

**BỘ GIÁO DỤC VÀ ĐÀO TẠO
TRƯỜNG ĐẠI HỌC TÂY ĐÔ**



GIÁO TRÌNH
HÓA HỌC CƠ BẢN – VÔ CƠ
(DÙNG CHO ĐÀO TẠO ĐẠI HỌC SĨ ĐÀO TẠO)

CÁC THỜI - 2016

M C L C

	<i>biên soạn</i>	Trang
<i>Lời mở đầu</i>		03
Danh mục viêt tắt và ký hiệu		04
Chương 1		
C U T O NGUYÊN T		
Đ NH LU T TU N HOÀN CÁC NGUYÊN T	<i>ThS. Nguyễn Minh Kha.....</i>	05
1.1 THÀNH PHẦN 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
Chương 2		
C U T O PHÂN T		
LIÊN K T HÓA H C	<i>ThS. Nguyễn Minh Kha.....</i>	36
2.1 M T S Đ I L ̀ NG C LIÊN QUAN Đ N LIÊN K T.....		36
2.2 S PHÂN C C C A PHÂN T		44
Chương 3		
PH C CH T	<i>ThS. Nguyễn 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 I TÊN H P CH T PH C.....		49
3.4 M T S TÍNH CH T C A PH C CH T.....		51
3.5 Đ U CH PH C CH T.....		53
Chương 4		
NHI T – Đ 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 NHẬN ĐỊNH NGUYÊN CẤU PHÂN NG – DỰ ĐOÁN KHẢ NĂNG TẠO ĐI N BỊ N CẤU A PHÂN NG HÓA HỌC		63
Chương 5		
ĐƯỜNG HƯỚNG PHÂN NG – CÂN BẰNG HÓA HỌC <i>ThS. Nguyễn Minh Kha</i>		73
5.1 KHÁI NIỆM VÀ CÁC YẾU TỐ ẢNH HƯỞNG ĐẾN TỐC ĐỘ PHÂN NG.....		73
5.2 CÂN BẰNG HÓA HỌC.....		82
Chương 6		
ĐIỀU CHẾ NGUYÊN VẬT DUNG DỊCH.....	<i>ThS. Phạm Quang Khôi</i>	86
6.1 ĐỊNH NGHĨA VÀ PHÂN LOẠI DUNG DỊCH.....		86
6.2 NGUYÊN ĐỐ DUNG DỊCH.....		86
6.3 DUNG DỊCH CHẤT ĐIỀU LI.....		89
6.4 THUYẾT PROTON VÀ ACID VÀ BASE. BRONSTED.....		92
6.5 DUNG DỊCH ĐẶC.....		98
Chương 7		
HÓA HỌC CÁC NGUYÊN TỐ.....	<i>ThS. Phạm Quang Khôi</i>	102
7.1 NGUYÊN TỐ NHÓM A.....		102
7.2 CÁC KIM LOẠI NHÓM B.....		114
TÀI LIỆU THAM KHẢO.....		124

LỜI NÓI ĐẦU

Trong chương trình đào tạo đào tạo sĩ đại học của Đại học Tây Đô, học phần Hóa đại cương – Vô cơ là môn cơ sở ngành làm nền tảng cho các em sinh viên năm thứ nhất có kiến thức căn bản về hóa đại cương và tính chất hóa học của các nguyên tố nhóm chính và phụ trong ngành dược. Học phần này được viết ra cho sinh viên có chuẩn đầu vào căn bản nên nội dung được chọn lọc và cô đọng để các em tiếp thu những kiến thức cần thiết nhất cho các học phần sau.

Giáo trình **Hóa đại cương – Vô cơ** bao gồm 7 chương được trình bày theo thứ tự:

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

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

Chương 3: **Phản ứng**

Chương 4: **Nhiệt – Động học phản ứng hóa học**

Chương 5: **Động học phản ứng – Cân bằng hóa học**

Chương 6: **Đại cương về dung dịch**

Chương 7: **Hóa học các nguyên tố**

Trong quá trình biên soạn, các tác giả đã cố gắng dùng những hình ảnh minh họa và một số câu hỏi tự luận giúp sinh viên tự đánh giá khả năng của mình. Tuy nhiên, giáo trình này cũng có thể mắc những sai sót, chúng tôi xin chân thành nhận được những ý kiến đóng góp quý báu của quý thầy cô, các bạn đồng nghiệp, sinh viên để sửa chữa, bổ sung hoàn thiện hơn.

