

ĐẠI HỌC NÔNG LÂM TP. HỒ CHÍ MINH  
KHOA KHOA HỌC/ BỘ MÔN HÓA HỌC

# HÓA ĐẠI CƯƠNG

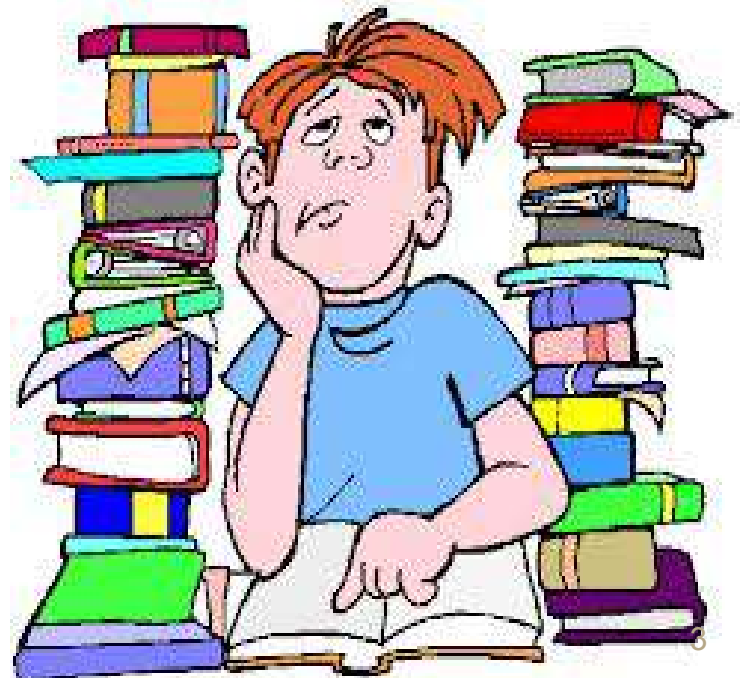


## THÔNG TIN VỀ MÔN HỌC

- Số tín chỉ: 3
- Phân phối giờ học:
  - Tuần 1→7 : Hóa đại cương tập 1
  - Tuần 8 : Kiểm tra giữa kỳ
  - Tuần 9→15: Hóa đại cương tập 2
- Đánh giá kết quả cuối kỳ:
  - Kiểm tra giữa kỳ: 30%
  - Thi cuối kỳ: 70%.

*Hình thức thi: trắc nghiệm (40 câu/ 60 phút)*

# TÀI LIỆU HỌC TẬP



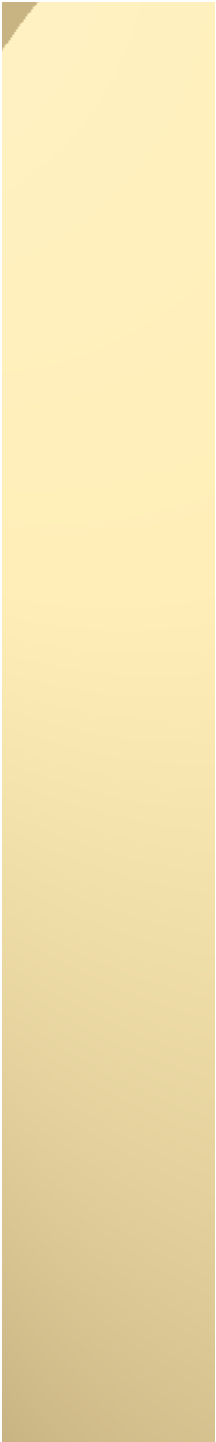


Liên hệ GV:

[nvhien@hcmuaf.edu.vn](mailto:nvhien@hcmuaf.edu.vn)

## **NỘI DUNG (tập 1):**

- *Chương 1:           Cấu tạo nguyên tử*
- *Chương 2:           Liên kết hóa học*
- *Chương 3:           Nhiệt động hóa học*
- *Chương 4:           Động hóa học*
- *Chương 5:           Dung dịch*

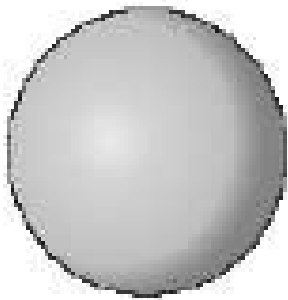


# **CHƯƠNG 1:**

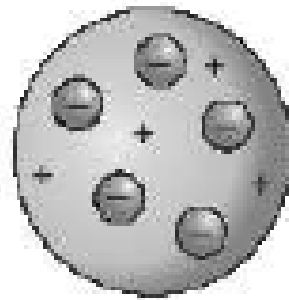
## **CẤU TẠO NGUYÊN TỬ & BẢNG PHÂN LOẠI TUẦN HOÀN CÁC NGUYÊN TỐ HÓA HỌC**



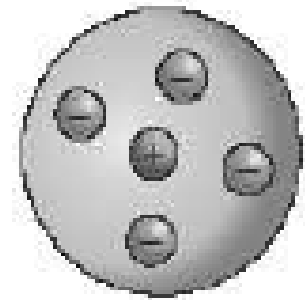
# I. Sơ lược về các thuyết cấu tạo nguyên tử



