



# HÓA ĐẠI CƯƠNG

**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](mailto:nmkha@hcmut.edu.vn)***

# Tài liệu tham khảo

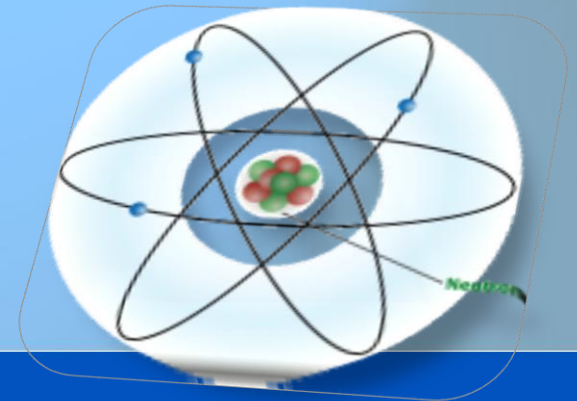
- Hóa Đại Cương – GS *NGUYỄN ĐÌNH SOA*
- Bài tập trắc nghiệm Hóa Đại Cương - Bộ môn CN Hóa Vô Cơ – Khoa Kỹ Thuật Hóa Học, ĐH Bách Khoa TP HCM
- Hóa Học Vô Cơ – GS *Hoàng Nhâm*
- Hóa Đại Cương và Trắc nghiệm Hóa Đại Cương - *Nguyễn Đức Chung*
- Các tài liệu Hóa Đại Cương (General Chemistry)



# Chương I

# CẤU TẠO

# NGUYÊN TỬ



Giảng viên: ThS. Nguyễn Minh Kha

# TÓM TẮT

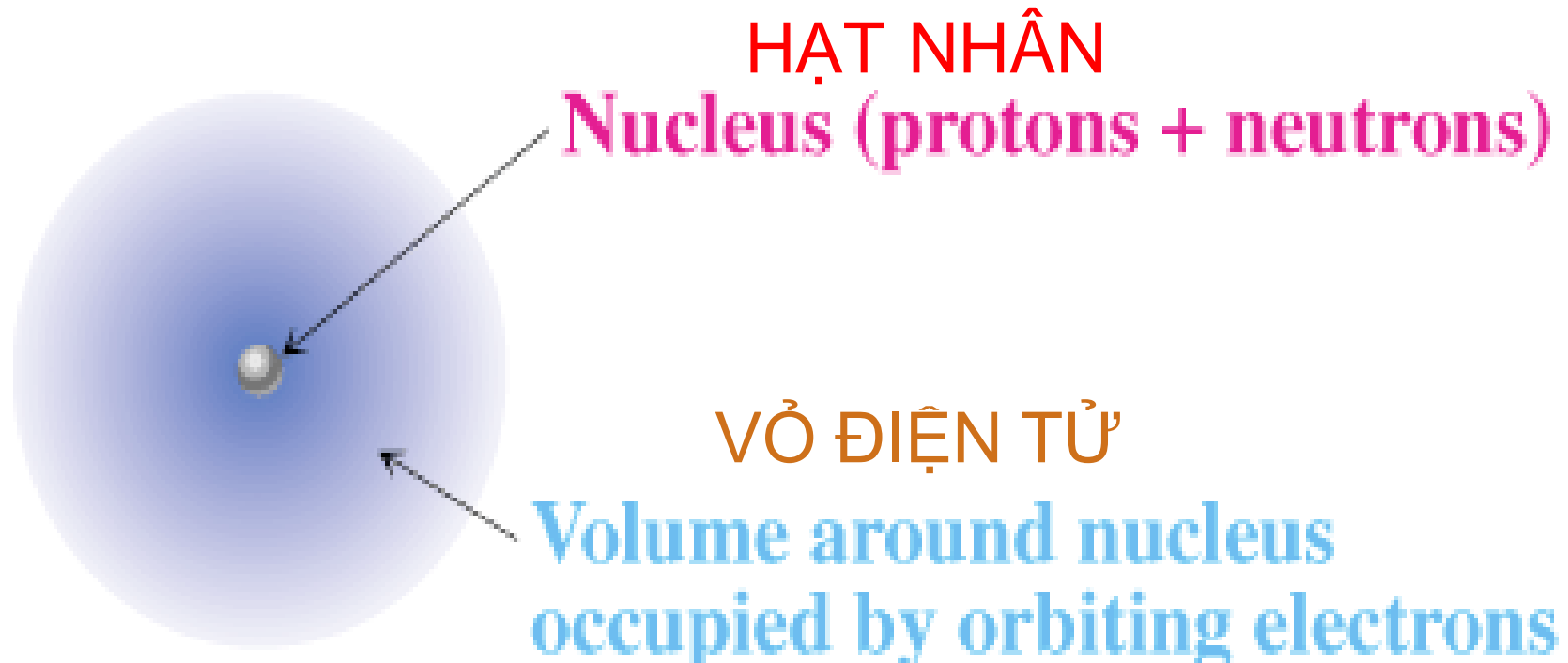
- I. NGUYÊN TỬ VÀ QUANG PHỔ NGUYÊN TỬ
- II. SƠ LƯỢC VỀ CÁC THUYẾT CẤU TẠO NGUYÊN TỬ
- III. CẤU TRÚC LỚP VỎ ELECTRON NGUYÊN TỬ THEO CƠ HỌC LƯỢNG TỬ
- IV. NGUYÊN TỬ NHIỀU ELECTRON

