

NĂNG LƯỢNG CỦA CÁC ELECTRON TRONG NGUYÊN TỬ CẤU HÌNH ELECTRON NGUYÊN TỬ

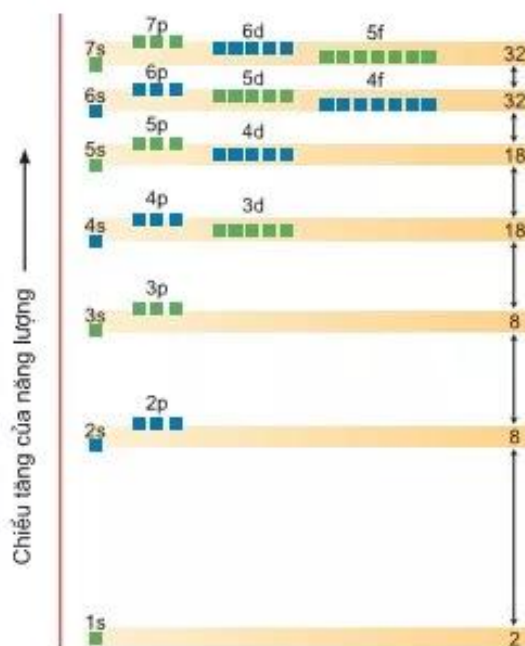
- Trong nguyên tử, các electron chiếm những mức năng lượng nào ? Trình tự sắp xếp các mức năng lượng này ra sao ?
- Việc phân bố các electron trong nguyên tử tuân theo những nguyên lí và quy tắc nào ?
- Cấu hình electron nguyên tử là gì ? Cách viết cấu hình electron nguyên tử như thế nào ?

I - NĂNG LƯỢNG CỦA ELECTRON TRONG NGUYÊN TỬ

1. Mức năng lượng obitan nguyên tử

Trong nguyên tử, các electron trên mỗi obitan có một mức năng lượng xác định. Người ta gọi mức năng lượng này là *mức năng lượng obitan nguyên tử* (mức năng lượng AO).

Các electron trên các obitan khác nhau của cùng một phân lớp có năng lượng như nhau. Thí dụ : Ứng với $n = 2$, ta có 2 phân lớp là 2s và 2p. Phân lớp 2s chỉ có một obitan 2s, còn phân lớp 2p có 3 obitan : $2p_x, 2p_y, 2p_z$. Các electron của các obitan p trong phân lớp này tuy có sự định hướng trong không gian khác nhau, nhưng chúng có cùng mức năng lượng AO.



2. Trật tự các mức năng lượng obitan nguyên tử

Thực nghiệm và lí thuyết cho thấy khi số hiệu nguyên tử Z tăng, các mức năng lượng AO tăng dần theo trình tự sau :

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

Hình 1.11. Mối quan hệ về mức năng lượng của các obitan trong những phân lớp khác nhau

Từ trình tự mức năng lượng AO trên cho thấy khi điện tích hạt nhân tăng có sự *chèn mức* năng lượng, mức 4s trở nên thấp hơn 3d, mức 5s thấp hơn 4d, 6s thấp hơn 4f, 5d,...

II - CÁC NGUYÊN LÝ VÀ QUY TẮC PHÂN BỐ ELECTRON TRONG NGUYÊN TỬ

Sự phân bố các electron trong nguyên tử tuân theo nguyên lý Pau-li, nguyên lý vững bền và quy tắc Hun (F.Hund).

1. Nguyên lý Pau-li

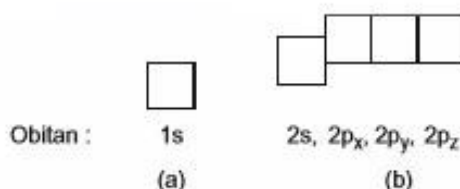
a) Ô lượng tử

Để biểu diễn obitan nguyên tử một cách đơn giản, người ta còn dùng ô vuông nhỏ, được gọi là *ô lượng tử*. Một ô lượng tử ứng với một AO.

