

Chương 1: Cấu tạo nguyên tử

1. Thành phần nguyên tử

- 3 loại hạt cơ bản: p, n, e

- $Z = p = e$

- $A = Z + N$

Trong đó:

A: số khối

Z: số thứ tự nguyên tố (số đơn vị điện tích hạt nhân)

N: số notron

2. Thuyết lượng tử Planck

Hệ thức Planck: $E = hv$

Trong đó:

h: hằng số Planck, $h = 6,63 \cdot 10^{-34}$ J.s

v : tần số bức xạ (s^{-1})

$v = \frac{c}{\lambda}$, $c = 3 \cdot 10^8$ m/s

λ : độ dài sóng (m)

E : năng lượng của lượng tử bức xạ (J)

3. Hiệu ứng quang điện

- Nếu bức xạ chiếu vào có tần số $v > v_0$ thì năng lượng bức xạ sẽ tách e ra khỏi bề mặt kim loại và truyền động năng cho e.

- Phương trình Einstein về hiệu ứng quang điện: $hv = hv_0 + \frac{1}{2}mv^2$

- Lượng tính sóng-hạt của vật chất: hệ thức de Broglie: $\lambda = \frac{h}{mv} = \frac{h}{p}$

4. Nguyên lí bất định Heisenberg

$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq h \left(\frac{h}{2\pi} \right)$

Trong đó:

Δx : độ bất định về toạ độ

$\Delta x \cdot \Delta v_x \geq \frac{h}{m}$

Δp_x : độ bất định về động lượng

Δv_x : độ bất định về vận tốc

5. Nguyên tử nhiều e

- Trạng thái AO được đặc trưng bởi 3 số lượng tử: $\psi (n, l, m_l)$

- Trạng thái của e được đặc trưng bởi 4 số lượng tử: $\psi (n, l, m_l, m_s)$

6. Ý nghĩa 4 số lượng tử

* Số lượng tử chính n

- Mỗi lớp e được đặc trưng bởi 1 giá trị số lượng tử chính n.

n : 1 2 3 4 5 6 7

Kí hiệu lớp e: K L M N O P Q

→ Giá trị n càng lớn, lớp e càng nằm xa hạt nhân

- Lớp n có n^2 AO

- Đối với nguyên tử 1e, n cho biết mức năng lượng E

- Đối với nguyên tử nhiều e, cho biết mức năng lượng trung bình của các e trong cùng 1 lớp.

* Số lượng tử phụ l

- Mỗi giá trị của l ứng với một phân lớp (số phân lớp = n)

l: 0 1 2 3 4... (n-1)

Kí hiệu phân lớp e: s p d f g...

- Giá trị của l cho biết phân mức năng lượng của e trong lớp e khảo sát

- Xác định hình dạng AO: + AO s: hình cầu

+ AO p: số 8 nổi

Thảo Lê BKĐCMP

+ AO d,f: hình dạng phức tạp

* *Hiệu ứng chắn*: $Z^* = Z - \sigma$ (Z^* : điện tích hạt nhân hiệu dụng)

* *Quy tắc Slater*

- Slater chia các AO trong nguyên tử thành các nhóm theo trật tự:

(1s) ; (2s,2p) ; (3s,3p) ; (3d) ; (4s,4p) ; (4d) ; (4f) ; (5s,5p) ;....

+ Đối với e ở 1s bị e ở 1s còn lại chắn: $\sigma_i = 0,3$

+ e ở ns, np bị e ở lớp n' chắn:

- $n' < n-1$: $\sigma_i = 1$
- $n' = n-1$: $\sigma_i = 0,85$
- $n' = n$: $\sigma_i = 0,35$
- $n' > n$: $\sigma_i = 0$

+ e ở nd, nf bị e khác chắn: e chắn cùng nhóm: $\sigma_i = 0,35$

e chắn ở các nhóm bên trong: $\sigma_i = 1$

e chắn ở các nhóm bên ngoài: $\sigma_i = 0$

Năng lượng AO: $E_{AO} = -13,6 \cdot (Z^*/n^*)^2$ (eV) $1\text{eV} = 1,602 \cdot 10^{-19}\text{J}$

n*: số lượng tử chính biểu kiến

n:	1	2	3	4	5	6
n*:	1	2	3	3,7	4	4,2

* *Số lượng tử từ m_l*

- Xác định sự định hướng của obitan trong không gian.