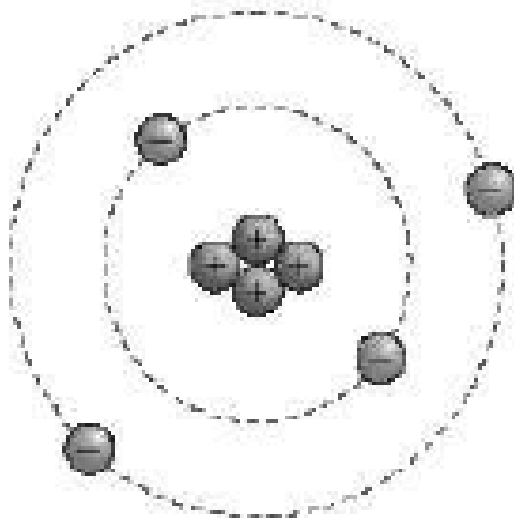
Nguyên tử của Dalton



Nguyên tử của Thompson

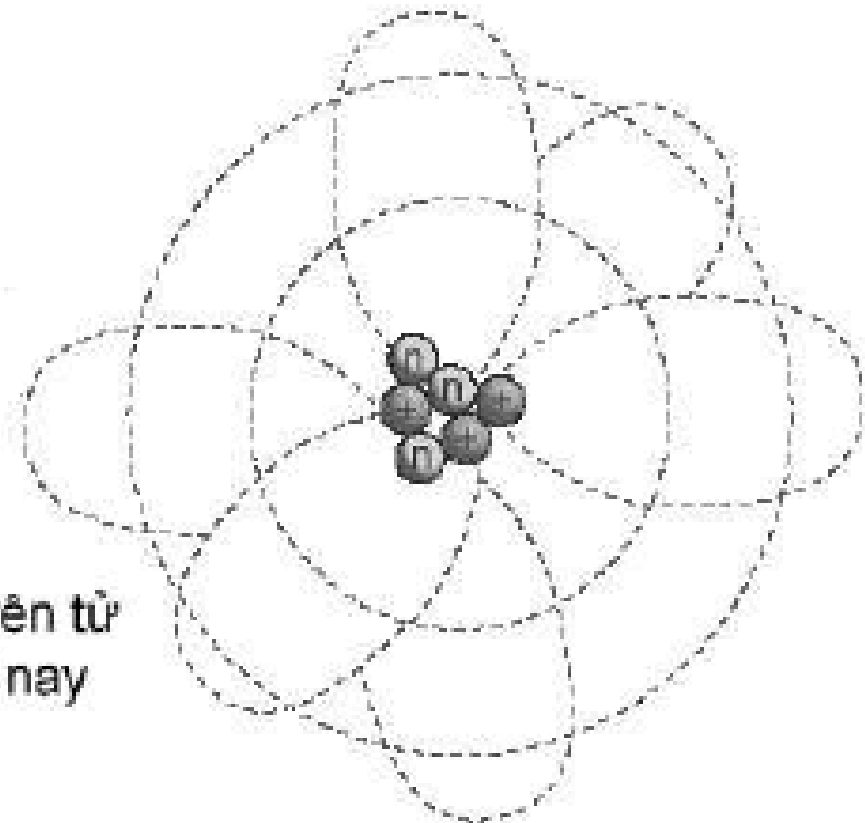


Nguyên tử của Rutherford



Nguyên tử của Bohr

Nguyên tử ngày nay



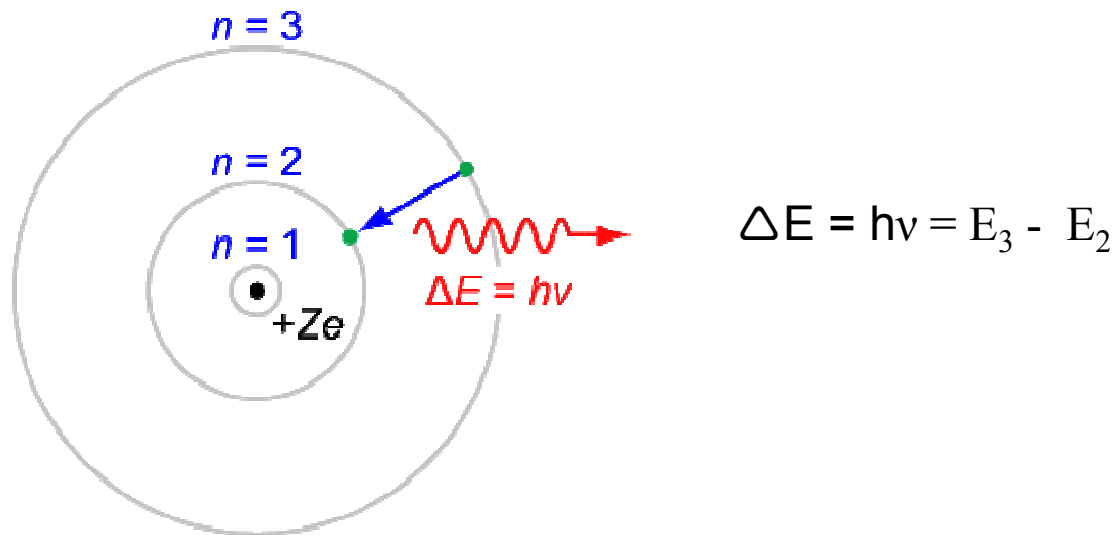


# Thuyết Bohr- Rutherford

- Hai tiên đề của Bohr

- ❖ Electron chỉ quay xung quanh hạt nhân trên những quỹ đạo tròn, đồng tâm, có bán kính xác định và một mức năng lượng xác định (quỹ đạo dừng). Electron không phát xạ hay hấp thụ năng lượng trên các quỹ đạo dừng

- ❖ Năng lượng ( $\Delta E$ ) chỉ được phát ra hay thu vào khi electron chuyển từ quỹ đạo này sang quỹ đạo khác.



$$\Delta E = hv = E_3 - E_2$$

# Thành công của thuyết Bohr

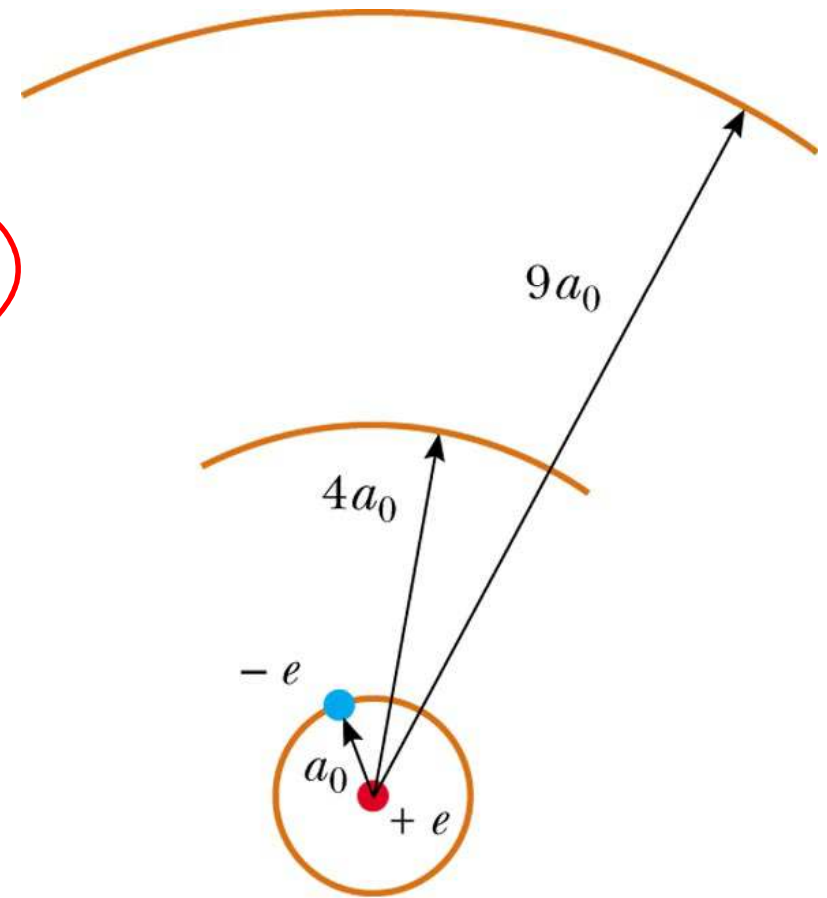
- \* **Tính được bán kính quỹ đạo bền, tốc độ, năng lượng của e khi chuyển động trên các quỹ đạo bền đó**

$$v = \frac{1}{n} \frac{Ze^2}{2\epsilon_0 h}$$

và

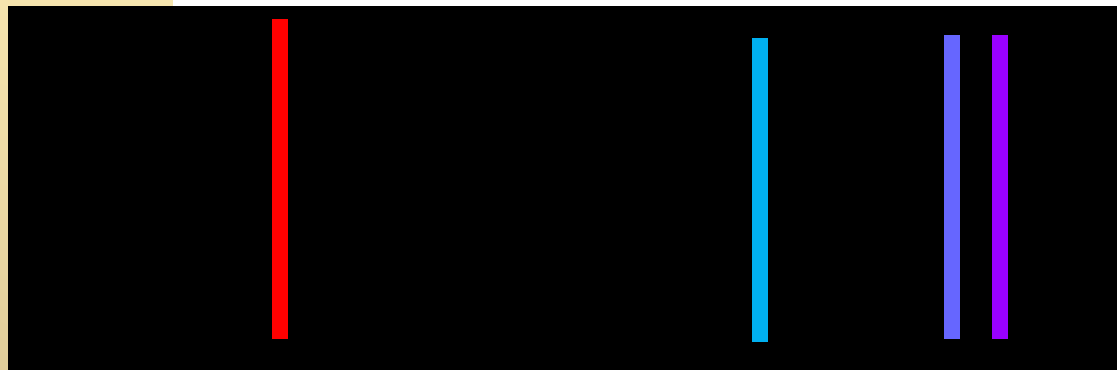
$$r_n = n^2 \frac{\epsilon_0 h^2}{\pi m e^2 Z}$$

