

1. Cấu hình electron của nguyên tử các nguyên tố khí hiếm

Các nguyên tố khí hiếm (hay khí trơ) thuộc nhóm VIIIA trong bảng tuần hoàn. Chúng hầu như không tham gia vào các phản ứng hóa học ở điều kiện thường. Sự trơ về mặt hóa học này được giải thích bởi cấu trúc electron đặc biệt bền vững của chúng.

Đặc điểm lớp electron ngoài cùng

Đặc điểm chung và quan trọng nhất của các nguyên tố khí hiếm là chúng đều có lớp electron ngoài cùng đã bão hòa.

- **Cấu trúc chung:** Hầu hết các khí hiếm (Ne, Ar, Kr, Xe, Rn) đều có **8 electron** ở lớp ngoài cùng, với cấu hình chung là **ns^2np^6** .
- **Trường hợp đặc biệt:** Nguyên tố Helium (He) chỉ có một lớp electron duy nhất (lớp $n=1$) và lớp này cũng được lấp đầy tối đa với **2 electron**, cấu hình **$1s^2$** .

Cấu hình electron với 8 (hoặc 2 đối với He) electron ở lớp ngoài cùng được gọi là cấu hình electron bền vững.

Bảng cấu hình electron của các nguyên tố khí hiếm

Nguyên tố	Kí hiệu	Số hiệu nguyên tử (Z)	Cấu hình electron	Số electron lớp ngoài cùng
Helium	He	2	1s²	2
Neon	Ne	10	1s²2s²2p⁶	8
Argon	Ar	18	1s²2s²2p⁶3s²3p⁶	8
Krypton	Kr	36	1s²2s²2p⁶3s²3p⁶3d¹⁰4s²4p⁶	8
Xenon	Xe	54	[Kr]4d¹⁰5s²5p⁶	8
Radon	Rn	86	[Xe]4f¹⁴5d¹⁰6s²6p⁶	8

Sự bão hòa lớp electron ngoài cùng này làm cho các nguyên tử khí hiếm có năng lượng thấp, rất bền vững và khó bị biến đổi trong các phản ứng hóa học.

2. Quy tắc bát tử (Octet Rule)

Nội dung quy tắc bát tử

Từ sự bền vững của cấu hình electron khí hiếm, các nhà hóa học đã đưa ra một quy tắc quan trọng để giải thích sự hình thành liên kết hóa học.

- **Định nghĩa:** Khi hình thành liên kết hóa học, nguyên tử của các nguyên tố có xu hướng **nhường, nhận, hoặc góp chung electron** để đạt được cấu

hình electron bền vững của nguyên tử khí hiếm gần nhất, tức là có **8 electron ở lớp ngoài cùng** (hoặc 2 electron đối với các nguyên tử có Z nhỏ như H, Li, Be).

Ý nghĩa của quy tắc bát tử

Quy tắc bát tử là một công cụ hữu ích giúp giải thích và dự đoán cách các nguyên tử kết hợp với nhau:

1. **Giải thích sự hình thành ion:** Kim loại có xu hướng nhường electron để tạo ion dương, phi kim có xu hướng nhận electron để tạo ion âm. Cả hai quá trình đều nhằm mục đích đạt được cấu hình 8 electron lớp ngoài cùng.
2. **Giải thích sự hình thành liên kết cộng hóa trị:** Các nguyên tử phi kim có thể góp chung electron với nhau để cả hai cùng đạt được cấu hình 8 electron bền vững.
3. **Dự đoán công thức hóa học:** Dựa vào số electron cần nhường/nhận/góp chung để đạt bát tử, ta có thể dự đoán tỉ lệ kết hợp giữa các nguyên tử trong một phân tử.

3. Vận dụng quy tắc bát tử để giải thích sự hình thành liên kết hóa học

Trường hợp 1: Nhường và nhận electron (Hình thành liên kết ion)

Liên kết ion thường được hình thành giữa một kim loại điển hình (dễ nhường electron) và một phi kim điển hình (dễ nhận electron).

Ví dụ 1: Sự hình thành phân tử Natri clorua (NaCl)

- **Nguyên tử Natri (Na, Z=11):**

- Cấu hình electron: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$.
- Có 1 electron ở lớp ngoài cùng.
- Xu hướng: Dễ dàng **nhường đi 1 electron** này để đạt cấu hình bền vững của khí hiếm Neon (Ne) gần nhất ($1s^2 2s^2 2p^6$).
- Quá trình: **$Na \rightarrow Na^+ + 1e$**

- **Nguyên tử Chlorine (Cl, Z=17):**

- Cấu hình electron: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$.
- Có 7 electron ở lớp ngoài cùng.
- Xu hướng: Dễ dàng **nhận thêm 1 electron** để đạt cấu hình bền vững của khí hiếm Argon (Ar) gần nhất ($1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$).
- Quá trình: **$Cl + 1e \rightarrow Cl^-$**

- **Kết quả:** Ion Na^+ và ion Cl^- mang điện tích trái dấu hút nhau bằng lực hút tĩnh điện, tạo thành liên kết ion trong phân tử NaCl. Cả hai ion đều đã đạt được quy tắc bát tử.

Ví dụ 2: Sự hình thành phân tử Magnesium oxide (MgO)

- **Nguyên tử Magnesium (Mg, Z=12):**

- Cấu hình electron: $[Ne] 3s^2$.
- Xu hướng: **Nhường 2 electron** để đạt cấu hình của Ne.