Chân thành cảm ơn!

CÁC TÁC GIẢ

DANH MỤC TỪ VIẾT TẮT

P	Proton
N	Nơtron
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	Culông
đ.v.C	Đơn vị Cacbon
u	Unit
Å	Ăngstron
λ	Bước sóng
AO	Atomic orbital
Ψ	hàm sóng
CHLT	Cơ học lượng tử

Chương 1

CẤU TRÚC NGUYÊN TỬ - ĐỊNH LUẬT TUẦN HOÀN CÁC NGUYÊN TỬ

MỤC TIÊU BÀI HỌC

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

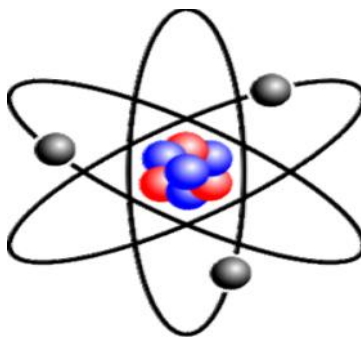
1. Thành phần cấu tạo một nguyên tử nhất định, các khái niệm cơ bản.
2. Thuyết lượng tử ánh sáng, cấu tạo vỏ electron theo mô hình Niels Bohr.
3. Bảng hệ thống tuần hoàn các nguyên tử hóa học.
4. Định luật tuần hoàn các nguyên tử hóa học.

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 được nữa và mất hóa học.

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



Hình 1.1 Mô hình nguyên tử đơn giản.

Tuy nhiên với mô hình vật lý, nguyên tử chứa phải là như thật. Nó được cấu tạo từ 3 loại hạt cơ bản (như ở 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 neutron (kí hiệu là n) không mang điện tích cùng tồn tại với proton nhân của nguyên tử.

Có thể thấy, nguyên tử được cấu tạo thành bởi 1 lớp vỏ electron và hạt nhân. Trong hạt nhân nguyên tử có 2 loại hạt cơ bản: proton và neutron. 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 cũng rất nhỏ so với khối lượng của hạt proton và neutron:

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

Điện tích của mỗi 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, mỗi nguyên tử đều có số lượng hạt p bằng số hạt e^- :

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

Mỗi hạt nhân chứa số lượng p nhất định 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, $Z+$ được gọi là điện tích hạt nhân.

Nguyên tử rất nhỏ, nên đến mức trí tưởng tượng của chúng ta cũng chưa tìm kiếm được kích thước thật của nó. Chính vì vậy, các hạt cơ bản cấu tạo thành nó cũng rất – rất – rất nhỏ. Khi đó, vô số các hạt p và n được nén chặt trong hạt nhân đến mức kỳ diệu nhất. Vì thế, khối lượng của nguyên tử xem như tập trung ở hạt nhân. Nếu qui định khối lượng của 1 hạt p là đơn vị khối lượng nguyên tử (unit) hay đ.v.C (đơn vị cacbon) thì mỗi hạt neutron cũng tương đương 1u, do đó khối lượng của một nguyên tử xem như số khối A :

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

Chính vì thế, mỗi nguyên tử sẽ có giá trị A nhất định. 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 điện tích hạt nhân được 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 điện tích hạt nhân nhưng khác nhau về số neutron trong hạt nhân.

Ví dụ: Khí hidro thiên nhiên là hỗn hợp của 3 đồng vị là protium (${}^1_1\text{H}$), deuterium (${}^2_1\text{H}$) và tritium (${}^3_1\text{H}$). Tuy nhiên, hai đồng vị protium và deuterium là bền thì deuterium thì không bền nên một thời gian dài người ta chỉ biết đến hidro chỉ có 2 loại đồng vị.

Ngày nay, người ta đã biết đến hơn 119 nguyên tố tự 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

- Z là số proton

- X là ký hiệu tên nguyên tố

Ví dụ: Nguyên tố sắt được ký hiệu ${}^{56}_{26}\text{Fe}$ - 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 cũng 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 tố liên kết với nhau (trừ các khí hiếm bền thì đơn nguyên tố do là nguyên tố).

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 tạo nên phân tử cùng với các chỉ số phía dưới bên phải để chỉ số lượng nguyên tố của nguyên tố trong phân tử.

