

**B GIÁO D C VÀ ÀO T O
TR NG IH C TÂY Ô**



GIÁO TRÌNH
HÓA I C NG – VÔ C

(DÙNG CHO ÀO T O D C S IH C)

C N TH - 2016

M C L C

	<i>biên số n</i>	Trang
<i>L i m</i> <i>u</i>		03
Danh m c vi t t t và ký hi u		04
Ch ng 1		
C U T O NGUYÊN T		
NH LU T TU N HOÀN CÁC NGUYÊN T <i>ThS. Nguy n Minh Kha.....</i>		05
1.1 THÀNH PH N C U T O NGUYÊN T		05
1.2 C U T O NGUYÊN T		12
1.3 B NG H TH NG TU N HOÀN CÁC NGUYÊN T HÓA H C.....		26
Ch ng 2		
C U T O PHÂN T		
LIÊN K T HÓA H C <i>ThS. Nguy n Minh Kha.....</i>		36
2.1 M T S IL NG CÓ LIÊN QUAN N LIÊN K T.....		36
2.2 S PHÂN C C C A PHÂN T		44
Ch ng 3		
PH C CH T <i>ThS. Nguy n Minh Kha.....</i>		47
3.1 KHÁI NI M V PH C CH T.....		47
3.2 PHÂN LO I PH C CH T.....		48
3.3 G ITÊN H PCH T PH C.....		49
3.4 M T S TÍNH CH TC A PH C CH T.....		51
3.5 I UCH PH C CH T.....		53
Ch ng 4		
NHI T – NG H C PH N NG HÓA H C		

	<i>ThS. Nguyễn Minh Kha</i>	56
4.1 KHÁI NIỆM.....		56
4.2 NGUYÊN LÝ THỰC HÀNH CẤU TRÚC PHÂN NGUYÊN - ĐOẠN KHUYNH TĐ ĐỂ ĐỀ CƯƠNG PHÂN NGUYÊN HÓA HỌC		63
Chương 5		
	NGUYÊN CẤU TRÚC PHÂN NGUYÊN - CẤU TRÚC NGUYÊN HÓA HỌC <i>ThS. Nguyễn Minh Kha</i>	73
5.1 KHÁI NIỆM VÀ CÁC YẾU TỐ NHỮNG NGUYÊN TỬ CẤU TRÚC PHÂN NGUYÊN.....		73
5.2 CẤU TRÚC NGUYÊN HÓA HỌC.....		82
Chương 6		
	ION NGUYÊN DUNG DỊCH <i>ThS. Phạm Quang Khôi</i>	86
6.1 NHỮNG A VÀ PHÂN LOẠI DUNG DỊCH.....		86
6.2 NƯỚC DUNG DỊCH.....		86
6.3 DUNG DỊCH CHỈ TỈ NHIỆT.....		89
6.4 THUYẾT PROTON VÀ ACID VÀ BASE. BRONSTED.....		92
6.5 DUNG DỊCH M.....		98
Chương 7		
	HÓA HỌC CÁC NGUYÊN TỬ <i>ThS. Phạm Quang Khôi</i>	102
7.1 NGUYÊN TỬ NHÓM A.....		102
7.2 CÁC KIM LOẠI NHÓM B.....		114
TÀI LIỆU THAM KHẢO		124

LỜI NÓI ĐẦU

Trong chương trình đào tạo cử nhân ngành Công nghệ Hóa học – Vô cơ là môn cơ sở ngành làm nền tảng cho các em sinh viên nắm vững kiến thức cơ bản về hóa học và tính chất hóa học của các nguyên tố nhóm chính và phụ trong ngành d. Học phần này có vị trí ra cho sinh viên có chú ý vào cơ bản nên nội dung cơ bản và công việc các em tiếp thu những kiến thức cần thiết cho các học phần sau.

Giáo trình **Hóa học cơ bản – Vô cơ** bao gồm 7 chương trình bày theo thứ tự:

Chương 1: **Cấu tạo nguyên tử - Nh luật tuần hoàn các nguyên tố hóa học**

Chương 2: **Cấu tạo phân tử - Liên kết hóa học**

Chương 3: **Phản ứng oxi hóa khử**

Chương 4: **Nhiệt động học phân tử hóa học**

Chương 5: **Hóa học phân tử - Cân bằng hóa học**

Chương 6: **Hóa học vô cơ dung dịch**

Chương 7: **Hóa học các nguyên tố**

Trong quá trình biên soạn, các tác giả đã cố gắng dùng những hình ảnh trực quan và một số câu hỏi để giúp sinh viên tiếp nhận kiến thức một cách dễ dàng. Tuy nhiên, giáo trình này cũng có thể mắc những sai sót, chúng tôi xin chân thành nhận lỗi và mong ý kiến đóng góp quý báu của quý thầy cô, các bạn đồng nghiệp, sinh viên để sách này được hoàn thiện hơn.

Chân thành cảm ơn!

