

ĐẠI HỌC QUỐC GIA TP.HCM
TRƯỜNG ĐẠI HỌC KHOA HỌC TỰ NHIÊN
KHOA HÓA – BỘ MÔN HÓA VÔ CƠ & ỨNG DỤNG



GIÁO TRÌNH

HÓA ĐẠI CƯƠNG A1

Biên soạn: Trần Hón Quốc
Nguyễn Quốc Chính

TP. HCM – 2014

TaiLieu.vn

MỤC LỤC

MỤC LỤC.....	i
Chương 1 CẤU TẠO NGUYÊN TỬ.....	5
1.1. Sự phát triển của Thuyết cấu tạo nguyên tử.....	5
1.2. Cấu trúc lớp vỏ electron.....	6
1.2.1 Các bước phát triển của thuyết lượng tử về cấu tạo lớp vỏ của nguyên tử.....	6
1.2.1.1 Bức xạ điện từ (electromagnetic radiation).....	7
1.2.1.1.1 Bản chất sóng của bức xạ điện từ.....	7
1.2.1.1.2 Năng lượng của bức xạ điện từ.....	8
1.2.1.1.3 Thuyết lượng tử của Planck.....	8
1.2.1.1.4 Bản chất hạt của bức xạ điện từ.....	8
1.2.1.1.5 Bản chất nhị nguyên sóng – hạt của bức xạ điện từ.....	9
1.2.1.2 Quang phổ vạch của Hydro.....	9
1.2.2 Mẫu nguyên tử Hydro của Bohr.....	10
1.2.3 Mô hình nguyên tử theo cơ học lượng tử.....	11
1.2.3.1 Các luận điểm cơ sở.....	11
1.2.3.1.1 Bản chất nhị nguyên sóng – hạt của electron.....	11
1.2.3.1.2 Nguyên lý bất định Heisenberg.....	11
1.2.3.1.3 Hàm sóng.....	12
1.2.3.1.4 Phương trình sóng Schrodinger.....	12
1.2.3.2 Orbital (vân đạo).....	13
1.2.3.3 Số lượng tử (Quantum numbers).....	14
1.2.3.3.1 Số lượng tử chính (principal quantum number): ký hiệu là n	15
1.2.3.3.2 Số lượng tử phụ (subsidiary quantum number): ký hiệu là ℓ	15
1.2.3.3.3 Số lượng tử từ (magnetic quantum number): ký hiệu là m_ℓ	15
1.2.3.3.4 Số lượng tử spin (spin quantum number): ký hiệu là m_s	16
1.2.3.4 Nguyên lý loại trừ Pauli (1925).....	16
1.2.4 Cấu hình electron của nguyên tử.....	16
1.2.4.1 Nguyên tử 1 electron.....	16
1.2.4.2 Nguyên tử nhiều electron.....	16
1.2.5 Quy tắc Slater.....	19
1.2.5.1 Đại cương.....	19
1.2.5.2 Quy tắc Slater về số lượng tử chính hiệu dụng n^*	19
1.2.5.3 Quy tắc Slater về điện tích hạt nhân hiệu dụng Z^*	19
1.2.5.4 Thí dụ.....	20
1.3 Một số vấn đề khác.....	21