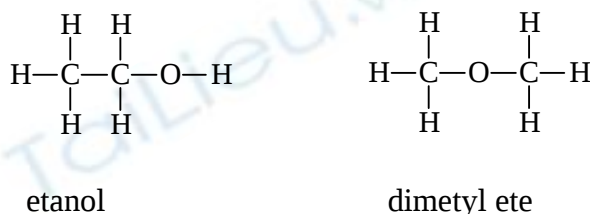
Ví dụ: Phân tử nước được ký hiệu là H_2O . Tức là, một phân tử nước chứa 2 nguyên tố hidro và một nguyên tố ôxi.

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

Hợp chất. Phân tử được tạo bởi 2 nguyên tử trở lên được gọi 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 – lại ứng với 2 chất là ethanol và dimethyl ete. Chúng là các chất *đồng phân* với nhau. Chính vì vậy, người ta cần quan tâm kỹ hơn với một cấu tạo của chúng.

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

Ví dụ: 2 đồng phân ethanol và dimethyl ete được biết với 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 được biết với thành phần biến đổi từ $TiO_{0,58}$ đến $TiO_{1,33}$. Thành phần biến đổi nhưng khiến trúc tinh thể 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 dẫn và quang.

1.1.2 CÁC ĐẠI LƯỢNG NGUYÊN CẤU HẠT

Các giá trị nguyên lượng và điện tích đã được 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

Hạt	Khối lượng (g)	Điện tích (culong)
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 proton hay neutron hay electron (khoảng 10^{-24} g), điện tích proton và electron là gần nhau và trái dấu. Ta có:

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

$$1,6 \cdot 10^{-19} \text{ (C)} = 1 \text{ đơn vị điện tích} = +1$$

Chính vì vậy, 1 proton hay neutron xem là có trọng lượng 1u. Khối lượng electron có điện tích -1, còn proton là +1.

Ví dụ: 1 nguyên tử natri (Na) có trọng lượng 23u, trong đó, hạt nhân tích điện +11 cân bằng điện với 11 proton và 11 electron -11. Vì trong 1 nguyên tử Na có 11 proton, 12 neutron và 11 electron nên 23 chính là A.

Mol là đơn vị đo lường dùng trong hóa học nhằm diễn tả lượng chất có chứa số hạt nguyên tử hay ion và được đặt theo nhà khoa học, Lorenzo Romano Amedeo Carlo Avogadro di Quaregna e di Cerreto, phát minh ra số $6,02214179 \times 10^{23}$. Gọi tắt là hằng số Avogadro. Như vậy, 1 mol nguyên tử bất kỳ có chứa $6,02214179 \times 10^{23}$ nguyên tử. Ta thấy:

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

Do đó, M_{Na} gần bằng 23 g là khối lượng của 1 mol natri được tính theo đơn vị gam. A_{Na} gần bằng 23 u là khối lượng của 1 nguyên tử natri được tính theo đơn vị u. Như vậy, M và A có mối quan hệ chặt chẽ, nhìn thấy thông số A có thể suy ra giá trị M theo đơn vị gam tương ứng.

Thông thường, người ta xem nguyên tử là hình cầu. Do đó, mỗi nguyên tử có một thể tích riêng và liên hệ với bán kính (r) của chúng:

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

trong đó, V – thể tích mỗi nguyên tử

r – bán kính nguyên tử

Bán kính nguyên tử được đo bằng đơn vị Ångström ($\text{\AA}$) và cho biết đến độ lớn thể tích của nguyên tử. Theo công thức (4), người ta suy ra bán kính nguyên tử.

Chúng ta có thể kết luận thông số quan trọng của nguyên tử lớn nhất sau đây:

a. Đại lượng trọng lượng

Số khối (A) cho biết tổng số hạt cơ bản (proton và neutron) trong hạt nhân nguyên tử:

$$A = p + n$$

Khối lượng mol (M) cho biết tổng khối lượng của 1 mol nguyên tử chứa số hạt nhân 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. Đại lượng đặc trưng

Khối lượng riêng cho biết tổng khối lượng chất được chứa trong một đơn vị thể tích nhất định:

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

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 tổng khối lượng chất nào đó được chứa trong một hỗn hợp chất tính trên 1 đơn vị nhất định. Nồng độ thường được ký hiệu rất đa dạng, có thể là C_M (số mol trong 1 lít dung dịch); C_N (số đương lượng gam trong 1 lít dung dịch); C% (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);...

