

Chương 1: CẤU TẠO NGUYÊN TỬ

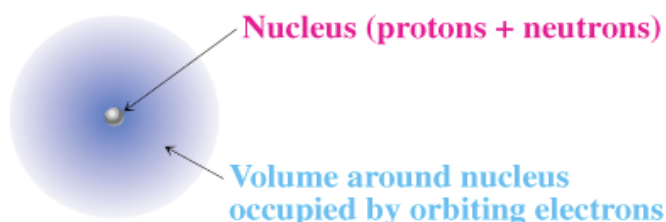
I. NGUYÊN TỬ VÀ QUANG PHỔ NGUYÊN TỬ

1. Nguyên tử

a) Khái niệm

Nguyên tử là đơn vị cấu trúc nhỏ nhất của một nguyên tố hoá học và trong các phản ứng hoá học (thông thường) nguyên tử không thay đổi. (theo quan điểm hoá học)

b) **Cấu tạo nguyên tử** - gồm có hai phần



+ **Hạt nhân nguyên tử** - chứa các hạt cơ bản là proton(p) mang điện tích dương và neutron(n) có khối lượng gần bằng khối lượng proton nhưng không mang điện. Trong hạt nhân các hạt proton và neutron liên kết với nhau bằng loại lực đặc biệt gọi là lực hạt nhân. Hạt nhân nguyên tử có kích thước khoảng 10^{-13} cm rất nhỏ so với kích thước của nguyên tử khoảng 10^{-8} cm.

(Ngoại trừ hạt nhân nguyên tử hydro chỉ có một proton)

+ **Lớp vỏ electron (điện tử)** – được tạo bởi các electron mang điện tích âm chuyển động xung quanh hạt nhân nguyên tử.

Bảng 1 : Khối lượng và điện tích của electron, proton và neutron.

Tên	Ký hiệu	Khối lượng		Điện tích	
		(kg)	đvklnt	(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

(đvklnt - đơn vị khối lượng nguyên tử)

***Nhận xét** – trong nguyên tử ta có :

-Số electron bằng số proton (do nguyên tử trung hoà về điện)

-Khối lượng của hạt nhân nguyên tử chiếm hơn 99,9% khối lượng của toàn bộ nguyên tử, nên khối lượng nguyên tử có thể coi như tập trung tại hạt nhân nguyên tử.

($m_p \approx m_n \approx 1836 m_e$)

-Kích thước của nguyên tử lớn hơn kích thước của hạt nhân khoảng 10^5 lần. Nên vỏ điện tử chiếm thể tích rất lớn hầu như bằng thể tích của cả nguyên tử nhưng có khối lượng rất nhỏ, không đáng kể so với khối lượng của cả nguyên tử.

-Độ bền của hạt nhân nguyên tử phụ thuộc vào số proton và neutron có trong thành phần hạt nhân. Ở những nguyên tố có khối lượng nhỏ, khi số proton và số neutron bằng nhau thì hạt nhân nguyên tử rất bền vững. Ở những nguyên tử có khối lượng lớn, sự tăng số proton và neutron không giống nhau và khi tỷ lệ giữa chúng không phù hợp sẽ làm cho hạt nhân kém bền và dẫn đến hiện tượng phóng xạ.

***Hai đặc trưng cơ bản nhất của nguyên tử là điện tích hạt nhân (Z) và số khối A**

Z - là điện tích hạt nhân bằng tổng số proton trong nhân, còn được gọi là bậc nguyên tử Z.

A - là số khối lượng của nguyên tử bằng tổng số proton và neutron trong hạt nhân nguyên tử

c) Nguyên tố hoá học – là chất được tạo thành từ các nguyên tử có cùng điện tích hạt nhân Z.

Ký hiệu $\begin{matrix} A \\ Z \end{matrix} X$ X – là nguyên tố hoá học

Trong các phản ứng hoá học, hạt nhân nguyên tử được bảo toàn, chỉ có lớp vỏ điện tử thay đổi nên số lượng và trật tự sắp xếp của các electron trong nguyên tử quyết định tính chất hoá học của các nguyên tố.

(thực ra, như sau này sẽ thấy ứng với mỗi nguyên tố hoá học, trong tổng số điện tử quanh nhân chỉ có một số điện tử quanh nhân quyết định đặc tính của nguyên tố đó, các điện tử này được gọi là các điện tử hoá trị)

Vì vậy

Z –là đặc trưng quan trọng cho nguyên tố hoá học

Z - là số thứ tự của nguyên tố hoá học trong bảng hệ thống tuần hoàn của Mendeleev.

d)Đồng vị – là những dạng khác nhau của cùng một nguyên tố hoá học, chúng có cùng số proton nhưng khác nhau số khối hoặc khác nhau số neutron.

Ví dụ - Các đồng vị của Hydro:

$\begin{matrix} 1 \\ 1 \end{matrix} H$ - Hydro hay Hydro nhẹ (99,98%)
 $\begin{matrix} 2 \\ 1 \end{matrix} H$ hay D - Hydro nặng hay Đơteri (0,016 %)
 $\begin{matrix} 3 \\ 1 \end{matrix} H$ hay T - Triti (10^{-3} %)

***Các đồng vị có tính chất hoá học và vật lý không giống nhau.**

Về phương diện hoá học thì Đơteri kém hoạt động hơn Hydro thường. Khi điện phân nước những phân tử H_2O bị điện phân trước, còn lại những phân tử D_2O tụ lại trong bình điện phân.

Đây là phương pháp quan trọng nhất để điều chế Đơteri dưới dạng nước nặng D_2O nguyên chất.

***Mỗi nguyên tố hoá học thường có một số dạng đồng vị đồng thời tồn tại với những tỷ lệ nào đó, nên khối lượng nguyên tử của nguyên tố sẽ có giá trị là trung bình cộng của khối lượng nguyên tử các đồng vị (theo tỷ lệ tồn tại) và thường có giá trị lẻ.**

***Các đồng vị bền không bị phân hủy theo thời gian gọi là đồng vị không phóng xạ. Các đồng vị không bền bị phân hủy theo thời gian gọi là đồng vị phóng xạ.**

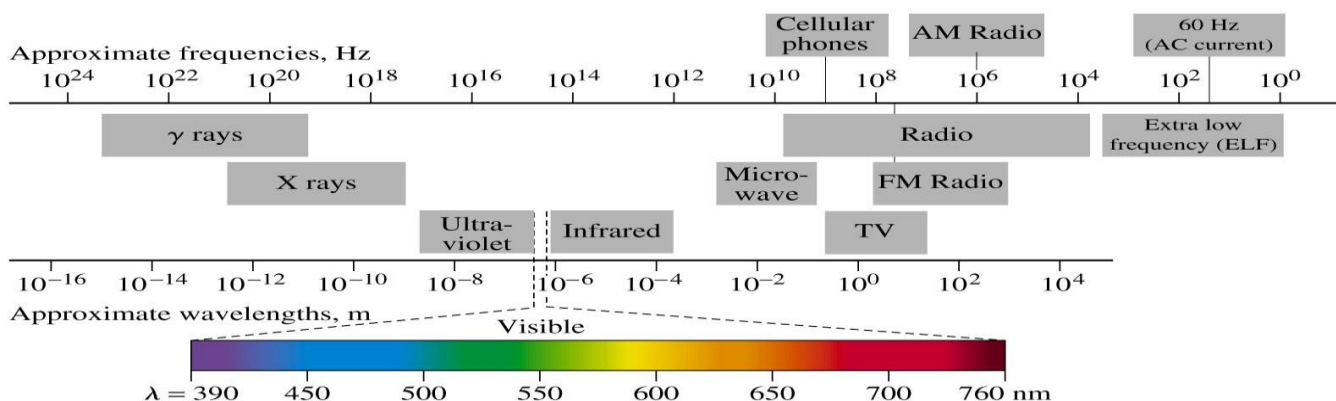
e) Mol

Theo hệ đơn vị SI (*Système International*) mol là đơn vị đo lường chất hoá học, **1 mol chất chứa $6,023 \cdot 10^{23}$ tiểu phân cấu trúc của chất** (nguyên tử, phân tử, ion, electron....).