1.3.1 Cấu hình electron đặc biệt	21
1.3.2 Phân loại các nguyên tố	21
1.3.3 Cấu hình electron của các ion đơn giản	21
1.3.3.1 Anion (ion âm).....	21
1.3.3.2 Cation (ion dương).....	21
Chương 2 BẢNG HỆ THỐNG TUẦN HOÀN CÁC NGUYÊN TỐ HÓA HỌC	22
2.1 Sự phát triển của hệ thống tuần hoàn các nguyên tố hóa học	22
2.1.1 Sự phát hiện ra các nguyên tố – Cơ sở của định luật tuần hoàn	22
2.1.2 Quá trình Mendeleev xây dựng định luật tuần hoàn.....	23
2.1.3 Những hiệu chỉnh và bổ xung cho hệ thống tuần hoàn	23
2.2 Bảng phân loại tuần hoàn	24
2.2.1 Định luật tuần hoàn.....	24
2.2.2 Cấu trúc bảng phân loại tuần hoàn	25
2.2.3 Nguyên tắc sắp xếp nguyên tố vào bảng phân loại tuần hoàn	25
2.2.3.1 Chu kỳ.....	25
2.2.3.2 Nhóm	26
2.2.3.3 Phân nhóm	26
2.3 Sự biến đổi tính chất của các nguyên tố trong hệ thống tuần hoàn	27
2.3.1 Các yếu tố ảnh hưởng đến tính chất nguyên tố.....	27
2.3.2 Bán kính nguyên tử (Atomic Radii)	27
2.3.3 Bán kính ion (Ionic Radii)	29
2.3.4 Năng lượng ion hóa (Ionization Energy)	30
2.3.5 Ái lực điện tử (Electron Affinity).....	31
2.3.6 Độ âm điện (Electronegativity)	33
2.3.7 Tính kim loại-không kim loại	33
Chương 3 LIÊN KẾT HÓA HỌC	34
3.1 Các khái niệm cơ bản về liên kết hóa học	34
3.1.1 Bản chất liên kết hóa học.....	34
3.1.2 Liên kết dưới quan điểm nhiệt động lực hóa học	34
3.1.3 Các thông số đặc trưng cho liên kết.....	35
3.1.3.1 Năng lượng liên kết (E)	35
3.1.3.2 Độ dài liên kết (d).....	35
3.1.3.3 Độ bội liên kết	35
3.1.3.4 Góc liên kết.....	35
3.2 Vài nét về sự phát triển của các lý thuyết về liên kết hóa học.....	35
3.3 Liên kết ion	37
3.3.1 Điều kiện hình thành liên kết ion.....	37
3.3.2 Tính chất của liên kết ion.....	37
3.3.3 Độ bền liên kết ion.....	38

3.4 Liên kết cộng hóa trị.....	39
3.4.1 Thuyết liên kết hóa trị	39
3.4.1.1 Các luận điểm cơ sở của thuyết VB	39
3.4.1.2 Tính chất của liên kết cộng hóa trị theo VB.....	40
3.4.1.3 Độ bền liên kết cộng hóa trị theo VB.....	40
3.4.1.4 Liên kết cộng hóa trị-cho nhận theo VB	40
3.4.1.5 Các loại liên kết.....	40
3.4.1.6 Tính định hướng của liên kết cộng hóa trị và hình dạng của phân tử	41
3.4.1.6.1 Phân tử 2 nguyên tử.....	41
3.4.1.6.2 Phân tử 3 nguyên tử.....	41
3.4.1.6.3 Phân tử 4 nguyên tử.....	42
3.4.1.6.4 Phân tử nhiều hơn 4 nguyên tử.....	42
3.4.1.7 Thuyết lai hóa.....	42
3.4.1.7.1 Nguyên tắc lai hóa.....	42
3.4.1.7.2 Các kiểu lai hóa thông thường	42
3.4.1.7.3 Điều kiện lai hóa bền.....	43
3.4.1.7.4 Phương pháp xác định trạng thái lai hóa của nguyên tử trung tâm	43
3.4.1.8 Các dạng công thức cộng hưởng	44
3.4.1.9 Dự đoán cấu hình không gian và góc hóa trị của phân tử	44
3.4.1.9.1 Thuyết VSEPR	45
3.4.1.9.2 Các quy tắc viết công thức lập thể của phân tử.....	45
3.4.1.9.3 Công thức lập thể của các hợp chất thông thường	46
3.4.1.10 Góc liên kết	47
3.4.1.11 Moment lưỡng cực của liên kết và phân tử.....	48
3.4.1.11.1 Moment lưỡng cực của liên kết.....	48
3.4.1.11.2 Moment lưỡng cực của phân tử.....	48
3.4.1.12 Tính ion của liên kết cộng hóa trị.....	49
3.4.1.13 Khiếm khuyết của thuyết liên kết hóa trị	50
3.4.2 Thuyết vân đạo phân tử.....	51
3.4.2.1 Điều kiện để hình thành MO liên kết từ các AO.....	51
3.4.2.2 Các loại MO	51
3.4.2.2.1 MO σ	51
3.4.2.2.2 MO π	52
3.4.2.3 Cách sắp xếp điện tử trong vân đạo phân tử	52
3.4.2.4 Bậc liên kết.....	52
3.4.2.5 Giảm đồ năng lượng của các MO tạo từ phân tử 2 nguyên tử đồng nhân A_2	53
3.4.2.6 Giảm đồ năng lượng của các MO tạo từ phân tử 2 nguyên tử dị nhân AB	55
3.5 Liên kết kim loại	55
3.5.1 Mô hình liên kết kim loại cổ điển	55