# 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:  ${}^A_Z X$



# 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%)

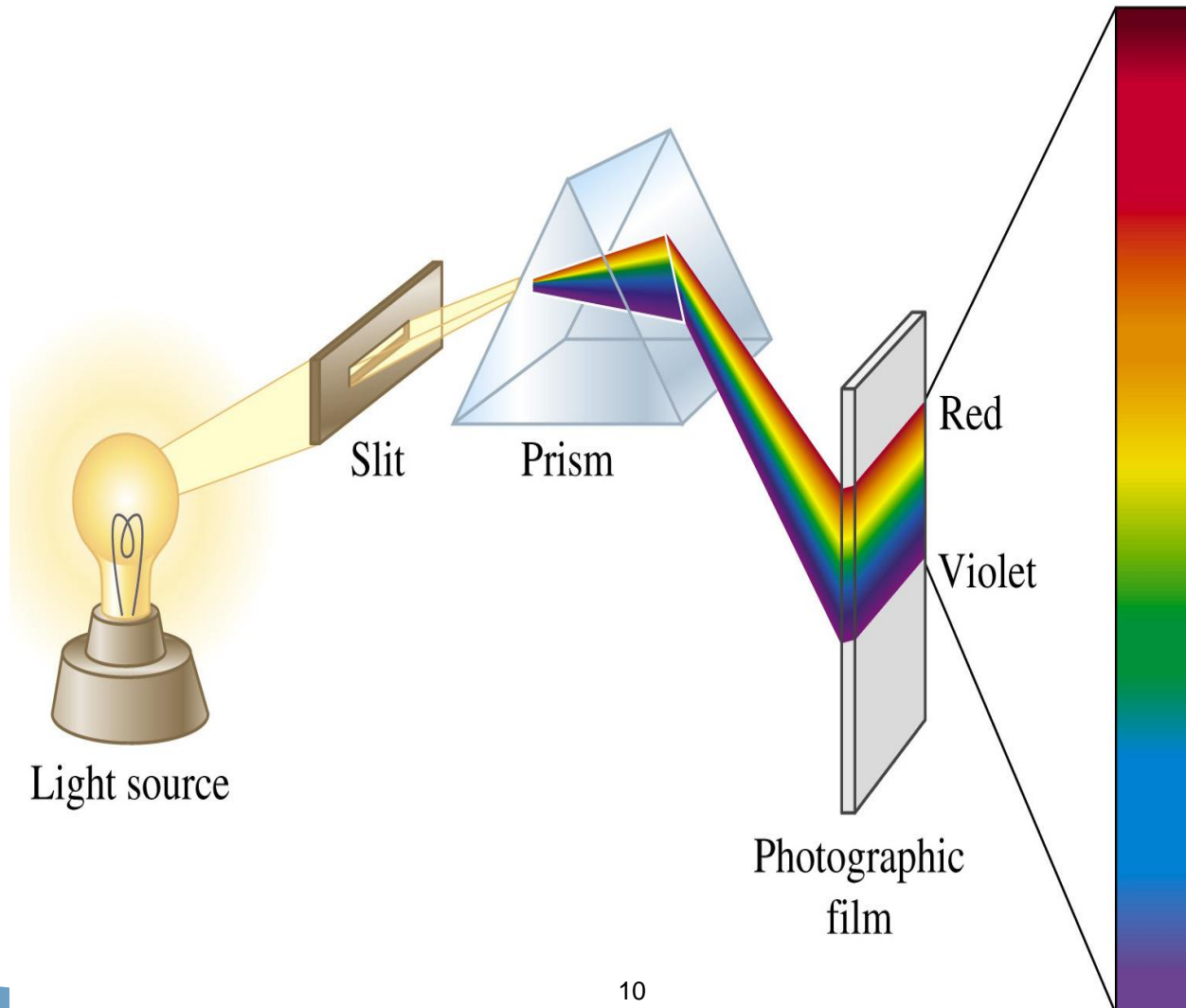
Đơteri ( 0,016 % )

Triti ( 0,001%)

