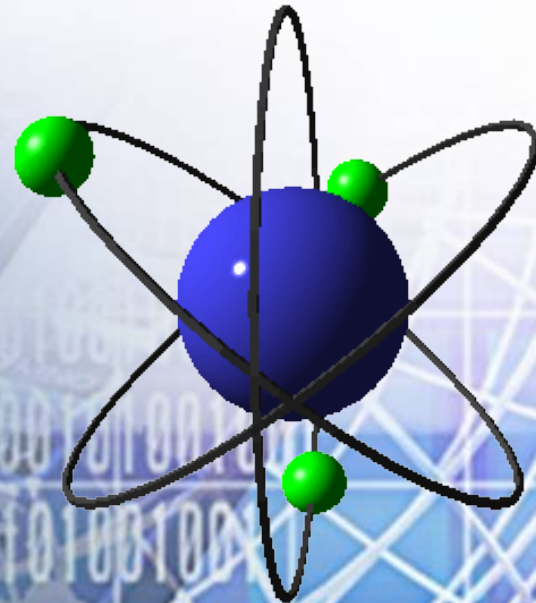


Chương 2

CẤU TẠO NGUYÊN TỬ



Chương 2 - Cấu tạo nguyên tử



2.1. Thành phần cấu tạo nguyên tử

2.2. Phổ nguyên tử

2.3. Mô hình Thomson

2.4. Mô hình Rutherford

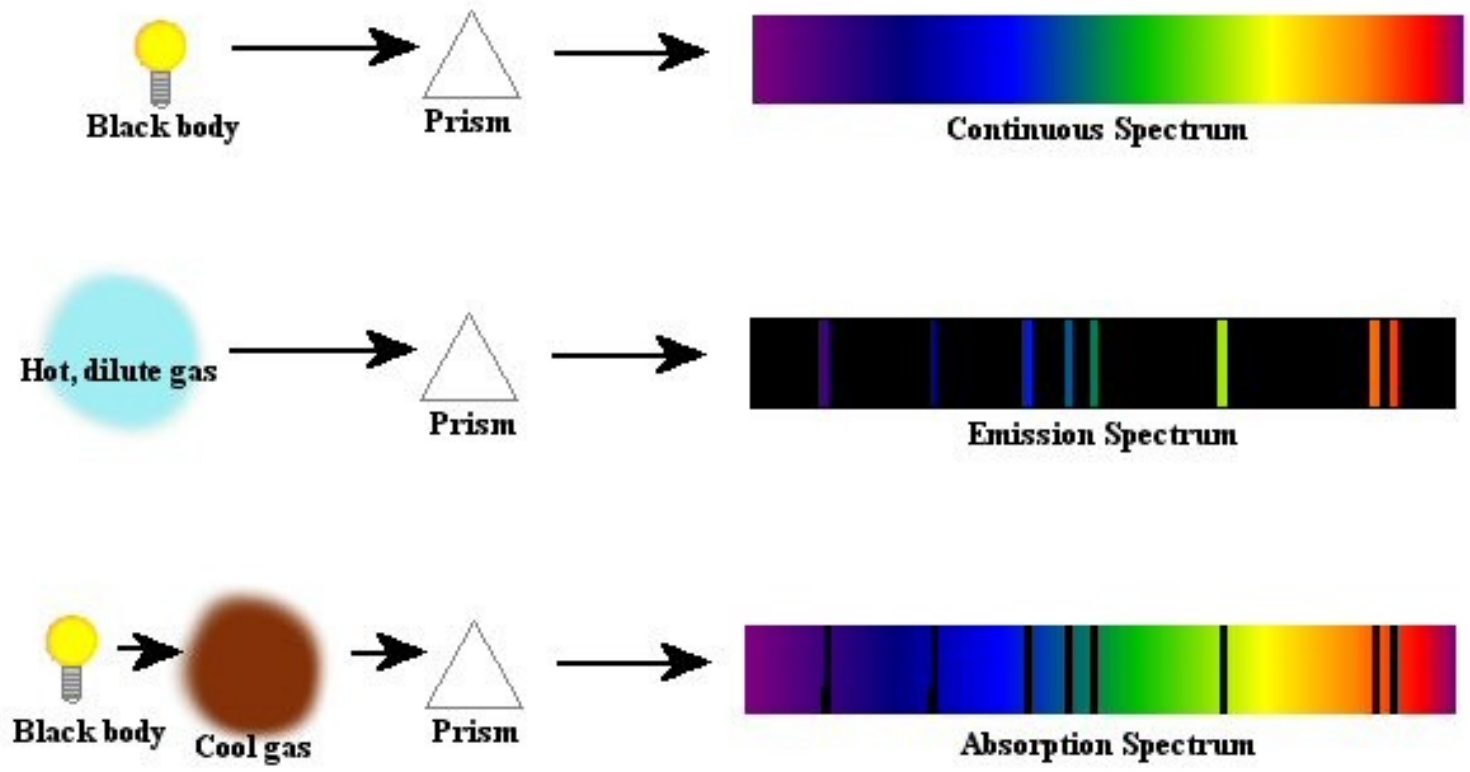
2.5. Mô hình Bohr

2.6. Mô hình AO (Atomic Orbitals)

2.2. Phổ nguyên tử

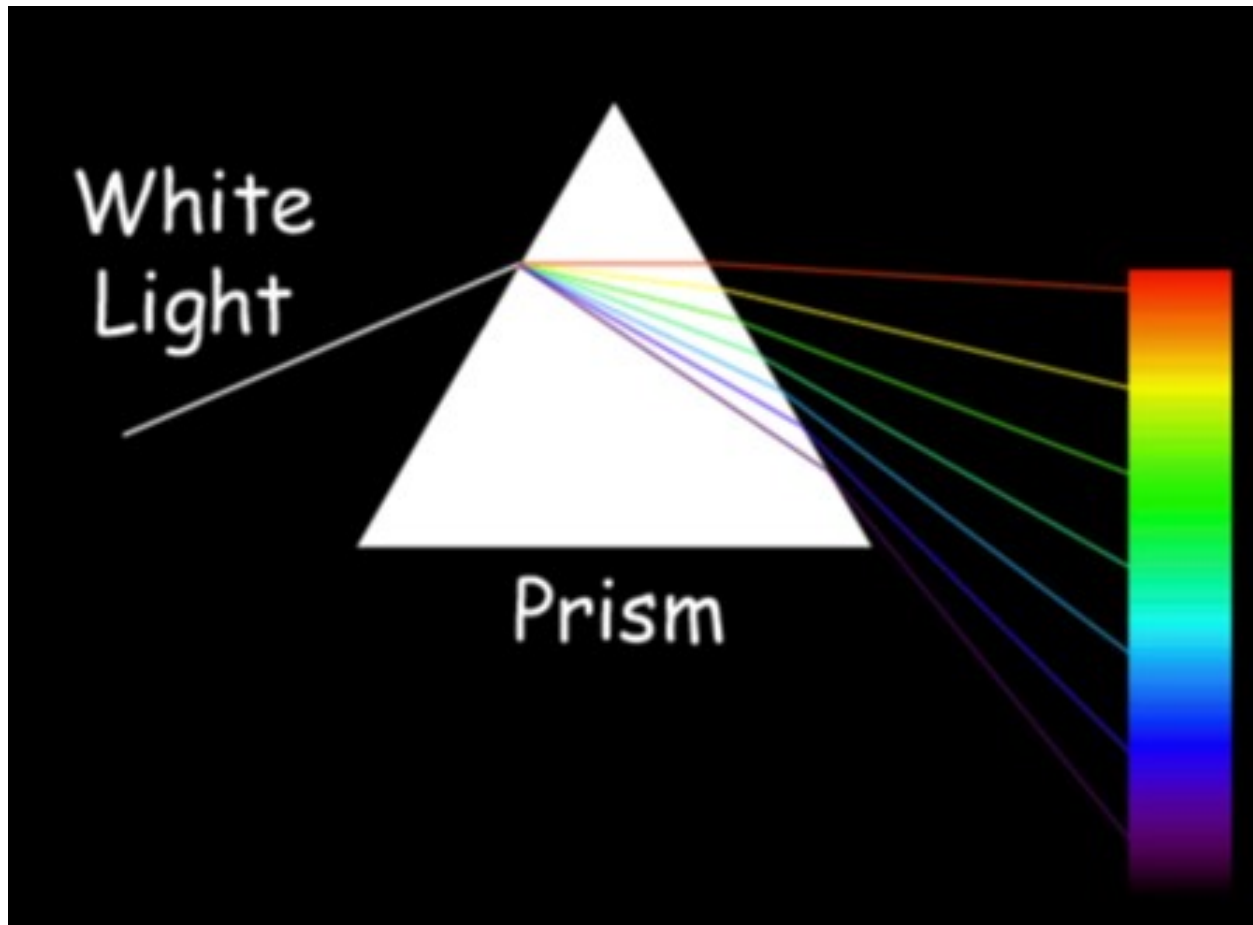


▪ Quang phổ : 3 loại





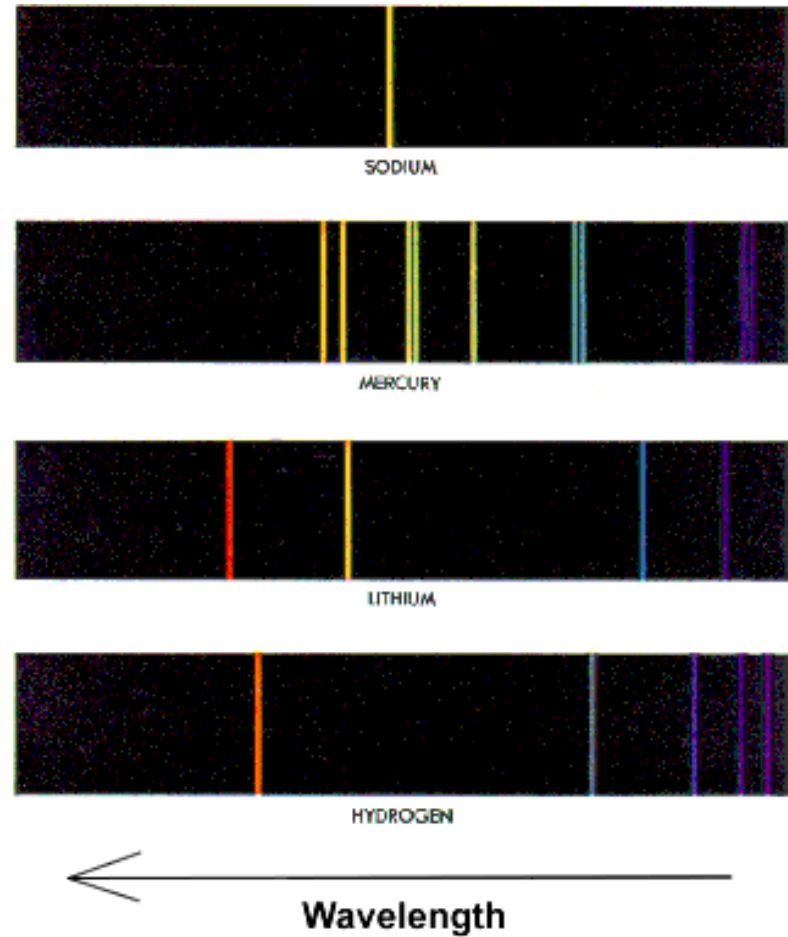
▪ Phổ ánh sáng



2.2. Phổ nguyên tử



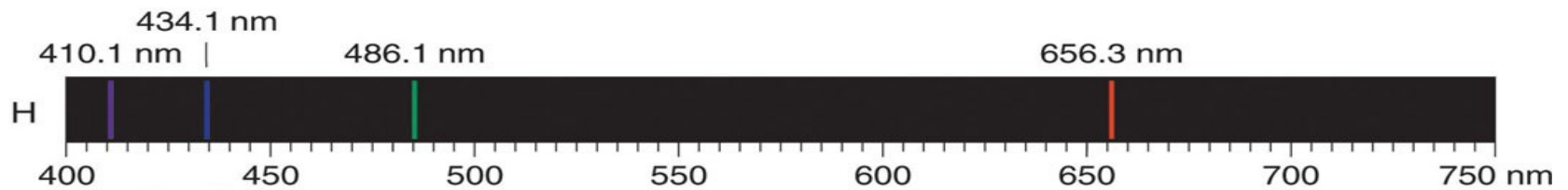
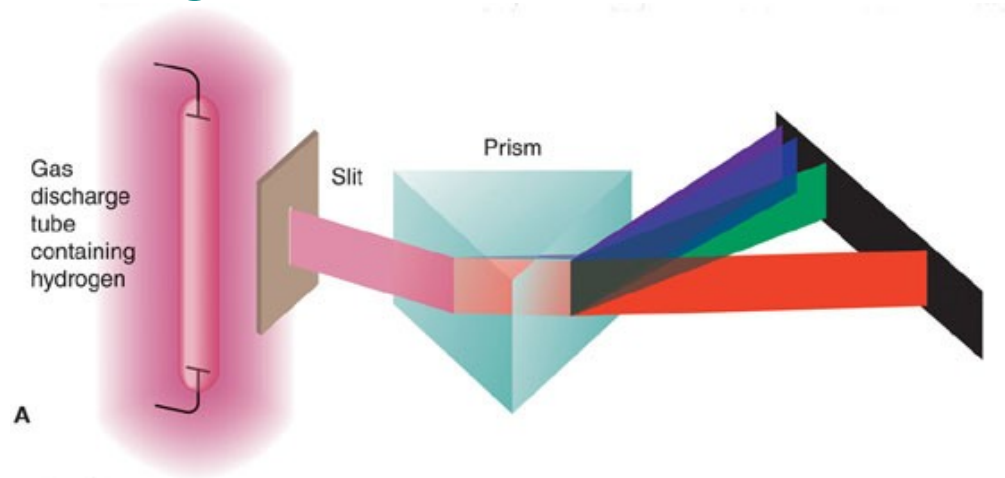
▪ Phổ các nguyên tố



2.2. Phổ nguyên tử

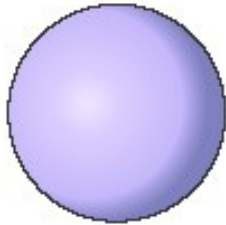


▪ Phổ hydro : 3 vùng

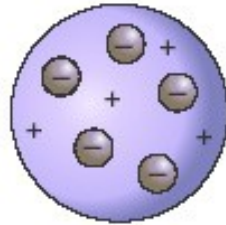


- Vùng nhìn thấy : Balmer : 4 vạch
- Vùng tử ngoại : Lyman
- Vùng hồng ngoại : Paschen, Brackett & Pfund

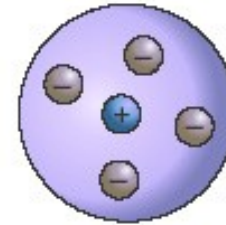
Mô hình nguyên tử



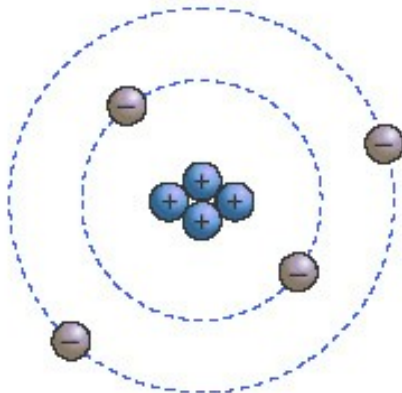
Nguyên tử của Dalton



Nguyên tử của Thomson



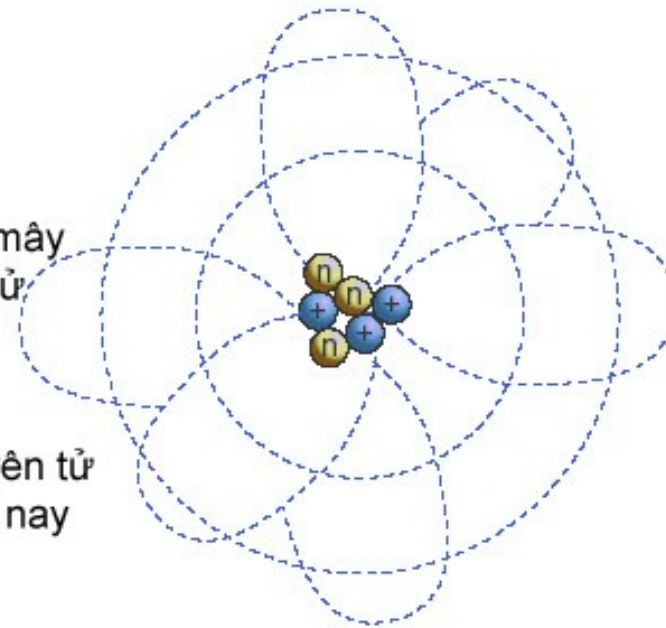
Nguyên tử của Rutherford



Nguyên tử của Bohr

đám mây
điện tử

Nguyên tử
ngày nay



2.2. Mô hình Thomson



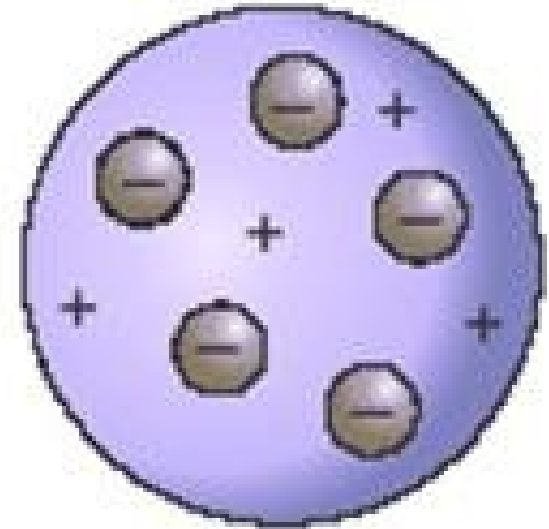
❖ Thuyết cấu nguyên tử của Thomson 1903.

❖ Theo Thompson:

Nguyên tử là một quả cầu bao gồm các điện tích dương phân bố đồng đều trong toàn thể tích & các electron có kích thước không đáng kể dao động xung quanh điện tích dương

