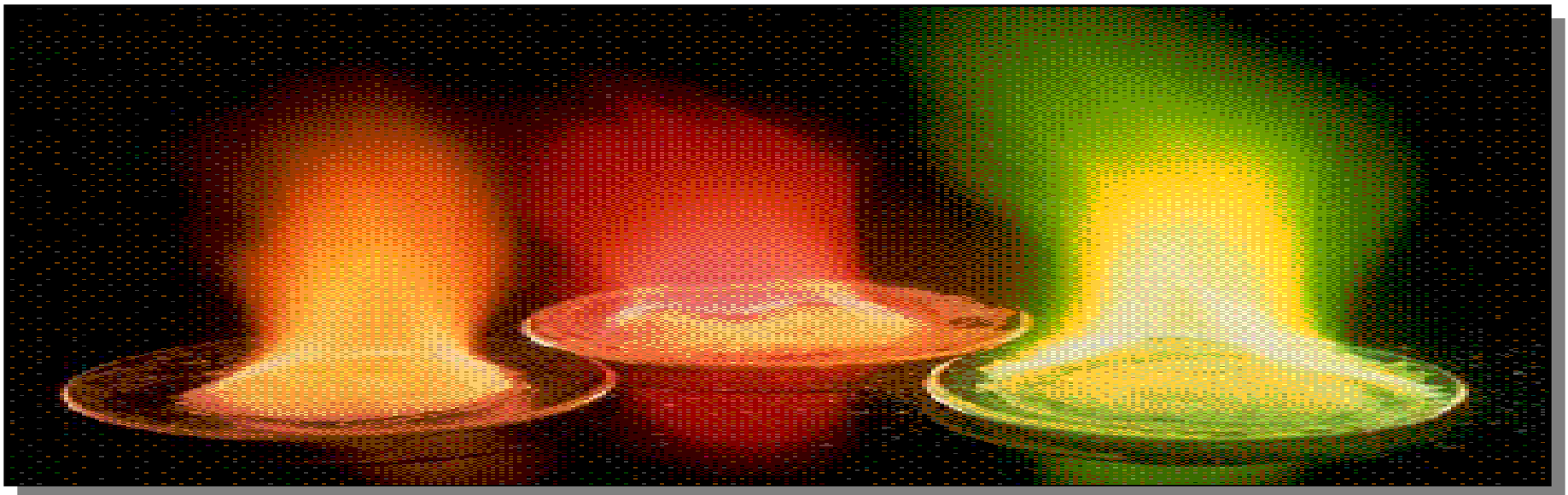


# *CHƯƠNG 1*

# **CẤU TẠO NGUYÊN TỬ** Atomic Structure



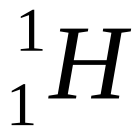
# CẤU TẠO NGUYÊN TỬ



# KHỐI LƯỢNG VÀ ĐIỆN TÍCH CÁC HẠT

Tên	Kí hiệu	Khối lượng		Điện tích	
		(kg)	ñvklnt	(C)	Tổng ñoái ñ/v e
Điện tử	e	$9,11 \cdot 10^{-31}$	$5,49 \cdot 10^{-4}$	$-1,60 \cdot 10^{-19}$	-1
Proton	p	$1,67 \cdot 10^{-27}$	1,01	$+1,60 \cdot 10^{-19}$	+1
Neutron	n	$1,67 \cdot 10^{-27}$	1,01	0	0

Hydro nhẹ không có nơ tron



# ***NHÀÀN XEÙT***

- ***Số electron bằng số proton.***
- ***Khối lượng nguyên tử tập trung ở hạt nhân .***
- ***$R(\text{nguyên tử}) \approx 10^5 R(\text{nhân}).$***

# Z và A là hai đặc trưng cơ bản của nguyên tử

**Z** - Điện tích hạt nhân = số proton

**Bậc nguyên tử Z**

• **A** – số khối lượng nguyên tử

**A = số proton + số neutron**

# ỨNG DỤNG

Hoàn thành số liệu trong bảng dưới đây

Nguyên tử	A	Z	N	N/Z
Ca	40	20	20	1
I	127	53	74	1,40
Tl	204	81	123	1,52

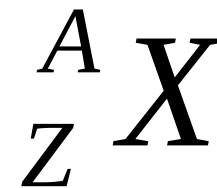
# **NGUYÊN TỐ HOÀ HỮU**

- **Được tạo thành từ các nguyên tử có cùng  $Z$ .**
- **Ký hiệu**

**$X$  – nguyên tố hóa học**

**$A$  - số khối**

**$Z$  – điện tích hạt nhân**



# ĐỒNG VỊ

Có cùng số proton (cùng 1 ng tố hóa học)

*Khác số khối hay số nơ tron .*

**Ví dụ** - Các đồng vị của Hydro ( $Z = 1$ )

Hydro hay Hydro nhẹ ( 99,98%)  ${}^1_1\text{H}$

Đơteri ( 0,016 % )  ${}^2_1\text{H}$

Triti ( 0,001%)  ${}^3_1\text{H}$



## ỨNG DỤNG

Tính nguyên tử khối trung bình của Argon

Ar (0,34%) ; Ar (0,06%) ; Ar (99,6%)

