

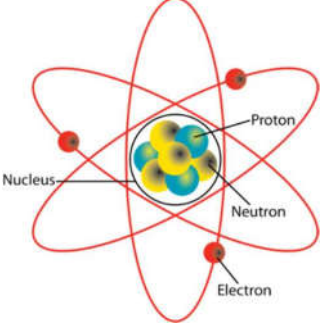
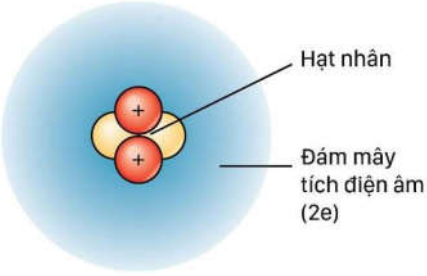
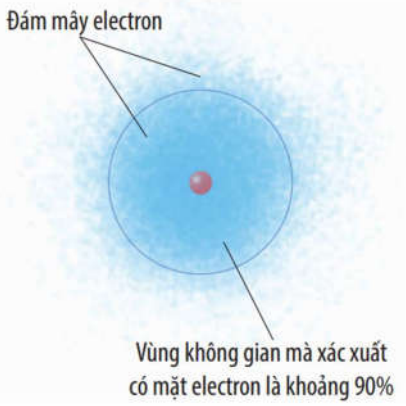
Bài 3: CẤU TRÚC LỚP VỎ ELECTRON CỦA NGUYÊN TỬ

NỘI DUNG

I. Sự chuyển động của electron trong nguyên tử

1. Tìm hiểu sự chuyển động của electron trong nguyên tử

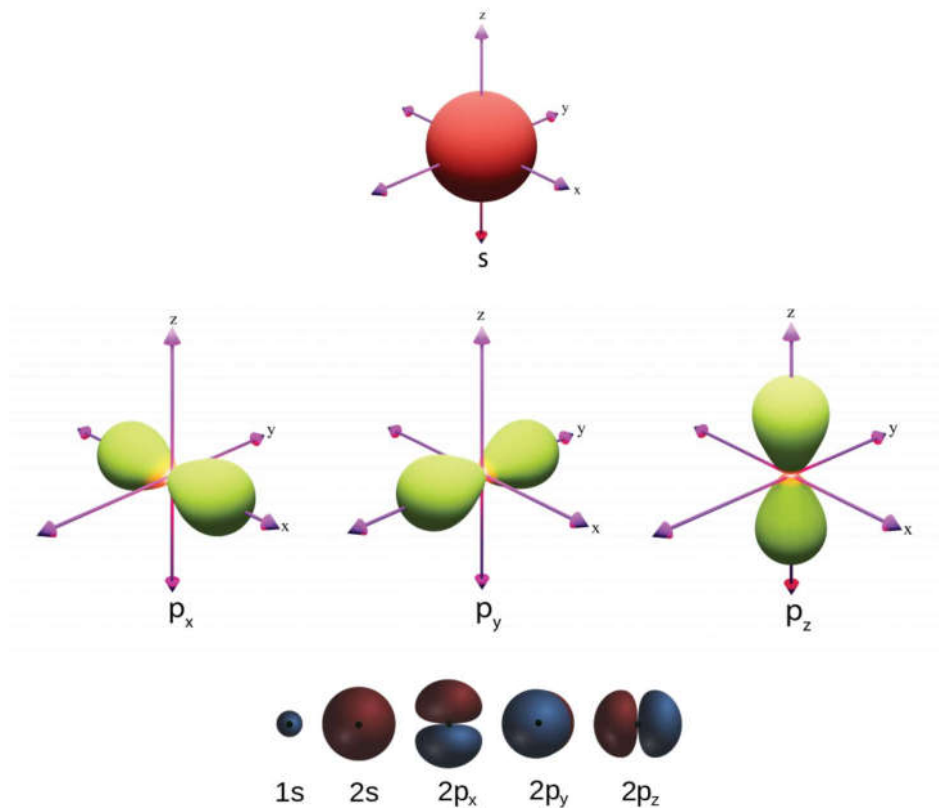
Bảng. So sánh mô hình chuyển động electron trong nguyên tử