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

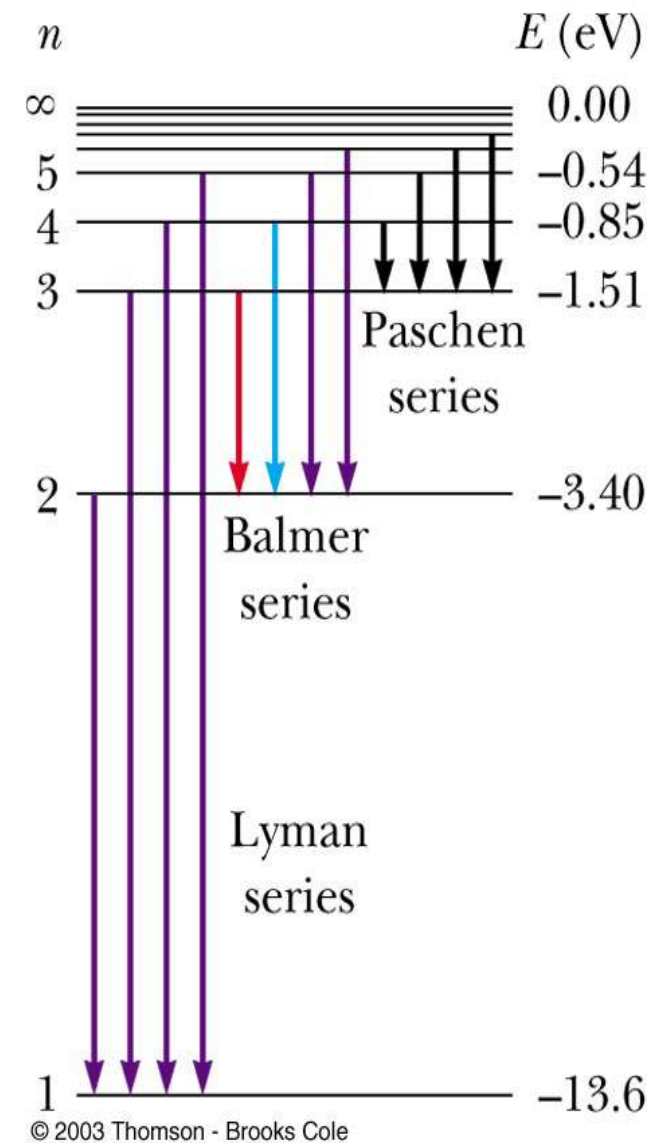


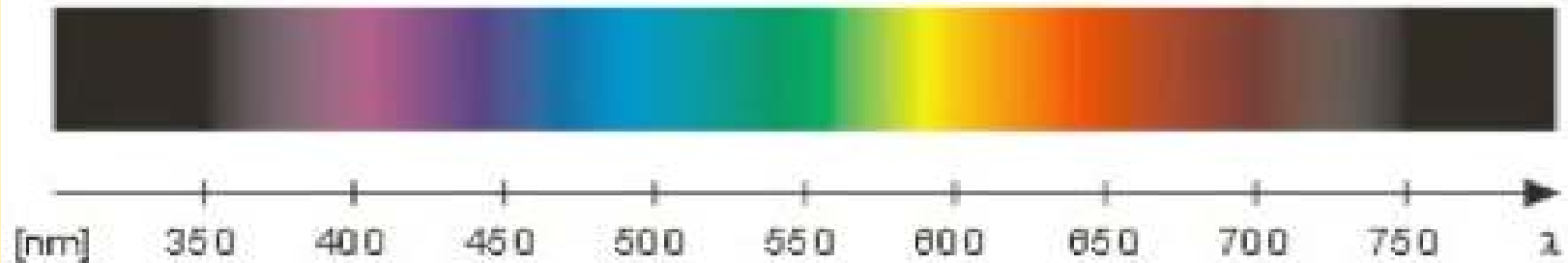
$$r_n = n^2 a_0 \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

\* *Giải thích được bản chất vật lý của quang phổ nguyên tử Hydro*



**Đỏ, Lam, Chàm, Tím**

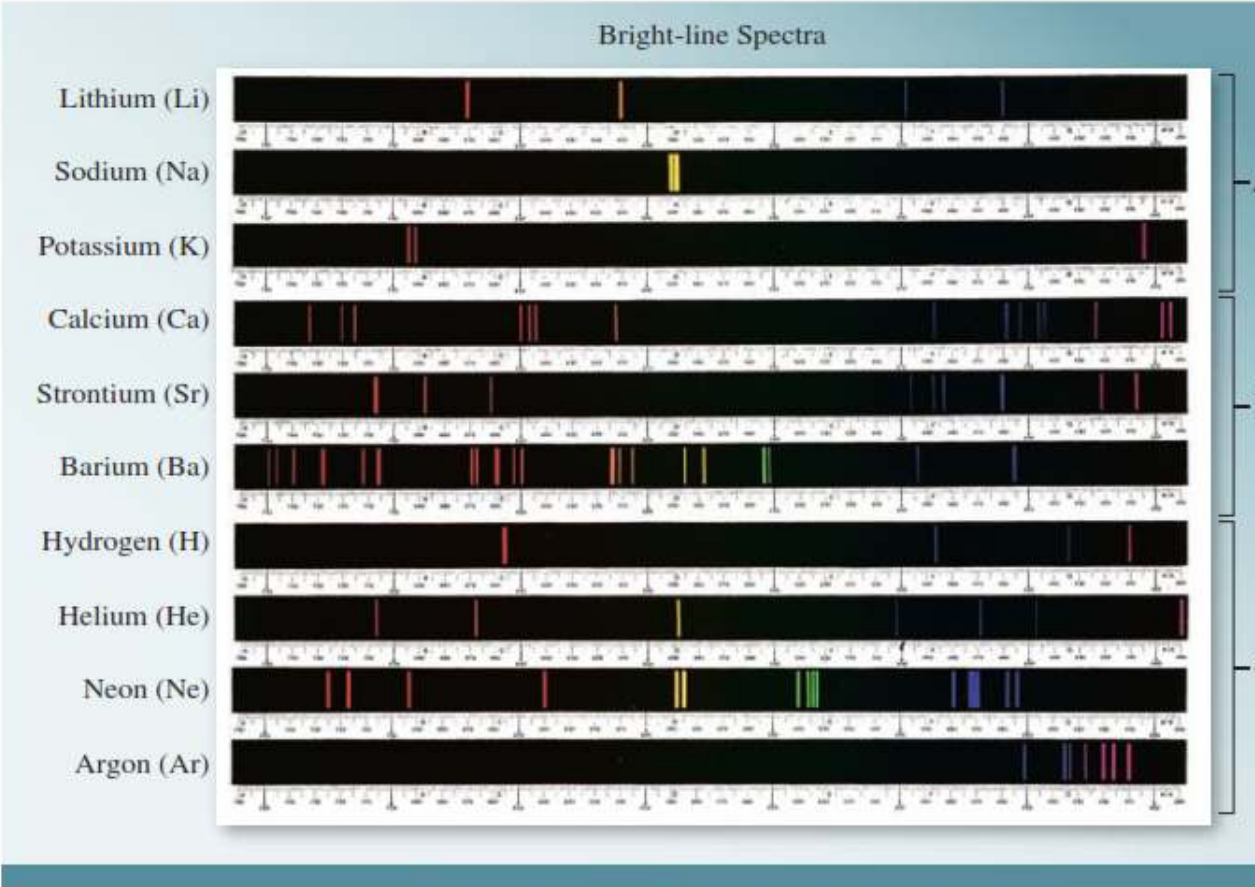




Màu	Bước sóng ( $\lambda$ )
Tím (Violet)	380 – 420 nm
Chàm (Indigo)	420 – 450 nm
Lam (Blue)	450 – 490 nm
Lục (Green)	490 – 570 nm
Vàng (Yellow)	570 – 590 nm
Da cam (Orange)	590 – 630 nm
Đỏ (Red)	630 – 750 nm



**Figure 6.8** Emission spectra of several elements.



## **II. Thuyết cấu tạo nguyên tử hiện đại theo cơ học lượng tử**

# Những luận điểm cơ bản của cơ học lượng tử

## ❖ Tính chất sóng-hạt của hạt vi mô

Thuyết lượng tử của Plank:

