

CHƯƠNG I

CẤU TẠO NGUYÊN TỬ VÀ HỆ THỐNG TUẦN HOÀN CÁC NGUYÊN TỐ HÓA HỌC

NỘI DUNG

- 1. NHỮNG KHÁI NIỆM VÀ ĐỊNH LUẬT CƠ SỞ CỦA HÓA HỌC**
- 2. KHÁI NIỆM VỀ NGUYÊN TỬ VÀ QUANG PHỔ NGUYÊN TỬ**
- 3. CẤU TẠO NGUYÊN TỬ THEO CƠ HỌC LƯỢNG TỬ**
- 4 HỆ THỐNG TUẦN HOÀN CÁC NTHH**

1.1 NHỮNG KHÁI NIỆM VÀ ĐỊNH LUẬT CƠ SỞ CỦA HÓA HỌC

1.1.1 Nguyên tử và phân tử

**1.1.2 Khối lượng nguyên tử, khối lượng phân
tử và khái niệm mol**

1.1.3 Nguyên tố hóa học

1.1.4 Chất hóa học

1.1.5 Đơn chất và hợp chất

1.1.6 Định luật bảo toàn khối lượng

1.1.7 Định luật thành phần không đổi

1.1.8 Định luật tỷ lệ bội

1.1.9 Định luật tỷ lệ thể tích

1.1.10 Định luật Boyle-Mariotte và

Charler-Gay-Lussac

1.1.11 Định luật Avogadro

1.1.12 ĐƯƠNG LUỢNG VÀ ĐỊNH LUẬT ĐƯƠNG LUỢNG

Đương lượng của một nguyên tố, một hợp chất là số phần khối lượng của nguyên tố hay hợp chất đó kết hợp hoặc thay thế vừa đủ với 1,008 phần khối lượng hydro hoặc 8 phần khối lượng oxy.

Định luật đương lượng:

*Các nguyên tố hóa học kết hợp với nhau theo
những lượng khối lượng tỷ lệ với đương lượng của
chúng:*

$$\frac{m_A}{m_B} = \frac{\mathfrak{D}_A}{\mathfrak{D}_B}$$

*Trong một ứng hóa học số đương lượng
của các chất tham gia phản ứng phải bằng
nhau hoặc trong các phản ứng hóa học một
đương lượng của chất này chỉ kết hợp hoặc thay
thế một đương lượng chất khác mà thôi.*

$$\text{Đ} = \frac{\text{A}}{\text{n}}$$

Đương lượng của một nguyên tố phụ thuộc vào KLNT và trạng thái hóa trị của nguyên tố:

Đương lượng hợp chất và số ion trao đổi có quan hệ:

$$\mathbb{D} = \frac{M}{n}$$

M, n là khối lượng và số ion hóa trị (Số e trao đổi) phân tử của hợp chất.

Đương lượng gam của một chất là lượng tính bằng gam của chất đó có số đo bằng đương lượng của nó.

1.1.13 PHƯƠNG TRÌNH TRẠNG THÁI KHÍ

Đối với khí lý tưởng:

$$PV = nRT \quad \text{hay} \quad PV = \frac{m}{M} RT$$

Đối với khí thực:

$$\left(P + \frac{a}{V^2} \right) (V - b) = nRT$$

1.1.14 XÁC ĐỊNH KHỐI LƯỢNG NGUYÊN TỬ VÀ PHÂN TỬ

a. Theo tỷ khối của khí và hơi.

b. Dựa trên phương trình:

Clapeyron – Mendeleev.

c. Xác định khối lượng phân tử chất tan.

+ *Phương pháp nghiệm sôi và nghiệm đông.*

+ *Phương pháp thẩm thấu.*

d. Phương pháp sức căng bề mặt.

1.1.14 XÁC ĐỊNH ĐƯƠNG LƯỢNG

- a. Dựa theo định nghĩa đương lượng.**
- b. Dựa trên định luật đương lượng.**
- c. Dựa theo mối liên quan giữa đương lượng Δ , khối lượng nguyên tử A và hóa trị n.**
- d. Xác định đương lượng của axit và baz.**
- e. Xác định đương lượng của muối.**
- f. Xác định đương lượng của chất oxy hóa và khử.**

1.2 KHÁI NIỆM VỀ NGUYÊN TỬ VÀ QUANG PHỔ NGUYÊN TỬ

1.2.1 NGUYÊN TỬ VÀ QUANG PHỔ NGUYÊN TỬ

a. Nguyên tử và các hạt electron (e), proton, neutron:

Nguyên tử gồm 2 thành phần chính: hạt nhân và e:

Hạt nhân mang điện tích dương.

Electron mang điện tích âm

Trong nguyên tử các e chuyển động trong xung quanh hạt nhân tạo nên lớp vỏ e.

Trong một nguyên tử trung hòa:

Số e = số proton (Z) = số hiệu nguyên tử (Z)
= trị số điện tích hạt nhân nguyên tử (Z)

Khối lượng hạt nhân = (Z+N) dvC.

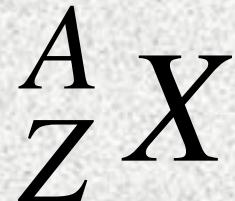
Khối lượng nguyên tử = (Z+N)x1dvC + ex549.10⁻⁶ dvC.

Tính gần đúng :

Khối lượng nguyên tử = (Z+N)x1dvC = (Z+N) dvC.

Số khối = Tổng số hạt Proton và Neutron:

$$A = Z + N.$$



Ký hiệu nguyên tử :

| Hạt | Khối lượng | | Điện tích | | |
|---------------|-------------------------------------|------------------|--------------------------------------|--------------------------------------|-----------------|
| | Tuyệt đối | Tương đối | Tuyệt đối | Tương đối | |
| Đơn vị | Kg | đvC | Culon | Culon | Đơn vị e |
| Electron | 9,109390.10 -31 | 0,000549 | -1,602177.10 -19 | -4,802298.10 -10 | -1 |
| Proton | 1,672623.10 -27 | 1,007277 | +1,602177.10 -19 | +4,802298.10 -10 | +1 |
| Neutron | 1,674929.10 -27 | 1,008665 | 0 | 0 | 0 |

b. Khái niệm về quang phổ nguyên tử

Quang phổ của nguyên tử là quang phổ vạch, nghĩa là gồm một số vạch riêng biệt có màu sắc nhất định tương ứng với những tia bức xạ có bước sóng xác định, đặc trưng cho nguyên tố đó.

1.3 CẤU TẠO NGUYÊN TỬ THEO CƠ HỌC LUỢNG TỬ

Lý thuyết cấu tạo nguyên tử hiện đại cơ sở trên cơ học lượng tử (CHLT), ra đời vào đầu thế kỷ XX.

1.3.1. CÁC LUẬN ĐIỂM CƠ BẢN CỦA CH LT

a. Bản chất sóng - hạt của các hạt vi mô:

-Hạt vi mô (có kích thước r, khối lượng m vô cùng nhỏ bé, có tốc độ chuyển động v rất lớn) như ánh sáng (photon), electron, nguyên tử, phân tử ...vừa có bản chất hạt (đặc trưng bằng m, r, v), vừa có bản chất sóng (đặc trưng bằng bước sóng λ , tốc độ v), thể hiện trong biểu thức:

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

*h: hằng số Planck; m, v: khối lượng, tốc độ hạt vi mô;
λ: bước sóng.*

Phát biểu:

*Hạt vi mô có khối lượng m khi chuyển động với
tốc độ v sẽ tạo nên sóng truyền đi với bước sóng λ.*

b. Nguyên lý bất định Heisenberg:

*“ Không thể xác định chính xác đồng thời cả tốc độ
lãnh vị trí của hạt vi mô ”:*

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

$\Delta x, \Delta v$: *độ bất định về vị trí và tốc độ*; $\hbar = \frac{h}{2\pi}$

-**Kết luận:** *hạt vi mô khi biết chính xác tốc độ chuyển động thì không thể biết được chính xác đường đi, chỉ có thể biết được xác suất có mặt của nó ở chỗ nào đó trong không gian mà thôi.*

c. *Phương trình sóng Schrödinger:*

- Ý nghĩa, vai trò:

- *Phương trình sóng Schrödinger mô tả sự chuyển động của một hạt vi mô trong trường thế năng V:*

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} [E - V] \psi = 0$$

x, y, z: tọa độ;

m: khối lượng hạt vi mô;

h: hằng số Planck.

E: năng lượng toàn phần;

V: thế năng của hạt vi mô phụ thuộc x, y, z.

ψ : hàm sóng (đối với các biến x, y, z)

mô tả sự chuyển động của hạt vi mô .

-Ý nghĩa: ψ đặc trưng cho trạng thái chuyển động của hạt vi mô liên quan với xác suất có mặt của hạt vi mô: $\psi^2 dv$ xác định xác suất có mặt của hạt vi mô trong thể tích dv và ψ^2 xác định mật độ xác suất có mặt của hạt vi mô.

1.3.2. TRẠNG THÁI E TRONG NGUYÊN TỬ HYDRO VÀ CÁC HẠT TƯƠNG TỰ (He^+ , Li^{2+})

Giải phương trình sóng Schrödinger đối với hệ nguyên tử này. Kết quả: trạng thái của e trong nguyên tử hydro được xác định bởi *các số lượng tử* và được đặc trưng bằng khái niệm *đám mây e*.

a. *Đám mây e:*

- Khái niệm:
- Định nghĩa:

b. Các số lượng tử và ý nghĩa

Các số lượng tử là những số nguyên không có số đo, xác định hàm sóng ψ (trạng thái chuyển động của e) và gồm có: *số lượng tử chính n*, *số lượng tử orbital l*, *số lượng tử từ m_l*, *số lượng tử spin m_s*.

