

[www.mientayvn.com](http://www.mientayvn.com)

Dịch tiếng anh chuyên ngành khoa học tự nhiên và kỹ thuật.

Dịch các bài giảng trong chương trình học liệu mở của học viện MIT, Yale.

Tìm và dịch tài liệu phục vụ cho sinh viên làm seminar, luận văn.

Tại sao mọi thứ đều miễn phí và chuyên nghiệp ???

Trao i tr c tuy n t i:

[www.mientayvn.com/chat\\_box\\_hoa.html](http://www.mientayvn.com/chat_box_hoa.html)

# HÓA HỌC ĐẠI CƯƠNG

GV: Lê Minh Thành

1/19/2011

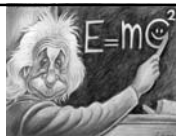
1

## Chương 6 Năng lượng & Phản ứng hóa học

1/19/2011

2

### 6.1. Các nguyên lý cơ bản



- Năng lượng là khả năng làm thay đổi trạng thái hoặc thực hiện công năng lên một hệ vật chất.
- Năng lượng được chia thành 2 dạng ....
- Câu hỏi: Nhiệt năng, hóa năng, cơ năng, điện năng, năng lượng tĩnh điện, âm thanh...thuộc loại năng lượng nào?

1/19/2011

3

#### 1a. Các dạng năng lượng

##### Động năng

###### Cơ năng

Năng lượng của vật vì mô chuyển động

###### Nhiệt năng

Chuyển động vi mô của ngử, phử, ion

###### Điện năng

Chuyển động của electron trong vật dẫn

###### Bức xạ

Bức xạ điện từ truyền trong không gian

##### Thế năng

###### Thế năng hấp dẫn

Do tương tác hấp dẫn

###### Năng lượng tĩnh điện

Do tương tác tĩnh điện

###### Hóa năng

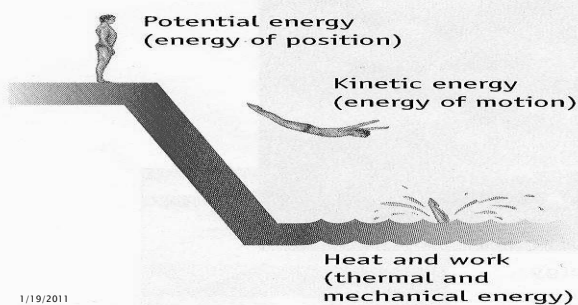
Lực hút của electron và hạt nhân trong nguyên tử

1/19/2011

4

#### 1b. Định luật về bảo toàn năng lượng

- Nội dung:....
- Ví dụ về sự biến đổi + bảo toàn n.lượng:



1/19/2011

#### 1c. Nhiệt độ và nhiệt lượng

- Nhiệt lượng (nhiệt), là một dạng năng lượng dự trữ trong vật chất nhờ vào chuyển động nhiệt hỗn loạn của các hạt cấu tạo nên vật chất.
- Nhiệt độ: là tính chất vật lý của vật chất.



1/19/2011

dreamstime

### 1d. Hệ và môi trường xung quanh

- Khái niệm hệ:...
- Khái niệm môi trường xung quanh: ....

#### 1e. Hướng truyền nhiệt

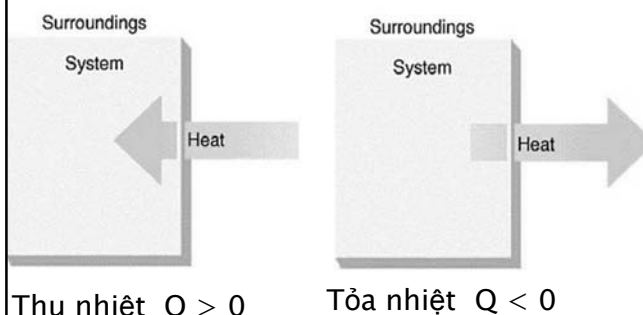
- Nhiệt luôn được truyền từ vật nóng hơn sang vật lạnh hơn.

- Quá trình thu nhiệt  $Q > 0$ ,
- Quá trình tỏa nhiệt  $Q < 0$



1/19/2011

- VD: Hãy xác định dấu của nhiệt lượng với mỗi quá trình sau:



1/19/2011

8

### 1f. Đơn vị năng lượng

**J, cal, Cal, eV, J/mol, cal/mol...**

- Bảng chuyển đổi đơn vị năng lượng:

1 J	=	1 kg.m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup>
1 J	=	0,23901 cal
1 cal	=	4,184 J
1 Cal	=	1000 cal
1 BTU	=	1054,35 J



1/19/2011

9

### 6.2. Nhiệt dung riêng



- Khái niệm: là lượng nhiệt cần cung cấp để làm tăng nhiệt độ của 1 gam chất lên 1K

- Biểu thức  $C = \frac{Q}{m \cdot \Delta T}$  (6.1)

- Đơn vị đo: J/g.K, đôi khi J/K....

- Chú ý: +  $\Delta T$  và  $Q$  là cùng dấu  
+ Nhiệt dung mol...

- Dùng khi nung nóng, làm lạnh

1/19/2011

- Khi vật được đốt nóng  
→  $\Delta T > 0$  →  $Q > 0$ ; qt thu nhiệt
- Khi vật được làm lạnh  
→  $\Delta T < 0$  →  $Q < 0$ ; qt tỏa nhiệt

#### Định luật về sự truyền nhiệt

- Tổng nhiệt trao đổi trong hệ bằng không.

$$Q_1 + Q_2 + \dots = 0 \quad (6.3)$$

1/19/2011

11

### 6.3. Năng lượng và sự biến đổi trạng thái

- Quá trình biến đổi trạng thái:

$$\text{rắn} \leftrightarrow \text{lỏng} \leftrightarrow \text{hơi}; \quad T = \text{const}$$

- (ứng với các tên gọi là quá trình bay hơi; ngưng tụ; đông đặc; nóng chảy...)

- Nhiệt biến đổi trạng thái: nhiệt bay hơi; nhiệt nóng chảy,...

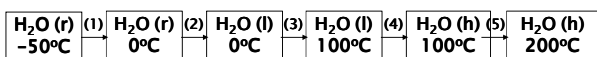
- Ví dụ:  $\Delta H_{\text{bhoi}} [\text{H}_2\text{O}] = 2256 \text{ J/g}$

$$\Delta H_{\text{nchay}} [\text{H}_2\text{O}] = 333 \text{ J/g}$$

1/19/2011

12

**VD:** Tính nhiệt lượng cần thiết để đưa 500 g nước từ  $-50^{\circ}\text{C}$  đến  $200^{\circ}\text{C}$ ? Cho  $\Delta H_{nc}$  và  $\Delta H_{bh}$  (J/g), C (J/g.K).



$$Q_1 = C.m. \Delta T$$

$$Q_2 = m. \Delta H_{nc}$$

$$Q_3 = C.m. \Delta T$$

$$Q_4 = m. \Delta H_{bh}$$

$$Q_5 = C.m. \Delta T$$

$$Q_{\text{tổng}} = Q_1 + Q_2 + Q_3 + Q_4 + Q_5$$

1/19/2011

#### 6.4. Nguyên lý I của nhiệt động học

- Khái niệm nhiệt động học: là ngành vật lý nghiên cứu dạng nhiệt của chuyển động vật chất và những qui luật của chuyển động đó.
- Nhiệt hóa học là một phần của nhiệt động học nhằm mục đích khảo sát sự trao đổi năng lượng đi kèm theo những biến đổi vật lý, hóa học của vật chất.

14

- Nội dung nguyên lý 1, chính là định luật bảo toàn năng lượng, khẳng định rằng năng lượng luôn được bảo toàn.

- Biểu thức :

$$\Delta U = Q + W \quad (6.4)$$

- Trong trường hợp giãn nở đẳng áp, công W được tính theo:

$$W = -P.\Delta V \quad (6.5)$$

1/19/2011

15

- Bảng quy ước dấu của Q và W:

	Quy ước dấu	Ảnh hưởng tới hệ
Hệ thu nhiệt	$Q > 0 (+)$	U tăng
Hệ tỏa nhiệt	$Q < 0 (-)$	U giảm
Hệ nhận công	$W > 0 (+)$	U tăng
Hệ sinh công	$W < 0 (-)$	U giảm



1/19/2011

#### a. Entanpi (H) và biến thiên entanpi ( $\Delta H$ )

- Khái niệm entanpi (H): năng lượng của một hệ nhiệt động mà trao đổi nhiệt và công với môi trường,  $H = U + pV$

- Biểu thức biến thiên entanpi:

$$\Delta H = H_{\text{cuối}} - H_{\text{đầu}}$$

$$\Delta H = \Delta U - W$$

- Đơn vị đo:...



1/19/2011

- Sự khác nhau giữa entanpi (H) và nội năng (U).....
- Liên hệ giữa biến thiên entanpi ( $\Delta H$ ), biến thiên nội năng ( $\Delta U$ ) và nhiệt lượng (Q) trong từng quá trình:

$$P = \text{const} \text{ thì } Q_p = \Delta H$$

$$V = \text{const} \text{ thì } Q_v = \Delta U$$

- Quy ước về dấu của  $\Delta U$  và  $\Delta H$ ...



1/19/2011

## b. Hàm trạng thái

- Khái niệm hàm trạng thái: là một đặc tính mà sự biến thiên giá trị của nó trong bất cứ quá trình nào cũng chỉ phụ thuộc vào giá trị đầu và giá trị cuối mà không phụ thuộc vào con đường chuyển biến.
- Một số hàm trạng thái: Nội năng (U), năng lượng tự do (F), thế nhiệt động (Z hay G), entanpi (H), entropi (S)..... là những **hàm trạng thái**

1/19/2011

19

## 6.5. Biến thiên entanpi của p/ư hóa học

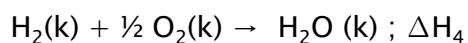
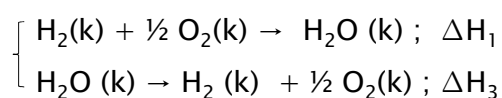
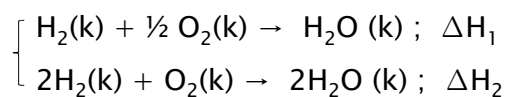
### • Một số chú ý khi tính $\Delta H$ :...tr.279

- Biến thiên entanpi của phản ứng phụ thuộc vào số mol chất tham gia, chất tạo thành và trạng thái tồn tại (r, l, k) của các chất.
- Phản ứng tỏa nhiệt thì giá trị  $\Delta H$  mang dấu âm, phản ứng thu nhiệt giá trị  $\Delta H$  mang dấu dương.
- Đại lượng  $\Delta H$  có giá trị tương đương nhưng ngược dấu trong phản ứng phân hủy và tạo thành.

1/19/2011

20

- VD: chỉ ra liên hệ của  $\Delta H$  trong t/h:



Với  $\Delta H_4$  tạo ra 9g nước

1/19/2011

21

## 6.6. Đo nhiệt lượng trong PTN

### a. Khi $P = \text{constant}$ , đo $\Delta H$

- Dụng cụ: nhiệt kế cốc café,...
- Quy trình:
- Cách tính:

$$Q_{\text{pư}} + Q_{\text{dd}} = 0$$

$$Q_{\text{dd}} = C.m.\Delta T$$

1/19/2011

22

**VD:** Cho 0,5g Mg vào 1 nhiệt lượng kế cốc café, thêm 100ml dd HCl 1M. Nhiệt độ dd tăng từ 22,2°C đến 44,8°C. Tính  $\Delta H$  của phản ứng trên 1 mol Mg? ( $C_{\text{dd}} = 4,2\text{J/g.K}$  và  $D_{\text{ddHCl}} = 1\text{ g/ml}$ )

m (g) dd	(1)	$Q_{\text{dd}}$	(2)	$Q_{\text{pư}}$	(3)	$\Delta H_{\text{pư}}$
22,2°C ÷ 44,8°C		(J)		(J)		(J/mol Mg)

$$Q_{\text{dd}} = C.m.\Delta T$$

$$Q_{\text{pư}} + Q_{\text{dd}} = 0$$

$$\Rightarrow \Delta H = Q_{\text{pư}} : n_{\text{Mg}}$$



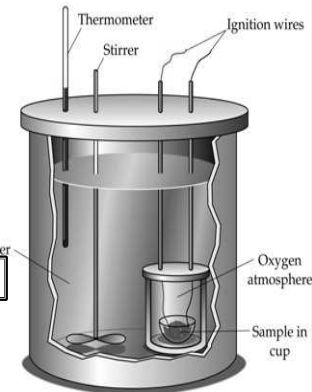
1/19/2011

### b. Khi $V = \text{constant}$ , đo $\Delta U$

- Dụng cụ: “bom” nhiệt kế,...
- Quy trình:
- Cách tính:

$$Q_{\text{pư}} + Q_{\text{nước}} + Q_{\text{bom}} = 0$$

$$Q_{\text{nước}} = C.m.\Delta T$$



1/19/2011

24

**VD:** Đốt cháy 1 g octan trong nhiệt lượng kế (V không đổi). Dụng cụ được đặt vào 1 bình chứa 1,2 kg nước. Nhiệt độ của nước và bom tăng từ 25°C tới 33,2°C.  $C_{\text{bom}} = 837 \text{ J/K}$ . Tính nhiệt đốt cháy trên 1 gam octan?

$$Q_{\text{nước}} = C \cdot m \cdot \Delta T$$

$$Q_{\text{bom}} = C_{\text{bom}} \cdot \Delta T$$

$$\Rightarrow Q_{\text{pư}} = -(Q_{\text{nước}} + Q_{\text{bom}})$$



1/19/2011

## 6.7. Định luật Hess

- Nội dung: Hiệu ứng nhiệt của phản ứng hóa học phụ thuộc vào trạng thái của các chất đầu và của các sản phẩm cuối, chứ không phụ thuộc vào các giai đoạn trung gian của phản ứng.
- Hệ quả: Nếu một phản ứng hóa học là tổng của hai hay nhiều phản ứng khác, thì  $\Delta H$  của phản ứng tổng được tính bằng tổng các giá trị  $\Delta H$  của tất cả các phản ứng cộng lại.



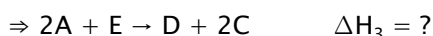
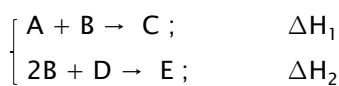
G.I. Hess nhà bác học Nga (1802-1850)

1/19/2011

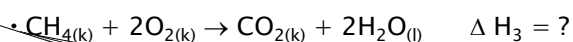
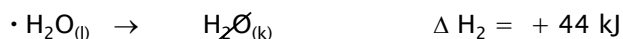
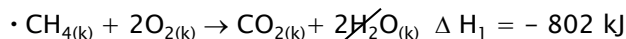
26

- Cách áp dụng:

+ pp đại số:



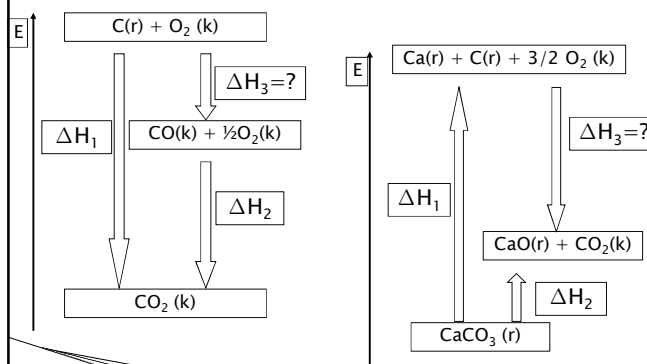
Ví dụ:



1/19/2011

27

+ pp đồ thị (biểu đồ mức năng lượng)



1/19/2011

28

## 6.7. Tính nhiệt của p/ư hóa học

### a. Entanpi sinh tiêu chuẩn

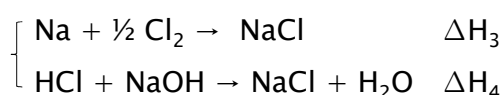
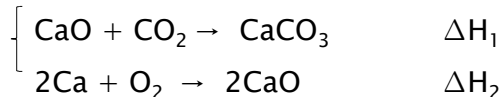
- Entanpi sinh:...
- Entanpi sinh tiêu chuẩn: Entanpi sinh tiêu chuẩn của một chất là biến thiên entanpi của phản ứng hình thành 1 mol hợp chất từ các nguyên tố ban đầu ở trạng thái chuẩn.
- Trạng thái chuẩn (đk chuẩn): là trạng thái tại đó dạng tồn tại của vật chất bền vững nhất, ở áp suất 1 atm và nhiệt độ 25°C (298K)



1/19/2011

29

- VD: chỉ ra  $\Delta H_s$  trong các pư sau là  $\Delta H_s$ :



Đáp án đúng là:...

1/19/2011

30

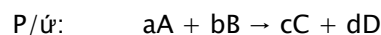
- Kí hiệu:  $\Delta H_s$ ,  $\Delta H^\circ$ , hay  $\Delta H^\circ_{298,s}$
- Chú ý: (tr.288)
  - với đơn chất:  $\Delta H^\circ_{298,s} = 0$ .
  - Giá trị của  $\Delta H^\circ_s$  có thể sử dụng để so sánh khả năng bền vững nhiệt giữa các hợp chất cùng nhóm.
  - Hầu hết giá trị entanpi sinh tiêu chuẩn đều mang dấu âm, điều này cho biết quá trình tạo thành các hợp chất từ các nguyên tố ban đầu thường là tỏa nhiệt.

1/19/2011

31

### b. Biến thiên entanpi p/ư hóa học

$$\Delta H^\circ_{pư} = \sum \Delta H^\circ_{s,(sản\ phẩm)} - \Delta H^\circ_{s,(tham\ gia)}$$



$$\Delta H^\circ_{pư} = [c \cdot \Delta H^\circ_{s(C)} + d \cdot \Delta H^\circ_{s(D)}] - [a \cdot \Delta H^\circ_{s(A)} + b \cdot \Delta H^\circ_{s(B)}]$$

1/19/2011

32

### 6.8. Nhiệt hóa học và chiều hướng của pưh

- $\Delta H_{pư} < 0 \rightarrow$  phản ứng có xu hướng diễn ra theo chiều tạo sản phẩm
- $\Delta H_{pư} > 0 \rightarrow$  phản ứng có xu hướng diễn ra theo chiều tạo chất tham gia

1/19/2011

33

### Bài tập chương 6:

11, 15, 25, 29, 33, 39, 45, 53, 79, 93.

Bài sau:

Chương 7: Cấu tạo nguyên tử

1/19/2011

34



1/19/2011

35

1. Năng lượng và phản ứng hóa học có liên quan như thế nào với nhau?
2. Những hình thức tính toán có liên quan đến sự liên hệ đó là gì?



# HÓA HỌC ĐẠI CƯƠNG

GV: Lê Minh Thành

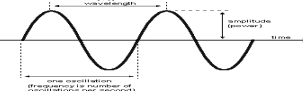
1

## Chương 7

### CẤU TẠO NGUYÊN TỬ

2

### 7.1. BƯỚC XẠ ĐIỆN TỪ



- o Các khái niệm ôn tập
  - bước sóng ( $\lambda$ ) là khoảng cách giữa hai đỉnh sóng (cao nhất hoặc thấp nhất) liên tiếp ; đơn vị đo....
  - tần số sóng ( $\nu$ ,  $f$ ) là số dao động của sóng tại một điểm cho trước trong một đơn vị thời gian ; đơn vị đo....
  - biên độ sóng là độ lệch cực đại của dao động sóng so với vị trí cân bằng.
  - tốc độ sóng là khoảng cách lan truyền sóng trong một đơn vị thời gian ; đơn vị đo....

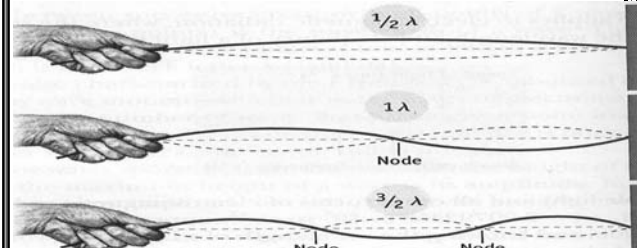
$Tốc\ độ\ sóng\ (m.s^{-1}) = \lambda\ (m) \times f\ (s^{-1})$

$c = \lambda \times f \quad (7.1)$

3

### 7.1.a. Sóng dừng

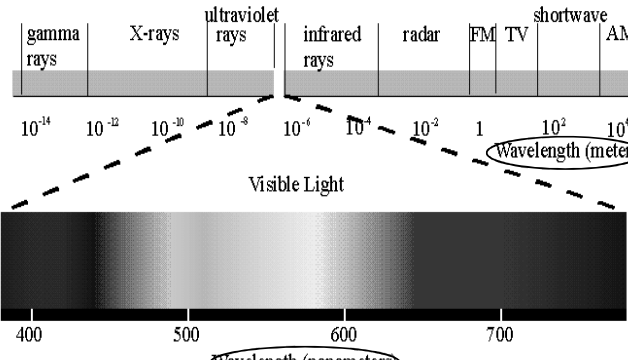
- sóng dừng là sóng có các bụng và các nút cố định trong không gian.
- đặc điểm: có  $\geq 2$  nút; khoảng cách giữa hai điểm nút liên tiếp luôn luôn là  $\lambda/2$ ; có thể có những bước sóng xác định.



4

### 7.1.b. Phổ điện từ và phổ khả kiến

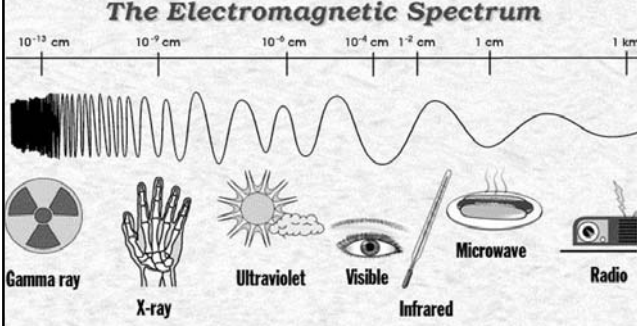
- Phổ điện từ là một khoảng nào đó của sóng điện từ.



Wavelength (nanometers)

5

### The Electromagnetic Spectrum



- o Câu hỏi: Sóng điện thoại di động có bước sóng nằm trong khoảng nào ?

6



## 7.2. PLANCK, EINSTEIN, NĂNG LƯỢNG VÀ PHOTON

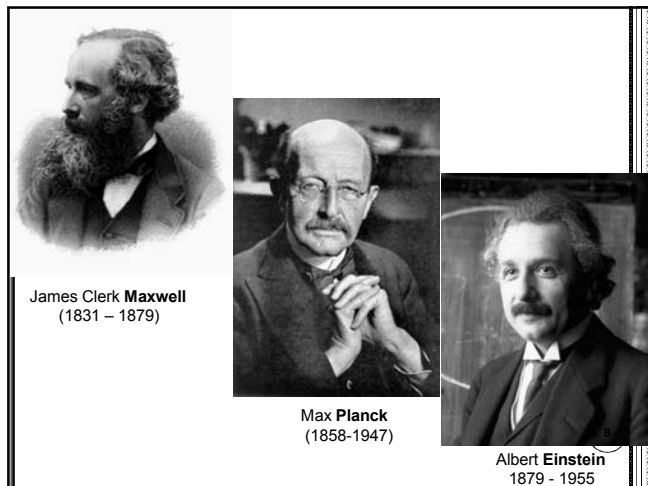
o Thuyết Planck: "Bức xạ điện từ được hấp thụ hoặc phát xạ dưới dạng những lượng gián đoạn gọi là lượng tử năng lượng"

o Phương trình Planck:  $E = h.f$  (7.2)

o Ý nghĩa của thuyết Planck: giải quyết được vấn đề "khủng hoảng tử ngoại" mà thuyết Maxwell chưa giải thích được.

❖ Khủng hoảng tử ngoại (ultraviolet catastrophe) là mâu thuẫn giữa lý thuyết và thực nghiệm khi nghiên cứu thực nghiệm về sự bức xạ nhiệt, người ta đã thu được những kết quả không thể giải thích nổi bằng lý thuyết phát xạ cổ điển.

7



o Khái niệm hiệu ứng quang điện: là hiện tượng các hạt electron bắn ra khỏi bề mặt kim loại khi có ánh sáng đập vào.

o Điều kiện để xảy ra hiệu ứng quang điện: năng lượng điện từ chiếu vào phải lớn hơn công thoát của electron liên kết với kim loại:  $f \geq f_0$

o Công thức của Einstein...

$$E = m.c^2 = h.f$$

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m.c}$$

(tính cho một hạt photon)

o Ý nghĩa của luận điểm Einstein về ánh sáng..... 9

Câu hỏi: Hãy so sánh năng lượng của 1 mol photon ánh sáng có  $\lambda = 625 \text{ nm}$  với năng lượng của 1 mol photon vi sóng có  $f = 2,45 \text{ GHz}$  ?

HD:

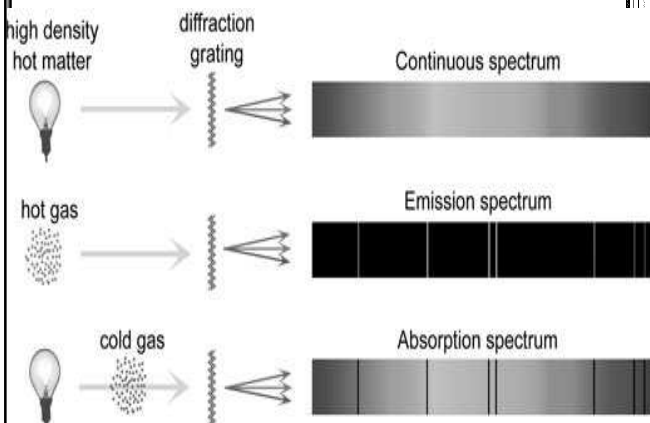
$$E_1 = N_A \cdot h \cdot f_1 = N_A \cdot h \cdot (c / \lambda_1)$$

$$E_2 = N_A \cdot h \cdot f_2$$

Trong hai công thức trên, chú ý đơn vị đo của  $\lambda$  là ..... còn đơn vị của  $f$  là .....

Giá trị của  $h = \dots\dots\dots$  còn giá trị của  $c = \dots\dots\dots$  10

o Phân biệt phổ liên tục, phổ vạch, phổ phát xạ và phổ hấp thụ...



## 7.3. PHỔ VẠCH CỦA NGUYÊN TỬ

o Khái niệm phổ vạch nguyên tử: là một hệ thống những vạch sáng riêng lẻ trên một nền tối.

o Phân loại:....

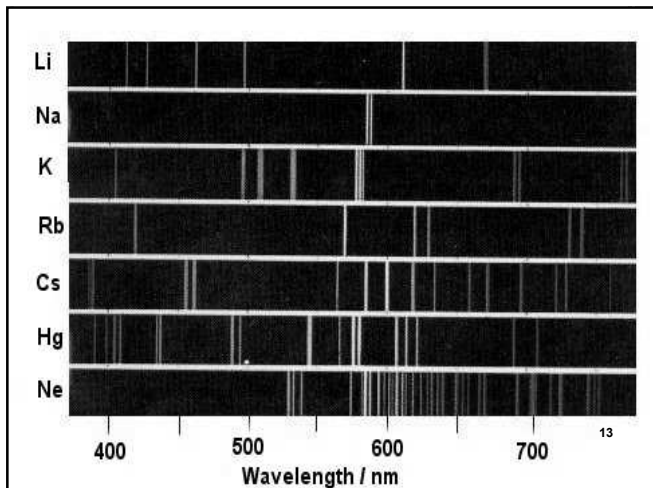
o Đặc điểm và ứng dụng...

o Công thức Rydberg ...

$$\frac{1}{\lambda} = R \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad \text{với } n > 2 \quad (7.3)$$

hằng số Rydberg:  $R = 1,097 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$

12



**7.3.a. Mô hình nguyên tử H của Bohr ...**

- o Mô hình Bohr: "Electron chuyển động trên những quỹ đạo nhất định, trên đó năng lượng của e không đổi"
- o Công thức của Bohr ...



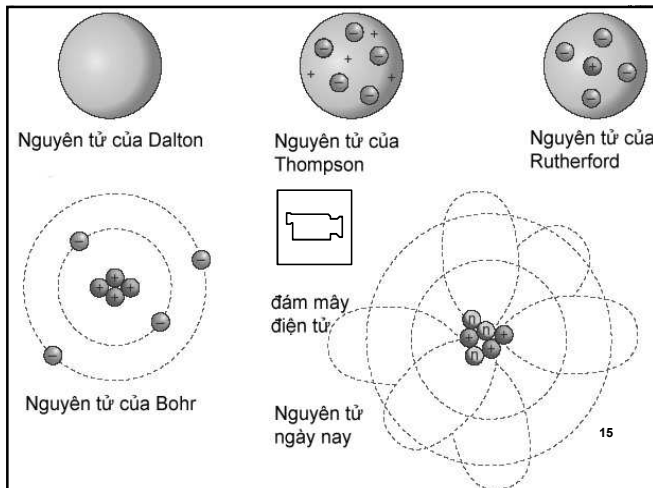
$$E_n = - \frac{Rhc}{n^2} \quad (7.4)$$

n: Số lượng tử chính, n = 1,2,3...

E: đơn vị đo (J/nguyên tử)

$$\Rightarrow R.h.c = 1312 \text{ kJ/mol thì } E \text{ (kJ/mol)}_{14}$$

- o Ý nghĩa mô hình của Bohr ...



**7.3.b. Thuyết Bohr và quang phổ vạch**

- o Câu hỏi: quan sát video sau và giải thích quang phổ vạch thu được?
- o Các công thức:

$$\Delta E = E_{\text{sau}} - E_{\text{trước}}$$

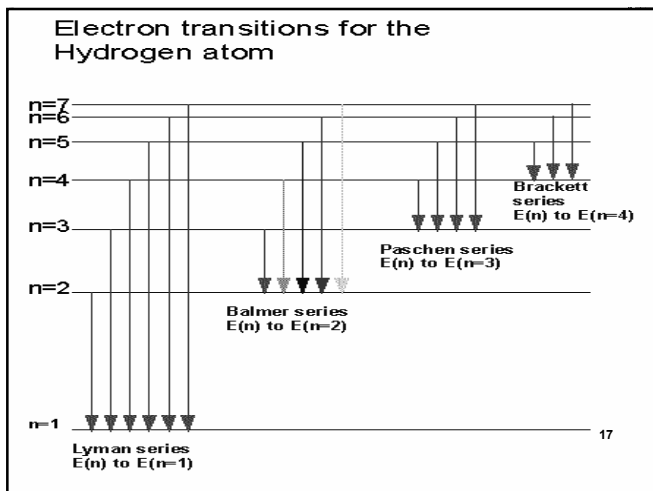
$$E_n = - \frac{Rhc}{n^2}$$

$$E_{1 \text{ photon}} = (\Delta E \cdot 10^3) : N_A$$

(J/photon)

$$E_{1 \text{ photon}} = (h \cdot c) : \lambda$$

16



**7.4. TÍNH CHẤT SÓNG CỦA ELECTRON**

- o Câu hỏi: Các hạt vật chất (khác ánh sáng) có tính chất lưỡng tính sóng-hạt không?



- o Quan điểm của Louis Victor de Broglie....

$$\lambda = \frac{h}{mv} \quad (7.6)$$

"Mọi hạt vật chất khối lượng m chuyển động với tốc độ v sẽ có bước sóng λ"

- o Ý nghĩa của thuyết de Broglie....

18

## 7.5. CƠ HỌC LƯỢNG TỬ VỀ NGUYÊN TỬ

### a. Nguyên lý bất định Heisenberg

"Nội dung: Không thể xác định được chính xác đồng thời cả toạ độ và năng lượng của electron trong nguyên tử"

- o Biểu thức:  $\Delta x \cdot \Delta p > h$
- o Ý nghĩa của nguyên lý...

### b. Mô hình nguyên tử theo Schrödinger

- o Bản chất mô hình nguyên tử theo Schrödinger ...
- o Coi e chuyển động sóng, mô tả bằng hàm sóng  $\Psi$ ...
- o Ý nghĩa của hàm sóng  $\Psi$  và hàm mật độ xác suất  $\Psi^2$

19

- o Phương trình Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \hat{H} \Psi(\mathbf{r}, t)$$

- $i$  = đơn vị ảo
- $\psi(r,t)$  = hàm sóng..
- $\hbar$  = hằng số Planck rút gọn
- $\hat{H}$  = toán tử Hamilton.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}, t)$$

- o Các kết quả giải phương trình Schrödinger gồm có hàm sóng  $\Psi$ , năng lượng  $E$  và bộ các số lượng tử...

20

- ❖ Kết quả hàm sóng (ví dụ...).

$$\Psi(x, t) = e^{-iEt/\hbar} \psi(x)$$

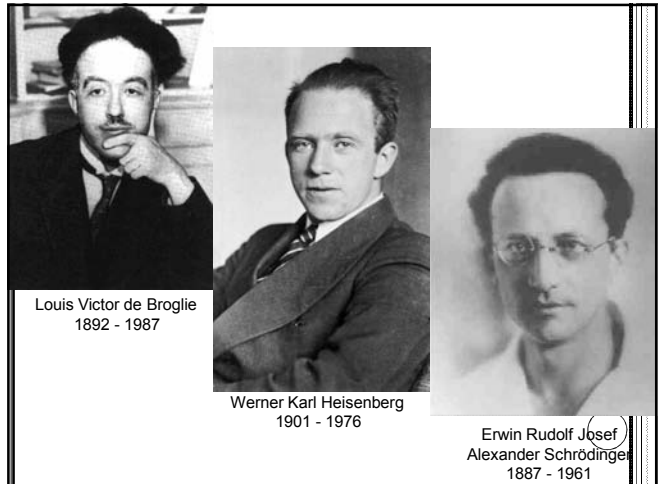
$$\psi(x) = Ae^{-\frac{x^2}{2a^2}} \quad \Psi_{1s} = \frac{1/a_0}{\sqrt{\pi}} e^{-r/a_0}$$

- ❖ Kết quả năng lượng (ví dụ...).

$$E_n = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} = \frac{n^2 h^2}{8ma^2}$$

$$E = \hbar \omega \left( n + \frac{1}{2} \right) = E_n$$

21



- ❖ Hệ quả: khái niệm obitan....