Ví dụ – 2 mol ion H^+ chứa $2 \cdot 6,023 \cdot 10^{23}$ ion H^+

4 mol electron chứa $4 \cdot 6,023 \cdot 10^{23}$ electron.

2. Quang phổ nguyên tử



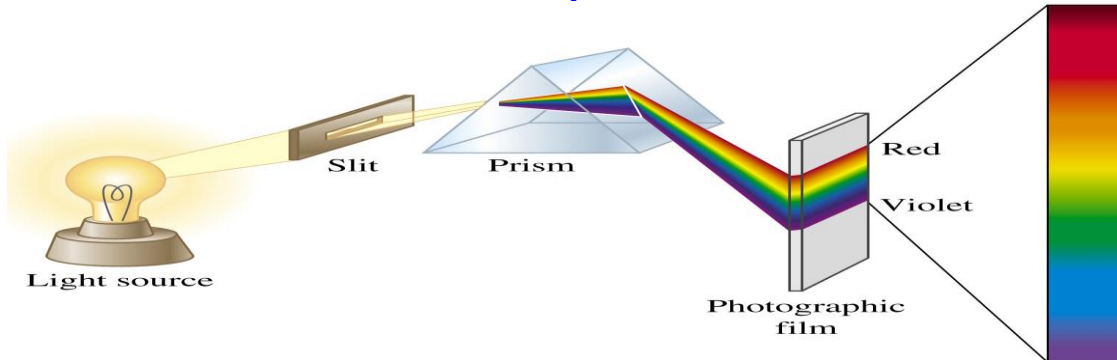
PHỔ BỨC XẠ ĐIỆN TỪ

a)Nguyên tắc – khi cho một chùm bức xạ điện từ với những bước sóng khác nhau đi qua một hệ thống phân ly quang học (lăng kính) thì chùm bức xạ đó được phân ly thành các bức xạ thành phần có bước sóng khác nhau sẽ đi theo các phương khác nhau (vì chiết suất n của lăng kính phụ thuộc vào λ), những bức xạ có bước sóng ngắn sẽ đi lệch về phía đáy của lăng kính nhiều hơn. Nếu dùng bộ phận ghi nhận bức xạ được phân ly ta sẽ thu được quang phổ của chùm bức xạ đó.

* Nếu chùm bức xạ ban đầu gồm tất cả các bước sóng trong một miền nào đó (miền khả kiến, tử ngoại, hồng ngoại) thì quang phổ thu được là một dải liên tục (tập hợp các giá trị liên tục của λ) và được gọi là **quang phổ liên tục**.

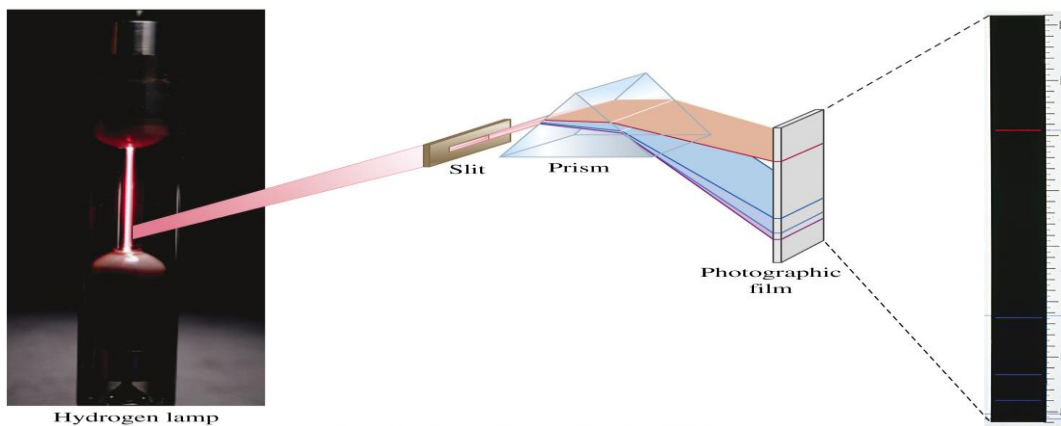
Ví dụ - Quang phổ của ánh sáng mặt trời là quang phổ liên tục. Miền trông thấy của quang phổ này là một dải màu liên tục: đỏ, cam, vàng, lục, lam, chàm, tím.

QUANG PHỔ LIÊN TỤC



- Trường hợp chùm bức xạ ban đầu chỉ gồm một số bức xạ ứng với những bước sóng gián đoạn xác định $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \dots$ thì quang phổ thu được chỉ gồm một số vạch xác định tương ứng với những bước sóng $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \dots$ và được gọi là **quang phổ vạch**

QUANG PHỔ PHÁT XẠ CỦA NGUYÊN TỬ HYDRO (QUANG PHỔ VẠCH)



*Chùm bức xạ ban đầu có thể do một vật phát quang phát ra sau khi kích thích qua sự nhận năng lượng dưới hình thức như nhiệt năng, điện năng, khi đó quang phổ thu được gọi là **quang phổ phát xạ** (có thể liên tục , vạch hay đám)

- Các chất rắn và lỏng khi được đốt nóng đến trạng thái nóng đỏ đều phát ra quang phổ phát xạ là quang phổ liên tục.
- Các chất khí (hơi) ở trạng thái nguyên tử sẽ cho quang phổ phát xạ là quang phổ vạch. Mỗi vạch ứng với một bước sóng xác định. Số vạch và cách sắp xếp vạch chỉ phụ thuộc vào bản chất khí hay hơi nguyên tử. Vì vậy **quang phổ vạch được gọi là quang phổ nguyên tử.** Ví dụ - Quang phổ phát xạ hơi kim loại trong vùng thấy của Hg, Li, Cd, Sr (quang phổ vạch)

QUANG PHỔ PHÁT XẠ NGUYÊN TỬ

Các phương pháp quang phổ có ý nghĩa lớn cho việc phân tích định tính và định lượng các chất.

b) Quang phổ nguyên tử Hydro.

Quang phổ nguyên tử là quang phổ vạch điều này chứng tỏ rằng electron trong nguyên tử chỉ có thể có được những năng lượng cho phép nhất định nào đó, hay nói cách khác **năng lượng của electron trong nguyên tử đã bị lượng tử hoá.** Khi electron chuyển từ trạng thái có mức năng lượng này ($E_{\text{đầu}}$) sang trạng thái có mức năng lượng khác ($E_{\text{cuối}}$) nó sẽ bức xạ (khi $E_{\text{đầu}} > E_{\text{cuối}}$) hoặc hấp thụ (khi $E_{\text{đầu}} < E_{\text{cuối}}$) ra một photon có năng lượng bằng hiệu hai mức năng lượng trên và tần số được xác định bằng biểu thức sau

$$|E_{\text{đầu}} - E_{\text{cuối}}| = \Delta E = h \cdot \nu = h \cdot C \cdot \bar{\nu} = h \cdot C / \lambda$$

h - hằng số Plank có giá trị $h = 6,6256 \cdot 10^{-34} \text{ J.s} = 6,6256 \cdot 10^{-27} \text{ erg.s}$; ν - tần số bức xạ

λ - bước sóng; C - tốc độ ánh sáng có giá trị $C = 3 \cdot 10^8 \text{ m/s}$; ν - số sóng (cm^{-1}) $\bar{\nu} = 1/\lambda$.