	
Mô hình nguyên tử theo Rutherford – Bohr	Mô hình nguyên tử hiện đại
<p>Đặc điểm:</p> <p>⇒ Electron chuyển động xung quanh hạt nhân theo quỹ đạo tròn hay bầu dục, giống như quỹ đạo các hành tinh quay xung quanh Mặt Trời.</p>	<p>Đặc điểm</p> <p>⇒ Electron chuyển động rất nhanh, quanh hạt nhân, không theo quỹ đạo xác định, tạo thành đám mây electron.</p>  <p>Đám mây electron</p> <p>Vùng không gian mà xác suất có mặt electron là khoảng 90%</p> <p>⇒ Vùng không quanh hạt nhân mà tại đó xác suất tìm thấy (có mặt electron) khoảng 90% gọi là orbital nguyên tử kí hiệu là AO (Atomic Orbital).</p>

2. Tìm hiểu về orbital nguyên tử

Bảng. Hình dạng các orbital

Loại AO	Hình dạng
AO s	Hình cầu
AO p	Hình số 8 nổi được phân bố theo các trục của hệ tọa độ Descartes (Đề - các)
	AO p_x (Vị trí AO p phân bố trên trục Ox)
	AO p_y (Vị trí AO p phân bố trên trục Oy)
AO p_z (Vị trí AO p phân bố trên trục Oz)	
AO d, f	Có hình dạng phức tạp.



Hình. Hình dạng của các orbital s và p

3. Ô orbital

Một AO được biểu diễn bằng một ô vuông, gọi là ô orbital

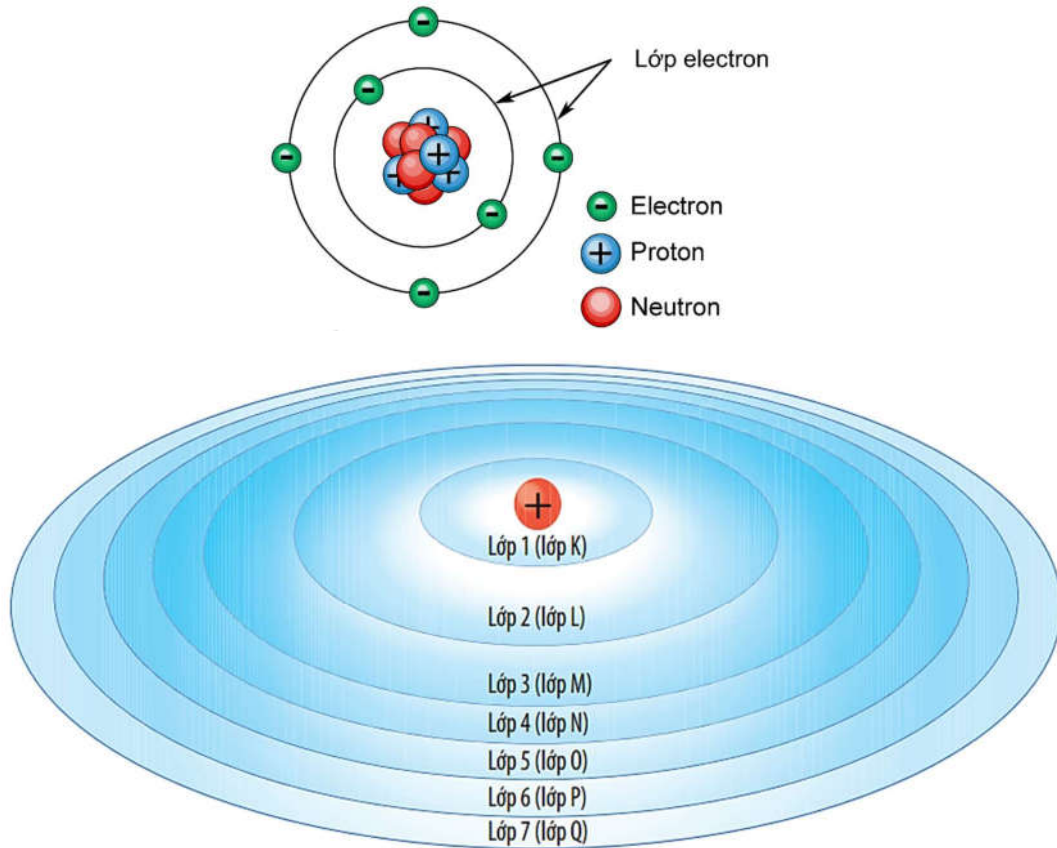
Một AO chứa tối đa 2 electron \Rightarrow 2 electron này gọi là cặp electron ghép đôi.

