

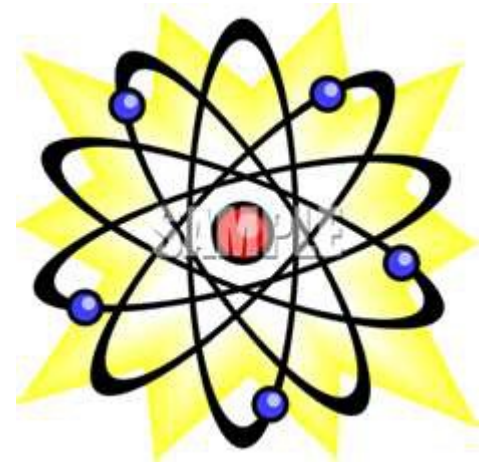
CHƯƠNG I

CẤU TẠO NGUYÊN TỬ

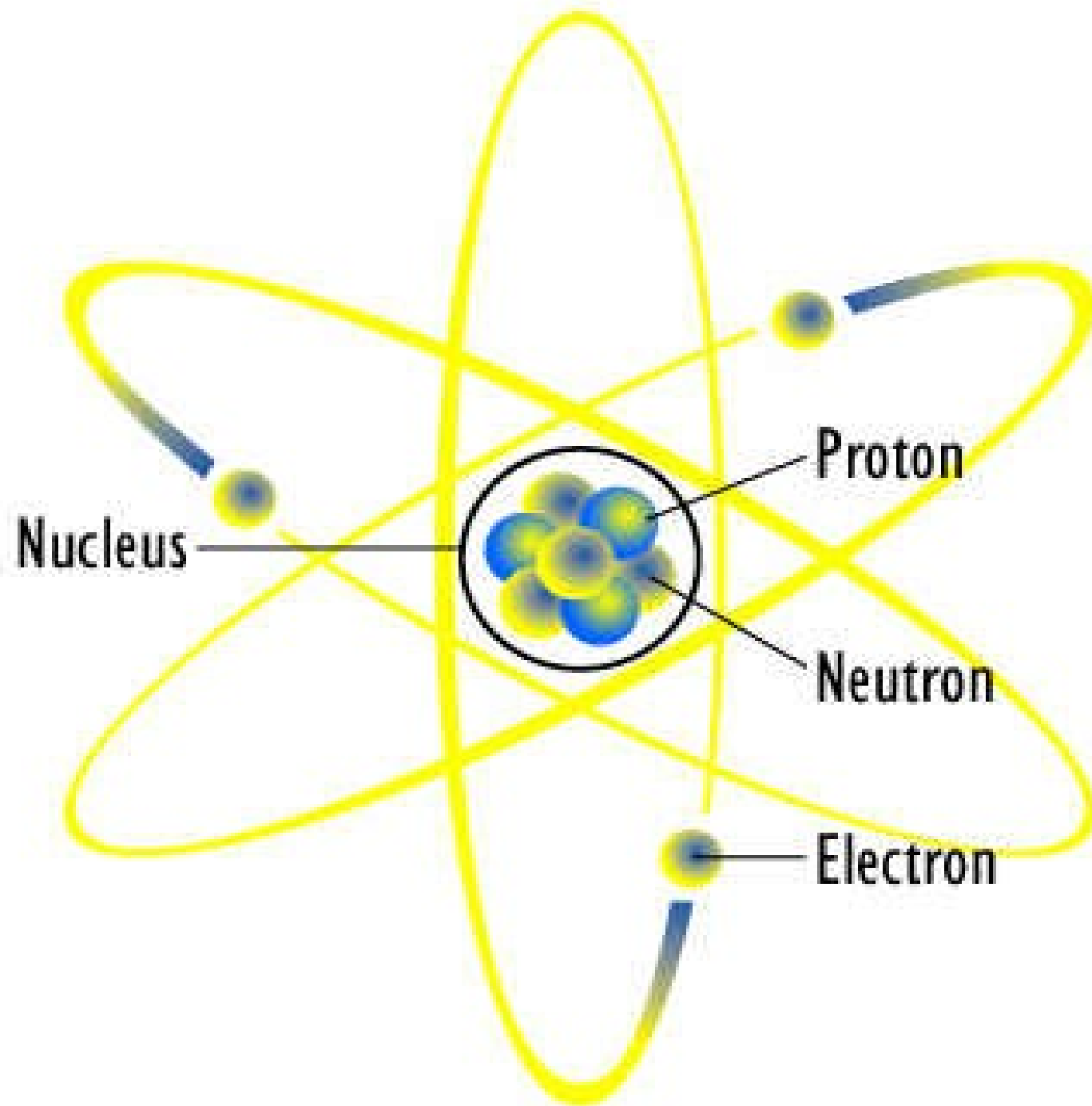
I. Các cấu tử chính:

1. Các hạt cơ bản:

Nguyên tử	{	Electron(e)	-1	
		Nhân {		
		Proton(p)	+1	1dvc
		Neutron(n)	0	1dvc



$$m_e/m_p = 1/1840 \rightarrow Kl(ng.t) = Kl(nhân)$$



2. Ký hiệu nguyên tử:

$\overset{A}{\underset{Z}{\text{X}}}$ { $\begin{aligned} \text{Z: Bậc số nguyên tử} &= \sum p \text{ trong nhân} \\ \text{A= Số khối} &= \sum p + \sum n \end{aligned}$

$\text{Td: } 12$ { $\begin{aligned} \sum p &= 6 \\ \sum n &= 12 - 6 = 6 \end{aligned}$

C

Nguyên tử ở trạng thái cơ bản trung hòa điện

$\Rightarrow \sum e = \sum p = 6$

3. Nguyên tử đồng vị: Cùng Z nhưng khác A

1 H	2 H	3 H	Đều có 1 proton nhưng có 0; 1; 2 neutron
1 12 C	1 13 C	1 14 C	Đều có 6 proton nhưng có 6; 7; 8 neutron
6 35 Cl	6 36 Cl	6 37 Cl	Đều có 17 proton nhưng có 18; 19; 20 neutron

17 17 17
Các ng.t đồng vị có cùng Z $\Rightarrow \Sigma e$ bằng nhau $\Rightarrow$
hóa tính giống nhau.

4. Nguyên tố – nguyên tử:

Một nguyên tố xác định khi có một giá trị Z xác định.

Trong 1 ng.tố có thể gồm nhiều nguyên tử đồng vị với thành phần xác định

${}_1\text{H}$ gồm: ${}^1\text{H}$ (99,985%) và ${}^2\text{H}$ (0,015%)

${}_{17}\text{Cl}$ gồm: ${}^{35}\text{Cl}$ (75,4%) và ${}^{37}\text{Cl}$ (24,6%)

${}_6\text{C}$ gồm: ${}^{12}\text{C}$ (98,982%) và ${}^{13}\text{C}$ (1,018%)

$$K_{\text{Int}}(\text{ng.tố}) = \sum A_i \cdot \%(i) / 100$$

$$\text{Td: } k_{\text{Int}}(\text{Cl}) = (35 \cdot 75,4 + 37 \cdot 24,6) / 100 = 35,453$$

II. Cấu tạo nguyên tử theo thuyết cơ lượng tử.

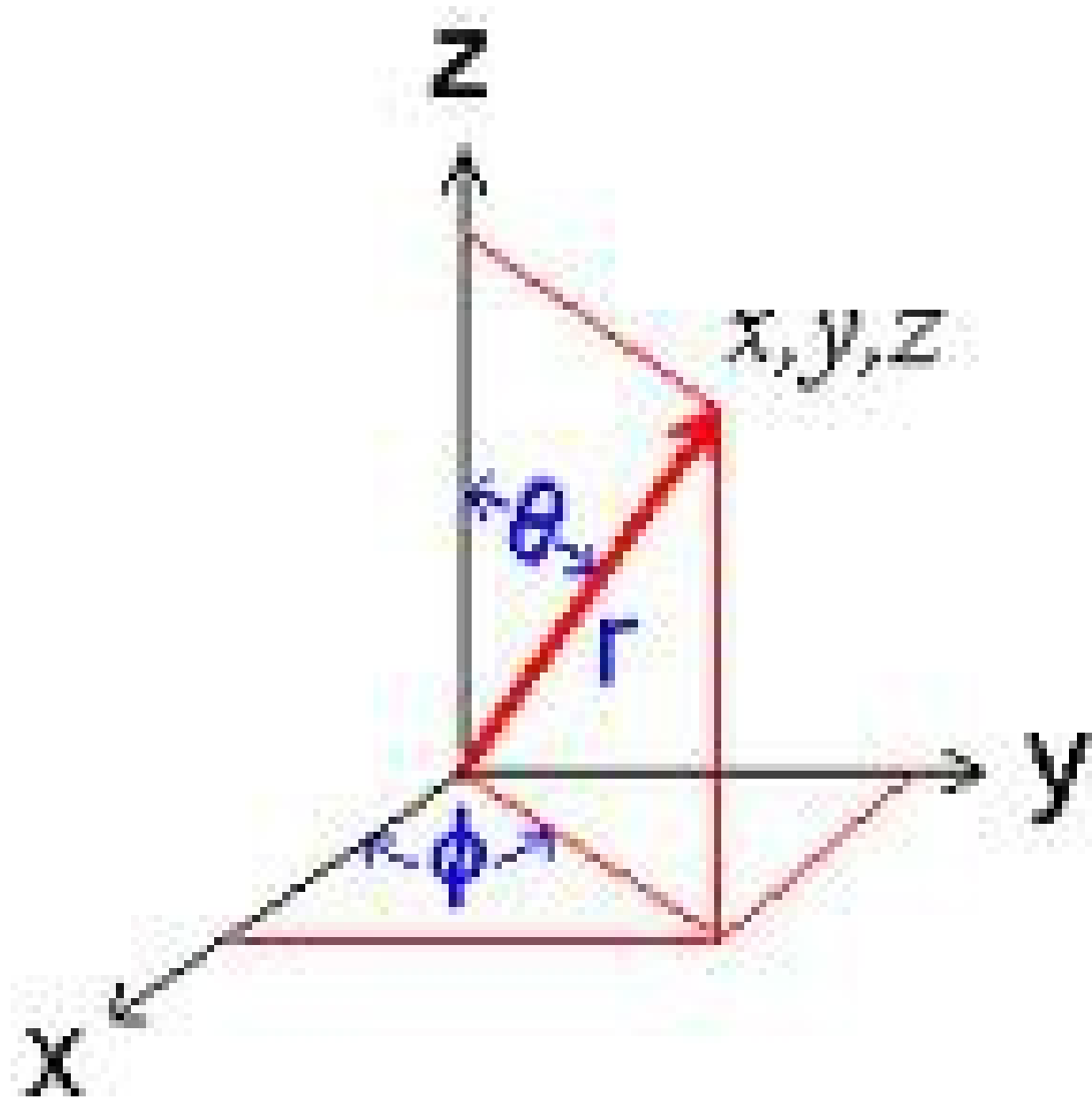
e di chuyển trên các **orbital** ng.tử[atom orbital](**AO**)

* **Về ph.d vật lý:** **AO** là vùng kh. gian bao quanh nhân trên đó xác suất tìm thấy e cực đại từ 90→99%

* **Về ph.d toán học:** **AO** được biểu diễn bởi hàm số $\Psi_{n,l,m}$ là nghiệm của p.t sóng Schrodinger

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

Giải p.t này → các cặp nghiệm E; Ψ



1. Hệ 1 electron:

${}_1\text{H}$: nhân $1+$ và $1e$ di chuyển quanh nhân

${}_2\text{He} \rightarrow {}_2\text{He}^+ + e$: nhân $2+$ và $1e$ quanh nhân

${}_3\text{Li} \rightarrow {}_3\text{Li}^{2+} + 2e$: nhân $3+$ và $1e$ quanh nhân

➔ Hệ $1e$ Nhân có $Z+$ và $1(e)$ quanh nhân

Giải p.t Schrodinger áp dụng cho hệ $1(e)$

➔ Các hàm $\Psi_{n,l,m}$ biểu diễn các AO , và E_n

AO có dạng xác định khi hàm $\Psi_{n,l,m}$ xác định.

$\Psi_{n,l,m}$ xác định khi các số lượng tử n,l,m có giá trị xác định

a. Các số lượng tử:

α. Số lượng tử chính **n** = 1; 2; 3; 4; 5; 6; 7;...∞

Số lượng tử n cho biết lớp mà e di chuyển trên đó, và cho biết kích thước của AO..

n = 1 2 3 4 5 6 7.....∞

Lớp K L M N O P Q.....

$$E_n = -13,6 \cdot \frac{Z^2}{n^2} \text{ eV} \quad \left\{ \begin{array}{l} E_n < 0 \text{ và } E_n \uparrow \text{ khi } n \uparrow \\ n \uparrow \Rightarrow \text{kích thước AO} \uparrow \end{array} \right.$$

Td: ${}_1\text{H}$:

$$\left\{ \begin{array}{l} n=1 \Rightarrow E_1 = -13,6 \cdot \frac{1^2}{1^2} = -13,6 \text{ eV} \\ n=2 \Rightarrow E_2 = -13,6 \cdot \frac{1^2}{2^2} = -3,4 \text{ eV} \end{array} \right.$$

$${}_2\text{He}^+ (Z=2): \left\{ \begin{array}{l} n=1 \rightarrow E_1 = -13,6 * \frac{2^2}{1^2} = -54,4\text{eV} \\ n=2 \rightarrow E_2 = -13,6 * \frac{2^2}{2^2} = -13,6\text{eV} \\ n=3 \rightarrow E_3 = -13,6 * \frac{2^2}{3^2} = -6,05\text{eV} \end{array} \right.$$

$${}_Z\text{X}^{n+} : \quad n = \infty \rightarrow E_{\infty} = -13,6 * \frac{Z^2}{\infty^2} = 0 \text{ eV}$$

β. Số lượng tử phụ **l**:

Với 1 giá trị $n \rightarrow \mathbf{l}$ có n trị số: 0; 1; 2; 3; 4; 5; ...; $n-1$.

Số lượng tử phụ **l** cho biết hình dạng của AO và phân lớp có trong 1 lớp thứ n của nguyên tử.

l	0	1	2	3	4	5	6	7.....
Ph.l	s	p	d	f	g	h	i	j.....

γ. Số lượng tử từ **m** (m_l):

Với 1 giá trị của $\mathbf{l} \rightarrow \mathbf{m}$ có $(2\mathbf{l}+1)$ trị số:

$\mathbf{m} = -1; -(1-1); -(1-2); \dots; 0; 1; 2; \dots; +1$

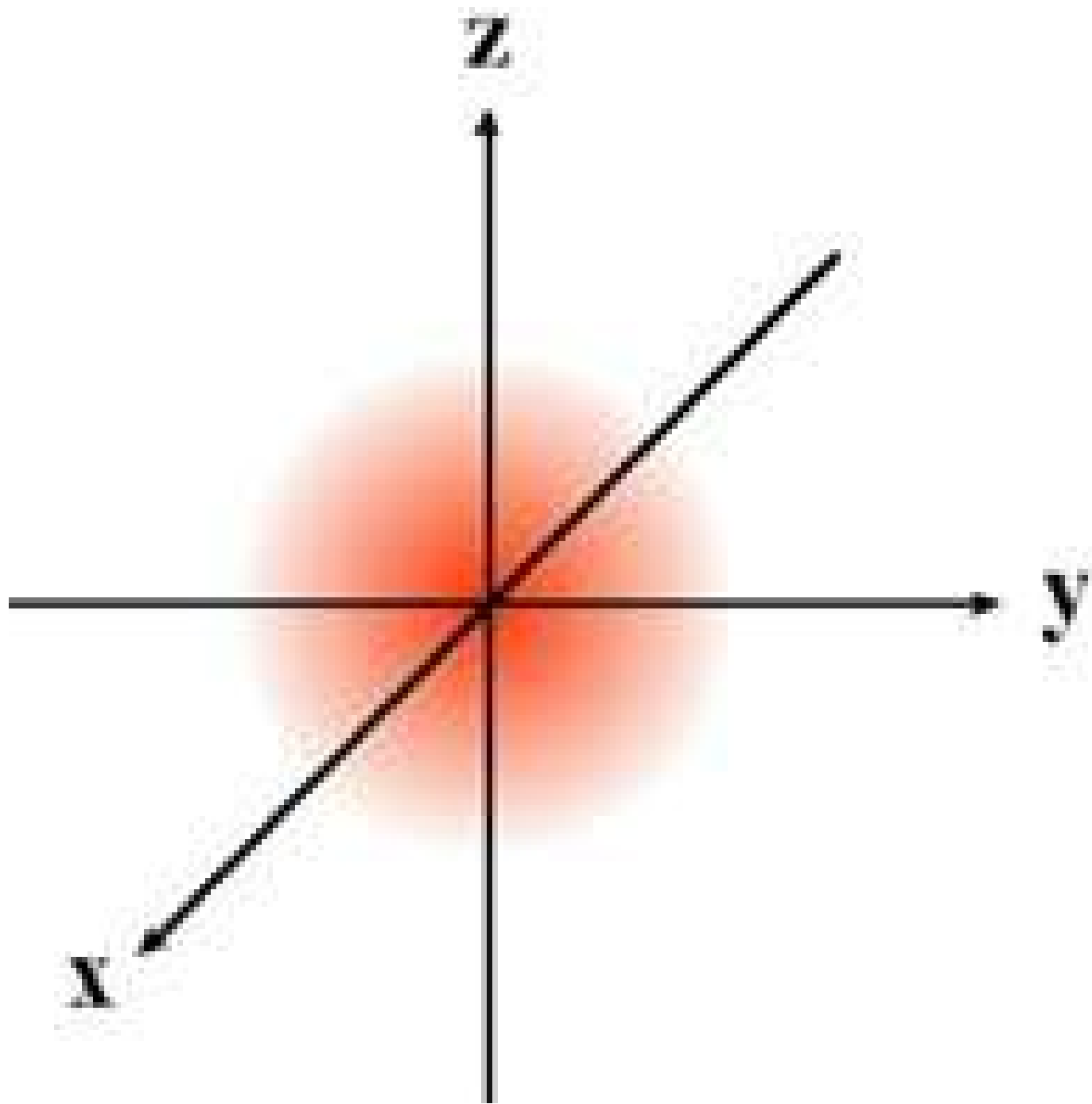
Số lượng tử từ **m** cho biết sự định hướng của AO trong không gian

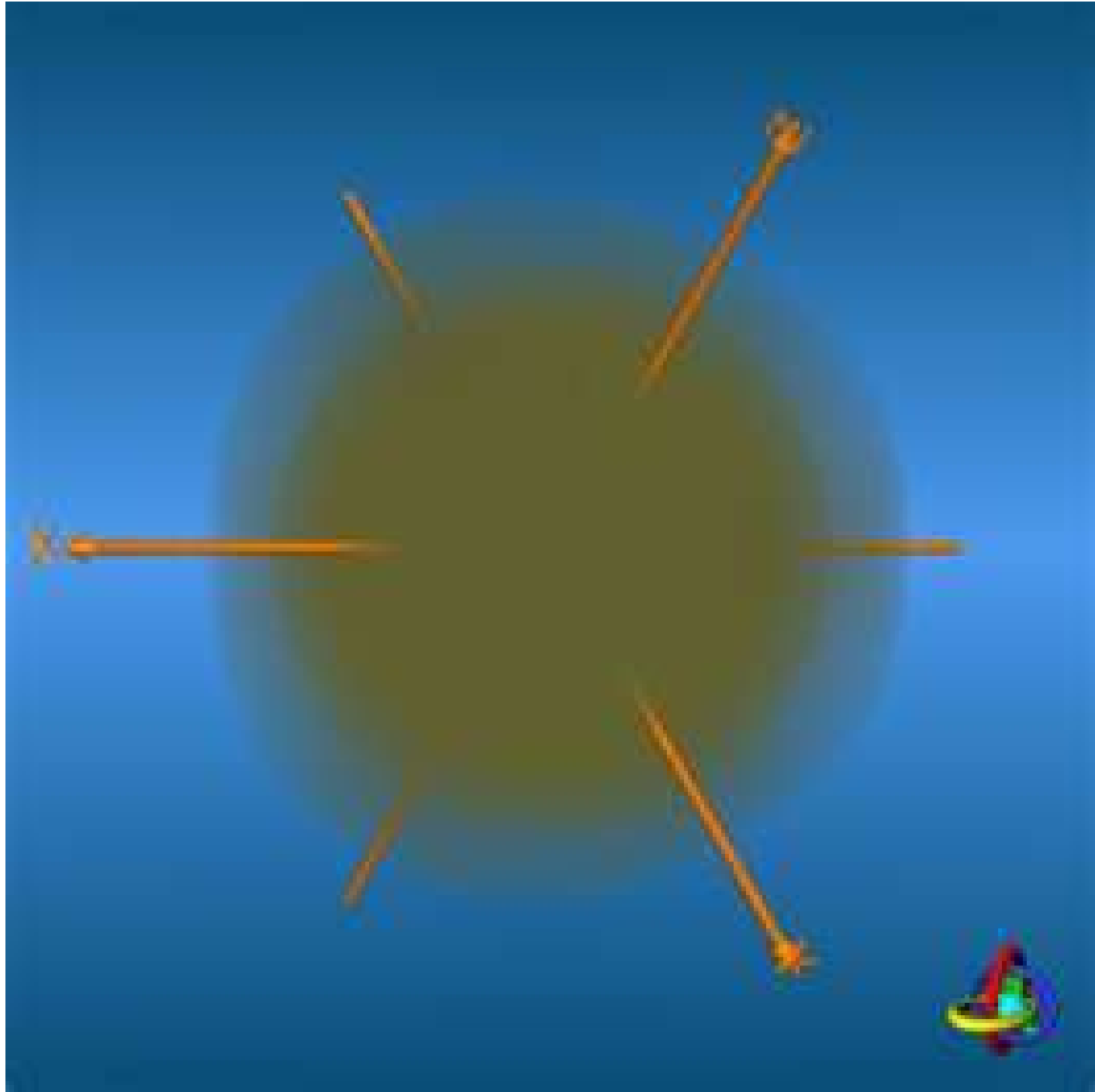


n	l	m	$\Psi_{n,l,m}$ (nl)	AO
1	0	0	$\Psi_{1,0,0}$	1s

→ lớp K(n=1) có 1 phân lớp(1s) và chỉ có 1AO(1s)

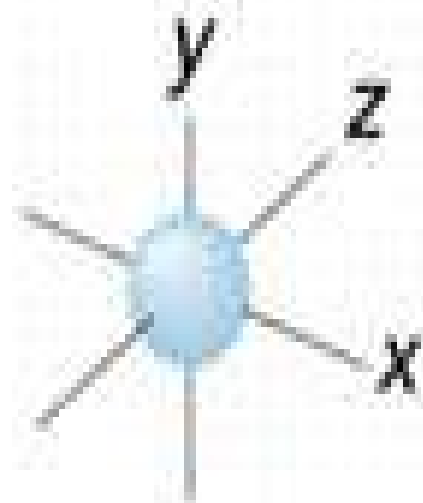




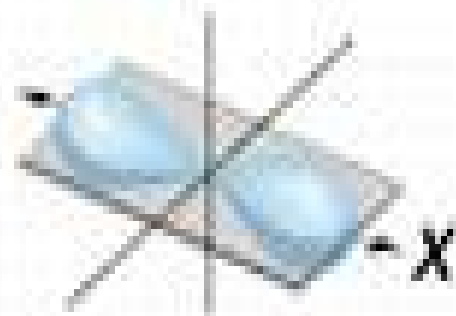


n	l	m	$\Psi_{n,l,m}$	(nl)	AO
2	0	0	$\Psi_{2,0,0}$	2s	2s
	1	-1	$\Psi_{2,1,-1}$	2p	2p _x
		0	$\Psi_{2,1,0}$		2p _y
		+1	$\Psi_{2,1,+1}$		2p _z

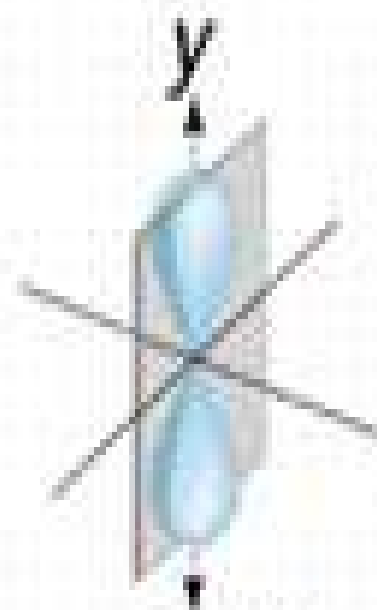
➔ lớp L(n=2) có 2 phân lớp: 2s có 1 AO(2s) và 2p có 3 AO (2p_x; 2p_y; 2p_z)



s Orbital



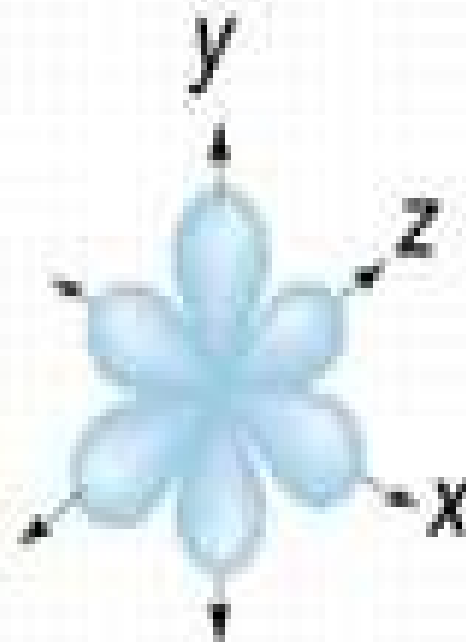
p_x Orbital



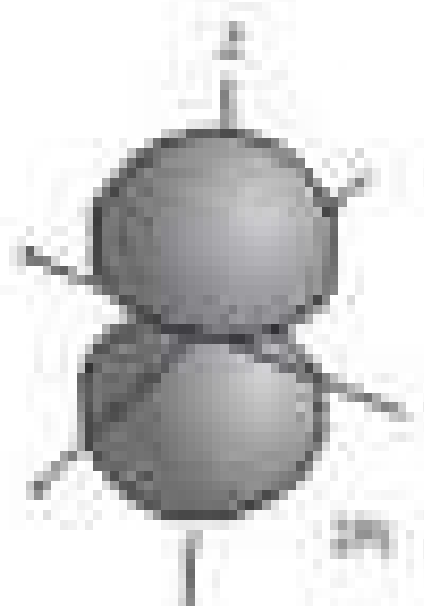
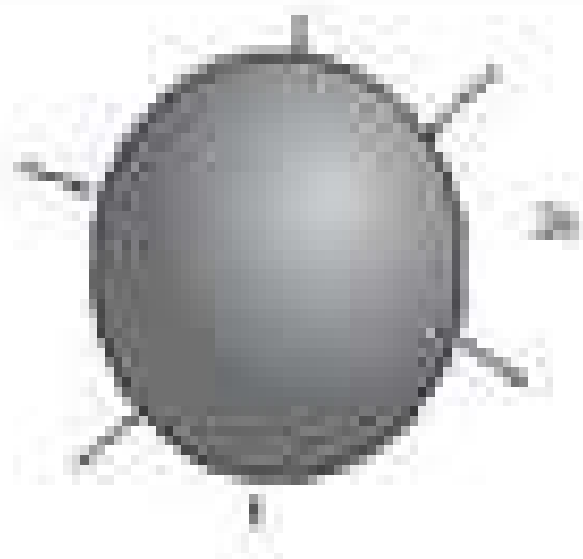
p_y Orbital

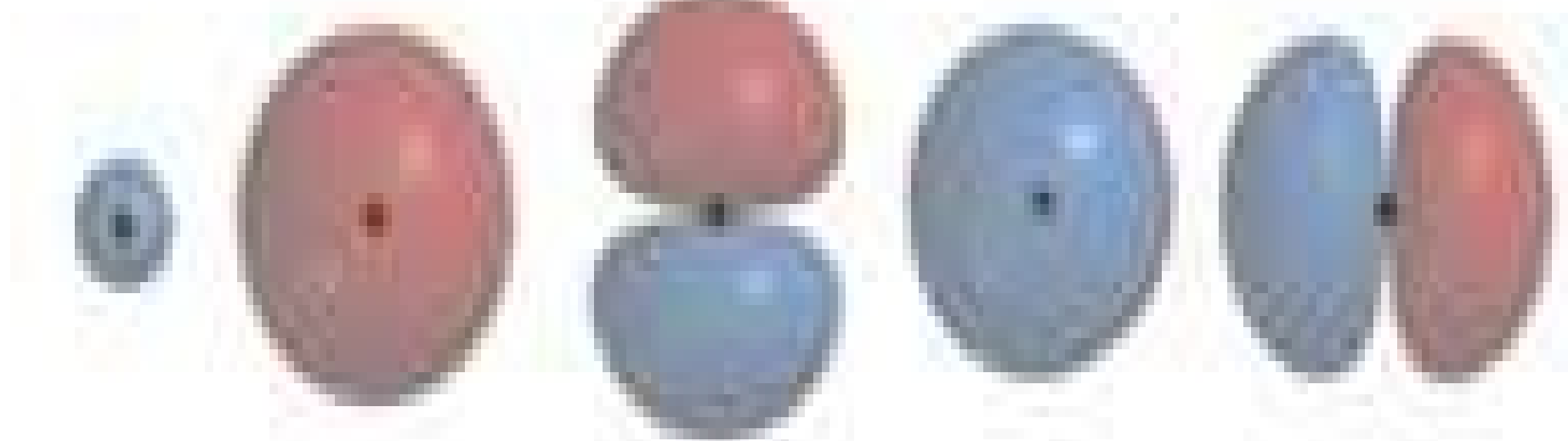


p_z Orbital



All p orbitals full





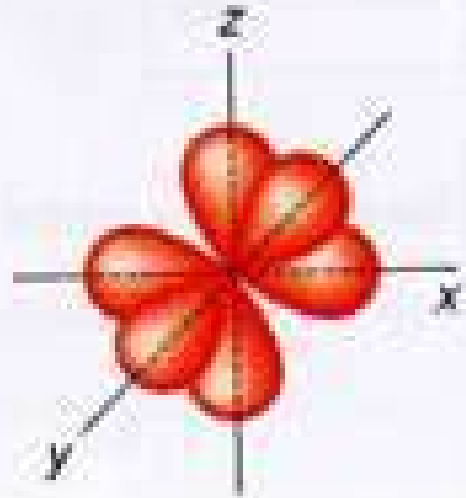
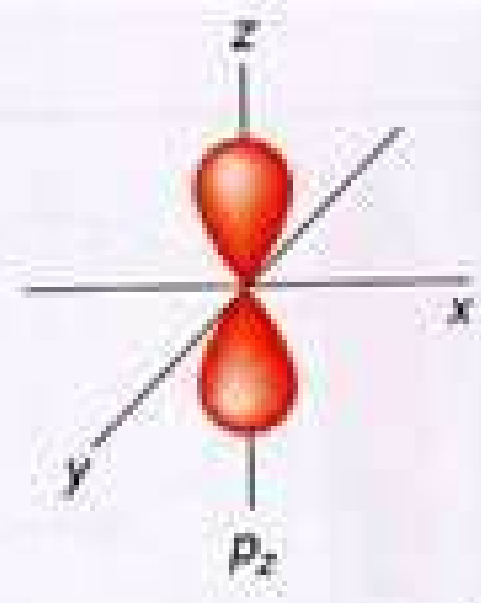
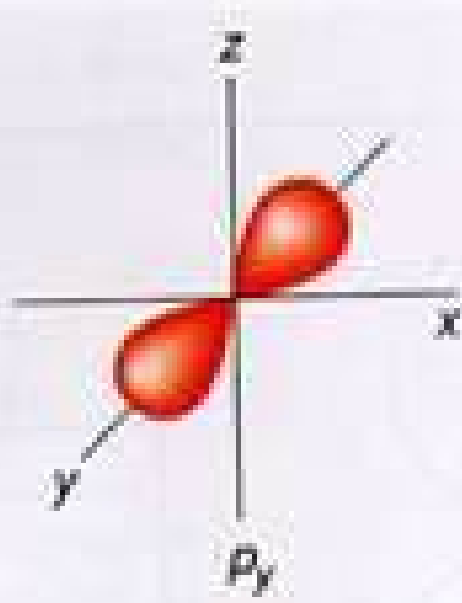
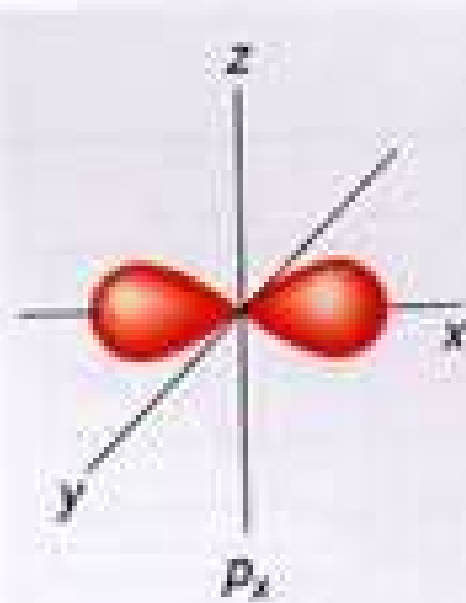
1s

2s

2p_x

2p_y

2p_z



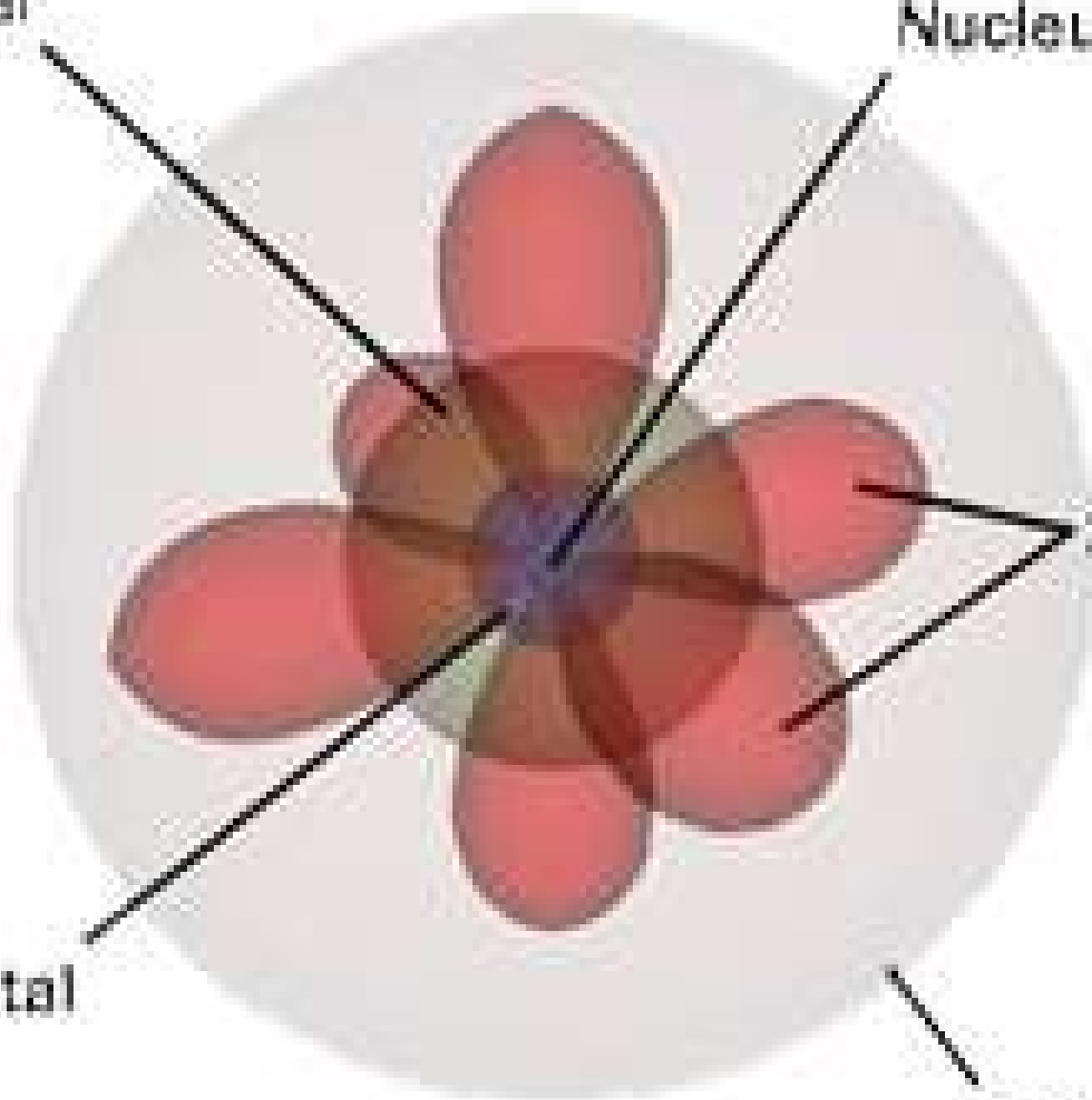
2s orbital

Nucleus

2p orbitals

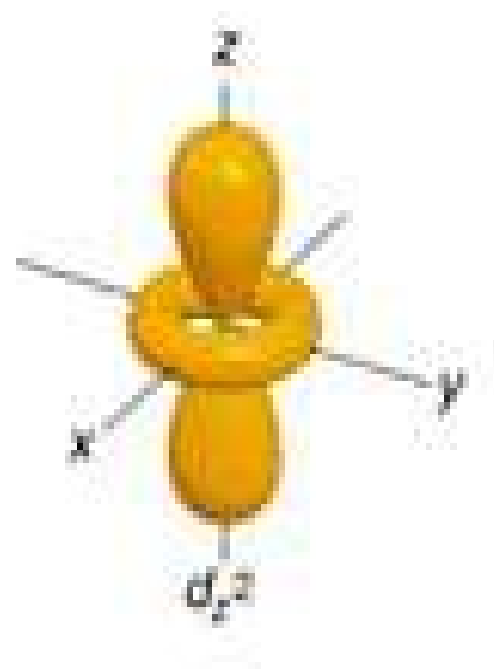
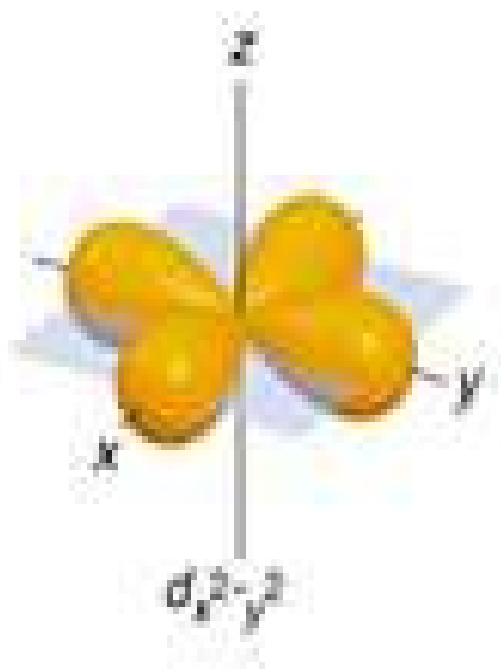
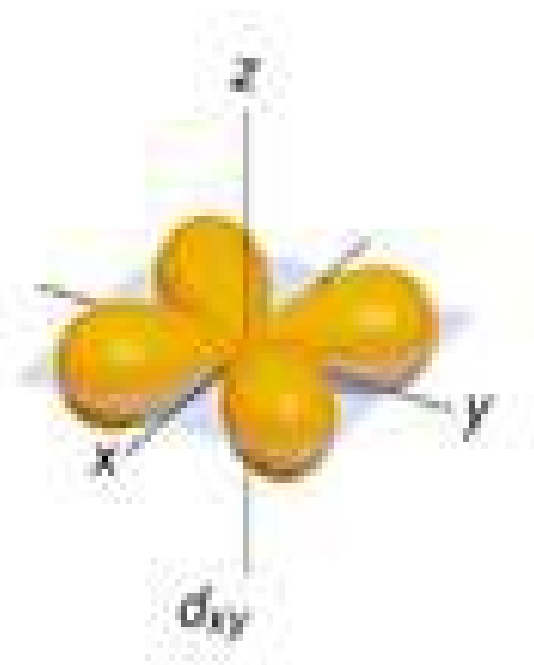
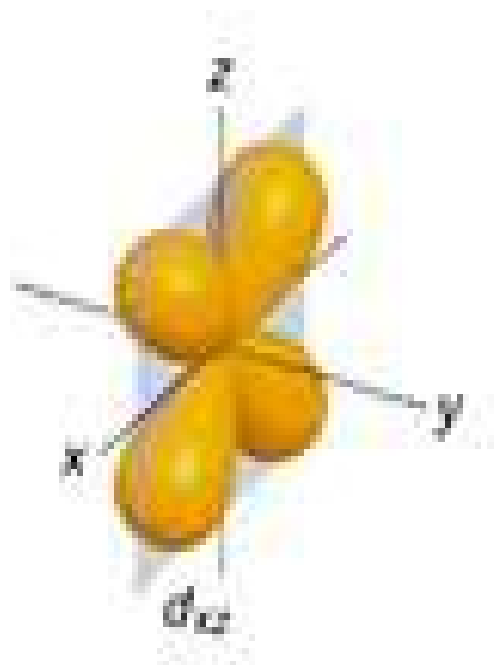
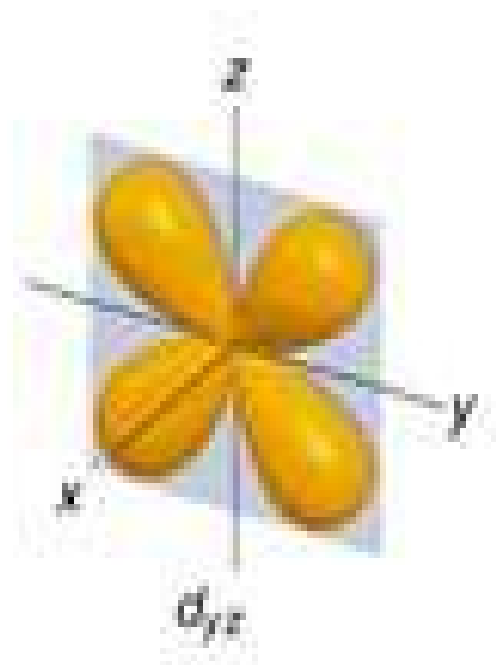
3s orbital

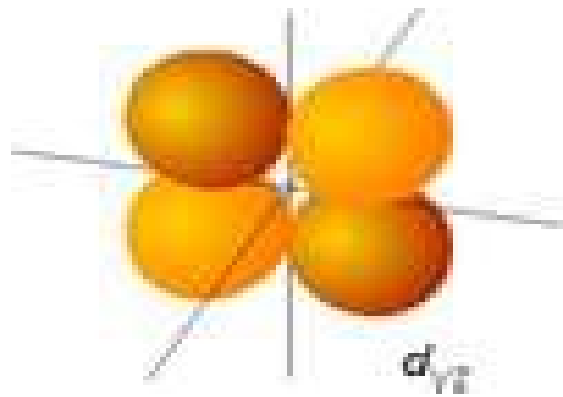
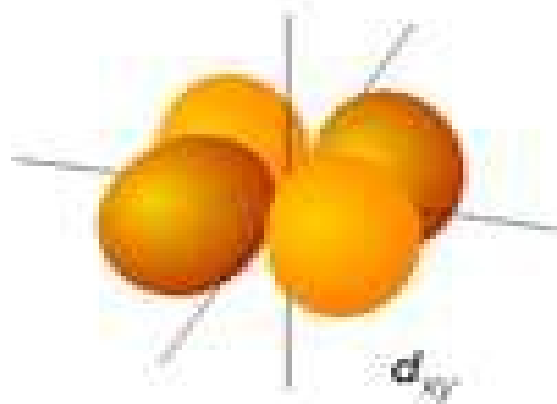
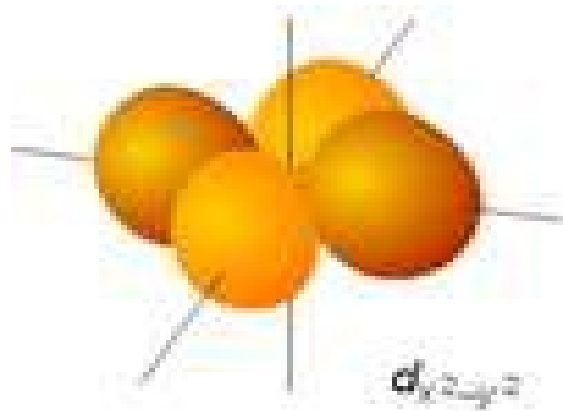
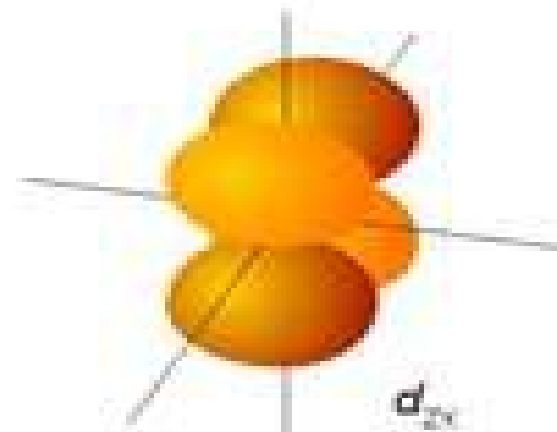
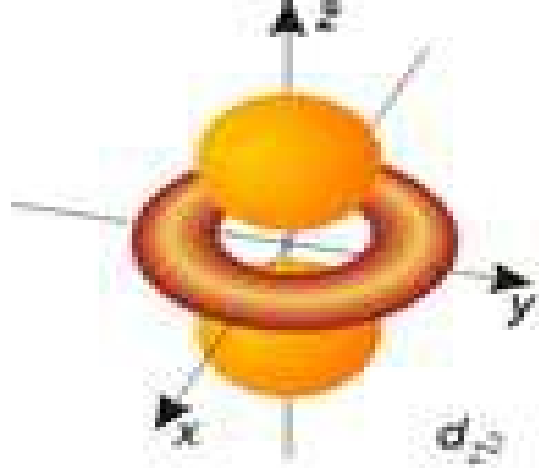
1s orbital

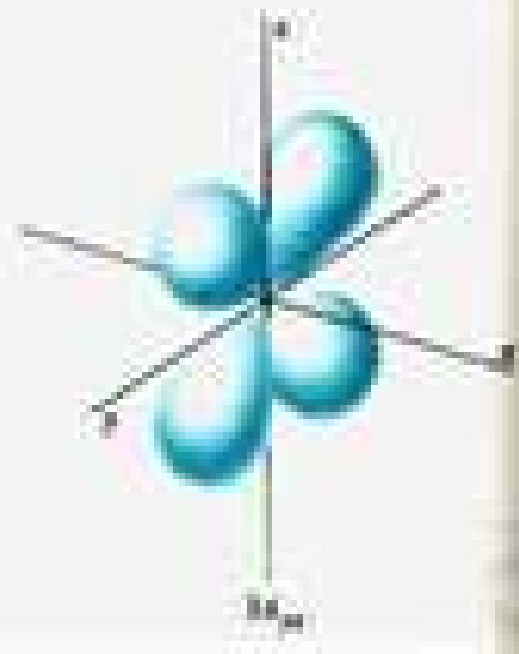
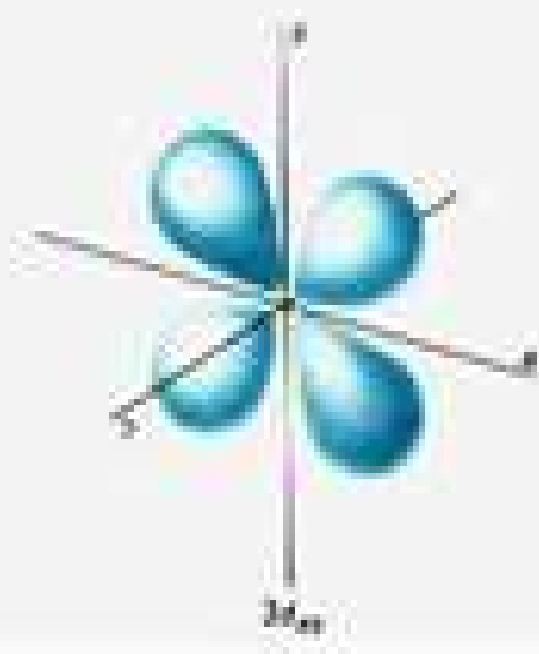
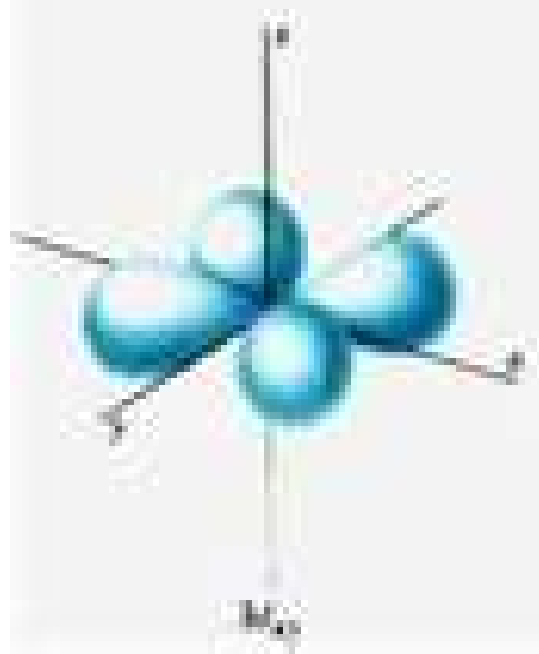
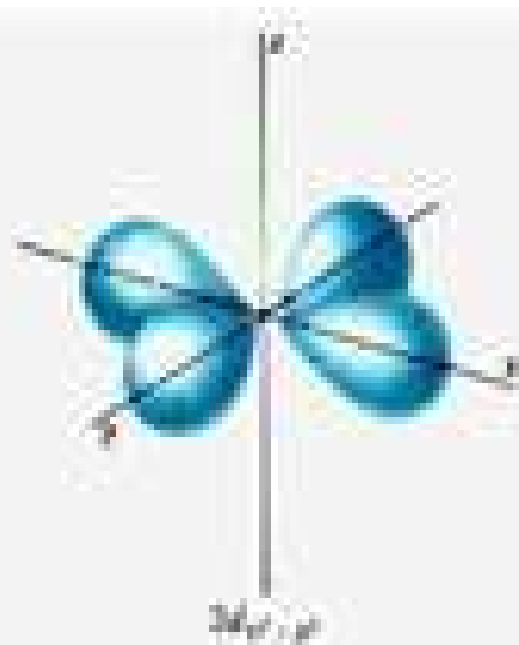
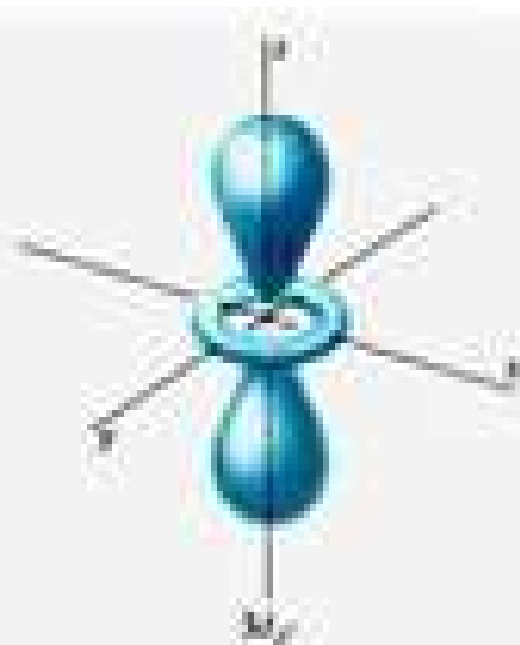


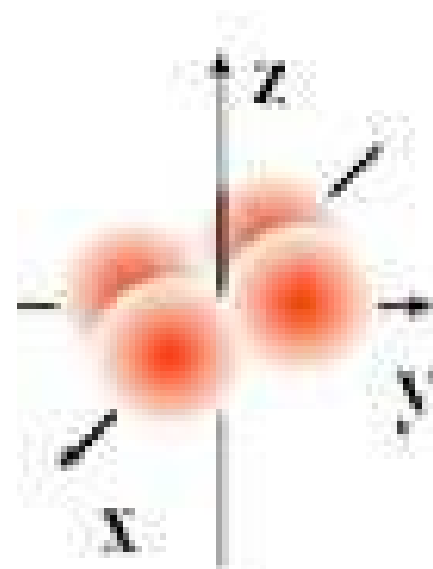
n	l	m	$\Psi_{n,l,m}$	nl	AO
3	0	0	$\Psi_{3,0,0}$	3s	3s
	1	-1	$\Psi_{3,1,-1}$	3p	3p _x
		0	$\Psi_{3,1,0}$		3p _y
		+1	$\Psi_{3,1,+1}$		3p _z
	2	-2	$\Psi_{3,2,-2}$	3d	3d _{xy}
		-1	$\Psi_{3,2,-1}$		3d _{yz}
		0	$\Psi_{3,2,0}$		3d _{z²}
		+1	$\Psi_{3,2,+1}$		3d _{xz}
		+2	$\Psi_{3,2,+2}$		3d _{x² - y²}

➔ lớp M(n=3) có 3 phân lớp: 3s (1AO); 3p(3AO) ; 3d(5AO)

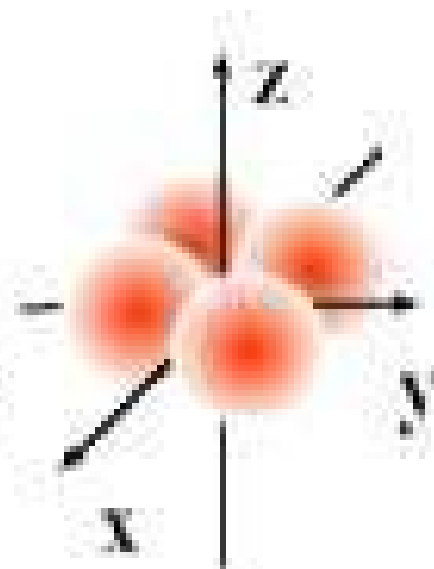




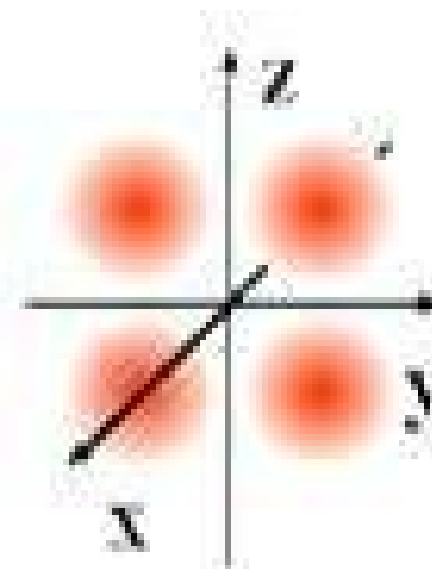




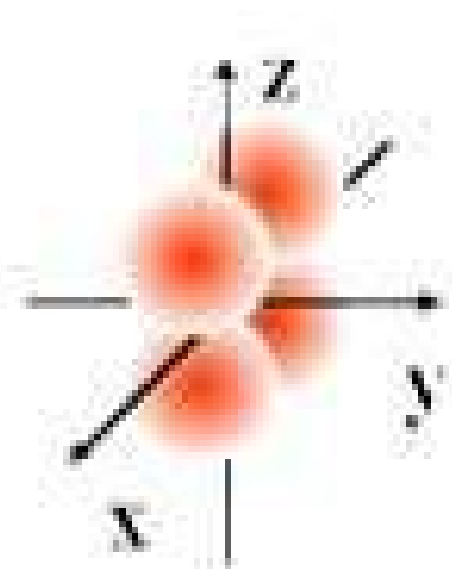
$3d_{x^2-y^2}$



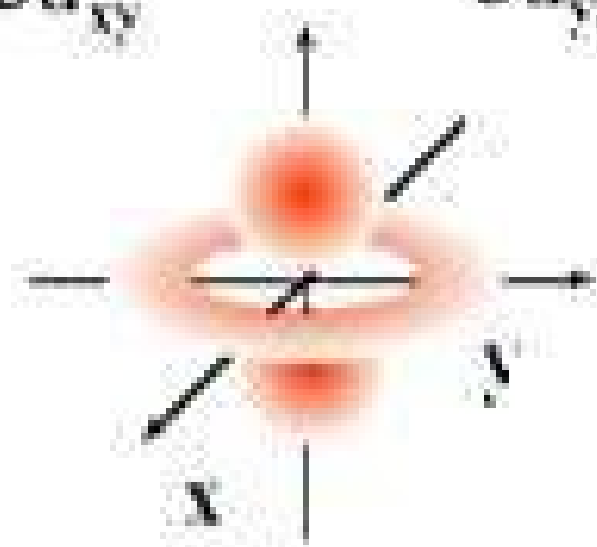
$3d_{xy}$



$3d_{yz}$



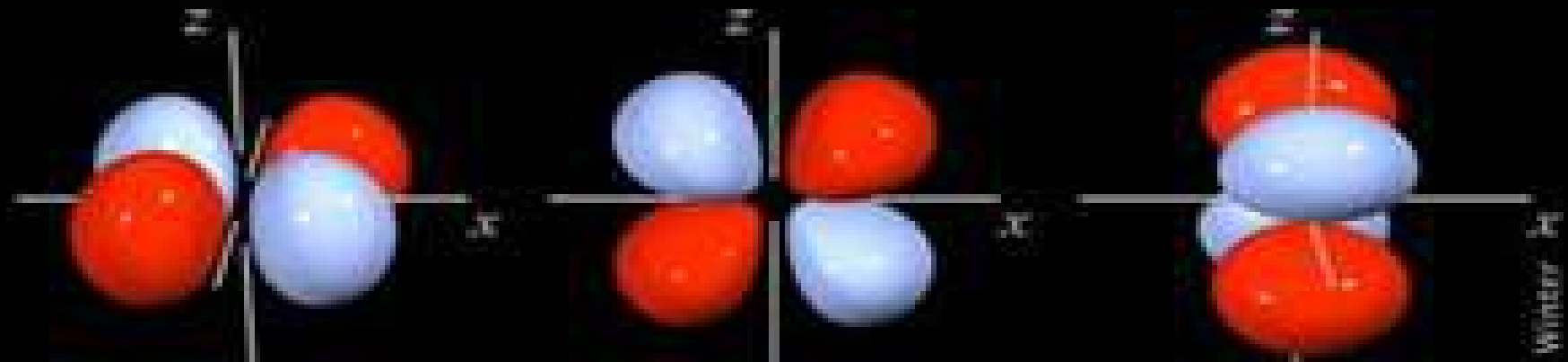
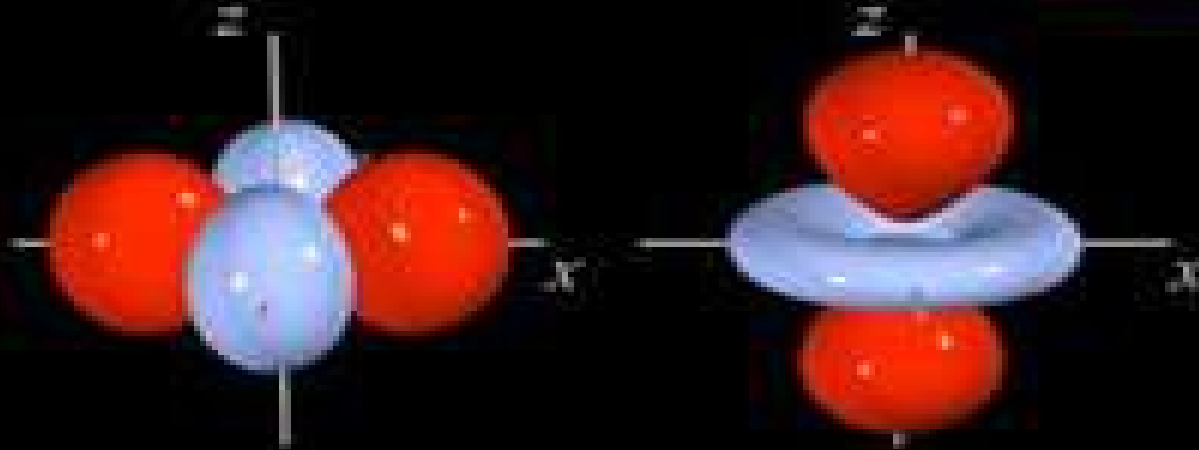
$3d_{xz}$



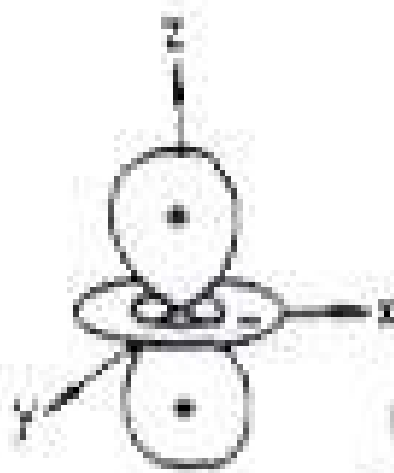
$3d_{z^2}$



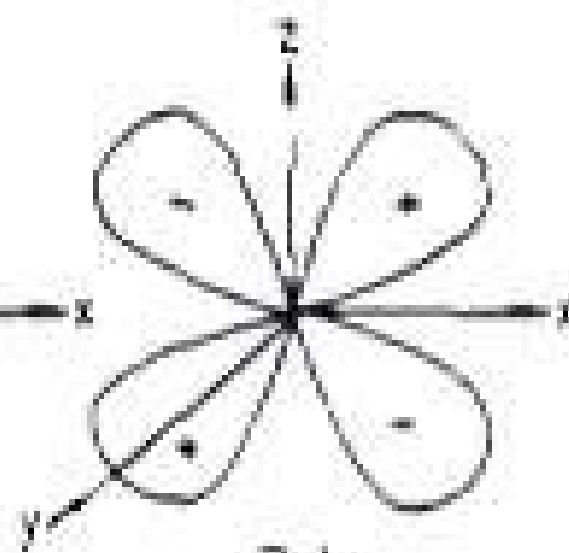
The Orbitron



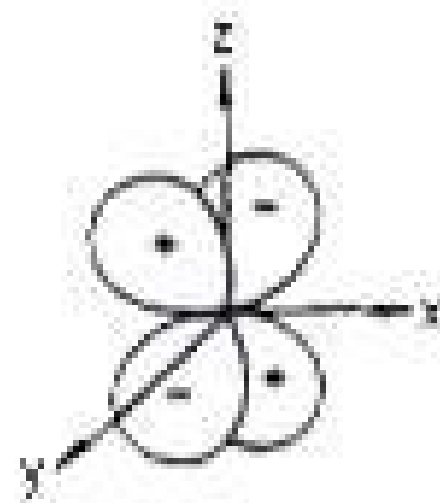
Toggle nodes



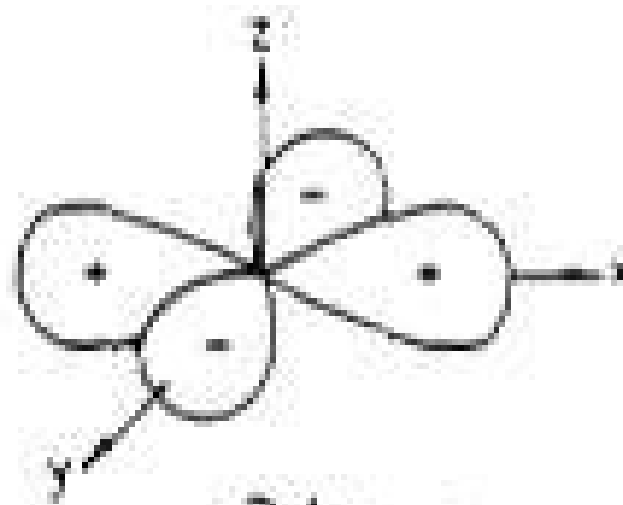
$3d_{z^2}$



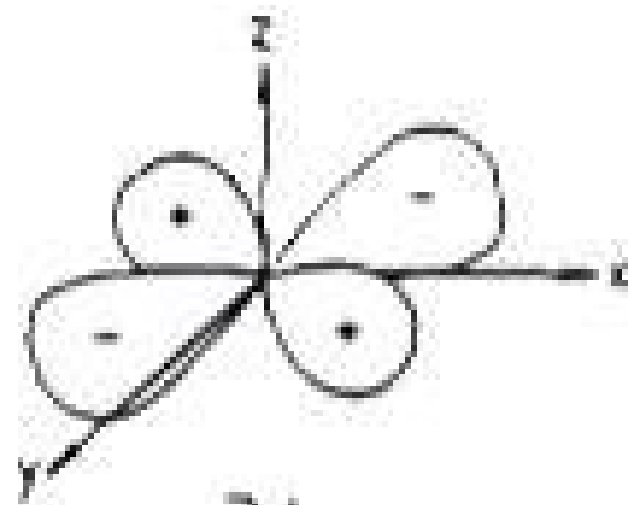
$3d_{xz}$



$3d_{yz}$



$3d_{x^2 - y^2}$



$3d_{xy}$

$n = 4 \rightarrow l = 0; 1; 2; 3 \rightarrow$ có 4 phân lớp: $4s; 4p; 4d; 4f$

Phân lớp $4f$ ($l=3$) $\Rightarrow m$ có $(2.3+1)=7$ giá trị $\rightarrow 7AO$

$\rightarrow$ Lớp thứ n có n phân lớp: $ns; np; nd; nf; \dots$

δ. Số lượng tử spin m_s

Trạng thái chuyển động của electron còn được biểu diễn bởi một số lượng tử thứ tư là m_s : khi di chuyển quanh nhân electron có thể tự quay quanh trục đối xứng theo 2 chiều trái nhau (thuận và ngược chiều kim đồng hồ)

Số lượng tử m_s có 2 giá trị: $m_s = -\frac{1}{2}$ và $m_s = +\frac{1}{2}$

→ Trạng thái chuyển động của electron được xác định bởi 4 số lượng tử: n, l, m, m_s . → Mỗi e trong 1 ng. tử đều có 4 số lượng tử n, l, m, m_s xác định.

b. Ghi chú:

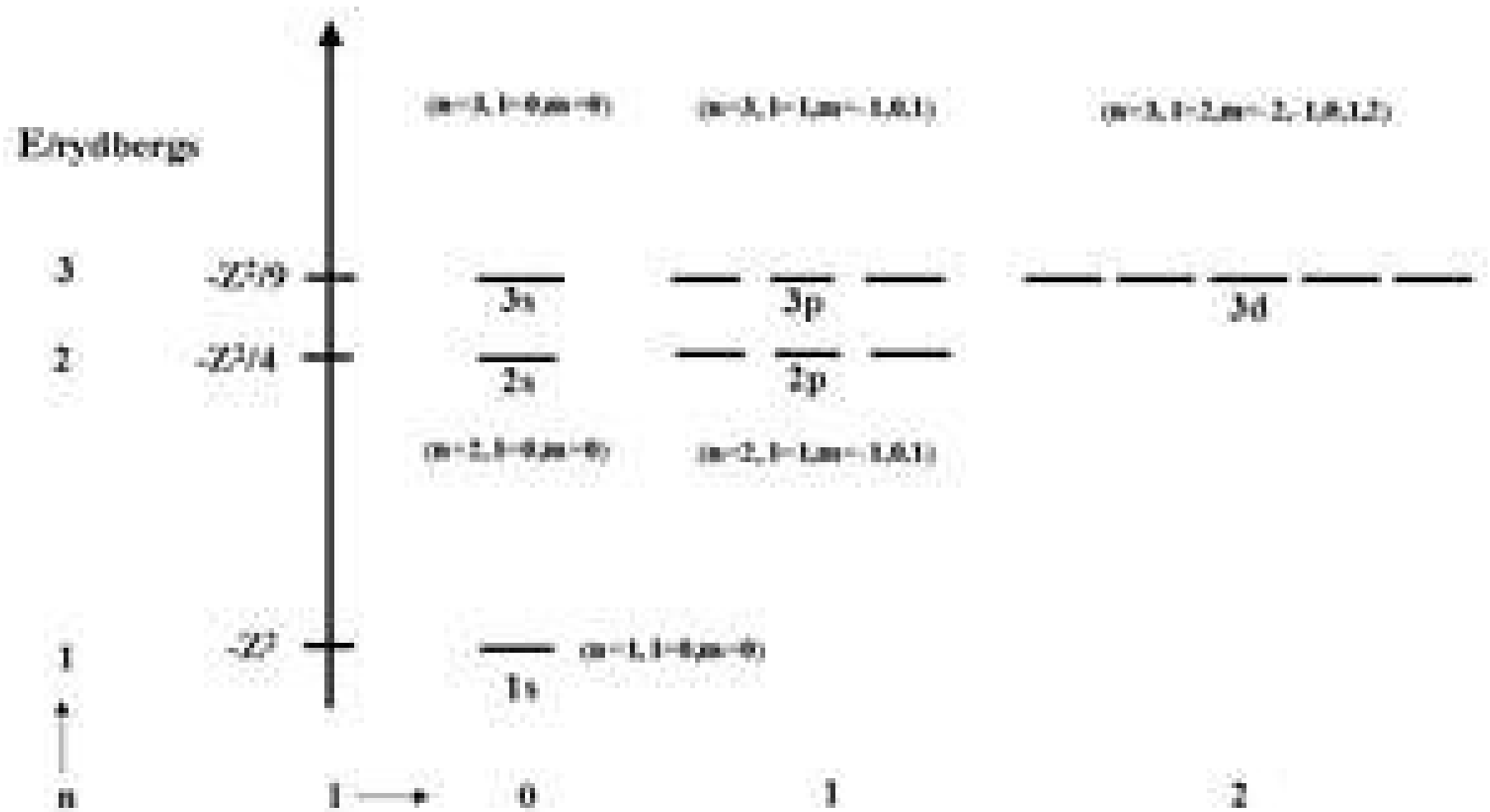
- * trong hệ 1(e) Các ph.1 $\in$ 1 lớp có E_n bằng nhau
- * e có thể di chuyển trên bất kỳ lớp nào từ $n=1 \rightarrow \infty$
- * Khi e di chuyển ở lớp nào $\rightarrow E_n$ của lớp đó

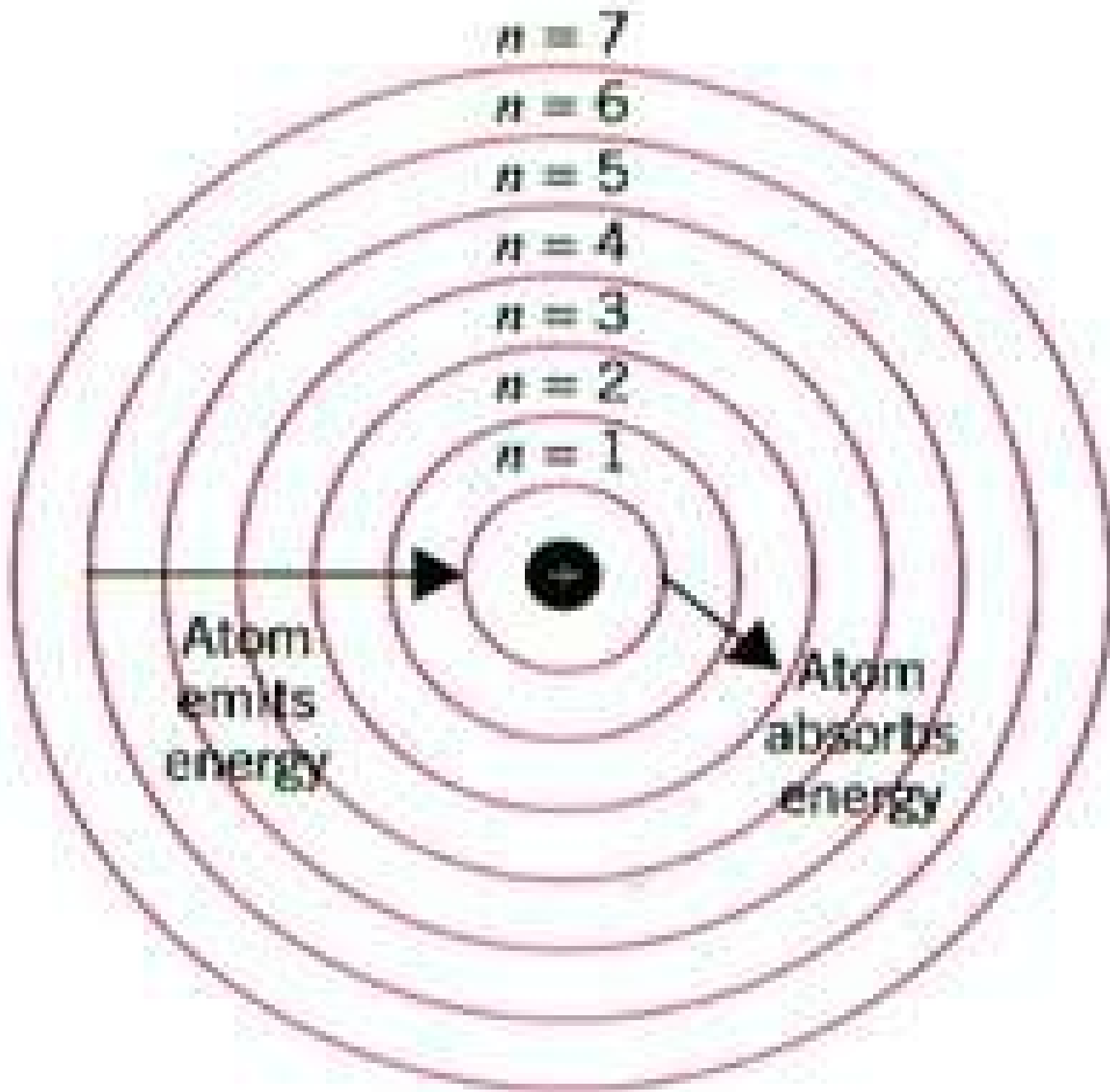
$$Z^2$$

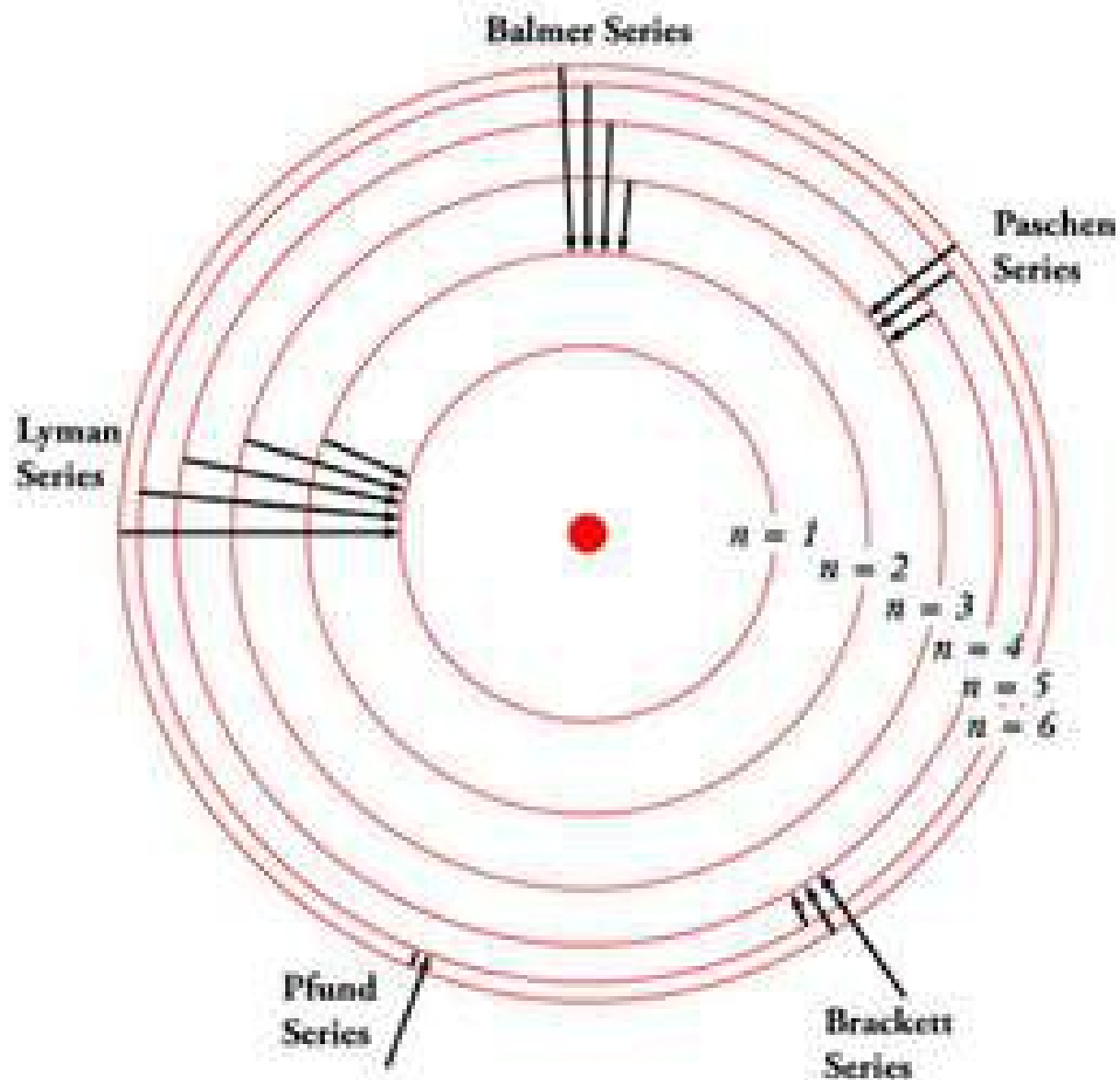
$$E_n = -13,6 \cdot \frac{Z^2}{n^2} \text{ eV}$$

- * Ở trạng thái cơ bản: Hệ có E nhỏ nhất $\rightarrow e \in n=1$
- * e từ $n=1 \rightarrow n=2 \rightarrow \Delta E_{1 \rightarrow 2} = E_2 - E_1 = -13,6(z^2/2^2 - z^2/1^2)\text{eV} > 0$
- * e từ $n=2 \rightarrow n=1 \rightarrow \Delta E_{2 \rightarrow 1} = E_1 - E_2 = -13,6(z^2/1^2 - z^2/2^2)\text{eV} < 0$
- * e từ E_n thấp $\rightarrow E_n$ cao $\rightarrow$ Hệ nhận năng lượng
- * e từ E_n cao $\rightarrow E_n$ thấp $\rightarrow$ Hệ phát năng lượng

Energy -Level Diagram for One-Electron Atom/Ions







2. Hệ nhiều electron:

Gồm các nguyên tử chứa từ 2e trở lên:

- * Các e đẩy lẫn nhau → các phân lớp trong cùng 1 lớp có E khác nhau
- * Các e di chuyển quanh nhân cũng trên các lớp và phân lớp tương tự trường hợp hệ 1e.
- * Trạng thái chuyển động của các e trong hệ nhiều e phải tuân theo các nguyên lý của cơ lượng tử.

a. Các nguyên lý của cơ lượng tử:

α . Nguyên lý ngoại trừ Pauli:

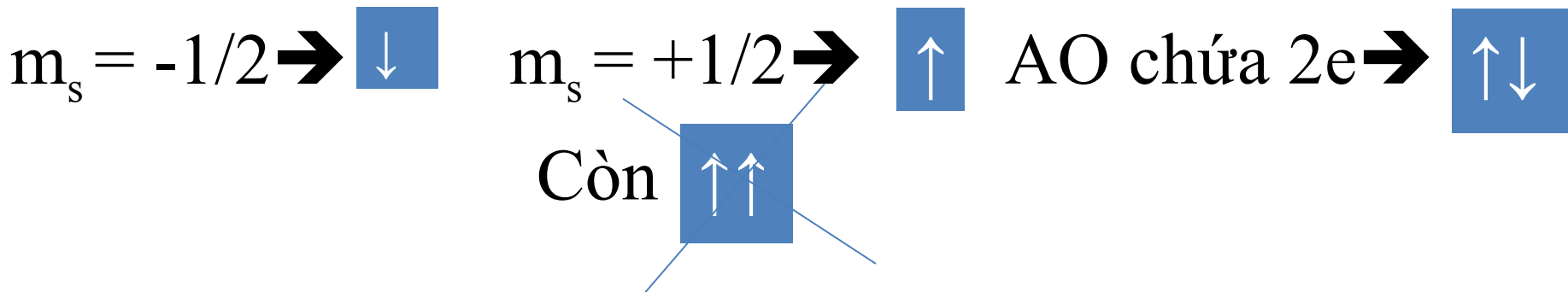
Trong 1 nguyên tử nhiều electron, không có cặp e nào có 4 số lượng tử hoàn toàn giống nhau.

* Số e tối đa trong 1AO:

Các e di chuyển trên cùng 1AO($\Psi_{n,l,m}$) phải có 3 số lượng tử n, l, m giống nhau $\rightarrow$ số m_s phải khác nhau

Vì m_s chỉ có 2 giá trị: $m_s = -1/2$ và $m_s = +1/2$

$\rightarrow$ Trong 1AO chỉ chứa tối đa 2e với spin ngược chiều



* Số electron tối đa trong 1 phân lớp:

Trong 1 phân lớp thứ l: Có $(2l+1)$ AO $\rightarrow$ có $2(2l+1)e$

Phân lớp s ($l=0$) $\rightarrow$ chứa tối đa $2(2.0+1) = 2e \rightarrow s^2$

Phân lớp p ($l=1$) $\rightarrow$ chứa tối đa $2(2.1+1) = 6e \rightarrow p^6$

Phân lớp d ($l=2$) $\rightarrow$ chứa tối đa $2(2.2+1) = 10e \rightarrow d^{10}$

Phân lớp f ($l=3$) $\rightarrow$ chứa tối đa $2(2.3+1) = 14e \rightarrow f^{14}$

ns: s^0 ; s^1 ; s^2

np: p^0 ; p^1 ; p^2 ; p^3 ; p^4 ; p^5 ; p^6

nd: d^0 ; d^1 ; d^2 ; d^3 ; d^4 ; d^5 ; d^6 ; d^7 ; d^8 ; d^9 ; d^{10}

nf: f^0 ; f^1 ; f^2 ; f^3 ; f^4 ; f^5 ; f^6 ; f^7 ; f^8 ; f^9 ; f^{10} ; f^{11} ; f^{12} ; f^{13} ; f^{14}

* Số electron tối đa trong 1 lớp

Trong lớp thứ n: Chứa tối đa $(2.n^2)$ e

$$n=1 \rightarrow \text{tối đa } 2.1^2 = 2 \text{ e}$$

$$n=2 \rightarrow \text{tối đa } 2.2^2 = 8 \text{ e}$$

$$n=3 \rightarrow \text{tối đa } 2.3^2 = 18 \text{ e}$$

$$n=4 \rightarrow \text{tối đa } 2.4^2 = 32 \text{ e}$$

$$n=5 \rightarrow \text{tối đa } 2.5^2 = 50 \text{ e}$$

$$n=6 \rightarrow \text{tối đa } 2.6^2 = 72 \text{ e}$$

$$n=7 \rightarrow \text{tối đa } 2.7^2 = 98 \text{ e}$$

β. Nguyên lý vững bền

Trong 1 nguyên tử nhiều electron, các electron di chuyển quanh nhân như thế nào để năng lượng của hệ là nhỏ nhất.

* Các phân lớp nl : Có $(n + 1) \uparrow \rightarrow E \uparrow$

Td: $3s(3 + 0) < 3p(3 + 1) \rightarrow E_{3s} < E_{3p}$

* Trường hợp 2 phân lớp có $(n + 1)$ bằng nhau:

Phân lớp nào có $n \uparrow \rightarrow E_n \uparrow$

Td: $3d(3 + 2)$ và $4p(4 + 1) \rightarrow E_{3d} < E_{4p}$

$4p(4 + 1)$ và $5s(5 + 0) \rightarrow E_{4p} < E_{5s}$

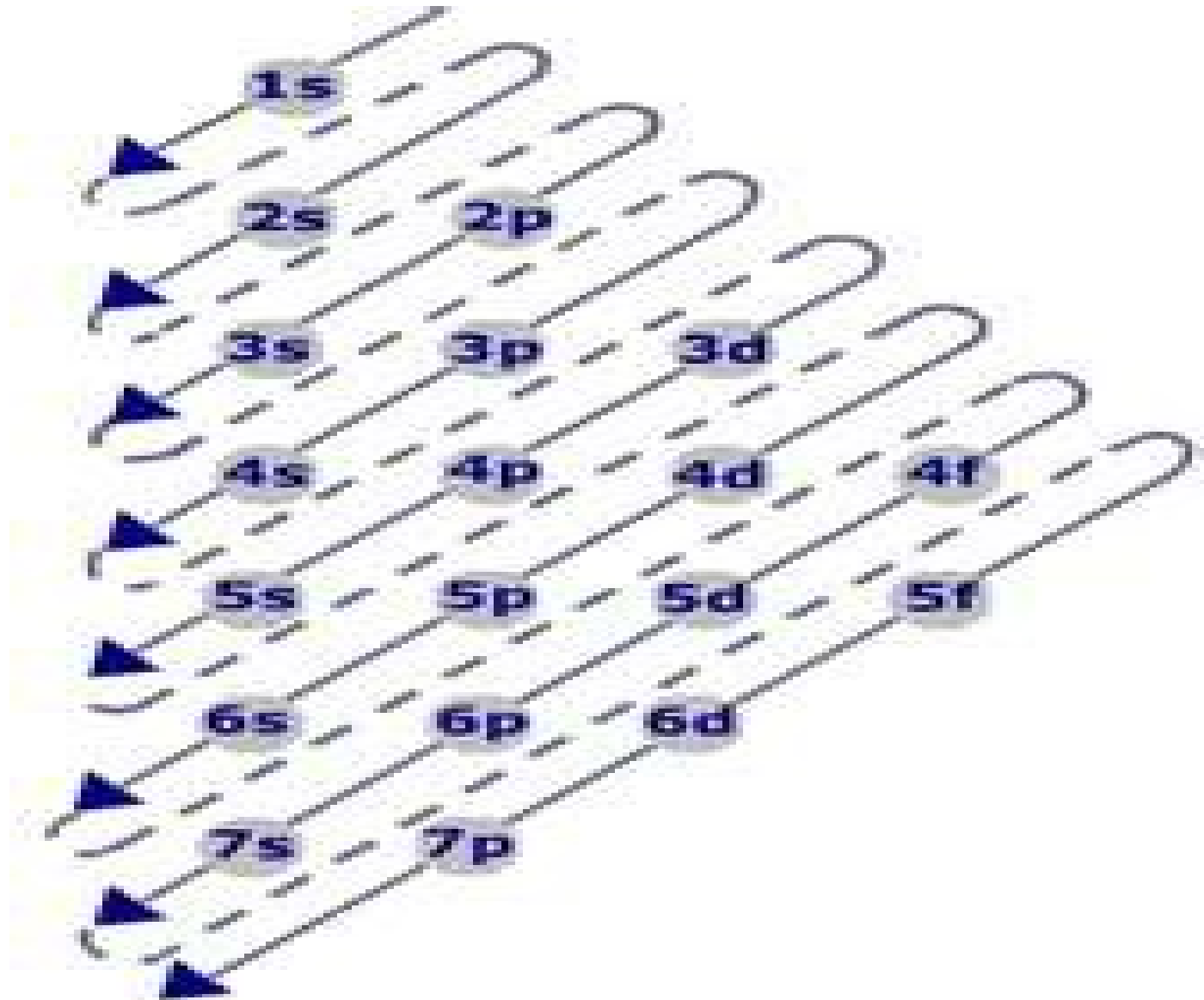
* Quy tắc Kleckowski:

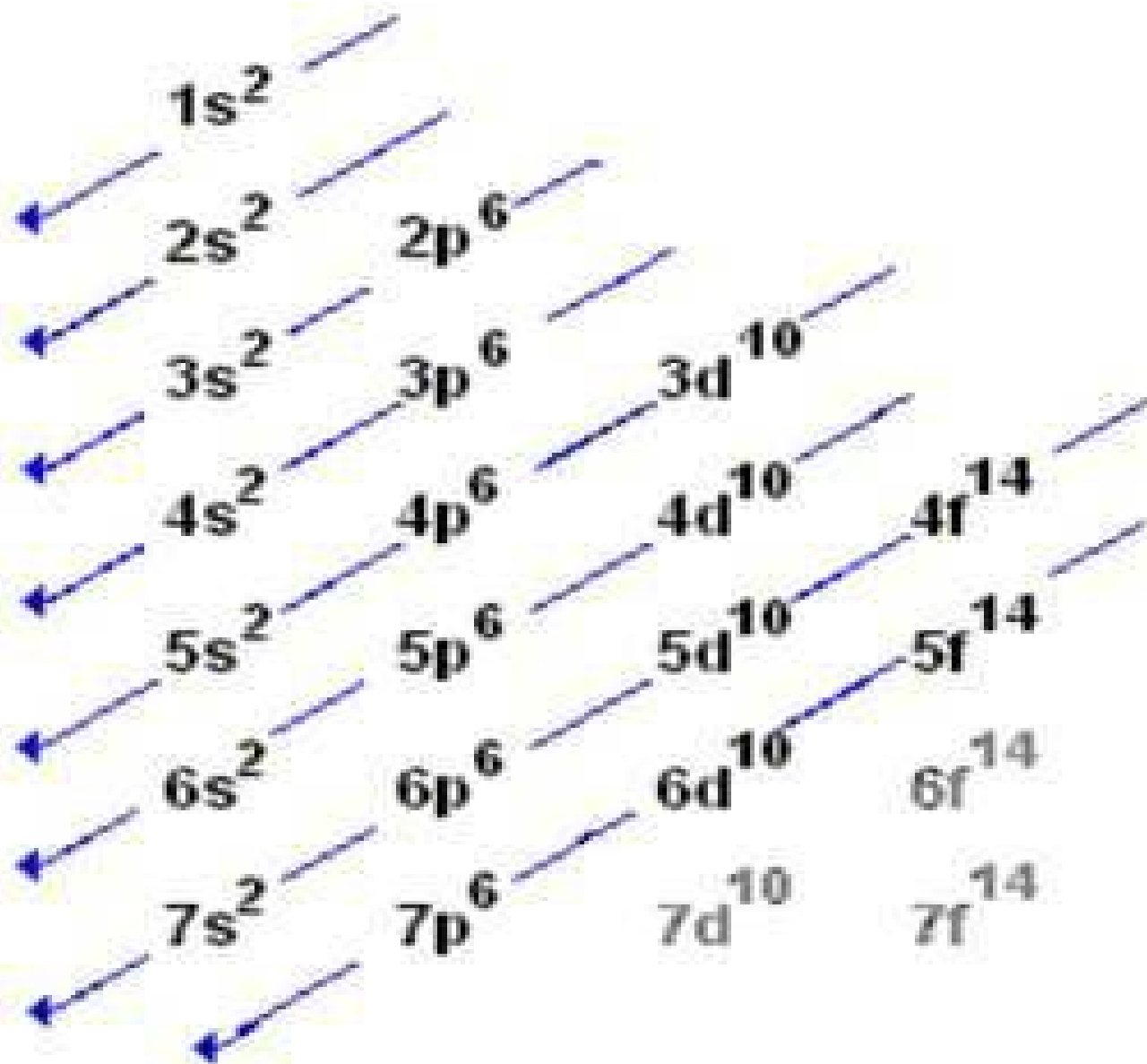
Trong 1 nguyên tử nhiều electron, các electron lần lượt vào chiếm các phân lớp có năng lượng nhỏ nhất trước (mỗi AO chỉ chứa tối đa 2e với spin ngược chiều). Khi nào phân lớp có năng lượng nhỏ hơn đã bão hòa electron, thì electron tiếp theo mới vào chiếm phân lớp có năng lượng cao hơn kế tiếp. Thứ tự tiến năng lượng của các phân lớp được xác định bởi qui tắc Kleckowski.

