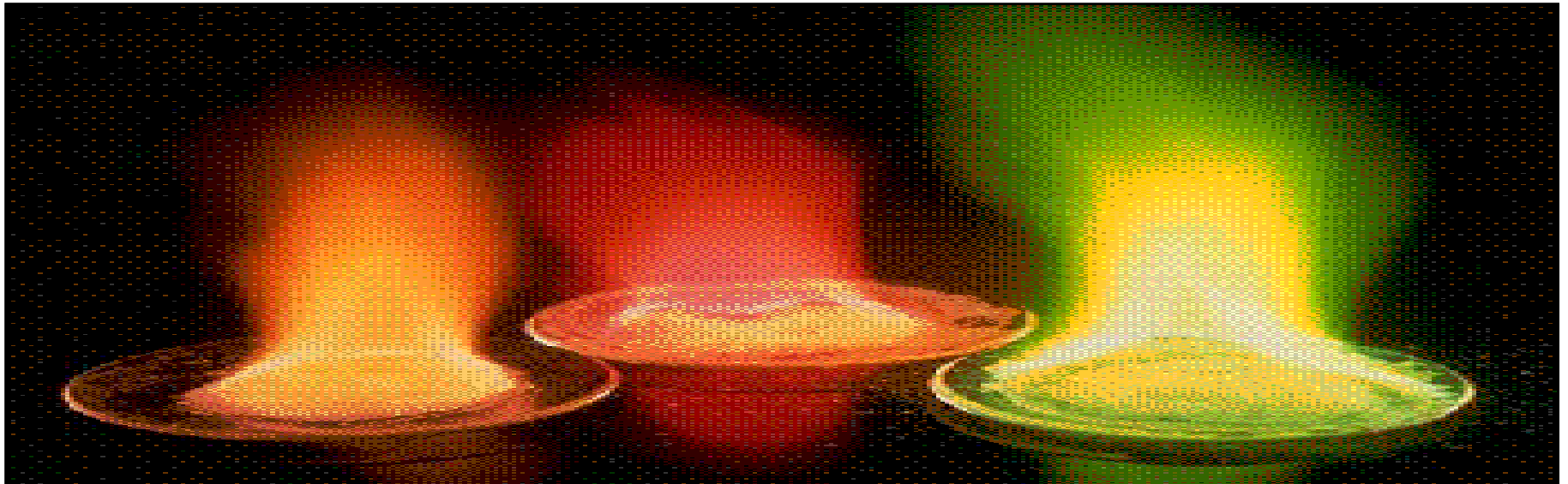
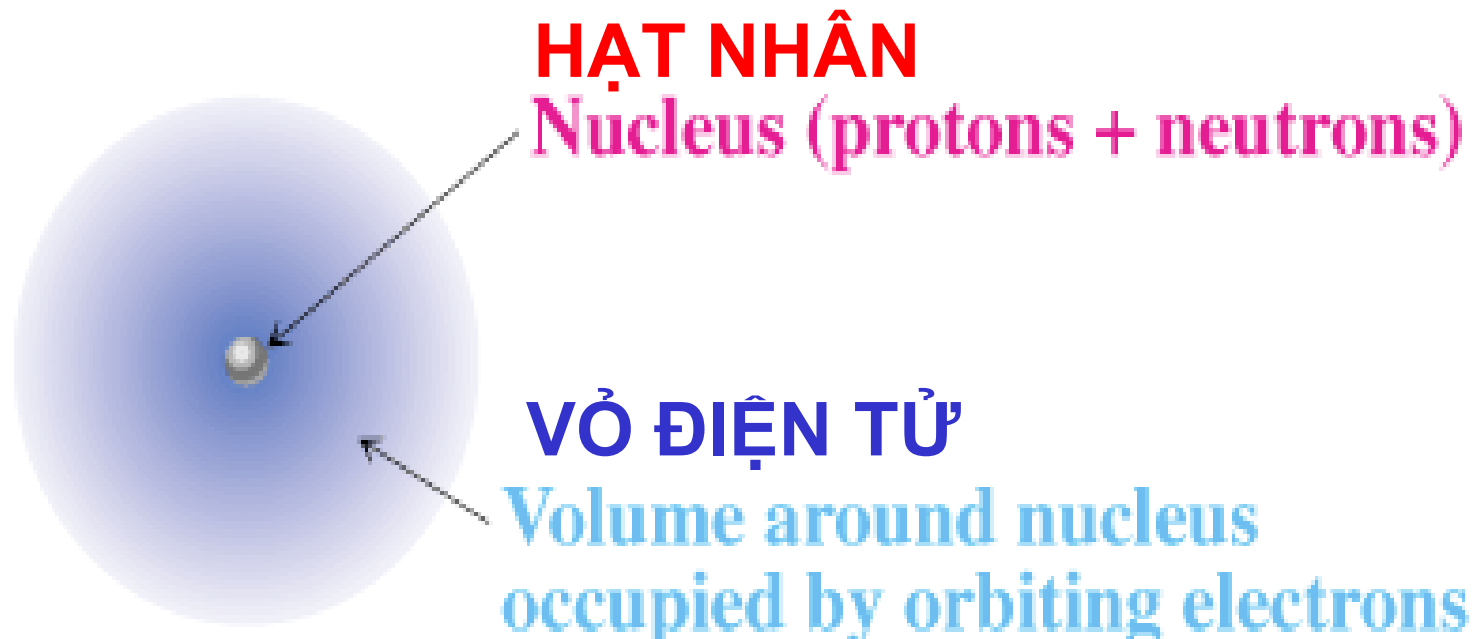


