

Tổng hợp kiến thức: Cấu tạo vỏ nguyên tử và thứ tự các mức năng lượng

Vỏ nguyên tử được cấu tạo từ các electron chuyển động xung quanh hạt nhân theo những quy luật phức tạp. Việc hiểu rõ sự sắp xếp của các electron trong vỏ nguyên tử là chìa khóa để giải thích tính chất hóa học của các nguyên tố.

1. Lớp và phân lớp electron

Các electron trong vỏ nguyên tử được phân bố vào các lớp và phân lớp với các mức năng lượng khác nhau.

a. Lớp electron

Lớp electron là tập hợp các electron có mức năng lượng gần bằng nhau. Các lớp được đánh số từ trong ra ngoài.

- **Định nghĩa:** Các electron trên cùng một lớp có mức năng lượng gần bằng nhau.
- **Kí hiệu:** Các lớp được kí hiệu bằng số nguyên $n = 1, 2, 3, 4, \dots$ hoặc các chữ cái tương ứng K, L, M, N,...
- **Công thức:** Số electron tối đa trong lớp thứ n là $2n^2$.

Ví dụ:

1. **Lớp K ($n=1$):** Số electron tối đa là $2 \times 1^2 = 2$ electron.

2. **Lớp L (n=2):** Số electron tối đa là $2 \times 2^2 = 8$ electron.

3. **Lớp M (n=3):** Số electron tối đa là $2 \times 3^2 = 18$ electron.

Lớp electron càng xa hạt nhân (n càng lớn) thì có mức năng lượng càng cao.

b. Phân lớp electron

Mỗi lớp electron lại được chia thành các phân lớp nhỏ hơn.

- **Định nghĩa:** Các electron trên cùng một phân lớp có mức năng lượng bằng nhau.
- **Kí hiệu:** Các phân lớp được kí hiệu bằng các chữ cái in thường: s, p, d, f.
- **Cấu trúc:** Lớp thứ n có n phân lớp.

Bảng số electron tối đa trong các phân lớp:

Phân lớp	Số electron tối đa
s	2
p	6
d	10
f	14

Ví dụ:

1. **Lớp K (n=1):** Có 1 phân lớp là **1s**.

2. **Lớp L (n=2):** Có 2 phân lớp là **2s, 2p**.

3. **Lớp M (n=3):** Có 3 phân lớp là **3s, 3p, 3d**.

4. **Lớp N (n=4):** Có 4 phân lớp là **4s, 4p, 4d, 4f**.

2. Obitan nguyên tử (AO)

Obitan nguyên tử mô tả không gian chuyển động của electron.

a. Khái niệm

- **Định nghĩa:** Obitan nguyên tử (viết tắt là AO) là khu vực không gian xung quanh hạt nhân mà ở đó xác suất tìm thấy electron là lớn nhất (khoảng 90%).
- Mỗi obitan chỉ chứa tối đa 2 electron có chiều tự quay ngược nhau (spin ngược dấu).

b. Số obitan trong một phân lớp

Số lượng obitan trong các phân lớp là cố định.

- **Phân lớp s:** có **1** obitan.
- **Phân lớp p:** có **3** obitan.
- **Phân lớp d:** có **5** obitan.
- **Phân lớp f:** có **7** obitan.

c. Hình dạng các obitan

Mỗi loại obitan có hình dạng không gian đặc trưng.

- **Obitan s:** Có dạng hình cầu, tâm là hạt nhân nguyên tử.

- **Orbitan p:** Có dạng hình số tám nổi. Có 3 orbitan p (p_x , p_y , p_z) định hướng theo 3 trục tọa độ vuông góc Ox, Oy, Oz.