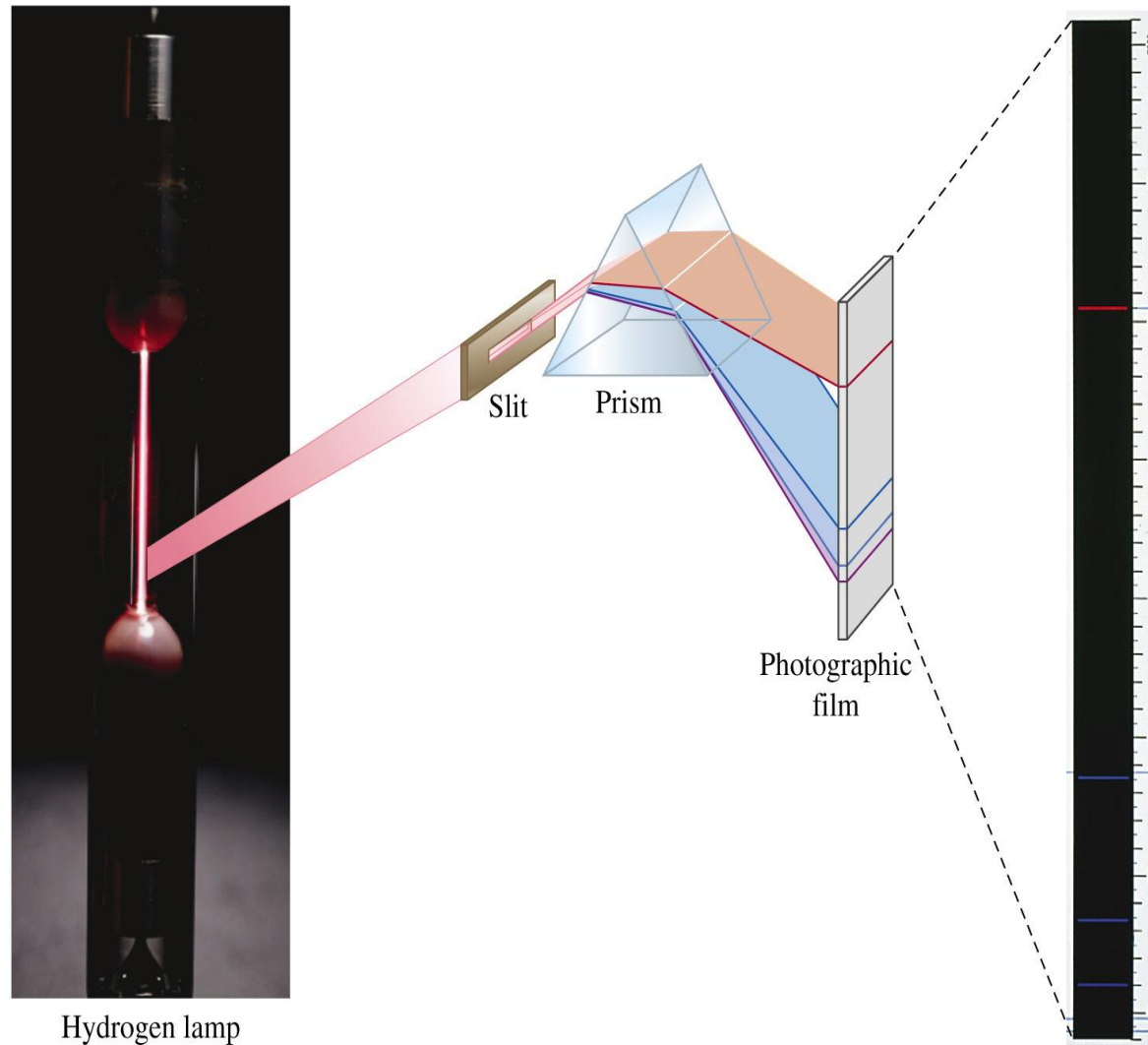


## 2. Quang phổ nguyên tử

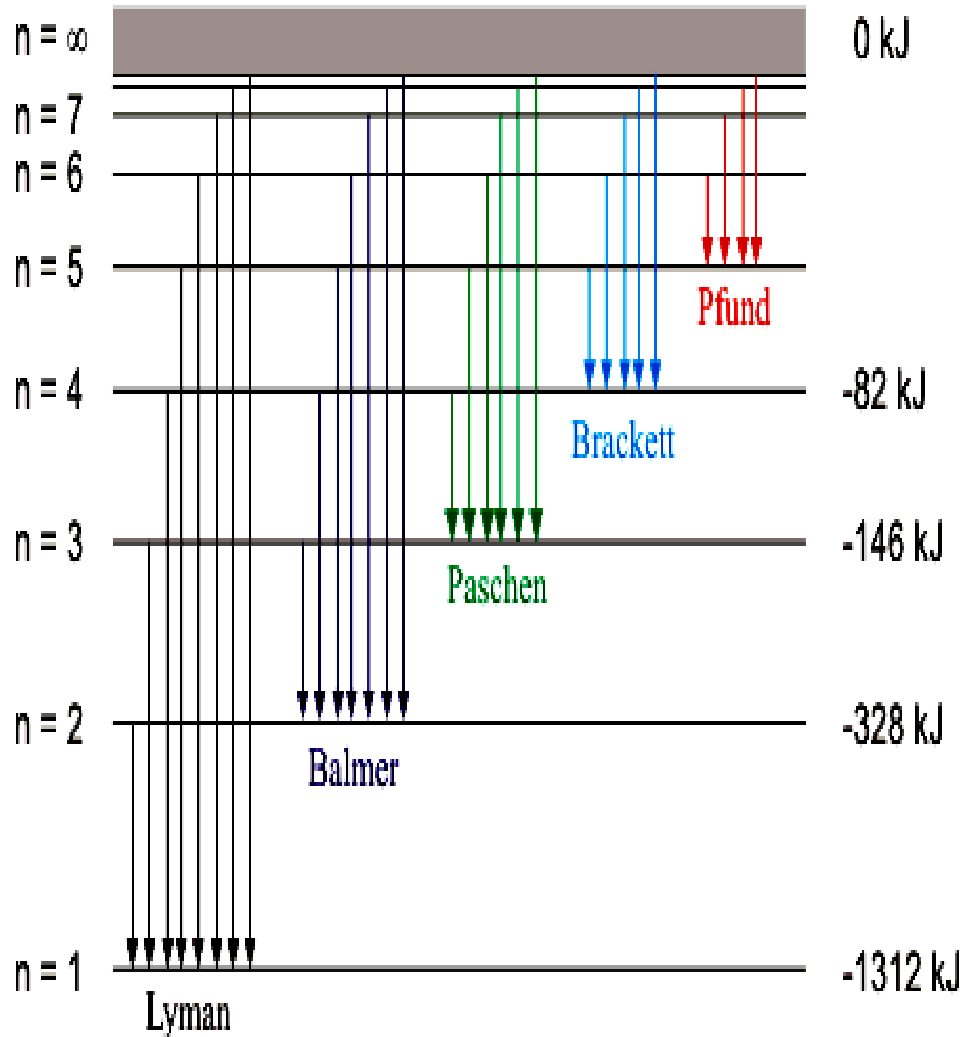
### Quang phổ liên tục của ánh sáng trắng



# Quang phổ vạch (Line Spectra)



# Quang phổ phát xạ nguyên tử (atomic emission spectra)



Dãy Lyman  $\Rightarrow$  Tử ngoại  
(ultraviolet)

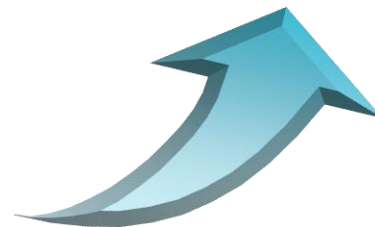
$n > 1 \Rightarrow n = 1$

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

$n > 2 \Rightarrow n = 2$

Dãy Paschen  $\Rightarrow$  Hồng ngoại  
(infrared)

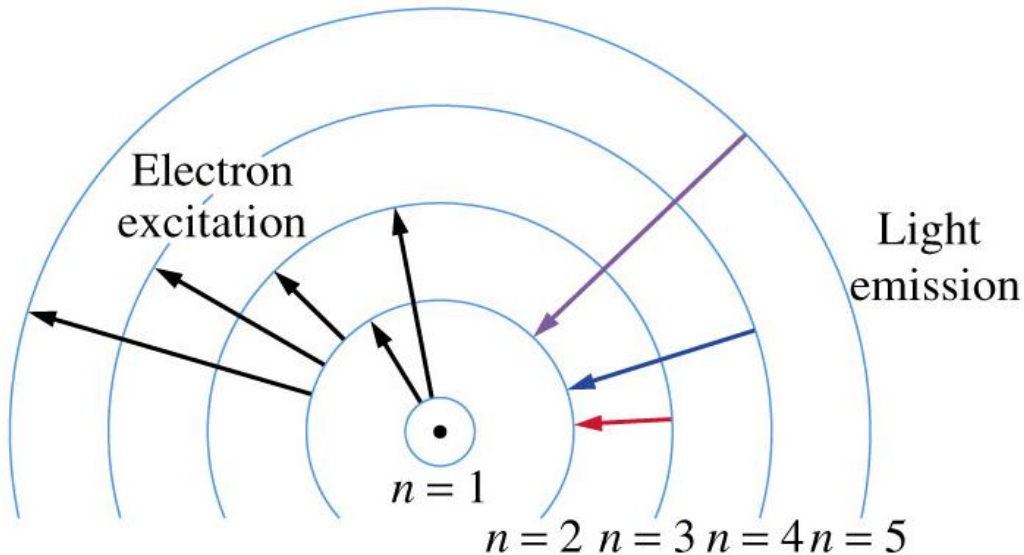
$n > 3 \Rightarrow n = 3$



## 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**

# 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:  $\Delta E = |E_t - E_c| = h\nu$

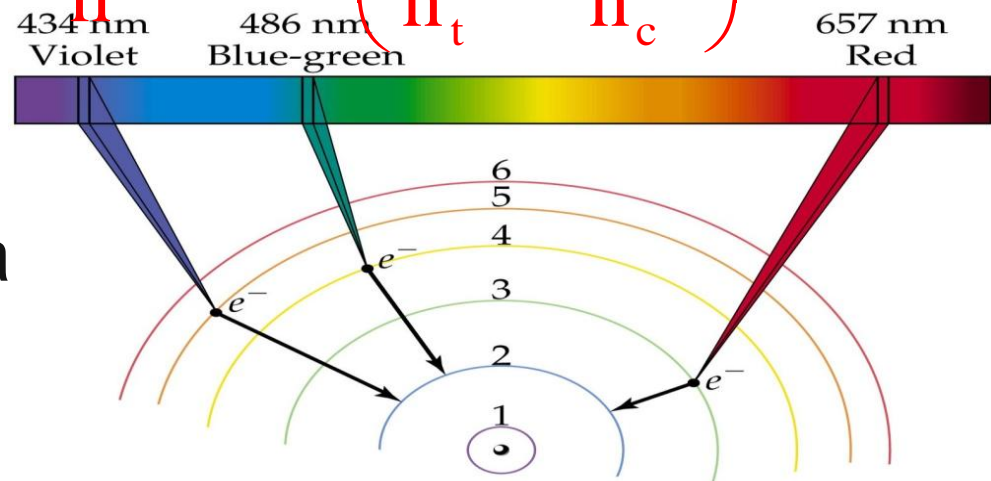
# ƯU ĐIỂM CỦA THUYẾT BORH

- ✓ 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

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

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

- ✓ 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:  $\lambda$ .