*** Quang phổ phát xạ của nguyên tử Hydro**

Trong nguyên tử Hydro ứng với mỗi bước nhảy xác định từ quỹ đạo n_c (quỹ đạo có mức năng lượng cao) về quỹ đạo n_t (quỹ đạo có mức năng lượng thấp hơn) nguyên tử phát ra bức xạ đơn sắc với số sóng được xác định bằng phương trình Rydberg

$$\bar{\nu} = 1/\lambda = R_H (1/n_t^2 - 1/n_c^2);$$

trong đó R_H - hằng số Rydberg có giá trị $R_H = 109678 \text{ cm}^{-1}$

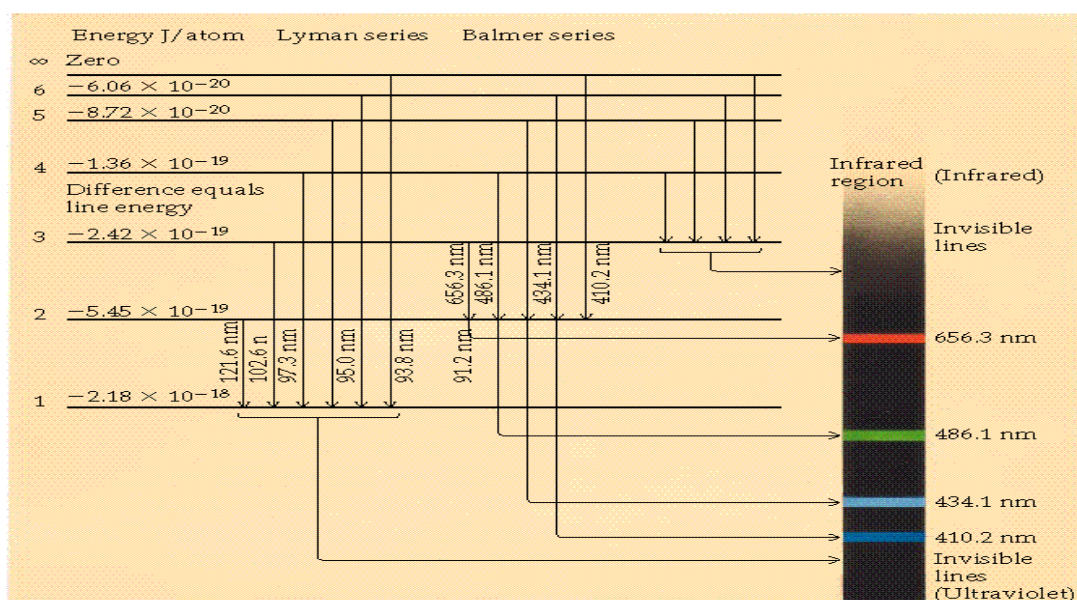
+với $n_t = 1$; $n_c = 2, 3, 4, 5, \dots, \infty$ tập hợp các bức xạ thuộc dãy Lyman, thuộc miền tử ngoại đã được Lyman tìm ra năm 1916.

+với $n_t = 2$; $n_c = 3, 4, 5, \dots, \infty$ tập hợp các bức xạ thuộc dãy Balmer thuộc miền khả kiến, có thể quan sát được bằng mắt, đã được Balmer tìm ra đầu tiên năm 1885 và đây là dãy phổ quan trọng nhất của Hydro.

Dưới đây là một số vạch phổ quan trọng thường được nói đến H_α , H_β , H_γ , H_δ

Ký hiệu	H α	H β	H γ	H δ
n _c	3	4	5	6
n _t	2	2	2	2
λ (Å)	6563,1	4861,3	4340,5	4101,7
màu	đỏ	Xanh lam	Chàm	tím

- +với n_t = 3 ; n_c = 4, 5, 6 ... ∞ tập hợp các bức xạ thuộc dãy Paschen thuộc miền hồng ngoại.
 +với n_t = 4 ; n_c = 5, 6 ... ∞ tập hợp các bức xạ thuộc dãy Brackett thuộc miền hồng ngoại xa.
 +với n_t = 5 ; n_c = 6, 7, 8 ... ∞ tập hợp các bức xạ thuộc dãy Pfund thuộc miền hồng ngoại xa.



II.SƠ LƯỢC VỀ CÁC THUYẾT CẤU TẠO NGUYÊN TỬ

1.Thuyết cấu tạo nguyên tử của Thompson (1898)

Nguyên tử là một quả cầu bao gồm các điện tích dương phân bố đồng đều trong toàn thể tích, còn các điện tích âm dao động phân tán trong đó.

2.Mẫu hành tinh nguyên tử Rutherford (1911)

a)Đề nghị cấu tạo

- * Hạt nhân mang điện tích dương, tập trung gần như toàn bộ khối lượng nguyên tử .
- * Các electron mang điện tích âm chuyển động quay tròn quanh nhân.

b)Ưu điểm - chứng minh được sự tồn tại của hạt nhân nguyên tử.

c)Khuyết điểm

Không giải thích được



3. Mẫu nguyên tử theo Bohr (1913): là sự kết hợp của mẫu hành tinh nguyên tử Rutherford và thuyết lượng tử ánh sáng. Có ba định đề của Bohr :

- **Định đề 1** - electron quay quanh nhân trên những quỹ đạo tròn đồng tâm xác định gọi là **quỹ đạo bền**. Mỗi quỹ đạo bền tương ứng với một mức năng lượng xác định của điện tử .

Những quỹ đạo bền là những quỹ đạo thoả mãn điều kiện: momen động lượng của điện tử khi di chuyển trên những quỹ đạo này phải có giá trị bằng bội số nguyên lần của $h/2\pi$.

$$mvr = n \cdot h/2\pi = n \cdot \hbar$$

trong đó:

m và v là khối lượng và tốc độ chuyển động của điện tử; r là bán kính quỹ đạo bền;

mvr – momen động lượng của điện tử

n - số nguyên được gọi là số lượng tử có giá trị $n = 1, 2, 3, 4, \dots, \infty$.

→ ứng với một giá trị xác định của n ta có một quỹ đạo bền.

$\hbar = \frac{h}{2\pi}$ được gọi là đơn vị lượng tử của momen động lượng .

- **Định đề 2** - khi electron quay trên quỹ đạo bền này electron sẽ không bức xạ, nghĩa là không mất năng lượng .

(điều này trái với định luật bức xạ của điện động học kinh điển)

- **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. Khi đó sẽ có sự hấp thụ hay phát xạ một lượng tử năng lượng (photon) bằng hiệu hai mức năng lượng của điện tử ở các quỹ đạo bền tương ứng.

$\Delta E = | E_d - E_c | = h\nu$; E_d - năng lượng của electron ở quỹ đạo bền ban đầu

E_c - năng lượng của electron ở quỹ đạo bền ban cuối

Như vậy, theo thuyết Borh, năng lượng của điện tử trong nguyên tử được lượng tử hoá, trong nguyên tử chỉ được phép tồn tại một số xác định các quỹ đạo bền có năng lượng xác định ứng với những giá trị nguyên của. Với sự thừa nhận như vậy, mẫu nguyên tử của Borh áp dụng rất thành công cho trường hợp nguyên tử hydro hoặc ion có chứa một electron.

a) Ưu điểm

* Bằng cách áp dụng các định luật của vật lý cổ điển kết hợp với điều kiện lượng tử hoá quỹ đạo, Borh đã thiết lập được biểu thức tính bán kính quỹ đạo bền, năng lượng, tốc độ của electron trên quỹ đạo bền. Từ đó, xác minh tính lượng tử hoá năng lượng của điện tử trong nguyên tử.

