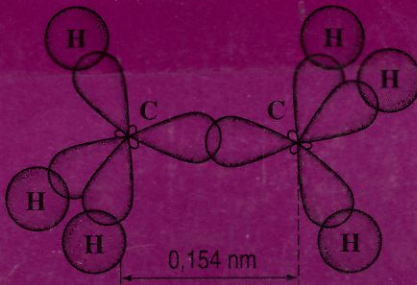


NGUYỄN ĐÌNH CHI

# CƠ SỞ LÍ THUYẾT HÓA HỌC

(Dùng cho các trường đại học kĩ thuật)

## PHẦN I CẤU TẠO CHẤT



NHÀ XUẤT BẢN GIÁO DỤC

P.G.S NGUYỄN ĐÌNH CHI

# CƠ SỞ LÝ THUYẾT HÓA HỌC

(Dùng cho các trường đại học kỹ thuật)

PHẦN I

CẤU TẠO CHẤT

(Tái bản lần thứ mười bốn)

NHÀ XUẤT BẢN GIÁO DỤC

## LỜI NÓI ĐẦU

Theo kế hoạch thực hiện chương trình I của Bộ Giáo dục và Đào tạo, sách giáo khoa "Cơ sở lý thuyết hóa học" được xuất bản để phục vụ việc giảng dạy và học tập môn Hóa học ở giai đoạn I của các trường đại học kỹ thuật. Sách gồm 2 phần :

- Phần I : Cấu tạo chất
- Phần II : Các quá trình hóa học.<sup>(1)</sup>

Cuốn sách này trình bày các kiến thức về cấu tạo chất theo chương trình môn học "Cơ sở lý thuyết hóa học" đã được hội đồng môn học môn Hóa học thông qua. Nội dung cuốn sách gồm những kiến thức cơ bản về cấu tạo nguyên tử, cấu tạo phân tử, liên kết hóa học và các trạng thái tập hợp. Đó là những kiến thức cần thiết chuẩn bị cơ sở cho sinh viên có thể tiếp thu được các môn hóa học khác và các môn kỹ thuật.

Việc giảng dạy cấu tạo chất ở những năm đầu của chương trình đại học cho đến nay vẫn còn là vấn đề nan giải. Đó là do mâu thuẫn giữa yêu cầu trang bị kiến thức sâu, rộng của chuyên đề này với sự hạn chế về thời gian và mức độ chuẩn bị về toán và vật lý của sinh viên trong những năm học đầu tiên ở đại học.

Theo tinh thần của chương trình môn học, cuốn sách chỉ bao gồm những phần kiến thức cơ bản nhất giúp cho sinh viên hiểu được các quy luật trong cấu tạo chất để tiếp tục học các

---

(1) Phần II do P.G.S. Nguyễn Hạnh viết, Nhà xuất bản Đại học và GDCN đã xuất bản năm 1990.

môn khác ở giai đoạn hai. Một vài phần được viết sâu hơn (cách giải phương trình Schrodinger, giới thiệu phép tính biến phân trong phương pháp MO) để giúp cho một số sinh viên giỏi có thể tham khảo thêm. Phần trạng thái tập hợp viết gọn, không trình bày các dạng cấu trúc, bạn đọc có thể tham khảo thêm ở cuốn "Cơ sở lý thuyết hóa học" (Nguyễn Đình Chi, Phạm Thúc Côn - N.X.B Đại học và THCN - in lần thứ 2 - HN - 1985).

Như đã nói, việc giảng dạy cấu tạo chất ở giai đoạn đầu của chương trình đào tạo đại học hiện nay vẫn là vấn đề thời sự của giáo dục hóa học đại học không chỉ ở Việt Nam mà cả trên thế giới. Khi chuẩn bị bản thảo, tác giả đã được nhiều bạn đồng nghiệp đóng góp ý kiến, tác giả xin bày tỏ lòng biết ơn chân thành. Tác giả cũng xin trân trọng cảm ơn các đồng chí cán bộ ở Vụ Đào tạo Đại học (bộ Giáo dục và Đào tạo) và nhà xuất bản Đại học và giáo dục chuyên nghiệp đã tạo nhiều thuận lợi cho việc xuất bản cuốn sách. Tác giả mong tiếp tục nhận được sự đóng góp ý kiến xây dựng của bạn đọc.

Hà Nội, ngày 20-12-1990

P.G.S. NGUYỄN ĐÌNH CHI

# MỞ ĐẦU

## 1. Đối tượng của hóa học

### 1.1. Đối tượng nghiên cứu của khoa học tự nhiên là vật chất

Vật chất tồn tại dưới hai hình thức là chất và trường.

Chất là hình thức tồn tại của vật chất dưới dạng những hạt có khối lượng như electron, proton, notron, nguyên tử, phân tử, tinh thể...

Trường là hình thức tồn tại của vật chất biểu hiện dưới dạng các lực tương tác giữa các vật hoặc dạng các tia, ví dụ lực hấp dẫn, bức xạ...

Giữa chất và trường không có sự đối lập mà có mối quan hệ thống nhất. Ví dụ ánh sáng vừa có bản chất hạt vừa có bản chất sóng.

### 1.2. Vật chất tồn tại trong vận động

Vận động là tính chất cố sẵn của vật chất. Trong vô số hình thức vận động của vật chất có thể phân chia ra 5 hình thức vận động cơ bản :

- Vận động cơ học : là sự chuyển đổi vị trí của vật.
- Vận động vật lý học thể hiện ở sự tương tác giữa các hạt cơ bản, ở các hiện tượng nhiệt, điện, từ...
- Vận động hóa học liên quan đến sự hình, thành và phá vỡ các mối liên kết giữa các nguyên tử, tương ứng với hiệu ứng năng lượng từ vài  $J/mol$  đến hàng trăm  $kJ/mol$ .
- Vận động sinh vật học liên quan đến sự biến đổi các chất sống và các hoạt động sống của sinh vật.
- Vận động xã hội.

Các dạng vận động đó liên quan mật thiết với nhau và có thể chuyển hóa lẫn ra nhau.

Mỗi dạng vận động tương ứng với một trình độ tổ chức của vật chất. Tùy thuộc vào trình độ tổ chức của mình mỗi đối tượng vật chất có một hình thức vận động chính và những hình thức vận động thấp hơn. Ví dụ cơ thể sống có dạng vận động sinh vật học là chính (tương ứng với tổ chức tế bào) đồng thời có các dạng vận động hóa học, vật lý học, cơ học.

Thước đo vận động là năng lượng. Các dạng vận động có thể chuyển hóa lẫn ra nhau nên các dạng năng lượng cũng có thể chuyển hóa lẫn ra nhau.

Vật chất luôn luôn được bảo toàn, vận động cũng được bảo toàn cho nên năng lượng cũng được bảo toàn. Đó là nội dung của định luật bảo toàn vật chất và năng lượng.

**1.3. Hóa học** là một bộ phận của khoa học tự nhiên nghiên cứu dạng vận động hóa học của vật chất. Dạng vận động hóa học của vật chất liên quan với sự hình thành và phá vỡ các mối liên kết giữa các nguyên tử, thực chất đó là sự phân bố lại electron hóa trị giữa các nguyên tử đồng thời với sự sắp xếp lại các nguyên tử trong không gian. Quá trình đó dẫn đến sự biến đổi chất này thành chất khác kèm theo sự giải phóng hoặc hấp thụ năng lượng. Những quá trình như vậy được gọi là quá trình hóa học. Trong quá trình hóa học, bản chất của nguyên tử (đặc trưng bằng điện tích hạt nhân) không bị biến đổi.

Như vậy có thể xác định đối tượng của hóa học : hóa học là khoa học nghiên cứu sự phụ thuộc của tính chất các chất vào thành phần và cấu tạo của chúng và những quá trình liên quan đến sự biến đổi các chất.

## **2. Mối quan hệ giữa hóa học với các ngành khoa học khác. Vai trò của hóa học trong đời sống và kĩ thuật**

**2.1. Một đặc điểm của nền khoa học và kĩ thuật hiện đại** là việc xem xét toàn diện đối tượng nghiên cứu

bằng cách áp dụng một cách tổng hợp các quan điểm và phương pháp của nhiều ngành khoa học, do đó các ngành khoa học vừa chuyên môn hóa sâu sắc hơn lại vừa xâm nhập vào nhau mạnh mẽ hơn.

Khoa học hóa học với quan điểm và phương pháp của mình đóng góp phần quan trọng vào việc hình thành phương pháp tư duy khoa học hoàn thiện và chính xác. Phong cách tư duy hóa học dựa trên cơ sở mối quan hệ biện chứng giữa tính chất và khả năng biến đổi của các chất với cấu trúc hóa học của chất.

Các quan niệm và khái niệm cơ bản của hóa học được áp dụng để tìm hiểu và xây dựng quan điểm lý thuyết cho nhiều ngành khoa học khác như vật lý học, sinh vật học, địa chất học... và các lĩnh vực kỹ thuật khác nhau. Các phương pháp nghiên cứu hóa học được sử dụng rộng rãi trong nhiều ngành khoa học và kỹ thuật.

Bản thân hóa học cũng áp dụng nhiều thành tựu của các ngành khoa học khác. Các phương pháp toán học ngày càng có vị trí quan trọng trong phát triển hóa học do sự chuyển mạnh phương pháp nghiên cứu hóa học từ định tính sang định lượng. Nhiều thành tựu lý thuyết của vật lý học đã trở thành nền tảng lý luận của các lý thuyết hóa học, nhiều phương pháp vật lý đã trở thành phương pháp nghiên cứu chủ yếu của hóa học.

**2.2. Ngày nay những thành tựu của hóa học có ảnh hưởng mạnh mẽ đến mọi lĩnh vực hoạt động của con người.** Trong sinh hoạt bình thường mỗi người đều luôn luôn tiếp xúc với các chế phẩm hóa học. Trong kỹ thuật, vấn đề vật liệu, một vấn đề sống còn của loài người, chỉ có thể giải quyết được trên cơ sở các thành tựu của hóa học. Người ta đã và đang tìm tòi các loại vật liệu mới có tính chất ưu việt hơn hẳn các vật liệu tự nhiên. Nhiều vật liệu truyền thống sau khi được chế hóa hóa học trở nên có giá trị sử dụng cao hơn trước rất nhiều. Về mặt năng lượng, hóa học góp phần tạo ra các nguồn năng lượng mới và nâng cao hiệu suất sử dụng các nguồn năng lượng hiện có bằng cách góp phần cải tiến các quá trình công nghệ. Hóa học cũng đóng góp phần quyết định vào việc bảo vệ và cải thiện môi trường sống cho con người. Việc hóa học hóa nền nông nghiệp là một biện pháp chủ yếu đảm bảo sự phát triển mạnh mẽ nông nghiệp.

### 3. Các khái niệm cơ bản của hóa học - đơn vị đo

#### 3.1. Các khái niệm cơ bản

Ngày nay khoa học đã chứng minh rằng các chất cấu tạo từ nguyên tử và phân tử. Mỗi nguyên tử có một hạt nhân mang điện tích dương xác định. Tập hợp các nguyên tử có cùng điện tích hạt nhân là một nguyên tố hóa học. Các nguyên tử có thể kết hợp với nhau tạo thành phân tử nhờ các mối liên kết hóa học.

Phản ứng hóa học là quá trình biến đổi các chất này thành các chất khác.

#### 3.2. Đơn vị đo

Ngoài những thứ đơn vị thường dùng chung cho nhiều ngành, trong hóa học còn hay dùng một số đơn vị sau :

a) *Mol* : là lượng chất có chứa số phân tử, số nguyên tử, số ion, số electron... hay nói chung là số đơn vị cấu trúc (hạt) bằng số nguyên tử  $^{12}\text{C}$  có, trong 12 gam đồng vị cacbon - 12, tức là bằng số *Avogadro* ( $N_0 = 6,0229 \cdot 10^{23}$ ).

Khi dùng khái niệm mol cần phải xác định rõ đơn vị cấu trúc hay hạt đơn vị là gì. Ví dụ một mol hidro-nguyên tử có khối lượng bằng 1,0079 gam, 1 mol hidro - phân tử có khối lượng bằng 2,0158 gam.

b) *Đương lượng* :

- *Đương lượng của một nguyên tố là lượng nguyên tố đó có thể kết hợp hoặc thay thế một mol nguyên tử hidro trong phản ứng hóa học.*

Ví dụ trong các hợp chất : HF, H<sub>2</sub>O, NH<sub>3</sub>, CH<sub>4</sub> đương lượng của các nguyên tố F, O, N, C lần lượt bằng 1 mol nguyên tử, 1/2 mol nguyên tử, 1/3 mol nguyên tử, 1/4 mol nguyên tử của các nguyên tố đó.

- *Khối lượng đương lượng (hay đương lượng khối) của một nguyên tố là khối lượng tính ra gam của một đương lượng của nguyên tố đó.*



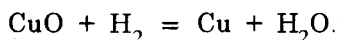
Khối lượng đương lượng (kí hiệu là  $D$ ) của nguyên tố được tính từ khối lượng mol nguyên tử ( $A$ ) và hóa trị ( $n$ ) của nguyên tố theo công thức :

$$D = \frac{A}{n} \quad (0-1)$$

Nếu nguyên tố có nhiều trạng thái hóa trị thì nó có nhiều trị số đương lượng. Ví dụ Fe có  $A = 55,84$ , ứng với 3 trạng thái hóa trị : 2, 3, 6 có 3 trị số đương lượng là 27,92 ; 18,61 ; và 9,31.

- Khái niệm đương lượng được áp dụng cả cho các hợp chất. Đương lượng của một hợp chất là lượng chất đó tương tác vừa đủ với một đương lượng của hidro hay của một chất bất kỳ khác.

Ví dụ : trong phản ứng giữa CuO và  $H_2$  :



Đương lượng của CuO bằng 1/2 mol phân tử CuO.

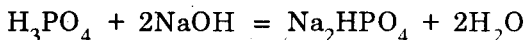
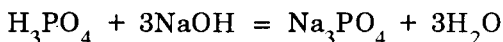
Khối lượng đương lượng (hay đương lượng khối) của một hợp chất là khối lượng đương lượng của hợp chất đó tính ra gam.

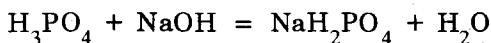
Khối lượng đương lượng ( $D$ ) của một hợp chất có thể tính từ khối lượng mol phân tử ( $M$ ) theo công thức sau :

$$D = \frac{M}{n} \quad (0-2)$$

trong đó  $n$  có ý nghĩa khác nhau tùy từng loại phản ứng.

Đối với các phản ứng trao đổi,  $n$  là tổng số đơn vị điện tích (tính ra đơn vị  $|e|$ ) mà phân tử hợp chất trao đổi với các phân tử khác. Ví dụ đương lượng khối của  $H_3PO_4$  trong 3 phản ứng sau :





lần lượt bằng  $\frac{M}{3}, \frac{M}{2}, M$ .

Trong phản ứng trao đổi,  $n$  của axit bằng số nguyên tử H (hay ion  $\text{H}^+$ ) của phân tử axit tham gia phản ứng,  $n$  của bazơ bằng số nhóm OH (hay ion OH) của "phân tử" bazơ tham gia phản ứng,  $n$  của muối bằng tổng số điện tích của các ion dương trong "phân tử" muối tham gia phản ứng.

- Đối với phản ứng oxi hóa - khử,  $n$  được tính bằng số electron mà một phân tử chất đó trao đổi với chất khác.

- Từ các lý luận trên có thể suy ra *định luật đương lượng*: Các chất tương tác với nhau hay thay thế nhau theo những lượng tỷ lệ với đương lượng của chúng.

Ví dụ: Khi  $m_A$  gam chất A tương tác (hay thay thế) với  $m_B$  gam chất B thì ta có:

$$\frac{m_A}{m_B} = \frac{D_A}{D_B} \quad (0-3)$$

## CÂU HỎI

1. Mol là gì? Tính khối lượng (ra gam) của một mol phân tử clo và 1 mol nguyên tử clo.

2. Đương lượng là gì? Thế nào là đương lượng khối của 1 nguyên tố và một hợp chất?

3. Viết công thức tính đương lượng khối của đơn chất từ khối lượng nguyên tử và công thức tính đương lượng khối của axit, bazơ, muối từ khối lượng phân tử.

4. Phát biểu định luật đương lượng. Viết công thức toán học của định luật đương lượng.

5. Viết công thức tính đương lượng của một chất trong phản ứng oxi hóa-khử.

## BÀI TẬP

1. Tính đương lượng của Fe trong phản ứng hòa tan Fe vào dung dịch HCl và phản ứng hòa tan Fe vào dung dịch HNO<sub>3</sub> (tạo ra khí NO). Tính đương lượng của axit trong mỗi phản ứng đó.

$$Ds : D_{Fe} = 28, D_{HCl} = 36,5, D_{HNO_3} = 84.$$

2. Viết các phương trình phản ứng giữa H<sub>3</sub>PO<sub>4</sub> và Ba(OH)<sub>2</sub>. Tính đương lượng của mỗi chất trong các phản ứng.

$$Ds : D_{H_3PO_4} = 98; 49; 32,67. D_{Ba(OH)_2} = 85,5; 171.$$

3. Viết phương trình phản ứng hòa tan FeO trong dung dịch HNO<sub>3</sub> (tạo thành NO). Tính đương lượng của FeO trong phản ứng.

$$Ds : 72$$

4. Một hợp kim A cấu tạo từ kim loại R và magiê, thành phần khối lượng mỗi kim loại là 50%. Hòa tan 7,2 gam A vào dung dịch HNO<sub>3</sub> thì có 4,032 lít khí NO bay ra (đktc).

Tính đương lượng của R.

$$Ds : 15$$

5. Để trung hòa 100 gam dung dịch HCl 14,6% đã dùng hết  $m$  gam oxit kim loại R và thu được 19 gam muối clorua.

a) Tính  $m$  và  $D$  của R.

b) Khi hòa tan 0,25 mol R vào nước cường toan (dung dịch hỗn hợp HNO<sub>3</sub> và HCl) có 10 gam khí A bay ra và tạo thành muối clorua. Khí A là oxit của nitơ trong đó  $D_N = 7$ . Hãy tính khối lượng nguyên tử của R và khối lượng muối clorua tạo thành. Tính  $D_{HNO_3}$  trong phản ứng hòa tan R.

$$Ds : a) 8g \text{ và } 20.$$

$$b) A = 48; 47,5 \text{ gam muối.}$$

$$c) 21.$$

## Chương I

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

### 1. Sự phức tạp của nguyên tử

Ngày nay giả thuyết về nguyên tử của thế kỷ 19 đã trở thành một thực tế thực nghiệm. Các nguyên tử có kích thước vào cỡ  $10^{-10}m$  (1Å) và có khối lượng vào cỡ  $10^{-23}$  gam<sup>(1)</sup>.

Đến cuối thế kỷ 19 có nhiều hiện tượng thực nghiệm cho thấy nguyên tử cấu tạo phức tạp từ những loại hạt cơ bản khác nhau.

#### 1.1. Các hạt cơ bản tạo thành nguyên tử

- *Electron* (còn gọi là điện tử, ký hiệu là e) do nhà vật lý học Anh J.J Thomson tìm ra năm 1897. Electron có khối lượng bằng  $1/1837$  đ.v.C hay  $9,1095.10^{-28}$  gam và mang điện tích âm bằng  $-1,6021.10^{-19}$  culông (-e).

- *Proton* (p) có khối lượng bằng 1,00728 đ.v.C hay  $1,672.10^{-24}$  gam. Proton mang điện tích dương +e.

- *Notron* (n) có khối lượng bằng 1,00867 đ.v.C hay  $1,675.10^{-24}$  gam, nơtron không mang điện tích.

---

(1) Để đo khối lượng nguyên tử người ta dùng đơn vị cacbon (đ.v.C). 1 đ.v. C =  $1/12$  khối lượng nguyên tử  $^{12}C$ . 1 đ.v.C =  $1,66043.10^{-24}$  gam.

## 1.2. Mô hình nguyên tử có hạt nhân

Bằng thí nghiệm dùng hạt  $\alpha$  bắn qua lá kim loại mỏng, năm 1911 nhà bác học Anh E. Rutherford đã khám phá ra hạt nhân nguyên tử và đề xuất mô hình nguyên tử có hạt nhân (hay mô hình nguyên tử theo hệ mặt trời). Theo mô hình này mỗi nguyên tử có một hạt nhân mang điện tích dương và các electron quay chung quanh. Hạt nhân cấu tạo từ các hạt  $p$  và  $n$  (đặc biệt hạt nhân nguyên tử H chỉ cấu tạo từ một hạt  $p$ ). Trong hạt nhân, các hạt  $p$  và  $n$  liên kết với nhau bằng một loại lực đặc biệt gọi là *lực hạt nhân*. Điện tích hạt nhân ( $Z$ ) bằng đúng số  $p$  có trong hạt nhân.

Hạt nhân nguyên tử có đường kính cỡ  $10^{-13} \text{ cm} + 10^{-12} \text{ cm}$  trong khi kích thước nguyên tử vào cỡ  $10^{-8} \text{ cm}$ .

Vì khối lượng electron rất nhỏ nên hầu hết khối lượng nguyên tử tập trung ở hạt nhân.

Điện tích hạt nhân ( $Z$ ) (khi tính ra đơn vị  $|e|$ ) được xác định bằng thực nghiệm theo công thức Moseley :

$$\sqrt{\gamma} = a(Z-b) \quad (1-1)$$

$\gamma$  là tần số quang phổ tia Roenghent phát ra bởi nguyên tử đó khi bị kích thích,  $a$  và  $b$  là các hằng số đặc trưng cho vạch quang phổ tương ứng.

## 2. Mô hình nguyên tử Bohr

**2.1. Lượng tử năng lượng.** Trước đây người ta coi năng lượng có tính chất liên tục, quá trình phát và hấp thụ năng lượng có tính chất liên tục. Năm 1900, để giải thích các qui luật về hấp thụ và phát xạ của các vật đen tuyệt đối nhà vật lý học Đức M. Planck đã phát biểu giả thuyết : *Năng lượng bức xạ được giải phóng hoặc hấp thụ dưới dạng những lượng gián đoạn gọi là các lượng tử năng lượng.*

Với tia đơn sắc có tần số  $\gamma$  và bước sóng  $\lambda$  thì lượng tử năng lượng có trị số bằng :

$h$  là hằng số Planck có giá trị bằng  $6,6256 \cdot 10^{-34} \text{ J.s}$

Ngày nay khái niệm lượng tử năng lượng là một trong những khái niệm cơ bản quan trọng nhất của khoa học tự nhiên.

## 2.2. Mô hình nguyên tử Bohr

Khi áp dụng quan niệm lượng tử năng lượng để xem xét cấu tạo quang phổ vạch của nguyên tử hydro, nhà bác học Đan Mạch N.Bohr đã đề xuất mô hình nguyên tử với nội dung chính như sau :

a) Trong nguyên tử, electron chỉ có thể chuyển động trên những quỹ đạo xác định có bán kính xác định. Khi quay trên các quỹ đạo đó năng lượng của electron được bảo toàn.

b) Mỗi quỹ đạo ứng với 1 mức năng lượng của electron. Quỹ đạo gần nhân nhất ứng với mức năng lượng thấp nhất. Quỹ đạo càng xa nhân ứng với mức năng lượng càng cao.

Áp dụng quan niệm lượng tử hóa năng lượng của Planck vào nguyên tử, Bohr đã lượng tử hóa momen động lượng của electron và từ đó giải bài toán cơ học đối với nguyên tử hydro. Kết quả cho thấy năng lượng của electron khi quay trên quỹ đạo trong nguyên tử hydro được tính bằng công thức :

$$E_n = - \frac{1}{8 \epsilon_0^2} \cdot \frac{m e^4}{h^2} \cdot \frac{1}{n^2} \quad (1-3)$$

trong đó :  $\epsilon_0$  là hằng số điện môi của chân không được cho bởi :

$$\frac{1}{4 \pi \epsilon_0} = 9 \cdot 10^9 \text{ SI} \quad (\epsilon_0 = 8,854 \cdot 10^{-12} \frac{\text{C}^2}{\text{J.m}})$$

$m$  : khối lượng electron ;

$e$  : trị tuyệt đối của điện tích electron ;

$h$  : hằng số Planck,

$n$  : một số nguyên có thể lấy các giá trị dương : 1, 2, 3...

Như vậy năng lượng của electron trong nguyên tử đã bị lượng tử hóa. Ứng với  $n$  càng lớn, mức năng lượng  $E_n$  của các electron càng cao và các mức càng sát vào nhau.

c) Khi electron chuyển từ quỹ đạo này sang quỹ đạo khác thì xảy ra sự hấp thụ hoặc giải phóng năng lượng. Electron hấp thụ năng lượng khi chuyển từ quỹ đạo gần nhân ra quỹ đạo xa nhân hơn và giải phóng năng lượng khi chuyển theo chiều ngược lại.

Lượng tử năng lượng của bức xạ được giải phóng hoặc hấp thụ bằng hiệu giữa hai mức năng lượng và có tần số (và bước sóng) được xác định bằng công thức (khi electron chuyển từ mức  $n$  đến mức  $n'$ ) ;

$$\varepsilon = h \gamma = h \frac{c}{\lambda} = E_n - E_{n'} \quad (1-4)$$

với  $E_n$  và  $E_{n'}$  được tính theo (1-3).

### 2.3. Kết quả và hạn chế của thuyết Bohr

a) Thuyết Bohr cho phép giải thích được quang phổ, cấu tạo quang phổ vạch của nguyên tử hydro và những nguyên tử giống hydro.

Nó cũng cho phép tính được bán kính nguyên tử hydro ở trạng thái cơ bản :

$$a = 0,529 \cdot 10^{-10} \text{ m} = 0,529 \cdot 10^{-8} \text{ cm} = 0,529 \text{ \AA}.$$

$a$  được gọi là bán kính nguyên tử Bohr.

b) Tuy nhiên thuyết Bohr có những hạn chế :

- Không giải thích được cấu tạo của quang phổ của các nguyên tử phức tạp.

- Không giải thích được sự tách các vạch quang phổ dưới tác dụng của điện trường và từ trường.

- Về mặt tư tưởng lý thuyết các giả thuyết của Bohr có tính chất độc đoán.

Về sau này người ta tìm cách bổ sung (ví dụ Sommerfeld) cho thuyết Bohr một số giả thuyết và thu được một số kết quả,

nhưng chúng ta không xem xét các giả thuyết đó trong giáo trình này, mà sẽ nghiên cứu những quan niệm của cơ học lượng tử áp dụng cho cấu tạo nguyên tử.

### 3. Tính chất sóng của hạt vimô. Cách mô tả trạng thái của hạt vi mô. Khái niệm về cơ học lượng tử

#### 3.1. Lượng tử sóng - hạt của ánh sáng.

Vào cuối thế kỷ 19, đầu thế kỷ 20 có nhiều bằng chứng thực nghiệm chứng tỏ ánh sáng có lưỡng tính sóng - hạt.

Bản chất hạt của ánh sáng thể hiện ở :

- Hiệu ứng *quang điện*.
- Hiệu ứng *Compton*.

Trong các hiệu ứng này ánh sáng thể hiện tính chất như các dòng hạt có khối lượng và xung lượng xác định với động năng tính bằng công thức :

$$\varepsilon = mc^2 \quad (1-5)$$

$m$  là khối lượng hạt ánh sáng ;  $c$  là vận tốc truyền ánh sáng.

Bản chất sóng của ánh sáng thể hiện trong các hiện tượng *nhiều xạ* và *giao thoa*, trong đó ánh sáng thể hiện tính chất như những sóng truyền đi trong không gian với vận tốc  $c$  và bước sóng  $\lambda$ , tần số  $\gamma$  xác định, liên hệ với nhau theo công thức :

$$c = \lambda \gamma \quad (1-6)$$

Sự thống nhất tính chất hạt và sóng của ánh sáng dẫn đến hệ thức Einstein biểu diễn mối quan hệ giữa khối lượng ( $m$ ) với tần số ( $\gamma$ ).

$$\varepsilon = h\gamma = mc^2 = mc \cdot \lambda \gamma$$

do đó có :

$$\lambda = \frac{h}{mc} \quad (1-7)$$



### 3.2. Tính chất sóng của các hạt vi mô

a) Năm 1924 nhà vật lí học Pháp Louis de Broglie mở rộng quan niệm về lưỡng tính sóng - hạt bằng giả thuyết : mọi hạt vật chất chuyển động đều có thể coi như quá trình sóng đặc trưng bằng bước sóng  $\lambda$  được tính theo hệ thức de Broglie :

$$\lambda = \frac{h}{mv} \quad (1-8)$$

trong đó :  $m$  là khối lượng hạt,  $v$  là vận tốc chuyển động của hạt.

Năm 1927 các nhà vật lí học Germer và K.J. Davisson quan sát thấy hiện tượng nhiễu xạ đối với chùm electron. Sau đó các hiện tượng nhiễu xạ cũng được quan sát thấy đối với các phân tử  $H_2$ , He... Như vậy giả thuyết de Broglie được hoàn toàn xác nhận.

b) Nguyên lí bất định. Từ tính chất sóng của các hạt vi mô, năm 1927 nhà vật lí Đức W. Heisenberg chứng minh được nguyên lí bất định : Về nguyên tắc không thể xác định đồng thời chính xác cả tọa độ và vận tốc của hạt, do đó không thể vẽ hoàn toàn chính xác quỹ đạo chuyển động của hạt.

Từ đó có thể chứng minh ra hệ thức bất định :

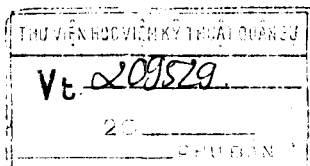
$$\Delta x \cdot \Delta v_x \geq \frac{h}{m} \quad (1-9)$$

trong đó :  $\Delta x$  là sai số của phép đo tọa độ theo phương  $x$ .

$\Delta v_x$  là sai số của phép đo thành phần vận tốc của hạt theo phương  $x$ .

$m$  là khối lượng của hạt ;  $h$  là hằng số Planck.

Do lưỡng tính sóng - hạt nên trong việc nghiên cứu và mô tả chuyển động của các hạt vi mô không thể dùng cơ học cổ điển (cơ học Newton) mà phải xây dựng một môn cơ học mới là cơ học lượng tử.



### 3.3. Khái niệm về cơ học lượng tử

Trong cơ học cổ điển để mô tả trạng thái chuyển động của một vật tại một thời điểm người ta chỉ cần biết vận tốc và tọa độ của vật ở thời điểm đó (3 thành phần vận tốc, 3 thành phần tọa độ khi vật chuyển động trong không gian 3 chiều), và nếu biết các định luật điều khiển chuyển động của vật ta sẽ biết được sự tiến triển tương lai của vật (giống như trong thiên văn, nếu biết vị trí của các hành tinh ở một thời điểm và biết các lực hấp dẫn tác dụng lên hành tinh này thì ta có thể tiên đoán vị trí của các hành tinh đó trong tương lai, tức là vẽ được quỹ đạo chuyển động của hành tinh).

Đối với các hạt vi mô, do tính chất sóng nên không còn khái niệm quỹ đạo, mặt khác việc xác định tọa độ và vận tốc hạt luôn luôn nằm trong một mức độ bất định nào đó nên kết quả khảo sát mang tính chất thống kê. Vì vậy, cơ học lượng tử sử dụng phương pháp khảo sát khác dựa vào những khái niệm sau đây :

a) *Hàm sóng* : Trạng thái chuyển động của hạt vi mô (ví dụ electron trong nguyên tử) được mô tả bằng một hàm số  $\psi(x, y, z, t)$  được gọi là *hàm sóng*.

Hàm sóng có thể là hàm thực hay hàm phức, có ý nghĩa vật lý như sau :

$|\psi(x, y, z, t)|^2 dx dy dz$  cho biết xác suất tìm thấy hạt tại thời điểm  $t$ , trong nguyên tố thể tích  $d\tau = dx dy dz$  có tâm là  $M(x, y, z)$ .

Trong cơ học lượng tử không còn khái niệm quỹ đạo nên người ta tìm cách xác định xác suất tìm thấy hạt ở các điểm khác nhau trong không gian.

Nếu trạng thái của hạt không phụ thuộc thời gian (được gọi là trạng thái dừng) thì hàm sóng không phụ thuộc thời gian  $t$ . Khi đó  $|\psi(q)|^2$  biểu thị mật độ xác suất tìm thấy hạt tại điểm có tọa độ  $q$ , chỉ phụ thuộc vào tọa độ. ( $q$  là kí hiệu tổng quát chỉ tọa độ).

Vì xác suất tìm hạt trong toàn bộ không gian là bằng 1 nên

$$\int_{\Omega} |\psi|^2 d\tau = 1. \quad (1-10)$$

Điều kiện này được gọi là *điều kiện chuẩn hóa* của hàm sóng.

b) *Bộ đầy đủ các đại lượng vật lí.* Trạng thái xác định của hạt được mô tả bằng hàm sóng  $\Psi(q)$ . Khi đó một số đại lượng vật lí đặc trưng cho trạng thái của hạt cũng có giá trị xác định. Số đại lượng vật lí độc lập với nhau (tức là không phải là hàm của nhau) lập thành *bộ đầy đủ các đại lượng vật lí* đặc trưng cho trạng thái của hạt.

c) *Phương trình Schrodinger.*

Để tìm được hàm sóng người ta giải phương trình sóng, còn gọi là phương trình Schrodinger, do Schrodinger thiết lập lần đầu tiên vào năm 1926. Đó là phương trình vi phân của hàm  $\Psi$ , có dạng như sau đối với hạt (electron) chuyển động trong 1 trường thế  $V$  (điện trường)

$$\left( -\frac{\hbar^2}{8\pi^2m} \Delta + V \right) \psi = E\psi \quad (1-11)$$

Trong đó  $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$  được gọi là *toán tử Laplace*.