3.5.2 Mô hình liên kết kim loại theo cơ học lượng tử	55
3.6 Sự phân cực ion – Tính cộng hóa trị trong liên kết ion	56
3.6.1 Tác dụng phân cực của cation.....	57
3.6.2 Tác dụng bị phân cực của ion	58
3.7 Phân biệt tác dụng phân cực của ion và độ phân cực của liên kết.....	58
3.8 Sự không phân định ranh giới giữa các loại liên kết hóa học.....	59
Chương 4 TRẠNG THÁI TẬP HỢP CỦA CÁC CHẤT VÀ CÁC KIỂU MẠNG TINH THỂ.....	60
4.1 Trạng thái tập hợp của chất.....	60
4.2 Trạng thái khí.....	62
4.2.1 Phương trình trạng thái khí lý tưởng	62
4.2.2 Hỗn hợp khí lý tưởng.....	62
4.2.2.1 Áp suất riêng phần	62
4.2.2.2 Nồng độ mol riêng phần	63
4.2.3 Khí thật	63
4.3 Trạng thái lỏng.....	64
4.4 Trạng thái rắn tinh thể.....	64
4.4.1 Đại cương về tinh thể.....	64
4.4.1.1 Mạng lưới tinh thể	64
4.4.1.2 Ô mạng cơ sở.....	65
4.4.1.3 14 mạng Bravais	66
4.4.2 Phân loại mạng tinh thể theo liên kết – Tính chất vật lý của các chất.....	68
4.4.2.1 Tinh thể kim loại.....	68
4.4.2.2 Tinh thể ion.....	69
4.4.2.3 Tinh thể cộng hóa trị.....	70
4.4.2.4 Tinh thể phân tử.....	71
4.4.2.4.1 Liên kết Van der Waals	71
4.4.2.4.2 Liên kết Hydro	72
4.4.2.4.3 Đặc điểm của tinh thể phân tử	73
4.4.2.5 Cấu trúc của tinh thể có liên kết hỗn tạp	74

Chương 1

CẤU TẠO NGUYÊN TỬ

1.1. Sự phát triển của Thuyết cấu tạo nguyên tử

Thế kỷ thứ 5 trước Công nguyên: nhà triết học Hy Lạp Democrit đưa ra khái niệm về nguyên tử (atomos): “Mọi vật đều cấu tạo từ những hạt rất nhỏ gọi là nguyên tử, đó là giới hạn cuối cùng của các chất, các nguyên tử cực kỳ cứng và không bị biến đổi”

Giữa năm 400 trước Công nguyên đến thế kỷ 16 (khoảng thời gian 2000 năm): thuộc về trào lưu giả kim thuật. Mục tiêu biến kim loại thường thành vàng với quan niệm “vàng là kim loại nguyên chất, các kim loại còn lại bị lẫn tạp chất” hay “mọi kim loại đều cấu tạo từ lưu huỳnh, thủy ngân và muối theo những tỉ lệ khác nhau”

Từ đầu thế kỷ 16 đến giữa thế kỷ 17: là thời kỳ phát triển của Hóa y học và kỹ thuật

Trong khoảng cuối thế kỷ 17 đầu thế kỷ 19: đánh dấu thời kỳ phát triển của ngành khoa học hóa học với sự ra đời liên tiếp của các định luật mang tính chất định lượng như:

Năm 1748, Lomonosov M. V. – nhà khoa học người Nga – đã tìm ra một trong các định luật quan trọng nhất trong tự nhiên, được gọi là **định luật bảo toàn khối lượng**. Định luật này được phát biểu như sau: “Khối lượng (trọng lượng) của các chất tham gia phản ứng bằng khối lượng (trọng lượng) của các chất tạo thành sau phản ứng”

Năm 1799, Proust J. L. – nhà hóa học người Pháp – đưa ra **định luật thành phần không đổi** có nội dung như sau: “Mỗi chất hóa học có thành phần định tính và định lượng không đổi, không phụ thuộc vào phương pháp điều chế nó”