Thí dụ : Ứng với $n = 1$ chỉ có một obitan 1s, ta vẽ một ô vuông. Ứng với $n = 2$ có một obitan 2s và ba obitan 2p ($2p_x$, $2p_y$ và $2p_z$), ta vẽ một ô vuông thuộc phân lớp 2s và ba ô vuông thuộc phân lớp 2p, ba ô vuông này được vẽ liền nhau, để chỉ rằng các obitan 2p có cùng mức năng lượng AO, nhưng cao hơn AO -2s (hình 1.12a và hình 1.12b).



Pau-li (Wolfgang Pauli)
(1900 - 1958)



Hình 1.12. Các ô lượng tử ứng với $n = 1$ và $n = 2$

b) Nguyên lý Pau-li

Trên một obitan chỉ có thể có nhiều nhất là hai electron và hai electron này chuyển động tự quay khác chiều nhau xung quanh trục riêng của mỗi electron.

Người ta biểu thị chiều tự quay khác nhau quanh trục riêng của hai electron bằng 2 mũi tên nhỏ : Một mũi tên có chiều đi lên, một mũi tên có chiều đi xuống. Trong một obitan đã có 2 electron, thì 2 electron đó gọi là electron ghép đôi (hình 1.13a). Khi obitan chỉ có một electron thì electron đó gọi là *electron độc thân* (hình 1.13b).

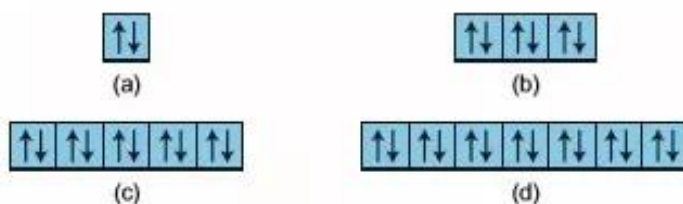


Hình 1.13. Electron ghép đôi và electron độc thân

c) Số electron tối đa trong một lớp và trong một phân lớp

– Số electron tối đa trong một lớp electron : Ta đã biết lớp n có n^2 obitan. Mỗi obitan theo nguyên lí Pau-li có tối đa 2 electron. Do đó : Lớp n có tối đa $2 n^2$ electron.

– Số electron tối đa trong một phân lớp electron : Cũng theo nguyên lí Pau-li, ta có thể biết được số electron tối đa trong một phân lớp. Phân lớp s chỉ có một obitan, vậy chỉ có tối đa 2 electron. Phân lớp p có 3 obitan nên có tối đa 6 electron, tương tự phân lớp d có tối đa 10 electron, phân lớp f có tối đa 14 electron. Ta có thể biểu diễn số electron tối đa trong các phân lớp bằng các ô lượng tử trên hình 1.14.



Hình 1.14. Số electron tối đa trong các phân lớp

(a) Phân lớp s ; (b) Phân lớp p ; (c) Phân lớp d ; (d) Phân lớp f.

Một cách khác, để biểu diễn trạng thái electron của obitan 1s chứa 2 electron ta dùng kí hiệu : $1s^2$. Ở đây, số 1 đứng bên trái chỉ lớp $n = 1$, chữ s chỉ obitan s, số 2 ở phía trên bên phải chỉ số electron có chứa trong obitan 1s. Giả sử phân lớp 2p có 6 electron, ta viết : $2p^6$.

Các phân lớp : s^2, p^6, d^{10}, f^{14} có đủ số electron tối đa gọi là *phân lớp bão hoà*. Còn phân lớp chưa đủ số electron tối đa gọi là *phân lớp chưa bão hoà*. Thí dụ các phân lớp $s^1, p^3, d^7, f^{12}, \dots$

2. Nguyên lí vững bền

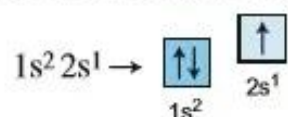
Ở trạng thái cơ bản, trong nguyên tử các electron chiếm lần lượt những obitan có mức năng lượng từ thấp đến cao.