$V$  : thế năng của hạt.

$E$  : năng lượng toàn phần của hạt.

Trong trường hợp tổng quát có thể viết phương trình Schrodinger dưới dạng :

$$H\psi = E\psi \quad (1-12)$$

Phương trình này được xem như nguyên lí cơ bản của cơ học lượng tử.

## 4. Nguyên tử có một electron (Nguyên tử dạng hidro).

### 4.1. Phương trình Schrodinger.

Ta xét hệ gồm một electron điện tích  $-e$ , khối lượng  $m$  và một hạt nhân điện tích  $-Ze$ . Thế năng của electron bằng :

$$V(r) = - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

trong đó  $r$  là khoảng cách giữa tâm của electron và hạt nhân. Thế năng  $V$  chỉ phụ thuộc  $r$  nên trường thế có đối xứng tâm và là trường *Culong*.

Trong trường hợp gần đúng có thể coi như hạt nhân đứng yên, trọng tâm của hệ nguyên tử trùng với trọng tâm của hạt nhân và lấy tâm hạt nhân làm gốc tọa độ <sup>(1)</sup>. Khi đó ta chỉ xét chuyển động của electron trong không gian, dưới tác dụng của điện trường gây ra bởi điện tích của hạt nhân (trường *Culong*). Chuyển động này được gọi là *chuyển động Orbital*. Khi đó phương trình Schrodinger được viết như sau :

$$\left( -\frac{\hbar^2}{8\pi^2m} \Delta - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \psi = E\psi \quad (1-13)$$

Hàm  $\psi$  là nghiệm của (1-13) phải thỏa mãn các điều kiện : đơn trị, liên tục, hữu hạn trong toàn không gian.

Để thuận lợi cho việc giải, do tính đối xứng tâm của trường thế, người ta sử dụng hệ tọa độ cầu  $(r, \theta, \varphi)$  thay cho hệ tọa độ Descartes. Quan hệ giữa 2 hệ tọa độ như sau (xem hình 1-1)

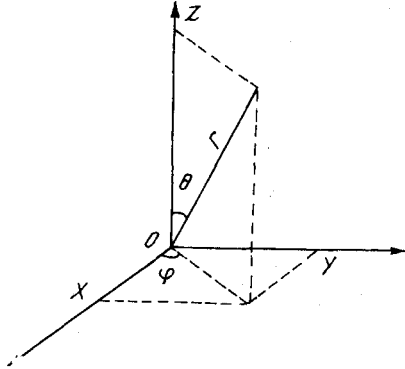
---

(1) Chính xác hơn, phải xét chuyển động của hệ electron và hạt nhân chung quanh trọng tâm của hệ được chọn làm gốc tọa độ. Khi đó trong phương trình Schrodinger, khối lượng  $m$  của electron được thay bằng khối lượng rút gọn  $\mu$  xác định theo.

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m} + \frac{1}{M} = \frac{mM}{m+M}$$

$M$  : khối lượng hạt nhân.

$$\begin{aligned}
 x &= r \sin\theta \cos\varphi \\
 y &= r \sin\theta \sin\varphi \\
 z &= r \cos\theta \\
 \text{với : } 0 &\leq r < \infty \\
 0 &\leq \theta < \pi \\
 0 &\leq \varphi < 2\pi
 \end{aligned}$$



Hình 1-1 : Quan hệ giữa hệ tọa độ cầu và hệ tọa độ Descartes.

Toán tử Laplace được viết trong tọa độ cầu như sau :

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad (1-14)$$

Khi đó hàm sóng  $\Psi$  cũng là hàm của các biến số  $r, \theta, \varphi$ .

**4.2. Giải phương trình Schrodinger.** Đặt hàm  $\psi(r, \theta, \varphi)$  dưới dạng :

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \cdot Y(\theta, \varphi) \quad (1-15)$$

Từ đó :

$$\frac{\partial \psi}{\partial r} = Y \frac{\partial R}{\partial r} ; \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} = Y \frac{\partial^2 R}{\partial r^2}$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} = R \frac{\partial^2 Y}{\partial \varphi^2} ; \frac{\partial \psi}{\partial \theta} = R \frac{\partial Y}{\partial \theta}$$

Đưa các biểu thức đạo hàm trên vào (1-14) và nhân với  $r^2/\psi = r^2/R Y$  sẽ được :

$$\Delta \psi = \frac{r^2}{R} \frac{\partial^2 R}{\partial r^2} + \frac{2r}{R} \frac{\partial R}{\partial r} + \frac{1}{Y \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin\theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{Y \sin^2\theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \varphi^2}$$

Từ đó phương trình Schrodinger trở thành có dạng :

$$f_1(r) + f_2(\theta, \varphi) = 0$$

Có thể đặt :

$$f_1(r) = A \text{ và } f_2(\theta, \varphi) = -A.$$

Như vậy phương trình vi phân (1-13) được tách thành 2 phương trình vi phân và được giải riêng.

Về mặt toán học có thể chứng minh được rằng Y sẽ thỏa mãn với mọi giá trị của  $\theta$  và  $\varphi$  nếu :

$$A = l(l + 1) \text{ với } l = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Phương trình vi phân  $f_1(r) = A$ , đối với các trường hợp năng lượng  $E < 0$ , chỉ có những nghiệm thỏa mãn điều kiện đơn trị, giới nội đối với một số trị số hoàn toàn xác định của  $E$  :

$$E_n = -\frac{1}{n^2} \cdot \frac{mZ^2e^4}{8\epsilon_0^2h^2} \quad (1-16)$$

$n$  là một số nguyên, dương :  $n = 1, 2, 3, \dots$

Phần xuyên tâm  $R(r)$  của hàm sóng phụ thuộc vào các tham số  $n$  và  $l$  ;  $n$  được gọi là số lượng tử chính,  $l$  được gọi là số lượng tử thứ 2 (còn gọi là số lượng tử phụ hay số lượng tử momen động lượng orbital).

$$l = 0, 1, \dots, n-1.$$

Phần góc của hàm sóng :  $Y(\theta, \varphi)$  phụ thuộc vào tham số  $m$  với  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$ .

$m$  được gọi là số lượng tử từ hay số lượng tử hình chiếu momen orbital.

### 4.3. Các số lượng tử - Bộ đầy đủ các đại lượng vật lí.

Việc tìm những nghiệm thỏa mãn các điều kiện đơn trị, giới nội và liên tục của hàm sóng làm xuất hiện những tham số nguyên, gọi là các số lượng tử :

số lượng tử chính :  $n = 1, 2, 3, \dots$

số lượng tử phụ :  $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$ .

số lượng tử từ :  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$ .

Các số lượng tử này có quan hệ với các đại lượng vật lý xác định trạng thái của electron trong nguyên tử.

a) Số lượng tử chính  $n = 1, 2, 3, \dots$  xác định năng lượng  $E_n$  của electron trong nguyên tử.

$$E_n = - \frac{1}{n^2} \cdot \frac{mZ^2e^4}{8\epsilon_0^2h^2} \quad (1-17)$$

Đối với nguyên tử hydro  $Z = 1$  ta có :

$$E_n = - \frac{1}{n^2} \cdot \frac{me^4}{8\epsilon_0^2h^2} \quad (1-17a)$$

nếu biểu diễn ra eV ta có công thức :

$$E_n = - \frac{13,6}{n^2} \text{ (eV)} \quad (1-17b)$$

Từ công thức (1-16) và (1-17) người ta suy ra các hệ quả sau :

- Vì  $n$  là những số nguyên dương nên năng lượng của electron trong nguyên tử chỉ có thể nhận những giá trị gián đoạn. Ứng với mỗi giá trị  $n$  ta có một mức năng lượng, khi  $n$  càng lớn trị số  $E_n$  càng cao (càng gần 0) và hiệu giữa 2 mức liên tiếp càng nhỏ, người ta kí hiệu :

$n$ :	1	2	3	4	5	6	7...
Mức $E_n$ :	K	L	M	N	O	P	Q...

- Bình thường electron ở trạng thái ứng với mức năng lượng thấp nhất ( $E_1$ ) khi đó nguyên tử ở trạng thái cơ bản. Khi cung cấp năng lượng cho electron (ví dụ bằng cách chiếu sáng, phóng điện, nung nóng...) thì electron nhận thêm năng lượng và chuyển lên mức cao hơn ( $E_n$ ), nguyên tử chuyển sang trạng thái kích thích.

Tuy nhiên trạng thái kích thích rất kém bền, chỉ tồn tại trong một thời gian rất ngắn (cỡ phần triệu giây) sau đó electron lại chuyển về mức năng lượng thấp  $E_1$  bằng nhiều cách, đồng thời giải phóng năng lượng  $\Delta E$  dưới dạng bức xạ điện từ (hình 1-1), ví dụ khi electron chuyển từ mức  $n'$  về mức  $n$ , sẽ phát ra một bức xạ có lượng tử năng lượng bằng :

$$h\nu = \Delta E = E_{n'} - E_n \quad (1-18)$$

b) *Độ lớn của momen động lượng orbital\**.

Trong cơ học cổ điển khi một vật quay trên một quỹ đạo tròn bán kính  $r$  với vận tốc  $v$  thì có động lượng bằng :

$$\vec{p} = m\vec{v} \quad (1-19)$$

và momen động lượng  $\vec{M}$  được tính bằng công thức :

$$\vec{M} = \vec{p} \wedge \vec{r} = m\vec{v} \wedge \vec{r} \quad (1-20)$$

dấu  $\wedge$  biểu diễn phép lập tích có hướng hay tích vectơ của 2 vectơ  $p$  và  $r$ .

$\vec{M}$  là một đại lượng vectơ nên để xác định được nó ta phải :

- hoặc xác định được độ lớn  $|\vec{M}|$ , phương, chiều của  $\vec{M}$ .
- hoặc xác định được cả 3 thành phần (hình chiếu) của  $\vec{M}$  :  $M_x, M_y, M_z$ .

Tuy nhiên cơ học lượng tử cho thấy đối với electron chuyển động trong nguyên tử không thể xác định được đầy đủ cả 3 thành phần đặc trưng của  $\vec{M}$ , mà chỉ có thể xác định được 2 trong 3 thành phần đó. Người ta xác định độ lớn  $|\vec{M}|$  và một hình chiếu  $M_z$ .

Việc giải bài toán chuyển động của electron trong nguyên tử (do tính chất đẳng hướng của không gian và của trường xuyên tâm) dẫn đến công thức tính  $|\vec{M}|$  :

---

\* Trong cơ học, những đại lượng vật lí (hay biến số cơ học) đặc trưng cho chuyển động thẳng là : quãng đường (s), vận tốc (v) lực (F), động lượng  $\vec{p} = m\vec{v}$ , những đại lượng đặc trưng cho chuyển động quay là : góc quay  $\alpha$ , vận tốc góc  $\omega$ , momen lực  $F r$ , momen động lượng  $M = pr$ .



$$|\vec{M}| = \sqrt{l(l+1)} \cdot \frac{h}{2\pi} \quad (1-21)$$

Ta có nhận xét :

- Vì  $l$  chỉ có thể nhận những giá trị nguyên từ 0, 1, ...,  $n - 1$  nên  $|\vec{M}|$  chỉ có thể nhận những giá trị gián đoạn, đó là sự lượng tử hóa momen động lượng.

$$l = 0 \quad |\vec{M}| = 0$$

$$l = 1 \quad |\vec{M}| = \sqrt{2} \frac{h}{2\pi}$$

$$l = 2 \quad |\vec{M}| = \sqrt{6} \frac{h}{2\pi} \text{ v.v...}$$

- Những electron ứng với cùng một mức năng lượng  $E_n$  có thể có  $n$  giá trị khác nhau của  $|\vec{M}|$

Người ta thường kí hiệu trạng thái electron ứng với các giá trị số khác nhau của  $l$  như sau :

$$l : 0 \quad 1 \quad 2 \quad 3 \dots$$

$$\text{trạng thái : } s \quad p \quad d \quad f \dots$$

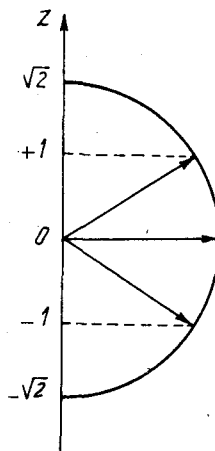
c) Hình chiếu của momen động lượng orbital lên trục  $z$  ( $M_z$ ) được

tính bằng công thức :

$$M_z = m \cdot \frac{h}{2\pi} \quad (1-22)$$

Nhận xét :

$M_z$  chỉ có thể nhận những giá trị gián đoạn ứng với các giá trị số gián đoạn của  $m$ . Nghĩa là vectơ  $\vec{M}$  không thể định hướng một cách bất kì trong không gian mà chỉ có một số cách định hướng xác định. Ví dụ sự định hướng của vectơ  $\vec{M}$  của electron có  $l = 1$  (electron  $p$ ) được biểu diễn trên hình 1-2.



Hình 1-2. Sự lượng tử hóa hình chiếu momen động lượng.

4.4. Hàm sóng. Các hàm riêng tức là nghiệm của phương trình  $H\Psi = E\Psi$  được gọi là các orbital nguyên tử (ta sẽ kí hiệu là A.O. viết tắt của thuật ngữ tiếng Anh : *atomic orbital*). Như đã nói ở 4-2, khi giải phương trình Schrodinger đối với nguyên tử 1 electron dẫn đến việc đặt :

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \cdot Y(\theta, \varphi).$$

Phép giải phương trình dẫn đến kết quả :

$$\psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi) = R_{n,l}(r) \cdot Y_{l,m}(\theta, \varphi). \quad (1-23)$$

Phần xuyên tâm  $R_{n,l}(r)$  chỉ phụ thuộc vào các số lượng tử  $n, l$ .

Phần góc  $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$  chỉ phụ thuộc vào các số lượng tử  $l, m$ .

Hai phần của hàm sóng có thể chuẩn hóa riêng.

Các biểu thức của các AO của nguyên tử hydro được trình bày trên bảng 1-1, trong đó  $a$  là bán kính nguyên tử hydro ở trạng thái cơ bản (gọi là bán kính nguyên tử Bohr).

*Chú ý* rằng việc giải phương trình Schrodinger dẫn đến nghiệm là các hàm phức, trong đó xuất hiện số lượng tử  $m$  như một tham số, để có nghiệm là hàm thực người ta tổ hợp tuyến tính các hàm phức, khi đó tham số  $m$  không được thể hiện.

Về mặt toán học số lượng tử chính xác định số nút của hàm sóng. Nút là điểm hay mặt mà ở đó hàm sóng đổi dấu. Như vậy hàm sóng triệt tiêu ở những điểm nút hay mặt nút, và xác suất tìm thấy electron ở đó bằng không. Số nút đối với hàm sóng  $\Psi$  bằng  $n - 1$ . Số nút này xuất hiện trong phần xuyên tâm  $R(r)$  hoặc trong phần góc  $Y(\theta, \varphi)$ . Số nút trong phần  $Y(\theta, \varphi)$  bằng  $l$ . Số nút trong phần  $R(r)$  bằng  $n - (l + 1)$ . Ví dụ đối với orbital s ( $l = 0$ ) thì phần  $Y(\theta, \varphi)$  không có nút, và phần  $R(r)$  có  $n - 1$  nút.

CÁC BIỂU THỨC CỦA MỘT SỐ AO CỦA NGUYÊN TỬ MỘT ELECTRON

$n$	$l$	AO	$R_{n,l}(r)$	$Y_{l,m}(\theta, \varphi)$	$E_n(eV)$
1	0	1s	$\frac{2z}{a^{3/2}} e^{-zr/a}$	$\frac{1}{2\sqrt{\pi}}$	$-13,6.Z^2$
2	0	2s	$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{z}{2a}\right)^{3/2} \left(1 - \frac{zr}{2a}\right) e^{-zr/2a}$	$\frac{1}{2\sqrt{\pi}}$	$-3,4.Z^2$
2	1	$2p_x$	$\frac{1}{2\sqrt{6}} \left(\frac{z}{a}\right)^{3/2} \frac{zr}{a} e^{-zr/2a}$	$\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} \sin\theta \cos\varphi$	$-3,4.Z^2$
2	1	$2p_y$	$\frac{1}{2\sqrt{6}} \left(\frac{z}{a}\right)^{3/2} \frac{zr}{a} e^{-zr/2a}$	$\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} \sin\theta \sin\varphi$	$-3,4.Z^2$
2	1	$2p_z$	$\frac{1}{2\sqrt{6}} \left(\frac{z}{a}\right)^{3/2} \frac{zr}{a} e^{-zr/2a}$	$\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} \cos\theta$	$-3,4.Z^2$

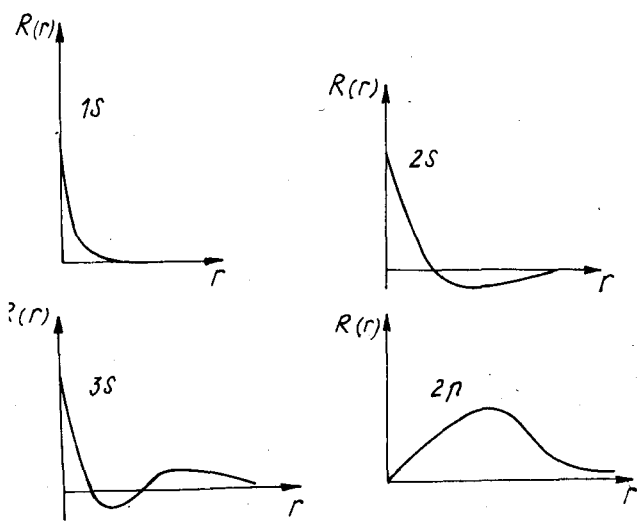
Biểu diễn lên đồ thị, nút của  $R(r)$  là những mặt cầu, còn nút của  $Y(\theta, \varphi)$  là những mặt kinh tuyến hay mặt vĩ tuyến.

Ta sẽ nghiên cứu riêng phần xuyên tâm và phần góc của AO.

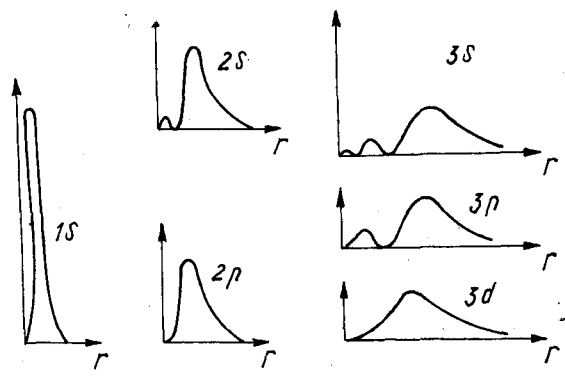
a) Phần xuyên tâm  $R(r)$ .

- Biểu diễn đồ thị của phần xuyên tâm  $R(r)$  được trình bày trên hình 1-3.

Một đại lượng rất quan trọng là hàm phân bố xuyên tâm  $4\pi r^2 |R(r)|^2$ . Đó là xác suất có mặt của electron trong lớp cầu có bề dày bằng 1 đơn vị dài ở cách nhau một khoảng cách bằng  $r$ . Khi đó đại lượng  $4\pi r^2 |R(r)|^2 dr$  biểu diễn xác suất có mặt của electron trong một lớp cầu có bề dày  $dr$  nằm cách tâm hạt nhân một khoảng cách  $r$ .  $|R_{ne}(r)|^2$  là xác suất có mặt electron trong một lớp cầu có thể tính bằng 1 đơn vị ở cách nhân 1 khoảng bằng  $r$ , tức là mật độ xác suất ở khoảng cách  $r$ .



Hình 1-3 : Đồ thị biểu diễn phân xuyên tâm của hàm sóng.



Hình 1-4. Hàm phân bố xuyên tâm của các AO.

Trên hình 1-4 biểu diễn đồ thị của các hàm phân bố xuyên tâm đối với các AO khác nhau.

b) Phần góc  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$

Phần góc  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$  có vai trò quan trọng nhất trong việc nghiên cứu liên kết hóa học. Phần góc chỉ phụ thuộc số lượng tử  $l, m$ , không phụ thuộc  $n$ . Khi nghiên cứu liên kết hóa học người ta hay dùng thuật ngữ orbital nguyên tử (AO) để chỉ biểu diễn phần góc  $Y(\theta, \varphi)$  của hàm sóng.

Về mặt giải tích việc nghiên cứu hàm  $|Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2$  rất phức tạp đối với các giá trị cao của  $l$  cho nên người ta quy ước dùng cách biểu diễn sau : Gọi AO (biểu diễn góc của hàm sóng) là bề mặt được xác định bởi tập hợp các điểm  $M$  sao cho  $OM = |Y_{lm}(\theta, \varphi)|$  khi  $\theta$  và  $\varphi$  biến thiên trong khoảng :

$$0 \leq \theta \leq \pi \text{ và } 0 \leq \varphi \leq 2\pi$$

góc O là tâm của nguyên tử.

Khi đó ta được những đồ thị cho các AO (biểu diễn góc) như trên hình 1-5.

Orbital  $s$  có dạng :  $1s = Y_{0,0} = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}$

như vậy  $s$  không phụ thuộc vào  $\theta, \varphi$ , nên có :

$$OM = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}$$

Hàm  $Y_{0,0}$  là hàm dương, có đối xứng cầu. Người ta nói sự phân bố electron  $s$  là đẳng hướng.

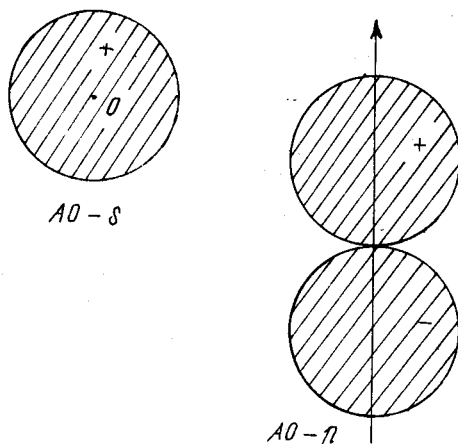
Các orbital  $p$  : có 3 orbital  $p$ . Ta hãy xét  $p_z$ .

$$P_z = \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} \cdot \cos\theta$$

$$OM = \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} |\cos\theta| = f(\theta)$$

Trong biểu thức của hàm không có  $\varphi$ , do đó ta chỉ cần xét đường cong kinh tuyến trong một mặt phẳng bất kì có chứa

trục Oz. Khi đó đồ thị là 2 vòng tròn tiếp xúc nhau ở O (tâm của hạt nhân) có bán kính bằng  $\frac{\sqrt{3}}{4\sqrt{\pi}}$ . Oz là trục đối xứng. Phần trên hàm có dấu dương, phần dưới hàm có dấu âm. Mặt xy là mặt nút, đó là mặt phân đối xứng của hàm  $P_z$ . Như vậy sự phân bố electron  $P_z$  không đẳng hướng, mật độ electron này lớn nhất ở phương z.

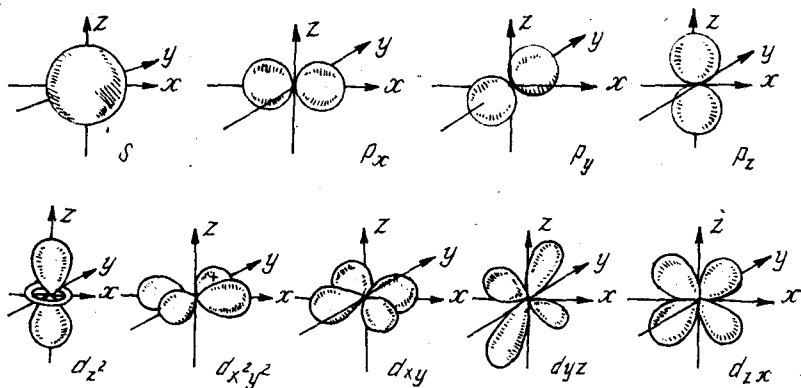


Hình 1 - 5

Biểu diễn góc của các A.O. s và p

Việc nghiên cứu các hàm  $P_x$  và  $P_y$  cũng dẫn đến kết quả tương tự. Đồ thị biểu diễn các hàm này cũng là những mặt cầu có trục đối xứng là Ox và Oy. Có thể thu được các đồ thị đó bằng cách quay đồ thị của hàm  $P_z$  một góc  $\pi/2$  để cho trục z chuyển sang vị trí của trục x hoặc trục y.

**4.5. Mây electron.** Ta đã biết mật độ xác suất có mặt của electron tại một điểm có tọa độ  $q$  được xác định bằng  $|\Psi(q)|^2$ . Để có một khái niệm trực quan hơn người ta thường dùng khái niệm mây electron. Mây electron được quy ước là miền không gian trong đó xác suất có mặt của electron chiếm 90%. Mỗi mây electron được giới hạn bằng một bề mặt giới hạn gồm các điểm có mật độ xác suất bằng nhau. Hình dạng và kích thước của mây electron phụ thuộc vào trạng thái orbital của electron, tức là phụ thuộc vào các số lượng tử  $n, l, m$ . Trên hình 1-6 trình bày hình dạng và sự định hướng các mây electron 1s, 2p và 3d



Hình 1-6. Hình dáng và sự định hướng của mây electron

**4.6. Spin.** Ngoài trạng thái chuyển động trong không gian của electron (gọi là chuyển động orbital), được đặc trưng bằng ba số lượng tử  $n$ ,  $l$ ,  $m$ . Bằng lý thuyết và thực nghiệm<sup>(1)</sup> người ta nhận thấy electron còn có momen động lượng riêng (còn gọi là momen động lượng nội tại hay momen động lượng spin), kí hiệu là  $\vec{M}_s$ .

Để dễ hiểu chúng ta có thể hình dung electron có một chuyển động riêng vào đó, ví dụ tự quay xung quanh 1 trục riêng, (giống như quả đất tự quay quanh 1 trục riêng), do đó sinh ra momen động lượng spin.

Momen động lượng spin có giá trị bằng :

$$\vec{M}_s = \sqrt{s(s+1)} \cdot \frac{h}{2\pi} \quad (1-24)$$

(1) Những sự kiện thực nghiệm chứng tỏ sự tồn tại của momen động lượng spin là : Thí nghiệm Stern, Gerlach, hiệu ứng cộng hưởng thuận từ electron, tính chất của electron trong từ trường, cấu trúc tinh tế của quang phổ nguyên tử.

trong đó  $h$  là hằng số Planck,  $s$  là số lượng tử spin luôn luôn có giá trị bằng  $1/2$ . Như vậy  $|\vec{M}_s|$  luôn luôn có trị số không đổi. Vectơ  $\vec{M}_s$  chỉ có thể định hướng theo 2 cách xác định trong không gian sao cho hình chiếu của nó lên trục  $z$  có trị số bằng :

$$M_{sz} = m_s \cdot \frac{h}{2\pi} \quad (1-25)$$

$m_s$  được gọi là số lượng tử spin có thể nhận 1 trong 2 giá trị bằng  $+1/2$  và  $-1/2$ .

**4.7. Tóm tắt.** Tổng kết lại những điều trình bày ở trên có thể nói rằng trạng thái của electron trong nguyên tử có 1 electron duy nhất được xác định bởi giá trị của 4 đại lượng vật lí, do đó bởi trị số của 4 số lượng tử tương ứng là :

- Năng lượng phụ thuộc vào số lượng tử  $n$
- Độ lớn của momen động lượng orbital phụ thuộc vào số lượng tử  $l$ .
- Hình chiếu của momen động lượng orbital phụ thuộc vào số lượng tử  $m$ .
- Hình chiếu của momen động lượng spin phụ thuộc vào số lượng tử  $m_s$ .

Hàm sóng mô tả trạng thái chuyển động orbital của electron  $\Psi_{n,l,m}$  xác định xác suất có mặt của electron trong các khu vực khác nhau trong không gian, do đó xác định kích thước và hình dạng các mây electron ở trạng thái đó.

## 5. Nguyên tử có nhiều electron

**5.1. Phương pháp gần đúng một electron.** Bài toán về nguyên tử có nhiều electron trở nên phức tạp hơn nhiều so với bài toán nguyên tử giống hidro. Khi đó mỗi electron không những chịu lực hút của hạt nhân nguyên tử (ứng với số hạng âm trong biểu thức thế năng) mà còn chịu lực đẩy của các



electron khác trong nguyên tử (ứng với số hạng dương trong biểu thức thế năng) được giả thiết là trường đối xứng tâm, nhưng không phải trường Culong (\*), vì vậy năng lượng electron trong trường hợp này không những phụ thuộc vào số lượng tử  $n$  mà còn phụ thuộc vào số lượng tử  $l$ . (Người ta nói có sự khử hiện tượng suy biến).

Ví dụ : xét trường hợp nguyên tử Hêli có 2 electron. Coi hạt nhân như đứng yên, gọi khoảng cách của 2 electron (thứ 1 và thứ 2) đến hạt nhân là  $r_1, r_2$  và khoảng cách giữa 2 electron là  $r_{12}$ . Khi đó tổng thế năng của hệ là :

$$V = -\frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} - \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}}$$

Động năng của hệ là tổng các động năng của 2 electron :

$$E_d = \frac{mv_1^2}{2} + \frac{mv_2^2}{2}$$

Khi đó toán tử Hamilton đối với nguyên tử Hêli :

$$H = -\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} (\Delta_1 + \Delta_2) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left( \frac{2}{r_1} + \frac{2}{r_2} - \frac{1}{r_{12}} \right)$$

$\Delta_1$  và  $\Delta_2$  là toán tử Laplace của 2 electron.

Phương trình Schrodinger đối với nguyên tử Hêli :

$$H\psi = E\psi$$

trong đó :  $\psi = \psi(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2) = \psi(1,2)$

1,2 là kí hiệu tổng quát chỉ tọa độ của 2 electron 1,2.

Nếu nguyên tử có  $N$  electron, hàm sóng của nguyên tử sẽ phụ thuộc tọa độ của  $N$  electron.

---

\* Trường Culong là trường đối xứng tâm trong đó thế năng tương tác được biểu diễn bằng công thức Culong.

Việc giải chính xác bài toán như vậy bằng phương pháp giải tích là không thể được nên người ta phải dùng phương pháp gần đúng.

Để giải gần đúng bài toán nguyên tử nhiều electron người ta phải dùng một số giả thuyết. Trước hết giả thuyết coi hạt nhân đứng yên (phương pháp gần đúng Born - Oppenheimer). Sau đó đưa bài toán về dạng bài toán nguyên tử một electron bằng cách dùng khái niệm *hiệu ứng chắn*.

Như đã nói mỗi electron bị hạt nhân hút bởi điện tích  $+Z$  (lấy  $|e|$  làm đơn vị điện tích) và bị các mây electron khác đẩy. Tổng hợp 2 loại tác dụng này có thể coi như electron bị hạt nhân hút bởi một điện tích hiệu dụng  $+Z^* < +Z$ , nghĩa là coi như các mây electron khác đã chắn mất một phần ảnh hưởng của điện tích hạt nhân đối với electron được xét.  $Z^*$  được gọi là *điện tích hiệu dụng* của hạt nhân đối với electron đang xét. Hiệu số

$$\sigma = Z - Z^*$$

được gọi *hiệu ứng chắn* hay *hàng số chắn* của các electron khác đối với electron đang xét. Khi đó :  $Z^* = Z - \sigma$  (1.26)

Áp dụng cho trường hợp nguyên tử có 2 electron (dạng Hêli), ta có toán tử Laplace :

$$H = -\frac{\hbar^2}{8\pi^2m} (\Delta_1 + \Delta_2) - \frac{(Z - \sigma_1)e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} - \frac{(Z - \sigma_2)e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} \quad (1.27)$$

$\sigma_1$  và  $\sigma_2$  là hằng số chắn đối với 2 electron 1,2.

Khi đó tách được  $H$  thành tổng 2 số hạng :

$$H(1) = -\frac{\hbar^2}{8\pi^2m} \Delta_1 - \frac{(Z - \sigma_1)e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} = -\frac{\hbar^2}{8\pi^2m} \Delta_1 - \frac{Z^* e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1}$$

$$H(2) = -\frac{\hbar^2}{8\pi^2m} \Delta_2 - \frac{(Z - \sigma_2)e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} = -\frac{\hbar^2}{8\pi^2m} \Delta_2 - \frac{Z^* e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2}$$

Phương trình Schrodinger có dạng :

$$[H(1) + H(2)] \psi(1, 2) = E \psi(1, 2) \quad (1-28)$$

$$\text{Từ đó ta lại đặt : } \psi(1,2) = \varphi(1) \cdot \varphi(2) \quad (1-29)$$

$\varphi(1)$  chỉ phụ thuộc tọa độ electron 1,  $\varphi(2)$  chỉ phụ thuộc tọa độ electron 2.

$$\text{Đặt năng lượng : } E = E_1 + E_2 \quad (1-30)$$

Ta tách (1-28) thành 2 phương trình :

$$H(1) \varphi(1) = E_1 \varphi(1)$$

$$H(2) \varphi(2) = E_2 \varphi(2) \quad (1-31)$$

Ta lại có bài toán nguyên tử 1 electron đã biết.

