

ĐẠI HỌC ĐÀ NẴNG
TRƯỜNG ĐẠI HỌC SƯ PHẠM

Lê Tự Hải

Giáo trình
HÓA LƯỢNG TỬ



NHÀ XUẤT BẢN ĐÀ NẴNG

MỞ ĐẦU

Hóa lượng tử là một trong những lý thuyết cơ bản và không thể thiếu được trong mọi lĩnh vực của hóa học. Hóa lượng tử ứng dụng những kết quả của cơ học lượng tử để giải quyết các vấn đề của hóa học như cấu tạo nguyên tử, cấu tạo phân tử. Từ lý thuyết của cơ học lượng tử, các nhà Hóa học đã xây dựng cơ sở lý thuyết của Hóa lượng tử và những lý thuyết của Hóa lượng tử đã được ứng dụng để giải thích đúng đắn các quy luật của hóa học, góp phần giải quyết các vấn đề phức tạp trong hóa học vô cơ, hóa học hữu cơ, hóa học phân tích,...

Trong những năm gần đây, nhờ sự phát triển mạnh của tin học, Hóa lượng tử không còn mang tính lý thuyết thuần túy mà đã có những ứng dụng quan trọng trong các lĩnh vực của hóa học, giúp các nhà hóa học thực nghiệm làm sáng tỏ nhiều cơ chế của phản ứng hóa học, tiên đoán các tính chất hóa lý, sinh học của các chất phức tạp, dự đoán các hướng phản ứng để từ đó xây dựng một hướng đi đúng và hiệu quả trong thực nghiệm hóa học.

Với tầm quan trọng như vậy, Hóa lượng tử là một học phần bắt buộc đối với sinh viên ngành Hóa (Cử nhân Sư phạm và Cử nhân Khoa học). Do vậy, chúng tôi biên soạn giáo trình Hóa lượng tử để giúp cho sinh viên tham khảo trong quá trình học tập học phần này.

Mặc dù đã có nhiều cố gắng trong biên soạn, nhưng giáo trình chắc chắn không tránh khỏi những thiếu sót, rất mong nhận được những ý kiến đóng góp của các bạn sinh viên, các thầy cô giáo để giáo trình được hoàn thiện hơn.

MỤC LỤC

Mở đầu	3
Chương 1. Một số mô hình nguyên tử trước cơ học lượng tử....	9
1.1. Khái niệm nguyên tử.....	9
1.2. Mô hình nguyên tử của Thomson	12
1.3. Mô hình nguyên tử của Rutherford.....	13
1.4. Phổ nguyên tử	14
1.5. Thuyết lượng tử Planck	16
1.6. Mô hình nguyên tử của Bohr	19
1.7. Mô hình nguyên tử của Sommerfeld.....	24
Câu hỏi và bài tập.....	27
Tài liệu tham khảo chương 1.....	28
Chương 2. Đại cương về cơ học lượng tử.....	29
2.1. Tính chất sóng - hạt của ánh sáng.....	29
2.2. Tính chất sóng - hạt của hạt vật chất.....	32
2.3. Nguyên lý bất định Heizenberg	33
2.4. Sự khác nhau giữa cơ học cổ điển và cơ học lượng tử	36
Câu hỏi và bài tập.....	37
Tài liệu tham khảo chương 2.....	38
Chương 3. Toán tử và hệ hàm.....	39
3.1. Toán tử	39
3.2. Toán tử tuyến tính	40
3.3. Một số khái niệm về các hệ hàm	43
3.4. Toán tử tuyến tính tự liên hợp (toán tử Hermite)	45
Câu hỏi và bài tập.....	47
Tài liệu tham khảo chương 3.....	49
Chương 4. Hệ tiên đề của cơ học lượng tử	50
4.1. Tiên đề về hàm sóng (tiên đề 1). Nguyên lý chồng chất các trạng thái.....	50

4.2. Tiên đề về toán tử (tiên đề 2).....	51
4.3. Tiên đề về trị riêng và đại lượng đo được	53
4.4. Điều kiện để hai đại lượng vật lý có giá trị xác định đồng thời trong một trạng thái.....	54
4.5. Tiên đề về phương trình Schrodinger - Trạng thái dừng.	56
4.6. Một số bài toán ứng dụng	58
Câu hỏi và bài tập	69
Tài liệu tham khảo chương 4	72
Chương 5. Trường xuyên tâm và nguyên tử Hidro	73
5.1. Trường xuyên tâm và hệ tọa độ cầu.....	73
5.2. Bài toán nguyên tử hidro và ion giống hidro	75
Câu hỏi và bài tập	102
Tài liệu tham khảo chương 5	105
Chương 6. Nguyên tử nhiều electron	106
6.1. Phương trình Schrodinger của nguyên tử nhiều electron	106
6.2. Hệ các hạt độc lập và đồng nhất - Nguyên lý loại trừ Pauli.....	106
6.3. Phương pháp trường tự hợp Hartree giải bài toán nguyên tử nhiều electron	110
6.4. Phương pháp biến phân.....	112
6.5. Orbital nguyên tử nhiều electron, orbital Slater và Gauss	117
6.6. Các mức năng lượng của nguyên tử nhiều electron. Quy tắc Klechkovski. Cấu hình electron của nguyên tử.....	119
6.7. Sự biến thiên tuần hoàn một số tính chất của các nguyên tố hoá học.....	124
6.8. Độ âm điện	128
6.9. Số hạng nguyên tử	131
6.10. Quang phổ của nguyên tử nhiều electron	140
Câu hỏi và bài tập	146
Tài liệu tham khảo chương 6	147

Chương 7. Khái quát về sự khảo sát phân tử bằng cơ học lượng tử	149
7.1. Quá trình phát triển các thuyết về cấu tạo phân tử và liên kết hoá học	149
7.2. Lý thuyết cơ học lượng tử về liên kết hoá học	153
7.3. Hàm sóng và năng lượng electron của phân tử	155
7.4. Phép tính biến phân.....	155
Chương 8. Thuyết liên kết hoá trị (VB)	159
8.1. Phương pháp VB giải bài toán phân tử H_2	159
8.2. Phương pháp VB và phân tử nhiều nguyên tử.....	166
8.3. Sự lai hoá các orbital nguyên tử.....	170
8.4. Mô hình sự đẩy cặp electron vỏ hóa trị (VSEPR) và hình học phân tử.....	180
8.5. Thuyết VB với sự cộng hưởng	184
8.6. Công thức vạch hoá trị. Thành công và hạn chế của thuyết VB.....	186
Câu hỏi và bài tập.....	187
Tài liệu tham khảo chương 7, 8.....	188
Chương 9. Thuyết orbital phân tử (MO)	190
9.1. Những luận điểm cơ bản của thuyết MO	190
9.2. Giải bài toán ion phân tử H_2^+ bằng phương pháp MO - LCAO.....	191
9.3. Sự tổ hợp các AO tạo các MO	198
9.4. Thuyết MO và phân tử hai nguyên tử đồng hạch.....	200
9.5. Phổ hấp thụ phân tử, quang phổ electron và năng lượng các MO.....	204
9.6. Phân tử hai nguyên tử dị hạch AB.....	206
9.7. Thuyết MO và liên kết cho nhận.....	209
9.8. Thuyết MO và phân tử nhiều nguyên tử	209
9.9. Chuyển MO không định cư thành MO định cư	215
9.10. Thuyết MO và các mô hình khác nhau về liên kết	217

Câu hỏi và bài tập	220
Tài liệu tham khảo chương 9	222
Chương 10. Phương pháp MO - Hückel và hệ electron π không định cư	224
10.1. Sự gần đúng electron π	224
10.2. áp dụng phương pháp MO - Huckel khảo sát các phân tử liên hợp	226
10.3. áp dụng phương pháp MO-Huckel cho phân tử liên hợp mạch vòng.....	232
10.4. Phương pháp MO-Huckel với các hợp chất dị nguyên tố.....	239
10.5. Giảm đồ phân tử π	240
10.6. Quy tắc Huckel về tính thơm.....	244
Câu hỏi và bài tập	245
Tài liệu tham khảo chương 10	247
Chương 11. Liên kết trong phức chất	248
11.1. Khái niệm về phức chất	248
11.2. ứng dụng của phức chất	249
11.3. Các thuyết về liên kết trong phức chất.....	250
11.4. Thuyết VB	251
11.5. Thuyết trường phối tử	254
11.6. Định lý Jahn - Teller.....	262
11.7. Phương pháp MO - LCAO cho phức chất.....	264
Câu hỏi và bài tập	275
Tài liệu tham khảo chương 11	277
Tài liệu tham khảo	278