Thí dụ :

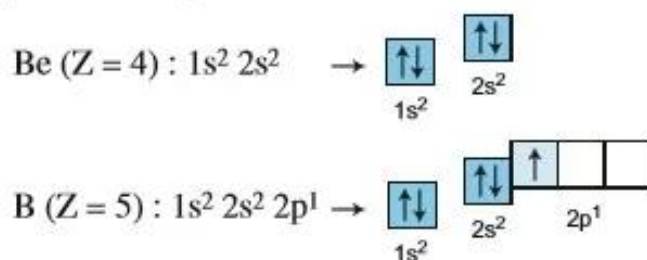
Nguyên tử hidro ($Z = 1$) có 1 electron, electron này sẽ chiếm obitan $1s$ (AO- $1s$) có mức năng lượng thấp nhất. Do đó có thể biểu diễn sự phân bố electron của nguyên tử hidro là : $1s^1$; Biểu diễn bằng ô lượng tử là $\boxed{\uparrow}$

Nguyên tử heli ($Z = 2$) có 2 electron. Theo nguyên lí Pau-li, hai electron này cùng chiếm obitan $1s$ có mức năng lượng thấp nhất. Bởi vậy sự phân bố electron trên obitan của heli là $1s^2 \rightarrow \boxed{\uparrow\downarrow}$

Nguyên tử liti ($Z = 3$) có 3 electron, 2 electron trước chiếm obitan $1s$ và đã bão hoà, electron còn lại chiếm obitan $2s$ tiếp theo có mức năng lượng cao hơn. Do đó sự phân bố electron trên các obitan của liti là :



Một cách tương tự, ta có thể viết được sự phân bố electron trên các obitan của các nguyên tố tiếp theo. *Thí dụ :*



Tuy nhiên, không nhất thiết lúc nào cũng phải biểu diễn các AO- $2p$ phải cao hơn AO- $2s$, ... vì sẽ công kênh. Người ta chỉ biểu diễn sự cao, thấp của các ô lượng tử khi cần thể hiện mức năng lượng khác nhau của từng phân lớp electron.

3. Quy tắc Hun

Trong cùng một phân lớp, các electron sẽ phân bố trên các obitan sao cho số electron độc thân là tối đa và các electron này phải có chiều tự quay giống nhau.

Thí dụ sự phân bố electron trên các obitan của nguyên tử cacbon, nitơ như sau :



Các electron độc thân trong một nguyên tử được kí hiệu bằng các mũi tên cùng chiều, thường được viết hướng lên trên.

III - CẤU HÌNH ELECTRON NGUYÊN TỬ

1. Cấu hình electron nguyên tử

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

Quy ước cách viết cấu hình electron nguyên tử :

- Số thứ tự lớp electron được viết bằng các chữ số (1, 2, 3, ...)
- Phân lớp được kí hiệu bằng chữ cái thường (s, p, d, f).
- Số electron được ghi bằng chỉ số ở phía trên, bên phải kí hiệu của phân lớp (s^2 , p^2 , ...).

Cách viết cấu hình electron nguyên tử :

- Xác định số electron của nguyên tử.
- Các electron được phân bố theo thứ tự tăng dần các mức năng lượng AO, theo các nguyên lí và quy tắc phân bố electron trong nguyên tử.
- Viết cấu hình electron theo thứ tự các phân lớp trong một lớp và theo thứ tự của các lớp electron.

Thí dụ :

Na ($Z = 11$) có 11 electron. Cấu hình electron của Na như sau : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$

Fe ($Z = 26$) có 26 electron. Do có sự chèn mức năng lượng, các electron được phân bố như sau : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^6$

Sau đó phải sắp xếp các phân lớp theo từng lớp : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^6 4s^2$

Hoặc viết gọn là : $[Ar] 3d^6 4s^2$.