Đối với nguyên tử có  $N$  electron, phương trình Schrodinger đối với electron  $i$  có dạng :

$$\left( -\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \Delta_i - \frac{Z_i^* e^2}{4\pi\epsilon_0 r_i} \right) \varphi_i = E_i \varphi(i) \quad (1-32)$$

$$\text{với } Z_i^* = Z - \sigma_i \quad (1-33)$$

Hàm sóng của cả nguyên tử sẽ là :

$$\psi(1,2,\dots,N) = \varphi(1) \cdot \varphi(2) \dots \varphi(N) \quad (1-34)$$

năng lượng của cả nguyên tử :

$$E = E_1 + E_2 + \dots + E_N \quad (1-35)$$

Hằng số chắn  $\sigma_i$  phụ thuộc cả vào hình dạng và kích thước mây electron  $i$ , (tức là phụ thuộc  $n, l$ ), nếu mật độ xác suất có mặt của electron khu vực gần hạt nhân càng lớn thì  $\sigma_i$  càng nhỏ (hiệu ứng xâm nhập), do đó năng lượng  $E_i$  không những phụ thuộc vào số lượng tử  $n$  mà còn phụ thuộc vào số lượng tử  $l$  của electron được xét.

$$E_{n,l} = -\frac{1}{n^2} \cdot \frac{mZ^{*2} e^4}{8\epsilon_0^2 \hbar^2}$$

Nếu biểu diễn năng lượng ra eV ta có công thức :

$$E_{n,l} = -13,6 \cdot \frac{Z^{*2}}{n^2} \quad (1-36b)$$

Ta cũng có thể sử dụng các cách biểu diễn các AO đã dùng đối với các nguyên tử 1 electron.

Năng lượng của electron trong các AO phụ thuộc vào hiệu ứng chắn và hiệu ứng xâm nhập.

Do nguyên lý bất định electron có thể có mặt ở bất kì khu vực nào trong không gian với xác suất lớn hay nhỏ, vì vậy một electron dù thuộc lớp bên ngoài vẫn có một thời gian nào đó tồn tại gần khu vực hạt nhân, do đó có thể nói electron của lớp ngoài đã xâm nhập vào gần hạt nhân qua các lớp electron bên trong. Hiệu ứng xâm nhập làm tăng độ bền liên kết giữa electron đó và hạt nhân. Hiệu ứng xâm nhập càng lớn khi các số lượng tử  $n$  và  $l$  của electron càng nhỏ.

Có thể nêu một số quy luật đối với hiệu ứng chắn như sau :

- Các electron của lớp bên trong có tác dụng chắn mạnh đối với 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 đối với lớp trong không đáng kể.

- Các electron có  $n$  giống nhau thì nếu có  $l$  càng lớn tác dụng chắn sẽ càng nhỏ và bị chắn càng nhiều.

Trong cùng một lớp các electron chắn nhau không mạnh so với khi khác lớp. Trong cùng một phân lớp các electron chắn nhau càng yếu hơn. 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 các electron  $p$ ,  $d$ ,  $f$

- Một phân lớp đã bão hòa hoàn toàn electron hay bão hòa một nửa (mỗi ô lượng tử có đủ một electron) thì có tác dụng chắn rất lớn đối với các lớp bên ngoài.

- Hai electron thuộc cùng một ô lượng tử chắn nhau rất yếu nhưng lại đẩy nhau mạnh.

Từ đó có thể rút ra một số quy luật về biến thiên năng lượng của các AO trong bảng hệ thống tuần hoàn như sau :

a) Trong một phân nhóm chính khi đi từ trên xuống dưới, do electron hóa trị có số lượng tử  $n$  tăng nên năng lượng của các AO hóa trị tăng lên.

b) Trong một chu kì khi đi từ đầu đến cuối chu kì hiệu các mức  $E_{np} - E_{ns}$  tăng lên

c) Khi lớp bên trong xuất hiện electron ở các phân lớp  $d$  hay  $f$  thì điện tích hạt nhân hiệu dụng ( $Z^*$ ) đối với electron  $s$  của lớp ngoài cùng tăng lên.

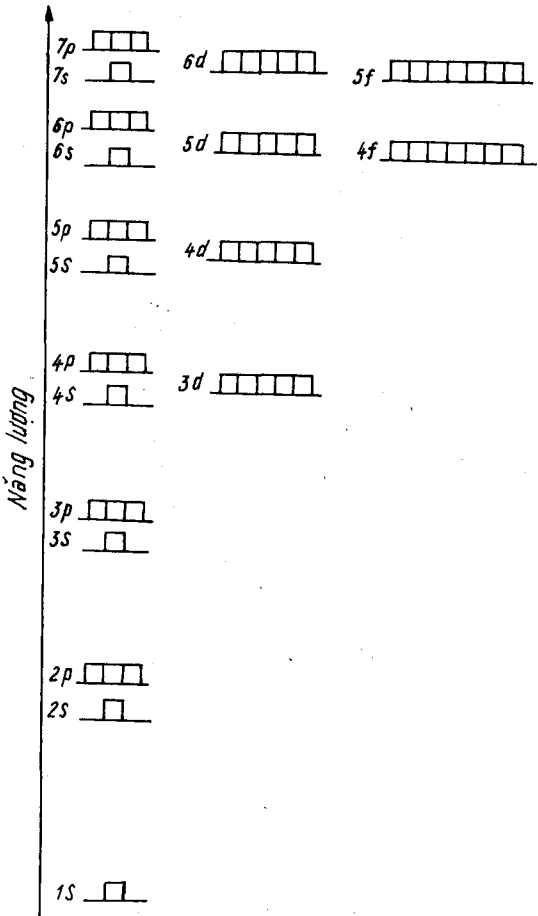
**5.2. Giảm độ năng lượng. Quy tắc Klechkowsky.**

Khi nghiên cứu thứ tự năng lượng của các AO trong nguyên tử nhiều electron, nhà bác học Nga Klechkowsky đã đưa ra 2 quy tắc sau :

a) Năng lượng  $E_{n,l}$  tăng theo giá trị tổng số  $n + l$ .

b) Nếu hai AO có tổng  $n + l$  như nhau thì AO nào có  $n$  lớn hơn sẽ có năng lượng cao hơn.

Năng lượng của các AO theo thứ tự tăng dần như sau :



Hình 1-7. Mức năng lượng của các AO trong nguyên tử nhiều electron.

$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < 4p < 5s < 4d < 5p < 6s < 4f \approx 5d < 6p < 7s < 5f \approx 6d < 7p$ .

và được biểu diễn trên hình 1-7.

**5.3. Tóm tắt.** Trạng thái của electron trong nguyên tử nhiều electron cũng được đặc trưng bằng giá trị của 4 đại lượng vật lí :  $E_{n,l}$ ,  $|M|$ ,  $M_z$  và  $M_{sz}$ , nghĩa là phụ thuộc vào 4 số lượng tử  $n$ ,  $l$ ,  $m$ ,  $m_s$ . Nhưng ở đây có hiện tượng khử 1 phần suy biến, nên năng lượng của electron phụ thuộc vào 2 số lượng tử  $n$ ,  $l$ .

Hình dạng các AO và hình dạng mây electron vẫn có dạng giống như trường hợp nguyên tử 1 electron.

## 6 Sự phân bố electron trong nguyên tử nhiều electron

### 6.1. Khái niệm lớp, phân lớp, ô lượng tử.

a) *Lớp electron* : Trong một nguyên tử các electron có số lượng tử chính giống nhau hợp lại thành một lớp ; các lớp được kí hiệu như sau :

$n$ :	1	2	3	4	5	6	7
lớp :	K	L	M	N	O	P	Q

$n$  càng lớn thì electron có năng lượng càng cao và mây electron được phân bố càng xa hạt nhân. Như vậy  $n$  chỉ số thứ tự lớp electron.

b) *Phân lớp* : Mỗi phân lớp gồm các electron có các số lượng tử  $n$ ,  $l$  như nhau. Các phân lớp được kí hiệu bằng các chữ (chỉ  $l$ ) và số (chỉ  $n$ ).

$l$ :	0	1	2	3
kí hiệu :	s	p	d	f

Do quan hệ giữa 2 số lượng tử  $n$  và  $l$  nên trong mỗi lớp có  $n$  phân lớp :

lớp K có 1 phân lớp : 1s

lớp L có 2 phân lớp : 2s, 2p

lớp M có 3 phân lớp : 3s, 3p, 3d

lớp N có 4 phân lớp : 4s, 4p, 4d, 4f

v.v...

c) *Ô lượng tử* hay *orbital* : Các electron có 3 số lượng tử  $n, l, m$  giống nhau, nghĩa là có hàm sóng orbital  $\psi(q)$  giống nhau và có trạng thái chuyển động orbital giống nhau thì được gọi là thuộc cùng một ô lượng tử.

Số ô lượng tử trong một phân lớp được tính bằng số các trị số  $m$  ứng với giá trị  $l$  đã cho. Từ đó có :

phân lớp s :  $l = 0$  nên  $m = 0$  : có 1 ô lượng tử.

phân lớp p :  $l = 1$  nên  $m = -1 ; 0 ; +1$  : có 3 ô lượng tử.

phân lớp d :  $l = 2$  nên  $m = -2 ; -1 ; 0 ; +1 ; +2$  : có 5 ô lượng tử.

phân lớp f :  $l = 3$  nên  $m = -3 \dots ; 0 ; \dots +3$  : có 7 ô lượng tử.

Nghĩa là phân lớp ứng với số lượng tử phụ  $l$  có  $2l + 1$  ô lượng tử.

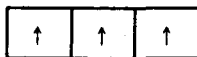
d) *Cách biểu diễn cấu tạo vỏ electron của nguyên tử* :

- Dùng công thức electron. Ví dụ :

Nitơ (N)  $1s^2 2s^2 2p^3$ .

- Dùng kí hiệu ô lượng tử :

N:            1s            2s            2p



## 6.2. Các quy luật phân bố electron trong nguyên tử.

a) *Nguyên lí Pauli (1925) (hay nguyên lí ngoại trừ)* :

Trong một nguyên tử không thể có 2 electron cùng có 4 số lượng tử giống nhau.

Từ đó có thể tính được số electron cực đại trong một ô lượng tử, một phân lớp, một lớp.

- Các electron trong một ô lượng tử có 3 số lượng tử  $n, l, m$  giống nhau ; nên số lượng tử từ spin ( $m_s$ ) phải khác nhau (+ 1/2 và -1/2) vì vậy 1 ô lượng tử chỉ có tối đa 2 electron.

- Trong một phân lớp ứng với số lượng tử phụ  $l$  có  $(2l + 1)$  ô lượng tử nên có tối đa  $2(2l + 1)$  electron. Như vậy : số electron tối đa của các phân lớp như sau :

phân lớp :	s	p	d	f
số ô lượng tử :	1	3	5	7
số electron tối đa :	2	6	10	14

- Một lớp ứng với số lượng tử chính  $n$  có  $n$  phân lớp ứng với  $l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$ . Mỗi phân lớp có tối đa  $2(2l + 1)$  electron, nên số electron tối đa của cả lớp là :

$$\sum_{l=0}^{n-1} 2(2l + 1) = 2n^2 \quad (1-37)$$

### b) Nguyên lí vững bền

Trong nguyên tử các electron có khuynh hướng chiếm các ô lượng tử thuộc những phân lớp có mức năng lượng thấp nhất.

Khi đó nguyên tử ở trạng thái bền nhất có mức năng lượng thấp nhất, gọi là trạng thái cơ bản.

Theo quy tắc Klechkowsky ta có dãy thứ tự năng lượng tăng dần của các phân lớp như sau (xem hình 1-7) :

1s 2s 2p 3s 3p 4s 3d 4p 5s 4d 5p 6s 4f  $\approx$  5d 6p 7s 5f  $\approx$  6d.

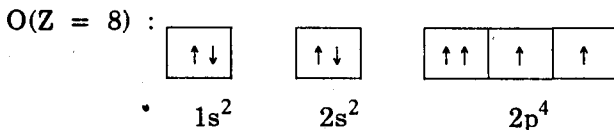
Áp dụng nguyên lí Pauli và nguyên lí vững bền có thể viết công thức electron cho các nguyên tử. Ví dụ :

Na ( $Z = 11$ ) :	$1s^2$	$2s^2 2p^6$	$3s^1$			
Br ( $Z = 35$ ) :	$1s^2$	$2s^2 2p^6$	$3s^2 3p^6$	$4s^2$	$3d^{10}$	$4p^4$
Mn ( $Z = 25$ ) :	$1s^2$	$2s^2 2p^6$	$3s^2 3p^6$	$4s^2$	$3d^5$	



c) *Quy tắc Hund.* Trong một phân lớp các electron có khuynh hướng phân bố đều vào các ô lượng tử sao cho số electron độc thân là cực đại.

Ví dụ nguyên tử oxi :



## 7. Năng lượng ion hóa và ái lực với electron

**7.1. Năng lượng ion hóa (I).** *Năng lượng ion hóa là năng lượng cần tiêu thụ để tách một electron ra khỏi nguyên tử ở trạng thái cơ bản và ở thể khí.*

Đối với một nguyên tử đã cho năng lượng ion hóa thứ nhất là nhỏ nhất, sau đó đến năng lượng ion hóa thứ 2 rồi thứ 3 :

$$I_1 < I_2 < I_3 \dots$$

Có thể xác định năng lượng ion hóa bằng cách dùng electron được tăng tốc trong một điện trường bán phá vào nguyên tử. Khi đó điện thế nhỏ nhất của điện trường làm cho tốc độ electron đủ để ion hóa nguyên tử được gọi là *thế ion hóa* của nguyên tử đó.

Năng lượng ion hóa thường được biểu diễn ra electron - von (eV). 1 eV là năng lượng mà electron có được trong điện trường tăng tốc có thế hiệu 1 von. ( $1 \text{ eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Jun}$ ). Thế ion hóa được biểu diễn ra von, có số chỉ von bằng số chỉ năng lượng ion hóa (biểu diễn ra eV)

Năng lượng ion hóa có thể dùng để đặc trưng cho khả năng nhường electron của nguyên tử kim loại, tức là để "đo tính kim loại" của nguyên tố. Nguyên tử có năng lượng ion hóa càng nhỏ thì càng dễ nhường electron.

Năng lượng ion hóa phụ thuộc vào độ bền của mối liên kết giữa electron hóa trị với hạt nhân, do đó phụ thuộc vào một số yếu tố như :

- điện tích hạt nhân  $Ze$ .
- số lượng tử chính của electron được xét, khi  $n$  càng lớn electron càng dễ tách khỏi nguyên tử.
- số lượng tử  $l$  của electron được xét, với  $n$  cho trước thì  $l$  càng lớn năng lượng ion càng nhỏ.
- ảnh hưởng của các electron khác trong nguyên tử (hiệu ứng chắn).

Dùng các khái niệm điện tích hạt nhân hiệu dụng, hiệu ứng chắn và hiệu ứng xâm nhập ta có thể giải thích được các quy luật biến thiên năng lượng của các AO theo điện tích hạt nhân, do đó giải thích được quy luật biến thiên năng lượng ion hóa trong các chu kì và phân nhóm của bảng hệ thống tuần hoàn.

**7.2. Ái lực đối với electron (E).** *Ái lực đối với electron là năng lượng được giải phóng khi kết hợp 1 electron vào nguyên tử ở trạng thái cơ bản.*

Nguyên tử có khả năng thu electron càng mạnh thì ái lực với electron càng lớn, ví dụ của hydro bằng  $0,75eV$ , của oxi bằng  $1,47 eV$ , của flo bằng  $3,52 eV$ .

Bằng thực nghiệm và tính toán người ta thấy chỉ có một số nguyên tố (F, Cl, O...) có khả năng thu thêm electron để biến thành ion âm mang điện tích  $-1$ . Quan niệm về ion âm nhiều điện tích như  $O^{2-}$ ,  $N^{3-}$ ... là không có cơ sở về mặt lí luận và thực nghiệm. Ái lực với electron của các nguyên tử kim loại thường bằng không hoặc âm, nghĩa là phần lớn kim loại không có khuynh hướng kết hợp electron. Trị tuyệt đối của ái lực với electron của các phi kim là số dương và càng lớn khi cấu tạo vỏ electron của nguyên tử phi kim càng gần với cấu trúc của khí trơ.

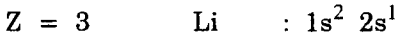
## 8. Biến thiên tuần hoàn trong cấu tạo nguyên tử của các nguyên tố hóa học

**8.1. Sự tuần hoàn trong quá trình xây dựng các lớp electron.** Khi xếp các nguyên tố hóa học theo chiều tăng dần của điện tích hạt nhân ( $Z$ ) người ta nhận thấy sự hình thành các lớp electron xảy ra một cách tuần hoàn như sau : Cứ sau một số nguyên tố lại bắt đầu hình thành một lớp electron mới, nghĩa là sự hình thành các lớp vỏ electron xảy ra theo từng chu kì. (xem bảng 1-1)

*Chu kì 1* : Gồm 2 nguyên tố từ  $Z = 1$  đến  $Z = 2$ . Các electron xây dựng phân lớp  $1s$ .

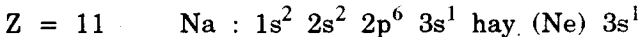


*Chu kì 2* : Gồm 8 nguyên tố từ  $Z = 3$  đến  $Z = 10$ .

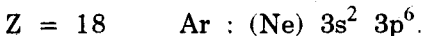


*Chu kì 3* : Gồm 8 nguyên tố từ  $Z = 11$  đến  $Z = 18$ .

Các electron xây dựng thêm các phân lớp  $3s, 3p$ .

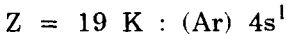


.....

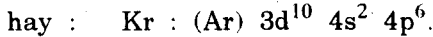
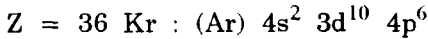


*Chu kì 4* : Gồm 18 nguyên tố từ  $Z = 19$  đến  $Z = 36$ .

Các electron xây dựng thêm các phân lớp  $4s$ ,  $3d$ ,  $4p$ .

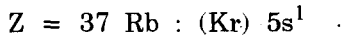


.....

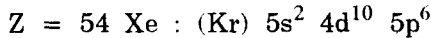


*Chu kì 5* : Gồm 18 nguyên tố từ  $Z = 37$  đến  $Z = 54$ .

Các electron xây dựng thêm các phân lớp  $5s$ ,  $4d$ ,  $5p$



.....

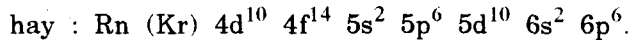
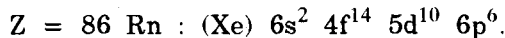


*Chu kì 6* : Gồm 32 nguyên tố từ  $Z = 55$  đến  $Z = 86$ .

Các electron xây dựng thêm các phân lớp  $6s$ ,  $4f$ ,  $5d$ ,  $6p$ .

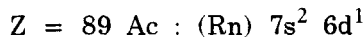
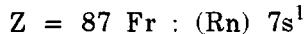


.....

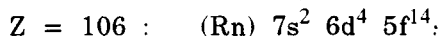


*Chu kì 7* : Là chu kì chưa hoàn thành, hiện nay mới chỉ biết 20 nguyên tố từ  $Z = 87$  đến  $Z = 106$ .

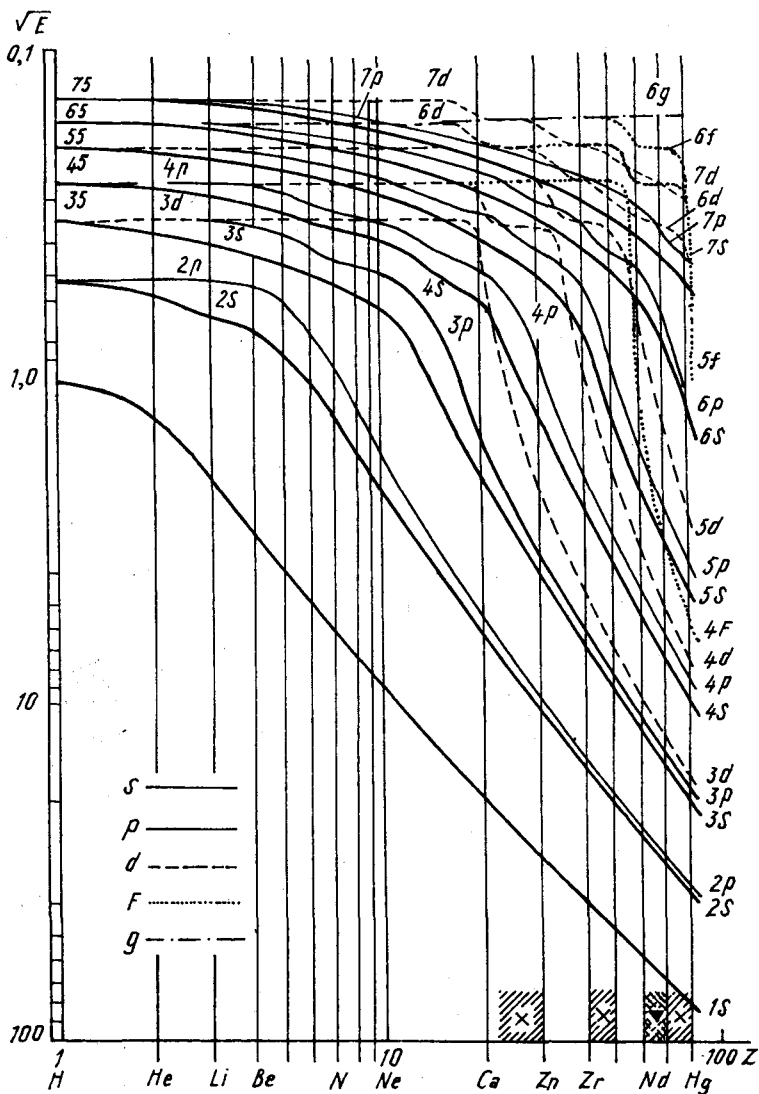
Các electron xây dựng thêm các phân lớp  $7s$ ,  $5f$ ,  $6d$ ...



.....



Sự hình thành các chu kì, các dãy nguyên tố chuyển tiếp, các họ Lantanôit và Actinôit có nguyên nhân ở quy luật biến thiên năng lượng của các AO theo điện tích hạt nhân  $Z$ . Các



Hình 1-8. Biến thiên của năng lượng của các AO theo  $Z$ .

đường cong biến thiên năng lượng của các AO  $s, p, d, f$  theo  $Z$  được trình bày trên hình 1-8. Đơn vị năng lượng là  $13,6 \text{ eV}$  (năng lượng nguyên tử H ở trạng thái cơ bản). Trục hoành đặt  $Z$  (theo thang logarit), trục tung đặt  $\sqrt{-E}$  (cũng theo thang logarit). Sự cắt nhau của đường cong  $(n - 1)d$  với các đường cong  $ns, np$  là nguyên nhân xuất hiện dãy nguyên tố chuyển tiếp chu kì  $n$ . Sự cắt nhau của đường cong  $(n - 2)f$  với các đường cong  $(n - 1)s, (n - 1)p, (n - 1)d, ns, np$  là nguyên nhân xuất hiện các họ lantanôit và actinôit.

## 8.2. Nhận xét

a) Quá trình hình thành vỏ electron của các nguyên tố có tính chất tuần hoàn : cứ sau một dãy nguyên tố lại bắt đầu xây dựng một lớp electron mới. Dãy nguyên tố trong đó đang hình thành một lớp electron mới được gọi là một *chu kì*. Bắt đầu chu kì  $n$  là nguyên tố tại đó bắt đầu xây dựng phân lớp  $ns$ . Kết thúc chu kì là nguyên tố tại đó electron bão hòa phân lớp  $np$ .

Tuy nhiên tính tuần hoàn trong cấu tạo nguyên tử không thể hiện một cách đơn giản mà có sự phát triển. Chu kì đầu chỉ có 2 nguyên tố (xây dựng phân lớp  $1s$ ), các chu kì 2 và 3 mỗi chu kì có 8 nguyên tố (xây dựng các phân lớp  $2s, 2p$ , và  $3s, 3p$ ) các chu kì 4 và 5 mỗi chu kì có 18 nguyên tố, chu kì 6 có 32 nguyên tố...

Nguyên nhân của sự phát triển xoay tròn ốc này bắt nguồn từ quy luật phân bố electron trong nguyên tử.

b) Sự sắp xếp electron vào các phân lớp nói chung phù hợp với quy tắc Klechkowsky nhưng có một số ngoại lệ.

- Sau V ( $Z = 23$ ) với các phân lớp ngoài là  $3d^3 4s^2$  đáng lẽ có Cr ( $Z = 24$ )  $3d^4 4s^2$  nhưng lại có  $3d^5 4s^1$  vì cấu trúc diễn  $1/2$  số ô lượng tử có tính bền cao hơn. Trường hợp tương tự xảy ra với Mo ( $Z = 42$ ).

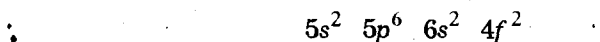
- Sau Ni ( $Z = 28$ ) với các phân lớp ngoài là  $3d^8 4s^2$  đáng lẽ có Cu ( $Z = 29$ )  $3d^9 4s^2$  nhưng lại có  $3d^{10} 4s^1$  vì cấu trúc sau

bền hơn. Các trường hợp tương tự xảy ra với Ag ( $Z = 47$ ), Au ( $Z = 79$ ).

Hiện tượng này thường được gọi là sự *vội bão hòa* phân lớp  $d$ .

- Họ Lantanôit bắt đầu bằng La ( $Z = 57$ ) có các phân lớp ngoài :  $5s^2 5p^6 5d^1 6s^2$ .

Sau đó đến Ce ( $Z = 58$ ) electron không xếp vào  $5d$  mà xây dựng  $4f$ .



Ở các nguyên tố tiếp theo (từ Pr :  $Z = 59$  đến Lu :  $Z = 71$ ) các electron tiếp tục xây dựng phân lớp  $4f$  cho đến bão hòa mà không xếp vào  $5d$  (trừ Gd :  $Z = 64$ ).

Chỉ trừ Hf ( $Z = 72$ ) electron mới lại tiếp tục xây dựng  $5d$ .

- Sự xây dựng vỏ electron của các nguyên tố trong họ Actinôit xảy ra cũng không hoàn toàn tuân theo quy tắc Klechkowsky.

- Các trường hợp bất thường cũng xảy ra đối với các nguyên tố Ru ( $Z = 44$ ), Rh ( $Z = 45$ ), Pd ( $Z = 46$ ).

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

Vào giữa thế kỉ 19 khi nghiên cứu sự biến thiên tính chất của nguyên tố và hợp chất của chúng theo chiều tăng của khối lượng nguyên tử, và tìm cách phân loại các nguyên tố, nhà bác học Nga Đ.I Mendeleev đã khám phá ra *định luật tuần hoàn* (năm 1869) và trên cơ sở đó Mendeleev đã xếp 63 nguyên tố đã biết lúc đó thành *hệ thống tuần hoàn*. Ngày nay, dưới ánh sáng của lý thuyết cấu tạo nguyên tử, định luật tuần hoàn và hệ thống tuần hoàn là hệ quả tự nhiên của các quy luật tuần hoàn trong cấu tạo vỏ electron của các nguyên tố. *Định luật tuần hoàn được phát biểu như sau : Tính chất của các nguyên tố và tính chất của các đơn chất, hợp chất của các nguyên tố phụ thuộc tuần hoàn vào điện tích hạt nhân.*

Sự phát triển của khoa học hiện đại cho phép tìm ra nhiều nguyên tố mới và hiểu sâu sắc, chính xác và đầy đủ hơn tính

chất và các hợp chất của chúng. Định luật tuần hoàn và các ứng dụng của nó có vai trò quan trọng trong nhiều lĩnh vực khoa học và được nhiều nhà khoa học ở các chuyên ngành khác nhau quan tâm đến, vì vậy hiện nay có nhiều cách biểu diễn hệ thống tuần hoàn. Đã có tới gần 100 dạng bảng, đồ thị hoặc mô hình biểu diễn định luật tuần hoàn, nhưng chúng ta chỉ xét 2 dạng bảng được phổ biến rộng rãi nhất.

### 9.1. Nguyên tắc xây dựng bảng hệ thống tuần hoàn.

a) Các nguyên tố được xếp theo chiều tăng dần của điện tích hạt nhân ( $Z$ ). Các nguyên tố trong chu kì được xếp thành 1 hay nhiều hàng ngang.

b) Các nguyên tố thuộc những chu kì khác nhau nhưng có tính chất giống nhau được xếp thành một nhóm. Mỗi nhóm được xếp thành một cột trong bảng. Số chỉ nhóm bằng mức oxi hóa (hay số oxi hoá) cao nhất của các nguyên tố trong bảng (trừ một số ngoại lệ).

### 9.2. Một số dạng bảng hệ thống tuần hoàn.

a) *Dạng bảng dài* :

- Các nguyên tố trong mỗi chu kì được xếp thành một hàng.
- Toàn bảng có 16 nhóm đánh số từ IA, IIA, ..., VIIIA, và IB, IIB, ..., VIIIB. Hai họ Lantanôit và Actinôit gồm các nguyên tố f được xếp vào nhóm IIIB.

Nhóm A gồm các nguyên tố  $s, p$ .

Nhóm B gồm các nguyên tố  $d, f$  <sup>(1)</sup>.

b) *Dạng bảng ngắn* :

- Chu kì nhỏ có 1 hàng, chu kì lớn có hai hàng.
- Có 8 nhóm mỗi nhóm chia thành 2 phân nhóm. *Phân nhóm chính* gồm các nguyên tố  $s, p$ . *Phân nhóm phụ* gồm các nguyên tố  $d, f$ .

---

(1) Những nguyên tố trong đó electron đang xây dựng phân lớp  $s$  thì được gọi là nguyên tố  $s$ , tương tự như vậy người ta gọi các nguyên tố  $p, d, f$ .



## 10. Sự biến thiên tuần hoàn tính chất của các nguyên tố hóa học

Phần lớn tính chất của các chất ở mức độ nhiều hay ít đều phụ thuộc vào cấu tạo vỏ electron của nguyên tử nên phụ thuộc tuần hoàn vào điện tích hạt nhân.

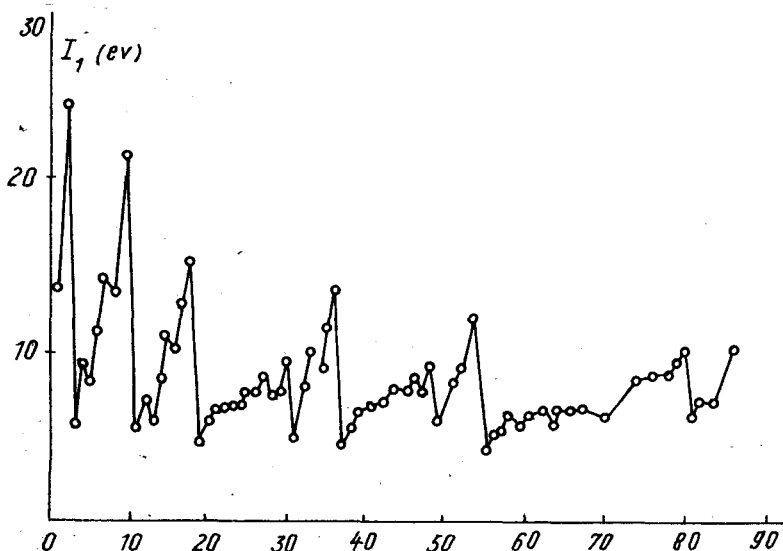
**10.1. Năng lượng ion hóa.** (xem hình 1-9 và bảng 1-2). Trong mỗi chu kì, nguyên tố đầu chu kì (kim loại kiềm) có năng lượng ion hóa thấp nhất, nguyên tố khí trơ kết thúc chu kì có năng lượng ion hóa cao nhất.

**10.2. Ái lực với electron.** Nói chung trong một chu kì, ái lực với electron tăng lên khi tiến dần đến nhóm 7A. Các nguyên tử halôgen (thuộc nhóm 7A) có ái lực với electron cao nhất. (xem bảng 1-2).

**10.3. Bán kính nguyên tử.** Cũng biến thiên tuần hoàn theo chiều tăng của Z. Các kim loại kiềm có bán kính nguyên tử lớn nhất, các khí trơ có bán kính nguyên tử nhỏ nhất. (xem bảng 1-2).

**10.4. Mức oxi hóa** (hay số oxi hóa). Trong tương tác hóa học giữa các nguyên tử thường hay xảy ra sự di chuyển electron hóa trị từ nguyên tử này đến nguyên tử khác. Sự di chuyển đó xác định mức oxi hóa của nguyên tử tham gia tương tác. Nguyên tử bị mất electron hóa trị để trở thành tích điện dương thì có mức oxi hóa dương. Nguyên tử thu electron để trở thành tích điện âm thì có mức oxi hóa âm. Mức oxi hóa dương được tính bằng số electron tách khỏi nguyên tử khi hình thành liên kết ion hay liên kết cộng hóa trị có cực. Mức oxi hóa âm được tính bằng số electron mà nguyên tử nhận vào.

Mức oxi hóa cao nhất của nguyên tố nói chung phù hợp với số chỉ nhóm nguyên tố (xem bảng 1-2)



Hình 1-9. Biến thiên năng lượng ion hóa theo điện tích hạt nhân.

**10.5. Các tính chất khác.** Nhiều tính chất khác (như nhiệt độ nóng chảy, nhiệt độ sôi, entanpy tạo thành của các loại hợp chất...) cũng phụ thuộc tuần hoàn vào điện tích hạt nhân.