❖ Nhược điểm :

Thuyết không giải thích được tại sao các điện tích âm và dương trong cùng thể tích nguyên tử lại không hút nhau để trung hoà về điện



2.3. Mô hình Rutherford (1871-1937)

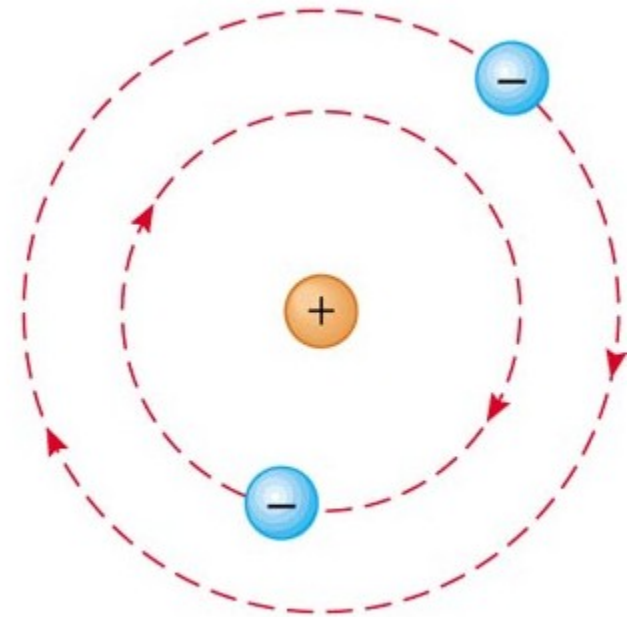


1911, Rutherford đã đưa ra mẫu hành tinh nguyên tử đầu tiên:

“Electron quay chung quanh hạt nhân nguyên tử giống như hành tinh quay xung quanh mặt trời”.

Nhược điểm:

Mẫu nguyên tử này là không giải thích được tính bền của nguyên tử.



2.4. Mô hình Borh - 1913



■ Thuyết lượng tử Planck

- ❖ Năng lượng bức xạ do các chất phát ra hay hấp thụ là không liên tục, mà gián đoạn, nghĩa là thành những phần riêng biệt gọi là lượng tử (photon) :

$$E = h\nu$$

E-năng lượng của 1 photon

$h = 6.63 \times 10^{-34} \text{ J.s}$ hằng số Planck

ν (nu)-tần số bức xạ, s^{-1}

$$\nu = \frac{c}{\lambda}$$

$c = 3.10^8 \text{ ms}^{-1}$

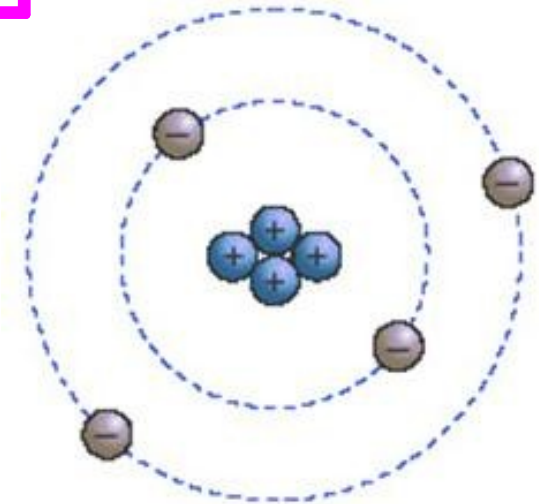
λ -độ dài sóng,m

2.4. Mô hình Bohr - 1913



▪ *Ba định đề của Bohr*

- ❖ Electron chuyển động trên những quỹ đạo tròn, đồng tâm, có bán kính xác định (quỹ đạo dừng)
- ❖ Khi quay trên quỹ đạo dừng electron không hấp thụ hoặc giải phóng năng lượng, nghĩa là có mức năng lượng xác định.
- ❖ Khi electron nhảy từ quỹ đạo dừng này sang quỹ đạo dừng khác xảy ra sự hấp thụ hay giải phóng năng lượng.