CÁC TÁC GIẢ

DANH MỤC VIẾT TẮT

P	Proton
N	Neutron
E	Electron
Z	Số hiệu nguyên tử
Z ⁺	Điện tích hạt nhân
A	Số khối
M	Khối lượng mol nguyên tử / khối lượng mol phân tử
g	Gram
C	Coulomb
.v.C	Đơn vị Cacbon
u	Unit
Å	Angstrom
	Bước sóng
AO	Atomic orbital
	hàm sóng
CHLT	Chức năng lượng

Chương 1

CẤU TRÚC NGUYÊN TỬ - NHU TỐ TUẦN HOÀN CÁC NGUYÊN TỬ

MỤC TIÊU BÀI HỌC

Khi học xong chương này, sinh viên chuyên ngành Dành học có khả năng biết, hiểu và vận dụng các vấn đề sau:

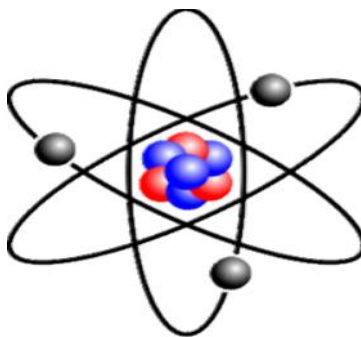
1. Thành phần cấu tạo nguyên tử như thế nào, các khái niệm cơ bản.
2. Thuyết lượng tử ánh sáng, cấu tạo electron theo mô hình Niels Bohr.
3. Bảng hệ thống tuần hoàn các nguyên tử hóa học.
4. Nhu tố tuần hoàn các nguyên tử hóa học.

1.1 THÀNH PHẦN CẤU TRÚC NGUYÊN TỬ

1.1.1 THÀNH PHẦN NGUYÊN TỬ

Nguyên tử là hạt nhỏ nhất của nguyên tử hóa học không thể chia nhỏ hơn nữa và mất hóa học.

Nguyên tử của các nguyên tử có kích thước vô cùng nhỏ. Nếu xem gần đúng, nguyên tử nhỏ nhất thì nguyên tử nguyên tử hydro là nhỏ nhất với bán kính vào khoảng $0,68 \text{ \AA}$. Khối lượng của nguyên tử nguyên tử hydro bằng $1,673 \cdot 10^{-23} \text{ g}$.



Hình 1.1 Mô hình nguyên tử đơn giản.

Tuy nhiên về mặt vật lý, nguyên tử thực ra phải là một khối. Nó có cấu tạo bởi 3 loại hạt cơ bản (như hình 1.1) là electron (kí hiệu là e^-) tích điện âm – tồn tại ở lớp vỏ, proton (kí hiệu là p) tích điện dương và hạt nơtron (kí hiệu là n) không mang điện tích cùng tồn tại với proton nhân của nguyên tử.

Có thể thấy, nguyên tử được cấu thành bởi *lớp vỏ electron* và *hạt nhân*. Trong hạt nhân nguyên tử có 2 loại hạt cơ bản: *proton* và *nơtron*. Như vậy, khối lượng của hạt nhân là tổng khối lượng p và n :

$$m_{\text{hạt nhân}} = m_p + m_n \quad (1)$$

Electron tồn tại ở lớp vỏ bao quanh hạt nhân. Chúng tích điện âm. Khối lượng của electron nhỏ hơn rất nhiều so với khối lượng của hạt proton và nơtron:

$$m_{e^-} \sim 10^{-4} \cdot m_p \sim 10^{-4} \cdot m_n$$

Điện tích của proton và electron có cùng giá trị tuyệt đối, chỉ khác nhau về dấu. Bởi vì nguyên tử của nguyên tử nào, nó luôn trung hòa về điện. Do đó, điện tích của nguyên tử phải có số lượng hạt proton bằng số hạt electron:

$$p = e \quad (2)$$

Mỗi hạt nhân của số lượng proton khác nhau (mà về sau chúng quy định thành số khác biệt tính chất) nên người ta còn gọi chúng là *số hiệu nguyên tử*, ký hiệu là Z . Vì vậy, $Z+$ cũng gọi là điện tích hạt nhân.

Nguyên tử rất nhỏ, như bạn có thể tưởng tượng được chúng ta cũng chưa thể nhìn thấy kích thước thực của nó. Chính vì vậy, các hạt cơ bản cấu thành nó cũng rất nhỏ – rất nhỏ. Khi đó, vô số các hạt proton và nơtron nén chặt trong hạt nhân nên các hạt cơ bản này, khối lượng của nguyên tử xem như tập trung ở hạt nhân. Nếu quy định khối lượng của 1 hạt proton và 1 hạt nơtron là đơn vị khối lượng nguyên tử (unit) hay 1 u (đơn vị cacbon) thì điện tích của nguyên tử bằng số lượng hạt proton và nơtron, do đó khối lượng của nguyên tử xem như bằng số hạt nhân A :

$$A = p + n \quad (3)$$

Chính vì thế, điện tích của nguyên tử cũng có giá trị bằng A hạt nhân. Mà sau này chúng ta sẽ thấy mối liên hệ giữa A và khối lượng mol nguyên tử M .