➤ **Hệ thức L. de Broglie:**

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



**L. de Broglie**  
(1892-1987)

# Ví dụ

## ✓ Đối với electron:

- $m = 9,1 \cdot 10^{-28} \text{g}$
- $v = 10^8 \text{cm/s} \sim 100 \text{km/s}$
- $\lambda = 7,25 \cdot 10^{-8} \text{cm}$

## ✓ Đối với hạt vĩ mô:

- $m = 1 \text{g}$
- $v = 1 \text{cm/s}$
- $\lambda = 6,6 \cdot 10^{-27} \text{cm}$

## 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**

# a. Nguyên lý bất định Heisenberg

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

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

➤ 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

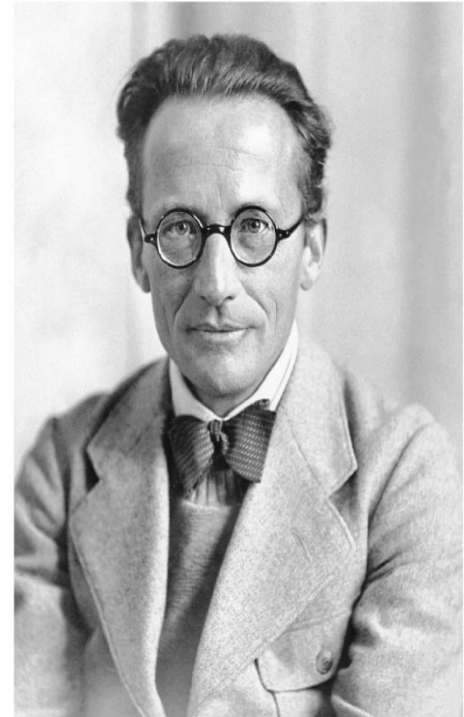
b. Bốn số lượng tử

- Số lượng tử chính  $n$
- Số lượng tử phụ  $\ell$
- Số lượng tử từ  $m_\ell$
- 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
- ✓  **$\Psi$**  - hàm sóng đối với các biến x, y, z mô tả sự chuyển động của hạt vi mô ở điểm x, y, z.
- ✓  **$\Psi^2$**  – **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	$E_1$	$E_2$	$E_3$	...	$E_\infty$

•  $E_{\min}$  - *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 ngtử 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 $\ell$ 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  $(n, \ell)$  → xác định 1 phân lớp e**

$\ell$	0	1	2	3
Phân lớp e	s	p	d	f

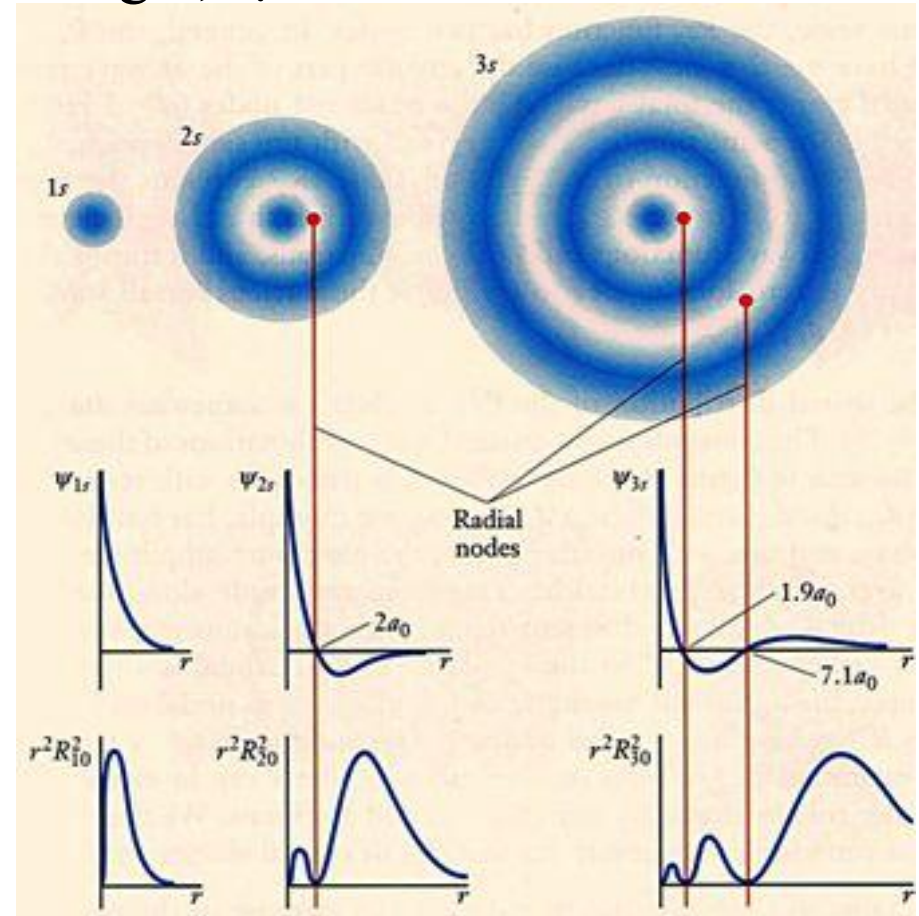
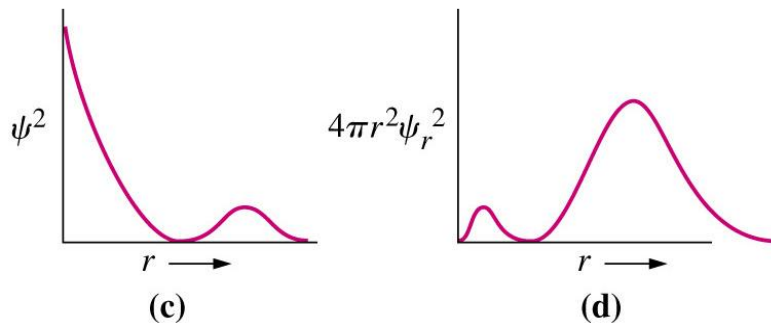
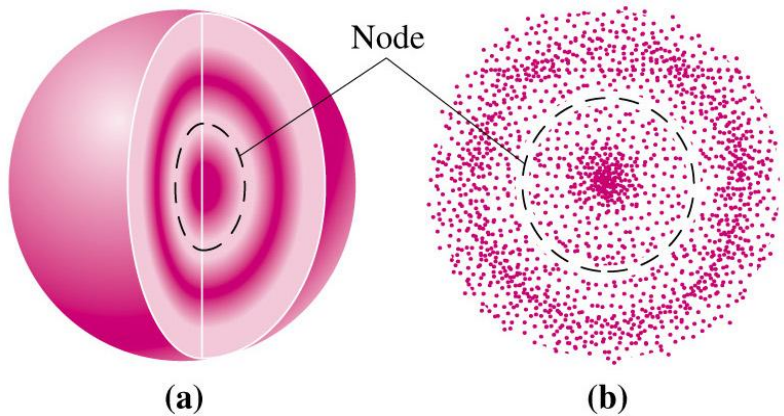
→ Ký hiệu phân lớp: 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d...

