



HÓA ĐẠI CƯỜNG

GV: ThS. Nguyễn Minh Kha

Bộ môn Kỹ Thuật Vô Cơ

Khoa Kỹ Thuật Hóa Học

Trường Đại Học Bách Khoa TP. HCM

Email: nmkha@hcmut.edu.vn

Tài liệu tham khảo

- Hóa Đại Cương – GS *NGUYỄN ĐÌNH SOA*
- Bài tập trắc nghiệm Hóa Đại Cương - Bộ môn CN Hóa Vô Cơ – Khoa Kỹ Thuật Hóa Học, ĐH Bách Khoa TP HCM
- Hóa Học Vô Cơ – GS *Hoàng Nhâm*
- Hóa Đại Cương và Trắc nghiệm Hóa Đại Cương - *Nguyễn Đức Chung*
- Các tài liệu Hóa Đại Cương (General Chemistry)



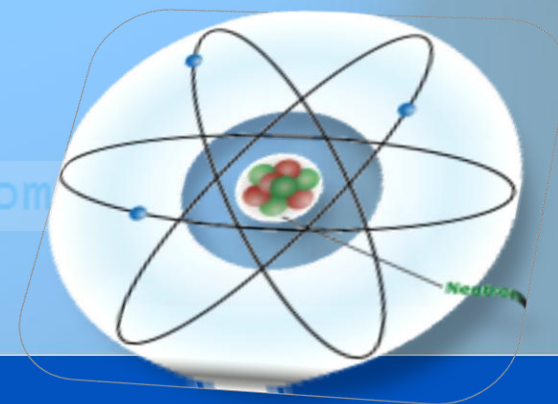
Chương I

CẤU TẠO

NGUYÊN TỬ

cuu duong than cong . com

cuu duong than cong . com



Giảng viên: ThS. Nguyễn Minh Kha

TÓM TẮT

- I. NGUYÊN TỬ VÀ QUANG PHỔ NGUYÊN TỬ
- II. SƠ LƯỢC VỀ CÁC THUYẾT CẤU TẠO NGUYÊN TỬ
- III. CẤU TRÚC LỚP VỎ ELECTRON NGUYÊN TỬ THEO CƠ HỌC LƯỢNG TỬ
- IV. NGUYÊN TỬ NHIỀU ELECTRON

I. NGUYÊN TỬ VÀ QUANG PHỔ NGUYÊN TỬ

1. Nguyên tử

2. Quang phổ nguyên tử

1. Nguyên tử



© Thomson - Brooks Cole

1. Nguyên tử

Tên	Ký hiệu	Khối lượng		Điện tích	
		(kg)	đvklnt	(C)	Tương đối đ/v e
Điện tử	e	$9,1095 \cdot 10^{-31}$	$5,4858 \cdot 10^{-4}$	$-1,60219 \cdot 10^{-19}$	- 1
Proton	p	$1,6726 \cdot 10^{-27}$	1,007276	$+1,60219 \cdot 10^{-19}$	+ 1
Neutron	n	$1,6745 \cdot 10^{-27}$	1,008665	0	0

➤ **Số electron bằng số proton.**

➤ **Khối lượng nguyên tử tập trung ở hạt nhân .**

Z và A là hai đặc trưng cơ bản của nguyên tử

Z - Điện tích hạt nhân = số proton

Bậc nguyên tử Z

■ **A** – số khối nguyên tử

$A = \text{số proton} + \text{số neutron}$

■ Ký hiệu nguyên tố hóa học: $\begin{matrix} A \\ Z \end{matrix} X$

ĐỒNG VỊ

Có cùng số proton (cùng 1 ng tố hóa học)

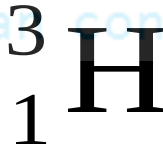
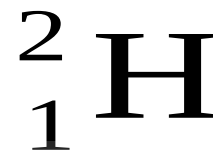
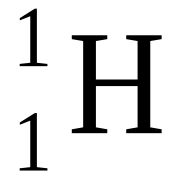
Khác số khối hay số nơ tron .

Ví dụ - Các đồng vị của Hydro ($Z = 1$)

Hydro hay Hydro nhẹ (99,98%)

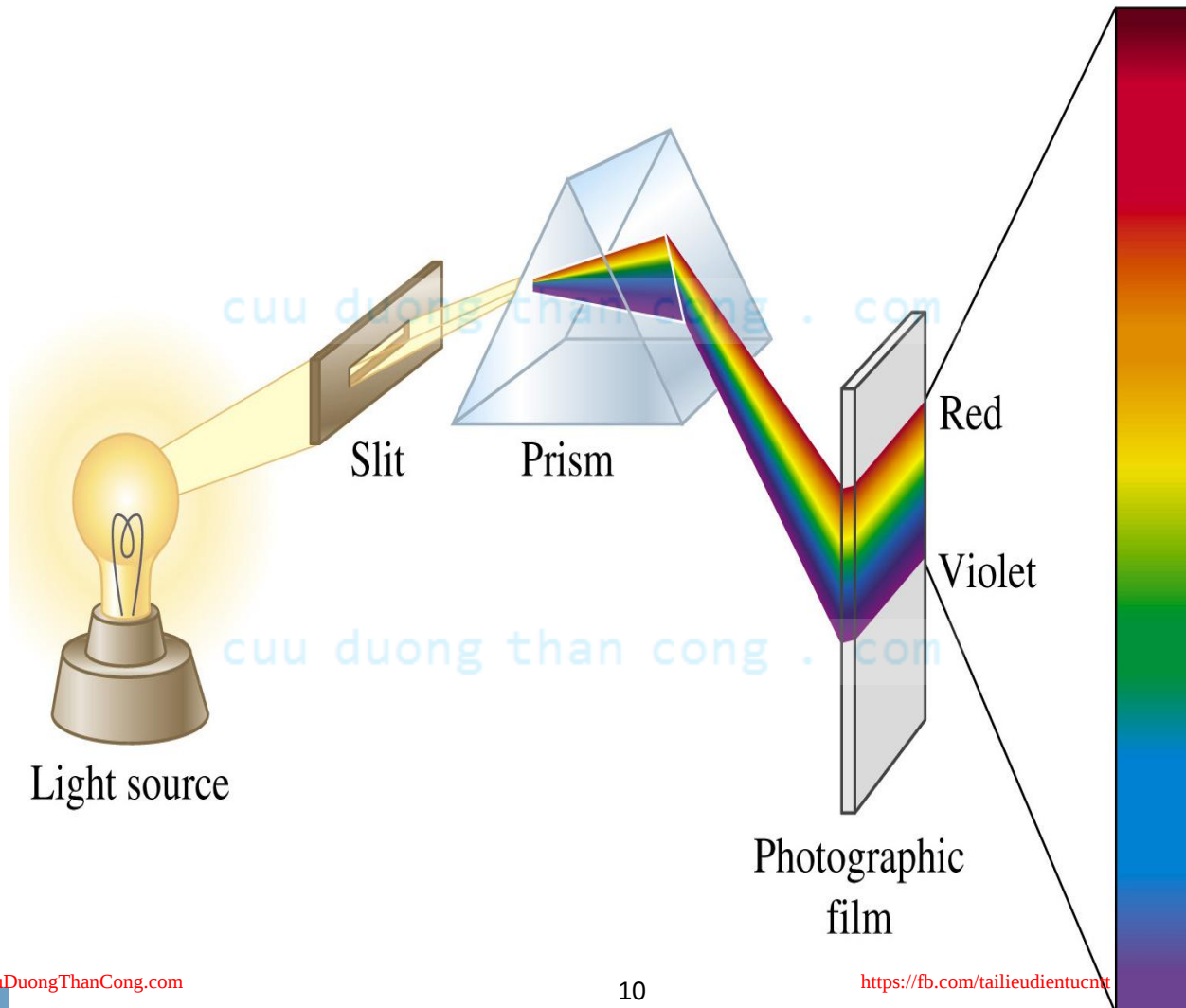
Đơteri (0,016 %)