Nếu AO chứa 1 electron \Rightarrow 1 electron này gọi là electron độc thân.

Nếu AO không chứa electron nào \Rightarrow gọi là AO trống.

II. Lớp và phân lớp electron

1. Tìm hiểu lớp electron



Hình. Minh họa các lớp electron ở vỏ nguyên tử

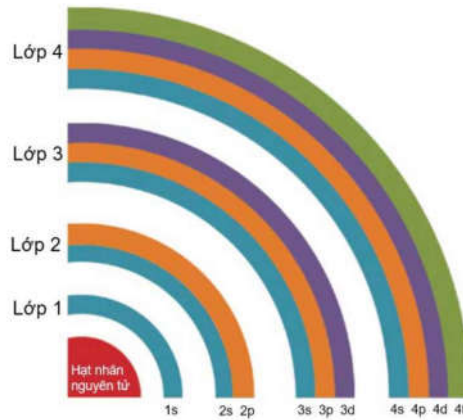
Đặc điểm:

- Trong nguyên tử, các electron được sắp xếp thành từng lớp (kí hiệu K, L, M, N, O, P, Q) từ gần đến xa hạt nhân, theo thứ tự từ lớp $n = 1$ đến $n = 7$.
- Các electron trên cùng một lớp có **năng lượng gần bằng nhau**.
- Lớp e càng gần hạt nhân có năng lượng càng thấp \Rightarrow lớp K có năng lượng thấp nhất (e ở lớp này bị giữ chặt nhất).

2. Tìm hiểu phân lớp electron

Đặc điểm

- Mỗi lớp electron phân chia thành các phân lớp, kí hiệu bằng các chữ cái viết thường: s, p, d, f (theo thứ tự năng lượng: $s < p < d < f$).
- Các electron thuộc các phân lớp s, p, d và f được gọi tương ứng là các electron s, p, d và f.
- Các electron trên cùng một phân lớp có **năng lượng bằng nhau**.