$$\Delta E = E_c - E_d$$

2.4. Mô hình Bohr - 1913



▪ Lý thuyết Bohr về nguyên tử hydro

❖ Tính bán kính quỹ đạo bền & tốc độ c.động của electron

▪ Momen động lượng

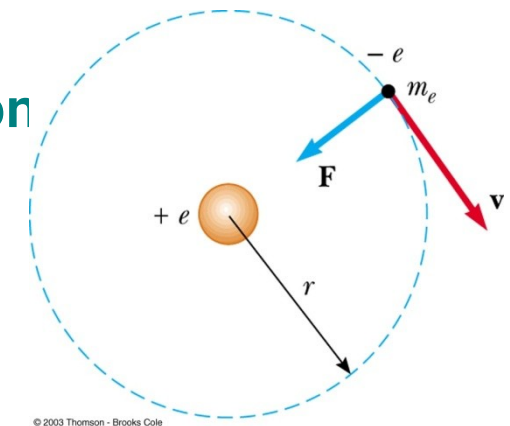
$$mvr = n \frac{h}{2\pi} \quad (1)$$

m , V-k.lượng & t.độ của electron
 r -bán kính quỹ đạo
 $n = 1, 2, 3, \dots$ -hằng số Planck

▪ Lực tác dụng

Lực hút của hạt nhân $\frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}$
 Lực ly tâm $\frac{mv^2}{r}$

$$\left. \begin{array}{l} \frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \\ \frac{mv^2}{r} \end{array} \right\} \frac{mv^2}{r} = \frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \quad (2)$$



2.4. Mô hình Bohr - 1913



▪ Lý thuyết Bohr về nguyên tử hydro

❖ Tính bán kính quỹ đạo bền & tốc độ c.động của electron

▪ Tốc độ chuyển động của electron

$$(2) \rightarrow m v^2 r = \frac{z e^2}{4 \pi \epsilon_0} \rightarrow v = \frac{z e^2}{4 \pi \epsilon_0} \times \frac{1}{m v r} \quad (3)$$

$$\text{Theo (1)} \quad m v r = n \frac{h}{2 \pi} \rightarrow v = \frac{2 \pi z e^2}{4 \pi \epsilon_0 h} \times \frac{1}{n} \rightarrow v = \frac{e^2 z}{2 \epsilon_0 h n} \quad (4)$$

▪ Bán kính quỹ đạo

$$(1) \rightarrow r = n \frac{h}{2 \pi m} \times \frac{1}{v} \left. \vphantom{r} \right\} \rightarrow r = n \frac{h}{2 \pi m} \frac{2 \epsilon_0 h n}{e^2 z} \rightarrow r = \frac{\epsilon_0 h^2}{\pi m e^2} \frac{n^2}{z} \quad (5)$$

Thay (4) vào mẫu số

2.4. Mô hình Bohr - 1913



▪ Lý thuyết Bohr về nguyên tử hydro

❖ Tính bán kính quỹ đạo bền & tốc độ c.động của electron

▪ Bán kính quỹ đạo

Đặt
$$a_o = \frac{\epsilon_o h^2}{\pi m e^2}$$

$$\epsilon_o = 8,85 \cdot 10^{-12} \text{ C}^2 \text{ J}^{-1} \text{ m}^{-1}$$

$$h = 6,63 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$$

$$m = 9,109 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$$

$$e = 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ C}$$

$$a_o = \frac{8,85 \cdot 10^{-12} \times (6,63 \cdot 10^{-34})^2}{3,14 \times 9,109 \cdot 10^{-31} \times (1,602 \cdot 10^{-19})^2}$$

$$a_o = 5,29 \cdot 10^{-11} \text{ m}$$



$$r = a_o \frac{n^2}{z} \quad (5)$$

Khi $n = 1$ $r_1 = 5,29 \cdot 10^{-11} \text{ m} = 0,53 \cdot 10^{-10} \text{ m}$

Khi $n = 2$ $r_2 = 4a_o$

Bán kính Bohr

2.4. Mô hình Bohr - 1913



▪ Lý thuyết Bohr về nguyên tử hydro

❖ Tính năng lượng của electron

- Động năng $\frac{mv^2}{2}$
- Thế năng $\frac{-ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$

$$\left. \begin{array}{l} \frac{mv^2}{2} \\ \frac{-ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \end{array} \right\} \rightarrow E = \frac{mv^2}{2} + \frac{-ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \rightarrow \text{Thay (4) \& (5)}$$

$$E = \frac{m}{2} \times \frac{e^4 z^2}{4\epsilon_0^2 h^2 n^2} - \frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0} \times \frac{\pi e^2 m z}{\epsilon_0 h^2 n^2} \rightarrow E = -\frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \times \frac{z^2}{n^2} \quad (6)$$

▪ Tính năng lượng

$$m = 9,109 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$$

$$e = 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ C}$$

$$\epsilon_0 = 8,85 \cdot 10^{-12} \text{ C}^2 \text{ J}^{-1} \text{ m}^{-1}$$

$$h = 6,63 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$$

$$z = 1$$

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

$$E = -\frac{9,109 \cdot 10^{31} \times (1,602 \cdot 10^{-19})^4}{8 \times (8,85 \cdot 10^{-12})^2 \times (6,63 \cdot 10^{-34})^2} \times \frac{1^2}{n^2} = 2,18 \cdot 10^{-18} \frac{1}{n^2} \text{ J} \rightarrow E = -13,6 \frac{1}{n^2} \text{ eV}$$

$$1 \text{ eV} = 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$

2.4. Mô hình Bohr - 1913

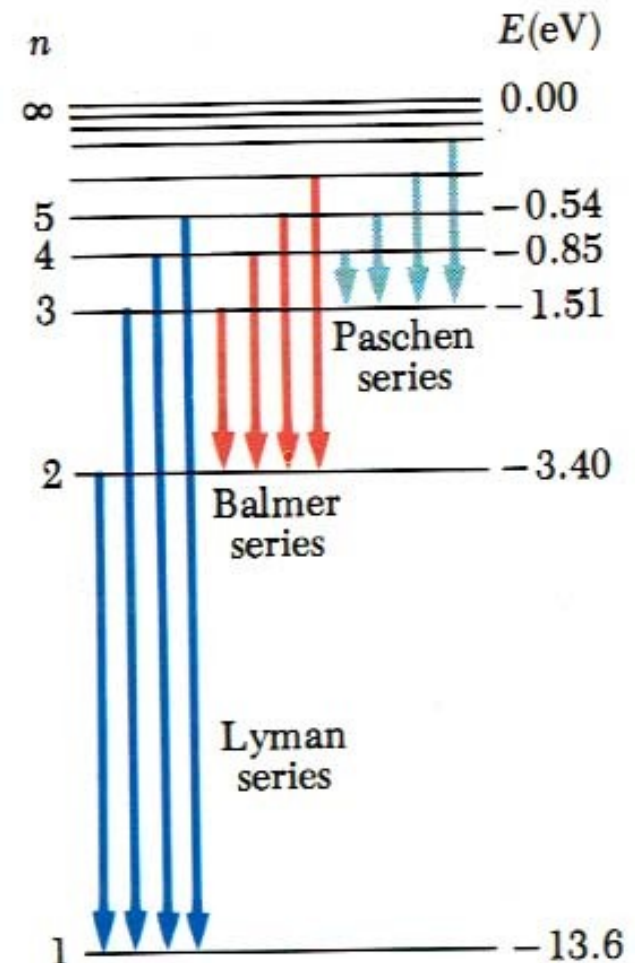


▪ Lý thuyết Bohr về nguyên tử hydro

❖ Tính năng lượng của electron

$$E = -1,36 \frac{1}{n^2} eV$$

Khi $n = 1$	→	$E = -13,6 eV$
Khi $n = 2$	→	$E = -3,4 eV$
Khi $n = 3$	→	$E = -1,5 eV$
Khi $n = 4$	→	$E = -0,85 eV$
Khi $n = 5$	→	$E = -0,54 eV$



2.4. Mô hình Bohr - 1913



▪ Lý thuyết Bohr về nguyên tử hydro

❖ Giải thích phổ vạch nguyên tử hydro

- Trạng thái cơ bản : $n = 1$ & Năng lượng $E_d = \min$

Trạng thái kích thích : $n = 2, 3, 4... & \text{Năng lượng } E_c > E_d$

Khi nhảy về trạng thái cơ bản \rightarrow Năng lượng phát xạ tạo tia sáng tần số ν

$$\Delta E = E_c - E_d = \left(\frac{-me^4}{8\epsilon_0^2 h^2 n_c^2} \right) - \left(\frac{-me^4}{8\epsilon_0^2 h^2 n_d^2} \right) = \frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \left(\frac{1}{n_d^2} - \frac{1}{n_c^2} \right) = h\nu$$

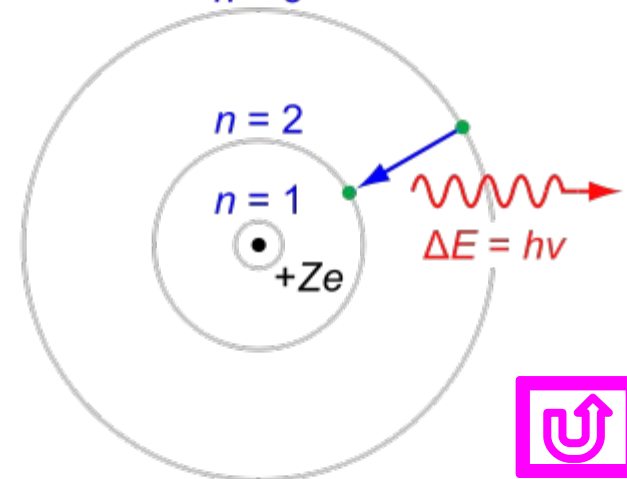
$n = 3$

- Tần số

$$\nu = \frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^3} \left(\frac{1}{n_d^2} - \frac{1}{n_c^2} \right)$$

- Bước sóng

$$\lambda = \frac{c}{\nu}$$



2.4. Mô hình Bohr - 1913



▪ Lý thuyết Bohr về nguyên tử hydro

- **Số sóng** $\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda} = \frac{\nu}{c} \rightarrow \bar{\nu} = \frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^3 c} \left(\frac{1}{n_d^2} - \frac{1}{n_c^2} \right)$

Hằng số Rydberg $R_H = \frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^3 c} = 1096,78 \cdot 10^4 m^{-1}$

$$\bar{\nu} = R_H \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) = 1096,78 \cdot 10^4 \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

- **Bước sóng**

$$\bar{\nu} = 1096,78 \cdot 10^4 \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{2^2} \right) = 8225850 m^{-1}$$

$$\lambda = \frac{1}{\bar{\nu}} = \frac{1}{8225850} = 1,215 \cdot 10^{-7} m = 121,5 nm$$

2.4. Mô hình Borh - 1913



-Dãy Balmer (vùng nhìn thấy)

$$\bar{\nu} = 109679,43 \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{3^2} \right) = 15233,25 \text{ cm}^{-1}$$

$$\lambda = \frac{1}{15233,25} = 6,565 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^{-1} = 656,5 \text{ nm} \quad \rightarrow \text{Màu đỏ}$$

$$\bar{\nu} = 109679,43 \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{4^2} \right) = 20564,89 \text{ cm}^{-1}$$

$$^1 \lambda = \frac{1}{\bar{\nu}} = \frac{1}{20564,89} = 4,863 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^{-1} = 486 \text{ nm} \quad \rightarrow \text{Màu lam}$$

$$\bar{\nu} = 109679,43 \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{5^2} \right) = 23032,68 \text{ cm}^{-1}$$

$$\lambda = \frac{1}{23032,68} = 4,341 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^{-1} = 434 \text{ nm} \quad \rightarrow \text{Màu chàm}$$

$$\bar{\nu} = 109679,43 \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{6^2} \right) = 24373,2 \text{ cm}^{-1}$$

$$\lambda = \frac{1}{24373,2} = 4,102 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^{-1} = 410 \text{ nm} \quad \rightarrow \text{Màu tím}$$