## ▪ Số lượng tử từ $m_\ell$ và các AO

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

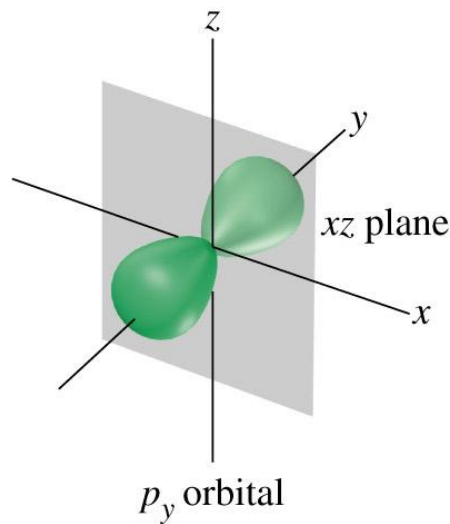
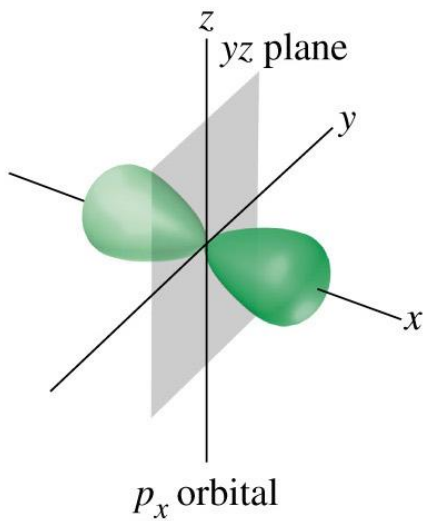
# $\ell = 0 \rightarrow m_\ell = 0 \rightarrow 1$ Orbital S

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

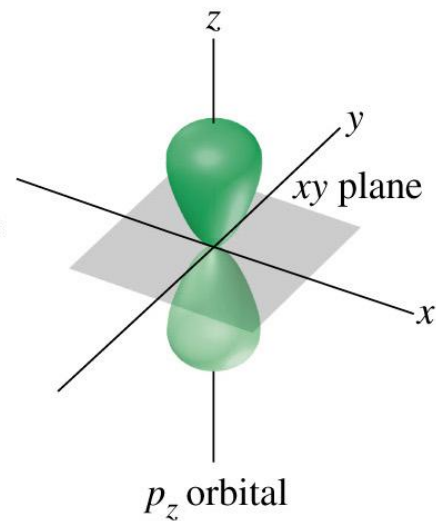


Với **orbital s** ứng với số lượng tử chính  $n$  thì **số nút là  $(n-1)$**

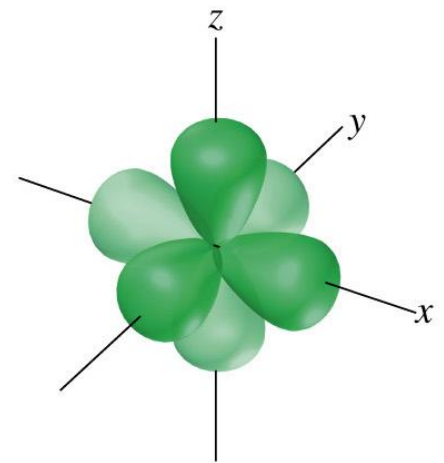
$\ell = 1 \rightarrow m_\ell = 0, \pm 1 \rightarrow 3 \text{ orbital p}$