Năm 1803, Dalton John – nhà hóa học người Anh – đưa ra **định luật tỉ lệ bội**, có nội dung như sau: “Nếu hai nguyên tố tạo thành với nhau một số hợp chất, thì khối lượng của nguyên tố này kết hợp với cùng một khối lượng của nguyên tố kia sẽ tỉ lệ với nhau như tỉ lệ giữa những số nguyên đơn giản”

Dựa trên cơ sở của các định luật trên, năm 1808 Dalton đưa ra **thuyết nguyên tử** với nội dung như sau:

- Mỗi nguyên tố được cấu tạo bởi những hạt nhỏ gọi là nguyên tử
- Các nguyên tử của cùng một nguyên tố thì giống nhau. Các nguyên tử của các nguyên tố khác nhau thì khác nhau
- Các hợp chất hóa học được hình thành khi các nguyên tử liên kết với nhau. Một hợp chất luôn chứa một tỷ lệ xác định các loại nguyên tử
- Phản ứng hóa học xảy ra do sự thay đổi liên kết giữa các nguyên tử. Bản thân nguyên tử không bị biến đổi trong các phản ứng hóa học.

40 năm cuối của thế kỷ 19: sự phát triển của kỹ thuật tạo điều kiện cho sự tìm hiểu nguyên tử

- 1895: Roentgen phát hiện ra tia X
- 1896: Becquerel phát hiện ra hiện tượng phóng xạ của Uranium

Những năm cuối thế kỷ 19 đầu thế kỷ 20: giai đoạn của hóa học hiện đại với sự phát triển của lý thuyết về cấu tạo nguyên tử

- 1897: Thomson với thí nghiệm “tia âm cực” phát hiện ra electron mang điện tích âm.
- 1910: Rutherford dùng tia α bắn qua lá vàng dát mỏng, ông phát hiện nguyên tử có cấu tạo rỗng và hạt nhân của nguyên tử mang điện tích dương. Đến năm 1919, ông xác định được sự có mặt của hạt proton mang điện tích dương, có khối lượng nặng hơn electron 1840 lần.

- 1932: Chadwick khi bắn phá miếng kim loại Berili bằng tia γ đã phát hiện ra hạt neutron trung hòa điện.

Từ những kết quả trên, có thể mô tả cấu trúc nguyên tử như sau:

1. Nguyên tử gồm hạt nhân (chứa hạt proton mang điện dương và hạt neutron trung hòa điện) có bán kính khoảng 10^{-12} cm và các electron chuyển động quanh hạt nhân với khoảng cách khoảng 10^{-14} cm.

Hạt	Khối lượng (gam)	Điện tích	Khối lượng (amu)
Electron	$9,1095 \cdot 10^{-28}$	$-1,602 \cdot 10^{-19}$ C	$5,486 \cdot 10^{-4}$
Proton	$1,6726 \cdot 10^{-24}$	$+1,602 \cdot 10^{-19}$ C	1,0073
Neutron	$1,6750 \cdot 10^{-24}$	0	1,0087

$$1 \text{ amu (atomic mass unit)} = 1 \text{ đvC} = 1,66054 \cdot 10^{-24} \text{ gam}$$

2. Quy ước ký hiệu nguyên tử:



X: ký hiệu nguyên tố của nguyên tử

Z: số hiệu nguyên tử của nguyên tố

Z = điện tích hạt nhân = số proton

A: số khối

$A = Z + N$ (N: số neutron)

3. Những nguyên tử có cùng số proton nhưng khác nhau về số neutron (hay cùng Z, khác A) được gọi là **đồng vị**.

Ví dụ: nguyên tố hydro có 3 đồng vị: ${}_1^1\text{H}$ (99,985%) ${}_1^2\text{D}$ (${}_1^2\text{H}$) (0,015%) ${}_1^3\text{T}$ (${}_1^3\text{H}$)

Hydro

Deuteri

Triti

4. Những nguyên tử đồng vị đều có tính chất hóa học giống nhau. Do đó, Z là đặc trưng để phân biệt các nguyên tố hóa học. Vậy **nguyên tố hóa học là tập hợp các nguyên tử có cùng điện tích hạt nhân**.