“ Năng lượng của bức xạ không được giải phóng hay hấp thu một cách liên tục mà bằng những lượng gián đoạn gọi là hạt lượng tử (hay photon)

$$E = hc/\lambda$$

Ánh sáng  
vừa là sóng  
vừa là hạt

Thuyết sóng kết hợp của De Broglie

$$\lambda = h/mv$$

Hạt cũng có  
tính chất sóng

Tiểu phân	Khối lượng (kg)	Vận tốc (ms <sup>-1</sup> )	Độ dài sóng (pm)
e ngử hidro	$9 \cdot 10^{-31}$	$2,2 \cdot 10^6$	33
e ngử Xe	$9 \cdot 10^{-31}$	$1 \cdot 10^8$	7
Ngử He khí (300K)	$9 \cdot 10^{-25}$	250	10
Tính chất hạt & sóng			
Trái banh bay nhanh	0,1	20	$3 \cdot 10^{-22}$
Trái banh bay chậm	0,1	0,1	$7 \cdot 10^{-20}$
Tính chất hạt			



## ❖ Nguyên lý bất định Heisenberg

*Không thể xác định chính xác đồng thời vị trí và vận tốc của hạt vi mô*

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

$\Delta v$ : độ sai số về vận tốc  
 $\Delta x$ : độ sai số về vị trí

## Ví dụ

- Một electron ( $m = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{kg}$ ) của nguyên tử H được xác định chuyển động với  $v = 10^7 \text{m/s} \pm 10\%$ , thì độ sai số về vị trí nhỏ nhất  $\Delta x$  sẽ là :

$$\Delta x \geq \frac{h}{2\pi m \cdot \Delta v} = \frac{6,625 \cdot 10^{-34}}{2 \times 3,14 \times 9,1 \cdot 10^{-31} \times 10^6} = 1,15 \cdot 10^{-10} \text{m} = 1,15 \text{ \AA}$$

- Do đó người ta chỉ nói **vùng không gian** mà electron cư trú và chuyển động trên đó.
- Vùng không gian như vậy gọi là đám mây điện tử hay **ORBITAL** nguyên tử (**Atomic Orbital - **AO**)**

## ❖ Phương trình sóng Schrodinger

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

$h$  : hằng số Plank

$m$ : khối lượng hạt vi mô

$E$  : năng lượng toàn phần của hạt vi mô

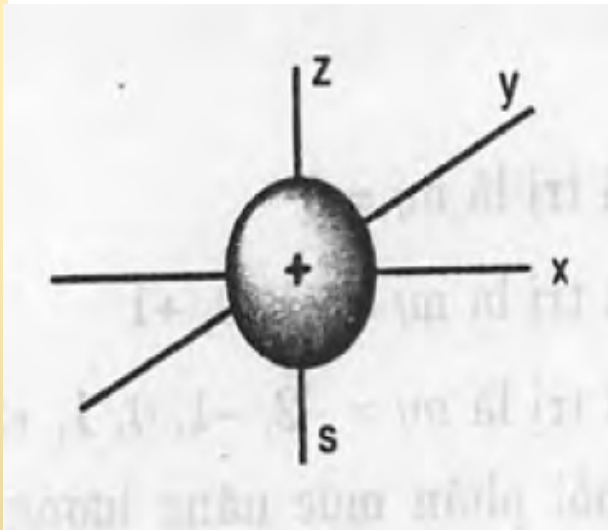
$V$  : thế năng của hạt vi mô phụ thuộc vào tọa độ  $x, y, z$

$\psi$  : hàm sóng của hạt – mô tả sự chuyển động của hạt trong không gian  $x, y, z$

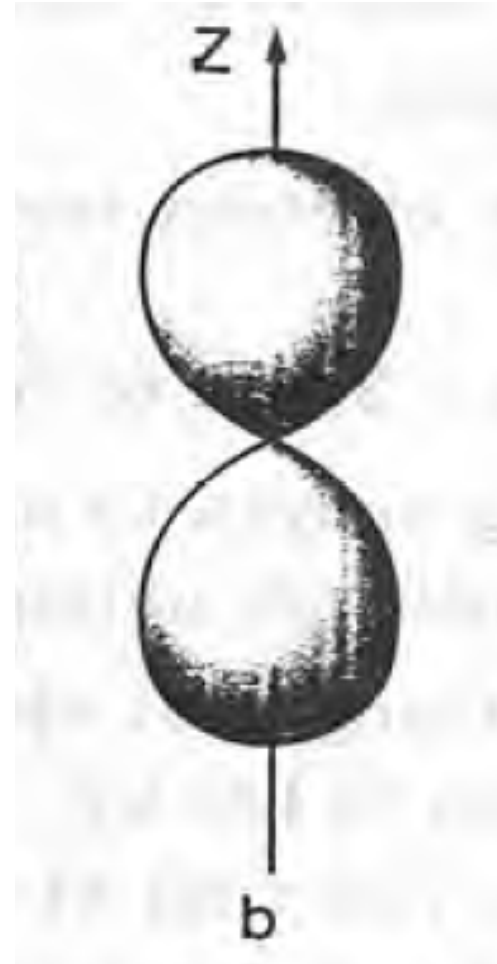
❖ Hàm sóng  $\psi$  của electron luôn chứa 3 thông số là các số nguyên:  $n, l, m_l$  - **CÁC SỐ LƯỢNG TỬ**

❖ Mỗi bộ 3 số  $(n, l, m_l) \rightarrow \psi_{n,l,m_l}$  : xác định một AO

## Hình dạng các AO



$$n = 1, l = 0, m_l = 0$$



$$n = 2, l = 1, m_l = 0$$

# Các số lượng tử

## ❖ Số lượng tử chính $n$

Xác định năng lượng  $E$  và kích thước của orbital nguyên tử

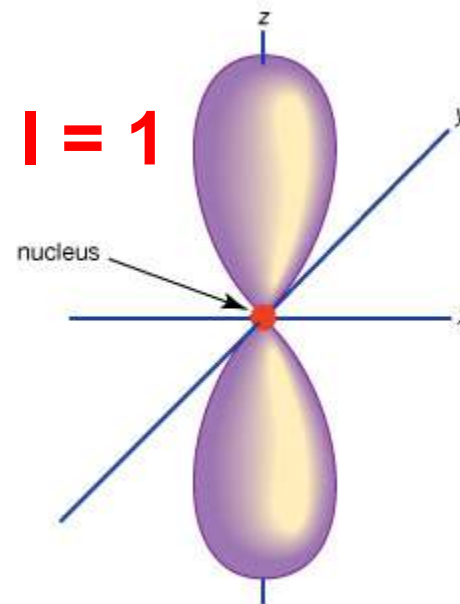
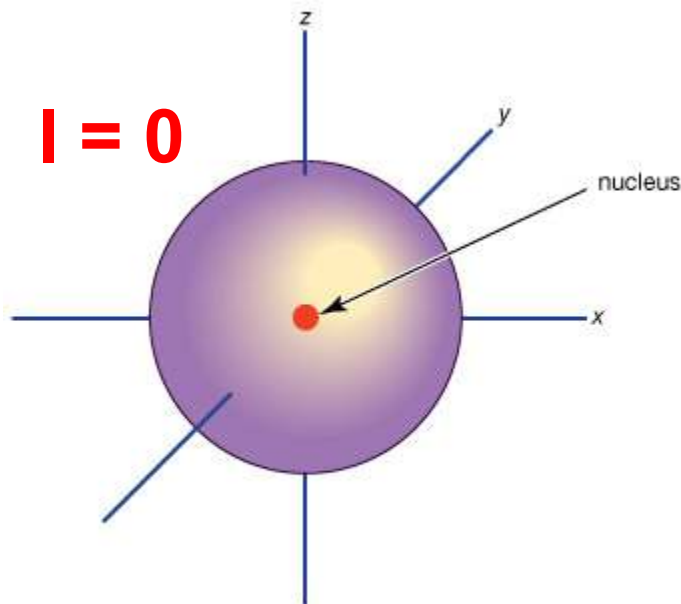
$n$	1	2	3	4	.....
Lớp	K	L	M	N	.....

