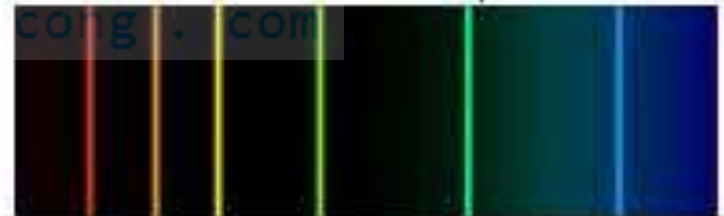
Continuum Spectrum



Hot Gas



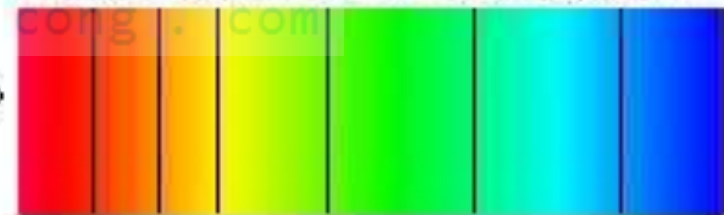
Emission Line Spectrum



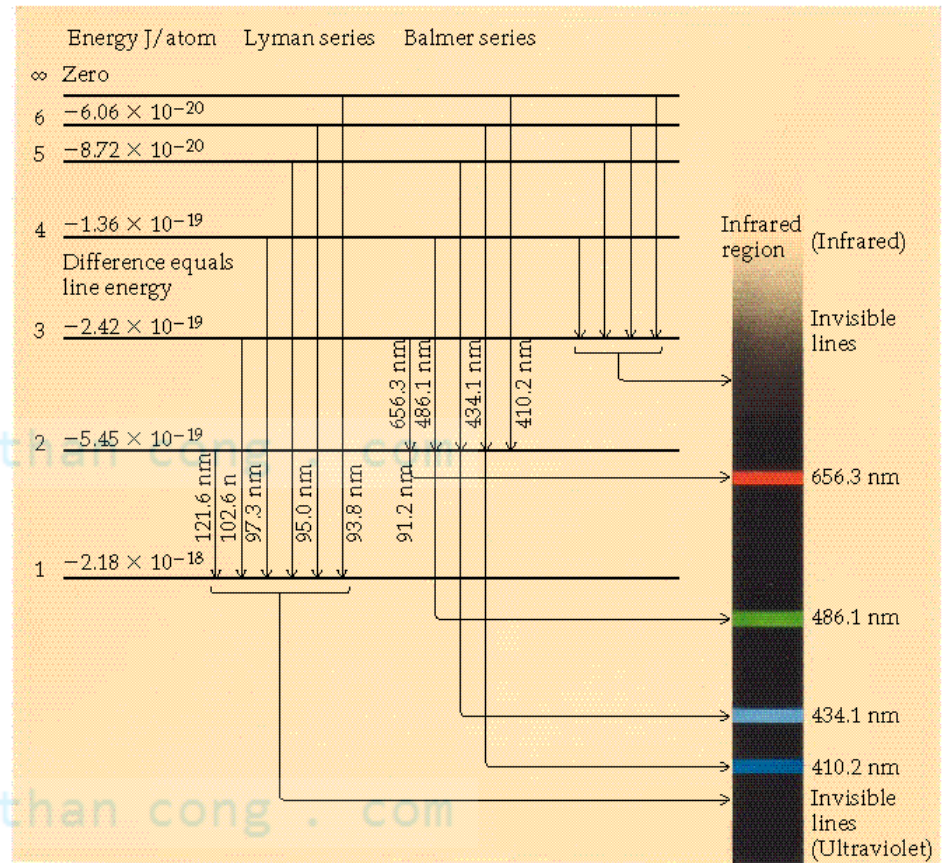
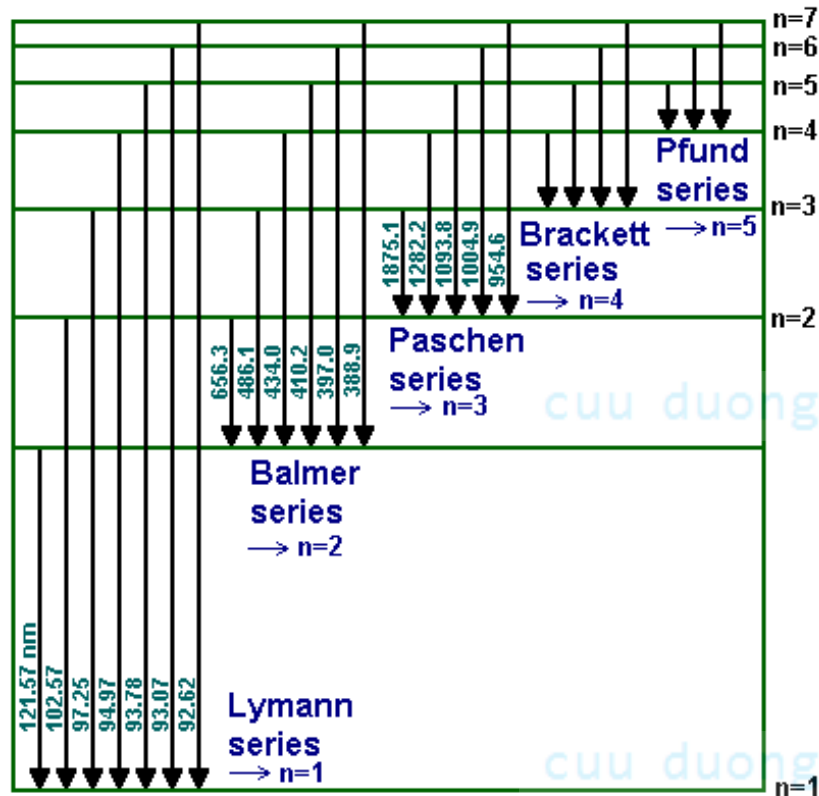
Cold Gas



Absorption Line Spectrum

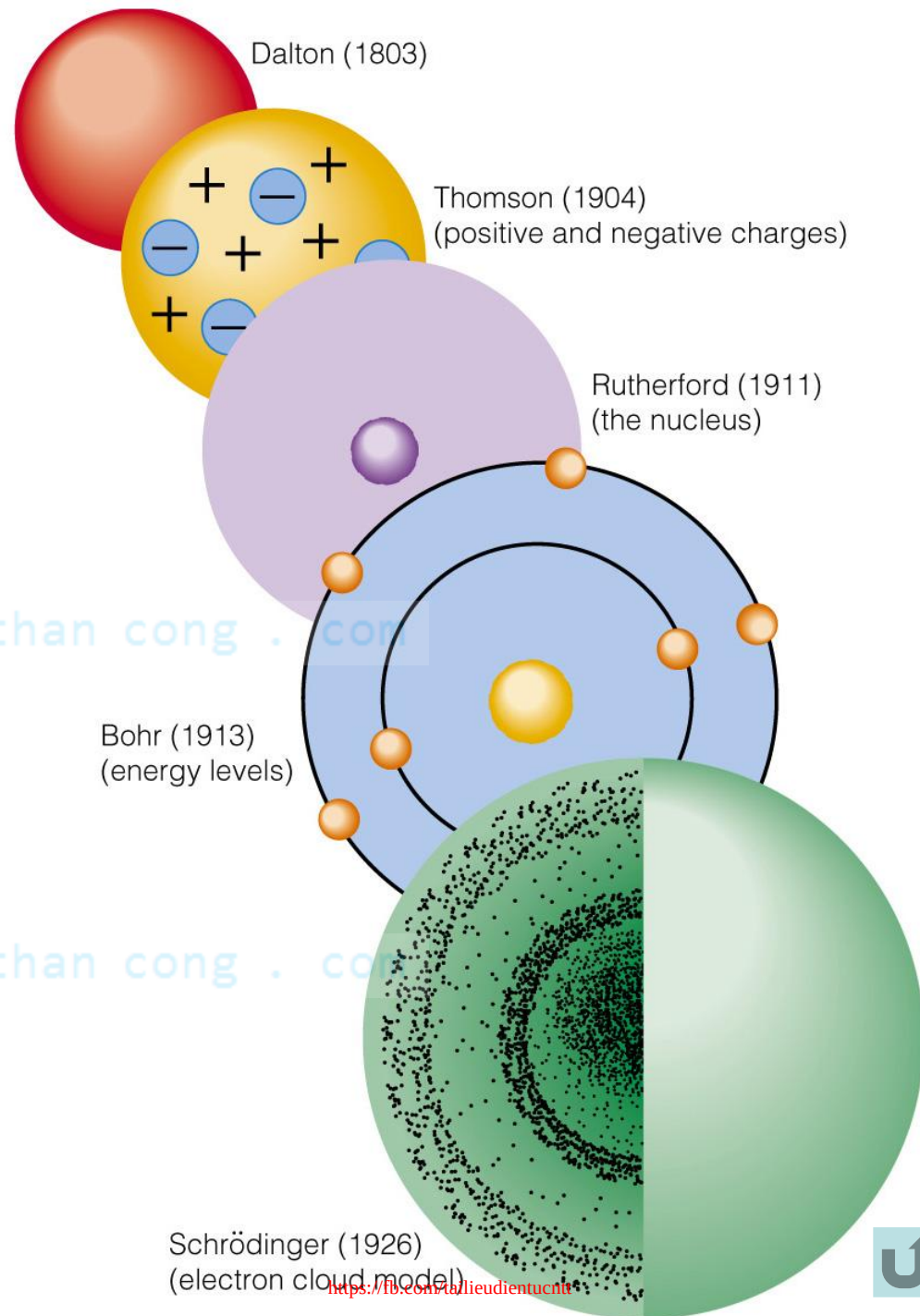


Quang phổ nguyên tử - Của nguyên tử hydro (Trang 39 SGK)



II. CÁC THUYẾT CẤU TẠO NGUYÊN TỬ

- 2.1. Thuyết cấu tạo nguyên tử của Thompson (1898)
- 2.2. Mẫu hành tinh nguyên tử của Rutherford (1911)
- 2.3. Mẫu nguyên tử theo Bohr (1913)
- 2.4. Mẫu nguyên tử của Bohr và Sommerfeld
- 2.5. Mẫu nguyên tử theo cơ học lượng tử



Phát hiện ra điện tử

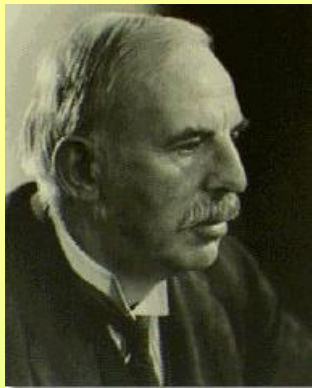
(Trang 40 SGK)



- Năm 1897, **Thompson** phát hiện ra **electron**, mang điện tích âm.
- Năm 1904, Ông đề nghị mẫu nguyên tử đầu tiên được gọi là "Thompsons pudding".
- **Thompson** đề nghị nguyên tử chứa đầy các hạt electron mang điện tích âm nằm xen kẽ với các phần tử mang điện tích dương như “nho khô trong ổ bánh bông lan” ("like the raisins in a cake").

cuu duong than cong . com

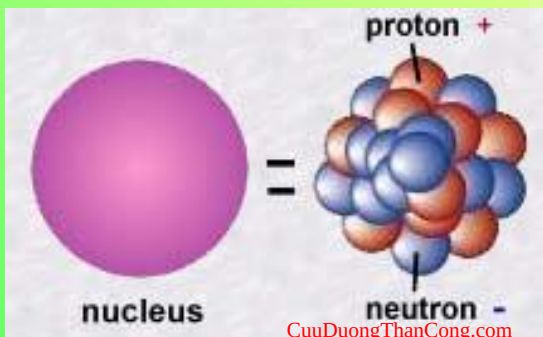
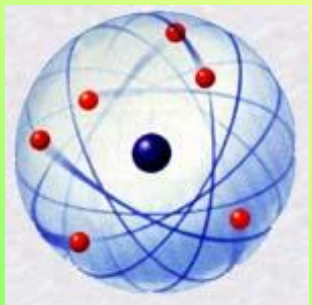
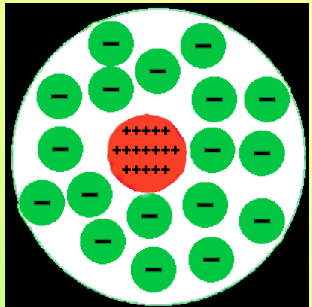




Phát hiện ra hạt nhân nguyên tử

Mô hình hành tinh nguyên tử (Trang 40 SGK)

✓ Năm 1912, **Rutherford** (Nhà vật lý học người New Zealand) đã phát hiện ra hạt nhân nguyên tử.