- ❖ Bộ các số lượng tử:

- ✓ Số lượng tử chính  $n$ : (1,2,3...n)
- ✓ Số lượng tử phụ  $\ell$  ( số lượng tử xung lượng):  
(0, 1, 2, ..., (n-1))
- ✓ Số lượng tử từ  $m_\ell$ : (- $\ell$ , -( $\ell$ -1),...0...( $\ell$ -1),  $\ell$ )

- ❖ Ý nghĩa của bộ số lượng tử....

23

- ❖ Số lượng tử chính  $n$ ;  $n = 1, 2, 3, \dots, \infty$

- ✓ Là thừa số đầu tiên trong quá trình xác định năng lượng e:

$$E_n = -R.h.c/n^2$$

- ✓  $n$  tăng  $\rightarrow E_n$  tăng và các mức năng lượng càng xít nhau
- ✓ Các e có cùng giá trị  $n$  thuộc cùng 1 lớp:

Giá trị $n$ :	1	2	3	4....
Kí hiệu lớp:	K	L	M	N....

24

❖ Số lượng tử xung lượng  $\ell$ ,  $\ell = 0, 1, 2, \dots, n-1$

✓ Giá trị của số  $\ell$  tương ứng với ký hiệu phân lớp:

Giá trị $\ell$ :	0	1	2	3
Phân lớp:	s	p	d	f

✓ Giá trị của số  $\ell$  tuân theo giá trị của  $n$ :

Lớp  $n = 1 \rightarrow \ell = 0 \rightarrow$  obitan: 1s

Lớp  $n = 2 \rightarrow \ell = 0, 1 \rightarrow$  obitan: 2s, 2p

25

❖ Số lượng tử từ  $m_\ell$ ,  $m_\ell = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \ell$

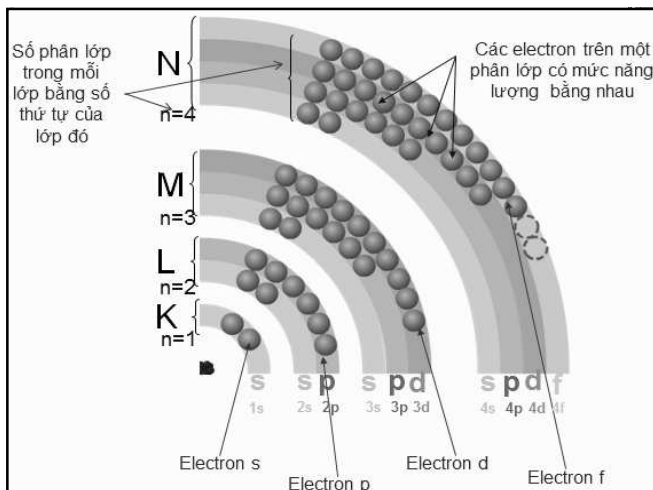
✓  $m_\ell$  cho biết cách định hướng của obitan

✓ Mỗi phân lớp ( $\ell$ ) có  $(2\ell+1)$  obitan có định hướng khác nhau, nhưng có năng lượng bằng nhau

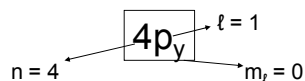
Phân lớp:	s	p	d	f
Số obitan:	1	3	5	7

❖ Ý nghĩa bộ số lượng tử ( $n, \ell, m_\ell$ ): mỗi bộ số lượng tử này đại diện cho một obitan duy nhất trong tử.

26



❖ Cách khai triển một bộ số lượng tử để xác định obitan tương ứng và ngược lại...

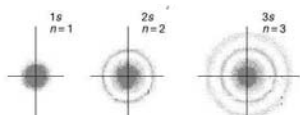


❖ Câu hỏi: Từ một số lượng tử ( $n=2$ ) ta có thể có những bộ số lượng tử ( $n, \ell, m_\ell$ ) nào?

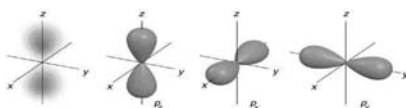
✓ HD: từ  $n$ , suy ra các giá trị  $\ell$ , sau đó từ mỗi giá trị  $\ell$ , suy ra các giá trị  $m_\ell$  tương ứng. Kết hợp đồng thời cả 3 giá trị  $n, \ell, m_\ell$  ta sẽ có các bộ số lượng tử theo yêu cầu.

7.6. HÌNH DẠNG CÁC OBITAN

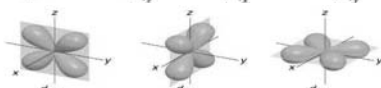
o Obitan s:



o Obitan p:



o Obitan d:



o Obitan f: .....



BT chương 7

7, 11, 17, 25, 27, 33, 37, 55, 61, 65

Bài sau: Chương 8

CẤU HÌNH ELECTRON NGUYÊN TỬ VÀ TÍNH TUẦN HOÀN HÓA HỌC

28

# HÓA HỌC ĐẠI CƯƠNG

GV: Lê Minh Thành

February 11, 2011

1

## Chương 8 Cấu hình electron nguyên tử & Tính tuần hoàn hóa học

2

### 8.1. Spin electron

- ▶ Khái niệm spin electron:...
- ▶ Số lượng tử spin electron:  $m_s$ .
- ▶ Giá trị của  $m_s = \pm 1/2$ , đại diện cho 2 chiều quay...
- ▶ Bộ số lượng tử đầy đủ mô tả 1 e trong nguyên tử là:  $(n, \ell, m_\ell, m_s)$ .
- ▶ **Câu hỏi:** bộ số  $(3, 1, -1, +1/2)$  mô tả e nào?
  - HD: phân tích lần lượt vị trí ...

3

### 8.1.a. Từ tính

- ▶ **Từ tính** (*magnetic property*) là một tính chất của vật liệu hưởng ứng dưới sự tác động của một từ trường.
- ▶ Từ tính có nguồn gốc từ lực từ, lực này luôn đi liền với lực điện nên thường được gọi là lực điện từ.
- ▶ *Lực điện từ là một trong bốn lực cơ bản của tự nhiên. Sự liên hệ giữa lực từ, lực điện, và nguồn gốc của chúng được cho bởi hệ phương trình Maxwell.*

4

- ▶ Lực điện từ sinh ra khi các hạt tích điện chuyển động vì như các điện tử chuyển động trong dòng điện, *hoặc trên quan điểm lượng tử thì lực điện từ gây ra bởi chuyển động quỹ đạo và spin của điện tử trong nguyên tử.*
- ▶ Từ tính có thể phân ra làm các loại: sắt từ, phản sắt từ, ferri từ, thuận từ, nghịch từ. *Thông thường khi ta nói một vật liệu có từ tính, tức là ám chỉ vật liệu có tính sắt từ, phản sắt từ hoặc ferri từ.*

5

### 8.1.b. Các electron & tính thuận - nghịch từ

- ▶ Tính thuận từ: là tính chất bị hút về từ trường của các chất (n/tử hoặc ion tạo nên nó có e độc thân).
- ▶ Tính nghịch từ: là tính chất bị đẩy bởi từ trường của các chất (n/tử, ion tạo nên nó ko có e độc thân)
- ▶ Nguyên nhân tính thuận từ, nghịch từ: .....
- ▶ **Câu hỏi:** Nguyên tử, ion nào sau đây thuận từ, nghịch từ:  $\text{Na}^+$ ,  $\text{Cl}$ ,  $\text{O}$ ,  $\text{Fe}^{2+}$  ...
- ▶ HD: viết cấu hình e cho tử, ion trên...

6

• Hình ảnh của chất thuận, nghịch từ và sắt từ:...

Chất thuận từ      Chất nghịch từ      Chất sắt từ

- Sắt từ: là các chất có từ tính mạnh, hay khả năng hưởng ứng mạnh dưới tác dụng của từ trường ngoài, mà tiêu biểu là Fe.
- Tên gọi "sắt từ" được đặt cho nhóm các chất có tính chất từ giống với sắt. Các chất sắt từ có hành vi gần giống với các chất thuận từ ở đặc điểm hưởng ứng thuận theo từ trường ngoài, (ví dụ như sắt (Fe), coban (Co), niken (Ni), gadôli (Gd)... là các chất sắt từ điển hình)

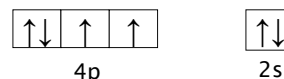
## 8.2. Nguyên lí ngoại trừ Pauli

► Nội dung: trong một nguyên tử ko thể tồn tại đồng thời 2 e có chung bộ bốn số lượng tử ( $n, \ell, m_\ell, m_s$ ).

► Hệ quả: .....

❖ **Câu hỏi:** Số e tối đa ở mỗi obitan ( $m_\ell$ ), mỗi phân lớp ( $\ell$ ) và mỗi lớp ( $n$ ) là bao nhiêu? ?

❖ **Câu hỏi:** Với cấu hình electron obitan sau đây, hãy chỉ ra bộ số lượng tử tương ứng với các electron tương ứng? ?



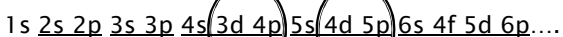
## 8.3. Phân mức năng lượng ở n.tử

► Nội dung nguyên lí Aufbau (quy tắc  $(n+\ell)$ ):...

❖ Electron được xếp vào các phân lớp theo chiều tăng dần của giá trị  $(n+\ell)$ .

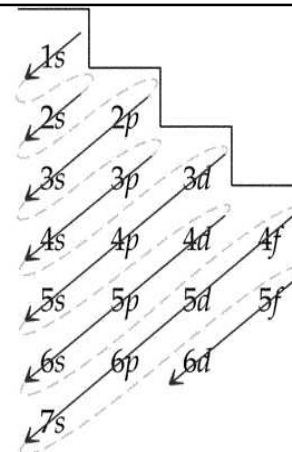
❖ Trường hợp giá trị  $(n+\ell)$  bằng nhau, thì ưu tiên phân bố vào giá trị nào có  $n$  nhỏ hơn trước.

► Hệ quả: đưa ra thứ tự năng lượng của các phân lớp



• Thứ tự năng lượng của các phân lớp phụ thuộc vào 2 số lượng tử  $n$  và  $\ell$ .

• Quy tắc Klescopski minh họa nguyên lí Aufbau:



## 8.4. Cấu hình electron nguyên tử, ion

► Khái niệm cấu hình electron:...

► Biểu diễn cấu hình electron thường theo 2 cách:

❖ Cấu hình spdf, dùng bộ kí hiệu:  $n\ell^a$ .

❖ Cấu hình obitan (ô lượng tử), dùng các ô vuông, điền e

► Để biểu diễn được cấu hình obitan → cần sử dụng quy tắc Hund (quy tắc độ bội cực đại): các e điền vào một phân lớp sao cho tổng spin của chúng là cực đại.

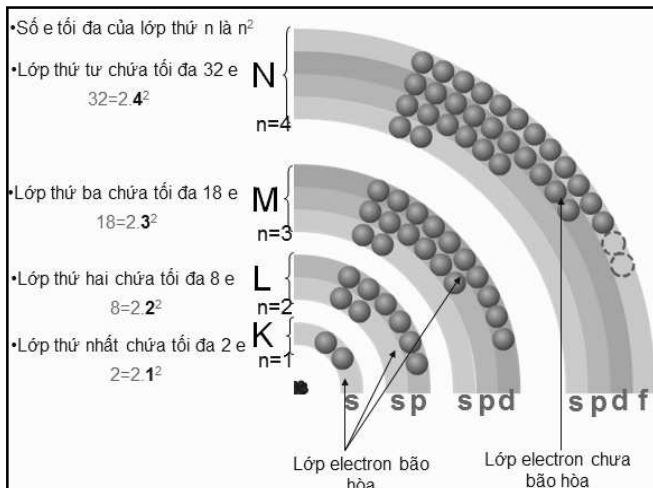
► Hệ quả quy tắc Hund: đưa ra tính thuận từ, nghịch từ của nguyên tử, ion, phân tử

► **Chú ý quan trọng khi viết cấu hình electron:**

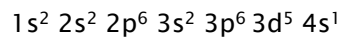
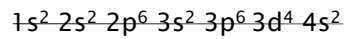
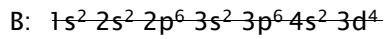
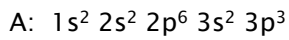
❖ Viết theo năng lượng trước, sau đó đưa các phân lớp về đúng vị trí của lớp.

❖ Trường hợp xuất hiện phân lớp  $d^9, f^{13} \dots \rightarrow d^{10}, f^{14}$   
→ hiện tượng giả bão hòa. Còn nếu xuất hiện phân lớp  $d^4, f^6 \dots \rightarrow d^5, f^7$  → hiện tượng giả nửa bão hòa.

❖ Cấu hình electron của ion dương (hoặc ion âm) được viết bằng cách, sau khi đã viết cấu hình electron của nguyên tử, ta trừ đi (hoặc thêm vào) cấu hình nguyên tử đó.



• Câu hỏi: hãy viết cấu hình electron theo 2 cách cho các nguyên tử sau: A (Z=15); B (Z=24)?



• Câu hỏi: hãy viết cấu hình electron của ion  $A^{2-}$  và  $B^{3+}$  biết: A (Z=16); B (Z=27)?



## 8.5. Bảng hệ thống tuần hoàn

### a. Định luật tuần hoàn

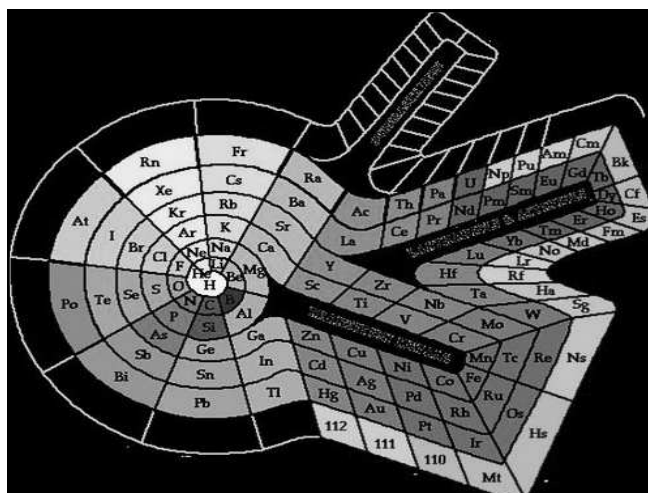
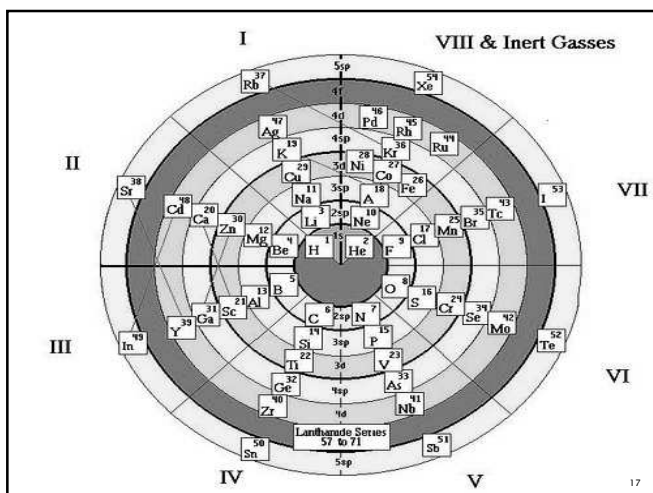
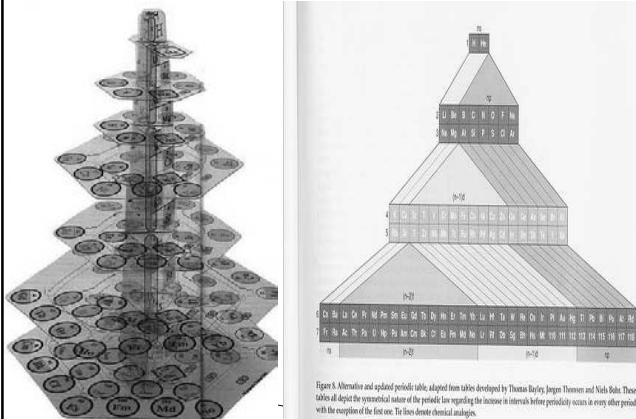
► Nội dung: Tính chất của các đơn chất, thành phần và tính chất của các hợp chất tương ứng của các nguyên tố biến đổi tuần hoàn theo chiều tăng của ĐTHN.

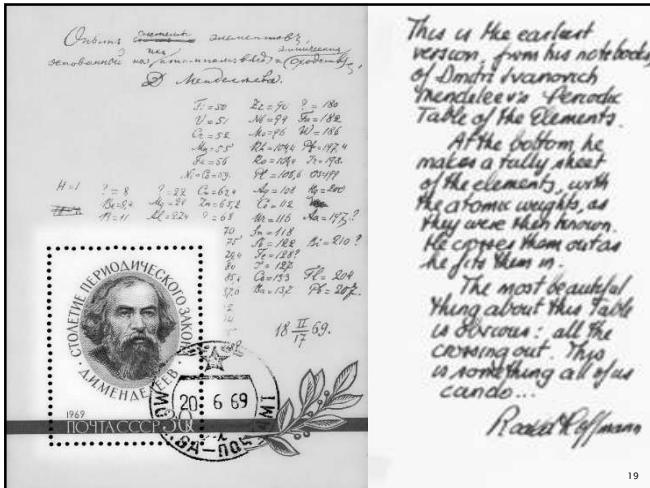


Dmitri Ivanovich Mendeleev

► Hệ quả:.....

### b. Giới thiệu một số dạng bảng HTTH





**BẢNG TUẦN HOÀN CÁC NGUYÊN TỬ HOÁ HỌC**

IA	IIA																IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	VIII	IX	X	XI	XII	
1																	(H)										
2	Li	Be															B	C	N	O	F	Ne					
3	Na	Mg															Al	Si	P	S	Cl	Ar					
4	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr									
5	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe									
6	Cs	Ba	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu										
7	Fr	Ra	Ac																								

19

### 8.6. Các tính chất của nguyên tử và sự biến đổi tuần hoàn

**a. Bán kính nguyên tử và ion**

- BKNT là nửa khoảng cách giữa hai nguyên tử gần nhau nhất trong đơn chất.
- BKNT còn phụ thuộc kiểu lai hoá, kiểu mạng tinh thể.
- BK ion cũng tương tự BKNT, người ta coi tổng bán kính cation và anion bằng khoảng cách gần nhất giữa cation và anion trong tinh thể ion.

21

► Đặc điểm bán kính ion:

- ❖ Cation được hình thành do nguyên tử mất electron, vì vậy bán kính cation < bán kính n.tử.
- ❖ Anion được hình thành do nguyên tử nhận electron, vì vậy bán kính anion > bán kính n.tử.

22

**b. Năng lượng ion hóa**

- Khái niệm: là năng lượng cần thiết để tách một e ra khỏi nguyên tử ở pha khí ở trạng thái cơ bản.
- Kí hiệu: IE, hoặc I..... Đơn vị đo.....
- Chú ý:
  - Tính kim loại của nguyên tử càng lớn thì IE càng nhỏ.
  - Một nguyên tử trung hòa, tách lần lượt các e thứ 1, 2, 3 thì giá trị năng lượng ion hóa là....
  - Năng lượng tách e hóa trị nhỏ hơn rất nhiều so với e lõi.

23

**c. Ái lực electron**

- Khái niệm: là năng lượng của quá trình nhận thêm một e của nguyên tử ở pha khí ở trạng thái cơ bản.
- Kí hiệu: EA, hoặc E..... Đơn vị đo...
- Chú ý:
  - Khả năng hút e của n.tử càng lớn thì EA càng âm.
  - Một nguyên tử trung hòa, nhận lần lượt e thứ 1, 2, 3 thì giá trị ái lực electron lần lượt là...

24



### d. Quy luật biến thiên các tính chất



- Tham khảo thêm quy luật biến đổi ở hình 8.11; 8.12 (về bán kính); hình 8.13 (về IE); hình 8.14 (về EA).

25

### Câu hỏi:

So sánh ba nôt:  $_{13}\text{Al}$ ,  $_{15}\text{P}$  và  $_{9}\text{F}$  theo các tính chất sau:

- Thứ tự tăng dần bán kính nguyên tử của chúng
- Nguyên tố nào có năng lượng ion hóa lớn nhất?
- Nguyên tố nào có ái lực electron âm hơn, Al hay F?

HD:

- F < P < Al, tại vì....
- Al < P < F, tại vì....
- F âm hơn Al, tại vì....

26

### Câu hỏi:

Sắp xếp các ion  $_{11}\text{Na}^+$ ,  $_{12}\text{Mg}^{2+}$ ,  $_{9}\text{F}^-$  và  $_{8}\text{O}^{2-}$  theo chiều bán kính tăng dần? Chọn đáp án đúng?

- $\text{O}^{2-} < \text{F}^- < \text{Na}^+ < \text{Mg}^{2+}$
- $\text{F}^- < \text{Mg}^{2+} < \text{O}^{2-} < \text{Na}^+$
- $\text{Na}^+ < \text{Mg}^{2+} < \text{F}^- < \text{O}^{2-}$
- $\text{Mg}^{2+} < \text{Na}^+ < \text{F}^- < \text{O}^{2-}$

27

## BT chương 8

3, 13, 17, 25, 27, 29, 31, 47, 51, 53..

## Bài sau: Chương 9

## Liên kết và cấu tạo phân tử:

## Những khái niệm cơ bản

28



29

Main-group elements															
s-block		Transition elements						p-block							
1A	2A	3B	4B	5B	6B	7B	8B	1B	2B	3A	4A	5A	6A	7A	8A
←1s→															←1s→
←2s→															←2p→
←3s→															←3p→
←4s→															←4p→
←5s→															←5p→
←6s→															←6p→
←7s→															
Inner-transition elements										4f					
										5f					
f-block															

30

# HÓA HỌC ĐẠI CƯƠNG

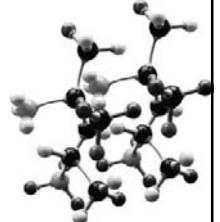
GV: Lê Minh Thành

12/02/2011

1

## Chương 9

### Liên kết và cấu tạo phân tử: Những khái niệm cơ bản

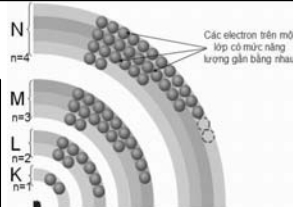


12/02/2011

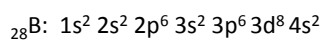
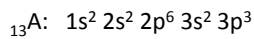
2

#### 9.1. Electron hóa trị

- Khái niệm e hóa trị: là các e lớp ngoài cùng + số e phân lớp s ở ngoài cùng chưa bão hòa.



- Khái niệm electron lõi: là các e còn lại ngoài e hóa trị.
- Câu hỏi: Hãy xác định số e hóa trị cho mỗi ntử sau đây:



12/02/2011

3

- Kí hiệu Lewis cho các nguyên tử: kí hiệu của nguyên tố là đại diện cho hạt nhân + các electron lõi, còn các electron hóa trị được biểu diễn bằng các dấu chấm đặt đều đặn bốn phía xung quanh kí hiệu nguyên tố.



- Chú ý khi biểu diễn kí hiệu Lewis:
  - Điền e lần lượt xung quanh theo 4 hướng sau đó tiếp tục...
  - Với các nguyên tố phân nhóm phụ:...

12/02/2011

4

#### 9.2. Sự tạo thành liên kết hóa học

- Khái niệm liên kết hóa học: là lực giữ cho các nguyên tử cùng nhau trong các phân tử hay các tinh thể.
- Sự phân loại liên kết hóa học (giữa các nguyên tử):
  - Theo lý thuyết cổ điển: 3 loại: ion, cộng hóa trị, kim loại.
  - Theo lý thuyết hiện đại: 2 loại: xích ma, pi.
- Ngoài ra còn có liên kết liên phân tử: là loại lực liên kết giữa các phân tử với nhau. Ví dụ: liên kết hiđrô, ...
- Nguyên tắc chung của việc tạo thành liên kết hóa học ở thuyết cổ điển là tuân theo quy tắc bát tử: "....."

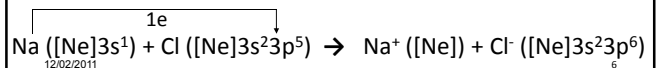
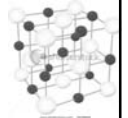
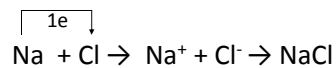


5

#### 9.3. Liên kết ion

- Khái niệm: là liên kết hóa học có bản chất lực hút tĩnh điện giữa hai ion mang điện tích trái dấu.

- Sự hình thành:



12/02/2011

- Đặc điểm liên kết ion:
  - o thường là liên kết giữa các nguyên tử nguyên tố phi kim với các nguyên tử nguyên tố kim loại.
  - o điện tích ion tham gia liên kết càng lớn, thì lực hút càng mạnh, liên kết càng bền vững.
  - o kích thước của ion, hay khoảng cách giữa các ion trái dấu càng lớn, thì lực hút giữa các ion đó càng giảm, càng kém bền.
- Năng lượng mạng tinh thể ion phụ thuộc vào:
  - o Quá trình ion hóa, năng lượng của nó thể hiện bằng IE.
  - o Quá trình nhận thêm e, năng lượng của nó thể hiện bằng  $E_A$
  - o Quá trình tạo phân tử từ các ion thể khí, thể hiện bằng  $E_{\text{cặp ion}}$

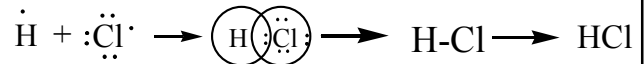
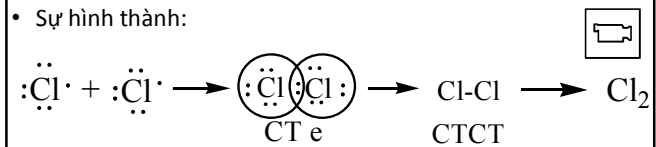
12/02/2011

7

## 9.4. Liên kết cộng hóa trị



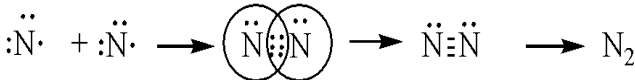
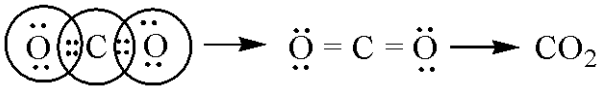
- Khái niệm: là liên kết được hình thành giữa các nguyên tử bằng một hay nhiều cặp electron (electron) chung.



12/02/2011

8

- Đặc điểm liên kết cộng hóa trị
  - o Thường là liên kết giữa các n.tử nguyên tố phi kim với nhau.
  - o Nếu liên kết giữa 2 nguyên tử bằng 1 cặp electron dùng chung  $\rightarrow$  liên kết đó gọi là liên kết đơn. Còn nếu 2 nguyên tử bằng 2, 3 cặp electron dùng chung  $\rightarrow$  liên kết đó gọi là liên kết đôi, ba.

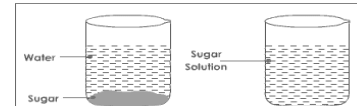


12/02/2011

9

- Chú ý khi so sánh các tính chất của hợp chất ion và cộng hóa trị về dạng tồn tại,  $t^{\circ}_{\text{nc}}$ ,  $t^{\circ}_{\text{s}}$ , tính tan, tính dẫn điện,  $E_{\text{phân hủy}}$  thì chúng tuân theo quy luật là:

- o Hợp chất ion thường có  $t^{\circ}_{\text{nc}}$ ,  $t^{\circ}_{\text{s}}$ , tính tan, tính dẫn điện,  $E_{\text{phân hủy}}$  cao hơn so với h/c cộng hóa trị.
- o Trong các hợp chất CHT, chất có độ phân cực liên kết càng lớn thì chất đó có  $t^{\circ}_{\text{nc}}$ ,  $t^{\circ}_{\text{s}}$ , tính tan trong nước (đm phân cực) càng lớn.



12/02/2011

Fig. 3.2 Dissolving of sugar in water

- Câu hỏi: Hãy so sánh nhiệt độ nóng chảy, tính tan trong nước của các chất sau đây và xếp theo chiều tăng dần các tính chất đó: HCl, NaCl, CaCl<sub>2</sub>, Cl<sub>2</sub>, NH<sub>3</sub>.

- HD:
  - o Phân loại 4 chất trên xem chúng thuộc loại ion hay CHT.
  - o Cùng là h/c CHT thì xét xem độ phân cực các lk đó ntn.
  - o Cùng là h/c ion thì xem xét độ lớn điện tích ion, kích thước ion để so sánh.
  - o Kết quả đúng là: .....

12/02/2011

11

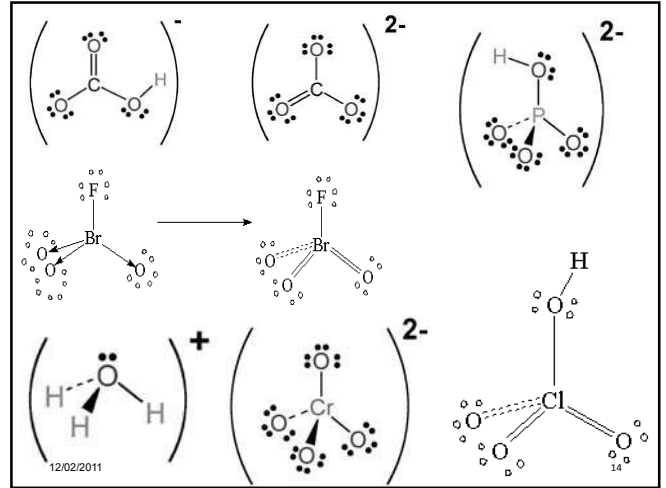
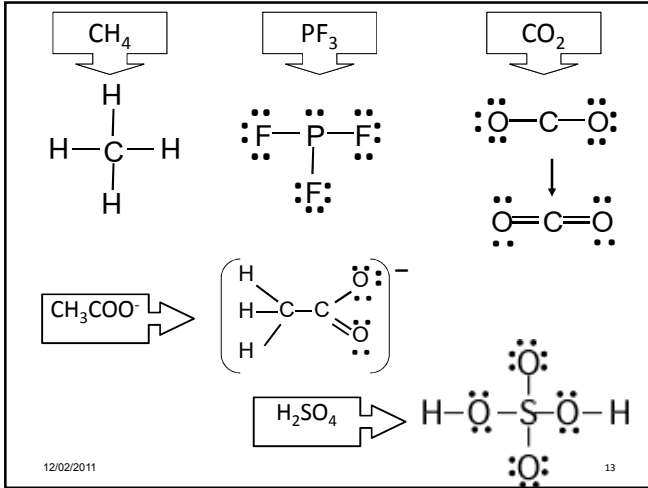
## 9.5. Cấu trúc chấm electron của Lewis

- Ý tưởng: dùng các kí hiệu nguyên tử và sắp xếp các e hóa trị bằng các dấu chấm để mô tả cặp e liên kết, cặp e chưa liên kết ...

- Cách vẽ cấu trúc Lewis cho 1 chất: (tr.419/T<sub>1</sub>)



1. Xác định tổng số electron hóa trị của phân tử, ion đó.
2. Chọn nguyên tử trung tâm thường là nguyên tử có ái lực e nhỏ nhất, các nguyên tử còn lại làm nguyên tử xung quanh.
3. Đặt 1 cặp electron vào giữa mỗi cặp nguyên tử. Sau đó đặt các cặp electron còn lại quanh các nguyên tử xung quanh (trừ H) để chúng được bát tử.
4. Chuyển một (hoặc một vài cặp e không liên kết) của nguyên tử ngoài vào để làm bát tử cho nguyên tử trung tâm.



• Chú ý khi vẽ cấu trúc Lewis: ....

- o Một hợp chất có thể có 1 hoặc nhiều cấu trúc Lewis khác nhau.

$[\text{:}\ddot{\text{O}}-\text{C}\equiv\text{N:}]^- \longleftrightarrow [\text{:}\ddot{\text{O}}=\text{C}=\ddot{\text{N}}:]^- \longleftrightarrow [\text{:}\text{O}\equiv\text{C}-\ddot{\text{N}}:]^-$

A                                  B                                  C

- o Các chất khác nhau, nhưng có cùng tổng số e hóa trị (các chất đồng e) thì thường có cấu trúc Lewis giống nhau.

$[\text{:}\ddot{\text{O}}-\text{P}(\text{O})_2\text{:}]^{3-} \longleftrightarrow (\text{H}-\ddot{\text{O}}-\text{P}(\text{O})_2\text{H})^{2-}$

- o Các nguyên tử C, N, O, F luôn tuân theo quy tắc bát tử....
- o Xem thêm “Chú ý 9.1” trang 423.

12/02/2011 15

### 9.6. Quy tắc bát tử và những ngoại lệ

- Nội dung quy tắc bát tử: ....
- Các trường hợp ngoại lệ:
  - o Nguyên tử Hydro trong mọi hợp chất chỉ cần 2e.
  - o Trường hợp có ít hơn 8 electron hóa trị: VD: hợp chất của Bo...
  - o Trường hợp có nhiều hơn 8 electron hóa trị: VD: hợp chất của S, P
  - o Trường hợp có số lẻ electron: VD: hợp chất  $\text{NO}_2$ ...

12/02/2011 16

### 9.7. Hình học cặp e và hình học phân tử

- Thuyết sức đẩy cặp electron hóa trị (VSEPR): “*cặp e đã lk và cặp e chưa lk trong vỏ hóa trị của nó luôn đẩy nhau và phân bố sao cho càng xa càng tốt*”.
- Ứng dụng: dự đoán hình dạng phân bố không gian của các tử trong phân tử, trong ion...

---

- Sự phân bố các cặp e (đã lk + chưa lk) của tử trung tâm **tao nên hình học cặp electron**.
- Sự phân bố các nguyên tử có mặt xung quanh tử trung tâm **tao nên hình học phân tử**.