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

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

trong đó: N là số đương lượng gam.

$$N = \frac{m}{D} \quad , D - \text{độ nặng riêng gam}; \quad D = \frac{M}{g} \quad , \gamma - \text{hệ số độ nặng riêng}.$$

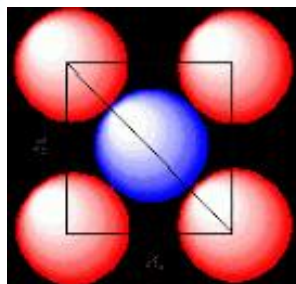
$$- C\% : \quad C\% = \frac{m_{ct}}{m_{dd}} \cdot 100\% \quad (10)$$

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

Ví dụ: Bán kính nguyên tử của sắt (cho gần đúng) là $1,28\text{\AA}$ (biết $1\text{\AA} = 10^{-10}\text{m}$), khối lượng mol của sắt là 56 g.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 sẽ xuất hiện 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 mạng tinh thể, bao gồm thể tích của 1 mol nguyên tử V_{mol} và thể tích các khe trống V_{tr} : $V = V_{\text{mol}} + V_{\text{tr}}$ (*)

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

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

Từ (*) 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 được V . Thay V vào (5) ta được d và đổi đơn vị g/cm^3 thì $d = 7,84 \text{ g/cm}^3$.

c. Đo lường đường kính

Thông thường, để biết về đường kính của nguyên tử người ta sẽ dùng đường kính bán kính hiệu dụng của nguyên tử. Tuy nhiên, bán kính hiệu dụng thay đổi bởi điều kiện tồn tại nguyên tử nên không thể nói chúng có giá trị xác thực nào. Người ta có thể tham khảo qua giá trị bán kính nguyên tử suy ra từ (4):

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

Ví dụ: Cho $d_{\text{Ca}} = 1,55 \text{ g.cm}^{-3}$, $M_{\text{Ca}} = 40,08 \text{ g.mol}^{-1}$. Trong tinh thể, các nguyên tử Ca chiếm 74% thể tích, còn lại là các khe trống. Bán kính gần đúng 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. Tức là có chứa lượng 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:

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

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

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

Hydro là nguyên tử nhẹ nhất có bán kính vào khoảng 0,53 Å. Sau các ví dụ trên đây ta thấy nguyên tử Ca lớn hơn gấp 4 lần hydro (1,97 Å) và Fe lớn hơn hydro khoảng 2 lần (1,28 Å).

1.2 CỤ THỂ O NGUYÊN TỬ

1.2.1 MÔ HÌNH NGUYÊN TỬ NIELS BOHR

Dựa trên thuyết lượng tử của Planck (Plăng) và những định luật của 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 được tính theo công thức:

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

n là các số tự nhiên 1,2,3... n

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

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

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

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

Năng lượng toàn phần của electron trên mỗi quỹ đạo được 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 tương ứng 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 được 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 được các quỹ đạo, năng lượng của electron và giải thích quang phổ vạch của nguyên tử hydro là nguyên tử đầu tiên như vậy, tuy nhiên không giải thích được quang phổ của các nguyên tử phức tạp.

Điều đó cho thấy rằng điều gì về những hạt hay hệ hạt vi mô như electron, nguyên tử thì không thể áp dụng những định luật của vật lý cổ điển. Các hệ này có những đặc tính khác với hệ vĩ mô và phải được nghiên cứu bằng các học lượng tử.

1.2.2 Thuyết lượng tử ánh sáng

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

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

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

Mọi 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 công 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 khối lượng $9,1.10^{-28}$ g chuyển động với vận tốc khoảng 10^8 cm/s sẽ có bước sóng liên kết với λ tính theo biểu thức (15):

$$\lambda = \frac{6,62.10^{-27}}{9,1.10^{-28}.10^8} \approx 7.10^{-8} \text{ cm}$$

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

Năm 1927 Devison và Germe 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 (Haixenbec - Đức) 1927

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

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

Δv : độ bất định vận tốc

Δx : độ bất định vị trí

m : khối lượng hạt

Theo hệ thức này thì việc xác định toán tử càng chính xác bao nhiêu thì xác định toán tử càng kém chính xác bấy nhiêu.