Hình. Kí hiệu một số lớp và phân lớp electron trong nguyên tử

- Lớp thứ n thì có n phân lớp và kí hiệu là $ns, np, nd, nf...$

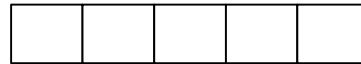
Phân lớp s có 1 AO



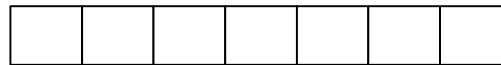
Phân lớp p có 3AO



Phân lớp d có 5AO



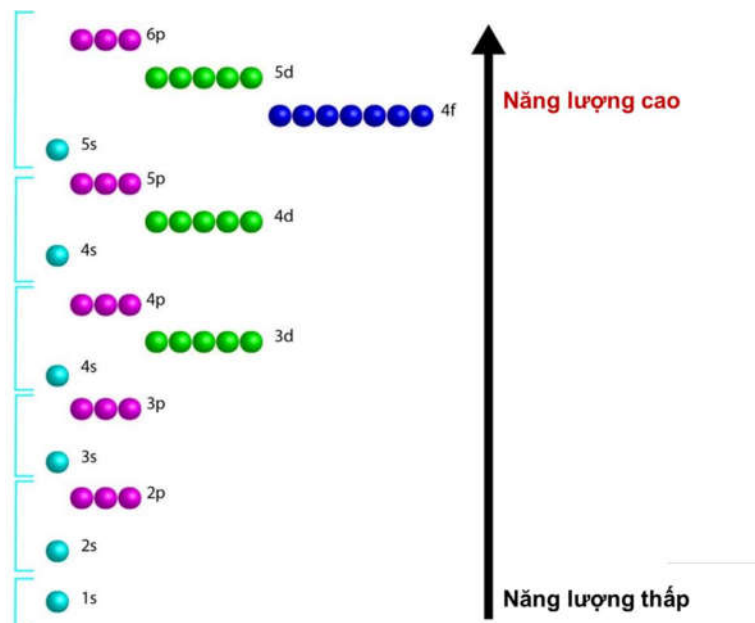
Phân lớp f có 7AO

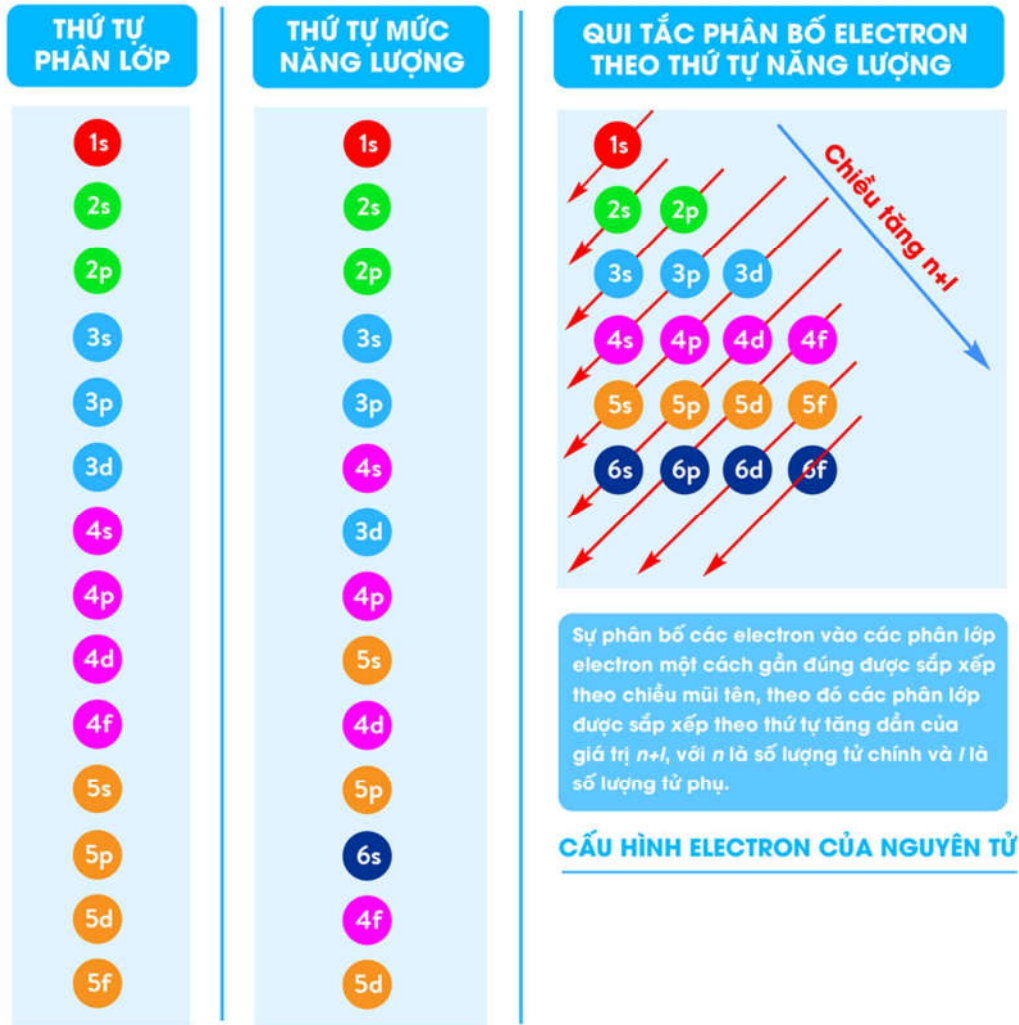


- Với 4 lớp đầu (1, 2, 3, 4) số phân lớp trong mỗi lớp bằng số thứ tự của lớp đó.

III. Cấu hình electron nguyên tử

1. Nguyên lí bền vững



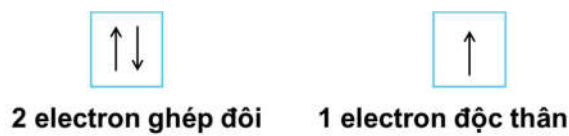


Hình. Mối quan hệ về mức năng lượng của các orbital trong những phân lớp khác nhau

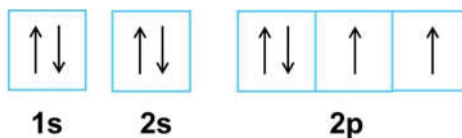
Nguyên lí:

Ở trạng thái cơ bản, các electron trong nguyên tử chiếm lần lượt những orbital có mức năng lượng từ thấp đến cao: 1s 2s 2p 3s 3p 4s 3d 4p 5s 4d 5p ..

2. Tìm hiểu nguyên lí Pauli (Pau-li)



Hình. Electron ghép đôi và electron độc thân



Hình. Sự sắp xếp electron trên các orbital của nguyên tử oxygen

Nguyên lí Pauli: Mỗi orbital chỉ chứa **tối đa 2 electron** và có chiều tự quay **ngược nhau**.