2.4. Mô hình Borh - 1913

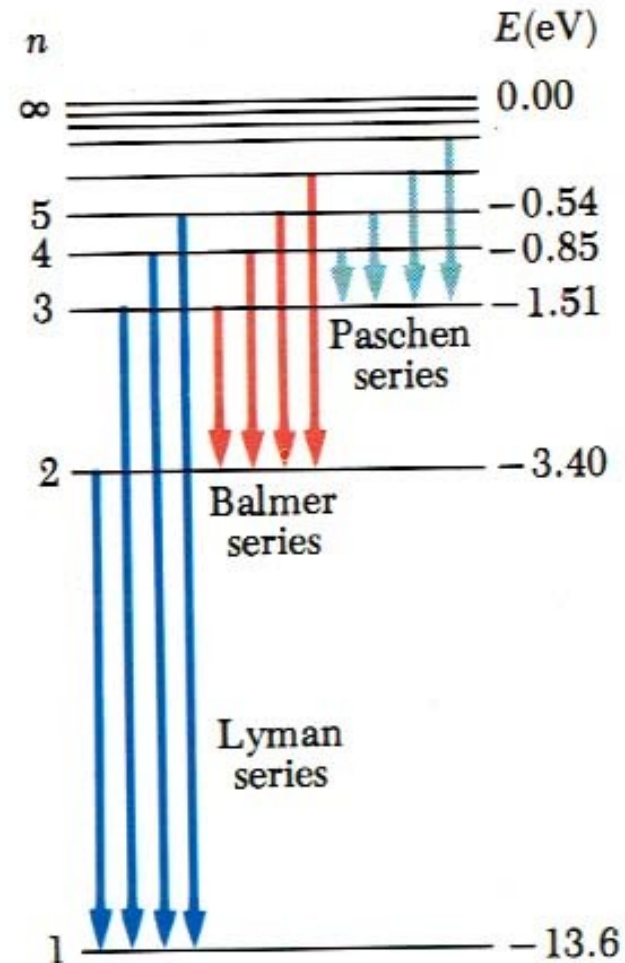


▪ Lý thuyết Bohr về nguyên tử hydro

-Vùng hồng ngoại

1

2



2.4. Mô hình Borh - 1913

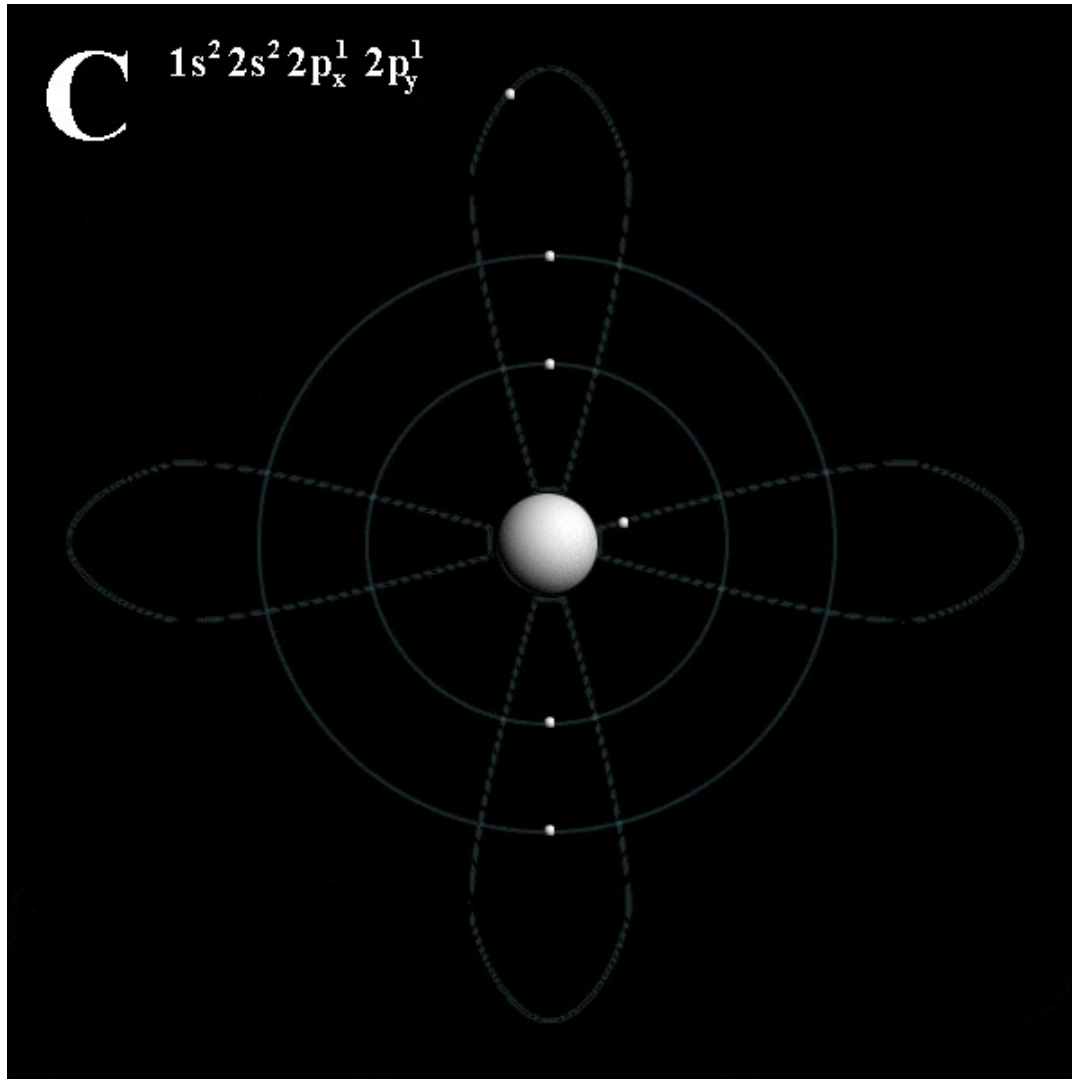


▪ *Nhược điểm của mẫu nguyên tử Borh*

- Không mô tả được nguyên tử nhiều electron
- Việc khảo sát electron trong nguyên tử như phần tử gián đoạn với vị trí & tốc độ xác định nghiêm ngặt
Kết quả tính toán không phù hợp với kết quả thực nghiệm



2.4. Mô hình Borh - 1913



2.5. Mô hình AO



2.5.1. Các luận điểm của cơ học lượng tử

2.5.2. Ý nghĩa của các số lượng tử

2.5.3. Cấu hình electron trong nguyên tử

2.5.1. Luận điểm của cơ học lượng tử



❖ Tính chất sóng-hạt của các hạt vi mô

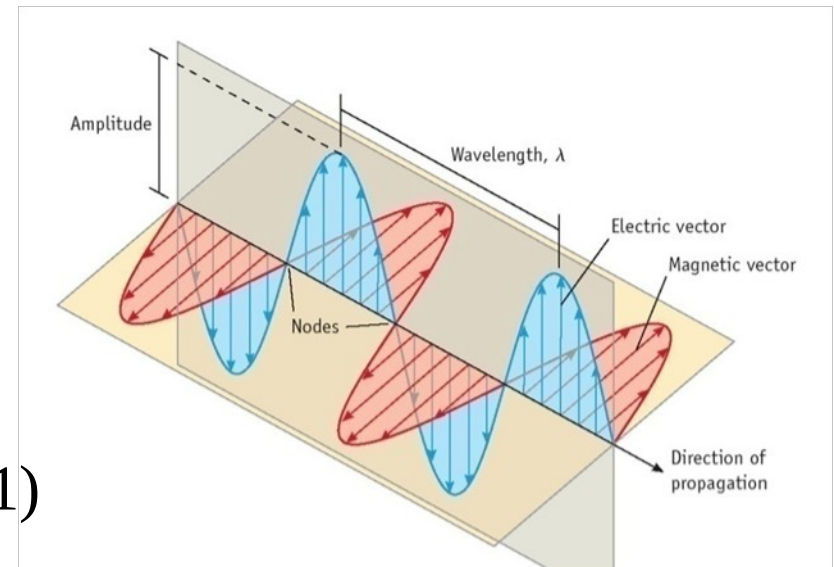
■ Tính chất sóng-hạt của ánh sáng

• Tính chất sóng

Ánh sáng truyền đi không gian với vận tốc c , bước sóng λ tần số ν .

Khi đó:

$$c = \lambda \times \nu \rightarrow \nu = \frac{c}{\lambda} \quad (1)$$



2.5.1. Luận điểm của cơ học lượng tử



- **Tính chất hạt**

- Bản chất hạt của ánh sáng thể hiện ở hiệu ứng quang điện:

$$E = h\nu \quad (2)$$

- Năm 1903 Einstein tìm ra hệ thức:

$$E = mc^2 \quad (3)$$

$$\left. \begin{array}{l} (2) \\ (3) \end{array} \right\} \rightarrow m = \frac{h\nu}{c^2}$$

- **Tính chất sóng-hạt**

- (1), (2), (3)

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

Ánh sáng là một hạt (photon) có khối lượng m & khi chuyển động với tốc độ C sẽ tạo ra sóng λ

2.5.1. Luận điểm của cơ học lượng tử



▪ Hệ thức De Broglie

1924, Louis De Broglie đưa ra giả thuyết:

Hạt vi mô có khối lượng m & khi chuyển động với tốc độ V sẽ tạo ra sóng truyền đi với bước sóng λ

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

- Hạt vĩ mô : m lớn $\rightarrow \lambda$ rất nhỏ \rightarrow Không có t/c sóng
- Hạt vi mô (electron) : m rất nhỏ $\rightarrow \lambda$ lớn \rightarrow Có t/c sóng

2.5.1. Luận điểm của cơ học lượng tử



❖ Nguyên lý bất định của Heisenberg



W. Heisenberg
1901-1976

Không thể xác định chính xác đồng thời vị trí & tốc độ của hạt vi mô

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

Δx : độ bất định về vị trí

Δv_x : độ bất định về tốc độ

• Nếu v_x chính xác $\rightarrow \Delta v_x \approx 0 \Rightarrow$

$\Delta x \rightarrow \infty$: x hoàn toàn bất định

2.5.1. Luận điểm của cơ học lượng tử



❖ Nguyên lý bất định của Heisenberg

$$\Delta x \geq \frac{h}{2\pi m \cdot \Delta v} = \frac{6,63 \cdot 10^{-34}}{2 \times 3,14 \times 9,1 \cdot 10^{-31} \times 1} = 0,17 \cdot 10^{-3} \text{ m}$$



Tổng quát: khi biết chính xác tốc độ chuyển động của hạt vi mô thì chỉ có thể tìm được xác suất có mặt của nó ở chỗ nào đó trong không gian

2.5.1. Luận điểm của cơ học lượng tử



❖ Phương trình Schrodinger

■ Hàm sóng

-Trạng thái chuyển động của electron xung quanh hạt nhân nguyên tử (~điểm M) & thời điểm t đặc trưng bằng **hàm sóng** $\psi(x,y,z,t)$

