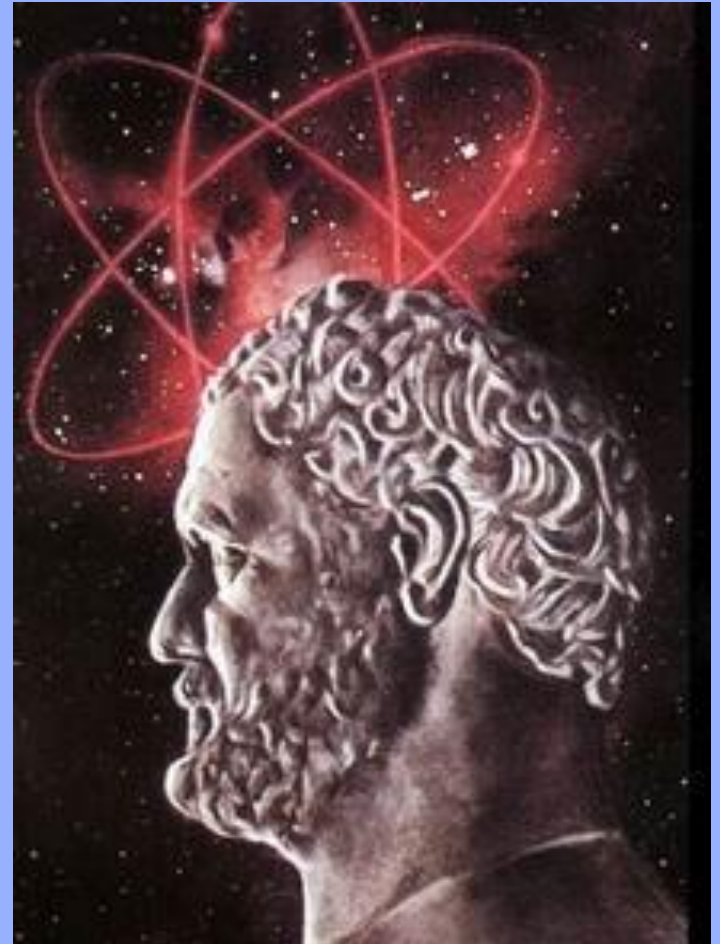




# CHƯƠNG I - CẤU TẠO NGUYÊN TỬ

# Democritus (Greece, 4th Century BC)

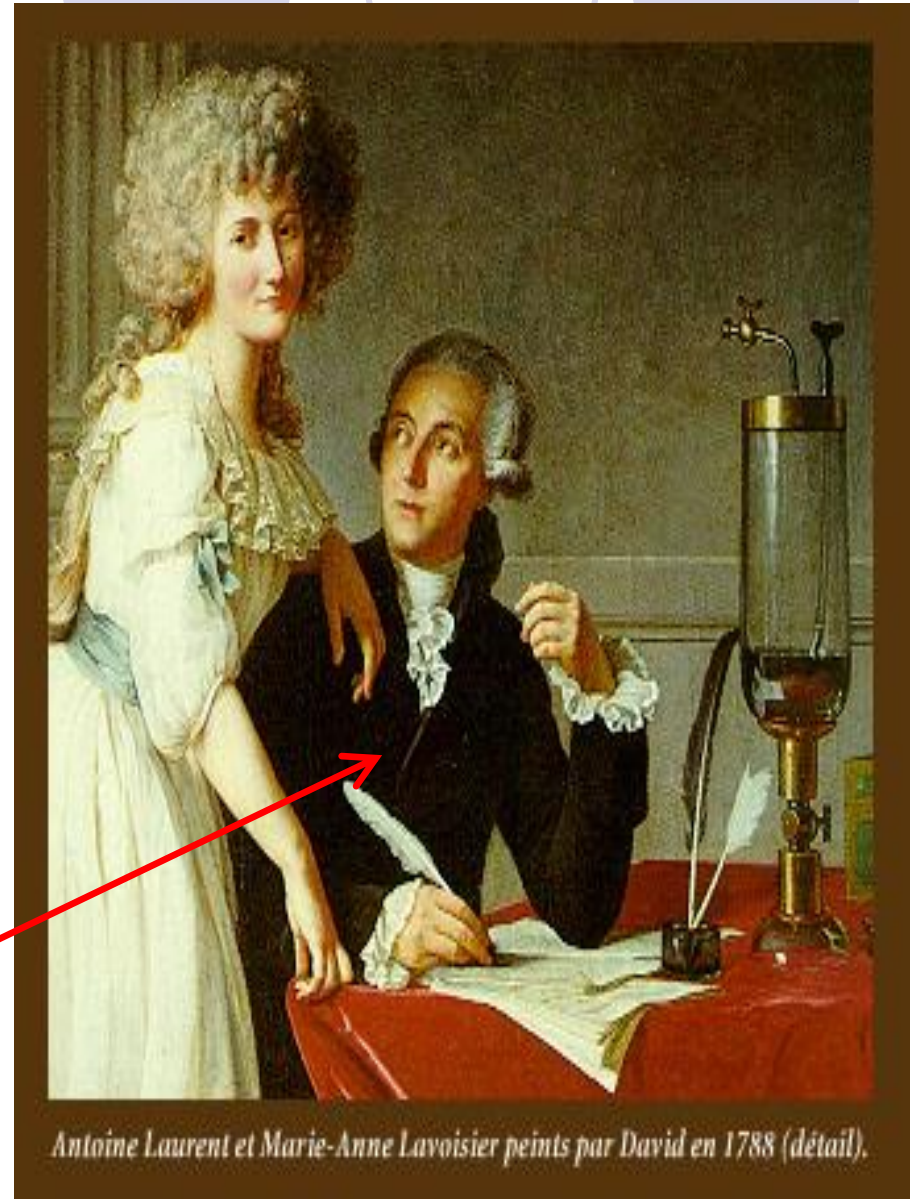
- First atomic theory
- Atom (indivisible).



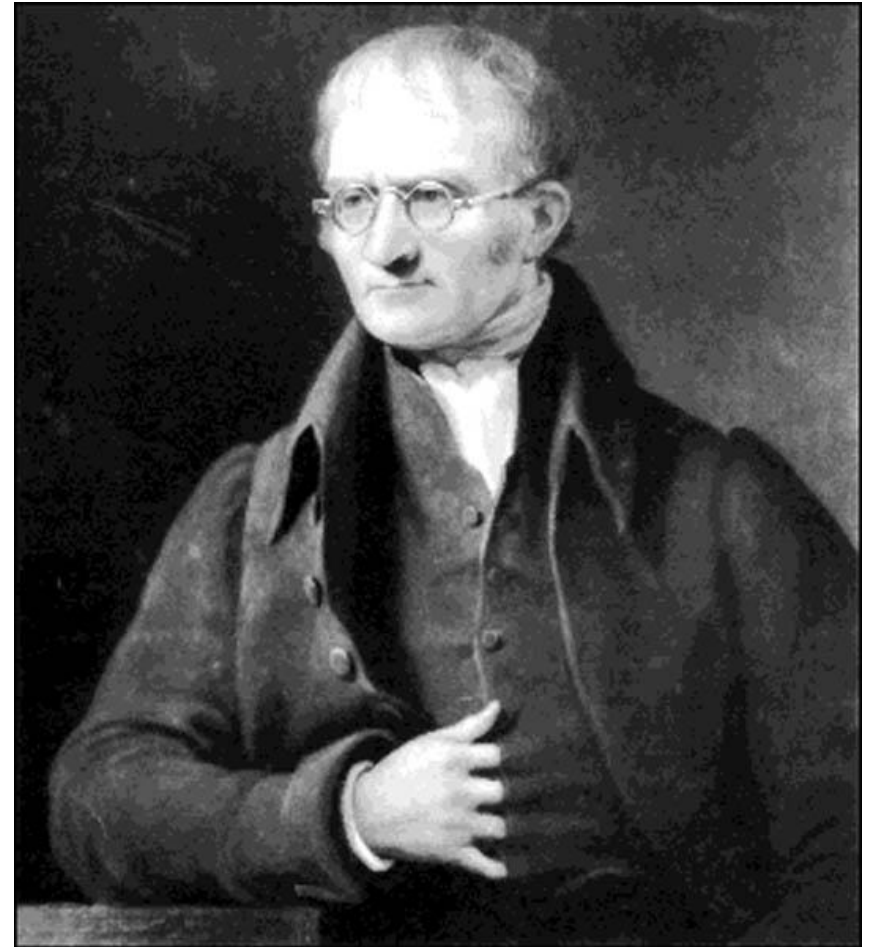
~400 BC - Democritus suggested the existence of atoms

66 AD - Peter wrote: “but the day of the Lord will come like a thief, in which the heavens will pass away with a roar and the elements will be destroyed with intense heat, and the earth and its works will be burned up.” From New Testament, 2 Peter 3:10

1783 - Antoine Lavoisier found that matter is not created nor destroyed in a chemical reaction. Known as “father of modern chemistry.”