12/02/2011 17

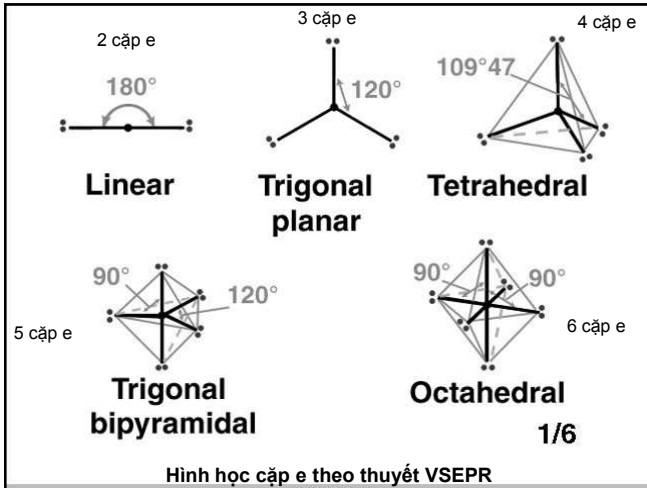
• Hệ quả của thuyết VSEPR:

- o dự đoán hình học cặp e của nguyên tử trung tâm trong phân tử, ion... theo mô hình dưới đây (chỉ dự vào số cặp e quanh tử tt):

2 cặp e	3 cặp e	4 cặp e	5 cặp e	6 cặp e
Đường thẳng 180°	Tam giác 120°	Tứ diện đều 109,5°	Lưỡng tháp tam giác 120°; 90°	Bát diện đều 90°

- o dự đoán hình học phân tử của cả phân tử, ion... phải kết hợp kết quả của hình học cặp e ở trên với số lượng các tử có xq tử tt.

12/02/2011 18



• **Cách xác định hình học cặp e, hình học phân tử :**

1. Tính tổng số electron hóa trị của phân tử, ion... đó.
2. Vẽ cấu trúc Lewis cho ptử, ion... đó
3. Đếm số cặp e (đã lk và chưa lk) quanh nguyên tử trung tâm, chú ý các liên kết bội (đôi, ba) cũng coi như 1 cặp e liên kết.
4. Xác định hình học cặp e theo quy tắc VSEPR, chỉ dựa vào tổng số cặp e quanh n.tử trung tâm. (có thể vẽ ra cho dễ hình dung)
5. Dựa vào hình học cặp e, đồng thời dựa vào số nguyên tử xung quanh nguyên tử trung tâm, kết luận về hình học phân tử, (đưa ra góc liên kết nếu có yêu cầu).

12/02/2011

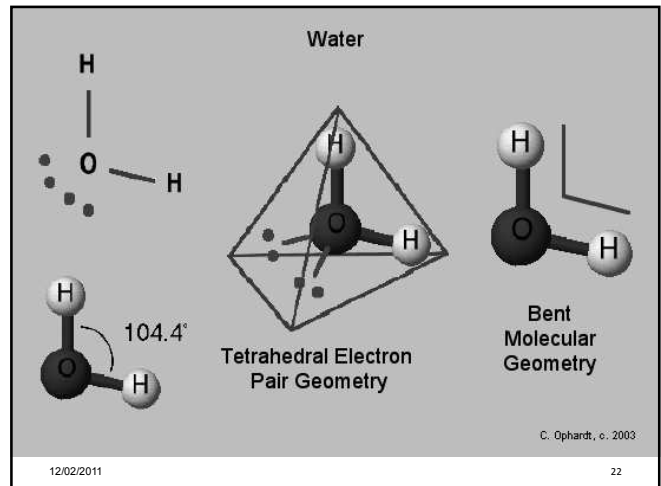
20

- Chú ý về hình học cặp e và hình học phân tử:

- Dự đoán hình học cặp e chỉ cần căn cứ vào tổng số cặp e xung quanh nguyên tử trung tâm (tính cả cặp e đã lk và cặp e chưa liên kết).
- Dự đoán hình dạng của phân tử phải dựa vào số nguyên tử xung quanh nguyên tử trung tâm, có kết hợp hình học cặp e.
- Hình học cặp e và hình học phân tử đều coi liên kết đôi, ba như các liên kết đơn.

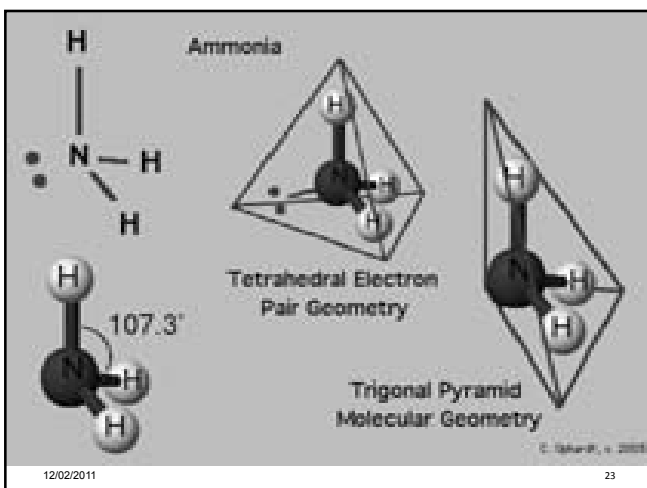
12/02/2011

21



12/02/2011

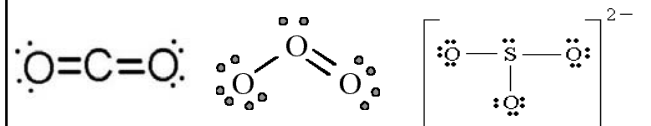
22



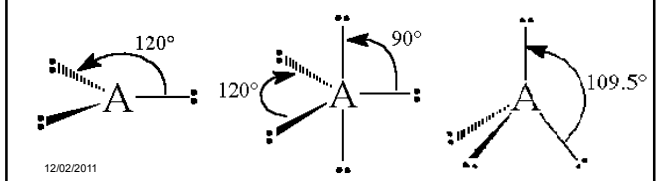
12/02/2011

23

Câu hỏi: hãy xác định hình học cặp e và hình học phân tử cho các phân tử và ion sau:  $\text{CO}_2$ ,  $\text{O}_3$ ,  $\text{SO}_3^{2-}$ ,  $\text{PO}_4^{3-}$ ...



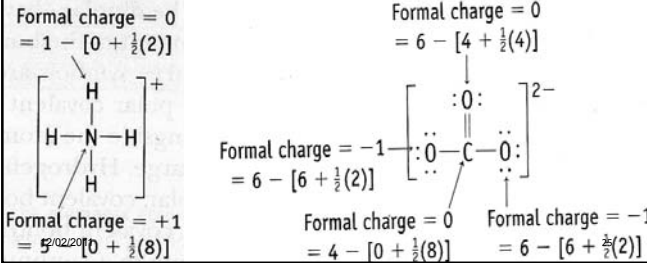
Câu hỏi: hãy xác định hình học cặp e và hình học phân tử cho các trường hợp tổng quát sau:



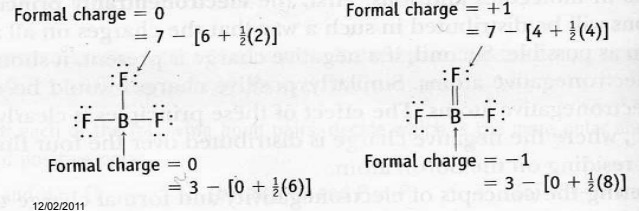
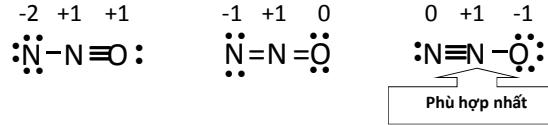
12/02/2011

### 9.8. Sự phân bố điện tích trong liên kết...

- Điện tích chính thức của n.tử trong p.tử = số e hóa trị của nguyên tử đó - số e chưa liên kết - 1/2 (số e đã liên kết).



- Trường hợp có nhiều công thức Lewis, ví dụ: N<sub>2</sub>O, BF<sub>3</sub>... thì công thức nào mà điện tích âm nằm trên n.tử độ âm điện lớn nhất sẽ là công thức phù hợp nhất.



#### 9.8.a. Độ phân cực liên kết và độ âm điện

- Trong hợp chất ion: độ phân cực liên kết được kí hiệu (+) và (-) được viết ngay cạnh kí hiệu nguyên tử.
- Trong liên kết cộng hóa trị phân cực, sự phân cực được chỉ ra bởi kí hiệu (δ+) và (δ-) viết cạnh kí hiệu nguyên tử
- Có thể sử dụng độ âm điện để dự đoán khuynh hướng của sự phân cực liên kết bằng cách tính  $\Delta\chi$

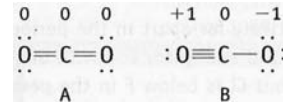
$$\Delta\chi = |\chi_2 - \chi_1|$$

- Giá trị delta X càng lớn → liên kết càng phân cực mạnh.
- Độ phân cực của liên kết được biểu diễn bằng mũi tên hướng từ nguyên tử độ âm điện yếu sang nguyên tử độ âm điện mạnh.

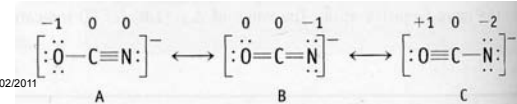
#### 9.8.b. Điện tích chính thức

- Sự phân bố điện tích trên nguyên tử theo hai quy tắc sau:

- Các electron sẽ phân bố theo cách nào đó sao cho điện tích trên mọi nguyên tử trong phân tử gần giá trị 0 nhất.



- Nếu có một điện tích âm xuất hiện, nó sẽ định vị trên nguyên tử có độ âm điện lớn nhất.



### 9.9. Sự phân cực phân tử

- Khái niệm: là trạng thái của phân tử trong đó có một đầu mang điện tích âm, đầu còn lại mang điện tích dương.
- Các bước để dự đoán độ phân cực phân tử:
  1. Tính tổng e hóa trị.
  2. Vẽ cấu trúc Lewis.
  3. Xác định hình học cặp e.
  4. Xác định hình học phân tử.
  5. Xác định độ phân cực mỗi liên kết.
  6. Kết luận về sự phân cực toàn p.tử theo quy tắc hợp lực.

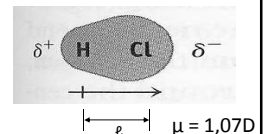
- Sự phân cực phân tử thường được đo bằng mô men lưỡng cực (μ): là đại lượng đặc trưng cho mức độ phân cực của phân tử

$$\mu = e \times |\delta| \quad (\text{Debye, D})$$

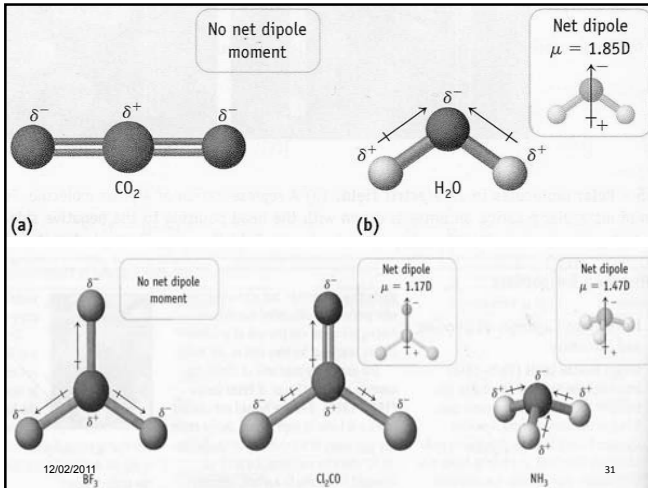
e: độ dài lưỡng cực (cm)

δ: độ lớn điện tích

$$1 \text{ D} = 3,34 \times 10^{-30} \text{ C.m}$$



- Mô men lưỡng cực càng lớn, phân tử càng phân cực
- Chú ý: Phân tử mà có liên kết phân cực thì nó có thể phân cực hoặc không phân cực



### 9.10. Các tính chất của liên kết

- Bậc liên kết: là số cặp e dùng chung giữa 2 tử trong 1 ptử.

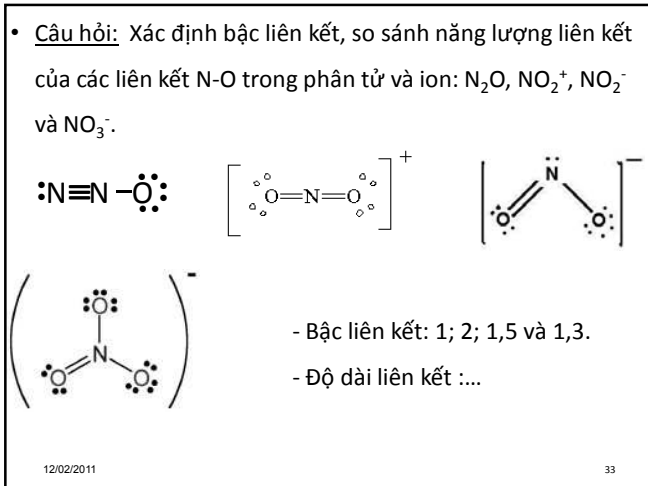
$$\text{Bậc liên kết} = \frac{\text{Số cặp e dùng chung liên kết X với Y}}{\text{Số mỗi liên kết của X-Y trong phân tử hoặc ion}} \quad (9.2)$$

- Độ dài liên kết: là khoảng cách giữa 2 hạt nhân của 2 tử tham gia lk.

o Liên hệ: bậc liên kết càng lớn, thì độ dài liên kết tương ứng càng nhỏ, liên kết đó càng bền.

- Năng lượng liên kết: là n/l cần để phá vỡ lk đó trong ptử.

o Liên hệ: năng lượng liên kết càng lớn thì liên kết đó càng bền

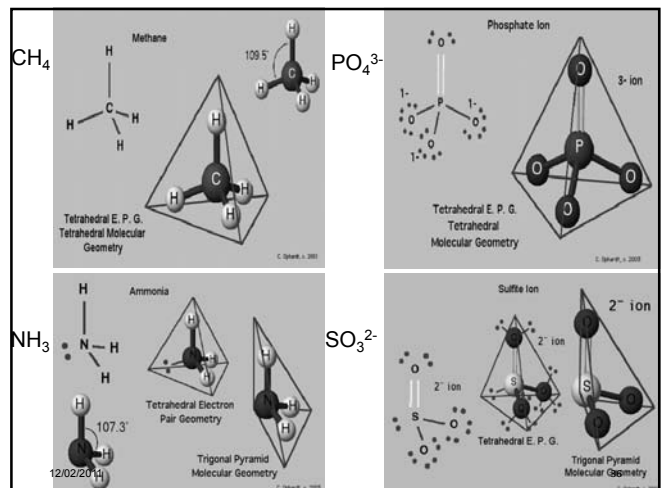
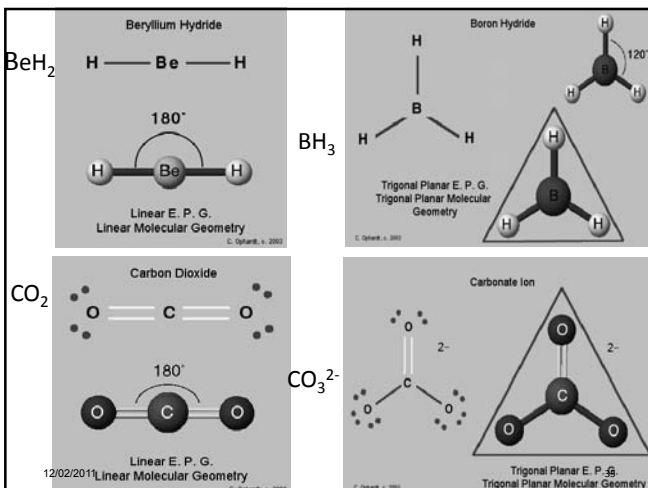


### BT chương 9:

11, 13, 19, 21, 33, 35, 45, 47, 51, 53.

### Bài sau: Chương 10

### Liên kết và cấu tạo phân tử: Sự lai hóa obitan và obitan phân tử



# HÓA HỌC ĐẠI CƯƠNG

GV: Lê Minh Thành

2/12/2011 1

## Chương 10

Liên kết và cấu tạo phân tử:  
Sự lai hóa obitan và obitan phân tử

2/12/2011 2

### 10.1. Obitan và các lý thuyết về liên kết

- Khái niệm về obitan nguyên tử, obitan phân tử....
- Phân loại obitan nguyên tử (AO): s, p, d, f ...
- Phân loại obitan phân tử (MO):  $\pi$ ,  $\sigma$ ...
- Hai thuyết hiện đại giải thích liên kết hóa học dựa trên obitan :
  - thuyết liên kết hóa trị (**thuyết VB**, valent bond)
  - thuyết obitan phân tử (**thuyết MO**, molecular orbital)

2/12/2011 3

### 10.2. Thuyết liên kết hóa trị (thuyết VB)

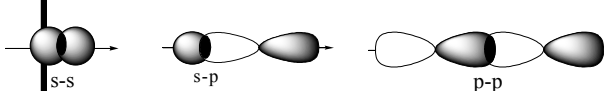
#### 10.2.a. Mô hình xen phủ obitan

- Luận điểm chính của thuyết VB: liên kết hóa học được sinh ra do sự xen phủ các obitan nguyên tử.
- Khái niệm xen phủ AO: sự đan xen hai hay nhiều vùng obitan vào nhau tạo thành khu vực có mật độ electron cao hơn giữa hai hay nhiều nguyên tử.
- Các hình thức xen phủ:
  - Xen phủ trực: tạo liên kết xíchma  $\sigma$ .
  - Xen phủ bên: tạo liên kết pi  $\pi$  hoặc liên kết delta  $\delta$

2/12/2011 4

- Xen phủ trực: là sự xen phủ trong đó vùng xen phủ nằm trên trục liên kết, là đường nối tâm 2 nguyên tử tham gia liên kết.

- Các kiểu xen phủ trực:



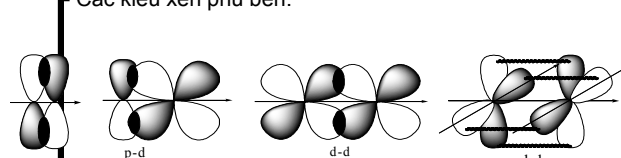
+ Xen phủ trực tạo ra liên kết xíchma  $\sigma$ , là liên kết bền vững nhất, bởi vùng xen phủ nằm trên đường nối tâm giữa 2 hạt nhân của nguyên tử.

+ Các liên kết đơn trong các phân tử đều là liên kết xíchma

2/12/2011 5

- Xen phủ bên: là sự xen phủ trong đó vùng xen phủ nằm 2 bên trục liên kết, hoặc song song với trục liên kết (đường nối tâm 2 nguyên tử tham gia liên kết).

- Các kiểu xen phủ bên:



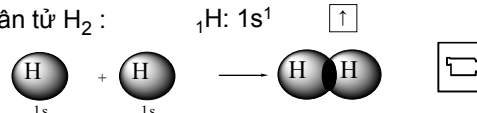
+ Xen phủ bên tạo ra liên kết pi  $\pi$  và liên kết delta  $\delta$ , loại liên kết này kém bền hơn so với liên kết xíchma  $\sigma$  do vùng xen phủ xa hai hạt nhân hơn.

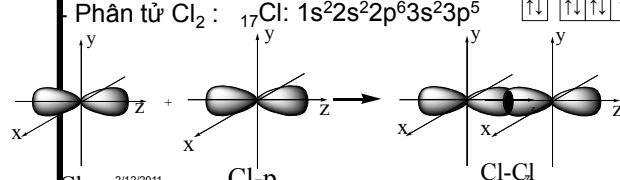
2/12/2011 6

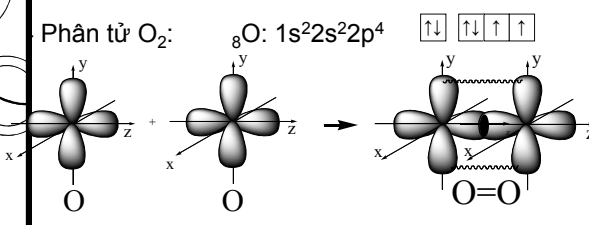


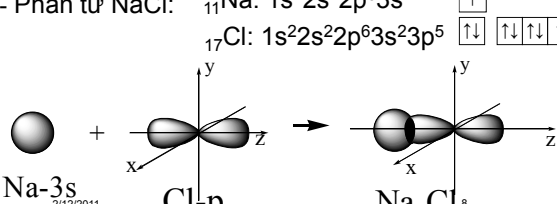
**Cách giải thích liên kết hóa học theo thuyết VB:**













- Viết cấu hình e nguyên tử tham gia liên kết.
- Xác định các orbital chứa e độc thân.
- Tiến hành xen phủ các orbital để tạo liên kết.

**Phân tử H<sub>2</sub>:**  $1\text{H}: 1s^1$  


**Phân tử Cl<sub>2</sub>:**  $17\text{Cl}: 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$  

**Phân tử O<sub>2</sub>:**  $8\text{O}: 1s^2 2s^2 2p^4$  

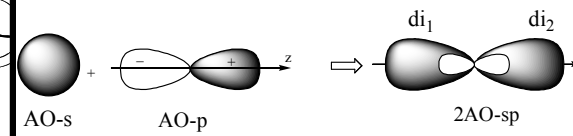
**Phân tử NaCl:**  $11\text{Na}: 1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$   $17\text{Cl}: 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$  

	+		→		$\text{H}-\text{H}$ 
<b>H</b> 1s orbital of hydrogen		<b>H</b> 1s orbital of hydrogen		<b>H<sub>2</sub></b> Overlap creates H—H σ bond	
	+		→		$\text{H}-\text{F}:$ 
<b>H</b> 1s orbital of hydrogen		<b>F</b> 2p orbital of fluorine		<b>HF</b> Overlap creates H—F sigma (σ) bond	
	+		→		$:\text{F}-\text{F}:$ 
<b>F</b> 2p orbital of fluorine		<b>F</b> 2p orbital of fluorine		<b>F<sub>2</sub></b> Overlap creates F—F sigma (σ) bond	

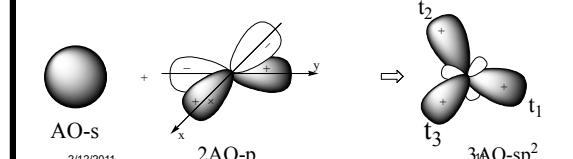
**10.2.b. Sự lai hóa các orbital nguyên tử**

- Khái niệm: lai hóa là sự trộn lẫn các orbital có hình dạng khác nhau và năng lượng gần nhau, để tạo ra các orbital đồng nhất tham gia vào liên kết hóa học.
- Đặc điểm của quá trình lai hóa:
  - Lai hoá là một khái niệm giả định được dùng để giải thích các kết quả thực nghiệm.
  - Chỉ xảy ra trong 1 nguyên tử.
  - Các orbital hoá trị tham gia lai hóa phải có năng lượng gần nhau ...
  - Số orbital lai hoá thu được = tổng số các orbital tham gia tổ hợp.
  - Dạng hình học của orbital lai hoá luôn có 1 đầu nở rộng và 1 đầu thu hẹp: 

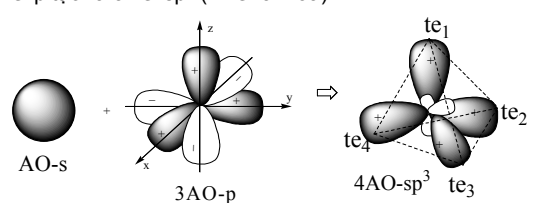
**Lai hóa sp:** lai hoá trong đó 1orbital-s tổ hợp tuyến tính với 1orbital-p, tạo ra 2orbital-sp.



**Lai hóa sp<sup>2</sup>:** lai hoá trong đó 1orbital-s tổ hợp tuyến tính với 2 orbital-p tạo ra 3orbital-sp<sup>2</sup>.



**Lai hóa sp<sup>3</sup>:** lai hoá trong đó AO-s tổ hợp tuyến tính với 3AO-p tạo ra 3AO-sp<sup>3</sup> (4AO lai hóa).

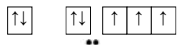
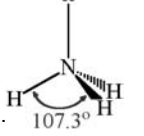

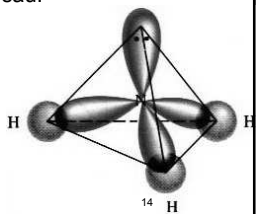


Nếu kết hợp thêm các orbital d vào quá trình lai hóa, ta có thêm kiểu lai hóa như: sp<sup>3</sup>d, sp<sup>3</sup>d<sup>2</sup>...

- Cách giải thích liên kết hóa học theo thuyết VB, có kết hợp thuyết lai hóa:
  1. Viết cấu hình e nguyên tử tham gia liên kết, xác định obitan chứa e độc thân.
  2. Vẽ cấu trúc Lewis cho phân tử đó.
  3. Xác định hình học cặp e cho nguyên tử trung tâm.
  4. Chỉ định kiểu lai hóa cho nguyên tử trung tâm mà phù hợp với hình học cặp e đó.
  5. Tiến hành xen phủ để tạo liên kết giữa các obitan thuần khiết và obitan lai hóa.

2/12/2011 13

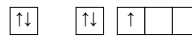
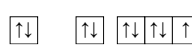
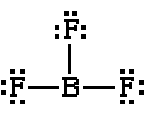
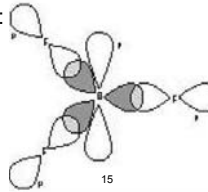
Ví dụ: giải thích liên kết trong NH<sub>3</sub> theo VB.

- o Cấu hình e:  ${}_{7}\text{N}: 1s^2 2s^2 2p^3$ . 
- o Cấu trúc Lewis: 
- o Hình học cặp e của N là tứ diện.
- o Vậy N đã lai hóa sp<sup>3</sup>, là sự tổ hợp..... 
- o Sự xen phủ trong NH<sub>3</sub> như sau: 

Ví dụ: giải thích liên kết trong CH<sub>4</sub> (xem kết quả)

2/12/2011 14

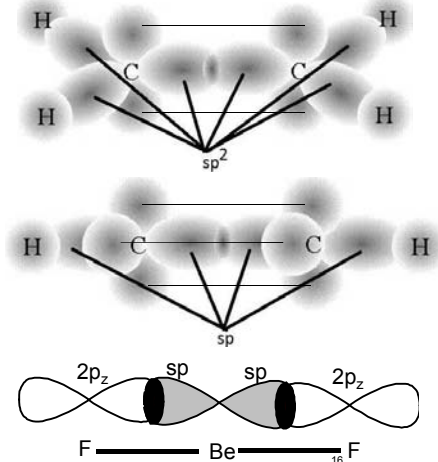
Ví dụ: giải thích liên kết trong BF<sub>3</sub> theo VB.

- Cấu hình e:  ${}_{5}\text{B}: 1s^2 2s^2 2p^1$ . 
- ${}_{9}\text{F}: 1s^2 2s^2 2p^5$  
- Cấu trúc Lewis: 
- Hình học cặp e của B là tam giác...
- Vậy B đã lai hóa sp<sup>2</sup>, tổ hợp ...và...
- Sự xen phủ trong BF<sub>3</sub> như sau: 

Câu hỏi: hãy giải thích liên kết trong các phân tử NO<sub>3</sub><sup>-</sup> theo VB?

2/12/2011 15

- Một số hình ảnh liên kết trong phân tử được giải thích theo thuyết VB:


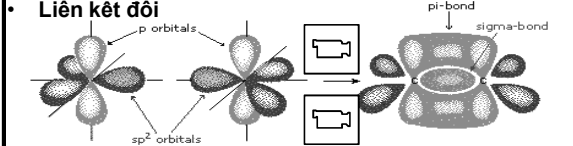
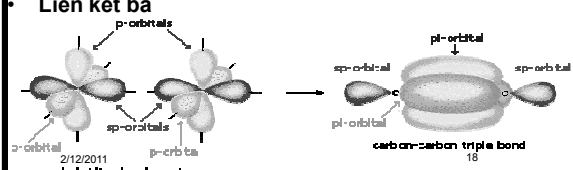


2/12/2011 16

10.2.c. Liên kết đơn và liên kết bội theo thuyết VB

- Phân loại:
  - Liên kết đơn: do sự 1 xen phủ trục tạo thành, chỉ gồm liên kết xíchma  $\sigma$ .
  - Liên kết đôi: do 1 xen phủ trục và 1 xen phủ bên tạo thành ( $1\sigma + 1\pi$ ).
  - Liên kết ba: do 1 xen phủ trục và 2 xen phủ bên ( $1\sigma + 2\pi$ ).
- Nhận xét:
  - Liên kết pi chỉ hình thành khi có sự xen phủ bên của các obitan p, d không tham gia lai hóa.
  - Một cấu trúc Lewis đã có liên kết bội thì nguyên tử tham gia liên kết phải có lai hóa sp<sup>2</sup> hoặc sp.

2/12/2011 17

- Liên kết đơn 
- Liên kết đôi 
- Liên kết ba 

2/12/2011 18

10.2.d. Đồng phân cis-trans

Nhận xét:

- > Các liên kết đơn dễ dàng xoay quanh trục của nó, tạo ra các cấu dạng khác nhau (ở ngay nhiệt độ phòng).
- > Các liên kết đôi khi xoay quanh trục của nó, đòi hỏi năng lượng cao hơn nhiều, và không thể xảy ra ở nhiệt độ phòng, do đó tồn tại 2 dạng khác nhau trong không gian → xuất hiện đồng phân cis-trans.

• Kết luận: sự sắp xếp khác nhau của các nguyên tử xung quanh mặt phẳng chứa liên kết đôi trong không gian, tạo thành đồng phân cis-trans.



2/12/2011

19

10.3. Thuyết orbital phân tử (thuyết MO)

10.3.a. Nguyên lý cơ bản của thuyết

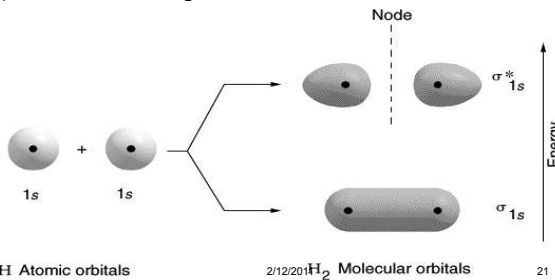
- Tổng số các MO thu được luôn bằng tổng số các AO tham gia tổ hợp.
- Orbital liên kết (MO) có năng lượng thấp hơn orbital gốc và orbital phản liên kết (MO\*) có năng lượng cao hơn.
- Các electron của phân tử được điền vào các MO theo thứ tự năng lượng tăng dần, theo nguyên lý loại trừ Pauli và quy tắc Hund.
- Các AO kết hợp để tạo MO hiệu quả nhất khi nó có mức năng lượng bằng nhau

2/12/2011

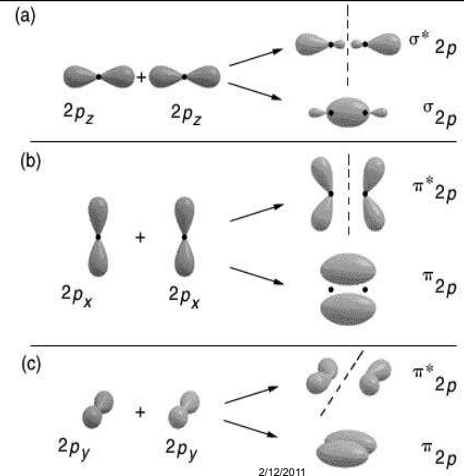
20

10.3.b. Sự hình thành các MO và MO\*

- Cứ 2 AO (s-s hoặc p-p) khi tổ hợp với nhau, sẽ tạo thành 1 MO liên kết và 1 MO phản liên kết (MO\*).
- Đặt tên cho các MO và MO\* tạo ra theo 2 dạng xen phủ ( $\sigma$ ,  $\pi$ ) và nếu có MO không liên kết sẽ là n.

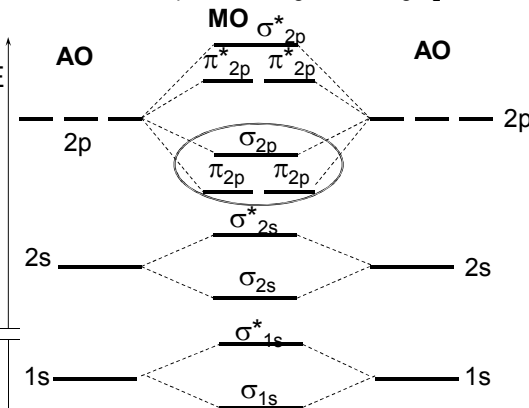


21



22

Cách vẽ cho các phân tử đồng hạch dạng X<sub>2</sub>.



Chú ý: đối với O<sub>2</sub> và F<sub>2</sub> thì  $\sigma_{2p}$  có năng lượng thấp hơn  $\pi_{2p}$

2/12/2011

10.3.c. Các bước để viết cấu hình e cho phân tử, ion

- 1) Viết cấu hình e cho các nguyên tử tham gia liên kết.
- 2) Vẽ giản đồ năng lượng của quá trình tổ hợp các AO để tạo ra các MO và MO\*.
- 3) Đặt tên cho các MO và MO\* tạo ra.
- 4) Điền electron theo thứ tự tăng dần năng lượng, tổng số e điền vào các MO và MO\* bằng tổng số e các AO có.
- 5) Kết luận cấu hình electron của phân tử từ giản đồ trên.
- 6) Bậc liên kết = 1/2 (tổng số e ở MO – tổng số e ở MO\*).
- 7) Kết luận về sự tồn tại phân tử, về các liên kết có trong phân tử đó...

2/12/2011

24

**- Cách giải thích liên kết theo thuyết MO: ví dụ cho He<sub>2</sub>**

- + Cấu hình e cho nguyên tử He:  $1s^2$
- + Vẽ giản đồ MO cho phân tử He<sub>2</sub>.

+ Cấu hình e cho phân tử He<sub>2</sub>:  $(\sigma_{1s})^2(\sigma^*_{1s})^2$ .