Triti (0,001%)

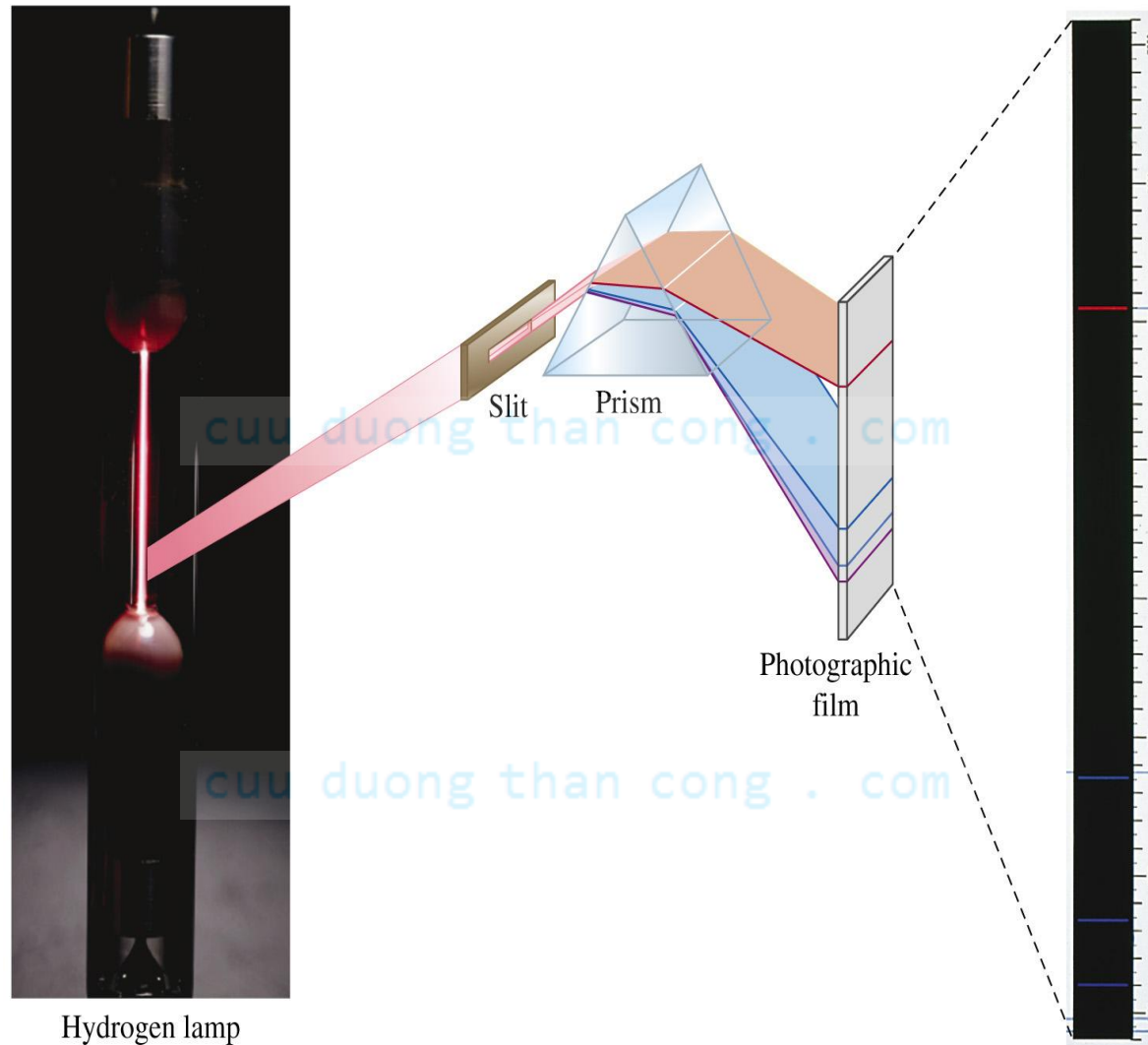


2. Quang phổ nguyên tử

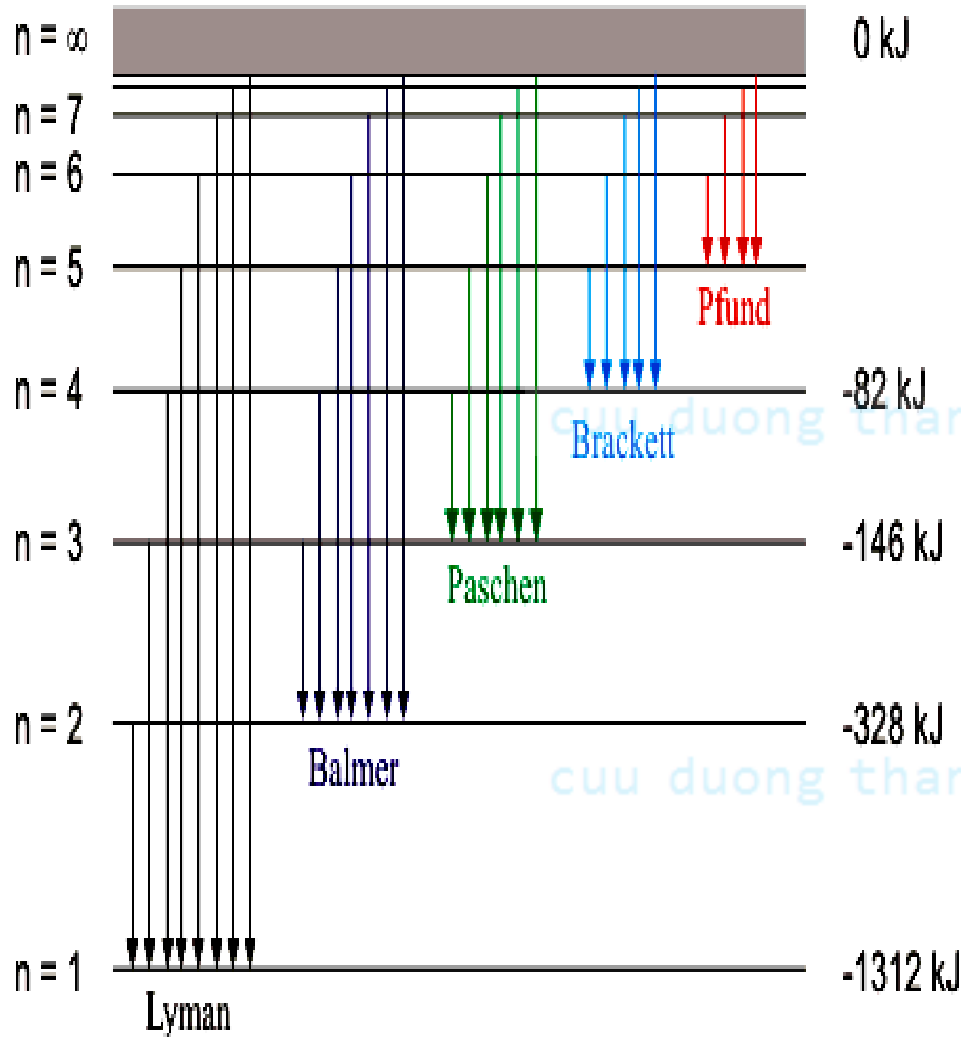
Quang phổ liên tục của ánh sáng trắng



Quang phổ vạch (Line Spectra)



Quang phổ phát xạ ngử (atomic emission spectra)



Dãy Lyman $\Rightarrow$ Tử ngoại (ultraviolet)

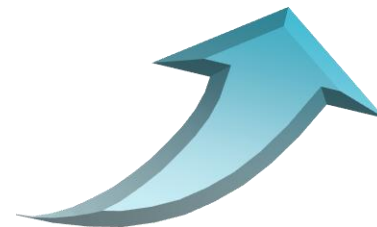
$n > 1 \Rightarrow n = 1$

Dãy Balmer $\Rightarrow$ Khả kiến (visible light)