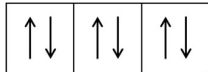
3. Xác định số AO và số electron tối đa trong một phân lớp và trong mỗi lớp

Bảng. Tổng kết số AO, số e tối đa trên lớp và phân lớp

Lớp (n)	K (n = 1)	L (n = 2)	M (n = 3)	N (n = 4)
Số phân lớp	1 (1s)	2 (2s2p)	3 (3s3p3d)	4 (4s4p4d4f)
Số AO = n^2 ($n \leq 4$)	1	4	9	16
Số e tối đa = $2n^2$ ($n \leq 4$)	2	8	18	32

4. Tìm hiểu quy tắc Hund (Hun)

- * Số e tối đa trên mỗi phân lớp: s^2, p^6, d^{10}, f^{14} → phân lớp **bão hòa**.
- * Phân lớp chứa một nửa số electron tối đa: s^1, p^3, d^5, f^7 → phân lớp **bán bão hòa**.
- * Phân lớp chứa chưa đủ số electron tối đa: p^4, d^7, f^9, \dots → phân lớp **chưa bão hòa**.



Phân lớp bão hòa



Phân lớp bán bão hòa



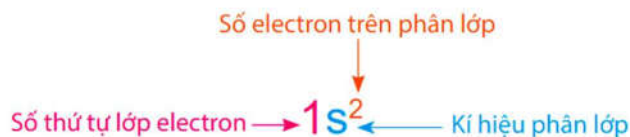
Phân lớp chưa bão hòa

Quy tắc Hund:

Trong cùng một phân lớp chưa bão hòa, các electron sẽ phân bố vào các orbital sao cho **số electron độc thân là tối đa**.

5. Tìm hiểu cách viết cấu hình electron nguyên tử

Cấu hình electron nguyên tử biểu diễn sự phân bố electron trong vỏ nguyên tử trên các phân lớp thuộc các lớp khác nhau.



Cách viết cấu hình electron:

Bước 1: Xác định số electron của nguyên tử.

Bước 2: Các electron được phân bố theo thứ tự các AO có mức năng lượng tăng dần, theo các nguyên lí và quy tắc phân bố electron trong nguyên tử.

Bước 3: Viết cấu hình electron theo thứ tự các phân lớp trong một lớp và theo thứ tự của các lớp electron.

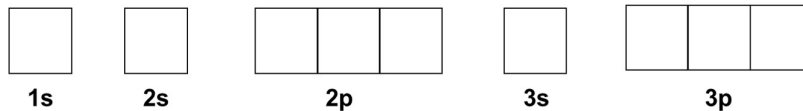
Trước tiên xác định số e (Z) cần viết

<p>* $Z \leq 20$: viết 1 dòng Điền các e theo thứ tự: $1s2s2p3s3p4s$ (trước phân lớp cuối thì điền s^2, p^6, phân lớp cuối còn lại bao nhiêu e thì điền bấy nhiêu e).</p>	<p>* $Z > 20$: viết 2 dòng - Năng lượng: $1s2s2p3s3p4s3d4p5s\dots$ - Cấu hình e: $1s2s2p3s3p3d4s4p5s\dots$ Lưu ý: - $d^4 \rightarrow d^5$ (bán bão hòa sóm) lấy 1e của 4s - $d^9 \rightarrow d^{10}$ (bão hòa sóm) lấy 1e của 4s</p>
--	--

6. Biểu diễn cấu hình electron theo ô orbital

⇒ **Biết được số e độc thân.**

- Viết cấu hình electron nguyên tử.
- Biểu diễn mỗi AO là một ô vuông, các AO cùng một phân lớp viết liền nhau, các AO khác phân lớp viết tách nhau.



- Mỗi một e biểu diễn bằng một mũi tên và điền từ trái sang phải và theo yêu cầu:
 - Trong 1AO e đầu tiên biểu diễn bằng mũi tên quay lên.
 - 1 AO chứa tối đa 2 electron có chiều ngược nhau (Nguyên lí Pauli).
 - Trong mỗi phân lớp e được phân bố sao cho số e độc thân là tối đa (Quy tắc Hund).