✓ Đề nghị cấu tạo:

- Hạt nhân: Gồm hai loại hạt là neutron (không mang điện và proton mang điện tích dương)
- Hạt nhân Mang điện tích dương, tập trung toàn bộ khối lượng nguyên tử (Đường kính của hạt nhân = 10^{-15} m = 1 Fermi).
- Điện tử: Quay tròn quanh nhân
- Tổng điện tích âm = điện tích hạt nhân



Ưu nhược điểm của thuyết hành tinh nguyên tử

Ưu điểm: Xác định được

Dạng cơ bản của nguyên tử

Kích thước nguyên tử, hạt nhân, điện tử.

Điện tích hạt nhân

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

Khuyết điểm: Không giải thích được:

Tính bền nguyên tử.

Quang phổ vạch

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





Mẫu nguyên tử theo Bohr (1913)

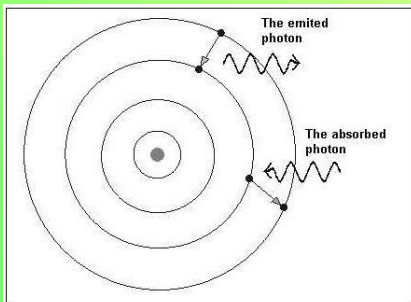
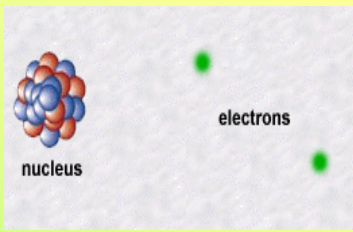
Ba định đề của Bohr: (Trang 40 SGK)

Định đề 1: electron quay quanh nhân trên những quỹ đạo tròn đồng tâm xác định gọi là quỹ đạo bền

Định đề 2: Khi electron quay trên quỹ đạo bền không phát ra năng lượng điện từ.

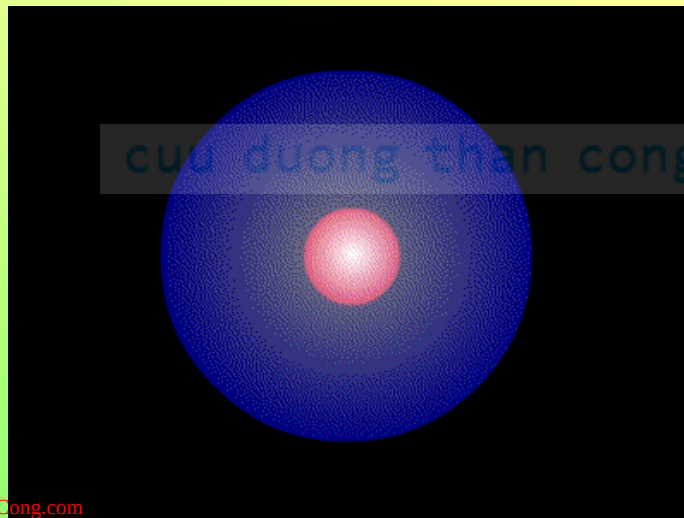
Định đề 3: Năng lượng sẽ được phát xạ hay hấp thụ khi electron chuyển từ quỹ đạo bền này sang quỹ đạo bền khác

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



The electron emits or absorbs the energy changing the orbits.

CuuDuongThanCong.com

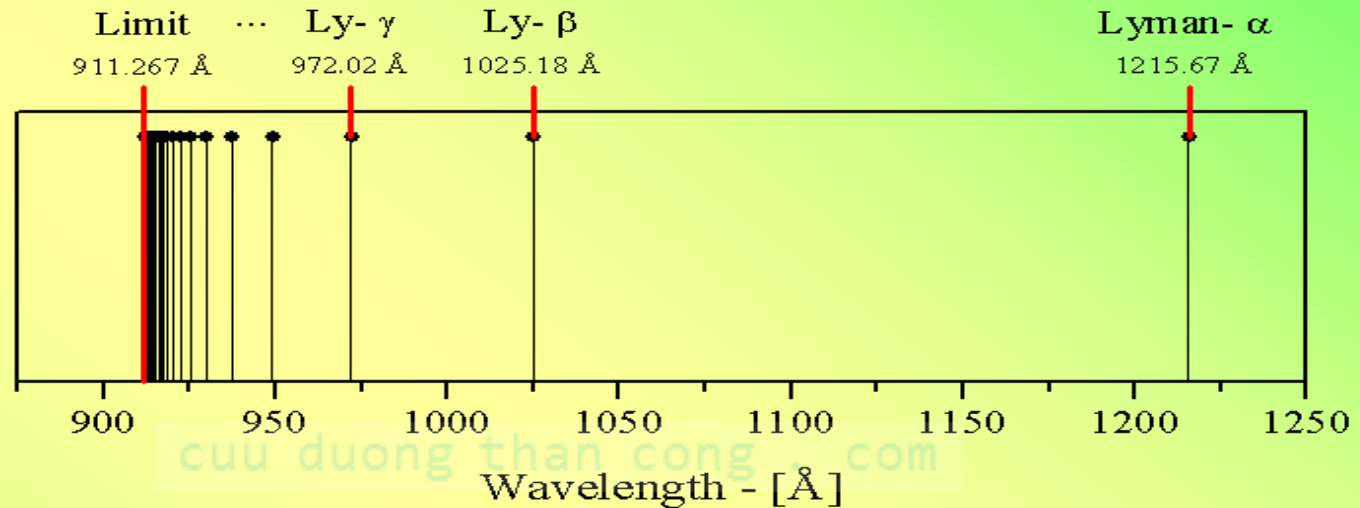


<https://fb.com/tailieudientucntt>

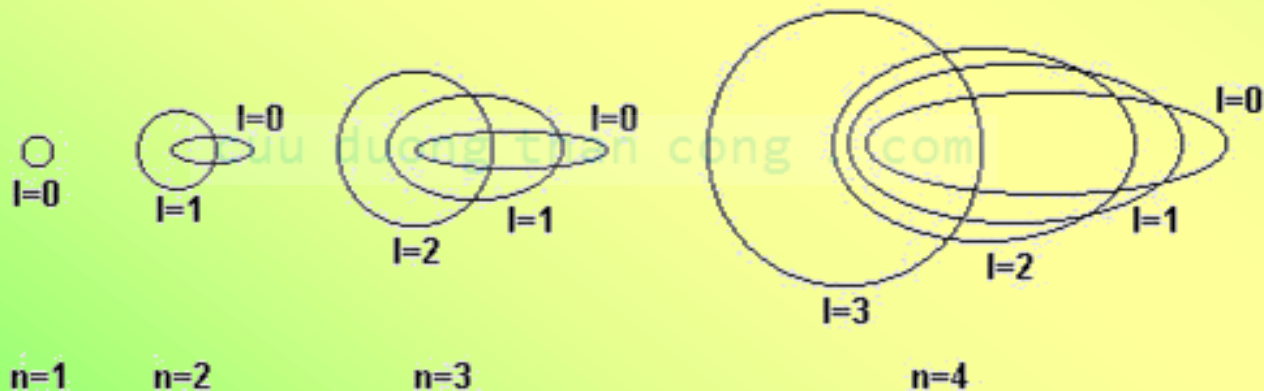


Mẫu nguyên tử theo Bohr - Sommerfeld – 1916

(Trang 44 SGK)



Thêm quỹ đạo elip và các số lượng tử n , l , m_l



Ưu điểm của mẫu nguyên tử theo Bohr - Sommerfeld

(Trang 41 SGK)

- Nêu được nguyên tử bền vững
- Biểu tượng dễ hiểu, vẫn sử dụng đến bây giờ
- Tính toán được
 - Bán kính quỹ đạo bền của electron

$$r = \frac{n^2}{Z} \frac{h^2}{4\pi m e^2} = \frac{n^2}{Z} a_0 = \frac{n^2}{Z} 0,529 \text{ \AA}$$

- Năng lượng của electron trong nguyên tử

$$E = -\frac{Z^2}{n^2} \frac{2\pi^2 m e^4}{h^2} = -13,6 \frac{Z^2}{n^2} \text{ eV}$$

- Vận tốc electron trên quỹ đạo bền:

$$v = \frac{Z}{n} \frac{2\pi e^2}{h} = \frac{Z}{n} v_0 = 2185 \frac{Z}{n} \text{ m/s}$$

- Giải thích được hiện tượng quang phổ nguyên tử Hydro



Khuyết điểm của mẫu nguyên tử theo Bohr - Sommerfeld (Trang 45 SGK)

Không giải thích được độ bội của quang phổ vạch
Khi đưa định đề không áp dụng cơ học cổ điển
nhưng khi tính toán lại sử dụng cơ học cổ điển
Xem electron chuyển động trên mặt phẳng
Không xác định được vị trí của electron ở đâu khi
chuyển từ quỹ đạo này sang quỹ đạo khác

cuu duong than cong . com



III. CẤU TRÚC LỚP VỎ E NGUYÊN TỬ THEO CƠ HỌC LƯỢNG TỬ

(Trang 45 SGK)

BA LỰA AN NIỆM CƠ BA UN

3.1. Tính chất sóng – hạt của các hạt vi mô

3.2. Nguyên lý bất định của Heisenberg và khái niệm đám mây điện tử

3.3. Phương trình sóng Schrödinger và 4 số lượng tử



3.1. Bản chất sóng hạt – Giả thuyết De Broglie (1924)

(Trang 45 SGK)



- ✓ Phaùt bieàu: Electron cũng nhö caùc haït vì mô khaùc ñeàu coù baùn chaát soùng haït
- ✓ Bieàu

thöùc:

$$\lambda = \frac{h}{mv}$$

Vớì

l: Bôùc soùng (mm,nm, Å⁰)

h: Haèng sốá Planck (6,626.10⁻³⁴J.s)

m: Khoái lööng haït (kg)

v: Vaän toác haït (m/s)



➤ Ví dụ

✓ Đối với electron:

- $m = 9,1 \cdot 10^{-28} \text{g}$
- $v = 10^8 \text{cm/s} \sim 100 \text{km/s}$
- $\lambda = 7,25 \cdot 10^{-8} \text{cm}$

✓ Đối với hạt vĩ mô:

- $m = 1 \text{g}$
- $v = 1 \text{cm/s}$
- $\lambda = 6,6 \cdot 10^{-27} \text{cm}$

cuu duong than cong . com

cuu duong than cong . com





3.2. Nguyên lý bất định Heisenberg (1927)

(Trang 46 SGK)

✓ Phaùt bieàu: Không thể đồng thời xác định chính xác cả vị trí lẫn tốc độ của hạt vi mô

✓ Biểu
thức:

$$\Delta x \Delta v \geq \frac{h}{2\pi m}$$

Với
(J.s)

h: Hằng số Planck ($6,626 \cdot 10^{-34}$)

m: Khối lượng hạt (kg)

Δv : Độ bất định vận tốc hạt



➤ Ví dụ: đối với electron của nguyên tử hydro chuyển động với biến thiên vận tốc $\Delta v = 0 \div 10^6 \text{ m/s}$

$$\Delta x \geq \frac{h}{2 \pi m \Delta v} = \frac{6,626 \cdot 10^{-34}}{2 \cdot 3,14 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 10^6} = 1,16 \cdot 10^{-10} \text{ m} = 1,16 \text{ Å}$$

➤ Hay electron của nguyên tử hydro chuyển động theo phương x trong khoảng bán kính quỹ đạo bên thứ nhất thì gần đúng xem biến thiên khoảng cách $\Delta x = d = 2r = 2 \cdot 0,529 \cdot 10^{-10} = 1,058 \cdot 10^{-10} \text{ m}$

$$\Delta v \geq \frac{h}{2 \pi m \Delta x} = \frac{6,626 \cdot 10^{-34}}{2 \cdot 3,14 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 1,058 \cdot 10^{-10}} = 1,095 \cdot 10^6 \text{ m / s}$$

→ **Khi xác định tương đối chính xác tốc độ chuyển động của electron 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.**



Khái niệm đám mây electron

- ✓ Không thể dùng khái niệm quỹ đạo
- ✓ Đám mây e là vùng không gian electron có thể chuyển động = mật độ của đám mây ~ xác suất có mặt của e.