* *Số lượng tử chính n và mức năng lượng, lớp e:*

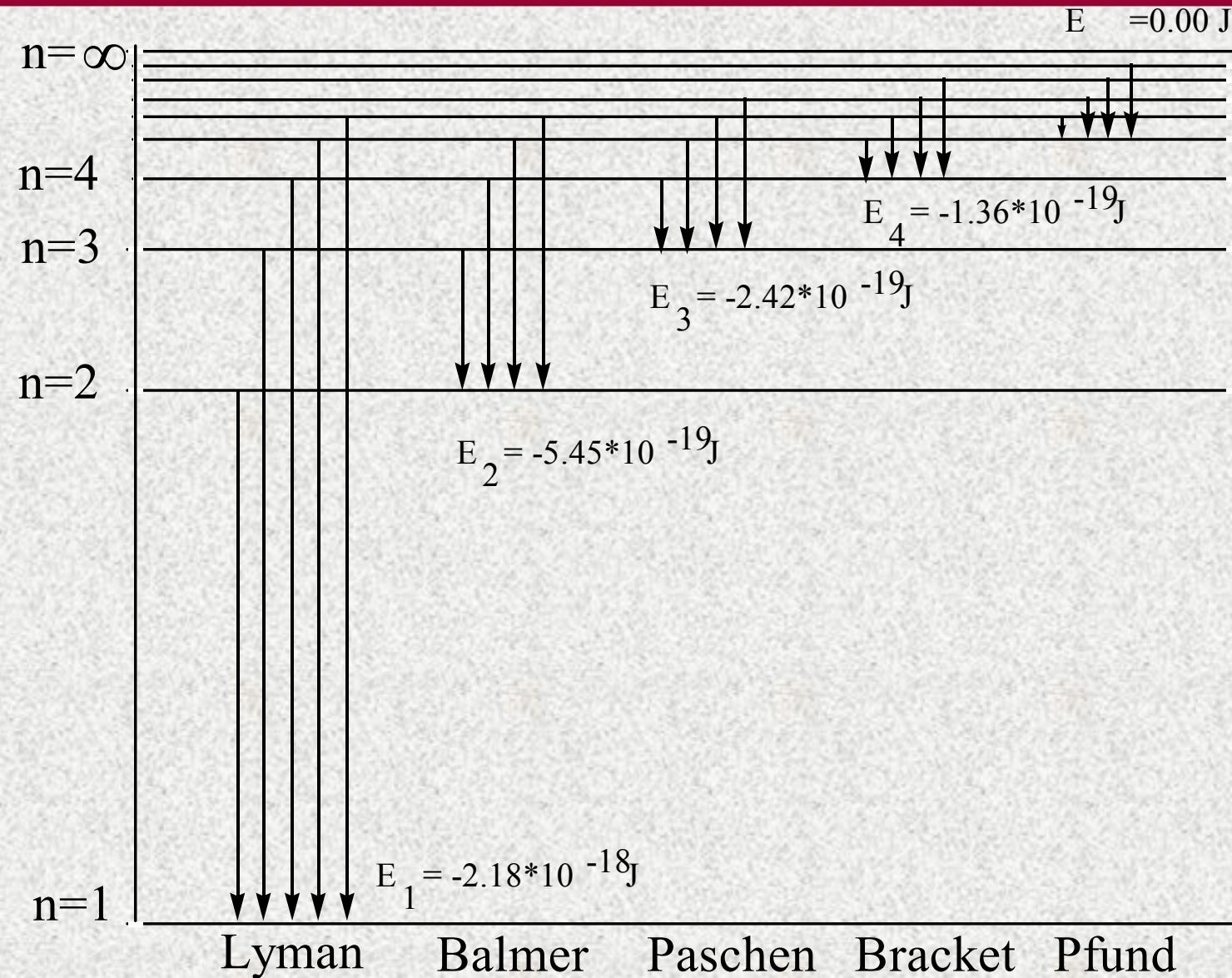
- Xác định *năng lượng* của e:

$$E_n = - 2,818 \cdot 10^{-18} \times \frac{Z^2}{n^2} \text{ J} = - 13,6 \times \left(\frac{Z^2}{n^2} \right) \text{ eV}$$

- n có giá trị nguyên, dương, từ 1 đến ∞ : 1, 2, 3, ... , ∞ . Giá trị của n gián đoạn.
- Trạng thái năng lượng của e được xác định bằng giá trị nhất định của n được gọi là *mức năng lượng*. Mức năng lượng có giá trị tăng theo giá trị của n .

$$\begin{array}{ccccccc} n & 1 & 2 & 3 & \dots & \infty \\ E_n & E_1 & < E_2 & < E_3 & \dots & < E_\infty \end{array}$$

Nguyên nhân xuất hiện quang phổ vạch nguyên tử.
Ví dụ: quang phổ nguyên tử hydro.



- Các e có cùng mức năng lượng hợp thành *lớp e hay lớp lượng tử*. Hiện có 7 lớp e, được ký hiệu như sau:

| | | | | | | | |
|------|---|---|---|---|---|---|---|
| n | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 |
| K.h. | K | L | M | N | O | P | Q |

- * Số lượng tử orbital l và hình dạng đám mây e, phân mức năng lượng và phân lớp e:

- Số lượng tử l xác định *hình dạng đám mây e*.
- l có giá trị nguyên, dương từ 0 đến $n - 1$: giá trị của n có n giá trị của l cũng như có n hình dạng đám mây e. Ví dụ: ứng với $n=3$ có 3 giá trị của l là 0, 1, 2 ($3 - 1$) và có 3 hình dạng đám mây e.

- Đối với nguyên tử nhiều e, l còn xác định cả trạng thái năng lượng của e: gọi là *phân mức năng lượng*.

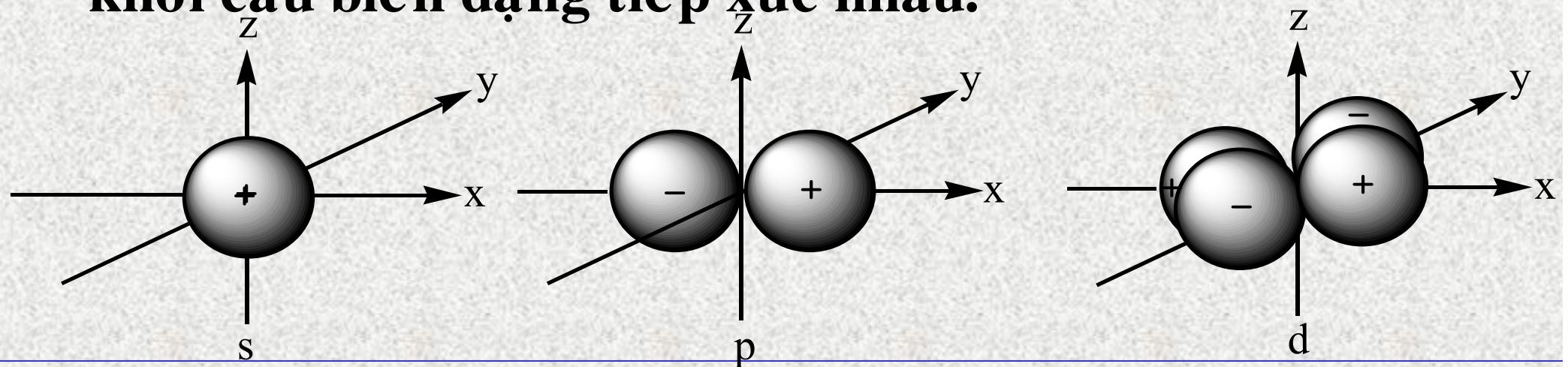
- Các e trong mỗi lớp lượng tử có cùng phân mức năng lượng hợp thành phân lớp e hay phân lớp lượng tử.