3. Thứ tự các mức năng lượng và nguyên lí điền electron

Sự phân bố electron vào các orbitan tuân theo các quy luật chặt chẽ để đảm bảo nguyên tử ở trạng thái năng lượng thấp nhất, bền vững nhất.

a. Thứ tự các mức năng lượng (Quy tắc Klechkowski)

Trong nguyên tử, năng lượng của các orbitan tăng dần theo thứ tự sau:

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

Lưu ý: Có sự chèn mức năng lượng. Ví dụ, mức năng lượng của orbitan 4s thấp hơn 3d, mức năng lượng của 5s thấp hơn 4d.

b. Nguyên lí vững bền (Nguyên lí Aufbau)

- **Phát biểu:** Ở trạng thái cơ bản, trong nguyên tử các electron lần lượt chiếm các orbitan có mức năng lượng từ thấp đến cao.
- **Giải thích:** Electron sẽ điền vào orbitan 1s trước, sau khi 1s đã đủ electron thì mới điền tiếp vào 2s, rồi đến 2p, và cứ thế tiếp tục.

c. Nguyên lí loại trừ Pauli

- **Phát biểu:** Trên một orbitan nguyên tử, có thể chứa tối đa hai electron và hai electron này phải có chiều tự quay ngược nhau.
- **Giải thích:** Nếu biểu diễn electron bằng mũi tên, thì trong một ô vuông (biểu diễn orbitan), chỉ có thể có tối đa hai mũi tên ngược chiều nhau (một lên, một xuống).

d. Quy tắc Hund

- **Phát biểu:** Trong cùng một phân lớp chưa bão hòa, các electron sẽ được phân bố vào các obitan sao cho số electron độc thân là tối đa và các electron này có chiều tự quay giống nhau.
- **Giải thích:** Khi điền electron vào các obitan trong cùng phân lớp (p, d, f), ta điền vào mỗi obitan 1 electron (cùng chiều) trước, sau đó mới ghép đôi.
- **Ví dụ:** Nguyên tử Nitrogen ($Z=7$) có cấu hình $1s^2 2s^2 2p^3$. Ba electron ở phân lớp 2p sẽ được phân bố vào 3 obitan p như sau: mỗi obitan p_x , p_y , p_z chứa 1 electron độc thân.

4. Cấu hình electron nguyên tử

Cấu hình electron biểu diễn sự phân bố electron của nguyên tử trên các phân lớp.

a. Các bước viết cấu hình electron

1. **Bước 1:** Xác định số electron của nguyên tử (bằng số hiệu nguyên tử Z).
2. **Bước 2:** Phân bố các electron vào các phân lớp theo đúng thứ tự mức năng lượng ($1s\ 2s\ 2p\ 3s\ 3p\ 4s\ 3d\dots$) cho đến khi hết electron. Lưu ý số electron tối đa của mỗi phân lớp.
3. **Bước 3:** Viết cấu hình electron theo thứ tự các lớp từ trong ra ngoài. (Ví dụ: nếu có 3d và 4s, viết 3d trước 4s).

Ví dụ 1: Viết cấu hình electron của Oxygen (O, $Z=8$).

- Số electron = 8.

- Phân bố: $1s^2 2s^2 2p^4$ ($2+2+4=8$).
- Cấu hình electron: **$1s^2 2s^2 2p^4$** .

Ví dụ 2: Viết cấu hình electron của Iron (Fe, $Z=26$).

- Số electron = 26.
- Phân bố theo mức năng lượng: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^6$.
- Sắp xếp lại theo lớp: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^6 4s^2$.
- Cấu hình electron: **$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^6 4s^2$** .

Cách viết gọn: Ta có thể thay cấu hình của khí hiếm đứng trước bằng kí hiệu của khí hiếm đó trong ngoặc vuông.