Khái niệm đám mây electron đối với cơ học lượng tử (trang 53 SGK)

- ✓ Khi chuyển động xung quanh hạt nhân trong nguyên tử, e đã tạo ra một vùng không gian bao quanh hạt nhân mà nó có thể có mặt ở thời điểm bất kỳ với xác suất có mặt khác nhau. Vùng không gian đó gọi là đám mây electron hay orbital nguyên tử
- ✓ *Quy ước:* đám mây e là vùng không gian gần hạt nhân trong đó xác suất có mặt của e chiếm khoảng 90%. Hình dạng đám mây electron được xác định bởi bề mặt giới hạn vùng không gian đó. Bề mặt này tạo thành từ các điểm có **mật độ xác suất có mặt bằng nhau**





3.3. Phương trình sóng Schrodinger

(trang 47SGK)

Giúp Xác định trạng thái chuyển động của hạt vi mô (trang 48 SGK)

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

Ψ : Hàm sóng – Biên độ sóng ba chiều

E : Năng lượng toàn phần của electron trong nguyên tử (eV)

U : Thế năng của electron so với hạt nhân (eV)

x, y, z : Tọa độ electron so với hạt nhân

Ψ^2 : Xác suất tìm thấy hạt/ Mật độ electron tại vị trí x, y, z trong không gian

Yêu cầu hàm sóng: Hàm sóng $\Psi(x, y, z)$ phải

✓ *Chưa biến đổi*

✓ *Liên tục*

✓ *Đơn trị*

✓ *Hữu hạn*

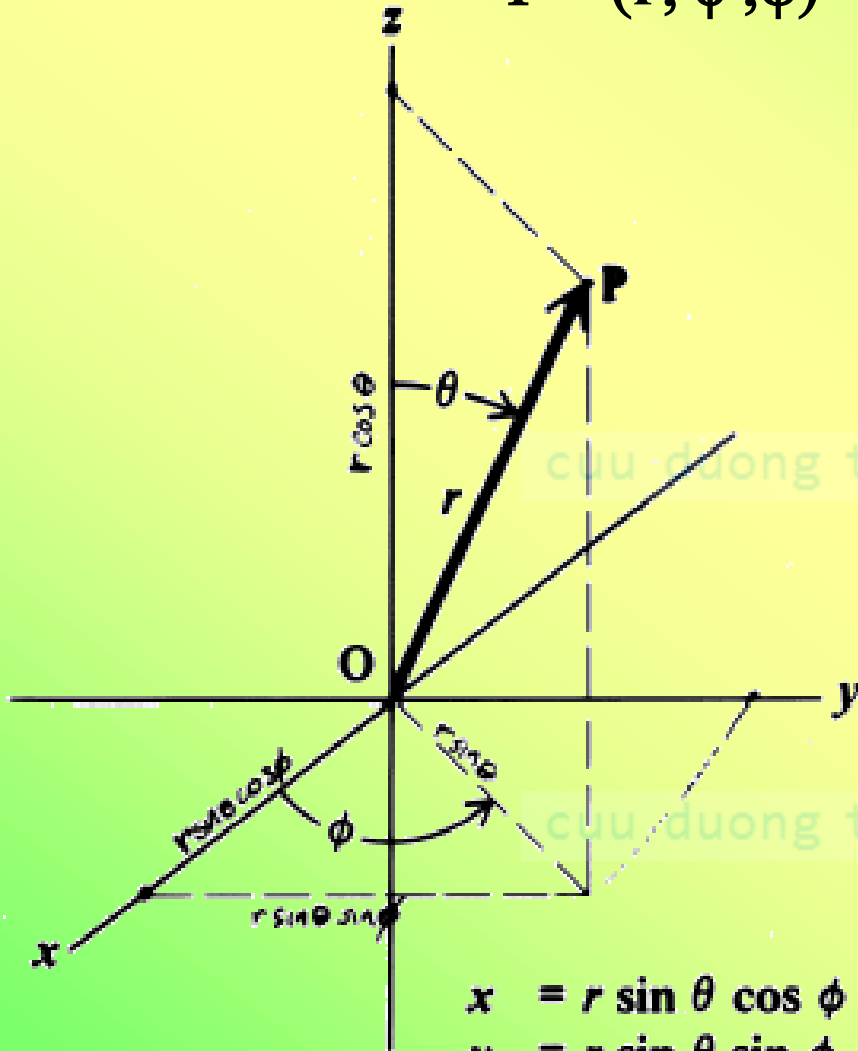
CuuDuongThanCong.com

$$\iiint \Psi(x, y, z) dx dy dz = 1$$



Hàm sóng mô tả orbital nguyên tử trong hệ tọa độ cầu

$$\Psi = (r, \phi, \varphi) = R(r) \cdot \Theta(\phi) \cdot \Phi(\varphi) \quad (\text{trang 49 SGK})$$



$$x = r \sin \theta \cos \phi$$

$$y = r \sin \theta \sin \phi$$

$$z = r \cos \theta$$

$$x^2 + y^2 + z^2 = r^2$$



Giải phương trình sóng Schrödinger

Hàm số sóng Ψ của electron chứa các số không thứ nguyên gọi là số lượng tử

Số số lượng tử = số bậc tự do của electron = 4

Bao gồm 3 số lượng tử n, l, m_l theo 3 chiều không gian và 1 số lượng tử m_s biểu thị cho sự tự quay quanh trục

Electron có mức năng lượng gián đoạn, giá trị các mức năng lượng của electron đặc trưng bằng các số lượng tử

➤ Số lượng tử chính n

➤ Số lượng tử phụ l

➤ Số lượng tử từ m_l

➤ Số lượng tử spin m_s



(1) Số lượng tử chính n và các mức năng lượng

(trang 54 SGK)

a) Giá trị: $n = 1, 2, 3, 4 \dots$

b) Xác định:

Trạng thái năng lượng

$$E = -\frac{me^4}{8\epsilon_0^2 n^2 h^2} Z^2 = -2,18.10^{-18} \frac{Z^2}{n^2} J = -13,6 \frac{Z^2}{n^2} eV$$

lỗ trống

Kích thước trung bình của đám mây electron

$$r = \frac{a_0 n^2}{Z} \left\{ 1 + \frac{1}{2} \left[1 - \frac{l(l+1)}{n^2} \right] \right\}$$

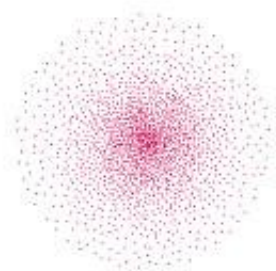
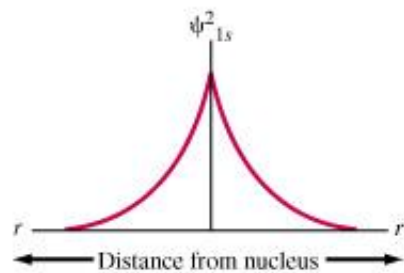
(trang 56 SGK)

c) Khi n tăng thì E và r tăng → Pha vị toán năng lượng sẽ tăng kích thước đám mây electron

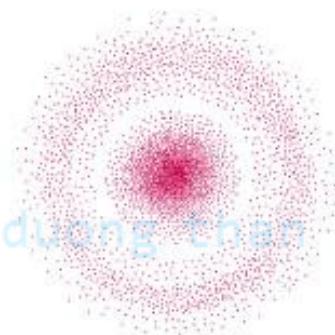
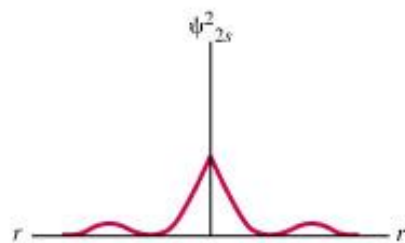
d) Các mức năng lượng tương ứng

n	1	2	3	...	$+\infty$
Mức năng lượng	E_1	E_2	E_3	...	E_∞

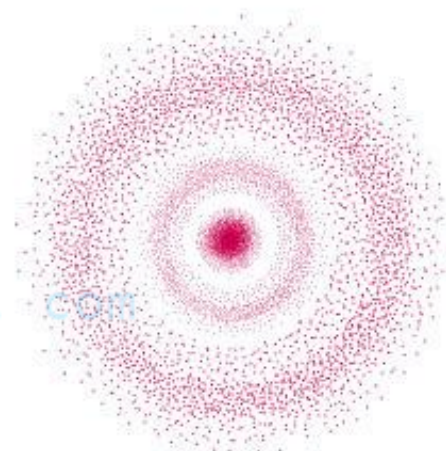
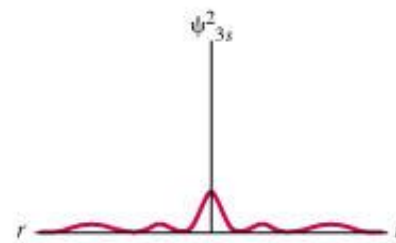




(a) 1s



(b) 2s



(c) 3s

- ✓ *Bình thường electron trải trải trên, ở ở mức năng lượng thấp nhất : Mức cơ bản*
- ✓ *Khi hấp thu năng lượng electron chuyển sang mức năng lượng cao hơn: Mức năng lượng kích thích kèm trên → electron sẽ nhanh chóng trở lại mức năng lượng trên → phát ra năng lượng dưới dạng sóng ánh sáng:*

$$\Delta E = E_{kt} - E_{cb} = -13,6Z^2 \left(\frac{1}{n_{kt}^2} - \frac{1}{n_{cb}^2} \right) = h\nu = \frac{hc}{\lambda} \quad (\text{trang 55 SGK})$$

✓ Quang phổ nguyên tử

- *Quang phổ của các nguyên tử là quang phổ vạch.*
- *Quang phổ của mỗi nguyên tử là đặc trưng*

✓ *Lớp electron: gồm các e có cùng giá trị n* (trang 56 SGK)

<i>n</i>	1	2	3	4	5	6	7
<i>Lớp e</i>	K	L	M	N	O	P	Q



(2) Số lượng tử phụ l (phương vị, orbital)

