

Các số lượng tử

(The Young Vietnamese Chemistry Specialists)



Schrödinger

Có bốn loại số dùng để mô tả các electron trong một nguyên tử

Mô hình của **Borh** là mô hình một chiều đã dùng một số lượng tử để mô tả về các electron trong nguyên tử. Chỉ có kích thước của quỹ đạo là quan trọng và đã được mô tả bằng số lượng tử n . **Schrödinger** đã mô tả một mô hình nguyên tử với các electron trong ba chiều. Mô hình này có 3 loại tọa độ, hay ba số lượng tử để mô tả các vị trí có thể tìm thấy electron.

Ba loại tọa độ từ phương trình sóng của **Schrödinger** là số lượng tử chính (n), số lượng tử góc (1) và số lượng tử từ (m). Các số lượng tử này mô tả về kích thước, hình dạng và hướng trong không gian của các orbital trong nguyên tử.

Có bốn điều bạn nên biết về mỗi số lượng tử: (1) tên và kí hiệu, (2) giá trị có thể của các số lượng tử, (3) các số nói gì về năng lượng của electron và (4) là các số nói gì về vai trò của electron. Bốn mục này thường liên quan đến xác suất mật độ hoặc thể tích của vùng mà trong đó electron có khả năng tìm thấy.

1. Số lượng tử chính (hay số lớp) - n

*Mô tả mức năng lượng trong nguyên tử.

- Các mức năng lượng từ 1 đến 7
- Số electron cực đại có thể điền vào lớp n là $2n^2$ electron

Các giá trị có thể = 1, 2, 3, 4...

Năng lượng = giá trị của n càng lớn thì năng lượng càng cao

Ý nghĩa vật lý = Giá trị lớn hơn thì biểu thị xác suất mật độ lớn hơn

2. Số lượng tử xung lượng (phân lớp) - l

*Mô tả các lớp phụ trong n

- Các phân lớp của các nguyên tố đã biết là **s - p - d - f**

- Mỗi lớp năng lượng có n phân lớp.
- Các phân lớp của các lớp năng lượng khác nhau có thể có các năng lượng xen phủ.

Các giá trị có thể nhận = 0, 1, 2, 3, ... $n - 1$

Các giá trị có các tên xen kẽ mà bạn cũng nên biết:

- $l = 0$ là *s*
- $l = 1$ là *p*
- $l = 2$ là *d*
- $l = 3$ là *f*

Năng lượng = giá trị l lớn hơn sẽ biểu thị năng lượng lớn hơn một chút

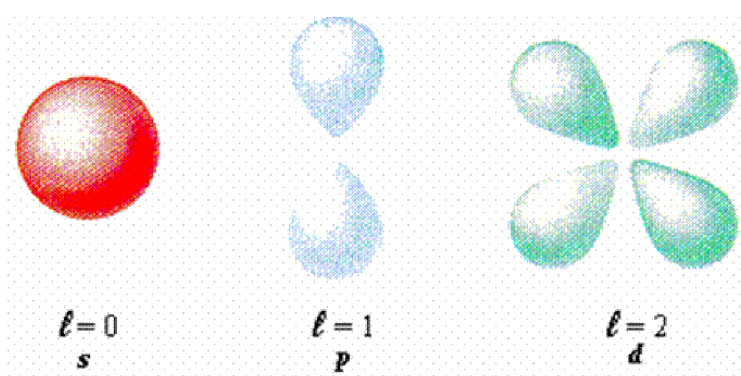
Ý nghĩa vật lý = l liên quan đến hình dạng của các xác suất mật độ xuất hiện của đám mây điện tử:

- $l = 0$ hay **s** là khối cầu (một bụng, không có nốt)
- $l = 1$ hay **p** hình quả tạ (2 bụng, 1 nốt)
- $l = 2$ hay **d** hoa bốn cánh (4 bụng, 2 nốt)
- $l = 3$ hay **f** hình dạng phức tạp (8 bụng, 4 nốt)

2 số lượng tử đầu tiên có thể được biểu thị cùng nhau ví dụ 1s hay 2p.

Số lượng tử xung lượng cũng mô tả hình dạng của các orbital

- Các orbital có hình dạng được mô tả dạng hình cầu ($l=0$), dạng cực ($l=1$), hoặc dạng hình cánh hoa 4 cánh ($l=2$).
- Các orbital còn có những hình dạng phức tạp hơn nếu như các số lượng tử góc trở nên lớn hơn.