- Hàm ψ có giá trị dương & âm $\rightarrow |\psi|^2 > 0 \Rightarrow$
 $|\psi|^2$ - xác suất tìm thấy electron tại một điểm trong không gian (mật độ xác suất)

- $|\psi|^2 dV$ -xác suất tìm thấy electron trong yếu tố thể tích dV () $dV = 4\pi r^2 dr$

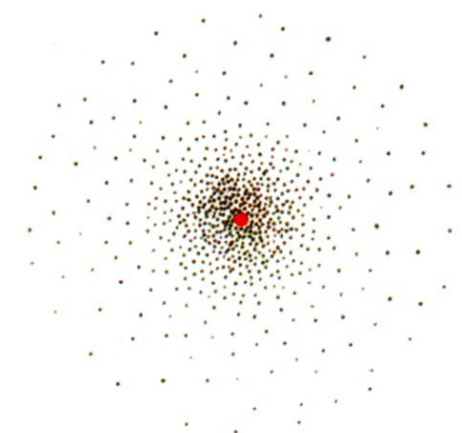
2.5.1. Luận điểm của cơ học lượng tử



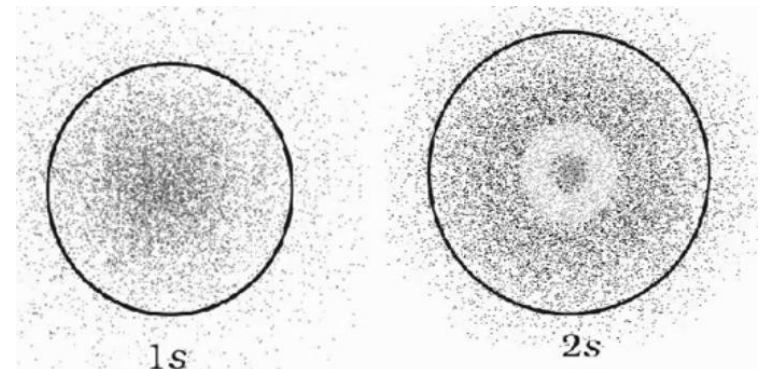
❖ Phương trình Schrodinger

▪ Hàm sóng

-Miền không gian gần hạt nhân nguyên tử, trong đó xác suất có mặt electron khoảng 90% gọi là **mây điện tử**



-**Mỗi hàm $\psi(x,y,z,t)$ là một orbital nguyên tử (AO)**



2.5.1. Luận điểm của cơ học lượng tử



❖ Phương trình Schrodinger

- *Phương trình sóng Schrodinger mô tả chuyển động của electron xung quanh hạt nhân (trong trường thế năng U) tại thời điểm xác định t (hệ ở trạng thái dừng).*

$$-\frac{h^2}{8\pi^2 m} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) + U\psi = E\psi$$

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

là toán tử Laplace

$$H = -\frac{h^2}{8\pi^2 m} \Delta + U$$

là toán tử Hamilton

Viết gọn:

$$H\Psi = E\Psi$$

h : hằng số Plank m -khối lượng hạt U : thế năng

E : năng lượng toàn phần x, y, z : tọa độ của hạt

2.5.1. Luận điểm của cơ học lượng tử



❖ Phương trình Schrodinger

Giải phương trình Schrodinger để tìm ra hàm Ψ và năng lượng $E \rightarrow$ xác định trạng thái của hạt vi mô.

Mục tiêu:

Ψ_1	Ψ_2	Ψ_3	Ψ_4	Ψ_n
E_1	E_2	E_3	E_4	E_n

- Mỗi Ψ ứng với một **ORBITAL** — vùng không gian tìm thấy electron.
- Ψ **không** mô tả chính xác vị trí của electron.

2

- Ψ cho biết **xác suất** tìm thấy electron tại một vị trí xác định.

2.5.1. Luận điểm của cơ học lượng tử



❖ Phương trình Schrodinger

Hàm sóng Ψ phụ thuộc vào 3 số lượng tử, đặc trưng cho cấu trúc nguyên tử

3 số lượng tử



Số lượng tử chính: n

Số lượng tử phụ: l

Mỗi hàm sóng Ψ_{nlm} là một orbital nguyên tử

2.5.2. Ý nghĩa của các số lượng tử



- a. Số lượng tử chính (n)
- n chỉ số lớp electron

n	1	2	3	4
Lớp	K	L	M	N
Chu kỳ	1	2	3	4

- Xác định năng lượng của electron

$$E = \frac{-me^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \times \frac{z^2}{n^2}$$

m - khối lượng của electron, kg

e - điện tích của electron, C

z - số proton trong hạt nhân

ϵ_0 - hằng số điện môi của chân không

2.5.2. Ý nghĩa của các số lượng tử



a. Số lượng tử chính (n)

▪ Xác định năng lượng của electron

$$E = -2.18 \times 10^{-18} \frac{z^2}{n^2} (J) = -13,6 \cdot \frac{z^2}{n^2} (eV) \quad 1eV = 1,602 \times 10^{-19} J$$

Trạng thái kích thích: không bền \longrightarrow Giải phóng năng lượng

$$\Delta E = E_{n^*} - E_n = h\nu = h \frac{c}{\lambda} \quad n^* > n$$

$$E = 13,6 \left(\frac{z^2}{n^2} - \frac{z^2}{n^{*2}} \right) (eV)$$

▪ Nguyên tử nhiều electron

n-chỉ mức năng lượng trung bình của các electron trong cùng một lớp

2.5.2. Ý nghĩa của các số lượng tử



b. Số lượng tử phụ (l)

- *l -chỉ phân lớp*

$l = 0, 1, 2, 3, 4, \dots, (n - 1)$ tức là có n phân lớp

l	0	1	2	3	4	$n - 1$
Phân lớp	s	p	d	f	g	

- *l -cho biết phân mức năng lượng của các electron*

Năng lượng của electron tăng dần : $ns \rightarrow np \rightarrow nd \rightarrow nf$

2.5.2. Ý nghĩa của các số lượng tử



b. Số lượng tử phụ (l)

- l -xác định momen động lượng M của electron

$$\vec{M} = \vec{\omega} \times \vec{r}$$

$$\vec{\omega} = m\vec{V}$$

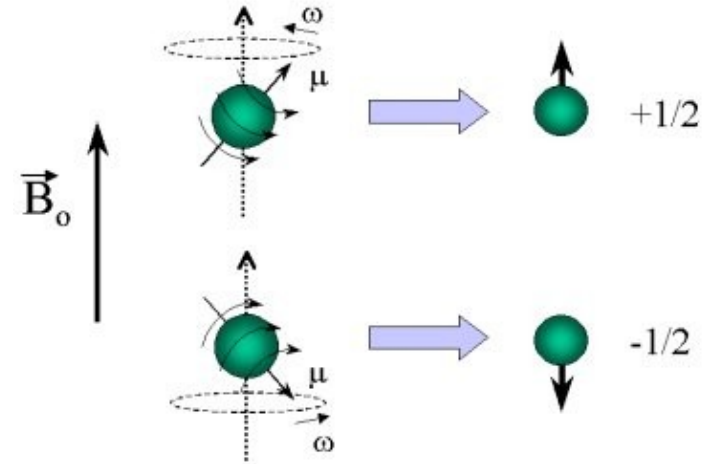
$\vec{\omega}$ -tốc độ quay

\vec{r} -bán kính nguyên tử

\vec{V} -tốc độ chuyển động của ng.tử

m -khối lượng electron

\vec{M} -vuông góc với mặt phẳng chứa $\vec{\omega} \times \vec{r}$



2.5.2. Ý nghĩa của các số lượng tử



b. Số lượng tử phụ (l)

- l -xác định momen động lượng M của electron

Giá trị của momen động lượng $M = \sqrt{\ell(\ell+1)} \frac{h}{2\pi}$

l - xác định hình dạng đám mây electron

Orbital S : dạng hình cầu

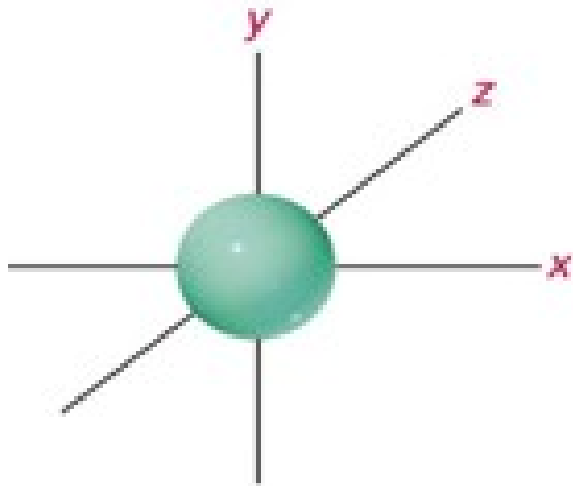
Orbital P : 2 quả cầu tiếp xúc nhau ở hạt nhân nguyên tử

