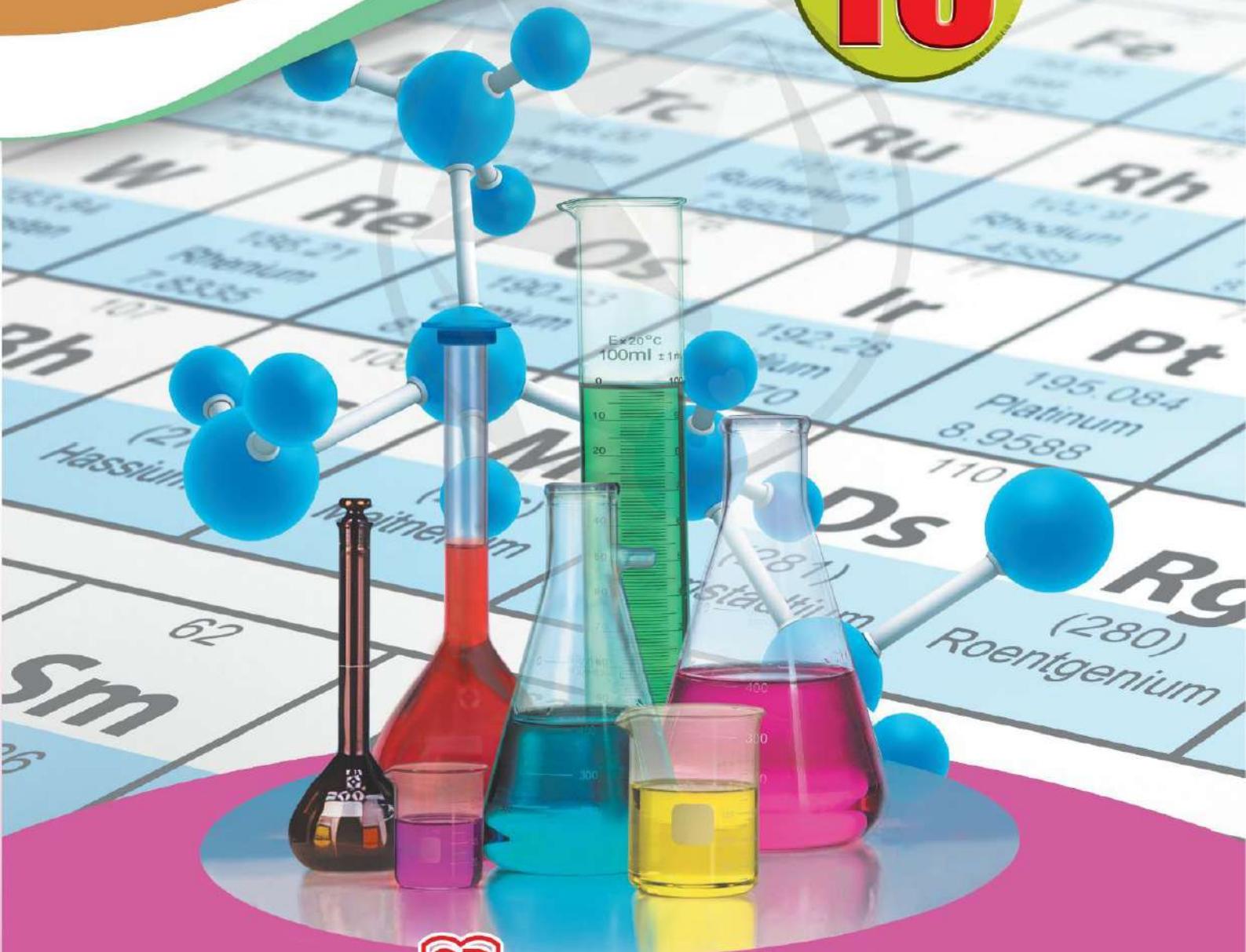


TRẦN THÀNH HUẾ (Tổng Chủ biên)
NGUYỄN NGỌC HÀ (Chủ biên)

CHUYÊN ĐỀ HỌC TẬP
Hoá học

10



NHÀ XUẤT BẢN ĐẠI HỌC SƯ PHẠM

TRẦN THÀNH HUẾ (Tổng Chủ biên) – NGUYỄN NGỌC HÀ (Chủ biên)

CHUYÊN ĐỀ HỌC TẬP

Hoá học

10

(Sách đã được Bộ trưởng Bộ Giáo dục và Đào tạo phê duyệt sử dụng
trong cơ sở giáo dục phổ thông tại Quyết định số 442/QĐ-BGDDT ngày 28/01/2022)

NHÀ XUẤT BẢN ĐẠI HỌC SƯ PHẠM

MỤC LỤC

LỜI NÓI ĐẦU	3
HƯỚNG DẪN SỬ DỤNG SÁCH	4
Chuyên đề 10.1. CƠ SỞ HÓA HỌC.....	6
Bài 1. Liên kết hoá học và hình học phân tử	6
Bài 2. Phản ứng hạt nhân.....	15
Bài 3. Năng lượng hoạt hoá của phản ứng hoá học	22
Bài 4. Entropy và biến thiên năng lượng tự do Gibbs	28
Chuyên đề 10.2. HÓA HỌC TRONG VIỆC PHÒNG CHỐNG CHÁY NỔ.....	34
Bài 5. Sơ lược về phản ứng cháy và nổ	34
Bài 6. Hoá học về phản ứng cháy và nổ	41
Bài 7. Phòng chống và xử lí cháy nổ.....	48
Chuyên đề 10.3. THỰC HÀNH HÓA HỌC VÀ CÔNG NGHỆ THÔNG TIN	51
Bài 8. Vẽ cấu trúc phân tử	51
Bài 9. Thực hành thí nghiệm hoá học ảo	57
Bài 10. Tính tham số cấu trúc và năng lượng của phân tử	63
PHỤ LỤC 1. Entropy của một số chất ở điều kiện chuẩn	68
PHỤ LỤC 2. Enthalpy tạo thành của một số chất ở điều kiện chuẩn	69
PHỤ LỤC 3. Năng lượng của một số liên kết ở điều kiện chuẩn	69
BẢNG GIẢI THÍCH THUẬT NGỮ	70
BẢNG TRA CỨU TÊN RIÊNG NƯỚC NGOÀI	71
BẢNG TRÍCH NGUỒN TÀI LIỆU	71

LỜI NÓI ĐẦU

Các em thân mến!

Qua phần kiến thức chung môn Hoá học 10, chắc hẳn các em đã thấy được vai trò quan trọng của hoá học với cuộc sống và sản xuất. Trong cuốn sách **Chuyên đề học tập Hoá học 10**, chúng ta sẽ tìm hiểu sâu và rộng hơn nữa về vẻ đẹp của hoá học, trong cả những phần lí thuyết và thực hành trên máy tính. Nội dung cuốn sách gồm ba phần chính:

- **Cơ sở hoá học:** Cung cấp những kiến thức về liên kết hoá học, phản ứng hạt nhân, năng lượng hoạt hoá, biến thiên entropy và năng lượng tự do của phản ứng hoá học.
- **Hoá học trong việc phòng chống cháy nổ:** Cung cấp nhiều thông tin hữu ích trong việc phòng chống cháy nổ dưới góc độ hoá học.
- **Thực hành hoá học và công nghệ thông tin:** Là một nội dung rất thú vị, giúp các em khám phá thế giới hoá học trong sự hỗ trợ của công nghệ thông tin, chẳng hạn như các em có thể làm các thí nghiệm hoá học ảo, tính được độ dài liên kết, góc liên kết và năng lượng của phân tử chỉ qua một số thao tác đơn giản với phần mềm tính toán được cài đặt trên máy tính cá nhân.

Chúc các em sẽ tìm thấy nhiều điều thú vị của thế giới quanh ta thông qua việc học tập chuyên đề hoá học này!

CÁC TÁC GIẢ

HƯỚNG DẪN SỬ DỤNG SÁCH

Các nội dung trong cuốn sách sẽ được trình bày chủ yếu trong hai tuyến: tuyến chính và tuyến phụ. Tuyến chính bao gồm toàn bộ những nội dung chính trong bài học mà các em cần đạt được. Tuyến phụ được viết song song với tuyến chính, với mục đích hỗ trợ, giúp các em nhớ, hiểu và vận dụng được nội dung trong tuyến chính. Ngoài hai tuyến này, mỗi bài học còn có phần mở đầu, ghi nhớ và bài tập sẽ giúp các em hướng tới bài học, tóm tắt nội dung bài học, cũng như luyện tập để củng cố, vận dụng kiến thức và kỹ năng đã biết. Mục tiêu là khi học xong mỗi bài, các em sẽ đạt được những yêu cầu nêu ra trong phần đầu tiên của bài: “*Học xong bài học này, em có thể*”.

Chuyên đề học tập Hoá học sử dụng hệ thống logo dễ nhớ và đẹp mắt, giúp các em sử dụng cuốn sách được dễ dàng hơn.



Mở đầu

Thực hiện hoạt động này sẽ giúp các em hướng tới nội dung chính của bài.



Trả lời câu hỏi hoặc thảo luận

Thực hiện hoạt động này góp phần giúp các em khắc sâu kiến thức ở tuyến chính tương ứng.

Các em nên đọc kĩ nội dung tuyến chính để hiểu, sau đó trả lời câu hỏi.

Các em cần thực hiện được tất cả yêu cầu của hoạt động này.



Thực hành

Thực hiện hoạt động này giúp các em khám phá kiến thức và rèn luyện kỹ năng thực hành. Các em cần liên hệ giữa lí thuyết với các quan sát từ thí nghiệm để thực hiện hoạt động này.

Trong điều kiện không thể thực hiện thí nghiệm, có thể thay thế bằng quan sát thí nghiệm ảo hoặc video, băng hình thí nghiệm.

Luyện tập

Thực hiện hoạt động này giúp các em nhớ, hiểu và vận dụng những nội dung chính của bài học, nhằm luyện tập nội dung ở tuyển chính tương ứng.

Các em cần thực hiện được tất cả yêu cầu của hoạt động này.



Vận dụng

Thực hiện hoạt động này góp phần giúp các em vận dụng được kiến thức, kĩ năng đã học vào thực tiễn.

Các em hãy cố gắng thực hiện được nhiều nhất các yêu cầu ở hoạt động này.



EM CÓ BIẾT

Cung cấp thêm những thông tin mở rộng so với tuyển chính. Kiến thức trong phần này chỉ có ý nghĩa đọc thêm.



Kiến thức cốt lõi

Tóm tắt cô đọng những kiến thức cốt lõi mà các em cần đạt được sau mỗi bài học.

Trong bài học, đôi khi còn xuất hiện phần “*Kiến thức bổ trợ*” với mục đích nhắc lại những kiến thức cần thiết đã được học từ trước hoặc ở các môn học khác nhằm hỗ trợ cho tuyển chính trong bài.

Phần Bài tập ở cuối mỗi bài học rất quan trọng, giúp các em vận dụng kiến thức, kĩ năng trong bài học ở nhiều mức độ khác nhau, trong đó bài tập có đánh dấu sao (*) là những bài tập khó hơn. Các em hãy cố gắng làm được tất cả các bài tập của phần này.

Mong rằng cuốn sách này vừa là người thầy, vừa là người bạn thân thiết của các em. Các em hãy làm theo những chỉ dẫn trong sách và không viết, vẽ vào sách nhé!

Bài 1

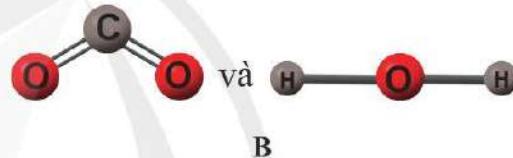
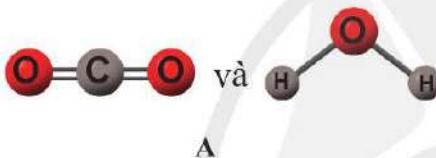
LIÊN KẾT HOÁ HỌC VÀ HÌNH HỌC PHÂN TỬ

Học xong bài học này, em có thể:

- Viết được công thức Lewis, sử dụng được mô hình VSEPR để dự đoán dạng hình học cho một số phân tử đơn giản.
- Trình bày được khái niệm về sự lai hóa orbital (sp , sp^2 , sp^3) và vận dụng để giải thích liên kết trong một số phân tử (CO_2 ; BF_3 ; CH_4 ;...).



Theo em, dạng hình học nào sau đây của hai phân tử carbon dioxide và nước là đúng?



- Những electron như thế nào được gọi là:
 - electron hoá trị?
 - electron chung?
 - electron hoá trị riêng?



- Viết công thức cấu tạo của CO_2 và H_2O .