$n > 2 \Rightarrow n = 2$

Dãy Paschen $\Rightarrow$ Hồng ngoại (infrared)

$n > 3 \Rightarrow n = 3$

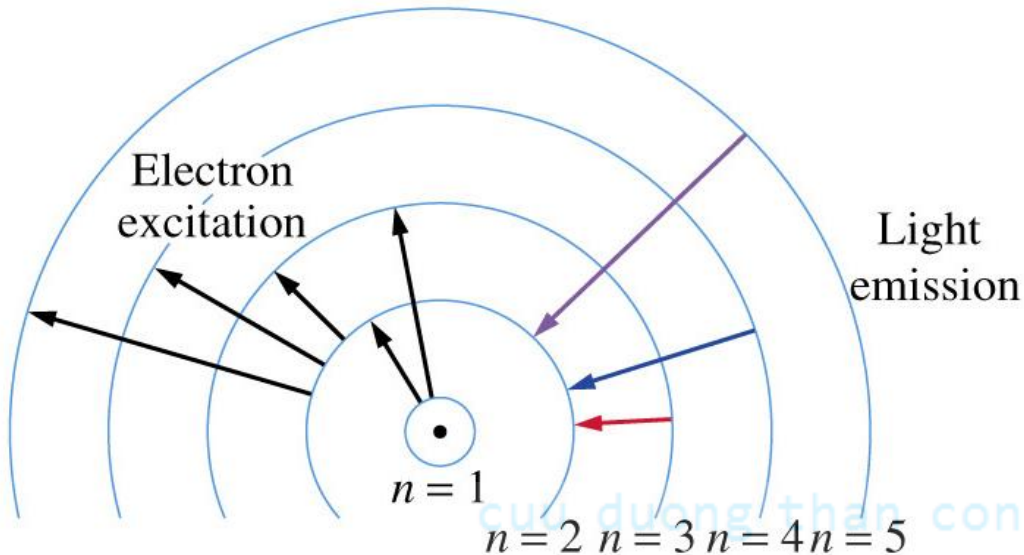


II. SƠ LƯỢC VỀ CÁC THUYẾT CẤU TẠO NGUYÊN TỬ

1. Thuyết cấu tạo nguyên tử của **John Dalton (1803)**
2. Thuyết cấu tạo nguyên tử của **Thompson (1898)**
3. Mẫu hành tinh nguyên tử của **Rutherford (1911)**
4. Mẫu nguyên tử theo **Bohr (1913)**
5. Mẫu nguyên tử của **Sommerfeld**

cuu duong than cong . com

BA TIÊN ĐỀ CỦA BOHR



Niels Bohr

- ❖ Electron quay quanh nhân trên những quỹ đạo tròn đồng tâm xác định, gọi là quỹ đạo bền.

$$mvr = nh/2\pi$$

- ❖ Khi quay trên quỹ đạo bền electron không bức xạ (không mất năng lượng).
- ❖ Năng lượng chỉ được phát ra hay hấp thụ khi electron chuyển từ quỹ đạo bền này sang quỹ đạo bền khác: $\Delta E = |E_t - E_c| = h\nu$

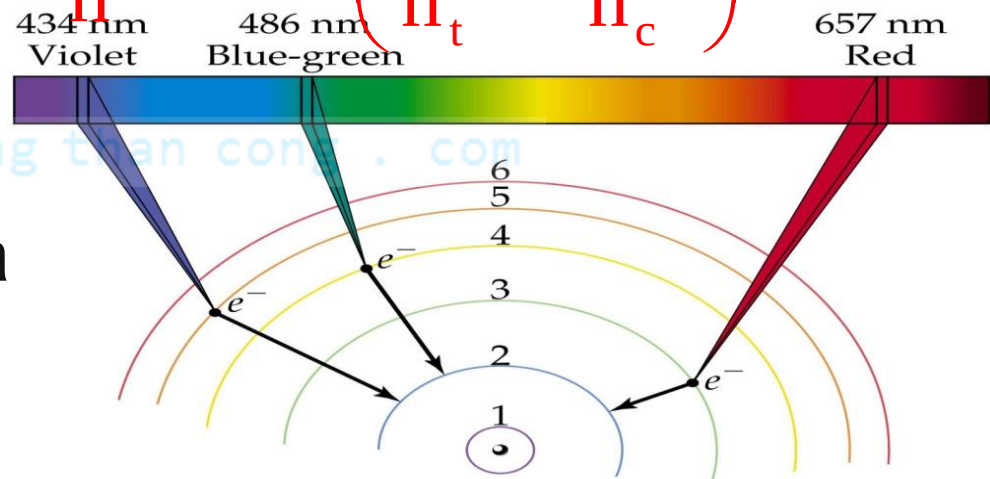
ƯU ĐIỂM CỦA THUYẾT BORH

- ✓ Áp dụng đúng cho hệ ng tử có 1electron, gần đúng cho ng tử nhiều electron.
- ✓ Tính bán kính quỹ đạo, năng lượng, tốc độ của electron trên quỹ đạo bền.
- ✓ Xác minh tính lượng tử hóa năng lượng của electron

$$E_n = -13,6Z^2/n^2 \text{ [eV]}$$

$$E = h\nu = h \frac{c}{\lambda} = -\frac{2\pi^2 me^4}{h^2} Z^2 \left(\frac{1}{n_t^2} - \frac{1}{n_c^2} \right)$$

- ✓ Giải thích được quang phổ vạch của ng tử .



NHƯỢC ĐIỂM CỦA THUYẾT BORH

- Không giải thích được độ bội của quang phổ.
- Tính toán lại sử dụng đl cơ học cổ điển.
- Xem electron chuyển động trên mặt phẳng.
- Không xác định được vị trí của electron khi di chuyển từ quỹ đạo này sang quỹ đạo khác.
- Không giải thích được sự lượng tử hóa năng lượng.
- Áp dụng cho nguyên tử phức tạp chỉ cho kết quả định tính.

III. CẤU TRÚC LỚP VỎ ELECTRON NGUYÊN TỬ THEO CƠ HỌC LƯỢNG TỬ

1. **Tính lưỡng nguyên của các hạt vi mô**
2. **Nguyên lý bất định Heisenberg và khái niệm đám mây điện tử**
3. **Phương trình sóng Schrödinger và 4 số lượng tử**

1. Tính lưỡng nguyên của các hạt vi mô

➤ *Các chất vi mô có cả tính chất hạt và tính chất sóng*

- ✓ Bản chất hạt: m , r và v xác định.
- ✓ Bản chất sóng: λ .

➤ **Hệ thức L. de Broglie:**

$$\lambda = \frac{h}{mv}$$



L. de Broglie
(1892-1987)

Ví dụ

✓ Đối với electron:

- $m = 9,1.10^{-28}g$
- $v = 10^8\text{cm/s} \sim 100\text{km/s}$
- $\lambda = 7,25.10^{-8}\text{cm}$

✓ Đối với hạt vĩ mô:

- $m = 1g$
- $v = 1\text{cm/s}$
- $\lambda = 6,6.10^{-27}\text{cm}$

2. Nguyên lý bất định Heisenberg và khái niệm đám mây điện tử

- a. Nguyên lý bất định Heisenberg (1927)**
- b. Khái niệm đám mây electron**

cuu duong than cong . com

cuu duong than cong . com

a. Nguyên lý bất định Heisenberg

➤ *Không thể đồng thời xác định chính xác cả vị trí và tốc độ của hạt vi mô.*

$$\Delta x \cdot \Delta v \geq \frac{h}{m} = \frac{h}{2\pi m}$$

➤ Ví dụ: đối với electron

$$v = 10^8 \pm 10^8 \text{ cm/s}$$

$$\Delta x \geq \frac{h}{2\pi m \Delta v} = \frac{6.625 \times 10^{-27}}{2 \times 3.14 \times 9.1 \times 10^{-28} \times 10^8} = 1.16 \times 10^{-8} \text{ cm} = 1.16 \text{ \AA}$$