- **Ví dụ:** Sodium (Na, $Z=11$) có cấu hình $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$. Khí hiếm gần nhất là Neon (Ne, $Z=10$) có cấu hình $1s^2 2s^2 2p^6$. Vậy cấu hình của Na có thể viết gọn là **$[\text{Ne}]3s^1$** .

b. Cấu hình electron của một số trường hợp đặc biệt

Các cấu hình electron đạt trạng thái bão hòa (s^2 , p^6 , d^{10} , f^{14}) hoặc bán bão hòa (p^3 , d^5 , f^7) thường bền vững hơn. Do đó, có một số ngoại lệ so với quy tắc điền năng lượng.

Ví dụ 1: Chromium (Cr, $Z=24$)

- Dự đoán theo quy tắc: $[\text{Ar}] 3d^4 4s^2$.
- Thực tế: Một electron từ 4s chuyển sang 3d để đạt cấu hình bán bão hòa bền vững hơn. Cấu hình đúng là **$[\text{Ar}] 3d^5 4s^1$** .

Ví dụ 2: Copper (Cu, Z=29)

- Dự đoán theo quy tắc: $[\text{Ar}] 3d^9 4s^2$.
- Thực tế: Một electron từ 4s chuyển sang 3d để đạt cấu hình bão hòa bền vững hơn. Cấu hình đúng là **$[\text{Ar}] 3d^{10} 4s^1$** .

c. Đặc điểm của lớp electron ngoài cùng

Số electron ở lớp ngoài cùng quyết định tính chất hóa học cơ bản của một nguyên tố.

- **Nguyên tử kim loại:** Thường có 1, 2 hoặc 3 electron ở lớp ngoài cùng. Chúng có xu hướng nhường electron trong các phản ứng hóa học.
- **Nguyên tử phi kim:** Thường có 5, 6 hoặc 7 electron ở lớp ngoài cùng. Chúng có xu hướng nhận thêm electron.
- **Nguyên tử khí hiếm:** Có lớp electron ngoài cùng bão hòa (thường là 8 electron, riêng Helium là 2). Chúng rất bền và khó tham gia phản ứng hóa học.

Ví dụ:

- Potassium (K, Z=19): $[\text{Ar}] 4s^1$. Có 1 electron lớp ngoài cùng → là kim loại.
- Sulfur (S, Z=16): $[\text{Ne}] 3s^2 3p^4$. Có 6 electron lớp ngoài cùng → là phi kim.

5. Cấu hình electron của ion

Ion được hình thành khi nguyên tử nhường hoặc nhận electron.

a. Cấu hình electron của cation (ion dương)

Cation hình thành khi nguyên tử mất đi electron ở lớp ngoài cùng.

- **Quy tắc:** Viết cấu hình electron của nguyên tử trung hòa, sau đó loại bỏ electron từ lớp có số n lớn nhất trước. Nếu cùng lớp, bỏ từ phân lớp năng lượng cao hơn.

Ví dụ 1: Ion Na^+ từ nguyên tử Na ($Z=11$).

- Cấu hình Na: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$.
- Na nhường 1 electron ở lớp ngoài cùng ($3s^1$) để tạo ion Na^+ .
- Cấu hình Na^+ : $1s^2 2s^2 2p^6$.

Ví dụ 2: Ion Fe^{2+} từ nguyên tử Fe ($Z=26$).

- Cấu hình Fe: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^6 4s^2$.
- Fe nhường 2 electron từ lớp ngoài cùng (lớp 4) trước.
- Cấu hình Fe^{2+} : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^6$.

b. Cấu hình electron của anion (ion âm)

Anion hình thành khi nguyên tử nhận thêm electron vào lớp ngoài cùng.

- **Quy tắc:** Viết cấu hình electron của nguyên tử trung hòa, sau đó thêm electron vào phân lớp còn trống theo thứ tự mức năng lượng.

Ví dụ 1: Ion O^{2-} từ nguyên tử O ($Z=8$).

- Cấu hình O: $1s^2 2s^2 2p^4$.
- O nhận thêm 2 electron vào phân lớp 2p.

- Cấu hình O^{2-} : $1s^2 2s^2 2p^6$.

VIDOCU.COM