Nguyên tố hóa học. Trong thế giới khách quan, vật chất được cấu thành từ rất nhiều loại nguyên tố. Các nguyên tố có cùng vị trí hóa học nhân đôi gọi là một nguyên tố hóa học.

Nhiều nguyên tố là hỗn hợp của nhiều đồng vị. Đồng vị là các nguyên tố có cùng vị trí hóa học nhân đôi nhưng khác nhau về số neutron trong hạt nhân.

Ví dụ: Khí hydro thiên nhiên là hỗn hợp của 3 đồng vị là protium (1_1H), deuterium (2_1H) và tritium (3_1H). Tuy nhiên, hai đồng vị protium và deuterium là rất hiếm nên nghiên cứu nên một thời gian dài người ta chỉ biết đến hydro chỉ có 2 loại đồng vị.

Ngày nay, người ta đã biết đến hơn 119 nguyên tố thiên nhiên và nhân tạo nên việc nghiên cứu trở nên phong phú và cần ký hiệu thống nhất. Ký hiệu nguyên tố được chấp nhận có dạng:



trong đó – A là số khối

- p là số proton

- X là ký hiệu tên nguyên tố

Ví dụ: Nguyên tố sắt có ký hiệu ${}^{56}_{26}Fe$ - Fe là ký hiệu tên của sắt, 26 là số hạt proton trong hạt nhân nguyên tố sắt, 56 là tổng số hạt neutron và proton trong nguyên tố sắt.

Phân tử. Phân tử là một vi mô, nhưng chúng có tính chất hóa học của chất nào đó. Phân tử có thể có từ 2 hay hàng ngàn nguyên tử liên kết với nhau (trừ các khí hiếm thì chỉ có 1 nguyên tử).

Công thức hóa học. Trong hóa học, người ta biểu diễn phân tử bằng công thức hóa học. Công thức hóa học bao gồm ký hiệu hóa học của các nguyên tố nên phân tử cùng với các chỉ số phía dưới bên phải chỉ số lượng nguyên tử của nguyên tố đứng trong phân tử.

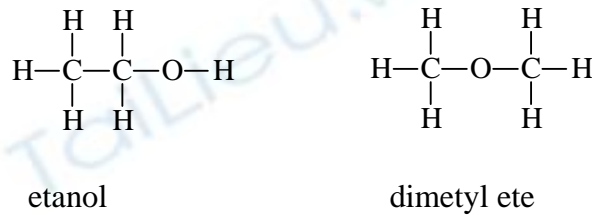
Ví dụ: Phân tử nước có ký hiệu là H_2O . Tức là, một phân tử nước chứa 2 nguyên tử hydro và một nguyên tử ôxi.

Đơn chất. Một nguyên tố của cùng một nguyên tử liên kết với nhau tạo thành phân tử gọi là các đơn chất. Ví dụ như phân tử khí ôxi (O_2).

Hợp chất. Phân tử có 2 nguyên tử trên cùng là *hợp chất*. Một hợp chất luôn luôn có thành phần xác định. Nhưng một thành phần xác định không phải luôn luôn ứng với một chất. Ví dụ như C_2H_6O có thành phần xác định – 2 nguyên tử cacbon, 6 nguyên tử hydro và 1 nguyên tử ôxi – 1 ứng với 2 chất là ethanol và dimethyl ete. Chúng là các chất *ng phân* với nhau. Chính vì vậy, người ta cần quan tâm kỹ hơn về mặt thực tế của chúng.

Công thức cấu tạo. Công thức hóa học cho biết trật tự và cách thức liên kết giữa các nguyên tử cùng gọi là *công thức cấu tạo*.

Ví dụ: 2 ứng phân ethanol và dimethyl ete có biểu thị 2 cấu tạo:



Ngày nay, người ta còn biết đến các chất có thành phần biến đổi. Nhưng hợp chất đó gọi là *hợp chất không hợp thành*.

Ví dụ: Titan oxit có biểu thị thành phần biến đổi là $TiO_{0,58}$ và $TiO_{1,33}$. Thành phần biến đổi như người ta biết tính chất titan oxit không thay đổi nên tính chất hóa học không thay đổi mà chỉ làm thay đổi tính chất vật lý như tính chất điện và quang.

1.1.2 CÁC ĐẠI NGUYÊN CẤU NGUYÊN CẤU

Các giá trị nguyên tử và điện tích của các nhà khoa học tính toán và thể hiện trong bảng sau:

Bảng 1.1 Bảng giá trị khối lượng và điện tích của các loại hạt

<i>Hạt</i>	<i>Khối lượng (g)</i>	<i>Điện tích (coulomb)</i>
electron (E)	$9,1.10^{-28}$	$-1,6.10^{-19}$
proton (P)	$1,673.10^{-24}$	$+1,6.10^{-19}$
neutron (N)	$1,675.10^{-24}$	0

Qua đó, chúng ta nhận thấy: khối lượng mihitn hay prtl n h n m i h t e⁻ (khong 10⁴ l n), i n tích m i h t p và e⁻ là gi ng nhau v tr tuy t i nh ng trái d u. Ta có:

$$1(u) = 1(\text{v.C}) = 1,661 \cdot 10^{-24} \text{ (g)}$$

$$1,6 \cdot 10^{-19} \text{ (C)} = 1 \text{ n v i n tích} = +1$$

Chính vì vậy, 1 h t p hay n c xem là có tr ng l ng lu. M i h t e⁻ có i n tích -1, còn p là +1.