- Ứng với mỗi giá trị l có (2l+1) giá trị m_l , là những số từ -l đến +l tính cả số 0.

+ l = 0 (obitan s) : chỉ có 1 giá trị $m_l = 0$

+ l = 1 (obitan p) : có 3 giá trị $m_l = -1; 0; +1$

+ l = 2 (obitan d) : có 5 giá trị $m_l = -2; -1; 0; +1; +2$

+ l = 3 (obitan f) : có 7 giá trị $m_l = -3 \rightarrow +3$

* *Số lượng tử từ spin m_s*

- m_s có 2 giá trị là +1/2 và -1/2

- Xác định sự tự quay của electron.

7. Quy luật phân bố e trong nguyên tử

Phân biệt e ngoài cùng và e cuối cùng

- e ngoài cùng: e ở lớp ngoài cùng, có giá trị n lớn nhất

- e cuối cùng: e được điền cuối cùng theo dãy Kleskopxki

* *Nguyên lí loại trừ Pauli*

- "Trong 1 nguyên tử không thể tồn tại 2e có cùng giá trị 4 số lượng tử n,l, m_l , m_s ."

- Số e tối đa: + Ở mỗi AO: 2

+ Ở mỗi phân lớp: s=2, p=6, d=10, f=14

+ Ở mỗi lớp: $2n^2$

* *Quy tắc Kleskopxki (Nguyên lí vững bền)*

1s 2s 2p 3s 3p 4s 3d 4p 5s 4d 5p 6s 4f 5d 6p 7s 5f 6d 7p 8s 5g 6f 7d 8p...

* *Quy tắc Hund*

- "Nguyên tử ở trạng thái cơ bản, nếu có phân lớp chưa đủ số e tối đa thì các e có xu hướng phân bố đều vào các AO của phân lớp đó sao cho số e độc thân cùng m_s là lớn nhất."

Chương 2: Bảng tuần hoàn các nguyên tố hoá học

* Sự biến thiên năng lượng ion hoá thứ nhất

- Trong 1 chu kì: từ trái → phải I_1 tăng dần
- Nhóm A: trên → dưới I_1 giảm dần
- Nhóm B: trên → dưới biến thiên chậm, thường tăng dần.

* Sự biến thiên độ âm điện

- Từ trái → phải trong 1 chu kì: độ âm điện tăng dần
- Từ trên → dưới trong 1 nhóm: độ âm điện giảm dần

- Theo Pauling: $|\chi_A - \chi_B| = 0,102 \cdot \sqrt{\Delta_{AB}}$

$$\Delta_{AB} = D_{AB} - \frac{1}{2}(D_{A_2} + D_{B_2}) \quad (\text{kJ/mol})$$

Trong đó: D_{AB} : năng lượng phân ly liên kết trong phân tử AB (kJ/mol)

D_{A_2}, D_{B_2} : năng lượng phân ly liên kết trong phân tử A_2, B_2 (kJ/mol)

- Theo Mulliken: $\chi = \frac{I_1 - A_{e_1}}{516} + 0,17$

- Theo Allred-Rochow: $\chi = 3,59 \cdot 10^3 \cdot \frac{Z^* - 0,35}{r^2} + 0,744$

Trong đó: r : bán kính CHT (pm)

Z^* : điện tích hạt nhân hiệu dụng

* Sự biến thiên tính kim loại, phi kim

- Chu kì: trái → phải KL ↓, PK ↑
- Nhóm A: trên → dưới KL ↑, PK ↓
- Nhóm B: trên → dưới KL ↓
- Số oxi lớn nhất: = STT nhóm
- Số oxi thấp nhất: = STT nhóm - 8