I CÔNG THỨC LEWIS VÀ MÔ HÌNH VSEPR

1. Công thức Lewis

Công thức Lewis là công thức biểu diễn cấu tạo phân tử qua các liên kết và các electron hoá trị riêng. Mặc dù cách xây dựng khá đơn giản nhưng công thức Lewis có thể cung cấp cho ta nhiều thông tin về đặc điểm cấu tạo của phân tử và là cơ sở để xác định dạng hình học phân tử theo mô hình lực đẩy giữa các cặp electron vỏ hoá trị – VSEPR.

Ví dụ 1 Công thức Lewis của CO_2 và H_2O như sau:



Từ công thức Lewis của CO_2 , ta biết được cả hai liên kết giữa carbon và oxygen đều là liên kết đôi, trên mỗi nguyên tử oxygen còn hai cặp electron hoá trị riêng, nguyên tử carbon không còn electron hoá trị riêng.

Trong phần “Liên kết cộng hoá trị” thuộc nội dung sách giáo khoa Hoá học 10, ta đã biết cách viết công thức Lewis

từ công thức electron của phân tử. Tuy nhiên, cách này khá phức tạp với các phân tử nhiều nguyên tử. Sau đây, chúng ta sẽ cùng tìm hiểu một cách khác để xác định công thức Lewis khi biết công thức phân tử. Phương pháp này dựa trên những cơ sở sau:

- Chỉ các electron hoá trị của nguyên tử là có thể tham gia vào việc hình thành liên kết hoá học.
- Mỗi liên kết (kí hiệu là “–”) được tạo nên từ 1 cặp electron dùng chung.
- Các nguyên tử có xu hướng tạo nên lớp vỏ 8 electron khi hình thành liên kết (trừ nguyên tử H có xu hướng tạo lớp vỏ 2 electron). Trong một số trường hợp, một số nguyên tử trong phân tử có thể không đạt được “octet”, mà có ít hơn hoặc nhiều hơn 8 electron ở lớp vỏ ngoài cùng.

Với các nguyên tố nhóm A, số electron hoá trị của nguyên tử bằng số thứ tự của nhóm.

EM CÓ BIẾT

Các nguyên tử nguyên tố thuộc chu kỳ 2 không thể có nhiều hơn 8 electron ở lớp vỏ ngoài cùng khi hình thành liên kết do lớp ngoài cùng chỉ có 4 orbital là $2s$, $2p_x$, $2p_y$ và $2p_z$.

Ví dụ 2 Viết công thức Lewis của CO_2 .

Bước 1: Tính tổng số electron hoá trị (N_1) của phân tử CO_2 .

Carbon có 4 electron hoá trị, oxygen có 6 electron hoá trị. Trong phân tử CO_2 có 1 nguyên tử carbon và 2 nguyên tử oxygen. Vậy $N_1 = 4 + 6 \times 2 = 16$ (electron). Ta coi đây là 16 “viên gạch” để “xây dựng phân tử”.

Bước 2: Vẽ khung phân tử tạo bởi liên kết đơn giữa các nguyên tử.

Do nguyên tử C có 2 nguyên tử O xung quanh nên C được coi là nguyên tử *trung tâm*. Vẽ một gạch (một liên kết) từ nguyên tử trung tâm tới mỗi nguyên tử xung quanh.



Gọi N_2 là số electron hoá trị đã dùng để xây dựng công thức (1).

Vậy $N_2 = 2 \times 2 = 4$ (electron).

Gọi N_3 là số electron hoá trị còn lại. Vậy $N_3 = N_1 - N_2 = 16 - 4 = 12$ (electron).

Bước 3: Sử dụng N_3 electron để tạo “octet” cho các nguyên tử (thường là nguyên tử nguyên tố có độ âm điện lớn hơn đạt được “octet” trước).

Do O có độ âm điện lớn hơn C nên được tạo “octet” trước. Trong công thức (1), xung quanh mỗi nguyên tử O mới có 2 electron nên cần phải “bổ sung” 6 electron vào mỗi nguyên tử này.



Bước 4: Kiểm tra lại cả phân tử, nếu nguyên tử nào chưa đạt được “octet” thì chuyển cặp electron chưa liên kết (cặp electron hoá trị riêng) của nguyên tử kế bên vào để tạo thành một liên kết mới (một cặp electron dùng chung).

Từ công thức (2), đã sử dụng hết $N_1 = 16$ electron. Tuy nhiên, trong công thức (2), nguyên tử C mới có lớp vỏ 4 electron và còn thiếu 4 electron nữa để đạt “octet”. Trong trường hợp này, có thể chuyển cặp electron chưa liên kết của hai nguyên tử O thành cặp electron dùng chung để cả C và O đều đạt được “octet”. Công thức (3) chính là công thức Lewis của CO_2 cần xác định.



Ví dụ 3 Viết công thức Lewis của NH_3 .

Bước 1: Tính tổng số electron hoá trị (N_1) của phân tử NH_3 .

Nitrogen có 5 electron hoá trị, hydrogen có 1 electron hoá trị. Trong phân tử NH_3 có 1 nguyên tử nitrogen và 3 nguyên tử hydrogen. Vậy $N_1 = 1 \times 5 + 3 \times 1 = 8$ (electron).

Bước 2: Vẽ khung phân tử tạo bởi liên kết đơn giữa các nguyên tử.

Do nguyên tử N có 3 nguyên tử H xung quanh nên N được coi là nguyên tử trung tâm. Vẽ một gạch (một liên kết) từ nguyên tử trung tâm tới mỗi nguyên tử xung quanh.



Gọi N_2 là số electron hoá trị đã dùng để xây dựng công thức (4).

Vậy $N_2 = 3 \times 2 = 6$ (electron).

Gọi N_3 là số electron hoá trị còn lại. Vậy $N_3 = N_1 - N_2 = 8 - 6 = 2$ (electron).

Bước 3: Sử dụng N_3 electron để tạo “octet” cho các nguyên tử có độ âm điện lớn hơn trước.

Do N có độ âm điện lớn hơn nên đạt được “octet” trước. Trong công thức (4), xung quanh nguyên tử N mới có 6 electron, nên 2 electron còn lại được điền vào nguyên tử N.



Bước 4: Kiểm tra lại cả phân tử, nếu nguyên tử nào chưa đạt được “octet” thì chuyển cặp electron chưa liên kết của nguyên tử kế bên vào để tạo thành cặp electron dùng chung.

Từ công thức (5), đã sử dụng hết $N_1 = 8$ electron. Xung quanh mỗi nguyên tử H đã đủ

2 electron, xung quanh nguyên tử N đã có đủ 8 electron.

Vậy công thức (5) chính là công thức Lewis của NH_3 cần xác định.



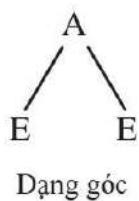
- Viết công thức Lewis của CH_4 , BF_3 , SO_3 và F_2O .

Lưu ý: Phương pháp xác định công thức Lewis nêu trên cũng có những ngoại lệ không phù hợp, chẳng hạn như ở phân tử BeCl_2 .

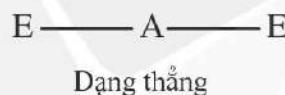
2. Mô hình VSEPR

Mô hình *lực đẩy giữa các cặp electron vỏ hoá trị* – VSEPR (Valence Shell Electron Pair Repulsion) có thể giúp ta dự đoán dạng hình học của phân tử (đặc trưng bởi cách sắp xếp của các nguyên tử trong không gian). Mô hình này dựa trên cơ sở *các đám mây electron hoá trị* của nguyên tử trung tâm sẽ *đẩy nhau tới vị trí xa nhau nhất* để lực đẩy giữa chúng là nhỏ nhất.

Chẳng hạn, nếu xung quanh nguyên tử trung tâm A có 2 đám mây electron hoá trị (kí hiệu là E) thì do lực đẩy giữa 2 đám mây electron (cùng mang điện tích âm) nên 2 đám mây này phải có vị trí xa nhau nhất. Do vậy, vị trí hợp lí của A và 2 đám mây E phải có dạng thẳng, mà không phải là dạng góc.



Dạng góc



Dạng thẳng

Vị trí phân bố các đám mây electron E xung quanh nguyên tử trung tâm A theo số lượng đám mây khác nhau được cho trong Bảng 1.1.

Bảng 1.1. Dạng hình học phân tử theo VSEPR

Công thức VSEPR	Dạng hình học	Dạng phân bố không gian
AE_2	$E — A — E$	Thẳng
AE_3		Tam giác phẳng
AE_4		Tứ diện

Như vậy, từ mô hình VSEPR có thể dự đoán được dạng hình học của phân tử.



3. Các điện tích cùng dấu thì đẩy nhau hay hút nhau?

Một đám mây electron hoá trị có thể là một liên kết (đơn, đôi, ba), một cặp electron hoá trị riêng hoặc một electron độc thân.



EM CÓ BIẾT

Việc xác định hình học phân tử có ý nghĩa quan trọng trong nghiên cứu hoá học, giúp ta có thêm những hiểu biết về khả năng phản ứng, về độ bền, về tính phân cực của phân tử,...



2. Giải thích vì sao khi xung quanh nguyên tử trung tâm có 3 đám mây electron hoá trị E thì 3 đám mây này có xu hướng nằm ở 3 đỉnh của một tam giác phẳng.

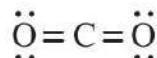


EM CÓ BIẾT

Mô hình VSEPR còn có thể vận dụng cho các hệ AE_5 (dạng phân bố không gian: lưỡng tháp tam giác) và AE_6 (dạng phân bố không gian: bát diện).

Ví dụ 4 Dự đoán dạng hình học của phân tử CO_2 .

Bước 1: Viết công thức Lewis của CO_2 ,



Bước 2: Xác định số đám mây electron hoá trị xung quanh nguyên tử trung tâm.

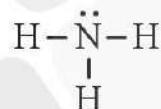
Nguyên tử trung tâm C có 2 liên kết (đôi) xung quanh tương ứng với 2 đám mây electron hoá trị. Công thức VSEPR của CO_2 là AE_2 .

Bước 3: Từ công thức VSEPR dự đoán dạng hình học của phân tử tương ứng theo Bảng 1.1.

Do 2 đám mây electron (hai liên kết đôi $\text{C}=\text{O}$) phân bố thẳng hàng với nguyên tử C nên phân tử CO_2 có dạng thẳng.

Ví dụ 5 Dự đoán dạng hình học của phân tử NH_3 .

Bước 1: Viết công thức Lewis của NH_3 ,



Bước 2: Xác định số đám mây electron hoá trị xung quanh nguyên tử trung tâm.

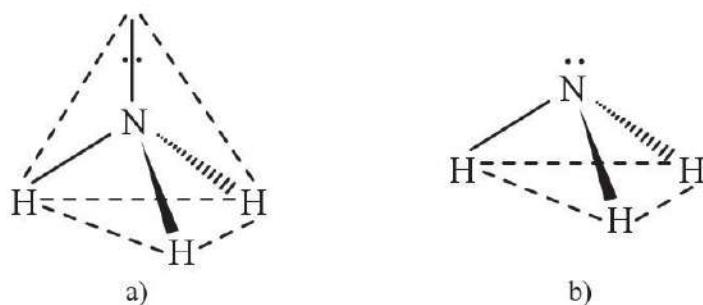
Nguyên tử trung tâm N có 3 liên kết đơn xung quanh và 1 cặp electron riêng tương ứng với 4 đám mây electron hoá trị. Công thức VSEPR của NH_3 là AE_4 .

Bước 3: Từ công thức VSEPR, dự đoán dạng hình học của phân tử tương ứng theo Bảng 1.1.

Do 4 đám mây hướng tới 4 đỉnh của một tứ diện, trong đó 3 đám mây electron liên kết ($\text{N}-\text{H}$) và 1 đám mây là cặp electron riêng của N (Hình 1.1.a). Bởi vì kí hiệu liên kết chỉ sử dụng giữa 2 nguyên tử nên dạng hình học trong không gian của NH_3 được biểu diễn như Hình 1.1.b.