Bán kính quỹ đạo bền của electron

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

Năng lượng của electron trong nguyên tử

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

Tốc độ electron trên quỹ đạo bên

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

* Dấu trừ trong biểu thức tính năng lượng điện tử của Borh có ý nghĩa là khi điện tử ở trạng thái liên kết với nhân nó sẽ có năng lượng thấp hơn so với khi nó ở vị trí xa vô cùng đối với nhân ($n=\infty$), ở đó nó không bị nhân hút và năng lượng bằng không.

* Trong nguyên tử Hydro, khi $n=1$ thì $r=a_0=0,529 \text{ \AA}$, giá trị này được gọi là bán kính Borh.

* Khi số lượng tử n càng lớn các mức năng lượng càng nằm xít gần nhau, nghĩa là hiệu số năng lượng giữa các mức cạnh nhau càng giảm.

* Giải thích được hiện tượng quang phổ nguyên tử Hydro và những ion giống Hydro. Tính toán vị trí các vạch của quang phổ Hydro trong vùng ánh sáng thấy được.

* Vì sự khác nhau giữa hai mức năng lượng là xác định nên lượng năng lượng phóng thích là xác định tương ứng với một vạch phổ có màu sắc, bước sóng xác định. Cho nên quang phổ của nguyên tử là quang phổ vạch. Sự khác nhau về năng lượng giữa hai quỹ đạo càng lớn thì photon được phóng thích mang năng lượng càng lớn, bước sóng càng ngắn.

* Cường độ sáng của một vạch phụ thuộc vào số photon của bức xạ có bước sóng tương ứng với vạch phổ đó được phóng thích ra.

b) Khuyết điểm

* Không giải thích được độ bội của quang phổ vạch.

* Khi đưa định đề đã áp dụng cơ học lượng tử 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.

* Không giải thích được năng lượng của điện tử bị lượng tử hoá.

* Khi áp dụng cho những nguyên tử phức tạp, thuyết Bohr không cho những kết quả định lượng chính xác mà chỉ có tính định tính.

Về sau, mặc dù Sommerfeld đã cố gắng bổ sung thêm những quỹ đạo hình elip bên cạnh những quỹ đạo hình tròn của Borh nhưng mẫu nguyên tử Bohr-Sommerfeld về cơ bản vẫn không chính xác.

Nguyên nhân chính dẫn đến những hạn chế của thuyết Bohr-Sommerfeld là quan niệm điện tử trong nguyên tử chuyển động trên những quỹ đạo xác định do đó có thể áp dụng những định luật của vật lý cổ điển để miêu tả trạng thái chuyển động của điện tử trong nguyên tử.

Ngày nay chúng ta biết rằng, điện tử là một vi hạt, chuyển động của nó tuân theo những quy luật khác hẳn, đặc trưng cho thế giới vi mô. Vì vậy, để có thể mô tả trạng

thái chuyển động phức tạp của điện tử trong nguyên tử cần có một lý thuyết hoàn chỉnh hơn đó là – **cơ học lượng tử**

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

1. Những luận điểm cơ bản của cơ học lượng tử

a) Luận điểm 1 - Tính lưỡng nguyên của các hạt vi mô

Cơ học lượng tử quan niệm rằng *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.*

$$\text{Hệ thức L. de Broglie: } \lambda = \frac{h}{mv}$$

trong đó: h - hằng số Plank = $6,625 \cdot 10^{-27} \text{ erg.s}$

m - khối lượng của hạt vi mô

v - tốc độ của hạt vi mô

λ - bước sóng

+ Bản chất hạt của các hạt vi mô thể hiện qua khối lượng m .

+ Bản chất sóng của hạt vi mô chuyển động sẽ tạo ra một sóng truyền đi với bước sóng λ .

Ví dụ

+ Đối với electron có khối lượng $m = 9,1 \cdot 10^{-28} \text{ g}$, chuyển động với tốc độ $v = 10^8 \text{ cm/s}$ sẽ tạo nên sóng $\lambda = 7,25 \cdot 10^{-8} \text{ cm}$.

+ Đối với viên bi có khối lượng $m = 1 \text{ g}$, chuyển động với tốc độ $v = 1 \text{ cm/s}$ sẽ tạo nên sóng $\lambda = 6,6 \cdot 10^{-27} \text{ cm}$. Do độ dài sóng kết hợp trong chuyển động của viên bi có giá trị rất nhỏ so với kích thước của nó nên không có thiết bị nào phát hiện được. Nhưng trong trường hợp của điện tử, bản chất sóng không thể bỏ qua được.

b) Luận điểm 2 - Nguyên lý bất định của Heisenberg (1927)

Bản chất sóng - hạt đưa tới hệ quả quan trọng về sự chuyển động của nó, thể hiện trong nguyên tắc do Heisenberg đưa ra năm 1927: *không thể đồng thời xác định chính xác cả vị trí và tốc độ của hạt vi mô.*

$$\Delta x \cdot \Delta v_x \geq \frac{h}{m} = \frac{h}{2\pi n}$$

Δx - độ bất định về vị trí trên trục x

Δv_x - độ bất định về tốc độ trên trục x

→ Đối với hạt vi mô xác định, đại lượng $\frac{h}{m}$ là hằng số nên khi tốc độ của hạt càng được

xác định chính xác thì tọa độ của nó sẽ được xác định càng kém chính xác và ngược lại.

- Như vậy khi xác định tương đối chính xác tốc độ chuyển động của electron thì không thể xác định được vị trí của electron ở thời điểm đó, có nghĩa là không thể xác định được quỹ đạo chuyển động mà chỉ có thể xác định được vùng không gian mà electron có thể có mặt. Nói cách khác *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 quanh nhân nguyên tử.*

c) Luận điểm 3 - Phương trình sóng Schrödinger

- Phương trình sóng Schrödinger trong cơ học lượng tử đóng vai trò như những định luật của Newton trong cơ học cổ điển.

- Theo cơ học lượng tử, việc nghiên cứu cấu trúc của các hệ vi mô chẳng qua là việc giải phương trình sóng Schrödinger đối với hệ vi mô đó.
- Phương trình sóng Schrödinger mô tả sự chuyển động của một hạt vi mô trong trường thế năng ở *trạng thái dừng* (trạng thái của hệ không thay đổi theo thời gian)

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

trong đó:

- ∂ - vi phân riêng phần
- 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
- x, y, z – tọa độ xác định vị trí của hạt vi mô

* $\Psi(x,y,z)$ - hàm sóng mô tả trạng thái của hạt vi mô, nó có thể có giá trị âm hoặc dương vì vậy bản thân hàm sóng Ψ không có ý nghĩa vật lý.

* $\Psi^2(x,y,z)$ – mật độ xác suất có mặt của hạt vi mô tại điểm có tọa độ x, y, z (có giá trị luôn luôn dương)

* $\Psi^2(x,y,z)dV$ – xác suất có mặt của hạt vi mô trong phần tử thể tích dV có tâm tại điểm có tọa độ x,y,z với $dV=dx.dy.dz$

ví dụ - giả sử $\Psi^2 dV = 0,01$ (xem hạt vi mô là electron) ta có thể hiểu là:

- * cứ 100 lần ghi nhận sẽ có một lần electron có mặt trong yếu tố thể tích dV
- * thời gian electron có mặt tại dV bằng 1% toàn bộ thời gian ghi nhận
- * có 1% điện tích của electron tập trung trong dV.

Trong cơ học lượng tử không còn khái niệm quỹ đạo, nên người ta tìm cách xác định xác suất tìm thấy hạt ở các điểm khác nhau trong không gian. Vì xác suất tìm thấy hạt trong toàn bộ không gian bằng một nên ta có :

$$\int_{\infty} \Psi^2(x, y, z) dV = 1$$

Đây là điều kiện chuẩn hoá của hàm sóng. Hàm sóng thỏa mãn điều kiện này được gọi là hàm chuẩn hoá. Với ý nghĩa vật lý trên, hàm sóng Ψ phải mang tính đơn trị, liên tục và hữu hạn.

*Giải phương trình sóng Schrödinger để tìm các hàm sóng Ψ thích hợp thỏa mãn phương trình sóng và các giá trị năng lượng E tương ứng. (Ψ và E là nghiệm của phương trình)

*Phương trình sóng Schrödinger chỉ giải được chính xác cho trường hợp nguyên tử Hydro (hệ có một electron). Đối với các nguyên tử đa điện tử (hệ vi mô phức tạp) phải giải gần đúng.

2.Trạng thái của electron trong nguyên tử Hydro (hoặc ion dạng Hydro)

a) Giải phương trình sóng Schrödinger cho nguyên tử Hydro

Trong trường hợp gần đúng có thể coi như hạt nhân đứng yên, trọng tâm của hệ nguyên tử trùng với trọng tâm của hạt nhân và lấy tâm hạt nhân làm gốc tọa độ. Khi đó ta chỉ xét chuyển động của electron trong không gian dưới tác dụng của điện

trường gây ra bởi điện tích hạt nhân (trường Coulomb). Chuyển động này được gọi là chuyển động orbital.

Ta có phương trình sóng Schrödinger cho nguyên tử Hydro :

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

Để việc tính toán thuận lợi, do tính đối xứng tâm của trường thế, nên chuyển tọa độ Đêcac về tọa độ cực. Gọi r là khoảng cách giữa electron và hạt nhân.

$$z = r \cdot \cos \theta \quad ; \quad x = r \cdot \sin \theta \cdot \cos \varphi \quad \text{với} \quad 0 \leq \theta \leq \pi \quad ; \quad 0 \leq \varphi \leq 2\pi$$

$$y = r \sin \theta \cdot \sin \varphi \quad ; \quad x^2 + y^2 + z^2 = r^2$$

$$\text{Thế năng } V = \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (\epsilon_0 - \text{hằng số điện môi của chân không})$$

Thế năng của điện tử trong nguyên tử Hydro chỉ phụ thuộc vào r nên trường thế có tính đối xứng tâm được gọi là trường xuyên tâm.

Đặt $\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \cdot \Theta(\theta) \cdot \Phi(\varphi) = R(r) \cdot Y(\theta, \varphi)$.

trong đó : $R(r)$ - hàm bán kính và $Y(\theta, \varphi)$ - hàm góc

b) Kết quả

Tìm được rất nhiều nghiệm

$$\Psi_{n, \ell, m_\ell}(r, \theta, \varphi) = R_{n, \ell}(r) \cdot Y_{\ell, m_\ell}(\theta, \varphi).$$

$$E_n = -\frac{13,6}{n^2} [\text{eV}] \quad (\text{nguyên tử Hydro})$$

$$E_n = -Z^2 \frac{13,6}{n^2} [\text{eV}] \quad (\text{ion dạng Hydro})$$

với $n = 1, 2, 3, \dots, \infty$; $\ell = 0, 1, 2, 3, \dots, (n-1)$; $m_\ell = -\ell, \dots, 0, \dots, +\ell$

- Hàm sóng Ψ_{n, ℓ, m_ℓ} luôn chứa ba thông số (n, ℓ, m_ℓ) không có thứ nguyên và là những số nguyên, chúng bằng số bậc tự do của electron nên các thông số này được gọi là những số lượng tử.

- Hàm sóng Ψ_{n, ℓ, m_ℓ} mô tả trạng thái của electron trong nguyên tử nên được gọi là orbital nguyên tử (atomic orbital) viết tắt AO. Tập hợp một bộ ba số lượng tử (n, ℓ, m_ℓ) xác định AO.

*** Khái niệm đám mây electron**

- Cơ học lượng tử quan niệm rằng không thể dùng khái niệm quỹ đạo để mô tả sự chuyển động của electron. Quan sát chuyển động electron xung quanh hạt nhân nguyên tử ứng với orbital Ψ_i với trạng thái năng lượng E_i , electron sẽ 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. Khi quan sát mỗi lần electron xuất hiện ở một vị trí nào đó lại đánh một dấu chấm. Vì electron chuyển động với tốc độ lớn nên có thể hình dung rằng các điểm chấm này sẽ tạo thành một "đám mây" với mật độ phân bố không đồng đều ở các vùng không gian khác nhau. Vùng nào electron xuất hiện càng nhiều thì mật độ dấu chấm sẽ càng dày đặc hay xác suất tìm thấy electron trong vùng không gian đó càng lớn, có nghĩa là ψ^2

lớn, có vùng hoàn toàn không có electron ($\psi^2 = 0$). Sự phân bố mật độ xác suất tìm thấy electron không có một giới hạn rõ ràng xác định, ngay cả ở những vị trí rất xa hạt nhân vẫn có mặt electron mặc dù xác suất tìm thấy nó rất thấp.

- Hình dạng của orbital nguyên tử được biểu diễn qua hình dạng đám mây electron theo quy ước là vùng không gian gần hạt nhân trong đó xác suất có mặt của electron lớn hơn 90%. Vùng không gian này được giới hạn bằng một bề mặt giới hạn gồm các điểm có mật độ xác suất bằng nhau. Hình dạng của AO hay của bề mặt giới hạn này được quyết định bởi phần góc của hàm sóng, thường biểu diễn bằng giản đồ cực. Để sau này có thể lý giải về liên kết hoá học, người ta để dấu (+) hay (-) trong vùng không gian ứng với dấu của hàm sóng ψ tại nơi đó.

- Cách xác định hình dạng orbital bằng giản đồ cực: từ gốc toạ độ về mọi hướng vẽ các đoạn thẳng $OP = |Y_{\ell, m_\ell}(\theta, \varphi)|$ (hoặc $OP = Y^2$) ($0^\circ \leq \theta \leq 180^\circ$; $0^\circ \leq \varphi \leq 360^\circ$). Tập hợp các điểm mút của những đoạn thẳng OP này tạo nên dạng hình học của orbital nguyên tử.

b) Ý nghĩa của các số lượng tử

1/. Số lượng tử chính n ($n = 1, 2, 3, \dots, \infty$)

***Xác định trạng thái năng lượng của electron trong nguyên tử (có một electron):**

$$E_n = -Z^2 \frac{13,6}{n^2} [\text{eV}]$$

Từ biểu thức thu được ta thấy:

+ Vì n chỉ nhận những giá trị gián đoạn nên E_n cũng chỉ nhận giá trị gián đoạn. Vì vậy quang phổ của nguyên tử là quang phổ vạch và có tính đặc trưng.

+ Khi n càng lớn electron có năng lượng càng cao và hiệu giữa hai mức năng lượng liên tiếp càng nhỏ tức là các mức năng lượng càng xít lại gần nhau.

+ Trạng thái có nhiều hàm sóng ứng với một mức năng lượng gọi là trạng thái suy biến và số hàm sóng đó được gọi là độ suy biến.

***Tất cả các orbital tương ứng với các hàm sóng có cùng giá trị n hợp lại thành một lớp lượng tử** Tên các lớp được ký hiệu như sau:

n	1	2	3	4	5	6	7
lớp electron	K	L	M	N	O	P	Q

+ Ở điều kiện bình thường electron ở mức năng lượng thấp nhất (mức bền nhất) gọi là *mức cơ bản* (E_{cb}). Khi hấp thụ năng lượng, electron sẽ chuyển lên mức cao hơn gọi là *mức kích thích* (E_{kt}), trạng thái kém bền hơn \rightarrow electron sẽ nhanh chóng chuyển về mức cơ bản, phát ra năng lượng đã hấp thụ dưới dạng các sóng ánh sáng:

$$\Delta E = E_{kt} - E_{cb} = \frac{hc}{\lambda}$$

***Xác định kích thước trung bình của đám mây electron. Khi n càng lớn thì kích thước của AO tăng lên.**

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

2/. Số lượng tử orbital (số lượng tử phụ) ℓ ($\ell = 0, 1, \dots, (n-1)$)

- Với một giá trị cho trước của n thì ℓ có thể nhận n giá trị : $\ell = 0, 1, 2, 3 \dots (n-1)$

***Những electron có cùng giá trị n và ℓ tạo thành một phân lớp electron. (phân lớp lượng tử)**

Số lượng tử orbital ℓ	0	1	2	3
Tên phân lớp electron	s	p	d	f

***Xác định tên và hình dạng của AO**

$\ell = 0$ - tên AO được gọi là orbital s có dạng hình quả cầu.

$\ell = 1$ - tên AO được gọi là orbital p có dạng 2 quả cầu tiếp xúc nhau (hay hình số 8 tròn xoay)

$\ell = 2$ - tên AO được gọi là orbital d có dạng 4 quả cầu tiếp xúc nhau

$\ell = 3$ - tên AO được gọi là orbital f có hình dạng rất phức tạp

***Xác định momen động lượng orbital của điện tử:** $M = \frac{h}{2\pi} \sqrt{\ell(\ell+1)}$

3/. Số lượng tử từ m_ℓ ($m_\ell = -\ell, \dots, 0, \dots, +\ell$)

***Số lượng tử từ m_ℓ - xác định sự định hướng của orbital trong không gian. Ứng với mỗi giá trị của số lượng tử ℓ có tất cả $(2\ell+1)$ giá trị của số lượng tử từ $m_\ell = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, \pm \ell$.**

Vậy ở mỗi phân mức lượng tử có $(2\ell+1)$ orbital định hướng khác nhau trong không gian. Hay số lượng tử phụ (ℓ) quyết định số AO có trong một phân lớp.

Ví dụ :

- khi $\ell = 0$ thì $m_\ell = 0$ ta có orbital Ψ_s hình cầu với mọi hướng như nhau.

- khi $\ell = 1$ thì nhận được ba giá trị $m_\ell = 0, \pm 1$ ta có ba orbital Ψ_{px} , Ψ_{py} , Ψ_{pz} định hướng theo ba trục tọa độ x, y, z.

- khi $\ell = 2$ thì nhận được năm giá trị $m_\ell = 0, \pm 1, \pm 2$ ta có năm orbital $\Psi_{d_{z^2}}$, $\Psi_{d_{xz}}$, $\Psi_{d_{yz}}$, $\Psi_{d_{xy}}$, $\Psi_{d_{x^2-y^2}}$ định hướng khác nhau trong không gian.

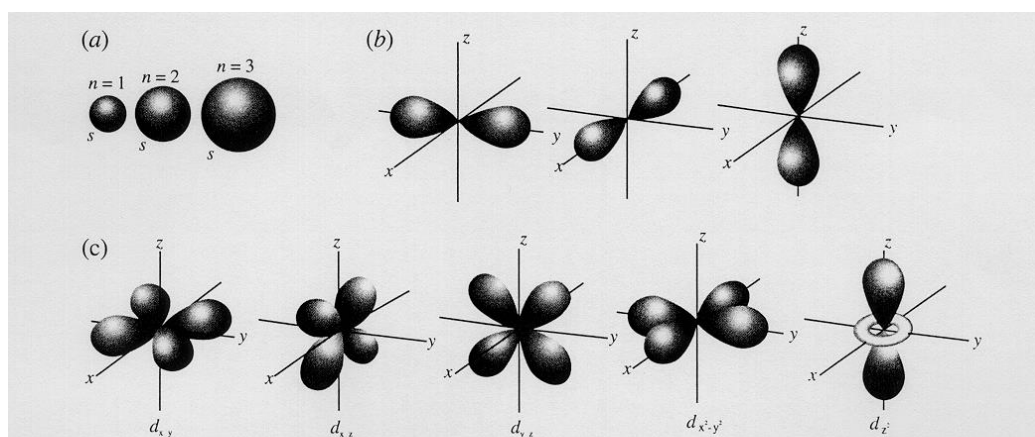
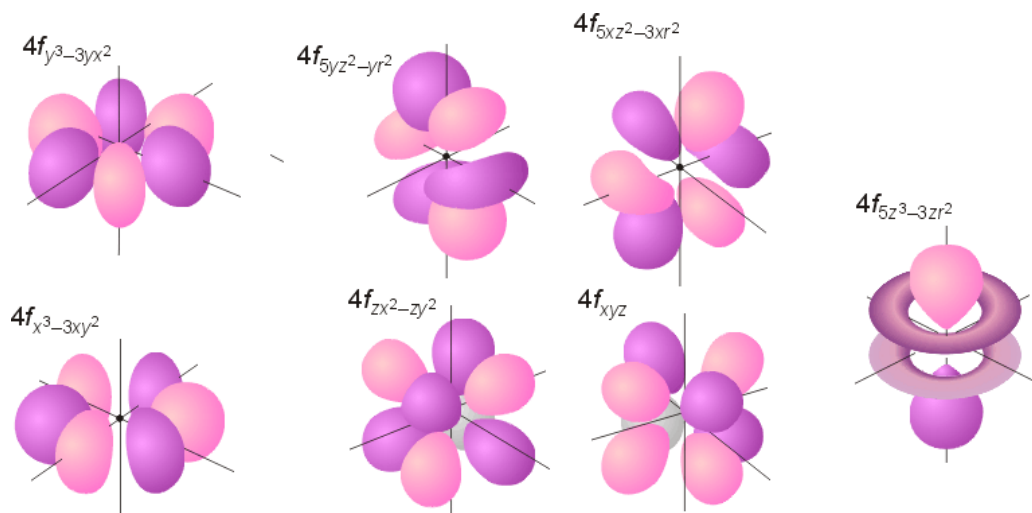


Figure 3.1 Geometry of orbitals in the s, p, and d subshells. Orbitals represent the volume of space around a nucleus in which an electron is most probably located. (a) Orbitals in the s subshells are spherical in all shells. (b) The p subshell contains three different bilobate orbitals oriented along orthogonal x, y, and z axes. (c) The d subshell contains five orbitals. The d_{xy} , d_{xz} , and d_{yz} orbitals are quadrilobate and lie



* **Số lượng tử từ m_ℓ - xác định năng lượng của electron nguyên tử dưới tác dụng của từ trường ngoài (hiệu ứng Zeeman tìm ra năm 1896) hoặc điện trường ngoài (hiệu ứng Stark – 1910):** khi có từ trường hay điện trường, mỗi orbital được đặc trưng bằng số lượng tử ℓ sẽ có $(2\ell + 1)$ cách định hướng và tùy thuộc vào sự định hướng này mà electron nhận những giá trị năng lượng hơi khác nhau. Vì vậy, mỗi mức năng lượng $E_{n,\ell}$ được tách ra làm $(2\ell + 1)$ định hướng khác nhau (sự khử suy biến). Đó là nguyên nhân của sự tăng số vạch quang phổ khi có tác dụng của điện trường hay từ trường. Ngược lại, khi không có tác dụng của trường lực ngoài như vậy thì $(2\ell + 1)$ phân mức năng lượng (tương ứng với $(2\ell + 1)$ định hướng khác nhau) sẽ chập làm một (trạng thái suy biến).