CHƯƠNG 1

CẤU TẠO NGUYÊN TỬ **Atomic Structure**

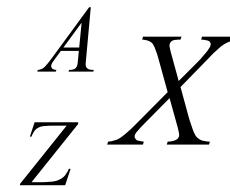


CẤU TẠO NGUYÊN TỬ



A – số khối = số proton + số neutron

Z – điện tích hạt nhân = số proton



CẤU TRÚC LỚP VỎ ELECTRON THEO CƠ HỌC LƯỢNG TỬ

- ❑ Ba luận điểm cơ bản của cơ học lượng tử.
- ❑ Trạng thái của electron trong nguyên tử Hydro.
- ❑ Trạng thái của electron trong nguyên tử ph tạp.
- ❑ Cấu hình electron của nguyên tử.

BA LUẬN ĐIỂM CƠ BẢN

Luận điểm 1

Tính lưỡng nguyên (hạt và sóng) của các hạt vi mô

- *Hệ thức L. de Broglie (1924):*

h - hằng số Plank = $6,625 \cdot 10^{-27}$ [erg.s]

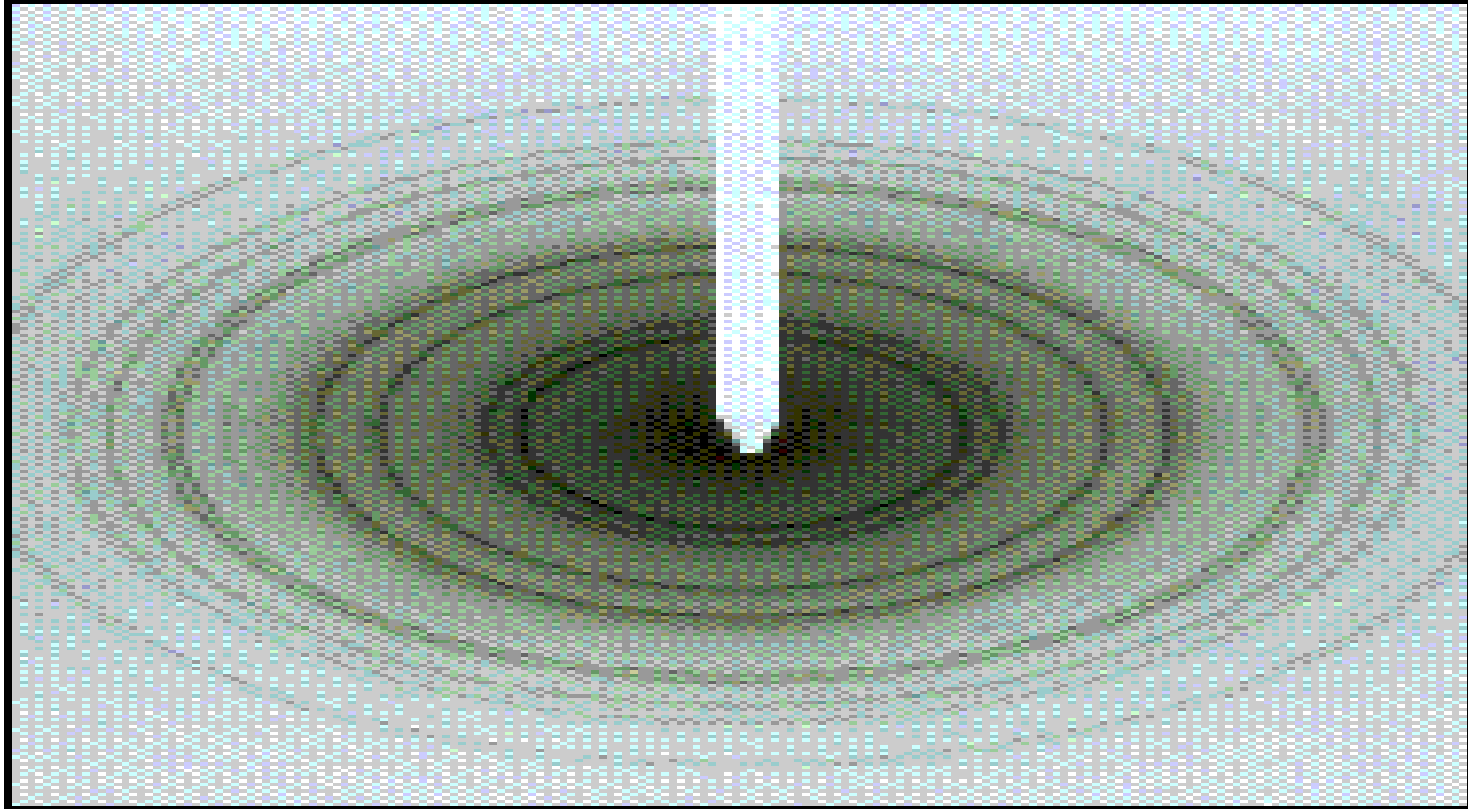
m – khối lượng của hạt vi mô

v – tốc độ của hạt vi mô

λ - bước sóng

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

Nhiễu xạ electron của Davisson và Germer



Luận điểm 2

NGUYÊN LÝ BẤT ĐỊNH HEISENBERG



Không thể xác định đồng thời chính xác cả vị trí và tốc độ của hạt vi mô.

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

Luận điểm 3

Phương trình sóng Schrödinger

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

→ mô tả chuyển động của hạt vi mô trong trường thế năng ở trạng thái dừng (trạng thái của hệ không thay đổi theo thời gian).



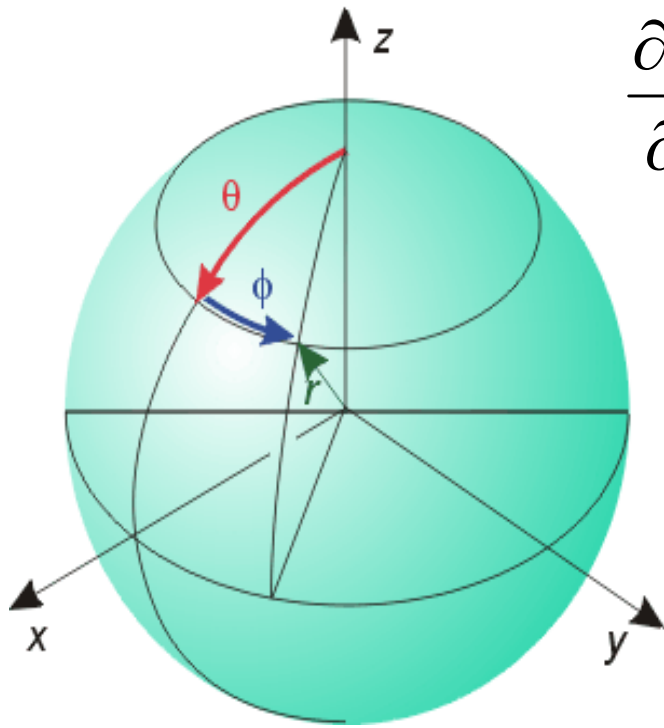
- $E(x,y,z)$ năng lượng toàn phần của hạt vi mô
 $E = \text{thế năng (V)} + \text{động năng}$
- $V(x,y,z)$ thế năng của hạt vi mô tại (x,y,z) .
- $\Psi(x,y,z)$ hàm sóng mô tả trạng thái của hạt vi mô