**1803** - **John Dalton** proposed that matter is made up of tiny atoms; that atoms of the same element are alike; and that atoms combine in definite ratios to form compounds. This set aside false idea promoted by Aristotle 2000 years earlier that matter was continuous.

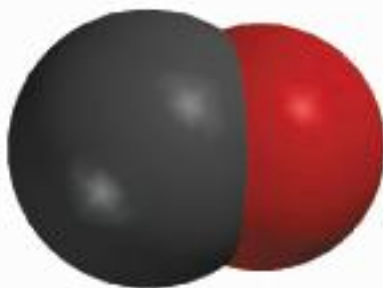


# Dalton's Atomic Theory (1808)

1. **Elements** are composed of extremely small particles called **atoms**. All atoms of a given element are identical, having the same size, mass and chemical properties. The atoms of one element are different from the atoms of all other elements.
2. **Compounds** are composed of atoms of more than one element. The relative number of atoms of each element in a given compound is always the same.
3. Chemical reactions only involve the rearrangement of atoms. Atoms are not created or destroyed in chemical reactions.

# Oxygen in CO and CO<sub>2</sub>

Carbon monoxide



$$\frac{\text{O}}{\text{C}} = \frac{\text{1 red sphere}}{\text{1 black sphere}} = \frac{1}{1}$$

Carbon dioxide



$$\frac{\text{O}}{\text{C}} = \frac{\text{2 red spheres}}{\text{1 black sphere}} = \frac{2}{1}$$

**Law of Multiple Proportions**

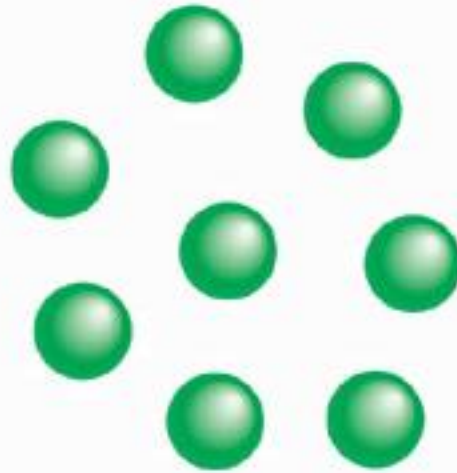


# Dalton's Atomic Theory



Atoms of element X

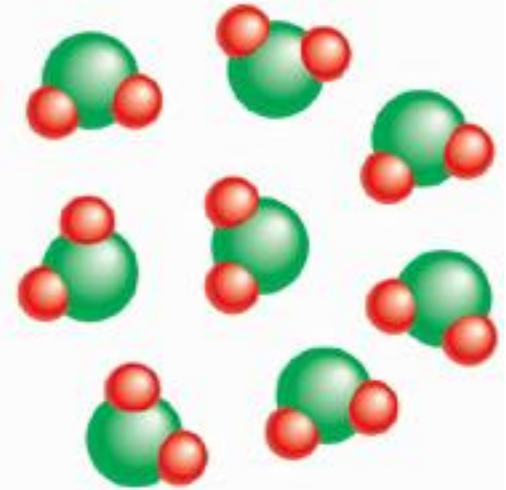
16 X



Atoms of element Y

8 Y

+



Compound of elements X and Y

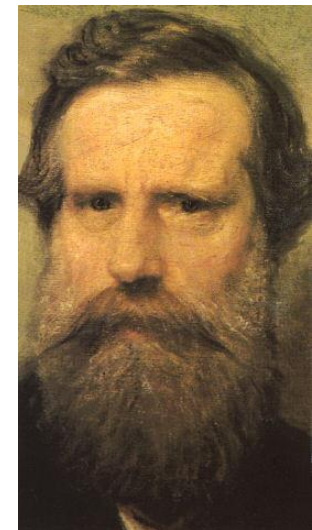
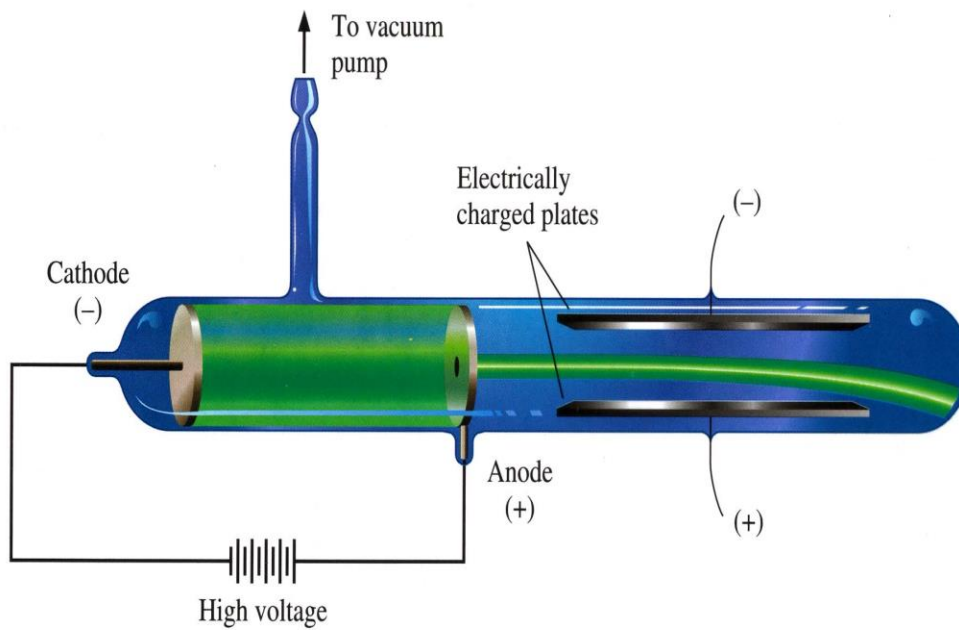
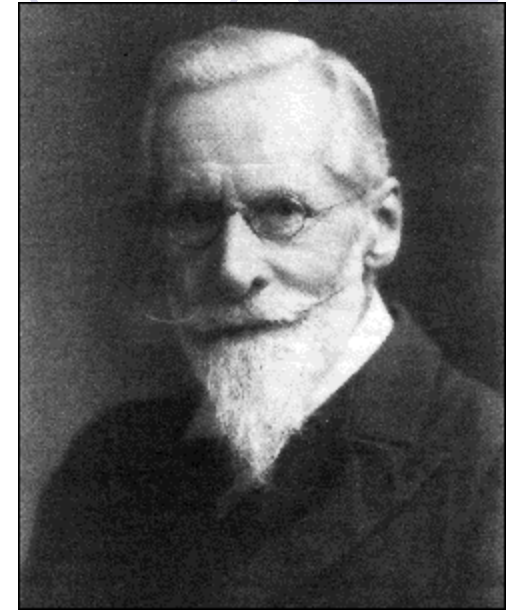
8 X<sub>2</sub>Y

**Law of Conservation of Mass**

# I. Atoms & Molecules

# D. History

- 1879 - William Crookes developed the “ray tube” which later allowed us to view electron beams





