

I. Lớp và Phân lớp Electron

Electron trong vỏ nguyên tử được sắp xếp thành từng lớp và phân lớp theo các mức năng lượng từ thấp đến cao.

1. Lớp electron

Các electron trên cùng một lớp có mức năng lượng gần bằng nhau.

- **Ký hiệu:** Các lớp được ký hiệu bằng các số nguyên $n = 1, 2, 3, 4, \dots$ hoặc các chữ cái in hoa tương ứng là K, L, M, N,...
- **Thứ tự:** Lớp $n=1$ (lớp K) là lớp gần hạt nhân nhất và có mức năng lượng thấp nhất. Năng lượng của electron tăng dần khi n tăng.
- **Số electron tối đa trong một lớp (lớp thứ n):**

Công thức: $2n^2$ (với $n \leq 4$)

Công thức này giúp xác định số lượng electron tối đa mà một lớp có thể chứa.

Ví dụ:

- **Lớp K ($n=1$):** Có tối đa $2.1^2 = 2$ electron.
- **Lớp L ($n=2$):** Có tối đa $2.2^2 = 8$ electron.
- **Lớp M ($n=3$):** Có tối đa $2.3^2 = 18$ electron.
- **Lớp N ($n=4$):** Có tối đa $2.4^2 = 32$ electron.

2. Phân lớp electron

Mỗi lớp electron (trừ lớp K) lại được chia thành các phân lớp nhỏ hơn có mức năng lượng bằng nhau.

- **Ký hiệu:** Các phân lớp được ký hiệu bằng các chữ cái thường: **s, p, d, f**.
- **Số phân lớp trong một lớp:** Lớp thứ n có n phân lớp.
- **Số electron tối đa trong một phân lớp:**
 - s:** chứa tối đa 2 electron
 - p:** chứa tối đa 6 electron
 - d:** chứa tối đa 10 electron
 - f:** chứa tối đa 14 electron

Ví dụ:

- **Lớp K (n=1):** Có 1 phân lớp là 1s.
- **Lớp L (n=2):** Có 2 phân lớp là 2s và 2p.
- **Lớp M (n=3):** Có 3 phân lớp là 3s, 3p và 3d.

Lớp (n)	Tên lớp	Các phân lớp	Số electron tối đa của lớp (2n ²)
1	K	1s	2
2	L	2s, 2p	8
3	M	3s, 3p, 3d	18
4	N	4s, 4p, 4d, 4f	32

II. Orbital Nguyên tử (AO)

1. Khái niệm

Orbital 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 AO chỉ chứa tối đa 2 electron.

2. Số lượng và hình dạng các Orbital

- **Phân lớp s:** Có 1 AO hình cầu.
- **Phân lớp p:** Có 3 AO hình số tám nổi, định hướng theo 3 trục không gian vuông góc (p_x , p_y , p_z).
- **Phân lớp d:** Có 5 AO có hình dạng phức tạp hơn.
- **Phân lớp f:** Có 7 AO có hình dạng rất phức tạp.

III. Thứ tự Mức Năng lượng và các Quy tắc Phân bố Electron

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

Các electron trong nguyên tử ở trạng thái cơ bản lần lượt chiếm các orbital có mức năng lượng từ thấp đến cao.

- **Thứ tự mức năng lượng của các phân lớp:**

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

- **Lưu ý:** Từ lớp thứ 3 trở đi có sự chèn mức năng lượng. Ví dụ, mức năng lượng của phân lớp 4s thấp hơn 3d, nên electron sẽ điền vào 4s trước khi điền vào

3d.

2. Các nguyên lí và quy tắc phân bố electron

1. Nguyên lí vững bền (Nguyên lí Aufbau)

Nội dung: Ở trạng thái cơ bản, trong nguyên tử các electron lần lượt chiếm các orbital có mức năng lượng từ thấp đến cao.

Ví dụ: Electron sẽ điền vào orbital 1s trước, sau đó đến 2s, rồi đến 2p, và cứ thế tiếp tục theo dãy năng lượng.

2. Nguyên lí Pauli

Nội dung: Trên một orbital nguyên tử có thể chứa tối đa hai electron và hai electron này phải có chiều tự quay ngược nhau (spin ngược dấu).

Ví dụ:

- Orbital 1s của nguyên tử Helium (He) có 2 electron. Khi biểu diễn trên ô orbital, ta vẽ một mũi tên đi lên và một mũi tên đi xuống.
- Một orbital không thể chứa 2 electron có cùng chiều tự quay (hai mũi tên cùng đi lên hoặc cùng đi xuống).

3. Quy tắc Hund

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

Ví dụ:

- **Nguyên tử Nitrogen (N, Z=7):** Cấu hình electron là $1s^2 2s^2 2p^3$. Phân lớp 2p có 3 orbital. Theo quy tắc Hund, 3 electron sẽ được phân bố vào 3 orbital khác nhau, mỗi orbital có 1 electron độc thân với spin cùng chiều.
- **Nguyên tử Oxygen (O, Z=8):** Cấu hình electron là $1s^2 2s^2 2p^4$. Phân lớp 2p có 4 electron. Ba electron đầu tiên sẽ điền vào 3 orbital riêng biệt (theo quy tắc Hund). Electron thứ tư sẽ ghép đôi với một trong ba electron đó, tạo thành một cặp electron với spin ngược chiều (theo nguyên lí Pauli).