→ *Khi xác định tương đối chính xác tốc độ chuyển động của electron chỉ có thể nói đến xác suất có mặt của nó ở chỗ nào đó trong không gian.*

b. Khái niệm đám mây electron

- ✓ Không thể dùng khái niệm quỹ đạo
- ✓ CHLT: khi chuyển động xung quanh hạt nhân, e đã tạo ra một vùng không gian mà nó có thể có mặt ở thời điểm bất kỳ với xác suất có mặt khác nhau.
- ✓ Vùng không gian = đám mây e: mật độ của đám mây $\sim$ xác suất có mặt của e.
- ✓ Theo tính toán của cơ học lượng tử thì *đám mây electron là vô cùng, không có ranh giới xác định.*
- ✓ CHLT Quy ước: *đám mây e là vùng không gian gần hạt nhân trong đó chứa khoảng 90% xác suất có mặt của e. Hình dạng đám mây - bề mặt giới hạn vùng không gian đó.*

3. Phương trình sóng Schrödinger và 4 số lượng tử

a. Phương trình sóng Schrödinger

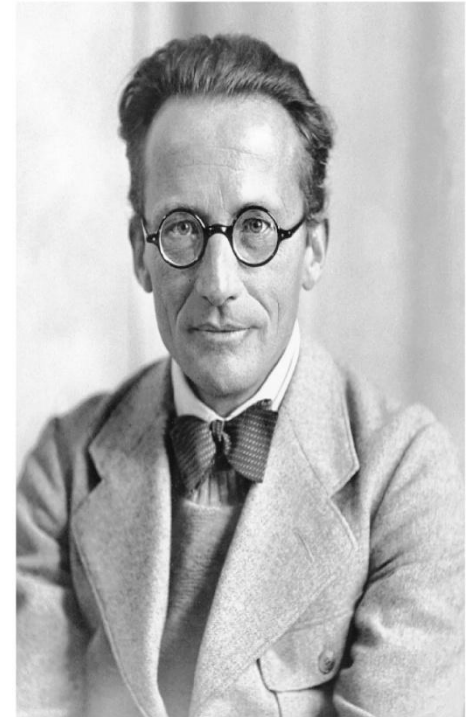
b. Bốn số lượng tử

- Số lượng tử chính n
- Số lượng tử phụ ℓ
- Số lượng tử từ m_ℓ
- Số lượng tử spin m_s

a. Phương trình sóng Schrödinger

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - V) \Psi = 0$$

→ mô tả chuyển động của hạt vi mô trong trường thế năng ở trạng thái dừng (trạng thái của hệ không thay đổi theo thời gian).



Erwin Schrödinger

a. Phương trình sóng Schrödinger

- ✓ **E** – năng lượng toàn phần của hạt vi mô
- ✓ **V** - thế năng, phụ thuộc vào tọa độ x, y, z
- ✓ **Ψ** - hàm sóng đối với các biến x, y, z mô tả sự chuyển động của hạt vi mô ở điểm x, y, z .
- ✓ **Ψ^2** – **mật độ xác suất có mặt** của hạt vi mô tại điểm x, y, z .
- ✓ **$\Psi^2 dV$** – **xác suất có mặt** của hạt vi mô trong thể tích dV có tâm xyz .

$$\int_0^{\infty} \Psi^2 dV = 1$$

a. Phương trình sóng Schrödinger

- Khi giải phương trình sóng Schrödinger cho các hệ nguyên tử khác nhau người ta thấy xuất hiện 4 đại lượng không thứ nguyên nhưng lại xác định trạng thái của electron trong nguyên tử. **Đó là 4 số lượng tử.**
- *Phương trình sóng Schrödinger chỉ giải được chính xác cho trường hợp hệ nguyên tử H (1 hạt nhân và 1 e). Đối với các hệ vi mô phức tạp hơn phải giải gần đúng.*

▪ Số lượng tử chính n và các mức năng lượng

✓ Xác định:

- Trạng thái **mức năng lượng** của electron (*chỉ đúng đối với nguyên tử H và ion hydrogenoid*)
- Kích thước trung bình của đám mây electron

$$E = -\frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 n^2 h^2} Z^2 = -2,18.10^{-18} \frac{Z^2}{n^2} J = -13.6 \frac{Z^2}{n^2} eV$$

$$\bar{r} = \frac{a_0 n^2}{Z} \left\{ 1 + \frac{1}{2} \left[1 - \frac{l(l+1)}{n^2} \right] \right\}$$

✓ Giá trị: $n = 1, 2, 3, \dots, \infty$

✓ Các **mức năng lượng**

n	1	2	3	...	$+\infty$
Mức năng lượng	E_1	E_2	E_3	...	E_∞

- $E_{\min}$ - *mức cơ bản*

- $E_{>\min}$ - *mức kích thích*

$$\Delta E = E_{kt} - E_{cb} = \frac{hc}{\lambda}$$

✓ Quang phổ nguyên tử

- Quang phổ của các ntử là quang phổ vạch.

- Quang phổ của mỗi nguyên tử là đặc trưng

✓ *Lớp electron*: gồm các e có cùng giá trị n

n	1	2	3	4	5	6	7
Lớp e	K	L	M	N	O	P	Q

Số lượng tử orbital ℓ và hình dạng đám mây e

✓ Giá trị: $\ell = 0, 1, \dots, (n - 1)$

✓ Xác định:

- **Phân mức năng lượng (E)** của đám mây trong nguyên tử nhiều e: $\ell \uparrow \rightarrow E \uparrow$