3. Viết công thức Lewis, dự đoán dạng hình học của phân tử CH_4 .



Hình 1.1. Dạng hình học trong không gian của NH_3

II SỰ LAI HOÁ ORBITAL

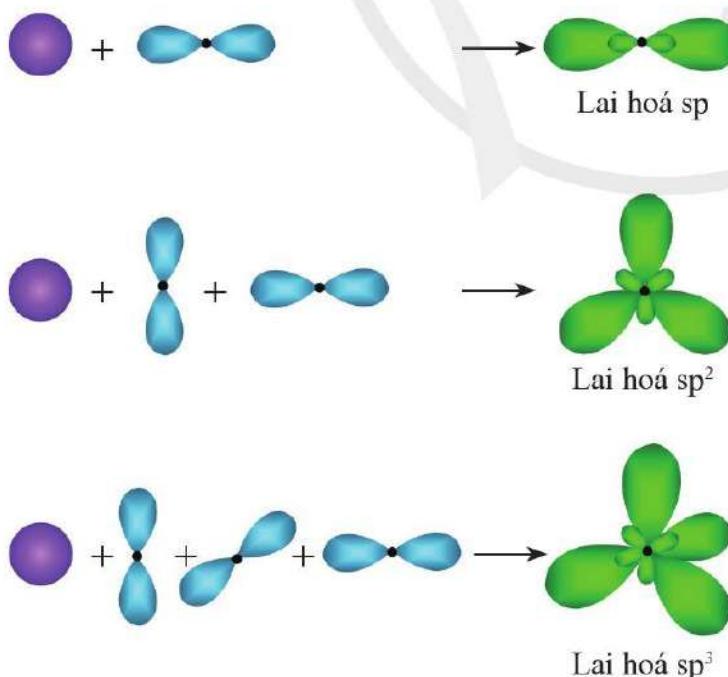
Trong các phân tử nhiều nguyên tử, nguyên tử trung tâm phải liên kết với các nguyên tử xung quanh ở nhiều vị trí không gian khác nhau. Do vậy, các AO của nguyên tử trung tâm phải biến đổi sao cho có định hướng không gian phù hợp mới tạo được liên kết với các nguyên tử xung quanh.

1. Khái niệm

Một hệ gồm n AO ($n = 2, 3, \dots$) của cùng một nguyên tử, có thể tổ hợp với nhau để tạo ra hệ n orbital mới (gọi là orbital lai hoá) có hình dạng như nhau, nhưng có định hướng không gian phù hợp với sự hình thành liên kết và dạng hình học phân tử tương ứng. *Lai hoá là sự tổ hợp các orbital của cùng nguyên tử để tạo ra các orbital mới có cùng dạng hình học và năng lượng nhưng có định hướng khác nhau trong không gian.* Sự lai hoá thường chỉ xét với nguyên tử trung tâm.

2. Các dạng lai hoá phổ biến

Có ba dạng lai hoá đơn giản và phổ biến được biểu diễn ở Hình 1.2:



Hình 1.2. Sự hình thành các dạng lai hoá sp, sp^2 và sp^3

EM CÓ BIẾT

Nếu nguyên tử C trong phân tử CH_4 không có sự lai hoá AO thì sẽ xuất hiện góc liên kết \widehat{HCH} là 90° , trái với thực nghiệm là $109^\circ 28'$.

Các AO tham gia lai hoá phải là các AO hoá trị.



4. Đặc điểm dạng hình học khác nhau giữa AO lai hoá với AO s và với AO p là gì?

Lai hoá sp thuộc loại lai hoá thẳng, lai hoá sp^2 là thuộc loại lai hoá tam giác phẳng, lai hoá sp^3 thuộc loại lai hoá tứ diện.

Khi xét lai hoá, chỉ quan tâm tới sự tổ hợp AO. Các AO có thể có hoặc không có electron.

Phân tử tương ứng với công thức VSEPR là AE_2 thì nguyên tử trung tâm A thường có dạng lai hoá sp.

EM CÓ BIẾT

Trong phân tử BeH_2 , nguyên tử Be chưa đạt được "octet" nên chất này rất kém bền, các phân tử tự liên kết với nhau thành dạng polymer (BeH_2)_n.

2 electron hoá trị của Be nằm trong 2 AO lai hoá để tạo liên kết với H.



5. Nguyên tử C trong CO_2 có dạng lai hoá gì? Trình bày sự hình thành dạng lai hoá đó.

Phân tử tương ứng với công thức VSEPR là AE_3 thì nguyên tử trung tâm A thường có dạng lai hoá sp².

3 electron hoá trị của B nằm trong 3 AO lai hoá để tạo liên kết với F. Liên kết π có bản chất là liên kết cho – nhận được tạo nên từ cặp electron của F và AO 2p trống của B.

a) Lai hoá sp

Lai hoá sp là sự tổ hợp giữa 1 AO s với 1 AO p hoá trị của nguyên tử trung tâm để tạo thành 2 AO lai hoá sp nằm trên cùng một đường thẳng hướng về hai phía, đối xứng nhau (góc giữa 2 AO lai hoá là 180°).

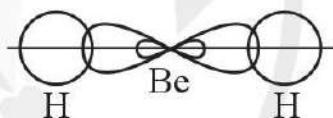
Ví dụ 6 Giải thích sự hình thành liên kết trong phân tử BeH_2 qua sự lai hoá của nguyên tử trung tâm Be.

Từ công thức Lewis của BeH_2 , xác định được phân tử này có dạng đường thẳng theo mô hình VSEPR.



Cấu hình electron của Be ($Z = 4$) là $1s^22s^22p^0$. Để tạo liên kết với H, trước tiên có sự dịch chuyển 1 electron từ 2s lên 2p tạo cấu hình electron ở trạng thái kích thích là $1s^22s^12p^1$.

Trong phân tử BeH_2 , nguyên tử Be phải có lai hoá sp giữa 2 AO (1 AO 2s và 1 AO 2p) chứa electron độc thân để tạo ra 2 AO lai hoá cùng nằm trên một đường thẳng; 2 AO lai hoá này xen phủ với AO 1s của 2 nguyên tử H tạo ra 2 liên kết Be – H.

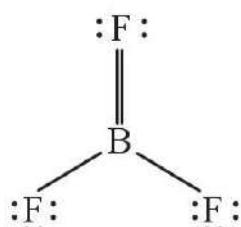


b) Lai hoá sp²

Lai hoá sp² là sự tổ hợp giữa 1 AO s với 2 AO p hoá trị của nguyên tử trung tâm để tạo thành 3 AO lai hoá sp² nằm trong một mặt phẳng, hướng từ tâm tới 3 đỉnh của một tam giác đều (góc giữa 2 AO lai hoá là 120°).

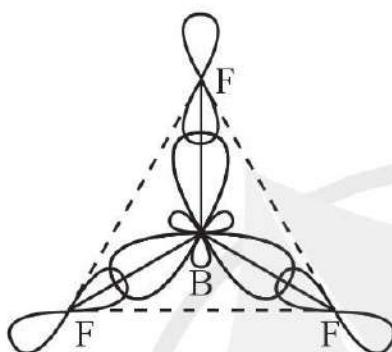
Ví dụ 7 Giải thích sự hình thành liên kết trong phân tử BF_3 qua sự lai hoá của nguyên tử trung tâm B.

Từ công thức Lewis của BF_3 , xác định được phân tử này có dạng tam giác theo mô hình VSEPR.



Cấu hình electron của B ($Z = 5$) là $1s^22s^22p^1$. Để tạo liên kết với F, trước tiên có sự dịch chuyển 1 electron từ 2s lên 2p tạo cấu hình electron ở trạng thái kích thích là $1s^22s^12p^2$.

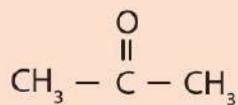
Trong phân tử BF_3 , nguyên tử B phải có lai hóa sp^2 giữa 3 AO (1 AO 2s và 2 AO 2p) chứa electron độc thân để tạo 3 AO lai hóa hướng tới 3 đỉnh của một tam giác đều; 3 AO lai hóa này xen phủ với AO 2p của 3 nguyên tử F tạo ra 3 liên kết BF.



c) Lai hóa sp^3

Lai hóa sp^3 là sự tổ hợp giữa 1 AO s với 3 AO p hoà trộn của nguyên tử trung tâm để tạo thành 4 AO lai hóa sp^3 , hướng từ tâm tới 4 đỉnh của một tứ diện đều (góc giữa 2 AO lai hóa là $109,5^\circ$).

6. Khung phân tử acetone tạo bởi 3 nguyên tử C và 1 nguyên tử O có dạng tam giác phẳng theo mô hình VSEPR. Xác định dạng lai hóa của nguyên tử trung tâm C. Biết công thức hóa học của acetone là:



4. Trình bày sự hình thành lai hóa sp^3 của nguyên tử C trong CH_4 và sự hình thành các liên kết trong phân tử này.



- Công thức Lewis là công thức cấu tạo biểu diễn phân tử qua các liên kết và các electron hoà trộn riêng.
- Mô hình VSEPR giúp dự đoán hình học phân tử dựa trên cơ sở *các đám mây electron hoà trộn* của nguyên tử trung tâm sẽ *đẩy nhau tới vị trí xa nhau nhất* để lực đẩy giữa chúng là nhỏ nhất.
- Lai hóa là sự tổ hợp các orbital của cùng nguyên tử để tạo ra các orbital mới có cùng dạng hình học và năng lượng nhưng có định hướng khác nhau trong không gian. Có 3 dạng lai hóa phổ biến là lai hóa sp , sp^2 và sp^3 .

BÀI TẬP

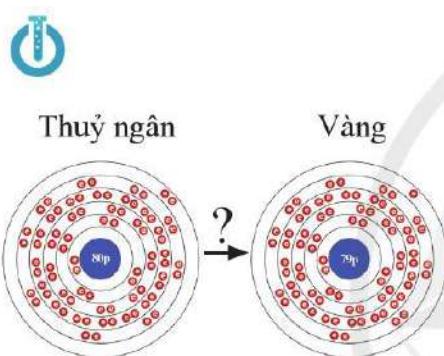
- Bài 1.** Viết công thức Lewis của các phân tử sau: CF_4 ; C_2H_6 ; C_2H_4 ; C_2H_2 .
- Bài 2.** Viết công thức Lewis của H_2O . Dự đoán dạng hình học phân tử và dạng lai hoá của nguyên tử trung tâm.
- Bài 3.** Dựa theo công thức Lewis của CHCl_3 , xác định được dạng lai hoá của nguyên tử trung tâm C trong phân tử này là:
- A. sp.
B. sp^2 .
C. sp^3 .
- Bài 4*.** Xác định công thức Lewis của nitric acid (HNO_3). Cho biết nguyên tử H liên kết với O mà không phải với N.
- Bài 5*.** Viết công thức Lewis và xác định dạng hình học của CS_2 . Xác định dạng lai hoá của nguyên tử trung tâm C trong phân tử này.
- Bài 6*.** Viết công thức Lewis của BH_3 , PCl_5 và SF_6 .

Bài 2

PHẢN ỨNG HẠT NHÂN

Học xong bài học này, em có thể:

- Nếu được sơ lược về sự phóng xạ tự nhiên; lấy được ví dụ về sự phóng xạ tự nhiên.
 - Nếu được sơ lược về sự phóng xạ nhân tạo, phản ứng hạt nhân.
 - Vận dụng được các định luật bảo toàn số khối và điện tích cho phản ứng hạt nhân.
 - Nếu được ứng dụng điển hình của phản ứng hạt nhân phục vụ nghiên cứu khoa học, y học, sản xuất và đời sống.



Sự phát triển của hoá học thời cổ và trung đại có sự đóng góp quan trọng của các nhà giả kim thuật, những người có ước mơ biến thuỷ ngân (Hg , $Z = 80$) thành vàng (Au , $Z = 79$). Tất nhiên, họ không thể thành công. Tuy nhiên, ngày nay điều này đã trở thành sự thật nhờ sự biến đổi hạt nhân nguyên tử. Sự biến đổi hạt nhân nào sau đây mô tả quá trình này?

- A. Loại đi một proton từ hạt nhân Hg.
 - B. Thêm một proton vào hạt nhân Hg.

I. SỰ PHÓNG XA TỰ NHIÊN VÀ PHÓNG XA NHÂN TAO

1. Sứ phóng xa tự nhiên

Sự phóng xạ tự nhiên là quá trình biến đổi hạt nhân tự phát, không phụ thuộc vào tác động bên ngoài. Cùng với sự biến đổi hạt nhân, quá trình này phát ra các tia bức xạ (hay tia phóng xạ). Quá trình này còn được gọi là sự phân rã phóng xạ tự nhiên.

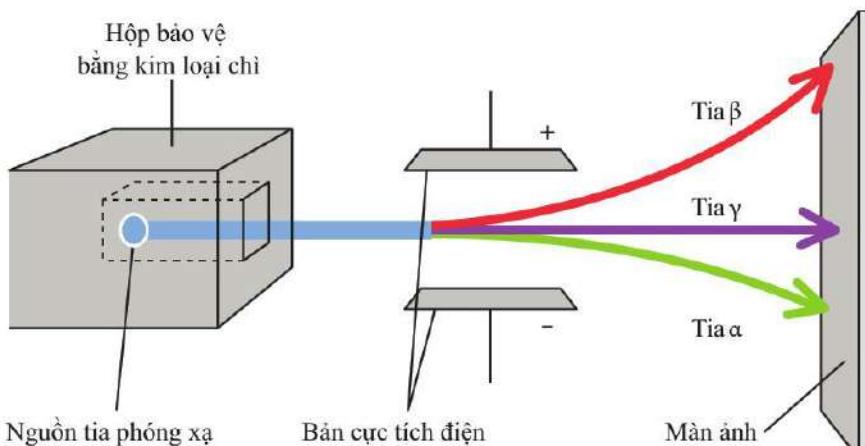
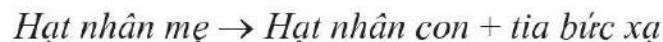
Ví dụ $^{238}_{92}\text{U} \rightarrow ^{222}_{86}\text{Rn} + \text{các tia bức xạ}$

Trong đó: $^{238}_{92}\text{U}$ được gọi là hạt nhân mẹ (loại hạt nhân kém bền); $^{222}_{86}\text{Rn}$ được gọi là hạt nhân con.

