

LÊ MẬU QUYỀN

GIÁO TRÌNH
BÀI TẬP HOÁ HỌC ĐẠI CƯƠNG
(Hệ Cao Đẳng)

NXB GIÁO DỤC

Phần I

TÓM TẮT LÝ THUYẾT - BÀI TẬP

Chương 1

CẤU TẠO NGUYÊN TỬ

TÓM TẮT LÝ THUYẾT

Bốn số lượng tử đặc trưng cho trạng thái của electron trong nguyên tử là số lượng tử chính n , số lượng tử phụ l , số lượng tử từ m và số lượng tử spin m_s .

Số lượng tử chính n

Số lượng tử chính n nhận các giá trị nguyên dương. Mỗi giá trị của n đặc trưng cho một lớp electron trong nguyên tử:

n	:	1	2	3	4	5	...
-----	---	---	---	---	---	---	-----

Kí hiệu lớp electron :	K	L	M	N	O	...
------------------------	---	---	---	---	---	-----

Giá trị của n càng lớn, electron càng xa hạt nhân.

Số lượng tử phụ l

Mỗi lớp electron từ $n = 2$ trở lên lại gồm nhiều phân lớp. Mỗi phân lớp electron được đặc trưng bằng một giá trị của số lượng tử phụ l . Số lượng tử phụ l nhận các giá trị nguyên dương từ 0 đến $n - 1$, nghĩa là ở lớp thứ n có n phân lớp:

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

Kí hiệu phân lớp electron :	s	p	d	f	...
-----------------------------	---	---	---	---	-----

Để chỉ phân lớp thuộc lớp electron nào, người ta ghi giá trị của n chỉ lớp đó trước kí hiệu phân lớp. Ví dụ, kí hiệu $3s$ chỉ rằng đây là phân lớp $l = 0$ của lớp $n = 3$ (lớp M). Kí hiệu $2p$ ứng với phân lớp $l = 1$ của lớp $n = 2$ (lớp L).

Số lượng tử phụ l còn cho biết hình dạng của obitan nguyên tử. Obitan s có dạng hình cầu. Obitan p gồm hai hình cầu tiếp xúc với nhau ở hạt nhân. Obitan d là hình hoa bốn cánh nổi.

Hai số lượng tử n và l xác định năng lượng của electron trong nguyên tử. Ví dụ, năng lượng của các electron ở $1s < \text{năng lượng của các electron ở } 2s < \text{năng lượng của các electron ở } 2p \dots$

Số lượng tử từ m

Số lượng tử từ m xác định hướng của obitan nguyên tử trong không gian xung quanh hạt nhân.

Ứng với một giá trị của l có $2l + 1$ giá trị của m . Đó là những số nguyên âm và dương kể cả số 0 từ $-l \Rightarrow 0 \Rightarrow +l$.

Khi $l = 0$ có một giá trị của $m = 0$

Khi $l = 1$ có ba giá trị của $m = -1, 0, +1$.

Khi $l = 2$ có năm giá trị của $m = -2, -1, 0, +1, +2$.

Khi $l = 3$ có bảy giá trị của $m = -3, -2, -1, 0, +1, +2, +3$.

Số lượng tử từ spin m_s

Số lượng tử m_s đặc trưng cho sự chuyển động riêng của electron.

Chỉ có hai giá trị của m_s là $m_s = +\frac{1}{2}$ và $m_s = -\frac{1}{2}$.

Obitan nguyên tử (AO)

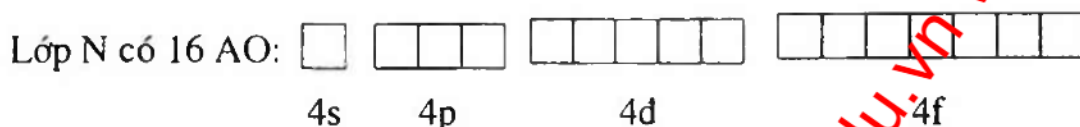
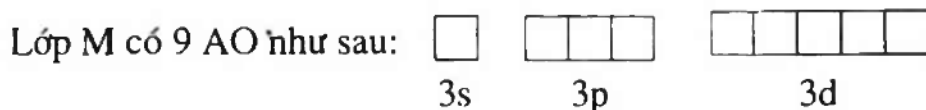
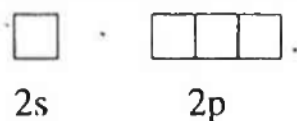
Mỗi AO được đặc trưng bằng ba giá trị của ba số lượng tử n, l và m . Ví dụ, $n = 1 \Rightarrow l = 0 \Rightarrow m = 0$ ứng với AO $1s$.

$n = 2 \Rightarrow l = 1 \Rightarrow m = 0$ ứng với AO $2p_z$.

Từ đó suy ra số AO ở mỗi lớp electron như sau:

Lớp K có một AO, đó là AO $1s$. Người ta thường kí hiệu mỗi AO bằng một ô vuông $\square$ và gọi là ô lượng tử.

Lớp L có một AO 2s và ba AO 2p là $2p_x$, $2p_y$ và $2p_z$. Năng lượng của AO 2s thấp hơn năng lượng của các AO 2p. Ba AO 2p cùng có năng lượng như nhau, nên người ta thường viết ba ô lượng tử liền nhau và viết cách AO 2s:



Sự phân bố các electron trong nguyên tử ở trạng thái cơ bản

Sự phân bố các electron trong một nguyên tử ở trạng thái cơ bản tuân theo nguyên lý loại trừ Pauli, quy tắc Kleckopxki và quy tắc Hund.

Nguyên lý loại trừ Pauli (đúng cho cả nguyên tử ở trạng thái kích thích).

Trong một nguyên tử không thể tồn tại hai electron có cùng giá trị của bốn số lượng tử n , l , m và m_s . Ví dụ ở lớp K ta có:

$n = 1 \Rightarrow l = 0 \Rightarrow m = 0$ ứng với AO 1s chỉ có tối đa 2 electron:

electron thứ nhất ứng với $n = 1, l = 0, m = 0$ và $m_s = +\frac{1}{2}$,

electron thứ hai ứng với $n = 1, l = 0, m = 0$ và $m_s = -\frac{1}{2}$.

Hai electron trên một AO được biểu diễn bằng hai mũi tên ngược chiều nhau ứng với hai giá trị khác nhau của m_s trong một ô lượng tử: $\uparrow\downarrow$. Hai electron như thế được gọi là hai electron đã *ghép đôi*. Nếu trong ô lượng tử chỉ có một electron thì electron đó được gọi là electron độc thân: $\uparrow$ hoặc $\downarrow$.

Dựa vào nguyên lý Pauli có thể tính được số electron tối đa như sau:

Mỗi AO chỉ có tối đa 2 electron với các giá trị m_s khác dấu

Phân lớp s có tối đa 2 electron: $\uparrow\downarrow$

Phân lớp p có tối đa 6 electron: $\uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow$

Phân lớp d có tối đa 10 electron: $\uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow$

Phân lớp f có tối đa 14 electron: $\uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow$

c. $n = 3, \quad l = 2, \quad m = -1.$

d. $n = 3, \quad l = 0, \quad m = 0.$

e. $n = 2, \quad l = 2, \quad m = -1.$

Đ.S. a, c, d.

1.2. Những kí hiệu nào dưới đây không thể có trong nguyên tử?

a. $1p$; b. $2d$; c. $3s$; d. $4f$; e. $5d$.

Đ.S. $1p$ và $2d$

1.3. Các kí hiệu $3s$, $4f$, $5d$ chỉ lớp và phân lớp electron nào trong nguyên tử?

Đ.S. $3s$: lớp $n = 3$ (lớp M) và phân lớp $l = 0$.

$4f$: lớp $n = 4$ (lớp N) và phân lớp $l = 3$.

$5d$: lớp $n = 5$ (lớp O) và phân lớp $l = 2$.

1.4. Các AO $4s$, $4p_x$, $4p_y$, $4p_z$, $4d_{xy}$, $4d_{yz}$, $4d_{zx}$, $4d_{x^2-y^2}$, $4d_z$ ứng với các giá trị nào của các số lượng tử?

Đ.S. $4s$: $n = 4, \quad l = 0, \quad m = 0$

$4p_x$: $n = 4, \quad l = 1, \quad m = 1$

$4p_y$: $n = 4, \quad l = 1, \quad m = -1$

$4p_z$: $n = 4, \quad l = 1, \quad m = 0$

$4d_{xy}$: $n = 4, \quad l = 2, \quad m = -2$

$4d_{yz}$: $n = 4, \quad l = 2, \quad m = -1$

$4d_{zx}$: $n = 4, \quad l = 2, \quad m = 1$

$4d_{x^2-y^2}$: $n = 4, \quad l = 2, \quad m = 2$

$4d_z$: $n = 4, \quad l = 2, \quad m = 0$

1.5. Hãy nêu sự khác nhau giữa hai AO sau:

a. $2p_x$ và $2p_y$

b. $2p_z$ và $3p_z$

Bài giải:

a. AO $2p_x$ và $2p_y$ khác nhau về sự định hướng xung quanh hạt nhân nguyên tử, AO $2p_x$ định hướng dọc theo trục x , AO $2p_y$ định hướng