- Hình dạng đám mây electron

✓ **Các e có cùng cặp giá trị (n, ℓ) → xác định 1 phân lớp e**

ℓ	0	1	2	3
Phân lớp e	s	p	d	f

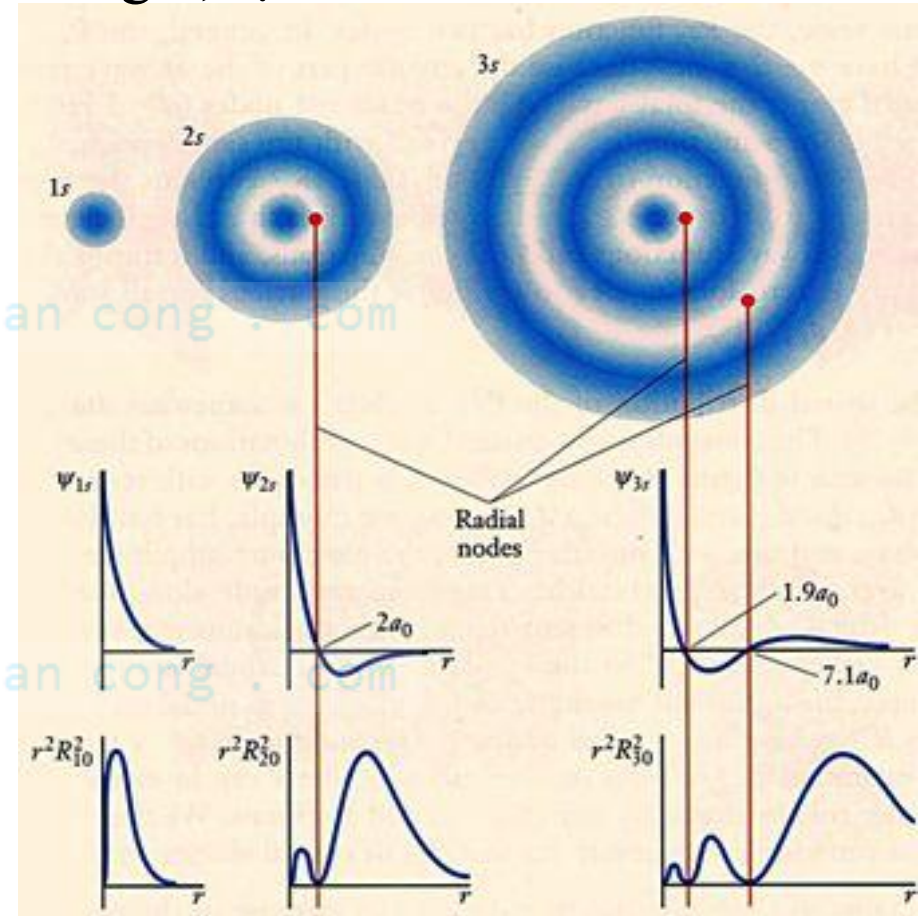
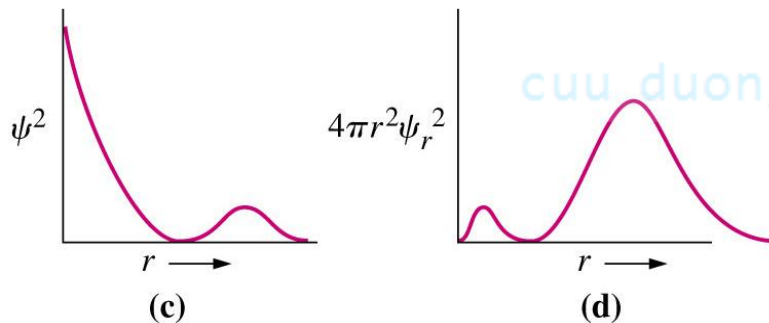
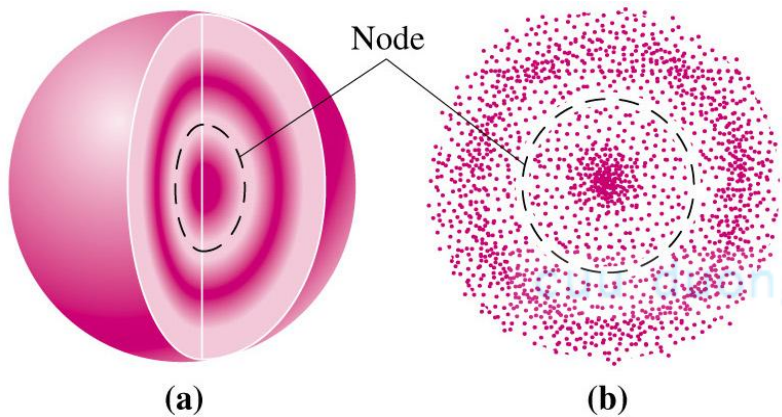
→ Ký hiệu phân lớp: 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d...

▪ Số lượng tử từ m_ℓ và các AO

- ✓ Giá trị: $m_\ell = 0, \pm 1, \dots, \pm \ell \rightarrow$ Cứ mỗi giá trị của ℓ có $(2\ell + 1)$ giá trị của m_ℓ .
- ✓ **Xác định: hướng của đám mây trong không gian: Mỗi giá trị của m_ℓ ứng với một cách định hướng của đám mây electron**
- ✓ Đám mây electron được xác định bởi ba số lượng tử n, ℓ, m_ℓ được gọi là *orbital nguyên tử* (AO).
- ✓ **Công thức chung tính số orbital là n^2**

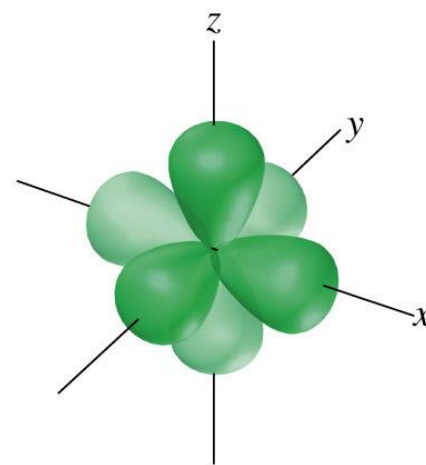
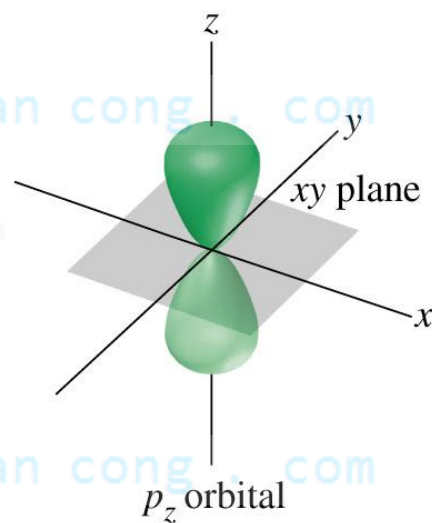
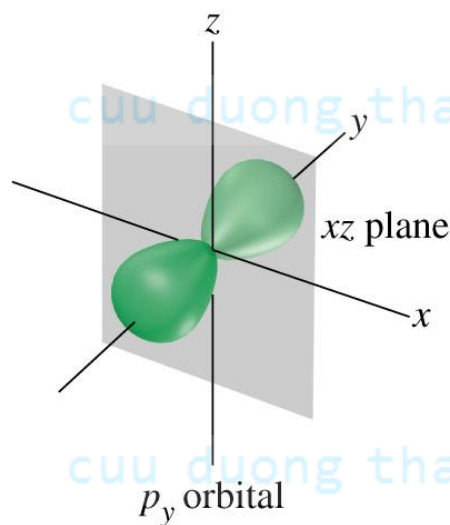
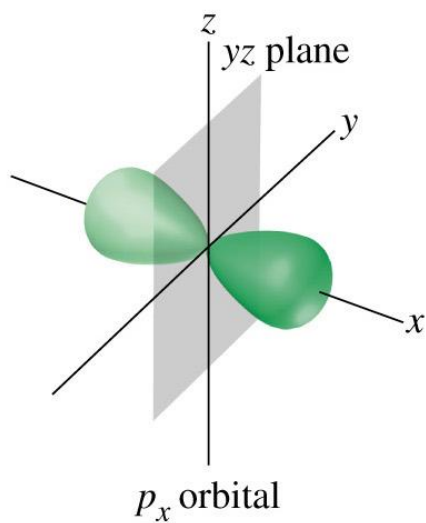
$\ell = 0 \rightarrow m_\ell = 0 \rightarrow 1$ Orbital S

Nút: Là khoảng không gian có **xác suất gặp electron là 0**.
Theo phương trình sóng Schrodinger, tại nút có $\Psi^2 = 0$.



Với **orbital s** ứng với số lượng tử chính n thì **số nút là $(n-1)$**

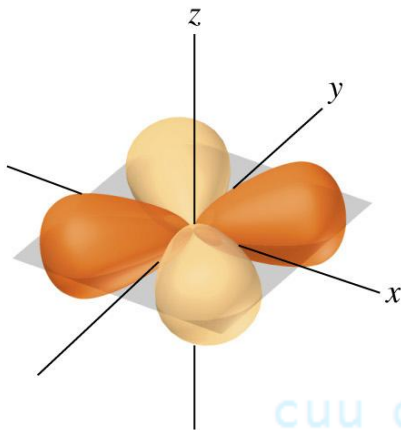
$\ell = 1 \rightarrow m_\ell = 0, \pm 1 \rightarrow 3 \text{ orbital } p$



