

HỌC VIỆN CÔNG NGHỆ BƯU CHÍNH VIỄN THÔNG



SÁCH HƯỚNG DẪN HỌC TẬP
HÓA HỌC ĐẠI CƯƠNG

(Dùng cho sinh viên hệ đào tạo đại học từ xa)

Lưu hành nội bộ

HÀ NỘI - 2006

SÁCH HƯỚNG DẪN HỌC TẬP

HÓA HỌC ĐẠI CƯƠNG

Biên soạn : Ths. TỪ ANH PHONG

MỞ ĐẦU

Hóa học là một trong những lĩnh vực khoa học tự nhiên nghiên cứu về thế giới vật chất và sự vận động của nó, nhằm tìm ra các quy luật vận động để vận dụng vào cuộc sống.

Sự vận động hóa học của vật chất đó là quá trình biến đổi chất này thành chất khác. Ví dụ như sự oxi hóa kim loại bởi oxi của không khí, sự phân hủy các chất hữu cơ bởi các vi khuẩn, sự quang hợp biến khí cacbonic và hơi nước thành các hợp chất glucit, sự đốt cháy nhiên liệu tạo ra năng lượng dùng trong đời sống và sản xuất.

Những sự chuyển hóa các chất như trên gọi là hiện tượng hóa học hay phản ứng hóa học.

Các phản ứng hóa học xảy ra thường kèm theo sự biến đổi năng lượng dưới các dạng khác nhau (nhiệt, điện, quang, cơ,...) được gọi là những hiện tượng kèm theo phản ứng hóa học.

Khả năng phản ứng hóa học của các chất phụ thuộc vào thành phần, cấu tạo phân tử và trạng thái tồn tại của chúng, điều kiện thực hiện phản ứng, đó là tính chất hóa học của các chất.

Bởi vậy đối tượng của hóa học được tóm tắt như sau: *Hóa học là khoa học về các chất, nó nghiên cứu thành phần, cấu tạo, tính chất của các chất, sự chuyển hóa giữa chúng, các hiện tượng kèm theo sự chuyển hóa đó và các quy luật chi phối chúng.*

Các quá trình hóa học không ngừng xảy ra trên vỏ trái đất, trong lòng đất, trong không khí, trong nước, trong các cơ thể động vật, thực vật,...

Nhiều ngành khoa học, kinh tế liên quan chặt chẽ với hóa học: công nghiệp hóa học, luyện kim, địa chất, sinh vật học, nông nghiệp, y học, dược học, xây dựng, giao thông vận tải, chế tạo vật liệu, công nghiệp nhẹ, công nghiệp thực phẩm,... Sở dĩ như vậy là vì các ngành đều sử dụng các chất là đối tượng; do đó cần phải biết bản chất của chúng.

Sự liên quan chặt chẽ giữa hóa học và các ngành khoa học khác đã làm nảy sinh các môn hóa học phục vụ cho từng ngành: hóa nông, hóa học đất, hóa học trong xây dựng, hóa học nước, sinh hóa, hóa học bảo vệ thực vật, hóa học bảo vệ môi trường, hóa dược, hóa thực phẩm, hóa luyện kim...

BÀI 1: MỘT SỐ KHÁI NIỆM VÀ ĐỊNH LUẬT CƠ BẢN CỦA HÓA HỌC

1. Nguyên tử

Nguyên tử là hạt nhỏ nhất cấu tạo nên các chất không thể chia nhỏ hơn nữa bằng phương pháp hóa học.

2. Nguyên tố hóa học

Nguyên tố hóa học là khái niệm để chỉ một loại nguyên tử. Một nguyên tố hóa học được biểu thị bằng kí hiệu hóa học. Ví dụ: nguyên tố oxi O, canxi Ca, lưu huỳnh S...

3. Phân tử

Phân tử được tạo thành từ các nguyên tử, là hạt nhỏ nhất của một chất nhưng vẫn mang đầy đủ tính chất của chất đó.