$$m_\ell = \pm 1$$

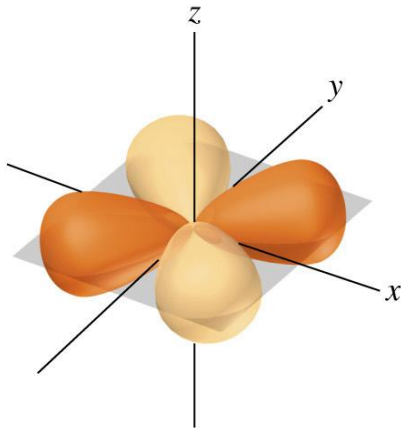


$$m_\ell = 0$$

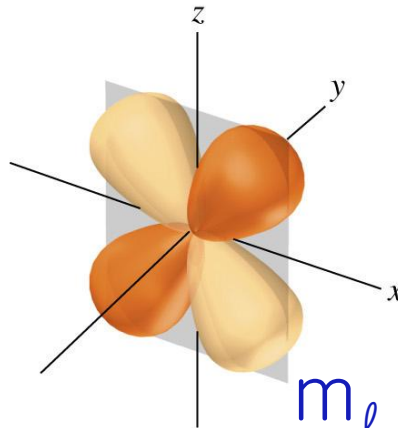




$\ell = 2 \rightarrow m_\ell = \pm 1, \pm 2, 0 \rightarrow 5 \text{ orbital d}$

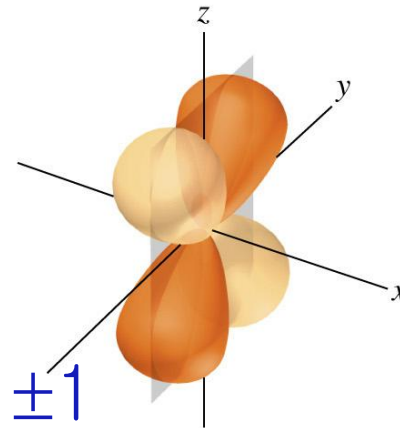


$d_{xy}$  orbital

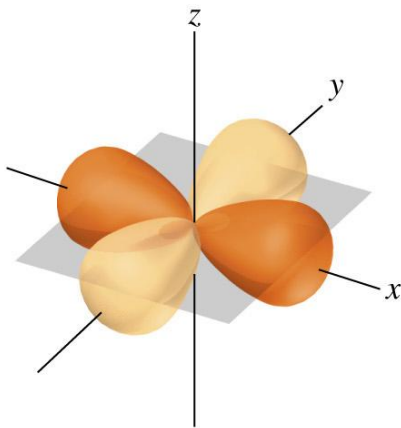


$d_{xz}$  orbital

$m_\ell = \pm 1$

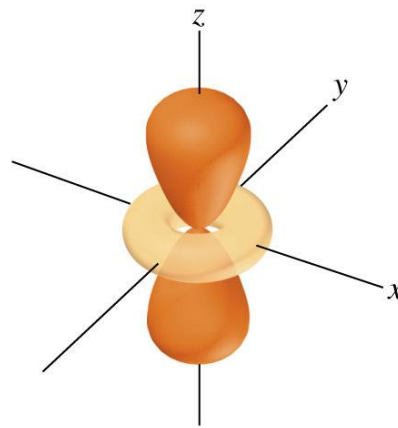


$d_{yz}$  orbital



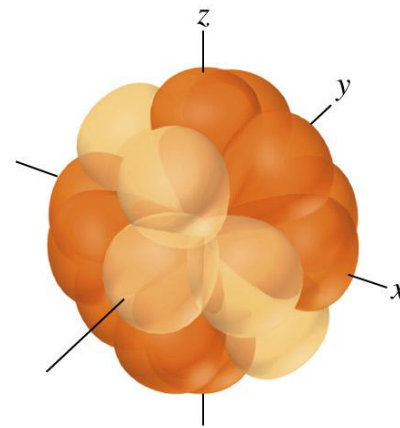
$d_{x^2-y^2}$  orbital

$m_\ell = \pm 2$



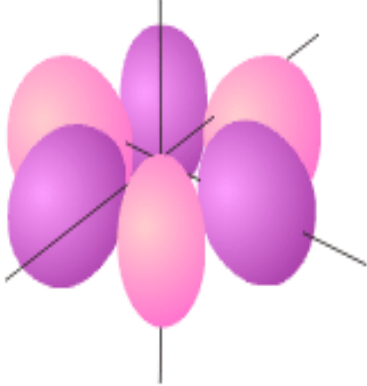
$d_{z^2}$  orbital

$m_\ell = 0$

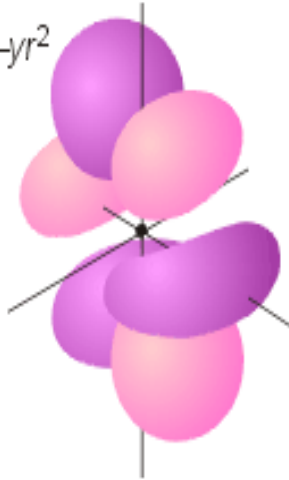


$\ell = 3 \rightarrow m_\ell = \pm 1, \pm 2, \pm 3, 0 \rightarrow 7 \text{ orbital f}$