1.2. Cấu trúc lớp vỏ electron

Với cấu trúc nguyên tử như trên, electron chiếm hầu như toàn bộ thể tích nguyên tử. Trong các phản ứng hóa học chỉ có lớp vỏ electron của nguyên tử bị biến đổi còn hạt nhân được giữ nguyên. Như vậy cấu trúc lớp vỏ electron quyết định tính chất hóa học của nguyên tử.

Một câu hỏi được đặt ra là **làm thế nào để biết được trạng thái chuyển động của electron trong nguyên tử?**

Do nguyên tử là một hạt vi mô (có kích thước rất nhỏ) ta không thể quan sát trực tiếp được sự chuyển động của nó mà chỉ có thể dựa vào các hiện tượng thực nghiệm thể hiện tính chất của electron trong nguyên tử để xây dựng nên những **mô hình** để mô phỏng cấu trúc lớp vỏ electron.

Nhiều mô hình đã được xây dựng như mô hình của Thomson, Rutherford, Bohr, Schrodinger (mô hình lượng tử). Trong số đó mô hình lượng tử là mô hình hoàn thiện nhất và đang được áp dụng rộng rãi hiện nay.

1.2.1 Các bước phát triển của thuyết lượng tử về cấu tạo lớp vỏ của nguyên tử

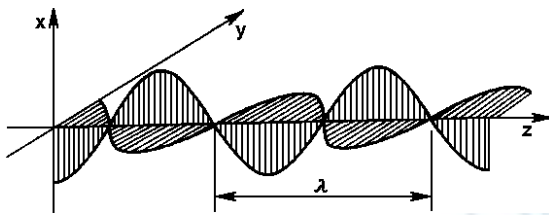
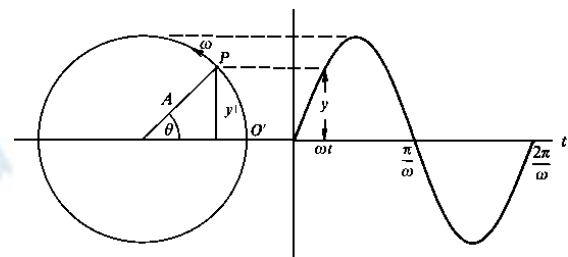
Phần lớn hiểu biết của con người về cấu tạo lớp vỏ của nguyên tử được xây dựng trên cơ sở nghiên cứu bức xạ (sóng) điện từ cũng như hiện tượng phát xạ và hấp thụ bức xạ điện từ của các nguyên tử (gọi tắt là quang phổ nguyên tử).

1.2.1.1 Bức xạ điện từ (electromagnetic radiation)**1.2.1.1.1 Bản chất sóng của bức xạ điện từ**

1. Bản chất sóng của bức xạ điện từ được thể hiện trong các hiện tượng giao thoa và nhiễu xạ.
2. Theo lý thuyết sóng, bức xạ điện từ là một sóng điều hòa gồm hai thành phần là điện trường và từ trường cùng pha và vuông góc với nhau.
3. Bức xạ điện từ được biểu thị đặc trưng bằng phương trình sóng điều hòa hình sin:

$$y = A \sin \omega t = A \sin 2\pi \nu t$$

Trong đó: ω : vận tốc góc
 ν : tần số

**Dao động điện và dao động từ của sóng điện từ****Dao động hình sin của sóng điện từ**

4. Bức xạ điện từ di chuyển trong chân không với vận tốc ánh sáng $c \approx 3 \times 10^8$ m/s.
5. Mỗi bức xạ được đặc trưng bởi tần số và bước sóng thể hiện qua biểu thức:

$$\nu = \frac{c}{\lambda}$$

Trong đó: ν : tần số ($s^{-1} \equiv \text{Hz}$)
 c : vận tốc ánh sáng (m/s)
 λ : bước sóng (m)

6. Bức xạ điện từ bao gồm các bức xạ vô tuyến, vi sóng (MW), hồng ngoại (IR), khả kiến (VIS), tử ngoại (UV), tia X và tia γ .