**10.6. Sự tuần hoàn thứ cấp và sự tuần hoàn nội chu kì (hình 1-10)**

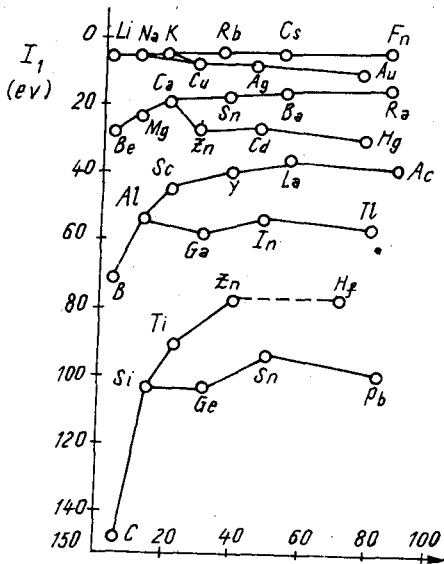
- Sự tuần hoàn thứ cấp (còn có thể gọi là sự tuần hoàn thẳng đứng) được hiểu là sự biến thiên không đều đặn tính chất của các nguyên tố và hợp chất của chúng theo chiều từ trên xuống dưới trong một phân nhóm, đặc biệt là phân nhóm chính.

Nguyên nhân của sự tuần hoàn này là ở sự co các bán kính nguyên tử (giảm bán kính nguyên tử) gây ra bởi sự xếp các

electron vào các phân lớp  $d$  và  $f$  ở bên trong và tác dụng chắn các electron này. Chính vì vậy mà khi đi từ Xêri (Ce) đến Lutêxi (Lu) bán kính nguyên tử giảm xuống (sự nén Lantanôit)

Sự tuần hoàn thứ cấp thể hiện rõ trong biến thiên thế ion hóa. Ví dụ trong nhóm IVA, khi đi từ C đến Si, giá trị năng lượng ion hóa tăng lên vì  $r_C < r_{Si}$ . Nhưng khi đi từ Si đến Ge giá trị này giảm vì  $r_{Si} > r_{Ge}$ . Sau đi từ Ge đến Sn, giá trị này lại tăng vì  $r_{Ge} < r_{Sn}$  v.v...

- Sự tuần hoàn nội chu kì được thấy trong họ Lantanôit : do sự xếp electron vào orbital  $f$  theo 2 giai đoạn (giai đoạn đầu xếp vào mỗi ô lượng tử 1 electron theo quy tắc Hun, giai đoạn sau xếp vào mỗi ô lượng tử đủ 2 electron). Vì vậy trong họ có sự biến thiên hóa trị theo 2 giai đoạn. Sự biến thiên nội chu kì đặc trưng đối với các nguyên tố  $p$  và các dãy nguyên tố  $d$  theo hàng ngang.



Hình 1-10. Sự phụ thuộc tuần hoàn thứ cấp của năng lượng ion hóa  $I_1$  (eV) vào  $Z$ .

## CÂU HỎI

1. Mol là gì. Tính khối lượng (ra gam) của một mol các chất sau : khí nitơ, nước, hidro nguyên tử, hidro phân tử, natri clorua, anion sunfat, ion amoni, electron, nơtron.

2. Nguyên tử cấu tạo từ những loại hạt cơ bản nào. Mối quan hệ giữa số hạt cơ bản của mỗi loại với điện tích hạt nhân, số khối của nguyên tử, điện tích ion như thế nào ?

3. Thế nào là lưỡng tính sóng hạt của ánh sáng. Phát biểu giả thuyết de Broglie và nguyên lý bất định Heisenberg. Từ quan niệm về lưỡng tính sóng hạt người ta rút ra kết luận gì về phương pháp nghiên cứu cấu tạo nguyên tử.

4. Nguyên tắc khảo sát của cơ học lượng tử đối với cấu tạo nguyên tử. Ý nghĩa của hàm sóng và các số lượng tử.

5. Viết công thức tính năng lượng của electron trong nguyên tử một electron. Từ công thức đó có thể rút ra những kết luận gì.

6. Sự phân bố mật độ electron trong nguyên tử một electron theo khoảng cách từ nhân và theo các phương như thế nào ?

7. Thế nào là spin của electron.

8. Trình bày về 4 số lượng tử. Trị số và ý nghĩa của 4 số lượng tử.

9. Thế nào là orbital nguyên tử (AO). Thế nào là mây electron. Vẽ hình dạng AO và hình dạng mây electron của các trạng thái  $1s$ ,  $2s$ ,  $2p$ ,  $3s$ ,  $3p$ ,  $3d$ .

10. Trình bày vắn tắt nội dung của phương pháp gần đúng một electron áp dụng cho nguyên tử nhiều electron.

11. Trình bày kết quả của phương pháp gần đúng một electron áp dụng cho nguyên tử nhiều electron về : năng lượng của electron và mật độ electron. Từ đó so sánh sự giống nhau và sự khác nhau so với trường hợp nguyên tử một electron.

12. Trình bày các yếu tố ảnh hưởng đến hiệu ứng chắn và hiệu ứng xâm nhập.

13. Hãy trình bày quy luật biến thiên điện tích hạt nhân hiệu dụng và năng lượng AO đối với :

- các electron  $s$  của các lớp khác nhau.

- các electron  $p$  của các lớp khác nhau.
- các electron  $s, p, d, f$  của cùng 1 lớp.
- các electron  $ns$  của một dãy nguyên tố khi điện tích hạt nhân tăng lên.

14. Khi tăng điện tích hạt nhân hiệu năng lượng của các AO  $np$  và  $ns$  trong một nguyên tử biến thiên như thế nào. Giải thích bằng hiệu ứng chắn và điện tích hạt nhân hiệu dụng.

15. Trình bày các quy luật phân bố electron trong nguyên tử nhiều electron. Nêu các ví dụ minh họa.

16. Trình bày nội dung hiện tượng vôi bão hòa. Cho 4 ví dụ.

17. Thế nào là năng lượng ion hóa. Nêu các yếu tố ảnh hưởng đến năng lượng ion hóa.

18. Thế nào là ái lực với electron. Những nguyên tố nào có ái lực với electron mạnh nhất, vì sao. Tại sao năng lượng ion hóa của các nguyên tố đều có cùng dấu, nhưng ái lực với electron lại có thể khác dấu nhau đối với các nguyên tố khác nhau.

19. Phát biểu định luật tuần hoàn. Giải thích nguyên nhân của định luật tuần hoàn. Nguyên tắc xây dựng bảng hệ thống tuần hoàn (HTTH)

20. Nguyên nhân hình thành các chu kì, nhóm, phân nhóm, dãy nguyên tố  $d$ , họ lantanôit, họ actinôit trong bảng HTTH.

21. Trình bày quy luật chung về biến thiên trị số của năng lượng ion hóa và của ái lực với electron của các nguyên tố trong một chu kì, trong một phân nhóm chính. Giải thích.

23. Năng lượng ion hóa thứ nhất của các nguyên tố thuộc chu kì 2 như sau :

Nguyên tố :	Li	Be	B	C	N	O	F	Ne
$I_1$ (ev) :	5,392	9,323	8,298	11,260	14,534	13,618	17,423	21,565

Nhận xét chung về chiều biến thiên của  $I_1$  khi đi từ Li đến Ne. Giải thích

Giải thích sự xuất hiện các cực tiểu nhỏ tại B và O.

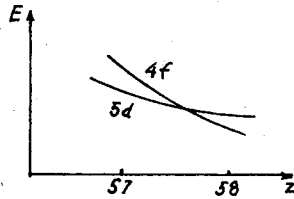
24. Thế nào là hiện tượng tuần hoàn thứ cấp. Cho 1 ví dụ và giải thích.

25. Tại sao nguyên tố  $d$  có nhiều trạng thái hóa trị. Tại sao các nguyên tố lantanôit rất giống nhau và giống lantan.

26. Thế nào là hiện tượng tuần hoàn nội chu kì. Cho ví dụ và giải thích.

27. Thế nào là hiện tượng nén lantanôit. Giải thích.

28. Sự biến thiên năng lượng của các AO  $4f$  và  $5d$  theo  $Z$  có dạng như hình bên. Dùng quy luật biến thiên này hãy giải thích cấu hình electron của hai nguyên tử La ( $Z = 57$ ) và Ce ( $Z = 58$ ).



## BÀI TẬP

1. Trong nguyên tử hydro cơ bản giả thiết bán kính trung bình của quỹ đạo electron là  $0,53 \cdot 10^{-10} m$ , hãy tính độ bất định trong vận tốc chuyển động của electron.

$$\text{Đs : } \Delta v_x \geq 10^6 m/s$$

2. Hãy tính năng lượng mà nguyên tử hydro hấp thụ khi chuyển dời electron từ trạng thái có  $n = 1$  lên trạng thái có  $n = 2$ .

$$\text{Đs : } 10,2 \text{ eV}$$

3. Tính năng lượng ion hóa thứ 3 của Li.

Đs : 122 eV

4. Trong quang phổ hydro tia đỏ  $H_{\alpha}$  có  $\lambda = 6560 \text{ \AA}$ , hãy tính tần số ( $\nu$ ), số sóng  $\bar{\nu}$  và khối lượng của tia đó.

5. Hãy tính bước sóng của sóng vật chất liên kết với một máy bay có khối lượng 100 tấn bay với vận tốc 1000 km/h và của sóng liên kết với một electron có khối lượng bằng  $9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$  chuyển động với vận tốc  $10^6 \text{ m/s}$ . Rút ra nhận xét.

6. Biết năng lượng ion hóa của cacbon (tính ra eV)

$I_1$	$I_2$	$I_3$	$I_4$	$I_5$
11,2	24,4	48	64	392

a) Tính điện tích hiệu dụng của hạt nhân và hàng số chắn đối với mỗi electron bị tách.

b) Giải thích vì sao  $I_{n+1} > I_n$ .

c) Giải thích vì sao có sự tăng đột ngột từ  $I_4$  lên  $I_5$ .

7. Từ biểu thức của hàm xuyên tâm

$$R_{nl}(r) = \sqrt{\frac{Z^3}{a_0^3}} \cdot Z \cdot e^{-\frac{\rho}{2}} \text{ trong đó } \rho = \frac{2Zr}{na_0} \text{ và } a_0 = 0,53 \cdot 10^{-10} \text{ m,}$$

hãy tìm bán kính quả cầu tại đó xác suất có mặt của electron 1s là lớn nhất.

Đs :  $r = \frac{a_0}{Z}$

8. Hãy giải thích vì sao để quan sát được quang phổ phát xạ của nguyên tử Rb và ion  $Rb^+$  người ta phải nung hơi rubidi đến những nhiệt độ khác nhau. Trường hợp nào phải nung đến nhiệt độ cao hơn.

9. Một nguyên tố thuộc chu kì 4 ở cùng nhóm nhưng khác phân nhóm với nguyên tố clo ( $Z = 17$ )

a) Hãy viết cấu hình electron của nguyên tố đó và nêu những đặc trưng cơ bản nhất của nguyên tố đó (kim loại hay phi kim, số oxi hóa).

b) Nguyên tố đó chiếm ô nào trong bảng HTTH.

10. Ion  $R^{3+}$  có hai phân lớp ngoài cùng là  $3p^6 3d^2$

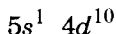
a) Viết cấu hình electron của R và  $R^{3+}$  dưới dạng chữ và o.

b) Xác định Z, chu kì, nhóm, phân nhóm của R.

c) Viết công thức oxit cao nhất của R.

d) Nêu các bộ trị số cơ thể cơ của 4 số lượng tử đối với 2 electron  $3d^2$  của ion  $R^{3+}$ .

11. Một nguyên tử X có các phân lớp ngoài cùng như sau :



Tính điện tích hạt nhân và xác định vị trí của nguyên tố X trong bảng HTTH.

12. Dựa vào cấu hình electron làm thế nào biết được một nguyên tố thuộc phân nhóm chính (nhóm A) hay thuộc phân nhóm phụ (nhóm B) thuộc họ lantanôit hay họ actinôit. Cho ví dụ.

13. Viết cấu hình electron của các nguyên tử có  $Z = 9, 11, 16$  từ đó hãy cho biết :

a) Nguyên tố nào trong các nguyên tố trên có năng lượng ion hóa  $I_1$  lớn nhất, nguyên tố nào có năng lượng ion hóa  $I_1$  nhỏ nhất.

b) Cation và anion nào dễ được tạo thành nhất từ mỗi nguyên tử.

14. Có hai nguyên tố ở các chu kì 3 và 4 đều thuộc nhóm IVA (phân nhóm chính nhóm 4). Viết cấu hình electron của các nguyên tử và các ion dạng  $R^{2+}$  và  $R^{4+}$  của chúng.

15. Vì sao các nguyên tố thuộc nhóm IA và các nguyên tố thuộc nhóm IB đều có 1 electron ở lớp ngoài cùng nhưng các

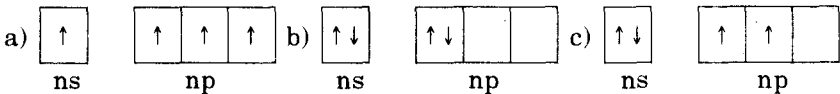


nguyên tố thuộc nhóm IA có năng lượng ion hóa nhỏ hơn so với nhóm IB.

16. Vì sao hai nguyên tố  $Z = 43$  và  $Z = 53$  có số oxi hoá cao nhất bằng nhau mà số oxi hóa thấp nhất lại khác nhau.

17. Một nguyên tố R thuộc chu kì 4 có thể tạo hợp chất khí dạng  $RH_3$  và tạo oxit cao nhất dạng  $R_2O_5$ . Hãy viết cấu hình electron của nguyên tử R và các ion  $R^{3+}$ ,  $R^{5+}$ . Xác định vị trí của R trong bảng HTTH.

18. Một nguyên tố p có 2 phân lớp ngoài cùng có thể có các trạng thái electron sau :



Trạng thái nào bền nhất, trạng thái nào có mức năng lượng cao nhất, vì sao.

19. Biết rằng các nguyên tử H, Li, B, C, O, F khi kết hợp thêm electron thì giải phóng năng lượng, còn He, Be, N, Ne khi kết hợp thêm electron thì tiêu thụ năng lượng. Hãy giải thích bằng khái niệm hiệu ứng chắn và điện tích hiệu dụng.

20. Năng lượng ion hóa  $I_1$  của dãy nguyên tố sau : (ev)

Na    Mg    Al    Si    P    S    Cl    Ar

$I_1$ : 5,139 7,646 5,986 8,152 10,487 10,360 12,968 15,760

Hãy vẽ đồ thị  $I_1 - Z$ , nhận xét quy luật biến đổi của  $I_1$  theo Z trong một chu kì và giải thích quy luật đó.

21. Giá trị năng lượng ion hóa  $I_1$  của các nguyên tố p và nguyên tố d của nhóm 5 như sau (tính ra eV)

Các nguyên tố p

Các nguyên tố d

	Z	$I_1$		Z	$I_1$
As	33	9,82	V	23	6,74
Sb	51	8,61	Nb	41	6,88
Bi	83	7,29	Ta	73	7,89

Nhận xét quy luật biến thiên  $I_1$  ở 2 nhóm nguyên tố trên dùng quan niệm hiệu ứng chắn và hiệu ứng xâm nhập giải thích các quy luật đó.

22. So sánh năng lượng ion hóa thứ nhất và bán kính nguyên tử của các nguyên tố Lu (71), Ce(58), Cu (29), Ti (22) như sau :

$$\begin{cases} R(\text{Lu}) < R(\text{Ce}) \\ I_1(\text{Lu}) > I_1(\text{Ce}) \end{cases} \quad \begin{cases} R(\text{Cu}) < R(\text{Ti}) \\ I_1(\text{Cu}) > I_1(\text{Ti}) \end{cases}$$

Hãy dùng hiệu ứng chắn và hiệu ứng xâm nhập giải thích hiện tượng trên.

## Chương II

# LIÊN KẾT HÓA HỌC VÀ CẤU TẠO PHÂN TỬ

## I. LIÊN KẾT HÓA HỌC

### 1. Các đặc trưng cơ bản của liên kết hóa học

**1.1. Năng lượng liên kết :** Là năng lượng được giải phóng khi hình thành mới liên kết hóa học giữa các nguyên tử cô lập.

Năng lượng liên kết có thể tính ra *eV/phân tử* hay *kJ.mol<sup>-1</sup>* hay *kcal.mol<sup>-1</sup>*.

$$1 \text{ eV} = 4,3360.10^{-8} \text{ kcal/mol}$$

$$1 \text{ kcal} = 4,1840 \text{ kJ.}$$

Ví dụ : liên kết H-H có năng lượng bằng - 414,4 *kJ/mol*

**1.2. Độ dài liên kết :** Là khoảng cách giữa tâm của 2 nguyên tử tham gia liên kết. Độ dài liên kết thường được tính ra anstron (Å) .  $1\text{Å} = 10^{-8} \text{ cm.}$

Ví dụ : liên kết H-H có độ dài bằng 0,74 Å.

---

\* Năng lượng liên kết bằng về trị số nhưng ngược dấu với năng lượng phá vỡ liên kết.

**1.3. Góc hóa trị :** Là góc tạo bởi 2 mối liên kết ở cùng một nguyên tử với hai nguyên tử khác. Ví dụ trong phân tử nước góc hóa trị H-O-H là  $104,5^{\circ}$ .

**1.4. Độ bội của liên kết :** Là số mối liên kết được hình thành giữa 2 nguyên tử cho trước. Ví dụ trong phân tử nitơ độ bội của liên kết bằng 3 :  $N \equiv N$ .

## 2. Độ âm điện của nguyên tố

Khi hình thành liên kết hóa học các nguyên tử tham gia liên kết trao đổi electron hóa trị với nhau (nhường electron cho nhau hay góp chung electron). Khi đó chiều di chuyển của electron hóa trị được xác định bởi so sánh *độ âm điện* của hai nguyên tử.

Xét sự hình thành mối liên kết hóa học giữa 2 nguyên tử A và B. Khi đó có thể xảy ra các trường hợp sau :

*Trường hợp 1 :* A nhường electron cho B để biến thành các ion  $A^{+}$ ,  $B^{-}$



các ion  $A^{+}$  và  $B^{-}$  liên kết với nhau bằng lực hút tĩnh điện.

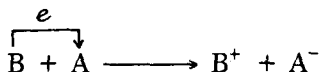
Khi đó để tách electron khỏi nguyên tử A cần tiêu thụ năng lượng  $I_A$ .

Khi kết hợp electron vào B giải phóng năng lượng  $E_B$ .

Năng lượng được giải phóng trong cả quá trình sẽ là :

$$- E_B + I_A$$

*Trường hợp 2 :* B nhường electron cho A :



Năng lượng giải phóng sẽ là :

$$- E_A + I_B$$

Quá trình thực tế xảy ra sẽ là quá trình giải phóng nhiều năng lượng nhất, ví dụ xảy ra quá trình thứ nhất, khi đó sẽ có :

$$\begin{aligned} -E_B + I_A &< -E_A + I_B \\ E_B + I_B &> E_A + I_A \end{aligned}$$

hay có thể đặt :

$$\frac{E_B + I_B}{2} > \frac{E_A + I_A}{2}$$

Đại lượng :  $\chi = \frac{E + I}{2}$  (2-1)

được gọi là *độ âm điện của nguyên tố*. Trong đó E là ái lực với electron, I là năng lượng ion hóa của nguyên tố đó.

Từ lí luận trên ta rút ra kết luận : *Khi hình thành mỗi liên kết hóa học giữa 2 nguyên tử, electron hóa trị chuyển từ nguyên tử có độ âm điện nhỏ sang phía nguyên tử có độ âm điện lớn.*

Người ta thường tính độ âm điện ra đơn vị qui ước, khi đó chấp nhận độ âm điện của flo bằng 4 đơn vị. Bảng 2-1 ghi độ âm điện của một số nguyên tố.

Bảng 2-1

ĐỘ ÂM ĐIỆN CỦA MỘT SỐ NGUYÊN TỐ

Ng. tố	$\chi$	Ng. tố	$\chi$	Ng. tố	$\chi$	Ng. tố	$\chi$	Ng. tố	$\chi$	Ng. tố	$\chi$	Ng. tố	$\chi$
H	2.1												
Li	0.98	Be	1.5	B	2.0	C	2.5	N	3.07	O	3.5	F	4.0
Na	0.93	Mg	1.2	Al	1.6	Si	1.8	P	2.2	S	2.6	Cl	3.0
K	0.91	Ca	1.04	Ga	1.8	Ge	1.8	As	2.1	Se	2.5	Br	2.8
Rb	0.89	Sr	1.0	In	1.5	Sn	1.8	Sb	1.8	Te	2.1	I	2.6
		Ba	0.99										

Dựa vào độ âm điện người ta phân biệt các dạng liên kết cơ bản :

- Nếu hai nguyên tử tham gia liên kết có độ âm điện khác xa nhau ( $\Delta\chi \geq 2$ ) thì mây electron liên kết gần như bị di chuyển hoàn toàn về phía nguyên tử có độ âm điện nhỏ. Khi đó hình thành *liên kết ion*.

- Nếu hai nguyên tử tham gia liên kết có độ âm điện bằng nhau thì mây electron liên kết được phân bố đều giữa 2 nguyên tử và hình thành liên kết *cộng hóa trị*.

- Nếu hai nguyên tử tham gia liên kết có độ âm điện khác nhau không nhiều ( $\Delta\chi < 2$ ) thì hình thành liên kết cộng hóa trị phân cực.

### 3. Liên kết ion

Điều kiện tạo thành liên kết ion là hai nguyên tử tham gia liên kết có độ âm điện khác nhau nhiều :  $\Delta\chi \geq 2$ . Khi đó mây electron liên kết sẽ chuyển hoàn toàn về phía nguyên tử có độ âm điện lớn và làm cho nguyên tử này trở thành ion âm, nguyên tử kia trở thành ion dương. Hai nguyên tử liên kết với nhau bằng lực hút tĩnh điện.

*Hóa trị* của nguyên tử trong liên kết ion được tính bằng số electron hóa trị mà nguyên tử nhường ra hay thu vào. Khi nguyên tử nhường electron để biến thành ion dương thì nó có hóa trị dương. Khi nguyên tử thu electron để biến thành ion âm thì có hóa trị âm.

Ví dụ : Khi hình thành liên kết  $\text{Na}^+ - \text{Cl}^-$  thì natri có hóa trị 1+, clo có hóa trị 1-.

Năng lượng của liên kết ion là năng lượng tương tác tĩnh điện giữa 2 ion gồm có :

- Năng lượng hút của 2 điện tích ngược dấu của hai ion được tính bằng công thức Culong :

$$U_{hút} = -k \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r}$$

$k$  là hệ số tỉ lệ, phụ thuộc cách chọn đơn vị.

- Năng lượng đẩy giữa hai vỏ electron của hai ion, tương tác đẩy chỉ đáng kể khi hai ion tiến đến sát gần nhau, mây electron của hai ion bắt đầu tiếp xúc nhau.

$$J_{đẩy} = \frac{B \cdot e^2}{r^n}$$

$B$  là hằng số,  $n$  là hệ số đẩy Born có giá trị phụ thuộc vào dạng cấu trúc vỏ electron của ion.

Tổng năng lượng tương tác giữa 2 ion :

$$U = U_{hút} + U_{đẩy}$$

Liên kết bền ứng với giá trị âm nhất của  $U$  khi khoảng cách giữa tâm của 2 ion bằng  $r_0$ .

Liên kết ion có một số đặc điểm sau :

- Không có tính bão hòa.
- Không có tính định hướng.

Vì vậy ở điều kiện thường các hợp chất ion thường tạo thành các tinh thể ion, ví dụ muối, oxit kim loại, hidroxit kim loại.

## 4. Liên kết cộng hóa trị, phương pháp cặp electron liên kết

### 4.1. Bài toán phân tử hidro

- Khi áp dụng cơ học lượng tử để giải quyết vấn đề bản chất liên kết hóa học, năm 1927 hai nhà bác học W.Heiter và F.London đã giải bài toán tính năng lượng liên kết trong phân tử hidro ( $H_2$ ).

Kết quả bài toán cho thấy :

- Liên kết giữa 2 nguyên tử hidro được hình thành khi 2 electron của 2 nguyên tử hidro có spin ngược chiều nhau, tức là  $m_s = +1/2$  và  $m_s = -1/2$ .

Khi đó năng lượng của phân tử  $H_2$  thấp hơn tổng năng lượng của hai nguyên tử H cô lập, và mức năng lượng của phân tử thấp nhất khi khoảng cách giữa tâm của 2 nguyên tử H bằng  $0,74 \text{ \AA}$ .

- Khi hình thành liên kết mật độ mây electron ở khu vực không gian giữa 2 hạt nhân tăng lên giống như 2 đám mây xen phủ lên nhau, do đó mật độ điện tích âm ở khu vực đó tăng lên, điều này có tác dụng hút hai hạt nhân lại và liên kết chúng lại với nhau.

Khái quát hóa các kết quả trên chúng ta đi đến những tiên đề cơ bản của phương pháp cặp electron liên kết.

#### 4.2. Những tiên đề cơ bản của phương pháp cặp electron liên kết

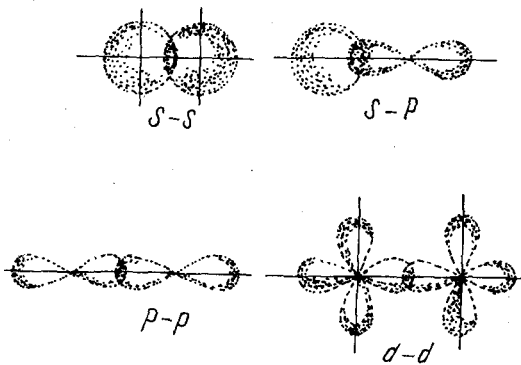
a) *Liên kết cộng hóa trị* được hình thành do sự ghép đôi hai electron độc thân có số lượng tử  $m_s$  ngược dấu nhau của 2 nguyên tử tham gia liên kết vào một ô lượng tử của phân tử (một orbital phân tử).

Khi đó xảy ra sự xen phủ giữa 2 mây electron liên kết.

b) *Mức độ xen phủ* giữa 2 mây electron càng mạnh thì liên kết càng bền.

c) *Liên kết* được phân bố theo phương pháp tại đó xen phủ lẫn nhau giữa các mây electron liên kết là lớn nhất.

Hình ảnh xen phủ giữa một số mây electron được trình bày trên hình 2-1.



Hình 2-1. Sự xen phủ lẫn nhau của một số mây electron liên kết.



## 5. Hóa trị của nguyên tố trong liên kết cộng hóa trị.

Từ tiêu đề 1 chúng ta có thể đi đến quy tắc : Cộng hóa trị của một nguyên tử được tính bằng số electron chưa ghép đôi (electron độc thân) của nguyên tử khi ở trạng thái tự do.

Ví dụ : nguyên tử hidro có hóa trị bằng 1.  $\begin{array}{c} 1s \\ \boxed{\uparrow} \end{array}$

nguyên tử He có hóa trị bằng 0.  $\begin{array}{c} 2s \\ \boxed{\uparrow\downarrow} \end{array}$

Li :  $\boxed{\uparrow\downarrow} \quad \boxed{\uparrow}$  hóa trị 1

Be ở trạng thái cơ bản :  $\boxed{\uparrow\downarrow} \quad \boxed{\uparrow\downarrow}$  cộng hóa trị bằng 0.  
 $\boxed{\uparrow\downarrow} \quad \boxed{\uparrow} \quad \boxed{\phantom{\uparrow}} \quad \boxed{\phantom{\uparrow}}$

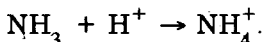
Trạng thái kích thích :  $1s^2 2s^1 2p^1$ , cộng hóa trị bằng 2.  
 Bằng phương pháp khảo sát tương tự chúng ta sẽ thấy được :

- Nguyên tử B : trạng thái cơ bản có hóa trị bằng 1.  
 trạng thái kích thích có hóa trị bằng 3.
- Nguyên tử C : trạng thái cơ bản có hóa trị bằng 2,  
 trạng thái kích thích có hóa trị bằng 4.
- Nguyên tử N : có hóa trị bằng 3
- Nguyên tử O : có hóa trị bằng 2
- Nguyên tử F : có hóa trị bằng 1.
- Nguyên tử Ne : có hóa trị bằng 0.

Từ tiên đề 1 chúng ta cũng suy ra được tính chất bão hòa của liên kết cộng hóa trị. Thật vậy sau khi tạo thành liên kết với nguyên tử khác nếu một nguyên tử không còn electron chưa ghép đôi thì không còn khả năng tạo thêm liên kết cộng hóa trị. Tuy nhiên điều này còn được hiệu chỉnh bằng khả năng tạo liên kết cho nhận

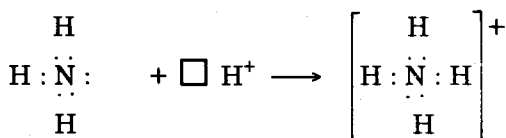
## 6. Liên kết cho - nhận

6.1. Liên kết cho nhận. Xét sự hình thành ion  $\text{NH}_4^+$  từ phân tử  $\text{NH}_3$  và ion  $\text{H}^+$ .



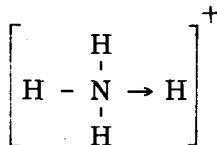
Nguyên tử N trong phân tử  $\text{NH}_3$  đã tạo thành 3 mối liên kết cộng hóa trị với 3 nguyên tử hydro, còn có một cặp electron chưa dùng đến gọi là *cặp electron không phân chia*.

Ion  $\text{H}^+$  có ô lượng tử trống  $1s$ . Khi ion  $\text{H}^+$  tiến đến gần phân tử  $\text{NH}_3$ , cặp electron không phân chia của nguyên tử N bị ion  $\text{H}^+$  hút và trở thành cặp electron chung cho cả 2 nguyên tử :

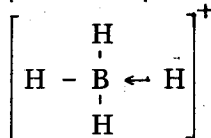


Mối liên kết được hình thành nhờ cặp electron không phân chia của 1 nguyên tử và ô lượng tử trống của nguyên tử kia được gọi là *liên kết cho - nhận*, hay còn gọi là *liên kết phối trí* hoặc *liên kết bán cực*. Nguyên tử có cặp electron không phân chia được gọi là *nguyên tử cho*, nguyên tử có ô lượng tử trống gọi là *nguyên tử nhận*.

Có thể biểu diễn mối liên kết cho - nhận bằng mũi tên :



Một số ví dụ khác :



**6.2. Cộng hóa trị cực đại của nguyên tố.** Như đã nói ở trên, liên kết cộng hóa trị không những được hình thành nhờ các electron chưa ghép đôi mà còn nhờ các cặp electron không phân chia và nhờ các ô lượng tử trống. Từ đó có thể rút ra kết luận : *Số liên kết cộng hóa trị mà nguyên tử có khả năng tạo thành bằng số ô lượng tử (orbital) của nguyên tử có khả năng tham gia tạo liên kết.*

Đối với các nguyên tố thuộc chu kì 2 của bảng hệ thống tuần hoàn có 4 ô lượng tử (1 ô  $2s$  và 3 ô  $2p$ ) tham gia liên kết, do đó cộng hóa trị cao nhất bằng 4.

Ở chu kì 3 và các chu kì tiếp theo ngoài các ô lượng tử  $ns$  và  $np$  còn có một số ô lượng tử  $(n - 1)d$  tham gia tạo liên kết, do đó cộng hóa trị cực đại của các nguyên tố này lớn hơn 4.

## **7. Tính định hướng của liên kết cộng hóa trị và cấu hình hình học của phân tử**

Các mối liên kết cộng hóa trị trong phân tử được phân bố theo những phương sao cho sự xen phủ lẫn nhau của các mây electron liên kết là cực đại, vì vậy hình dạng các mây electron tham gia liên kết có ảnh hưởng quyết định đến cấu trúc hình học của phân tử.

**7.1. Phân tử 2 nguyên tử.** Trường hợp *liên kết s-s* các mây electron  $s$  có dạng đối xứng cầu nên mức độ xen phủ giữa 2 mây chỉ phụ thuộc vào khoảng cách giữa các hạt nhân của 2 nguyên tử và không phụ thuộc vào cách định hướng giữa các nguyên tử đó (xem hình 2-1).

Trường hợp *liên kết s-p* : vì mây electron  $p$  có hình dáng quả tạ định hướng theo một phương xác định (trục  $x$  hoặc trục

y hoặc trục z) nên muốn có sự xen phủ cực đại với mây electron s của nguyên tử thứ 2 thì nguyên tử thứ 2 này phải nằm ở vị trí trên trục đối xứng của mây electron p của nguyên tử thứ nhất (h.2.1).

Trường hợp liên kết p-p : muốn có xen phủ cực đại thì hai nguyên tử tham gia liên kết phải định hướng sao cho trục đối xứng của hai mây electron liên kết p đó trùng lên nhau (h.2.1).

Về mức độ xen phủ : nếu quy ước độ lớn xen phủ s-s bằng 1 thì độ lớn xen phủ của liên kết s-p là  $\sqrt{3}$  và của liên kết p-p là 3. Độ bền của liên kết tỷ lệ với mức độ xen phủ.