Chương 3: Liên kết hoá học và cấu tạo phân tử

- Quy ước về dấu của năng lượng:
 - + Quá trình giải phóng năng lượng: (-)
 - + Quá trình thu năng lượng: (+)

1. Phân loại liên kết

- Liên kết ion: $\Delta \chi \geq 1,7$
- Liên kết cộng hoá trị: $\Delta \chi < 1,7$
- + Liên kết CHT phân cực: $0,4 \leq \Delta \chi < 1,7$
- + Liên kết CHT không phân cực: $\Delta \chi < 0,4$

2. Liên kết ion

- Được tạo thành từ kim loại mạnh + phi kim mạnh hay các gốc ion
- Bản chất: lực hút tĩnh điện giữa các ion
- Liên kết không có hướng (theo mọi hướng), không bão hoà, rất bền.
- Hợp chất ion có nhiệt độ sôi, nóng chảy cao, thường là chất rắn.

3. Liên kết cộng hoá trị

- Để giải thích sự hình thành liên kết cộng hoá trị, có 1 số thuyết:
 - + Mô hình Lewis
 - + Thuyết liên kết hoá trị VB, thuyết lai hoá
 - + Thuyết orbital phân tử MO
 - + Thuyết trường tinh thể

Thảo Lê BKĐCMP

+ Thuyết trường phối tử

- Để phân loại liên kết CHT người ta dựa vào kiểu xen phủ giữa các orbital hoá trị tham gia liên kết → Liên kết σ bền, liên kết π và δ kém bền.

* Công thức Lewis

- Quy tắc octet: các nguyên tử có xu hướng tạo thành liên kết để đạt cấu hình bát tử bền giống khí hiếm

- Ngoại lệ quy tắc octet: có nhiều ngoại lệ với quy tắc octet vì sự tạo thành liên kết là để lợi về năng lượng, do đó không nhất định phải đủ bát tử mới có lợi về năng lượng.

- Cấu trúc cộng hưởng = công thức mesomer

- Điện tích hình thức = Số e hoá trị - Số e chưa liên kết - Số liên kết

→ Cấu trúc cộng hưởng bền là cấu trúc có tổng giá trị tuyệt đối hình thức nhỏ và sự phân chia điện tích nhỏ.

* Phương pháp VB (phương pháp liên kết hoá trị)

- Tạo thành bằng 1 cặp e dùng chung giữa 2 nguyên tử liên kết.

+ Cặp e chung có thể do mỗi nguyên tử góp 1e, 2e này phải có m_s trái dấu.

+ cặp e chung cũng có thể do 1 nguyên tử góp, còn nguyên tử kia có AO hoá trị trống để tạo liên kết cho-nhận.

- Khi tạo liên kết xảy ra sự xen phủ AO hoá trị của 2 nguyên tử tham gia liên kết, sự xen phủ này càng lớn, liên kết càng bền. Sự xen phủ càng lớn khi

+ Độ bội liên kết lớn

+ Năng lượng AO hoá trị thấp

+ Miền phủ có nhiều AO hoá trị tham gia

- Liên kết CHT là liên kết có hướng, đó là hướng có độ xen phủ các AO lớn nhất

+ Hoá trị = số e độc thân của nguyên tử

+ Cộng hoá trị của nguyên tố trong phân tử: là số liên kết cộng hoá trị của nguyên tử đó với các nguyên tử khác.