IV. Cấu hình Electron của Nguyên tử

1. Khái niệm

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

2. Cách viết cấu hình electron

1. **Bước 1:** Xác định số electron của nguyên tử. Số electron = số proton = số hiệu nguyên tử Z.
2. **Bước 2:** Phân bố các electron vào các phân lớp theo thứ tự mức năng lượng ($1s\ 2s\ 2p\ 3s\ 3p\ 4s\ 3d\dots$) và tuân thủ các nguyên lí Pauli, quy tắc Hund.
3. **Bước 3:** Viết cấu hình electron theo thứ tự các lớp electron (1, 2, 3, 4,...).

Cấu trúc: $n(\text{phân lớp})^{\text{số e}}$. Ví dụ: $1s^2, 2p^6, 3d^{10}$.

3. Ví dụ minh họa

- **Lithium (Li, Z=3):** Có 3 electron. Phân bố: $1s^2 2s^1$. Cấu hình electron: **$1s^2 2s^1$** .
- **Sodium (Na, Z=11):** Có 11 electron. Phân bố: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$. Cấu hình electron: **$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$** .
- **Chlorine (Cl, Z=17):** Có 17 electron. Phân bố: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$. Cấu hình electron: **$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$** .
- **Calcium (Ca, Z=20):** Có 20 electron. Phân bố: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2$. Cấu hình electron: **$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2$** .

4. Cấu hình electron dạng rút gọn

Để viết gọn, ta có thể thay thế một phần cấu hình electron bằng ký hiệu của nguyên tử khí hiếm đứng trước nó trong bảng tuần hoàn.

- **Na (Z=11):** Khí hiếm đứng trước là Ne (Z=10, $1s^2 2s^2 2p^6$). Cấu hình rút gọn: **$[\text{Ne}] 3s^1$** .
- **Cl (Z=17):** Khí hiếm đứng trước là Ne (Z=10). Cấu hình rút gọn: **$[\text{Ne}] 3s^2 3p^5$** .
- **Ca (Z=20):** Khí hiếm đứng trước là Ar (Z=18, $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$). Cấu hình rút gọn: **$[\text{Ar}] 4s^2$** .

5. Cấu hình electron của ion

- **Ion dương (cation):** Được hình thành khi nguyên tử nhường electron ở lớp ngoài cùng.

Ví dụ: Na ($Z=11$) có cấu hình $[\text{Ne}] 3s^1$. Khi nhường $1e$, tạo thành ion Na^+ có cấu hình của Ne: **$[\text{Ne}]$** hay **$1s^2 2s^2 2p^6$** .

- **Ion âm (anion):** Được hình thành khi nguyên tử nhận thêm electron vào lớp ngoài cùng.

Ví dụ: Cl ($Z=17$) có cấu hình $[\text{Ne}] 3s^2 3p^5$. Khi nhận $1e$, tạo thành ion Cl^- có cấu hình của Ar: **$[\text{Ar}]$** hay **$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$** .

6. Cấu hình electron đặc biệt (bán bão hòa và bão hòa)

Các cấu hình electron đạt trạng thái bão hòa (s^2 , p^6 , d^{10}) hoặc bán bão hòa (p^3 , d^5) trên các phân lớp thường bền vững hơn. Do đó, có một số trường hợp ngoại lệ so với quy tắc Klechkowski.

- **Chromium (Cr, $Z=24$):**

Dự đoán theo quy tắc: $[\text{Ar}] 3d^4 4s^2$.

Thực tế (bền hơn): **$[\text{Ar}] 3d^5 4s^1$** (do phân lớp d đạt trạng thái bán bão hòa bền vững).

- **Copper (Cu, $Z=29$):**

Dự đoán theo quy tắc: $[\text{Ar}] 3d^9 4s^2$.

Thực tế (bền hơn): **$[\text{Ar}] 3d^{10} 4s^1$** (do phân lớp d đạt trạng thái bão hòa bền vững).

V. Đặc điểm của Lớp Electron Ngoài Cùng

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

1. Electron hóa trị

Electron hóa trị là những electron có khả năng tham gia hình thành liên kết hóa học. Chúng thường là các electron ở lớp ngoài cùng và phân lớp sát ngoài cùng chưa bão hòa.

- **Đối với nguyên tố nhóm A:** Electron hóa trị là electron ở lớp ngoài cùng.
- **Đối với nguyên tố nhóm B:** Electron hóa trị bao gồm electron ở lớp ngoài cùng và phân lớp d hoặc f sát lớp ngoài cùng.

2. Mối liên hệ giữa cấu hình electron lớp ngoài cùng và tính chất nguyên tố

Số electron ở lớp ngoài cùng cho biết khuynh hướng nhường, nhận hay góp chung electron của nguyên tử, từ đó suy ra tính chất kim loại, phi kim hay khí hiếm.

Số e lớp ngoài cùng	Tính chất hóa học	Khuynh hướng	Ví dụ
1, 2, 3	Kim loại (trừ H, He, B)	Dễ nhường electron	Na ($[\text{Ne}]3s^1$), Mg ($[\text{Ne}]3s^2$), Al ($[\text{Ne}]3s^23p^1$)
5, 6, 7	Phi kim	Dễ nhận electron	N ($\dots 2s^22p^3$), O ($\dots 2s^22p^4$), F ($\dots 2s^22p^5$)
8 (trừ He có 2)	Khí hiếm	Bền vững, khó tham gia phản ứng	Ne ($\dots 2s^22p^6$), Ar ($\dots 3s^23p^6$)
4	Có thể là kim loại hoặc phi kim	Có xu hướng dùng chung electron	C ($\dots 2s^22p^2$ - phi kim), Si ($\dots 3s^23p^2$ - phi kim)