EM CÓ BIẾT

Năm 1896, Antoine Henri Becquerel (A. H. Béc-cơ-ren) (đạt Giải thưởng Nobel Vật lí năm 1903) đã phát hiện ra sự phóng xạ tự nhiên qua việc làm đen kính ảnh của muối potassium uranyl sulfate ($K_2UO_2(SO_4)_2$). Về sau, những nghiên cứu mang tính hệ thống về cơ sở của sự phóng xạ đã được đóng góp chính bởi Marie Curie (Ma-riQuy-ri) (đạt Giải thưởng Nobel Hoá học năm 1911).

Phương trình tổng quát:

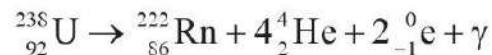


1. Qua thí nghiệm nghiên cứu thành phần tia bức xạ từ phóng xạ tự nhiên (Hình 2.1), hãy cho biết các dòng hạt α , β , γ mang điện tích dương, âm hay không mang điện.

Hình 2.1. Mô hình thí nghiệm nghiên cứu thành phần tia bức xạ

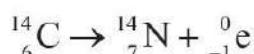
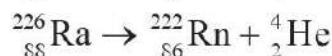
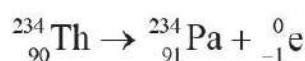
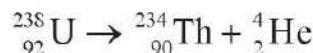
Các nghiên cứu đã chỉ ra thành phần các tia bức xạ của phóng xạ tự nhiên gồm có:

- Tia α (alpha) gồm các hạt tích điện dương, gọi là hạt α . Hạt α chính là hạt nhân ${}_{2}^{4}\text{He}$. Chùm hạt α bị lệch ít trong trường điện.
- Tia β (beta) gồm các hạt tích điện âm, gọi là hạt β . Hạt β chính là electron ${}_{-1}^{0}\text{e}$ (còn được kí hiệu là β^{-}). Chùm hạt β bị lệch nhiều trong trường điện.
- Tia γ (gamma) là dòng các hạt không mang điện tích, gọi là hạt γ . Hạt γ là các photon ${}_{0}^{0}\gamma$ (cùng bản chất với ánh sáng). Chùm hạt γ không bị lệch trong trường điện.



Chú ý: Tia gamma hầu như luôn có trong thành phần tia phóng xạ nên thường không được viết trong các phương trình.

Một số quá trình phóng xạ tự nhiên khác:



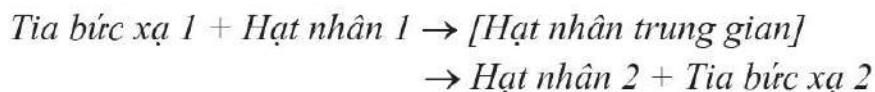
2. Vì sao tia γ không bị lệch trong trường điện?

3. Nhận xét về tổng số khối và tổng điện tích trước và sau phản ứng.

2. Sự phóng xạ nhân tạo

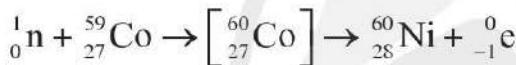
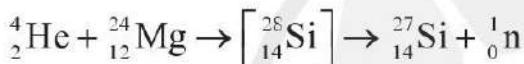
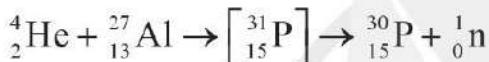
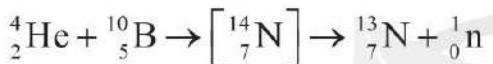
Sự phóng xạ nhân tạo là quá trình biến đổi hạt nhân không tự phát, gây ra bởi tác động bên ngoài lên hạt nhân. Ngoài sự biến đổi hạt nhân, quá trình này còn phát ra các tia bức xạ.

Phương trình tổng quát:



Tia bức xạ 1 thường là dòng hạt alpha ${}^4_2\text{He}$, hoặc neutron ${}_0^1\text{n}$ có năng lượng cao.

Một số quá trình phóng xạ nhân tạo:



4. Nêu sự giống và khác nhau giữa phóng xạ tự nhiên và phóng xạ nhân tạo.

EM CÓ BIẾT

Các hạt nhân trung gian có năng lượng cao (do nhận động năng từ tia bức xạ 1) nên kém bền và tiếp tục bị phân rã, do vậy được đặt trong dấu [].

EM CÓ BIẾT

Hiện tượng phóng xạ nhân tạo được các nhà bác học Pháp là Irene Joliot - Curie (I. J. Quy-ri) và Frederic Joliot - Curie (F. J. Quy-ri) phát hiện vào năm 1934. Phát hiện này giúp họ nhận giải Nobel vào năm 1935.

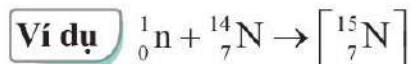
II PHẢN ỨNG HẠT NHÂN VÀ CÁC ĐỊNH LUẬT BẢO TOÀN SỐ KHỐI VÀ ĐIỆN TÍCH

1. Phản ứng hạt nhân

Phản ứng hạt nhân là phản ứng có sự biến đổi ở hạt nhân nguyên tử (thành phần hạt nhân, năng lượng của hạt nhân).

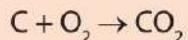
a) Phản ứng thay đổi thành phần hạt nhân

Các phản ứng phóng xạ tự nhiên, phóng xạ nhân tạo nêu trên đều làm thay đổi thành phần hạt nhân. Điều này thể hiện qua việc biến đổi từ nguyên tố này sang nguyên tố khác, hoặc thay đổi số lượng các hạt tạo nên hạt nhân.



Bên cạnh các phản ứng làm thay đổi thành phần hạt nhân nêu trên, còn có một số loại phản ứng sau đây cũng làm thay đổi thành phần hạt nhân.

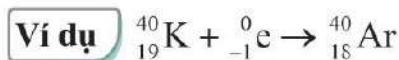
5. Cho phản ứng hóa học:



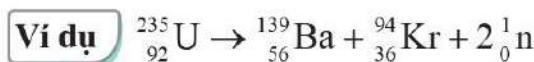
Phản ứng hóa học trên khác các phản ứng phóng xạ tự nhiên và nhân tạo ở điểm nào?



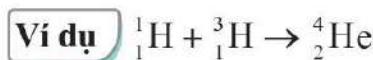
• *Phản ứng bắt electron của hạt nhân.*



• *Phản ứng phân hạch:* Phân tách hạt nhân lớn hơn thành nhiều hạt nhân nhỏ hơn, khác với phản ứng phóng xạ chỉ tạo ra một hạt nhân con.



• *Phản ứng nhiệt hạch:* Phản ứng kết hợp các hạt nhân nhỏ hơn thành hạt nhân lớn hơn, xảy ra ở nhiệt độ rất cao.



b) *Phản ứng thay đổi năng lượng của hạt nhân*

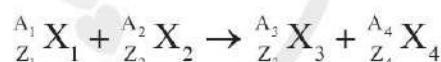
Phản ứng hạt nhân chỉ phát ra tia gamma, thành phần hạt nhân không thay đổi.



2. Định luật bảo toàn số khối và điện tích

Tất cả các phản ứng hạt nhân đều tuân theo định luật bảo toàn số khối và điện tích.

Giả sử có phản ứng hạt nhân:

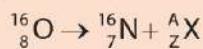


Theo định luật bảo toàn số khối: $A_1 + A_2 = A_3 + A_4$.

Theo định luật bảo toàn điện tích: $Z_1 + Z_2 = Z_3 + Z_4$.

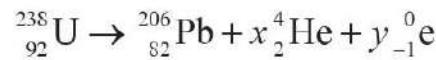


6. Cho phản ứng hạt nhân sau:



Xác định số khối, điện tích và tên gọi của hạt nhân ${}_{Z}^{A}\text{X}$.

Ví dụ Phân rã phóng xạ tự nhiên ${}_{92}^{238}\text{U}$ tạo ra đồng vị bền ${}_{82}^{206}\text{Pb}$, đồng thời giải phóng một số hạt α và β . Xác định số hạt α và β được giải phóng khi phân rã một hạt nhân ${}_{92}^{238}\text{U}$.



Giải: Theo định luật bảo toàn số khối:

$$238 = 206 + 4x + 0y \quad (1)$$

Theo định luật bảo toàn điện tích: $92 = 82 + 2x - y \quad (2)$

Giải hệ hai phương trình (1) và (2) ta tìm được: $x = 8$, $y = 6$.



III. ỨNG DỤNG CỦA PHẢN ỨNG HẠT NHÂN

Phản ứng hạt nhân có rất nhiều ứng dụng trong nghiên cứu khoa học, y học, sản xuất và đời sống.

1. Trong nghiên cứu khoa học

- Xác định tuổi của cổ vật:* Phản ứng hạt nhân luôn phát ra các bức xạ dễ đo đếm được; đồng thời lượng bức xạ giảm theo thời gian. Dựa trên cơ sở này, các nhà khảo cổ có thể xác định được tuổi của cổ vật.
- Nghiên cứu bản chất của vật chất:* Các máy gia tốc làm tăng năng lượng (động năng) của dòng hạt proton, electron,... lên rất cao. Dòng hạt này khi va chạm vào hạt nhân (thậm chí với các hạt tạo nên hạt nhân) nào đó sẽ phá vỡ chúng thành nhiều hạt nhỏ hơn, giúp các nhà khoa học có thêm thông tin về thành phần và bản chất của vật chất. Hiện nay, hiểu biết của con người về cấu tạo hạt nhân nói riêng, về bản chất của vật chất nói chung vẫn còn hạn chế.

2. Trong y học

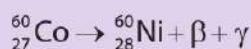
- Chẩn đoán bệnh qua hình ảnh:* Một liều chất phóng xạ thích hợp được đưa vào cơ thể, đi tới cơ quan cần chẩn đoán. Chất phóng xạ phát ra tia γ có khả năng đâm xuyên cao nên đi được tới thiết bị ghi hình ảnh dùng để chẩn đoán bệnh.
- Trị bệnh ung thư:* Dựa trên cơ sở sử dụng tia bức xạ có năng lượng cao (tia γ , β ,...) từ phản ứng hạt nhân để tiêu diệt hoặc kìm hãm sự phát triển tế bào ung thư (phương pháp xạ trị). Tia bức xạ phá huỷ DNA của tế bào ung thư. Khi các DNA này đã bị hư hỏng, tế bào ung thư sẽ ngừng phân chia hoặc bị phá vỡ và được loại bỏ ra khỏi cơ thể.
- Khử trùng:* Tia γ có tác dụng diệt trùng, cách thức này rẻ hơn phương pháp khử trùng bằng hơi nước; lại có thể thực hiện ở nhiệt độ thấp nên không gây ra các biến đổi bởi nhiệt cho các vật được khử trùng.

EM CÓ BIẾT

Cơ thể sinh vật sống luôn có sự trao đổi chất với khí quyển bên ngoài. Người ta tính được có trung bình 13,6 nguyên tử $^{14}_6C$ bị phân rã trong 1 phút ứng với 1 gam carbon trong cơ thể sinh vật sống cũng như trong khí quyển. Con số này là không đổi do $^{14}_6C$ liên tục được sinh ra (do 1_0n của tia vũ trụ phản ứng với nitrogen trong khí quyển, $^{14}_7N + ^1_0n \rightarrow ^{14}_6C + ^1_1H$) cân bằng với lượng bị phân rã. Khi sinh vật chết đi, không còn sự trao đổi chất nên số lượng $^{14}_6C$ phân rã giảm dần.



$^{60}_{27}Co$ được dùng trong phương pháp xạ trị dựa theo phản ứng sau đây:



Do nguồn bức xạ đặt ngoài cơ thể bệnh nhân nên tia xạ trị cần phải có khả năng đâm xuyên (khả năng đi xuyên qua lớp vật chất) lớn. Dựa vào bản chất của tia γ và β , em hãy dự đoán tia γ hay tia β có tác dụng xạ trị chính khi đặt $^{60}_{27}Co$ ngoài cơ thể bệnh nhân.



EM CÓ BIẾT

Bên cạnh những lợi ích từ phản ứng hạt nhân, con người cần phải cảnh giác với những khía cạnh có hại của nó: Các tia phóng xạ rất nguy hiểm với con người nên phải rất thận trọng trong các vấn đề có liên quan đến phóng xạ. Các vụ nổ, rò rỉ lò phản ứng hạt nhân,... nếu xảy ra sẽ là một thảm họa lớn đối với con người và thiên nhiên.