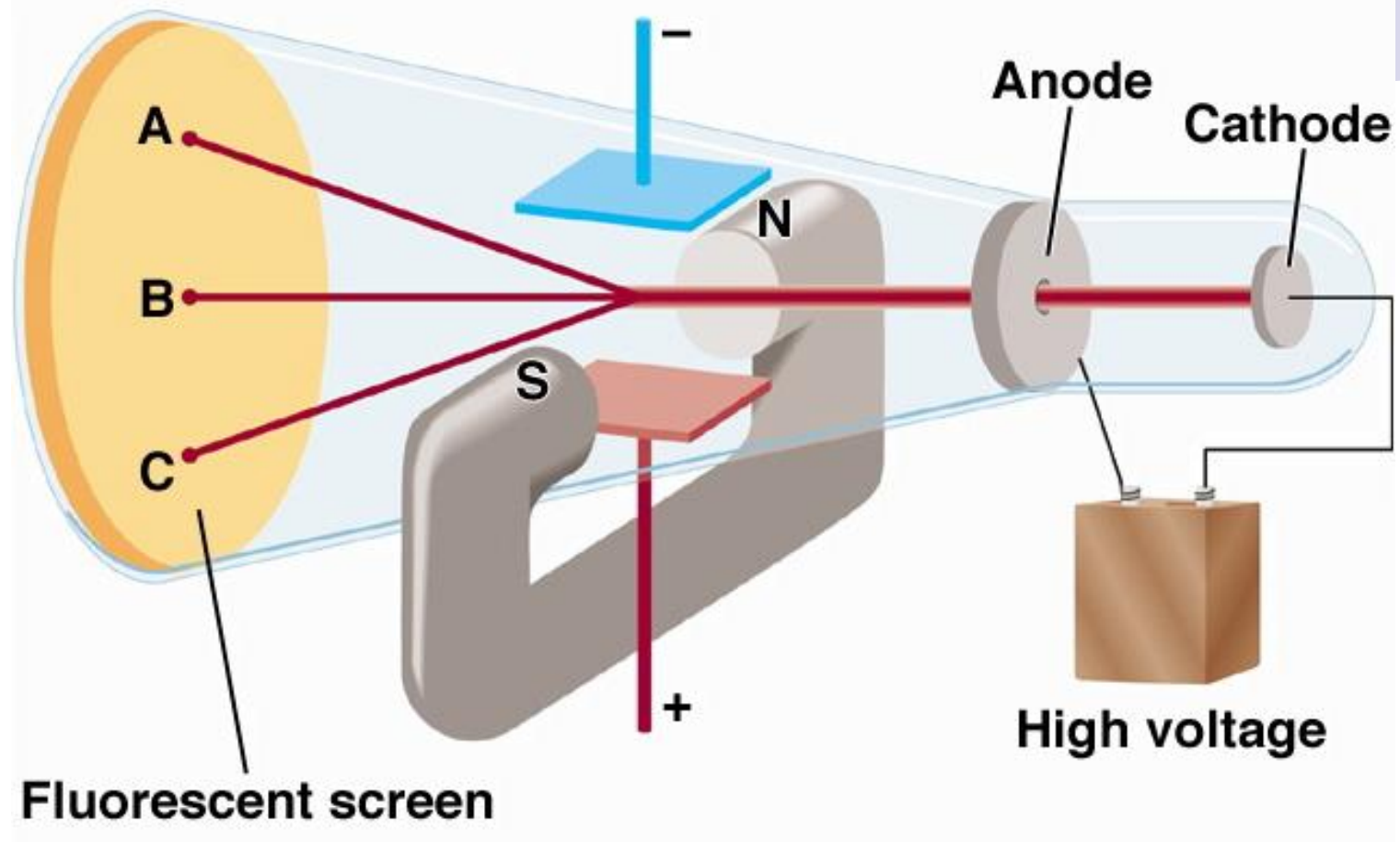
## I. Atoms & Molecules

## D. History

- **1897 – Joseph Thomson** used the cathode-ray tube and discovered the electron.



# Cathode Ray Tube



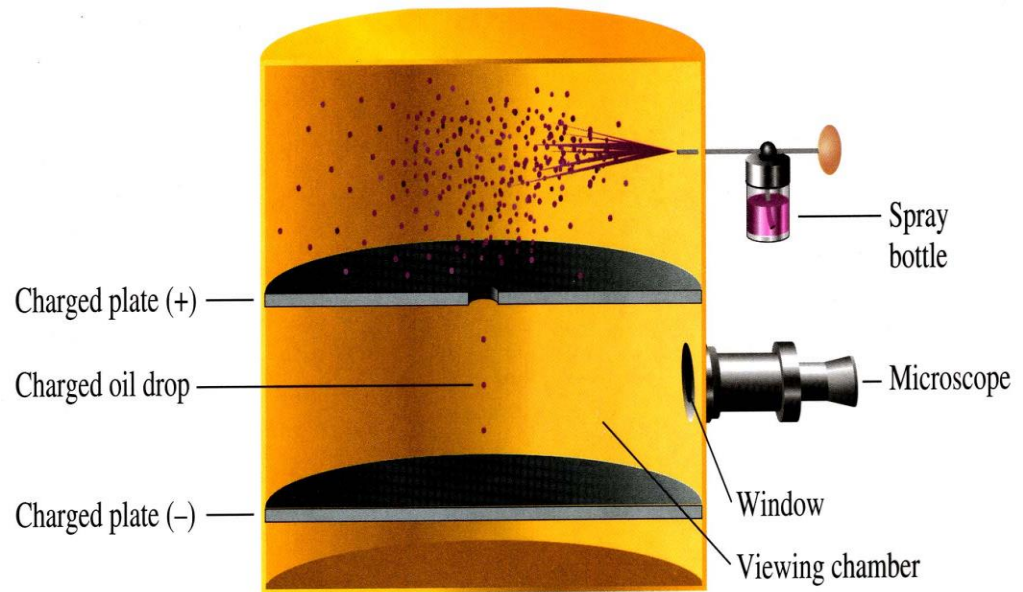
J.J. Thomson, **measured charge/mass of  $e^-$**

(1906 Nobel Prize in Physics)

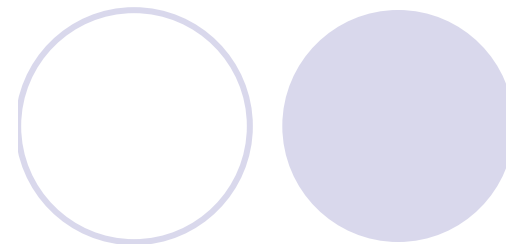
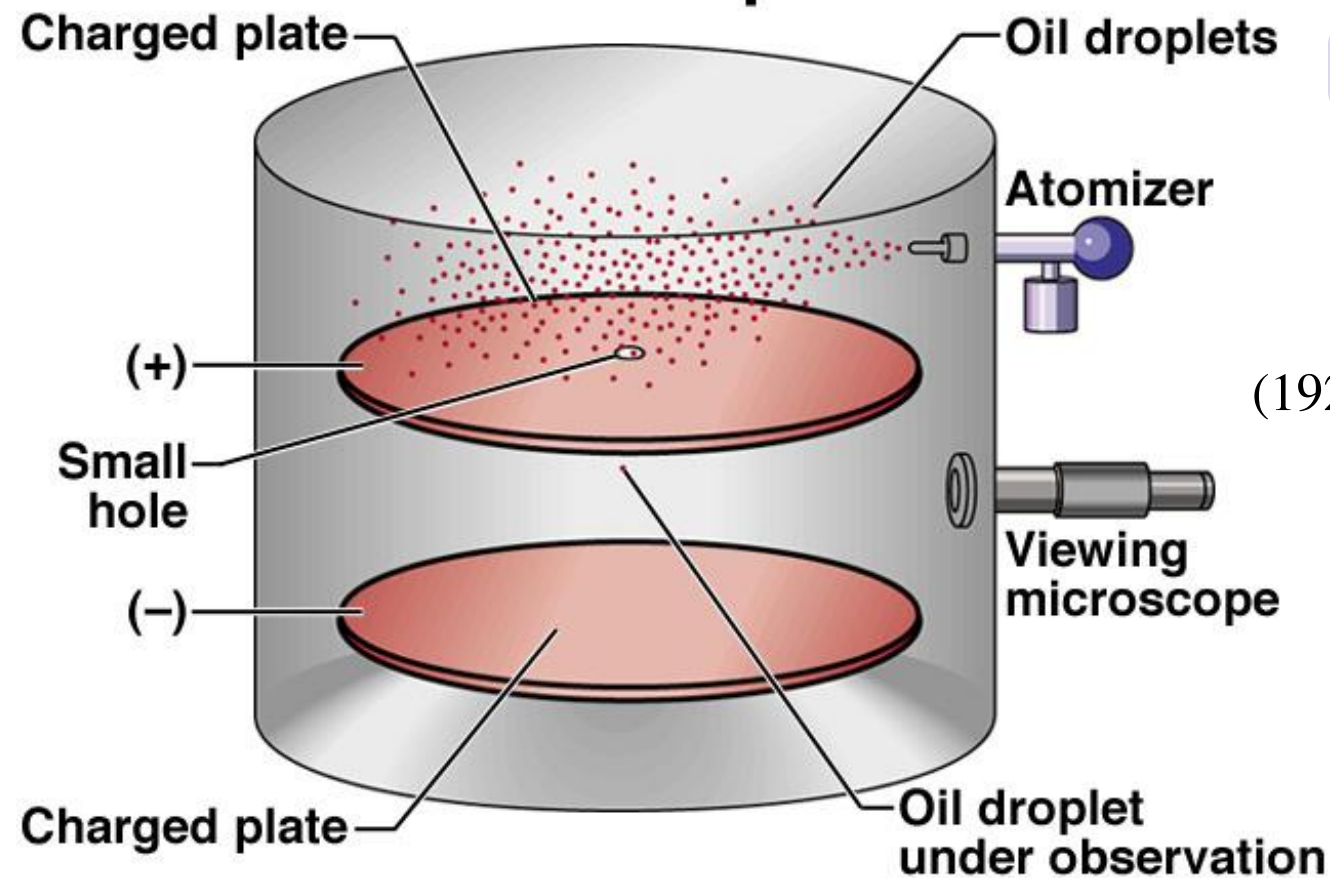
# I. Atoms & Molecules

# D. History

- **1886** - **Eugene Goldstein** demonstrated existence of + particles, protons. These particles later found to have a charge of +1 ( $1.60 \times 10^{-19}$  coulombs) and a mass of  $1.67 \times 10^{-24}$  g (a mass of 1.00 AMU).
- **1909** - **Robert Millikan** determined mass ( $9.11 \times 10^{-28}$  g; ~1800 less than proton) and charge (-1 or  $-1.60 \times 10^{-19}$  coulombs) of an electron.