**7.2. Trường hợp phân tử 3 nguyên tử.** Ví dụ xét phân tử  $H_2S$ . Hai mỗi liên kết S-H được thực hiện nhờ 2 mây electron 3p của nguyên tử S với hai mây electron 1s của 2 nguyên tử H. Vì hai mây 3p của nguyên tử S định hướng vuông góc với nhau nên góc giữa hai mỗi liên kết S-H bằng  $90^\circ$  (hình 2-2). Thực nghiệm cho biết góc này bằng  $92^\circ$  hơi lớn hơn  $90$ . Điều này được giải thích do tính phân cực của mỗi liên kết S-H làm cho 2 nguyên tử H tích điện dương và đẩy lẫn nhau.

Một cách tương tự có thể giải thích cấu tạo hình học của phân tử  $H_2O$  với góc giữa 2 liên kết O-H bằng  $104,50^\circ$ .

**7.3. Phân tử 4 nguyên tử.** Ví dụ phân tử  $NH_3$  có 3 mỗi liên kết N-H được thực hiện bởi 3 mây electron p của nguyên tử N và 3 mây s của 3 nguyên tử H, vì vậy phân tử  $NH_3$  cấu tạo tháp tam giác, nguyên tử N ở đỉnh tháp, góc giữa 2 liên kết bằng  $107,3^\circ$ .

Cấu hình hình học của các phân tử  $H_2O$ ,  $NH_3$ , sẽ được giải thích thỏa đáng hơn bằng thuyết lai hóa.

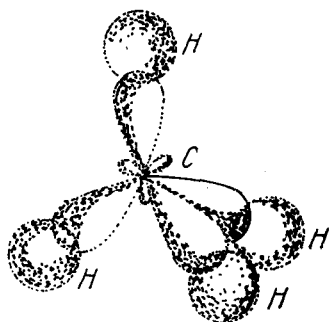
## 8. Thuyết lai hóa

**8.1. Sự lai hóa các mây electron.** Xét phân tử  $CH_4$ . Trong phân tử này có 4 mỗi liên kết C-H được tạo thành bởi 4 mây

electron hóa trị của nguyên tử C là  $2s^1$ ,  $2p^3$  và 4 mây electron  $1s$  của 4 nguyên tử H. Như vậy đáng lẽ trong phân tử  $\text{CH}_4$  phải có 2 loại liên kết khác nhau là : 1 liên kết  $s-s$  và 3 liên kết  $s-p$ . Tuy nhiên thực nghiệm cho biết 4 mối liên kết C-H trong phân tử  $\text{CH}_4$  đều giống hệt nhau và được định hướng đôi một với nhau những góc bằng  $109^\circ 28'$ , theo các phương từ tâm đến 4 đỉnh của hình tứ diện đều (hình 2-3).



Hình 2-2. Cấu tạo của phân tử  $\text{H}_2\text{S}$ .



Hình 2-3. Các mối liên kết C-H trong phân tử  $\text{CH}_4$ .

Để giải thích sự tạo thành các mối liên kết trong phân tử  $\text{CH}_4$  và những trường hợp tương tự các nhà bác học Mỹ Sleiter và L. Pauling đề ra *thuyết lai hóa*. Theo thuyết lai hóa khi nguyên tử C tham gia liên kết với 4 nguyên tử H để tạo thành phân tử  $\text{CH}_4$  thì mây electron  $2s$  và mây electron  $2p$  của nguyên tử C trộn lẫn với nhau (tổ hợp với nhau) tạo thành 4 mây

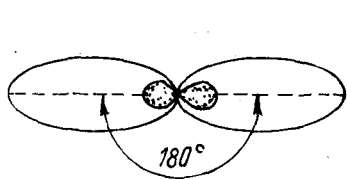
electron  $q$  giống nhau có dạng quả tạ không cân đối có trục đối xứng làm với nhau những góc bằng  $109^{\circ}28'$  (hình 2.6).

$$2s + 2p_x + 2p_y + 2p_z = 4q$$

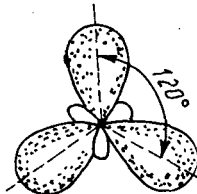
Mây electron  $q$  được gọi là *mây electron lai hóa*. Nhờ sự lai hóa như vậy khi hình thành các mối liên kết C - H mức độ xen phủ giữa các mây electron liên kết lớn hơn, do đó liên kết bền hơn.

## 8.2. Các kiểu lai hóa

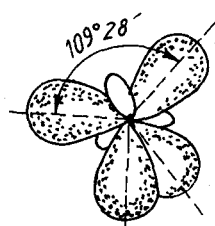
- *Lai hóa  $sp$*  : một mây  $s$  trộn lẫn với một mây  $p$  tạo thành 2 mây  $q$  nằm thẳng hàng với nhau nhưng hướng về hai phía đối nhau (hình 2.4). Ví dụ nguyên tử Be trong phân tử  $BeCl_2$ .



Hình 2-4. Lai hóa  $sp$ .



Hình 2-5. Lai hóa  $sp^2$ .



Hình 2-6. Lai hóa  $sp^3$  trong phân tử  $CH_4$ .

- *Lai hóa  $sp^2$*  : Một mây  $s$  trộn lẫn với 2 mây  $p$  tạo thành 3 mây  $q$  nằm trong 1 mặt phẳng tạo với nhau những góc bằng  $120^{\circ}$ . Ví dụ nguyên tử B trong phân tử  $BCl_3$  (hình 2-5).

- *Lai hóa  $sp^3$*  : Một mây  $s$  trộn lẫn với 3 mây  $p$  tạo thành 4 mây  $q$  định hướng theo phương từ tâm đến 4 đỉnh của hình tứ diện đều (hình 2-6). Ví dụ nguyên tử O trong  $H_2O$ , nguyên tử N trong phân tử  $NH_3$ , và trong ion  $NH_4^+$  ...

- *Lai hóa  $dsp^2$*  : Một mây  $d$  của lớp sát ngoài trộn lẫn với 1 mây  $s$  và 2 mây  $p$  của lớp ngoài cùng tạo thành 4 mây  $q$  có

trục đối xứng nằm trong cùng 1 mặt phẳng định hướng từ tâm ra 4 đỉnh hình vuông. Kiểu lai hóa này gặp trong các ion phức tạp như  $\text{PtCl}_4^{2-}$ .

- Lai hóa  $d^2sp^3$ : Hai mây  $d$  của lớp sát ngoài trộn lẫn với 1 mây  $s$  và 2 mây  $p$  của lớp ngoài cùng tạo thành 6 mây  $q$  có trục đối xứng định hướng theo phương từ tâm đến 6 đỉnh của hình bát diện đều.

Ví dụ trong ion phức tạp  $[\text{PtCl}_6]^{2-}$

**8.3. Điều kiện lai hóa bên.** Điều kiện để trạng thái lai hóa của nguyên tử bên là :

- Năng lượng của các orbital tham gia lai hóa phải xấp xỉ nhau.

- Mật độ electron của AO tham gia lai hóa phải đủ lớn.

- Độ xen phủ của các AO lai hóa với các AO của các nguyên tử khác tham gia liên kết phải đủ lớn để tạo thành liên kết bền.

Từ các điều kiện trên ta có thể thấy : Trong một chu kì hiệu năng lượng của AO- $s$  với AO- $p$  tăng lên khi đi từ đầu đến cuối chu kì nên khả năng tham gia lai hóa giảm xuống. Khi tăng kích thước nguyên tử, khả năng lai hóa của các AO hóa trị giảm xuống.

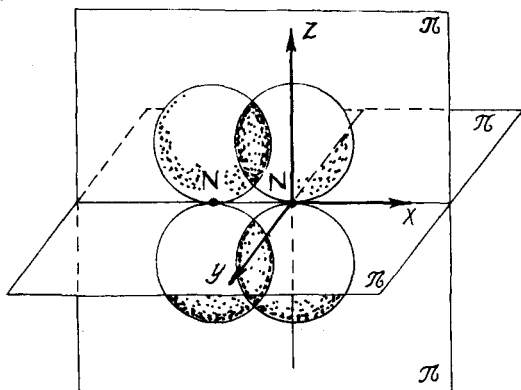
## 9. Liên kết bội. Các dạng liên kết $\sigma$ , $\pi$

Trong các trường hợp đã xét ở các phần trên mỗi liên kết được tạo thành khi các mây electron liên kết xen phủ nhau dọc theo trục nối hai hạt nhân nguyên tử. Những mối liên kết này gọi là liên kết  $\sigma$ . Phần xen phủ trong liên kết  $\sigma$  nhận trục nối hai hạt nhân nguyên tử làm trục đối xứng.

Nếu giữa 2 nguyên tử xuất hiện liên kết đôi hoặc liên kết ba, thì mỗi liên kết thứ 2, thứ 3 do các mây electron  $p$  còn lại định hướng theo phương vuông góc với trục nối giữa hai hạt

nhân nguyên tử (hình 2 - 7) các mây electron  $p$  này xen phủ với nhau ở 2 bên trục liên kết. Những mối liên kết này được gọi là liên kết  $\pi$ .

Liên kết  $\pi$  tạo thành trong những phân tử có liên kết bội. Ví dụ : trong phân tử  $N_2$  có một mối liên kết  $\sigma$  và 2 mối liên kết  $\pi$ . Giữa hai nguyên tử C trong phân tử  $C_2H_4$  có 1 mối liên kết  $\sigma$  và 1 mối liên kết  $\pi$ , còn trong phân tử  $C_2H_2$  có 1 mối liên kết  $\sigma$  và 2 mối liên kết  $\pi$ .



Hình 2-7. Liên kết  $\pi$  trong phân tử  $N_2$ .

## 10. Độ phân cực của liên kết cộng hóa trị

Khi hai nguyên tử tham gia liên kết thuộc cùng một nguyên tố thì mây electron liên kết được phân bố đều giữa 2 nguyên tử và ta có liên kết cộng hóa trị hoàn toàn không phân cực.

Nếu hai nguyên tử tham gia liên kết thuộc hai nguyên tố có độ âm điện khác nhau thì mây electron liên kết sẽ bị hút lệch về phía nguyên tử có độ âm điện lớn hơn làm cho nguyên tử này có trệ điện tích âm và nguyên tử kia có trệ điện tích dương. Khi đó ta có mối liên kết cộng hóa trị phân cực.

Khi hiệu số độ âm điện giữa 2 nguyên tử tham gia liên kết đủ lớn ( $\Delta_x \geq 2$ ) thì mây electron của cặp điện tử liên kết hầu như bị hút lệch hoàn toàn về phía nguyên tử có độ âm điện



lớn và nguyên tử này biến thành ion âm. Nguyên tử kia trở thành ion dương. Ta có liên kết ion. Như vậy có thể coi liên kết ion như trường hợp giới hạn của liên kết cộng hóa trị phân cực.

## 11. Phương pháp orbital phân tử

Phương pháp cặp electron liên kết tuy áp dụng có kết quả cho nhiều phân tử, nhưng còn nhiều trường hợp không thể giải thích được bằng phương pháp này, ví dụ sự tạo thành phân tử ion  $H_2^+$ , hoặc tính thuận từ của khí oxi... Vì vậy hiện nay một phương pháp khác được sử dụng rộng rãi hơn, đó là phương pháp orbital phân tử, viết tắt là phương pháp MO (molecular orbital).

**11.1. Tư tưởng cơ bản của phương pháp MO.** Mỗi electron trong phân tử được coi như chuyển động trong một điện trường do các hạt nhân nguyên tử và các electron còn lại gây ra. Trạng thái của mỗi electron được mô tả bằng một hàm sóng gọi là *orbital phân tử* (MO). Trạng thái của toàn bộ phân tử được xác định bởi hàm sóng toàn phần của phân tử.

Bài toán phân tử quy về việc xác định các MO và các mức năng lượng tương ứng của chúng, xây dựng giản đồ mức năng lượng của các MO, sau đó sắp xếp electron vào các MO theo những quy tắc thích hợp để thu được cấu hình electron của phân tử.

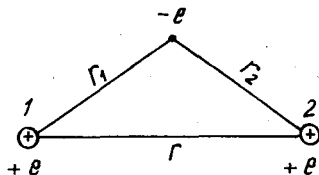
Trong phép gần đúng thứ nhất (gần đúng Born - Oppenheimer) người ta coi các hạt nhân là đứng yên và giải phương trình Schrodinger :

$$H\psi = E\psi$$

$H$  là toán tử Hamilton,  $E$  là trị riêng của năng lượng,  $\psi$  là hàm số riêng mô tả trạng thái 1 electron. Ta sẽ lần lượt khảo sát các phân tử từ đơn giản đến phức tạp.

**11.2. Phân tử 2 nguyên tử có hạt nhân giống nhau (phân tử đồng hạch).**

Ví dụ phân tử  $H_2^+$ . Ta có thể giải chính xác bài toán cơ học lượng tử cho phân tử này. Từ hình 2-8 ta viết được biểu thức của toán tử Hamilton :



Hình 2-8. Phân tử  $H_2^+$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left( -\frac{1}{r_1} - \frac{1}{r_2} + \frac{1}{r} \right)$$

động năng

thế năng

Phương trình Schrodinger :

$$H\psi = E\psi$$

Để lập MO người ta dùng *phương pháp tổ hợp tuyến tính các orbital nguyên tử* (AO) dựa trên quan niệm sau : Trong phân tử hai hạt nhân 1, 2 nằm cách nhau một khoảng cách  $r$  xác định. Khi electron chuyển động gần hạt nhân 1, nó chịu tác dụng chủ yếu của hạt nhân 1 và trạng thái electron được mô tả bởi hàm sóng  $\varphi_1$  của nguyên tử thứ 1 ( $\varphi_1$  là hàm sóng 1s của nguyên tử 1) nhưng chịu một nhiễu loạn nào đó gây ra bởi hạt nhân thứ 2, nên phải có một số hạng bổ sung vào biểu thức của MO. Tương tự như vậy, khi electron chuyển động gần hạt nhân thứ 2 trạng thái của nó được mô tả bởi hàm  $\varphi_2$  của nguyên tử thứ 2 (là hàm 1s của nguyên tử thứ 2) có bổ sung một số hạng biểu thị sự nhiễu loạn gây ra bởi hạt nhân thứ 1. Từ đó ta có thể xem MO  $\psi$  như tổ hợp tuyến tính của các AO  $\varphi_1$  và  $\varphi_2$ .

$$\psi = a_1\varphi_1 + a_2\varphi_2$$

Các hệ số  $a_1$  và  $a_2$  là trọng lượng thống kê của  $\varphi_1$  và  $\varphi_2$ .  $a_1^2$  và  $a_2^2$  là xác suất để electron trong phân tử được mô tả bởi  $\varphi_1$  hay  $\varphi_2$ . Vì 2 hạt nhân 1 và 2 giống nhau nên :

$$a_1^2 = a_2^2 \text{ hay } a_1 = \pm a_2$$

Ta ký hiệu :

$$\psi_+ = a_1(\varphi_1 + \varphi_2), \psi_- = a_1(\varphi_1 - \varphi_2)$$

với :

$$\varphi_1 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cdot \frac{1}{a^{3/2}} e^{-r_1/a}, \varphi_2 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cdot \frac{1}{a^{3/2}} e^{-r_2/a}$$

$\varphi_1, \varphi_2$  được gọi là các AO hóa trị, đó là các AO có mức năng lượng cao nên electron tại đó liên kết yếu với hạt nhân, để tham gia các mối liên kết hóa học.

Để tìm biểu thức cho hàm MO người ta áp dụng nguyên lý biến phân. Biểu thức này càng tốt khi năng lượng E tìm được càng thấp.

Từ phương trình  $H\psi = E\psi$  có thể suy ra biểu thức của E.

$$E = \frac{\int \psi H \psi d\tau}{\int \psi^2 d\tau}$$

Các AO  $\varphi_1$  và  $\varphi_2$  đã được chuẩn hóa, nghĩa là :

$$\int \varphi_1^2 d\tau = \int \varphi_2^2 d\tau = 1.$$

Để đơn giản ta viết :

$$S = \int \varphi_1 \varphi_2 d\tau \quad \alpha_1 = \int \varphi_1 H \varphi_1 d\tau$$

$$\alpha_2 = \int \varphi_2 H \varphi_2 d\tau \quad \beta = \int \varphi_1 H \varphi_2 d\tau$$

Do tính chất đối xứng :  $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha$  đối với ion  $H^+$ .

S là tích phân phủ có giá trị phụ thuộc vào khoảng cách r giữa 2 hạt nhân.

$\alpha$  : tích phân Coulomb.

$\beta$  : tích phân cộng hưởng

Biểu thức của năng lượng bây giờ được viết :

$$E = \frac{a_1^2 \alpha_1 + a_2^2 \alpha_2 + 2a_1 a_2 \beta}{a_1^2 + a_2^2 + 2a_1 a_2 S}$$

Áp dụng nguyên lý biến phân :

$$\frac{\partial E}{\partial a_1} = 0 \quad \text{và} \quad \frac{\partial E}{\partial a_2} = 0$$

Điều kiện này dẫn đến các phương trình chạy đua (phương trình thế kỷ) :

$$\begin{cases} a_1(\alpha_1 - E) + a_2(\beta - ES) = 0 \\ a_1(\beta - ES) + a_2(\alpha_2 - E) = 0 \end{cases}$$

Để có 1 nghiệm không tầm thường ( $a_1 = a_2 = 0$ ) thì định thức thế kỉ phải bằng 0 :

$$\begin{vmatrix} \alpha_1 - \beta & \beta - S \\ \beta - ES & \alpha_2 - E \end{vmatrix} = 0$$

Ta đã có :  $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha$ .

Hai nghiệm là :

$$E_+ = \frac{\alpha + \beta}{1 + S} \quad ; \quad E_- = \frac{\alpha - \beta}{1 - S}$$

Thay các trị số này của E vào các phương trình thế kỉ ta sẽ được :

$$\text{đối với } E_+ : a_1 = a_2$$

$$\text{đối với } E_- : a_1 = -a_2$$

Hai nghiệm này được tìm ra từ điều kiện đối xứng.

Xét các hàm sóng. Do điều kiện chuẩn hóa :

$$\int \psi^2 d\tau = a_1^2 + a_2^2 + 2a_1a_2S = 1$$

Cuối cùng ta tìm được biểu thức của 2 hàm sóng MO :

$$\psi_+ = \frac{1}{\sqrt{2(1+S)}} (\varphi_1 + \varphi_2) \quad \text{ứng với } E_+ = \frac{\alpha + \beta}{1 + S}$$

$$\psi_- = \frac{1}{\sqrt{2(1-S)}} (\varphi_1 - \varphi_2) \quad \text{ứng với } E_- = \frac{\alpha - \beta}{1 - S}$$

Nếu bỏ qua tích phân phủ S, ta được biểu thức :

$$\psi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_1 + \varphi_2) \quad E_+ = \alpha + \beta$$

$$\psi_- = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_1 - \varphi_2) \quad E_- = \alpha - \beta$$

Việc nghiên cứu lí thuyết cho thấy  $\beta = 2\alpha S$ , S dương,  $\alpha, \beta$  âm.

*MO liên kết và MO phân liên kết.*

Khi đã biết các AO  $\varphi_1$  và  $\varphi_2$  (là các AO 1s của nguyên tử H), có thể tính các tích phân  $\alpha, \beta$  và S. Những tích phân này phụ thuộc vào khoảng cách  $r$  giữa 2 hạt nhân. Khi đó có thể vẽ đồ thị biểu diễn sự phụ thuộc của  $E_+$  và  $E_-$  vào  $r$  ( $E_+$  và  $E_-$  là hàm của  $r$ ). Khi  $r \rightarrow \infty$  thì  $\beta \rightarrow 0, S \rightarrow 0$  nên  $E_+$  và  $E_-$  tiến đến  $\alpha$  (ta quy ước khi hai nguyên tử cô lập thì  $E_+$  và  $E_-$  bằng 0).

$E_+$  đi qua cực tiểu tại một giá trị  $r_0$  của  $r$ , chứng tỏ có sự tồn tại phân tử bền  $H_2^+$  (xem hình 2-9).

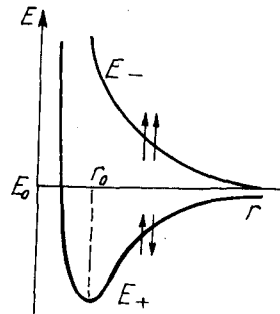
Ngược lại  $E_-$  không có một cực tiểu nào và luôn luôn  $> 0$ .

Người ta gọi hàm sóng MO  $\psi_+$  (tương ứng với năng lượng  $E_+$ ) là *orbital phân tử liên kết*. Hàm  $\psi_-$  (tương ứng với  $E_-$ ) là *MO phân liên kết*.

Cả hai hàm MO đối xứng đối với trục nối 2 hạt nhân và được nói là thuộc dạng  $\sigma$ .

Các MO  $\sigma$  được xây dựng từ các AO s, được kí hiệu là  $\sigma_s$  đối với MO liên kết và  $\sigma_s^*$  đối với MO phân liên kết.

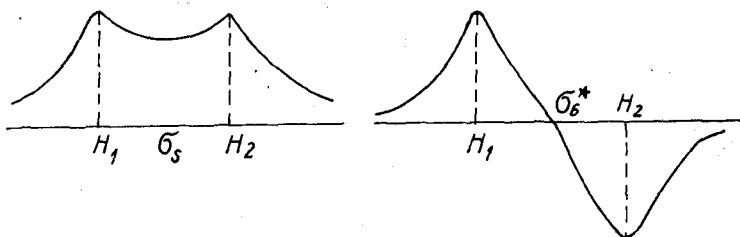
Như vậy khi tổ hợp 2AO s có cùng năng lượng của 2 nguyên tử sẽ cho 2 MO : một MO liên kết  $\sigma_s$



Hình 2-9. Đồ thị  $E_+$  và  $E_-$  theo  $r$ .

có năng lượng thấp hơn và một MO phân liên kết  $\sigma_s^*$  có năng lượng cao hơn (h 2-9)

Xét sự biểu diễn trên đồ thị các hàm sóng MO. Phân xuyên tâm của các MO được biểu diễn trên hình 2-10.



Hình 2-10. Sự phân bố xuyên tâm các MO  $\sigma_s$  và  $\sigma_s^*$

Nếu đặt :  $\lambda = \frac{1}{\sqrt{\pi} a^{3/2}}$  ta sẽ có :

$$\varphi_1 = \lambda e^{-r_1/a} \text{ và } \varphi_2 = \lambda e^{-r_2/a}$$

nên hai MO có dạng :

$$\psi_+ = \sigma_s = \frac{\lambda}{\sqrt{2}} (e^{-r_1/a} + e^{-r_2/a})$$

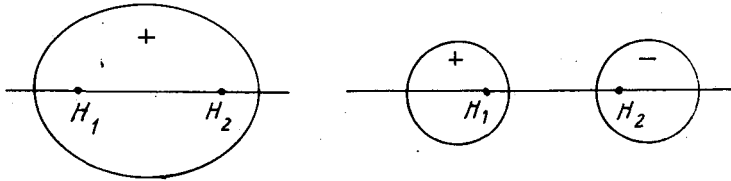
$$\psi_- = \sigma_s^* = \frac{\lambda}{\sqrt{2}} (e^{-r_1/a} - e^{-r_2/a})$$

Biểu diễn giá trị của các hàm  $\psi_+$ ,  $\psi_-$  theo trục nối 2 hạt nhân ta được kết quả như hình 2-10. Hàm số  $\sigma_s^*$  triệt tiêu ở điểm giữa của khoảng cách của 2 hạt nhân, electron có mặt chủ yếu ở khu vực 2 hạt nhân.

Hàm  $\sigma_s$  có giá trị đáng kể ở mặt giữa của khoảng cách hai hạt nhân, do đó electron nằm trên MO  $\sigma_s$  có tác dụng liên kết 2 hạt nhân  $H^+$  lại tạo thành phân tử  $H_2^+$ .

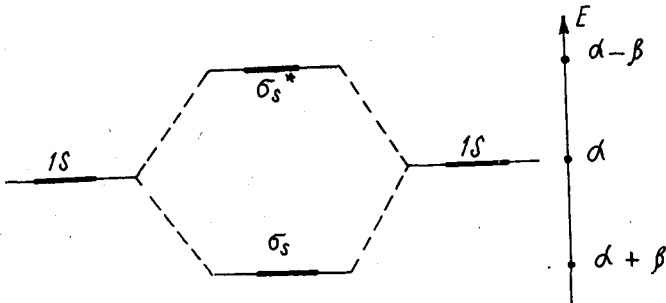
Ta xét sự phân bố góc (phần góc) của các MO trong một mặt phẳng có chứa trục nối hai hạt nhân. Khi đó được kết quả định tính trên hình 2-11. MO  $\sigma_s$  được đặc trưng bằng mật độ

electron tăng lên ở khoảng không gian giữa hai hạt nhân. Còn MO  $\sigma_s^*$  được đặc trưng bằng mật độ electron bằng 0 ở khoảng không gian giữa hai hạt nhân.



Hình 2-11. Sự phân bố góc của các MO  $\sigma_s$  và  $\sigma_s^*$

Giàn đồ các MO : (xem hình 2-12) biểu diễn sự tổ hợp 2 AO  $1s$  thành 2 MO  $\sigma_s^*$  và  $\sigma_s$  với các mức năng lượng của 2 MO là mức  $\alpha - \beta$  và mức  $\alpha + \beta$ .



Hình 2-12. Giàn đồ các MO.

Sự phân bố electron vào các MO : cũng tuân theo những quy tắc như trong nguyên tử :

- Nguyên lí Pauli : Trong một MO chỉ có thể có tối đa 2 electron có spin đối song với nhau. ( $m_s = +1/2$  và  $m_s = -1/2$ )

Sự phân bố electron vào các MO : cũng tuân theo những quy tắc như trong nguyên tử :

- Nguyên lí Pauli : Trong một MO chỉ có thể có tối đa 2 electron có spin đối song với nhau. ( $m_s = +1/2$  và  $m_s = -1/2$ )

- Nguyên lí vững bền : Các electron lần lượt xếp vào các MO có mức năng lượng từ thấp đến cao.

- Quy tắc Hund : Khi electron xếp vào các MO có cùng mức năng lượng thì có khuynh hướng chiếm một số lớn MO sao cho số electron độc thân cực đại.

Các đặc trưng của liên kết cộng hóa trị trong phương pháp MO :

- Chỉ số liên kết hay độ bội của liên kết ( $N$ ).

$$N = \frac{1}{2} (n - n^*)$$

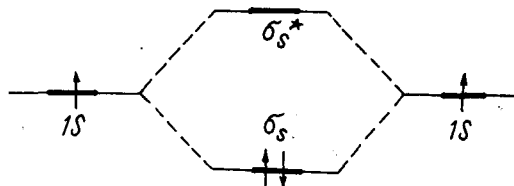
$n$  : số electron nằm ở MO liên kết.

$n^*$  : số electron nằm ở MO phản liên kết.

Độ dài liên kết bằng khoảng cách giữa tâm của 2 hạt nhân,  $l$  càng nhỏ khi chỉ số liên kết càng lớn.

- Năng lượng liên kết càng lớn khi liên kết càng bền.

Ta vận dụng các kết quả trên cho các phân tử đơn giản nhất.



Hình 2-13. Cấu trúc electron của phân tử  $H_2$ .



. Cấu trúc electron :  $\sigma_s^2$

. Độ bội liên kết :  $N = 1$

.  $l = 0,74\text{Å}$

.  $E = -432\text{kJ/mol}$

Phân tử  $\text{He}_2^+$  :

. Cấu trúc electron :  $\sigma_s^2 \sigma_s^{*1}$

$$N = \frac{1}{2} (2 - 1) = \frac{1}{2}$$

.  $l = 1,08\text{Å}$

.  $E = -251\text{kJ/mol}$

- Phân tử  $\text{He}_2$  :

. Cấu trúc electron :  $\sigma_s^2 \sigma_s^{*2}$

.  $N = 0$ . Phân tử này không tồn tại vì tác dụng liên kết của các electron  $\sigma_s$  bị triệt tiêu bởi tác dụng phản liên kết của các electron  $\sigma_s^*$ .

Thật vậy, thực tế cho thấy He chỉ tồn tại ở dạng nguyên tử.

Trong 4 phân tử trên, phân tử  $\text{H}_2$  bền nhất.

### 11.3. Tổng quát về các phân tử có 2 hạt nhân giống nhau.

Trong trường hợp tổng quát, các AO hóa trị có thể là  $s$ ,  $p$  (và cả  $d$ ,  $f$ ). Đối với các nguyên tố thuộc chu kì 2, chỉ phải xét các AO hóa trị  $2s$ ,  $2p$ .

a) *Lập các MO.*

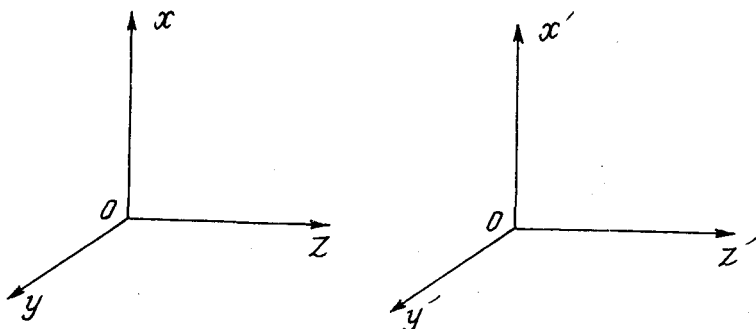
- *Nguyên tắc chung.* Các MO được xây dựng bằng cách tổ hợp tuyến tính các AO hóa trị.

Các MO càng bền khi 2 AO xen phủ nhau càng mạnh (tương tác càng mạnh).

Các MO được chia thành dạng  $\sigma$  và dạng  $\pi$  theo tính đối xứng của chúng. Điều kiện để các AO có thể tham gia tổ hợp hiệu quả tạo thành MO là\* :

- Các AO phải có năng lượng gần bằng nhau.
- Các AO phải xen phủ nhau rõ rệt.
- Các AO phải có cùng dạng đối xứng đối với trục liên kết.

Khi tổ hợp, các AO của 2 nguyên tử được lắp ghép vào 2 hình tam diện Oxyz và O'x'y'z' với 2 hạt nhân là 2 gốc tọa độ và trục z là trục nối hai hạt nhân (hình 2-14).



Hình 2-14. Chọn trục quy chiếu cho việc tổ hợp các AO.

- MO $\sigma$  là MO có trục đối xứng là trục OO'. Phần xen phủ các AO có tính đối xứng trục.

Tương tự như các AO 1s, các AO 2s tổ hợp với nhau tạo thành 2 MO  $\sigma$  là :

$$\sigma_s = \frac{1}{\sqrt{2}} (2s_1 + 2s_2) \quad \sigma_s^* = \frac{1}{\sqrt{2}} (2s_1 - 2s_2)$$

$2s_1$  và  $2s_2$  là các AO của 2 nguyên tử tham gia liên kết.

Hình dạng của các MO  $\sigma_s$  và  $\sigma_s^*$  (tức là phân bố góc của chúng) cũng có dạng như trên hình 2-14.

\* Nếu không thỏa mãn các điều kiện này sự tổ hợp sẽ không có hiệu quả và không dẫn đến sự hình thành liên kết.

Các AO  $2p_z$  của 2 nguyên tử hướng vào nhau, nên cũng xen phủ nhau dọc theo trục z và mây xen phủ có dạng đối xứng trục.

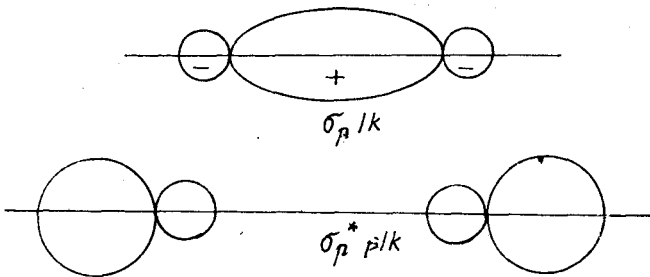
Phần dương của  $2p_z$  hướng về phía phân âm của  $2p_z$ , nên biểu thức của MO  $\sigma_p$  có dạng sau (MO liên kết).

$$\sigma_p = \frac{1}{\sqrt{2}} (p_z - p_z')$$

MO phản liên kết  $\sigma_p^*$  có dạng :

$$\sigma_p^* = \frac{1}{\sqrt{2}} (p_z + p_z')$$

Hình dạng 2 MO  $\sigma_p$  và  $\sigma_p^*$  được biểu diễn trên hình 2-15.



Hình 2-15. Hình dạng các MO  $\sigma_p$  và  $\sigma_p^*$ .

MO  $\sigma_p$  có mật độ xác suất lớn ở khu vực giữa 2 hạt nhân, còn  $\sigma_p^*$  có một mật nút ở khoảng cách giữa 2 hạt nhân vuông góc với trục liên kết. Đó cũng là mật đối xứng của MO liên kết  $\sigma_p$  và là mật phản đối xứng của MO phản liên kết  $\sigma_p^*$ .

- MO  $\pi$  : Các AO  $2p_x$ ,  $2p_x'$ , (và  $2p_y$ ,  $2p_y'$ ) có các trục đối xứng song song với nhau và vuông góc với trục nối 2 hạt nhân nên không thể xen phủ dọc theo trục liên kết, mà xen phủ nhau hai bên trục nối 2 hạt nhân, khi đó tạo thành các MO  $\pi$ . Sự xen phủ như vậy sẽ là cực đại khi các trục đối xứng của các AO song song với nhau.

Tổ hợp tuyến tính các AO  $2p_x$  và  $2p_x$  dẫn đến  $2MO \pi$  :

MO liên kết :

$$\pi_x = \frac{1}{\sqrt{2}} (p_x + p_x)$$

MO phản liên kết :

$$\pi_x^* = \frac{1}{\sqrt{2}} (p_x - p_x)$$

Tương tự như vậy, khi tổ hợp các AO  $2p_y$  và  $2p_y$  tạo thành :

MO liên kết :

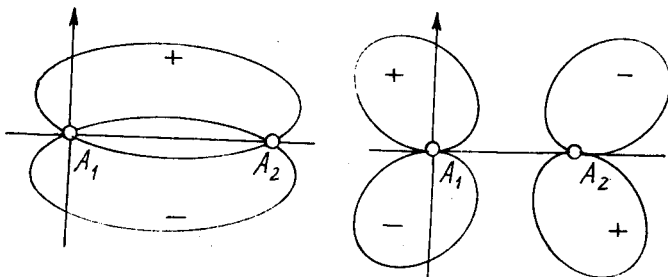
$$\pi_y = \frac{1}{\sqrt{2}} (p_y + p_y)$$

MO phản liên kết :

$$\pi_y^* = \frac{1}{\sqrt{2}} (p_y - p_y)$$

Các MO  $\pi_x$  và  $\pi_y$  có cùng mức năng lượng, các MO  $\pi_x^*$ ,  $\pi_y^*$  có cùng mức năng lượng (vì  $p_x$ ,  $p_y$ ,  $p_x$ ,  $p_y$  có cùng mức năng lượng và có mức xen phủ bằng nhau).

Hình dạng các MO  $\pi$  được biểu diễn trên hình 2-16.



Hình 2-16. Các MO  $\pi$

$\pi_x^*$  và  $\pi_y^*$  đều có 1 mặt nút trên trục hạt nhân. Mặt phẳng vuông góc với trục nối 2 hạt nhân và đi qua điểm giữa khoảng cách hai hạt nhân là mặt đối xứng của  $\pi_x$  và là mặt phản đối xứng của  $\pi_x^*$ .

Mặt zoy là mặt phản đối xứng đối với  $\pi_x$  và  $\pi_x^*$ .

b) *Giải đồ các MO.*

Từ 8 AO ( $2s$ ,  $2p_x$ ,  $2p_y$ ,  $2p_z$  của 2 nguyên tử) ta đã xây dựng được 8 MO trong đó 4 MO liên kết và 4MO phản liên kết.

Thứ tự mức năng lượng của các MO (theo dữ kiện quang phổ) của các nguyên tố cuối chu kì 2 : ( $O_2$ ,  $F_2$ ) :

$$\sigma_s < \sigma_s^* < \sigma_p < \pi_x = \pi_y < \pi_x^* = \pi_y^* < \sigma_p^* \quad (1)$$

Đối với các nguyên tố đầu chu kì 2 (từ Li đến N) mức năng lượng của các AO  $2s$  và  $2p$  tương đối gần nhau nên các AO  $2s$  và  $2p_z$  có thể cùng tham gia tổ hợp tạo thành MO, điều đó có thể coi như sự đẩy lẫn nhau giữa 2 mức năng lượng :  $\sigma_{2s}^*$  và  $\sigma_{2pz}$ , dẫn đến thứ tự năng lượng của các MO như sau :

$$\sigma_s < \sigma_s^* < \pi_x = \pi_y < \sigma_p < \pi_x^* = \pi_y^* < \sigma_p^* \quad (2)$$

Các thứ tự năng lượng của các MO (1) và (2) được biểu diễn trên hình 2-17.

c) *Ví dụ về các phân tử  $A_2$  :*

- Phân tử  $Li_2$  (theo thứ tự (2)) :

Cấu trúc electron :  $\sigma_s^2$

$$N = 1$$

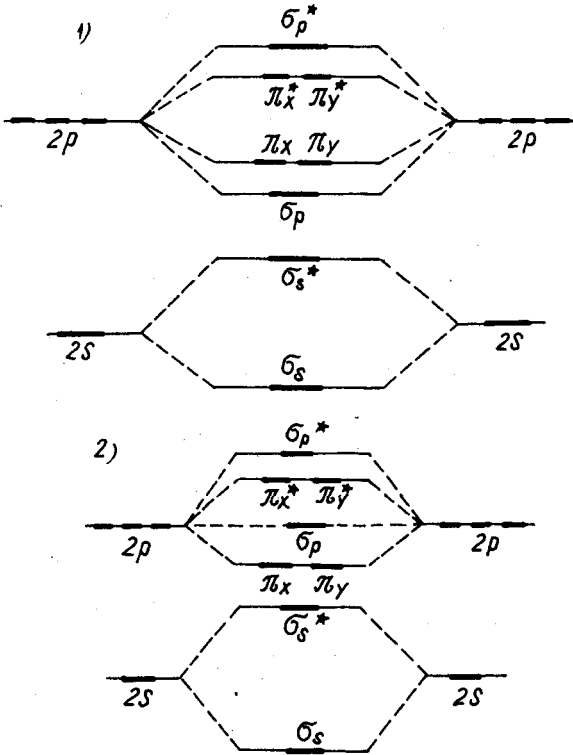
$$l = 2,67 \text{ \AA}$$

$$E = 105 \text{ kJ/mol}$$

- Phân tử  $Be_2$

Cấu trúc electron :  $\sigma_s^2 \sigma_s^{*2}$

$N = 0$  nên phân tử không tồn tại.



Hình 2-17. Thứ tự các MO trong phân tử 2 nguyên tử A<sub>2</sub>.

- Phân tử B<sub>2</sub> :

$$\text{Cấu trúc electron : } \sigma_s^2 \sigma_s^{*2} \pi_x^1 = \pi_y^1$$

$N = 1$  nên phân tử bền

$$l = 1,59\text{Å}$$

$$E = -287\text{kJ/mol}$$

Phân tử có 2 electron độc thân nên có tính chất thuận từ.

- Phân tử C<sub>2</sub> :

$$\text{Cấu trúc electron : } \sigma_s^2 \sigma_s^{*2} \pi_x^2 = \pi_y^2$$

$N = 2$ , liên kết  $C = C$ , phân tử bền

$$l \approx 1,31\text{Å}$$

$$E = -628\text{kJ/mol.}$$

- Phân tử  $N_2$  :

$$\text{Cấu trúc electron : } \sigma_s^2 \sigma_s^{*2} \pi_x^2 = \pi_y^2 \sigma_p^2$$

$N = 3$ , liên kết ba :  $N \equiv N$

$$l = 1,10\text{Å}$$

$$E = -942\text{kJ/mol.}$$

Phân tử rất bền,  $N_2$  hoạt động hóa học kém.

- Phân tử  $O_2$  :

Cấu trúc electron theo thứ tự (1) :

$$\sigma_s^2 \sigma_s^{*2} \sigma_p^2 \pi_x^2 = \pi_y^2 \pi_x^{*1} = \pi_y^{*1}$$

$$N = 1$$

Phân tử có 2 electron độc thân, có tính thuận từ.

$$l = 1,21\text{Å.}$$

$$E = -494\text{kJ/mol}$$

- Phân tử  $F_2$  :

$$\text{Cấu trúc electron : } \sigma_s^2 \sigma_s^{*2} \sigma_p^2 \pi_x^2 = \pi_y^2 \pi_x^{*2} = \pi_y^{*2}$$

$$N = 1.$$

$$l = 1,42\text{Å}$$

$$E = -155\text{kJ/mol}$$

- Phân tử  $Ne_2$  : không tồn tại.

**11.4. Phân tử hai nguyên tử có hạt nhân khác nhau.**

a) Tổng quát :

- Trong phân tử 2 nguyên tử có hạt nhân giống nhau mặt phẳng giữa hai hạt nhân vuông góc với trục nối 2 hạt nhân là mặt đối xứng của MO liên kết và là mặt phản đối xứng của

các MO phân liên kết, nên mật độ electron  $\psi^2$  lấy mật đó làm mật đối xứng và do đó trọng tâm điện tích âm và trọng tâm điện tích dương trùng nhau ở điểm giữa trục nối 2 hạt nhân.

- Trường hợp phân tử 2 nguyên tử có hạt nhân khác nhau A - B, độ âm điện ( $\chi$ ) của A và B khác nhau, ví dụ nguyên tử B có độ âm điện lớn hơn và các AO hóa trị của nguyên tử B có mức năng lượng thấp hơn các AO hóa trị của nguyên tử A nên khi tham gia tổ hợp, mức năng lượng của MO liên kết nằm gần với mức năng lượng của AO hóa trị của nguyên tử B, còn mức năng lượng của MO phân liên kết nằm gần với mức năng lượng của AO hóa trị của nguyên tử A, khi đó mật độ electron bị hút lệch về phía B, mỗi liên kết A - B là liên kết phân cực và xuất hiện momen lưỡng cực A - B. Sự phân bố bất đối xứng các MO của phân tử AB càng lớn khi sự khác nhau về độ âm điện giữa A và B càng lớn.

Momen lưỡng cực xuất hiện trong phân tử A - B được tính theo công thức :

$$\vec{\mu} = q.l$$

$l$  : độ dài liên kết.

$q$  : trị tuyệt đối của điện tích ở mỗi cực.

Đơn vị đo  $\mu$  là culông. met (C.m) và Debye với hệ thức liên hệ :

$$\mu = 1,60.10^{-19} (C).10^{-10}(m) = 1,60.10^{-29} C.m = 4,8D.$$

$$1D = \frac{10^{-29}}{3} C.m$$

Ví dụ đối với phân tử H - F, đo được  $\mu = 1,83 D$

và  $l = 0,92 \text{ \AA}$  nên :

$$q = \frac{1,83}{4,8 \times 0,92} = 0,141 |e|$$

Đối với phân tử Li - H,  $\mu = 5,88D$  ;  $l = 1,60 \text{ \AA}$  nên :

$$q = \frac{5,88}{4,8 \times 1,60} = 0,77 |e|$$

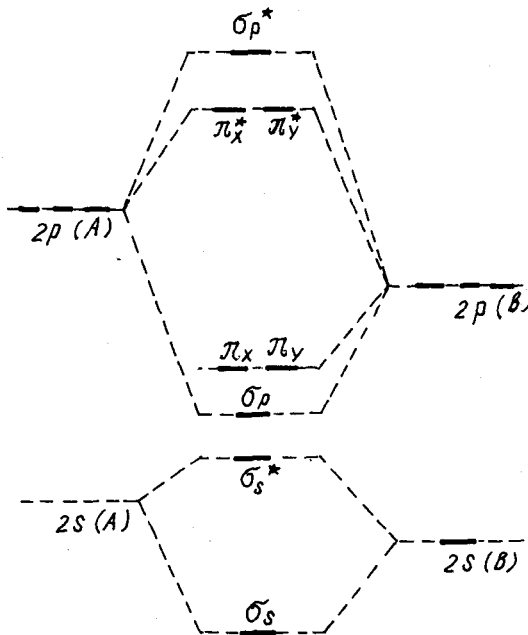


- Để xây dựng các MO cho các phân tử AB ta cũng tổ hợp tuyến tính các AO hóa trị của 2 nguyên tử A và B phù hợp với quy tắc đối xứng và lập được giản đồ các MO rồi sắp xếp electron vào các MO đó để có được cấu trúc electron của phân tử, và tính được bậc liên kết N.

b) Một số phân tử dạng A - B.

- Phân tử H-F. Độ âm điện  $\chi_f = 4 > \chi_H = 2,1$  nên liên kết phân cực mạnh, điều này thể hiện trên giản đồ MO.

Tham gia tổ hợp có AO 1s của nguyên tử H và AO  $2p_z$  của nguyên tử F tạo thành MO liên kết  $\sigma$  có năng lượng thấp hơn năng lượng của các AO. MO phản liên kết  $\sigma^*$  có năng lượng



Hình 2-18. Giản đồ MO của phân tử AB (chu kì 2).

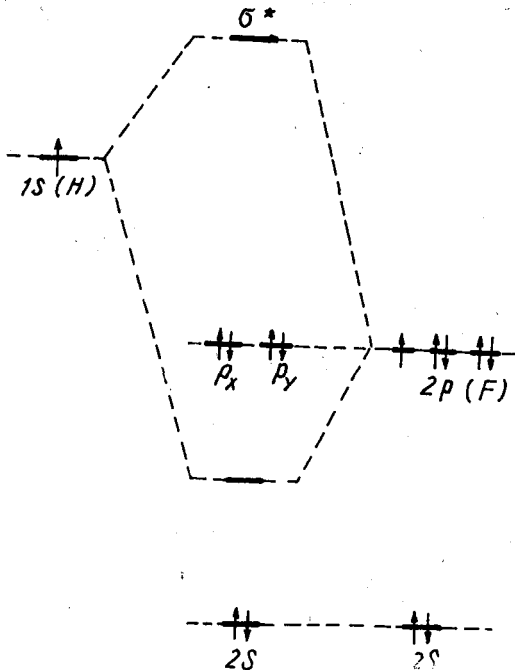
cao hơn năng lượng của các AO. Nguyên tử F còn có các AO không tham gia vào tổ hợp là  $2s$  (do chênh lệch quá nhiều về năng lượng so với  $1s$  của nguyên tử H) và hai AO  $2p_x$  và  $2p_y$  (do khác tính đối xứng), những AO này thực tế vẫn định chỗ tại nguyên tử F và có mức năng lượng như trong nguyên tử nên được gọi là các AO không liên kết.

Giản đồ MO của phân tử HF và sự phân bố electron vào các MO được trình bày trên hình 2-19.

Phân tử HF có :  $N = 1$ ,  $l = 0,92$ ,  $E = -565 \text{ kJ/mol}$  và  $\mu = 1,83D$ .

- Các phân tử AB với A, B thuộc chu kì 2 bằng HTTH.

Giả sử  $\chi_B > \chi_A$ . Nên AO hóa trị của nguyên tử B có năng lượng thấp hơn AO hóa trị của A. Giản đồ MO vẽ trên hình 2-18.



Hình 2-19. Giản đồ MO, và cấu trúc electron của phân tử HF.

Ví dụ 1 : Phân tử CO :

Cấu trúc electron :  $\sigma_s^2 \sigma_s^{*2} \sigma_p^2 \pi_x^2 = \pi_y^2$  (giống phân tử  $N_2$ )

$N = 3$ .  $l = 1,13 \text{ \AA}$ ,  $E = -1072 \text{ kJ/mol}$ ,  $\mu = 0,12 D$

Phân tử CO tương tự như phân tử  $N_2$ .

Ion  $CN^-$  cũng có cấu trúc electron tương tự phân tử CO.

Ví dụ 2 : Phân tử NO :

Cấu trúc electron :  $\sigma_s^2 \sigma_s^{*2} \sigma_p^2 \pi_x^2 = \pi_y^2 \pi^*1$

$N = 2,5$ ,  $l = 1,15 \text{ \AA}$ ,  $E = -678 \text{ kJ/mol}$ ,  $\mu = 0,15 D$ .

c) *Độ phân cực của liên kết.* Nếu hai nguyên tử tạo thành phân tử có độ âm điện chênh lệch lớn so với nhau, ví dụ : phân tử Li - F ( $\chi_{Li} = 1,0$  và  $\chi_F = 4,0$ ) thì phân tử có cực rất mạnh :  $l = 1,52 \text{ \AA}$ ,  $\mu = 6,33 D$ .

$$q = \frac{6,33}{4,8 \cdot 1,52} = 0,87 \approx 0,9$$

Có thể coi như phân tử cấu tạo từ 2 ion  $Li^+ - F^-$  và được khảo sát bằng phương pháp tính toán tĩnh điện.

Đối với các trường hợp tổng quát ta có thể tính mức độ ion của liên kết. Ví dụ : xét phân tử HF  $\mu_e = 1,83 D$ .

Nếu liên kết ion thuần túy :  $H^+ - F^-$  thì  $\mu_i = 4,8 \cdot 1 \cdot 0,92 = 4,42 D$ .

Độ ion của liên kết :

$$\frac{\mu_e}{\mu_i} = \frac{1,83}{4,42} = 0,41 = 41\%$$

Để dàng thấy khi chênh lệch độ âm điện giữa 2 nguyên tử tăng lên thì độ phân cực của liên kết tăng lên và độ ion của liên kết tăng lên. Trị số 41% tương ứng với điện tích (trị tuyệt đối) của mỗi nguyên tử.

## II. CẤU TẠO PHÂN TỬ

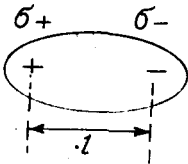
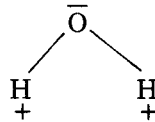
### 12. Độ phân cực của phân tử

#### 12.1. Phân tử phân cực và phân tử không phân cực.

*Phân tử không phân cực* là phân tử trong đó các hạt nhân và các mây electron được phân bố hoàn toàn đối xứng để cho trọng tâm điện tích dương (của các hạt nhân) và trọng tâm điện tích âm (của các mây electron) hoàn toàn trùng vào nhau.

Ví dụ : các phân tử  $N_2$ ,  $O_2$ ,  $H_2$ ,  $CO_2$ ...

*Phân tử phân cực* là phân tử trong đó sự phân bố các hạt nhân và mây electron không hoàn toàn đối xứng, do đó các trọng tâm điện tích dương và âm không trùng vào nhau. Ví dụ các phân tử  $HCl$ ,  $H_2O$ ...



**12.2. Mômen lưỡng cực.** Mỗi phân tử phân cực là một lưỡng cực điện gồm 2 điện tích điểm có trị tuyệt đối bằng nhau nhưng ngược dấu nhau, đặt cách nhau 1 khoảng bằng  $l$  (hình 2-20)

Tích số :

$$\mu = l \cdot \delta$$

Hình 2.20. Lưỡng cực phân tử.

được gọi là *momen lưỡng cực*.

Momen lưỡng cực đặc trưng cho độ phân cực của phân tử.  $\mu$  thường được tính ra đơn vị Debye (kí hiệu là  $D$ ).

$$1D = 0,333 \cdot 10^{-30} \text{ C.m}$$

$\mu$  của các phân tử cộng hóa trị thường nằm trong khoảng 0 - 4D, của các phân tử ion thường nằm trong khoảng 4 - 11D.

Ví dụ :

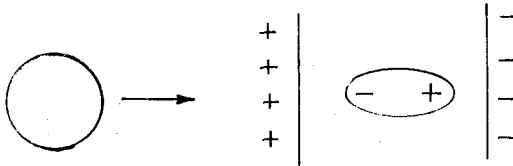
Phân tử :	HCl	HBr	HI	H <sub>2</sub> O	SO <sub>2</sub>	NH <sub>3</sub>
$\mu(D)$ :	1,04	0,79	0,38	1,86	1,61	1,46.

### 13. Sự phân cực hóa phân tử và ion

Dưới tác dụng của điện trường ngoài (ví dụ điện trường tạo ra bởi 2 bản của 1 tụ điện) các phân tử và ion bị biến đổi cấu trúc và do đó thay đổi trị số momen lưỡng cực. Hiện tượng đó gọi là sự phân cực hóa phân tử và ion.

#### 13.1. Sự phân cực hóa hợp chất không phân cực.

Khi không có điện trường ngoài, phân tử của hợp chất có  $\mu = 0$ . Khi phân tử nằm trong điện trường giữa 2 bản của tụ điện, các hạt nhân mang điện dương bị hút về phía bản âm, các mây electron mang điện âm bị hút về phía bản dương, do đó trọng tâm điện tích dương và trọng tâm điện tích âm bị tách ra làm xuất hiện một momen lưỡng cực ( $\mu \neq 0$ ) (xem hình 2-21).



Hình 2-21. Hiện tượng phân cực hóa biến dạng.

Hiện tượng phân cực hóa như vậy được gọi là sự phân cực hóa cảm ứng hay phân cực hóa biến dạng.

Độ lớn của momen lưỡng cực cảm ứng tỉ lệ với điện trường tác dụng :

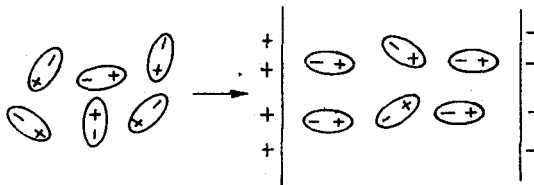
$$\mu_c = \alpha E$$

trong đó  $E$  là cường độ điện trường,  $\alpha$  là độ phân cực hóa cảm ứng phụ thuộc vào cấu tạo phân tử của mỗi chất.

**13.2. Sự phân cực hóa đối với hợp chất phân cực.** Khi cho các phân tử phân cực vào điện trường giữa 2 tụ điện thì xảy ra các hiện tượng sau :

- Các lưỡng cực phân tử trước kia do chuyển động nhiệt nên sắp xếp hỗn độn bây giờ do ảnh hưởng của điện trường nên ưu tiên định hướng theo phương của điện trường, tuy nhiên vẫn còn mang tính chất hỗn độn của chuyển động nhiệt. Đó là *sự phân cực hóa định hướng* (xem hình 2-22).

- Do ảnh hưởng của điện trường ngoài mỗi lưỡng cực phân tử bị kéo dài ra làm tăng trị số của momen lưỡng cực. Đó là *sự phân cực biến dạng*.



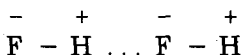
Hình 2-22. Hiện tượng phân cực hóa định hướng.

**13.3. Sự phân cực hóa tương hỗ giữa các ion.** Khi các ion lại gần nhau điện trường tạo bởi một ion này có thể gây ra sự phân cực hóa đối với ion kia. Đó là *sự phân cực hóa tương hỗ giữa các ion*. Hiện tượng này làm tăng tính chất cộng hóa trị của liên kết ion và làm tăng độ bền của liên kết ion.

### III. CÁC MỐI LIÊN KẾT YẾU

#### 14. Liên kết hidro

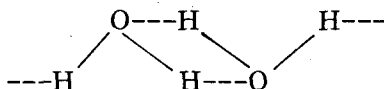
**14.1. Khái niệm.** Xét phân tử HF. Vì độ âm điện của F rất lớn nên trong mỗi liên kết H-F mây electron liên kết bị hút lệch mạnh về phía nguyên tử F làm cho nguyên tử F tích điện âm, nguyên tử H chỉ còn lại gần như trơ trọi hạt nhân mang điện dương nên có thể đến khá gần nguyên tử F và chui vào bên trong vỏ electron của nguyên tử F của phân tử HF khác và hình thành mối liên kết mới với nguyên tử F này :



mối liên kết mới hình thành này được gọi là *liên kết hidro*.

Do sự tạo thành liên kết hidro nên các phân tử HF liên hợp lại với nhau thành những phân tử liên hợp dạng  $(\text{HF})_n$  với  $n = 2$  khi trong dung dịch nước và  $n = 4$  khi ở thể khí.

Liên kết hidro cũng được hình thành giữa các phân tử nước và gây ra hiện tượng liên hợp phân tử nước thành các phân tử liên hợp dạng  $(\text{H}_2\text{O})_n$  với  $n = 2$  hoặc 3.



**14.2. Độ bền của liên kết hidro.** Liên kết hidro có năng lượng vào cỡ  $8 \div 40 \text{ kJ/mol}$  (hay  $2 \div 10 \text{ kcal/mol}$ )

Liên kết hidro càng bền khi : nguyên tử phi kim liên kết (bằng hóa trị chính) với H có độ âm điện càng lớn và kích thước càng nhỏ, nguyên tử phi kim tham gia liên kết hidro có độ âm điện càng lớn và kích thước càng nhỏ.

Một số ví dụ :

Liên kết H-F ... H-F có năng lượng bằng  $28 \text{ kJ/mol}$  , độ dài bằng  $2,44 \text{ \AA}$ .

Liên kết H-O ... H-O có độ dài cỡ  $2,75 \text{ \AA}$  và năng lượng bằng  $14 \text{ kJ/mol}$  (khi ở thể khí) và  $20,9 \text{ kJ/mol}$  (khi ở thể lỏng).

Liên kết H-N...H-N có năng lượng bằng  $18,4 \text{ kJ/mol}$  và độ dài bằng  $3,1 \text{ \AA}$  (thể khí).

**14.3. Ảnh hưởng của liên kết hidro đến tính chất của các chất.** Liên kết hidro gây ra hiện tượng liên hợp phân tử nên ảnh hưởng đến nhiều tính chất vật lí và hóa học của các chất :

- Tăng nhiệt độ nóng chảy, nhiệt độ sôi, tăng nhiệt hóa hơi, nhiệt dung.

- Gây ra sự biến đổi bất thường khối lượng riêng của nước. Nước có khối lượng lớn nhất bằng  $1 \text{ (g/ml)}$  ở  $4^\circ\text{C}$ .

- Làm giảm độ điện li của axit.

- Ảnh hưởng đến sự hòa tan lẫn nhau giữa các chất lỏng.

Ví dụ rượu etylic và nước tan lẫn vô hạn vào nhau.

- Liên kết hidro giữ vai trò quan trọng trong hoạt động sống của cơ thể sinh vật.

## 15. Lực Vander-Waals.

Thực nghiệm cho biết giữa các phân tử (kể cả phân cực và không phân cực) luôn luôn có lực tương tác. Loại lực này, được gọi là lực Vander - Waals giữ vai trò quan trọng trong các quá trình biến đổi trạng thái tập hợp và nhiều quá trình hóa-lí.

**15.1. Bản chất của lực Vander - Waals.** Giữa các phân tử có tác dụng cả lực hút và lực đẩy.

Các loại lực hút gồm có :



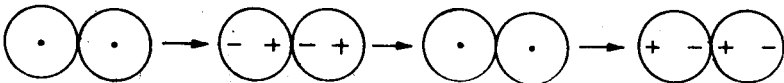
a) *Lực định hướng* : Các phân tử phân cực hút lẫn nhau bằng các cực ngược dấu của các lưỡng cực phân tử, nhờ vậy các phân tử này định hướng lại với nhau theo một trật tự xác định, vì vậy loại lực hút này được gọi là *lực định hướng*.

Momen lưỡng cực của phân tử càng lớn thì lực định hướng càng mạnh.

b) *Lực cảm ứng* : Khi phân tử không phân cực tiến đến gần phân tử phân cực thì dưới ảnh hưởng của điện trường gây ra bởi lưỡng cực phân tử của phân tử phân cực, các phân tử không phân cực bị cảm ứng điện và xuất hiện lưỡng cực cảm ứng. Sau đó các phân tử hút nhau bằng các cực ngược dấu. Lực cảm ứng càng mạnh khi phân tử phân cực có momen lưỡng cực càng lớn và phân tử không phân cực càng dễ bị phân cực cảm ứng.

c) *Lực khuếch tán* : Là lực hút xuất hiện nhờ các *lưỡng cực tạm thời* xuất hiện trong phân tử.

Trong phân tử (phân cực cũng như không phân cực) có các electron luôn luôn chuyển động và các nhân nguyên tử luôn luôn dao động quanh vị trí cân bằng nên sự phân bố các điện tích dương và điện tích âm thường xuyên bị lệch khỏi vị trí cân bằng làm xuất hiện những lưỡng cực tạm thời trong phân tử. Lưỡng cực tạm thời luôn luôn xuất hiện, triệt tiêu, đối dấu... và có tác dụng cảm ứng đối với các phân tử bên cạnh, do đó các phân tử không cực cũng có thể hút lẫn nhau nhờ lưỡng cực tạm thời này (xem hình 2-23). Loại lực hút này được gọi là *lực khuếch tán*.



Hình 2-23. Sự xuất hiện lưỡng cực tạm thời và lực khuếch tán.

Thực nghiệm và tính toán cho thấy :

- Tương tác khuếch tán giữ vai trò chính hay vai trò quan trọng trong tất cả các trường hợp tương tác giữa các phân tử.

- Tương tác định hướng giữ vai trò quan trọng khi phân tử phân cực mạnh.

- Tương tác cảm ứng nối chung không quan trọng.

Ngoài lực hút giữa các phân tử còn có lực đẩy tác dụng. Khi các phân tử tiến đến sát gần nhau, các mây electron bắt đầu xen phủ lên nhau thì giữa các phân tử bắt đầu xuất hiện lực đẩy. Lực đẩy tăng rất nhanh khi giảm khoảng cách giữa tâm của 2 phân tử.

Năng lượng tương tác toàn phần giữa 2 phân tử là tổng năng lượng hút và năng lượng đẩy. Tương tác này có trị số cực đại ứng với khoảng cách cân bằng  $R_0$  giữa tâm của 2 phân tử tham gia tương tác.

### 15.2. Đặc điểm của lực Vander-Waals.

- Lực Vander-Waals không có tính chất chọn lọc và tính chất bão hòa.

- Năng lượng tương tác Vander-Waals tương đối nhỏ ( $-\Delta H$  dưới 40  $kJ/mol$ ).

- Lực Vander - Waals giảm nhanh khi tăng khoảng cách giữa các phân tử (tỉ lệ với  $r^{-6}$ , trong đó  $r$  là khoảng cách giữa tâm điểm hai phân tử). - Lực Vander-Waals tăng lên khi kích thước phân tử và khối lượng phân tử tăng lên.

7.CƠ SỞ LT HÓA HỌC.B

## CÂU HỎI

1. Nêu các đại lượng đặc trưng cho liên kết hóa học.

2. Độ âm điện là gì ? Cách dùng độ âm điện để phân loại các dạng liên kết cơ bản.

3. Nêu các đặc điểm của liên kết ion. Giải thích vì sao các hợp chất ion lại ở trạng thái tinh thể rắn trong điều kiện thường.

4. Nêu các tiên đề (hay định đề) cơ bản của phương pháp cặp electron liên kết. Giải thích tính bão hòa và tính định hướng của liên kết cộng hóa trị.

5. Thế nào là liên kết cho - nhận ? Những nguyên tử nào có khả năng tham gia liên kết cho - nhận. Cho ví dụ.

6. Cách tính cộng hóa trị cực đại của các nguyên tố. Nêu ví dụ đối với nguyên tố thuộc chu kì 2.

7. Sự lai hóa là gì ? Quan niệm lai hóa giải quyết được vấn đề gì trong cấu tạo phân tử và liên kết hóa học. Nêu các kiểu lai hóa giữa các AO  $s$  và  $p$ . Cho ví dụ.

\*8. Điều kiện để lai hóa có hiệu quả ? Trong 1 chu kì khi đi từ trái sang phải khả năng lai hóa trong các nguyên tố thay đổi thế nào. Giải thích. Cho ví dụ.

\*9. Trong 1 phân nhóm chính khi đi từ trên xuống dưới khả năng lai hóa của các AO trong các nguyên tố thay đổi thế nào ? Giải thích. Cho ví dụ.

10. Phân biệt các dạng liên kết  $\sigma$ ,  $\pi$  (về năng lượng, tính đối xứng).

11. Nêu các ưu, khuyết điểm của phương pháp cặp electron liên kết.

12. Trình bày tư tưởng cơ bản của phương pháp orbital phân tử (MO) và nội dung chính của phương pháp tổ hợp tuyến tính các AO (MO - LCAO).

13. Trình bày quy trình khảo sát phân tử có 2 hạt nhân giống nhau bằng phương pháp MO-LCAO. Nêu một ví dụ minh họa.

14. Điều kiện để các AO của 2 nguyên tử có thể tham gia tổ hợp có hiệu quả. Nêu ví dụ phân tử dạng  $A_2$  của các nguyên tố chu kì 2.

\* Khả năng tham gia tổ hợp giữa các AO  $n_s$ ,  $n_p$  biến thiên như thế nào trong một chu kì và trong một phân nhóm chính.

15. Dựa vào tính đối xứng có thể phân loại các MO như thế nào. Thế nào là MO liên kết, MO phản liên kết, MO không liên kết.

\*16. Trình bày 2 dạng giản đồ năng lượng của các MO trong phân tử dạng  $A_2$  của các nguyên tố thuộc chu kì 2.

17. Trình bày các quy luật phân bố electron vào các MO. Cho ví dụ.

18. Theo phương pháp MO hãy nêu cách tiên đoán về : - bậc liên kết (hay độ bội liên kết) - độ bền liên kết - độ dài liên kết - từ tính của chất.

19. Thế nào là phân tử phân cực, phân tử không phân cực ? Thế nào là momen lưỡng cực của phân tử và của liên kết ? Nêu quan hệ giữa momen lưỡng cực của phân tử với momen lưỡng cực của các liên kết và cặp electron không liên kết (hay cặp electron tự do hay cặp electron không phân chia)

20. Trình bày tác dụng phân cực hóa của điện trường ngoài đối với các phân tử phân cực và không phân cực.

21. Thế nào là liên kết hydro ? Độ bền của liên kết Hydro và các yếu tố ảnh hưởng đến độ bền của liên kết hydro. Liên kết hydro ảnh hưởng đến tính chất của các chất như thế nào ?

22. Trình bày bản chất của lực Vander - Waals. Đặc điểm của lực Vander - Waals. Ảnh hưởng của lực Vander - Waals đối với nhiệt độ nóng chảy và nhiệt độ sôi của các chất.

## BÀI TẬP

1. Trong các phân tử  $NaF$ ,  $Cl_2$ ,  $SCl_2$  các mối liên kết thuộc loại gì ?

2. Tính năng lượng tạo thành phân tử  $KCl$  ở trạng thái khí, từ các nguyên tử  $K$ ,  $Cl$ . Biết rằng khoảng cách giữa tâm của

2 ion  $K^+$  và  $Cl^-$  là  $2,67\text{\AA}$ , ái lực với electron của clo là  $3,81\text{ eV}$ , năng lượng ion hóa của kali là  $4,34\text{ eV}$ .

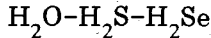
Đs :  $4,32\text{ eV}$  hay  $6,92 \cdot 10^{-19}\text{ J}$ .