Bức xạ	Tia γ	Tia X	Tử ngoại	Khả kiến	Hồng ngoại	Vi sóng	Radio, TV
Bước sóng (m)	10^{-11}	10^{-10}	10^{-9}	$4 \cdot 10^{-7} - 7 \cdot 10^{-7}$	$10^{-6} - 10^{-3}$	10^{-2}	1

7. Đơn vị của bước sóng λ thường được tính thay đổi theo loại bức xạ:

m, cm cho bức xạ vi sóng
 μm cho bức xạ hồng ngoại
nm cho bức xạ khả kiến, tử ngoại
 $\text{\AA}$ cho bức xạ tia X
 $1\text{m} = 10^2 \text{ cm} = 10^6 \mu\text{m} = 10^9 \text{ nm} = 10^{10} \text{\AA}$

8. Khi xem xét đến yếu tố pha thì sự tổ hợp các sóng cùng tần số có thể dẫn đến hai giới hạn biên là bị triệt tiêu hay cộng hưởng năng lượng của các sóng này.

1.2.1.1.2 Năng lượng của bức xạ điện từ

Khi vật chất được nung nóng chúng sẽ phát ra bức xạ (ví dụ như miếng sắt nóng đỏ, dây tóc bóng đèn).

Vào cuối thế kỷ 19 bằng thực nghiệm người ta đã xác định được rằng năng lượng của bức xạ phát ra tỉ lệ với bước sóng của bức xạ. Tuy nhiên với quan niệm “năng lượng có tính liên tục” các nhà khoa học thời đó đã không thể tìm ra được mối liên hệ giữa bước sóng bức xạ với năng lượng của chúng.

1.2.1.1.3 Thuyết lượng tử của Planck

Năm 1900 Max Planck đã giải quyết vấn đề trên bằng cách đưa ra một khái niệm hoàn toàn mới đó là “**năng lượng có tính gián đoạn**”.

Quan niệm cổ điển cho rằng nguyên tử hấp thu và phát xạ năng lượng một cách liên tục. Trong khi đó Planck cho rằng nguyên tử phát xạ năng lượng theo từng lượng nhỏ gọi là **lượng tử (quantum)**.

Năng lượng của 1 lượng tử bức xạ được tính theo biểu thức:

$$E = h\nu = h \frac{c}{\lambda}$$

Trong đó h : hằng số Planck, $h = 6,62 \cdot 10^{-34} \text{ J.s}$

ν : tần số bức xạ (Hz)

λ : bước sóng của bức xạ (m)

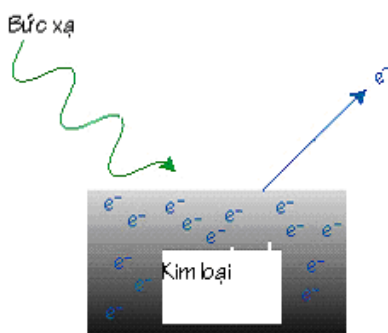
Theo Planck, năng lượng luôn được truyền theo từng bội số nguyên của $h\nu$ (ví dụ: $1h\nu$; $2h\nu$; $22h\nu$ chứ không thể là $1,5h\nu$; $4,7h\nu$...)

1.2.1.1.4 Bản chất hạt của bức xạ điện từ

Khi Planck đưa ra khái niệm lượng tử, ông không thể giải thích được nguyên nhân vì sao năng lượng lại gián đoạn.

5 năm sau (1905) với thí nghiệm về **hiệu ứng quang điện** Einstein đã trả lời được câu hỏi này.

Albert Einstein dùng những bức xạ khác nhau chiếu vào 1 tấm kim loại và tiến hành khảo sát số lượng các hạt electron phát ra từ tấm kim loại đó cùng với động năng của chúng.



Kết quả thực nghiệm cho thấy:

1. Electron chỉ bị bứt ra khi tần số của bức xạ vượt qua một giá trị ν_0 nào đó (gọi là giá trị ngưỡng). Mỗi kim loại sẽ có một giá trị ν_0 khác nhau.
2. Với các bức xạ có tần số lớn hơn ν_0 thì:
 - Cường độ dòng electron (số hạt electron) bị bứt ra tỉ lệ thuận với cường độ bức xạ chứ không tỉ lệ thuận với tần số bức xạ.
 - Động năng của electron bị bứt ra tỉ lệ thuận với tần số của bức xạ.