Ví dụ: Phân tử nước H_2O gồm 2 nguyên tử hydro và 1 nguyên tử oxi, phân tử clo Cl_2 gồm 2 nguyên tử clo, phân tử metan CH_4 gồm 1 nguyên tử cacbon và 4 nguyên tử hydro...

4. Chất hóa học

Chất hóa học là khái niệm để chỉ một loại phân tử. Một chất hóa học được biểu thị bằng công thức hóa học. Ví dụ: muối ăn NaCl, nước H_2O , nitơ N_2 , sắt Fe...

5. Khối lượng nguyên tử

Đó là khối lượng của một nguyên tử của nguyên tố. Khối lượng nguyên tử được tính bằng đơn vị cacbon (đvC). Một đvC bằng 1/12 khối lượng nguyên tử cacbon (^{12}C). Ví dụ: khối lượng nguyên tử oxi 16 đvC, Na = 23 đvC...

6. Khối lượng phân tử

Đó là khối lượng của một phân tử của chất. Khối lượng phân tử cũng được tính bằng đvC. Ví dụ: khối lượng phân tử của N_2 = 28 đvC, HCl = 36,5 đvC...

7. Mol

Đó là lượng chất chứa $N = 6,02 \cdot 10^{23}$ phần tử vi mô (phân tử nguyên tử, ion electron...). N được gọi là số Avogadro và nó bằng số nguyên tử C có trong 12 gam ^{12}C .

8. Khối lượng mol nguyên tử, phân tử, ion

Đó là khối lượng tính bằng gam của 1 mol nguyên tử (phân tử hay ion...). Về số trị nó đúng bằng trị số khối lượng nguyên tử (phân tử hay ion). Ví dụ: khối lượng mol nguyên tử của hydro bằng 1 gam, của phân tử nitơ bằng 28 gam, của H_2SO_4 bằng 98 gam...

9. Hóa trị

Hóa trị của một nguyên tố là số liên kết hóa học mà một nguyên tử của nguyên tố đó tạo ra với các nguyên tử khác trong phân tử. Mỗi liên kết được biểu thị bằng một gạch nối hai nguyên tử. Hóa trị được biểu thị bằng chữ số La Mã.

Nếu qui ước hóa trị của hidro trong các hợp chất bằng (I) thì hóa trị của oxi trong H_2O bằng (II), của nitơ trong NH_3 bằng (III)... Dựa vào hóa trị (I) của hidro và hóa trị (II) của oxi có thể biết được hóa trị của nhiều nguyên tố khác.

Ví dụ: Ag, các kim loại kiềm (hóa trị I); Zn, các kim loại kiềm thổ (II)

Al (III), các khí trơ (hóa trị 0)

Fe (II, III); Cu (I, II); S (II, IV, VI)

10. Số oxi-hóa

Số oxi-hóa được qui ước là điện tích của nguyên tử trong phân tử khi giả định rằng cặp electron dùng để liên kết với nguyên tử khác trong phân tử chuyển hẳn về nguyên tử có độ điện âm lớn hơn.

Để tính số oxi-hóa của một nguyên tố, cần lưu ý:

- Số oxi-hóa có thể là số dương, âm, bằng 0 hay là số lẻ;
- Số oxi-hóa của nguyên tố trong đơn chất bằng 0;
- Một số nguyên tố có số oxi-hóa không đổi và bằng điện tích ion của nó
 - H, các kim loại kiềm có số oxi-hóa +1 (trong NaH, H có số oxi-hóa -1)
 - Mg và các kim loại kiềm thổ có số oxi-hóa +2
 - Al có số oxi-hóa +3; Fe có hai số oxi-hóa +2 và +3
 - O có số oxi-hóa -2 (trong H_2O_2 O có số oxi-hóa -1)
- Tổng đại số số oxi-hóa của các nguyên tử trong phân tử bằng 0.