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

c. Hàm sóng

Trạng thái của một hệ vĩ mô sẽ hoàn toàn được xác định nếu biết quỹ đạo và tốc độ chuyển động của nó. Trong khi đó đối với hệ vi mô như 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 môi trường trạng thái của electron trong nguyên tử bằng một hàm sóng gọi là *hàm sóng*, kí hiệu là Ψ (đọc là pxi).

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 Ψ nhận được khi giải phương trình sóng đối với nguyên tử.

1.2.3 Phương trình sóng hay phương trình Schrodinger (Schrödinger)

Cơ sở của 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 được viết gọn rút gọn:

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

U : thế năng của hạt

E : năng lượng toàn phần của hạt

m : khối lượng của hạt

Đổi vị trí hạt có thể, nếu thay U bằng biểu thức tính thế năng của hạt và giải phương trình ta nhận được các nghiệm $\Psi_1, \Psi_2, \Psi_3 \dots \Psi_n$ để trình bày cho các trạng thái khác nhau của hạt vi mô và các giá trị năng lượng ứng với mỗi trạng thái đó.

1.2.4 Phương trình sóng đôi vị nguyên tử hydro

Nguyên tử hydro là nguyên tử đơn giản nhất, gồm một electron mang điện tích $-e$ chuyển động trong trường thế của hạt nhân mang điện tích $+e$. Vì vậy phương trình Schrödinger trong trường hợp này có thể giải được một cách chính xác. Nhưng kết quả thu được khi giải phương trình này là cơ sở của hệ thống lý thuyết về cấu tạo nguyên tử.

Phương trình sóng đôi vị nguyên tử hydro có dạng:

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

h : hằng số, gọi là 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 $(\Psi_1, \Psi_2, \dots \Psi_n)$ từ đó tìm được Ψ^2 biểu thức xác suất tìm thấy electron tại những điểm khác nhau trong không gian nguyên tử và mật độ điện tích được trình bày của electron như năng lượng toàn phần E , mômen động lượng M ...

1.2.5 Orbital nguyên tử . Mây electron

Các hàm sóng Ψ_n - nghiệm của phương trình (18), được gọi là các orbital nguyên tử (viết tắt là AO) và kí hiệu của nó là: $1s, 2s, 2p \dots 3d \dots$. Trong đó các chữ s dùng để chỉ $1p$ orbital, còn các chữ p, d dùng để chỉ các phân lớp. **Ví dụ:**

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

$2p$ 2,p.

3d

3,..... d.

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

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

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r} \quad \text{tức là} \quad \psi^2 = e^{-2r} \frac{1}{\pi}$$

Hàm này chỉ phụ thuộc vào biến số tới độ r. Từ hàm này ta biết được $\Psi^2(r)$ biểu thị xác suất có mặt electron tại một điểm cách nhân một khoảng r.

Nếu biểu diễn số phụ thuộc của hàm Ψ^2 theo khoảng cách r ta được đồ thị cong phân bố xác suất có mặt của electron ở 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 ở gần hạt nhân rất lớn và giảm dần khi càng xa hạt nhân.

Một cách hình ảnh khác ta có thể biểu diễn số phân bố xác suất có mặt electron trong nguyên tử bằng những dấu chấm. Một đám các chấm sẽ lớn ở gần hạt nhân và thưa dần khi càng xa nhân. Khi đó orbital nguyên tử giống như một đám mây vì vậy gọi là mây electron. Để dễ 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 được hình dạng của các orbital hay các mây electron (Hình 1.3).

Mây s có dạng hình cầu.

Các mây p có hình số 8 nối tiếp nhau theo 3 trục ox, oy, oz để kí hiệu là p_x , p_y và p_z