$$M = \frac{36.0,34 + 38.0,06 + 40.99,6}{100} = 39,87$$

# *Mol (hệ SI)*

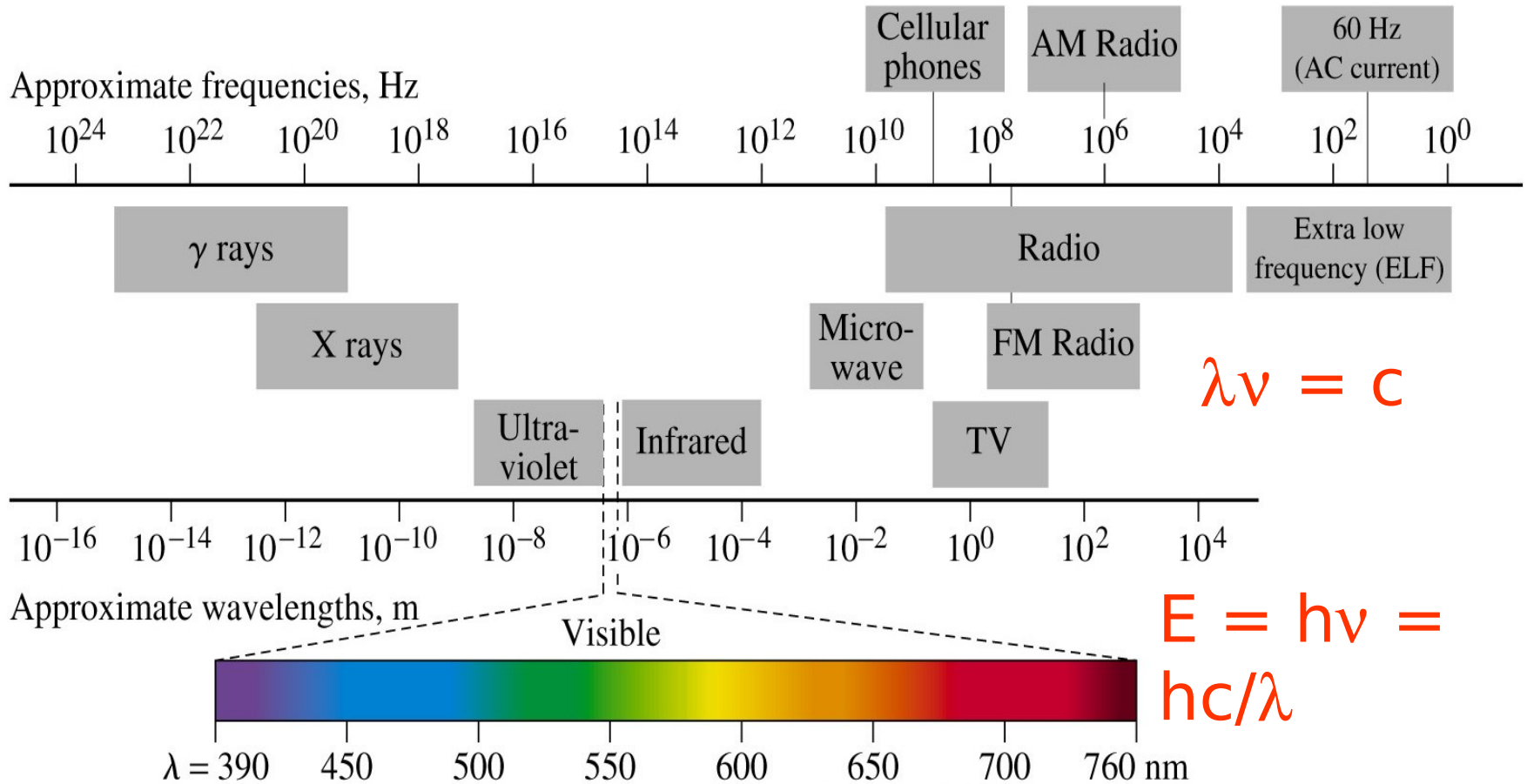
***1 mol chất chứa  $6,022.10^{23}$  tiểu phân cấu trúc của chất (nguyên tử, phân tử, ion, electron....).***

## ***Ví dụ***

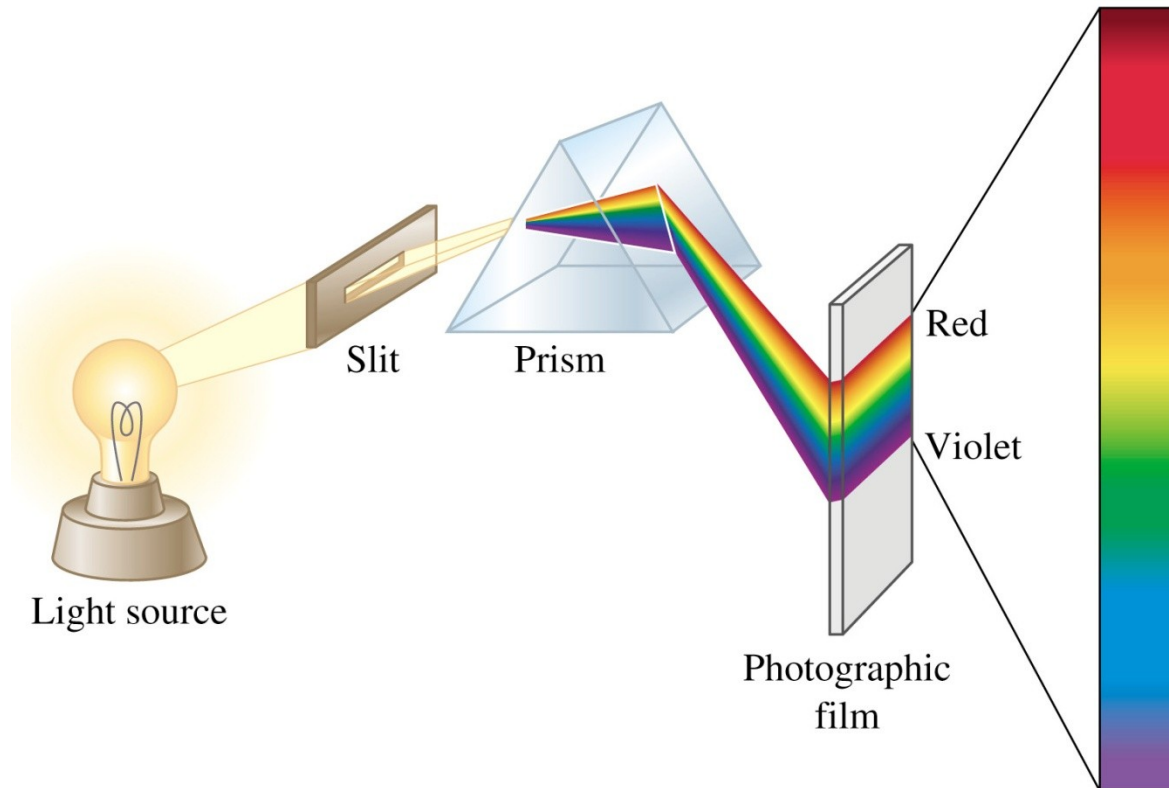
***2 mol ion  $H^+$  chứa:  $2 . 6,022.10^{23}$  ion  $H^+$***