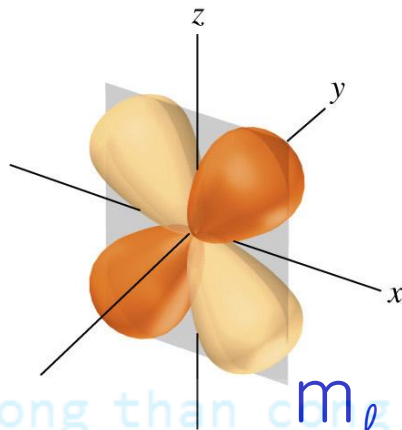
$$m_\ell = \pm 1$$

$$m_\ell = 0$$

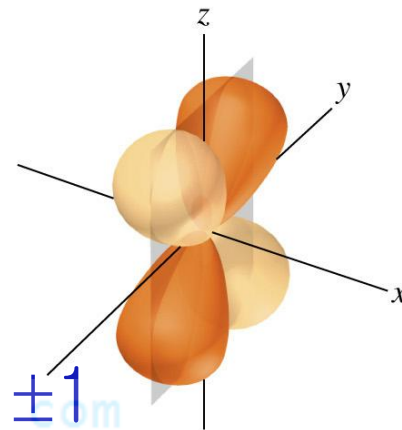
$\ell = 2 \rightarrow m_\ell = \pm 1, \pm 2, 0 \rightarrow 5 \text{ orbital d}$



d_{xy} orbital

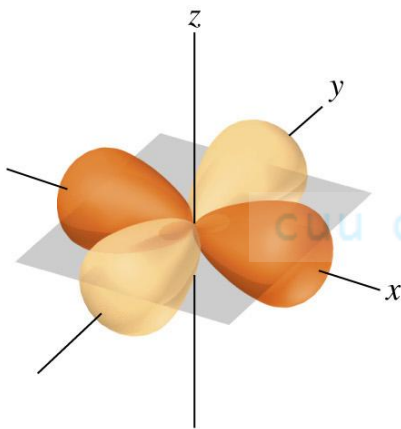


d_{xz} orbital



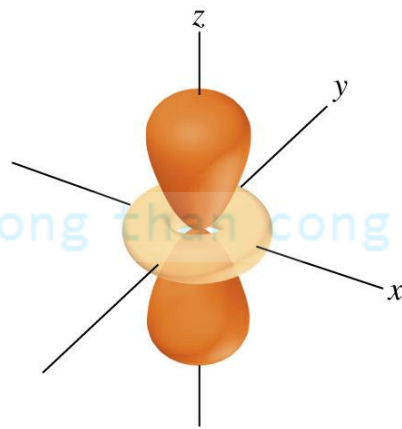
d_{yz} orbital

$m_\ell = \pm 1$



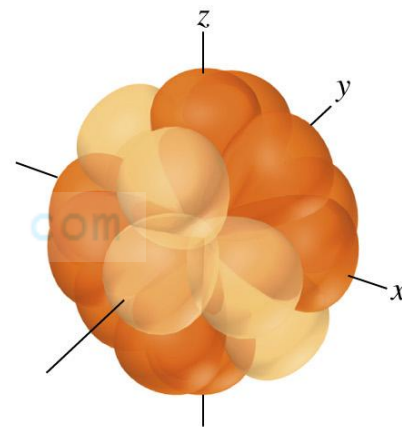
$d_{x^2-y^2}$ orbital

$m_\ell = \pm 2$

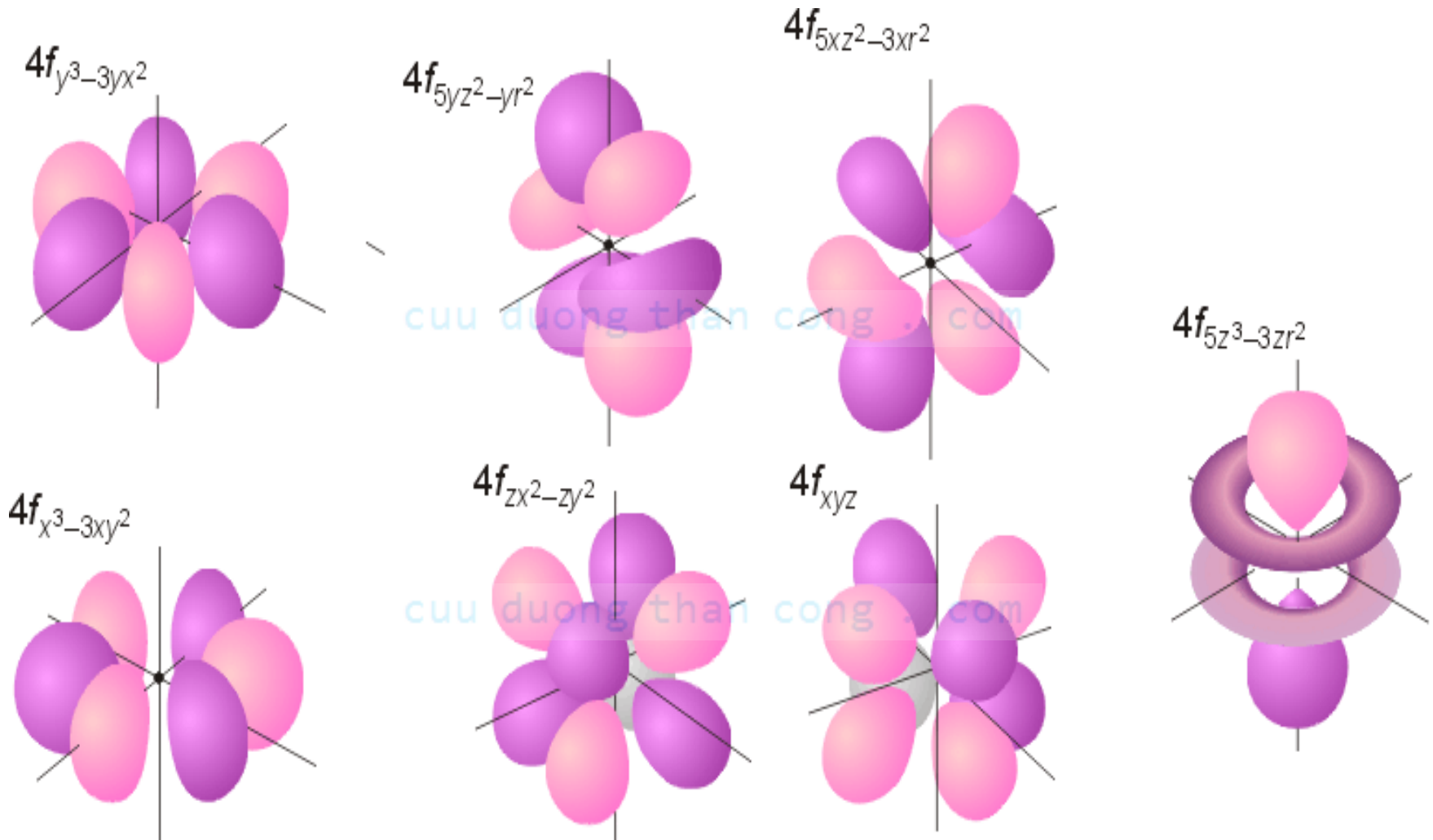


d_{z^2} orbital

$m_\ell = 0$

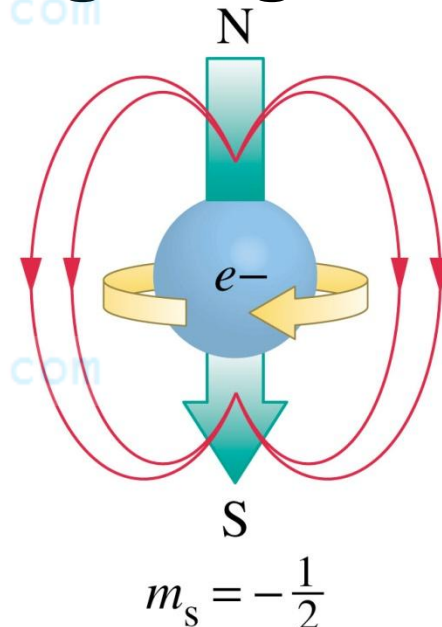
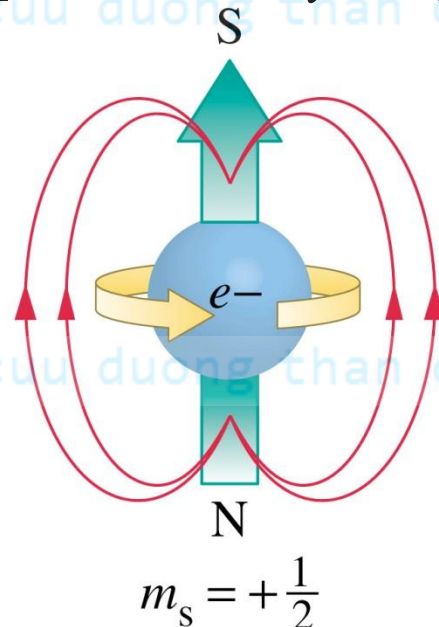