+ Bậc liên kết cho phân tử He<sub>2</sub> =  $\frac{1}{2}(2 - 2) = 0$

→ vậy phân tử He<sub>2</sub> không tồn tại

25

**- Cách giải thích liên kết theo thuyết MO: ví dụ cho phân tử N<sub>2</sub>**

+ Cấu hình e cho nguyên tử N:  $1s^2 2s^2 2p^3$

+ Cấu hình e cho N<sub>2</sub>:  $(\sigma_{1s})^2(\sigma^*_{1s})^2(\sigma_{2s})^2(\sigma^*_{2s})^2(\pi_{2p})^2(\pi^*_{2p})^2(\sigma_{2p})^2$

+ Bậc liên kết =  $\frac{1}{2}(10 - 4) = 3$  → vậy phân tử N<sub>2</sub> tồn tại lk ba

26

**- Cách giải thích liên kết theo MO: ví dụ cho phân tử Li<sub>2</sub>**

- Giản đồ MO: cho phân tử Li<sub>2</sub>.
- Cấu hình e cho phân tử Li<sub>2</sub>:  $(\sigma_{1s})^2(\sigma^*_{1s})^2(\sigma_{2s})^2$
- Bậc liên kết cho phân tử Li<sub>2</sub> = 1

27

**• Câu hỏi: Hãy viết cấu hình electron của O<sub>2</sub><sup>+</sup>, N<sub>2</sub><sup>+</sup>. Từ đó mô tả bậc liên kết và từ tính của chúng?**

- + Cấu hình e cho O<sub>2</sub>:  $(\sigma_{1s})^2(\sigma^*_{1s})^2(\sigma_{2s})^2(\sigma^*_{2s})^2(\sigma_{2p})^2(\pi_{2p})^2(\pi^*_{2p})^1(\pi^*_{2p})^1$
- + Cấu hình e cho N<sub>2</sub>:  $(\sigma_{1s})^2(\sigma^*_{1s})^2(\sigma_{2s})^2(\sigma^*_{2s})^2(\pi_{2p})^2(\pi_{2p})^2(\sigma_{2p})^2$
- + Từ đó suy ra cấu hình của ion:
  - Cấu hình e cho O<sub>2</sub><sup>+</sup>:  $(\sigma_{1s})^2(\sigma^*_{1s})^2(\sigma_{2s})^2(\sigma^*_{2s})^2(\sigma_{2p})^2(\pi_{2p})^2(\pi_{2p})^2(\pi^*_{2p})^1$
  - Cấu hình e cho N<sub>2</sub><sup>+</sup>:  $(\sigma_{1s})^2(\sigma^*_{1s})^2(\sigma_{2s})^2(\sigma^*_{2s})^2(\pi_{2p})^2(\pi_{2p})^2(\sigma_{2p})^1$
- + Từ cấu hình của ion suy ra bậc liên kết và từ tính của ion đó:
  - Cả hai ion O<sub>2</sub><sup>+</sup>, N<sub>2</sub><sup>+</sup> đều có e độc thân, nên chúng thuận từ.
  - Ion O<sub>2</sub><sup>+</sup> có bậc lk = 2,5 ; còn ion N<sub>2</sub><sup>+</sup> có bậc lk cũng = 2,5.

28

**10.4. So sánh hai thuyết VB và MO**

- ❖ **Thuyết VB.**
  - cung cấp cho ta một bức tranh mô hình về cấu tạo phân tử và liên kết.
  - đặc biệt hữu ích cho phân tử khi xem xét nhiều nút.
  - mô tả tốt về liên kết đối với các phân tử ở trạng thái cơ bản, hoặc trạng thái có năng lượng thấp nhất.
- ❖ **Thuyết MO.**
  - được sử dụng khi cần một bức tranh về số lượng liên kết rất cần thiết nếu chúng ta muốn mô tả phân tử ở trạng thái kích thích có năng lượng cao
  - đối với một vài phân tử như NO và O<sub>2</sub>, thuyết obitan phân tử là thuyết duy nhất mô tả được liên kết thật sự trong chúng.

29

**BT chương 10:**

1, 3, 5, 11, 15, 17, 23, 29, 31, 41.

**Bài sau: Chương 12 (Tập II)**

**Trạng thái khí**

30

# HÓA HỌC ĐẠI CƯƠNG

GV: Lê Minh Thành

2/12/2011

1

## Chương 12 TRẠNG THẠY KHÍ

2/12/2011

2

### 12.1. Các tính chất của chất khí

#### a. Áp suất khí

• Khái niệm: lực tác dụng của các phân tử khí lên thành bình chứa trên 1 đơn vị diện tích

• Biểu thức: ...

• Đơn vị đo:

• Pa, KPa	• mmHg
• N/m <sup>2</sup>	• bar
• atm, at	• torr...

• Mỗi liên hệ quy đổi:

1 atm	= 760 mmHg	= 101,3 kPa	= 1,013 bar	= 760 torr
1 bar	= 10 <sup>5</sup> Pa			

2/12/2011

3

#### b. Nhiệt độ

• Khái niệm: là tính chất vật lý của vật chất, (là thang đo độ "nóng" và "lạnh"). Vật chất có nhiệt độ cao hơn thì nóng hơn.

• Đơn vị đo:

°C	K	°F.....
----	---	---------

• Mỗi liên hệ quy đổi:

○ T (K) = t (°C) + 273,15
○ T (°F) = T (K)*1,8 – 459,67 = T (°C)*1,8 + 3,2.

❖ Chú ý: Trong hệ đo lường quốc tế, nhiệt độ được đo bằng đơn vị độ K.

❖ Trong đời sống ở Việt Nam và nhiều nước, nó được đo bằng độ C (1 độ C bằng 274,15 độ K).

❖ Trong đời sống ở nước Anh, Mỹ và một số nước, nó được đo bằng độ F (1 độ F bằng 255,927778 độ K).

2/12/2011

4

Updated today  
London  
Current condition  
**43 °F**  
Real Feel: 37...43 °F  
Partly Cloudy  
Pressure: 30.03 inHg  
Humidity: 70 %  
Wind: NW 12 mph

Câu hỏi: Hãy đổi nhiệt độ ở London theo thang độ F ở trên sang nhiệt độ Celsius?  
HD:  
• 43 °F → 22,1°C

2/12/2011

5

### 12.2. Các định luật về chất khí

#### 12.2.a. Định luật Boyle

• Nội dung: thể tích của một khối lượng khí xác định tại một nhiệt độ cố định tỷ lệ nghịch với áp suất do khí đó tạo ra

• Biểu thức:  $P \sim 1/V$

(T và n không đổi)

• Hệ quả: 
$$\frac{P_1}{P_2} = \frac{V_2}{V_1} \quad (12.1)$$

• Câu hỏi: hãy đưa ra ví dụ minh họa định luật Boyle?



Robert Boyle (1627 - 1691)



2/12/2011

### 12.2.b. Định luật Charles

- Nội dung: tại một áp suất không đổi, với một lượng khí cho trước, thể tích của lượng khí đó tỉ lệ thuận với nhiệt độ.

• Biểu thức:  $V \sim T$   
( $n$  và  $P$  không đổi)

• Hệ quả:  $\frac{V_1}{V_2} = \frac{T_1}{T_2}$  (12.2)



Jacques Charles (1746-1823)

- **Câu hỏi:** Một quả bóng được bơm đầy khí heli đến thể tích 45lít ở nhiệt độ phòng (25°C). Làm lạnh quả bóng đến -10°C, thể tích mới của quả bóng là bao nhiêu? Coi áp suất không đổi

### 12.2.c. Định luật khí tổng quát:

- Nội dung: là sự kết hợp định luật Boyle và định luật Charles.

• Biểu thức:  $V \sim T$  và  $V \sim 1/P$  ( $n$  không đổi)

• Hệ quả:  $\frac{P_1 V_1}{T_1} = \frac{P_2 V_2}{T_2}$  (12.3)

❖ Phương trình này được gọi là định luật khí tổng quát, hay định luật khí kết hợp.

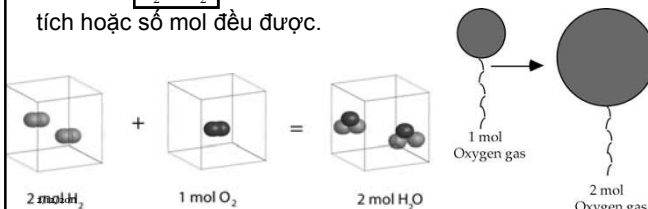
- **Câu hỏi:** Ta có một bình trụ 22 lít chứa khí Heli ở áp suất là 150 atm và nhiệt độ 31°C. Ta có thể bơm được bao nhiêu quả bóng, mỗi quả 5 lít khí áp suất bên ngoài là 755 mmHg và nhiệt độ là 22°C?

### 12.2.d. Định luật Avogadro

- Nội dung: những thể tích khí bằng nhau ở cùng một điều kiện nhiệt độ và áp suất sẽ có số hạt bằng nhau.

• Biểu thức:  $V \sim n$   
( $T$  và  $P$  không đổi)

- Hệ quả:  $\frac{V_1}{V_2} = \frac{n_1}{n_2}$  → trong phản ứng chất khí, tính theo thể tích hoặc số mol đều được.



### 12.2.e. Định luật khí lí tưởng

- Nội dung: là sự kết hợp của 3 định luật: Boyle, Charles, và Avogadro.

• Biểu thức:  $V \sim n/(T.P) \rightarrow PV = nRT$  (12.4).

- Chú ý:  $R = 0,082$  (atm.l/mol.K) khi  $P$  (atm)

$R = 8,413$  (J/mol.độ)

$R = 1,987$  (cal/mol.độ)

$R = 62,32$  (mmHg.l/mol.độ) khi  $P$  (mmHg)

- Khí lí tưởng:** là một loại chất khí tưởng tượng chứa các hạt giống nhau có kích thước vô cùng nhỏ so với thể tích của khối khí và không tương tác với nhau, chúng chỉ va chạm đàn hồi với tường bao quanh khối khí.

#### Phân loại khí lí tưởng:

- khí lí tưởng cổ điển, tuân thủ thống kê Maxwell-Boltzmann
- khí lí tưởng lượng tử tuân thủ thống kê Bose.
- khí lí tưởng lượng tử tuân thủ thống kê Fermi.

- Khí thực:** là chất khí có kể đến kích thước của phân tử và thế năng tương tác giữa chúng.

- Đặc điểm khí thực:** Khí thực ở trạng thái áp suất cao và nhiệt độ thấp, lực tương tác giữa các hạt trong khí (các phân tử hay nguyên tử) có ảnh hưởng đáng kể trong các tính chất của khí

### 12.2. f. Khối lượng riêng của khí

- Khái niệm: là một đặc tính về mật độ của vật chất đó, là đại lượng đo bằng thương số giữa khối lượng  $m$  của vật chất (nguyên chất) và thể tích  $V$  của vật.

• Biểu thức:  $d = \frac{m}{V} = \frac{P.M}{R.T}$  (12.5)


- Hệ quả: tính khối lượng mol phân tử khi biết  $P$ ,  $V$ ,  $T$ ,  $m$  của khí đó.

$n = \frac{PV}{RT}$        $M = \frac{m}{n}$  (g/mol)

- Câu hỏi:** Khối lượng riêng của một khí chưa xác định là 5,02 g/lít ở 15°C và 745 mmHg. Hãy tính khối lượng mol phân tử khí

### 12.3. Hỗn hợp khí và áp suất riêng phần

- Định luật Dalton: một hỗn hợp có nhiều khí khác nhau, mỗi loại khí sẽ tạo ra một áp suất riêng phần khác nhau, áp suất chung của hỗn hợp khí là tổng các áp suất riêng phần.
- Biểu thức:
 
$$P_{\text{toàn phần}} = P_1 + P_2 + P_3 + \dots \quad (12.6)$$
- Hệ quả: đưa ra khái niệm nồng độ phần mol
 
$$X_A = \frac{n_A}{n_{\text{hh}}}$$
- Áp suất riêng phần:
 
$$P_A = X_A \cdot P_{\text{toàn phần}} \quad (12.8)$$



*John Dalton (1766-1844)*

2/12/2011

- Câu hỏi:** Khi trộn 71 gam khí Clo với 64 gam khí oxi. Nếu áp suất toàn phần của hỗn hợp là 800 mmHg.
  - Áp suất riêng phần của mỗi khí là bao nhiêu?
  - Nồng độ phần mol của mỗi khí là bao nhiêu?
- HD:
  - Xác định xem có phản ứng hóa học xảy ra ko?
  - Tính số mol khí clo, số mol khí oxi, từ đó tính số mol hh
  - Áp dụng công thức tính áp suất riêng phần, nồng độ phần mol:
 
$$P_i = X_i \cdot P_{\text{toàn phần}} \quad X_A = \frac{n_A}{n_{\text{hh}}}$$

2/12/2011

### 12.4. Thuyết động học phân tử khí

#### 12.4.a. Nội dung cơ bản:

- Chất khí được cấu tạo từ các phân tử riêng rẽ, có kích thước rất nhỏ so với khoảng cách giữa chúng.
- Các phân tử khí chuyển động hỗn loạn không ngừng chuyển động này càng nhanh thì nhiệt độ chất khí càng cao.
- Khí chuyển động hỗn loạn các phân tử khí va chạm vào nhau và va chạm vào thành bình và không mất năng lượng.
- Mỗi phân tử va chạm vào thành bình tác dụng lên thành bình một lực không đáng kể, nhưng vô số phân tử khí va chạm vào thành bình tác dụng lên thành bình một lực đáng kể, lực này gây ra áp suất của chất khí lên thành bình.

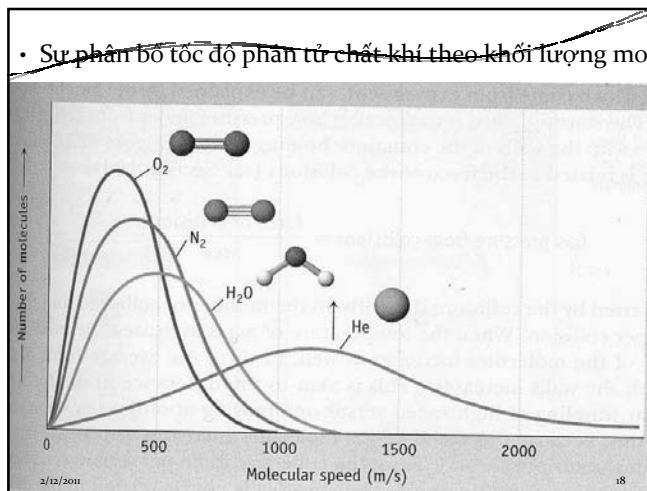
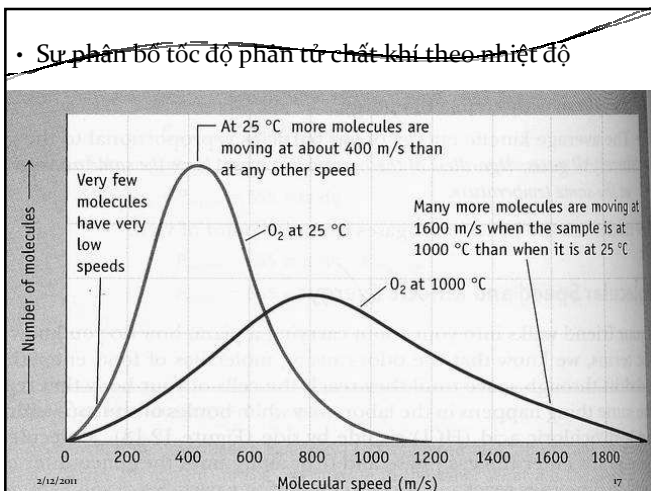
2/12/2011

#### 12.4.b. Vận tốc phân tử chất khí và động năng

- Động năng của một phân tử khí:  $E_d = \frac{1}{2}(m \cdot v^2)$
- Động năng trung bình của một tập hợp nhiều phân tử khí:
 
$$\overline{E_d} = \frac{1}{2} m \overline{v^2}$$
- Từ thực nghiệm, động năng trung bình liên hệ với nhiệt độ theo biểu thức:
 
$$\overline{E_d} = \frac{3}{2} R \cdot T \quad (R = 8,3145 \text{ J/mol.K})$$
- Tốc độ bình phương trung bình:
 
$$C = \sqrt{\overline{v^2}} = \sqrt{\frac{3RT}{M}} \quad (12.9)$$

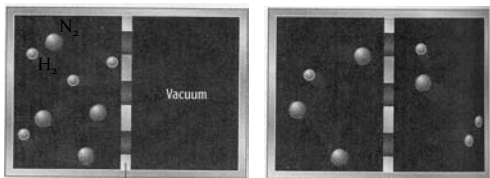
M: đơn vị kg/mol  
C: đơn vị m/s

2/12/2011



## 12.5. Sự khuếch tán và phóng lưu khí

- Khái niệm khuếch tán: là sự hòa trộn các phân tử của hai hoặc nhiều khí do chuyển động hỗn loạn của các phân tử khí đó vào nhau thành một hỗn hợp đồng nhất.
- Khái niệm phóng lưu: là sự chuyển động của một khí thông qua khe hở rất nhỏ từ bình chứa này sang bình chứa khác trong điều kiện áp suất thấp.



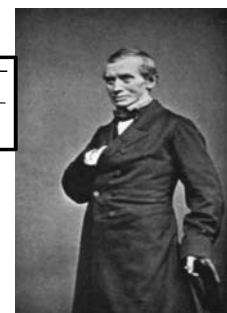
2/12/2011

19

- Hệ quả: tốc độ phóng lưu của một khí tỉ lệ nghịch với căn bậc hai của khối lượng phân tử khí đó (định luật Graham):

- Biểu thức định luật Graham:

$$\frac{\text{Tốc độ phóng lưu của khí 1}}{\text{Tốc độ phóng lưu của khí 2}} = \sqrt{\frac{M_2}{M_1}}$$



Thomas Graham (1805-1869)

2/12/2011

20

- Câu hỏi: Cho hai bình khí chứa lần lượt là nguyên tử Heli và phân tử N<sub>2</sub> ở 25 °C.

- Hãy tính tốc độ C của 2 khí trên.
- Bình khí nào có tốc độ phóng lưu nhanh hơn?

- HD:

- Sử dụng công thức:  $C = \sqrt{v^2} = \sqrt{\frac{3RT}{M}}$
- Với  $M_{\text{He}} = 4 \cdot 10^{-3} \text{ kg/mol}$ ,  $M_{\text{N}_2} = 28 \cdot 10^{-3} \text{ kg/mol}$ , giá trị  $R = 8,3145 \text{ J/mol.K}$ ,  $T = 25 + 273$ , ta thu được kết quả là..
- Sử dụng công thức của Graham để so sánh tốc độ phóng lưu 2 khí trên

2/12/2011

21

## BT chương 12

1, 11, 23, 27, 31, 39, 41, 47, 59, 65.

## Bài sau: Chương 13

### Lực hút liên phân tử, chất lỏng và chất rắn

2/12/2011

22



2/12/2011

23



## CHƯƠNG 13

### LỰC HÚT LIÊN PHÂN TỬ, CHẤT LỎNG VÀ CHẤT RẮN

2

2/12/2011

### 13.1. Các trạng thái của vật chất và thuyết động học phân tử

- Ở trạng thái rắn, các phân tử không thể chuyển động qua 1 phân tử khác
- Ở trạng thái lỏng, các phân tử chuyển động liên tục quanh các phân tử bên cạnh
- Lực để giữ các phân tử ở gần 1 phân tử khác trong trạng thái rắn hoặc lỏng, được gọi là lực hút liên phân tử.
- Thuyết động học phân tử chất khí giả định rằng các phân tử hoặc nguyên tử khí tồn tại khá tách biệt nhau và các hạt này có thể coi là độc lập với nhau.

3

2/12/2011

### 13.2. Lực hút liên phân tử

- Khái niệm: là lực liên kết các p.tử và giữ chúng gần nhau
- Lực hút liên phân tử gây ảnh hưởng đến các t/chất như:
  - > Nhiệt độ nóng chảy, nhiệt độ sôi...
  - > Năng lượng chuyển hóa giữa rắn – lỏng – khí của chất
  - > Khả năng hòa tan của rắn, lỏng, khí vào các dung môi.
  - > Xác định cấu trúc của các phân tử...
- Năng lượng của liên kết liên phân tử thường nhỏ hơn so với các loại liên kết cổ điển (liên kết ion, cộng hóa trị...)

4

2/12/2011

- Các dạng tương tác của lực hút liên phân tử chia theo đặc tính của phân tử (ion) đang tham gia liên kết → 4 dạng

Dạng liên kết liên phân tử	Năng lượng lk
Lực tương tác ion - lưỡng cực	40 – 600 kJ/mol
Tương tác lưỡng cực - lưỡng cực	5 – 25 kJ/mol
Lưỡng cực - lưỡng cực cảm ứng	2 – 10 kJ/mol
Lưỡng cực cảm ứng - lưỡng cực cảm ứng	0,05 - 40 kJ/mol

5

2/12/2011

### 13.2.a. Liên kết giữa: ion – lưỡng cực bất biến

- Xuất hiện khi hòa tan hợp chất ion vào một dung môi lưỡng cực. VD: hòa tan muối ăn vào nước....
- So sánh về độ bền liên kết:
 

liên kết ion-ion > liên kết ion-lưỡng cực > liên kết liên phân tử khác
- Lực hút liên kết ion – lưỡng cực có thể dùng phương trình Coulomb 3.1 để tính.

$$\text{lực tĩnh điện} = k \cdot \frac{(n^+ \cdot q_e)(m^- \cdot q_e)}{d^2}$$

6

2/12/2011

- Các yếu tố ảnh hưởng đến độ lớn của lực này:

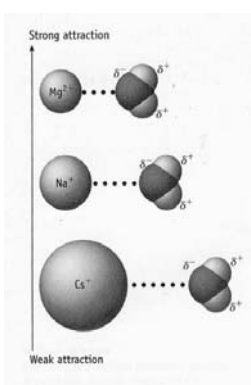
- > Khoảng cách ion và lưỡng cực:
- > Điện tích của ion liên kết:
- > Độ phân cực của phân tử lưỡng cực:

- Khi một hợp chất ion tan vào một dung môi phân cực, sẽ xảy ra quá trình liên kết liên phân tử giữa các ion và lưỡng cực đó, quá trình đó gọi là *quá trình solvat hóa* (nếu dung môi là nước thì gọi là *quá trình hydrat hóa*).
- Năng lượng tương ứng với quá trình hydrat được gọi là *năng lượng hydrat hóa* (enthalpi hydrat hóa,  $\Delta H_{\text{hydr}}$ ).

7

2/12/2011

- Câu hỏi:** Hãy so sánh năng lượng hydrat của quá trình hòa tan NaCl, CsCl và  $MgCl_2$  vào dung môi nước. Giải thích?



- Câu hỏi:** Giữa  $F^-$  và  $Cl^-$ , ion nào có năng lượng hydrat hóa âm cao hơn? Giải thích ngắn gọn tại sao.

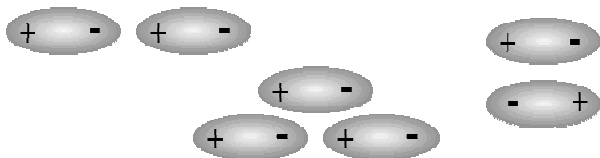
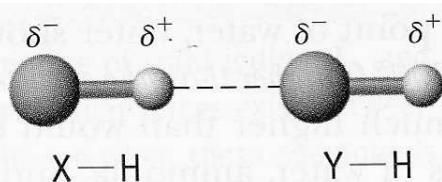
8

### 13.2.b. Liên kết giữa: lưỡng cực bất biến - lưỡng cực bất biến

- Xuất hiện khi hòa tan hợp chất lưỡng cực vào một dung môi lưỡng cực khác. VD: hòa tan khí amoniac vào nước....
- So sánh về độ bền liên kết:  
liên kết ion-lưỡng cực > liên kết lưỡng cực-lưỡng cực > liên kết lưỡng cực-lưỡng cực cảm ứng
- Dùng để giải thích các tính chất về nhiệt độ sôi, năng lượng bay hơi, khả năng hòa tan .... của các chất.

9

2/12/2011



Attractive Dipole-Dipole Interactions

2/12/2011

10

- Quy luật:

- > Độ phân cực của phân tử lưỡng cực càng lớn thì liên kết liên phân tử càng bền, năng lượng bay hơi càng cao ( $\Delta H_{bh}$ ) và điểm sôi càng cao ( $T^0_s$ ).
- > Các chất cùng tính phân cực thì dễ hòa tan vào nhau: chất phân cực dễ hòa tan vào dung môi phân cực...

- Câu hỏi:** Hãy so sánh các liên kết liên phân tử xuất hiện khi hòa tan khí  $H_2S$  vào dung môi nước?
- Câu hỏi:** Hãy so sánh khả năng hòa tan của khí oxi, khí hidroclorua và khí amoniac vào dung môi nước?

11

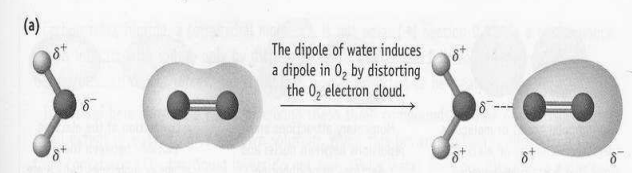
2/12/2011

### 13.2.c. Liên kết giữa: lưỡng cực bất biến - lưỡng cực cảm ứng

- Xuất hiện khi hòa tan hợp chất lưỡng cực vào một dung môi không cực hoặc ngược lại. VD: hòa tan khí  $Cl_2$  vào nước....
- So sánh về độ bền liên kết:  
liên kết lưỡng cực-lưỡng cực > liên kết lưỡng cực-cảm ứng > liên kết cảm ứng-cảm ứng
- Xuất hiện hiện tượng phân tử đang là không cực, do ảnh hưởng của phân tử có cực – trở thành có cực tạm thời (do cảm ứng), hiện tượng này gọi là lưỡng cực hóa (hay phân cực hóa)

12

2/12/2011



- Quy luật:

- > Khối lượng phân tử càng lớn thì khả năng phân cực càng cao (càng dễ bị phân cực cảm ứng).
- > Khả năng hòa tan của khí (mà phân tử không phân cực) tỉ lệ thuận với khối lượng phân tử của chúng.

- Câu hỏi:** Hãy so sánh khả năng hòa tan của khí Oxi, khí Hidro, khí Metan và khí Clo vào dung môi nước?

13

2/12/2011

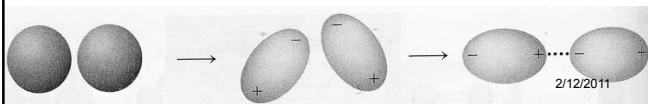
### 13.2.d. Liên kết giữa: lưỡng cực cảm ứng- lưỡng cực cảm ứng (lực phân tán London)

- Xuất hiện khi hòa tan hợp chất không cực vào một dung môi không cực. VD: hòa tan khí  $Cl_2$  vào benzen lỏng....
- So sánh về độ bền liên kết:



Là loại liên kết yếu nhất trong các loại liên kết liên phân tử

- Xuất hiện hiện tượng phân cực tạm thời (bị động) do sự chuyển động liên tục của đám mây e trong phân tử....



### 13.2.e. Liên kết hidro

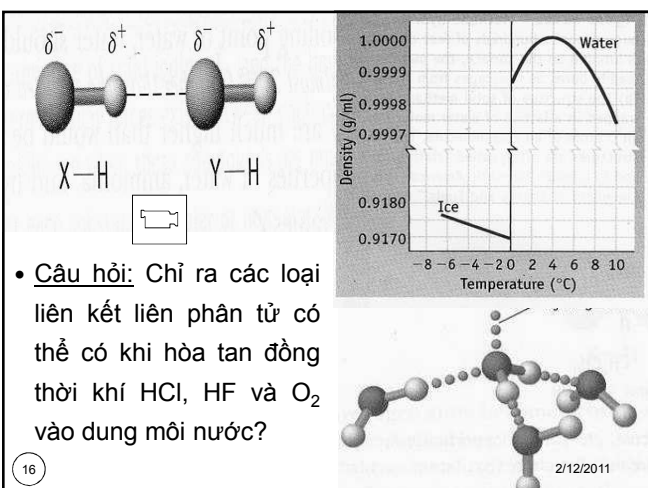
- Khái niệm: là liên kết giữa nguyên tử H của mỗi liên kết X-H và Y; trong đó X, Y là những nguyên tử có độ âm điện cao (O, N, F); còn Y thường có cặp e chưa liên kết.
- Bản chất liên kết hidro là một loại liên kết lưỡng cực – lưỡng cực đặc biệt.
- So sánh về độ bền liên kết:

Liên kết ion-lưỡng cực > liên kết hidro > liên kết lưỡng cực – lưỡng cực

- Liên kết hidro có thể xuất hiện giữa các phân tử với nhau hoặc trong một phân tử... nó ảnh hưởng đến  $T_s^o$ ,  $T_{nc}^o$ , khả năng hòa tan... và gây nên tính chất bất thường của nước về khối lượng riêng.

15

2/12/2011



- Câu hỏi: Chỉ ra các loại liên kết liên phân tử có thể có khi hòa tan đồng thời khí HCl, HF và  $O_2$  vào dung môi nước?

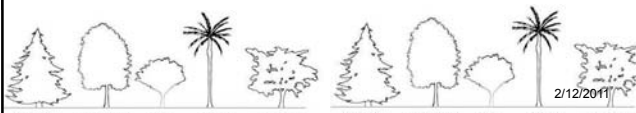
16

2/12/2011

### 13.2.f. Tổng kết các loại lk liên phân tử

- Câu hỏi: chúng ta vừa học mấy loại liên kết liên phân tử? Kể tên các loại đó?
- Câu hỏi: Độ bền các loại liên kết đó được xếp theo thứ tự giảm dần như thế nào?

liên kết ion-ion > liên kết ion-lưỡng cực > liên kết hidro > liên kết lưỡng cực-lưỡng cực > liên kết lưỡng cực-lưỡng cực cảm ứng > liên kết cảm ứng-cảm ứng



2/12/2011

### 13.3. Một số tính chất của chất lỏng

#### 13.3.a. Sự bay hơi

- Khái niệm sự bay hơi:...
  - > Năng lượng của quá trình bay hơi:  $\Delta H_{bh}$ .
- Khái niệm ngưng tụ: ...
- Đặc điểm: năng lượng của quá trình bay hơi phụ thuộc chặt chẽ vào các liên kết liên phân tử có trong chất lỏng đó.
- Câu hỏi: So sánh năng lượng bay hơi của các chất  $H_2O$ , HI, HF, HCl, HBr?

2/12/2011

18

#### 13.3.b. Áp suất hơi bão hòa

- Khái niệm: là áp suất hơi cân bằng của giữa pha lỏng và pha hơi khi nó được thiết lập trong hệ kín, trong hệ lúc này tốc độ bay hơi bằng với tốc độ ngưng tụ.
- Đặc điểm: Áp suất hơi bão hòa (tại nhiệt độ cho trước) càng cao thì khả năng bay hơi của hợp chất càng lớn.
- Áp suất hơi bão hòa tuân theo pt khí lý tưởng:

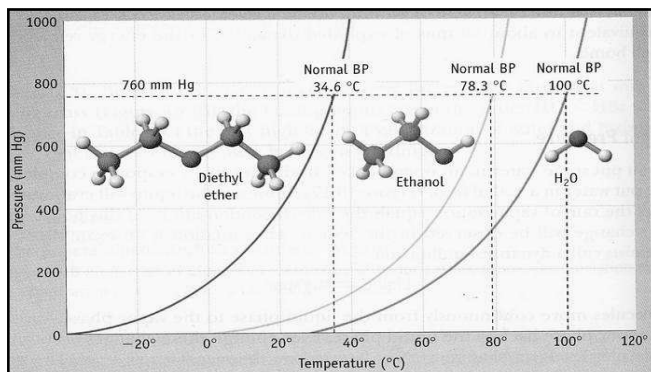
$$P.V = n.R.T$$

- Phương trình Clausius-Clapeyron đưa ra quan hệ áp suất hơi bão hòa và nhiệt bay hơi:

$$\ln P_{bh} = -\frac{\Delta H_{bh}^o}{RT} + C \quad (13.1)$$

19

2/12/2011



- **Câu hỏi:** Hãy so sánh nhiệt độ sôi của dietylete, ethanol và nước ở áp suất bão hòa 400mmHg?

20

2/12/2011

### 13.3.c. Điểm sôi

- Khái niệm: là nhiệt độ mà tại đó chất lỏng có áp suất hơi bão hòa bằng áp suất bên ngoài.
- Đặc điểm: Điểm sôi của cùng một chất sẽ càng thấp nếu áp suất bên ngoài của quá trình sôi càng thấp..

### 13.3.d. Nhiệt độ và áp suất tới hạn

- Nhiệt độ tới hạn là nhiệt độ của một chất tại thời điểm tới hạn (thời điểm mà sự phân chia giữa chất lỏng và dạng hơi biến mất)
  - Áp suất tới hạn là áp suất hơi bão hòa tại thời điểm tới hạn
- Chất tồn tại ở trạng thái này gọi là chất lỏng siêu tới hạn

21

## 13.4. Trạng thái rắn

- Liên kết hóa học trong chất rắn thường có liên kết ion, liên kết kim loại, liên kết cộng hóa trị, liên kết hydro, liên kết liên phân tử khác...
- Dạng cấu trúc: mạng tinh thể ion, tinh thể nguyên tử, tinh thể phân tử, mạng polime...
- Khái niệm mạng tinh thể: là một sự sắp xếp đặc biệt của các nguyên tử, phân tử hoặc ion trong một mạng lưới không gian 3 chiều theo các quy luật nhất định.

22

2/12/2011

- Ô đơn vị: là hình khối không gian nhỏ nhất, có tính đối xứng theo sự sắp xếp của các nguyên tử, ion, phân tử trong tinh thể đó.

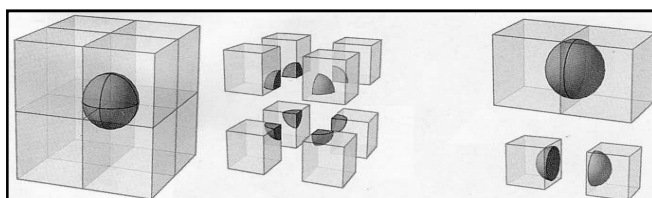


- Đặc điểm: nếu ta lặp lại ô đơn vị theo mọi hướng (bằng cách tịnh tiến) thì nó sẽ chiếm đầy không gian và sẽ tạo nên toàn tinh thể

- Sự đóng góp của 1 quả cầu nào đó vào ô đơn vị là:
  - Quả cầu ở trong lòng của ô đơn vị → đóng góp 1 quả.
  - Quả cầu ở bề mặt của ô đơn vị → đóng góp 1/2 quả.
  - Quả cầu ở cạnh của ô đơn vị → đóng góp 1/4 quả
  - Quả cầu ở góc của ô đơn vị → đóng góp 1/8 quả.