+ Điện hoá trị: số e mà nguyên tử mất đi hay thu vào khi tạo thành ion đơn. (Kí hiệu: $1+, 1-, \dots$)

+ Số oxi: hoá trị hình thức, kí hiệu: $+1, +2, \dots$

* VSEPR: AX_mE_n

$m + n$	Công thức	Dạng hình học	Ví dụ
2	AX_2E_0	Thẳng	BeH_2, CO_2, HCN, \dots
3	AX_3E_0	Tam giác đều	$BH_3, AlCl_3, SO_3, \dots$
	AX_2E_1	Gấp khúc	$SnCl_2, SO_2, NOCl, \dots$
4	AX_4E_0	Tứ diện	$CH_4, POCl_3, NH_4^+, \dots$
	AX_3E_1	Tháp đáy tam giác	$NH_3, SOBr_2, ClO_3^-, \dots$
	AX_2E_2	Gấp khúc	$OF_2, NH_2^-, ClO_2^-, \dots$
5	AX_5E_0	Lưỡng tháp tam giác	$PCl_5, AsF_5, SOF_4, \dots$
	AX_4E_1	Bập bênh (4 mặt lệch)	$IF_4^+, TeCl_4, XeF_2O_2, \dots$
	AX_3E_2	Chữ T	BrF_3, \dots
	AX_2E_3	Thẳng	XeF_2, I_3^-, \dots
6	AX_6E_0	Bát diện	SF_6, IF_5O, \dots
	AX_5E_1	Chóp vuông	$BrF_5, SbCl_5^-, \dots$
	AX_4E_2	Vuông phẳng	Icl_4^-, XeF_4, \dots

Thảo Lê BKĐCMP

* MO: $nAO \rightarrow \frac{n}{2} MO + \frac{n}{2} MO^*$

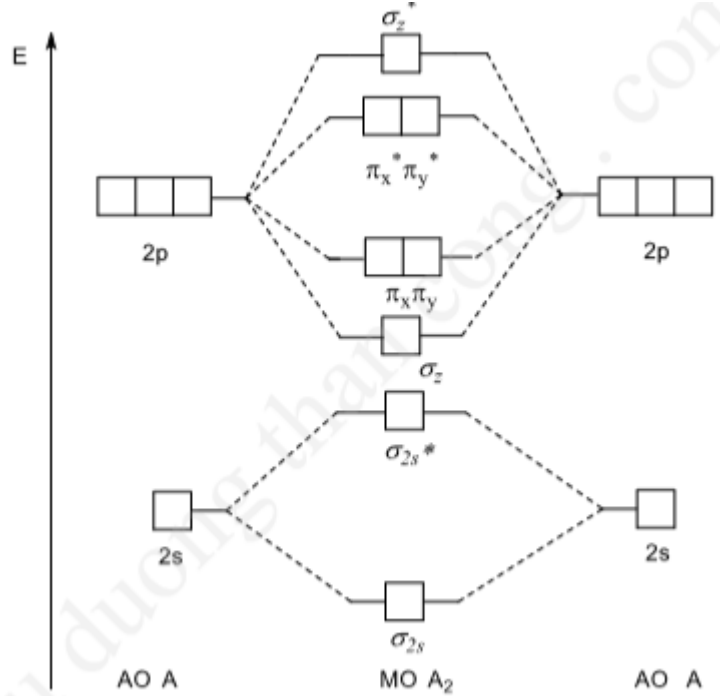
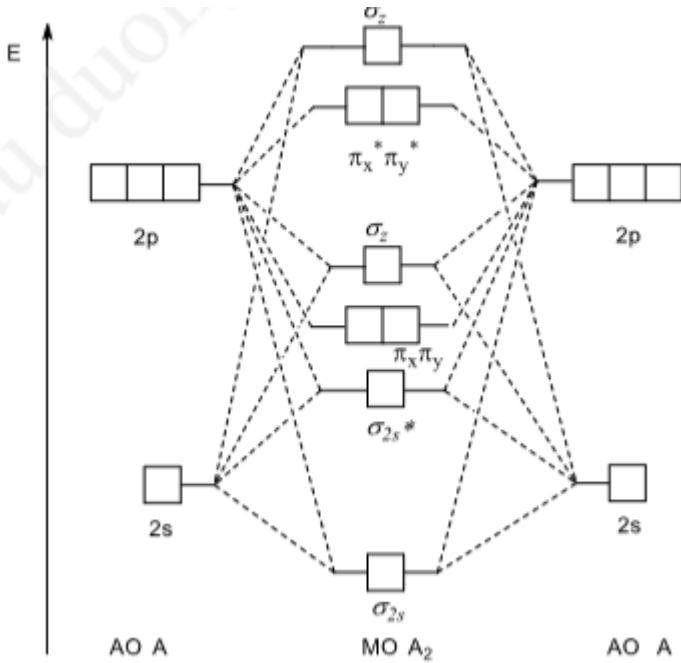
- ĐK tổ hợp AO:
 - + AO cùng tính chất đối xứng
 - + Năng lượng của các AO xấp xỉ nhau
 - + Các AO xen phủ hiệu quả