Các phân lớp e được ký hiệu:

| | | | | | | | |
|---------|---|---|---|---|---|---|-------|
| l | 0 | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | |
| Ký hiệu | s | p | d | f | g | h | |

- Hình dạng các đám mây e:

- Ứng với $l = 0$ (s): đám mây e có dạng khối cầu.
- Ứng với $l = 1$ (p): đám mây e có dạng 2 khối cầu biến dạng tiếp xúc nhau.
- Ứng với $l = 2$ (d): các đám mây đa số có dạng 4 khối cầu biến dạng tiếp xúc nhau.



* *Số lượng tử từ m_l và sự định hướng của đám mây e, khái niệm orbital nguyên tử:*

- Số lượng tử m_l xác định *sự định hướng trong không gian* của đám mây e.
- m_l có giá trị nguyên, dương hay âm, từ 0 đến $\pm l$: mỗi giá trị của l có $2l + 1$ giá trị của m_l và do đó có $2l + 1$ cách định hướng của đám mây e.

Ví dụ: Ứng với $l = 2$ m_l có 5 giá trị (-2, -1, 0, +1, +2) và có 5 cách định hướng của đám mây e tương ứng.

- m_l đặc trưng cho tương tác của từ trường ngoài (tác dụng lên nguyên tử) với từ trường của e.

- *Khái niệm orbital electron nguyên tử hay orbital nguyên tử (AO):*

AO là trạng thái của e trong nguyên tử được xác định bởi các số lượng tử n , l , m_l hay bởi hàm sóng Ψ chứa các thông số n , l , m_l ($\Psi_{n,l,m}$).

Mối liên hệ giữa các số lượng tử n , l , m_l và các lớp, phân lớp e, số AO, ký hiệu (tên gọi) của AO:

| Lớp | Phân lớp | A | O | Số | | | | Ký hiệu |
|-----|----------|-------------|-------------|--------------------------------------|-------------|-----|--|---|
| n | Ký hiệu | l | Ký hiệu | m_l | Phân lớp | Lớp | | |
| 1 | K | 0 | s | 0 | 1 | 1 | | 1s |
| 2 | L | 0 1 | s p | 0 $0, \pm 1$ | 1 3 | 4 | | 2s 2pz, 2px, 2py |
| 3 | M | 0 1 2 | s p d | 0 $0, \pm 1$ $0, \pm 1, \pm 2$ | 1 3 5 | 9 | | 3s 3pz, $\dot{3}px, 3py$ $3dz^2, 3dxz, 3dxz, 3dyz, 3dx^2-y^2$ |

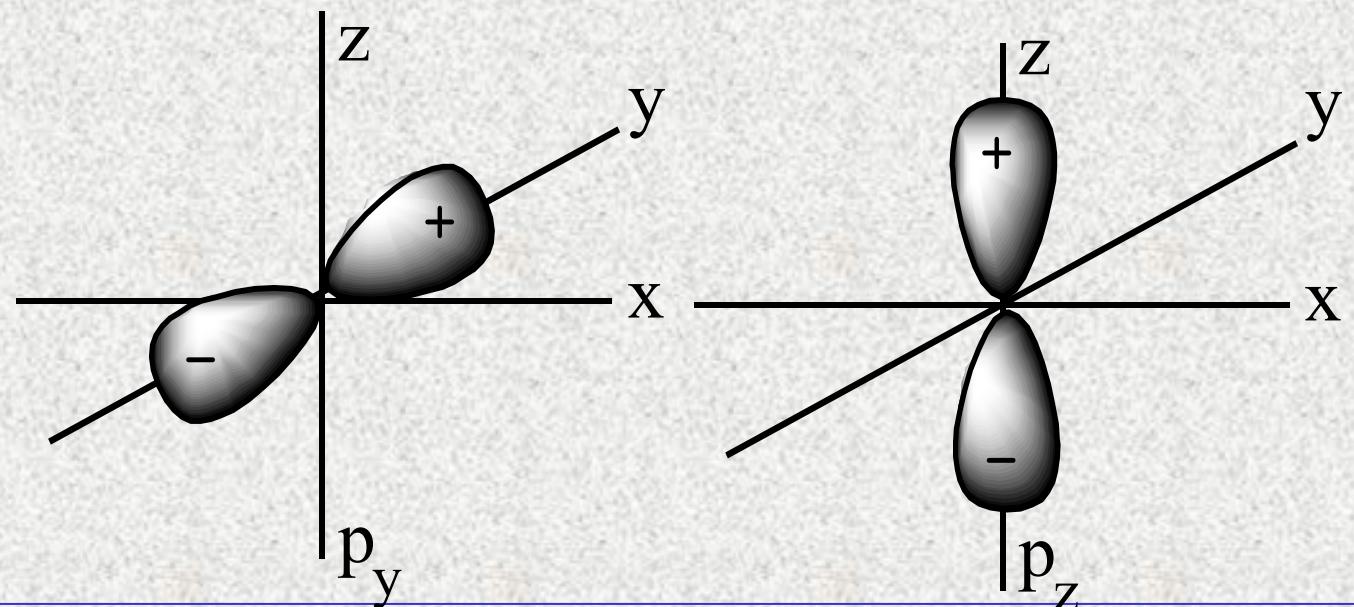
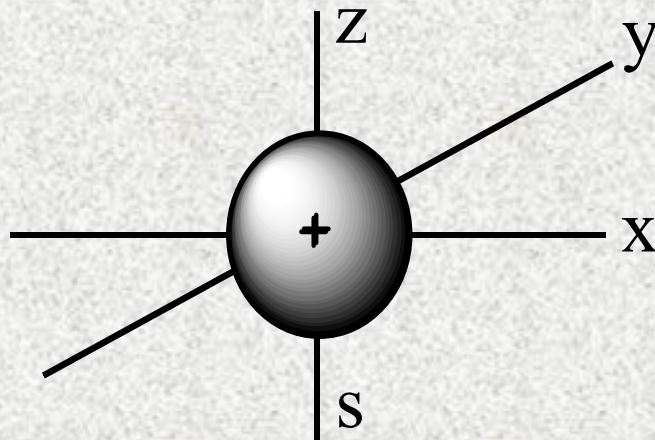
Cách định hướng của các AO tương ứng với n=2:

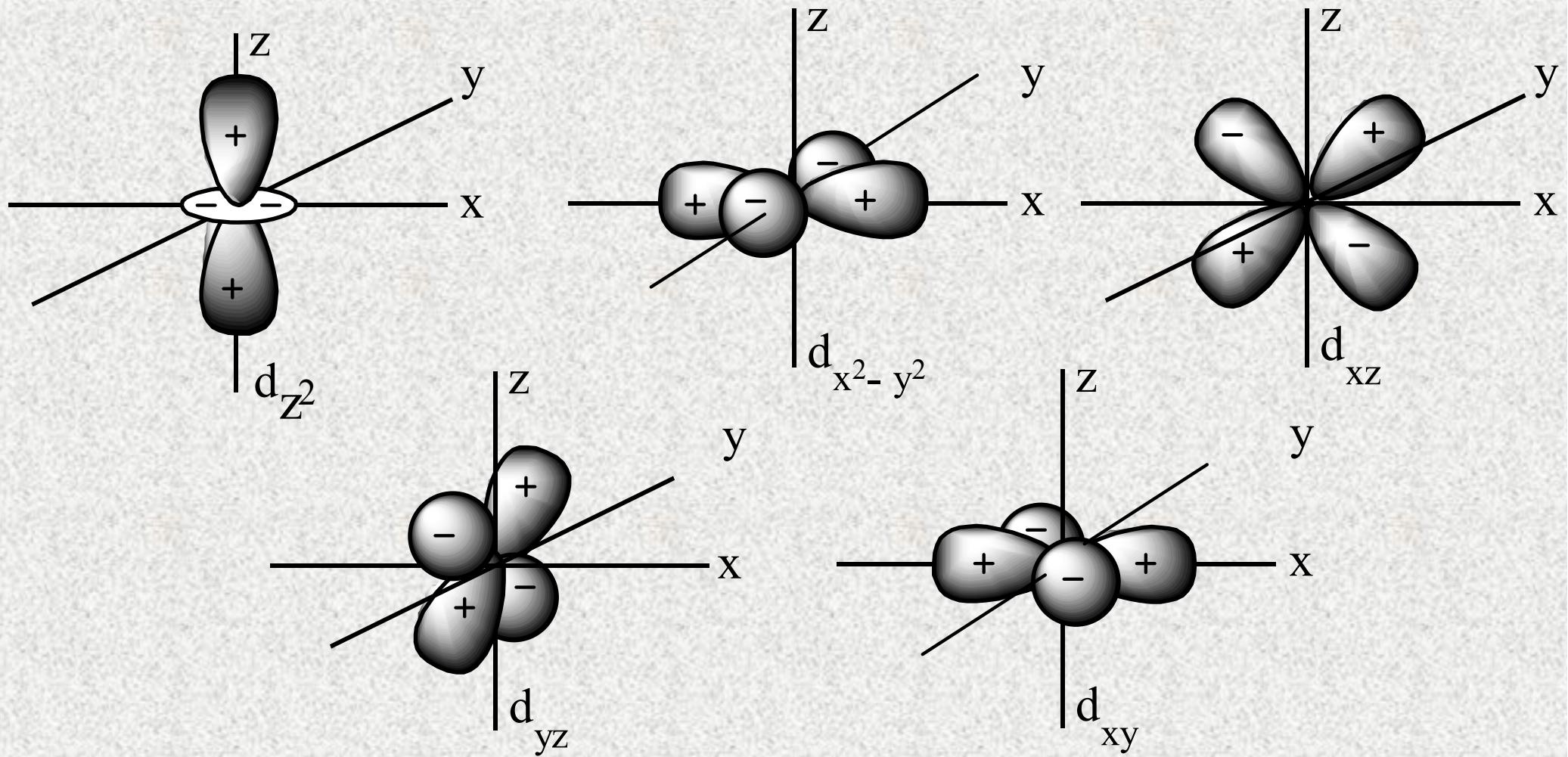
p_x, p_y, p_z : định hướng theo các trục x, y, z.

d_{xy}, d_{xz}, d_{yz} : định hướng theo các đường phân giác
của các góc tạo bởi các trục ký hiệu tương ứng.