Ví dụ: Zn^0, Cl_2^0, Na^+Cl^- , $K^+SO_4^{2-}$, Na_2SO_3 , $Na_2S_4O_6$, $KMnO_4$, H_2O_2

CO_2 , C_2H_5OH , $C_2H_4O(CH_3CHO)$, $C_2H_4O_2(CH_3COOH)$, $H_2C_2O_4$

BÀI 2: CẤU TẠO NGUYÊN TỬ

• Khái niệm nguyên tử "atom" (không thể phân chia) đã được các nhà triết học cổ Hy Lạp đưa ra cách đây hơn hai nghìn năm. Tuy nhiên mãi đến thế kỉ 19 mới xuất hiện những giả thuyết về nguyên tử và phân tử.

• Năm 1861 thuyết nguyên tử, phân tử chính thức được thừa nhận tại Hội nghị hóa học thế giới họp ở Thụy Sĩ.

• Chỉ đến cuối thế kỉ 19 và đầu thế kỉ 20 với những thành tựu của vật lí, các thành phần cấu tạo nên nguyên tử lần lượt được phát hiện.

1. Thành phần cấu tạo của nguyên tử

Về mặt vật lí, nguyên tử không phải là hạt nhỏ nhất mà có cấu tạo phức tạp, gồm ít nhất là hạt nhân và các electron. Trong hạt nhân nguyên tử có hai hạt cơ bản: proton và neutron.

Hạt	Khối lượng (g)	Điện tích (culong)
electron (e)	$9,1 \cdot 10^{-28}$	$-1,6 \cdot 10^{-19}$
proton (p)	$1,673 \cdot 10^{-24}$	$+1,6 \cdot 10^{-19}$
neutron (n)	$1,675 \cdot 10^{-24}$	0

- Khối lượng của e $\approx 1/1840$ khối lượng p.

- Điện tích của e là điện tích nhỏ nhất và được lấy làm đơn vị điện tích, ta nói electron mang điện tích -1, còn proton mang điện tích dương +1.

- Nếu trong hạt nhân nguyên tử của một nguyên tố nào đó có Z proton thì điện tích hạt nhân là +Z và nguyên tử đó phải có Z electron, vì nguyên tử trung hòa điện.

- Trong bảng tuần hoàn, số thứ tự của các nguyên tố chính là số điện tích hạt nhân hay số proton trong hạt nhân nguyên tử của nguyên tố đó.

2. Những mẫu nguyên tử cổ điển

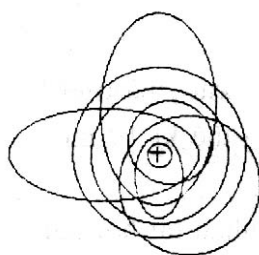
2.1. Mẫu Rutherford (Anh) 1911

Từ thực nghiệm Rutherford đã đưa ra mẫu nguyên tử hành tinh như sau:

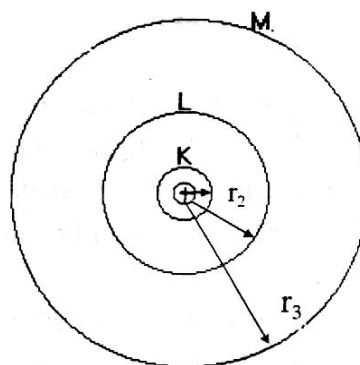
- Nguyên tử gồm một hạt nhân ở giữa và các electron quay xung quanh giống như các hành tinh quay xung quanh mặt trời (hình 1).

- Hạt nhân mang điện tích dương, có kích thước rất nhỏ so với kích thước của nguyên tử nhưng lại chiếm hầu như toàn bộ khối lượng của nguyên tử.

Mẫu Rutherford cho phép hình dung một cách đơn giản cấu tạo nguyên tử. Tuy nhiên không giải thích được sự tồn tại của nguyên tử cũng như hiện tượng quang phổ vạch của nguyên tử.