Orbital d : dạng hoa mai 4 cánh

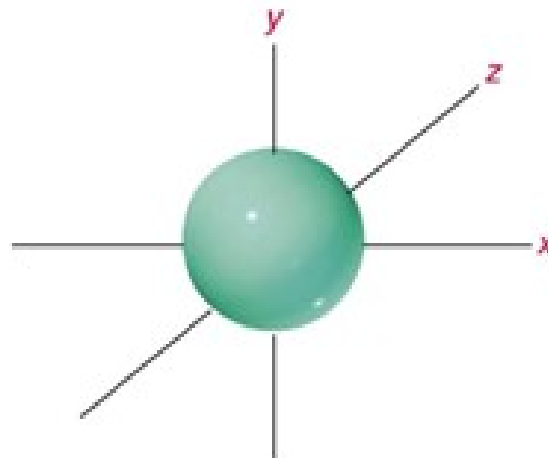
2.5.2. Ý nghĩa của các số lượng tử



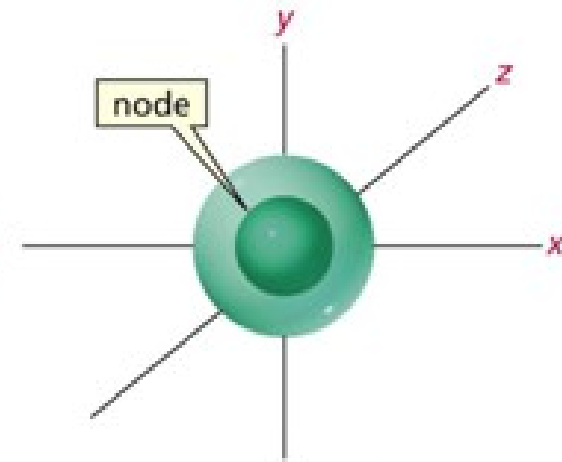
Đám mây s



1s atomic orbital



**2s atomic orbital
node not shown**



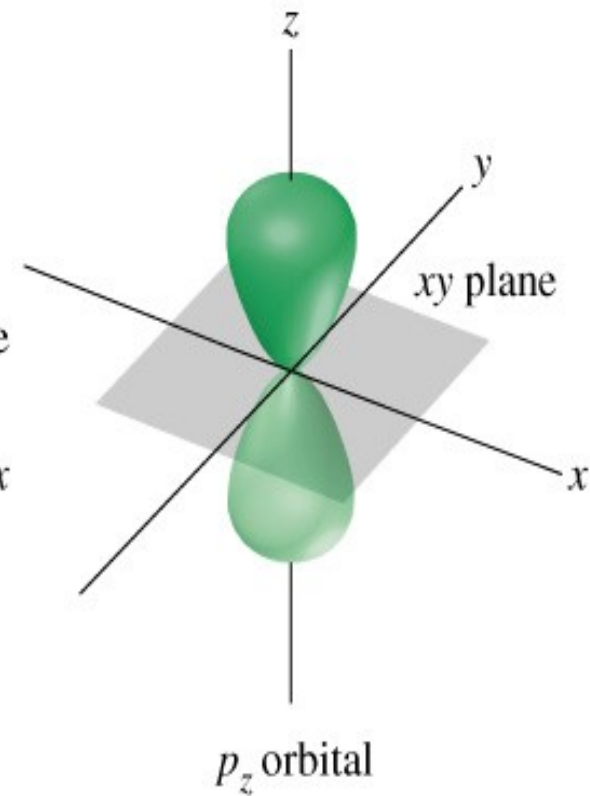
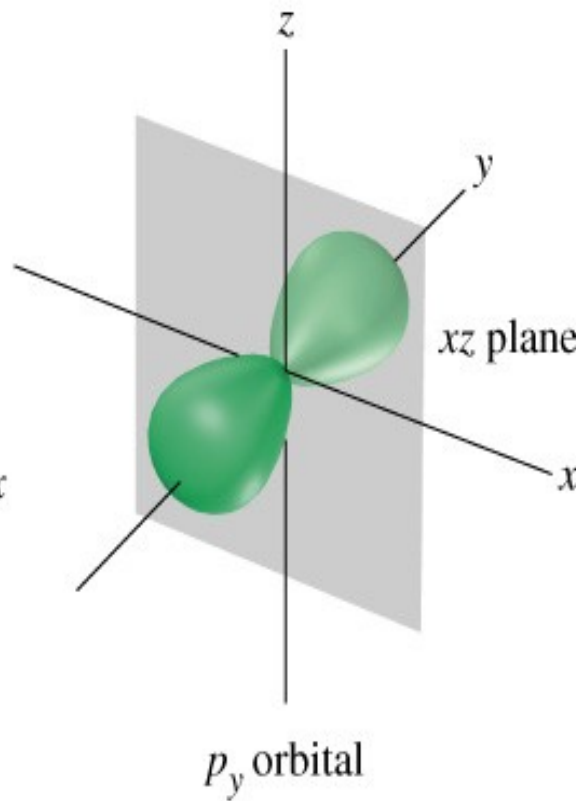
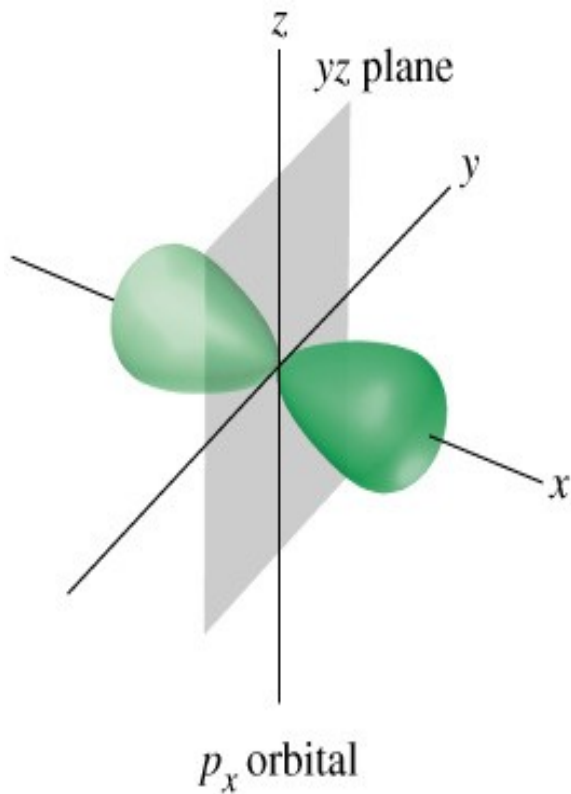
**2s atomic orbital
node shown**



2.5.2. Ý nghĩa của các số lượng tử



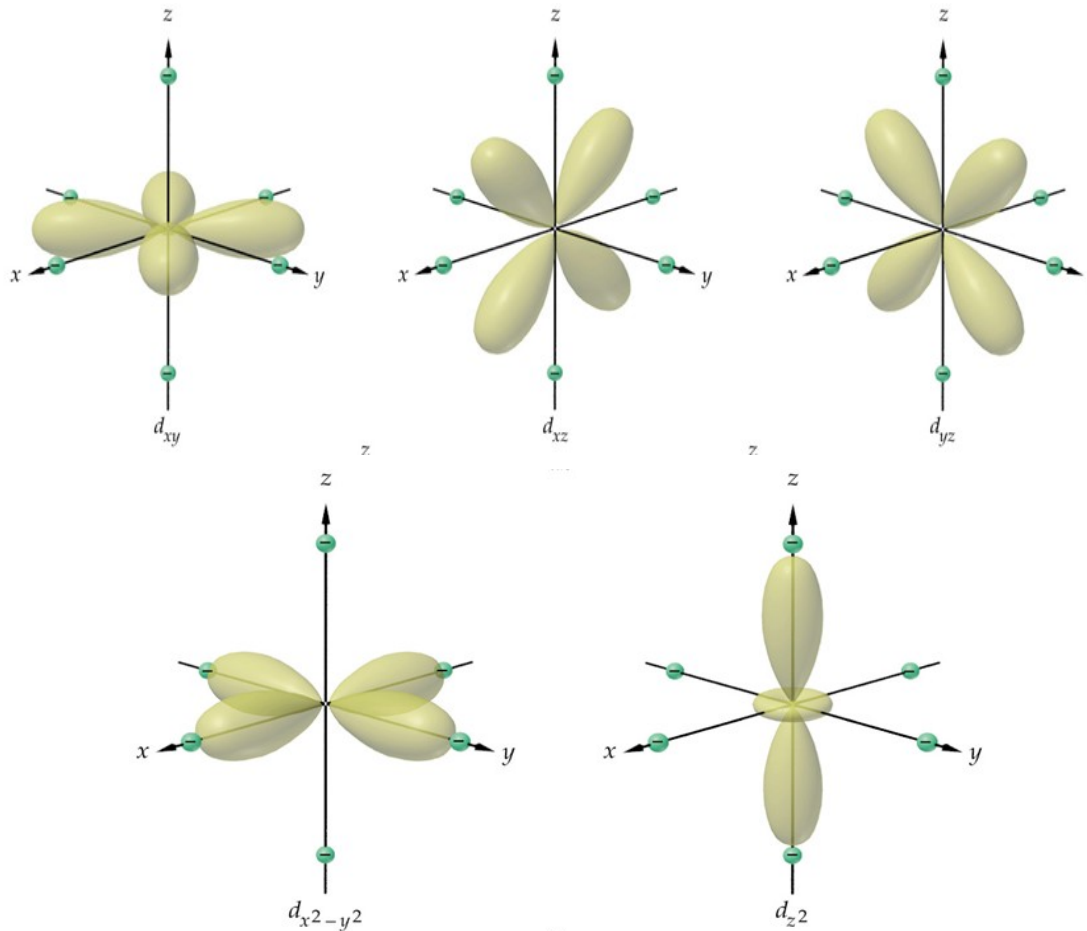
Đám mây 2p



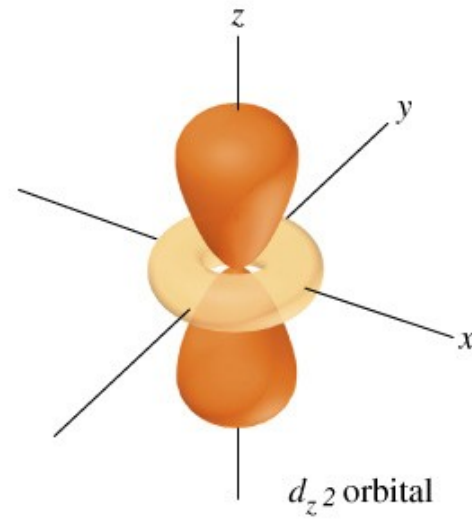
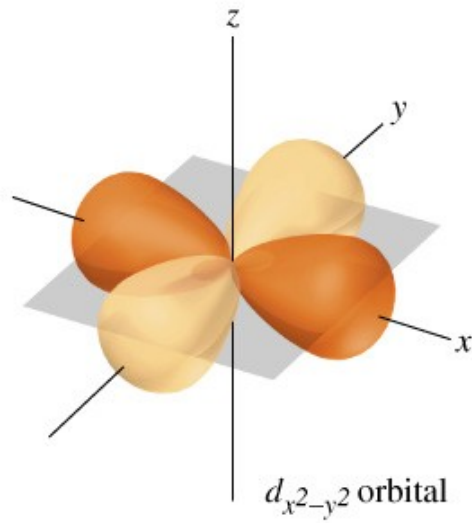
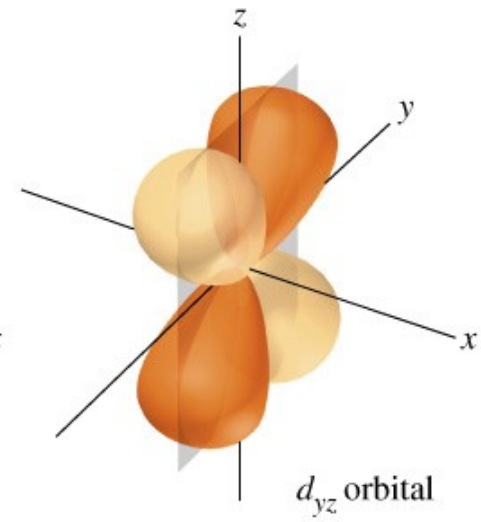
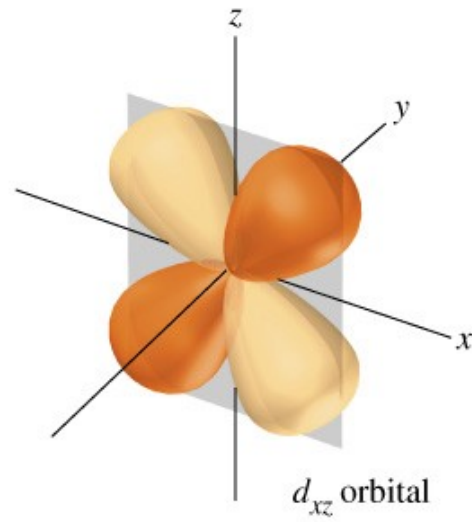
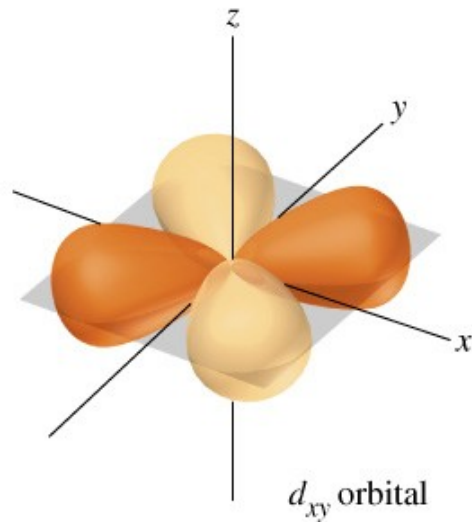
2.5.2. Ý nghĩa của các số lượng tử