# Millikan's Experiment



Measured mass of  $e^-$

(1923 Nobel Prize in Physics)

$$e^- \text{ charge} = -1.60 \times 10^{-19} \text{ C}$$

$$\text{Thomson's charge/mass of } e^- = -1.76 \times 10^8 \text{ C/g}$$

$$e^- \text{ mass} = 9.10 \times 10^{-28} \text{ g}$$



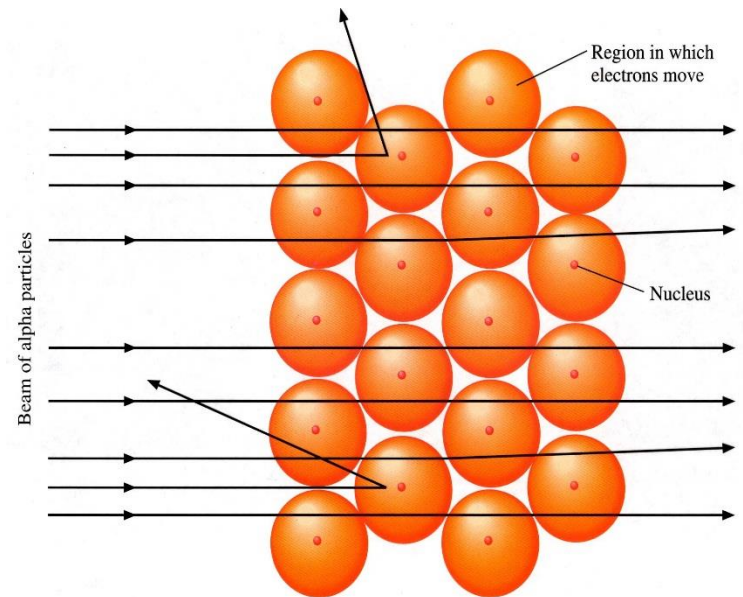
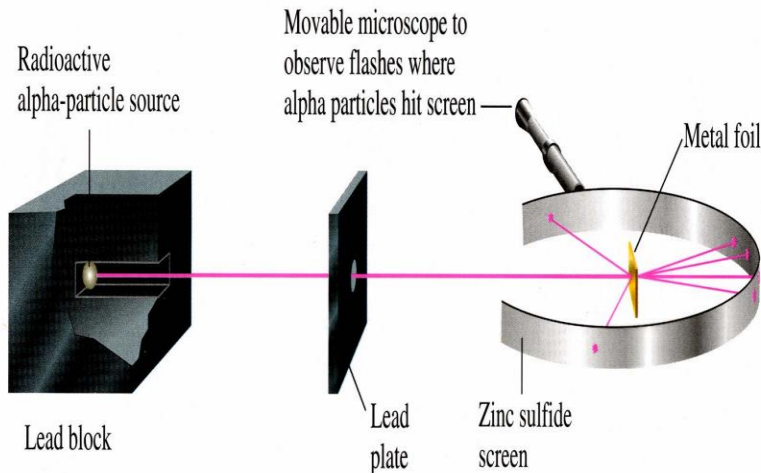
# I. Atoms & Molecules

# D. History

**1911 - Ernest Rutherford (a New Zealand physicist) demonstrated the nuclear nature of the atom in which the empty space is 10,000 to 100,000 times larger than the size of the nucleus.**



**Ernest Rutherford  
(1871-1937)**

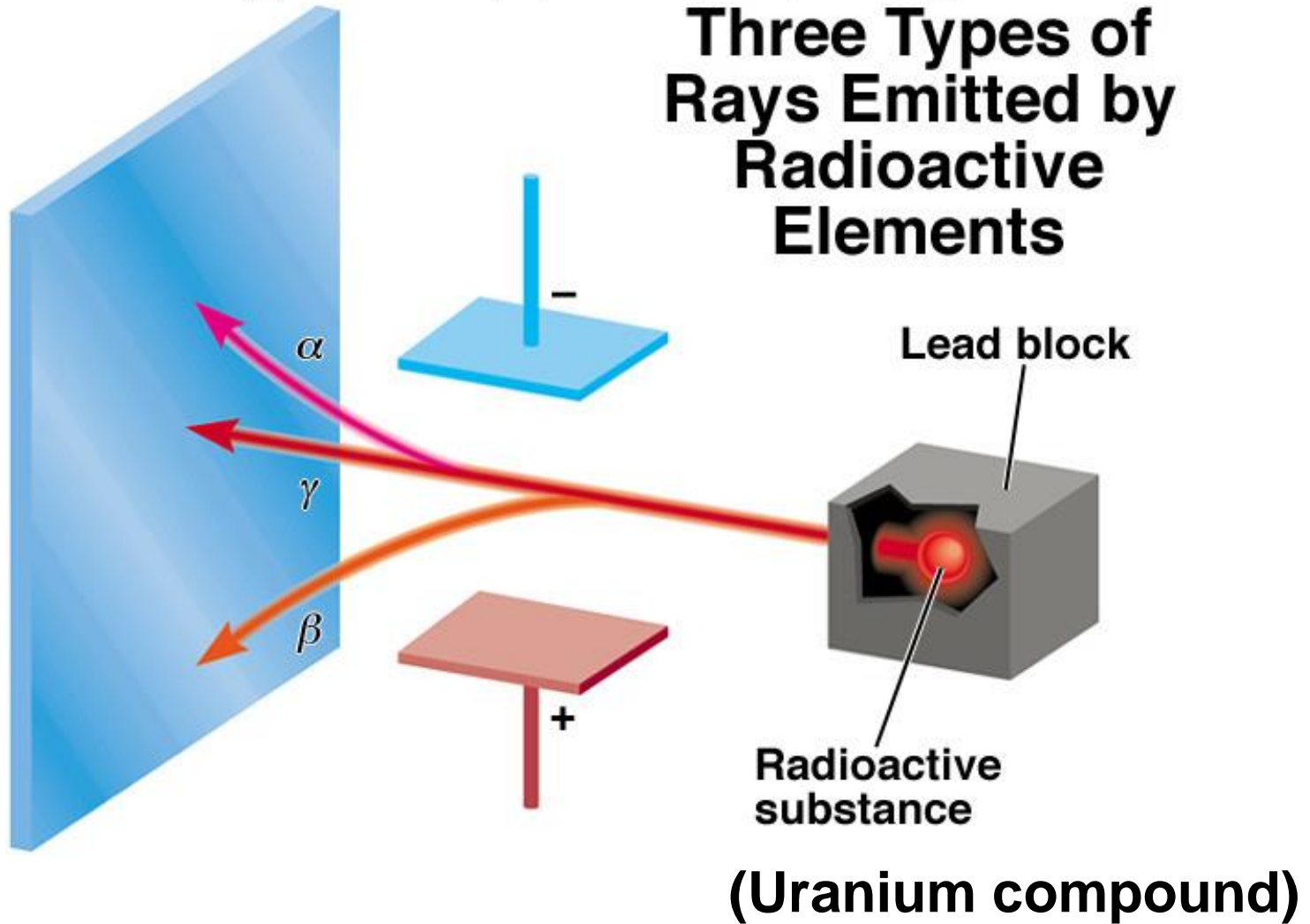




# Rutherford Experiment (1902)

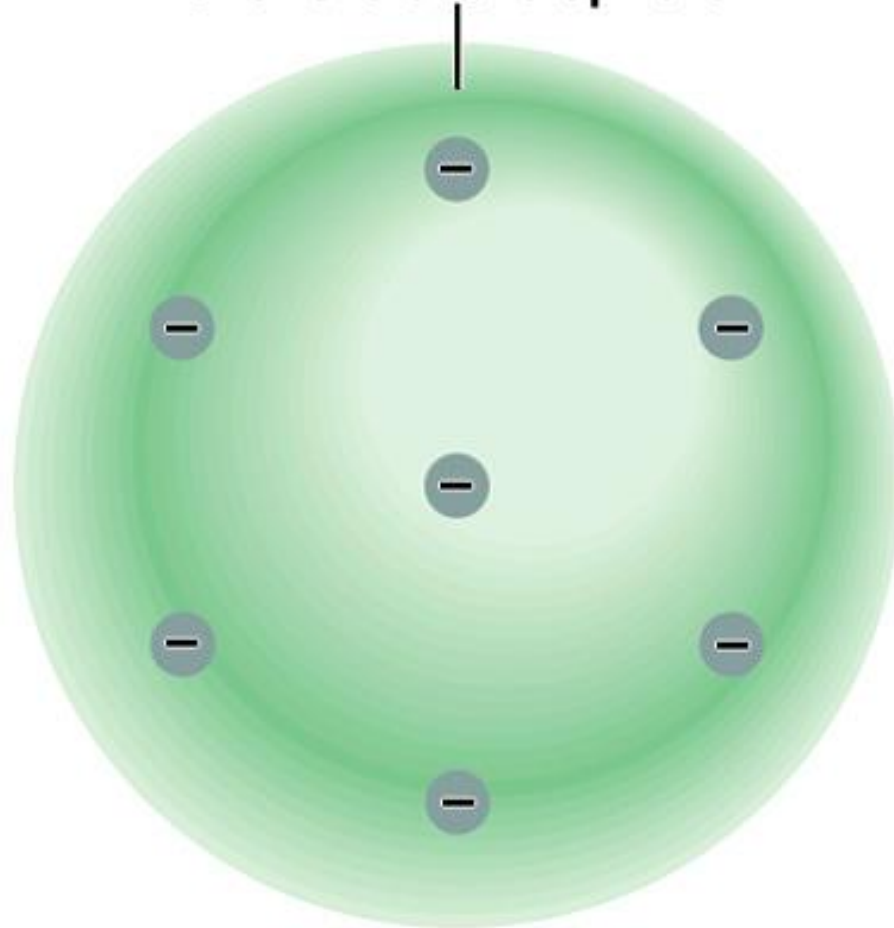
Copyright © The McGraw-Hill Companies, Inc. Permission required for reproduction or display.