 \rightarrow mô tả chuyển động trong không gian
- $\Psi^2(x,y,z)$ – mật độ xác suất có mặt của hạt vi mô tại điểm có tọa độ (x, y, z) , có dấu dương.
- $\Psi^2(x,y,z).dV$ – xác suất có mặt của hạt vi mô trong phần tử thể tích dV với tâm điểm có tọa độ x,y,z và $dV = dx.dy.dz$

ĐIỀU KIỆN CHUẨN HÓA CỦA HÀM SÓNG

$$\int_{\text{all space}} \psi^2(x, y, z) \cdot dV = 1$$

- Ψ đơn trị, liên tục và hữu hạn
- Ψ và E là nghiệm của phương trình
- Phương trình sóng Schrödinger chỉ giải được chính xác cho trường hợp nguyên tử Hydro và ion có một electron. Đối với các nguyên tử nhiều điện tử phải giải gần đúng.

TRẠNG THÁI ELECTRON TRONG NGUYÊN TỬ H



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

Ψ - hàm orbital nguyên tử

$$\Psi(r, \theta, \phi) = R(r) \cdot \Phi(\phi) \cdot \Theta(\theta) = R(r) \cdot Y(\theta, \phi)$$

$R(r)$ – hàm bán kính

$Y(\theta, \phi)$ – hàm góc

$$0 \leq \phi \leq 2\pi ; \quad 0 \leq \theta \leq \pi$$

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

$$V = -e^2 / 4\pi\epsilon_0 r$$

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

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

$$z = r \cdot \cos\theta$$

KẾT QUẢ

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

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

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

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

Orbital nguyên tử được xác định bởi tập hợp ba số lượng tử.

Khái niệm đám mây electron.

Đám mây electron là vùng không gian quanh hạt nhân trong đó xác suất có mặt của electron lớn hơn 90% .(ORBITAL NGUYÊN TỬ)

Ý nghĩa số lượng tử chính n

$$n = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7 \dots, \infty$$

- *Xác định trạng thái năng lượng của electron*
- *Xác định kích thước trung bình của đám mây electron*

$$E = -13.6 \frac{Z^2}{n^2} eV$$

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

Các electron có cùng giá trị n sẽ thuộc một lớp lượng tử (lớp electron)

n	1	2	3	4	5	6	7
Lớp e	K	L	M	N	O	P	Q

Ý nghĩa số lượng tử orbital l

$\ell = 0, 1, \dots, (n - 1) \rightarrow$ mỗi giá trị của n có n giá trị ℓ

➤ Các electron có cùng giá trị n và l tạo thành một phân lớp electron (phân lớp lượng tử)

ℓ **0** **1** **2** **3** **4** **5**

PHÂN LỚP ELECTRON

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

➤ *Xác định tên và hình dạng của AO*

$\ell = 0 \rightarrow$ orbital s , $Y(\theta, \varphi) = 1/2\sqrt{\pi} \rightarrow$ hình quả cầu.

$\ell = 1 \rightarrow$ orbital p , dạng hai quả cầu tiếp xúc nhau.

$\ell = 2 \rightarrow$ orbital d , dạng bốn quả cầu.

$\ell = 3 \rightarrow$ orbital f.

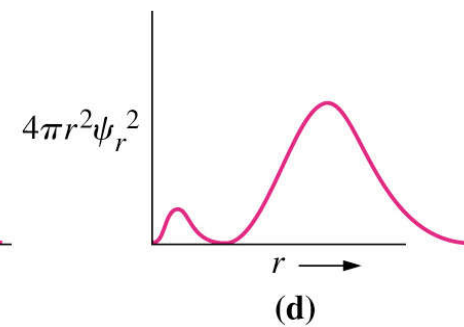
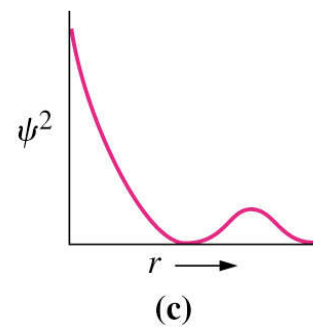
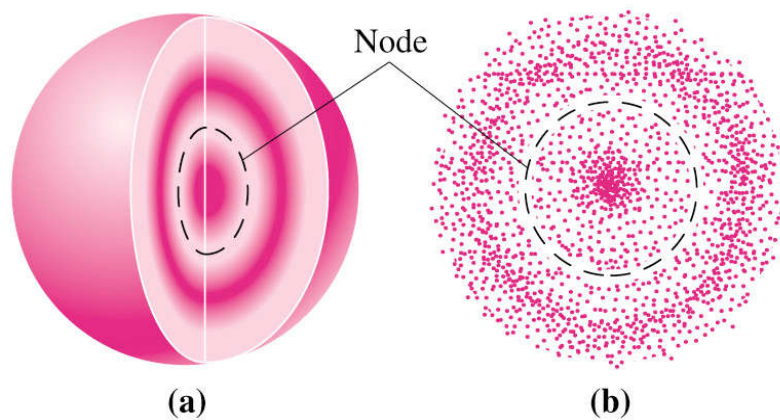
Ý nghĩa số lượng tử từ m_ℓ

$$m_\ell = -\ell, \dots, 0, \dots, +\ell$$

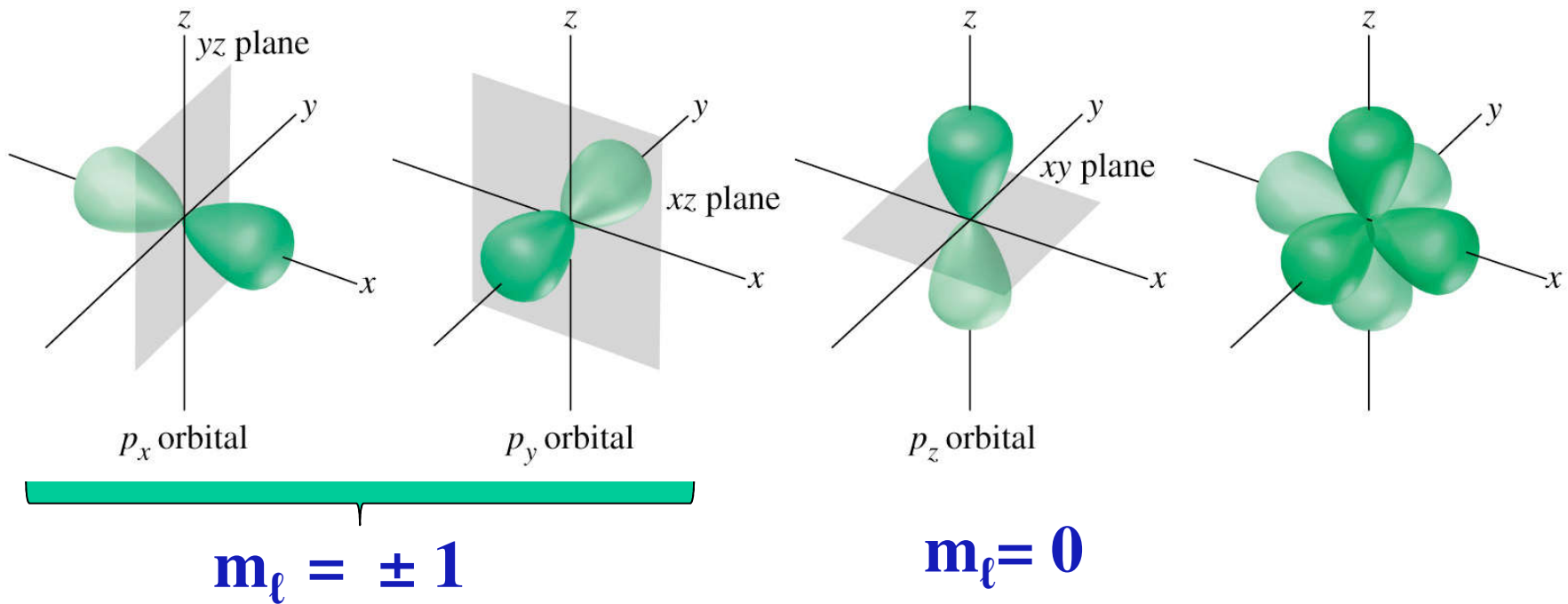
Cứ mỗi giá trị của ℓ có $(2\ell + 1)$ giá trị của m_ℓ .

➤ Xác định sự định hướng khác nhau của AO trong không gian dưới tác dụng của từ trường ngoài.

$\ell = 0 \rightarrow m_\ell = 0 \rightarrow 1 \text{ Orbital S}$

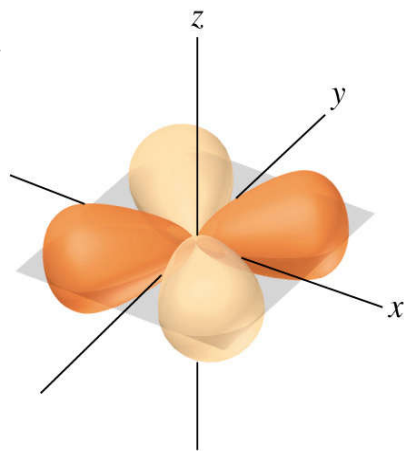


$\ell = 1 \rightarrow m_\ell = 0, \pm 1 \rightarrow 3 \text{ orbital p}$

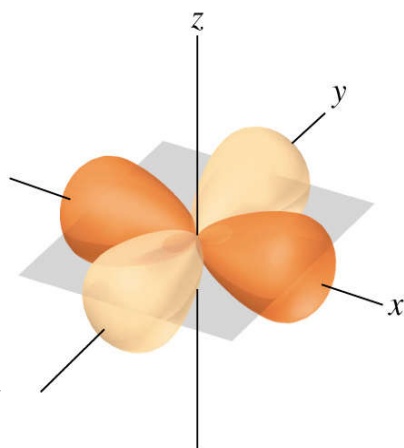


$\ell = 2 \rightarrow m_\ell = \pm 1, \pm 2, 0 \rightarrow 5 \text{ orbital d}$

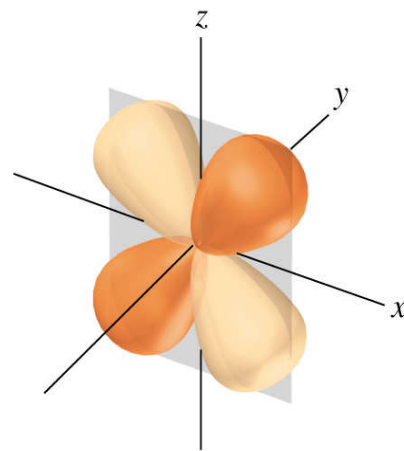
$m_\ell = \pm 2$



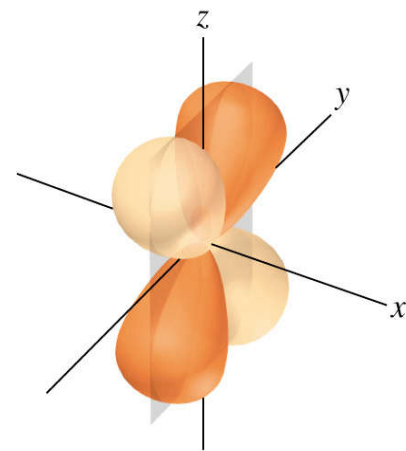
d_{xy} orbital



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

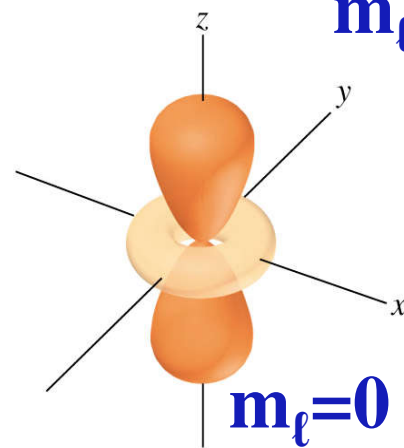


d_{xz} orbital



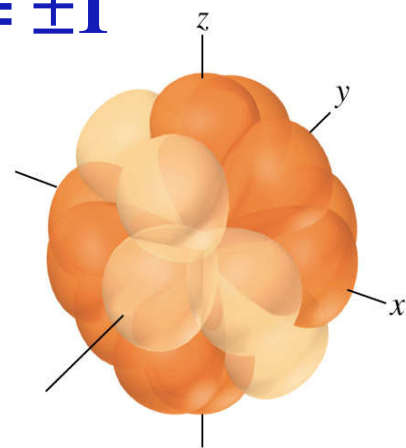
d_{yz} orbital

$m_\ell = \pm 1$

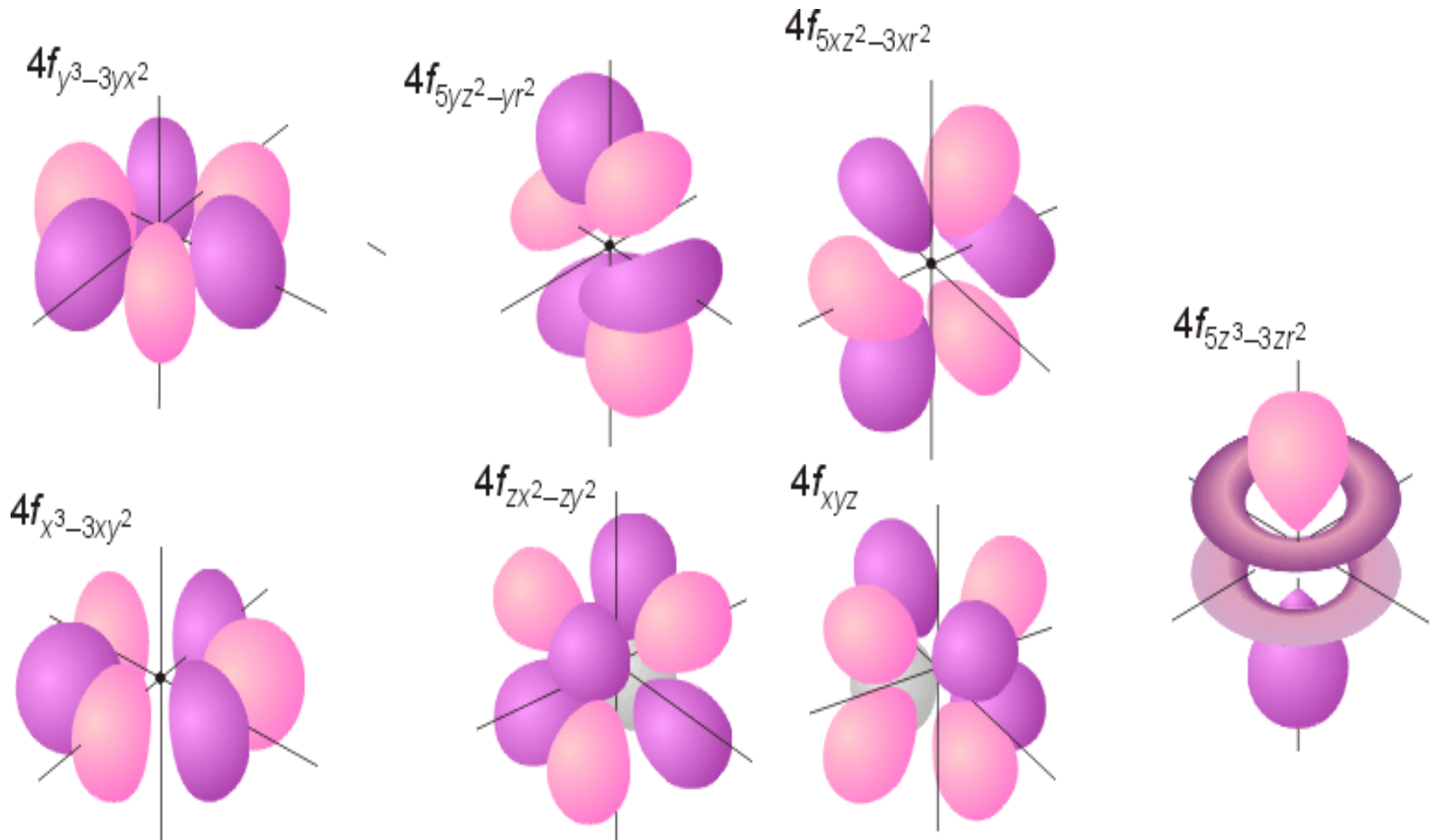


d_{z^2} orbital

$m_\ell = 0$



$\ell = 3 \rightarrow m_\ell = \pm 1, \pm 2, \pm 3, 0 \rightarrow 7 \text{ orbital f}$