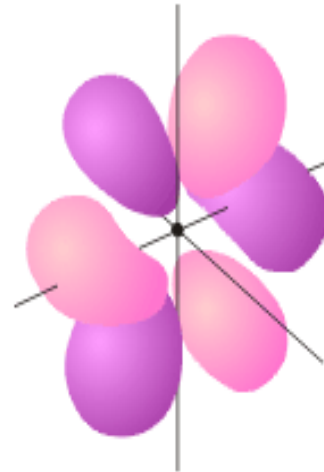
$4f_{y^3-3yx^2}$



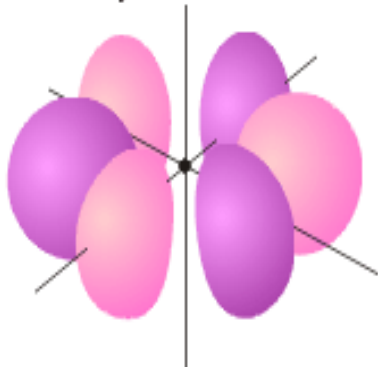
$4f_{5yz^2-y^2r^2}$



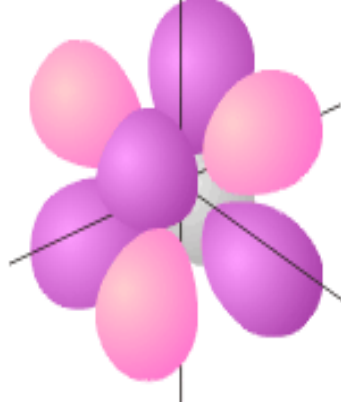
$4f_{5xz^2-3xr^2}$



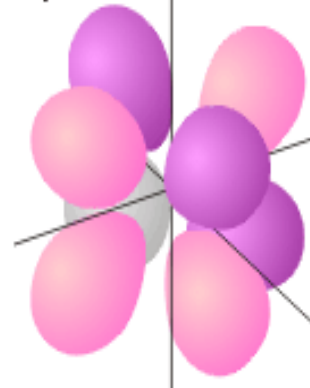
$4f_{x^3-3xy^2}$



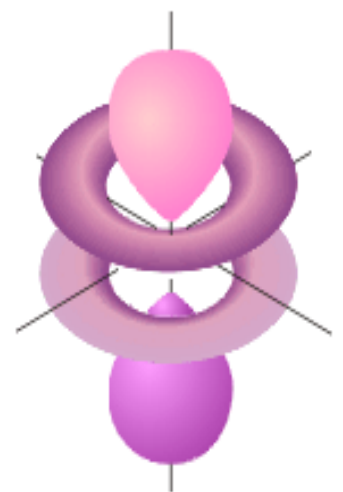
$4f_{zx^2-zy^2}$



$4f_{xyz}$

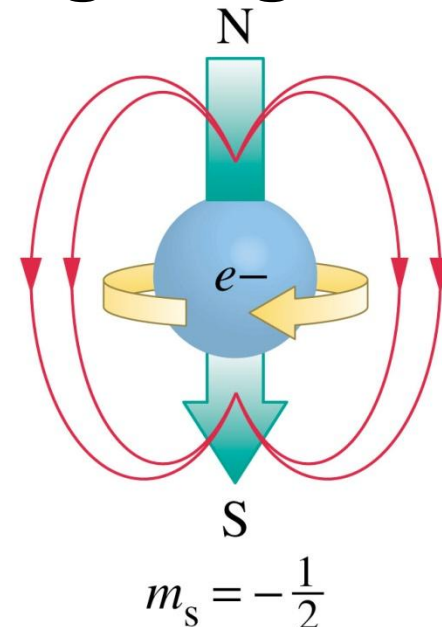
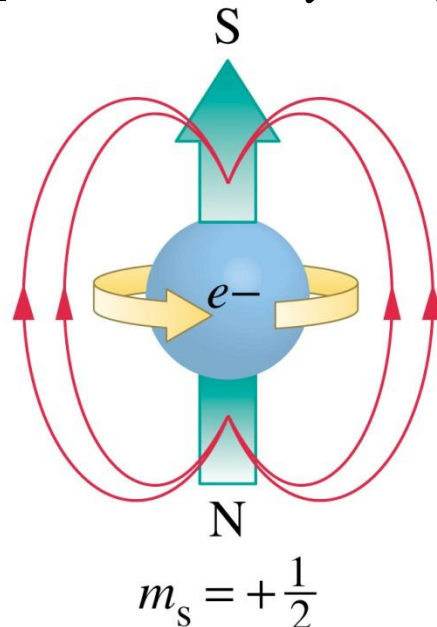


$4f_{5z^3-3zr^2}$

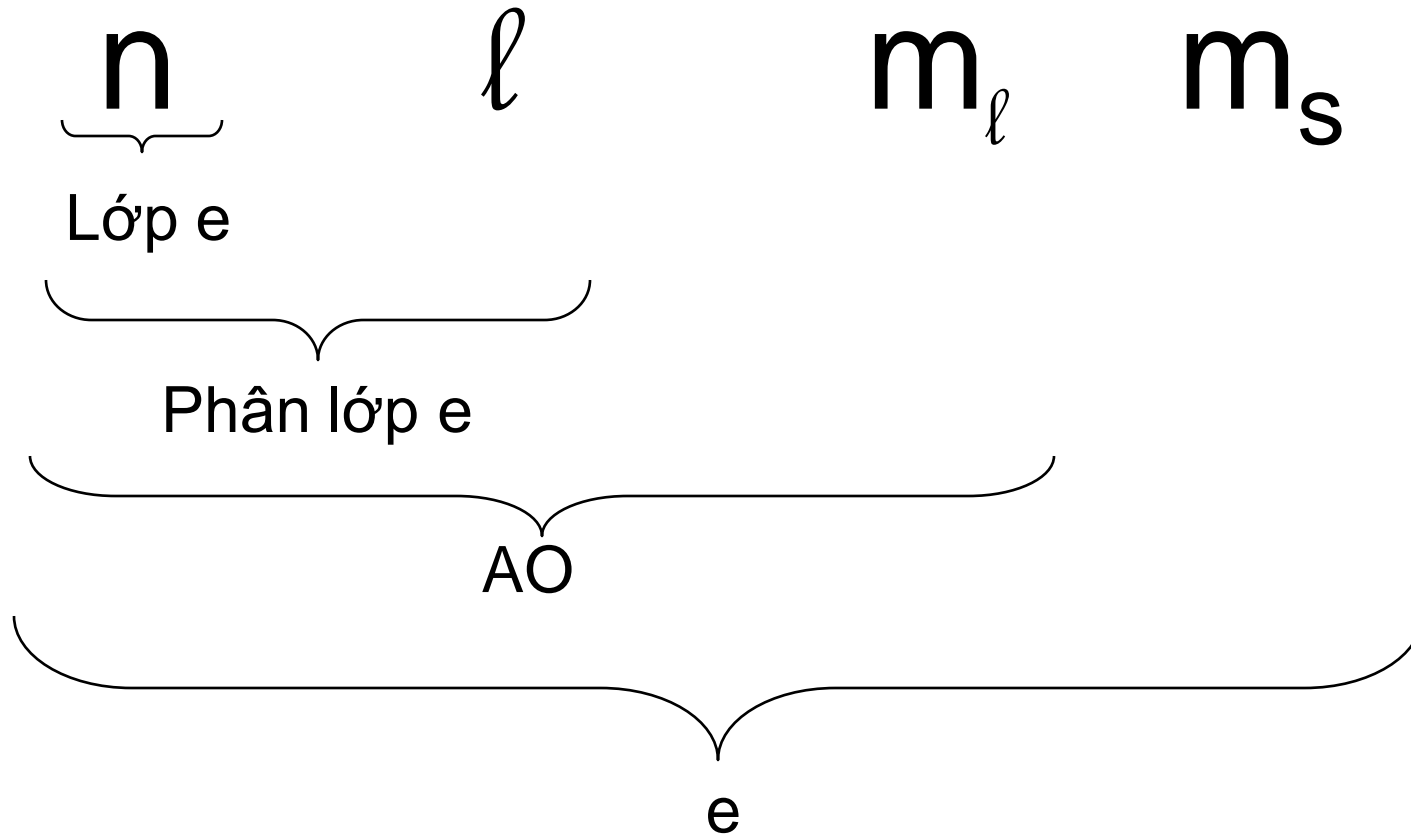


## ▪ Số lượng tử spin $m_s$

- ✓ **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  $n, \ell, m_\ell, m_s$  tương ứng 1  $e^-$ .**



# Nguyên tắc xác định



# ỨNG DỤNG

1. Nếu 1 điện tử có có giá trị  $m_\ell = -2$  thì giá trị nhỏ nhất của  $n$  và  $\ell$  là bao nhiêu?
2. Ký hiệu nào sau đây không đúng:  
3s, 1p, 2d, 3f, 4g, 5h