## Three Types of Rays Emitted by Radioactive Elements



# Thomson's Model of the Atom

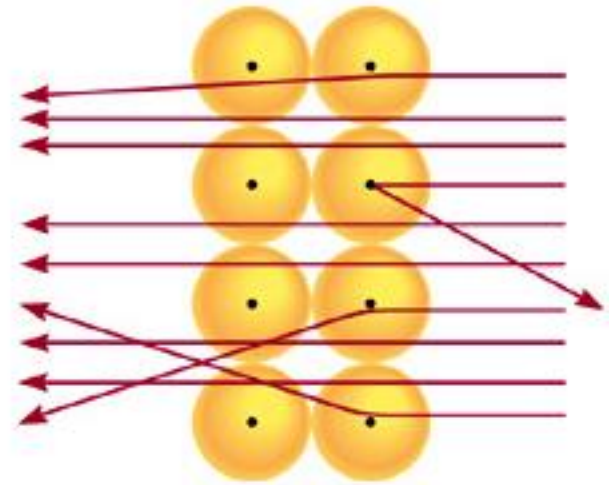
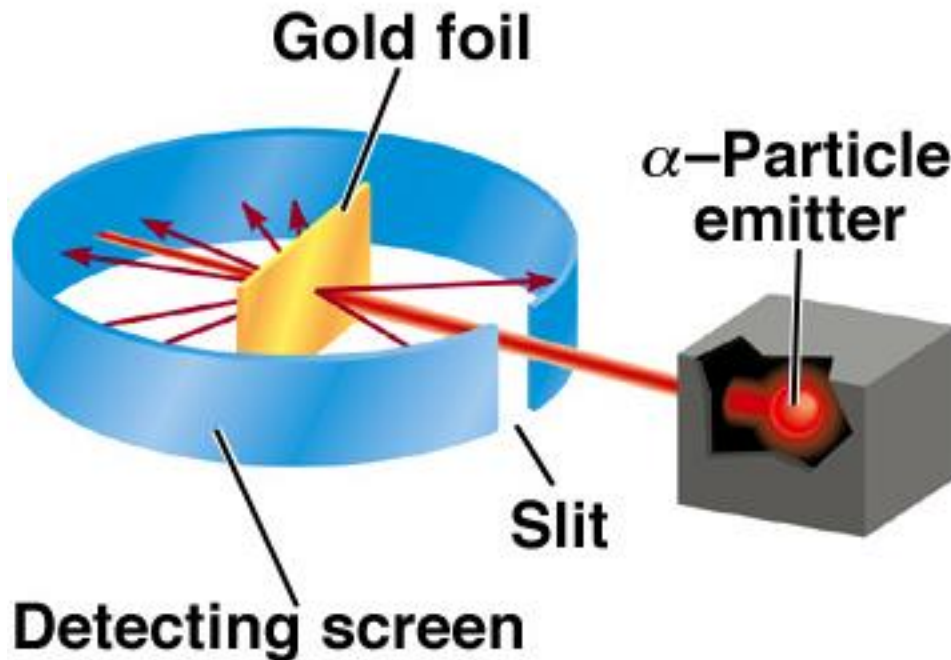
Positive charge spread  
over the entire sphere



Shown to be incorrect by Rutherford's experiments

# Rutherford's Experimental Design

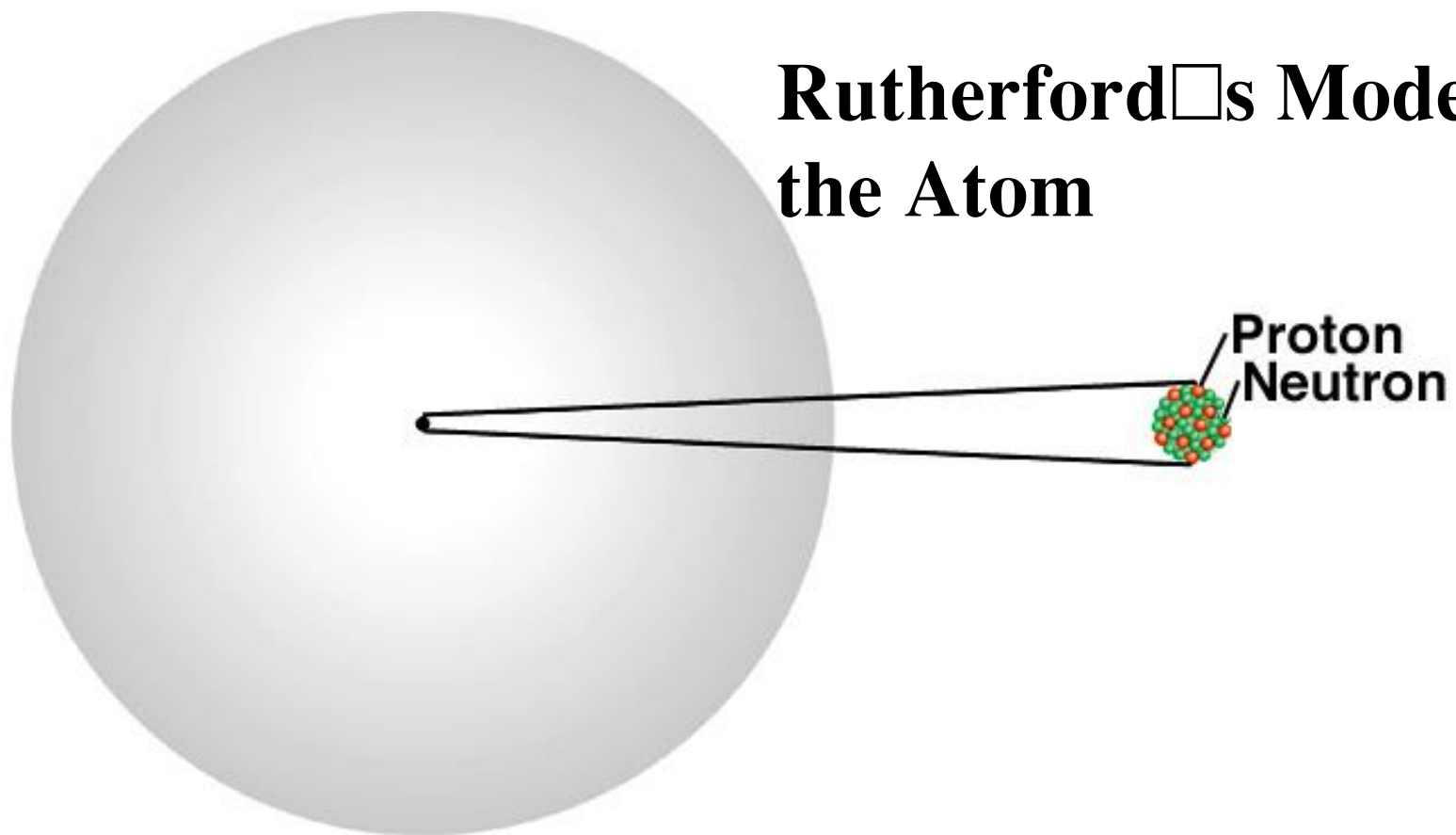
(1908 Nobel Prize in Chemistry)



$\alpha$  particle velocity  $\sim 1.4 \times 10^7$  m/s  
( $\sim 5\%$  speed of light)

1. atoms positive charge is concentrated in the nucleus
2. proton (p) has opposite (+) charge of electron (-)
3. mass of p is 1840 x mass of  $e^-$  ( $1.67 \times 10^{-24}$  g)

# Rutherford's Model of the Atom



atomic radius  $\sim 100 \text{ pm} = 1 \times 10^{-10} \text{ m}$

nuclear radius  $\sim 5 \times 10^{-3} \text{ pm} = 5 \times 10^{-15} \text{ m}$

**If the atom is the Houston Astrodome  
Then the nucleus is a marble on the 50 yard line**

## I. Atoms & Molecules

## D. History

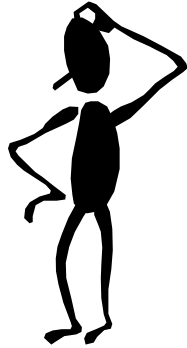
**1932** - James Chadwick demonstrated the existence of the neutron which has no charge and about the same mass as the proton (1.00 AMU).

- Why do you think that it took longer to uncover the neutron than either the electron or proton?

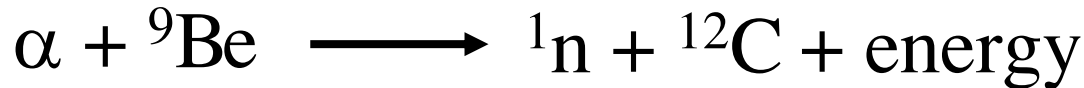




# Chadwick's Experiment (1932)

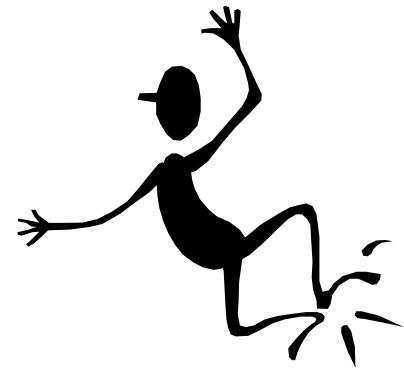


H atoms - 1 p; He atoms - 2 p  
mass He/mass H should = 2  
measured mass He/mass H = 4



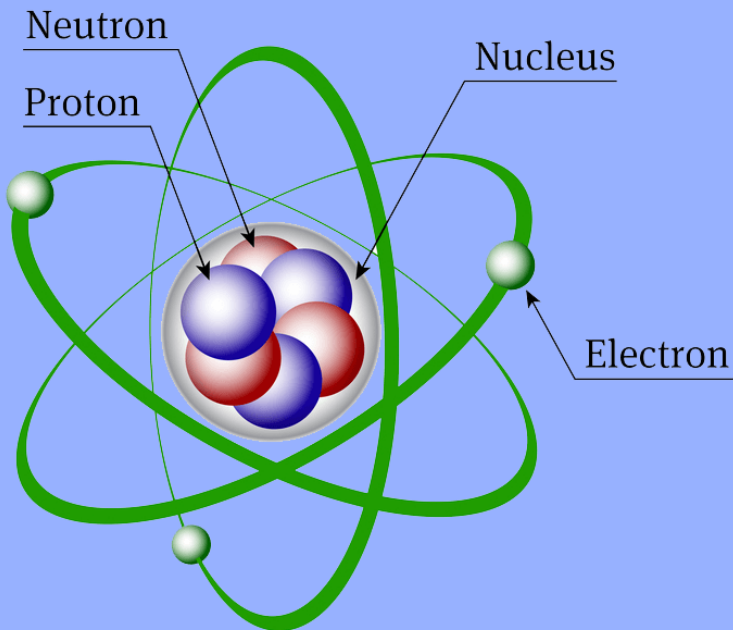
neutron (n) is neutral (charge = 0)

n mass  $\sim$  p mass =  $1.67 \times 10^{-24}$  g



# I. MỞ ĐẦU

## 1. Các hạt cơ bản tạo thành nguyên tử



- Proton (p) : tích điện dương
- Neutron (n) : không mang điện
- Electron (e): tích điện âm,

$$m_e = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg} ,$$

Trong 1 nguyên tử số e = số p →  
trung hòa về điện

## 2. Thuyết lượng tử Planck

Năng lượng của ánh sáng không có tính chất liên tục mà bao gồm từng lượng riêng biệt nhỏ nhất gọi là lượng tử. Một lượng tử của ánh sáng (gọi là phôtôn) có năng lượng là :  $E = h\nu = h\frac{c}{\lambda}$

Trong đó: E là năng lượng của photon [J]

$\nu$  : tần số bức xạ [ $s^{-1}$ ]

c: tốc độ ánh sáng  $3.10^8$ m/s

h– hằng số Planck =  $6,626 .10^{-34}$  J.s



# Phương trình Einstein

$$h\nu = h\nu_0 + \frac{1}{2}m\nu^2$$

$\nu$  (s<sup>-1</sup>)

$\nu_0$  (s<sup>-1</sup>)

**$h = 6,626 \cdot 10^{-34}$  J.s**

**$m = 9,1 \cdot 10^{-31}$  kg**

$\nu$  (m/s)



## 4. Lượng tính sóng hạt của vật chất

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

m - Khối lượng của hạt, kg

v - Vận tốc chuyển động của hạt , m/s

h - Hằng số Planck,  $h = 6,63 \cdot 10^{-34} \text{J.s}$

**Ví dụ 1:** So sánh  $\lambda$  trong hai trường hợp: Một hạt có khối lượng  $m = 0,3 \text{ kg}$ , vận tốc chuyển động  $V = 30 \text{ m/s}$  và một  $e$  chuyển động với vận tốc  $10^6 \text{ m/s}$ ?

**Giải:**

$$\lambda_{\text{hat}} = \frac{h}{mv} = \frac{6,626 \cdot 10^{-34}}{0,3 \cdot 30} = 0,736 \cdot 10^{-34} \text{ m}$$

$$\lambda_e = \frac{h}{mv} = \frac{6,626 \cdot 10^{-34}}{9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 10^6} = 0,72 \cdot 10^{-9} \text{ (m)}$$

## 5. Nguyên lý bất định Heisenberg

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

Trong đó

$\Delta x$  - Độ bất định (sai số) về tọa độ theo phương x

$\Delta v_x$  - Độ bất định (sai số) về vận tốc theo phương x

*Không thể xác định đồng thời chính xác cả tọa độ và vận tốc của hạt, do đó không thể vẽ được chính xác quỹ đạo chuyển động của hạt.*

## 6. Khái niệm về cơ học lượng tử

### *a. Hàm sóng*

Trạng thái chuyển động của e trong nguyên tử được mô tả bằng một hàm được gọi hàm sóng  $\psi(x,y,z,t)$

### *b. Phương trình Schrodinger*

$$H\Psi = E\Psi$$

trong đó - H là toán tử Hamilton

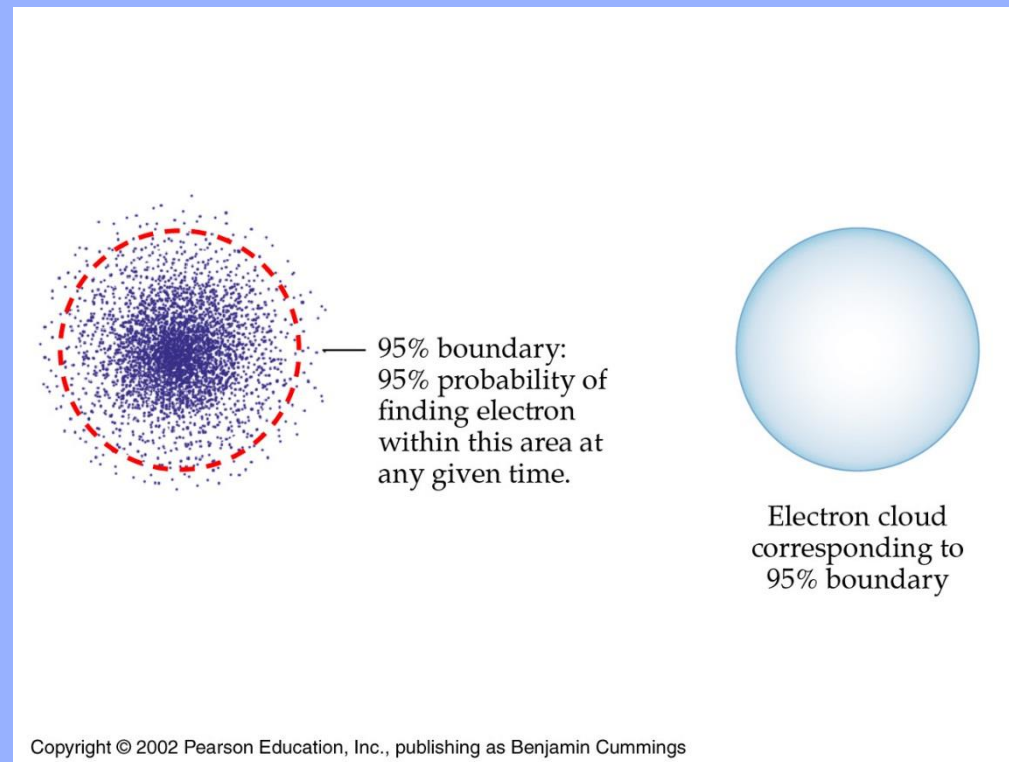
- E là năng lượng toàn phần của electron

*Giải phương trình sóng  $\rightarrow$  tìm được E,  $\psi \rightarrow$  từ đó biết được chuyển động của e.*

# Orbitan nguyên tử và mây electron.

Mỗi giá trị nghiệm  $\psi$  gọi là 1 orbitan nguyên tử, kí hiệu là AO.

Mây e được quy ước là miền không gian gần hạt nhân nguyên tử, trong đó xác suất có mặt electron khoảng 90%.





## II. Bốn số lượng tử đặc trưng cho trạng thái của e trong nguyên tử

### 1. Số lượng tử chính n

- Giá trị  $n=1, 2, \dots$
- Ý nghĩa: Mỗi giá trị đặc trưng cho 1 lớp e trong nguyên tử

|     |   |   |   |   |   |   |   |
|-----|---|---|---|---|---|---|---|
| n   | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 |
| Lớp | K | L | M | N | O | P | Q |

n càng lớn thì lớp electron càng xa nhân và electron có năng lượng càng cao.

## Hệ 1 e (H, He<sup>+</sup>, Li<sup>2+</sup>...)

-Đối với hệ 1 e năng lượng được tính như sau:

$$E_n = -13,6 \cdot \frac{Z^2}{n^2} \quad (\text{eV})$$

- + *E phụ thuộc vào n* ( n càng lớn -> E<sub>e</sub> càng lớn và ngược lại).
- + n gián đoạn → E<sub>e</sub> gián đoạn -> năng lượng của e trong nguyên tử được phân thành từng mức, mỗi mức ứng với 1 giá trị của n.

+ Khi  $n=1 \rightarrow E_1$  min  $\rightarrow$  mức  $E_1$  gọi là trạng thái cơ bản. Vậy trạng thái cơ bản là trạng thái có mức năng lượng thấp nhất.

+ Trạng thái kích thích: Khi cung cấp năng lượng cho hidro, e có thể chuyển ra mức năng lượng cao hơn ( $n>1$ ). Khi đó nguyên tử H ở trạng thái kích thích  $\rightarrow$  Trạng thái kích thích không bền, e có xu hướng quay về trạng thái cơ bản và giải phóng năng lượng

$$\Delta E = -13,6 \left( \frac{Z^2}{n'^2} - \frac{Z^2}{n^2} \right) \quad (n' > n)$$

# Hệ nhiều e

-Đối với hệ nhiều e năng lượng được tính như sau:

$$E_{n,l} = -13,6 \cdot \frac{Z'^2}{n^2}$$

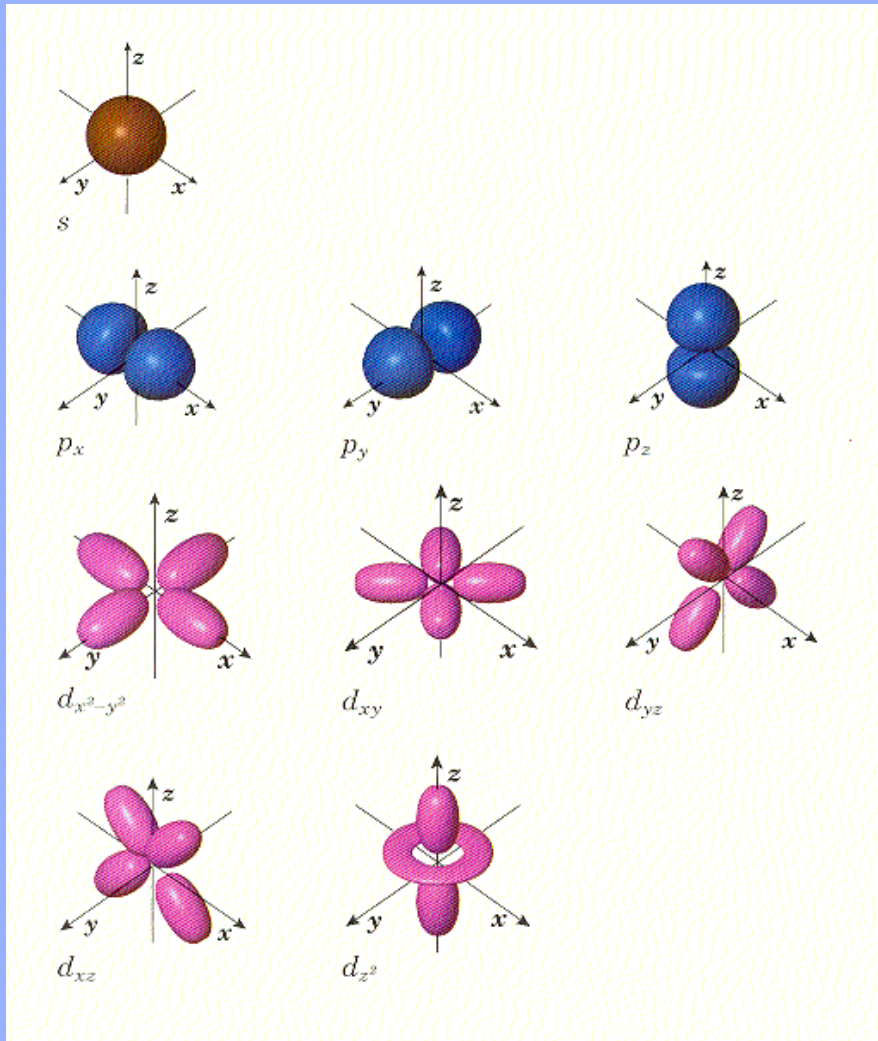
$Z'$  được gọi là điện tích hạt nhân hiệu dụng.

$Z' = Z - A$ ,  $A$  là hằng số chắn của các e còn lại.

*Trong hệ nhiều e thì năng lượng  $E$  của electron phụ thuộc vào 2 giá trị:  $n$  và  $l$*



$l$  cho biết hình dạng orbital



Orbital s : hình cầu  
Orbital p: hình số 8 nổi







### III. Orbital nguyên tử (AO - Atomic orbital)

+ Mỗi 1 hàm sóng  $\Psi$  của electron trong nguyên tử gọi là 1 orbital nguyên tử.

+ 1 AO kí hiệu  $\square$

+ 1 AO được đặc trưng bởi 3 giá trị của 3 số lượng tử  $n$ ,  $\ell$ ,  $m$ . Kí hiệu:  $\Psi_{n, \ell, m}$



# VI. Sự phân bố e trong nguyên tử nhiều e

## 1. Nguyên lý ngoại trừ Pauli

Trong một nguyên tử không thể tồn tại hai electron có cùng giá trị của 4 số lượng tử.

*Hệ quả:* Dựa vào nguyên lý Pauli có thể tính được số electron tối đa trong một ô lượng tử, một phân lớp hay một lớp.

+ Số electron tối đa trong một ô lượng tử là  $2e$

+ Số electron tối đa trong một phân lớp là  $2(2l+1)$ .

|             |   |   |    |    |
|-------------|---|---|----|----|
| Phân lớp    | s | p | d  | f  |
| Số e tối đa | 2 | 6 | 10 | 14 |

Electron capacity  
of shells ( $2n^2$ )