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

## ❖ Số lượng tử phụ $l$

- Xác định **hình dạng** của các orbital
- Ứng với **mỗi giá trị  $n$** ,  $l$  nhận các giá trị nguyên dương từ  **$0 \div (n-1)$** , nghĩa là **có  $n$  giá trị**

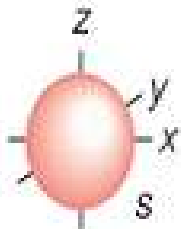
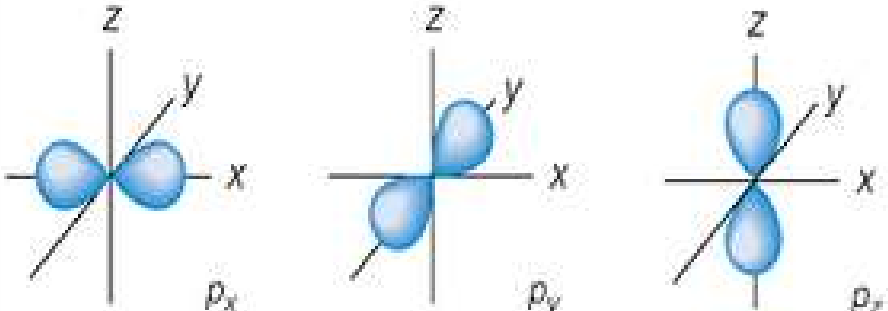
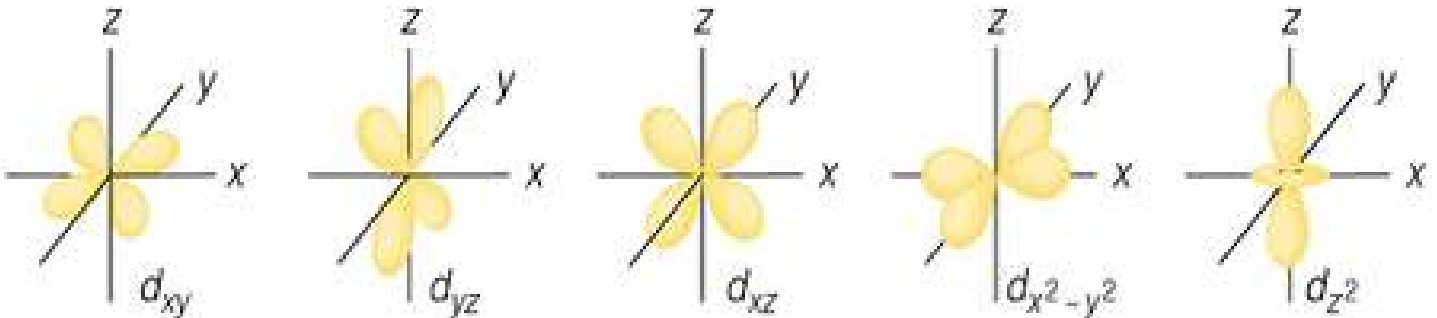
$l$	<b>0</b>	<b>1</b>	<b>2</b>	<b>3</b>	.....
Phân lớp	$s$	$p$	$d$	$f$	.....



## ❖ Số lượng tử từ $m_l$

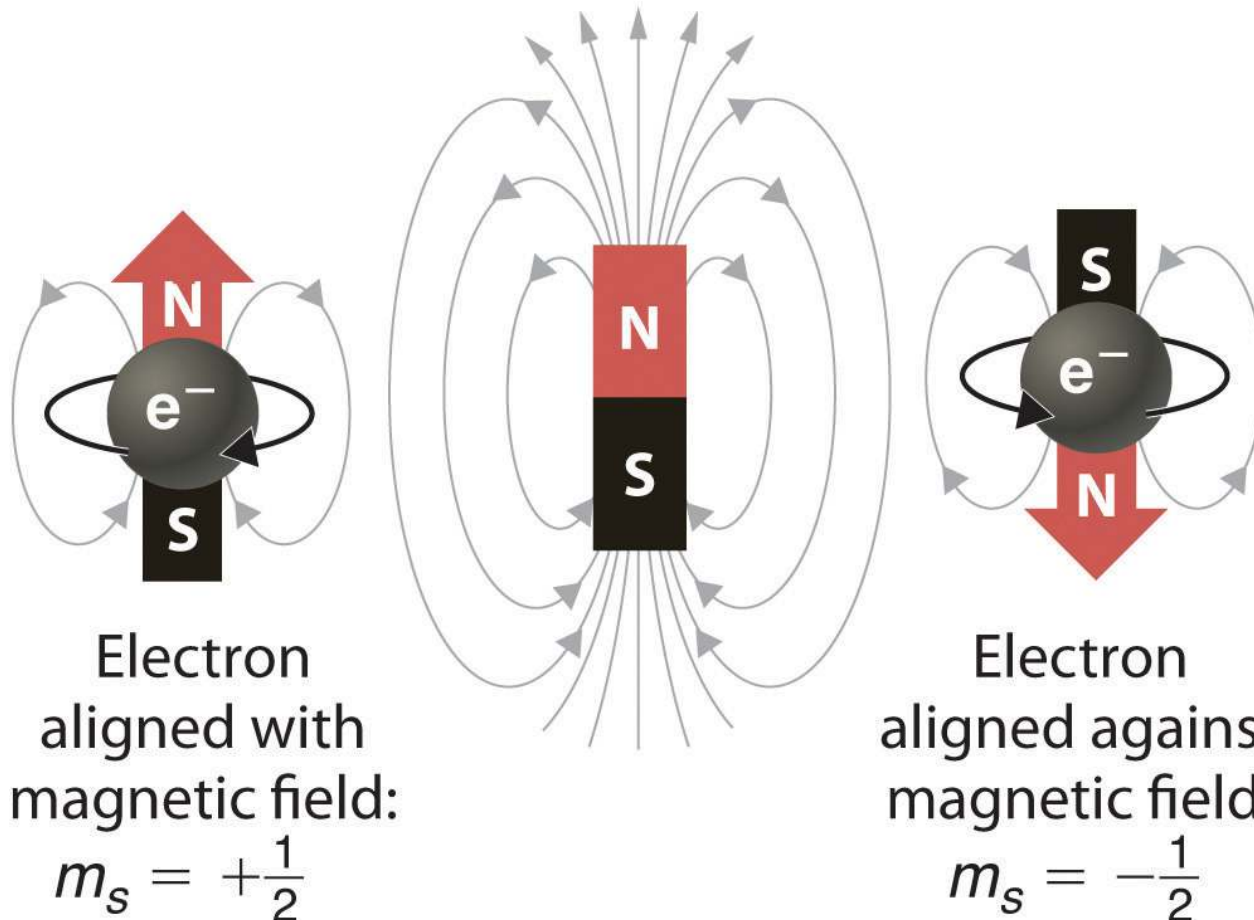
- ✓ Quyết định số lượng, sự định hướng các orbital nguyên tử
- ✓  $m_l$  nhận  $(2l + 1)$  giá trị từ  $-l \div +l$  kể cả giá trị 0



Sublevel	Orbital Shapes	Orbitals per Sublevel
s		1
p		3
d		5
f	Seven complex shapes	7

## ❖ Số lượng tử spin $m_s$

Đặc trưng cho *sự tự quay* của e xung quanh trục của mình, nhận một trong hai giá trị từ **-1/2** & **+1/2**



# Nguyên tử nhiều electron & cấu hình electron

- Trạng thái electron cũng phụ thuộc vào 4 số lượng tử  $n, l, m_l, m_s$
- Hình dạng của AO cũng tương tự AO của nguyên tử hydro