[Ar] là kí hiệu cấu hình electron nguyên tử của nguyên tố argon, là khí hiếm gần nhất đứng trước Fe.

2. Cấu hình electron nguyên tử của một số nguyên tố

Dựa vào các nguyên lí và quy tắc nêu ở trên ta có thể xây dựng cấu hình electron nguyên tử của các nguyên tố khác. Dưới đây là cấu hình electron nguyên tử của 20 nguyên tố đầu tiên trong bảng tuần hoàn (bảng 1.2).

Bảng 1.2**Cấu hình electron nguyên tử của 20 nguyên tố đầu tiên trong bảng tuần hoàn**

Z	Nguyên tử	Cấu hình electron	Cấu hình electron viết dưới dạng ô lượng tử
1	H	$1s^1$	
2	He	$1s^2$	
3	Li	$1s^2 2s^1$	
4	Be	$1s^2 2s^2$	
5	B	$1s^2 2s^2 2p^1$	
6	C	$1s^2 2s^2 2p^2$	
7	N	$1s^2 2s^2 2p^3$	
8	O	$1s^2 2s^2 2p^4$	
9	F	$1s^2 2s^2 2p^5$	
10	Ne	$1s^2 2s^2 2p^6$	
11	Na	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$	
12	Mg	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$	
13	Al	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$	
14	Si	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$	
15	P	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3$	
16	S	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$	
17	Cl	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$	
18	Ar	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$	
19	K	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1$	
20	Ca	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2$	

3. Đặc điểm của lớp electron ngoài cùng

Các electron ở lớp ngoài cùng quyết định tính chất hoá học của một nguyên tố.

- Đối với nguyên tử của các nguyên tố, số electron lớp ngoài cùng tối đa là 8. Các nguyên tử có 8 electron lớp ngoài cùng đều rất bền vững, chúng hầu như không tham gia vào các phản ứng hoá học. Đó là các nguyên tử khí hiếm (trừ He có số electron lớp ngoài cùng là 2).
- Các nguyên tử có 1, 2, 3 electron ở lớp ngoài cùng là các nguyên tử kim loại (trừ H, He và B).
- Các nguyên tử có 5, 6, 7 electron ở lớp ngoài cùng thường là các nguyên tử phi kim.
- Các nguyên tử có 4 electron ở lớp ngoài cùng có thể là nguyên tử kim loại hay phi kim.

BÀI TẬP

- Hãy ghép cấu hình electron ở trạng thái cơ bản với nguyên tử thích hợp

Cấu hình electron	Nguyên tử
A. $1s^22s^22p^5$	a. Cl
B. $1s^22s^22p^4$	b. S
C. $1s^22s^22p^63s^23p^4$	c. O
D. $1s^22s^22p^63s^23p^5$	d. F

- Sự phân bố electron trong nguyên tử tuân theo những nguyên lí và quy tắc gì ? Hãy phát biểu các nguyên lí và quy tắc đó. Lấy thí dụ minh hoạ.
- Tại sao trong sơ đồ phân bố electron của nguyên tử cacbon (C : $1s^22s^22p^2$), phân lớp 2p lại biểu diễn như sau :

↑	↑	
---	---	--

.
- Hãy viết cấu hình electron của các nguyên tử có $Z = 20$, $Z = 21$, $Z = 22$, $Z = 24$, $Z = 29$ và cho nhận xét cấu hình electron của các nguyên tử đó khác nhau thế nào ?
- Hãy cho biết số electron lớp ngoài cùng của các nguyên tử H, Li, Na, K, Ca, Mg, C, Si, O.
- Cấu hình electron nguyên tử của các nguyên tố K ($Z = 19$) và Ca ($Z = 20$) có đặc điểm gì ?
- Viết cấu hình electron của F ($Z = 9$), Cl ($Z = 17$) và cho biết khi nguyên tử của chúng nhận thêm 1 electron thì lớp electron ngoài cùng có đặc điểm gì.