Ví dụ: Cho các nguyên tố Sulfur (S) ($Z=16$); Iron (Fe) ($Z=26$); Chromium (Cr) ($Z=24$); Copper (Cu) ($Z=29$).Viết cấu hình electron nguyên tử của các nguyên tố trên?

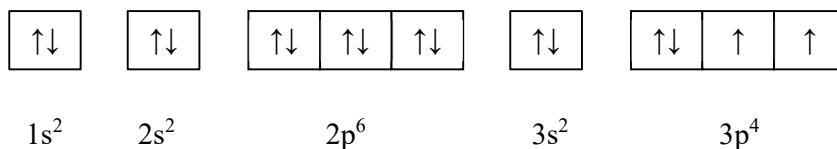
Biểu diễn cấu hình elctron theo ô orbital ?

Hướng dẫn giải

***Nguyên tố S ($Z = 16$) :**

- Cấu hình electron: $1s^22s^22p^63s^23p^4$ hoặc $[\text{Ne}] 3s^23p^4$

- Biểu diễn theo ô AO:

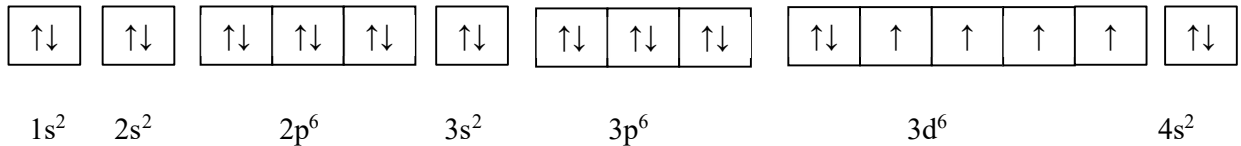


***Nguyên tố Fe ($Z = 26$):**

- Cấu hình electron: Năng lượng: $1s^22s^22p^63s^23p^64s^23d^6$ hoặc $[\text{Ar}]4s^23d^6$

Cấu hình e: $1s^22s^22p^63s^23p^63d^64s^2$ hoặc $[\text{Ar}]3d^64s^2$

- Biểu diễn theo ô AO:



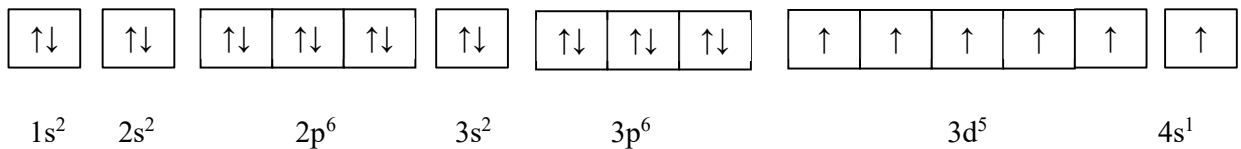
***Nguyên tố Cr (Z = 24):**

- Cấu hình electron: Năng lượng: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^4$ hoặc [Ar] $4s^2 3d^4$

Cấu hình e: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^1$ (bán bão hòa sóm) => bền.

Hoặc [Ar] $3d^5 4s^1$

- Biểu diễn theo ô AO:



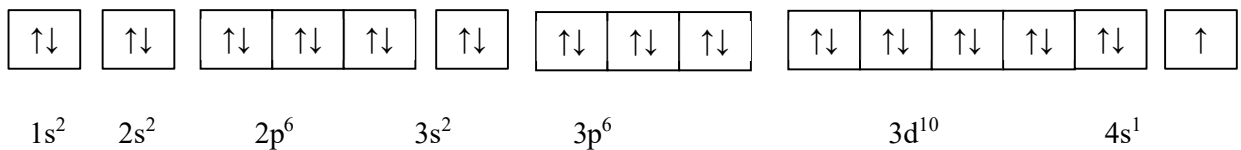
*** Nguyên tố Cu (Z = 29):**

- Cấu hình electron: Năng lượng: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^9$ hoặc [Ar] $4s^2 3d^9$

Cấu hình e: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^1$ (bão hòa sóm) => bền.

Hoặc [Ar] $3d^{10} 4s^1$

- Biểu diễn theo ô AO:



7. Đặc điểm lớp e ngoài cùng (theo cấu hình e)

⇒ Có thể chứa tối đa 8 e.

Số e lớp ngoài cùng	1, 2, 3 e	4e	5, 6, 7 e	8e (He 2e)
Loại nguyên tố	KL (trừ H, He, B).	KL hoặc PK	PK	Khí hiếm