3. Trong sản xuất và đời sống

Các phản ứng hạt nhân diễn ra thường giải phóng một năng lượng khổng lồ. Các lò phản ứng hạt nhân được sử dụng với mục đích cung cấp năng lượng (thay cho các nguồn nhiên liệu hoá thạch như than đá, dầu mỏ,...) trong các nhà máy phát điện, tàu ngầm,...

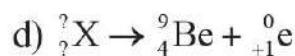
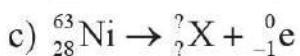
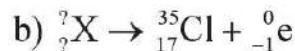
Bức xạ có điều khiển có thể gây nên biến đổi gene theo hướng có lợi: tạo giống cây lương thực và cây trồng khác cho sản lượng cao hơn, chống chịu tốt hơn với điều kiện thiên nhiên và sâu bệnh,...



- Phóng xạ tự nhiên là quá trình biến đổi hạt nhân tự phát, không phụ thuộc vào tác động bên ngoài. Phóng xạ nhân tạo là quá trình biến đổi hạt nhân không tự phát, gây ra bởi tác động bên ngoài lên hạt nhân. Ngoài sự biến đổi hạt nhân, các quá trình phóng xạ này còn phát ra các tia bức xạ.
- Phản ứng hạt nhân là phản ứng có sự biến đổi ở hạt nhân nguyên tử (thành phần hạt nhân, năng lượng của hạt nhân).
- Phản ứng hạt nhân tuân theo định luật bảo toàn số khối và điện tích.
- Phản ứng hạt nhân có rất nhiều ứng dụng trong nghiên cứu khoa học, y học, sản xuất và đời sống.

BÀI TẬP

Bài 1. Xác định số khối và điện tích của hạt nhân X trong các quá trình sau:



($?^0_{+1}\text{e}$ là hạt positron, còn được kí hiệu là β^+)

Bài 2. Phân rã tự nhiên $^{232}_{90}\text{Th}$ tạo ra đồng vị bền $^{208}_{82}\text{Pb}$, đồng thời giải phóng một số hạt α và β . Xác định số hạt α và β cho quá trình phân rã một hạt nhân $^{232}_{90}\text{Th}$.

Bài 3. Cần đốt cháy bao nhiêu kilôgam than đá chứa 80% C để tạo ra lượng nhiệt bằng năng lượng giải phóng ra khi 1 gam $^{235}_{92}\text{U}$ phân hạch. Biết khi phân hạch 1 mol $^{235}_{92}\text{U}$ toả ra năng lượng là $1,8 \times 10^{10}$ kJ, đốt cháy hoàn toàn 1 mol C toả ra năng lượng là 393,5 kJ.

Bài 4*. Một mảnh giấy lấy được từ một trong các “Cuộn sách Biển Chết” (gồm 981 bản ghi khác nhau được phát hiện tại 12 hang động ở phía đông hoang mạc Judea) được xác định có 10,8 nguyên tử $^{14}_6\text{C}$ bị phân rã trong 1 phút ứng với 1 gam carbon trong mảnh giấy (Hình 2.3).

Hãy tính tuổi của mảnh giấy (t) dựa theo phương trình:

$$t = \frac{1}{k} \ln \frac{A_0}{A_t}$$

Trong đó:

A_0 được coi bằng số nguyên tử $^{14}_6\text{C}$ bị phân rã trong 1 phút với 1 gam carbon trong sinh vật sống, $A_0 = 13,6$.

A_t được coi bằng số nguyên tử $^{14}_6\text{C}$ bị phân rã trong 1 phút với 1 gam carbon trong mẫu vật nghiên cứu.

Hằng số $k = 1,21 \times 10^{-4}$ năm $^{-1}$.



Hình 2.3. Mảnh giấy được lấy từ “Cuộn sách Biển Chết”

Bài 3

NĂNG LƯỢNG HOẠT HÓA CỦA PHẢN ỨNG HÓA HỌC

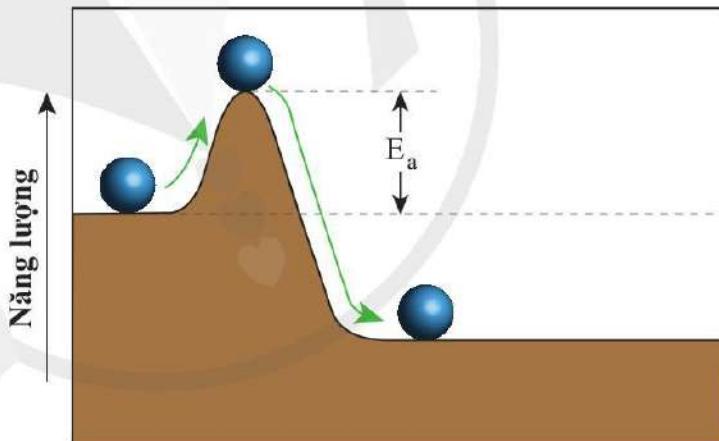
Học xong bài học này, em có thể:

- Trình bày được khái niệm năng lượng hoạt hóa.
- Nêu được ảnh hưởng của năng lượng hoạt hóa và nhiệt độ tới tốc độ phản ứng thông qua phương trình Arrhenius: $k = Ae^{\frac{-E_a}{RT}}$.
- Giải thích được vai trò của chất xúc tác.



Trong Hình 3.1, muốn lăn “hòn bi hoá học” sang phải theo chiều mũi tên màu xanh, hòn bi phải đi qua “hàng rào năng lượng” có chiều cao E_a . Những phát biểu nào sau đây là đúng?

- (1) Hàng rào E_a càng cao thì hòn bi càng dễ lăn qua.
- (2) Hàng rào E_a càng thấp thì hòn bi càng dễ lăn qua.
- (3) Cần phải cung cấp năng lượng cho hòn bi thì quá trình lăn sang phải mới xảy ra.
- (4) Hòn bi tự lăn sang phải mà không cần cung cấp thêm năng lượng.

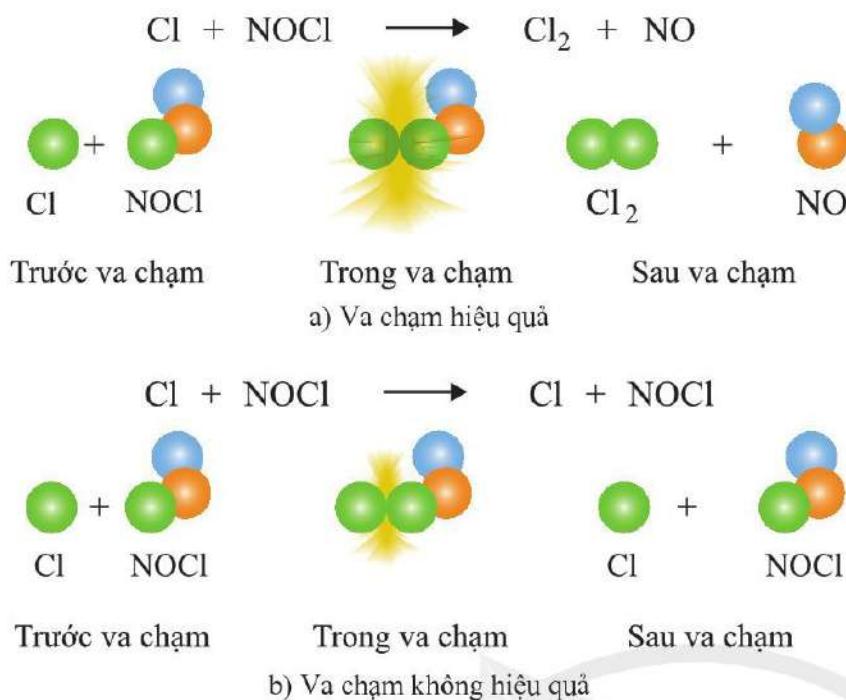


Hình 3.1. “Hòn bi hoá học” và hàng rào năng lượng E_a

Ở Hình 3.1, để “hòn bi hoá học” lăn được sang phải, cần cung cấp *năng lượng tối thiểu* bằng chiều cao hàng rào năng lượng E_a để đẩy “hòn bi hoá học” lên tới đỉnh hàng rào.

1. Năng lượng hoạt hóa

Để phản ứng hóa học xảy ra, các phân tử cần va chạm hiệu quả với nhau. Điều này đòi hỏi các phân tử phải chuyển động đủ nhanh, nghĩa là phải có động năng đủ lớn.



Hình 3.2. Hình mô phỏng va chạm hiệu quả và va chạm không hiệu quả

Năng lượng hoạt hoá (kí hiệu là E_a) là năng lượng tối thiểu mà các chất tham gia cần phải có để phản ứng có thể xảy ra.

Với cùng một phản ứng, E_a càng nhỏ thì tốc độ phản ứng càng cao do càng có nhiều nguyên tử hoặc phân tử đạt tới năng lượng này, tức là có càng nhiều va chạm hiệu quả xảy ra.

EM CÓ BIẾT

Nói chung, để làm tăng số lượng va chạm hiệu quả, các phân tử cần được cung cấp năng lượng, thường là dưới dạng nhiệt năng. Điều này giải thích vì sao người ta thường dùng đèn cồn, bếp điện để đun nóng hỗn hợp phản ứng khi làm thí nghiệm, cũng như cần phải đốt nóng hoặc gia nhiệt trong công nghiệp sản xuất hoá chất.



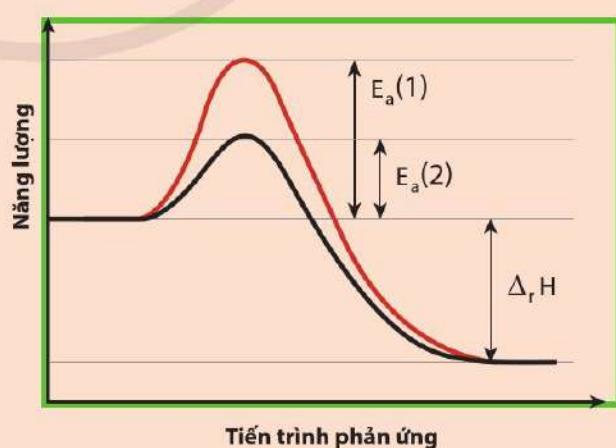
- Các phản ứng tạo gỉ kim loại có thể xảy ra ngay ở điều kiện nhiệt độ phòng mà không cần đun nóng. Hãy dự đoán năng lượng hoạt hoá của phản ứng là thấp hay cao.



1. Hình 3.3 biểu diễn cùng một phản ứng nhưng có năng lượng hoạt hoá khác nhau.

a) Trường hợp ứng với năng lượng hoạt hoá nào thì phản ứng xảy ra với tốc độ lớn hơn?

b) Biến thiên enthalpy phản ứng ($\Delta_r H$) trong trường hợp này là âm, nghĩa là thuận lợi (về enthalpy) cho phản ứng diễn ra. Nếu $\Delta_r H$ rất âm nhưng phản ứng lại có E_a rất lớn thì phản ứng này có dễ dàng xảy ra không? Giải thích.



Hình 3.3. Đồ thị biểu diễn các mức năng lượng hoạt hoá khác nhau của phản ứng

2. Ảnh hưởng của năng lượng hoạt hóa và nhiệt độ tới tốc độ phản ứng qua phương trình Arrhenius



2. Phát biểu định luật tác dụng khối lượng về tốc độ của phản ứng hóa học.



EM CÓ BIẾT

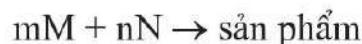
Phương trình Arrhenius được nhà bác học người Thụy Điển, Svante Arrhenius (S. A-rê-ni-út) đưa ra vào năm 1889.

Năng lượng hoạt hóa của một phản ứng sẽ thay đổi khi có mặt chất xúc tác.



1. Nếu ở ví dụ 1,
 $E_a(1) = 100 \text{ kJ mol}^{-1}$
và $E_a(2) = 150 \text{ kJ mol}^{-1}$
thì tốc độ phản ứng thay đổi như thế nào?

Giả sử phản ứng đơn giản:



có biểu thức tốc độ phản ứng: $v = kC_M^m C_N^n$.

Biểu thức này cho thấy khi nồng độ các chất được giữ không đổi, hằng số tốc độ k tăng (giảm) bao nhiêu lần thì tốc độ phản ứng v cũng tăng (giảm) bấy nhiêu lần. Như vậy, có thể thông qua sự thay đổi giá trị của k để đánh giá sự thay đổi tốc độ phản ứng.

Phương trình Arrhenius giúp chúng ta có thể tính được sự thay đổi của hằng số tốc độ phản ứng k theo năng lượng hoạt hóa $E_a (\text{J mol}^{-1})$ và nhiệt độ T (Kelvin).

$$k = Ae^{\frac{-E_a}{RT}} \quad (1)$$

Trong đó:

A là một hằng số cho một phản ứng xác định.

R là hằng số khí, $R = 8,314 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$.