$d_{x^2-y^2}$: định hướng theo các trục x, z.

d_{z^2} : định hướng chủ yếu trục z.

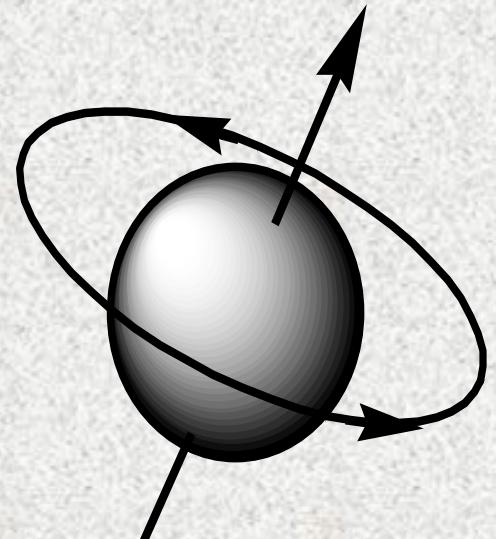
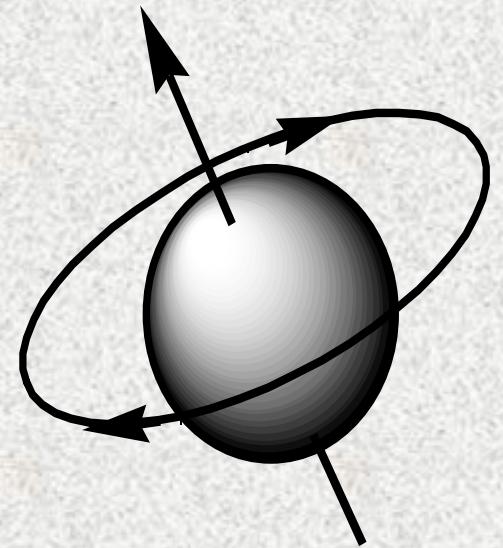




- **Số lượng tử spin hay spin m_s :**

- Spin m_s xác định trạng thái chuyển động riêng của e : là *sự tự quay của e xung quanh trục của mình*.

- m_s chỉ có 2 giá trị:
 $+1/2$ (chiều thuận)
 $-1/2$ (chiều ngược).



1.3.2. TRẠNG THÁI ELECTRON TRONG NGUYÊN TỬ NHIỀU ELECTRON

a. Năng lượng e và các hiệu ứng chấn, xâm nhập :

- Trạng thái của e cũng được xác định hoàn toàn bởi 4 số lượng tử và các AO cũng có dạng như trong nguyên tử hydro.
- E của e trong nguyên tử nhiều e phụ thuộc cả vào số lượng tử l . Ngoài lực hút giữa hạt nhân và e còn có thêm lực đẩy giữa các e với nhau. Xuất hiện 2 hiệu ứng: *chấn và xâm nhập*.

• *Hiệu ứng chấn:*

$$Z^* = Z - S$$

Z* là điện tích hiệu dụng, S là hằng số chấn.

Hiệu ứng chấn phụ thuộc vào n, l : tăng lên khi số lớp e tăng.

• *Hiệu ứng xâm nhập:*

Hiệu ứng xâm nhập cũng phụ thuộc vào n, l.

- **Sự phân bố các phân mức năng lượng như sau:**

$$E_{n,l} = -2,18 \cdot 10^{-18} \times \frac{Z^{*2}}{n^2} J = -13,6 \times \left(\frac{Z^{*2}}{n^2} \right) \text{eV}$$

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

b. **Sự sắp xếp e trong lớp vỏ e nguyên tử, cấu hình e nguyên tử:**

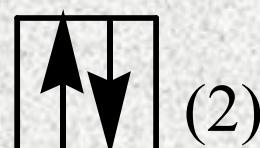
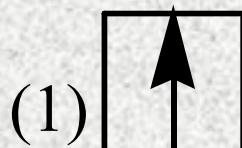
Dựa trên cơ sở các nguyên lý, quy tắc sau:

Nguyên lý vững bền:

- *Trạng thái bền vững nhất của e trong nguyên tử là trạng thái có năng lượng thấp nhất.*

Nguyên lý ngoại trừ Pauli:

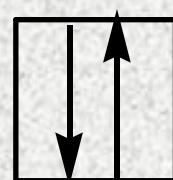
- Trong nguyên tử không thể có 2 electron có 4 số lượng tử như nhau.



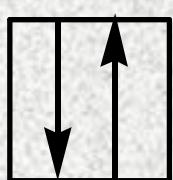
Quy tắc Hund:

- Sự sắp xếp e vào các AO trong cùng phân mức năng lượng sao cho giá trị tuyệt đối của tổng spin là cực đại. Ví dụ: sự sắp xếp e trên các phân lớp 1s, 2s, 2p của

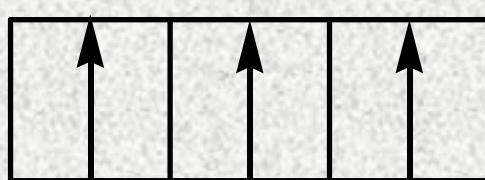
N:



1s



2s

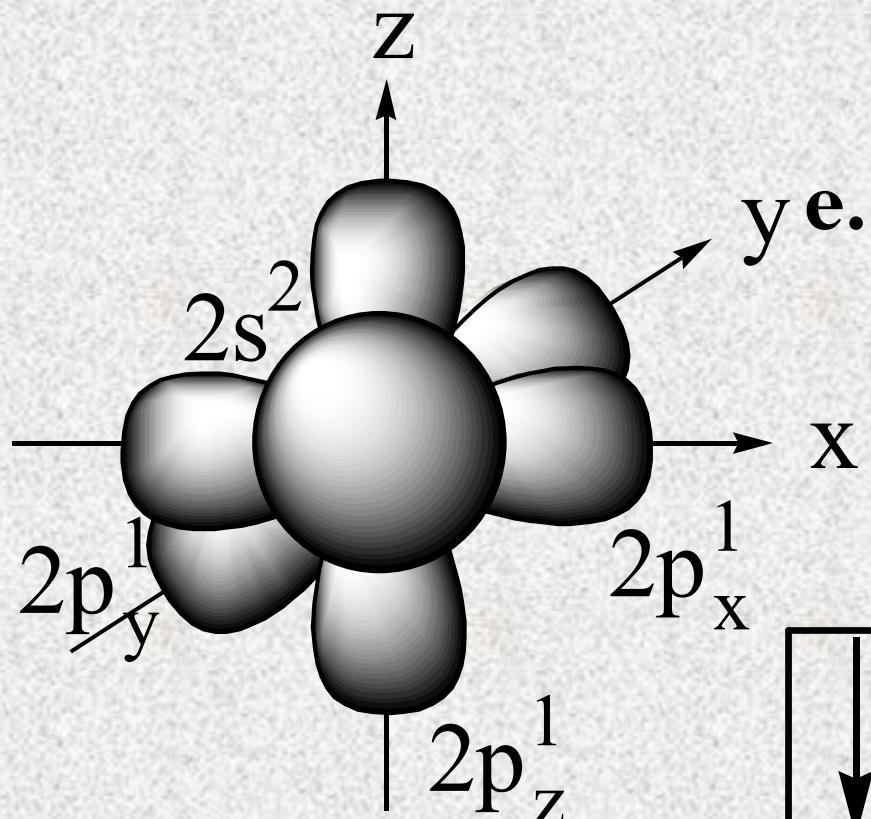


2p

Quy tắc Kleshkovski:

- Quy tắc I: *Sự sắp xếp e vào các AO theo chiều tăng Z xảy ra theo thứ tự từ những AO có tổng giá trị (n+l) nhỏ hơn đến những AO có tổng giá trị đó lớn hơn.*
- Quy tắc II: *Sự sắp xếp e vào các AO có tổng giá trị (n+l) như nhau sẽ xảy ra theo hướng tăng dần giá trị n.*

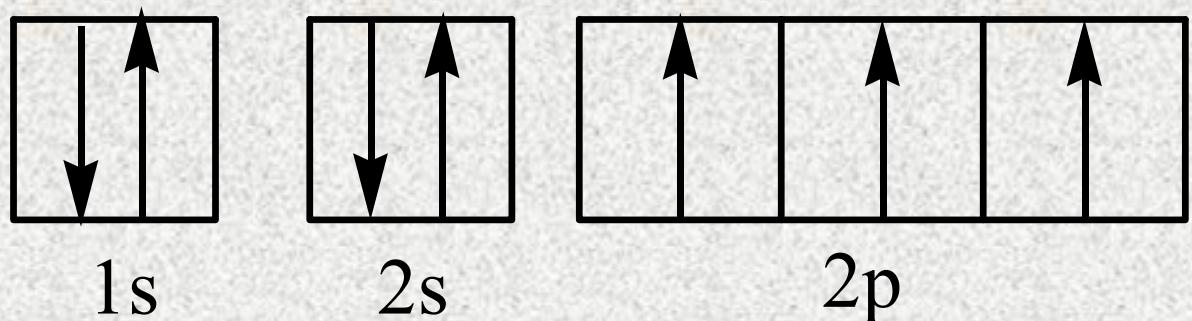
| | s² | p⁶ | d¹⁰ | f¹⁴ |
|--------------|----------------------|----------------------|-----------------------|-----------------------|
| (K) 1 | 1s | | | |
| (L) 2 | 2s | 2p | | |
| (M) 3 | 3s | 3p | 3d | |
| (N) 4 | 4s | 4p | 4d | 4f |
| (O) 5 | 5s | 5p | 5d | 5f |
| (P) 6 | 6s | 6p | 6d | 6f |
| (Q) 7 | 7s | 7p | 7d | 7f |



Cấu hình e nguyên tử:

- Theo ký hiệu phân lớp
- Theo ô lượng tử.

*Ví dụ: Cấu hình e nguyên tử
của N (Z = 7): 1s² 2s² 2p³*



1.4 HỆ THỐNG TUẦN HOÀN CÁC NTHH

1.4.1. ĐỊNH LUẬT TUẦN HOÀN VÀ Ý NGHĨA

1.4.2. HỆ THỐNG TUẦN HOÀN VÀ CẤU TRÚC CỦA NGUYÊN TỬ.

- Cấu trúc HTTH.
- Quy luật sắp xếp e vào lớp vỏ e nguyên tử các nguyên tố theo chiều tăng Z, theo chu kỳ, theo nhóm.

- Mối liên hệ giữa cấu trúc HTTH và cấu trúc e nguyên tử:

* *Chu kỳ:*

+ Gồm dây liên tục các nguyên tố, bắt đầu từ nguyên tố s, kết thúc bằng nguyên tố p, ở giữa có thể là những nguyên tố (*nt*) d và f.