Ví dụ : 1 nguyên tử natri (Na) có tr ng l ng 23u, trong đó, h t nhân tích i n +11 cân b ng i n v i l p v electron -11. Vì trong 1 nguyên tử Na có 11 h t p, 12 h t n và 11 h t e⁻ nên 23 chính là A .

Mol là n v o l ng dùng trong hóa học nh m di n t l ng ch t có ch a s h t nguyên tử hay ion và c nhà khoa học, Lorenzo Romano Amedeo Carlo Avogadro di Quaregna e di Cerreto, phát minh ra s $6,02214179 \times 10^{23}$. G i t t là h ng s Avogadro. Nh v y, 1 mol nguyên tử b t k có ch a $6,02214179 \times 10^{23}$ nguyên tử . Ta th y:

$$M_{\text{Na}} \text{ (g)} = 6,02214179 \times 10^{23} \text{ (nguyên tử)} \times 23 \times 1,661 \cdot 10^{-24} \text{ (g)} = 22,98 \text{ (g)}$$

Do đó, M_{Na} g n b ng 23 g là kh i l ng c a 1 mol natri c tính theo n v gam. A_{Na} g n b ng 23 u là kh i l ng c a 1 nguyên tử natri c tính theo n v u. Nh v y, M và A có m i quan h ch t ch , nhìn th y thông s A có th suy ra giá tr M theo n v gam t ng ng.

Thông thường, ng i ta xem nguyên tử là h t hình c u. Do đó, m i nguyên tử có m t th tích riêng và liên h v i bán kính (r) c a chúng:

$$V = \frac{4}{3} \pi r^3 \quad (4)$$

trong đó, V – th tích m i nguyên tử

r – bán kính nguyên tử

Bán kính nguyên tử c o b ng n v ngstrom (Å) và cho bi t l n t ng i c a nguyên tử . Theo công th c (4), ng i ta suy ra bán kính nguyên tử .

Chúng ta có th k m t s thông s quan tr ng c a nguyên tử l n l t sau ây:

a. Khối lượng

Số khối (A) cho biết trọng lượng của một nguyên tử:

$$A = p + n$$

Khối lượng mol (M) cho biết trọng lượng của 1 mol nguyên tử chứa số lượng tử nguyên tử ($6,022 \times 10^{23}$):

$$M = A \times 6,022 \times 10^{23} \text{ u} \quad (5)$$

hay

$$M = A \times 6,022 \times 10^{23} \times 1,661 \cdot 10^{-24} \text{ g} \quad (6)$$

b. Khối lượng riêng

Khối lượng riêng cho biết trọng lượng chất chứa trong một đơn vị thể tích như:

$$d = \frac{m}{V} \quad (7)$$

trong đó: - d khối lượng riêng

- m khối lượng

- V thể tích

Đơn vị của khối lượng riêng tùy vào đơn vị m và V.

Nồng độ là đại lượng biểu thị lượng chất nào đó chứa trong một hỗn hợp tính trên 1 đơn vị thể tích. Nồng độ thường ký hiệu rút gọn, có thể là C_M (số mol trong 1 lít dung dịch); C_N (số gam trong 1 lít dung dịch); % (khối lượng chất tan trong 100 gam dung dịch); P (khối lượng hoặc thể tích chất tan trong 1 lít dung dịch hoặc dung môi); % (khối lượng hoặc thể tích chất trong 100 phần hỗn hợp);...

- C_M (mol/L): $C_M = \frac{n}{V_{dd}} \quad (8)$

- C_N (N): $C_N = \frac{N}{V_{dd}} \quad (9)$

trong đó: N là số gam.

$$N = \frac{m}{M} \quad , \quad \text{ng l ng gam}; \quad = \frac{M}{x} \quad , \quad \gamma\text{-h s ng l ng.}$$

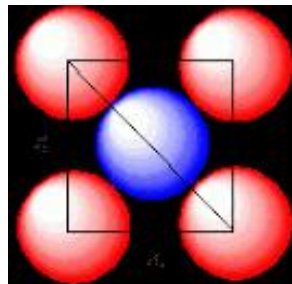
$$\text{- C\% :} \quad C\% = \frac{m_{ct}}{m_{dd}} \cdot 100\% \quad (10)$$

$$\text{- P (g/L):} \quad P = \frac{m}{V} \quad (11)$$

Ví dụ : Bán kính nguyên tử của sắt (cho giá trị đúng) là $1,28\text{\AA}$ (biết $1\text{\AA} = 10^{-10}\text{m}$), khối lượng mol của sắt là $56 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}$. Khối lượng riêng của sắt là (biết trong tinh thể sắt chiếm 74% thể tích, còn lại là phần rỗng) bao nhiêu?