Electron capacity  
of subshells

$n = 4$   $2(4)^2 = 32$

$f$  14  
 $d$  10  
 $p$  6  
 $s$  2

$n = 3$   $2(3)^2 = 18$

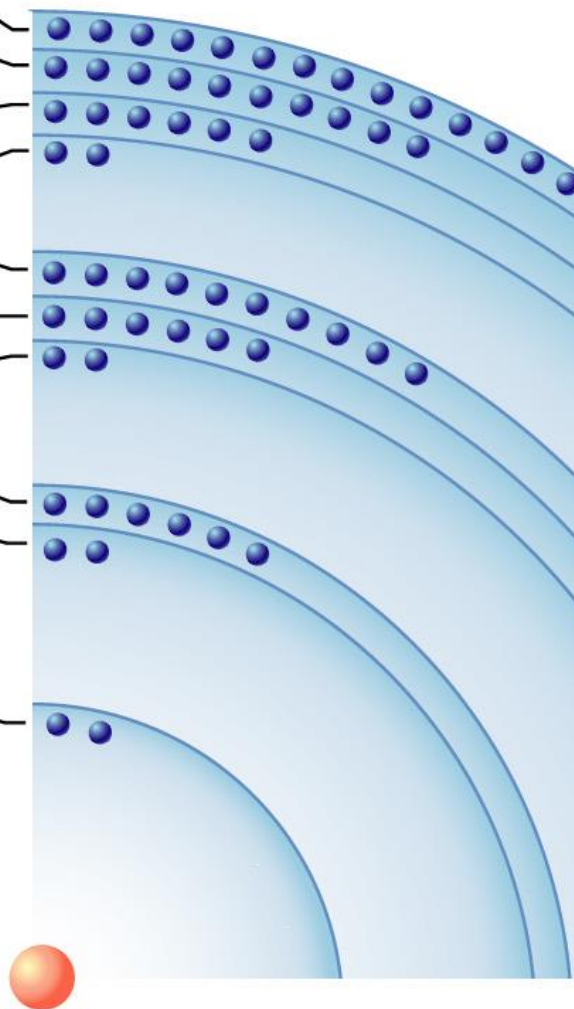
$d$  10  
 $p$  6  
 $s$  2

$n = 2$   $2(2)^2 = 8$

$p$  6  
 $s$  2

$n = 1$   $2(1)^2 = 2$

$s$  2



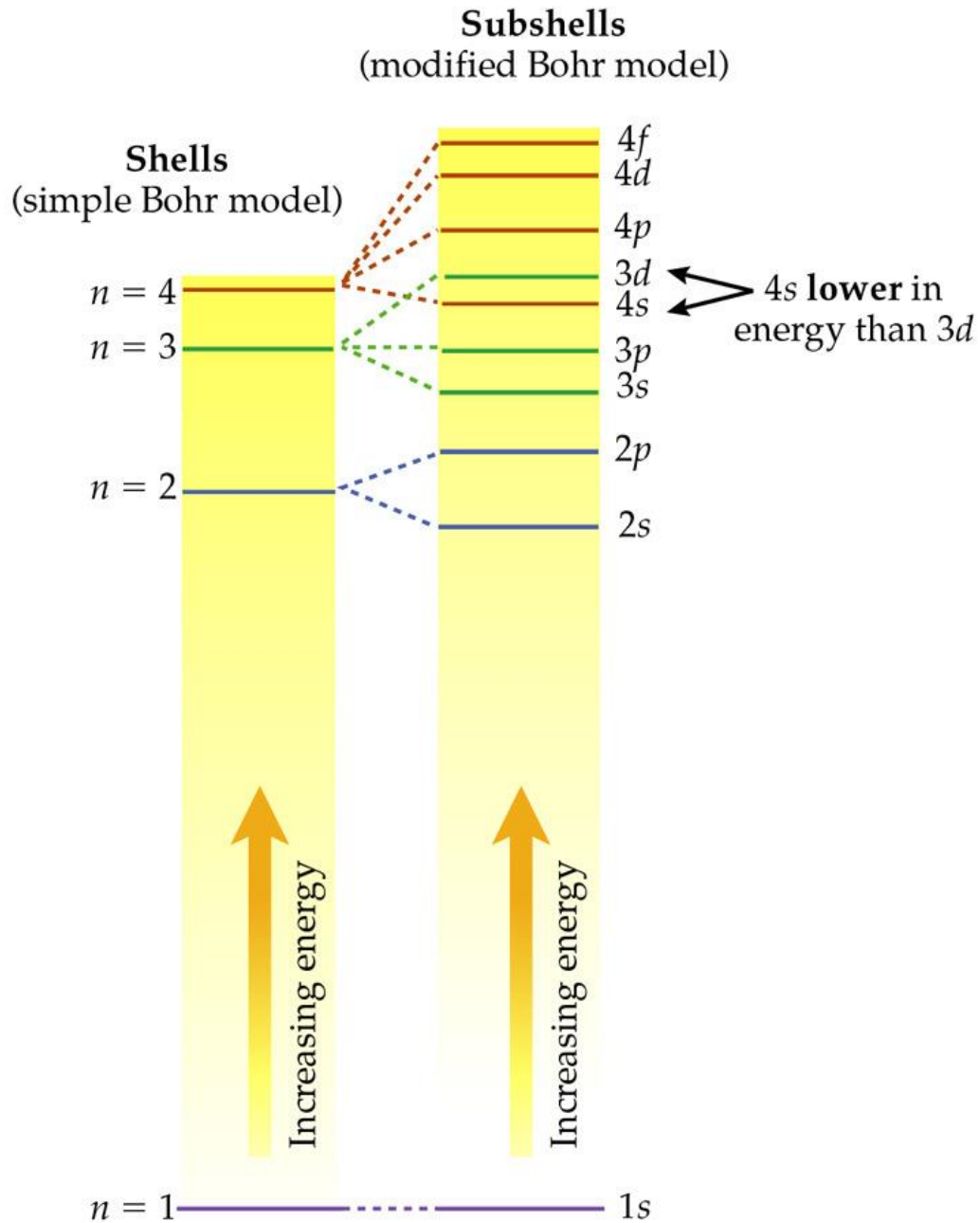


## 2. Nguyên lý vững bền:

- Trong nguyên tử các electron chiếm trước hết các AO có mức năng lượng thấp nhất .

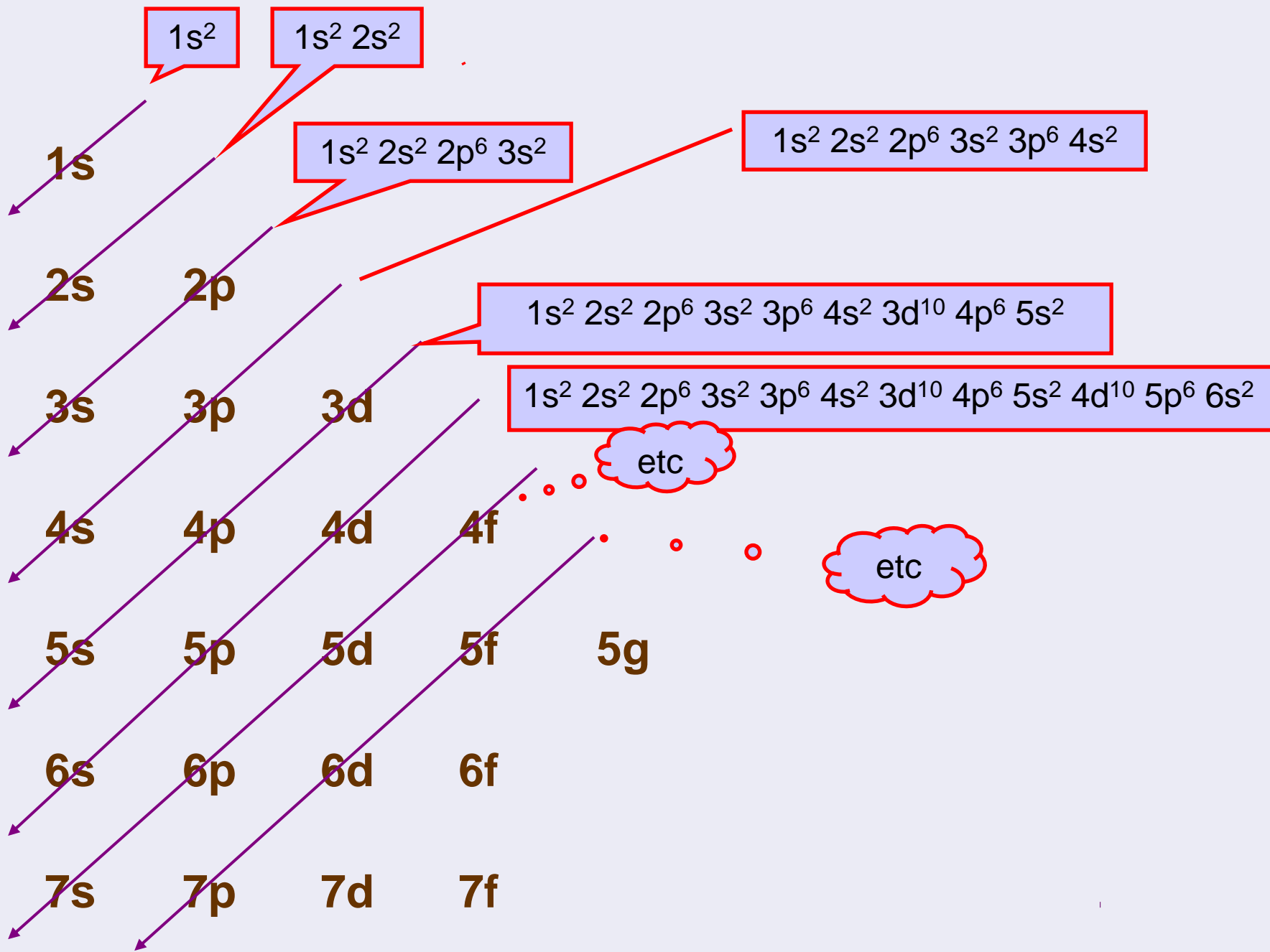
- Năng lượng của các AO trong nguyên tử được xếp theo thứ tự tăng dần như sau :

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



# Quy tắc Klechkowsky







### 3. Quy tắc Hund

Quy tắc Hund: Trong một phân lớp chưa đủ số electron tối đa các electron có khuynh hướng phân bố đều vào các ô lượng tử sao cho số electron độc thân với spin song song là cực đại.

Ví dụ 5: Viết cấu hình e dạng ô lượng tử của nguyên tử C ( $Z=6$ )

**VD 6:** Electron cuối của nguyên tử của nguyên tố S có 4 số lượng tử như sau:

**A.**  $n=3, l=2, m_l = -2, m_s = +1/2$

**B.**  $n=3, l=1, m_l = -1, m_s = -1/2$

**C.**  $n=3, l=0, m_l = +1, m_s = -1/2$

**D.**  $n=3, l=2, m_l = +2, m_s = -1/2$

**VD 7:** Trạng thái chuyển động của electron trong nguyên tử được đặc trưng bởi những số lượng tử sau:

**A.**  $n, l$

**B.**  $l, m$

**C.**  $n, l, m$

**D.**  $n, l, m, m_s$

**VD 8:** Ở trạng thái cơ bản, các electron ở phân lớp  $3p^2$  có thể ứng với bao nhiêu bộ của các số lượng tử  $n, l, m$  và  $m_s$ :

**A.** 8 bộ

**B.** 10 bộ

**C.** 12 bộ

**D.** 6 bộ