3. Theo quan điểm của cặp electron liên kết, hãy giải thích vì sao nguyên tử nitơ không thể có hóa trị 5 ?

4. Nêu và giải thích các trạng thái cộng hóa trị có thể có của S, Cl, C.

6. Vì sao phân tử  $NH_3$  có dạng tháp tam giác, còn phân tử  $BF_3$  có dạng tam giác phẳng ?

7. Hãy giải thích vì sao trong dãy :



góc liên kết càng gần với góc vuông ?

8. Biết nhiệt độ sôi và nhiệt hóa hơi của các hợp chất sau :

	HF	HCl	HBr	HI
$T_s(K)$	292	189	206	238
$\Delta H_{bh} (kJ/mol)$	32,6	16,3	17,6	19,6

nhận xét và giải thích quy luật biến thiên của các đại lượng đó.

9. Một tinh thể muối ăn hình lập phương có cạnh bằng  $2,4\text{cm}$ . Khối lượng bằng  $29,25\text{ gam}$ . Tính độ dài liên kết Na-Cl trong tinh thể.

Đs :  $2,84\text{\AA}$ .

10. Cho 2 nguyên tố A( $Z = 8$ ) và B( $Z = 16$ )

a) Viết cấu hình electron của 2 nguyên tố dưới dạng chữ và ô.

b) Hai nguyên tố đó có thể tạo với hidro những dạng hợp chất nào.

c) So sánh các hợp chất với hidro của A và B về cấu trúc hình học, độ bền liên kết và độ phân cực của liên kết. Dùng thuyết cặp electron liên kết giải thích.

d) So sánh momen lưỡng cực của các phân tử hợp chất đó.

\*11. Cho 3 nguyên tử : A( $Z = 6$ ), B( $Z = 7$ ) và D( $Z = 8$ ).

a) Từ cấu hình electron của chúng hãy suy đoán dạng công thức phân tử hợp chất với hidro của ba nguyên tố đó.

b) So sánh góc hóa trị trong phân tử của các hợp chất trên. Giải thích bằng thuyết cặp electron liên kết.

c) So sánh momen lưỡng cực của các mối liên kết và của các phân tử trên. Giải thích bằng thuyết cặp electron liên kết.

*Ghi chú :* Vì mây electron của cặp electron liên kết định chỗ chiếm vùng không gian hẹp hơn so với mây electron của cặp electron không liên kết nên các cặp electron không liên kết đẩy nhau mạnh nhất, rồi đến sự đẩy nhau giữa cặp electron không liên kết với cặp electron liên kết, hai cặp electron liên kết đẩy nhau yếu nhất.

12. Cho các nguyên tố R( $Z = 7$ ), R'( $Z = 15$ ), R''( $Z = 33$ ), R'''( $Z = 51$ )

a) Từ cấu hình electron hãy suy ra mối quan hệ giữa các nguyên tố đó trong bảng HTTH.

b) Hãy lập công thức phân tử hợp chất với hidro của các nguyên tố đó.

c) Dựa vào thuyết cặp electron liên kết (dùng quan niệm lai hóa) hãy tiên đoán quan hệ so sánh giữa các hợp chất trên về : độ dài liên kết, góc hóa trị, năng lượng liên kết.

13. Cho các nguyên tố N, O, F, P, S, Cl. Dựa vào thuyết cặp electron liên kết hãy :

a) Tính cộng hóa trị của các nguyên tố. Giải thích sự khác nhau về trạng thái cộng hóa trị của các nguyên tố đó.

b) So sánh độ phân cực của các mối liên kết trong phân tử hợp chất với hidro của các nguyên tố trên.

c) Nhận xét về cấu trúc hình học của các phân tử hợp chất với hidro của các nguyên tố đó. Giải thích bằng thuyết lai hóa.

14. Hãy cho biết các loại liên kết có trong các phân tử sau :  
 $\text{Cl}_2$ ,  $\text{O}_2$ ,  $\text{N}_2$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $(\text{H}_2\text{O})_x$ ,  $(\text{HF})_2$ ,  $\text{NH}_3$ ,  $\text{NH}_4^+$ ,  $\text{KF}$ .

15. Dùng thuyết cặp electron liên kết giải thích sự tạo thành các phân tử  $\text{B}_2$ ,  $\text{BF}$ ,  $\text{BF}_3$ ,  $\text{BF}_4^-$ .

16. Giải thích cấu trúc tam giác phẳng của phân tử  $\text{BF}_3$  và cấu trúc tứ diện của phân tử  $\text{BF}_4^-$ .

17. Dựa vào thuyết cặp electron liên kết hãy phân tích khả năng thể hiện cộng hóa trị của các nguyên tố thuộc chu kì 2 bảng HTTH.

18. Dùng phương pháp cặp electron liên kết hãy viết công thức phân tử của những hợp chất có thể tạo thành giữa N và F ; N và H (trong đó số nguyên tử N chỉ bằng 1). Sau đó :

a) Tiên đoán cấu trúc hình học của các phân tử.

b) So sánh độ phân cực của các mối liên kết H-N, và F-N.

19. Viết công thức cấu tạo của các phân tử  $\text{NH}_3$ ,  $\text{BF}_3$  ;  $\text{H}_3\text{O}^+$   $\text{BF}_4^-$  ;  $\text{BH}_4^-$ . Trong mỗi phân tử có những loại liên kết nào.

20. Cho các phân tử  $\text{O}_2^+$ ,  $\text{O}_2$ ,  $\text{N}_2$ ,  $\text{F}_2^+$ ,  $\text{F}_2^-$ .

a) Vẽ giản đồ năng lượng các MO và cấu hình electron của các phân tử đó.

b) Tính bậc liên kết trong các phân tử.

\*c) Nhận xét về độ bền liên kết và độ dài liên kết.

d) Nhận xét về từ tính của các hợp chất.

21. Cho các phân tử  $\text{O}_2$ ,  $\text{O}_2^-$ ,  $\text{O}_2^+$ ,  $\text{O}_2^{2-}$

a) Vẽ giản đồ năng lượng MO và cấu hình electron của các phân tử.

b) Tính bậc liên kết trong các phân tử.

c) So sánh độ bền liên kết và độ dài liên kết của các phân tử.

d) Nhận xét về từ tính của các phân tử.

\*22. Cho các phân tử  $B_2$ ,  $C_2$ ,  $Be_2$ ,  $O_2$ . Trả lời các câu hỏi như ở bài 11.

23. Đã biết năng lượng liên kết của các phân tử sau (KJ/mol)

$H_2$	$H_2^+$	$O_2$	$O_2^+$	$F_2$	$F_2^+$
-435	-259	-498	-664	-159	-310

a) So sánh và giải thích các dữ kiện đó bằng thuyết MO.

b) So sánh với kết quả của phương pháp cặp electron liên kết.

24. Vẽ giản đồ năng lượng của phân tử  $B_2$ . Tính bậc liên kết, tiên đoán về từ tính và so sánh với kết quả của phương pháp cặp electron liên kết.

\*25. So sánh độ bền liên kết của các phân tử :  $F_2$  và  $F_2^+$ ,  $N_2$  và  $N_2^+$ . Giải thích bằng phương pháp MO.

\*26. Hãy cho biết các AO nào có thể tham gia tạo MO liên kết trong trường hợp :

- Tạo phân tử HF từ H và F.
- Tạo phân tử HCl từ H và Cl.
- Tạo phân tử CO từ C và O.

27. Các phân tử  $B_2$ ,  $N_2$ ,  $O_2$  có cấu hình electron như sau :

$B_2$ (KK)	$\sigma_s^2$	$\sigma_s^{*2}$	$\pi_{p_y}^2$			
$N_2$ (KK)	$\sigma_s^2$	$\sigma_s^{*2}$	$\pi_{p_y}^2$	$\pi_{p_z}^2$	$\sigma_{p_x}^2$	
$O_2$ (KK)	$\sigma_s^2$	$\sigma_s^{*2}$	$\sigma_{p_x}^2$	$\pi_{p_x}^2$	$\pi_{p_y}^2$	$\pi_{p_z}^{*2}$

Hãy cho biết các phân tử đó ở trạng thái cơ bản hay kích thích.

28. Hãy giải thích vì sao thế ion hóa của các phân tử  $H_2$ ,  $N_2$ ,  $C_2$ , (CO), cao hơn thế ion hóa của các nguyên tử tương

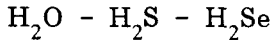


ứng, và thế ion hóa của các phân tử  $F_2$ ,  $O_2$ ,  $NO$  lại thấp hơn thế ion hóa của các nguyên tử tương ứng.

	H	C	N	O	F		
$I_1 (kJ/mol)$	1308	1083	1396	1312	1675		
	$H_2$	$C_2$	$N_2$	$O_2$	$F_2$	CO	NO
$I_1$	1488	1154	1507	1173	1526	1354	913

\*29. Vì sao phân tử  $NH_3$  có dạng tam giác, còn phân tử  $BF_3$  có dạng tam giác phẳng.

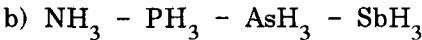
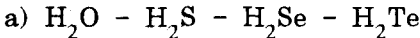
\*30. Hãy giải thích vì sao khi đi từ đầu đến cuối dãy :



góc liên kết càng tiến gần đến góc vuông ?

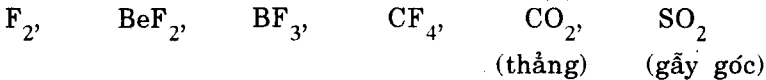
\*31. Giản đồ năng lượng MO của các phân tử CO và BF giống như của phân tử  $N_2$ . Hãy viết cấu hình electron của từng phân tử và tính bậc liên kết.

32. So sánh góc liên kết và momen lưỡng cực của các phân tử trong dãy sau và giải thích :



33. So sánh momen lưỡng cực của các phân tử  $NH_3$  và  $NF_3$ . Giải thích.

34. Các phân tử sau có momen lưỡng cực hay không ? Giải thích :



### Chương III

## TRẠNG THÁI TẬP HỢP CỦA VẬT CHẤT

### 1. Mở đầu

Ở một điều kiện xác định, một chất có thể tồn tại ở trạng thái khí, lỏng hoặc rắn tùy theo quan hệ so sánh của hai yếu tố sau đây :

- *Chuyển động nhiệt của các hạt* : làm cho các hạt phân bố hỗn độn và có khuynh hướng chiếm toàn bộ thể tích không gian của bình đựng. Yếu tố này được đánh giá bằng động năng chuyển động nhiệt của hạt.

- *Lực hút giữa các hạt* : Liên kết các hạt lại thành những tập hợp chặt chẽ có cấu trúc xác định. Yếu tố này được đánh giá bằng thế năng tương tác giữa các hạt.

Ở *trạng thái tinh thể* : thế năng tương tác giữa các hạt lớn hơn hẳn động năng chuyển động nhiệt của các hạt, do đó các hạt được sắp xếp thành những cấu trúc xác định, mỗi hạt hầu như không còn khả năng chuyển động tịnh tiến mà chỉ có khả năng dao động quanh vị trí cân bằng.

Ở *trạng thái khí* : động năng chuyển động nhiệt vượt xa thế năng tương tác giữa các hạt vì vậy các hạt (phân tử khí) có thể chuyển động gần như tự do chiếm toàn bộ thể tích của bình đựng, các phân tử khí chỉ có thể va chạm đàn hồi với nhau và với thành bình.

Trong trạng thái lỏng : sự khác nhau giữa động năng chuyển động nhiệt của phân tử và thế năng tương tác giữa chúng không lớn do đó phân tử chất lỏng vẫn có các chuyển động quay, dao động và tịnh tiến, nhưng không thể thoát khỏi vùng tác dụng của lực Vander-Waals (cỡ 10Å), vì vậy chất lỏng có thể tích xác định nhưng không có hình dạng xác định.

## A - TRẠNG THÁI KHÍ

### 2. Phương trình trạng thái khí lí tưởng

Mỗi trạng thái của chất khí được đặc trưng bằng một bộ các thông số trạng thái : nhiệt độ ( $T$ ), áp suất ( $P$ ), thể tích ( $V$ ), số mol ( $n$ ), khối lượng ( $m$ ). .. Thực nghiệm và lí thuyết cho biết nếu khí tương đối loãng thì thể tích ( $V$ ) của chất khí :

- Tỉ lệ nghịch với áp suất ( $\sim 1/P$ )
- Tỉ lệ thuận với nhiệt độ tuyệt đối ( $\sim T$ )
- Tỉ lệ thuận với số mol khí ( $\sim n$ ).

$$V \sim \frac{1}{P} \cdot T \cdot n.$$

Đặt  $R$  là hệ số tỉ lệ, ta lập được phương trình :

$$V = \frac{1}{P} \cdot T \cdot n \cdot R$$

hay :

$$PV = nRT \quad (3-1)$$

Vì  $n = m/M$  trong đó  $m$  là khối lượng khí,  $M$  là khối lượng 1 mol khí nên (3-1) được viết thành :

$$PV = \frac{m}{M} RT \quad (3-2)$$

Khi xét 1 mol khí :  $n = 1$  và (3-1) được viết thành :

$$PV = RT \quad (3-3)$$

(3-1), (3-2), (3-3) được gọi là *phương trình trạng thái khí lí tưởng*, và còn có tên là *phương trình Clapeyron-Mendeleev*.

Hệ số tỉ lệ  $R$  được gọi là *hằng số khí*, đó là hằng số phổ biến đối với mọi chất khí lí tưởng. Có thể xác định được  $R$  từ thực nghiệm bằng cách đo  $P$ ,  $V$ ,  $T$  và tính đối với 1 mol khí :

$$R = \frac{PV}{T}$$

Khi đó trị số của  $R$  phụ thuộc vào cách chọn đơn vị  $P$  và  $V$  (lượng khí luôn luôn tính ra *mol*,  $T$  đo trên thang nhiệt giai Kenvin).

Nếu  $P$  (atm),  $V$  (lít) thì  $R = 0,08205 \text{ l.atm/mol.độ.}$

$P$  (mmHg),  $V$ (ml)  $R = 62359 \text{ ml.mmHg/mol. độ.}$

$P$  ( $P_a = \text{N/m}^2$ ),  $V$  ( $\text{m}^3$ )  $R = 8,3144 \text{ kJ/kmol.độ}$

hay  $8,3144 \text{ J/mol.độ.}$

$P$  ( $\text{dyn/cm}^2$ ),  $V$ ( $\text{cm}^3$ )  $R = 9,314.10^7 \text{ erg/mol.độ.}$

Chú ý rằng nếu năng lượng tính ra cal thì vì  $1\text{J} = 0,2388\text{cal}$  nên  $R = 1,9859 \text{ cal/mol.độ} \approx 2,0 \text{ cal/mol.độ.}$

Từ  $R$  có thể tính ra hằng số Boltzmann( $k$ ) :

$$k = \frac{R}{N_0} \quad (3-4)$$

trong đó  $N_0$  là số Avogadro có giá trị bằng  $6,022.10^{23}/\text{mol.}$

Ý nghĩa của hằng số khí là công giãn nở của 1 *mol* khí khi nhiệt độ tăng lên 1 độ.

Người ta quy định điều kiện tiêu chuẩn là điều kiện tại đó :

$$T = 273,15\text{K} \approx 273\text{K.}$$

$$P = 1,01325.10^5 \text{ Pascal } (\text{N/m}^2) = 101,325.\text{kPa.}$$

tức là  $1\text{atm} = 1\text{bar} = 760\text{mmHg.}$

### 3. Áp suất riêng phần và nồng độ mol phần

**3.1. Áp suất riêng phần.** Nếu trong một bình khí có hỗn hợp các khí A, B, C thì khi đó có thể quan niệm : trong khi chuyển động nhiệt các phân tử khí A gây nên ở thành bình một áp suất bằng  $P_A$ .

Tương tự như vậy các phân tử khí B gây nên áp suất  $P_B$  và các phân tử C gây nên áp suất  $P_C$ .

$P_A, P_B, P_C$  được gọi là áp suất riêng phần của các khí A, B, C trong hỗn hợp.

Áp suất riêng phần của một chất khí trong hỗn hợp là áp suất có được khi một mình khí đó chiếm toàn bộ thể tích của hỗn hợp ở nhiệt độ đã cho.

Áp suất chung của toàn bộ hỗn hợp khí tác dụng lên thành bình sẽ bằng tổng các áp suất riêng phần của từng chất khí trong hỗn hợp :

$$P = P_A + P_B + P_C$$

Trong trường hợp tổng quát.

$$P = \sum_i P_i \quad (3-5)$$

**3.2. Nồng độ mol phần.** Xét hỗn hợp khí gồm  $n_A$  mol khí A,  $n_B$  mol khí B,  $n_C$  mol khí C. Khi đó nồng độ mol phần của A (kí hiệu là  $N_A$ ) được tính bằng công thức :

$$N_A = \frac{n_A}{n_A + n_B + n_C}$$

Một cách tổng quát có thể viết :

$$N_j = \frac{n_j}{\sum_i n_i} \quad (3-6)$$

Có thể nhận thấy : tổng các nồng độ mol phần của các chất khí trong hỗn hợp bằng đơn vị

$$\sum_i N_i = 1 \quad (3-7)$$

Như vậy để xác định thành phần định lượng của 1 hỗn hợp khí gồm  $n$  chất khí ta chỉ cần biết nồng độ mol phân của  $n - 1$  chất khí trong hỗn hợp.

#### 4. Thuyết động học chất khí

Các phương trình (3-1), (3-2), (3-3) chỉ hoàn toàn đúng đối với các chất khí lí tưởng là những chất khí thỏa mãn các điều kiện sau :

- Phân tử khí có khối lượng ( $M$ ), nhưng kích thước phân tử khí không đáng kể so với thể tích của bình đựng.

- Giữa các phân tử khí không có lực tương tác (hút và đẩy) mà chỉ có va chạm đàn hồi giữa các phân tử khí với nhau và với thành bình.

Từ quan niệm như vậy người ta đã xây dựng lí thuyết động học về chất khí với một số kết luận như sau :

##### 4.1. Động năng trung bình của phân tử khí.

$$\varepsilon = \frac{M \cdot v^2}{2} = \frac{3}{2} kT \quad (3-8)$$

$v$  : vận tốc trung bình của phân tử khí,

$k$  : hằng số Boltzmann.

(3-8) cho thấy nhiệt độ tuyệt đối ( $K$ ) là thước đo chuyển động của phân tử khí.

4.2. Vận tốc chuyển động của phân tử khí. Nếu có 2 khí lí tưởng ở cùng nhiệt độ và khối lượng phân tử tương ứng là  $M_1$  và  $M_2$ , vận tốc tương ứng là  $v_1$ ,  $v_2$ , khi đó động năng trung bình của phân tử khí là :

$$\frac{3}{2} kT = \frac{1}{2} M_1 \overline{v_1^2} = \frac{1}{2} M_2 \overline{v_2^2}$$

gọi :  $C = \sqrt{\overline{v^2}}$

là vận tốc bình phương trung bình, tính toán cho biết :

$$C = 0,92 v_{tb}$$

trong đó  $v$  là vận tốc trung bình, nghĩa là :

$$v_{tb} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N v_i$$

Khi đó ta viết được :

$$\frac{\sqrt{\overline{v^2}}_1}{\sqrt{\overline{v^2}}_2} = \sqrt{\frac{M_2}{M_1}} = \frac{C_1}{C_2} \approx \frac{v_{1tb}}{v_{2tb}} \quad (3-9)$$

Vậy phân tử có khối lượng càng nhỏ thì có vận tốc chuyển động nhiệt càng lớn.

## 5. Sự phân bố các phân tử khí theo năng lượng (phân bố Maxwell - Boltzmann)

Trong một chất khí, do chuyển động nhiệt các phân tử luôn luôn va chạm với nhau và với thành bình nên vận tốc của chúng luôn luôn thay đổi về trị số và phương chiều. Vì vậy ở một nhiệt độ cho trước, tuy động năng trung bình của các phân tử khí có giá trị xác định nhưng luôn luôn có một số phân tử khí có động năng lớn hơn động năng trung bình và một số phân tử khí có động năng nhỏ hơn động năng trung bình. Năm 1895 C.Maxwell đã thiết lập định luật phân bố các phân tử khí theo vận tốc cho phép tính số phân tử khi  $dn_v$  có vận tốc nằm trong khoảng từ  $v$  đến  $v + dv$  trong tổng số phân tử khí  $N$  của hệ :

$$dn_v = \frac{4N}{\sqrt{\pi}} \left( \frac{M}{2kT} \right)^{3/2} e^{-Mv^2/2kT} v^2 dv \quad (3-10)$$

trong đó  $M$  : khối lượng phân tử khí

$k$  : hằng số Boltzmann

$T$  : nhiệt độ tuyệt đối.

Nếu xét sự phân bố các phân tử khí trong một trường lực ngoài (ví dụ trọng trường) ta có *định luật phân bố Boltzmann* :

$$n = n_0 e^{-\varepsilon_i/kT} \quad (3-11)$$

Trong đó  $n$  là số phân tử khí có thế năng  $\varepsilon_i$ ,  $n_0$  là số phân tử khí có thế năng bằng 0 (ví dụ ở độ cao qui ước bằng 0).

Có thể thống nhất hai định luật phân bố nói trên bằng cách thay số phân tử  $N$  trong công thức của Maxwell bằng biểu thức của  $n$  trong phân bố Boltzmann. Khi đó ta có :

$$dn_{\varepsilon_i, v} = n_0 4\pi \left( \frac{M}{2kT} \right)^{3/2} e^{-\frac{(\varepsilon_i + \varepsilon_d)}{kT}} v^2 dv \quad (3-12)$$

$n_0$  : nồng độ trung bình của phân tử khí ở nơi có  $\varepsilon_i = 0$ .

$\varepsilon = \varepsilon_i + \varepsilon_d$  là tổng năng lượng của phân tử khí.

Đó là định luật phân bố Maxwell - Boltzmann mô tả sự phân bố các phân tử khí theo năng lượng toàn phần của phân tử khí.

Trong trường hợp năng lượng phân tử chỉ có thể nhận những giá trị gián đoạn, ta có công thức :

$$N_i = A \cdot e^{-\varepsilon_i/kT} \quad (3-13)$$

Trong đó :  $\varepsilon_i$  là năng lượng toàn phần của phân tử khí.

Hệ số tỉ lệ  $A$  :

$$A = \frac{N}{\sum_i e^{-\varepsilon_i/kT}}$$

$A$  được gọi là *thừa số chuẩn hóa*.

Trong trường hợp  $N_i$  nhỏ, có thể coi  $A \approx N$  (tổng số phân tử khí) và có công thức gần đúng :

$$N_i = N \cdot e^{-\varepsilon_i/kT} \quad (3-14)$$



Nếu tính lượng khí ra mol ta có công thức :

$$N_i = A \cdot e^{-E_i/RT} \quad (3-15)$$

hay công thức gần đúng :

$$N_i = N \cdot e^{-E_i/RT} \quad (3-16)$$

Trong đó  $E_i$  là năng lượng ứng với 1 mol khí.

$R$  là hằng số khí lí tưởng.

Định luật phân bố Maxwell - Boltzmann có thể áp dụng cho cả những loại hạt có tính chất giống với phân tử khí lí tưởng.

## 6. Khí thực

Trong mô hình khí lí tưởng ta đã giả thiết :

- Bỏ qua thể tích riêng của phân tử khí. Khi đó thể tích không gian trống để các phân tử chuyển động được coi là bằng dung tích của bình.

- Bỏ qua lực tương tác (hút, đẩy) giữa các phân tử khí, khi đó đối với 1 mol khí ta có phương trình :

$$PV = RT \quad (3-3)$$

Tuy nhiên các giả thuyết trên chỉ đúng trong điều kiện khí loãng, nhiệt độ cao, áp suất nhỏ. Ở những điều kiện nhiệt độ thấp, nồng độ khí lớn (và áp suất khí lớn) phương trình (3-3) trở nên không chính xác. Để có thể áp dụng (3-3) trong những điều kiện như vậy người ta phải hiệu chỉnh bằng cách :

- Tính đến thể tích riêng của các phân tử khí (kí hiệu là  $b$ ). Khi đó khoảng không gian tự do sẽ là  $V - b$ .

- Tính đến lực hút giữa các phân tử khí. Lực này làm giảm một phần lực va đập vào thành bình của phân tử khí, làm cho áp suất mà khí thực gây ra  $P_t$  nhỏ hơn áp suất do khí lí tưởng  $P_n$  gây ra một trị số gọi là áp suất nội  $P_n$  :

$$P_{tt} = P_t + P_n$$

Do đó (3-3) được viết thành :

$$(P + P_n)(V - b) = RT.$$

Người ta xác định :

$$P_n = \frac{a}{V^2}$$

trong đó  $a$  là hằng số đối với mỗi chất khí

$V$  là thể tích khí.

Khi đó (3-3) được viết thành :

$$\left(P + \frac{a}{V^2}\right)(V - b) = RT \quad (3-17)$$

(3-17) được gọi là phương trình khí thực Vander - Waals.

Trong đó  $a$  và  $b$  là những hằng số phụ thuộc vào từng chất khí. Người ta còn thiết lập nhiều dạng phương trình khí thực khác áp dụng trong những trường hợp khác nhau.

## B - TRẠNG THÁI RẮN

### 7. Chất tinh thể và chất vô định hình

7.1. Chất tinh thể : có các đặc trưng sau :

a) Có khả năng tự kết tinh thành các tinh thể có hình dạng xác định, có tính đối xứng xác định.

b) Trong tinh thể các nguyên tử, phân tử, oin được sắp xếp theo một trật tự xác định. Trật tự này quyết định hình dạng và tính đối xứng của tinh thể.

c) Có nhiệt độ nóng chảy xác định, không đổi trong suốt quá trình nóng chảy.

d) Có tính định hướng (còn gọi là tính vectơ hay tính bất đẳng hướng). Đó là sự thể hiện các tính chất vật lí, hóa học theo những phương khác nhau một cách khác nhau.

Ví dụ : Độ bền cơ học, sự khúc xạ ánh sáng, tính dẫn điện, dẫn nhiệt, vận tốc hòa tan...

**7.2. Chất vô định hình.** Có các đặc trưng sau :

- a) Không thể tự kết tinh thành tinh thể có hình dạng xác định.
- b) Trong chất vô định hình các phân tử sắp xếp hỗn độn, vì vậy chất vô định hình được coi là chất lỏng quá lạnh.
- c) Không có nhiệt độ nóng chảy xác định.
- d) Có tính đẳng hướng.

**7.3. Thực ra không thể có sự phân biệt hoàn toàn nghiêm ngặt giữa chất tinh thể và chất vô định hình vì :**

- Có nhiều chất tùy điều kiện cụ thể mà có thể ở dạng tinh thể hoặc ở dạng vô định hình, và có thể biến đổi từ dạng này sang dạng kia.

- Bằng những phương pháp nghiên cứu hiện đại (ví dụ phương pháp phân tích cấu trúc bằng tia Roenghent) người ta thấy trong nhiều chất vô định hình (ví dụ trong thủy tinh) có cấu trúc vi tinh thể.

## 8. Tính đối xứng và các hệ tinh thể

Một đặc điểm quan trọng của tinh thể là có tính đối xứng. Dựa vào tính đối xứng người ta phân loại các tinh thể thành những hạng và những hệ tinh thể khác nhau.

Có 3 hạng và 7 hệ tinh thể.

**8.1. Hạng thấp.** Gồm những tinh thể không có trục đối xứng bậc cao hơn 2. Hạng này gồm có 3 hệ :

a) *Hệ ba xiên* (tam tà) : không có trục đối xứng và mặt đối xứng.

b) *Hệ một xiên* (đơn tà) có thể có 1 trục đối xứng hay 1 mặt đối xứng và cả hai.

c) *Hệ trục thoi* : mỗi dạng đối xứng có một số yếu tố đối xứng giống nhau.

**8.2. Hạng trung.** Gồm những tinh thể có 1 trục đối xứng bậc cao hơn hai. Hạng này gồm 3 hệ tinh thể :

d) *Hệ ba phương* có 1 trục bậc 3.

e) *Hệ bốn phương* có 1 trục bậc 4.

f) *Hệ sáu phương* có 1 trục bậc 6.

**8.3. Hạng cao.** Có nhiều trục đối xứng bậc cao. Có 1 hệ :

g) *Hệ lập phương* có 4 trục bậc 3.

## 9. Mạng lưới tinh thể

**9.1. Mạng lưới không gian và ô mạng cơ sở.** Trong tinh thể các nguyên tử, phân tử, ion được sắp xếp theo những quy luật chặt chẽ. Hệ thống tâm điểm của những hạt này tạo thành *mạng lưới không gian* của tinh thể.

Mỗi điểm được gọi là 1 *nút lưới*. Mỗi hình hộp mà đỉnh là các nút lưới được gọi là 1 *ô mạng*. Một ô mạng được gọi là *ô mạng cơ sở* nếu nó có thể tích cực tiểu đồng thời có toàn bộ các đặc điểm đối xứng của mạng lưới tinh thể.

**9.2. Số phối trí và hằng số mạng lưới.** *Số phối trí* là số hạt (nguyên tử, phân tử, ion) gần nhất bao quanh một hạt cho trước và cách hạt này những khoảng cách bằng nhau. Số phối trí đặc trưng cho quy luật phân bố các hạt trong mạng lưới, phụ thuộc vào tỉ lệ kích thước giữa các hạt và tính chất của mỗi liên kết giữa các hạt.

Khoảng cách ngắn nhất giữa tâm điểm của 2 hạt kế nhau được gọi là *hằng số mạng lưới* (kí hiệu là  $d$ ).

Biết hằng số mạng lưới ta có thể tính được bán kính của nguyên tử và ion.

**9.3. Nguyên lí sắp xếp đặc khít nhất.** Trong tinh thể các hạt có khuynh hướng sắp xếp đặc khít nhất sao cho thể tích khoảng không gian tự do giữa chúng là nhỏ nhất.

## 10. Liên kết hóa học trong tinh thể

Dựa vào bản chất các mối liên kết hóa học trong tinh thể người ta phân biệt các dạng mạng lưới sau :

**10.1. Mạng lưới ion.** Các nút lưới là do các ion dương hoặc âm lần lượt chiếm giữ, các ion này liên kết với nhau bằng liên kết ion.

Vì liên kết ion là loại liên kết bền không định hướng, không bão hòa nên mạng lưới ion có đặc điểm :

- Tuân theo nguyên lí sắp xếp đặc khít nhất, số phối trí chỉ phụ thuộc vào tỷ số bán kính giữa cation và anion.
- Cơ độ bền cao, độ cứng cao.
- Dẫn nhiệt, dẫn điện kém vì trong tinh thể ion không có các hạt mang điện tích chuyển động tự do.

Độ bền của mạng lưới ion được đánh giá bằng năng lượng mạng lưới. Đó là năng lượng được giải phóng khi tạo thành 1 mol chất tinh thể từ các ion ở trạng thái tự do.

Về mặt lí thuyết có thể tính năng lượng mạng lưới bằng công thức Born.

$$U = - N_o \cdot \frac{Z^2 e^2}{R} \cdot a \cdot \left( \frac{n-1}{n} \right) \quad (3-18)$$

trong đó  $N_o$  là số Avogadro.

$e$  là điện tích electron (tính ra Culong)

$Z$  điện tích ion (lấy  $|e|$  làm đơn vị)

$a$  là hằng số Madelung phụ thuộc vào dạng cấu trúc tinh thể.

$n$  là hệ số đầy Born phụ thuộc vào cấu tạo vỏ electron của nguyên tử.

Từ công thức Born, Kapustinski đưa ra công thức gần đúng :

$$U = 256,1 \frac{Z_+ \cdot Z_-}{r_+ + r_-} \sum m \quad (3-19)$$

$Z_+$ ,  $Z_-$  là điện tích ion (lấy  $|e|$  làm đơn vị).

$r_+$ ,  $r_-$  là bán kính cation và anion.

$\sum m$  là tổng số các cation và anion trong công thức phân tử của hợp chất ion.

Ví dụ về mạng lưới tinh thể ion là tinh thể NaCl có số phối trí bằng 6. Ô mạng cơ sở có dạng hình lập phương. Các ion  $\text{Na}^+$  nằm ở tâm và trung điểm các cạnh hình lập phương, các ion  $\text{Cl}^-$  ở đỉnh và điểm giữa các mặt hình lập phương.

### 10.2. Mạng lưới cộng hóa trị hay mạng lưới nguyên tử.

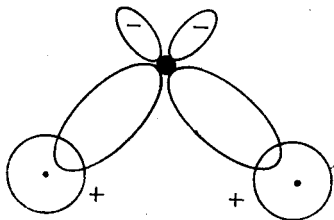
Nút lưới do các nguyên tử chiếm giữ, liên kết với nhau bằng liên kết cộng hóa trị. Liên kết cộng hóa trị rất bền và có tính định hướng nên tinh thể cộng hóa trị có tính chất :

- Rất bền, nhiệt độ nóng chảy cao, độ cứng cao.
- Không luôn luôn tuân theo triệt để nguyên lý sắp xếp đặc khít nhất vì các nguyên tử phải sắp xếp phù hợp với phương liên kết.
- Tính dẫn nhiệt và dẫn điện kém.

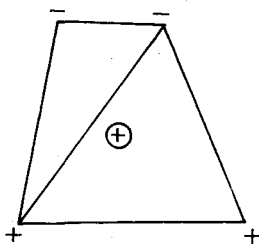
Ví dụ : tinh thể kim cương có cấu trúc tứ diện. Các nguyên tử cacbon nằm ở tâm và đỉnh của hình tứ diện đều liên kết với nhau bằng liên kết cộng hóa trị.