- a) Giá trị: phụ thuộc n : $l = 0, 1, 2, \dots, (n - 1)$
- b) Xác định moment động lượng của electron trong nguyên tử
- $$\vec{M} = r m \vec{v}$$

$$|\vec{M}| = \frac{h}{2\pi} \sqrt{l(l+1)}$$

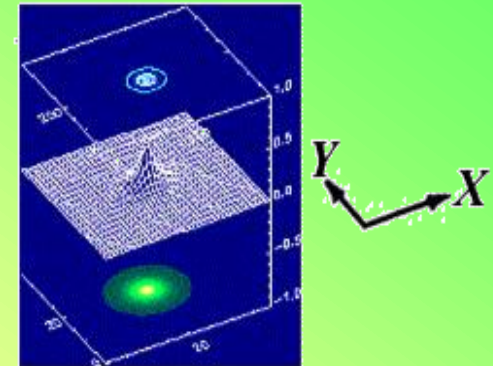
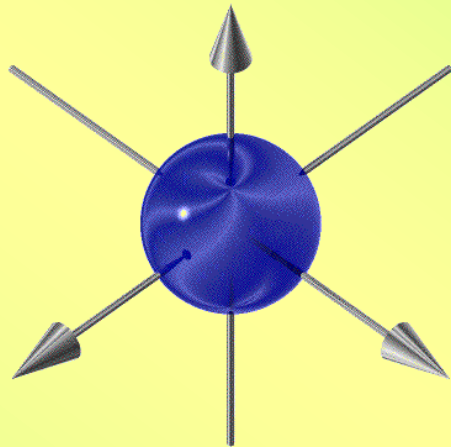
- c) Ảnh hưởng đến năng lượng và hình dạng của mây electron trong nguyên tử nhiều electron
- d) Các mức năng lượng n và l hợp thành phân lớp động lượng, phân lớp electron

l	0	1	2	3
Phân lớp e	s	p	d	f

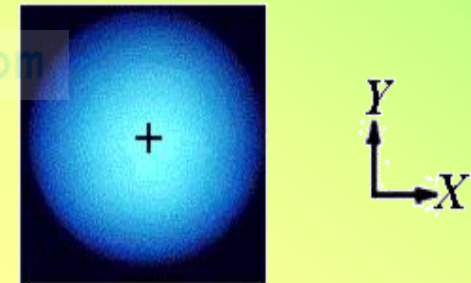
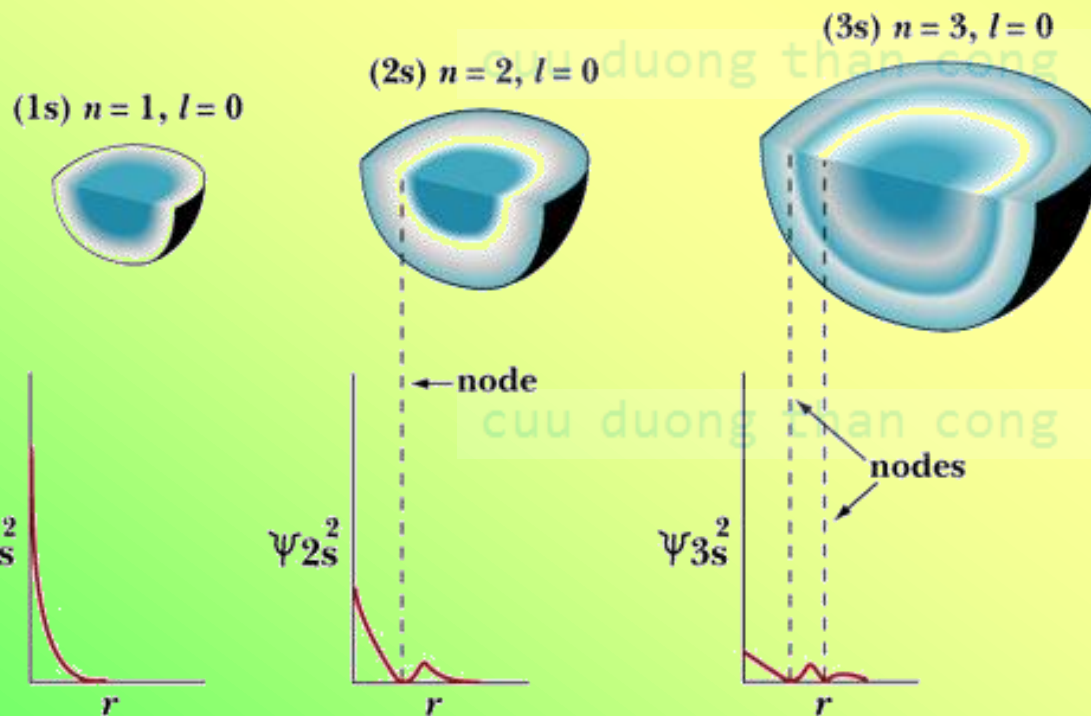
→ Ký hiệu phân lớp: 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d...



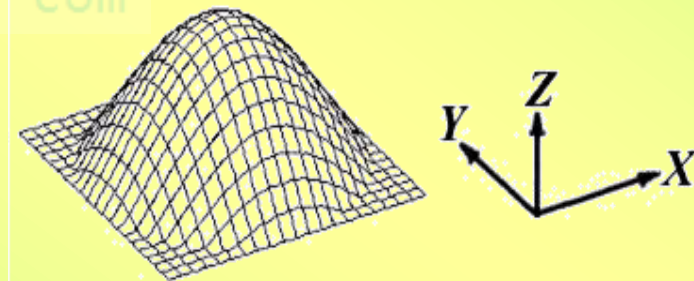
Phân lớp s



(a)

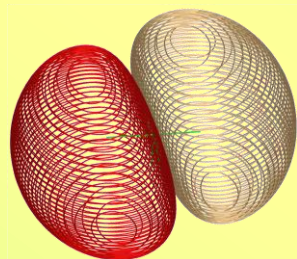


(b)

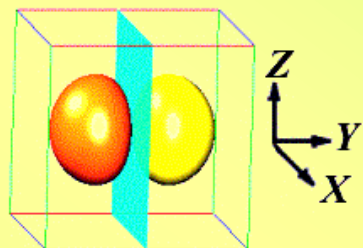


(c)

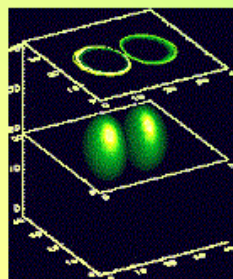
Phân lớp p



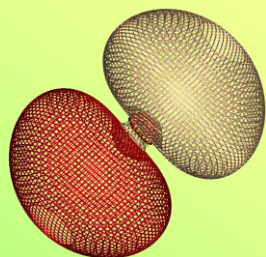
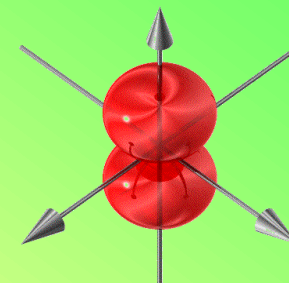
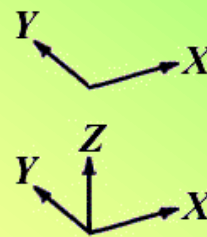
2p



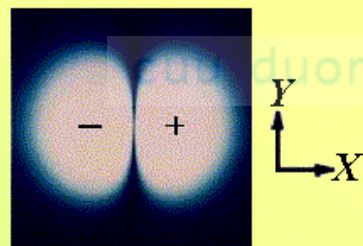
(a)



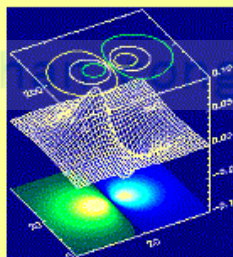
(b)



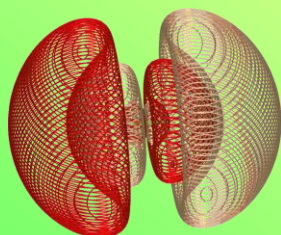
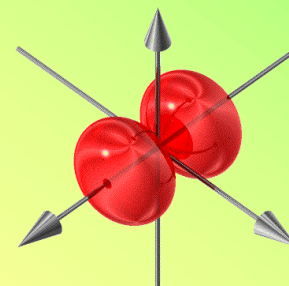
3p



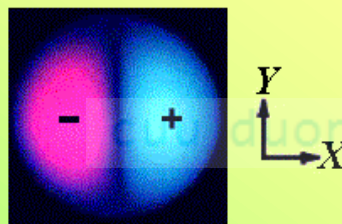
(c)



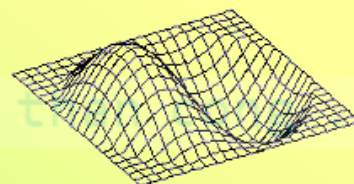
(d)



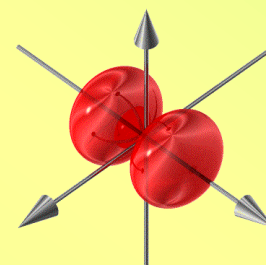
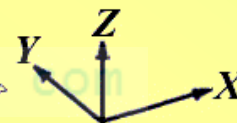
4p



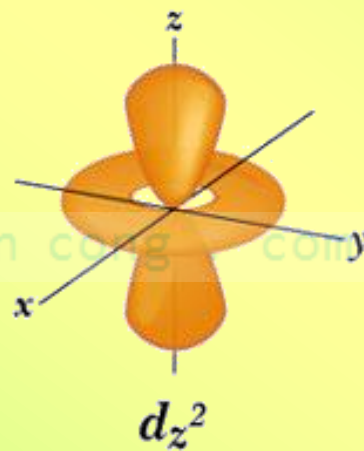
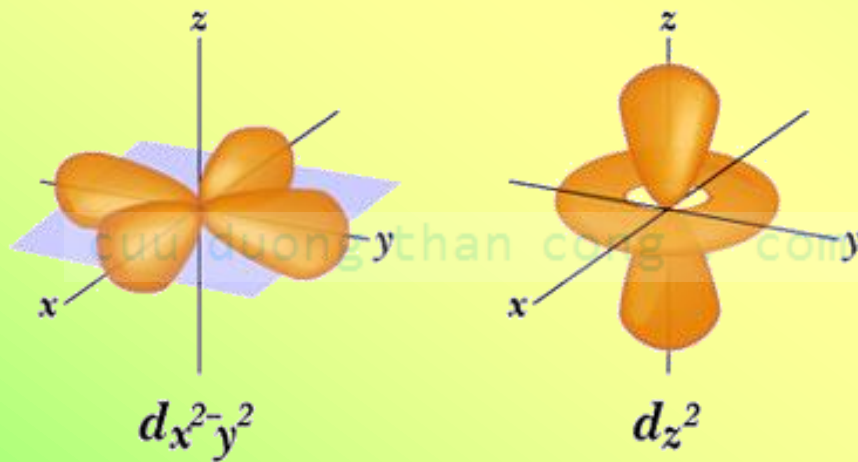
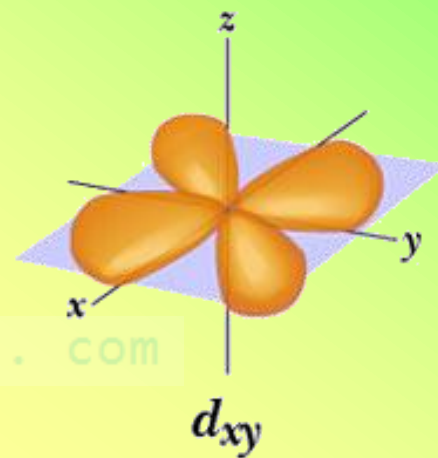
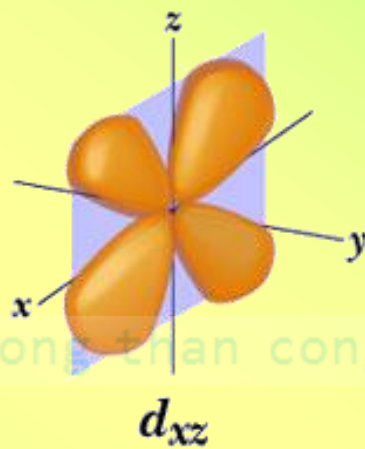
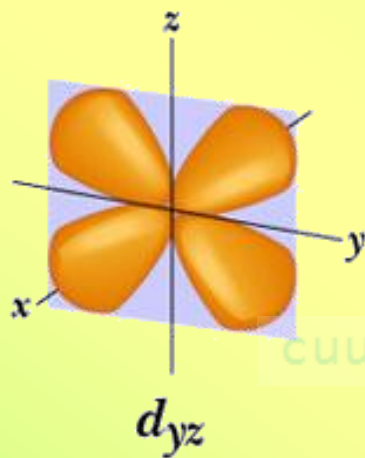
(e)



(f)

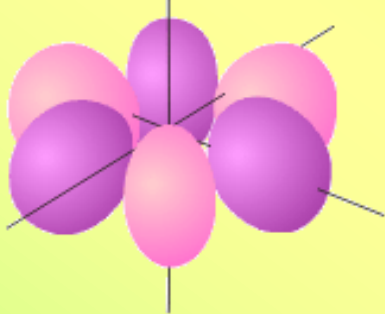


Phân lớp d

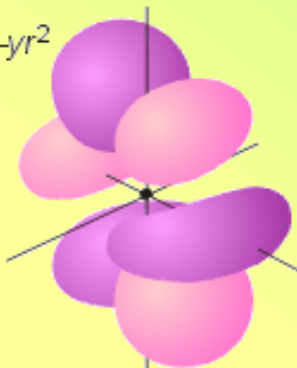


Phân lớp f

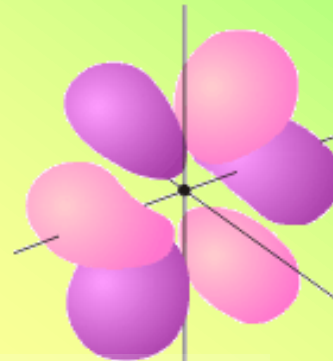
$$4f_{y^3-3yx^2}$$



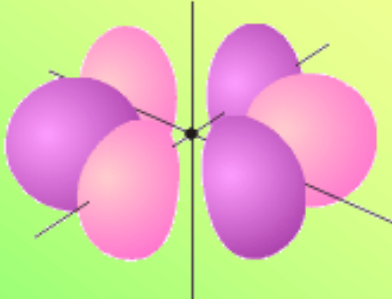
$$4f_{5yz^2-yr^2}$$



$$4f_{5xz^2-3xr^2}$$



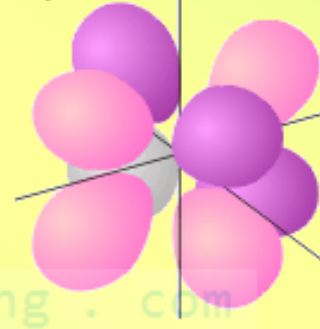
$$4f_{x^3-3xy^2}$$



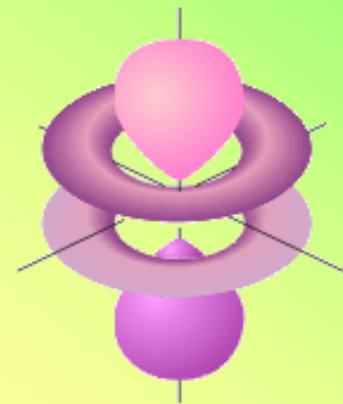
$$4f_{zx^2-zy^2}$$



$$4f_{xyz}$$



$$4f_{5z^3-3zr^2}$$



(3) Số lượng tử từ m_l

a) Giá trị: phụ thuộc l : $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l \rightarrow$ Cứ mỗi giá trị của l có $(2l + 1)$ giá trị của m_l .

b) Xác định

✓ Hình chiếu của moment động lượng lên trục z

$$M_z = m_l \frac{h}{2\pi}$$

✓ Hình ảnh của đám mây electron trong không gian: Mỗi giá trị của m_l ứng với một cách định hướng của đám mây electron

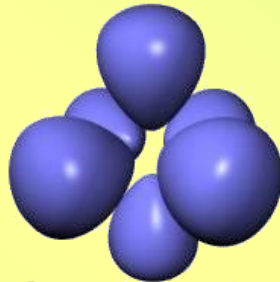
c) Khi biết n, l, m_l : biết tọa độ của electron trong không gian so với nhân $\rightarrow$ Xác định được orbital nguyên tử (ON – OA)



Một vài orbital nguyên tử

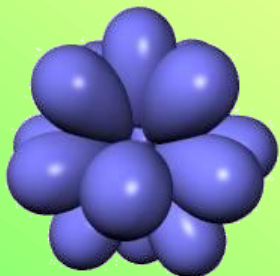


$$\begin{aligned} l &= 0 \\ m_l &= 0 \\ m_s &= +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \end{aligned}$$



$$\begin{aligned} l &= 1 \\ m_l &= -1, 0, 1 \\ m_s &= +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \end{aligned}$$

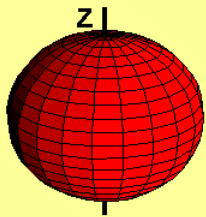
$2p_x$	$2p_y$	$2p_z$



$$\begin{aligned} l &= 2 \\ m_l &= -2, -1, 0, 1, 2 \\ m_s &= +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \end{aligned}$$

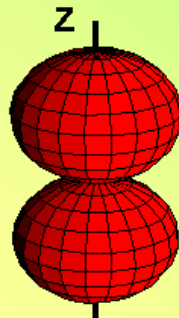
$3d_{xy}$	$3d_{xz}$	$3d_{yz}$	$3d_{x^2-y^2}$	$3d_{z^2}$





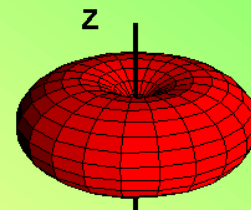
$$l = 0$$

$$m = 0$$



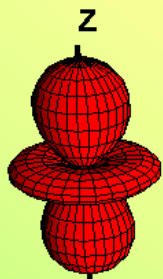
$$l = 1$$

$$m = 0$$



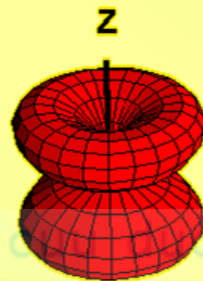
$$l = 1$$

$$m = +1, -1$$



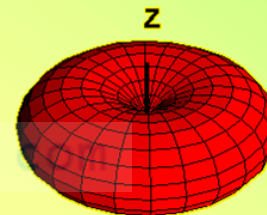
$$l = 2$$

$$m = 0$$



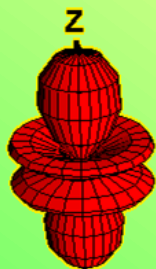
$$l = 2$$

$$m = +1, -1$$



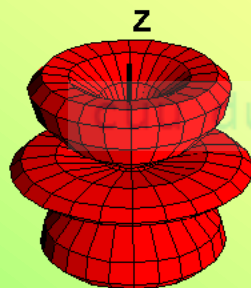
$$l = 2$$

$$m = +2, -2$$



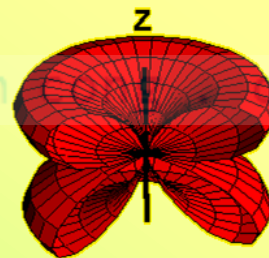
$$l = 3$$

$$m = 0$$



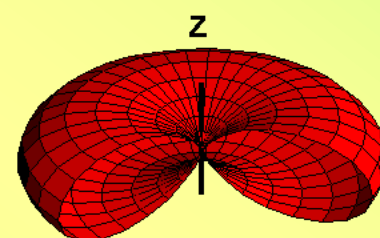
$$l = 3$$

$$m = +1, -1$$



$$l = 3$$

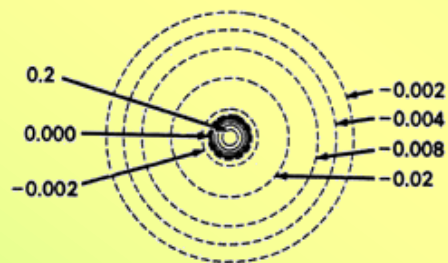
$$m = +2, -2$$



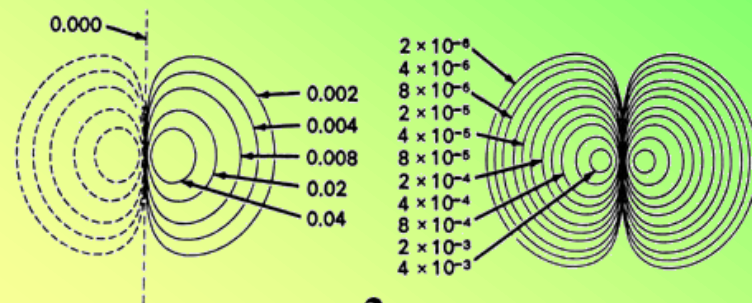
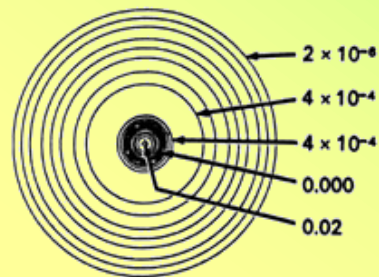
$$l = 3$$

$$m = +3, -3$$

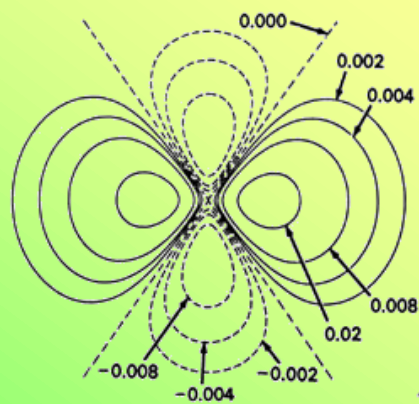




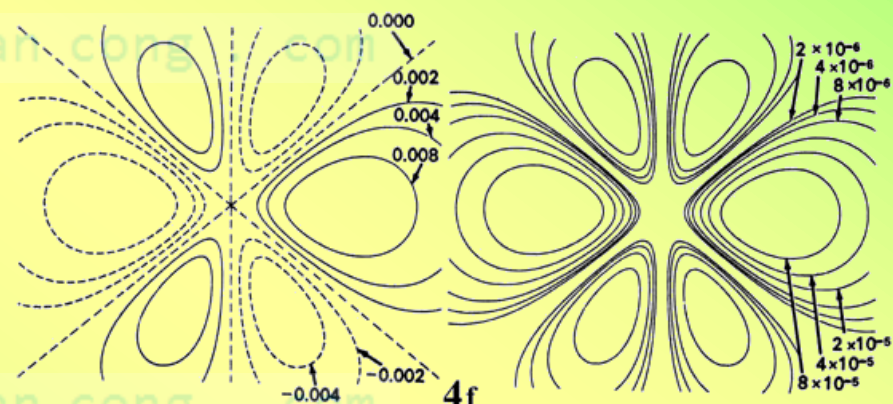
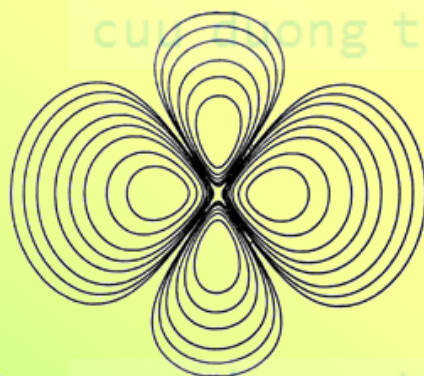
2s



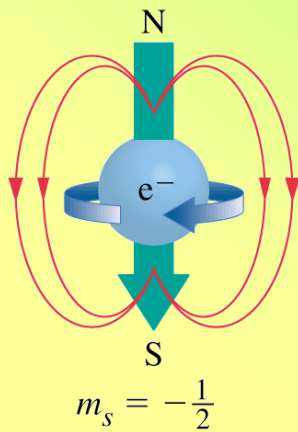
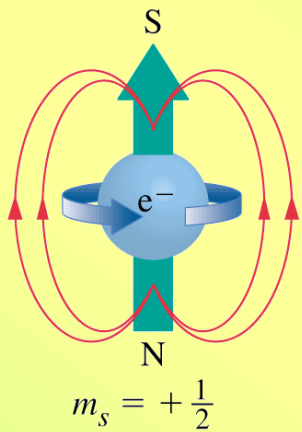
2p



3d



4f



(4) Số lượng tử spin m_s

a) Giá trị:

$s = +1/2$: electron quay thuận chiều kim đồng hồ

$s = -1/2$: electron quay ngược chiều kim đồng hồ

b) Xác định: Moment động lượng sinh ra do khả năng tối quay của electron quanh trục

$$M_s = \frac{h}{2\pi} \sqrt{s(s+1)}$$

✓ Xác định: trạng thái chuyển động riêng của electron, tức là sự tự quay quanh trục của electron.