* **Số lượng tử từ m_ℓ - xác định giá trị hình chiếu của momen động lượng orbital (M_z) lên phương Z của từ trường ngoài.**

$$M_z = m_\ell \cdot \frac{h}{2\pi}$$

4/ **Số lượng tử từ spin m_s ($m_s = \pm \frac{1}{2}$)**

Năm 1928 Dirac, dựa theo thuyết tương đối của Einstein tương đối hoá cơ học lượng tử đã giải thích được sự tồn tại của momen spin từ việc giải phương trình Schrödinger. Để dễ hình dung người ta thường dùng hình ảnh đơn giản bằng cách nói electron quay xung quanh trục riêng của nó.

Kết quả giải phương trình sóng đã xác định momen động lượng Spin là :

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

với $s = \frac{1}{2}$ đối với mọi electron. Vì vậy, s không thể xác định trạng thái của electron.

Hình chiếu của momen spin lên phương z của trường lực ngoài được tính theo hệ thức:

$$M_{s(z)} = \frac{h}{2\pi} m_s \quad \text{với } m_s = \pm \frac{1}{2}$$

Vì m_s có hai giá trị khác nhau đặc trưng cho trạng thái spin của electron nên m_s được gọi là số lượng tử từ spin.

Do sự tồn tại của momen spin nên nói chung, mỗi mức năng $E_{n,\ell}$ được tách thành hai phân mức nằm gần nhau làm xuất hiện vạch kép của quang phổ.

Spin cũng như khối lượng, điện tích là một thuộc tính cơ bản của electron. **Số lượng tử từ spin có ý nghĩa quan trọng đối với lý thuyết cấu trúc electron nguyên tử và phân tử cho phép giải thích liên kết cộng hoá trị từ tính, khả năng tương tác của các chất, cơ chế phản ứng hoá học ...**

*** Tóm lại, với bộ ba số lượng tử (n, ℓ, m_ℓ) xác định hàm orbital nguyên tử AO (Ψ_{n,ℓ,m_ℓ}), chỉ mô tả chuyển động không gian (chuyển động orbital) của electron xung quanh hạt nhân nguyên tử. Khi đó, tập hợp bộ bốn số lượng tử (n, ℓ, m_ℓ, m_s) mới xác định đầy đủ trạng thái chuyển động của electron trong nguyên tử (chuyển động spin và chuyển động orbital) và hàm sóng tương ứng phải là hàm sóng toàn phần Ψ_{n,ℓ,m_ℓ,m_s} (orbital toàn phần).**

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

a) Cách giải

Trong nguyên tử nhiều điện tử, ngoài lực hút của nhân đối với từng electron còn xuất hiện lực đẩy lẫn nhau giữa các điện tử, nhưng lực đẩy này không thể tính được do không thể xác định được vị trí của điện tử. Vì vậy phương trình sóng Schrödinger không thể giải chính xác mà chỉ có thể giải bằng phương pháp gần đúng thích hợp phản ánh được những đặc điểm cơ bản của nguyên tử nhiều điện tử. (phương pháp trường tự hợp, phương pháp hằng số chắn)

b) Kết quả

Khi sử dụng các phương pháp giải gần đúng nêu trên cho nguyên tử có nhiều electron đều dẫn đến kết luận như sau:

- Trạng thái của điện tử trong nguyên tử cũng được xác định bằng bốn số lượng tử (n, ℓ, m_ℓ, m_s) . Các orbital nguyên tử có hình dạng tương tự như các orbital của nguyên tử Hydro tuy có bị co lại chút ít do điện tích hạt nhân tăng lên.
- Trạng thái năng lượng của điện tử trong nguyên tử được xác định không những bởi số lượng tử chính n mà còn bởi số lượng tử orbital ℓ , trong đó ảnh hưởng của số lượng tử orbital ℓ càng lớn khi nguyên tử càng có nhiều electron. Điều này là do năng lượng của electron trong nguyên tử nhiều electron không những phụ thuộc vào lực hút của hạt nhân mà còn phụ thuộc vào lực đẩy giữa các electron còn lại. Chính tương tác đẩy giữa các electron gây nên hai hiệu ứng có ảnh hưởng trực tiếp đến trạng thái năng lượng của electron được gọi là hiệu ứng chắn và hiệu ứng xâm nhập. (electron càng gần nhân sẽ có năng lượng càng thấp, ngược lại càng xa nhân sẽ có năng lượng càng cao)

***Hiệu ứng chắn:** các lớp electron bên trong biến thành màn chắn (tác dụng chắn) làm yếu lực hút của hạt nhân đối với các electron bên ngoài (bị chắn) nên các electron bên ngoài này có khuynh hướng bị đẩy xa nhân và năng lượng của chúng sẽ tăng lên.

- Các electron có số lượng tử n và ℓ càng nhỏ có tác dụng chắn càng mạnh và bị chắn càng yếu. Ngược lại, các electron có số lượng tử n và ℓ càng lớn có tác dụng chắn càng yếu và bị chắn càng mạnh.
- Các electron của lớp bên trong có tác dụng chắn mạnh đối với lớp bên ngoài. Các electron có số lượng tử ℓ giống nhau thì nếu n càng tăng sẽ có tác dụng chắn càng yếu, nhưng bị chắn càng nhiều. Tác dụng chắn của lớp ngoài đối với lớp trong không đáng kể.
- Các electron có n giống nhau thì nếu có ℓ càng lớn tác dụng chắn sẽ càng nhỏ và bị chắn càng nhiều.
- Trong cùng một lớp chắn nhau không mạnh so với khi khác lớp. Trong cùng một phân lớp, các electron chắn nhau càng yếu hơn. Theo chiều ns, np, nd, nf tác dụng chắn yếu dần, nhưng bị chắn tăng lên. Vì vậy khi tăng điện tích hạt nhân (Z), thì điện tích hạt nhân hiệu dụng tăng mạnh đối với electron s , và tăng yếu hơn lần lượt đối với electron p, d, f .
- Một phân lớp đã bão hoà hoàn toàn electron hay bán bão hoà (mỗi ô lượng tử có đủ một electron) thì có tác dụng chắn rất lớn đối với lớp bên ngoài.
- Hai electron thuộc cùng một ô lượng tử chắn nhau rất yếu nhưng lại đẩy nhau mạnh.

*** Hiệu ứng xâm nhập:** do nguyên lý bất định electron có thể có mặt ở bất kỳ khu vực nào trong không gian xung quanh hạt nhân với xác suất lớn hay nhỏ. Vì vậy, một electron dù thuộc lớp bên ngoài vẫn có một thời gian nào đó tồn tại gần khu vực hạt nhân, do đó có thể nói electron của lớp bên ngoài đã xâm nhập vào gần hạt nhân. Hiệu ứng xâm nhập làm tăng độ bền liên kết giữa electron đó và hạt nhân dẫn đến làm giảm năng lượng của electron.

Hiệu ứng xâm nhập càng lớn khi các số lượng tử n và ℓ của electron càng nhỏ.

- Nhìn chung có thể sắp xếp năng lượng của các orbital nguyên tử theo trật tự gần đúng sau đây

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

c/. Các quy luật phân bố electron vào nguyên tử nhiều điện tử.

Để sắp xếp electron vào lớp vỏ điện tử của nguyên tử đa điện tử cần dựa vào những quy luật của cơ học lượng tử như sau:

***Nguyên lý vững bền:** Trong điều kiện bình thường trạng thái bền vững nhất là nguyên tử phải ở trạng thái có năng lượng thấp nhất được gọi là trạng thái cơ bản; những trạng thái có năng lượng cao hơn là trạng thái kích thích.

Trong nguyên tử, điện tử được phân bố vào các orbital nguyên tử sao cho tổng năng lượng của nguyên tử là thấp nhất.

***Quy tắc Klechowski:**

+ Trong một nguyên tử nhiều electron, trật tự điền các electron vào các phân lớp (đặc trưng bởi n và ℓ) sao cho tổng $(n + \ell)$ tăng dần.