23

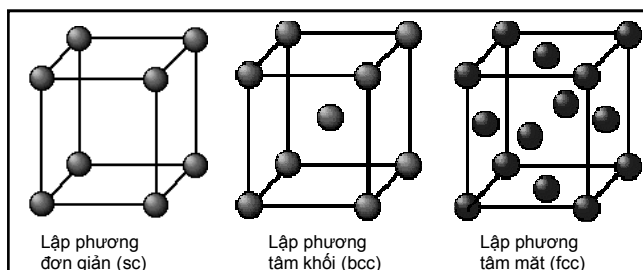
2/12/2011



- Khi sắp xếp các quả cầu đồng dạng trong tự nhiên, chúng thường tạo ra 3 loại hình cơ bản sau:
  - Lập phương đơn giản = sc.
  - Lập phương tâm khối = bcc.
  - Lập phương tâm mặt = fcc.
- Cả 3 loại hình này đều có các quả cầu ở đỉnh, ngoài ra còn có loại hình như: hcp, ccp...

2/12/2011

24



- Số quả cầu có mặt trong một ô đơn vị của mỗi loại hình:

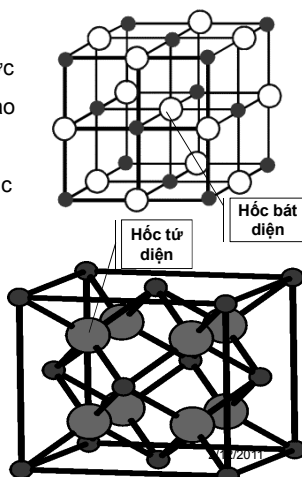
Dạng cấu trúc	Số quả cầu có trong mỗi ô đơn vị
Lập phương đơn giản	$1 = 8 \cdot (\frac{1}{8})$
Lập phương tâm khối	$2 = 1 + 8 \cdot (\frac{1}{8})$
Lập phương tâm mặt	$4 = 6 \cdot (\frac{1}{2}) + 8 \cdot (\frac{1}{8})$

2/12/2011

25

- Với hợp chất ion:

- > cấu trúc phụ thuộc kích thước các ion và thành phần cấu tạo của hợp chất.
- > Cấu trúc của đa số là sc hoặc fcc của các anion, còn các cation đặt trong hốc mạng.



26

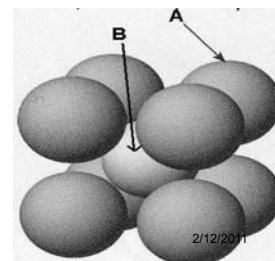
- Các loại hốc mạng:

- > Hốc tứ diện: 4 quả cầu bao quanh.
- > Hốc bát diện: 8 quả cầu bao quanh

- Cách suy ra CTPT của hợp chất từ 1 ô tế bào cho trước (bằng hình vẽ hoặc mô tả bằng lời):

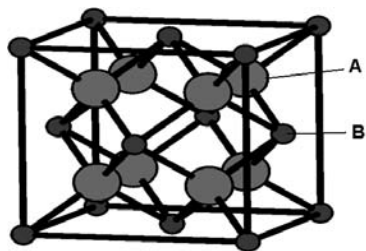
- > Vẽ đúng cấu trúc của ô tế bào (theo mô tả)
- > Tính số ion (+) và (-) trong một ô tế bào
- > Rút gọn tỉ lệ nguyên tử (hoặc ion) rồi kết luận công thức.

- Câu hỏi:** Xác định công thức đúng cho hợp chất tạo nên từ các ion A và B theo hình vẽ bên. Giải thích?



27

- Câu hỏi:** Xác định công thức đúng cho hợp chất tạo nên từ các ion A và B theo hình vẽ bên. Giải thích?

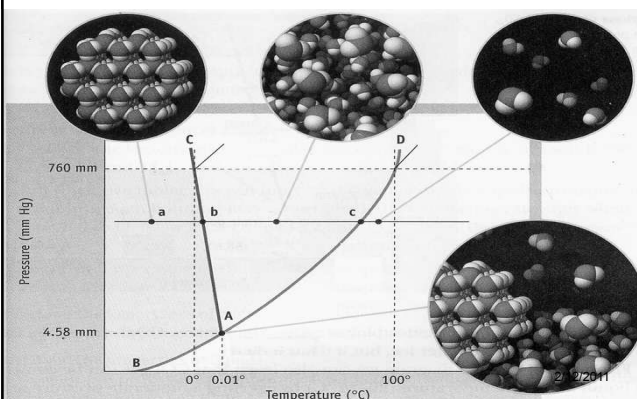


- HD:** Số ion A =  $8 \cdot \frac{1}{8} = 1$  ion.  
Số ion B =  $8 \cdot \frac{1}{8} + 6 \cdot \frac{1}{2} = 4$  ion

28

2/12/2011

### 13.5. Giản đồ trạng thái của nước



- Giản đồ trạng thái là hình minh họa mối liên hệ giữa các trạng thái của vật chất (r,l,k) ở các điều kiện nhiệt độ và áp suất khác nhau.
- Các đường cong trong giản đồ là điều kiện tồn tại trạng thái cân bằng giữa hai pha.
- Các điểm không nằm trên đường cong chỉ ra điều kiện tại đó tồn tại 1 pha duy nhất nào đó.
- Điểm giao của 2 đường cong là điểm ba, điểm đó xác định điều kiện để có cân bằng của cả 3 trạng thái vật chất.

30

2/12/2011

#### BT chương 13:

5, 7, 9, 13, 15, 25, 27, 39, 49, 53

#### Bài sau: Chương 14

### Dung dịch và tính chất của dd

31

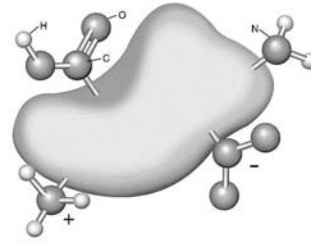
2/12/2011

# HÓA HỌC ĐẠI CƯƠNG

Gv: Lê Minh Thành

2/12/2011

1



## CHƯƠNG 14

# DUNG DỊCH & TÍNH CHẤT DUNG DỊCH

2/12/2011

2

### 14.1. Một số loại nồng độ dung dịch

- 1) Nồng độ mol/l ( $C_M$ ): là đại lượng biểu diễn số mol chất tan có trong một lít dung dịch.
  - Biểu thức: ...
  - Đơn vị đo: (mol/l) hoặc (M)
- 2) Nồng độ phần trăm (C%): biểu diễn tỉ lệ phần trăm của khối lượng chất tan so với khối lượng dd.
  - Biểu thức: ...
  - Đơn vị đo: (%)

2/12/2011

3

- 3) Nồng độ molan ( $C_m$ ): là đại lượng biểu diễn số mol chất tan có trong một kg dung môi.

o Biểu thức:

$$C_m = \frac{n_{ct} \text{ (mol)}}{m_{dm} \text{ (kg)}}$$

o Đơn vị đo: (m) hoặc (molan)

- 4) Nồng độ phần mol ( $X_i$ ): là tỉ số về số mol của chất cần tính chia cho tổng số mol các chất có trong dd.

o Biểu thức:

$$X_i = \frac{n_i \text{ (mol)}}{n_{hh} \text{ (mol)}}$$

o Đơn vị đo:

- 5) Nồng độ phần triệu ( $C_{ppm}$ ): là tỉ số về khối lượng của chất cần tính chia cho khối lượng dung môi.

o Biểu thức:

$$C_{ppm} = \frac{m_{ct} \text{ (gam)}}{m_{dd} \text{ (gam)}} \times 10^6$$

o Đơn vị đo: (ppm) hoặc (mg/l).

- 6) Nồng độ đương lượng ( $C_N$ ): là đại lượng biểu diễn số đương lượng chất tan có trong một lít dung dịch.

o Biểu thức:

$$C_N = \frac{\text{số đương lượng chất tan}}{V_{dd} \text{ (lt)}}$$

o Đơn vị đo: (N)

- Chú ý.

o Tổng nồng độ phần mol ( $X_i$ ) của tất cả các chất trong hệ = 1.

$$X_A + X_B + X_C + X_D + \dots = 1$$

o Số đương lượng được tính là:

$$\text{số đương lượng chất A} = \frac{m_A \text{ (g)}}{\vartheta_A}$$

o Đương lượng một chất được tính là:

$$\text{Đương lượng chất A} = \vartheta_A = \frac{M_A}{n^*}$$

2/12/2011

5

- 7) Liên hệ giữa các loại nồng độ đã học.

o Giữa C% và  $C_M$ :

$$C_M = \frac{C\% \cdot 10 \cdot D}{M_{ct}}$$

o Giữa  $C_N$  và  $C_M$ :

$$C_M = \frac{C_N}{n^*}$$

- Câu hỏi:** Nếu hòa tan 10 g đường ( $C_{12}H_{22}O_{11}$ ) vào một cốc nước (250 g). Hỏi nồng độ mol/l, nồng độ phần mol, nồng độ molan và nồng độ phần trăm. Cho  $D_{H_2O} = 1 \text{ g/ml}$ .

o HD:  $n_{ct}, V_{dd} \rightarrow C_M; C_m; \quad m_{dm}; n_{dm} \rightarrow X_{ct}, X_{dm};$   
 $m_{dm}, m_{ct} \rightarrow C\%.$

2/12/2011

6

• **Câu hỏi:** Cho dung dịch  $H_2SO_4$  0,5M. Hãy tính nồng độ phần mol, nồng độ molan, nồng độ đương lượng và nồng độ phần trăm. Cho  $D_{dd} = 1,1$  g/ml.

• HD: xét  $V_{dd} = 1$  lít;

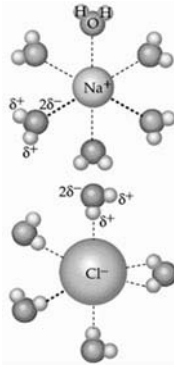
$$V_{dd}; C_M \rightarrow n_{ct} \rightarrow m_{ct};$$

$$D_{dd}; V_{dd} \rightarrow m_{dd} \rightarrow m_{dm} \rightarrow n_{dm} \rightarrow X_{ct}, X_{dm};$$

$$n_{ct}; m_{dm} \rightarrow C_m;$$

$$n^*; C_M \rightarrow C_N;$$

$$m_{ct}; m_{dd} \rightarrow C\%$$



2/12/2011

• Các khái niệm khác liên quan đến dung dịch.

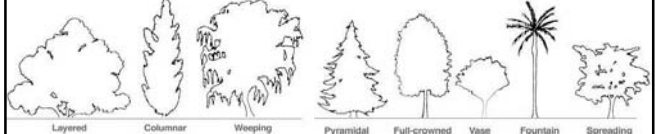
o **Độ tan (S):** là nồng độ chất tan khi chất tan đó nằm cân bằng với lượng chất rắn không tan trong dung dịch.

Đơn vị đo của độ tan: (M, mol/lít, g/lít, mg/lít).

o Dung dịch bão hòa: ...

o Dung dịch quá bão hòa: trong đó lượng chất tan nhiều hơn so với trong lượng dung dịch bão hòa.

o Dung dịch chưa bão hòa: ...



## 14.2. Các quá trình hòa tan

### 14.2.a. Sự hòa tan của chất lỏng trong chất lỏng

• **Qui luật thông dụng:** Các chất giống nhau (về độ phân cực) thì hòa tan tốt vào nhau.

• VD:

- o Etanol lỏng hòa tan ở mọi tỉ lệ trong trong nước, vì chúng đều là chất phân cực, hơn nữa chúng tạo ra được lk Hidro liên phân tử.
- o Octan  $C_8H_{18}$  lỏng và cloforom  $CCl_4$  lỏng đều không hòa tan trong nước, vì chúng là các chất không phân cực, dmôi nước phân cực.

o Octan  $C_8H_{18}$  lại cũng hòa tan trong  $CCl_4$  với mọi tỉ lệ, vì ....

### 14.2.b. Sự hòa tan chất rắn trong nước

• **Qui luật các chất giống nhau thì hòa tan vào nhau cũng được áp dụng cho việc hòa tan chất rắn vào trong lỏng.**

- Qui luật trên đôi lúc không hiệu quả, nhưng vẫn được dùng cho các chất chứa ion. VD: AgCl ko tan trong nước...
- Việc tạo thành liên kết hidro giữa phân tử dung môi với phân tử chất tan luôn làm tăng khả năng hòa tan. Các chất có lk hidro thường có nhóm -OH, -NH, -FH và tạo lk hidro với nước
- VD:
  - o Iốt,  $I_2$ , một chất rắn không phân cực, hòa tan hạn chế trong nước, nhưng hòa tan tốt trong dung môi không phân cực như  $CCl_4$ .
  - o Đường sucro, một chất rắn phân cực, không tan trong dung môi không phân cực, nhưng tan tốt trong nước

2/12/2011

10

### 14.2.c. Nhiệt hòa tan.

• Xét quá trình hòa tan chất rắn tinh thể ion vào nước:

- o Ban đầu các tinh thể chất rắn bị tách thành các ion đơn lẻ (thành pha khí). Năng lượng cần cung cấp để phá vỡ liên kết giữa các ion là  $-\Delta H_{\text{tinh thể}}$ .
- o Sau đó, các ion này bị hydrat hóa, tức là tạo ra lk giữa ion và các ptử nước. Năng lượng của quá trình này là  $\Delta H_{\text{hydrat hóa}}$ .
- o Năng lượng của quá trình tổng được gọi là nhiệt của dung dịch và là tổng của hai năng lượng thành phần:

$$\Delta H_{\text{dung dịch}} = -\Delta H_{\text{tinh thể}} + \Delta H_{\text{hydrat hóa}}$$

$$\Delta H^{\circ}_{\text{dung dịch}} = \sum[\Delta H^{\circ}_{\text{f, chất sản phẩm}}] - \sum[\Delta H^{\circ}_{\text{f, chất ban đầu}}]$$

2/12/2011

11

• Nhận xét:

- o Đại lượng  $\Delta H_{\text{tinh thể}}$  và  $\Delta H_{\text{hydrat hóa}}$  thường có giá trị âm.
- o Đa số quá trình hòa tan các muối là tỏa nhiệt, chỉ có một số ít quá trình là thu nhiệt.
- o Cả  $\Delta H_{\text{tinh thể}}$  và  $\Delta H_{\text{hydrat hóa}}$  đều bị ảnh hưởng bởi kích thước và điện tích của ion. Ion có kích thước nhỏ hơn sẽ có thể có năng lượng mạng lưới tinh thể  $\Delta H_{\text{tinh thể}}$  lớn hơn và năng lượng sonvat  $\Delta H_{\text{hydrat hóa}}$  lớn hơn.
- **Câu hỏi:** Trong các muối sau, muối nào có nhiệt hidrat hóa cao nhất:  $Li_2SO_4$ ,  $Na_2SO_4$ ,  $K_2SO_4$ ,  $Cs_2SO_4$ ?
- **Câu hỏi:** Sắp xếp độ tan các lỏng sau đây trong nước theo thứ tự tăng dần:  $C_6H_6$ ,  $Br_2$ ,  $C_2H_5OH$ ,  $CH_3COOH$ ?

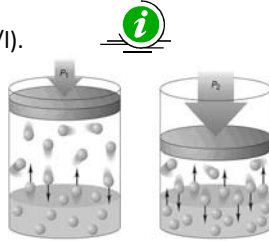
2/12/2011

12

### 14.3. Các yếu tố ảnh hưởng đến độ hòa tan chất khí: áp suất và nhiệt độ

#### 14.3.a. Ảnh hưởng của áp suất:

- Tuân theo định luật Henry: "Độ hòa tan của 1 chất khí nào đó trong chất lỏng tỉ lệ thuận với áp suất riêng của khí đó."
- Biểu thức:  $S_i = k_H \cdot P_i$
- Đơn vị đo của P (mmHg và S (mol/l)).
- Chú ý: Định luật Henry chỉ nghiệm đúng trong trường hợp chất tan không phản ứng hóa học với dung môi.



#### 14.3.b. Nhiệt độ ảnh hưởng lên độ hòa tan

- Tuân theo nguyên lý Le Chatelier: "Khi có sự thay đổi của bất kỳ yếu tố nào mà ảnh hưởng đến cân bằng, thì hệ sẽ thay đổi theo hướng sao cho làm giảm ảnh hưởng của sự tác động đó".
- Khí + dung môi lỏng  $\leftrightarrow$  dung dịch bão hòa  $\Delta H < 0$ 
  - Nếu tăng nhiệt độ thì cân bằng sẽ ....
  - Nếu giảm nhiệt độ thì cân bằng sẽ ....
- Qui luật: "Các chất giống nhau (về độ phân cực) thì hòa tan tốt vào nhau" vẫn nghiệm đúng cho chất khí.
- Câu hỏi: Sắp xếp độ tan các khí sau đây trong nước theo thứ tự tăng dần:  $H_2, O_2, HCl, NH_3, CH_4$ ?

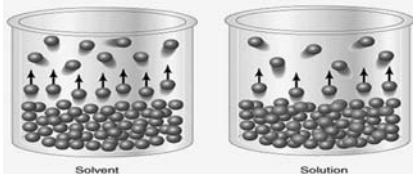
2/12/2011

14

### 14.4. Tính chất của dung dịch chứa chất tan không bay hơi, không điện ly

#### 14.4.a. Sự thay đổi áp suất hơi bão hòa: Định luật Raoult

- Khái niệm: Áp suất hơi bão hòa tại một nhiệt độ nào đó là áp suất của dạng hơi nằm cân bằng với chất lỏng.
- Áp suất hơi bão hòa của dung môi trên dung dịch ( $P_{dm}$ ) thấp hơn áp suất hơi bão hòa của dung môi nguyên chất.
- Quan hệ:  $P_{dm}$  tỉ lệ thuận với  $X_{dm}$ .



2/12/2011

- Định luật Raoult:  $P_{dm} = X_{dm} \times P_{dm}^0$  (14.5).

- Khi hòa tan một chất tan không bay hơi, không điện ly vào dm:

$$P_{dd} = P_{dm} = X_{dm} \times P_{dm}^0$$

- Độ giảm áp suất hơi bão hòa của dung dịch so với dung môi nguyên chất,  $\Delta P$ , sẽ là:

$$\Delta P = P_{dd} - P_{dm}^0 = -X_{ct} \times P_{dm}^0 \quad (14.6)$$

- Kết luận: "Độ giảm áp suất hơi bão hòa của dung dịch so với dung môi nguyên chất tỉ lệ với nồng độ phần mol của chất tan."
- Câu hỏi: Hòa tan 10 g đường mía ( $C_{12}H_{22}O_{11}$ ) vào 225 ml nước và đun nóng nước tới  $60^\circ C$ . Tính áp suất hơi bão hòa của dung dịch này? Biết áp suất hơi bão hòa của nước nguyên chất ở  $60^\circ C$  là 149,4 torr.
- HĐ:  $n_{nước} \rightarrow n_{đường\ mía} \rightarrow X_{nước} \rightarrow P_{dd} = P_{nước} = X_{dm} \times P_{dm}^0$

#### 14.4.b. Độ tăng nhiệt độ sôi

- Nhận xét: sự giảm áp suất hơi bão hòa do chất tan không bay hơi sẽ dẫn đến sự tăng nhiệt độ sôi.
- Quan hệ: "Độ tăng nhiệt độ sôi,  $\Delta T_s$ , tỉ lệ với nồng độ molan của chất tan."

$$\Delta T_s = T_{s\ dd} - T_{s\ dm} = K_s \times C_{m,ct} \quad (14.7)$$

#### 14.4.c. Độ giảm nhiệt độ đông đặc

- Hệ quả khác của việc hòa tan chất tan vào dung môi là :điểm đông đặc của dung dịch thấp hơn của dung môi nguyên chất.
- Quan hệ: "Độ giảm nhiệt độ đông đặc,  $\Delta T_d$ , tỉ lệ với nồng độ molan của chất tan."

$$\Delta T_d = T_{d\ dd} - T_{d\ dm} = K_d \times C_{m,ct} \quad (K_d < 0)$$

2/12/2011

17

#### 14.4.d. Hiện tượng thẩm thấu

- Khái niệm: là hiện tượng các phân tử dung môi di chuyển qua màng bán thấm từ nơi có nồng độ chất tan thấp hơn đến nơi có nồng độ chất tan cao hơn..
- Màng bán thấm là màng có tính thẩm chọn lọc, chỉ cho dung môi và các chất hoà tan có kích thước nhỏ đi qua nhưng không cho các chất có kích thước lớn đi qua.
- Dung môi chuyển động theo hai hướng, song tốc độ chuyển động của nó về hướng dung dịch có nồng độ chất hoà tan cao hơn sẽ lớn hơn so với hướng ngược lại  $\rightarrow$  quá trình khuếch tán một chiều như vậy của dung môi qua màng bán thấm được gọi là thẩm thấu.

2/12/2011

18



- Áp suất thẩm thấu ( $\Pi$ ) là áp suất thủy tĩnh được tạo ra bởi 2 môi trường có nồng độ khác nhau..
- Biểu thức:  $\Pi = C.R.T$  (14.10)  
( $R = 0,082057 \text{ l.atm/K.mol}$ , thì  $\Pi$  có đơn vị là atm)

**14.4.e. Xác định KLPT (M) của chất tan nhờ các tính chất của dd**

$M_{\text{chất tan}} = K_s \cdot \frac{m_{\text{ct}}}{\Delta T_s \cdot m_{\text{dm}}}$	$M_{\text{chất tan}} = K_d \cdot \frac{m_{\text{ct}}}{\Delta T_d \cdot m_{\text{dm}}}$	$M_{\text{chất tan}} = \frac{m_{\text{ct}}}{\pi \cdot V_{\text{dd}}} \cdot RT$
--	--	--

- Câu hỏi:** Azulene là một hiđrocacbon có công thức thực nghiệm  $C_5H_4$ . Hòa tan 0,640 g tinh thể chất đó trong 99,0 benzen, dung dịch thu được có điểm sôi là 80,23°C. Xác định công thức phân tử của azulene.
- Câu hỏi:** Một mẫu polietilen, một chất dẻo phổ biến, có khối lượng là 1,40 g được hòa tan hoàn toàn trong benzen tạo ra 100 ml dung dịch. Áp suất thẩm thấu của dung dịch đo được bằng 1,86 mmHg ở 25°C. Tính khối lượng mol phân tử trung bình của hợp chất polime này.

2/12/2011 20

**14.5. Tính chất của dung dịch chứa chất tan điện ly, không bay hơi**

**14.5.a. Tính chất bất thường của dd điện ly so với dd không điện li.**

- “Độ giảm áp suất hơi bão hòa, độ tăng nhiệt độ sôi, độ giảm nhiệt độ đông đặc và áp suất thẩm thấu của dung dịch chất điện li lớn hơn so với của dung dịch chất không điện li có cùng nồng độ molan.”
- Nguyên nhân: .....
- Đưa ra hệ số Van't Hoff (i):

$i = \frac{\Delta T_{\text{đông đặc}}}{\Delta T_{\text{đông đặc lý thuyết}}} = \frac{\Delta T_{\text{sôi}}}{\Delta T_{\text{sôi lý thuyết}}} = \frac{\Pi_{\text{thực tế}}}{\Pi_{\text{lý thuyết}}} = \frac{\Delta P_{\text{thực tế}}}{\Delta P_{\text{lý thuyết}}}$
---

2/12/2011 21

**14.5.b. Các công thức tính cho dung dịch điện ly**

- Các công thức cho dd điện ly sẽ là phương trình Raoult và Van't Hoff hiệu chỉnh (đã nhân thêm hệ số Van't Hoff (i)):

<ul style="list-style-type: none"> <li><math>\Delta P_{\text{đli}} = P_{\text{dd}} - P_{\text{đm}}^0 = -i \cdot X_{\text{ct}} \cdot P_{\text{đm}}^0</math></li> <li><math>\Delta T_{\text{s,đli}} = T_{\text{s,dd}} - T_{\text{s,đm}} = i \cdot K_s \cdot C_{\text{m,ct}}</math></li> <li><math>\Delta T_{\text{đ,đli}} = T_{\text{đ,dd}} - T_{\text{đ,đm}} = i \cdot K_d \cdot C_{\text{m,ct}}</math></li> <li><math>\Pi_{\text{đli}} = i \cdot C \cdot R \cdot T</math></li> </ul>
--

- Chú ý: (i) gần sát các giá trị nguyên (2, 3, ...) chỉ khi dung dịch rất loãng.
- VD: giá trị của  $i = 2$  đối với NaCl,  $i = 3$  đối với  $\text{Na}_2\text{SO}_4$ ,  $i = 4$  đối với  $\text{AlCl}_3$  và  $i = 5$  đối với  $\text{Al}_2(\text{SO}_4)_3$ .

2/12/2011 22

- Câu hỏi:** Trong các dung dịch sau, dung dịch nào có nhiệt độ đông đặc thấp nhất:  $\text{MgCl}_2$  0,05m (A); đường saccarozơ 0,15m (B); nhôm sunfat 0,05m (C) và etylenglicol 0,2m (D)?
- HD:
  - Tính độ giảm nhiệt độ đông đặc cho từng dung dịch.
 

$\Delta T_{\text{đ,A}} = 3 \cdot K_d \cdot 0,05$	$\Delta T_{\text{đ,B}} = 1 \cdot K_d \cdot 0,15$
$\Delta T_{\text{đ,C}} = 5 \cdot K_d \cdot 0,05$	$\Delta T_{\text{đ,D}} = 1 \cdot K_d \cdot 0,2$

 (cùng một dung môi, nên cùng một giá trị  $K_d$ )
  - Tính nhiệt độ đông đặc:  $T_{\text{đ,dd}} = \Delta T_{\text{đ,đli}} + T_{\text{đ,đm}}$
  - Vậy dung dịch có nhiệt độ đông đặc thấp nhất là.....

2/12/2011

**BT chương 14**

3, 17, 21, 27, 31, 35, 39, 49, 51, 59..

**Bài sau: Chương 15**

**Cơ chế của phản ứng hoá học**

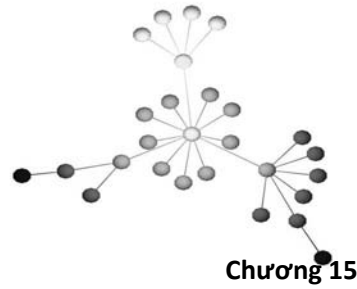
2/12/2011 24

# HÓA HỌC ĐẠI CƯƠNG

GV: Lê Minh Thành

2/12/2011

1



## Cơ chế của phản ứng hoá học

2/12/2011

2

### 15.1. Khái niệm về tốc độ của phản ứng hoá học

- Tốc độ của phản ứng hoá học : là sự biến thiên nồng độ của các chất trong một đơn vị thời gian.
- Xét p/ứ:  $aA + bB \rightarrow cC + dD$ , biểu thức vận tốc trung bình

$$V_{pu} = \pm \frac{\Delta C}{\Delta t} = -\frac{1}{a} \frac{\Delta[A]}{\Delta t} = -\frac{1}{b} \frac{\Delta[B]}{\Delta t} = +\frac{1}{c} \frac{\Delta[C]}{\Delta t} = +\frac{1}{d} \frac{\Delta[D]}{\Delta t}$$

Đơn vị của vận tốc: (mol/l. thời gian)

- Tốc độ tức thời của phản ứng được xác định bằng biến thiên nồng độ tại một thời điểm (t).

2/12/2011

3

- Biểu thức tốc độ tức thời:

$$v_{pu} = \pm \frac{dC}{dt} = -\frac{1}{a} \frac{dC_A}{dt} = -\frac{1}{b} \frac{dC_B}{dt} = +\frac{1}{c} \frac{dC_C}{dt} = +\frac{1}{d} \frac{dC_D}{dt}$$

- Chú ý: tốc độ riêng phần của chất tham gia (hoặc tạo thành) trong phản ứng được khác với khái niệm tốc độ pứ
- Biểu thức tốc độ riêng phần của mỗi chất là:

$$v_A = -\frac{dC_A}{dt}$$

$$v_B = -\frac{dC_B}{dt}$$

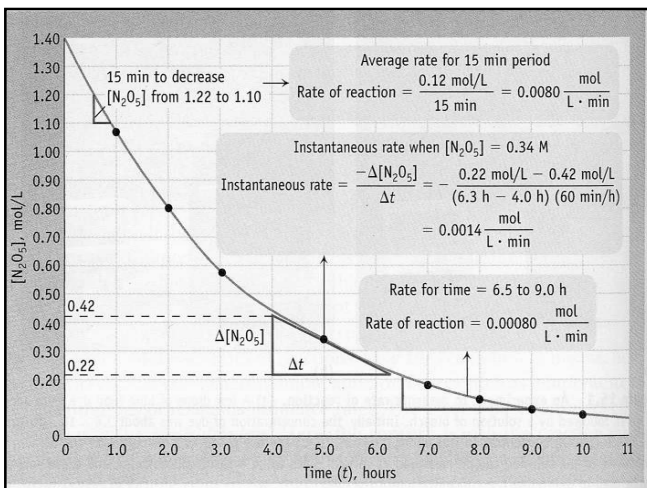
$$v_C = +\frac{dC_C}{dt}$$

$$v_D = +\frac{dC_D}{dt}$$

- Tốc độ tức thời được tính bằng độ dốc của đường thẳng tiếp tuyến với đường cong (C, t) tại thời điểm t

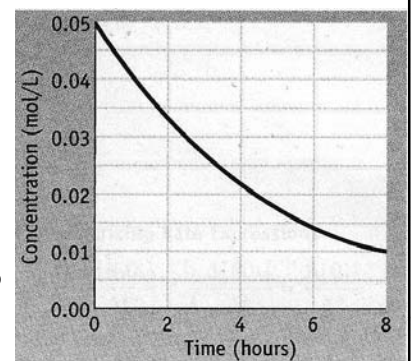
2/12/2011

4



- Câu hỏi:** Đường saccarơ phân huỷ thành fructozơ và glucozơ trong môi trường axit. Đồ thị biểu thị sự biến thiên của nồng độ theo thời gian được đưa ra dưới đây:

- Hãy xác định tốc độ biến đổi của nồng độ đường saccarơ sau 2 giờ đầu tiên?
- Hãy xác định tốc độ biến đổi nồng độ đường saccarơ của 2 giờ cuối cùng. Hãy ước tính tốc độ tức thời tại  $t = 4$  giờ?



2/12/2011

### 15.2. Các điều kiện ảnh hưởng tốc độ phản ứng

- Điều kiện cơ bản để phản ứng xảy ra: các phân tử chất phản ứng phải va chạm với nhau.
- Bên cạnh đó, tốc độ phản ứng phụ thuộc vào các đk như:
  - Nồng độ chất tham gia phản ứng: nồng độ chất t/gia tăng →
  - Nhiệt độ: nhiệt độ phản ứng tăng →
  - Chất xúc tác: tùy vào xúc tác dương hay âm →
  - Diện tích tiếp xúc (với pứ có chất rắn tham gia)
- Ví dụ:  $C_6H_6 + HNO_3 \rightarrow C_6H_5NO_2 + H_2O$ 
  - Nồng độ chất tham gia phản ứng: ....
  - Nhiệt độ: nhiệt độ phòng (25°C)
  - Chất xúc tác: (Cu(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>.3H<sub>2</sub>O trên bentonit)

2/12/2011

7

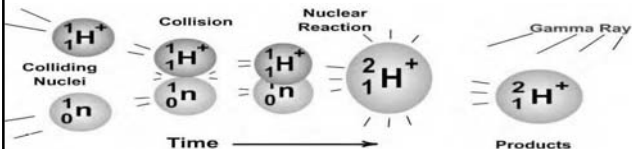
### 15.3. Ảnh hưởng của nồng độ đến tốc độ phản ứng

- Biểu thức của định luật tác dụng khối lượng:
 
$$V_{pứ} = k.[A]^m.[B]^n$$
  - Số mũ m và n không nhất thiết phải là hệ số tỉ lượng trong phương trình phản ứng (a và b), nó có thể là số dương, số âm hoặc 0.
  - Phương trình trên còn gọi là phương trình động học của phản ứng (hoặc phương trình tốc độ của pứ).
- Bậc của phản ứng chính là số mũ của nồng độ chất phản ứng trong biểu thức tốc độ phản ứng.
  - Bậc phản ứng của A là m, của B là n, của cả phản ứng là (m+n)

2/12/2011

8

- **Câu hỏi:** Cho phản ứng:  $2NO_{(k)} + Cl_{2(k)} \rightarrow 2NOCl_{(k)}$ . Có biểu thức vận tốc là:  $V = k.[NO]^{3/2}.[Cl_2]^{2/3}$ . Xác định bậc riêng phần và bậc toàn phần?
- HD:
  - Bậc riêng phần của NO là: ...
  - Bậc riêng phần của Cl<sub>2</sub> là: ...
  - Bậc toàn phần của cả phản ứng trên là: ....



- Hằng số tốc độ k là hệ số tỉ lệ có liên quan với hệ số và nồng độ của các chất tại một nhiệt độ xác định (còn gọi là tốc độ riêng của phản ứng).
- Đơn vị đo của k phụ thuộc vào bậc toàn phần của pứ:
  - Phản ứng bậc 1 hằng số k có đơn vị là: thời gian<sup>-1</sup>
  - Phản ứng bậc 2 hằng số k có đơn vị là: l/mol.thời gian
  - Phản ứng bậc 0 hằng số k có đơn vị là: mol/l.thời gian

- Ví dụ: phản ứng:  $CO_{(k)} + NO_{2(k)} \rightarrow CO_{2(k)} + NO_{(k)}$ 
    - Vận tốc phản ứng:  $v = 6,8.10^{-8} \text{ (mol/l.h)}$
    - Hằng số tốc độ:  $k = 1,9 \text{ (l/mol.h)}$
- Vậy phản ứng trên có bậc là 2.

2/12/2011

10

- Biểu thức tốc độ phản ứng được xác định bằng thực nghiệm:
  - "phương pháp tốc độ ban đầu"
  - "phương pháp đồ thị"

- **Câu hỏi:** Cho phản ứng:  $aA + bB \rightarrow cC + dD$

TN	Nồng độ đầu ([A] <sub>0</sub> )	Nồng độ đầu ([B] <sub>0</sub> )	Tốc độ ban đầu (v <sub>0</sub> )
1	1.00 M	1.00 M	1.25 x 10 <sup>-2</sup> M/s
2	1.00 M	2.00 M	2.5 x 10 <sup>-2</sup> M/s
3	2.00 M	2.00 M	2.5 x 10 <sup>-2</sup> M/s

Hãy xác định biểu thức tốc độ phản ứng?

- HD:  $V_{pứ} = k.[A]^m.[B]^n \rightarrow$  lập 3 phương trình 3 ẩn  $\rightarrow k, n, m$

2/12/2011

11

### 15.4. Quan hệ giữa nồng độ và thời gian: Các định luật về tốc độ

- Phương trình tốc độ theo thời gian của phản ứng bậc 1 (A → sản phẩm) sẽ là:
 
$$\ln \frac{[A]_t}{[A]_0} = -kt \quad (15.1)$$
- Phương trình tốc độ theo thời gian của phản ứng bậc 2 (2A → sản phẩm; hoặc A + B → sản phẩm) sẽ là:
 
$$\frac{1}{[A]_t} - \frac{1}{[A]_0} = kt \quad (15.2)$$
- Phương trình tốc độ theo thời gian của phản ứng bậc 0 (A → sản phẩm) sẽ là:
 
$$[A]_0 - [A]_t = kt \quad (15.3)$$

2/12/2011

12

- Từ các biểu thức của pt tốc độ trên, đưa ra cách xác định bậc phản ứng m, n và hằng số tốc k theo pp đồ thị:

Bậc pứ	Biểu thức tốc độ phản ứng	Biểu thức biến đổi của tốc độ pứ	Đồ thị đường thẳng
0	$[A]_t = -kt + [A]_0$	$y = ax + b$	$[A]_t$ và thời gian
1	$\ln[A]_t = -kt + \ln[A]_0$	$y = ax + b$	$\ln[A]_t$ và thời gian
2	$1/[A]_t = +kt + 1/[A]_0$	$y = ax + b$	$1/[A]_t$ và thời gian

- Thời gian bán huỷ ( $t_{1/2}$ ) của phản ứng là thời gian cần thiết để nồng độ chất phản ứng giảm một nửa so với nồng độ ban đầu.

- Ở phản ứng bậc 1, dễ dàng tính được:

$$t_{1/2} = \frac{0,693}{k}$$

2/12/2011

13

- Câu hỏi:** Số liệu của phản ứng phân huỷ  $N_2O_5$  trong dung môi ở  $45^\circ C$  được đưa ra trong bảng dưới đây?

$[N_2O_5]$ , (mol/l)	Thời gian, (phút)
2,08	3,07
1,67	8,77
1,36	14,45
0,72	31,28

- Hãy vẽ đồ thị để tìm, bậc của p.ứ và hằng số tốc độ của pứ?

- HD:

> biểu diễn sự biến thiên  $[N_2O_5]$  theo t.

> biểu diễn sự biến thiên  $\ln[N_2O_5]$  theo t

> biểu diễn sự biến thiên  $1/[N_2O_5]$  theo t.

> một trong 3 đồ thị trên sẽ là đường thẳng  $\rightarrow$  bậc pứ  $\rightarrow k_{14}$

2/12/2011

- Câu hỏi:** Đường saccharo bị phân huỷ trong môi trường axit tạo thành glucozo và fructozo. Đó là phản ứng bậc một với hằng số tốc độ  $k = 0,21 (h^{-1})$  ở  $25^\circ C$ . Nếu nồng độ ban đầu của đường saccharo là  $0,010 (mol/l)$ , hãy tính nồng độ của nó còn lại sau  $5,0 (h)$ ?

- HD:

> Biểu thức tính của p.ứ bậc 1:

$$\ln \frac{[A]_t}{[A]_0} = -kt$$

> Theo đề bài ta đã có  $[sacca]_0 = 0,01 M$ ,  $k = 0,21 (h^{-1})$ ,  $t=5 (h)$  lắp vào biểu thức trên, giải pt logarit một ẩn bậc nhất ta tính được  $[sacca]_{5h} = \dots$

2/12/2011

15

## 15.5. Các yếu tố khác ảnh hưởng đến tốc độ pứ

### 15.5.a) Yếu tố va chạm

- Thuyết va chạm của phản ứng nêu ra ba điều kiện cần có:

> có va chạm xảy ra giữa các ptử tham gia;

> có mức năng lượng đủ lớn trong các ptử tham gia;

> hướng va chạm phải thuận lợi cho việc phá và tạo lk.

### 15.5.b) Yếu tố nhiệt độ

- Khi tăng nhiệt độ thường làm tăng tốc độ phản ứng do nhiệt độ làm tăng tỉ lệ số phân tử có đủ năng lượng vượt qua hàng rào năng lượng hoạt hoá.

- Định luật Van't Hoff: "khi nhiệt độ tăng  $10^\circ$ , tốc độ pứ thường tăng lên từ 2 ÷ 4 lần."

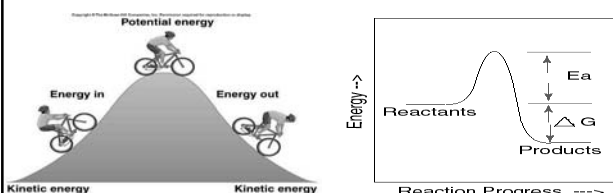
16

### 15.5.c) Yếu tố năng lượng hoạt hóa

- Năng lượng hoạt hóa ( $E_a$ ) là năng lượng dư tối thiểu mà hệ phản ứng cần phải có so với năng lượng trung bình của hệ ban đầu để phản ứng có thể xảy ra.

> Nếu giá trị  $E_a$  càng lớn, thì phản ứng càng khó xảy ra, vì số ptử tham gia đạt tới giá trị  $E_a$  càng ít đi, dẫn đến số va chạm hiệu quả không nhiều....

> Ngược lại,  $E_a$  càng nhỏ, phản ứng càng dễ xảy ra.

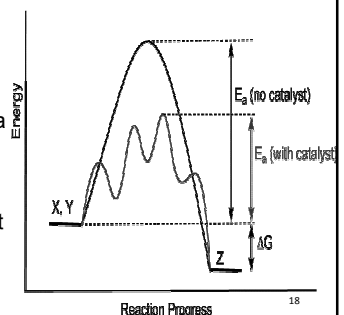


### 15.5.d) Yếu tố xúc tác

- Xúc tác là các chất có khả năng làm thay đổi tốc độ phản ứng hoá học.

- Phân loại xúc tác: xúc tác dương và xúc tác âm.

- Cơ chế chung của chất xúc tác dương là biến một phản ứng ít giai đoạn (mỗi giai đoạn có năng lượng hoạt hóa rất cao) thành một phản ứng có nhiều giai đoạn (với mỗi giai đoạn có năng lượng hoạt hóa thấp hơn nhiều)



2/12/2011

18

**15.5.e) Yếu tố bậc phản ứng**

- Bậc phản ứng được xác định là số lượng các phân tử (hoặc ion, nguyên tử, gốc tự do) của chất phản ứng.
- Bậc phản ứng càng lớn thì xác suất va chạm hiệu quả của đồng thời số phân tử tham gia pứ càng thấp, pứ càng khó xảy ra:

- > Phản ứng bậc 1, bậc 2 rất thường gặp trong tự nhiên cũng như trong cuộc sống, là các p/ứ tương đối dễ xảy ra
- > Pứ bậc 3: sự va chạm cùng một lúc của ba phân tử rất khó xảy ra trừ khi một trong các phân tử đó có nồng độ đủ lớn.
- > Pứ bậc 4 trở lên hầu như là không thể xảy ra được

2/12/2011

19

**15.5.f) Sự tổng hợp các yếu tố: Phương trình Arrhenius**

- Sự phụ thuộc của tốc độ phản ứng (v) vào các yếu tố (năng lượng, tần suất va chạm, nhiệt độ, định hướng hình học của các va chạm) được tóm tắt trong biểu thức của Arrhenius.

$$k = A \cdot e^{-E_a/RT} \quad (15.5)$$

$$\ln k = -\frac{E_a}{R} \left( \frac{1}{T} \right) + \ln A$$

$$\ln k_2 - \ln k_1 = \ln \frac{k_2}{k_1} = -\frac{E_a}{R} \left[ \frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right] \quad (15.7)$$

2/12/2011

20

**Bài tập chương 15:**

5, 11, 15, 19, 25, 27, 33, 63, 65, 71.

**Bài sau: Chương 16****CÂN BẰNG HÓA HỌC**

2/12/2011

21



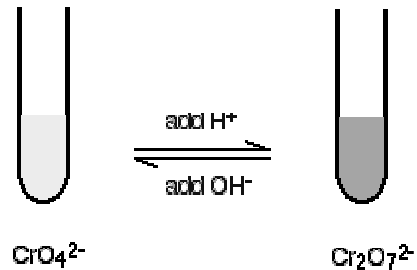
# HÓA HỌC ĐẠI CƯƠNG

2/13/2011

GV: Lê Minh Thành

1

## Chương 16 Cân Bằng Hóa Học



2/13/2011

2

### 16.1. Trạng thái cân bằng hóa học

- Khái niệm về phản ứng thuận nghịch: ....
- Khái niệm về cân bằng hóa học: là 1 trạng thái của phản ứng thuận nghịch mà ở đó vận tốc phản ứng thuận bằng vận tốc phản ứng nghịch.
- Đặc điểm của trạng thái cân bằng hóa học:
  - + là một trạng thái động:...
  - + có tính linh động:....
  - + không thay đổi theo thời gian nếu ....

2/13/2011 Có thể xác lập theo 2 chiều,...

3

### 16.2. Hằng số cân bằng và tỉ số phản ứng

- Xét p/ứ:  $a A_{(dd)} + b B_{(dd)} \rightleftharpoons c C_{(dd)} + d D_{(dd)}$ 
  - > Phản ứng thuận có:  $v_t = k_t \cdot [A]^a \cdot [B]^b$
  - > Phản ứng nghịch có:  $v_n = k_n \cdot [C]^c \cdot [D]^d$
- Khi đạt tới trạng thái cân bằng thì  $v_t = v_n$  nên tỉ số  $k_t/k_n = K_C$  được gọi là hằng số cân bằng (theo nồng độ):

$$K_C = \frac{[C]^c \cdot [D]^d}{[A]^a \cdot [B]^b}$$

2/13/2011

4

- Trong trường hợp phản ứng có sự tham gia của chất khí, có thể thay nồng độ bằng áp suất riêng phần.

- > Xét phản ứng:  $a A_{(k)} + b B_{(k)} \rightleftharpoons c C_{(k)} + d D_{(k)}$
- > Hằng số cân bằng  $K_p$  theo áp suất

$$K_p = \frac{[P_C]^c \cdot [P_D]^d}{[P_A]^a \cdot [P_B]^b}$$

- Liên hệ giữa  $K_C$  và  $K_p$ :  $K_p = K_C (RT)^{\Delta n}$  (với  $\Delta n = c + d - a - b$ )

- **Câu hỏi:** Khi nào thì giá trị  $K_p$  và giá trị  $K_C$  luôn bằng nhau trong một phản ứng hóa học bất kỳ?

2/13/2011

5

- Đặc điểm của hằng số cân bằng  $K_C$  hoặc  $K_p$ :

1. Nồng độ, áp suất riêng phần là giá trị tại lúc cân bằng
2. Giá trị của hằng số cân bằng  $K$  chỉ phụ thuộc vào phản ứng cụ thể và vào nhiệt độ.
3.  $K$  không có đơn vị.
4. Nồng độ của chất rắn hoặc dung môi nước được coi là hằng số, và không viết vào biểu thức hằng số cân bằng.
5.  $K \gg 1$ : ưu tiên theo hướng tạo sản phẩm,  $K \ll 1$ : ưu tiên theo hướng tạo chất ban đầu.

2/13/2011

6

**Câu hỏi 2:** Hãy thiết lập các biểu thức hằng số cân bằng  $K_c$  và  $K_p$  của các phản ứng sau:

- a)  $N_{2(k)} + O_{2(k)} \rightleftharpoons 2NO_{(k)}$   
 b)  $C_2H_5OH_{(dd)} + CH_3COOH_{(dd)} \rightleftharpoons CH_3COOC_2H_5_{(dd)} + H_2O_{(l)}$   
 c)  $C_{(r)} + \frac{1}{2} O_{2(k)} \rightleftharpoons CO_{(k)}$   
 d)  $AgCl_{(r)} \rightleftharpoons Ag^+_{(dd)} + Cl^-_{(dd)}$   
 e)  $AgCl_{(r)} + 2NH_{3(dd)} \rightleftharpoons Ag(NH_3)_2^+_{(dd)} + Cl^-_{(dd)}$

**Câu hỏi 3:** Hãy so sánh quan hệ giữa  $K_1$ ,  $K_2$ ,  $K_3$  của các pứ sau:

- a)  $N_2_{(k)} + 3H_2_{(k)} \rightleftharpoons 2NH_3_{(k)} \quad K_1$   
 b)  $\frac{1}{2} N_2_{(k)} + \frac{3}{2} H_2_{(k)} \rightleftharpoons NH_3_{(k)} \quad K_2$   
 c)  $2NH_3_{(k)} \rightleftharpoons N_2_{(k)} + 3H_2_{(k)} \quad K_3$

7

- Trong trường hợp phản ứng không ở trạng thái cân bằng, thì tỉ số của nồng độ sản phẩm chia cho chất tham gia, được gọi là tỉ số phản ứng.

> Xét phản ứng:  $aA_{(dd)} + bB_{(dd)} \rightleftharpoons cC_{(dd)} + dD_{(dd)}$

> Tỉ số phản ứng Q:

$$Q = \frac{C_C^c \cdot C_D^d}{C_A^a \cdot C_B^b}$$

(Tất cả nồng độ các chất là giá trị ở thời điểm bất kỳ.)

Mối liên hệ Q và K	Chiều của phản ứng
$Q < K$	Chiều thuận
$Q = K$	P/ứ đạt trạng thái cân bằng
$Q > K$	Chiều nghịch

2/13/2011

8

### 16.3. Sử dụng hằng số cân bằng

- K phản ứng tổng nhiều phản ứng =  $K_1 \cdot K_2 \cdot K_3 \dots$
- K phản ứng hiệu của phản ứng (1) trừ đi (2) =  $K_1/K_2$ .
- Khi nhân hệ số cân bằng của phản ứng lên n lần  
 $\rightarrow K_{mới} = (K_{cũ})^n$ .
- Khi phản ứng được viết ngược lại  $\rightarrow K_{mới} = 1/(K_{cũ})$ .
- Mọi bài toán có sử dụng đến hằng số cân bằng K đều sử dụng bảng ICE để tính toán.

2/13/2011

9

**Câu hỏi:** Cho phản ứng:  $2SO_2(k) + O_2(k) \rightleftharpoons 2SO_3(k)$  ở

1000K. Cho 1 mol  $SO_2$  và 1 mol  $O_2$  vào 1 bình 1 lít để phản ứng. Ở trạng thái cân bằng có 0,8 mol  $SO_3$  tạo ra. Tính K?

	$2SO_2(k)$	$+ O_2(k)$	$\rightleftharpoons 2SO_3(k)$
[ban đầu] = I	1,00	1,00	0
[phản ứng] = C	-0,8	-0,4	+0,8
[cân bằng] = E	0,2	0,6	0,8

$$K = \frac{[SO_3]^2}{[SO_2]^2[O_2]} = \frac{(0,8)^2}{(0,2)^2 \cdot (0,6)} = 26,67$$

2/13/2011

10

**Câu hỏi:** Cho 2 mol  $H_2$  và 3 mol  $I_2$  vào bình kín 1,0L ở 600°C.

Tính số mol các chất khi cân bằng, biết  $K = 50,0$ ?

	$H_2(k)$	$+ I_2(k)$	$\rightleftharpoons 2HI(k)$
I (M)	2	3	0
C (M)	-x	-x	+2x
E (M)	2-x	3-x	2x

$$K = \frac{[HI]^2}{[I_2][H_2]} = \frac{(2x)^2}{(3-x)(2-x)} = 50 \quad \rightarrow x = 1,79$$

$$\rightarrow [I_2] = 1,21M; [H_2] = 0,21M; [HI] = 3,58M$$

2/13/2011

11

### 16.4. Các yếu tố ảnh hưởng đến cân bằng

- Các yếu tố thường gặp: nhiệt độ, nồng độ, áp suất...
- Sự ảnh hưởng của các yếu tố trên đều tuân theo một quy luật chung, đó là tuân theo nguyên lý chuyển dịch cân bằng Le Chartelier: "..."



- Cách xét các ảnh hưởng đến một phản ứng:

- > Với yếu tố nhiệt độ: quan tâm đến hiệu ứng nhiệt  $\Delta H$
- > Với yếu tố nồng độ: quan tâm đến chất tgia hoặc sp.
- > Với yếu tố áp suất: chỉ xét phản ứng có chất khí, quan tâm đến phản ứng tăng hoặc giảm số phân tử khí...

2/13/2011

12

**16.4.a) Yếu tố nhiệt độ**

- Xét phản ứng:  $A + B \rightleftharpoons C + D$  có  $\Delta H < 0$
- Chiều thuận là chiều tỏa nhiệt.
- Nếu ta tăng nhiệt độ của hệ  $\rightarrow$  cân bằng sẽ chuyển dịch theo chiều chống lại sự tăng nhiệt  $\rightarrow$  chuyển dịch theo chiều làm giảm nhiệt  $\rightarrow$  chuyển dịch theo chiều nghịch.

**16.4.b) Yếu tố nồng độ**

- Xét phản ứng:  $A + B \rightleftharpoons C + D$
- Nếu ta tăng nồng độ của chất C (chất sản phẩm)  $\rightarrow$  cân bằng sẽ chuyển dịch theo chiều chống lại sự tăng nồng độ này  $\rightarrow$  chuyển dịch theo chiều làm giảm nồng độ chất C  $\rightarrow$  chuyển dịch theo chiều nghịch.

13

**16.4.c) Yếu tố áp suất**

- Xét phản ứng:  $aA_{(k)} + bB_{(k)} \rightleftharpoons cC_{(k)} + dD_{(k)}$  có  $\Delta n = c+d-a-b$
- Nếu  $\Delta n < 0$ , phản ứng là giảm áp suất....
- Nếu ta tăng áp suất của hệ  $\rightarrow$  cân bằng sẽ chuyển dịch theo chiều chống lại sự tăng áp suất này  $\rightarrow$  chuyển dịch theo chiều làm giảm áp suất  $\rightarrow$  chuyển dịch theo chiều thuận.

**Câu hỏi:** Nếu pứ có  $\Delta n = 0$ , thì áp suất ảnh hưởng ntn?**16.4.d) Yếu tố thể tích**

- Đối với phản ứng ở pha khí, thể tích hệ giảm đi thì áp suất hệ tăng lên, ảnh hưởng của nó giống như áp suất...
- Đối với phản ứng ở dung dịch....

2/13/2011

14

**Câu hỏi:** Ở trạng thái cân bằng có 0,2 mol  $H_2$  và 0,3 mol  $I_2$  và 0,1 mol HI trong bình kín 1,0L ở 600°C. Thêm vào hệ 0,5mol HI, hãy tính số mol các chất khi cân bằng mới được thiết lập?

	$H_2$ (k)	$+ I_2$ (k)	$\rightleftharpoons 2HI$ (k)
cb (M)	0,2	0,3	0,1
I (M)	0,2	0,3	0,1+0,5
C (M)	+x/2	+x/2	-x
E (M)	0,2+x/2	0,3+x/2	0,6-x

$$K = \frac{[HI]^2}{[I_2][H_2]} = \frac{(0,6-x)^2}{(0,2+x/2).(0,3+x/2)} = \dots$$

$\rightarrow x = \dots$

2/13/2011

15

**Câu hỏi:** Cho phản ứng:  $N_2 + 3H_2 \rightleftharpoons 2NH_3$ , có  $\Delta H < 0$

- Thêm xúc tác, cân bằng chuyển dịch theo chiều nào?
- Thêm  $NH_3$ , cân bằng chuyển dịch theo chiều nào?
- Giảm nhiệt độ, cân bằng chuyển dịch theo chiều nào?
- Tăng áp suất hệ, cân bằng chuyển dịch theo chiều nào?
- Tăng thể tích hệ phản ứng lên (không làm thay đổi số mol các chất), cân bằng chuyển dịch theo chiều nào?
- Trong các yếu tố sau: nhiệt độ, nồng độ, áp suất, xúc tác, thể tích, diện tích tiếp xúc, bậc phản ứng... chỉ ra yếu tố mà gây ảnh hưởng lên:

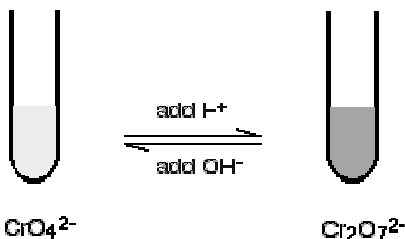
- tốc độ phản ứng?
- cân bằng hóa học?

2/13/2011

16

**Câu hỏi:** Viết phản ứng mô tả cân bằng hóa học xảy ra sau đây (hình vẽ). Từ phản ứng đó, hãy chỉ ra chiều chuyển dịch cân bằng khi:

- Thêm  $NH_4Cl$  vào dung dịch hỗn hợp  $Na_2CrO_4$  và  $Na_2Cr_2O_7$ .
- Thêm  $Na_2CO_3$  vào dung dịch hỗn hợp  $Na_2CrO_4$  và  $Na_2Cr_2O_7$ .
- Thêm KCl dung dịch hỗn hợp  $Na_2CrO_4$  và  $Na_2Cr_2O_7$ .



2/13/2011

17

**BT chương 16:**

1, 5, 9, 17, 23, 25, 27, 29, 45, 51.

**Bài sau: Chương 17****Tính chất của axit và bazơ**

2/13/2011

18



# HÓA HỌC

## ĐẠI CƯƠNG

GV: Lê Minh Thành

2/13/2011

1

## Chương 17

## Tính chất cũ? a axit bazo

2/13/2011

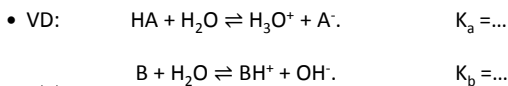
2

### 17.1. Khái niệm axit-bazơ cũ và trạng thái cân bằng

- Khái niệm axit-bazơ của Arrhenius :

- > Axit: là chất khi hòa tan trong nước phân ly ra ion  $\text{H}_3\text{O}^+$  ( $\text{H}^+$ ).
- > Bazơ: là chất khi hòa tan trong nước phân ly ra ion  $\text{OH}^-$

- Ưu điểm và nhược điểm của thuyết cũ:...
- Sự điện ly của axit – bazơ trong nước là một quá trình cân bằng, và được đặc trưng bởi hằng số điện ly.



2/13/2011

- Sự phân loại axit-bazơ mạnh

- > Axit, bazơ mạnh: là axit –bazơ có độ điện ly  $\alpha=0,75 \div 0,95$  ( $K > 1$ )
- > Axit, bazơ yếu: là axit –bazơ có độ điện ly  $\alpha=0,05 \div 0,75$  ( $K < 1$ ).

- Giới thiệu một vài axit-bazơ mạnh.

- > **Axit mạnh:** HCl, HBr, HI,  $\text{HClO}_4$ ,  $\text{HNO}_3$ ,  $\text{H}_2\text{SO}_4$  và một số ít axit không thông dụng khác.
- > **Bazơ mạnh:** MOH và  $\text{M}(\text{OH})_2$ ,  $\text{M} = \text{Li}^+, \text{Na}^+, \text{K}^+, \text{Rb}^+, \text{Cs}^+, \text{Ca}^{2+}, \text{Sr}^{2+}, \text{Ba}^{2+}$

- Biểu diễn sự điện ly.

- > Với axit, bazơ mạnh:  $\text{HA} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{A}^-$ .
- > Với axit, bazơ yếu:  $\text{HA} + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{H}_3\text{O}^+ + \text{A}^-$ .

2/13/2011

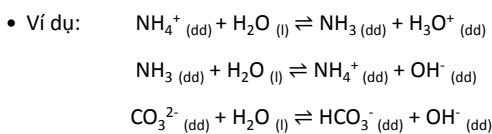
4

### 17.2. Thuyết axit bazơ của Bronsted-Lowry

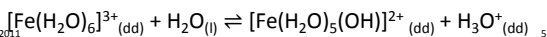
- Khái niệm axit-bazơ của Bronsted-Lowry:

- > Axit: là chất có khả năng nhường proton ( $\text{H}^+$ ).
- > Bazơ: là chất có khả năng nhận proton ( $\text{H}^+$ ).
- > Chất lưỡng tính: là chất vừa có khả năng cho, nhận proton.

- Ưu điểm và nhược điểm của thuyết này:...



2/13/2011



- Khái niệm về đa axit, đa bazơ:

- > Đa axit: là các axit mà từ 1 phân tử có thể cho nhiều ion  $\text{H}^+$ .
- > Đa bazơ: là các bazơ mà từ 1 phân tử có thể nhận nhiều ion  $\text{H}^+$ , và chúng thường là các anion của đa axit.

- Biểu diễn sự điện ly của các đa axit, đa bazơ, thường biểu diễn theo từng nấc riêng biệt.

- VD: với axit  $\text{H}_3\text{PO}_4$ :

- >  $\text{H}_3\text{PO}_{4(dd)} \rightleftharpoons \text{H}^+_{(dd)} + \text{H}_2\text{PO}_4^-_{(dd)}$   $K_{a1} = 7,2 \cdot 10^{-3}$
- >  $\text{H}_2\text{PO}_4^-_{(dd)} \rightleftharpoons \text{H}^+_{(dd)} + \text{HPO}_4^{2-}_{(dd)}$   $K_{a2} = 6,2 \cdot 10^{-8}$
- >  $\text{HPO}_4^{2-}_{(dd)} \rightleftharpoons \text{H}^+_{(dd)} + \text{PO}_4^{3-}_{(dd)}$   $K_{a3} = 4,8 \cdot 10^{-13}$

2/13/2011

6

- Khái niệm về cặp axit-bazơ liên hợp: là một cặp axit/bazơ mà bazơ đó được tạo ra từ axit tương ứng, và ngược lại.
- Xét pư:  $HA + H_2O \rightleftharpoons H_3O^+ + A^-$   
(axit) (bazơ) (axit) (bazơ)
- Theo chiều thuận: cặp axit/bazơ liên hợp là: HA/A<sup>-</sup>.
- Theo chiều nghịch: cặp axit/bazơ liên hợp là: H<sub>3</sub>O<sup>+</sup>/H<sub>2</sub>O.
- **Câu hỏi:** Cho pư:  $H_2O + H_2O \rightleftharpoons H_3O^+ + OH^-$ . Hãy kể tên cặp axit/bazơ liên hợp trong phản ứng trên?
- **Câu hỏi:** Cho pư:  $CO_3^{2-} + H_2O \rightleftharpoons HCO_3^- + OH^-$ . Hãy kể tên cặp axit/bazơ liên hợp trong phản ứng trên?

2/13/2011 7

### 17.3. Sự điện ly của nước và chỉ số pH

- Quá trình tự ion hóa của H<sub>2</sub>O :  
 $H_2O_{(l)} + H_2O_{(l)} \rightleftharpoons H_3O^+_{(dd)} + OH^-_{(dd)}$   $K_c = ?$
- $K_c = \frac{[H_3O^+][OH^-]}{[H_2O]^2} \rightarrow K_w = [H_3O^+][OH^-] = K_c[H_2O]^2$
- Đặc điểm:
  - K<sub>w</sub> gọi là tích số ion của nước.
  - $K_w = [H_3O^+].[OH^-] = 1,0.10^{-14}$  (ở 25°C)
  - Trong nước nguyên chất, trung tính  $[H_3O^+] = [OH^-] = 10^{-7}M$ .
  - Môi trường axit:  $[H_3O^+] > [OH^-]$ .
  - Môi trường bazơ:  $[H_3O^+] < [OH^-]$ .

2/13/2011 8

- Khái niệm về pH, pOH: là một đại lượng đặc trưng cho nồng độ mol/lít của ion H<sup>+</sup> hoặc OH<sup>-</sup> trong dung dịch.
- $pH = -lg[H_3O^+]$        $pOH = -lg[OH^-]$
- Hệ quả:
  - $pH = a \rightarrow [H^+] = 10^{-a}$  và ngược lại.
  - $pOH = b \rightarrow [OH^-] = 10^{-b}$  và ngược lại.
  - $pK_w = pH + pOH = 14,00$  (ở 25°C)
- Ý nghĩa của chỉ số pH: xác định môi trường của dung dịch (axit, bazơ, trung tính)....

2/13/2011 9

2/13/2011 9

2/13/2011 9

### 17.4. Hằng số cân bằng axit và bazơ

- Hằng số cân bằng của các axit, bazơ trong quá trình điện ly trong dung môi, được gọi là hằng số axit, bazơ.
- $HA_{(dd)} + H_2O_{(l)} \rightleftharpoons H_3O^+_{(dd)} + A^-_{(dd)}$        $K_a = \frac{[A^-][H_3O^+]}{[HA]}$
- $B_{(dd)} + H_2O_{(l)} \rightleftharpoons BH^+_{(dd)} + OH^-_{(dd)}$        $K_b = \frac{[OH^-][BH^+]}{[B]}$
- Đặc điểm:
  - Giá trị K<sub>a</sub>, K<sub>b</sub> càng lớn thì axit, bazơ đó càng mạnh và ngược lại.
  - Giá trị của K<sub>a</sub>, K<sub>b</sub> chỉ phụ thuộc vào nhiệt độ và bản chất ax-bz.
  - Axit càng mạnh thì bazơ liên hợp của nó càng yếu và ngược lại.
  - Với 1 cặp axit bazơ liên hợp ta có mối quan hệ giữa K<sub>a</sub> và K<sub>b</sub> :

$K_a \cdot K_b = K_w = 1,0.10^{-14}$

2/13/2011 12

- Chỉ số axit  $pK_a$ , chỉ số bazơ  $pK_b$ : là một dạng khác của hằng số axit, bazơ biểu diễn theo hàm logarit.

$$pK_a = -\lg K_a$$

$$pK_b = -\lg K_b$$

- Đặc điểm.

- Giá trị của  $pK_a$ ,  $pK_b$  càng lớn, axit hoặc bazơ đó càng yếu....
- Với 1 cặp axit bazơ liên hợp ta có mối quan hệ giữa  $pK_a$  và  $pK_b$ :

$$pK_a + pK_b = pK_w = 14$$

- Câu hỏi:** Cho axit yếu HX và HY có chỉ số bazơ  $pK_b$  của bazơ liên hợp với chúng lần lượt là 3 và 5. Hỏi axit nào mạnh hơn?

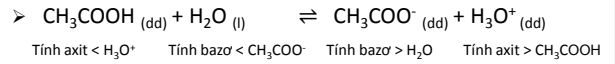
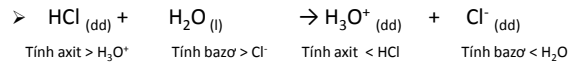
2/13/2011



### 17.5. Dự đoán chiều của phản ứng axit - bazơ

Quy luật: "axit mạnh + bazơ mạnh  $\rightarrow$  axit yếu + bazơ yếu".

- Ví dụ:



- Câu hỏi:** Pứ:  $\text{CH}_3\text{COOH} (\text{dd}) + \text{HCO}_3^- (\text{dd}) \rightleftharpoons \text{CH}_3\text{COO}^- (\text{dd}) + \text{H}_2\text{CO}_3 (\text{dd})$ .

Dự đoán chiều phản ứng?

Biết  $\text{H}_2\text{CO}_3$  ( $K_a = 4,2 \cdot 10^{-7}$ ),  $\text{CH}_3\text{COOH}$  ( $K_a = 1,8 \cdot 10^{-5}$ ) và  $\text{CH}_3\text{COO}^-$  ( $K_b = 5,6 \cdot 10^{-10}$ ),  $\text{HCO}_3^-$  ( $K_b = 2,4 \cdot 10^{-8}$ ).

2/13/2011

14

### 17.6. Môi trường của dung dịch muối, sự thủy phân

- Quy luật:

- Muối tạo bởi axit mạnh và bazơ mạnh cho mt trung tính.
- Muối tạo bởi axit mạnh và bazơ yếu cho mt axit.
- Muối tạo bởi axit yếu và bazơ mạnh cho mt bazơ.
- Muối tạo bởi axit yếu và bazơ yếu cho mt tùy thuộc vào tương quan giữa ax yếu và bz yếu.

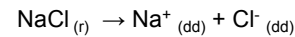
- Nguyên nhân: do sự thủy phân của ion chất yếu có mặt trong dung dịch với dung môi nước, làm tăng lượng ion  $\text{H}_3\text{O}^+$  hoặc  $\text{OH}^-$  trong dung dịch muối và tạo môi trường

2/13/2011

15

#### 17.6.a. Dung dịch muối có môi trường trung tính

- Xuất hiện khi muối có chứa anion của axit mạnh ( $\text{Cl}^-$ ,  $\text{Br}^-$ ,  $\text{I}^-$ ,  $\text{NO}_3^-$ ,  $\text{ClO}_4^-$ ) và cation của bazơ mạnh ( $\text{Na}^+$ ,  $\text{K}^+$ ,  $\text{Li}^+$ ,  $\text{Rb}^+$ ,  $\text{Cs}^+$ ,  $\text{Ca}^{2+}$ ,  $\text{Sr}^{2+}$ ,  $\text{Ba}^{2+}$ ):
- Nguyên nhân: Cả cation và anion của muối đều không có phản ứng thủy phân với  $\text{H}_2\text{O}$  để tạo ra  $\text{H}^+$  hoặc  $\text{OH}^-$ .
- VD: dung dịch muối chứa  $\text{NaCl}$ :



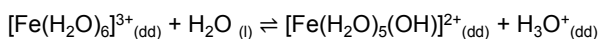
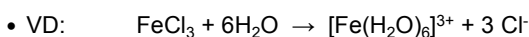
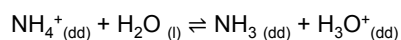
Ion  $\text{Na}^+$  và  $\text{Cl}^-$  đều không thủy phân trong nước  $\rightarrow$  không có sự thay đổi nào  $\rightarrow \text{pH} = 7,00 \rightarrow$  mt trung tính

2/13/2011

16

#### 17.6.b. Dung dịch muối có môi trường axit

- Xuất hiện khi muối có chứa anion của axit mạnh ( $\text{Cl}^-$ ,  $\text{Br}^-$ ,  $\text{I}^-$ ,  $\text{NO}_3^-$ ,  $\text{ClO}_4^-$ ) và cation của bazơ yếu ( $\text{NH}_4^+$ ,  $\text{Fe}^{3+}$ ...) hoặc một số muối axit như  $\text{NaH}_2\text{PO}_4$  ... :
- Nguyên nhân: do sự thủy phân của cation của bazơ yếu với  $\text{H}_2\text{O}$  để tạo ra nhiều  $\text{H}^+$  :

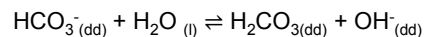
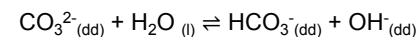
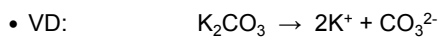
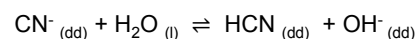


2/13/2011

17

#### 17.6.c. Dung dịch muối có môi trường bazơ

- Xuất hiện khi muối có chứa anion của axit yếu ( $\text{F}^-$ ,  $\text{NO}_2^-$ ,  $\text{PO}_4^{3-}$ ,  $\text{CH}_3\text{COO}^-$ ...) và cation của bazơ mạnh ( $\text{Na}^+$ ,  $\text{K}^+$ ...):
- Nguyên nhân: do sự thủy phân của anion của axit yếu với  $\text{H}_2\text{O}$  để tạo ra nhiều  $\text{OH}^-$  hơn.