Giải

Xem nguyên tử Fe là hình cầu. Trong tinh thể, chúng xếp chồng lên nhau nên sản xuất hình các khe trống:



Hình 1.2 Mô hình tinh thể nguyên tử cùng các khe trống

Theo (7), ta có: $d = \frac{m}{V}$

V là thể tích của mẫu tinh thể, bao gồm thể tích của 1 mol nguyên tử V_{mol} và thể tích các khe trống V_{tr} : $V = V_{\text{mol}} + V_{\text{tr}}$ (*)

$$V_{\text{mol}} = V_{\text{ht}} \times 6,22 \times 10^{23} \quad V_{\text{ht}} = \frac{4}{3} \pi r^3$$

$$V_{\text{tr}} = \frac{26\%}{74\%} \times V_{\text{ht}}$$

T (*) suy ra: $V = \frac{4}{3} \pi r^3 \times 6,22 \times 10^{23} + \frac{26\%}{74\%} \times \frac{4}{3} \pi r^3$. Thay giá trị $\pi = 3,14$ và $r = 1,28\text{\AA}$ vào ta có V . Thay V vào (5) ta có d và vì đơn vị $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ thì $d = 7,84\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$.

c. Ví dụ 1

Thông thường, bán kính của nguyên tử kim loại được tính bằng bán kính hiệu dụng của nguyên tử. Tuy nhiên, bán kính hiệu dụng thay đổi từ kim loại này sang kim loại khác nên không thể nói chúng có giá trị xác thực nào. Nguyên tử có thể tham khảo qua giá trị bán kính nguyên tử suy ra từ (4):

$$r = \sqrt[3]{\frac{3 \times V}{4 \times f}} \quad (12)$$

Ví dụ : Cho $d_{Ca} = 1,55 \text{ g.cm}^{-3}$, $M_{Ca} = 40,08 \text{ g.mol}^{-1}$. Trong tinh thể, các nguyên tử Ca chiếm 74% thể tích, còn lại là các khe trống. Bán kính nguyên tử của Ca là (cho $N_A = 6.10^{23}$) bao nhiêu?

Giải

Theo (7) suy ra: 1 cm^3 tinh thể Ca nặng 1,55 g. Thể tích của 1 mol = $\frac{1,55}{40,08} = 0,039 \text{ mol}$.

Ta có: $V = V_{\text{mol}} + V_{\text{tr}}$, V_{mol} – thể tích tổng các nguyên tử trong 0,039 mol; V_{tr} – thể tích các khe trống:

$$V_{\text{mol}} = V_{\text{h t}} \times 6,22 \times 10^{23} \times 0,039 \quad V_{\text{h t}} = \frac{4}{3} f r^3$$

$$V_{\text{tr}} = \frac{26\%}{74\%} \times V_{\text{h t}}$$

Suy ra: $V = \frac{4}{3} f r^3 \times 6,22 \times 10^{23} \times 0,039 + \frac{26\%}{74\%} \times \frac{4}{3} f r^3 = 1 \text{ (cm}^3) \Rightarrow r = 1,97.10^{-8} \text{ cm} \sim 1,97 \text{ \AA}$.

Hydro là nguyên tử nhỏ nhất có bán kính vào khoảng 0,53 Å. Sau các ví dụ trên đây ta thấy nguyên tử Calcium nặng gấp 4 lần hydro (1,97 Å) và Ferium nặng gấp 2 lần (1,28 Å).

1.2 CỤT O NGUYÊN TỬ

1.2.1 MÔ HÌNH NGUYÊN TỬ NIELS BOHR

Dựa trên thuyết lượng tử của Planck (Planck) và những nghiên cứu về vật lý cổ điển, Bohr đã đưa ra hai định luật:

- Trong nguyên tử, electron chỉ có thể quay trên những quỹ đạo tròn xác định gọi là các quỹ đạo lượng tử. Mỗi quỹ đạo ứng với một mức năng lượng xác định.

Bán kính các quỹ đạo tính theo công thức:

$$r_n = n^2 \cdot 0,53 \cdot 10^{-8} \text{ (cm)} = n^2 \cdot 0,53 \text{ (\AA)}. \quad (13)$$

n là các số tự nhiên 1,2,3... n

Như vậy các quỹ đạo thứ nhất, thứ hai... thứ n lần lượt có các bán kính như sau:

$$r_1 = 1^2 \cdot 0,53 \text{ \AA} = 0,53 \text{ \AA}$$

$$r_2 = 2^2 \cdot 0,53 \text{ \AA} = 4r_1$$

$$r_n = n^2 \cdot 0,53 \text{ \AA} = n^2 r_1$$

Năng lượng toàn phần của electron trên mỗi quỹ đạo tính theo công thức:

$$E_n = -\frac{1}{n^2} 13,6 \text{ eV} = -13,6 \text{ eV} \quad (14)$$

Như vậy năng lượng của electron trên các quỹ đạo thứ nhất, thứ hai, thứ n lần lượt là:

$$E_1 = -\frac{1}{1^2} 13,6 \text{ eV} = -13,6 \text{ eV}$$

$$E_2 = -\frac{1}{2^2} 13,6 \text{ eV} = \frac{E_1}{4} \text{ eV}$$

$$E_n = -\frac{1}{n^2} 13,6 \text{ eV} = \frac{E_1}{n^2} \text{ eV}$$

- Khi quay trên các quỹ đạo, năng lượng của electron là bảo toàn. Nó chỉ phát hay thu năng lượng khi chuyển từ một quỹ đạo này sang một quỹ đạo khác.