$\ell = 3 \rightarrow m_\ell = \pm 1, \pm 2, \pm 3, 0 \rightarrow 7 \text{ orbital f}$



▪ Số lượng tử spin m_s

- ✓ **Xác định:** trạng thái chuyển động riêng của e^- – sự tự quay quanh trục của e^- .
- ✓ Giá trị: $m_s = \pm \frac{1}{2}$ ứng với hai chiều quay thuận và nghịch kim đồng hồ.
- ✓ **Mỗi tổ hợp n, ℓ, m_ℓ, m_s tương ứng 1 e^- .**



Nguyên tắc xác định

$\underbrace{n}$ ℓ m_ℓ m_s

Lớp e

Phân lớp e

AO

e

ỨNG DỤNG

1. Nếu 1 điện tử có có giá trị $m_\ell = -2$ thì giá trị nhỏ nhất của n và ℓ là bao nhiêu? 

2. Ký hiệu nào sau đây không đúng:

3s, 1p, 2d, 3f, 4g, 5h

cuu duong than cong . com

IV. NGUYÊN TỬ NHIỀU ELECTRON

1. Trạng thái năng lượng của e trong nguyên tử nhiều e.
2. Các quy luật phân bố e vào ng tử nhiều e.
3. Công thức electron nguyên tử.

1. Trạng thái E của e trong ngử nhiều e

■ Giống e trong nguyên tử 1e:

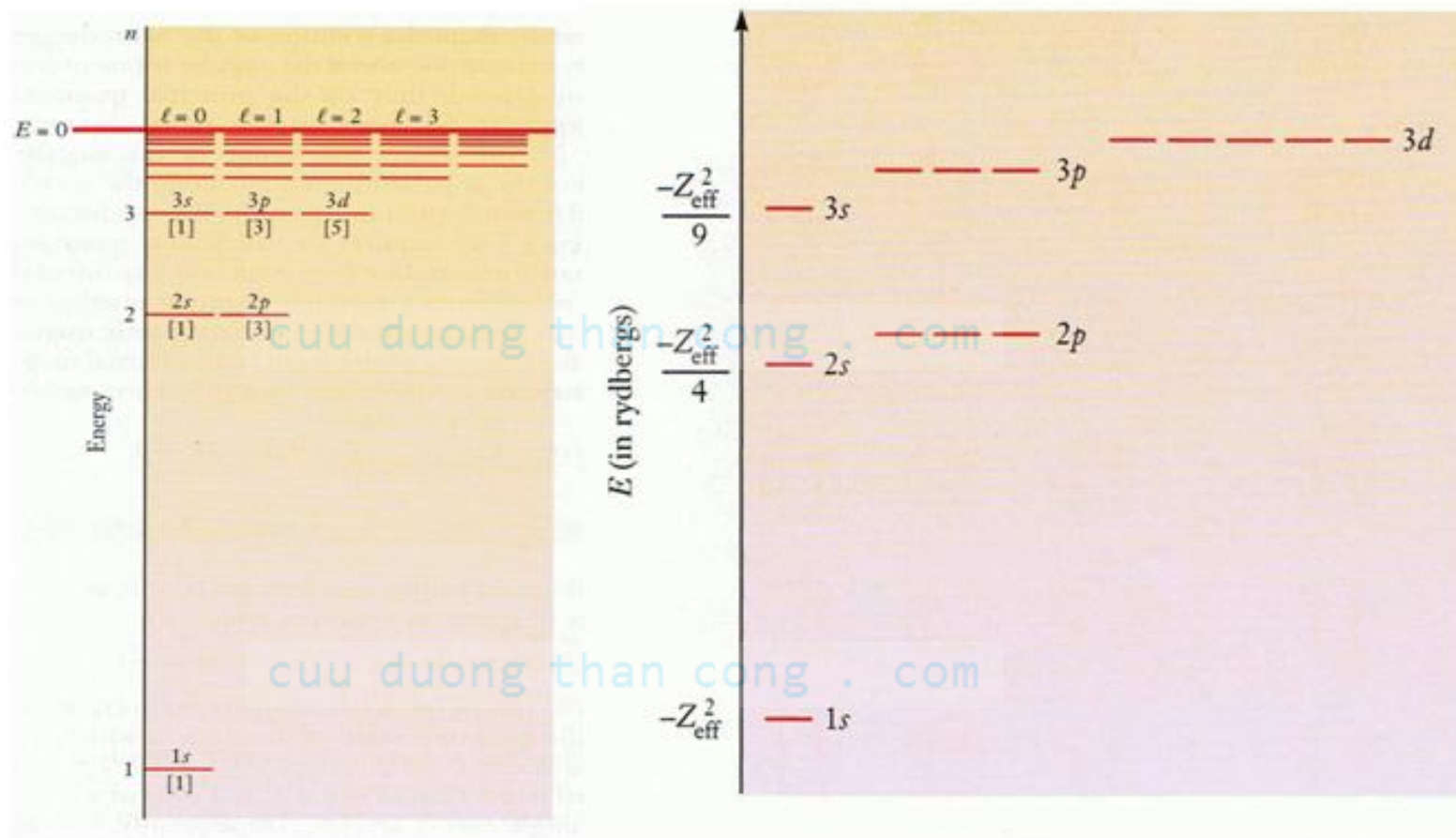
- ✓ Được xác định bằng 4 số lượng tử n, l, m_l, m_s
- ✓ Hình dạng, độ lớn, phân bố, định hướng của các AO

■ Khác nhau giữa nguyên tử 1e và nhiều e:

- ✓ Năng lượng: phụ thuộc vào cả n và l
- ✓ Lực tương tác: + lực hút hạt nhân – e
+ lực đẩy e – e.

→ **Xuất hiện hiệu ứng chắn và hiệu ứng xuyên**
nhập

***Khác nhau** giữa nguyên tử 1e và đa e:



Hình 2-12: Biểu đồ mức năng lượng của nguyên tử H và nguyên tử đa e.

Hiệu ứng chắn

- Các lớp electron bên trong biến thành màn chắn làm yếu lực hút của hạt nhân đối với các electron bên ngoài.
- **Hiệu ứng chắn tăng khi:**
 - ❖ số lớp electron tăng
 - ❖ số electron tăng

Hiệu ứng chắn

- Các electron có số lượng tử n và l càng nhỏ có tác dụng chắn càng mạnh và bị chắn càng yếu. Ngược lại các electron có số lượng tử n và l càng lớn có tác dụng chắn càng yếu và bị chắn càng mạnh.
- Các electron ở lớp bên trong có tác dụng chắn mạnh các lớp bên ngoài. Các electron có số lượng tử l giống nhau thì nếu n càng tăng sẽ có tác dụng chắn càng yếu, nhưng bị chắn càng nhiều. Tác dụng chắn của lớp ngoài với lớp trong không đáng kể.

Hiệu ứng chắn

- Các electron có n giống nhau thì electron nào có l càng lớn tác dụng chắn sẽ càng yếu và bị chắn càng nhiều.
- Trong cùng một lớp chắn nhau không mạnh so với khi khác lớp.
- Trong cùng một phân lớp, các electron chắn nhau càng yếu hơn.