***4 mol electron chứa:  $4. 6,022.10^{23}$  electron .***

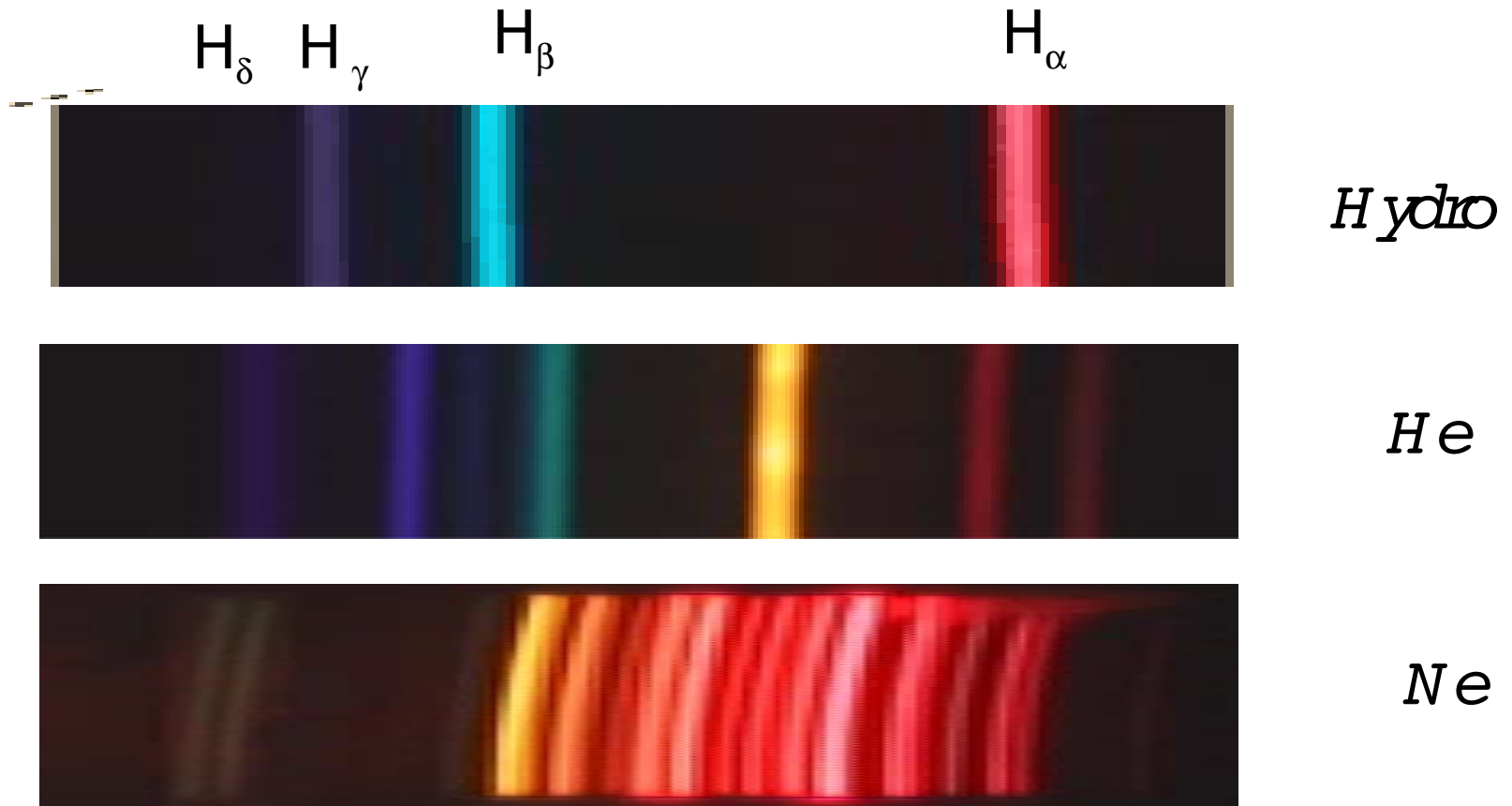
# PHỔ BỨC XẠ ĐIỆN TỪ



# QUANG PHỔ LIÊN TỤC



# QUANG PHỔ NGUYÊN TỬ - QUANG PHỔ VẠCH



# THUYẾT CẤU TẠO NGUYÊN TỬ

- ❑ **Thuyết cấu tạo nguyên tử của Thomson.(1898)**
- ❑ **Mẫu hành tinh Rutherford. (1911)**
- ❑ **Mẫu nguyên tử theo Bohr. (1913)**

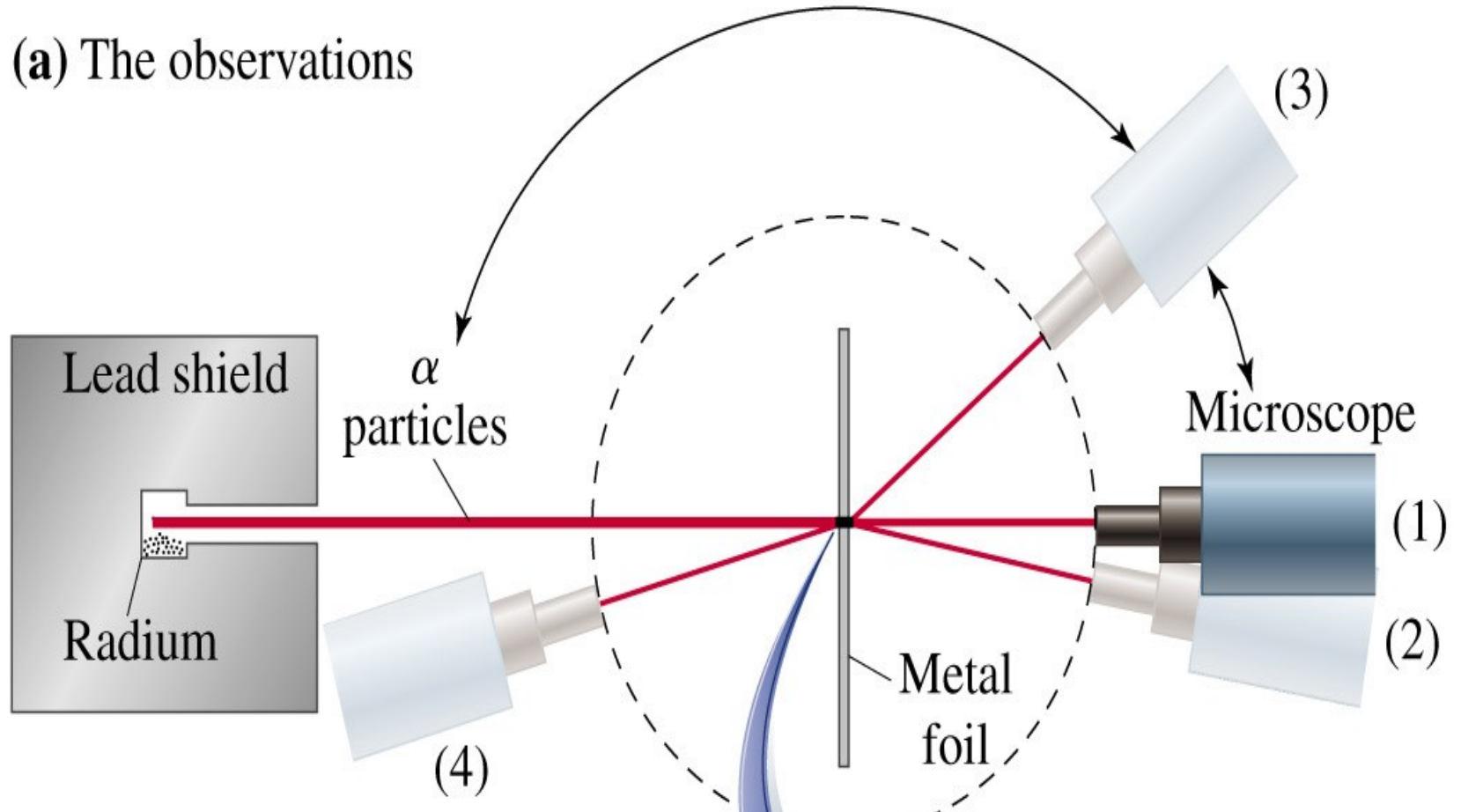
# J. J. Thomson – Atomic Model

## MÔ HÌNH NGUYÊN TỬ

*Nguyên tử là một quả cầu bao gồm các phần tử tích điện dương và các điện tử phân tán đồng đều trong toàn khối cầu.*

# Rutherford's Model (1911)

(a) The observations





# NHẬN XÉT

## ➤ ƯU ĐIỂM

*Chứng minh được sự tồn tại của hạt nhân nguyên tử chiếm phần lớn khối lượng nguyên tử*