3. Số lượng tử từ - m_l

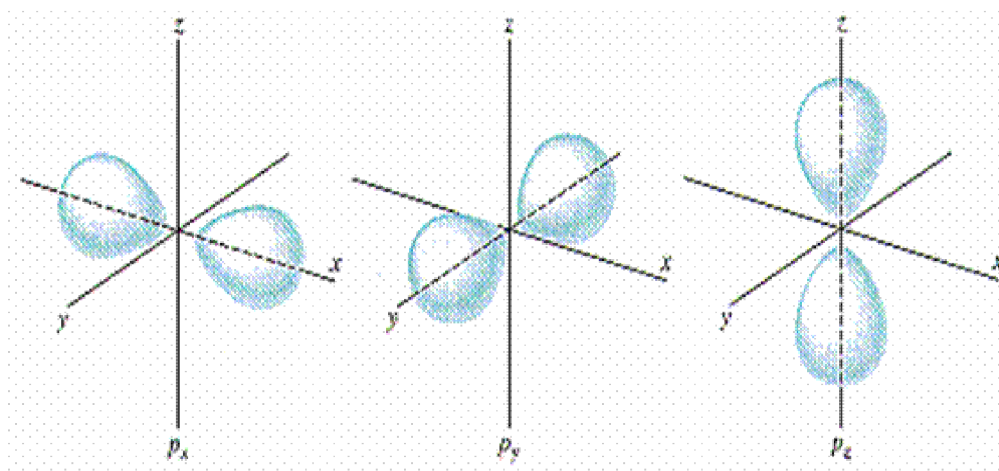
* Mô tả orbital bên trong một phân lớp

- **s** có 1 orbital
- **p** có 3 orbital
- **d** có 5 orbital

- f có 7 orbital

Mỗi orbital không chứa quá 2 electron không bao giờ lớn hơn 2

m cũng mô tả hướng và xác suất có mặt trong không gian orbital của các electron.



Sơ đồ cho thấy 3 hướng có thể của các orbital p p_x , p_y , p_z

Các giá trị có thể nhận = $-l \dots, -2, -1, 0, +1, +2, \dots +l$

Năng lượng = tất cả giá trị m_l có cùng năng lượng

Ý nghĩa vật lý = vị trí sắp xếp của xác suất mật độ

- khi $l = 0$, $m_l = 0$, chỉ có một cách mà quả cầu được định vị s orbital.
- khi $l = 1$, $m_l = -1, 0$, hoặc $+1$, có 3 p orbital.
- khi $l = 2$, $m_l = -2, -1, 0, +1, +2$, có 5 d orbital.
- khi $l = 3$, $m_l = -3, -2, -1, 0, +1, +2, +3$, có 7 f orbital.

4. Số lượng tử Spin – m_s

* Số lượng tử thứ tư này mô tả spin của electron

- Các electron trong cùng một orbital phải có spin đối nhau.
- Các spin có thể quay cùng hay ngược chiều kim đồng hồ.

* Các qui luật chi phối sự kết hợp của các số lượng tử:

- Ba số lượng tử n , l , và m đều là số nguyên.
- Số lượng tử chính (n) không thể là zero.
 - n phải là 1, 2, 3,

- Số lượng tử góc (l) có thể là các số nguyên nằm giữa 0 và $n - 1$.
 - Nếu $n = 3$, l có thể là 0, 1, hoặc 2.
- Số lượng tử từ (m) có thể là bất cứ số nguyên nào nằm giữa $-l$ và $+l$.
 - khi $l = 2$, m có thể nhận các giá trị $-2, -1, 0, +1$, hoặc $+2$.
- Số lượng tử spin (s) nhận các giá trị $+\frac{1}{2}$ hoặc $-\frac{1}{2}$.

Năng lượng = cả hai giá trị đều có cùng năng lượng; tuy nhiên, Năng lượng sẽ thấp hơn nếu các electron không ghép đôi và không xếp cùng spin và cùng hướng.

Ý nghĩa vật lý = spin

Chú ý rằng số lượng tử chính và số lượng tử góc xung lượng mới có ảnh hưởng về mặt năng lượng, nếu khoảng cách của các n là lớn hơn thì khoảng cách giữa các l sẽ nhỏ hơn. Tuy nhiên nhiều bước nhỏ sẽ thành một bước lớn. Một qui luật rất hữu dụng là nếu tổng $n+l$ lớn hơn thì năng lượng sẽ lớn hơn. Nếu 2 giá trị của tổng $n + l$ bằng nhau thì electron nào có n nhỏ hơn thì năng lượng sẽ nhỏ hơn. Năng lượng nhỏ hơn sẽ bền hơn. Năng lượng thấp nhất là “trạng thái cơ bản”.

Nguyên Lý loại trừ Pauli:

Không tồn tại 2 electron trong một nguyên tử có cùng các số lượng tử.