Hình 1



Hình 2

2.2. Mẫu Bo (Đan Mạch), 1913

Dựa theo thuyết lượng tử của Plăng và những định luật của vật lý cổ điển, Bo đã đưa ra hai định đề:

- Trong nguyên tử, electron quay trên những quỹ đạo tròn xác định (hình 2). Bán kính các quỹ đạo được tính theo công thức:

$$r_n = n^2 \cdot 0,53 \cdot 10^{-8} \text{ cm} = n^2 \cdot 0,53 \text{ \AA} \quad (1)$$

n là các số tự nhiên 1, 2, 3, ..., n

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

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

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

- Trên mỗi quỹ đạo, electron có một năng lượng xác định, được tính theo công thức:

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

Khi quay trên quỹ đạo, năng lượng của electron được bảo toàn. Nó chỉ phát hay thu năng lượng khi bị chuyển từ một quỹ đạo này sang một quỹ đạo khác. Điều đó giải thích tại sao lại thu được quang phổ vạch khi kích thích nguyên tử.

Thuyết Bo đã định lượng được các quỹ đạo và năng lượng của electron trong nguyên tử đồng thời giải thích được hiện tượng quang phổ vạch của nguyên tử hydro là nguyên tử đơn giản nhất (chỉ có một electron), tuy nhiên vẫn không giải thích được quang phổ của các nguyên tử phức tạp.

Điều đó cho thấy rằng đối với những hạt hay hệ hạt vi mô như electron, nguyên tử thì không thể áp dụng những định luật của cơ học cổ điển. Các hệ này có những đặc tính khác với hệ vĩ mô và phải được nghiên cứu bằng phương pháp mới, được gọi là cơ học lượng tử.

3. Đặc tính của hạt vi mô hay những tiền đề của cơ học lượng tử

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

Năm 1924, Đơ Broi (Pháp) trên cơ sở thuyết sóng - hạt của ánh sáng đã đề 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 hệ thức:

$$\lambda = \frac{h}{mv} \quad (3)$$

h : hằng số Planck

m : khối lượng của hạt

v : tốc độ chuyển động của hạt

Năm 1924, người ta đã xác định được khối lượng của electron, nghĩa là thừa nhận electron có bản chất hạt.

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

Như vậy: Electron vừa có bản chất sóng vừa có bản chất hạt.

3.2. Nguyên lý bất định (Haixenbec - Đức), 1927

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

$$\Delta x \cdot \Delta v \geq \frac{h}{2\pi m} \quad (4)$$

Δx : độ bất định về vị trí

Δv : độ bất định về tốc độ

m : khối lượng hạt

Theo hệ thức này thì việc xác định vị trí càng chính xác bao nhiêu thì xác định tốc độ càng kém chính xác bấy nhiêu.

4. Khái niệm cơ bản về cơ học lượng tử

4.1. 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 những hệ vi mô như electron, do bản chất sóng - hạt và nguyên lý bất định, không thể vẽ được các quỹ đạo chuyển động của chúng trong nguyên tử.

Thay cho các quỹ đạo, cơ học lượng tử mô tả thì mỗi trạng thái của electron trong nguyên tử bằng một hàm số gọi là hàm sóng, kí hiệu là ψ (poxi).

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.

4.2. Obitan nguyên tử. Máy electron

Các hàm sóng $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \dots$ - nghiệm của phương trình sóng, được gọi là các obitan nguyên tử (viết tắt là AO) và kí hiệu lần lượt là 1s, 2s, 2p... 3d... Trong đó các con số dùng để chỉ lớp obitan, còn các chữ s, p, d dùng để chỉ các phân lớp. Ví dụ:

2s chỉ electron (hay AO) thuộc lớp 2, phân lớp s

2p chỉ electron (hay AO) thuộc lớp 2, phân lớp p

3d chỉ electron (hay AO) thuộc lớp 3, phân lớp d

Như vậy:

Obitan nguyên tử là những hàm sóng mô tả trạng thái khác nhau của electron trong nguyên tử.

Nếu biểu diễn sự phụ thuộc của hàm ψ^2 theo khoảng cách r , ta được đường cong phân bố xác suất có mặt của electron ở trạng thái cơ bản.