Hiệu ứng chắn

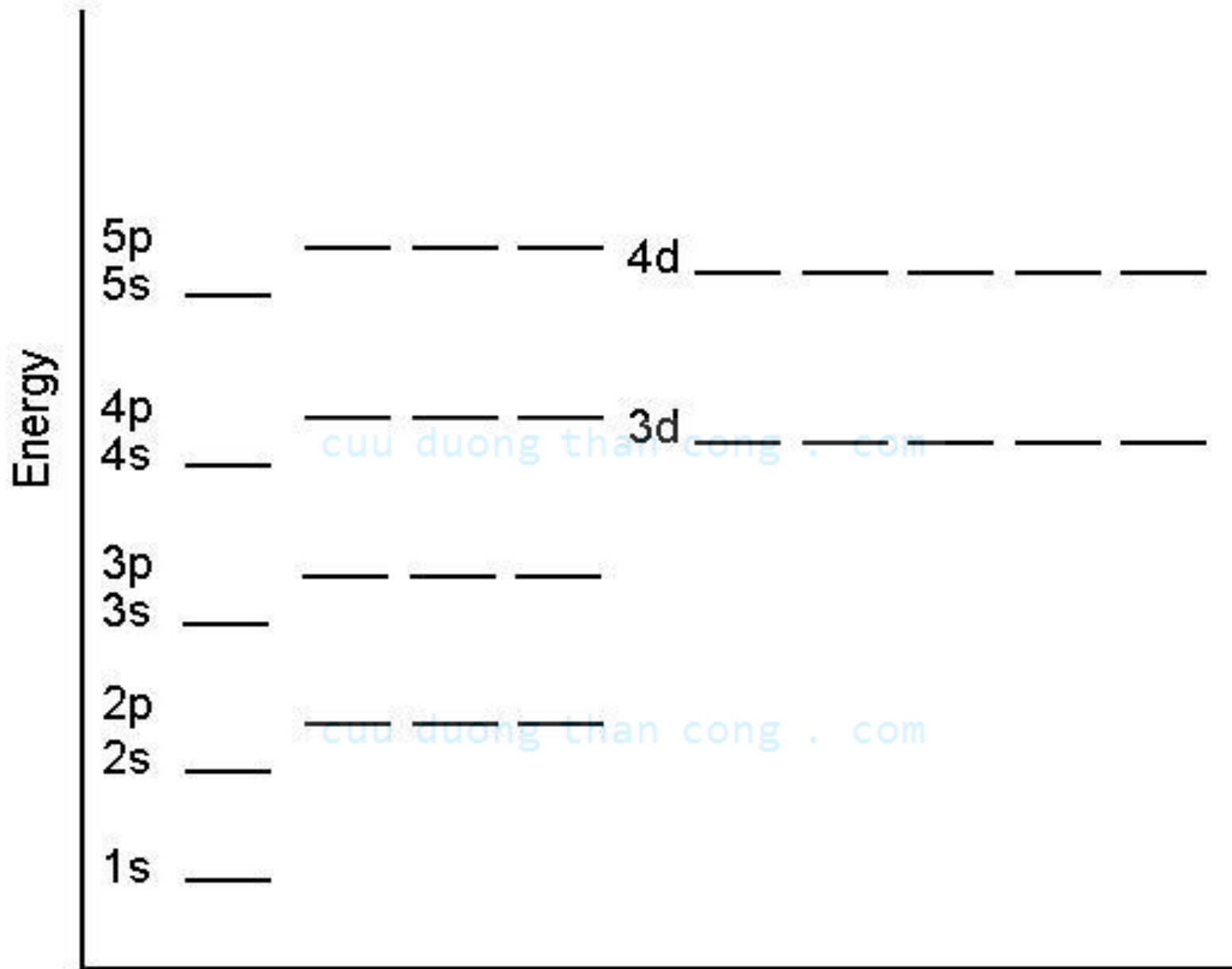
- Theo chiều ns, np, nd, nf tác dụng chắn yếu dần, nhưng bị chắn tăng lên. Vì vậy khi tăng điện tích hạt nhân (Z), thì điện tích hạt nhân hiệu dụng tăng mạnh đối với electron s, và tăng yếu hơn lần lượt đối với electron p, d, f.
- Một phân lớp đã bão hòa hoàn toàn electron hay bán bão hòa thì có tác dụng chắn rất mạnh đối với lớp bên ngoài.
- Hai electron thuộc cùng một ô lượng tử chắn nhau rất yếu nhưng lại đẩy nhau mạnh

Hiệu ứng xâm nhập

- Ngược lại với hiệu ứng chắn: **Khả năng xâm nhập giảm khi n và l tăng**
- ***Hiệu ứng xâm nhập làm tăng độ bền liên kết giữa electron với hạt nhân nên làm giảm năng lượng của electron.***

→ Thứ tự năng lượng của các phân lớp trong nguyên tử nhiều e: $1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < 4p < 5s < 4d < 5p < 6s < 4f < 5d < 6p < 7s < 5f \approx 6d$

Spin diagram



2. Các quy luật phân bố electron vào nguyên tử nhiều e

- a. Nguyên lý ngoại trừ Pauli
- b. Nguyên lý vững bền
 - Quy tắc Hund
 - Quy tắc Klechcowski

a. Nguyên lý ngoại trừ Pauli

Trong 1 ngử không thể có 2e có cùng 4 số lượng tử.

→ Một AO chứa tối đa 2e có spin ngược dấu.

Lớp n	Giá trị l	Phân lớp	số ph.lớp trg lớp n	Giá trị m _l	số AO trg lớp n	số e max trg lớp n
1	0	1s	1	0	1	2
2	0	2s	2	0	4	8
	1	2p		0, ±1		
	0	3s		0		
3	1	3p	3	0, ±1	9	18
	2	3d		0, ±1, ±2		

b. Nguyên lý vững bền

- Trong điều kiện bình thường nguyên tử phải ở trạng thái có **phân mức năng lượng nhỏ nhất**.
- Quy tắc Klechcowski:
1s 2s 2p 3s 3p 4s 3d 4p 5s 4d 5p 6s 4f 5d 6p 7s 5f 6d
1 2 3 3 4 4 5 5 6 6 7 7 7 7 8 8
✓ Điền e vào các phân lớp có $(n + l)$ tăng dần.
✓ Khi $(n + l) = \text{nhau}$: điền e vào phân mức có n nhỏ trước
- Quy tắc Hund: Khi e không đủ để bão hòa **một phân mức năng lượng**: $E_{\min}$ - khi các AO được sử dụng tối đa
- Quy ước: Điền e có spin dương trước, âm sau

Quy tắc thực nghiệm sắp xếp electron

n \ l	0 (s)	1 (p)	2 (d)	3 (f)
1	1s			
2	2s	2p		
3	3s	3p	3d	
4	4s	4p	4d	4f
5	5s	5p	5d	5f
6	6s	6p	6d	6f
7	7s	7p	7d	7f

Trên cùng một mức, các orbital có cùng tổng $(n+l)$, từ trên xuống tổng $(n+l)$ tăng từ 1 đến 10

CHÚ Ý

Cấu hình e không bền → Cấu hình e bền hơn

$ns^2 (n-1)d^4$ → $ns^1 (n-1)d^5$ (bán bão hòa, bền).

$ns^2 (n-1)d^9$ → $ns^1 (n-1)d^{10}$ (bão hòa, bền nhất).

Ví dụ: $Z=24$; $Z=29$

cuu duong than cong . com

CHÚ Ý

- **Cần phân biệt hai loại phân lớp:**
 - ***Phân lớp ngoài cùng:*** là phân lớp có số lượng tử chính n lớn nhất trong cấu hình e nguyên tử
 - ***Phân lớp cuối cùng:*** là phân lớp chứa e cuối cùng có năng lượng cao nhất (viết theo qui tắc Klechkowski)
- **Cấu hình e cation M^{n+} :** tách n e ra khỏi ***phân lớp ngoài cùng*** của nguyên tử.
- **Cấu hình e anion X^{m-} :** nhận m e vào ***phân lớp cuối cùng*** của nguyên tử