đọc theo trục y của tọa độ Descartes. Sự định hướng này được xác định bởi số lượng tử từ m . Khi $m = +1$ sự định hướng của $2p$ dọc theo trục x, khi $m = -1$ sự định hướng dọc theo trục y.

b. AO $2p_z$ và $3p_z$ khác nhau ở lớp electron. AO $2p_z$ ở lớp $n = 2$ (lớp K), còn $3p_z$ ở lớp $n = 3$ (lớp M).

1.6. Trong số các cấu hình electron sau, những cấu hình nào tuân theo nguyên lí loại trừ Pauli, cấu hình nào ở trạng thái cơ bản?

- a. $1s^3 2s^2 2p^6$; b. $1s^2 2s^2 2p^5$
c. $1s^2 2s^2 2p^4 3s^1 3p^1$; d. $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{14} 4s^2$

Đ.S. b và c. Ở trạng thái cơ bản: b.

1.7. Trong số các cấu hình giả thiết sau của nguyên tử niken ($Z = 28$):

- a. $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4d^{10}$;
b. $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^8 3d^6 4s^2$;
c. $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^8 4s^2$;
d. $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^6 4s^2 4p^2$.

1. Cấu hình nào không tuân theo nguyên lí Pauli?

2. Cấu hình nào ở trạng thái cơ bản? Hãy viết cấu hình đó dưới dạng ô lượng tử và cho biết số electron độc thân trong cấu hình đã viết.

3. Cấu hình nào không có electron độc thân?

4. Hãy sắp xếp các cấu hình theo trật tự năng lượng tăng dần.

Đ.S. 1. b ; 2. c:



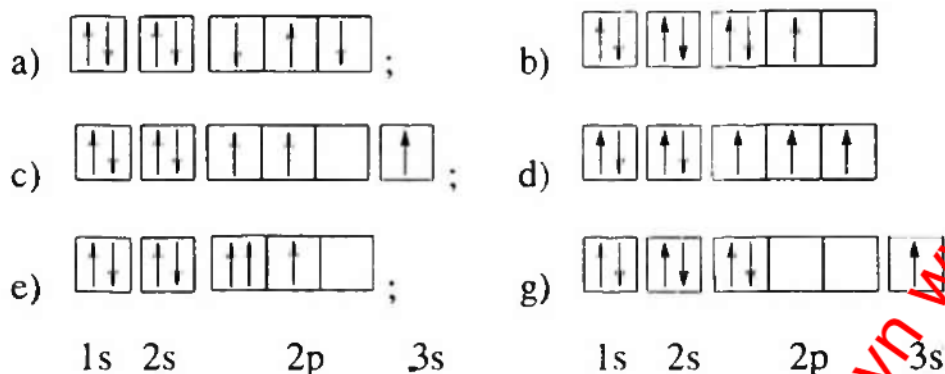
có 2 electron độc thân; 3. a; 4. $c < a < d$.

1.8. Trong số các cấu hình electron sau ở trạng thái cơ bản, những cấu hình nào không tuân theo quy tắc Hund?

- a) ; b) ;
c) ; d) ;
e) ; g) ;

Đ.S. a và c.

1.9. Trong các cấu hình electron sau của nitơ ($Z = 7$), cấu hình nào ở trạng thái cơ bản, ở trạng thái kích thích và cấu hình nào là không thể có?



Đ.S. d. Trạng thái cơ bản; a, b, c, g: Các trạng thái kích thích.

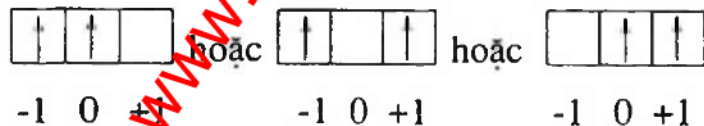
e. Không thể có vì trái với nguyên lí Pauli (2 electron trong một ô lượng tử không thể có cùng giá trị của m_l).

1.10. Một nguyên tử ở trạng thái cơ bản có phân lớp electron ngoài cùng là $4p^2$. Hãy viết cấu hình electron của nguyên tử đó dưới dạng chữ và dạng ô lượng tử. Hai electron $4p^2$ có thể ứng với những giá trị nào của bốn số lượng tử?