Trạng thái năng lượng  
của electron có đặc điểm khác

Phụ thuộc vào cả giá trị  $n$  và  $l$

**Hiệu ứng chắn**

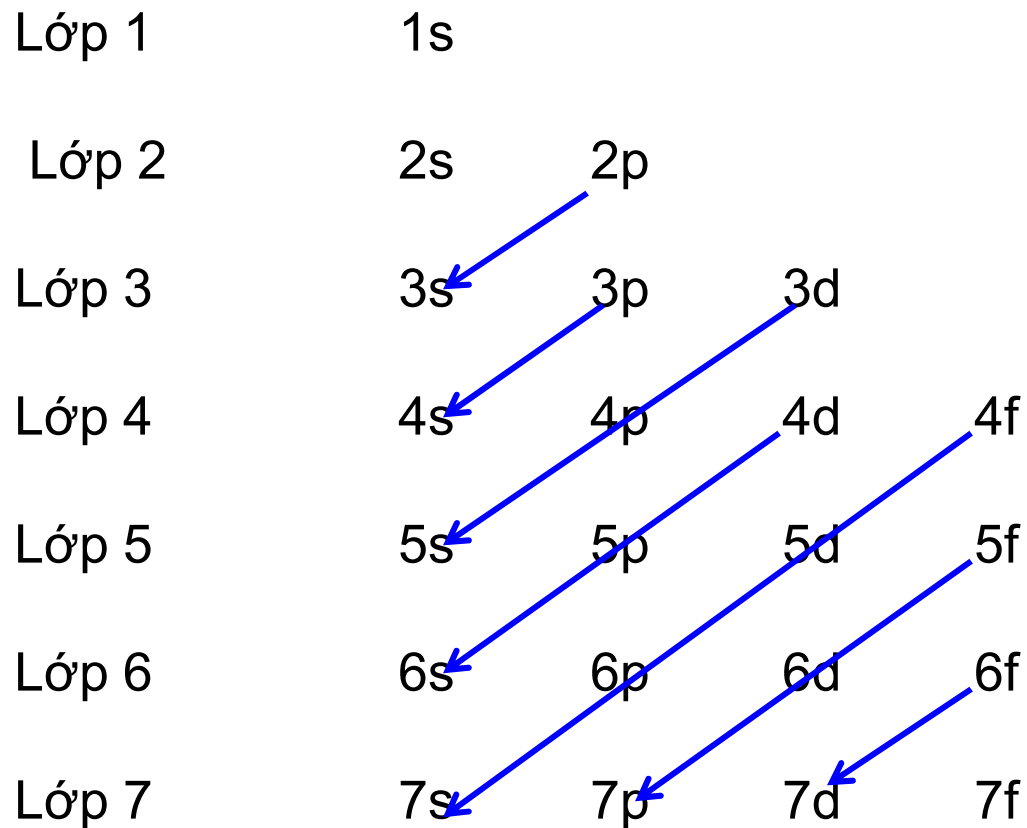
# QUY TẮC SLATER

XEM TRANG 19

GIÁO TRÌNH HÓA ĐẠI CƯƠNG TẬP 1

# CẤU HÌNH ELECTRON

## ➤ Quy tắc Klechkowski



## ➤ Nguyên lý ngoại trừ Pauli:

*Trong nguyên tử không thể có hai e có cùng 4 số lượng tử*

⇒ *Mỗi AO được đặc trưng bởi 3 số lượng tử  $n, l, m_l$  nhất định, chứa tối đa 2 e có spin khác nhau*

⇒ *trong mỗi phân lớp có  $(2l+1)$ AO, chứa tối đa  $2(2l+1)$  e*

## ➤ Quy tắc Hund

Trong mỗi phân lớp electron có khuynh hướng điền vào các AO sao cho tổng số spin là cực đại.

❖ Ví dụ 1: Electron cuối cùng (*thuộc phân mức năng lượng cao nhất*) của nguyên tử có  $Z = 30$  có 4 số lượng tử là:

a.  $n = 3; l = 2; m_l = -2; m_s = +1/2$

b.  $n = 4; l = 0; m_l = 0; m_s = -1/2$

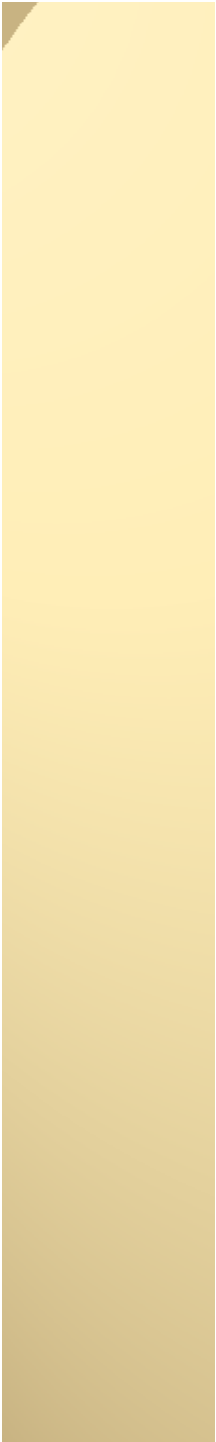
c.  $n = 3; l = 2; m_l = 2; m_s = -1/2$

d.  $n = 4; l = 0; m_l = 0; m_s = +1/2$



❖ Ví dụ 2: 4 số lượng tử của electron cuối cùng của ng.tử A:  $n=4$ ;  $l=2$ ;  $m_l=0$ ;  $m_s=-1/2$ .  
Vậy cấu hình A là:





### **III. Bảng hệ thống tuần hoàn các nguyên tố hóa học**

# Bảng HTTH

1 1A		Nhóm phụ KL chuyển tiếp										Nhóm chính					18 8A												
1 H 1.00794	2 2A	3 3B	4 4B	5 5B	6 6B	7 7B	8 8B	9 8B	10 8B	11 1B	12 2B	13 3A	14 4A	15 5A	16 6A	17 7A	18 8A												
3 Li 6.941	4 Be 9.01218	11 Na 22.9898	12 Mg 24.3050	21 Sc 44.9559	22 Ti 47.88	23 V 50.9415	24 Cr 51.9961	25 Mn 54.9381	26 Fe 55.847	27 Co 58.9332	28 Ni 58.693	29 Cu 63.546	30 Zn 65.39	5 B 10.811	6 C 12.011	7 N 14.0067	8 O 15.9994	9 F 18.9984	10 Ne 20.1797										
19 K 39.0983	20 Ca 40.078	39 Y 88.9059	40 Zr 91.224	41 Nb 92.9064	42 Mo 95.94	43 Tc (98)	44 Ru 101.07	45 Rh 102.906	46 Pd 106.42	47 Ag 107.868	48 Cd 112.411	31 Ga 69.723	32 Ge 72.61	33 As 74.9216	34 Se 78.96	35 Br 79.904	36 Kr 83.80												
37 Rb 85.4678	38 Sr 87.62	57 *La 138.906	72 Hf 178.49	73 Ta 180.948	74 W 183.84	75 Re 186.207	76 Os 190.23	77 Ir 192.22	78 Pt 195.08	79 Au 196.967	80 Hg 200.59	49 In 114.818	50 Sn 118.710	51 Sb 121.757	52 Te 127.60	53 I 126.904	54 Xe 131.29												
55 Cs 132.905	56 Ba 137.327	†Ac 227.028	104 Rf (261)	105 Db (262)	106 Sg (263)	107 Bh (262)	108 Hs (265)	109 Mt (266)	110 (269)	111 (272)	112 (272)	81 Tl 204.383	82 Pb 207.2	83 Bi 208.980	84 Po (209)	85 At (210)	86 Rn (222)												
87 Fr (223)	88 Ra 226.025												114 (287)		116 (289)		118 (293)												
*Lanthanide series		<table border="1"> <tr> <td>58 Ce 140.115</td> <td>59 Pr 140.908</td> <td>60 Nd 144.24</td> <td>61 Pm (145)</td> <td>62 Sm 150.36</td> <td>63 Eu 151.965</td> <td>64 Gd 157.25</td> <td>65 Tb 158.925</td> <td>66 Dy 162.50</td> <td>67 Ho 164.930</td> <td>68 Er 167.26</td> <td>69 Tm 168.934</td> <td>70 Yb 173.04</td> <td>71 Lu 174.967</td> </tr> </table>														58 Ce 140.115	59 Pr 140.908	60 Nd 144.24	61 Pm (145)	62 Sm 150.36	63 Eu 151.965	64 Gd 157.25	65 Tb 158.925	66 Dy 162.50	67 Ho 164.930	68 Er 167.26	69 Tm 168.934	70 Yb 173.04	71 Lu 174.967
58 Ce 140.115	59 Pr 140.908	60 Nd 144.24	61 Pm (145)	62 Sm 150.36	63 Eu 151.965	64 Gd 157.25	65 Tb 158.925	66 Dy 162.50	67 Ho 164.930	68 Er 167.26	69 Tm 168.934	70 Yb 173.04	71 Lu 174.967																
†Actinide series		<table border="1"> <tr> <td>90 Th 232.038</td> <td>91 Pa 231.036</td> <td>92 U 238.029</td> <td>93 Np 237.048</td> <td>94 Pu (244)</td> <td>95 Am (243)</td> <td>96 Cm (247)</td> <td>97 Bk (247)</td> <td>98 Cf (251)</td> <td>99 Es (252)</td> <td>100 Fm (257)</td> <td>101 Md (258)</td> <td>102 No (259)</td> <td>103 Lr (260)</td> </tr> </table>														90 Th 232.038	91 Pa 231.036	92 U 238.029	93 Np 237.048	94 Pu (244)	95 Am (243)	96 Cm (247)	97 Bk (247)	98 Cf (251)	99 Es (252)	100 Fm (257)	101 Md (258)	102 No (259)	103 Lr (260)
90 Th 232.038	91 Pa 231.036	92 U 238.029	93 Np 237.048	94 Pu (244)	95 Am (243)	96 Cm (247)	97 Bk (247)	98 Cf (251)	99 Es (252)	100 Fm (257)	101 Md (258)	102 No (259)	103 Lr (260)																