✓ Mỗi tổ hợp n, l, m_l, m_s tương ứng một electron trong nguyên tử.



IV. NGUYÊN TỬ NHIỀU ELECTRON

Nguyên tắc:

Giaûi phöông trình sòùng Schrodinger baêng phöông phaùp gaàn ñuùng moät electron :

- ✓ Giaûi thieát haøm sòùng cuûa heä nhieàu electron laø toång caùc haøm sòùng cuûa töøng electron riêng bieät.
- ✓ Phöông trình sòùng Schrodinger coù theå giaûi riêng cho töøng electron trong nguyên töû.

4.1. Trạng thái năng lượng của electron trong nguyên tử nhiều e.

4.2. Các quy luật phân bố electron vào nguyên tử nhiều e.

4.3. Công thức electron nguyên tử.



4.1. Trạng thái năng lượng của electron trong nguyên tử nhiều electron.

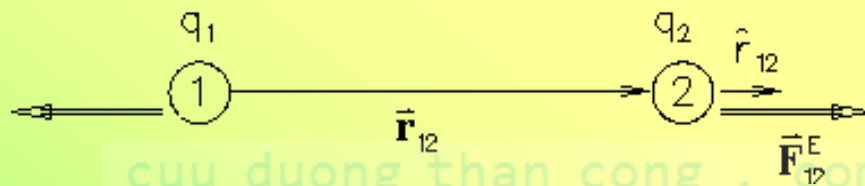
Các lực tác dụng

➤ *Các lực tác dụng lên electron trong nguyên tử nhiều electron*

- Lực hút nhân – electron
- Lực đẩy: electron – electron trong cùng một lớp
- Lực đẩy: electron ở lớp trong với electron ở lớp ngoài

→ Lực hút thực tế giữa nhân và electron luôn nhỏ hơn lực hút lý thuyết.

Electrostatic force:



$$\vec{F}_{12}^E = k_E \frac{q_1 q_2}{r_{12}^2} \hat{r}_{12}$$

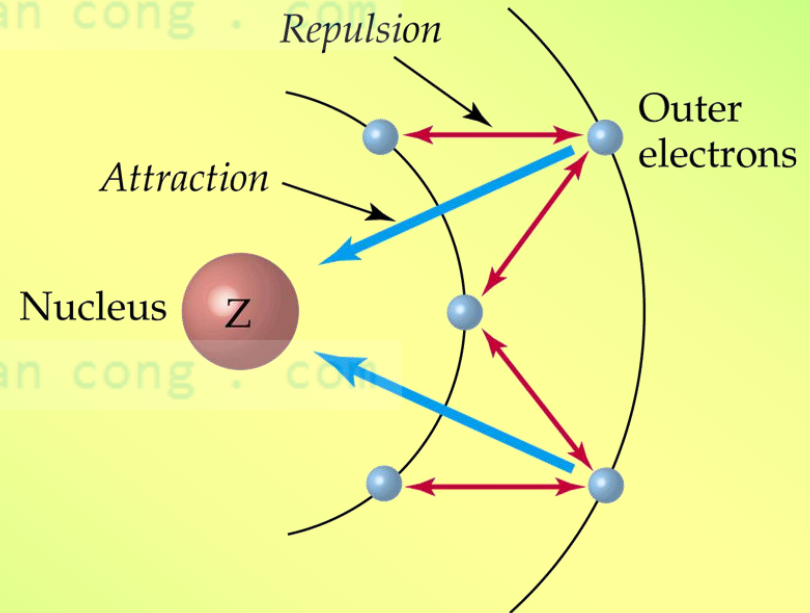
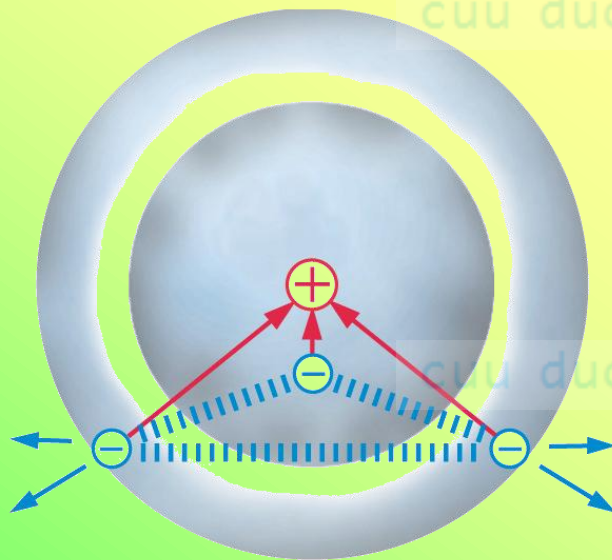


4.1. Trạng thái năng lượng của electron trong nguyên tử nhiều electron.

Các hiệu ứng

➤ Hiệu ứng chắn: do lực đẩy, các electron bên trong chắn làm yếu lực hút hạt nhân với electron bên ngoài.

- ✓ Hiệu ứng chắn tăng khi:
- + số lớp electron tăng
 - + số electron tăng





Quy tắc Slater

✓ Nieän tích haít nhân hieäu düng: $Z' = Z - \sum \delta_{ij}$

Trong ñoù δ_{ij} laø hieäu öùng chaén ñieän töû i ñoái vớì ñieän töû j .

✓ Caùch tính δ_{ij}

➤ Trình baøy laïi công thöïc döøi daïng

(1s) (2s 2p) (3s 3p) (3d) (4s 4p) (4d 4f) (5s 5p) (5d 5f) ...

➤ Tính tổng δ_{ij} theo baûng

Vị trí electron chắn e_i	Giá trị δ_{ij}	
	Electron bị chắn e_j nằm ở ns hay np	Electron bị chắn e_j nằm ở nd hay nf
Lớp (n+1)	0	0
ns, np	0,35 Nếu cùng 1s $\delta_{ij} = 0,30$	0,35
(n-1)s, (n-1)p	0,85	1,00
(n-1)d, (n-1)f	1,00	1,00
(n-2) trở vào	1,00	1,00



4.1. Trạng thái năng lượng của electron trong nguyên tử nhiều electron.

Các hiệu ứng

➤ Hiệu ứng xâm nhập: các electron lớp bên ngoài xuyên qua các lớp electron bên trong xâm nhập vào gần hạt nhân.

✓ **Hiệu ứng xâm nhập:** ngược lại với hiệu ứng chắn.

Khả năng xâm nhập giảm khi n và l tăng

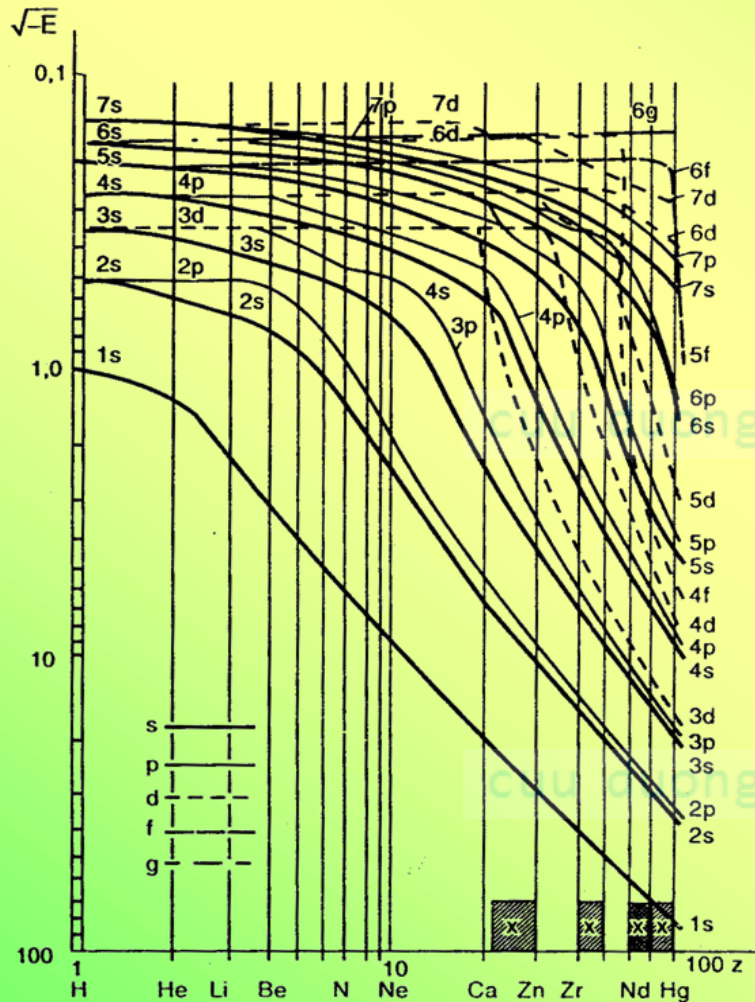
cuu duong than cong . com

Các electron có giá trị l càng lớn thì có hiệu ứng xâm nhập càng yếu và có độ bị chắn càng lớn làm cho lực hút giữa electron với hạt nhân càng yếu, khi đó electron có năng lượng càng cao.