Thuyết Bohr đã tính toán các quỹ đạo, năng lượng của electron và giải thích quang phổ vạch của nguyên tử hydro là nguyên tử nguyên tử, tuy nhiên không giải thích được quang phổ của các nguyên tử phức tạp.

Điều kiện cho thuyết nguyên tử vi mô hay hình ảnh vi mô của electron, nguyên tử thì không thể áp dụng những nguyên lý cơ bản của vật lý cổ điển. Các hình ảnh này có những tính chất khác với hình ảnh vĩ mô và phải được nghiên cứu bằng các thiết bị hiện đại.

1.2.2 Thuyết lượng tử ánh sáng

Trước khi tìm hiểu về thuyết lượng tử ánh sáng, chúng ta phải biết về các tính chất của các loại hạt vi mô:

a. Bản chất sóng của hạt vi mô (electron, nguyên tử ...)

Năm 1924 De Broglie (Br - Pháp) trên cơ sở thuyết sóng - hạt của ánh sáng đã đưa ra thuyết sóng - hạt của vật chất:

Mỗi hạt vật chất chuyển động đều liên kết với một sóng gọi là sóng vật chất hay sóng liên kết, có bước sóng λ tính theo hệ thức:

$$\lambda = \frac{h}{mv} \quad (15)$$

trong đó

h : hằng số Planck

m : khối lượng của hạt

v : tốc độ chuyển động của hạt

Ví dụ: Electron có khối lượng $9,1 \cdot 10^{-28}$ g chuyển động với vận tốc khoảng 10^8 cm/s có bước sóng liên kết với tính theo biểu thức (15):

$$\lambda = \frac{6,62 \cdot 10^{-27}}{9,1 \cdot 10^{-28} \cdot 10^8} \approx 7 \cdot 10^{-8} \text{ cm}$$

Năm 1924 người ta đã xác định được khối lượng của electron nghĩa là thành phần electron có bản chất hạt.

Năm 1927 Devison và Germer đã thực nghiệm cho thấy hiện tượng nhiễu xạ chùm electron. Điều đó chứng tỏ bản chất sóng của electron.

Nhận xét: Electron vừa có bản chất sóng vừa có bản chất hạt.

b. Nguyên lý bất định Heisenberg (Heisenberg - Đức) 1927

Đối với hạt vi mô không thể xác định chính xác đồng thời vận tốc và vị trí

$$\Delta x \cdot \Delta v \geq \frac{h}{2\pi m} \quad (16)$$

Δv : bất nhiễu tần số

Δx : bất nhiễu vị trí

m : khối lượng hạt

Theo hệ thức này thì vị trí xác định càng chính xác bao nhiêu thì xác định tần số càng kém chính xác bấy nhiêu.

Thuyết lượng tử ánh sáng rất phức tạp, chúng ta có thể biết và hiểu nó thông qua các khái niệm cơ bản sau:

c. Hàm sóng

Trạng thái của một hệ vật mô tả hoàn toàn xác định tuân theo luật lượng tử và thực nghiệm của nó. Trong khi đó, vì tính ngẫu nhiên của mô hình electron, do bản chất sóng-hạt và nguyên lý bất định, không thể xác định được quỹ đạo của chúng trong nguyên tử.

Thay cho khái niệm quỹ đạo, cơ học lượng tử mô tả trạng thái của electron trong nguyên tử bằng một hàm sóng gọi là *hàm sóng*, ký hiệu là ψ (c là *probability*).

Bình phương của hàm sóng ψ^2 có ý nghĩa vật lý rất quan trọng:

ψ^2 biểu thị xác suất có mặt của electron tại một điểm nhất định trong vùng không gian quanh hạt nhân nguyên tử.

Hàm sóng chỉ tồn tại khi giải phương trình sóng trong nguyên tử.

1.2.3 Phương trình sóng hay phương trình Schrodinger (Sơ cấp)

Các cơ học lượng tử là phương trình sóng do nhà bác học người Áo *Schrodinger* đưa ra năm 1926. Đó là phương trình mô tả trạng thái chuyển động của hạt vi mô trong không gian.

Phương trình Schrodinger thường viết dưới dạng rút gọn:

$$\Delta\psi + \frac{8\pi^2m}{h^2}(E - U)\psi = 0 \quad (17)$$

U : thế năng của hạt

E : năng lượng toàn phần của hạt

m : khối lượng electron

Trong phương trình (18), nếu thay U bằng biểu thức tính thế năng Coulomb và giải phương trình ta nhận được các nghiệm $1, 2, 3, \dots, n$ các trạng thái khác nhau của electron và các giá trị năng lượng tương ứng.