# 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:**

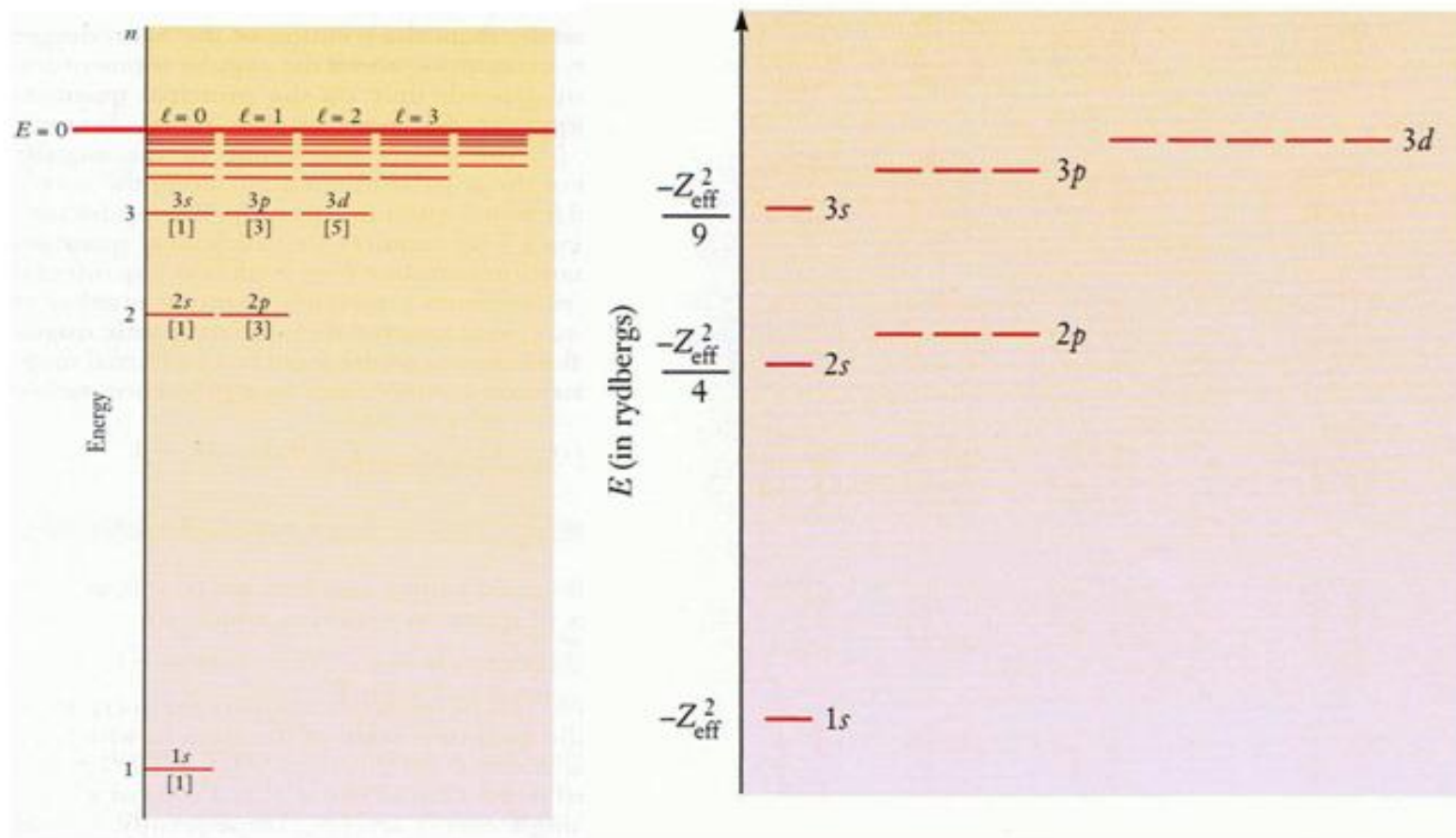
- ✓ Được xác định bằng 4 số lượng tử  $n, l, m_l, m_s$
- ✓ Hình dạng, độ lớn, phân bố, định hướng của các AO

- **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 xâm 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.

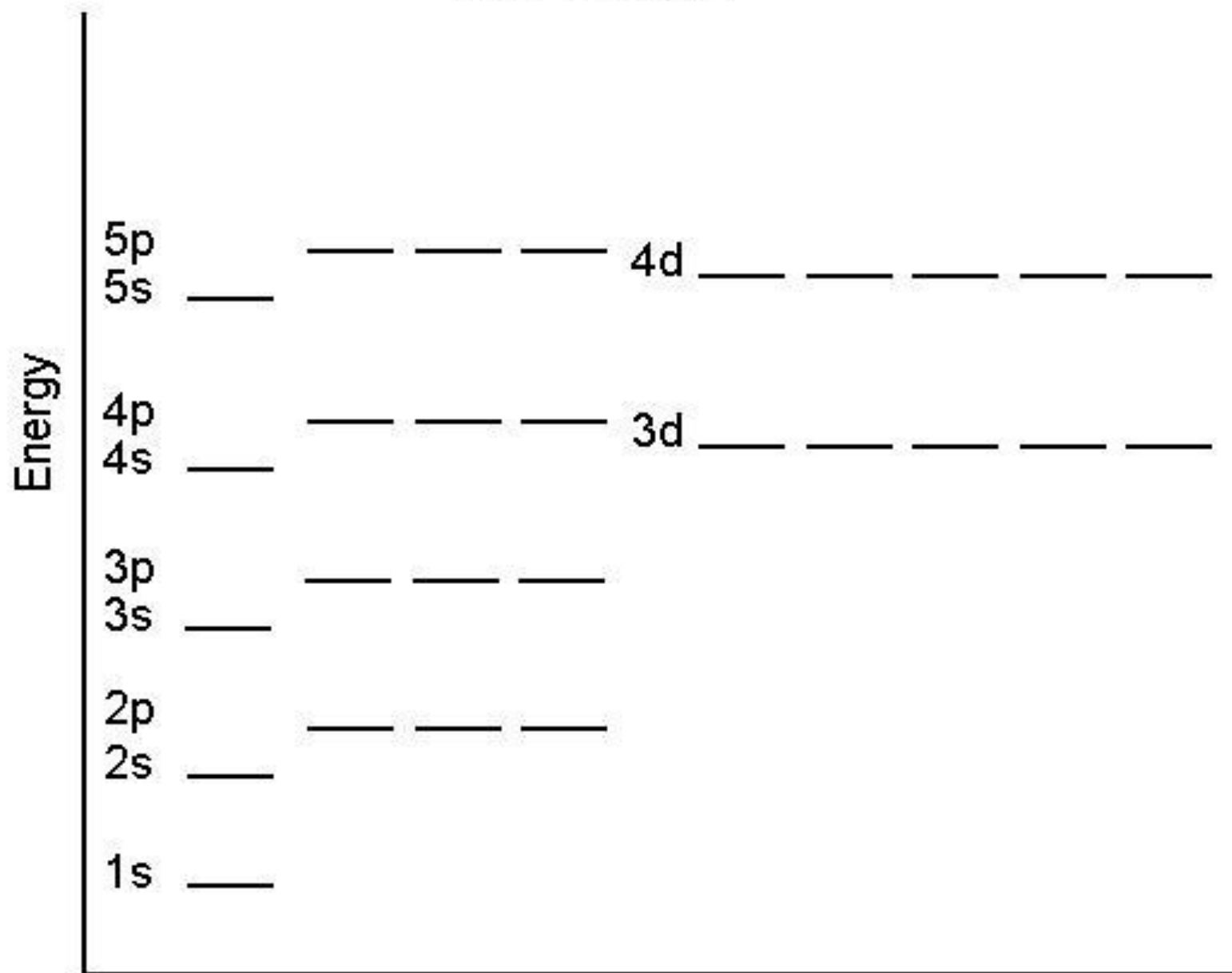
# Hiệu ứng chắn

- 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 <sub>l</sub>	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 5 6 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:  $Z=24$ ;  $Z=29$

# 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