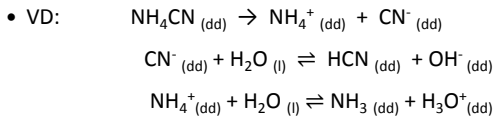


2/13/2011

18

**17.6.d. Dung dịch muối của axit yếu – bazơ yếu**

- Xuất hiện khi muối có chứa anion của axit yếu ( $F^-$ ,  $NO_2^-$ ,  $PO_4^{3-}$ ,  $CH_3COO^-$ ...) và cation của bazơ yếu ( $NH_4^+$ ;  $Fe^{3+}$ ...):
- Nguyên nhân: cả cation và anion của muối đều thủy phân, nên dd có thể là axit hoặc bazơ, phụ thuộc vào giá trị  $K_a$  và  $K_b$  của các ion.



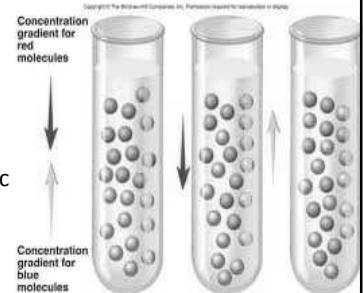
$$K_a(NH_4^+) = 5,7 \cdot 10^{-10}; \quad K_b(CN^-) = 2,5 \cdot 10^{-5} \rightarrow \text{mt bazơ}$$

- Quy luật: Nếu  $K_a > K_b$ , dung dịch muối có tính axit; nếu  $K_a < K_b$ , dung dịch muối có tính bazơ....

19

- **Câu hỏi:** Trong các dung dịch muối sau đây:  $LiCl$ ,  $FeCl_3$ ,  $NH_4NO_3$ ,  $CH_3COOK$ ,  $C_6H_5ONa$ ,  $KOOC-COOK$ ,  $Cs_2SO_4$ ,  $Al_2(SO_4)_3$ , nước Javel, soda, Kalipermanganat.... dung dịch nào cho môi trường:

- Trung tính.
- Axit
- Bazơ
- Không xác định được

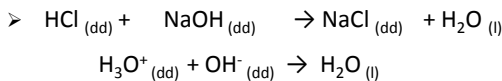


2/13/2011

**17.7. Các dạng phản ứng axit - bazơ**

- **Dạng 1: Axit mạnh + bazơ mạnh  $\rightarrow$  sp.**

- Ví dụ:



- Các phản ứng dạng này đều có hằng số cân bằng vô cùng lớn, nên được coi như xảy ra hoàn toàn.
- Các ion  $Na^+$  và  $Cl^-$  không thủy phân trong dung dịch sau pư
- **Câu hỏi:** Tính pH của dung dịch thu được sau khi trộn

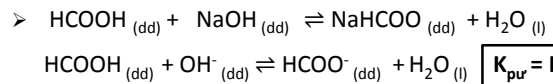
400ml HCl 0,2M với 100 ml NaOH 1M.

2/13/2011

21

- **Dạng 2: Axit yếu + bazơ mạnh  $\rightarrow$  sp.**

- Ví dụ:



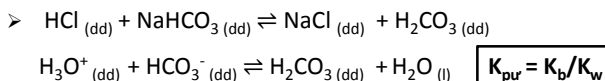
- Khi xem xét môi trường dung dịch (tính pH) phải xem xét quan hệ lượng ban đầu và sp  $\rightarrow$  3 trường hợp.
- **Câu hỏi:** Tính pH của dung dịch thu được sau khi trộn 400ml HCOOH 0,2M với 100 ml NaOH 1M.
- **Câu hỏi:** Tính pH của dung dịch thu được sau khi trộn 400ml HCOOH 0,3M với 100 ml NaOH 1M.

2/13/2011

22

- **Dạng 3: Axit mạnh + bazơ yếu  $\rightarrow$  sp.**

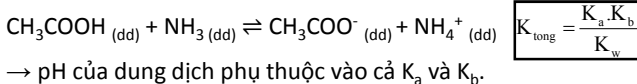
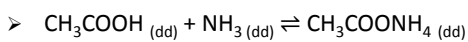
- Ví dụ:



- Tương tự dạng 2, trong dạng này  $\rightarrow$  3 trường hợp.

- **Dạng 4: Axit yếu + bazơ yếu  $\rightarrow$  sp.**

- Ví dụ:



2/13/2011

23

**17.8. Tính toán giá trị  $K_a$ ,  $K_b$  và pH**

- Giá trị của  $K_a$  và  $K_b$  được xác định bằng thực nghiệm.
- Khi tính toán, các giá trị để lắp vào biểu thức  $K_a$  và  $K_b$  đều là các giá trị nồng độ mol/l của các ion và chất ở thời điểm cân bằng.
- **VD:** Dung dịch  $HNO_2$  0,50M có pH = 1,72. Tính  $K_a$ ?

	$HNO_2$	$\rightleftharpoons$	$H^+$	+	$NO_2^-$
[ban đầu]	0,50M		0		0
[phản ứng]	-x		+x		+x
[cân bằng]	(0,50-x)		x		x

- pH = 1,72  $\rightarrow [H^+] = x = 10^{-1,72} = 0,019$  M.

$$K_a = \frac{x^2}{0,5 - x} \approx \frac{x^2}{0,5} = 7,1 \cdot 10^{-4}$$

2/13/2011

24

- **VD:** Tính pH của dung dịch  $\text{NH}_3$  0,1 M. Biết  $K_b = 1,8 \cdot 10^{-5}$ ?

	$\text{NH}_3$	+	$\text{H}_2\text{O}$	$\rightleftharpoons$	$\text{NH}_4^+$	+	$\text{OH}^-$
[ban đầu]	0,10M				0		0
[phản ứng]	-x				+x		+x
[cân bằng]	(0,10-x)				x		x

$$K_b = \frac{[\text{NH}_4^+][\text{OH}^-]}{[\text{NH}_3]} = \frac{x^2}{0,1-x} \approx \frac{x^2}{0,1} = 1,8 \cdot 10^{-5}$$

$$\rightarrow x = 1,3 \cdot 10^{-3} \text{M} = [\text{OH}^-] \rightarrow \text{pH} = 11,11$$

- **VD:** Tính pH của dung dịch  $\text{HCOOH}$  0,010M và tính % ion hóa của  $\text{HCOOH}$ ? Biết  $K_a = 1,6 \cdot 10^{-4}$ .

%ion hóa = (số mol  $\text{HCOOH}$  điện ly) / (số mol  $\text{HCOOH}$  bđ)

2/13/2011

25

- **VD:** Tính pH của dung dịch  $\text{H}_3\text{PO}_4$  5,0M? Biết các  $K_a$  của axit là  $K_{a1} = 7,2 \cdot 10^{-3}$ ;  $K_{a2} = 6,2 \cdot 10^{-8}$ ;  $K_{a3} = 4,8 \cdot 10^{-13}$ ;

- Do  $K_{a3} \ll K_{a2} \ll K_{a1}$  nên có thể bỏ các các nấc phân ly thứ 2, thứ 3 khi tính toán giá trị pH

	$\text{H}_3\text{PO}_4$ (d <sup>2</sup> )	$\rightleftharpoons$	$\text{H}_2\text{PO}_4^-$ (d <sup>2</sup> )	+	$\text{H}^+$ (d <sup>2</sup> )
[ban đầu]	5,0M		0		0
[phản ứng]	-x		+x		+x
[cân bằng]	(5,0-x)		x		x

$$K = \frac{[\text{H}_2\text{PO}_4^-][\text{H}^+]}{[\text{H}_3\text{PO}_4]} = \frac{x^2}{5,0-x} = 7,2 \cdot 10^{-3}$$

$$\rightarrow x = 0,19 \text{M} = [\text{H}^+] \rightarrow \text{pH} = 0,72$$

2/13/2011

26

### BT chương 17:

1, 5, 15, 31, 35, 41, 49, 51, 59, 61.

Bài sau: Chương 18

## CÂN BẰNG TRONG DUNG DỊCH

2/13/2011

27



2/13/2011

28

### 17.8. Thuyết axit bazơ của Lewis

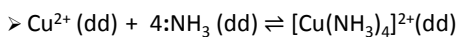
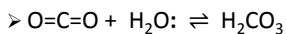
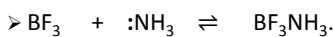
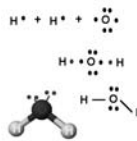
- Khái niệm axit-bazơ của Lewis :

> Axit: là chất chất mà có thể nhận cặp electron.

> Bazơ: là chất mà có thể nhường cặp electron

- Ưu điểm và nhược điểm của thuyết cũ:...

- **VD:**

Hydrogen Oxide - Water,  $\text{H}_2\text{O}$ 

2/13/2011

29

# HÓA HỌC ĐẠI CƯƠNG



GV: Lê Minh Thành

2/13/2011

1

## Chương 18 Cân bằng trong dung dịch



2/13/2011

2

### 18.1. Hiệu ứng ion đồng dạng

- Khái niệm ion đồng dạng: là ion thêm vào hệ mà trùng với ion có mặt trong hệ đang khảo sát.
- Ảnh hưởng của ion đồng dạng tuân theo nguyên lý chuyển dịch cân bằng Le Chatelier.
- Tính toán trong bài toán của ion đồng dạng, thường sử dụng bảng ICE để làm....

• **Câu hỏi:** Cho cb:  $\text{CH}_3\text{COOH} + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{H}_3\text{O}^+ + \text{CH}_3\text{COO}^-$   
Nêu sự chuyển dịch cb khi:

a) Thêm  $\text{CH}_3\text{COONa}$     b) Thêm  $\text{HCl}$     c) Thêm  $\text{NH}_4\text{Cl}$

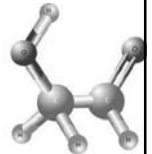
2/13/2011

3

• **Ví dụ:** Tính pH của dd thu được khi cho 200 ml dd  $\text{HCl}$  1M vào 300ml dd  $\text{CH}_3\text{COOH}$  1M. Biết  $K_a = 1,8 \cdot 10^{-5}$ .

• Hướng dẫn:

- > Tính lại nồng độ mol/L của  $\text{CH}_3\text{COOH}$  và  $\text{HCl}$ .
- > Lập bảng ICE với cân bằng của axit:



	$\text{CH}_3\text{COOH}$	$+ \text{H}_2\text{O}$	$\rightleftharpoons$	$\text{H}_3\text{O}^+$	$\text{CH}_3\text{COO}^-$
[ban đầu]	0,6 M			0,4 M	0
[phản ứng]	+x			-x	-x
[cân bằng]	(0,6+x)			(0,4-x)	-x

> Dùng  $K_a$  để tìm x  $\rightarrow$  tìm nồng độ  $\text{H}_3\text{O}^+$   $\rightarrow$  tìm pH:

$$K_a = \frac{(0,4 - x) \cdot x}{(0,6 + x)} = 1,8 \cdot 10^{-5}$$

2/13/2011

4

### 18.2. Dung dịch đệm

- Khái niệm: là một dung dịch hỗn hợp gồm axit yếu và muối tương ứng của nó (hoặc bazơ yếu và muối tương ứng của nó).
- Đặc điểm dd đệm:
  - > Chứa axit yếu và bazơ liên hợp với nó (hoặc bazơ yếu và axit liên hợp của nó).
  - > Có khả năng chống lại sự thay đổi của pH khi thêm vào dung dịch một lượng nhỏ  $\text{H}^+$  hay  $\text{OH}^-$ .
- Ví dụ:    dd chứa đồng thời  $\text{NH}_4\text{Cl}$  và  $\text{NH}_3$   
              dd chứa đồng thời  $\text{CH}_3\text{COONa}$  và  $\text{CH}_3\text{COOH}$ .

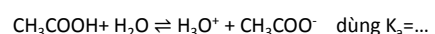
2/13/2011

5

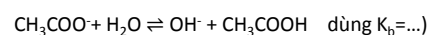
• **Ví dụ:** Tính pH dd đệm thu được khi cho 200 ml  $\text{NaOH}$  1M tác dụng với 300ml  $\text{CH}_3\text{COOH}$  1M. Có  $K_a = 1,8 \cdot 10^{-5}$

• Hướng dẫn:

- > Tính số mol của  $\text{NaOH}$ ,  $\text{CH}_3\text{COOH}$   $\rightarrow$   $\text{NaOH}$  thiếu  $\rightarrow$  dd sau pứ còn  $\text{CH}_3\text{COOH}$  và  $\text{CH}_3\text{COONa}$   $\rightarrow$  là một dd đệm.
- > Tính lại nồng độ mol/L của  $\text{CH}_3\text{COOH}$  và  $\text{CH}_3\text{COONa}$  sau pứ.
- > Lập bảng ICE với cân bằng của axit:



> (Hoặc lập bảng ICE với cân bằng của bazơ:



> Tính nồng độ  $\text{H}_3\text{O}^+$  (hoặc  $\text{OH}^-$ ) rồi tính pH của dd sau pứ.

2/13/2011

6

- Biểu thức tính pH cho dd đệm: (ptHenderson – Hasselbalch) :

$$\text{pH} = \text{pK}_a + \log \left( \frac{[\text{bazơ liên hợp}]}{[\text{axit}]} \right)$$

dùng cho dd đệm gồm axit yếu và muối của nó

$$\text{pOH} = \text{pK}_b + \log \left( \frac{[\text{axit liên hợp}]}{[\text{bazơ}]} \right)$$

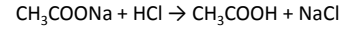
dùng cho dd đệm gồm bazơ yếu và muối của nó.

- **Ví dụ:** Tính pH dd đệm thu được khi cho 200 ml NaOH 1M tác dụng với 300ml CH<sub>3</sub>COOH 1M. Có K<sub>a</sub>=1,8.10<sup>-5</sup>.
- **Hướng dẫn:**
  - > Tính lại nồng độ mol/L của CH<sub>3</sub>COOH và CH<sub>3</sub>COONa sau pứ.
  - > [CH<sub>3</sub>COOH] = 0,2M                      [CH<sub>3</sub>COONa] = 0,4M
  - > Ta có:  $\text{pH} = \text{pK}_a + \log \left( \frac{[0,4]}{[0,2]} \right) = 4,74 + \log 2 = \dots$

- **Ví dụ:** Tính pH dd đệm mới thu được khi cho 100 ml HCl 1M vào một dd đệm có sẵn 700ml CH<sub>3</sub>COOH 1M và CH<sub>3</sub>COONa 0,8M. Có K<sub>a</sub>=1,8.10<sup>-5</sup>.

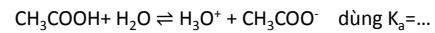
- **Hướng dẫn:**

- > Coi toàn bộ lượng HCl cho thêm vào sẽ tác dụng hết CH<sub>3</sub>COONa.



- > Tính lại nồng độ mol/L của CH<sub>3</sub>COOH và CH<sub>3</sub>COONa sau pứ.

- > Lập bảng ICE với cân bằng của axit, tính nồng độ H<sub>3</sub>O<sup>+</sup> rồi tính pH của dd sau pứ :



- > (Hoặc dùng phương trình Henderson – Hasselbalch để tính pH).

### 18.3. Chuẩn độ axit - bazơ

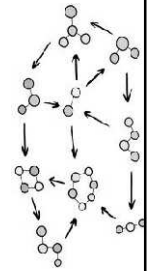
- Chuẩn độ là phương pháp dùng để xác định hàm lượng của một chất có trong một dung dịch hoặc xác định tính chất vật lý của một phân tử.
- Dung dịch tiêu chuẩn là dung dịch đã biết chính xác nồng độ của nó, dùng dung dịch này để xác định nồng độ các dung dịch khác.
- Dung dịch chuẩn độ là dung dịch chưa biết nồng độ. Ta dùng dung dịch tiêu chuẩn để xác định nó.
- Điểm tương đương là thời điểm khi dung dịch tiêu chuẩn và dung dịch chuẩn độ tác dụng vừa đủ với nhau. Người ta xác định điểm tương đương bằng chất chỉ thị màu.

- Chất chỉ thị màu (cho chuẩn độ axit-bazơ) là chất có màu sắc thay đổi theo giá trị pH của dung dịch..

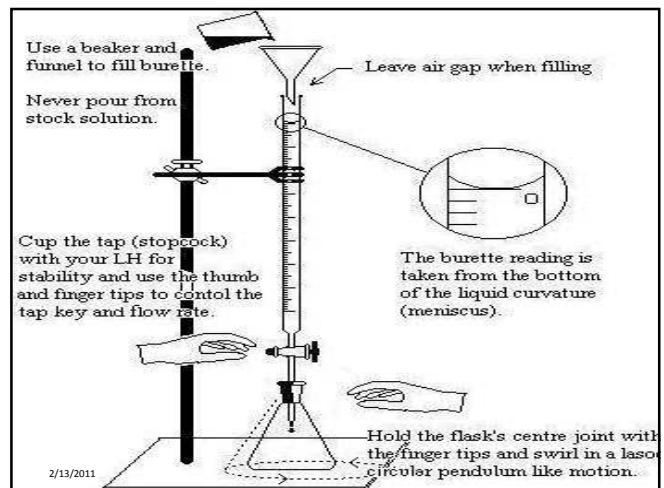
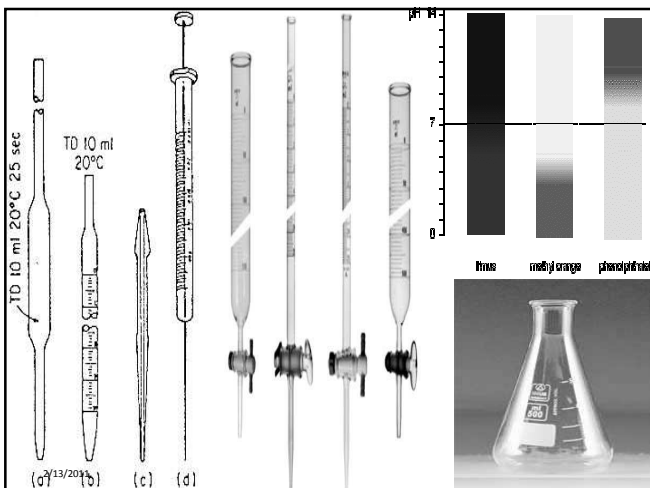
- Đường cong chuẩn độ: là đồ thị quan hệ giữa pH và thể tích của dung dịch axit hoặc bazơ thêm vào.

- Các bài toán chuẩn độ thường gặp (5 dạng):

- > Chuẩn độ axit mạnh với bazơ mạnh.
- > Chuẩn độ axit yếu với bazơ mạnh.
- > Chuẩn độ bazơ yếu bằng axit mạnh.
- > Chuẩn độ axit yếu đa bậc bằng bazơ mạnh.
- > Chuẩn độ bazơ yếu đa bậc bằng axit mạnh.



- Biểu thức dùng để tính pH và nồng độ các chất trong hệ, cho 4 trường hợp sau là : phương trình Henderson – Hasselbalch.

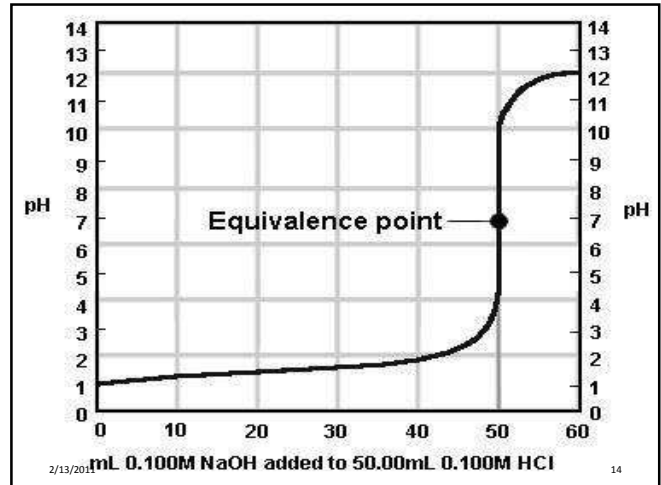


• **Ví dụ:** Xét quá trình chuẩn độ 100 ml dd HCl 0,1M bằng dd NaOH 0,1M.

- > Dd tiêu chuẩn là NaOH 0,1M (để ở trên buret); dd chuẩn độ là HCl (cho vào trong bình tam giác).
- > Chất chỉ thị màu có thể là quỳ tím, hoặc P.P.
- > Phương trình pứ:  $H^+ + OH^- \rightarrow H_2O$ .
- > Ban đầu khi chưa chuẩn độ:  $pH = 1$ .
- > Tại điểm tương đương:  $pH = 7$ .
- > Sau điểm tương đương (khi NaOH dư 10ml):  $pH = 11,67$ .

Đồ thị biểu diễn đường cong chuẩn độ:

13



2/13/2011

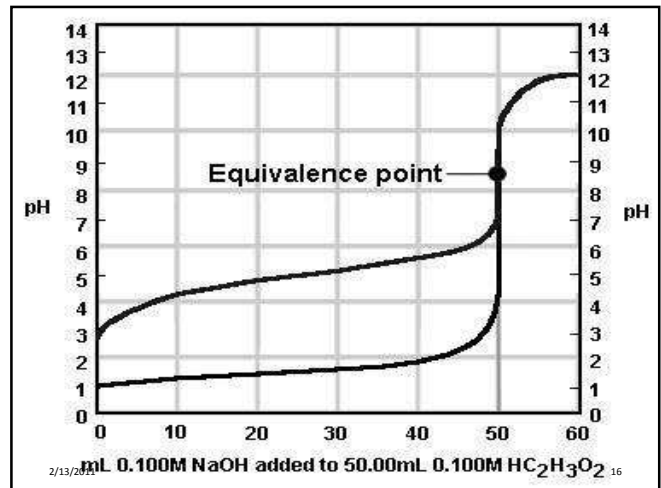
14

• **Ví dụ:** Xét quá trình chuẩn độ 100 ml dd  $CH_3COOH$  0,1M bằng dd NaOH 0,1M. Biết  $K_a = 1,8 \cdot 10^{-5}$ .

- > Dd tiêu chuẩn là NaOH 0,1M (để ở trên buret); dd chuẩn độ là  $CH_3COOH$  (cho vào trong bình tam giác).
- > Chất chỉ thị màu là P.P.
- > Phương trình pứ:  $CH_3COOH + OH^- \rightarrow CH_3COO^- + H_2O$ .
- > Ban đầu khi chưa chuẩn độ:  $pH = -\log\sqrt{K_a \cdot C_a} = 2,87$
- > Tại điểm tương đương:  $pOH = -\log\sqrt{K_b \cdot C_b} \rightarrow pH = 8,72$ .
- > Sau điểm tương đương (khi NaOH dư 10ml):  $pH = 11,67$ .

Đồ thị biểu diễn đường cong chuẩn độ:

15



2/13/2011

16

• **Khái niệm chất chỉ thị màu axit-bazơ:** là chất có màu sắc thay đổi theo giá trị pH dung dịch.

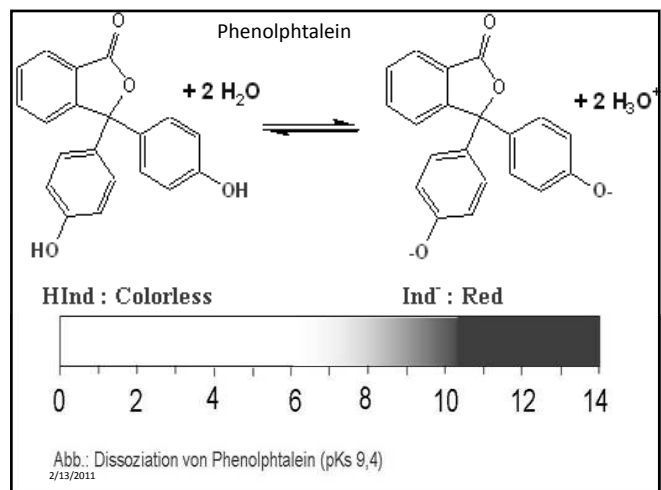
- > Các chất chỉ thị thường là các axit hoặc bazơ hữu cơ yếu mà ở dạng phân tử hoặc ion chúng có màu khác nhau.
- > Phenolphthalein,  $C_{20}H_{14}O_4$ . Tinh thể nhỏ màu trắng, không mùi, không vị,  $t_{nc} = 259 - 263$  °C. Ít tan trong nước, dễ tan trong etanol hoặc ete, không màu ở  $pH < 9$ ; màu hồng ở  $pH > 9$ ; dùng trong y học (làm thuốc tẩy), trong công nghiệp, tổng hợp phẩm nhuộm.



- > Giấy quỳ (litmus) là giấy có tẩm dung dịch etanol hoặc nước với chất màu tách từ rễ cây địa y (ngành thực vật cộng sinh giữa tảo và nấm) Roccella và Dendrographa, có màu gốc ban đầu là màu tím (nên còn được gọi là giấy quỳ tím), được sử dụng trong ngành hóa học để thử, kiểm nghiệm độ pH.

2/13/2011

17



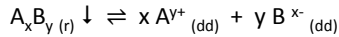
2/13/2011



### 18.4. Muối ít tan

- Muối ít tan là các muối có độ tan rất ít trong nước (<1g/100g nước), và phần tan được thì điện ly hoàn toàn.

- Quá trình hòa tan và điện ly của muối ít tan là một cb:



- Hằng số cân bằng của quá trình trên được gọi là tích số tan T.

$$T = K_{sp} = [A^{y+}]^x \cdot [B^{x-}]^y$$

- Gọi độ tan của muối tan  $A_x B_y$  là S (mol/L) thì quan hệ giữa độ tan và tích số tan là:

$$T = S^{x+y} \cdot x^x \cdot y^y$$

- Câu hỏi:** Biết muối  $BaF_2$  là một muối ít tan, có độ tan S (mol/L) và tích số tan T. Nêu quan hệ T và S cho muối này.

- Đặc điểm của tích số tan.

- > Giá trị của T càng lớn, muối đó tan và điện ly càng mạnh.
- > Giá trị của T chỉ phụ thuộc vào nhiệt độ, bản chất muối ít tan.

- Khi so sánh độ tan của 2 muối ít tan mà dựa vào T, thì chỉ có thể so sánh khi 2 muối đó có cùng tỉ số cation/anion.

- Độ hòa tan và ảnh hưởng của ion đồng dạng lên muối ít tan tuân theo nguyên lý Le Chatelier: *Khi thêm ion đồng dạng thì độ hòa tan sẽ giảm.*

- Độ hòa tan của muối còn chịu ảnh hưởng của pH và sự thủy phân của các anion trong muối có tính bazơ

2/13/2011

20

- Câu hỏi:** Hãy kết luận về độ tan S của chất ít tan  $PbCl_2$ , khi thêm vào dd của muối này một lượng NaCl, hoặc một lượng  $Pb(NO_3)_2$ .

- Ví dụ:** Tính độ hòa tan của  $Mg(OH)_2$  trong nước và trong dung dịch  $MgCl_2$  0,01 M ? (Biết  $T = 5,6 \cdot 10^{-12}$ )

- Hướng dẫn:

- > Trong nước, độ hòa tan của  $Mg(OH)_2 = S = \sqrt[3]{\frac{T}{4}} = 1,1 \cdot 10^{-4} M$
- > Trong môi trường có ion đồng dạng, lập bảng ICE để tính.



[I]	...	0,01	0
[C]	-x	+x	+2x
[E]	...	(0,01 + x)	2x

- >  $T = [Mg^{2+}][OH^-]^2 = (0,01+x)(2x)^2 = 5,6 \cdot 10^{-12} \rightarrow x = 1,2 \cdot 10^{-5} M$

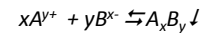
2/13/2011

21

### 18.5. Phản ứng tạo kết tủa

- Câu hỏi: Cho dung dịch  $AgNO_3$  tác dụng với dung dịch NaCl, có xảy ra phản ứng tạo kết tủa không?

- Xét quá trình tạo kết tủa tổng quát :



- > Tính số tan:

$$T = [A^{y+}]^x \cdot [B^{x-}]^y$$

- > Tính số ion:

$$Q = (C_{A^{y+}})^x \cdot (C_{B^{x-}})^y$$

- Có 3 khả năng xảy ra giữa Q và T:

- > Nếu  $Q > T \Rightarrow$  có tạo thành kết tủa.
- > Nếu  $Q = T \Rightarrow$  dung dịch bão hòa, không kết tủa.
- > Nếu  $Q < T \Rightarrow$  không tạo thành kết tủa.

2/13/2011

22

- Ví dụ:** Có kết tủa tạo ra không khi trộn 0,1 L dd  $Ca(NO_3)_2$  0,30M với 0,2 L dd NaF 0,06 M? Biết  $T_{(CaF_2)} = 3,2 \cdot 10^{-11}$ .

- Hướng dẫn:

- > Tính lại nồng độ của ion  $Ca^{2+} = 0,10 M$  và ion  $F^- = 0,04 M$  sau khi trộn.

- > Phương trình pứ:  $Ca^{2+} (dd) + 2 F^- (dd) \rightleftharpoons CaF_2 (r)$

- > Tính tích số ion:  $Q = [Ca^{2+}][F^-]^2 = (0,10)(0,040)^2 = 1,6 \cdot 10^{-4} > T$

- > Kết luận: có xuất hiện kết tủa  $CaF_2$  tạo ra.

### BT chương 18:

7, 13, 19, 21, 23, 29, 43, 53, 59, 63.



Bài sau: Chương 19

## Entropi và năng lượng tự do

2/13/2011

24

# HÓA HỌC ĐẠI CƯƠNG

GV: Lê Minh Thành



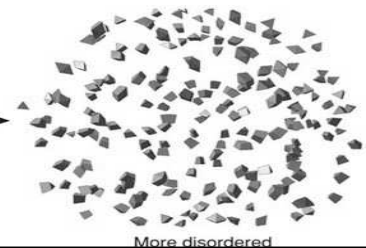
1

## Chương 19 Entropi và năng lượng tự do



Highly ordered

Increase  
in entropy →



More disordered

2/13/2011

### 19.1. Quá trình tự diễn biến và trạng thái cân bằng

- Khái niệm quá trình tự diễn biến: là quá trình xảy ra mà không cần có tác động nào khác, cho tới khi đạt cân bằng.
- Xu hướng chung của các quá trình tự diễn biến trong tự nhiên là tự nó đến trạng thái cân bằng của hệ.
- VD: + các phân tử khí chỉ chuyển động từ nơi có nồng độ cao đến nơi có nồng độ thấp.

+ phản ứng  $\text{NaOH} + \text{HCl} \rightarrow \text{NaCl} + \text{H}_2\text{O}$ .

+ nhiệt truyền từ vật nóng sang vật lạnh tiếp xúc với nó

2/13/2011

3

### 19.2. Nhiệt và khả năng tự diễn biến



- Nguyên lý 1 của nhiệt động học:
  - Phát biểu theo sự bảo toàn năng lượng:...
  - Phát biểu theo nội năng và công:  $\Delta U = Q + W$
- **Câu hỏi:** quá trình tự diễn biến là tỏa nhiệt hay thu nhiệt? Và các quá trình tỏa nhiệt có tự diễn biến hay ko?
- Kết luận khi xét các ví dụ trong thực tế: nhiệt (hoặc nguyên lý 1) không phải là tiêu chí duy nhất dùng để xác định chiều diễn biến của quá trình (vật lý, hóa học).
- VD: + quá trình hòa tan  $\text{NH}_4\text{NO}_3$  = tự diễn biến, thu nhiệt.

2/13/2011

4

### 19.3. Sự phân tán năng lượng và vật chất

- Khi vật chất, hoặc năng lượng thực hiện quá trình phân tán
  - Độ trật tự của hệ ở trạng thái sau có thể thấp hơn độ trật tự của trạng thái ban đầu.
  - Năng lượng khi phân tán có thể ứng với sự tạo ra số phân tử, nguyên tử nhiều hơn ban đầu.
- Đặc điểm:
  - Một quá trình mà cả năng lượng và vật chất đều phân tán, qt đó là tự diễn biến.
  - Một quá trình mà vật chất phân tán, năng lượng chưa xác định, thì chưa thể kết luận về tính diễn biến của nó.
  - Một quá trình mà năng lượng ko đổi → ko thể tự diễn biến.

2/13/2011

5

### 19.4. Entropi

- Khái niệm entropi: là đại lượng nhiệt động dùng để xác định độ hỗn độn của hệ do sự phân tán vật chất, năng lượng.
- Biểu thức tính:  $\Delta S = \frac{q}{T}$
- Đơn vị đo: J/K.mol hoặc cal/K.mol
- Đặc điểm của entropi:
  - Một hệ có độ hỗn độn càng lớn thì entropi S càng lớn.
  - Entropi là hàm trạng thái, tức là biến thiên entropi  $\Delta S$  chỉ phụ thuộc vào trạng thái đầu và cuối, ko phụ thuộc cách tiến hành
  - Entropi của mọi vật chất ở 0 K (không độ tuyệt đối) đều bằng 0.
  - Không có giá trị  $S < 0$ , vì giá trị Q ở công thức trên luôn ứng với nhiệt hấp thụ.

2/13/2011

6

- Entropi tiêu chuẩn,  $S^\circ$ , là entropi ở trạng thái tiêu chuẩn (25°C, khí có  $P = 1 \text{ bar}$ , dd có  $C_m = 1 \text{ m}$ ).

- Hệ quả.

- Với cùng một chất, hoặc các chất tương tự nhau thì:  $S^\circ$  (khí)  $\gg S^\circ$  (lỏng)  $> S^\circ$  (rắn).
- Chất có khối lượng mol phân tử ( $M$ ) càng lớn,  $S$  càng lớn.
- Chất có cấu trúc phân tử càng phức tạp,  $S$  càng lớn.
- Nhiệt độ tăng sẽ làm  $S$  tăng.
- Sự hòa tan chất lỏng, rắn nguyên chất hòa tan vào dung môi sẽ làm  $S$  chất đó tăng.