Thứ tự tiến năng lượng của các phân lớp:

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

Quy tắc Kleckowski:





γ . Quy tắc Hund:

Trường hợp phân lớp có nhiều AO đồng năng:

p.l: np^x 

$m = -1 \ 0 \ +1$

p.l: nd^x 

$m = -2 \ -1 \ 0 \ +1 \ +2$

Các e lần lượt vào chiếm các AO như thế nào để:

$\sum m_s$ cực đại

$\sum m$ cực tiểu

→ p^1 

p^2 

p^3 

p^4 

p^5 

p^6 

→ d^1 

d^2 

d^3 

d^4 

d^5 

d^6 

d^7 

d^8 

d^9 

d^{10} 

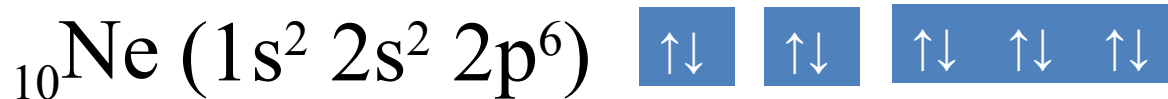
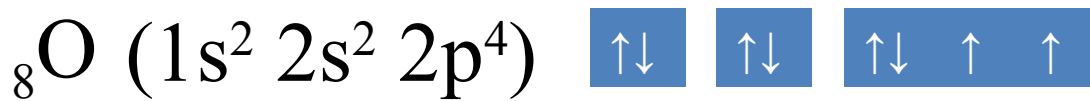
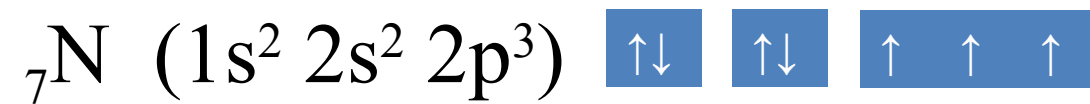
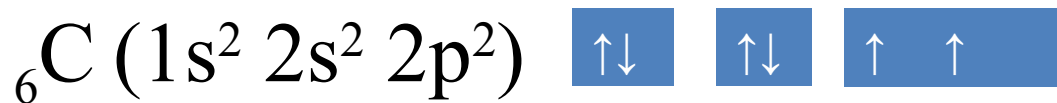
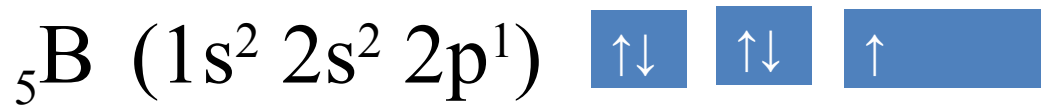
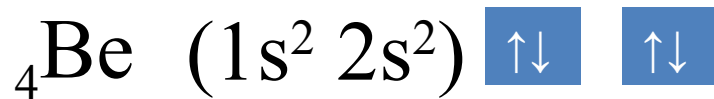
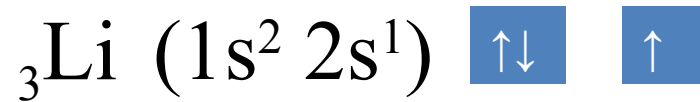
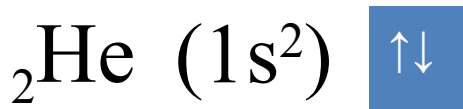
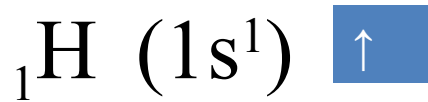
δ. Ghi chú:

* Các phân lớp p và d: Cấu hình bền nhất là cấu hình bão hòa và cấu hình bán bão hòa

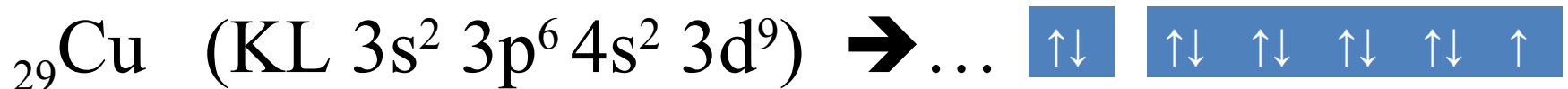
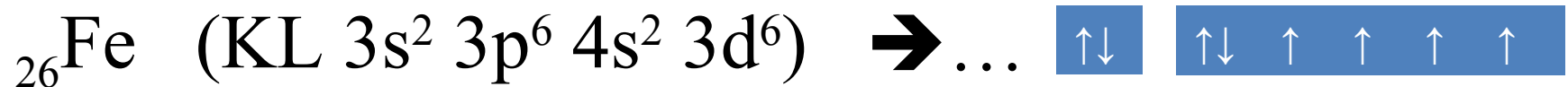
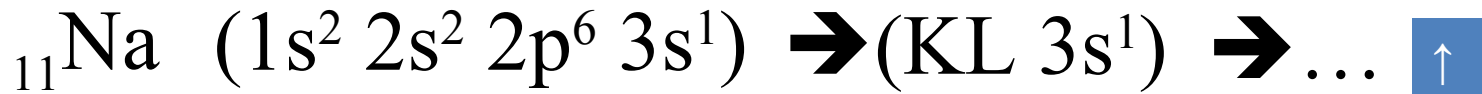
p.1 p Bền là p^6  và p^3 

p.1 d Bền là d^{10}  và d^5 

b. Cấu hình electron:

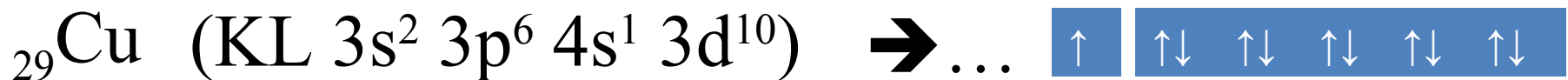


→ Có thể viết cấu hình electron của các nguyên tố nếu biết Z

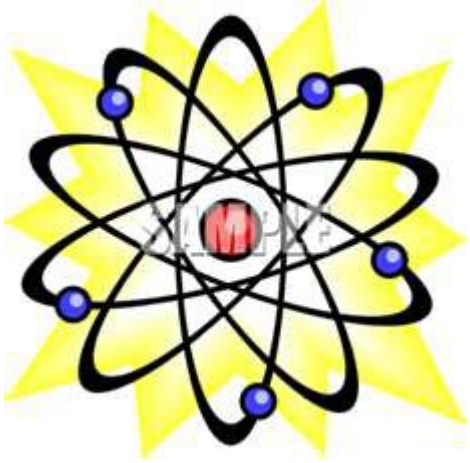


Nhưng: cơ cấu d^9 không bền bằng cơ cấu d^{10}

→ Cu sẽ hiệu chỉnh thành cơ cấu $4s^1 3d^{10}$



c. Hiệu ứng chắn và hiệu ứng xâm nhập:



α . Trong ng.tử nhiều e, khi di chuyển e_j bị các e_i còn lại đẩy một lực đẩy tổng cộng là S_j .
 S_j : hiệu ứng chắn của các e_i tác dụng lên e_j

→ $e(j)$ bị nhân hút yếu hơn tr.hợp ng.tử chỉ có 1 $e(j)$

Một e_i sẽ gây 1 hiệu ứng chắn σ_{ij} lên e_j → $(S_j = \sum \sigma_{ij})$

* e_j càng xa nhân → $S_j \uparrow$; e_j càng gần nhân → $S_j \downarrow$

* e_i càng xa nhân → $\sigma_{ij} \downarrow$; e_i càng gần nhân → $\sigma_{ij} \uparrow$

Trong cùng 1 lớp: $\begin{array}{cccc} s & p & d & f \\ \hline & \sigma_{ij} \downarrow & & \end{array}$

β. Hiệu ứng xâm nhập:

Các e khi di chuyển, do lực hút của nhân tác dụng lên

→ tạo nên hiệu ứng xâm nhập

(e xâm nhập vào gần nhân hơn)

→ e tạo hiệu ứng chắn σ mạnh hơn

Trong cùng 1 lớp $\begin{array}{cccc} s & p & d & f \end{array} \rightarrow$
h.ứ xâm nhập ↓

III. Bảng phân loại tuần hoàn.

1. Vị trí của các nguyên tố trong bảng phân loại tuần hoàn.

Là xác định chu kỳ và phân nhóm của nguyên tố:

Chu kỳ: số lượng tử chính n lớn nhất của ng.tố đó

Phân nhóm:

Phân nhóm chính A

Phân nhóm phụ B

* Nguyên tố thuộc phân nhóm chính A:

Là nguyên tố mà e cuối cùng đang xây dựng phân lớp ns hoặc np và phân lớp (n-1)d; (n-2)f không chứa hoặc đã chứa bão hòa e

ns ^x :	ns ¹	→ p.nh I _A
	ns ²	→ p.nh II _A

ns ² np ^y	ns ² np ¹	→ p.nh III _A
	ns ² np ²	→ p.nh IV _A
	ns ² np ³	→ p.nh V _A
	ns ² np ⁴	→ p.nh VI _A
	ns ² np ⁵	→ p.nh VII _A
	ns ² np ⁶	→ khí trơ

* Nguyên tố thuộc phân nhóm phụ B:

Là ng.tố mà e cuối cùng đang x.d phân lớp $(n-1)d$

$ns^2 (n-1)d^z$

$d^1 \rightarrow$ p.nh III_B

$d^2 \rightarrow$ p.nh IV_B

$d^3 \rightarrow$ p.nh V_B

$d^4 \rightarrow$ p.nh VI_B

$d^5 \rightarrow$ p.nh VII_B

d^6
 d^7 $\left\{ \rightarrow$ p.nh VIII_B

d^8

$d^9 \rightarrow \dots ns^1 (n-1)d^{10} \rightarrow$ p.nh I_B

$d^{10} \rightarrow$ p.nh II_B

43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54	55
56	57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68

2. Tính chất của các nguyên tố:

a. Tính kim loại và phi kim:

α . Kim loại: là ng.tố mà $\sum e$ lớp ngoài cùng ≤ 3

→ K.l gồm: phân nhóm I_A ; II_A ; III_A và các p.nh B

β . Phi kim: là ng.tố mà $\sum e$ lớp ngoài cùng ≥ 4

→ phi kim gồm: phân nhóm IV_A ; V_A ; VI_A ; VII_A

* Các ng.tố thuộc chu kỳ lớn của p.nh IV_A ; V_A là k.l

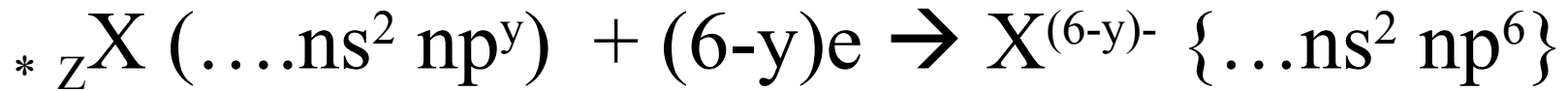
b. Số oxyd hóa (+) cao nhất và số oxyd hóa (-) thấp nhất

* Số oxyd hóa (+) cao nhất của 1 ng.tố = $\sum e$ hóa

trị của ng.tố đó

e hóa trị là e có thể tham gia tạo liên kết

→ Các ng.tổ phân nhóm chính A có soh(+) cao nhất = cột phân nhóm của ng.tổ đó.



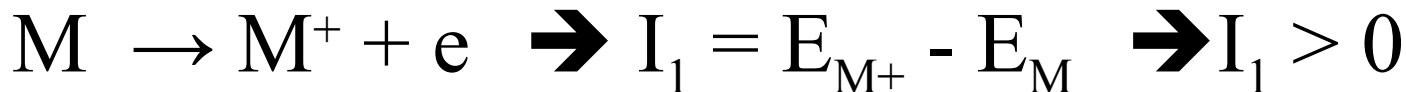
➔ Số oxyd hóa (-) thấp nhất = $\sum e$ hóa trị - 8

→ Kim loại chỉ có số oxyd hóa (+)

→ phi kim có : số oxyd hóa (+) và (-)

b. Năng lượng ion hóa thứ nhất (I_1) của ng.tổ

I_1 của 1 ng.tổ là năng lượng cần thiết mà ng.tổ nhận vào để tách 1e ra khỏi ng.tổ → ion M^+ .



$I_1 \uparrow \rightarrow$ ng.tổ càng khó ion hóa, tính khử và tính Kl $\downarrow$

c. Ái lực electron:

Ái lực electron là năng lượng trao đổi khi 1 ng.tổ nhận thêm 1e $\rightarrow$ ion X^-

$X + e \rightarrow X^- \rightarrow A_1 = E_{X^-} - E_X$ (A_1 có thể <0 hoặc >0)

A_1 càng $<0 \rightarrow$ càng dễ nhận e $\rightarrow$ tính oh, đad, pk $\uparrow$

d. Bán kính ng.tử

* Trong cùng 1 phân nhóm, khi đi từ trên xuống số lượng tử chính $n \uparrow \rightarrow$ bán kính ng.tử $\uparrow$

* Trong cùng 1 chu kỳ: các ng.tổ thuộc phân nhóm chính A, khi đi từ trái sang phải $Z \uparrow \rightarrow r_{ng.tổ} \downarrow$

$r_{ng.tử}$, tính khu, kl $\uparrow$

$I_1 \downarrow$

$r_{ng.tử} \downarrow$, tính oh, pk, đad $\uparrow$