D.S.



- $4p^2$ ứng với $n = 4, l = 1$, hai electron đều có cùng giá trị của m_s là $+\frac{1}{2}$ hoặc $-\frac{1}{2}$. Các số lượng tử m ứng với hai electron p có thể là:



1.11. Mỗi tổ hợp các số lượng tử sau ứng với orbital nguyên tử nào?

- a. $n = 3, \quad l = 0, \quad m = 0.$
b. $n = 4, \quad l = 1, \quad m = 0.$
c. $n = 5, \quad l = 0, \quad m = 0.$

2. S. a. $3s$; b. $4p_z$; c. $5s$.

Chương 2

BẢNG TUẦN HOÀN CÁC NGUYÊN TỐ HÓA HỌC

TÓM TẮT LÝ THUYẾT

Chu kì

Ở trạng thái cơ bản, nguyên tử của các nguyên tố trong cùng một chu kì đều có số lớp *electron* bằng nhau và bằng số thứ tự chu kì chứa chúng.

Nhóm

Nguyên tử của các nguyên tố trong cùng một nhóm có cấu hình *electron* hóa trị tương tự nhau.

Nhóm A

- Sự điền *electron* vào nguyên tử của các nguyên tố nhóm A theo quy tắc Kleckopxki đều kết thúc ở ns hoặc np (n là lớp *electron* ngoài cùng).
- Có thể nhận biết một nguyên tố ở các nhóm từ IIIA đến VIIIA dựa vào số *electron* ở lớp ngoài cùng của nguyên tử nguyên tố đó: số *electron* ở lớp ngoài cùng bằng số thứ tự nhóm chứa nó.
- Có thể nhận biết một nguyên tố ở nhóm A nào dựa vào sự điền *electron* cuối cùng vào nguyên tử xảy ra ở phân lớp:

ns : IA ; ns^2 : IIA; np^1 : IIIA; np^2 : IVA;
 np^3 : VA; np^4 : VIA; np^5 : VIIA; np^6 : VIIIA;

Nhóm B

- Sự điền electron cuối cùng vào nguyên tử của các nguyên tố nhóm B đều kết thúc ở $(n-1)d$.

- Số electron ở lớp ngoài cùng của các nguyên tử đều ít hơn ba.

- Có thể nhận biết một nguyên tố ở nhóm B nào dựa vào sự điền electron vào nguyên tử theo quy tắc Kleckopxki kết thúc ở phân lớp:

$(n-1)d^1$: IIIB ; $(n-1)d^2$: IVB ; $(n-1)d^3$: VB ; $(n-1)d^4$: VIB

$(n-1)d^5$: VIIB ; $(n-1)d^{6,7,8}$: VIIIB ; $(n-1)d^9$: IB ; $(n-1)d^{10}$: IIB

Bảng thực nghiệm người ta thấy ở một số trường hợp có 1 electron ở ns^2 chuyển vào $(n-1)d$.

Đó là Cr(Z = 24); Cu(Z = 29); Nb(Z = 41); Mo(Z=42); Ru(Z=44); Rh(Z=45); (Ag(Z=47); Pt(Z=78); Au(Z=79). Riêng ở Pd(Z=46) cả 2 electron ở ns^2 chuyển vào $(n-1)d$.

Nguyên tố s, p, d và f

Nguyên tố s (p, d, f) là nguyên tố mà sự điền electron cuối cùng theo quy tắc Kleckopxki xảy ra ở phân lớp s (p, d, f).

Các nguyên tố d và f còn được gọi là các nguyên tố chuyển tiếp d và f.

Các nguyên tố d đều nằm ở các nhóm B không có mặt ở các nhóm A.

Các nguyên tố f thường để riêng ở cuối bảng tuần hoàn, không xếp vào nhóm nào.

Bán kính nguyên tử và ion

- Bán kính nguyên tử cộng hóa trị bằng nửa khoảng cách giữa hai hạt nhân của hai nguyên tử giống nhau liên kết đơn cộng hóa trị với nhau ở 25°C.

- Bán kính nguyên tử kim loại bằng nửa khoảng cách giữa hai hạt nhân của hai nguyên tử kim loại gần nhau nhất trong tinh thể kim loại.

- Bán kính ion được xác định trong tinh thể ion. Khoảng cách giữa hai tâm ion dương và ion âm gần nhau nhất trong tinh thể ion bằng tổng số bán kính của ion dương và ion âm đó.

Từ trái sang phải trong một chu kì, bán kính nguyên tử nói chung giảm dần.