- Quá trình: **$\text{Mg} \rightarrow \text{Mg}^{2+} + 2\text{e}$**

- **Nguyên tử Oxygen (O, Z=8):**

- Cấu hình electron: **$[\text{He}]2\text{s}^22\text{p}^4$** .

- Xu hướng: **Nhận 2 electron** để đạt cấu hình của Ne.

- Quá trình: **$\text{O} + 2\text{e} \rightarrow \text{O}^{2-}$**

- **Kết quả:** Ion Mg^{2+} và O^{2-} hút nhau tạo thành liên kết ion trong phân tử MgO .

Trường hợp 2: Góp chung electron (Hình thành liên kết cộng hóa trị)

Liên kết cộng hóa trị thường được hình thành giữa các nguyên tử phi kim, nơi chúng dùng chung các cặp electron để cùng nhau thỏa mãn quy tắc bát tử.

Ví dụ 1: Sự hình thành phân tử hydrogen (H_2)

- **Nguyên tử Hydrogen (H, Z=1):**

- Cấu hình electron: **1s^1** .

- Có 1 electron lớp ngoài cùng.

- Xu hướng: Cần thêm 1 electron để đạt cấu hình bền vững của khí hiếm He (1s^2).

- **Quá trình:** Mỗi nguyên tử H **góp chung 1 electron**, tạo thành một cặp electron dùng chung. Cặp electron này thuộc về cả hai nguyên tử, giúp mỗi nguyên tử H đều có 2 electron, đạt cấu hình bền của He.

- **Công thức:** H-H

Ví dụ 2: Sự hình thành phân tử nước (H_2O)

- **Nguyên tử Oxygen (O, $Z=8$):** Có 6 electron lớp ngoài cùng, cần thêm 2 electron để đạt bát tử.
- **Nguyên tử Hydrogen (H, $Z=1$):** Có 1 electron lớp ngoài cùng, cần thêm 1 electron để đạt cấu hình bền của He.
- **Quá trình:** Nguyên tử O dùng 2 electron độc thân của mình để **góp chung** với 2 nguyên tử H (mỗi H góp 1 electron).
- **Kết quả:** Nguyên tử O tạo ra 2 liên kết đơn với 2 nguyên tử H. Sau khi liên kết, nguyên tử O có 4 electron riêng và 4 electron chung (tổng là 8 electron), thỏa mãn quy tắc bát tử. Mỗi nguyên tử H có 2 electron chung, thỏa mãn cấu hình bền của He.

Ví dụ 3: Sự hình thành phân tử nitrogen (N_2)

- **Nguyên tử Nitrogen (N, $Z=7$):**
 - Cấu hình electron: $[\text{He}]2s^22p^3$.
 - Có 5 electron lớp ngoài cùng, cần thêm 3 electron để đạt bát tử.
- **Quá trình:** Hai nguyên tử N không thể nhường hay nhận electron từ nhau. Chúng giải quyết bằng cách mỗi nguyên tử **góp chung 3 electron**, tạo thành 3 cặp electron dùng chung (một liên kết ba).
- **Kết quả:** Trong phân tử N_2 , mỗi nguyên tử N có 2 electron riêng và 6 electron chung (tổng là 8 electron), thỏa mãn quy tắc bát tử.

4. Một số trường hợp ngoại lệ của quy tắc bát tử

Quy tắc bát tử là một quy tắc kinh nghiệm rất hữu ích nhưng không phải lúc nào cũng đúng. Có một số trường hợp ngoại lệ đáng chú ý.

Bát tử không hoàn chỉnh (Bát tử thiếu)

Trong một số hợp chất, nguyên tử trung tâm có ít hơn 8 electron ở lớp vỏ ngoài cùng sau khi đã hình thành liên kết.

- **Ví dụ 1: BeCl_2 (Beryllium chloride).** Nguyên tử trung tâm Be ($Z=4$) có 2 electron hóa trị. Nó tạo 2 liên kết đơn với 2 nguyên tử Cl. Xung quanh Be chỉ có **4 electron** (2 cặp electron liên kết).
- **Ví dụ 2: BF_3 (Boron trifluoride).** Nguyên tử trung tâm B ($Z=5$) có 3 electron hóa trị. Nó tạo 3 liên kết đơn với 3 nguyên tử F. Xung quanh B chỉ có **6 electron** (3 cặp electron liên kết).

Bát tử mở rộng (Bát tử dư)

Xảy ra với các nguyên tử trung tâm thuộc chu kỳ 3 trở đi, vì chúng có các orbital d còn trống có thể chứa thêm electron. Nguyên tử trung tâm có nhiều hơn 8 electron ở lớp vỏ ngoài cùng.

- **Ví dụ 1: PCl_5 (Phosphorus pentachloride).** Nguyên tử trung tâm P (chu kỳ 3) tạo 5 liên kết đơn với 5 nguyên tử Cl. Xung quanh P có tổng cộng **10 electron** (5 cặp electron liên kết).
- **Ví dụ 2: SF_6 (Sulfur hexafluoride).** Nguyên tử trung tâm S (chu kỳ 3) tạo 6 liên kết đơn với 6 nguyên tử F. Xung quanh S có tổng cộng **12 electron** (6 cặp electron liên kết).