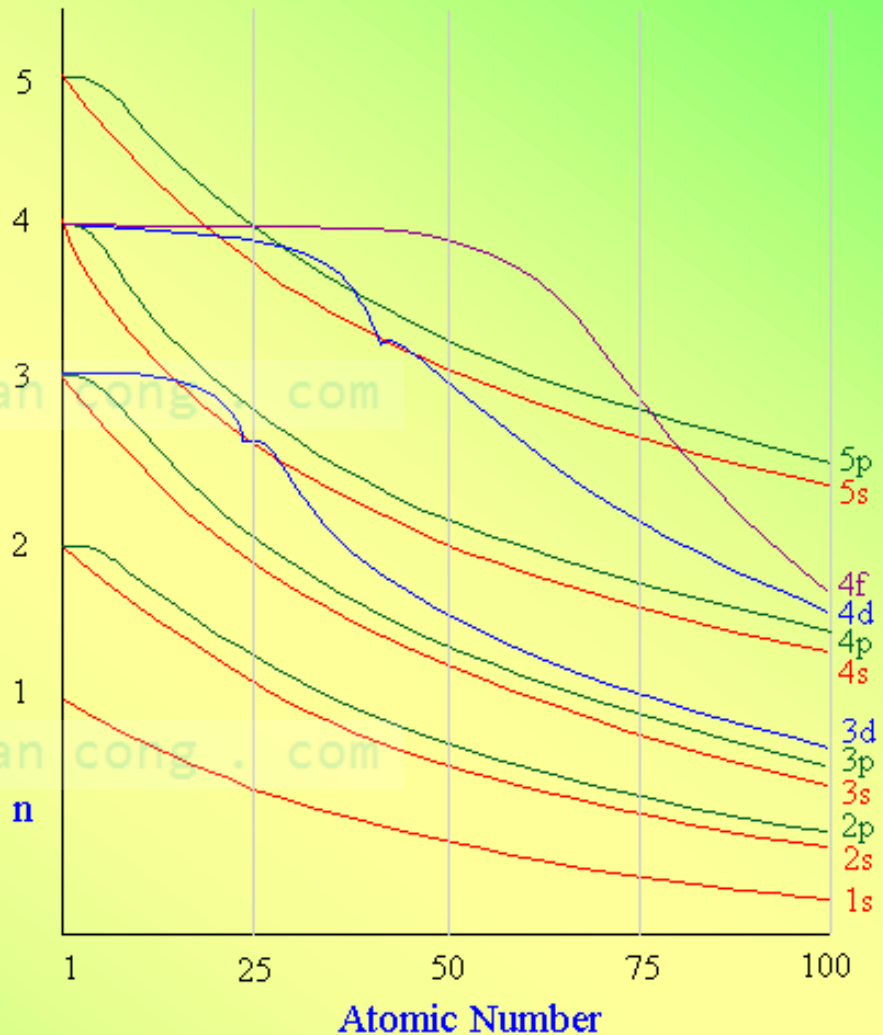
cuu duong than cong . com



Sự phụ thuộc các phân mức năng lượng vào điện tích hạt nhân (Trang 73 SGK)



Sự phụ thuộc của các phân mức năng lượng vào điện tích hạt nhân nguyên tử của một số nguyên tố



4.1. Trạng thái năng lượng của electron trong nguyên tử nhiều electron.

Được đặc trưng bằng giá trị của 4 đại lượng vật lý

1. Năng lượng của electron phụ thuộc vào số lượng tử n và l

$$E = -\frac{2\pi me^4}{h^2} \frac{Z'^2}{n^{*2}} = -13,6 \frac{Z'^2}{n^{*2}} = h\nu = \frac{hc}{\lambda} \text{ (eV)}$$

Trong đó	n^*	1	2	3	3,7	4,0	4,4
----------	-------	---	---	---	-----	-----	-----

2. Mômen động lượng: phụ thuộc vào số lượng tử l

$$\vec{M} = r m \vec{v} \quad |M| = \frac{h}{2\pi} \sqrt{l(l+1)}$$

3. Hình chiếu moment động lượng lên phương z: phụ thuộc vào số lượng tử m_l

$$M_z = m_l \frac{h}{2\pi}$$

4. Moment động lượng spin: phụ thuộc vào số lượng tử s

$$M_s = \frac{h}{2\pi} \sqrt{s(s+1)}$$



Xác định đủ 4 số lượng tử n, l, m_l, m_s thì xác định được hoàn toàn trạng thái electron trong nguyên tử nhiều electron

Hình dáng các OA và đám mây electron giống nguyên tử 1 electron



4.2. Các quy luật phân bố electron vào nguyên tử nhiều e.

- a. Nguyên lý ngoại trừ Pauli
- b. Nguyên lý vững bền

Quy tắc Klechkovskii

- c. Quy tắc Hund





a. Nguyên lý ngoại trừ Pauli

Trong phạm vi một nguyên tử không thể có hai electron có cùng 4 số lượng tử. → Một AO chứa tối đa 2e có spin ngược dấu.

Phân lớp	s	p	d	f
Số AO trong phân lớp	1	3	5	7
Số e max trong phân lớp	2	6	10	14

Lớp n	1	2	3	4	5	6	7
Số phân lớp trong lớp n	1	2	3	4	5	6	7
Số AO trong lớp n ($= n^2$)	1	4	9	16	25	36	49
Số e max có thể chứa trong lớp n ($= 2n^2$)	2	8	18	32	50	72	98



b. Nguyên lý vững bền

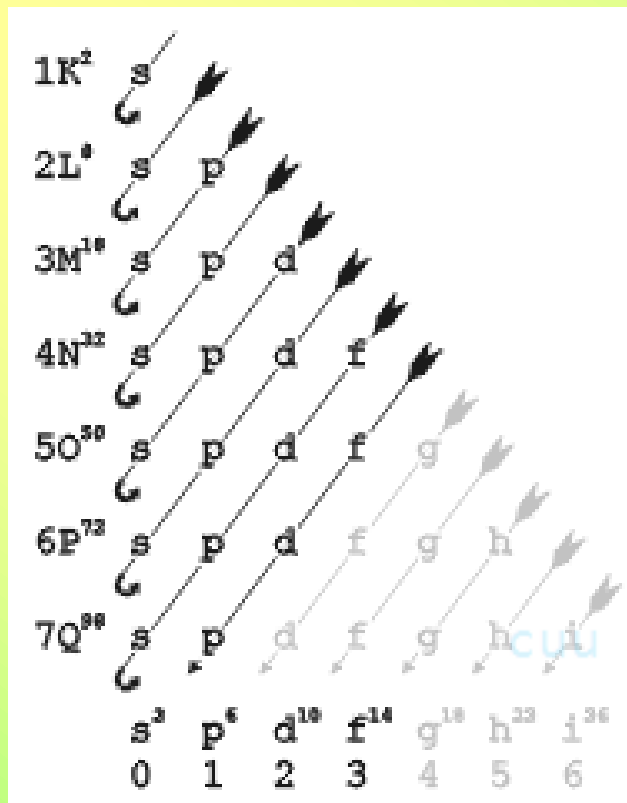
Trong điều kiện bình thường nguyên tử phải ở trạng thái có năng lượng thấp nhất

➤ Quy tắc KlechKovski:

Điền e vào các phân lớp có $(n + l)$ tăng dần.

Khi $(n + l) = \text{nhau}$: điền e vào phân mức có n tăng dần.





Phân mức: 1s 2s 2p 3s 3p 4s 3d 4p 5s 4d 5p 6s 4f 5d 6p 7s 5f 6d

(n + l) 1 2 3 3 4 4 5 5 5 6 6 6 7 7 7 7 8 8

✓ Dãy thòu tòi năng lờĩng tăng dần

$1s_2^2 2s_4^2 2p_{10}^6 3s_{12}^2 3p_{18}^6 4s_{20}^2 3d_{30}^{10} 4p_{36}^6 5s_{38}^2 4d_{48}^{10} 5p_{54}^6 6s_{56}^2 4f_{70}^{14} 5d_{80}^{10} 6p_{86}^6 7s_{88}^2 5f_{102}^{14} 6d_{112}^{10} 7p_{118}^6$

✓ Àùp dũng nguyẽn lỹ vũng beàn vaø nguyẽn lỹ Pauli ta vieát ñõõĩc công thòu electron cho nguyẽn tũu nhiềau electron





Quy tắc Hund

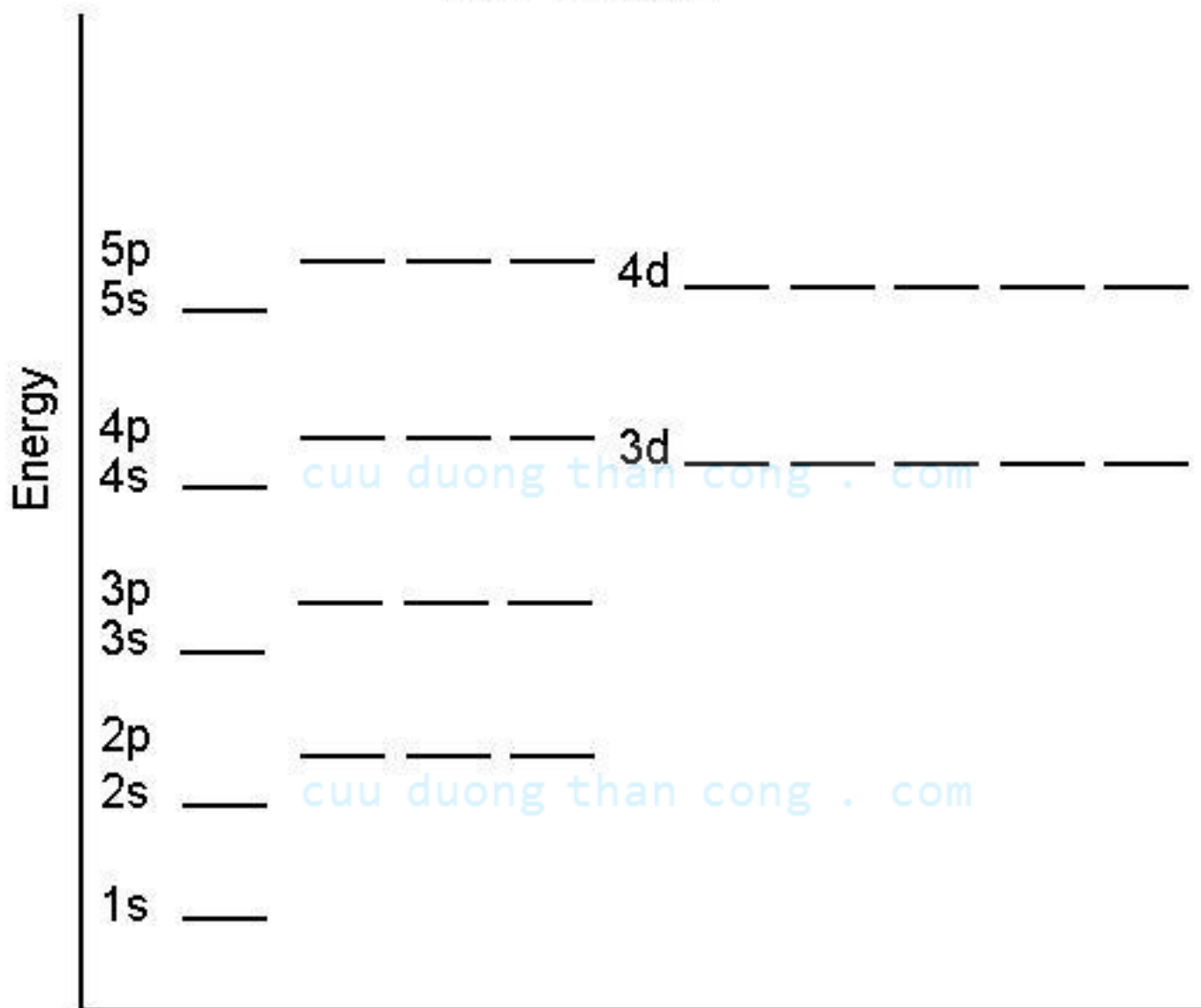
Trạng thái bền của nguyên tử tương ứng với sự sắp xếp electron sao cho trong cùng một phân lớp giá trị tuyệt đối của tổng spin electron phải cực đại $\rightarrow$ tức số electron độc thân là lớn nhất

Khi e không đủ để bão hòa một phân mức: E_{min} - khi các AO được sử dụng tối đa

+ Quy ước: Điền electron có spin dương trước, âm sau



Spin diagram



4.3.
Công thức
electron
nguyên tử.

Z	Element	Configuration	Z	Element	Configuration	Z	Element	Configuration
1	H	1s ¹	38	Sr	[Kr]5s ²	75	Re	[Xe]4f ¹⁴ 5d ⁵ 6s ²
2	He	1s ²	39	Y	[Kr]4d ¹ 5s ²	76	Os	[Xe]4f ¹⁴ 5d ⁶ 6s ²
3	Li	[He]2s ¹	40	Zr	[Kr]4d ² 5s ²	77	Ir	[Xe]4f ¹⁴ 5d ⁷ 6s ²
4	Be	[He]2s ²	41	Nb	[Kr]4d ⁴ 5s ¹	78	Pt	[Xe]4f ¹⁴ 5d ⁸ 6s ¹
5	B	[He]2s ² 2p ¹	42	Mo	[Kr]4d ⁵ 5s ¹	79	Au	[Xe]4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ¹
6	C	[He]2s ² 2p ²	43	Tc	[Kr]4d ⁵ 5s ²	80	Hg	[Xe]4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ²
7	N	[He]2s ² 2p ³	44	Ru	[Kr]4d ⁷ 5s ¹	81	Tl	[Xe]4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ¹
8	O	[He]2s ² 2p ⁴	45	Rh	[Kr]4d ⁸ 5s ¹	82	Pb	[Xe]4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ²
9	F	[He]2s ² 2p ⁵	46	Pd	[Kr]4d ¹⁰	83	Bi	[Xe]4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ³
10	Ne	[He]2s ² 2p ⁶	47	Ag	[Kr]4d ¹⁰ 5s ¹	84	Po	[Xe]4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ⁴
11	Na	[Ne]3s ¹	48	Cd	[Kr]4d ¹⁰ 5s ²	85	At	[Xe]4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ⁵
12	Mg	[Ne]3s ²	49	In	[Kr]4d ¹⁰ 5s ² 5p ¹	86	Rn	[Xe]4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ⁶
13	Al	[Ne]3s ² 3p ¹	50	Sn	[Kr]4d ¹⁰ 5s ² 5p ²	87	Fr	[Rn]7s ¹
14	Si	[Ne]3s ² 3p ²	51	Sb	[Kr]4d ¹⁰ 5s ² 5p ³	88	Ra	[Rn]7s ²
15	P	[Ne]3s ² 3p ³	52	Te	[Kr]4d ¹⁰ 5s ² 5p ⁴	89	Ac	[Rn]6d ¹ 7s ²
16	S	[Ne]3s ² 3p ⁴	53	I	[Kr]4d ¹⁰ 5s ² 5p ⁵	90	Th	[Rn]6d ² 7s ²
17	Cl	[Ne]3s ² 3p ⁵	54	Xe	[Kr]4d ¹⁰ 5s ² 5p ⁶	91	Pa	[Rn]5f ² 6d ¹ 7s ²
18	Ar	[Ne]3s ² 3p ⁶	55	Cs	[Xe]6s ¹	92	U	[Rn]5f ³ 6d ¹ 7s ²
19	K	[Ar]4s ¹	56	Ba	[Xe]6s ²	93	Np	[Rn]5f ⁴ 6d ¹ 7s ²
20	Ca	[Ar]4s ²	57	La	[Xe]5d ¹ 6s ²	94	Pu	[Rn]5f ⁶ 7s ²
21	Sc	[Ar]3d ¹ 4s ²	58	Ce	[Xe]4f ¹ 5d ¹ 6s ²	95	Am	[Rn]5f ⁷ 7s ²
22	Ti	[Ar]3d ² 4s ²	59	Pr	[Xe]4f ³ 6s ²	96	Cm	[Rn]5f ⁷ 6d ¹ 7s ²
23	V	[Ar]3d ³ 4s ²	60	Nd	[Xe]4f ⁴ 6s ²	97	Bk	[Rn]5f ⁹ 7s ²
24	Cr	[Ar]3d ⁵ 4s ¹	61	Pm	[Xe]4f ⁵ 6s ²	98	Cf	[Rn]5f ¹⁰ 7s ²
25	Mn	[Ar]3d ⁵ 4s ²	62	Sm	[Xe]4f ⁶ 6s ²	99	Es	[Rn]5f ¹¹ 7s ²
26	Fe	[Ar]3d ⁶ 4s ²	63	Eu	[Xe]4f ⁷ 6s ²	100	Fm	[Rn]5f ¹² 7s ²
27	Co	[Ar]3d ⁷ 4s ²	64	Gd	[Xe]4f ⁷ 5d ¹ 6s ²	101	Md	[Rn]5f ¹³ 7s ²
28	Ni	[Ar]3d ⁸ 4s ²	65	Tb	[Xe]4f ⁹ 6s ²	102	No	[Rn]5f ¹⁴ 7s ²
29	Cu	[Ar]3d ¹⁰ 4s ¹	66	Dy	[Xe]4f ¹⁰ 6s ²	103	Lr	[Rn]5f ¹⁴ 6d ¹ 7s ²
30	Zn	[Ar]3d ¹⁰ 4s ²	67	Ho	[Xe]4f ¹¹ 6s ²	104	Rf	[Rn]5f ¹⁴ 6d ² 7s ²
31	Ga	[Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ¹	68	Er	[Xe]4f ¹² 6s ²	105	Ha	[Rn]5f ¹⁴ 6d ³ 7s ²
32	Ge	[Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ²	69	Tm	[Xe]4f ¹³ 6s ²	106	Sg	[Rn]5f ¹⁴ 6d ⁴ 7s ²
33	As	[Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ³	70	Yb	[Xe]4f ¹⁴ 6s ²	107	Ns	[Rn]5f ¹⁴ 6d ⁵ 7s ²
34	Se	[Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁴	71	Lu	[Xe]4f ¹⁴ 5d ¹ 6s ²	108	Hs	[Rn]5f ¹⁴ 6d ⁶ 7s ²
35	Br	[Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁵	72	Hf	[Xe]4f ¹⁴ 5d ² 6s ²	109	Mt	[Rn]5f ¹⁴ 6d ⁷ 7s ²
36	Kr	[Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁶	73	Ta	[Xe]4f ¹⁴ 5d ³ 6s ²			
37	Rb	[Kr]5s ¹	74	W	[Xe]4f ¹⁴ 5d ⁴ 6s ²			



TABLE 8.3 Electron Configurations of Elements with $Z = 1$ to 10

	Electron Configuration	ℓ $n + \ell$	1s 0 1	2s 0 2	2p 1 3
H	$1s^1$		$\uparrow$		
He	$1s^2$		$\uparrow\downarrow$		
Li	$1s^2 2s^1$		$\uparrow\downarrow$	$\uparrow$	
Be	$1s^2 2s^2$		$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	
B	$1s^2 2s^2 2p^1$		$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow$
C	$1s^2 2s^2 2p^2$		$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\uparrow$
N	$1s^2 2s^2 2p^3$		$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\uparrow\uparrow$
O	$1s^2 2s^2 2p^4$		$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow$
F	$1s^2 2s^2 2p^5$		$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow$
Ne	$1s^2 2s^2 2p^6$		$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$

TABLE 8.4 Orbital Box Diagrams for the Elements Ca Through Zn

		3d	4s
Ca	$[\text{Ar}]4s^2$		
Sc	$[\text{Ar}]3d^1 4s^2$		
Ti	$[\text{Ar}]3d^2 4s^2$		
V	$[\text{Ar}]3d^3 4s^2$		
Cr*	$[\text{Ar}]3d^5 4s^1$		
Mn	$[\text{Ar}]3d^5 4s^2$		
Fe	$[\text{Ar}]3d^6 4s^2$		
Co	$[\text{Ar}]3d^7 4s^2$		
Ni	$[\text{Ar}]3d^8 4s^2$		
Cu*	$[\text{Ar}]3d^{10} 4s^1$		
Zn	$[\text{Ar}]3d^{10} 4s^2$		

n

/

m,

m_s

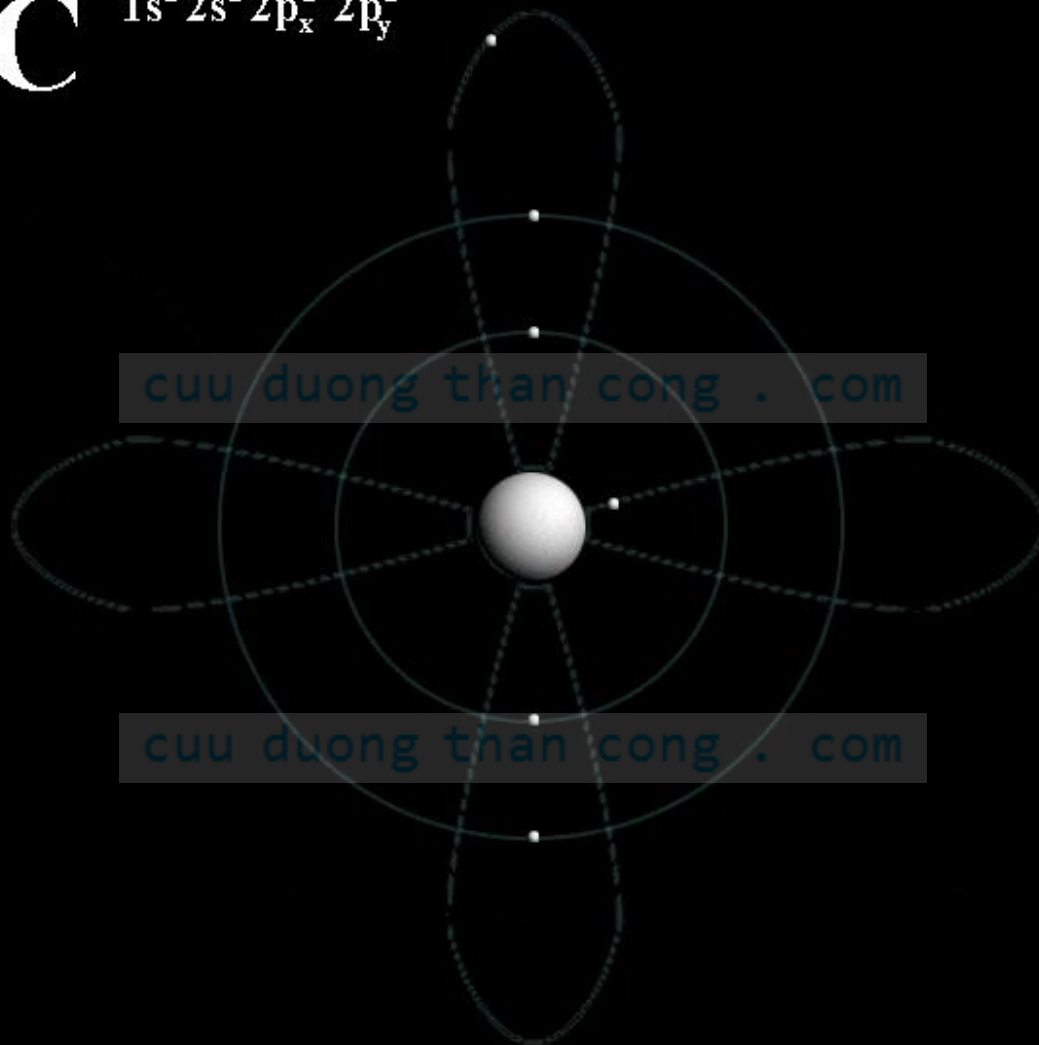
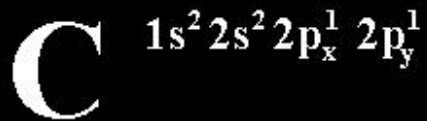
Lớp e

Phân lớp e

AO

e

Cấu hình nguyên tử Carbon



Cấu hình nguyên tử ???

10 (protons)

Neon

20 (Protons+Neutrons)