Ví dụ 1 Một phản ứng hóa học diễn ra ở nhiệt độ không đổi là 25°C , nhưng ở hai trường hợp có năng lượng hoạt hóa khác nhau: khi không có xúc tác $E_a(1) = 100 \text{ kJ mol}^{-1}$ và khi có xúc tác $E_a(2) = 50 \text{ kJ mol}^{-1}$. So sánh tốc độ của phản ứng trong hai trường hợp này.

Giải:

Theo phương trình (1) ta có:

$$k_1 = Ae^{\frac{-E_a(1)}{RT}} \quad (2)$$

$$k_2 = Ae^{\frac{-E_a(2)}{RT}} \quad (3)$$

Chia vế hai phương trình (3) cho (2), thu được:

$$\frac{k_2}{k_1} = e^{\frac{E_a(1)-E_a(2)}{RT}} \quad (4)$$

Thay số vào (4) ta được:

$$\frac{k_2}{k_1} = e^{\frac{(100-50) \cdot 10^3}{8,314,298}} \approx 5,81 \times 10^8$$

Như vậy trong trường hợp này, khi năng lượng hoạt hóa giảm đi 50 kJ mol^{-1} thì tốc độ phản ứng tăng lên khoảng 581 triệu lần.

Ví dụ 2 Một phản ứng hóa học có $E_a = 100 \text{ kJ mol}^{-1}$ nhưng diễn ra ở hai nhiệt độ là 25°C và 35°C . So sánh tốc độ của phản ứng trong hai trường hợp này.

Giải: Theo phương trình (1):

$$k_1 = Ae^{\frac{-E_a}{RT_1}} \quad (5)$$

$$k_2 = Ae^{\frac{-E_a}{RT_2}} \quad (6)$$

Chia từng vế hai phương trình (6) cho (5), thu được:

$$\frac{k_2}{k_1} = e^{\frac{E_a(T_2 - T_1)}{R(T_2 T_1)}} \quad (7)$$

Thay số vào (7) ta được:

$$\frac{k_2}{k_1} = e^{\frac{100 \cdot 10^3}{8,314} \left(\frac{308 - 298}{308 \cdot 298} \right)} \approx 3,7$$

Như vậy trong trường hợp này, khi nhiệt độ tăng 10°C thì tốc độ phản ứng tăng lên xấp xỉ 3,7 lần.



2. Nếu ở ví dụ 2, $E_a = 50 \text{ kJ mol}^{-1}$ thì tốc độ phản ứng thay đổi như thế nào?

$$T (\text{K}) = t (\text{ }^\circ\text{C}) + 273$$



2. Hãy liên hệ kết quả ở ví dụ 2 với hệ số Van't Hoff về sự thay đổi tốc độ phản ứng theo nhiệt độ.

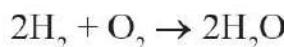


3. Một phản ứng diễn ra ở một nhiệt độ không đổi, khi thêm chất xúc tác, tốc độ phản ứng tăng lên do năng lượng hoạt hóa bị thay đổi. Vậy chất xúc tác làm tăng hay giảm năng lượng hoạt hóa của phản ứng?

3. Vai trò của chất xúc tác

Chất xúc tác là chất làm tăng tốc độ phản ứng nhưng không bị thay đổi về lượng và chất khi phản ứng kết thúc.

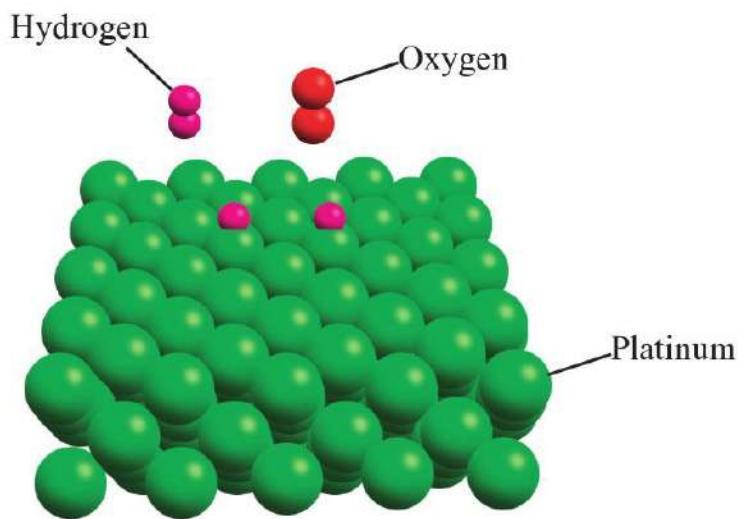
Ví dụ 3 H_2 phản ứng vô cùng chậm với O_2 ở nhiệt độ phòng, nhưng khi thổi khí H_2 qua lưới kim loại platinum (Pt) trong không khí, H_2 có thể bốc cháy. Trong trường hợp này, Pt đóng vai trò làm chất xúc tác cho phản ứng:





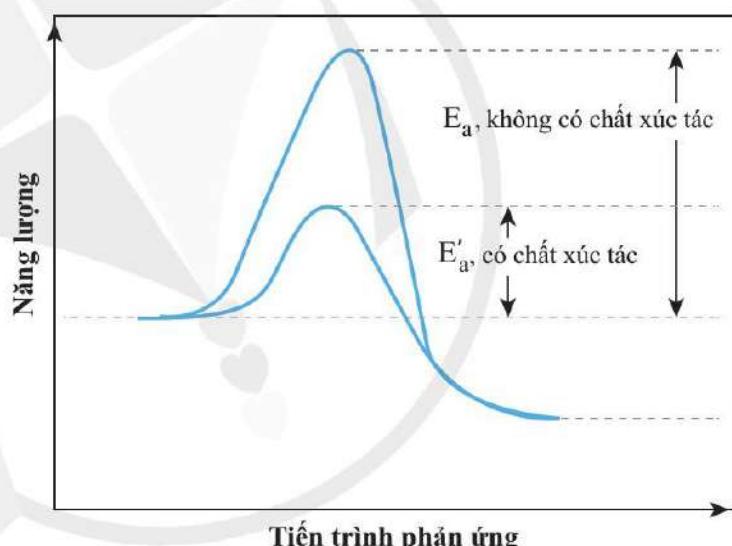
EM CÓ BIẾT

Hydrogen ở dạng nguyên tử có khả năng phản ứng mạnh hơn ở dạng phân tử. Năng lượng liên kết của H – H rất lớn (436 kJ mol^{-1}), nên để phá vỡ liên kết này cần đun nóng H_2 ở nhiệt độ cao. Tuy nhiên, H_2 bị hấp phụ trên bề mặt Pt làm liên kết H – H bị yếu đi, dẫn đến giảm năng lượng hoạt hóa của phản ứng. Điều này giải thích vai trò làm chất xúc tác của Pt trong phản ứng của H_2 với O_2 cũng như với nhiều chất khác (ví dụ như phản ứng cộng H_2 vào các hydrocarbon không no).



Hình 3.4. Phân tử H_2 bị phá vỡ liên kết trên bề mặt chất xúc tác Pt

Các nghiên cứu đã chỉ ra rằng: *Chất xúc tác có vai trò làm giảm năng lượng hoạt hóa của phản ứng, từ đó làm tăng tốc độ của phản ứng hóa học* (Hình 3.5).



Hình 3.5. Đồ thị so sánh năng lượng hoạt hóa của phản ứng khi có và không có chất xúc tác



- Năng lượng hoạt hóa (kí hiệu là E_a) là năng lượng tối thiểu mà các chất tham gia cần phải có để phản ứng có thể xảy ra.
- Theo phương trình Arrhenius: Phản ứng có năng lượng hoạt hóa càng nhỏ thì tốc độ phản ứng càng lớn. Nhiệt độ phản ứng càng cao thì tốc độ phản ứng càng lớn.
- Chất xúc tác có vai trò làm giảm năng lượng hoạt hóa của phản ứng.

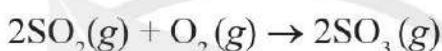
BÀI TẬP

Bài 1. Cho phản ứng:



So sánh tốc độ phân huỷ NO_2 ở nhiệt độ 25°C (nhiệt độ thường) và 800°C (nhiệt độ của ống xả khí thải ở động cơ đốt trong). Biết $E_a = 114 \text{ kJ mol}^{-1}$.

Bài 2. Cho phản ứng:



Biết $E_a = 314 \text{ kJ mol}^{-1}$.

- Hãy so sánh tốc độ phản ứng ở 25°C và 450°C .
- Nếu sử dụng xúc tác là hỗn hợp V_2O_5 và TiO_2 , thì năng lượng hoạt hoá của phản ứng giảm xuống chỉ còn 84 kJ mol^{-1} . Hãy so sánh tốc độ phản ứng khi có và không có chất xúc tác ở nhiệt độ 450°C .

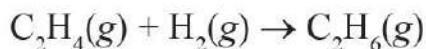
Bài 3. Thực hiện hai thí nghiệm hoà tan đá vôi vào dung dịch HCl 1 M ở cùng một nhiệt độ.

Thí nghiệm 1: Cho 0,5 gam đá vôi dạng bột vào 10 mL HCl 1 M.

Thí nghiệm 2: Cho 0,5 gam đá vôi dạng viên vào 10 mL HCl 1 M.

- Tốc độ phản ứng ở thí nghiệm nào nhanh hơn? Giải thích.
- Năng lượng hoạt hoá của hai phản ứng bằng nhau hay khác nhau?

Bài 4. Cho phản ứng:



Năng lượng hoạt hoá của phản ứng khi có xúc tác Pd là 35 kJ mol^{-1} . Hãy so sánh sự thay đổi tốc độ phản ứng khi có xúc tác Pd ở nhiệt độ 300 K và 475 K .

Bài 5. Giả sử hai phản ứng hóa học khác nhau có cùng E_a , diễn ra ở cùng nhiệt độ. Vậy hằng số tốc độ k có luôn bằng nhau không?

Bài 4

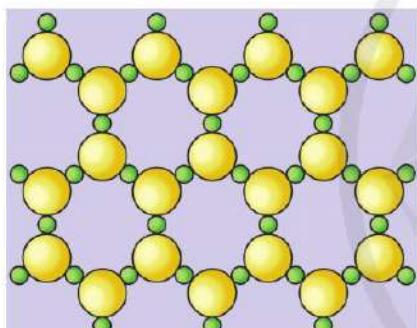
ENTROPY VÀ BIẾN THIỀN NĂNG LƯỢNG TỰ DO GIBBS

Học xong bài học này, em có thể:

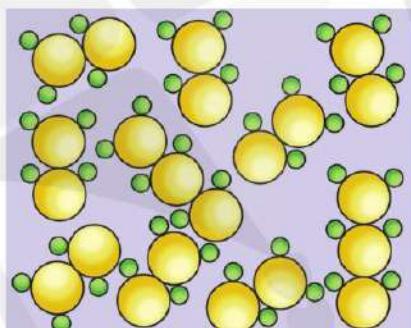
- Nêu được khái niệm và ý nghĩa của entropy.
- Nêu được ý nghĩa của dấu và trị số của biến thiên năng lượng tự do Gibbs.
- Tính được $\Delta_r G_T^\theta$ theo công thức $\Delta_r G_T^\theta = \Delta_r H_T^\theta - T \Delta_r S_T^\theta$ từ bảng cho sẵn các giá trị $\Delta_f H_{298}^\theta$ và S_{298}^θ của các chất.



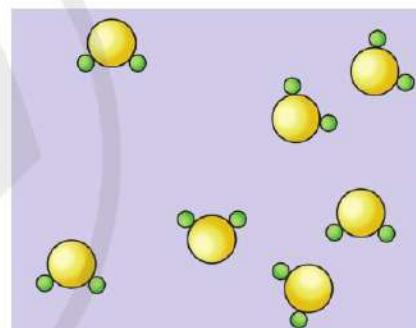
Hình 4.1 mô tả trật tự sắp xếp của các phân tử nước ở ba thể: rắn, lỏng và khí. Em hãy cho biết mức độ “mất trật tự” của hệ tăng hay giảm theo chiều từ nước đá tới hơi nước.



a) Nước đá



b) Nước lỏng



c) Hơi nước

Hình 4.1. Trật tự sắp xếp các phân tử nước ở ba thể rắn, lỏng, khí

I

ENTROPY

Muối ăn (sodium chloride, NaCl) ở trạng thái tinh thể với các ion được sắp xếp một cách trật tự (Hình 4.2a). Tuy nhiên, trật tự này bị phá vỡ khi hòa tan muối ăn vào nước (Hình 4.2b).



a) Muối ăn tinh thể



b) Muối ăn khi được hòa tan vào nước

Hình 4.2. Sự phá vỡ trật tự sắp xếp của các ion trong tinh thể NaCl khi hòa tan vào nước

Độ **mất trật tự** của ion Na^+ , Cl^- tăng lên khi chuyển từ NaCl dạng tinh thể sang dạng hoà tan; độ mất trật tự của nước tăng lên khi chuyển từ dạng lỏng sang dạng hơi. Người ta dùng đại lượng entropy (kí hiệu là S) để đặc trưng cho độ mất trật tự của các tiểu phân (nguyên tử, phân tử, ion) trong một hệ.