Ví dụ: Khi biểu diễn hàm số đơn giản nhất ψ_1 (1s) mô tả trạng thái cơ bản của electron (trạng thái e có năng lượng thấp nhất) trong nguyên tử H, ta có hình 3.



Hình 3

Xác suất có mặt của electron ở gần hạt nhân rất lớn và nó giảm dần khi càng xa hạt nhân.

Một cách hình ảnh, người ta có thể biểu diễn sự phân bố xác suất có mặt electron trong nguyên tử bằng những dấu chấm. Mật độ của các chấm sẽ lớn ở gần hạt nhân và thưa dần khi càng xa hạt nhân. Khi đó obitan 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 obitan nguyên tử.

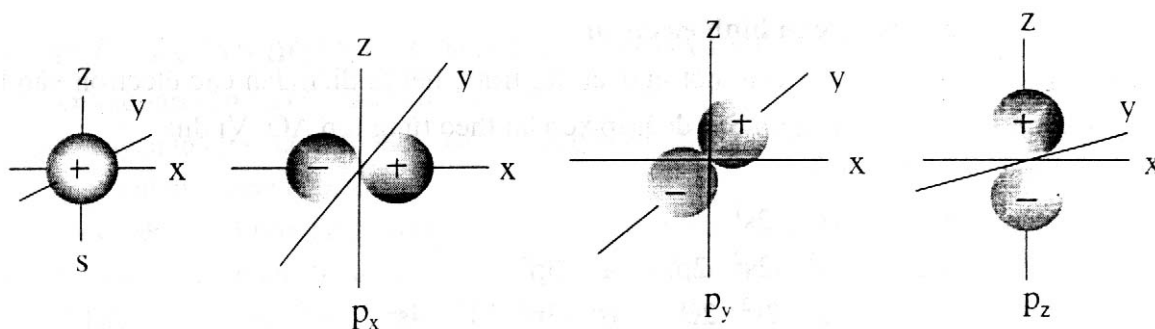
4.3. Hình dạng của các mây electron

Nếu biểu diễn các hàm sóng (các AO) trong không gian, ta được hình dạng của các obitan hay các mây electron (hình 4).

Mây s có dạng hình cầu.

Các mây p có hình số 8 nổi hướng theo 3 trục tọa độ ox, oy, oz được kí hiệu là p_x , p_y , p_z .

Dưới đây là hình dạng của một số AO:



Hình 4

5. Quy luật phân bố các electron trong nguyên tử

Trong nguyên tử nhiều electron, các electron được phân bố vào các AO tuân theo một số nguyên lí và quy luật như sau:

5.1. Nguyên lí ngăn cấm (Paoli - Thuyết Spin)

Theo nguyên lí này, trong mỗi AO chỉ có thể có tối đa hai electron có chiều tự quay (spin) khác nhau là $+1/2$ và $-1/2$.

Ví dụ:

Phân mức s có 1 AO (s), có tối đa 2 electron

Phân mức p có 3 AO (p_x , p_y , p_z), có tối đa 6 electron

Phân mức d có 5 AO (d_{xy} , d_{yz} , d_{z^2} , $d_{x^2-y^2}$, d_{zx}) có tối đa 10 electron

Phân mức f có 7 AO, có tối đa 14 electron

5.2. Nguyên lí vững bền. Cấu hình electron của nguyên tử

Trong nguyên tử, các electron chiếm lần lượt các obitan có năng lượng từ thấp đến cao.

Bằng phương pháp quang phổ nghiệm và tính toán lí thuyết, người ta đã xác định được thứ tự tăng dần năng lượng của các AO theo dãy sau đây:

$1s \ 2s \ 2p \ 3s \ 3p \ 4s \approx 3d \ 4p \ 5s \approx 4d \ 5p \ 6s \approx 4f \approx 5d \ 6p \ 7s \ 5f \approx 6d \ 7p \dots$

Để nhớ được thứ tự bậc thang năng lượng này, ta dùng sơ đồ sau: