

CHƯƠNG II

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

Cho đến giữa thế kỷ XVIII người ta cho rằng nguyên tử là hạt nhỏ nhất cấu tạo nên vật chất và không thể phân chia nhỏ hơn nữa. Nhưng đến cuối thế kỷ XIX nhiều công trình khoa học thực nghiệm đã chứng tỏ rằng nguyên tử có cấu tạo phức tạp từ nhiều loại hạt cơ bản khác nhau.

I. Những cơ sở vật lý nghiên cứu cấu tạo nguyên tử

1. Thành phần nguyên tử

Nhờ những thành tựu của vật lý học, các nhà khoa học đã khẳng định rằng nguyên tử gồm hai thành phần chính là electron và hạt nhân nguyên tử.

1.1. Electron (ký hiệu là e): Vỏ nguyên tử gồm các electron

- Khối lượng của e electron

$$m_e = 9,109.10^{-28} \text{g} = \frac{1}{1837} \text{ đ.v C}$$

- Điện tích của electron:

$$q_e = -1,602.10^{-19} \text{C}$$

Điện tích của e là điện tích nhỏ nhất đã gặp nên nó được chọn làm đơn vị điện tích.

$$q_e = -1 \text{ đơn vị điện tích hay } = -1$$

1.2. Hạt nhân nguyên tử

Là phần trung tâm của nguyên tử, gồm các hạt proton và neutron. Hạt nhân mang điện tích dương, số đơn vị điện tích dương của hạt nhân bằng số electron trong vỏ nguyên tử. Khối lượng của hạt nhân xấp xỉ khối lượng nguyên tử.

- Proton (ký hiệu p)

$$\text{Khối lượng: } m_p = 1,672.10^{-24} = 1,008 \text{ đ.v C}$$

$$\text{Điện tích : } q_p = 1,602.10^{-19} \text{C} = +1$$

- Neutron (ký hiệu n)

$$\text{Khối lượng: } m_n = 1,672.10^{-24} \text{g} = 1,00 \text{ đ.v C}$$

Neutron không mang điện

2. Thuyết lượng tử planck

Năm 1900 Planck đã trình bày quan điểm lượng tử đầu tiên và cho rằng: "Ánh sáng hay bức xạ điện từ nói chung gồm những lượng tử năng lượng phát đi từ nguồn sáng".

$$E = h\nu = h \frac{C}{\lambda}$$

Trong đó

E: lượng tử năng lượng

h: hằng số Planck ($h = 6,625.10^{-34} \text{ J.S}$)

ν : tần số của bức xạ

λ : bước sóng bức xạ

C: tốc độ ánh sáng

Bước sóng càng lớn thì tần số sóng càng giảm và ngược lại, E gọi là lượng tử năng lượng vì với mọi bức xạ đều phát ra hoặc hấp thụ đều bằng một số nguyên lần của E.

2.2. Hệ thức tương đối Einstein (1903)

Năm 1903 Einstein đã tìm ra mối quan hệ giữa vận tốc và khối lượng của vật chuyển động với năng lượng của nó qua biểu thức".

$$E = mc^2$$

Kết hợp với trước ta có:

$$E = h \frac{C}{\lambda} \Rightarrow mc^2 = h \frac{C}{\lambda}$$

$$mC = \frac{h}{\lambda} \text{ hay } \lambda = \frac{h}{mC}$$

λ là bước sóng của bức xạ, λ càng lớn thì tần số sóng càng bé, năng lượng càng nhỏ và ngược lại.

3. Bản chất sóng và hạt của electron

3.1. Mẫu nguyên tử Bohr (1913)

Bằng việc áp dụng đồng thời cả cơ học cổ điển và cơ học lượng tử khi nghiên cứu cấu tạo nguyên tử năm 1913, Niels Bohr đã xây dựng mẫu nguyên tử với nội dung sau:

- Trong nguyên tử electron chuyển động trên những quỹ đạo có bán kính xác định. Khi chuyển động trên các quỹ đạo này năng lượng của electron được bảo toàn.

- Mỗi quỹ đạo ứng với một mức năng lượng của electron càng xa hạt nhân thì năng lượng của electron càng cao.

- Khi electron chuyển từ quỹ đạo này sang quỹ đạo khác nó sẽ thu hoặc phát ra năng lượng bằng hiệu giữa 2 mức dưới dạng một bức xạ có tần số ν .

$$E = h\nu = E_n - E_m$$

Vậy: chuyển động của electron trong nguyên tử gắn liền với việc thu hoặc phát ra năng lượng dưới dạng bức xạ nên electron cũng có tính chất sóng và hạt như bức xạ.

3.2. Hệ thức De Broglie (1924)

Khi phát biểu về thuyết lượng tử, 1924 De Broglie đã nêu giả thuyết "không chỉ có bức xạ mà các hạt nhỏ trong nguyên tử như e, p cũng có bản chất sóng và hạt, được đặc trưng bằng bước sóng xác định".

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

Với: m: khối lượng của hạt

v: tốc độ chuyển động của hạt

Những nghiên cứu về sau cho thấy giả thuyết của De Broglie là đúng đắn. Vì electron cũng có bản chất sóng và hạt nên mọi phương trình mô tả chuyển động của electron phải thỏa mãn đồng thời cả hai tính chất đó.

3.3. Hệ thức bất định Heisenberg (1927)

Từ tính chất sóng và hạt của các hạt vi mô, 1927 nhà vật lý học Đức Heisenberg đã chứng minh nguyên lý bất định.

"Về nguyên tắc không thể xác định đồng thời chính xác cả tọa độ và vận tốc của hạt, do đó không thể xác định hoàn toàn chính xác các quỹ đạo chuyển động của hạt".

Nếu gọi sai số của phép đo về tốc độ của hạt theo phương x là Δv_x và sai số của phép đo tọa độ theo phương x là Δx thì ta có biểu thức của hệ thức bất định là :

$$\Delta x \cdot \Delta v_x \geq \frac{h}{m}$$

Trong đó h: hằng số Planck
 m: khối lượng của hạt

Theo biểu thức này ta thấy Δv_x và Δx biến thiên thuận nghịch với nhau. Nếu Δx càng nhỏ ($\Delta x \rightarrow 0$) nghĩa là càng xác định chính xác vị trí của hạt thì Δv_x càng lớn ($\Delta v_x \rightarrow \infty$), nghĩa là không thể xác định chính xác giá trị tốc độ của electron.

II. Hàm sóng và phương trình sóng của electron

Công trình của De Broglie đã đặt nền móng cho một môn cơ học mới dùng để mô tả chuyển động của các hạt vi mô. Năm 1925 - 1926, Heisenberg và Schrodinger độc lập nhau đã đề ra 2 phương pháp của môn cơ học này và đều đạt kết quả như nhau nhưng phương pháp của Schrodinger đơn giản hơn nhiều. Môn học mới dựa theo phương pháp Schrodinger mô tả chuyển động của các hạt vi mô gọi là môn cơ học lượng tử. Các kết quả thu được của môn cơ học này khi áp dụng cho các hệ vi mô đều phù hợp với thực nghiệm.

1. Hàm sóng (ψ)

Trạng thái chuyển động của hạt vi mô được mô tả bằng hàm số $\psi(x, y, z, t)$ là một hàm xác định, đơn vị và liên tục gọi là hàm sóng.

- Ý nghĩa vật lý của hàm sóng:

Ta không thể xác định chính xác electron có mặt ở tọa độ nào nhưng có thể biết xác suất tìm thấy electron nhiều nhất ở vùng mà phân lớn thời gian electron có mặt ở đó.

Vì hàm sóng $\psi(x, y, z, t)$ có thể là hàm thực hoặc phức nên nó không có ý nghĩa vật lý trực tiếp. Chỉ có bình phương modun của hàm sóng là $|\psi|^2$ (thực và luôn luôn dương) mới có ý nghĩa là mật độ xác suất tìm thấy hạt tại tọa độ tương ứng.

$|\psi(x, y, z, t)|^2 d\tau$ cho biết xác suất tìm thấy tại thời điểm t trong nguyên tố thể tích $d\tau$ có tâm là M(x, y, z).

Hình ảnh của hàm mật độ xác suất trong không gian gọi là đám mây điện tử.

Hàm sóng phải thỏa mãn các điều kiện sau:

- Hàm sóng phải đơn trị (tại mỗi điểm trong không gian ứng với tọa độ (x, y, z) chỉ có một giá trị duy nhất để cho xác suất tìm thấy electron tại đó chỉ có một giá trị tương ứng).

- Hàm sóng phải hữu hạn và liên tục (nghĩa là không thể bằng ∞ ở bất kỳ tọa độ nào nhưng có thể bằng 0).

- Hàm sóng phải thỏa mãn điều kiện:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi|^2 d\tau = 1$$

Để cho tổng xác suất tìm thấy electron từ $-\infty \rightarrow +\infty$ phải luôn luôn bằng 1, gọi là hàm sóng đã chuẩn hoá.

2. Phương trình sóng Schrodinger

Để tìm được hàm sóng mô tả chuyển động của hạt vi mô thì phải giải phương trình sóng gọi là phương trình Schrodinger. Đó là phương trình cơ bản của cơ học lượng tử được nhà vật lý người Áo Schrodinger đưa ra năm 1926.

Đó là phương trình vi phân bậc 2 của hàm ψ có dạng như sau đối với hạt (hay hệ hạt) ở dạng thái dừng:

$$\left(-\frac{h^2}{8\pi^2 m} \Delta + V \right) \psi = E\psi (*)$$

Trong đó: -V: thế năng của hạt tại toạ độ x,y,z

E: năng lượng toàn phần của hạt trong toàn hệ

$$\Delta: \text{toán tử Laplace: } \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

m: khối lượng của hạt

Trong trường hợp tổng quát có thể viết phương trình Schrodinger dưới dạng: $H\psi = E\psi$

* Trạng thái dừng là trạng thái mà năng lượng của hệ không phụ thuộc thời gian nghĩa là E của hệ không đổi.

Khi giải phương trình Schrodinger ta sẽ thu được các hàm sóng ψ mô tả các trạng thái chuyển động của electron trong nguyên tử và các giá trị năng lượng E ứng với các hàm ψ đó.

3. Kết quả giải phương trình sóng Schrodinger

Bài toán đơn giản nhất được các nhà khoa học thực hiện là bài toán của nguyên tử hydro.

Sau khi xây dựng hàm thế năng và đưa vào phương trình (*) người ta giải phương trình này và thu được hàm sóng ψ_{n,l,m_l} nghiệm của phương trình sóng mô tả trạng thái chuyển động của electron nguyên tử gọi là orbital nguyên tử.

Khi giải phương trình này, người ta nhận được đồng thời các cặp nghiệm E và ψ cùng các đại lượng vật lý xác định hàm ψ , đặc trưng cho trạng thái và vị trí chuyển động của electron trong nguyên tử đó là các số lượng tử n, l, m_l .

Ứng với một giá trị của E có một hàm sóng ψ , mỗi tổ hợp (E, ψ) đặc trưng cho một trạng thái của electron.

Trường hợp nhiều hàm ψ cùng ứng với một giá trị năng lượng E thì ta gọi là có sự suy biến năng lượng.

* *Chú ý:* Phương trình Schrodinger chỉ giải được chính xác với nguyên tử hydro và các ion đơn nguyên tử giống hydro. Còn với các nguyên tử nhiều electron thì phải sử dụng các phương pháp gần đúng.

4. Các số lượng tử và ý nghĩa

Khi giải phương trình Schrodinger người ta thấy xuất hiện các số lượng tử xác định hàm ψ , chúng xuất hiện do các điều kiện toán học để bài toán có nghiệm chứ không phải bởi áp đặt, các hàm ψ phụ thuộc vào các số lượng tử này.

4.1. Số lượng tử chính (n)

- Về trị số: nhận các giá trị nguyên dương: 1, 2 ... ∞
- Về ý nghĩa: xác định năng lượng của electron

$$E_n = -\frac{2\pi^2 me^4}{n^2 h^2}$$

Trong đó: n : số lượng tử chính
 m : khối lượng của electron
 e : điện tích của electron

Nếu thay $R = \frac{2\pi^2 me^4}{h^2}$ ta có $E = -\frac{R}{n^2}$

Ta thấy với n càng lớn thì năng lượng E càng lớn, electron càng ở cách xa nhân.

Những electron có cùng giá trị n tức là cùng mức năng lượng tạo thành một lớp electron.

Số lượng tử chính n	1	2	3	4	5	6	7
Mức năng lượng tương ứng	K	L	M	N	O	P	Q

4.2. Số lượng tử orbital (l) (số lượng tử momen góc)

- Về trị số: l nhận các giá trị nguyên từ 0 đến $(n - 1)$. Ứng với một giá trị của n thì có n giá trị của l .

- Về ý nghĩa: Xác định hình dạng và tên của orbital. Những electron có cùng giá trị l lập nên một phân lớp và có năng lượng như nhau. Lớp thứ n có n phân lớp.

Số lượng tử orbital (l)	0	1	2	3	4
Phân lớp	s	p	d	f	g

Để phân biệt năng lượng của các phân lớp cùng tên nhưng khác lớp ta ghi thêm giá trị số lượng tử chính ở trước ký hiệu phân lớp: ví dụ: 1s, 2s, 2p, 3s ...

4.3. Số lượng tử từ m_l :

- Về trị số: là một số nguyên có giá trị từ $-l$ đến $+l$ kể cả giá trị 0.

+ Với một giá trị của l , thì m_l có $(2l + 1)$ giá trị.

Ví dụ: $l = 1$; m_l có 3 giá trị là $-1, 0, 1$

$l = 2$; m_l có 5 giá trị là $-2, -1, 0, +1, +2$

Một giá trị của m_l ứng với một orbital (AO)

- Về ý nghĩa: đặc trưng cho sự định hướng của orbital trong không gian chung quanh hạt nhân.

Tóm lại, khi giải phương trình Schrodinger, người ta tìm thấy 3 số lượng tử đặc trưng cho trạng thái chuyển động của electron trong nguyên tử và tìm được hàm sóng ψ_{n,l,m_l} gọi là orbital nguyên tử, ký hiệu AO. Hàm này phụ thuộc vào 3 số lượng tử n, l, m_l . Bộ ba số lượng tử n, l, m_l xác định mức năng lượng (theo n); phân mức năng lượng (theo l) và hướng của orbital trong không gian (theo m_l).

Các số lượng tử này có quan hệ phụ thuộc nhau và chi phối lẫn nhau. Từ n ta biết số giá trị của l , từ đó biết số giá trị của m_l , suy ra số AO có trong phân lớp và có trong lớp đó.

4.3. Số lượng tử từ spin m_s

Ngoài 3 số lượng tử trên, khi nghiên cứu cấu trúc tinh tế của các phổ nguyên tử, người ta thấy cần phải bổ sung một số lượng tử nữa là số lượng tử từ spin m_s để có thể mô tả một cách duy nhất chuyển động của electron trong nguyên tử.

Về giá trị: chỉ nhận một trong 2 giá trị $+1/2$ hay $-1/2$ và không phụ thuộc gì vào các số lượng tử trên.

Về ý nghĩa: đặc trưng cho độ dao động tự do của electron đặc trưng cho chuyển động nội tại của electron gắn với momen động lượng riêng của electron.

Trong từ trường ngoài trạng thái $m_s = +1/2$ có năng lượng thấp hơn.

5. Năng lượng của electron

Khi giải phương trình Schrodinger cùng với ψ , ta nhận được các giá trị năng lượng E tương ứng. Với nguyên tử hiđrô, năng lượng của các AO nguyên tử được tính theo biểu thức:

$$E_n = \frac{2\pi^2 m e^4}{n^2 h^2}$$

Ở đây năng lượng của electron là những giá trị gián đoạn phụ thuộc vào số lượng tử chính n .

Khi n càng lớn, thì electron có năng lượng càng cao.

Người ta dùng các chữ cái K, M, N ... để ký hiệu các mức năng lượng ứng với các số lượng tử chính $n = 1, 2, 3, 4 \dots$

III. Orbital nguyên tử - hình dạng các orbital nguyên tử

1. Khái niệm về orbital nguyên tử (AO)

AO là hàm sóng mô tả trạng thái chuyển động của e trong nguyên tử, được biểu thị bằng hàm ψ_{x,l,m_e} .

Ví dụ: với $n = 1, l = 0, m_l$ ta có hàm $\psi_{1,0,0}$ ứng với AO 1s.

với $n = 3, l = 2$ ta có hàm $\psi_{3,2} \Rightarrow$ AO 3d

Tóm lại - mỗi giá trị của m_l ứng với 1AO

- một giá trị của n có n giá trị của l từ $l = 0$ đến $l = n - 1$.

- một giá trị của l có $(2l + 1)$ giá trị của m_e và do đó có $(2l + 1)$ AO khác nhau.

Vậy ứng với một giá trị của n (lớp n) số AO có trong mỗi lớp là:

$$\sum_{l=0}^{(n-1)} (2l + 1) = n^2$$

Vậy lớp thứ n có n^2 AO

Ví dụ: Cho $n = 3$, hỏi có bao nhiêu lớp, phân lớp, AO.

- Có 1 lớp electron là lớp thứ 3 (M) vì $n = 3$

- $l = 0, 1, 2$ nên có 3 phân lớp: s, p, d

- Với một giá trị của l thì có m_e có $(2l + 1)$ giá trị nên số AO trong các phân lớp là:

Phân lớp 1 ($l = 0$) có 1AO

Phân lớp 2 ($l = 1$) có 3 AO

Phân lớp 3 ($l = 2$) có 5AO

hay ở lớp thứ 3 số AO nguyên tử là $3^2 = 9$ AO

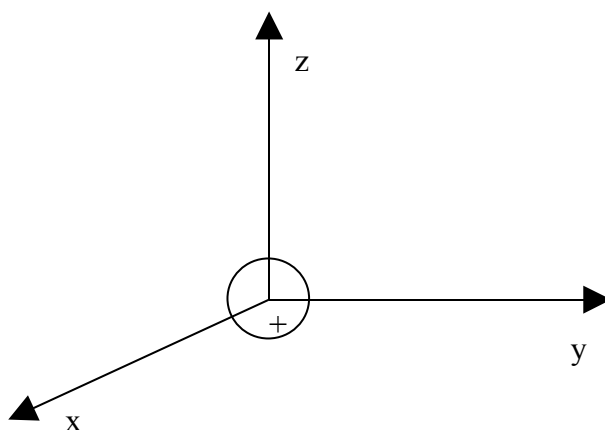
Trên mỗi AO có thể chứa tối đa $2e^-$ có spin đối song ($\pm 1/2$) vậy trên lớp n có n^2 AO và chứa tối đa $2n^2$ electron.

2. Hình dạng các electron

Hình dạng các AO nguyên tử phụ thuộc vào hàm ψ_{n,l,m_l} và ký hiệu theo số lượng tử l : s, p, d, f, g...

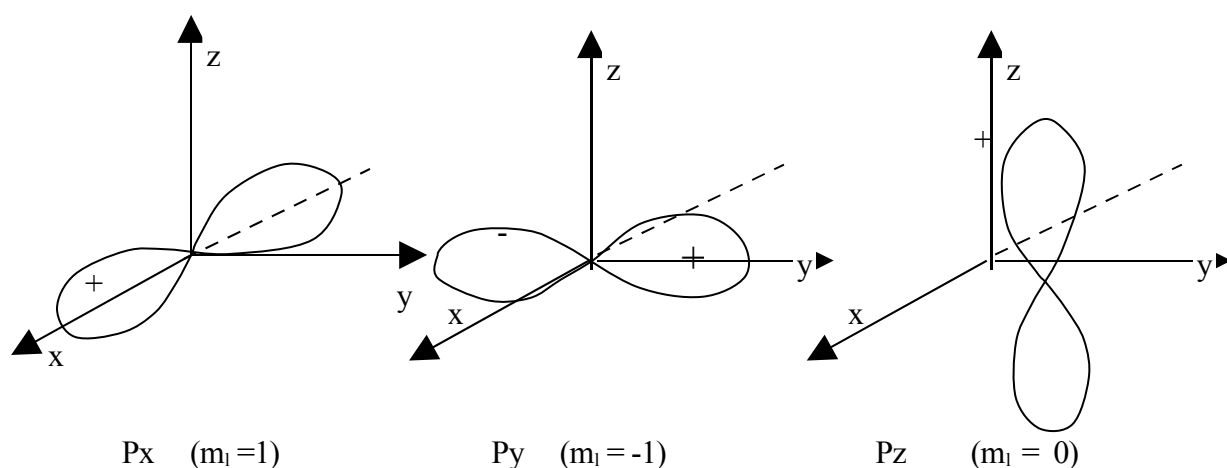
Trong hệ tọa độ x, y, z các orbital s, p, d mà hình ảnh của nó là các đám mây điện tử có dạng như sau:

2.1. AO s (xác định bởi $l = 0$; $m_l = 0$): có dạng hình cầu, tâm là hạt nhân nguyên tử, hàm ψ_s luôn luôn dương về mọi phía của trục tọa độ.



2.2. AO p (Xác định bởi $l = 1$; $m_l = -1, 0, +1$ (P_y, P_z, P_x) là những cặp hình cầu tiếp xúc với nhau ở điểm gốc tâm nằm trên các trục tọa độ.

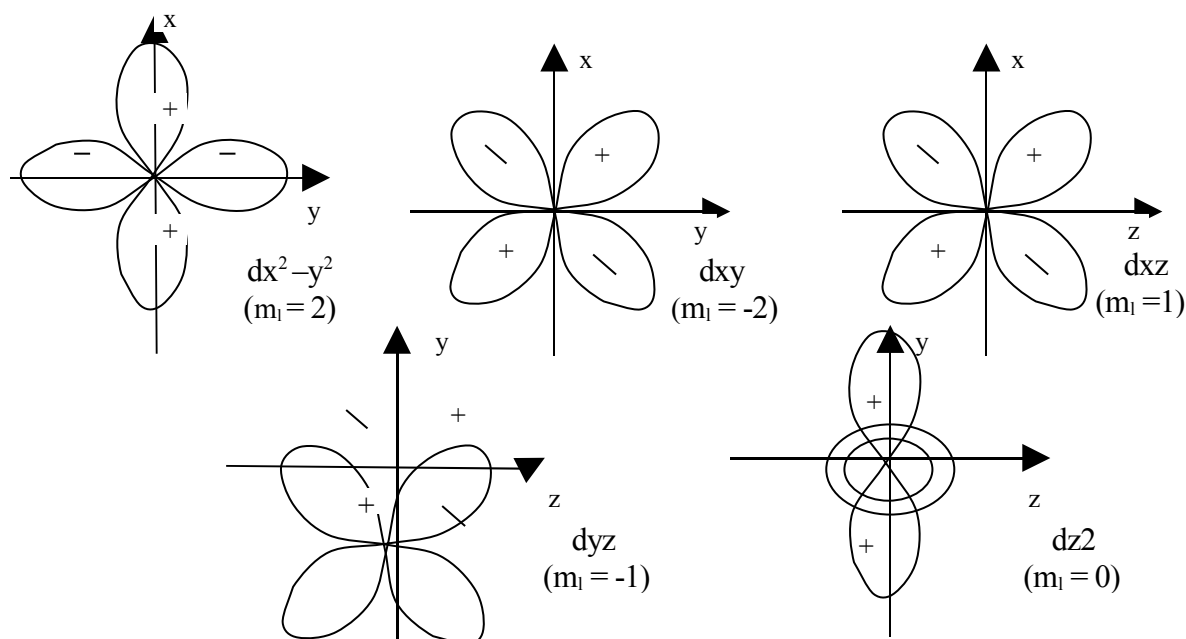
Các hàm ψ_p luôn luôn dương về phía dương của trục tọa độ và âm với các giá trị tọa độ âm.



2.3. AO d: xác định bởi $l = 2$, $m_l = -2, -1, 0, +1, +2$

Các AO d trừ dz^2 đều được biểu thị bằng hình hoa thị 4 cánh.

m_l	+2	-2	0	+1	-1
AO	dx^2-y^2	dxy	dz^2	dyz	dxz



IV. Nguyên tử nhiều electron - sự phân bố electron trong nguyên tử nhiều electron

Bài toán về nguyên tử nhiều electron phức tạp hơn nhiều so với bài toán của nguyên tử giống hiđrô khi đó mỗi electron không những chịu lực hút của hạt nhân mà còn chịu lực đẩy của các electron khác. Vì vậy việc giải chính xác bài toán bằng phương pháp giải tích là không thể được nên người ta dùng các phương pháp gần đúng. Từ đó xây dựng được các hàm sóng và phương trình sóng này và thu được các hàm có dạng tương tự các AO của nguyên tử hiđrô.

1. Khái niệm về lớp, phân lớp và ô lượng tử

- Lớp: trong nguyên tử các electron có cùng số lượng tử chính n tạo thành một lớp electron gọi là lớp n . Lớp n được ký hiệu bằng các chữ cái K, L, M, N ... ứng với các giá trị của $n = 1, 2, 3, 4, \dots$

- Phân lớp: mỗi phân lớp gồm các electron có cùng số lượng tử l mà mỗi giá trị của n có n giá trị của l nên mỗi lớp có n phân lớp.

Lớp K có 1 phân lớp: 1s

Lớp L có 2 phân lớp: 2s, 2p

Lớp M có 3 phân lớp : 3s, 3p, 3d.

Và:

Các electron cùng có $l = 0$ hợp thành phân lớp s

Các electron cùng có $l = 1$ hợp thành phân lớp p

Các electron cùng có $l = 2$ hợp thành phân lớp d

Các electron cùng có $l = 3$ hợp thành phân lớp f

Để chỉ một phân lớp thuộc lớp nào người ta dùng ký hiệu ns, np ... Ví dụ: 2s, 2p.

- Ô lượng tử hay orbital: các electron có 3 số lượng tử như nhau (n, l, m_l) có trạng thái chuyển động orbital giống nhau tạo thành một AO và được xếp vào một ô lượng tử - mỗi ô lượng tử được ký hiệu bằng một ô vuông nhỏ.

Số ô lượng tử trong một phân lớp bằng số các trị số m_l ứng với giá trị l đã cho.

Ví dụ: -Phân lớp s có $l = 0, m_l = 0 \Rightarrow$ có 1 ô lượng tử \square

- Phân lớp p có $l = 1, m_l = +1, 0, -1$ có 3 ô lượng tử $\square\square\square$

- Phân lớp d có $l = 2, m_l = +2, +1, 0, -1, -2$ có 5 ô lượng tử $\square\square\square\square\square$

2. Các qui luật phân bố electron trong nguyên tử nhiều electron

2.1. Nguyên lý Pauli

Nội dung: "Trong nguyên tử không thể có hai hay nhiều electron có cùng 4 số lượng tử".

- Các electron trong một ô lượng tử có 3 số lượng tử n, l, m_l giống nhau nên số lượng tử m_s phải khác nhau ($+1/2$ và $-1/2$) do đó số electron tối đa trên mỗi AO là $2e^-$.

Hai electron này có spin trái dấu nhau và được ký hiệu bằng hai mũi tên ngược chiều nhau:

\uparrow ứng với $m_s = +1/2$ và \downarrow ứng với $m_s = -1/2$

- Trong một phân lớp ứng với số lượng tử phụ l có $2(l+1)$ AO nên chứa tối đa $2(2l+1)$ electron. vậy số electron tối đa trong một phân lớp là $2(2l+1)$ electron.

Ta có: Phân lớp s p d f

Số electron tối đa 2 6 10 14

- Lớp thứ n có n^2 AO nên trong mỗi lớp có tối đa $2n^2$ electron.

Ví dụ : $n = 2$ có số electron tối đa là: $2 \cdot 2^2 = 8e^-$

2.2. Nguyên lý vững bền

2.2.1. Nội dung: "Trong một nguyên tử ở trạng thái cơ bản, các electron sẽ xếp vào các phân lớp có mức năng lượng thấp trước sau đó mới xếp sang các phân lớp có mức năng lượng cao hơn. »

Năng lượng của các phân lớp được xác định qua việc giải phương trình Schrodinger. Từ đó, Klechkowski đã sắp xếp các phân lớp theo thứ tự mức năng lượng tăng dần.

2.2.2. Qui tắc Klechkowski

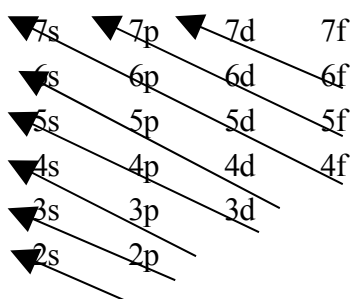
Trong nguyên tử, năng lượng của các phân lớp electron tăng dần theo thứ tự sau:

1s 2s 2p 3s 3p 4s 3d 5s 4d 5p 6s 4f 5d 6p 7s ...

Theo quy tắc này thì electron được điền vào các AO có giá trị $(n + l)$ nhỏ trước, nếu 2 AO có cùng giá trị $(n + l)$ thì electron sẽ điền vào các AO có giá trị n nhỏ trước.

Ví dụ: electron được điền vào AO 4s trước AO 3d.

Có thể mô tả qui tắc Klechkowski như sau:



1s

2.3. Quy tắc Hund

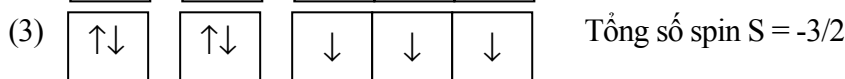
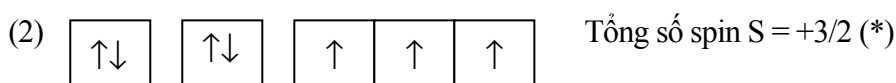
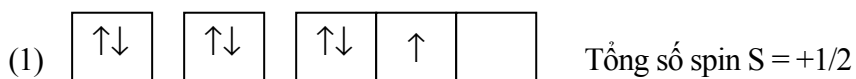
2.3.1. Quy tắc Hund 1 (qui tắc tổng spin cực đại)

"Trong nguyên tử ở dạng trạng thái cơ bản, các electron thuộc cùng một phân lớp sẽ được phân bố đều vào các ô lượng tử sao cho tổng spin S của chúng là cực đại (tổng số electron độc thân là cực đại)".

$$S = \sum m_s$$

Ví dụ: Nguyên tử N ($z = 7$) có cấu hình: $1s^2 2s^2 sp^3$

Có thể phân bố electron vào các ô lượng tử theo các cách sau:

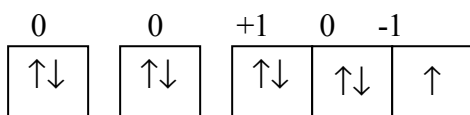


Vậy cách phân bố thứ 2 phù hợp với qui tắc Hund 1

2.3.2. Quy tắc Hund 2:

"Trong một phân lớp các electron có khuynh hướng điền vào các ô lượng tử có số lượng tử m_l có giá trị lớn nhất trước".

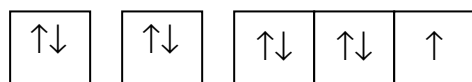
Ví dụ: Trạng thái cơ bản của nguyên tử F ($z = 9$) là trạng thái.



1s 2s 2p

Chứ không phải là trạng thái

0 0 -1 0 +1



1s 2s 2p

2.4. Cách biểu diễn cấu tạo vỏ electron. Cấu hình electron của nguyên tử

- Cấu hình electron của nguyên tử được dùng để mô tả các electron phân bố như thế nào vào các lớp, phân lớp trong nguyên tử.

Có 2 cách biểu diễn:

Cách 1: Dạng chữ ví dụ O ($Z = 8$): $1s^2 2s^2 2p^4$

Trong đó các số đứng trước 1, 2 chỉ số thứ tự của lớp $n = 1, 2$, các chữ số s, p chỉ các phân lớp, các số mũ chỉ số electron có trong phân lớp.

Cách 2: Dạng ô lượng tử: O ($Z = 8$)



Cách này còn cho biết số electron độc thân trong nguyên tử và nguyên tử ở trạng thái cơ bản hay trạng thái kích thích.

Dựa trên các qui tắc và nguyên lý trên dễ dàng viết được cấu hình electron của nguyên tố.

Ví dụ:

Cấu hình electron của một số nguyên tố ở trạng thái cơ bản.

- Đối với 20 nguyên tố đầu ($Z = 1 \rightarrow 20$) cấu hình electron trùng với thứ tự mức năng lượng (qui tắc Klechkowski).

- Bắt đầu từ nguyên tố $Z = 21$ trở đi do có sự chèn mức năng lượng nên cấu hình electron của các nguyên tố từ phân lớp 4s trở đi không còn trùng với thứ tự mức năng lượng (do đó để viết đúng cấu hình trước hết viết theo thứ tự mức năng lượng sau đó chuyển thành cấu hình theo lớp electron).

Ví dụ:

Fe ($Z = 26$).

Theo thứ tự mức năng lượng

$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^6$

Cấu hình electron

$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^6 4s^2$

- Khi một AO có đủ $2e^-$ ta nói các electron đã ghép đôi, nếu chỉ có một electron thì electron đó là độc thân.

Các trường hợp ngoại lệ :

Do cấu hình d^{10} (bão hoà) và d^5 (bán bão hoà) bền, có năng lượng thấp nên các nguyên tử có cấu hình $(n-1)d^9ns^2$ sẽ chuyển thành cấu hình $(n-1)d^{10}ns^1$ hay cấu hình $(n-1)d^4ns^2$ sẽ chuyển thành $(n-1)d^5ns^1$.

Ví dụ:

Nguyên tử

Cấu hình electron

Cr ($z = 24$)

$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^1$

Cu ($z = 29$)

$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^1$

V. Cấu tạo hạt nhân nguyên tử - đồng vị

Hạt nhân nguyên tử là thành phần cơ bản của nguyên tử, gồm các proton và các neutron. Trong các biến đổi hoá lý, nếu hạt nhân vẫn nguyên vẹn thì bản chất của nguyên tố được bảo toàn. Nếu hạt nhân bị biến đổi thì nguyên tử của nguyên tố này sẽ chuyển thành nguyên tử của nguyên tố khác.

1. Cấu tạo hạt nhân nguyên tử

Hạt nhân mang điện tích dương. Số đơn vị điện tích hạt nhân bằng số electron của nguyên tử.

Hạt nhân có khối lượng xấp xỉ khối lượng nguyên tử và có thể tích rất bé so với thể tích của nguyên tử gồm các proton và các neutron. Nếu gọi số proton trong hạt nhân là Z và số neutron là N thì khối lượng của hạt nhân xấp xỉ bằng khối lượng nguyên tử.

$$A = Z + N$$

2. Hiện tượng đồng vị

Những nguyên tử có cùng điện tích hạt nhân (cùng số proton) nhưng có số khối khác nhau (số neutron khác nhau) gọi là các đồng vị.

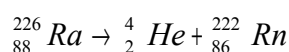
Ví dụ $^{16}_8\text{O}$ $^{17}_8\text{O}$ $^{18}_8\text{O}$

3. Hiện tượng phóng xạ tự nhiên

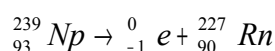
Là hiện tượng chuyển hoá tự phát đồng vị không bền của một nguyên tố thành đồng vị của nguyên tố khác có kèm theo sự phát ra các hạt cơ bản hay các hạt nhân nguyên tử.

Có 3 dạng phóng xạ cơ bản:

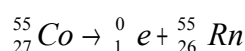
- Sự phân huỷ α (hạt nhân phóng ra các hạt α)



- Sự phân huỷ β^- (phóng ra hạt $^0_{-1}e$)



- Sự phân huỷ β^+ (β^+ : hạt positon 0_1e)



Kèm theo các tia α hay β là các tia γ gồm các bức xạ điện từ có năng lượng lớn.

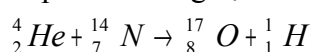
4. Phản ứng hạt nhân

Là phản ứng mà trong đó hạt nhân này bị biến đổi thành hạt nhân khác nghĩa là nguyên tố này chuyển thành nguyên tố khác.

Người ta thực hiện phản ứng hạt nhân nhân tạo bằng cách dùng các hạt cơ bản như α , n, p ... bắn phá vào các bia là nhân của một nguyên tố nào đó.

Ví dụ:

Bắn phá nitơ bằng hạt α



5. Ứng dụng của đồng vị phóng xạ nhân tạo

Bên cạnh tác hại to lớn của sự phóng xạ đến đời sống của con người như các tia phóng xạ phá huỷ tế bào, tích lũy trong xương, gan ... (nhất là các tia α , tia neutron) con người đã biết sử dụng các đồng vị phóng xạ để phục vụ cho việc chữa bệnh, kích thích sự tăng trưởng của cây trồng, xử lý hạt giống, sản xuất năng lượng ...

Ví dụ:

^{60}Co dùng tiêu diệt tế bào ung thư

^{131}I dùng chẩn đoán bệnh bướu cổ

^{30}P dùng theo dõi sự hấp thu photpho của cây

^{18}O dùng nghiên cứu cơ chế của các phản ứng hoá học và sinh học

^{14}C dùng xác định tuổi của các cổ vật

^{238}U dùng trong lĩnh vực năng lượng nguyên tử.

VI. Cấu tạo nguyên tử và hệ thống tuần hoàn các nguyên tố hoá học

1. Định luật tuần hoàn

"Tính chất của các đơn chất, thành phần và tính chất của các hợp chất của các nguyên tố hoá học biến thiên tuần hoàn theo chiều tăng của điện tích hạt nhân nguyên tử".

Vậy sự biến đổi tuần hoàn tính chất của các nguyên tố là do sự biến đổi tuần hoàn cấu trúc e^- của nguyên tử của các nguyên tố đó.

2. Bảng hệ thống tuần hoàn các nguyên tố

(Xét bảng hệ thống tuần hoàn dạng dài)

Bảng hệ thống tuần hoàn dạng dài được xây dựng trên cơ sở sau:

- Các nguyên tố được xếp theo chiều tăng dần điện tích hạt nhân.
- Các nguyên tố có cùng số lớp electron được xếp thành một hàng ngang gọi là chu kỳ.
- Các nguyên tố có cùng các electron hoá trị được xếp thành cột dọc gọi là nhóm.

2.2. Số thứ tự các nguyên tố

Mỗi nguyên tố được xếp vào 1 ô có số thứ tự đúng bằng điện tích hạt nhân Z của nguyên tố đó.

Ví dụ: Nguyên tố S có $Z = 16$ có 16p nên có 16 e^- ở trạng thái cơ bản.

2.3. Cấu tạo bảng hệ thống tuần hoàn

Các nguyên tố hoá học trong bảng hệ thống tuần hoàn được xếp theo thứ tự điện tích hạt nhân Z tăng dần và được phân thành các chu kỳ và nhóm.

- Chu kỳ:

Là dãy nguyên tố xếp theo hàng ngang gồm các nguyên tố có cùng số (trừ chu kỳ 1 bắt đầu bằng Hydro) và kết thúc và một khí hiếm.

Số thứ tự của chu kỳ bằng số lớp electron mà mỗi nguyên tố trong chu kỳ có. Hiện nay bảng hệ thống tuần hoàn gồm 7 chu kỳ, đánh số thứ tự từ 1 đến 7.

Trong đó:

Chu kỳ 1 gồm 2 nguyên tố H ($Z = 1$) và He ($Z = 2$)

Chu kỳ 2 gồm 8 nguyên tố từ Li ($Z = 3$) đến Ne ($Z = 10$)

Chu kỳ 3 gồm 8 nguyên tố từ Na ($Z = 11$) đến Ar ($Z = 18$)

Chu kỳ 4 gồm 18 nguyên tố từ K ($Z = 19$) đến Kr ($Z = 36$)

Chu kỳ 5 gồm 18 nguyên tố từ Rb ($Z = 37$) đến Xe ($Z = 54$)

Chu kỳ 6 gồm 32 nguyên tố từ Cs ($Z = 55$) đến Rn ($Z = 86$)

(Đặc biệt trong chu kỳ 6 có 14 nguyên tố xếp sau La ($Z = 57$) được xếp tách riêng thành 1 hàng ngang ở dưới bảng gọi là họ Lantan).

- Chu kỳ 7 gồm các nguyên tố đang xây dựng từ Fr ($Z = 87$) trở đi.

(Trong chu kỳ 7 có 14 nguyên tố xếp sau Ac ($Z = 89$) được tách riêng thành họ Actini)

* Nhóm:

Gồm các nguyên tố có cùng số electron hoá trị số thứ tự của nhóm bằng số electron hoá trị mà các nguyên tố có. Mỗi nhóm được chia thành 2 phân nhóm: chính và phụ.

- Phân nhóm chính (nhóm A): gồm các nguyên tố s hoặc p
- Phân nhóm phụ (nhóm B) gồm các nguyên tố d hoặc f

Các xác định số electron hoá trị của một nguyên tố

Loại nguyên tố	Số electron hoá trị
s hoặc p	- Tổng số electron ở lớp ngoài cùng
	- Số electron trên ns (nếu (n-1) d bão hoà) - Tổng số electron trên ns và (n-1)d [nếu (n-1)d chưa bão hoà]

Ví dụ:

- Cu ($z = 29$) có cấu hình $[\text{Ar}]3d^{10}4s^1$: thuộc nhóm I_B
- Zn ($z = 30$) có cấu hình $[\text{Ar}]3d^{10}4s^2$: thuộc nhóm II_B
- Fe ($z = 26$) có cấu hình $[\text{Ar}]3d^64s^2$: thuộc nhóm $VIII_B$
- Li, Na, K ... có cấu hình ns^1 : thuộc nhóm I_A

* Khối:

Ngày nay người ta thường xếp các nguyên tố thành các khối dựa vào cấu hình electron của chúng, có 4 khối là:

- Khối s: gồm các electron có cấu hình electron ngoài cùng là ns^1, ns^2 đó là các nhóm I_A, II_A .
- Khối p: gồm các nguyên tố có cấu hình các electron ngoài cùng từ ns^2np^1 đến ns^2np^6 tức là các nguyên tố thuộc nhóm III_A đến $VIII_A$.
- Khối d: gồm các nguyên tố có cấu hình $(n-1)d^{1-10}ns$ hoặc 2 thuộc các nhóm B
- Khối f: gồm 2 dãy lantanid và actinid xếp ở cuối bảng.

3. Sự biến đổi tuần hoàn tính chất các nguyên tố

3.1. Biến đổi tuần hoàn cấu hình electron của các nguyên tố

- Đối với các nguyên tố nhóm A, các electron lớp ngoài cùng tăng dần từ $1e^-$ ở nhóm I_A đến 8 electron ở lớp $VIII_A$, điều này được lặp lại ở tất cả các chu kỳ.
- Đối với các nguyên tố nhóm B: Các electron ở lớp ngoài cùng giống nhau là ns^2 (trừ một số trường hợp ngoại lệ).
 - + Các nguyên tố d thì phân lớp electron d tăng từ 1 electron ở nhóm III_B đến 9 electron ở nhóm I_B và 10 electron ở nhóm II_B .
 - + Các nguyên tố f: cấu hình electron ngoài cùng và hệ ngoài giống nhau chỉ khác nhau ở phân lớp $(n-2)f$.

3.2. Bán kính nguyên tử

Trong một chu kỳ khi đi từ trái sang phải, điện tích hạt nhân tăng dần nên lực hút giữa hạt nhân và điện tử ngoài cùng tăng dần, do đó bán kính nguyên tử giảm dần.

Trong một nhóm khi đi từ trên xuống bán kính nguyên tử tăng dần do số lớp điện tử tăng dần.

3.3. Năng lượng ion hoá (I)

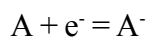
Là năng lượng tối thiểu cần cung cấp để bức một electron ra khỏi nguyên tử ở trạng thái cơ bản.

- Trong một chu kỳ khi đi từ trái sang phải, điện tích hạt nhân, lực hút giữa các hạt nhân và electron ngoài cùng tăng dần, electron bị hút chặt hơn nên năng lượng ion hoá tăng dần.

- Trong một nhóm khi đi từ trên xuống do bán kính nguyên tử tăng nên khoảng cách giữa hạt nhân và electron ngoài cùng tăng dần, lực hút giữa hạt nhân và điện tử ngoài cùng giảm dần do đó năng lượng ion hoá giảm dần.

3.4. Ái lực với electron (E)

Là năng lượng được giải phóng khi nguyên tử ở trạng thái khí nhận thêm một electron để trở thành anion khí.



Cho đến nay người ta chỉ mới xác định được ái lực đối với electron của một số ít nguyên tố. Trong đó các nguyên tố nhóm VII_A có ái lực với electron lớn nhất. Các nguyên tố s², s²p⁶, s²p³ có ái lực với electron rất kém.

3.5. Số oxi hoá

- Số oxi hoá dương cao nhất của các nguyên tố bằng số thứ tự của nhóm chứa chúng (trừ các nhóm VIII_B, I_B, Lantanid, Actinid, O, F và khí hiếm).

- Số oxi hoá âm thấp nhất hầu như chỉ có ở các nguyên tố phi kim và số oxi hoá âm thấp nhất của nguyên tố bằng số thứ tự của nhóm chứa nguyên tố đó trừ đi 8.

Ví dụ:

Nitơ có số oxi hoá âm thấp nhất là: $5 - 8 = -3$

3.6. Hợp chất với hydro và oxi

- Hợp chất với hydro:

Các kim loại nhóm I_A, II_A tạo các ion H⁻ (NaH, CaH₂ ...)

Các nguyên tố phi kim thường tạo các hợp chất cộng hoá trị, trong đó hydro có ôxi hoá +1, phi kim có số oxi hoá âm (CH₄, NH₃, H₂O, HF, HCl ...)

- Hợp chất với oxi:

Ôxi tạo được oxit với hầu hết các nguyên tố (trừ Pt, Au).

Trong một chu kỳ khi đi từ trái sang phải số oxi hoá của các nguyên tố tạo oxit tăng dần từ 1 đến 7.

Ví dụ:

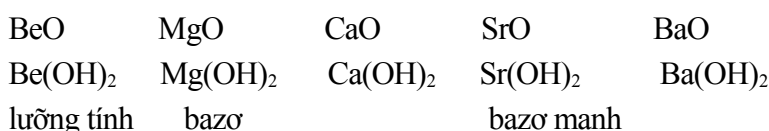
Chu kỳ 3:



Các bazơ và axit tương ứng cũng như các oxit đó có tính axit tăng dần từ trái sang phải.



Trong một nhóm khi đi từ trên xuống tính kim loại tăng nên tính bazơ của một oxit và hidroxit cũng tăng dần.



4. Quan hệ giữa cấu hình electron và vị trí của nguyên tố trong bảng hệ thống tuần hoàn

4.1. Biết số điện tích hạt nhân của nguyên tố (Z) ta có thể xác định được nguyên tố đó thuộc chu kỳ mấy, nhóm mấy và cấu hình electron của nguyên tố đó.

Ví dụ:

Cho X có Z = 16

Ta có thể viết cấu hình electron của X: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 2p^4$

Vậy X thuộc chu kỳ 3, nhóm VI_A đó là nguyên tố lưu huỳnh (S).

4.2. Biết cấu hình electron của nguyên tố, có thể xác định điện tích hạt nhân Z, số thứ tự của nguyên tố, chu kỳ, nhóm, hợp chất với hydro, hợp chất với oxi ...

Ví dụ 1:

Nguyên tố X có cấu hình $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5 \Rightarrow Z = 17$

Vì $n = 3$ nên nguyên tố này thuộc chu kỳ 3. Số electron hoá trị $2+5 = 7 \Rightarrow$ thuộc nhóm VII_A đó là nguyên tố Clo.

- Hợp chất với hydro là HCl

Ôxit cao nhất với oxi là Cl_2O_7

Ví dụ 2:

Nguyên tố Y có cấu hình $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^2 \Rightarrow Z = 25$

Vì lớp d chưa bão hoà nên Y thuộc nhóm B có e^- hoá trị là $2+5 = 7$ nên Y thuộc nhóm VII_B có lớp electron ngoài cùng là 4 nên thuộc chu kỳ 4 đó là nguyên tố Mn.

- Không có hợp chất với hydro

- Ôxit cao nhất của Mn với oxi là Mn_2O_7

4.3. Biết vị trí của nguyên tố có thể suy ra một số tính chất hoá học cơ bản của một số các hợp chất của nguyên tố đó.

Ví dụ:

Biết nguyên tố M thuộc chu kỳ 4, nhóm II_A vậy đó là kim loại kiềm thổ, chúng có thể nhường 2 electron để trở thành cation: $M - 2e = M^{2+}$ tạo được các hợp chất có liên kết ion là chính, hợp chất với hydro có công thức là MH_2 , hợp chất với oxi là MO và hidroxit tương ứng là $M(OH)_2$.