- Khi đun nóng chảy tinh thể NaCl , độ mất trật tự của các ion tăng hay giảm? Tại sao?

1. Ý nghĩa của entropy

Entropy là đại lượng đặc trưng cho độ mất trật tự của hệ ở một trạng thái và điều kiện xác định. Độ mất trật tự của hệ càng cao, entropy của hệ càng lớn.

Đơn vị của entropy thường là $\text{J mol}^{-1} \text{K}^{-1}$.

Entropy của một chất ở điều kiện chuẩn (25°C , 1 bar) gọi là entropy chuẩn của chất và được kí hiệu là S_{298}^0 .

2. Tính biến thiên entropy của một phản ứng hoặc một quá trình

Biến thiên entropy chuẩn của một quá trình (vật lí, hoá học), kí hiệu là $\Delta_r S_{298}^0$ được tính như sau.

Giả sử có phản ứng tổng quát:



Biến thiên entropy chuẩn của phản ứng này được tính theo công thức:

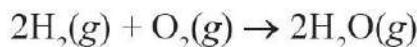
$$\Delta_r S_{298}^0 = mS_{298}^0(M) + nS_{298}^0(N) - aS_{298}^0(A) - bS_{298}^0(B)$$

Entropy chuẩn của một số chất được cho trong Phụ lục 1.



- Tính biến thiên entropy chuẩn cho phản ứng đốt cháy 1 mol $\text{CH}_3\text{OH}(l)$ bằng $\text{O}_2(g)$, thu được $\text{CO}_2(g)$ và $\text{H}_2\text{O}(g)$.

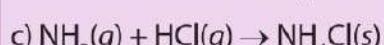
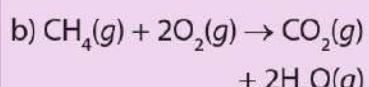
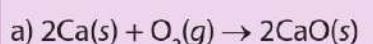
Ví dụ 1 Tính biến thiên entropy chuẩn cho phản ứng sau:



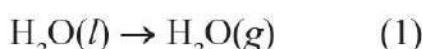
$$\begin{aligned} Giải: \Delta_r S_{298}^0 &= 2S_{298}^0(\text{H}_2\text{O}(g)) - 2S_{298}^0(\text{H}_2(g)) - S_{298}^0(\text{O}_2(g)) \\ &= 2 \times 188,7 - 2 \times 130,7 - 205,2 = -89,2 (\text{J K}^{-1}) \end{aligned}$$



- Tính $\Delta_r S_{298}^0$ của các phản ứng sau:



Ví dụ 2 Tính biến thiên entropy của quá trình chuyển 1 mol nước lỏng thành hơi nước ở điều kiện chuẩn.



$$\begin{aligned} Giải: \Delta S_{298}^0 &= S_{298}^0(\text{H}_2\text{O}(g)) - S_{298}^0(\text{H}_2\text{O}(l)) \\ &= 188,7 - 70,0 = 118,7 (\text{J K}^{-1}) \end{aligned}$$



- Tại sao ΔS_{298}^0 của quá trình (1) lại dương?

II

BIẾN THIÊN NĂNG LƯỢNG TỰ DO GIBBS VÀ KHẢ NĂNG XÂY RA CỦA PHẢN ỨNG HÓA HỌC

Một câu hỏi lớn luôn được đặt ra là: Đại lượng nào cho biết khả năng xảy ra một phản ứng hóa học nói riêng hay một quá trình nói chung? Ở một áp suất xác định thì phản ứng (quá trình) xảy ra ở nhiệt độ nào? Để trả lời câu hỏi đó, ta cùng xét biến thiên năng lượng tự do Gibbs.

Khả năng *tự xảy ra* của một phản ứng hóa học phụ thuộc vào các yếu tố: nhiệt độ T , biến thiên enthalpy và biến thiên entropy của phản ứng tại nhiệt độ tương ứng là $\Delta_r H_T^0$, $\Delta_r S_T^0$. Biến thiên năng lượng tự do Gibbs ($\Delta_r G_T^0$) là đại lượng liên hệ các yếu tố $\Delta_r H_T^0$, $\Delta_r S_T^0$ và nhiệt độ T .

$$\Delta_r G_T^0 = \Delta_r H_T^0 - T\Delta_r S_T^0$$

Trong đó, T là nhiệt độ theo thang Kelvin (K).

- $\Delta_r G_T^0 < 0$: Phản ứng tự xảy ra.
- $\Delta_r G_T^0 > 0$: Phản ứng không tự xảy ra.

Vậy biến thiên năng lượng tự do Gibbs ($\Delta_r G_T^0$) là tiêu chuẩn để đánh giá khả năng tự diễn biến của quá trình hoặc phản ứng hóa học ở nhiệt độ T và các yếu tố khác ở điều kiện chuẩn.

Ở nhiệt độ T , một phản ứng có $\Delta_r G_T^0$ càng âm thì quá trình tự diễn biến càng thuận lợi và ngược lại.

Ví dụ 3 Cho phản ứng:



- a) Phản ứng trên có tự xảy ra ở 25°C , 1 bar hay không?
b) Phản ứng trên có tự xảy ra ở 0°C , 1 bar hay không?

Biết rằng: $\Delta_r H_{298}^0 = -120 \text{ kJ}$, $\Delta_r S_{298}^0 = -150 \text{ J K}^{-1}$. Giả sử biến thiên enthalpy và biến thiên entropy của phản ứng không phụ thuộc vào nhiệt độ.

Giải:

- a) Ở nhiệt độ $t = 25^\circ\text{C}$ hay $T = 25 + 273 = 298 \text{ (K)}$. Thay vào công thức $\Delta_r G_T^0 = \Delta_r H_T^0 - T\Delta_r S_T^0$, ta được:

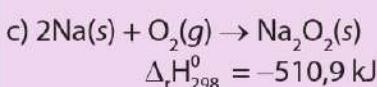
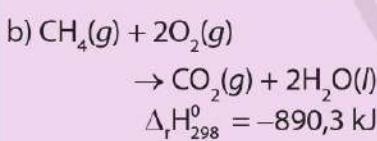
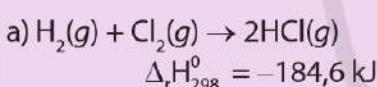
$$\begin{aligned}\Delta_r G_{298}^0 &= -120 \times 10^3 \text{ J} - 298 \text{ K} \times (-150) \text{ J K}^{-1} \\ &= -75\ 300 \text{ (J)} < 0.\end{aligned}$$

Vậy ở điều kiện chuẩn, phản ứng (2) tự xảy ra.

Chúng ta công nhận mà không chứng minh biểu thức này.



3. Tính $\Delta_r G_{298}^0$ của các phản ứng sau và cho biết ở điều kiện chuẩn các phản ứng đó có tự xảy ra hay không.

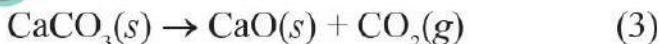


b) Ở nhiệt độ $t = 0^\circ\text{C}$ hay $T = 0 + 273 = 273$ (K). Thay vào công thức $\Delta_r G_T^0 = \Delta_r H_T^0 - T \Delta_r S_T^0$, ta được:

$$\begin{aligned}\Delta_r G_{273}^0 &= -120 \times 10^3 \text{ J} - 273 \text{ K} \times (-150) \text{ J K}^{-1} \\ &= -79\,050 \text{ (J)} < 0.\end{aligned}$$

Vậy ở nhiệt độ 0°C , 1 bar, phản ứng vẫn tự xảy ra được.

Ví dụ 4 Cho phản ứng:



a) Ở 25°C , 1 bar, phản ứng có tự xảy ra được hay không?

b) Ở nhiệt độ nào phản ứng trên tự xảy ra ở 1 bar?

Biết rằng: $\Delta_r H_{298}^0 = 178,29 \text{ kJ}$, $\Delta_r S_{298}^0$ được tính theo số liệu cho trong Phụ lục 1. Giả sử biến thiên enthalpy và biến thiên entropy của phản ứng không phụ thuộc vào nhiệt độ.

Giải:

a) Trước tiên cần tính $\Delta_r S_{298}^0$ từ các số liệu ở Phụ lục 1.

$$\begin{aligned}\Delta_r S_{298}^0 &= S_{298}^0(\text{CaO}(s)) + S_{298}^0(\text{CO}_2(g)) - S_{298}^0(\text{CaCO}_3(s)) \\ &= 38,1 + 213,8 - 92,9 = 159 \text{ (J K}^{-1}).\end{aligned}$$

$$\Delta_r G_{298}^0 = \Delta_r H_{298}^0 - 298 \times \Delta_r S_{298}^0 = 130,9 \text{ (kJ)} > 0$$

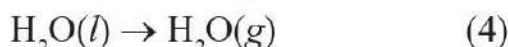
Như vậy, ở điều kiện chuẩn, phản ứng (3) không tự xảy ra.

b) Để phản ứng trên xảy ra, cần có:

$$\Delta_r G_T^0 = \Delta_r H_T^0 - T \Delta_r S_T^0 < 0$$

$$\begin{aligned}\text{Từ đây: } \Delta_r G_T^0 &= 178,29 \times 10^3 - T \times 159 < 0 \\ \Leftrightarrow T &> 1\,121 \text{ K hay } T > 848^\circ\text{C}.\end{aligned}$$

Ví dụ 5 Ở 1 bar, hãy xác định nhiệt độ để quá trình nước lỏng chuyển sang thể hơi tự xảy ra:



Biết rằng biến thiên enthalpy và biến thiên entropy của quá trình (4) là: $\Delta H_{298}^0 = 44,01 \text{ kJ}$; $\Delta S_{298}^0 = 118,74 \text{ J K}^{-1}$. Giả sử biến thiên enthalpy và biến thiên entropy của quá trình không phụ thuộc vào nhiệt độ.

Giải: Để quá trình trên xảy ra, cần có:

$$\Delta G_T^0 = \Delta H_T^0 - T \Delta S_T^0 < 0$$

$$\begin{aligned}\text{Tức là: } \Delta G_T^0 &= 44,01 \times 10^3 - T \times 118,74 < 0 \\ \Leftrightarrow T &> 370,64 \text{ K hay } T > 97,64^\circ\text{C}.\end{aligned}$$

1. Từ giá trị $\Delta_r G_T^0$ của phản ứng (2) ở nhiệt độ 298 K và 273 K, hãy cho biết ở nhiệt độ thấp hơn hay cao hơn thì phản ứng diễn ra thuận lợi hơn.

2. Phản ứng (3) trong thực tế còn gọi là phản ứng gì?

3. Mặc dù phản ứng (3) có thể xảy ra ở nhiệt độ 848°C , nhưng trong thực tế người ta thường nung nóng CaCO_3 tới nhiệt độ $1\,000^\circ\text{C}$. Giải thích vì sao.

Các quá trình (1) và (4) là quá trình vật lí nên không sử dụng các kí hiệu $\Delta_r H_T^0$, $\Delta_r S_T^0$, $\Delta_r G_T^0$.

Ở 1 bar, nhiệt độ sôi của nước là $99,61^\circ\text{C}$. Sai số giữa tính toán lí thuyết và thực nghiệm là do việc coi biến thiên enthalpy và biến thiên entropy của quá trình không phụ thuộc nhiệt độ.



- Entropy là đại lượng đặc trưng cho độ mất trật tự của hệ.
- Độ mất trật tự của hệ càng cao, entropy của hệ càng lớn.
- Biến thiên năng lượng tự do Gibbs ($\Delta_r G_T^0$) là đại lượng phụ thuộc vào các yếu tố $\Delta_r H_T^0$, $\Delta_r S_T^0$ và T theo công thức:

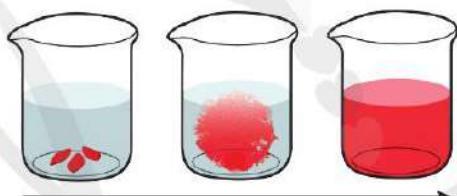
$$\Delta_r G_T^0 = \Delta_r H_T^0 - T \Delta_r S_T^0$$

$\Delta_r G_T^0 < 0$: Phản ứng tự xảy ra.

$\Delta_r G_T^0 > 0$: Phản ứng không tự xảy ra.

BÀI TẬP

- Bài 1.** Thả một vài tinh thể potassium dichromate ($K_2Cr_2O_7$) màu cam đỏ vào nước (Hình 4.3). Entropy của quá trình hoà tan này tăng hay giảm? Giải thích.