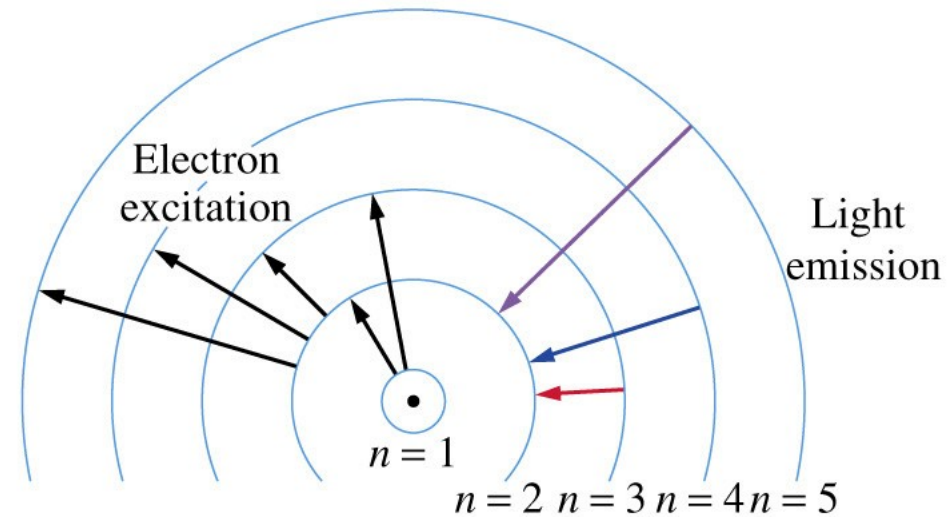
## ➤ NHƯỢC ĐIỂM

- Không giải thích được tính bền của nguyên tử*
- Không giải thích được quang phổ của nguyên tử là quang phổ vạch*

The Bohr Model  
**MẪU NGUYÊN TỬ THEO BOHR**  
**(1913)**



# BA TIÊN ĐỀ CỦA BOHR



❖  $mvr = nh/2\pi$

❖ *Khi quay trên quỹ đạo bên electron không bức xạ (không mất năng lượng).*

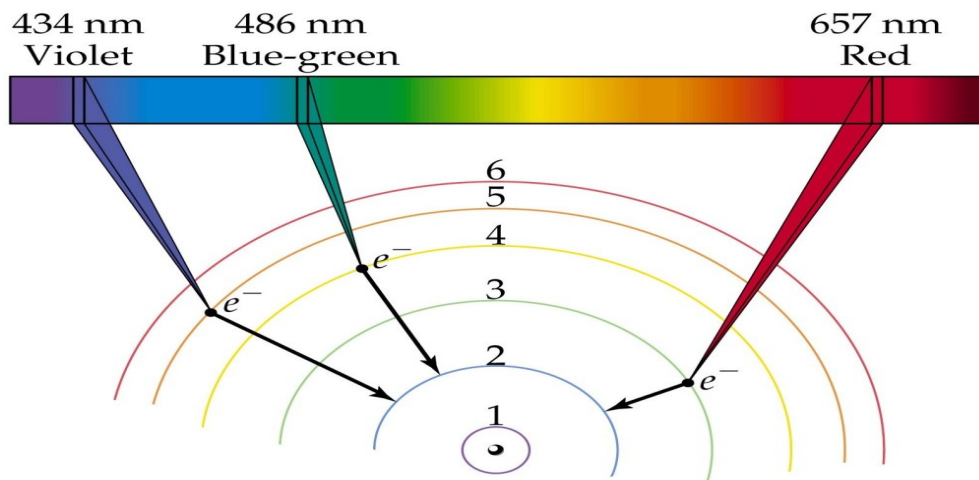
❖ *Năng lượng chỉ được phát ra hay hấp thụ khi electron chuyển từ quỹ đạo bên này sang quỹ đạo bên khác.*

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

# ƯU ĐIỂM CỦA THUYẾT BORH

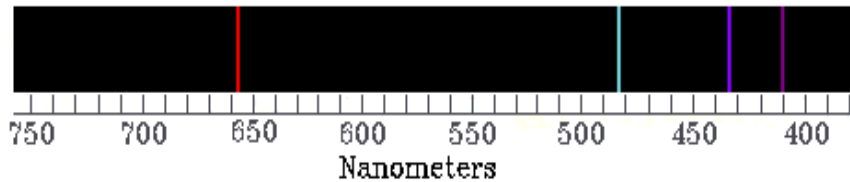
- ✓ Áp dụng đúng cho hệ nguyên tử có 1 electron
- ✓ Tính bán kính quỹ đạo, năng lượng, tốc độ của electron trên quỹ đạo bền.
- ✓ Xác minh tính lượng tử hóa năng lượng của electron  $E_n = -13,6Z^2 / n^2$  [eV]

$$E = h\nu = h \frac{c}{\lambda} = -\frac{2\pi^2 m e^4}{h^2} Z^2 \left( \frac{1}{n_t^2} - \frac{1}{n_c^2} \right)$$

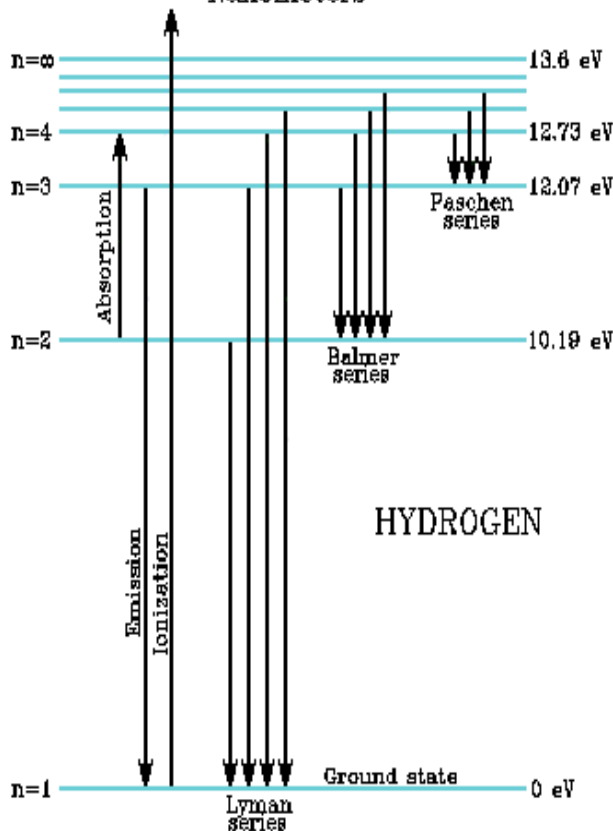


- ✓ Giải thích được quang phổ vạch của nguyên tử.

# Các mức năng lượng và quang phổ vạch của nguyên tử Hydro



$$E = h\nu = (-13.6 \text{ eV}) \left( \frac{1}{n_t^2} - \frac{1}{n_c^2} \right)$$



$$\text{Lyman } E = h\nu = (-13.6 \text{ eV}) \left( \frac{1}{1^2} - \frac{1}{n_c^2} \right)$$

$$\text{Balmer } E = h\nu = (-13.6 \text{ eV}) \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n_c^2} \right)$$

$$\text{Paschen } E = h\nu = (-13.6 \text{ eV}) \left( \frac{1}{3^2} - \frac{1}{n_c^2} \right)$$

# Quang phổ phát xạ của nguyên tử Hydro

- $n_t = 1$  dãy **Lyman** – miền tử ngoại.
- $n_t = 2$  dãy **Balmer** - miền khả kiến  
**dãy phổ quan trọng của Hydro.**
- $n_t = 3$  dãy **Paschen** – miền hồng ngoại.
- $n_t = 4$  dãy **Brackett** - miền hồng ngoại xa.
- $n_t = 5$  dãy **Pfund** - miền hồng ngoại xa.