Nhóm chính

Lanthanides và Actinides

# Sự biến đổi tuần hoàn tính chất các nguyên tố trong bảng HTTH

Bán kính nguyên tử, ion

Năng lượng ion hóa

Độ âm điện

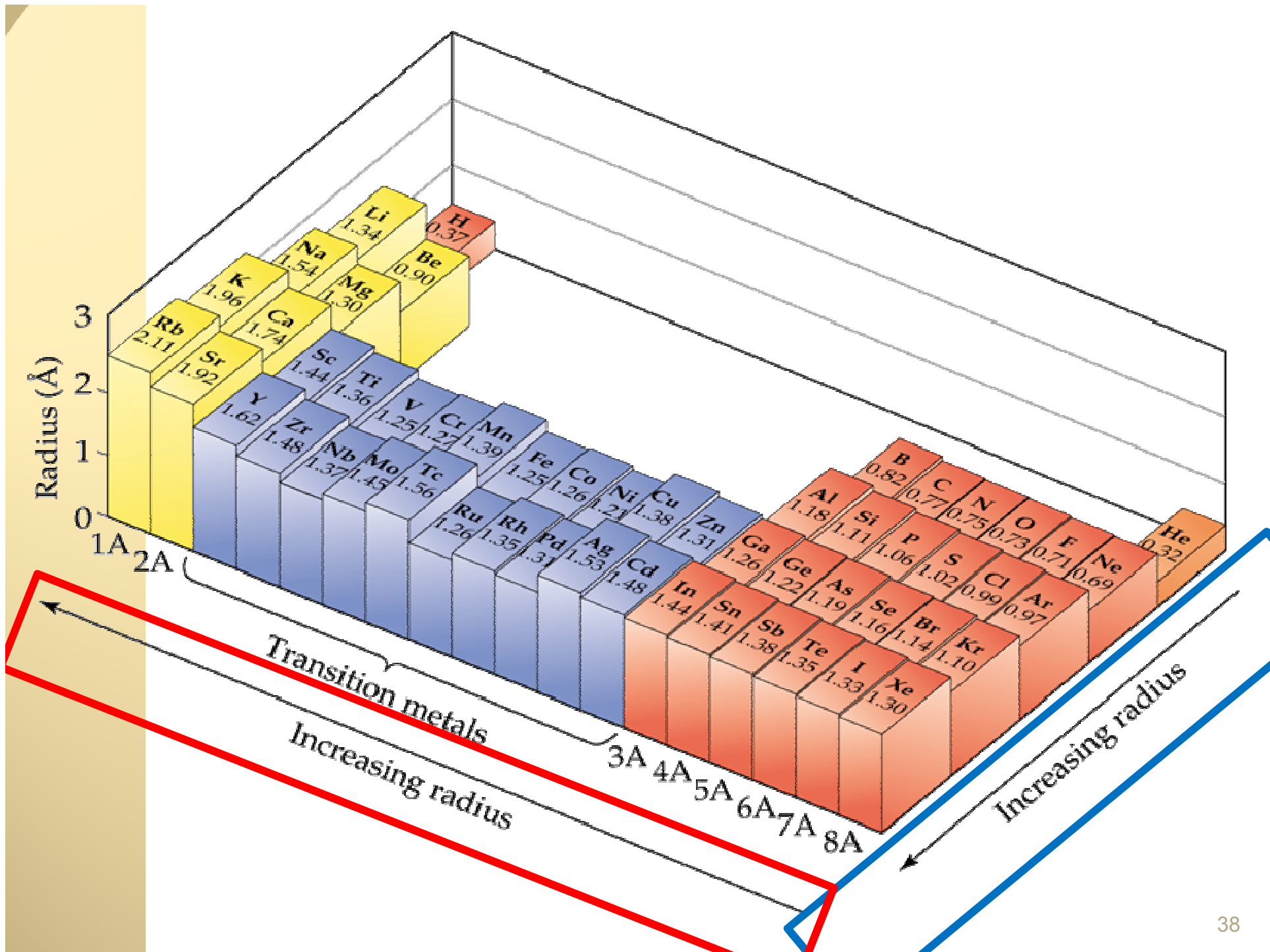
## ➤ Bán kính nguyên tử

**Trong chu kì**  
(khi đi từ trái  
sang phải)

- Bán kính nguyên tử **giảm dần**

**Trong phân  
nhóm**  
(khi đi từ trên  
xuống dưới)

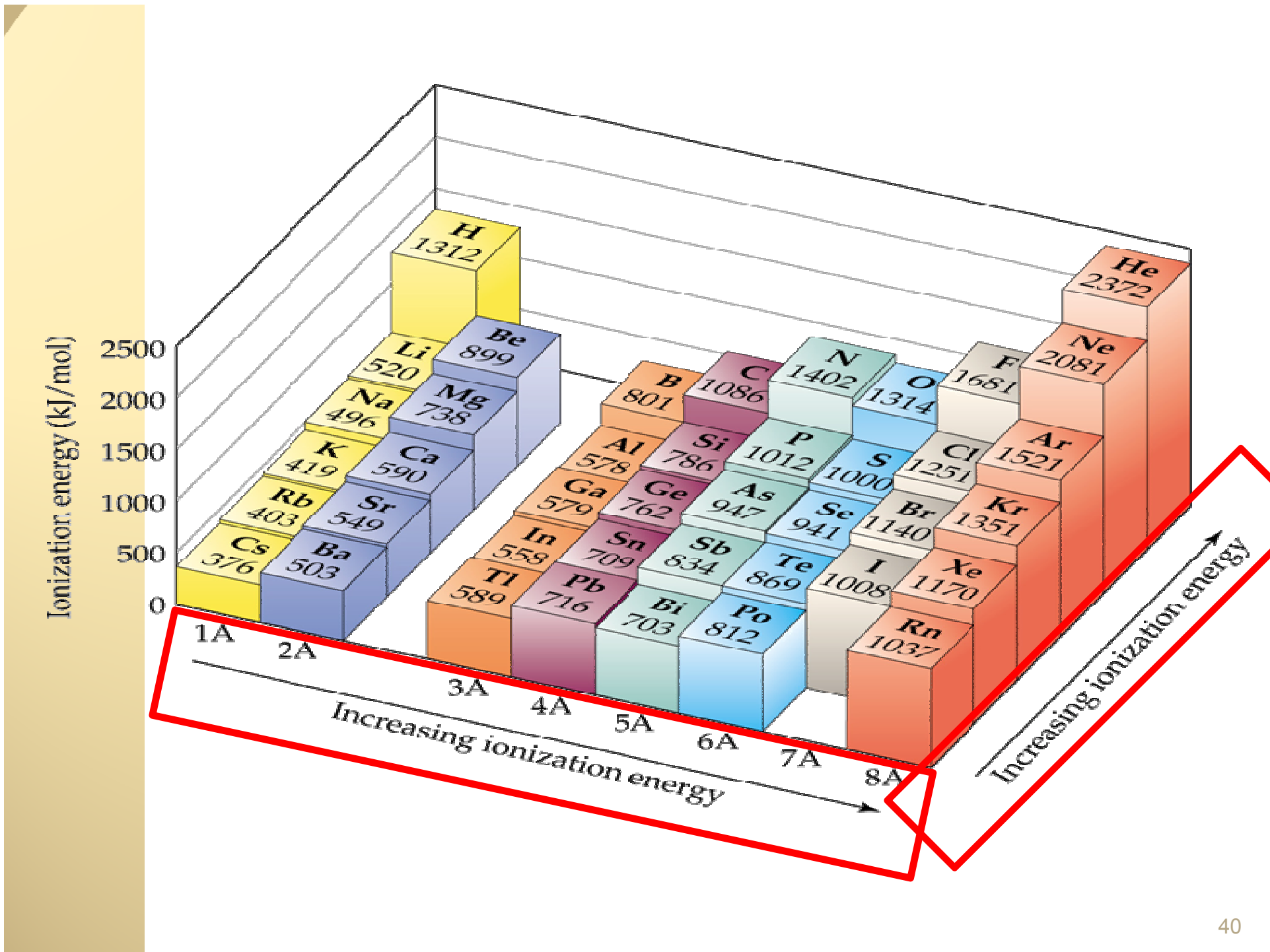
- Bán kính nguyên tử **tăng dần**



## ➤ Năng lượng ion hóa

Năng lượng ion hóa  $I$  là **năng lượng cần thiết để tách electron** ra khỏi 1 mol nguyên tử ở thể khí không bị kích thích

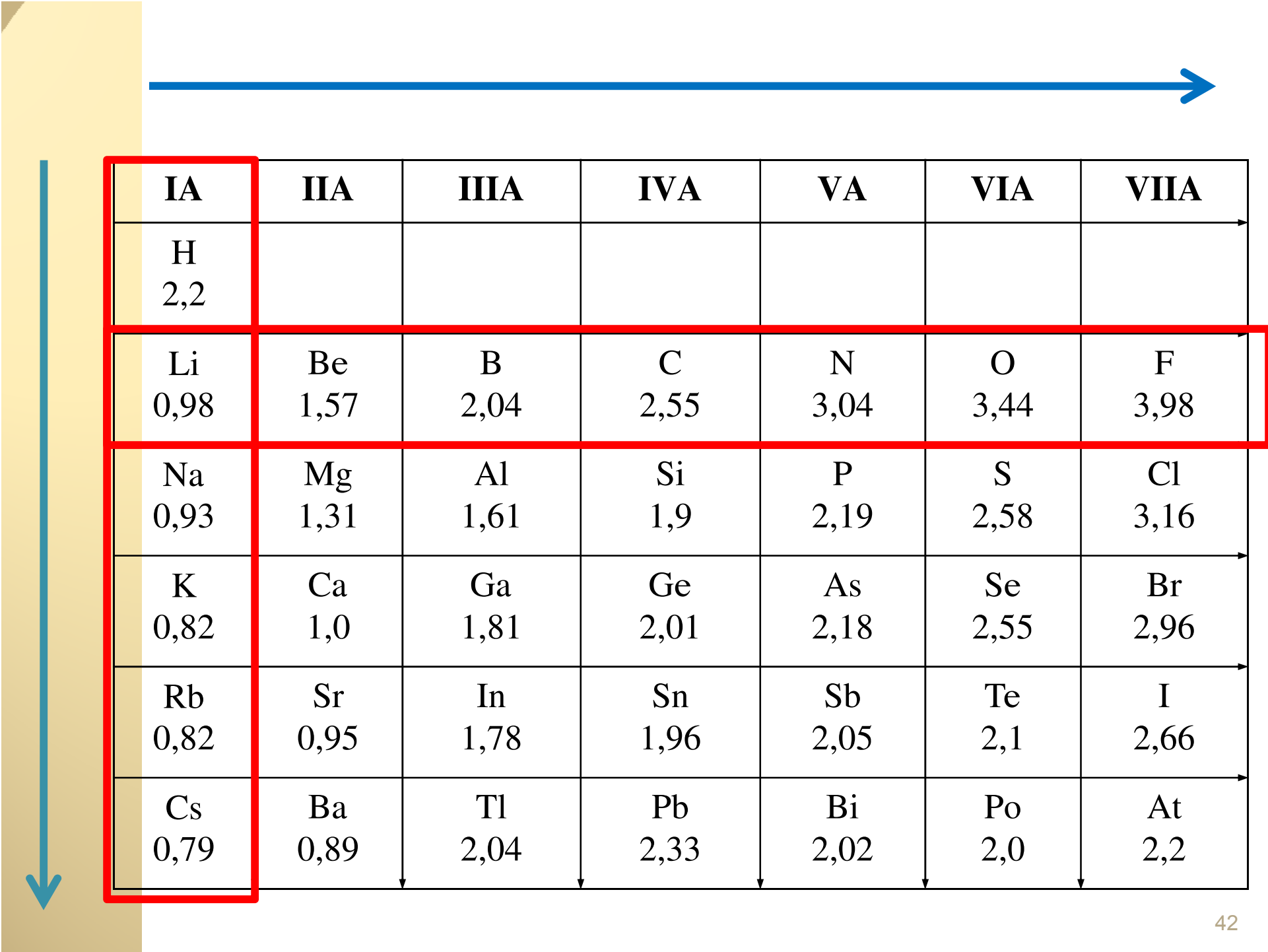






## ➤ Độ âm điện

Độ âm điện  $\chi$  là đại lượng đặc trưng cho khả năng của một nguyên tử (trong phân tử) **hút electron về phía mình** khi tạo liên kết với nguyên tử (của nguyên tố khác)



<b>IA</b>	<b>IIA</b>	<b>IIIA</b>	<b>IVA</b>	<b>VA</b>	<b>VIA</b>	<b>VIIA</b>
H 2,2						