Đám mây 3d

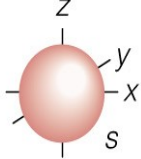
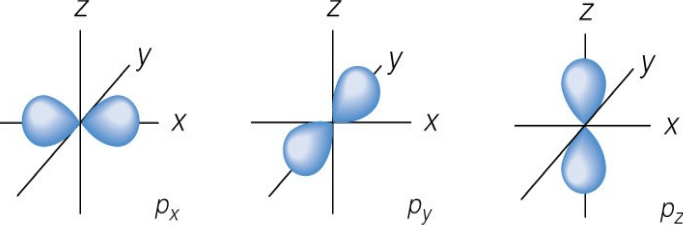
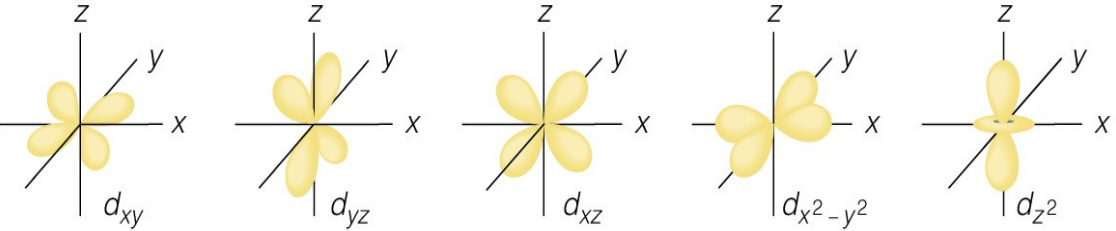


2.5.2. Ý nghĩa của các số lượng tử



2.5.2. Ý nghĩa của các số lượng tử



Sublevel	Orbital Shapes	Orbitals per Sublevel	Lobes per Orbital
s		1	1
p		3	2
d		5	4*
f	Seven complex shapes	7	8*

2.5.2. Ý nghĩa của các số lượng tử



b. Số lượng tử phụ (l)

$n = 1$ có 1 orbital s.

$n = 2$ có $2^2 = 4$ orbital = 1s + 3p

Các điện tử có cùng một giá trị l thì tạo thành một phân lớp năng lượng.

2.5.2. Ý nghĩa của các số lượng tử



c. Số lượng tử từ (m_l)

Số lượng tử từ m_l đặc trưng cho sự định hướng các orbital nguyên tử trong từ trường và quyết định số orbital có trong một phân lớp.

- Các orbital trong một phân lớp

$$m_l = \pm \ell \quad \text{kể cả giá trị } 0 \rightarrow (2\ell + 1) \text{ orbital}$$

2.5.2. Ý nghĩa của các số lượng tử

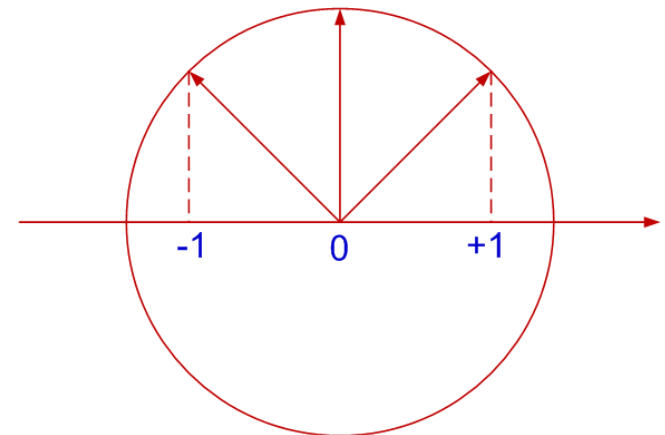


c. Số lượng tử từ (m)

- Hình chiếu của momen động lượng

$$M_z = m \frac{h}{2\pi}$$

Số lượng tử từ xác định hình chiếu của momen động lượng trên một phương z của tử trường ngoài



Hình chiếu momen động lượng M_z của các electron P ($\ell = 1$)

2.5.2. Ý nghĩa của các số lượng tử



d. Số lượng tử từ spin (m_s)

- Chuyển động quay quanh trục
→ Chuyển động spin
- Momen động lượng spin

$$\overline{M}_s = \sqrt{s(s+1)} \frac{h}{2\pi}$$

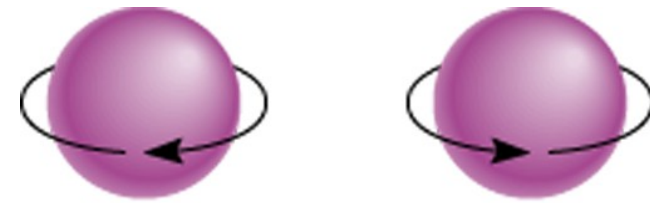
$s = 1/2$: số lượng tử spin

- Hình chiếu momen động lượng spin

$$M_{sz} = m_s \frac{h}{2\pi}$$

$m_s = +1/2$: “e” tự quay xung quanh trục của mình theo chiều kim đồng hồ

$m_s = -1/2$: “e” tự quay xung quanh trục của mình theo chiều ngược kim đồng hồ



$$m = +1/2$$

$$m = -1/2$$

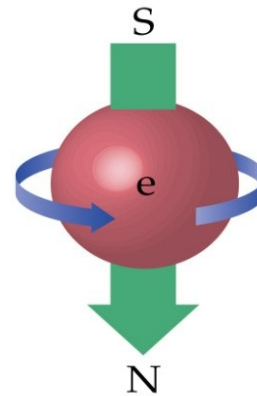
2.5.2. Ý nghĩa của các số lượng tử



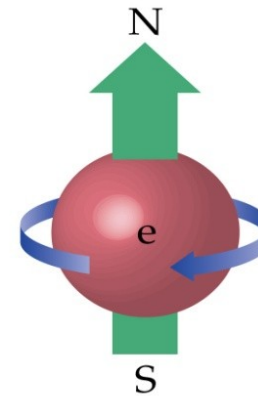
d. Số lượng tử spin (m_s)

$m_s = +1/2$ khi quay cùng
chiều với từ trường ngoài

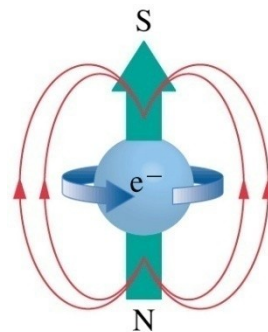
$m_s = -1/2$ khi quay ngược
chiều với từ trường ngoài



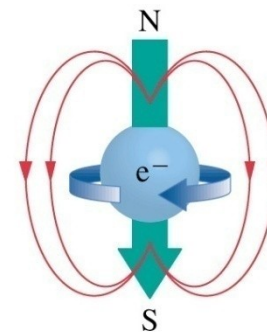
$$m_s = +\frac{1}{2}$$



$$m_s = -\frac{1}{2}$$



$$m_s = +\frac{1}{2}$$



$$m_s = -\frac{1}{2}$$

2.5.2. Ý nghĩa của các số lượng tử



Toùm tắt

n	l	Orbita l	ml	ms	Soá orbital ng/tôu	e toái ña
1	0	1s	0	+1/2 , -1/2	<input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/>	2
2	0 1	2s 2p	0 -1, 0, +1	+1/2 , -1/2	<input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/>	2 6
3	0 1 2	3s 3p 3d	0 -1, 0, +1 -2, -1, 0, +1, +2	+1/2 , -1/2	<input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/>	2 6 10
4	0 1 2 3	4s 4p 4d 4f	0 -1, 0, +1 -2, -1, 0, +1, +2 -3, -2, -1, 0, +1, +2, +3	+1/2 , -1/2	<input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/>	2 6 10 14

2.5. 3. Cấu hình electron nguyên tử



❖ Hiệu ứng chắn và xâm nhập

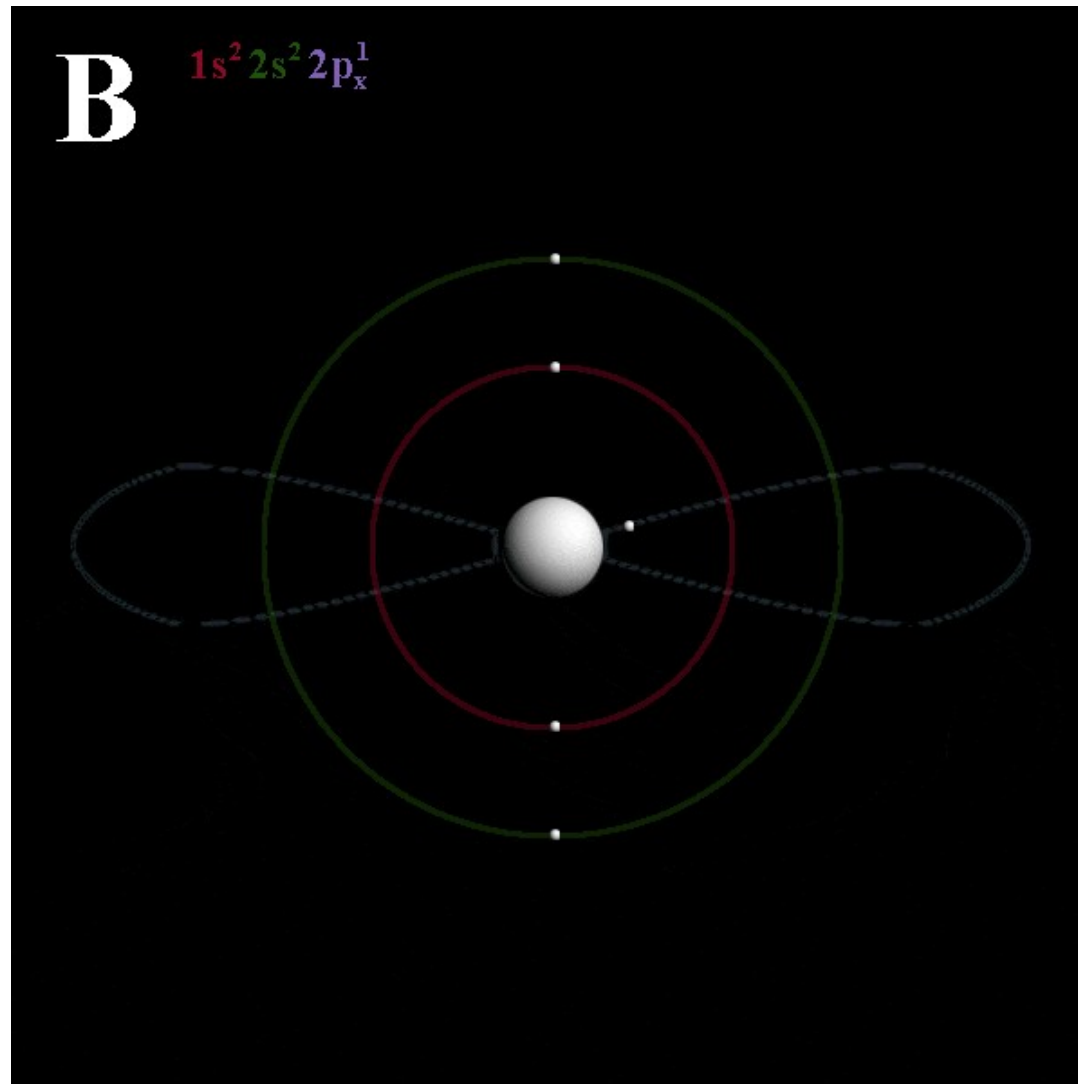
- Đối với nguyên tử chỉ có một điện tử thì chỉ có một lực tương tác giữa hạt nhân mang điện tích dương và điện tử mang điện tích âm.
- Với những nguyên tử có nhiều điện tử thì mỗi điện tử trong nguyên tử chịu tác dụng đồng thời của hạt nhân nguyên tử và của các điện tử còn lại.
 - Sự tương tác đẩy giữa các điện tử làm giảm lực hút giữa hạt nhân với điện tử. → Lực tác dụng của hạt nhân lên electron giảm đi:

$$\text{Điện tích hiệu dụng : } Z^* = Z - \sigma$$

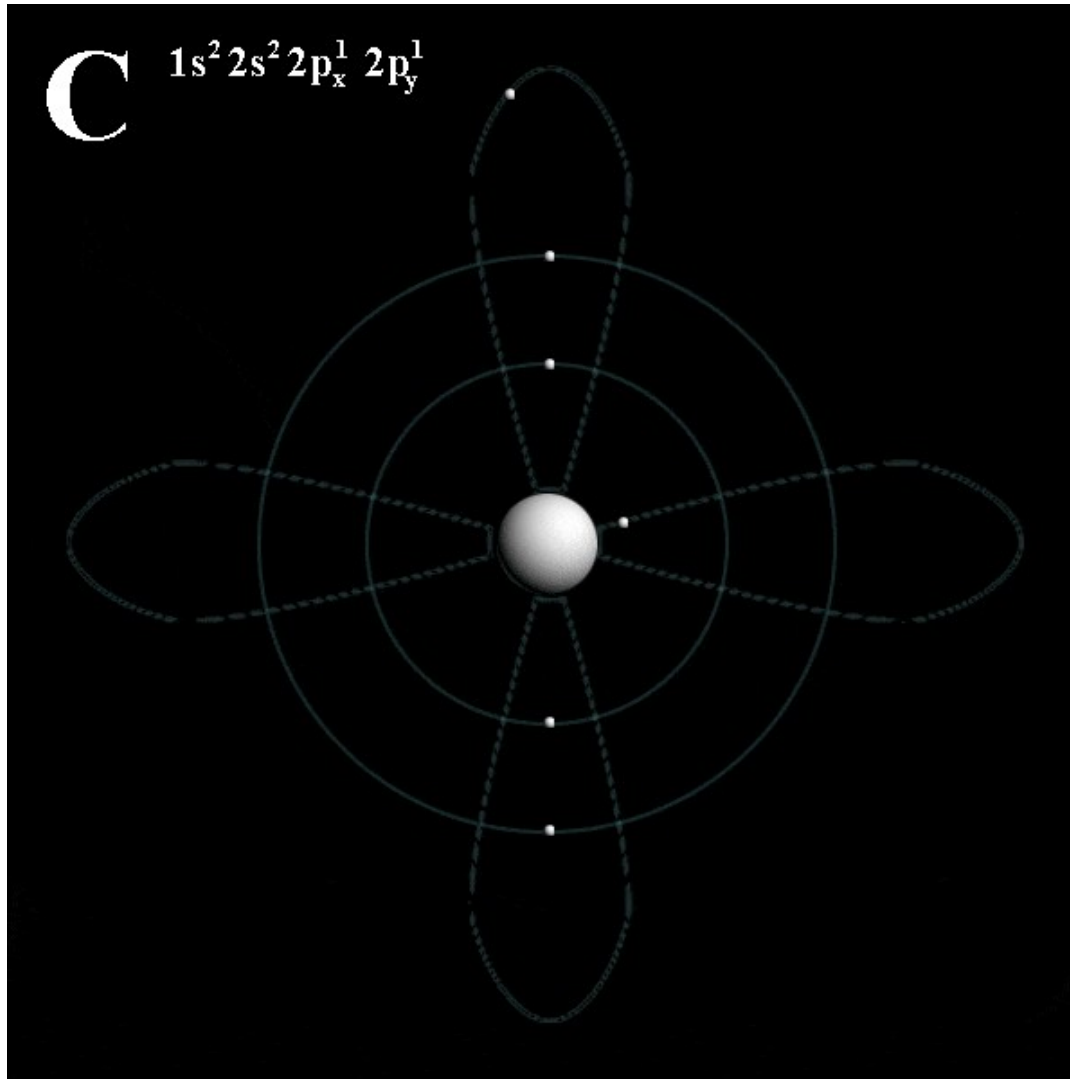
σ - Hiệu ứng chắn.

- Các điện tử bên ngoài cũng có thể xâm nhập vào mức năng lượng bên trong gần hạt nhân. Hiện tượng này gọi là **hiệu ứng xâm nhập**

2.5. 3. Cấu hình electron nguyên tử



2.5. 3. Cấu hình electron nguyên tử



2.5. 3. Cấu hình electron nguyên tử



❖ Quy tắc sắp xếp các điện tử trong nguyên tử

Nguyên lý bền vững

Trong một nguyên tử các electron chiếm cứ lần lượt các orbital có năng lượng từ thấp đến cao

2.5. 3. Cấu hình electron nguyên tử



❖ Quy tắc sắp xếp các điện tử trong nguyên tử

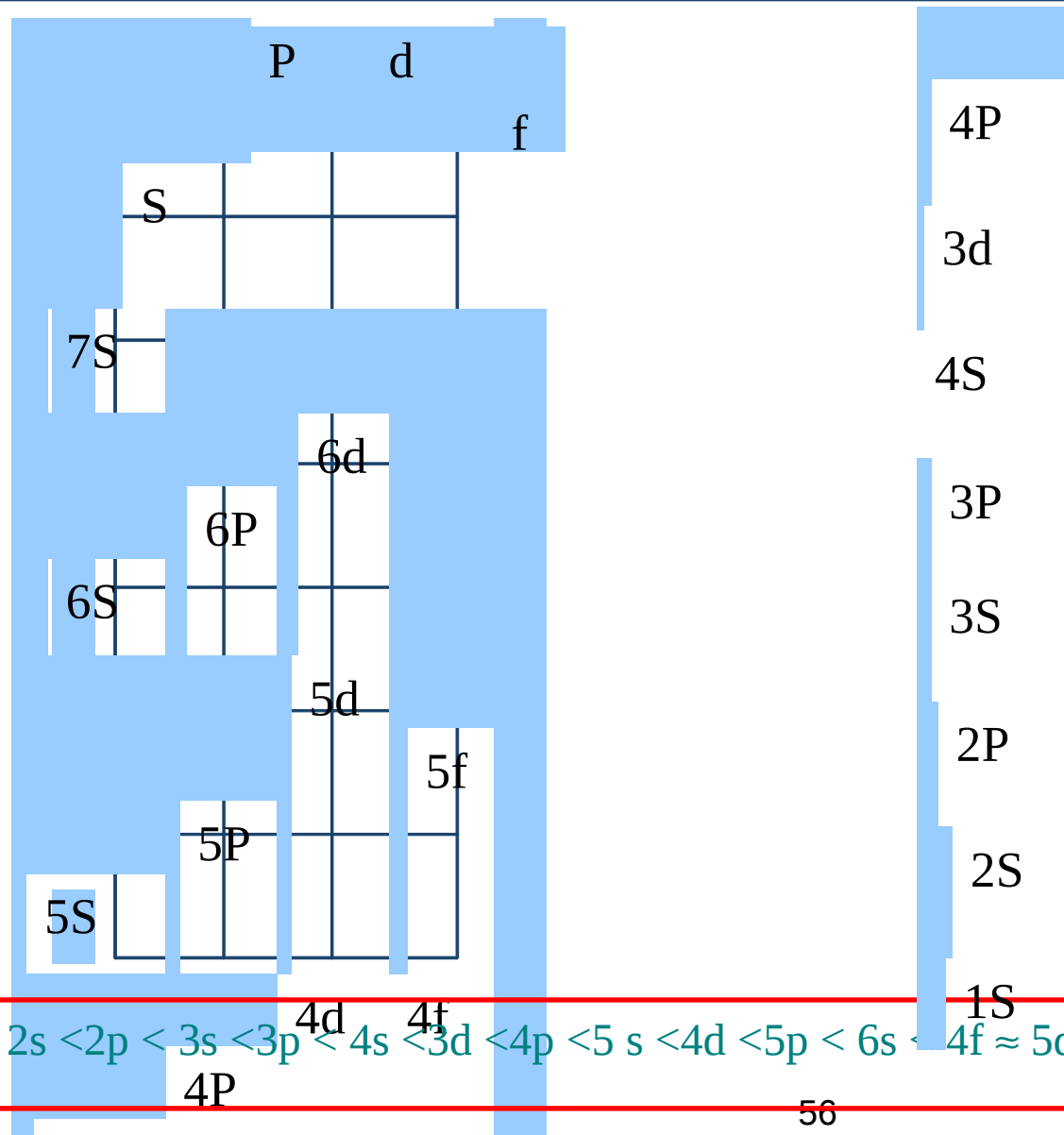
Quy tắc 1 (Klechkovski)

Năng lượng các điện tử phụ thuộc vào tổng giá trị của $(n + l)$.
Giá trị $(n + l)$ càng lớn thì năng lượng điện tử càng cao.

Các điện tử được xếp vào lớp vỏ nguyên tử theo thứ tự tăng dần của mức năng lượng $(n + l)$.

Nếu giá trị $(n + l)$ bằng nhau thì xếp theo thứ tự tăng dần của n .

Sự phân bố các electron trong nguyên tử



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

2.5. 3. Cấu hình electron nguyên tử



❖ Qui tắc sắp xếp các điện tử trong nguyên tử

Ví dụ : nguyên tử Ti ($Z= 22$)

Cấu hình :

2.5. 3. Cấu hình electron nguyên tử



Quy tắc 2 (nguyên lý ngoại trừ của Pauli)

Trong nguyên tử không thể có hai điện tử có bốn số lượng tử n , l , m_l , m_s giống nhau.

Mức năng lượng n	Số lượng tử l	Số lượng tử từ m	Số orbital tương ứng	Số điện tử xếp được tối đa	Ký hiệu điện tử theo các phân lớp
1	0	0	1	2	1s
2	0 1	0 -1, 0, +1	1 3	2 6	2s 2p
3	0 1 2	0 -1, 0, +1 -2, -1, 0, +1, +2	1 3 5	2 6 10	3s 3p 3d
4	0 1 2 3	0 -1, 0, +1 -2, -1, 0, +1, +2 -3, -2, -1, 0, +1, +2, +3	1 3 5 7	2 6 10 14	4s 4p 4d 4f

2.5. 3. Cấu hình electron nguyên tử



Quy tắc 3: quy tắc HUND

Trong một phân lớp điện tử thì các điện tử được sắp xếp trên các orbital thế nào cho số các điện tử độc thân với số lượng tử m_s cùng dấu là lớn nhất.