Chu kỳ tổng quát gồm có:

2 nts (ns)-1ntd [(n-1)d]-14ntf [(n-2)f]-

-9ntd [(n-1)d]-6ntp (np)

- + Số thứ tự chu kỳ bằng số lượng tử n đặc trưng cho lớp electron ngoài cùng của nguyên tố trong chu kỳ.
- + Tổng số nguyên tố trong 1 chu kỳ: $2n^2$

* Nhóm:

+ Gồm các nguyên tố có:

Số e lớp ngoài cùng (PNC) hoặc

Số e phân lớp ngoài cùng (PNP)

giống nhau và bằng số thứ tự nhóm.

Những e này được gọi là *e hóa trị* vì có khả năng tham gia tạo liên kết hóa học.

- + Số e hóa trị bằng số thứ tự của nhóm.
- + Cấu hình e của nhóm:

| Nhóm | I | II | III | IV | V | VI | VII | VIII |
|-------|-------------------|----------------|-----------------|----------------|----------------|----------------|----------------------|-------------|
| s + p | ns^1 | ns^2 | $ns^2 np^1$ | $ns^2 np^2$ | $ns^2 np^3$ | $ns^2 np^4$ | $ns^2 np^5$ | $ns^2 np^6$ |
| d | $(n-1)d^{10}ns^1$ | $(n-1)d^1ns^2$ | | $(n-1)d^3ns^2$ | | $(n-1)d^5ns^2$ | | |
| | $(n-1)d^{10}ns^2$ | | $(n-1)d^2 ns^2$ | | $(n-1)d^5ns^1$ | | $(n-1)d^{6,7,8}ns^2$ | |

* *Phân nhóm:*

+ Gồm các nguyên tố có cấu trúc e lớp ngoài cùng (PNC) hoặc của những phân lớp ngoài cùng (PNP) giống nhau.

+ Cấu trúc e:

ns^x hoặc ns^2np^{x-2} (PNC); $(n-1)d^{x-2}ns^2$ (PNP).

+ Có một số ngoại lệ ở các PNP:

IB, IIB, VIB, VIIIB.

* \hat{O} :

- + Vị trí cụ thể của nguyên tố trong HTTH.
- + Số thứ tự của ô = Z
 - = Số e = Số proton
 - = Số thứ tự của nguyên tố.

1.4.3 CÁC TÍNH CHẤT BIẾN ĐỔI TUẦN HOÀN CỦA CÁC NGUYÊN TỐ.

* *Bán kính nguyên tử và ion (r):*

- Là đại lượng quy ước xác định dựa trên khoảng cách giữa các hạt nhân của các nguyên tử tương tác (d).

Đối với kim loại và phi kim loại: $r = \frac{1}{2} d$;

Đối với ion: $d = r_c + r_a$.

- Quy luật biến đổi:

- Theo chu kỳ:

Từ trái sang phải: giảm.

- Theo PNC:

Từ trên xuống: tăng.

- Theo PNP:

Từ nguyên tố thứ 1 đến thứ 2: tăng,
sang nguyên tố thứ 3: không tăng.

* *Năng lượng ion hóa (I):*

- Là năng lượng cần để bứt e khỏi nguyên tử không bị kích thích ở trạng thái khí thành ion dương: $X^0(k) + I = X^+(k) + 1e.$

- I đặc trưng cho khả năng nhường e (tính kim loại) và được đo bằng đơn vị Kj / ntg hay eV/ nt.

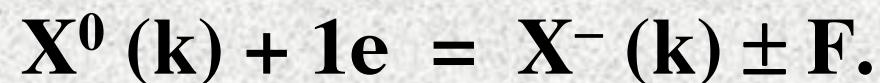
- Quy luật biến đổi:

Theo chu kỳ, từ trái sang phải, tăng;

Theo PNC, từ trên xuống dưới, giảm.

* *Aí lực e (F) :*

- Là năng lượng thoát ra hay thu vào khi kết hợp thêm e vào nguyên tử ở thể khí thành ion âm:



- F đặc trưng cho khả năng nhận e (tính phi kim loại) và cũng được đo bằng đơn vị giống I.

- Quy luật biến đổi:

Theo chu kỳ, từ trái sang phải, tăng;

Theo nhóm, từ trên xuống dưới, giảm;

Các nguyên tố p nhóm VII có F lớn nhất,

Các nguyên tố có cấu hình e lớp ngoài cùng:

s^2, p^3, s^2p^6 có F nhỏ nhất.

* *Độ âm điện* (χ):

- Đặc trưng cho khả năng của nguyên tử một nguyên tố hút mật độ e về phía mình khi tạo liên kết với nguyên tử của nguyên tố khác.

- Được xác định bằng nhiều phương pháp, trong đó đáng chú ý là:

- Phương pháp Mulliken: $\chi = \frac{1}{2} (F + I)$.

• Phương pháp Pauling: dựa trên năng lượng liên kết (E) của các chất (A_2 , B_2 , AB):

$$\Delta E = \text{const} (\chi A - \chi B)^2 \text{ với}$$

$$\Delta E = E_{A-B} - \sqrt{E_{A-A} \times E_{B-B}}$$

Để tính, Pauling chọn độ âm điện của Flo bằng 4 làm đơn vị so sánh. Thang độ âm điện tương đối của Pauling được sử dụng rộng rãi.

- Quy luật biến đổi:

Theo chu kỳ, từ trái sang phải, tăng;

Theo nhóm, từ trên xuống dưới, giảm.