Ý nghĩa số lượng tử từ spin m_s

- ✓ Xác định trạng thái chuyển động riêng của electron, tức là sự tự quay quanh trục của electron.
- ✓ Giá trị $m_s = \pm \frac{1}{2}$ ứng với hai chiều quay thuận và nghịch với chiều quay của kim đồng hồ.

n

ℓ

m_ℓ

m_s

Lớp electron

Phân lớp e

AO

Trạng thái đầy đủ của electron (chuyển động AO và spin)

NHẬN XÉT

- Bộ ba số lượng tử (n, ℓ, m_ℓ) xác định hàm orbital nguyên tử AO

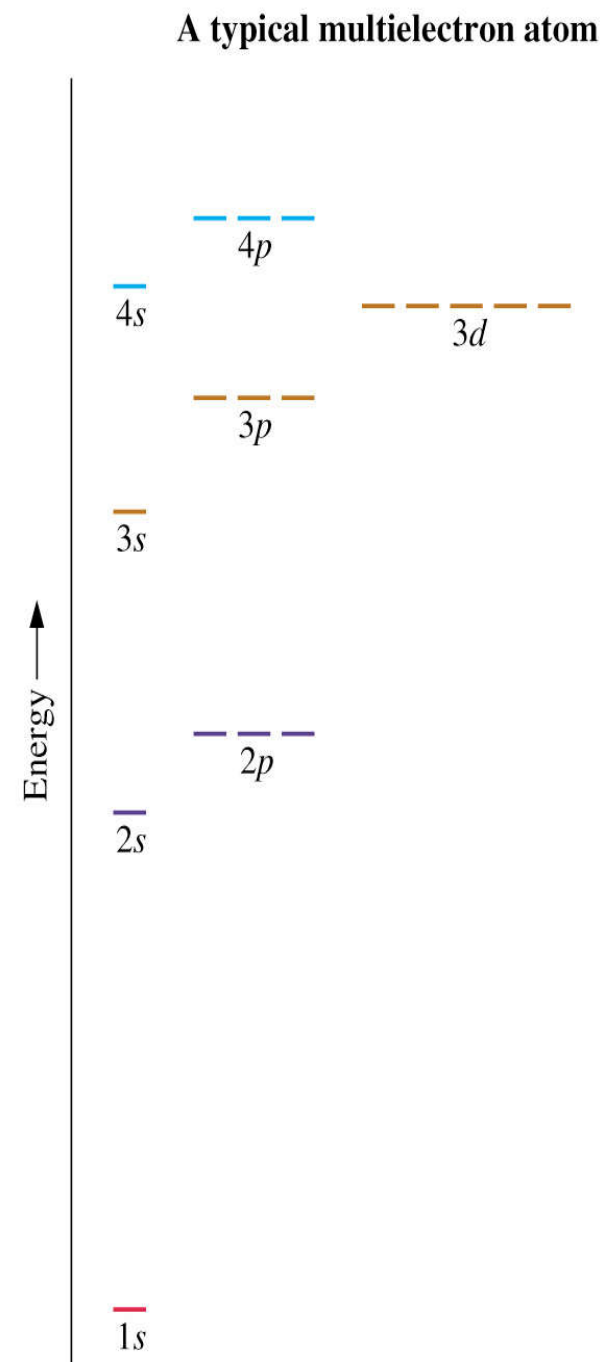
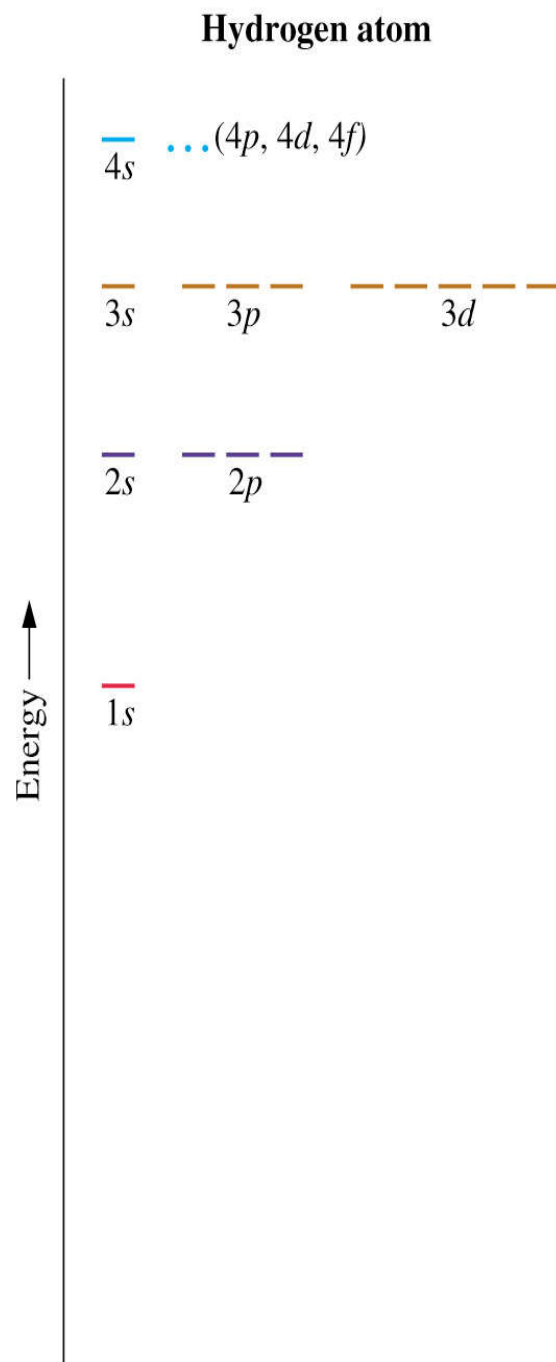
Ψ_{n, ℓ, m_ℓ} = hàm orbital