1.2.4 Phương trình sóng Schrödinger nguyên tử hydro

Nguyên tử hydro là nguyên tử đơn giản nhất, gồm một electron mang điện tích $-e$ chuyển động trong trường thế Coulomb của hạt nhân mang điện tích $+e$. Vì vậy phương trình Schrödinger trong trường thế này có thể giải được một cách chính xác. Nhiệm vụ tiếp theo là khi giải phương trình này là xác định các hàm sóng mô tả trạng thái của nguyên tử.

Phương trình sóng Schrödinger nguyên tử hydro có dạng:

$$\Delta\psi + \frac{8\pi^2m}{h^2} \left(E + \frac{e^2}{r} \right) \psi = 0 \quad (18)$$

h : hằng số Planck

r : khoảng cách từ electron đến hạt nhân

m : khối lượng electron

E : năng lượng toàn phần của electron

Giải phương trình (18) ta được các hàm $(1, 2, \dots, n)$ để tìm các biểu thức xác suất tìm thấy electron tại những vị trí khác nhau trong không gian nguyên tử và mô men động lượng của electron như năng lượng toàn phần E , mô men động lượng M ...

1.2.5 Orbital nguyên tử. Mây electron

Các hàm sóng n -nghiệm của phương trình (18), chúng ta gọi là các orbital nguyên tử (vì từ trước là AO) và kí hiệu của nó là: $1s, 2s, 2p, \dots, 3d, \dots$. Trong đó các chữ s dùng chỉ orbital, còn các chữ p, d dùng chỉ các phân lớp. Ví dụ:

2s orbital electron (hay AO) thuộc lớp 2, phân lớp s.

2p orbital electron (hay AO) thuộc lớp 2, phân lớp p.

3d

3,..... d.

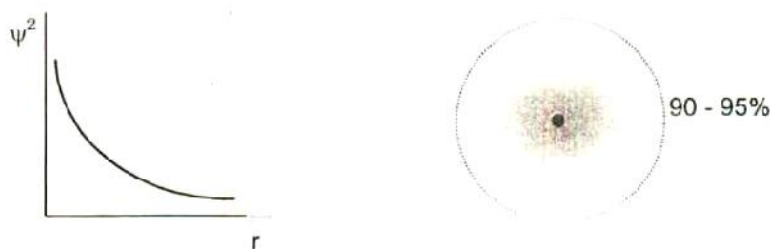
Nhận xét: Orbital nguyên tử là những hàm sóng mô tả các trạng thái khác nhau của electron trong nguyên tử.

Ví dụ: hàm sóng nguyên tử (1s) mô tả trạng thái cơ bản của electron (trạng thái có năng lượng thấp nhất) trong nguyên tử H có dạng:

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r} \quad \Psi^2 = e^{-2r} \frac{1}{\pi}$$

Hàm này chỉ phụ thuộc vào bán kính r . Từ hàm này ta biết $\Psi^2(r)$ biểu thị xác suất có mặt electron tại mỗi cách nhân mật độ r .

Nếu biểu diễn số phụ thuộc của hàm Ψ^2 theo khoảng cách r ta sẽ có công phân bố xác suất có mặt của electron trạng thái cơ bản (hình 2.3). Ta nhận thấy:



Hình 1.3. Xác suất có mặt electron theo r và hình dạng mây electron s

Xác suất có mặt của electron giảm dần nhân đôi và giảm dần khi càng xa hạt nhân.

Một cách hình ảnh khác ta có thể biểu diễn phân bố xác suất có mặt electron trong nguyên tử bằng những đường đậm. Mật độ của các chấm sẽ giảm dần nhân đôi và thưa dần khi càng xa nhân. Khi đó orbital nguyên tử giống như một đám mây vì vậy gọi là mây electron. Để hình dung người ta thường coi:

Mây electron là vùng không gian chung quanh hạt nhân, trong đó tập trung phần lớn xác suất có mặt electron (khoảng 90 - 95% xác suất).

Như vậy mây electron có thể coi là hình ảnh không gian của orbital nguyên tử.

Hình dạng của các mây electron

Nếu biểu diễn các hàm sóng (các AO) trong không gian ta sẽ có hình dạng của các orbital hay các mây electron (Hình 1.3).

Mây s có dạng hình cầu.