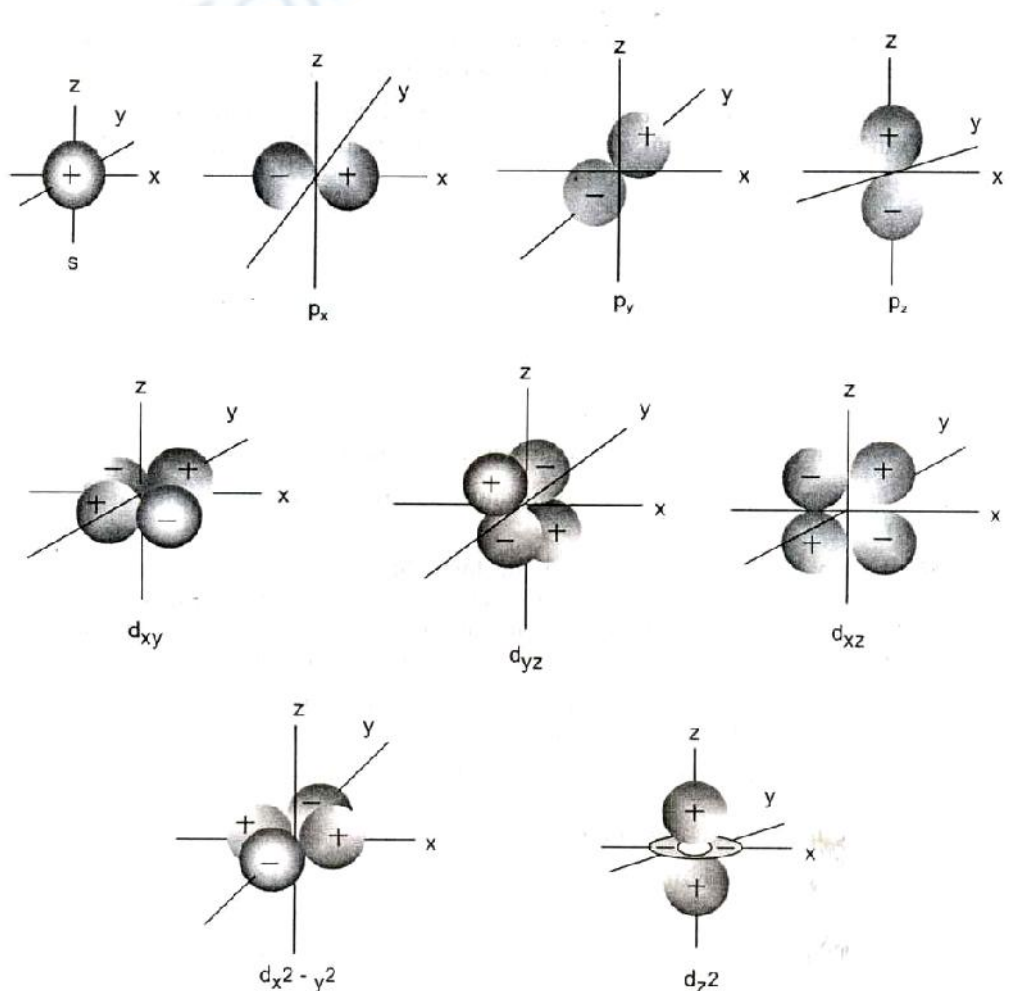
Các mây d có hình dạng khác nhau:

d_{xy} , d_{yz} , d_{zx} hình hoa th (4 cánh) hình theo đường phân giác của các góc trong xy , yz , zx .

$d_{x^2-y^2}$ có dạng hoa th nh hình hình theo 2 trục ox và oy.

Riêng mây d_{z^2} gồm hình số 8 nối tiếp nhau theo trục oz và một vành khăn nằm trên mặt phẳng xy

Đây là hình dạng của một số AO:



Hình 1.4. Hình dạng các orbital nguyên tử

1.2.6 Các số lượng tử

Mỗi hàm sóng Ψ (hay mức AO) được 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 để tìm mức số điện lượng vật lý đặc trưng cho mức 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

+ n nhận các giá trị từ 1, 2, 3... n .

+ Các AO có n giống nhau sẽ có cùng mức mức năng lượng và tạo ra mức lớp orbital nguyên tử

Lớp AO	n	1	2	3	4 ... n
Mức năng lượng		E_1	E_2	E_3	$E_4 \dots E_n$

- 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 lớp) có n giá trị của l (n phân lớp)

Lớp n	Phân lớp s	Phân lớp p	Phân lớp d	Phân lớp f
$n = 1$	1 = 0			
$n = 2$	1 = 0	1 = 1		
$n = 3$	1 = 0	1 = 1	1 = 2	
$n = 4$	1 = 0	1 = 1	1 = 2	1 = 3

Muốn chỉ ra mức phân lớp thuộc lớp nào người 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