# GIẢI THÍCH THÀNH CÔNG PHƯƠNG TRÌNH Rydberg

$$E = h\nu = h \frac{c}{\lambda} = -\frac{2\pi^2 m e^4}{h^2} Z^2 \left( \frac{1}{n_t^2} - \frac{1}{n_c^2} \right)$$

$$1/\lambda = 1,097 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1} (1/2^2 - 1/n_c^2); n_c = 3, 4, 5, 6$$

Ký Hiệu	H $\alpha$	H $\beta$	H $\gamma$	H $\delta$
$n_t$	2	2	2	2
$n_c$	3	4	5	6
$\lambda$ (Å)	6563,1	4861,3	4340,5	4101,7
màu	<b>Đỏ</b>	xanh lam	chàm	tím



# ỨNG DỤNG

## Tính năng lượng [ev] ở bốn mức năng lượng đầu tiên của nguyên tử H

1/ Có bao nhiêu vạch phổ xuất hiện trong quang phổ phát xạ của H do sự di chuyển điện tử giữa bốn mức này? **6**

2/ Ứng với bước chuyển nào của điện tử sẽ cho vạch phổ có tần số cao nhất? **4 → 1**

3/ Ứng với bước chuyển nào của điện tử sẽ cho vạch phổ có tần số thấp nhất? **4 → 3**

# NHƯỢC ĐIỂM CỦA THUYẾT BORH

- Không giải thích được độ bội của quang phổ.
- *Tính toán lại sử dụng đl cơ học cổ điển.*
- *Xem electron chuyển động trên mặt phẳng.*
- *Không xác định được vị trí của electron khi di chuyển từ quỹ đạo này sang quỹ đạo khác.*
- *Không giải thích được sự lượng tử hóa năng lượng.*
- *Áp dụng cho ng tử phức tạp chỉ cho kết quả định tính.*

# 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 phức 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 =  $6,625 \cdot 10^{-34}$  [erg.s]

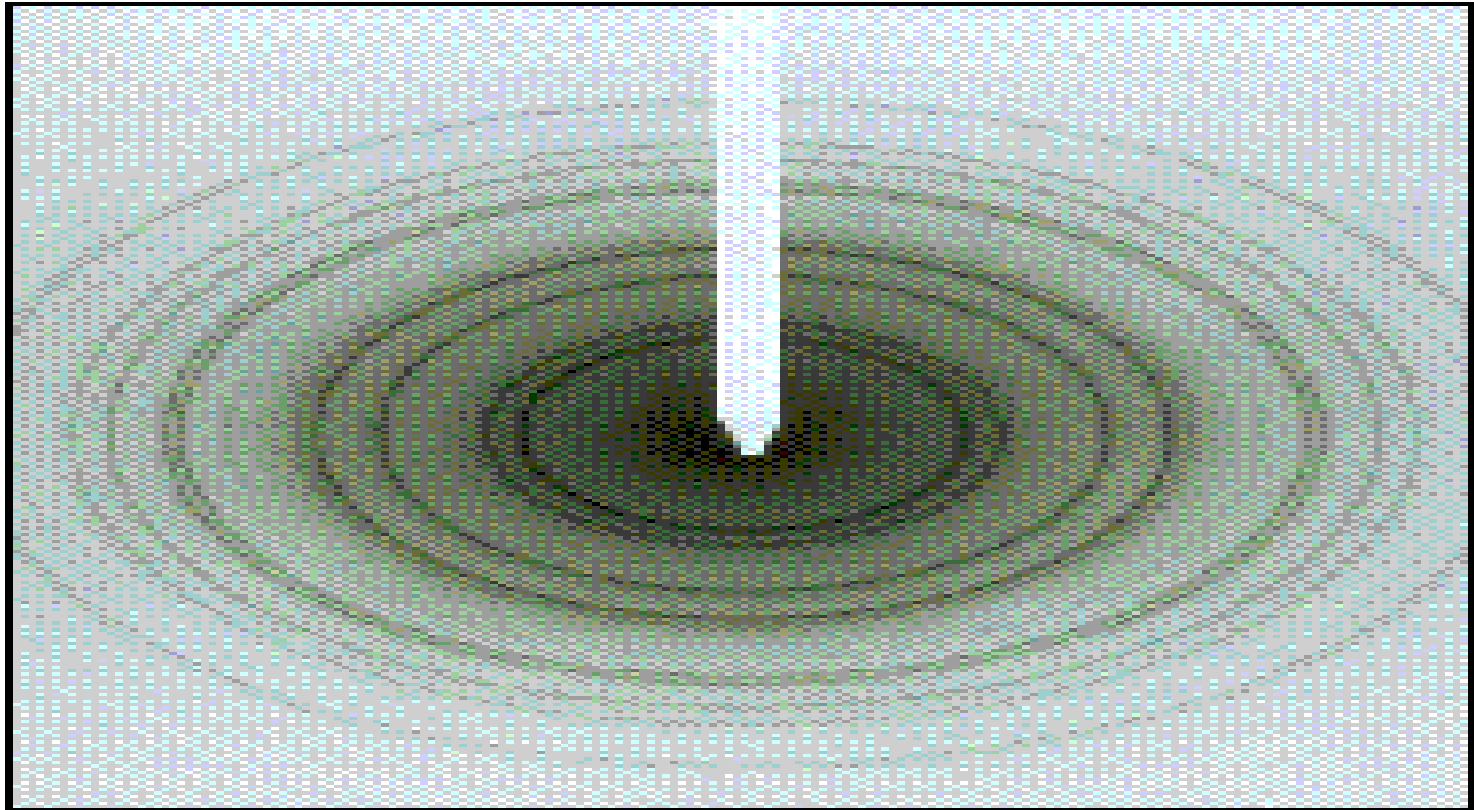
$m$  - khối lượng của hạt vi mô

$v$  - tốc độ của hạt vi mô

$\lambda$  - 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.

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

# **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).



- $E$  = thế năng ( $V$ ) + động năng  
 $E(x,y,z)$  năng lượng toàn phần của hạt vi mô
- $V(x,y,z)$  thế năng của hạt vi mô tại  $(x,y,z)$ .
- ∇  $\Psi(x,y,z)$  hàm sóng mô tả trạng thái của hạt vi mô  
 → mô tả chuyển động trong không gian

∇

$\Psi(x,y,z)$  – mật độ xác suất có mặt của hạt vi mô tại điểm có tọa độ  $(x, y, z)$ , có dấu dương.