- Cách xếp e vào MO: tuân theo nguyên lí vững bền, nguyên lí loại trừ Pauli và quy tắc Hund

- Giải đề các nguyên tố chu kì 2: chọn trục z làm trục liên nhân

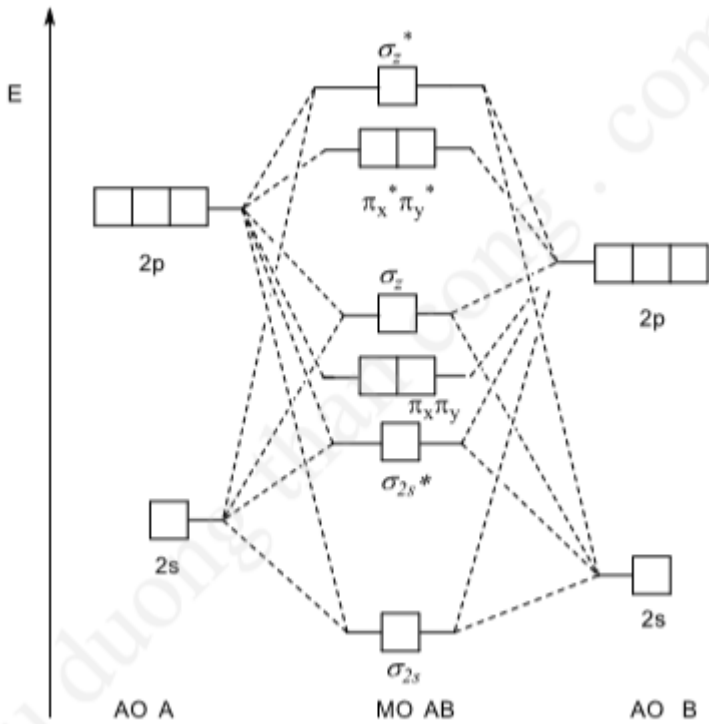
+ Các nguyên tố đầu chu kì dạng A_2 : Li \rightarrow N

+ Các nguyên tố cuối chu kì dạng A_2 : O \rightarrow F



Thảo Lê BKĐCMP

+ Phân tử AB có độ âm điện của B > A:



- Ứng dụng phương pháp MO

+ Bậc liên kết: $p = \frac{N - N^*}{2}$

trong đó: N : số e trên MO liên kết

N* : số e trên MO phản liên kết

Nếu $p > 0$ thì phân tử tồn tại, $p \leq 0$ thì phân tử không tồn tại theo thuyết MO

→ Bậc liên kết càng lớn thì liên kết càng bền và độ dài liên kết càng ngắn.

+ Nếu phân tử còn e độc thân sẽ thuận từ, nếu ghép đôi hết là nghịch từ

+ So sánh I_1 : nếu e được điền vào MO phản liên kết thì I_1 của phân tử nhỏ hơn nguyên tử tạo thành nó, nếu e chỉ được điền vào MO liên kết thì ngược lại.

- Liên kết Hidro: là liên kết của H với O, N, F (còn đôi e chưa liên kết) → làm tăng tính tan trong nước, nhiệt độ sôi, nhiệt độ nóng chảy

- Momen lưỡng cực : $\mu = q \cdot l$ và $q = \delta \cdot e$

Trong đó: q: giá trị tuyệt đối điện tích

l: độ dài liên kết

δ : % độ ion