**10.3. Mạng lưới phân tử.** Nút lưới là do các phân tử chiếm giữ liên kết với nhau bằng lực Vander - Waals hoặc liên kết hidro, là những loại liên kết yếu. Mạng lưới phân tử có tính chất kém bền, nhiệt độ nóng chảy thấp vì chỉ cần động năng chuyển động nhiệt tương đối lớn là đủ phá vỡ các loại liên kết yếu nói trên. Ví dụ quan trọng về mạng lưới phân tử là mạng lưới của tinh thể nước đá.

Phân tử nước có cấu tạo tứ diện với 4 cực ở 4 đỉnh của hình tứ diện (do sự lai hóa kiểu  $sp^3$  của nguyên tử ôxi), như trên các hình 3-1 và 3-2.



Hình 3-1. Các Mây electron hóa trị trong phân tử nước.



Hình 3-2. Sơ đồ cấu trúc tứ diện của phân tử nước.

Vì vậy mỗi phân tử nước có khả năng tạo 4 mối liên kết hydro với 4 phân tử khác nằm chung quanh và hình thành cách sắp xếp kiểu tứ diện trong nước đá. Trong tinh thể nước đá cấu trúc tứ diện được tuân theo 1 cách nghiêm ngặt, tạo thành những lỗ trống tứ diện có kích thước lớn hơn kích thước phân tử nước. Khoảng cách giữa tâm của 2 phân tử nước kề nhau là 2,76 Å, khoảng cách từ tâm lỗ trống đến tâm của phân tử nước gần nhất là 2,94 Å, vì vậy nước đá có cấu tạo xốp.

**10.4. Mạng lưới kim loại.** Trong tinh thể kim loại thường mỗi nguyên tử hay ion kim loại được bao bọc bởi 12 hay 8 nguyên tử cùng loại (số phối trí bằng 12 hoặc 8). Các ion hoặc nguyên tử kim loại trong mạng lưới liên kết với nhau nhờ các mây electron tự do không định chỗ cố định vào một nguyên tử nào.

Trong tinh thể kim loại các nguyên tử kim loại nằm cạnh nhau có mây electron ngoài cùng (electron hóa trị) xen phủ lẫn nhau, nên mỗi electron hóa trị chịu tác dụng đồng thời của điện trường của nhiều nguyên tử. Vì vậy các electron hóa trị đó có thể chuyển từ nguyên tử này sang nguyên tử khác mà

không cần tiêu thụ năng lượng. Đó là những electron tự do trong tinh thể.

*Ví dụ* : Trong tinh thể natri mỗi nguyên tử Na có 1 electron hóa trị, nhưng lại có số phối trí bằng 8 nghĩa là nó liên kết đồng thời với 8 nguyên tử Na khác. Vì vậy electron hóa trị của nguyên tử Na đó không định chỗ cố định ở một mối liên kết nào mà có thể di chuyển trong toàn bộ tinh thể và mỗi ion  $\text{Na}^+$  (hay nguyên tử Na) được bao quanh bởi những mây electron hóa trị không thuộc riêng 1 nguyên tử nào. Mạng lưới kim loại natri được hình dung như cấu tạo từ các ion  $\text{Na}^+$  (ở các nút lưới) nằm trong đám mây của các electron tự do. Các mối liên kết được thực hiện nhờ lực hút giữa ion  $\text{Na}^+$  và đám mây electron mang điện tích âm đó.

Loại liên kết như vậy được gọi là liên kết kim loại.

Lý thuyết liên kết kim loại cho phép giải thích các tính chất của kim loại.

a) Liên kết kim loại tuy yếu hơn liên kết cộng hóa trị nhưng cũng khá bền, nên việc tách các nguyên tử kim loại khỏi tinh thể cũng khó khăn.

b) Tính dẻo của kim loại là do : dưới tác dụng của ngoại lực các lớp ion trong tinh thể có thể dịch chuyển so với nhau nhưng mối liên kết giữa các lớp đó nhờ mây electron tự do vẫn được bảo toàn.

c) Tính dẫn nhiệt của các kim loại được giải thích bằng khả năng di chuyển tương đối dễ dàng của các electron hóa trị từ ion kim loại này sang ion kim loại khác trong mạng lưới dưới tác dụng của nhiệt hoặc của điện trường.

## 11. Hiện tượng đồng hình và tính đa hình

**11.1. Hiện tượng đồng hình.** Các chất đồng hình là những chất rắn có công thức hóa học cùng một dạng, có cùng dạng cấu trúc mạng lưới tinh thể và có thể thay thế nhau trong mạng lưới tinh thể để tạo thành các tinh thể hỗn tạp.

*Ví dụ* : hai muối KCl và KBr là những chất đồng hình có thể cùng kết tinh tạo thành tinh thể hỗn tạp.

**11.2. Dung dịch rắn.** Trong trường hợp các hạt (nguyên tử, ion...) của một chất có thể phân bố đều vào toàn bộ thể tích của chất thứ hai, ta thu được dung dịch rắn.



Người ta phân biệt 2 loại dung dịch rắn :

- Dung dịch rắn thế hay dung dịch rắn loại 1 là dung dịch rắn trong đó các hạt của 1 chất rắn thay thế vào vị trí của các hạt chất rắn thứ 2 trong mạng lưới tinh thể và tạo thành tinh thể hỗn tạp.

- Dung dịch rắn xâm nhập hay dung dịch rắn loại 2 trong đó các hạt của 1 chất được phân bố vào những khoảng không gian trống giữa các nút lưới của chất thứ 2. Trường hợp này xảy ra khi kích thước hạt của chất thứ nhất nhỏ hơn nhiều so với kích thước hạt của chất thứ hai.

**11.3. Tính đa hình.** Một chất trong những điều kiện khác nhau (về nhiệt độ, áp suất...) có thể tồn tại ở những dạng cấu trúc tinh thể khác nhau được gọi là *chất có tính đa hình*.

*Nhiệt độ* tại đó xảy ra sự chuyển dạng cấu trúc tinh thể được gọi là *điểm chuyển*.

*Ví dụ* : Cacbon có thể tồn tại ở dạng graphit (hệ sáu phương) và kim cương (hệ lập phương).

Sắt có thể tồn tại ở 4 dạng tinh thể  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ ,  $\delta$ , điểm chuyển lần lượt là  $760^{\circ}\text{C}$ ,  $906^{\circ}\text{C}$ ,  $1401^{\circ}\text{C}$ ,  $1539^{\circ}\text{C}$ . Ba dạng  $\alpha$ ,  $\beta$  và  $\delta$  có cấu trúc lập phương thể tâm, dạng  $\gamma$  có cấu trúc lập phương tâm mặt, Fe -  $\gamma$  chỉ bền ở nhiệt độ trên  $906^{\circ}\text{C}$ , và có khả năng chống ăn mòn, có khả năng hòa tan cacbon. Nếu làm nguội nhanh Fe -  $\gamma$  xuống nhiệt độ thường thì nó vẫn giữ được dạng cấu trúc và tính chất của nó. Đó là nguyên tắc của quá trình tôi thép. Tuy nhiên nếu nung nóng đến  $300^{\circ}\text{C}$  thì dạng  $\gamma$  sẽ chuyển thành dạng  $\alpha$ .

## CÂU HỎI

1. Trong các trạng thái tập hợp (khí, lỏng, rắn) mối tương quan giữa động năng chuyển động nhiệt và thế năng tương tác giữa các hạt khác nhau như thế nào ?

2. Thế nào là áp suất riêng phần ? Phát biểu định luật Dalton về áp suất riêng phần.

3. Quan hệ giữa nhiệt độ của chất khí và động năng chuyển động nhiệt của phân tử khí như thế nào ?

4. Viết phương trình Boltzmann và giải thích ý nghĩa của phương trình đó.
5. Phân biệt khí thực với khí lí tưởng. Cách áp dụng phương trình trạng thái khí lí tưởng cho khí thực.
6. Nêu các đặc trưng cơ bản của trạng thái lỏng.
7. Cấu tạo của nước lỏng như thế nào ? Giải thích các tính chất bất thường của nước.
8. Phân biệt chất tinh thể và chất vô định hình.
9. Thế nào là ô mạng cơ sở, số phối trí, hằng số mạng lưới ?
10. Phân biệt các loại mạng lưới tinh thể theo bản chất liên kết hóa học.
11. Thế nào là hiện tượng đồng hình ? Nêu các điều kiện tạo thành tinh thể hỗn tạp.
12. Thế nào là tính đa hình ? Nguyên nhân gây ra tính đa hình.

## BÀI TẬP

1. Từ phương trình trạng thái khí lí tưởng hãy chứng minh định luật Avogadro.
2. Tính thể tích của 8,8gam khí  $\text{CO}_2$  ở  $91^\circ\text{C}$  và  $0,667\text{atm}$ .  
Đs. 8,9 lít.
3. Một bình kín dung tích 4 lít chứa hỗn hợp khí CO và  $\text{O}_2$  ở  $819\text{K}$  và  $0,8\text{atm}$ . Sau khi hai khí phản ứng tạo thành 0,2 gam khí  $\text{CO}_2$  thì áp suất khí trong bình ở nhiệt độ đã cho bằng bao nhiêu.  
Đs :  $0,76\text{ atm}$ .
4. Đốt cháy một lượng cacbon được hỗn hợp khí CO và  $\text{CO}_2$ . Hỗn hợp khí này nếu đo ở  $136,5^\circ\text{C}$  và  $1\text{atm}$  thì có thể tích là  $V_1$ . Nếu đưa về  $27,3^\circ\text{C}$  và  $1,2\text{ atm}$  thì thể tích giảm đi 1,96 lít.  
Hãy tính khối lượng cacbon đã đốt cháy.  
Đs : 1,8gam.
5. Có 2 bình khí đều có dung tích bằng 8 lít được nối với nhau qua một ống có khóa K. Lúc đầu khóa K đóng. Bình 1

đựng hỗn hợp khí A gồm  $H_2$ , CO, HCl. Bình 2 đựng hỗn hợp khí B gồm  $H_2$ , CO,  $NH_3$ . Nhiệt độ 2 bình bằng nhau và bằng  $25^\circ C$ .

Áp suất khí trong bình 1 bằng  $0,3368 \text{ atm}$ , trong bình 2 bằng  $0,5501 \text{ atm}$ . Mở khóa K cho hỗn hợp 2 khí khuếch tán vào nhau. Sau 1 thời gian thành phần khí trong 2 bình đồng nhất, nhiệt độ mỗi bình bằng  $27^\circ C$  và áp suất bằng  $0,3385 \text{ atm}$ .

Tính thành phần % thể tích và % khối lượng hỗn hợp các khí ở thời điểm cuối và thời điểm đầu. Biết số mol khí CO trong A bằng số mol khí  $H_2$  trong B, số mol  $H_2$  trong A bằng số mol CO trong B. Khối lượng A lớn hơn khối lượng B là  $0,28 \text{ gam}$ .

Đs : sau khi trộn lẫn :	$H_2$	CO	$NH_3$
% thể tích :	36,36%	36,36%	27,27%.
% khối lượng :	4,68%	65,50%	29,82%.

Trước khi trộn lẫn :	hỗn hợp A :	$H_2$	CO	HCl
		$0,03 \text{ mol}$	$0,05 \text{ mol}$	$0,04 \text{ mol}$
	%V :	25%	41,67%	33,33%
	%m :	2,05%	47,95%	50,0%.

Hỗn hợp B :	$H_2$	CO	$NH_3$	
	$0,05 \text{ mol}$	$0,03 \text{ mol}$	$0,1 \text{ mol}$	
	%V :	27,78%	16,67%	55,56%
	%m :	3,79%	31,82%	64,39%

6. Biết momen lưỡng cực của nước là  $1,84D$ , của HF là  $1,91D$ , hãy giải thích vì sao nhiệt độ nóng chảy của nước cao hơn nhiều so với nhiệt độ nóng chảy của HF ( $-83^\circ C$ ).

7. Vì sao các chất hữu cơ rắn thường có mùi mà các hợp chất vô cơ rắn thường không có mùi.

8. Vì sao đối với nhiều chất polyme, trạng thái vô định hình đặc trưng hơn trạng thái tinh thể.

Bảng 1-2

Cấu tạo nguyên tử và một số tính chất của nguyên tố

Điện tích hạt nhân	Nguyên tố	Khối lượng nguyên tử	Cấu trúc elec	Bán kính nguyên tử (Å)	Bán kính ion (Å)
(1)	(2)	(3)	(4)	(5)	(6)
1	H	1,00797	$1s^1$	-	2,08(-1)
2	He	4,0026	$1s^2$	-	-
3	Li	6,939	$1s^2 2s^1$	1,55	0,60
4	Be	9,0122	$1s^2 2s^2$	1,12	0,31
5	B	10,811	$1s^2 2s^2 2p^1$	0,98	0,20
6	C	12,01115	$1s^2 2s^2 2p^2$	0,914	2,60(-4)
7	N	14,0067	$1s^2 2s^2 2p^3$	0,92	1,71(-3)
8	O	15,9094	$1s^2 2s^2 2p^4$	-	1,40
9	F	18,9984	$1s^2 2s^2 2p^5$	-	1,36
10	Ne	20,183	$1s^2 2s^2 2p^6$	-	-
11	Na	22,9898	(Ne) $3s^1$	1,90	0,95
12	Mg	24,312	(Ne) $3s^2$	1,60	0,65
13	Al	26,9815	(Ne) $3s^2 3p^1$	1,43	0,5
14	Si	28,086	(Ne) $3s^2 3p^2$	1,32	2,71(-4)

Năng lượng ion hóa (I <sub>1</sub> ) (eV)	Độ âm điện (thang Pauling)	Nhiệt độ sôi (°C)	Nhiệt độ nóng chảy (°C)	Khối lượng riêng (g/cm <sup>3</sup> )	Số ôxi hóa	Ái lực với electron (eV)
(7)	(8)	(9)	(10)	(11)	(12)	(13)
13,6	2,1	-252,7	-259,2	0,071	±1	0,75
24,6	-	-268,9	-269,7	0,126	0	0,19
5,4	1,0	1330	180,5	0,53	1	0,82
9,3	1,5	2770	1277	1,85	2	-0,19
8,3	2,0	-	(2030)	2,34	3	0,33
11,3	2,5	4830	3727	2,26	±4,2	1,12
14,5	3,0	-195,8	-210	0,81	±3,5;4,2	0,05
13,6	3,5	-183	-218,8	1,14	-2, -1	1,47
17,4	4,0	-188,2	-219,6	1,51	-1	3,45
21,6	-	-246	-248,6	1,20	0	-
5,1	0,9	892	97,8	0,94	1	0,47
7,6	1,2	1107	650	1,74	2	-0,32
6,0	1,5	2450	660	2,70	3	0,52
8,1	1,8	2680	1410	2,33	4	1,46

(1)	(2)	(3)	(4)	(5)	(6)
15	P	30,9738	(Ne) $3s^2 3p^3$	1,28	2,12(-3)
16	S	32,064	(Ne) $3s^2 3p^4$	1,27	1,84(-2)
17	Cl	35,453	(Ne) $3s^2 3p^5$	-	1,81
18	Ar	39,948	(Ne) $3s^2 3p^6$	-	-
19	K	39,102	(Ar) $4s^1$	2,35	1,33
20	Ca	40,08	(Ar) $4s^2$	1,97	0,99
21	Sc	44,956	(Ar) $3d^1 4s^2$	1,62	0,81
22	Ti	47,90	(Ar) $3d^2 4s^2$	1,47	0,90(+2)
23	V	50,942	(Ar) $3d^3 4s^2$	1,34	0,74(+3)
24	Cr	51,996	(Ar) $3d^5 4s^1$	1,30	0,69(+3)
25	Mn	54,938	(Ar) $3d^5 4s^2$	1,35	0,80(+2)
26	Fe	55,847	(Ar) $3d^6 4s^2$	1,26	0,76(+2)
27	Co	58,933	(Ar) $3d^7 4s^2$	1,25	0,74(+2)
28	Ni	58,71	(Ar) $3d^8 4s^2$	1,24	0,72(+2)
29	Cu	63,54	(Ar) $3d^{10} 4s^1$	1,28	0,69(+2)
30	Zn	65,37	(Ar) $3d^{10} 4s^2$	1,38	0,74
31	Ga	69,72	(Ar) $3d^{10} 4s^2 4p^1$	1,41	0,62
32	Ge	72,59	(Ar) $3d^{10} 4s^2 4p^2$	1,37	0,53
33	As	74,922	(Ar) $3d^{10} 4s^2 4p^3$	1,39	2,22(-3)
34	Se	78,96	(Ar) $3d^{10} 4s^2 4p^4$	1,40	1,98(-2)
35	Br	79,909	(Ar) $3d^{10} 4s^2 4p^5$	-	1,95
36	Kr	83,80	(Ar) $3d^{10} 4s^2 4p^6$	-	-

(7)	(8)	(9)	(10)	(11)	(12)	(13)
10,5	2,1	280	44,2	1,82	±2,5,4	-
10,4	2,5	444,6	119,0	2,07	±2,4,6	2,07
13,0	3,0	-34,7	-101,0	1,56	±1,3,5,7	3,61
15,8	-	-185,8	-189,4	1,40	0	-
4,3	0,8	760	63,7	0,86	1	
6,1	1,0	1440	838	1,55	2	
6,5	1,3	2730	1539	3,0	3	
6,8	1,5	3260	1668	4,51	4,3	
6,7	1,6	3450	1900	6,1	5,4,3,2	
6,8	1,6	2665	1875	7,19	6,3,2	
7,4	1,5	2150	1245	7,43	7,6,4,3,2	
7,9	1,8	3000	1536	7,86	3,2	
7,9	1,8	2900	1495	8,9	3,2	
7,6	1,8	2730	1453	8,9	3,2	
7,7	1,9	2595	1083	8,96	2,1	
6,8	1,6	906	419,5	7,14	2	
6,0	1,6	2237	29,8	5,91	3	
7,9	1,8	2830	937,4	5,32	4	
9,8	2,0	613	817	5,72	±3,5	
9,8	2,4	685	217	4,79	-2,4,6	
11,8	2,8	58	-7,2	3,12	±1,5	3,36
14,0	-	-152	-157,3	2,6	0	

(1)	(2)	(3)	(4)	(5)	(6)
37	Rb	85,47	(Kr) 5s <sup>1</sup>	2,48	1,48
38	Sr	87,62	(Kr) 5s <sup>2</sup>	2,15	1,13
39	Y	88,905	(Kr) 4d <sup>1</sup> 5s <sup>2</sup>	1,78	0,93
40	Zr	91,22	(Kr) 4d <sup>2</sup> 5s <sup>2</sup>	1,60	0,80
41	Nb	92,906	(Kr) 4d <sup>4</sup> 5s <sup>1</sup>	1,46	0,70(+5)
42	Mo	95,94	(Kr) 4d <sup>5</sup> 5s <sup>1</sup>	1,39	0,62(+6)
43	Tc	(98)	(Kr) 4d <sup>5</sup> 5s <sup>2</sup>	1,36	-
44	Ru	101,07	(Kr) 4d <sup>7</sup> 5s <sup>1</sup>	1,34	0,69(+3)
45	Rh	102,905	(Kr) 4d <sup>8</sup> 5s <sup>1</sup>	1,34	0,86(+2)
46	Pd	106,04	(Kr) 4d <sup>10</sup>	1,37	0,86(+2)
47	Ag	107,870	(Kr) 4d <sup>10</sup> 5s <sup>1</sup>	1,44	1,26
48	Cd	112,40	(Kr) 4d <sup>10</sup> 5s <sup>2</sup>	1,54	0,97
49	In	114,82	(Kr) 4d <sup>10</sup> 5s <sup>2</sup> 5p <sup>1</sup>	1,66	1,32(+1)
50	Sn	118,69	(Kr) 4d <sup>10</sup> 5s <sup>2</sup> 5p <sup>2</sup>	1,62	1,12(+2)
51	Sb	121,75	(Kr) 4d <sup>10</sup> 5s <sup>2</sup> 5p <sup>3</sup>	1,59	2,45(-3)
52	Te	127,60	(Kr) 4d <sup>10</sup> 5s <sup>2</sup> 5p <sup>4</sup>	1,60	2,21(-2)
53	I	126,904	(Kr) 4d <sup>10</sup> 5s <sup>2</sup> 5p <sup>5</sup>	-	2,16
54	Xe	131,30	(Kr) 4d <sup>10</sup> 5s <sup>2</sup> 5p <sup>6</sup>	-	-
55	Cs	132,905	(Xe) 6s <sup>1</sup>	2,67	1,69
56	Ba	137,34	(Xe) 6s <sup>2</sup>	2,22	1,35
57	La	138,91	(Xe) 5d <sup>1</sup> 6s <sup>2</sup>	1,87	1,15
58	Ce	140,12	(Xe) 4f <sup>1</sup> 5d <sup>1</sup> 6s <sup>2</sup>	1,81	1,11(+3)
59	Pr	140,907	(Xe) 4f <sup>3</sup> 6s <sup>2</sup>	1,82	1,09(+3)
60	Nd	144,24	(Xe) 4f <sup>4</sup> 6s <sup>2</sup>	1,82	1,08(+3)



(7)	(8)	(9)	(10)	(11)	(12)	(13)
4,2	0,8	688	38,9	1,53	1	
5,7	1,0	1380	768	2,6	2	
6,4	1,3	2927	1509	4,47	3	
6,8	1,4	3580	1852	6,49	4	
6,9	1,6	3300	2468	8,4	5,3	
7,1	1,8	5560	2610	10,2	6,5,4,3,2	
7,3	1,9	-	2140	11,5	7	
7,4	2,2	4900	2500	12,2	2,3,4,6,8	
7,5	2,2	4500	1966	12,4	4,3,2	
8,3	2,2	3980	1552	12,0	4,2	
7,6	1,9	2210	960,8	10,5	1	
9,0	1,7	765	320,9	8,65	2	
5,8	1,7	2000	156,2	7,31	3	
7,3	1,8	227	231,9	7,30	4,2	
8,6	1,9	1380	630,5	6,62	±3,5	
9,0	2,1	989,8	449,5	6,24	-2,4,6	
10,5	2,5	183	113,7	4,94	±1,5,7	3,06
12,1	-	108,0	-111,9	3,06	0	
3,9	0,7	690	28,7	1,90	1	
5,2	0,9	1640	714	3,5	2	
5,6	1,1	3470	920	6,17	3	
6,5	1,1	3468	795	6,67	4,3	
5,8	1,1	3127	935	6,77	4,3	
6,3	1,2	3027	1024	7,00	3	

(1)	(2)	(3)	(4)	(5)	(6)
61	Pm	(147)	(Xe) $4f^5 6s^2$	-	1,06(+3)
62	Sm	150,35	(Xe) $4f^6 6s^2$	1,81	1,04(+3)
63	Eu	151,96	(Xe) $4f^7 6s^2$	1,99	1,12(+2)
64	Gd	157,25	(Xe) $4f^7 5d^1 6s^2$	1,79	1,02(+2)
65	Tb	158,924	(Xe) $4f^9 6s^2$	1,80	1,00(+1)
66	Dy	162,50	(Xe) $4f^{10} 6s^2$	1,80	0,99(+3)
67	Ho	164,930	(Xe) $4f^{11} 6s^2$	1,79	0,97(+3)
68	Er	167,26	(Xe) $4f^{12} 6s^2$	1,78	0,96(+3)
69	Tm	168,974	(Xe) $4f^{13} 6s^2$	1,77	0,95(+3)
70	Yb	173,04	(Xe) $4f^{14} 6s^2$	1,94	1,13(+3)
71	Lu	174,97	(Xe) $4f^{14} 5d^1 6s^2$	1,75	0,93(+3)
72	Hf	178,49	(Xe) $4f^{14} 5d^2 6s^2$	1,67	0,81
73	Ta	180,948	(Xe) $4f^{14} 5d^3 6s^2$	1,49	0,73(+5)
74	W	183,85	(Xe) $4f^{14} 5d^4 6s^2$	1,41	0,68
75	Re	186,2	(Xe) $4f^{14} 5d^5 6s^2$	1,37	-
76	Os	190,2	(Xe) $4f^{14} 5d^6 6s^2$	1,35	0,69
77	Ir	192,2	(Xe) $4f^{14} 5d^7 6s^2$	1,36	0,66(+4)
78	Pt	195,09	(Xe) $4f^{14} 5d^9 6s^1$	1,39	0,96(+2)
79	Au	196,967	(Xe) $4f^{14} 5d^{10} 6s^1$	1,46	1,37(+1)
80	Hg	200,59	(Xe) $4f^{14} 5d^{10} 6s^2$	1,57	1,10(+2)
81	Tl	204,37	(Xe) $4f^{14} 5d^{10} 6s^2 6p^1$	1,71	1,40(+1)
82	Pb	207,19	(Xe) $4f^{14} 5d^{10} 6s^2 6p^2$	1,75	1,20(+2)
83	Bi	208,980	(Xe) $4f^{14} 5d^{10} 6s^2 6p^3$	1,70	1,20(+2)
84	Po	(210)	(Xe) $4f^{14} 5d^{10} 6s^2 6p^4$	1,76	-

(7)	(8)	(9)	(10)	(11)	(12)	(13)
-	-	-	(1027)	-	3	
5,6	1,2	1900	1072	7,54	3,2	
5,7	-	1439	826	5,26	3,2	
6,2	1,1	3000	1312	7,89	3	
6,7	1,2	2800	1356	8,27	4,3	
6,8	-	2600	1407	8,54	3	
-	1,2	2600	1461	8,80	3	
6,1	1,2	2900	1497	9,05	3	
5,8	1,2	1727	1545	9,33	3,2	
6,2	1,1	1427	824	6,98	3,2	
6,2	1,2	3327	1652	9,84	3	
7,0	1,3	5400	2222	13,1	4	
7,9	1,5	5425	2996	16,6	5	
10,0	1,7	5930	3410	19,3	6,5,4,3,2	
7,5	1,9	5900	3180	21,0	7,6,4,2,-1	
8,7	2,2	5500	3000	22,6	8,6,4,3,2	
9,1	2,2	5300	2454	22,5	6,4,32	
9,0	2,2	4530	1769	21,4	4,2	
9,2	2,4	2970	1063	19,3	3,1	
10,4	1,9	357	-38,4	13,6	2,1	1,54
6,1	1,8	1457	303	11,85	3,1	
7,4	1,8	1725	327,4	11,4	4,2	
7,3	1,9	1560	271,3	9,8	5,3	
8,4	2,0	-	254	(9,2)	4,2	

(1)	(2)	(3)	(4)	(5)	(6)
85	At	(210)	(Xe) $4f^{14} 5d^{10} 6s^2 6p^5$	-	-
86	Rn	(222)	(Xe) $4f^{14} 5d^{10} 6s^2 6p^6$	-	-
87	Fr	(223)	(Rn) $7s^1$	-	1,76
88	Ra	(226)	(Rn) $7s^2$	-	1,40
89	Ac	(227)	(Rn) $6d^1 7s^2$	1,88	1,18
90	Th	232,038	(Rn) $6d^2 7s^2$	1,80	0,95
91	Pa	(231)	(Rn) $5f^2 6d^1 7s^2$	1,61	0,98(+4)
92	U	238,03	(Rn) $5f^3 6d^1 7s^2$	1,38	0,97(+4)
93	Np	(237)	(Rn) $5f^4 6d^1 7s^2$	1,3	0,95(+4)
94	Pu	(242)	(Rn) $5f^6 7s^2$	1,51	0,93(+4)
95	Am	(243)	(Rn) $5f^7 7s^2$	1,73	0,92(+4)
96	Cm	(247)	(Rn) $5f^7 6d^1 7s^2$	-	-
97	Bk	(247)	(Rn) $5f^9 7s^2$	-	-
98	Cf	(249)	(Rn) $5f^{10} 7s^2$	-	-
99	Es	(254)	(Rn) $5f^{11} 7s^2$	-	-
100	Fm	(253)	(Rn) $5f^{12} 7s^2$	-	-
101	Md	(256)	(Rn) $5f^{13} 7s^2$	-	-
102	No	(254)	(Rn) $5f^{14} 7s^2$	-	-
103	Lw	(257)	(Rn) $5f^{14} 6d^1 7s^2$	-	-

(7)	(8)	(9)	(10)	(11)	(12)	(13)
9,8	2,2	-	(302)	-	±1,3,5,7	
10,7	-	(-61,8)	(-71)	-	0	
4	0,7	-	(27)	-	1	
5,3	0,9	-	700	5,0	2	
6,9	1,1	-	1050	-	3	
7,0	1,3	3850	1750	11,7	4	
-	1,5	-	(1230)	15,4	5,4	
6,1	1,7	3818	1132	19,1	6,5,4,3	
-	1,3	-	637	19,5	6,5,4,3	
5,1	1,3	3235	640	-	6,5,4,3	
-	1,3	-	-	11,7	6,5,4,3	
-	-	-	-	-	3	
-	-	-	-	-	4,3	
-	-	-	-	-	3	
-	-	-	-	-	-	
7,9	-	-	-	-	-	
-	-	-	-	-	-	
-	-	-	-	-	-	
-	-	-	-	-	-	

# MỤC LỤC

	<i>Trang</i>
<i>Mở đầu</i>	
1. Đối tượng của hóa học	5
2. Mối quan hệ giữa hóa học với các ngành khoa học khác. Vai trò của hóa học trong đời sống và kĩ thuật	6
3. Các khái niệm cơ bản của hóa học. Đơn vị đo	8
Câu hỏi	10
Bài tập	11

## *Chương I*

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

1. Sự phức tạp của nguyên tử	12
2. Mô hình nguyên tử Bohr	13
3. Tính chất sóng của hạt vi mô. Cách mô tả trạng thái của hạt vi mô. Khái niệm về cơ học lượng tử	16
4. Nguyên tử có một electron (Nguyên tử dạng hidrô)	19
5. Nguyên tử có nhiều electron	32
6. Sự phân bố electron trong nguyên tử nhiều electron	38
7. Năng lượng ion hóa và ái lực với electron	41
8. Biến thiên tuần hoàn trong cấu tạo nguyên tử của các nguyên tố hóa học	43
9. Bảng hệ thống tuần hoàn các nguyên tố hóa học	47
10. Sự biến thiên tuần hoàn tính chất của các nguyên tố hóa học	49
Câu hỏi	51
Bài tập	54

## *Chương II*

### LIÊN KẾT HÓA HỌC VÀ CẤU TẠO PHÂN TỬ

#### *I - Liên kết hóa học*

1. Các đặc trưng cơ bản của liên kết hóa học	59
2. Độ âm điện của nguyên tố	60

3.	Liên kết ion	62
4.	Liên kết cộng hóa trị, phương pháp cặp electron liên kết	63
5.	Hóa trị của nguyên tố trong liên kết cộng hóa trị	65
6.	Liên kết cho nhận	66
7.	Tính định hướng của liên kết cộng hóa trị và cấu hình hình học của phân tử	67
8.	Thuyết lai hóa	68
9.	Liên kết bội. Các dạng liên kết $\sigma$ , $\pi$	71
10.	Độ phân cực của liên kết cộng hóa trị	72
11.	Phương pháp orbital phân tử.	73

## II - Cấu tạo phân tử

12.	Độ phân cực của phân tử.	92
13.	Sự phân cực hóa phân tử và ion	93

## III - Các mối liên kết yếu

14.	Liên kết hidrô	95
15.	Lực Vander Waals	96
	Câu hỏi	98
	Bài tập	100

## Chương III

### TRANG THÁI TẬP HỢP CỦA VẬT CHẤT

1.	Mở đầu	106
	<i>A - Trạng thái khí</i>	
2.	Phương trình trạng thái khí lí tưởng	107
3.	Áp suất riêng phần và nồng độ mol phần	109
4.	Thuyết động học chất khí	110
5.	Sự phân bố các phân tử khí theo năng lượng (phân bố Maxwell - Boltzmann)	111
6.	Khí thực	113
	<i>B - Trạng thái rắn.</i>	
7.	Chất tinh thể và chất vô định hình	114
8.	Tính đối xứng và các hệ tinh thể	115
9.	Mạng lưới tinh thể	116
10.	Liên kết hóa học trong tinh thể	
11.	Hiện tượng đồng hình và tính đa hình	120
	Câu hỏi	121
	Bài tập.	122
	<i>Bảng 1-2. Cấu tạo nguyên tử và một số tính chất của nguyên tố.</i>	124

*Chịu trách nhiệm xuất bản :*

Chủ tịch HĐQT kiêm Tổng Giám đốc NGÔ TRẦN ÁI  
Phó Tổng Giám đốc kiêm Tổng biên tập NGUYỄN QUÝ THAO

*Biên soạn :*

NGUYỄN ĐÌNH CHI

*Biên tập :*

NGUYỄN VĂN THOẠI

*Sửa bài :*

VŨ THỊ XUYẾN

*Trình bày bìa :*

ĐOÀN HỒNG

*Chế bản :*

PHÒNG CHẾ BẢN (NXB GIÁO DỤC)

---

## **CƠ SỞ LÝ THUYẾT HOÁ HỌC - PHẦN 1**

**Mã số: 7K110h8 - DAI**

In 1.500 bản (QĐ74), khổ 14.5 x 20.5 cm. In tại Công ty CP In Phúc Yên.

Địa chỉ: Đường Trần Phú, Thị xã Phúc Yên.

Số xuất bản: 04-2008/CXB/245-1999/GD.

In xong và nộp lưu chiểu tháng 11 năm 2008.