2/13/2011

7

### 19.5. Nguyên lý thứ hai và thứ ba của nhiệt động học

- Nội dung nguyên lý hai: “quá trình tự diễn biến là quá trình làm tăng entropi  $S$  của hệ.”
  - Một hệ lớn và không trao đổi năng lượng với môi trường sẽ có entropy luôn tăng hoặc không đổi theo thời gian.
  - Không thể chuyển từ trạng thái mất trật tự sang trạng thái trật tự nếu không có sự can thiệp từ bên ngoài.
- Nội dung nguyên lý ba: “không có sự hỗn độn khi các chất ở trạng thái tinh thể ở nhiệt độ tuyệt đối 0 K”. Tức là ở 0 K các chất có  $S = 0$ .

2/13/2011

8

### \* Cách tính biến thiên entropi $\Delta S$ của hệ

- Với một quá trình vật lý, hoặc quá trình hóa học:

$$\Delta S_{\text{hệ}} = \sum S^\circ (\text{sản phẩm}) - \sum S^\circ (\text{ban đầu})$$

- Với một hệ xét cả môi trường xung quanh và vũ trụ:

$$\Delta S_{\text{vũ trụ}} = \Delta S_{\text{hệ}} + \Delta S_{\text{môi trường}}$$

- $\Delta S_{\text{vũ trụ}} = 0 \rightarrow$  hệ đạt tới cân bằng.
- $\Delta S_{\text{vũ trụ}} < 0 \rightarrow$  quá trình trong hệ ko tự diễn biến
- $\Delta S_{\text{vũ trụ}} > 0 \rightarrow$  quá trình trong hệ tự diễn biến (nguyên lý II)
- Trong trường hợp tính entropi có liên quan đến nhiệt, quá trình là thuận nghịch ở  $T = \text{constant}$ , thì  $q_{\text{mt}} = -\Delta H^\circ_{\text{hệ}}$ , do đó:

$$\Delta S_{\text{mt}} = \frac{q_{\text{mt}}}{T} = \frac{-\Delta H_{\text{hệ}}}{T}$$

2/13/2011

9

- Ví dụ:** Tính  $\Delta S_{\text{vũ trụ}}$  của quá trình hòa tan muối ăn trong nước ở 25°C. Quá trình đó có tự xảy ra hay ko? Cho biết  $S_{\text{NaCl, dd}}$ ,  $S_{\text{NaCl, rắn}}$ ,  $\Delta H_{\text{s, NaCl, dd}}$ ,  $\Delta H_{\text{s, NaCl, rắn}}$ .

- Hướng dẫn:

- Sơ đồ của quá trình:  $\text{NaCl}_{(\text{rắn})} \rightarrow \text{NaCl}_{(\text{dd})}$ .
- Tính  $\Delta S_{\text{hệ}} = S_{\text{NaCl, dd}} - S_{\text{NaCl, rắn}}$ .
- Tính  $\Delta H_{\text{hệ}} = \Delta H_{\text{s, NaCl, dd}} - \Delta H_{\text{s, NaCl, rắn}}$ .
- Tính  $\Delta S_{\text{mt}} = -\Delta H_{\text{hệ}}/T \rightarrow \Delta S_{\text{vũ trụ}} = \Delta S_{\text{hệ}} + \Delta S_{\text{môi trường}}$
- Kết luận, do giá trị của  $\Delta S_{\text{vũ trụ}} > 0$ , nên quá trình trên tự diễn biến (hay là tự xảy ra).

2/13/2011

10

- Ví dụ:** Xét phản ứng:  $\text{CO}_{(\text{k})} + 2\text{H}_{2(\text{k})} \rightarrow \text{CH}_3\text{OH}_{(\text{l})}$ . Phản ứng có tự xảy ra ở 298 K? Cho biết  $S_{\text{CH}_3\text{OH, lỏng}}$ ,  $S_{\text{CO, khí}}$ ,  $S_{\text{H}_2, \text{k}}$ ,  $\Delta H_{\text{CH}_3\text{OH, lỏng}}$ ,  $\Delta H_{\text{CO, khí}}$ ,  $\Delta H_{\text{H}_2, \text{k}}$ .

- Hướng dẫn:

- Tính  $\Delta S_{\text{hệ}} = S_{\text{CH}_3\text{OH, lỏng}} - S_{\text{CO, khí}} - 2 \cdot S_{\text{H}_2, \text{k}}$ .
- Tính  $\Delta H_{\text{hệ}} = \Delta H_{\text{CH}_3\text{OH, lỏng}} - \Delta H_{\text{CO, khí}} - 2 \cdot \Delta H_{\text{H}_2, \text{k}}$ .
- Tính  $\Delta S_{\text{mt}} = -\Delta H_{\text{hệ}}/T \rightarrow$  Tính  $\Delta S_{\text{vũ trụ}} = \Delta S_{\text{hệ}} + \Delta S_{\text{môi trường}}$
- Kết luận, do giá trị của  $\Delta S_{\text{vũ trụ}} > 0$ , nên q/t trên tự diễn biến

- Chú ý:** Khi tính cho pứ hóa học, nhớ nhân thêm hệ số tỉ lượng vào biểu thức tính  $\Delta S_{\text{hệ}}$  (giống việc tính  $\Delta H_{\text{pứ}}$  đã học).

2/13/2011

11

### \* Quan hệ giữa $\Delta S$ , $\Delta H$ và tính tự diễn biến

- Xét một quá trình bất kỳ ở điều kiện tiêu chuẩn:

- $\Delta S_{\text{hệ}} > 0$ ,  $\Delta H_{\text{hệ}} < 0 \rightarrow$  quá trình trong hệ tự diễn biến.
- $\Delta S_{\text{hệ}} < 0$ ,  $\Delta H_{\text{hệ}} > 0 \rightarrow$  quá trình trong hệ không tự diễn biến
- $\Delta S_{\text{hệ}}$  và  $\Delta H_{\text{hệ}}$  cùng dấu (cùng âm, hoặc cùng dương)  $\rightarrow$  tính tự diễn biến còn phụ thuộc vào nhiệt độ trong hệ.



2/13/2011

12

## 19.6. Năng lượng tự do Gibbs

- Định nghĩa:

$$G = H - T.S.$$

$$\rightarrow \Delta G = \Delta H - T.\Delta S$$

- Đặc điểm của năng lượng tự do Gibbs:

- Năng lượng tự do G là hàm trạng thái, tức là...
- Hầu như không thể xác định được giá trị G tuyệt đối của một chất, mà thường tính được biến thiên năng lượng tự do  $\Delta G$  (giống đặc điểm của H và  $\Delta H$ ).
- Xét hàm  $\Delta G$  tức là đã xét cả hai yếu tố  $\Delta S$ ,  $\Delta H$  đồng thời, và cả T, nên hàm G tỏ ra ưu thế và tiện lợi hơn so với S, H khi xét tính tự diễn biến của quá trình.

2/13/2011 Biến thiên  $\Delta G$  của một đơn chất bằng 0.

13

- Tính tự diễn biến và  $\Delta G$ :

- $\Delta G < 0$ : phản ứng tự xảy ra
- $\Delta G > 0$ : phản ứng không tự xảy ra
- $\Delta G = 0$ : quá trình ở trạng thái cân bằng

- Chứng minh:

$$\Delta S_{hệ} > 0, \Delta H_{hệ} < 0 \rightarrow \Delta G = \Delta H - T.\Delta S < 0.$$

$$\Delta S_{hệ} < 0, \Delta H_{hệ} > 0 \rightarrow \Delta G = \Delta H - T.\Delta S > 0.$$

$\Delta S_{hệ}$  và  $\Delta H_{hệ}$  cùng dấu (cùng âm, hoặc cùng dương)  $\rightarrow$  quá trình tự xảy ra khi  $T > \Delta H/\Delta S$ .

- Biến thiên năng lượng tự do của phản ứng:

$$\Delta G_{pur}^{\circ} = \sum \Delta G_{s(sản phẩm)}^{\circ} - \sum \Delta G_{s(tham gia)}^{\circ}$$

2/13/2011

14

- Ví dụ:** Cho pứ:  $2Fe_2O_3(r) + 3C(r) \rightarrow 4Fe(r) + 3CO_2(k)$ . Cho biết giá trị  $S^{\circ}$  và  $\Delta H^{\circ}_s$  của các chất trong pứ.

a) Ở 25°C phản ứng có xảy ra không?

b) Tính nhiệt độ để cho pứ sau xảy ra?

- Hướng dẫn:

- Tính  $\Delta S^{\circ}_{hệ} = 4.S^{\circ}_{Fe} + 3.S^{\circ}_{CO} - 2.S^{\circ}_{Fe_2O_3} - 3.S^{\circ}_C$ .
- Tính  $\Delta H^{\circ}_{hệ} = 3.\Delta H^{\circ}_{s,CO} - 2.\Delta H^{\circ}_{s,Fe_2O_3}$ .
- Tại 25°C = 298K  $\rightarrow \Delta G^{\circ}_{hệ} = \Delta H^{\circ}_{hệ} - T.\Delta S^{\circ}_{hệ} < 0 \rightarrow$  pứ ko xảy ra.
- Để phản ứng xảy ra được thì  $\Delta G < 0 \rightarrow T > \Delta H_{hệ}/\Delta S_{hệ}$ .

2/13/2011

15

## 19.7. Năng lượng tự do $\Delta G$ và hằng số cân bằng K

- Xét phản ứng dạng tổng quát:  $aA + bB \rightarrow cC + dD$

$\rightarrow$  Tỉ số phản ứng và hằng số cân bằng lần lượt là:

$$Q = \frac{C_C^c \cdot C_D^d}{C_A^a \cdot C_B^b}$$

$$K_C = \frac{[C]^c \cdot [D]^d}{[A]^a \cdot [B]^b}$$

- Ở điều kiện bất kỳ, liên hệ giữa  $\Delta G$  và  $\Delta G^{\circ}$  là:

$$\Delta G = \Delta G^{\circ} + RT \ln Q$$

- Khi đạt tới cân bằng thì  $\Delta G = 0$  và  $Q \equiv K$  nên:

$$\Delta G^{\circ} = -RT \ln K \quad (R=8,314 \text{ J/K.mol})$$

- Chú ý:** K ở đây có thể là  $K_c$ ,  $K_p$ ,  $K_{sp}$  hay  $T_t$  tùy vào quá trình.

2/13/2011

16

- Ví dụ:** Cho pứ:  $2SO_2(k) + O_2(k) \rightleftharpoons 2SO_3(k)$ . Cho biết giá trị  $S^{\circ}$  và  $\Delta H^{\circ}_s$  của các chất trong pứ.

a) Ở điều kiện chuẩn phản ứng có xảy ra không?

b) Giả sử biết rằng ở 25°C, hệ có chứa  $SO_2$  (0,50 atm),  $O_2$  (0,01 atm) và  $SO_3$  0,10 (atm). Phản ứng sẽ diễn ra theo chiều nào?

- Hướng dẫn:

- Tính  $\Delta S^{\circ}_{hệ} = 2.S^{\circ}_{SO_3} - 2.S^{\circ}_{SO_2} - S^{\circ}_{O_2}$ .
- Tính  $\Delta H^{\circ}_{hệ} = 2.\Delta H^{\circ}_{s,SO_3} - 2.\Delta H^{\circ}_{s,SO_2}$ .
- Tại 25°C = 298K  $\rightarrow \Delta G^{\circ}_{hệ} = \Delta H^{\circ}_{hệ} - T.\Delta S^{\circ}_{hệ} < 0 \rightarrow$  pứ có xảy ra.
- Ở đk mới, tính giá trị  $Q_p$ :  $Q_p = \frac{P_{SO_3}^2}{P_{SO_2}^2 \cdot P_{O_2}}$
- Tính lại giá trị:  $\Delta G_{298} = \Delta G^{\circ}_{298} + RT \ln Q < 0 \rightarrow$  pứ ưu tiên xảy ra theo chiều thuận.

2/13/2011

17

## BT chương 19:

3, 13, 19, 23, 25, 29, 31, 33, 41, 61.

## Bài cuối: Chương 20

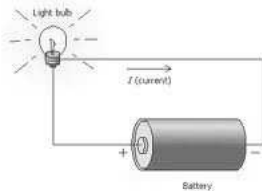
## Phản ứng trao đổi electron

2/13/2011

18

## Chương 20

### Phản ứng trao đổi electron



2/13/2011

2

#### 20.1. Phản ứng oxi hóa khử

- Khái niệm phản ứng oxi hóa khử:....
- Khái niệm chất oxi hóa, chất khử (chất bị oxi hóa, bị khử)....
- Khái niệm sự oxi hóa, sự khử (qt oxi hóa, qt khử)...
- Khái niệm số oxi hóa....
- Khái niệm bán phản ứng oxi hóa, bán pứ khử:...
- Cách cân bằng phản ứng oxi hóa - khử: 2 cách
- Quy luật phản ứng trong phản ứng oxi - k:  $m+m \rightarrow y+y$
- **Câu hỏi:** Cho phản ứng:  $Al + Fe^{2+} \rightarrow Al^{3+} + Fe$ . Hãy chỉ ra chất oxi hóa, chất khử, qt oxi hóa, qt khử, và các bán phản ứng oxi hóa, bán pứ khử...

2/13/2011

3

#### • Chú ý quan trọng khi viết bán pứ:

- Trong dd axit, thiếu tử Oxi bên nào thì thêm  $H_2O$  vào bên đó, thêm  $H^+$  vào bên còn lại.
- Trong dd bazơ, thiếu tử Oxi bên nào thì thêm  $OH^-$  vào bên đó, thêm  $H_2O$  vào bên còn lại.
- Cân bằng về số tử ở hai vế của bán phản ứng.
- Cân bằng về điện tích ở hai vế của bán pứ, bằng cách thêm các e vào một trong hai vế sao cho phù hợp, còn ptpứ tổng thì không được có mặt e.
- Cân bằng oxi, dùng cặp  $H_2O/OH^-$ , với hiđro dùng cặp  $H_2O/OH^-$  và  $H_2O/H^+$ .

2/13/2012

4

- **Câu hỏi:** Cho các cặp oxi hóa khử:  $VO_2^+/VO^{2+}$ ;  $MnO_4^-/Mn^{2+}$   $H_2O/H_2$ ; Hãy viết các bán pứ cho các cặp đó, giả sử chúng xảy ra được trong 2 môi trường: ax - bz?

#### • Hướng dẫn

- Ở môi trường axit:  $VO_2^+ \rightarrow VO^{2+}$   
 $2H^+ + VO_2^+ \rightarrow VO^{2+} + H_2O$   
 $1e + 2H^+ + VO_2^+ \rightarrow VO^{2+} + H_2O$
- Ở môi trường bazơ:  $VO_2^+ \rightarrow VO^{2+}$   
 $OH^- + VO_2^+ \rightarrow VO^{2+} + H_2O$  ???  
 $H_2O + VO_2^+ \rightarrow VO^{2+} + 2OH^-$  ???  
 $1e + H_2O + VO_2^+ \rightarrow VO^{2+} + 2OH^-$

➢ SV hãy tự thực hiện với 2 cặp còn lại!

2/13/2011

5

#### 20.2. Pin Volta

- Khái niệm pin Volta: là một tế bào (hệ) điện hoá trong đó phản ứng hóa học được dùng để tạo ra dòng điện. (pin điện hóa là dụng cụ cho phép chuyển năng lượng hóa học thành điện năng.)
- Cấu tạo pin: gồm 2 cực nhúng vào 2 dung dịch chất điện ly được ghép vào với nhau và được ngăn bằng màng xốp, hay bằng cầu muối. Anot (cực âm) là nơi xảy ra quá trình oxi hóa, catot (cực dương) là nơi xảy ra quá trình khử. Electron chuyển từ cực.... sang cực .... bằng...
- Cầu muối : thường được làm bằng gelatin (dạng dẻo và đặc) trong đó chứa các ion hòa tan, chứa trong ống làm bằng thủy tinh, cho phép các ion đi từ nửa pin này sang nửa pin kia đồng thời tránh được việc trộn lẫn 2 dung dịch.

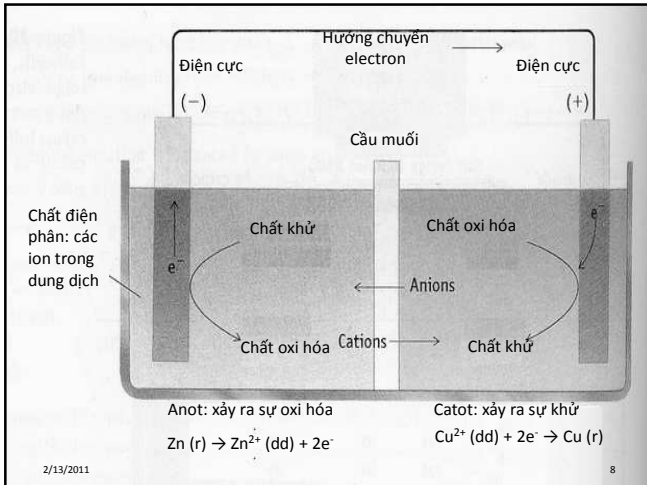
6

- Cơ chế phát sinh dòng điện trong pin điện hóa (xét pin Zn-Cu)

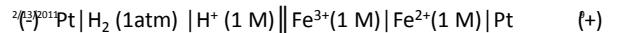
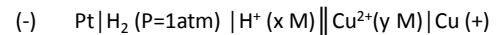
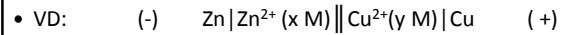
- Ở cực âm (anot): xảy ra quá trình oxi hóa và tạo ra electron.  
 $Zn \rightarrow Zn^{2+} + 2e.$
- Ở cực dương (catot): xảy ra quá trình khử, nhận e từ cực âm  
 $Cu^{2+} + 2e \rightarrow Cu.$
- Ở mạch điện ngoài: e di chuyển từ cực (-) sang cực (+) → dòng điện đi từ cực (+) sang cực (-)..
- Ở cầu muối: các ion (+) di chuyển về dung dịch cực (+) và ion (-) di chuyển về dung dịch cực (-).
- Phản ứng xảy ra trong pin:  $Zn + Cu^{2+} \rightarrow Zn^{2+} + Cu.$

2/13/2011

7



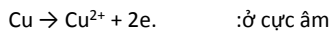
- Quy ước về cách biểu diễn pin điện hóa:
  - Điện cực đóng vai trò anốt xếp bên trái, điện cực đóng vai trò catốt xếp bên phải pin điện.
  - Ranh giới giữa hai pha lỏng và rắn được kí hiệu bằng một vạch thẳng đứng, ranh giới giữa hai pha lỏng có cầu muối được kí hiệu bằng vạch kép thẳng đứng.
  - Nồng độ các chất dạng dung dịch, áp suất các chất khí được viết kèm chất tương ứng.



• **Câu hỏi:** Cho phản ứng:  $\text{Cu} + 2\text{Ag}^+ \rightarrow \text{Cu}^{2+} + 2\text{Ag}$ . Hãy thiết lập một pin điện hóa mà xảy ra phản ứng trên?

• Hướng dẫn

- Xác định được chất oxy hóa, chất khử trong pứ.
- Chất oxy hóa sẽ có quá trình khử và xảy ra ở catot, còn chất khử sẽ có quá trình oxy hóa và xảy ra ở anot.
- Viết các bán phản ứng, có cân bằng các bán phản ứng đó sao cho phù hợp môi trường.



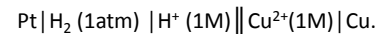
- Thiết lập sơ đồ pin và biểu diễn theo quy ước:



2/13/2011

10

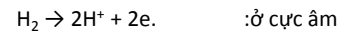
• **Câu hỏi:** Cho sơ đồ pin :



Hãy chỉ ra các bán pứ và phản ứng tổng xảy ra trong pin?

• Hướng dẫn

- Cực âm (bên trái) xảy ra qt oxi của chất khử. Cực dương (bên phải) xảy ra qt khử của chất oxy hóa.
- Viết các bán phản ứng, có cân bằng các bán phản ứng đó sao cho phù hợp môi trường.



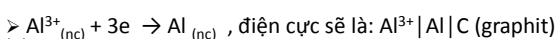
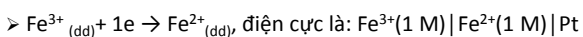
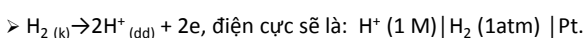
- Phản ứng tổng:  $\text{H}_2 + \text{Cu}^{2+} \rightarrow 2\text{H}^+ + \text{Cu}$

2/13/2011

11

### \* Điện cực trơ

- Khái niệm: là các điện cực thường không bị mòn trong quá trình pin hoạt động, không tham gia vào quá trình oxy hóa – khử, chỉ đóng vai trò dẫn điện.
- Trong trường hợp chất tham gia phản ứng và chất tạo thành là những chất không thể dùng làm điện cực được, thì cần dùng điện cực trơ.
- VD: các bán phản ứng sau cần có điện cực trơ:



2/13/2011

12

### 20.4. Thế điện hóa tiêu chuẩn

- Khái niệm thế điện cực: là điện thế xuất hiện ở mỗi điện cực khi nhúng thanh kim loại vào dung dịch muối có chứa cation tương ứng của kim loại đó.

• Khái niệm thế điện cực tiêu chuẩn: ....

• Đặc điểm của thế điện cực:

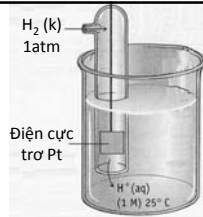
- Là thế oxy hóa/ khử của các cặp oxy hóa khử tương ứng.
- Giá trị của E càng dương  $\rightarrow$  tính oxy hóa càng mạnh, tính khử càng yếu và ngược lại.
- Không thể xác định được giá trị tuyệt đối của chúng....

2/13/2011

13

- Thế điện cực được xác định một cách tương đối bằng cách so sánh độ chênh lệch với điện cực hydro. Ở đk chuẩn người ta quy ước thế điện cực của điện cực hydro bằng 0.

**điện cực hydro:  $H^+ (1 M) | H_2 (1 atm) | Pt$**



- Xây dựng được bảng thế điện cực tiêu chuẩn của các cặp oxi/h (còn gọi tắt là thế khử, bởi nó đúng cho qt khử) – trang 452, 453.
- Đặc điểm của dãy thế khử là:

- > giá trị E càng dương, chất oxi hóa càng mạnh, chất khử càng yếu.
- > dấu của nó là so sánh với điện cực hydro tiêu chuẩn.
- > đưa ra được độ mạnh yếu của các cặp oxi/khử:  $Oxi + ne \rightleftharpoons Kh$

2/13/2011 **đưa ra được chiều phản ứng oxi/khử theo quy tắc alpha.** 14

- **Câu hỏi:** Cho hai cặp oxi hóa-khử  $2H^+/H_2$  và  $Fe^{3+}/Fe^{2+}$ , cho

$$E^0_{(2H^+/H_2)} = 0,0V; E^0_{(Fe^{3+}/Fe^{2+})} = 0,771V?$$

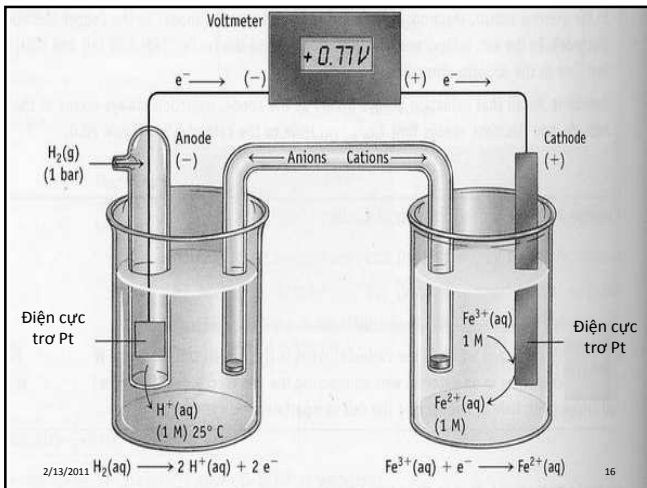
- So sánh tính oxi hóa của  $H^+$ ,  $Fe^{2+}$ ,  $Fe^{3+}$ .
- So sánh tính khử của  $H_2$  và  $Fe^{2+}$ .
- Dự đoán chiều của phản ứng  $Fe^{2+} + H^+ \rightarrow Fe^{3+} + H_2$ .

- Hướng dẫn

- > E càng dương, chất oxi hóa càng mạnh  $\rightarrow Fe^{3+} > 2H^+ > Fe^{2+}$ .
- > E càng dương, chất khử càng yếu  $H_2 > Fe^{2+}$ .
- > Dựa vào quy tắc alpha, xét hai cặp oxi-k đã cho, thấy rằng phản ứng đã cho xảy ra theo chiều nghịch.
- > (Hoặc, có thể xét chiều pứ dựa vào  $E^0_{pin}$  ứng với pứ đó).

2/13/2011

15



2/13/2011  $H_2(aq) \rightarrow 2 H^+(aq) + 2 e^-$

$Fe^{3+}(aq) + e^- \rightarrow Fe^{2+}(aq)$

16

- Một pin điện hóa bất kỳ, hình thành từ 2 cặp oxi hóa – khử nào đó, sẽ đo được mức chênh lệch điện thế lớn nhất giữa hai điện cực, và điện thế chênh lệch đó gọi là sức điện động (suất điện động, thế điện hóa) của pin:

$$E^0_{pin} = E^0_{catot} - E^0_{anot} = E^0_{(+)} - E^0_{(-)}$$

- Năng lượng Gibbs của pin sẽ là:

$$\Delta G^0 = -n.F.E^0_{pin}$$

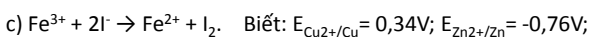
- Chúng ta có thể sử dụng  $E^0_{pin}$  để xét.

- > Nếu  $E^0_{pin} > 0$  : phản ứng tự xảy ra theo chiều đã viết.
- > Nếu  $E^0_{pin} < 0$  : phản ứng không xảy ra.
- > Nếu  $E^0_{pin} = 0$  : phản ứng ở trạng thái cân bằng.

2/13/2011

17

- **Câu hỏi:** Các p/ứ sau đây ưu tiên xảy ra theo chiều nào?



$$E_{Ni^{2+}/Ni} = -0,25V; E_{Fe^{3+}/Fe^{2+}} = 0,77V; E_{I_2/I^-} = 0,54V$$

- Hướng dẫn

- > Xác định cực âm, cực dương đối với mỗi pứ theo quy luật,  $E^0$  cặp nào lớn hơn, cặp đó đóng vai trò là cực dương.
- > Tính  $E^0_{pin}$  và so sánh với giá trị 0, đưa ra kết luận.
- > a) .....      b) .....      c).....

2/13/2011

18

- **Câu hỏi:** Tính sức điện động của pin tạo bởi hai cặp oxi hóa-khử  $Ag^+/Ag$  và  $Cu^{2+}/Cu$ , biết các điện cực ở đk tiêu chuẩn, cho  $E^0_{(Ag^+/Ag)} = 0,799V$ ;  $E^0_{(Cu^{2+}/Cu)} = 0,337V$ . Viết pứ xảy ra trong pin trên

- Hướng dẫn

- > Ta thấy:  $E^0_{(Ag^+/Ag)} > E^0_{(Cu^{2+}/Cu)} \rightarrow$  tính oxi hóa của  $Ag^+$  mạnh hơn của  $Cu^{2+} \rightarrow$  cực dương sẽ là cực Ag.
- > Sơ đồ pin sẽ có dạng: (-)  $Cu | Cu^{2+} (1 M) || Ag^+ (1 M) | Ag (+)$ .
- > Nên:  $E_{pin} = E_{catot} - E_{anot} = E_{(Ag^+/Ag)} - E_{(Cu^{2+}/Cu)} = \dots$
- > Phản ứng trong pin là:  $Cu + 2Ag^+ \rightarrow Cu^{2+} + 2Ag$ .

2/13/2011

19

**20.5. Thế điện cực và pin điện hóa ở đk không tc.**

- Trong điều kiện không phải tiêu chuẩn, người ta dùng pt Nernst để tính thế điện cực của mỗi cực:  $Oxi + ne \rightleftharpoons Kh$

$$E_{\text{điện cực}} = E^{\circ}_{\text{điện cực}} - \frac{RT}{nF} \ln \frac{[kh]}{[oxh]}$$

$$= E^{\circ}_{\text{điện cực}} - \frac{0,059}{n} \log \frac{[kh]}{[oxh]}$$

- Khi đó, sức điện động của pin được tính là:

$$E_{\text{pin}} = E^{\circ}_{\text{pin}} - \frac{RT \ln Q}{nF}$$

$$E_{\text{pin}} = E^{\circ}_{\text{pin}} - \frac{0,0592 \lg Q}{n} \quad (\text{ở } 25^{\circ}\text{C})$$

2/13/2011

20

- Câu hỏi:** Tính sức điện động của pin tạo bởi hai cặp oxi hóa-khử  $Ag^+/Ag$  và  $Cu^{2+}/Cu$ , biết các điện cực nhúng trong dd tương ứng có nồng độ 0,5M, cho  $E^{\circ}_{(Ag^+/Ag)} = 0,799V$ ;  $E^{\circ}_{(Cu^{2+}/Cu)} = 0,337V$ ?

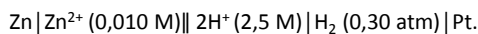
- Hướng dẫn

- Tính lại giá trị thế điện cực của mỗi điện cực, sử dụng phương trình Nernst:  $E_{\text{điện cực}} = E^{\circ}_{\text{điện cực}} - \frac{0,059}{n} \log \frac{[kh]}{[oxh]}$
- Ta thấy:  $E_{(Ag^+/Ag)} = 0,76V > E_{(Cu^{2+}/Cu)} = 0,328V \rightarrow$  tính oxi hóa của  $Ag^+$  mạnh hơn của  $Cu^{2+} \rightarrow$  cực dương sẽ là cực  $Ag$ .
- Sơ đồ pin sẽ có dạng:  $(-)Cu | Cu^{2+} (0,5 M) || Ag^+ (0,5 M) | Ag (+)$
- Nên:  $E_{\text{pin}} = E_{\text{catot}} - E_{\text{anot}} = E_{(Ag^+/Ag)} - E_{(Cu^{2+}/Cu)} = \dots$
- Phản ứng trong pin là:  $Cu + 2Ag^+ \rightarrow Cu^{2+} + 2Ag$ .

2/13/2011

21

- Câu hỏi:** Cho sơ đồ pin:



Viết phản ứng xảy ra trong pin và tính  $E^{\circ}_{\text{pin}}$ ?

- Hướng dẫn:

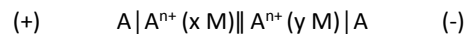
- Cách 1: làm như ví dụ 8.
- Cách 2:
  - Viết pứ xảy ra trong pin:  $Zn_{(r)} + 2H^+_{(dd)} \rightarrow Zn^{2+}_{(dd)} + H_{2(k)}$
  - Tính suất điện động pin ở đktc:  $E^{\circ}_{\text{pin}} = E^{\circ}_{\text{catot}} - E^{\circ}_{\text{anot}}$
  - Tính giá trị  $Q_{\text{pứ}} = Q = \frac{[Zn^{2+}]p(H_2)}{[H^+]^2} = \frac{(0,010)(0,30)}{(2,5)^2} = 4,8 \times 10^{-4}$
  - Tính lại giá trị  $E_{\text{pin}}$ , chú ý ( $n = 2$ )

$$E_{\text{pin}} = E^{\circ}_{\text{pin}} - \frac{0,0592 \lg Q}{n}$$

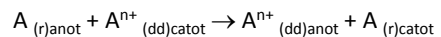
2/13/2011

22

- Trường hợp pin điện hóa có cả hai điện cực đều cùng làm bằng một kim loại, nhúng trong 2 dung dịch muối của kl đó, nhưng có nồng độ khác nhau, khi đó ta có pin nồng độ:



- VD:  $(-) Cu (r) | Cu^{2+} (0,10 M) || Cu^{2+} (1,0 M) | Cu (r) (+)$
- Phản ứng ở pin nồng độ:



- Tính toán ở bài toán pin nồng độ vẫn sử dụng các công thức cho pin điện hóa thông thường.

2/13/2011

23

**20.6. Điện hóa và nhiệt động học**

- Công cực đại mà pin điện hóa thực hiện:

$$A_{\text{max}} = n.F.E \quad (F=96500 \text{ C/mol.e})$$

- Năng lượng Gibbs do pin thực hiện:

$$\Delta G = -n.F.E_{\text{pin}} \rightarrow \Delta G^{\circ} = -n.F.E^{\circ}_{\text{pin}}$$

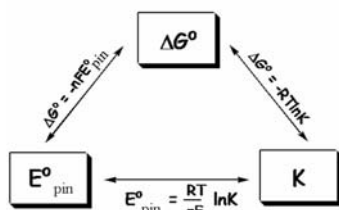
- Mà ta có:  $\Delta G^{\circ} = -R.T.\ln K$ , (với  $K$  = hằng số cân bằng pứ pin)

$$\Rightarrow E^{\circ}_{\text{pin}} = \frac{RT}{nF} \ln K$$

- Rút gọn ta có:

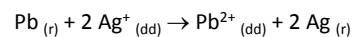
$$\ln K = n.E^{\circ}/0,0257$$

(ở  $25^{\circ}\text{C}$ )



2/13/2011

- Câu hỏi:** Tính  $E^{\circ}_{\text{pin}}$ ,  $K$  và  $\Delta G^{\circ}$  ở  $25^{\circ}\text{C}$  của phản ứng:



- Hướng dẫn:

- Theo pứ ,  $Pb$  cho e nên làm cực (-),  $Ag^+$  nhận e là ở cực (+)
- Ta có:  $E^{\circ}_{\text{pin}} = E^{\circ}_{\text{catot}} - E^{\circ}_{\text{anot}} = E^{\circ}_{Ag} - E^{\circ}_{Pb}$ .
- Lại có:  $-nFE^{\circ}_{\text{pin}} = -R.T.\ln K \rightarrow$  tính được giá trị  $K$ .
- Cuối cùng:  $\Delta G^{\circ} = -nFE^{\circ}_{\text{pin}}$

**BT chương 20:**

3, 13, 15, 21, 27, 29, 31, 55, 57, 63..

2/13/2011