Qui tắc Hund

Các electron sẽ điền vào các orbital trống có năng lượng bằng nhau, trước khi nó điền thêm electron thứ 2 nếu chúng đã sẵn sàng để điền các electron.



Hóa học lượng tử:

Mô tả cách mà các nguyên tử kết hợp để hình thành các phân tử và cách mà các phân tử tương tác với nhau dùng các qui tắc của vật lý lượng tử.

Một chìa khóa để hiểu hóa lượng tử là một electron không phải là một hạt cơ bản nằm trong một vị trí xác định nào đó trong không gian, thậm chí một đơn electron có thể quay quanh hạt nhân nguyên tử tạo nên thể tích của cả nguyên tử. Thay vì nghĩ rằng các lớp electron nằm gần nhau thì nên hình dung các electron được xếp trong các orbital giống như các các gợn sóng trên mặt hồ khi ta ném một cục đá. Mỗi đám mây electron trải rộng và bao xung quanh hạt nhân nguyên tử và tất cả các electron trong một nguyên tử chịu ảnh hưởng trực tiếp từ hạt nhân, mặc dù có một số electron chịu ảnh hưởng mạnh hơn các electron khác. Khi mà không có đủ chỗ trống cho các orbital để nằm gần hạt nhân thì có

một số orbital tập trung xa hạt nhân hơn với mật độ cao. Một số sự sắp xếp của các electron trong orbital ổn định hơn hay bền hơn các electron khác, và các nguyên tử sẽ tương tác để đạt được sự sắp xếp ổn định này đây là cơ sở cho việc hình thành liên kết.

Một số ví dụ về số lượng tử

Ví dụ 1

Sắp xếp các electron sau đây (n, l, m_l, m_s) từ năng lượng cao nhất đến năng lượng thấp nhất.

- A. (2, 1, 1, +1/2)
- B. (1, 0, 0, -1/2)
- C. (4, 1, -1, +1/2)
- D. (4, 2, -1, +1/2)
- E. (3, 2, -1, +1/2)
- F. (4, 0, 0, +1/2)
- G. (2, 1, -1, +1/2)
- H. (3, 1, 0, +1/2)

Lời giải

Năng lượng thấp nhất sẽ có tổng $n + l$ thấp nhất. Các electron C và E có cùng giá trị là 5 mà E có n thấp hơn sẽ có năng lượng thấp hơn. Các electron H và F cũng có cùng giá trị tổng $n + l$ và H có năng lượng thấp hơn. Các electron A và G có cùng giá trị n và l do vậy chúng có cùng năng lượng

Năng lượng thấp nhất $B < A = G < H < F < E < C < D$ **Năng lượng cao nhất**

Ví dụ 2

Sắp xếp các orbital có năng lượng giảm dần.

$3s, 5p, 4d, 1s, 5d, 3p$

Lời giải

Nhắc lại s là 0, p là 1, và d là 2. năng lượng có thể sắp xếp theo tổng $n + l$, do đó

$3s = 3, 5p = 6, 4d = 6, 1s = 1, 5d = 7, 3p = 4$

Năng lượng cao $5d > 5p > 4d > 3p > 3s > 1s$ **năng lượng thấp**

Sau khi đã đọc xong bài này mời bạn làm các bài tập sau:

Bài 1

Điều gì không ổn với các số lượng tử (n, l, m_l, m_s) của các electron sau?

- a. (2, 2, 0, +1/2)
- b. (3, 1, -1, -1/2)

- c. $(3, 1, -2, 1)$
- d. $(4, 0, 1, +1/2)$
- e. $(+1/2, 1, 1, 1)$

Bài 2 Từ các electron trong ví dụ 1 hãy trả lời các câu hỏi sau:

- A. $(2, 1, 1, +1/2)$
- B. $(1, 0, 0, -1/2)$
- C. $(4, 1, -1, +1/2)$
- D. $(4, 2, -1, +1/2)$
- E. $(3, 2, -1, +1/2)$
- F. $(4, 0, 0, +1/2)$
- G. $(2, 1, -1, +1/2)$
- H. $(3, 1, 0, +1/2)$

- a. Electron nào có spin khác hướng với các electron còn lại?
- b. Electron nào xếp trong orbital hình cầu?
- c. Electron nào xếp trong p-orbital?
- d. Electron nào xếp trong d-orbital?
- e. Electron nào nằm xa hạt nhân nguyên tử nhất?
- f. 2 electron nào xếp trong cùng 1 orbital?
- g. 2 electron nào xếp khác hướng?
- h. 2 electron nào không thể nằm trong cùng một nguyên tử?
- i. các electron nào có cùng năng lượng?
- j. electron nào xếp vào f-orbital?