Các mây p có hình s 8 n i h ãng theo 3 trục ox, oy, oz c k í h i u là p_x , p_y và p_z

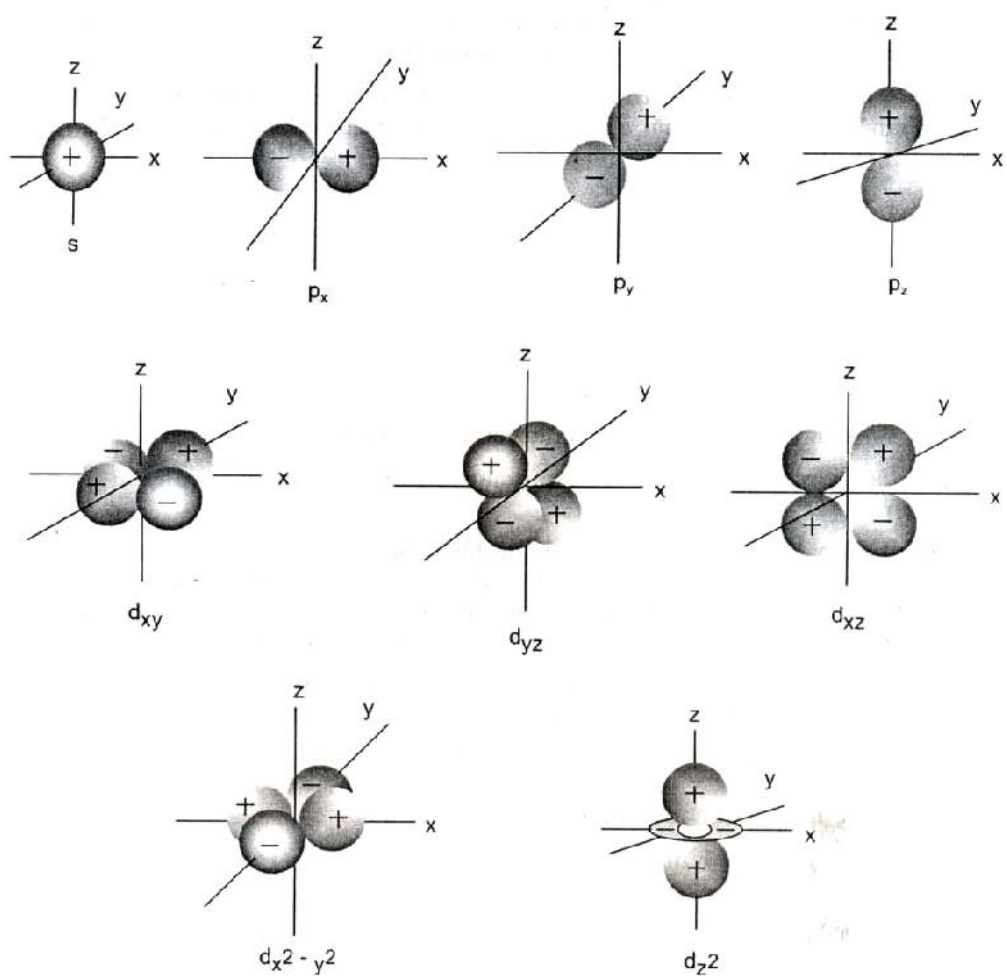
Các mây d có hình d ãng khác nhau:

d_{xy} , d_{yz} , d_{zx} hình hoa th (4 cánh) h ãng theo ãng phân giác c a các góc t ãng ãng xoy , yoz , zox.

$d_{x^2-y^2}$ có d ãng hoa th ãng h ãng theo 2 trục ox và oy.

Riêng mây d_{z^2} g ãm hình s 8 n i h ãng theo trục oz và ãm t vành kh ãn ãm trên ãm t ãng xoy

D i ãy là hình d ãng c a ãm t s AO:



Hình 1.4. Hình d ãng các obitan nguyên t

1.2.6 Các số lượng tử

Mỗi hàm sóng (hay mỗi AO) đặc trưng bởi 4 tham số n, l, m, m_s gọi là các số lượng tử. Các số lượng tử xuất hiện trong quá trình giải phương trình Schrodinger tìm mật độ electron và lý thuyết cho mỗi AO như năng lượng, momen động lượng, hình chiếu của momen động lượng, momen quay của electron trên AO đó.

- Số lượng tử chính n

+ nhận các giá trị $1, 2, 3, \dots, n$.

+ Các AO có cùng giá trị n có cùng mức năng lượng và tạo ra một lớp orbital nguyên tử

Lớp AO $n = 1 \quad 2 \quad 3 \quad 4 \dots n$

Mức năng lượng $E_1 \quad E_2 \quad E_3 \quad E_4 \dots E_n$

- Số lượng tử phụ l

+ Các giá trị của l phụ thuộc vào số lượng tử chính $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$.

+ Mỗi giá trị của n (mức năng lượng) có n giá trị của l (n phân lớp)

Lớp n Phân lớp s Phân lớp p Phân lớp d Phân lớp f

$n = 1$ $l = 0$

$n = 2$ $l = 0$ $l = 1$

$n = 3$ $l = 0$ $l = 1$ $l = 2$

$n = 4$ $l = 0$ $l = 1$ $l = 2$ $l = 3$

Muốn chỉ ra một phân lớp thuộc lớp nào thì ta viết số thứ tự lớp trước kí hiệu phân lớp.

Ví dụ: 2s chỉ electron (hay AO) thuộc phân lớp s ($l = 0$) của lớp 2 ($n = 2$).

3d d ($l = 2$). . . 3 ($n = 3$).

- Số lượng tử từ m