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

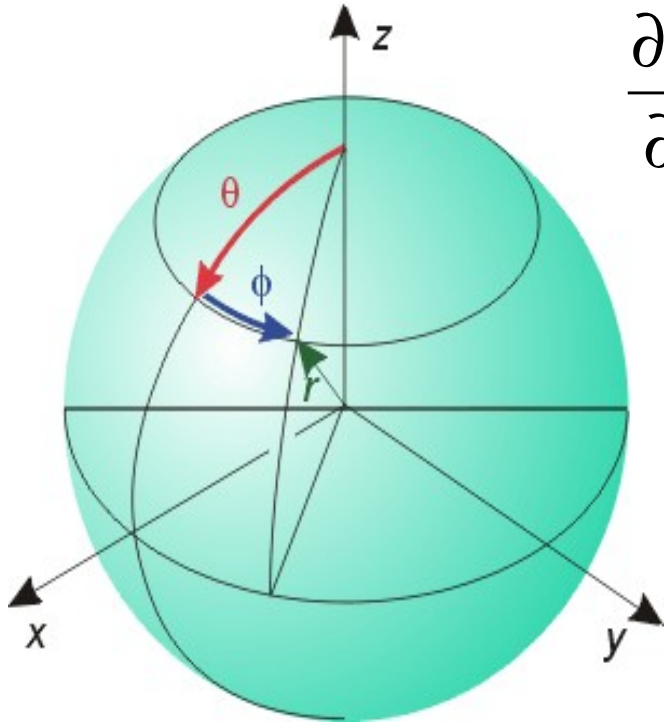


# • ĐIỀU KIỆN CHUẨN HÓA CỦA HÀM SÓNG.

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

- $\Psi$  đơn trị, liên tục và hữu hạn
- $\Psi$  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



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

$\Psi$  - hàm orbital nguyên tử

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

$R( r )$  – hàm bán kính  $Y(\theta, \varphi )$

– hàm góc

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

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

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

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

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

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

# KẾT QUẢ

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

$n$

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

$n$

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

$\ell$

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

## **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

$$n = 1, 2, 3, \dots, \infty$$

➤ **Xác định trạng thái năng lượng của electron**

➤ **Xác định kích thước trung bình của đám mây electron**

$$E = -\frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 n^2 h^2} Z^2 = -2,18.10^{-18} \frac{Z^2}{n^2} J = -13,6 \frac{Z^2}{n^2} eV$$

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

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

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

# Ý nghĩa số lượng tử orbital $\ell$

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

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

$\ell$	0	1	2	3
Phân lớp electron	s	p	d	f

→ 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

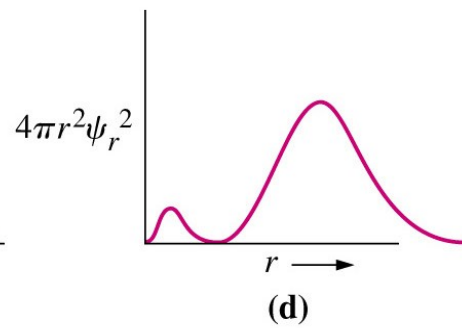
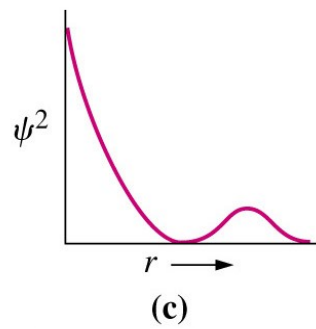
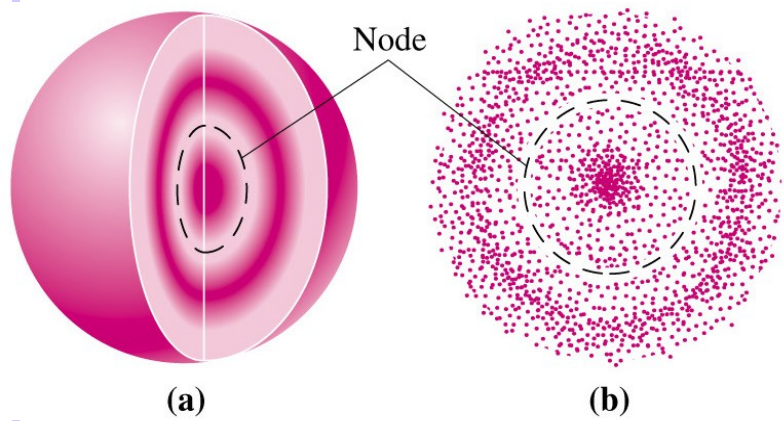


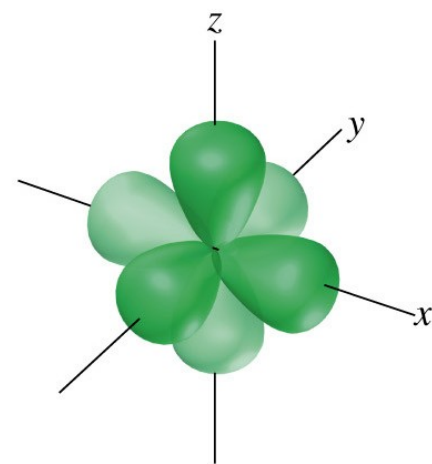
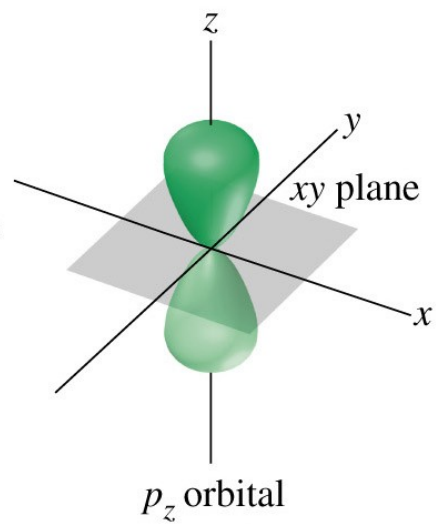
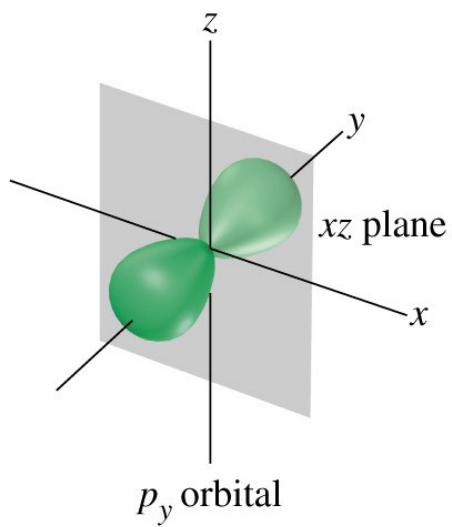
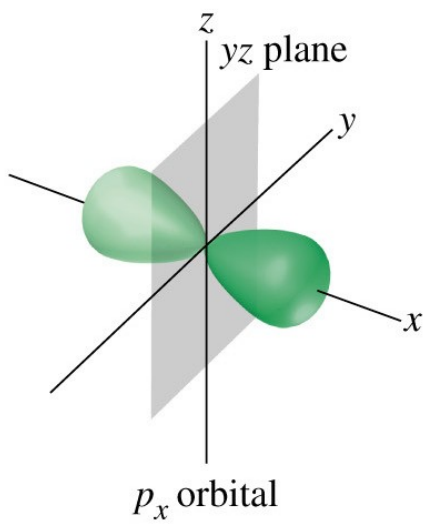
## Ý nghĩa số lượng tử từ $m$

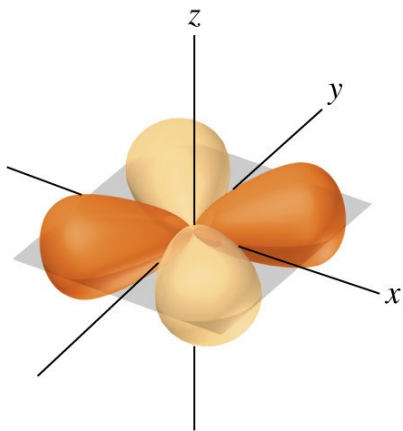
$$m_{\ell} = -\ell, \dots, 0, \dots, +\ell$$

**Cứ mỗi giá trị của  $\ell$  có  $(2\ell + 1)$  giá trị của  $m_{\ell}$ .**

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

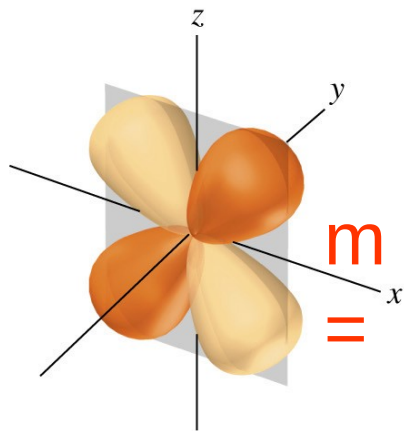






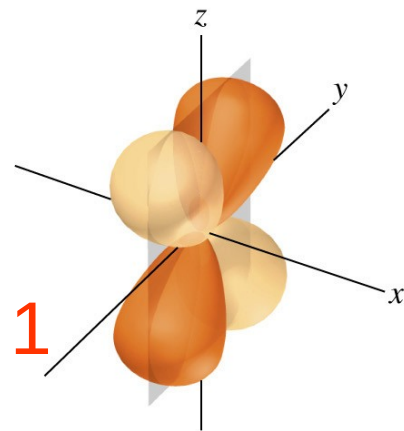
$d_{xy}$  orbital

$m = \pm 2$

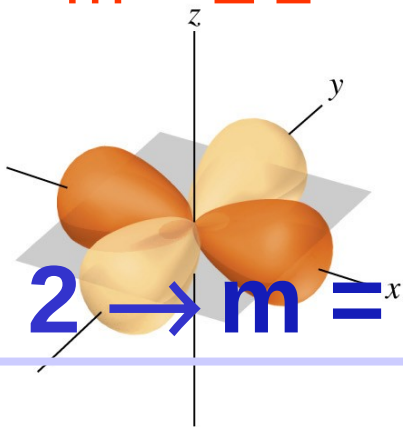


$d_{xz}$  orbital

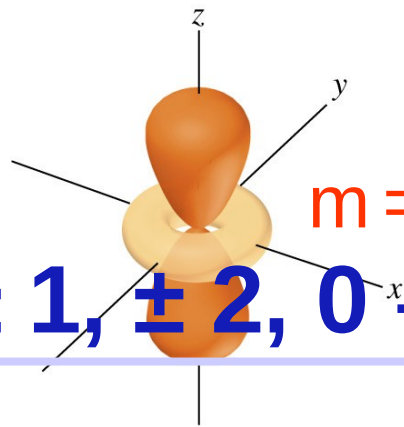
$m = \pm 1$



$d_{yz}$  orbital

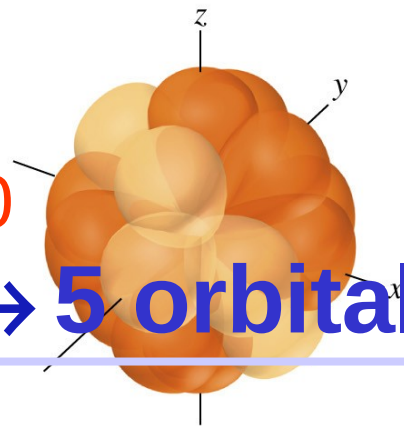


$d_{x^2-y^2}$  orbital



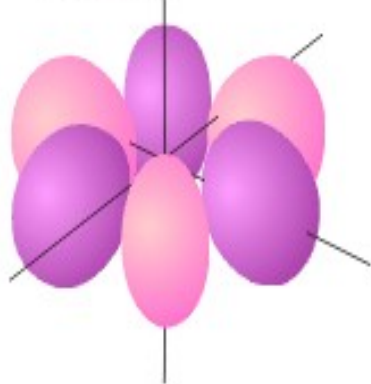
$d_{z^2}$  orbital

$m = 0$

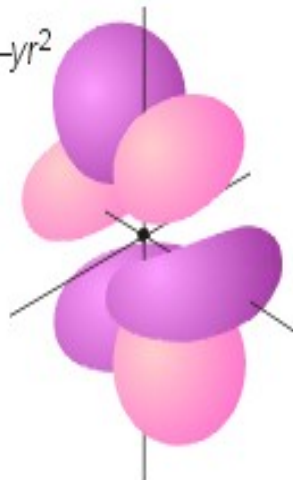


$l = 2 \rightarrow m = \pm 1, \pm 2, 0 \rightarrow 5$  orbital d

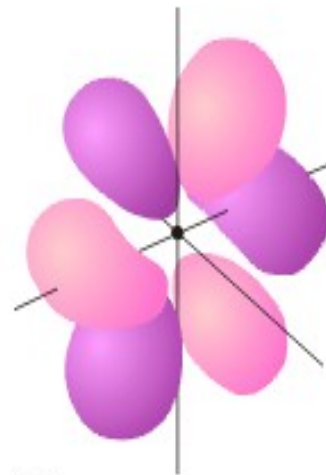
$$4f_{y^3-3yx^2}$$



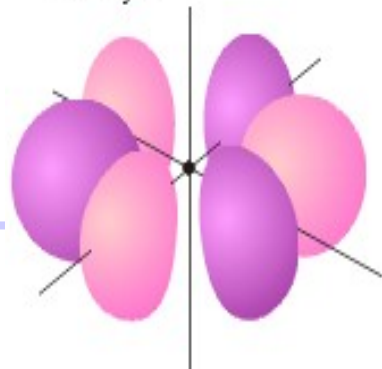
$$4f_{5yz^2-yr^2}$$



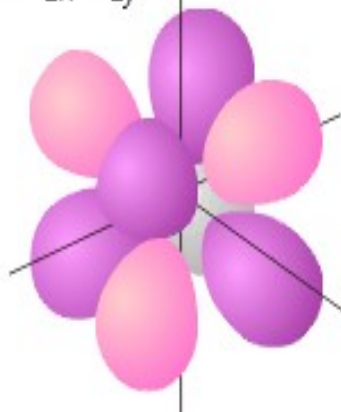
$$4f_{5xz^2-3xr^2}$$



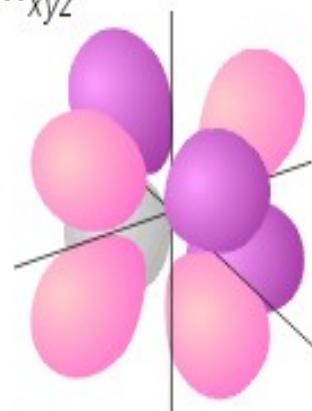
$$4f_{x^3-3xy^2}$$



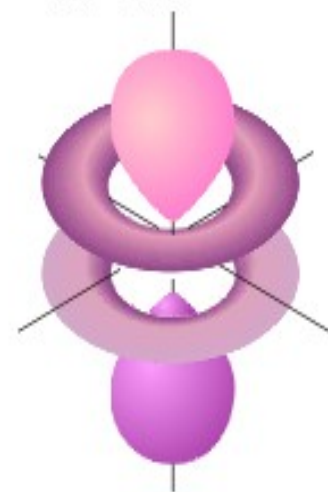
$$4f_{zx^2-zy^2}$$



$$4f_{xyz}$$



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



## Ý nghĩa số lượng tử từ spin m

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

n

*l*

$m_l$

$m_s$

Lớp e

Phân lớp e

AO

e

# NHẬN XÉT

- Bộ ba số lượng tử ( $n, \ell, m_\ell$ ) xác định hàm orbital nguyên tử AO

$\Psi_{n, \ell, m_\ell} =$  hàm orbital

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

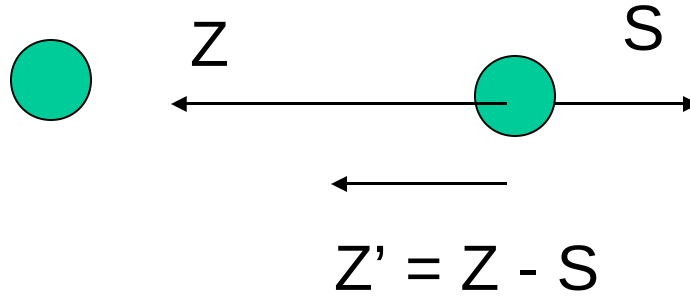
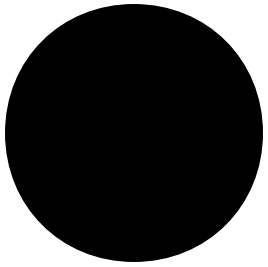
$\Psi_{n, \ell, m_\ell, m_s} =$  hàm sóng toàn phần  
 $=$  hàm orbital-spin



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

- Trạng thái của electron cũng được xác định bằng 4 số lượng tử  $n$ ,  $\ell$ ,  $m_l$ ,  $m_s$ .
- 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  $\ell$** .

Z



# 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. 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 ở lớp bên trong có tác dụng chắn mạnh các 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 với lớp trong không đáng kể.**
- **Các electron có  $n$  giống nhau thì electron nào có  $l$  càng lớn tác dụng chắn sẽ càng yếu 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 hòa hoàn toàn electron hay bán bão hòa thì có tác dụng chắn rất mạnh 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

- **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

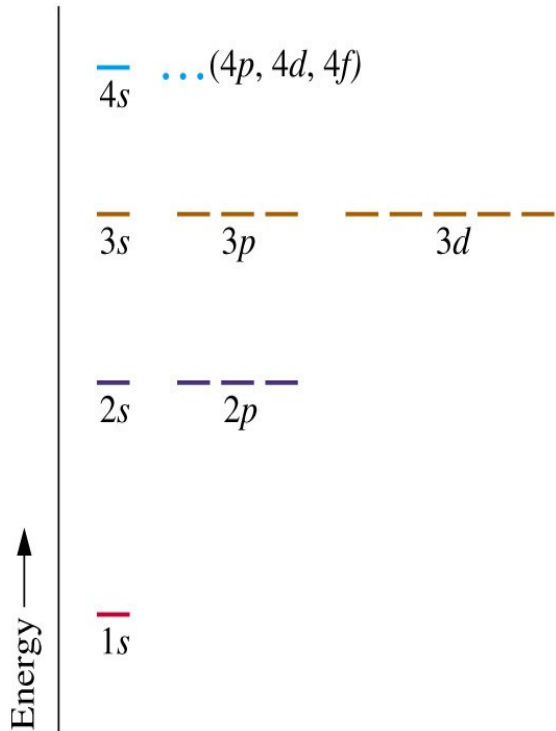
*Trong nguyên tử điện tử được phân bố vào các orbital nguyên tử sao cho tổng năng lượng của nguyên tử là thấp nhất.*

# Quy tắc Klechcowski

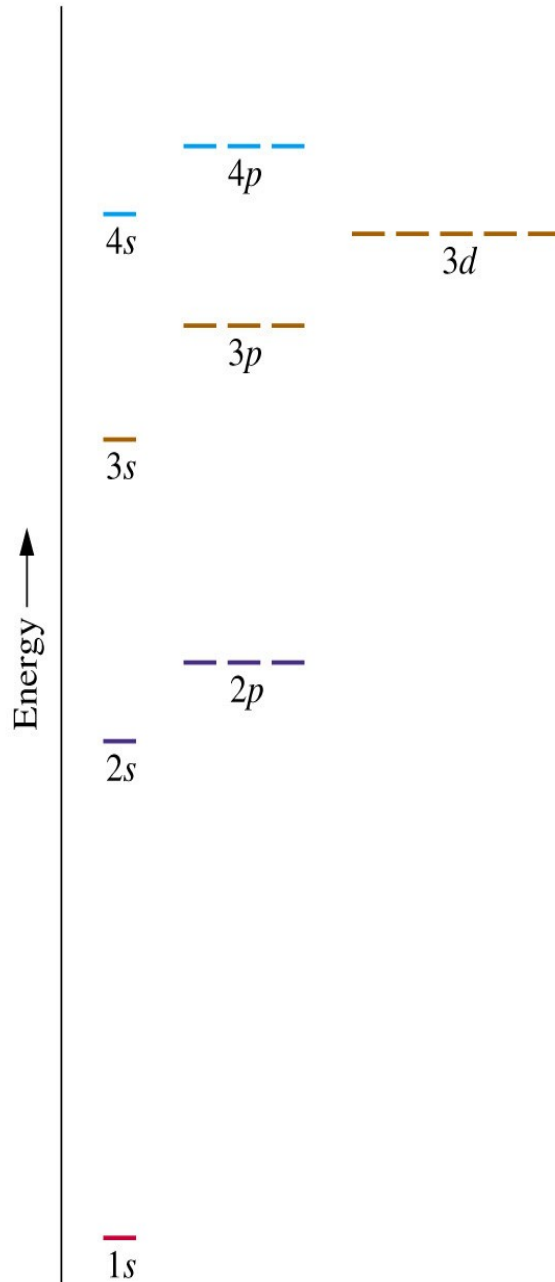
- ✓ *Điền e vào các phân lớp có  $(n + \ell)$  tăng dần.*
- ✓ *Khi  $(n + \ell)$  bằng nhau thì điền e vào phân mức có  $n$  tăng dần.*

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

### Hydrogen atom



### A typical multielectron atom



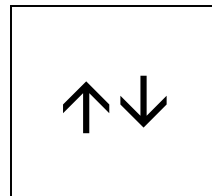
# Quy tắc Klechcowski

***Quy tắc Klechcowski là một quy tắc gần đúng mang tính khái quát nghiêm đúng trong nhiều trường hợp, nhưng cũng có những trường hợp quy tắc này không nghiêm 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  $(n, \ell)$  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  $2n^2$ .**

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

# 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)***