- Tập hợp bộ bốn số lượng tử (n, ℓ, m_ℓ, m_s) mới xác định đầy đủ trạng thái của electron trong nguyên tử (chuyển động spin và chuyển động orbital)

$\Psi_{n, \ell, m_\ell, m_s}$ = hàm sóng toàn phần
= hàm orbital-spin

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

- Trạng thái của electron cũng được xác định bằng 4 số lượng tử n , ℓ , m_ℓ , m_s .
- Hình dạng AO cũng tương tự như hình dạng của nguyên tử Hydro.
- Xuất hiện hiệu ứng chắn và hiệu ứng xâm nhập.
- Trạng thái năng lượng của electron phụ thuộc vào cả n và ℓ .



HIỆU ỨNG CHẮN

- *Các electron có số lượng tử n và ℓ càng nhỏ có tác dụng chắn càng mạnh và bị chắn càng yếu.*
- *Trong cùng một lớp, theo chiều: $ns, np, nd, nf..$ tác dụng chắn yếu dần nhưng bị chắn tăng lên.*
- *Hai electron thuộc cùng một ô lượng tử chắn nhau rất yếu nhưng lại đẩy nhau mạnh.*

HIỆU ỨNG XÂM NHẬP

- *Hiệu ứng xâm nhập làm tăng độ bền liên kết giữa electron với hạt nhân nên làm giảm năng lượng của electron.*
- **Hiệu ứng xâm nhập càng mạnh khi các số lượng tử n và ℓ của electron càng nhỏ.**

CÁC QUY LUẬT PHÂN BỐ ELECTRON VÀO NGUYÊN TỬ NHIỀU ELECTRON

- ❑ Nguyên lý vững bền

Quy tắc Klechcowski

- ❑ Nguyên lý ngoại trừ Pauli

- ❑ Quy tắc Hund

Nguyên lý vững bền

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 Klechcowski

- ✓ *Điền e vào các phân lớp có $(n + \ell)$ tăng dần.*
- ✓ *Khi $(n + \ell)$ bằng nhau thì điền e vào phân mức có n tăng dần.*

1s	2s	2p	3s	3p	4s	3d	4p	5s	4d	5p	6s	4f	5d	6p	7s	5f	6d
1	2	3	3	4	4	5	5	5	6	6	6	7	7	7	7	8	8

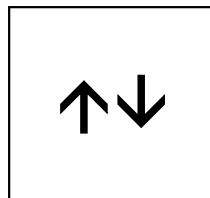
Quy tắc Klechcowski

Quy tắc Klechcowski 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.

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.



$$m_s = +1/2 \quad \uparrow$$

$$m_s = -1/2 \quad \downarrow$$

Trong một phân lớp (n, ℓ) ta có:

➤ $(2\ell + 1)$ số orbital

➤ Số điện tử tối đa $= 2(2\ell + 1)$.

- **phân lớp s** - có tối đa 2 điện tử
- **phân lớp p** - có tối đa 6 điện tử
- **phân lớp d** - có tối đa 10 điện tử
- **phân lớp f** - có tối đa 14 điện tử

• **Trong một lớp lượng tử n , ta có:**

- **n phân lớp $(0, 1, 2, \dots, (n-1))$**
- **số orbital trong một lớp là n^2**
- **số electron tối đa trong một lớp là $2n^2$.**

Lớp :	K, L, M, N, O, P, Q
Số electron:	$2, 8, 18, 32, 50, 72, 98$
tối đa	

QUY TẮC HUND

Trong một phân lớp với cùng nhiều AO có 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 (tổng số electron độc thân là tối đa)