+ Khi hai phân lớp khác nhau có cùng giá trị $(n + \ell)$ thì electron được xếp vào phân mức có n tăng dần.

E	↑		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																																																
					Giản đồ các mức năng lượng của điện tử																																																
					trong nguyên tử																																																
	7s	7p																																																			
	6s	6p	6d																																																		
	5s	5p	5d	5f																																																	
	4s	4p	4d	4f																																																	
	3s	3p	3d																																																		
	2s	2p																																																			
	1s																																																				

- Quy tắc Klechowski là một quy tắc gần đúng mang tính khái quát nghiệm đúng trong nhiều trường hợp, nhưng cũng có những trường hợp quy tắc này không nghiệm đúng.

Chẳng hạn, trường hợp của K và Ca ($Z \leq 20$) năng lượng của orbital 4s thấp hơn 3d nên điện tử sẽ vào orbital 4s trước 3d. Tuy nhiên, khi điện tử được xếp vào orbital 3d trong các nguyên tố chuyển tiếp thứ nhất thì sự khác biệt giữa 4s và 3d không còn nhiều nữa và trong một số trường hợp điện tử có thể ở 3d mà không ở 4s (${}_{24}\text{Cr}$, ${}_{29}\text{Cu}$).

-Năng lượng các orbital phụ thuộc vào số điện tích hạt nhân nghĩa là phụ thuộc vào các nguyên tố. Nhìn chung, năng lượng của các orbital giảm khi số điện tích hạt nhân tăng. Năng lượng của các orbital s và p giảm một cách đều đặn. Tuy nhiên, đối với các orbital d và f, từ một nguyên tố nào đó có sự giảm năng lượng một cách đột ngột, dẫn đến trật tự năng lượng của các phân mức năng lượng sẽ bị thay đổi. Chẳng hạn, đối với Ca thì mức 3d còn cao hơn mức 4s nhưng đối với các nguyên tố tiếp theo thì mức này trở nên thấp hơn 4s.

Đối với nguyên tố có số điện tích hạt nhân lớn ($Z \sim 100$) thì năng lượng của các phân lớp trong cùng một lớp có khuynh hướng xích lại gần nhau.

***Nguyên lý ngoại trừ Pauli:** trong phạm vi một nguyên tử không thể có hai electron mà trạng thái của chúng được đặc trưng bởi cùng 4 số lượng tử.

→ Một AO chỉ có thể chứa tối đa 2 electron có spin ngược dấu.

→ Một phân lớp có $(2\ell + 1)$ số orbital nên số điện tử tối đa trong phân lớp ℓ là $2(2\ell + 1)$.

Cụ thể :

phân lớp s (có 1 orbital) - có tối đa 2 điện tử

phân lớp p (có 3 orbital) - có tối đa 6 điện tử

phân lớp d (có 5 orbital) - có tối đa 10 điện tử

phân lớp f (có 7 orbital) - có tối đa 14 điện tử

→ Trong một lớp n có n phân lớp, số orbital trong một lớp là n^2 , số electron tối đa trong một lớp là $2n^2$. Như vậy, ở các lớp K, L, M, N, O, P, Q, ... lần lượt có tối đa 2, 8, 18, 32, 50, 72, 98 điện tử.

Qui ước – các AO được biểu diễn bằng các ô lượng tử

- electron được biểu diễn bằng mũi tên

mũi tên có chiều đi lên ứng với electron có $m_s = +\frac{1}{2}$ ↑
↓

mũi tên có chiều đi xuống ứng với electron có $m_s = -\frac{1}{2}$

- trong một phân lớp trật tự điền các electron vào từng AO ứng với m_ℓ từ cao tới thấp ($+\ell, 0, -\ell$). (có thể qui ước ngược lại)

*** Quy tắc Hund:** trong một phân lớp với nhiều orbital có cùng mức năng lượng như nhau, các electron có khuynh hướng phân bố đều vào các ô lượng tử sao cho tổng spin của chúng là cực đại (tức là có tổng số electron độc thân là nhiều nhất)

Quy ước: trong một phân lớp trật tự điền các electron vào từng AO ứng với $m_s = +\frac{1}{2}$ trước (mũi tên đi lên), cho đến khi mỗi orbital đều có chứa một điện tử thì mới điền các electron ứng với $m_s = -\frac{1}{2}$ (mũi tên đi xuống).

-Sau khi viết công thức điện tử theo trật tự mức năng lượng nên sắp xếp lại trật tự các orbital sao cho các orbital có cùng giá trị n nằm cùng một nhóm, các nhóm được xếp theo chiều tăng dần giá trị của n . Lớp ứng với n lớn nhất trong công thức điện tử gọi là lớp ngoài cùng. Phân lớp ứng với mức năng lượng cao nhất theo qui tắc Klechcowski gọi là phân lớp cuối cùng.

- **Electron hoá trị** là electron có khả năng thực hiện các liên kết hoá học, chúng thường thuộc lớp ngoài cùng hoặc thuộc những phân lớp đang trong quá trình xây dựng lớp vỏ điện tử. Electron hoá trị thường là $ns, np, (n-1)d, (n-2)f$.

*** Viết Công thức electron nguyên tử.**

Ví dụ: N ($Z = 7$) Công thức điện tử : $1s^2 2s^2 2p^3$

các số 1, 2... - giá trị của số lượng tử chính n

các chữ s, p... - ký hiệu của số lượng tử orbital ℓ

các số mũ – cho biết số electron có trên phân mức.

	$1s^2$	$2s^2$	$2p^3$
$n =$	1	2	2
$\ell =$	0	0	1
$m_\ell =$	0	0	+1 0 -1

- electron cuối cùng có bộ bốn số lượng tử là $n = 2, \ell = 1, m_\ell = -1, m_s = +\frac{1}{2}$

- cấu hình electron hoá trị là $2s^2 2p^3$

- nguyên tử N có tính thuận từ (có 3 điện tử độc thân)

-Độ bền cấu hình electron không những thể hiện ở các lớp electron bão hoà $2, 8, 18, 32, (2n^2)$ và các phân lớp bão hoà s^2, p^6, d^{10}, f^{14} mà còn thể hiện ở các phân lớp bán

bão hoà. Chẳng hạn như cấu hình điện tử của $_{24}\text{Cr}$ ($3d^5 4s^1$); $_{42}\text{Mo}$ ($4d^5 5s^1$); $_{29}\text{Cu}$ ($3d^{10} 4s^1$); $_{47}\text{Ag}$ ($4d^{10} 5s^1$).

*** Chú ý**

- Đối với anion, nên viết cấu hình điện tử của nguyên tử tương ứng ở trạng thái cơ bản, sau đó thêm điện tử lần lượt vào các AO theo các qui tắc trên.

Ví dụ - viết công thức điện tử của $_{17}\text{Cl}^-$ $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$

- Đối với cation, viết cấu hình điện tử của nguyên tử tương ứng ở trạng thái cơ bản. Sắp xếp lại trật tự các orbital sao cho các orbital có cùng giá trị n nằm cùng một nhóm, các nhóm được xếp theo chiều tăng dần giá trị của n . Sau đó, lấy bớt điện tử từ các orbital, bắt đầu với orbital có giá trị n lớn nhất, trường hợp các orbital có n bằng nhau thì bắt đầu với orbital có tổng $(n + \ell)$ lớn nhất. Số điện tử lấy bớt bằng điện tích của cation.

Ví dụ – viết cấu hình điện tử của ion Cu^+ $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10}$

- Lưu ý rằng điện tử cuối cùng được sắp xếp vào các orbital khi viết cấu hình điện tử của nguyên tử không phải lúc nào cũng bị mất trước tiên khi hình thành cation.

Table 8.3 • Electron Configurations of Atoms in the Ground State

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