Li 0,98	Be 1,57	B 2,04	C 2,55	N 3,04	O 3,44	F 3,98
Na 0,93	Mg 1,31	Al 1,61	Si 1,9	P 2,19	S 2,58	Cl 3,16
K 0,82	Ca 1,0	Ga 1,81	Ge 2,01	As 2,18	Se 2,55	Br 2,96
Rb 0,82	Sr 0,95	In 1,78	Sn 1,96	Sb 2,05	Te 2,1	I 2,66
Cs 0,79	Ba 0,89	Tl 2,04	Pb 2,33	Bi 2,02	Po 2,0	At 2,2

❖ Ví dụ 4: Electron cuối cùng của X có 4 số lượng tử:  $n = 4; l = 1; m_l = -1; m_s = -1/2$

a. X có số thứ tự là 32, chu kì 4, phân nhóm IVA, phi kim, số oxi hóa là -4

b. X có số thứ tự là 24, chu kì 4, phân nhóm VIA, phi kim, số oxi hóa là +6, -2

c. X có số thứ tự là 34, chu kì 4, phân nhóm VIA, phi kim, số oxi hóa là +4

d. X có số thứ tự là 34, chu kì 4, phân nhóm VIA, phi kim, số oxi hóa là +6, -2

❖ **Ví dụ 5**: Chọn phát biểu đúng: ion  $X^{2+}$  có phân lớp ngoài cùng là  $3d^2$

- a. X là kim loại thuộc chu kì 4, phân nhóm IVA
- b. X là kim loại thuộc chu kì 4, phân nhóm IVB
- c. X là phi kim thuộc chu kì 3, phân nhóm VIA
- d. X là kim loại thuộc chu kì 4, phân nhóm VIB