Hình 4.3. Quá trình hoà tan tinh thể potassium dichromate vào nước

- Bài 2.** Hãy đánh giá khả năng tự xảy ra của phản ứng sau ở điều kiện chuẩn:



Biết rằng: $\Delta_f H_{298}^0 = -818,3 \text{ kJ}$, $\Delta_f S_{298}^0$ được tính theo số liệu cho trong Phụ lục 1.

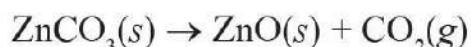
Từ kết quả này hãy đưa ra một lí do giải thích cho việc vì sao các đồ vật bằng nhôm được sử dụng rất phổ biến.

- Bài 3.** Hãy xác định nhiệt độ sôi của $CHCl_3(l)$ ở 1 bar và so sánh với giá trị đo được từ thực nghiệm ($61,2^\circ\text{C}$). Giải thích biến thiên enthalpy và entropy của quá trình không thay đổi theo nhiệt độ.

Biết rằng:

	$\Delta_f H_{298}^0$ (kJ mol ⁻¹)	S ₂₉₈ ⁰ (J mol ⁻¹ K ⁻¹)
CHCl ₃ (l)	-134,1	201,7
CHCl ₃ (g)	-102,7	295,7

Bài 4. Cho phản ứng:



Ở điều kiện chuẩn, phản ứng có tự xảy ra tại các nhiệt độ sau hay không?

Biết rằng: $\Delta_r H_{298}^0 = 71,0 \text{ kJ}$, $\Delta_r S_{298}^0 = 174,8 \text{ J K}^{-1}$. Giả sử biến thiên enthalpy và biến thiên entropy của phản ứng không phụ thuộc vào nhiệt độ.

Bài 5. Hãy xác định nhiệt độ thấp nhất để phản ứng nhiệt phân NaHCO_3 dưới đây diễn ra:



Biết rằng: $\Delta_r H_{298}^0 = 9,16 \text{ kJ}$, $\Delta_r S_{298}^0$ được tính theo số liệu cho trong Phụ lục 1. Giả sử biến thiên enthalpy và biến thiên entropy của phản ứng không phụ thuộc vào nhiệt độ.

Bài 6*. Ở điều kiện thường (coi là 25 °C, 1 bar), có tự xảy ra quá trình sắt bị biến đổi thành $\text{Fe}_2\text{O}_3(s)$ (có trong thành phần gỉ sắt) được không?

Bài 7*. Để dự đoán khả năng tự xảy ra phản ứng cần sử dụng $\Delta_r H^0$ hay $\Delta_r G^0$? Giải thích.

HOÁ HỌC TRONG VIỆC PHÒNG CHỐNG CHÁY NỔ

Bài 5

SƠ LƯỢC VỀ PHẢN ỨNG CHÁY VÀ NỔ

Học xong bài học này, em có thể:

- Nêu được khái niệm, đặc điểm của phản ứng cháy, điều kiện để phản ứng cháy xảy ra, một số ví dụ về sự cháy các chất vô cơ và hữu cơ.
- Chỉ ra được những sản phẩm của phản ứng cháy và tác hại với con người.
- Nêu được khái niệm về điểm chớp cháy, nhiệt độ tự bốc cháy, nhiệt độ ngọn lửa.
- Nêu được khái niệm, đặc điểm cơ bản của phản ứng nổ, nổ vật lý và nổ hóa học.
- Nêu được khái niệm về “nổ bụi”.
- Phân tích được dấu hiệu để nhận biết về những nguy cơ và cách giảm nguy cơ gây cháy, nổ.



Quan sát Hình 5.1 và Hình 5.2, cho biết trường hợp nào có thể gây cháy, nổ; trường hợp nào không. Giải thích.



Hình 5.1. Chai nước để trên xe ô tô giữa trưa nắng



Hình 5.2. Đun cách thuỷ để làm nóng bình rượu

I

PHẢN ỨNG CHÁY

Có nhiều phản ứng oxi hoá – khử diễn ra với tốc độ phản ứng chậm như phản ứng tạo gỉ sắt, phản ứng oxi hoá làm ố vàng sách báo,... Bên cạnh đó, cũng có nhiều phản ứng oxi hoá – khử diễn ra với tốc độ nhanh như các phản ứng đốt cháy than củi, xăng dầu,...



a) Đinh sắt bị gỉ



b) Than củi đang cháy

Hình 5.3. Một số quá trình oxi hoá – khử

Rất nhiều phản ứng oxi hoá – khử diễn ra với tốc độ nhanh và toả ra nhiều nhiệt. Lượng nhiệt này giúp duy trì phản ứng, cũng như nung nóng các chất lên nhiệt độ cao nên kèm theo sự phát ra ánh sáng.

1. Khái niệm

Những phản ứng oxi hoá – khử mà chất oxi hoá thường là oxygen trong không khí, toả ra nhiều nhiệt và phát ra ánh sáng gọi là phản ứng cháy.

Từ xa xưa, con người đã biết sử dụng các phản ứng đốt cháy như đốt cháy củi để lấy nhiệt và ánh sáng, đốt cháy dầu mỏ để lấy ánh sáng,... Ngày nay, những phản ứng cháy quan trọng nhất mà chúng ta thường gặp chính là phản ứng đốt cháy nhiên liệu lỏng như xăng, dầu (là các chất hữu cơ, thành phần chính là các hydrocarbon) trong các động cơ ô tô, xe máy,...

Tuy nhiên, có những phản ứng cháy diễn ra ngoài ý muốn của con người gây ra những hậu quả nặng nề như những vụ cháy rừng, cháy nhà ở, cháy kho chứa vật liệu máy móc,... Bên cạnh các thiệt hại gây ra bởi ngọn lửa, các phản ứng cháy còn có thể sinh ra các chất độc hại cho con người và các sinh vật sống như CO, HCN, HCl, SO₂, NO,... Nếu nồng độ CO trong không khí là 1,28% (theo thể tích) thì con người bất tỉnh sau 2 – 3 nhịp thở, chết sau 2 – 3 phút. Các loại nhựa khi cháy thường sinh ra PAHs (Polycyclic Aromatic Hydrocarbons), là những tác nhân gây bệnh ung thư. Nhiều đám cháy, chẳng hạn cháy rừng đã huỷ hoại trực tiếp môi trường sống của các loài sinh vật, sinh ra rất nhiều khí CO₂ làm nhiệt độ Trái Đất tăng lên, gây ra các hiện tượng biến đổi khí hậu,...



1. Em hãy chỉ ra những sự khác biệt có thể cảm nhận và quan sát được của hai quá trình oxi hoá – khử mô tả ở Hình 5.3a và 5.3b.



2. Em hãy chỉ ra những quá trình xảy ra trong thực tế có gắn với phản ứng cháy.



1. Bóng đèn điện (bóng dây tóc, bóng huỳnh quang) phát nhiệt và ánh sáng có phải do nguyên nhân gây ra bởi phản ứng cháy hay không?



EM CÓ BIẾT

Tên lửa vũ trụ sử dụng nhiên liệu rắn thường là bột Al trộn với bột NH₄ClO₄. Khi vận hành, NH₄ClO₄ bị nhiệt phân tạo ra O₂ (và NO, H₂O, HCl) sẽ đốt cháy Al, sinh ra rất nhiều nhiệt. Nhiệt độ tăng lên tới gần 2 800 °C khiến hơi nước và N₂ "nở" ra nhanh chóng, vì phun đầy các chất khí đang giãn nở ra bên ngoài, tạo ra lực đẩy.

2. Điều kiện để xảy ra phản ứng cháy

Để phản ứng cháy diễn ra, phải thoả mãn ba điều kiện sau:

- 3. Hãy lấy một số ví dụ phản ứng cháy của chất hữu cơ, phản ứng cháy của chất vô cơ. Nêu các điều kiện để các phản ứng này xảy ra.
- 4. Vụ cháy rừng Amazon gây thiệt hại nặng nề tới cả thế giới đã diễn ra trong thế kỷ XXI. Thảo luận về nguyên nhân gây cháy và tác hại của đám cháy đó.



2. Một số hydrocarbon trong bình gas tạo với không khí hỗn hợp nổ ngay ở nồng độ rất thấp: C_5H_{12} 1,4%, C_4H_{10} 1,6%, CH_4 4,4%. Nếu các nguyên nhân có thể gây ra các vụ cháy, nổ bình gas.

- Có chất cháy (nhiên liệu): xăng, dầu, gỗ, giấy, nhựa, cao su,...
- Có chất oxi hoá: chất oxi hoá phổ biến là oxygen trong không khí. Oxygen chiếm khoảng 21% thể tích không khí, nếu lượng oxygen giảm xuống nhỏ hơn 14% thì hầu hết các phản ứng cháy đều bị dừng lại, trừ một số ít chất vẫn cháy được trong điều kiện “nghèo” oxygen (ví dụ, hydrogen vẫn cháy khi chỉ còn 5% oxygen trong không khí).
- Có nguồn nhiệt khơi mào (mồi lửa): ngọn lửa, tia lửa điện, ánh nắng mặt trời hội tụ, nhiệt do ma sát,...



Hình 5.4. Tam giác lửa

3. Điểm chớp cháy, nhiệt độ tự bốc cháy, nhiệt độ ngọn lửa

Xăng dễ bắt cháy hơn dầu, dầu dễ bắt cháy hơn than. Để đánh giá khả năng cháy của các chất, người ta đưa ra một số khái niệm sau đây.

a) Điểm chớp cháy

Điểm chớp cháy của một chất là nhiệt độ thấp nhất ở áp suất khí quyển mà hơi của chất đó sẽ bốc cháy trong không khí khi tiếp xúc với nguồn lửa.



3. Vì sao ở ngay điều kiện nhiệt độ phòng (khoảng 25 °C), cần phải bảo quản xăng cẩn thận hơn so với dầu hoả?

Ví dụ Điểm chớp cháy của xăng là -43 °C, ethanol là 13 °C, dầu hoả là 38 – 72 °C, dầu diesel sinh học là 160 °C.

Chất lỏng có điểm chớp cháy nhỏ hơn 37,8 °C được gọi là *chất lỏng dễ cháy*. Chất lỏng có điểm chớp cháy lớn hơn 37,8 °C gọi là *chất lỏng có thể gây cháy*.

b) Nhiệt độ tự bốc cháy

Nhiệt độ tự bốc cháy là nhiệt độ thấp nhất ở áp suất khí quyển mà chất cháy tự cháy trong không khí dù không cần tiếp xúc với nguồn lửa.

Ví dụ Nhiệt độ tự bốc cháy của xăng là 247 – 280 °C, ethanol là 426 °C, da làm túi xách là 200 – 212 °C, giấy là 218 – 246 °C.

c) Nhiệt độ ngọn lửa

Nhiệt độ ngọn lửa là nhiệt độ cao nhất có thể tạo ra bởi phản ứng cháy của chất cháy trong không khí ở áp suất khí quyển.

Ví dụ Nhiệt độ ngọn lửa cao nhất khi cháy trong không khí của methane khoảng 1 963 °C và acetylene (khí đèn) khoảng 2 334 °C.



4. Vì sao nhiệt độ tự bốc cháy của xăng lớn hơn nhiệt độ tự bốc cháy của da làm túi xách nhưng người ta lại chỉ đặt biển cấm lửa tại các trạm bơm xăng?

II PHẢN ỨNG NỔ

Các chất khi bị giãn nở thể tích đột ngột (giãn nở trong một thời gian rất ngắn, chẳng hạn vài miligiây) sẽ gây nên tiếng nổ. Căn cứ vào đặc điểm gây nổ, phân chia thành hai loại nổ chính: nổ vật lí và nổ hoá học.

1. Nổ vật lí

Nổ vật lí là quá trình nổ gây ra bởi sự giãn nở rất nhanh về thể tích mà không kèm theo phản ứng hoá học.

Đặc điểm cơ bản của nổ vật lí là không liên quan đến phản ứng hoá học. Ví dụ, nổ săm lốp xe khi bị bơm quá căng, nổ nồi hơi hoặc các thiết bị áp lực khi áp suất khí hoặc hơi quá lớn,...



5. Hãy kể một số quá trình nổ quan sát được trong thực tế.



5. Phích đựng nước với phần ruột làm bằng thủy tinh tráng bạc gồm hai lớp, giữa hai lớp này là chân không. Giải thích vì sao nổ ruột phích đựng nước là sự nổ vật lí.



6. Các trường hợp sau đây là nổ vật lí hay nổ hoá học?
a) Nổ nồi áp suất khi đun nấu.
b) Nổ khoang tàu chứa dầu đã hút gần cạn dầu.

2. Nổ hoá học

Nổ hoá học là quá trình nổ gây ra bởi phản ứng hoá học diễn ra với tốc độ rất nhanh, toả nhiều nhiệt nên gây ra sự tăng thể tích đột ngột.

Đặc điểm cơ bản khác biệt với nổ vật lí là nổ hoá học phải có phản ứng hoá học. Sau đây là một số ví dụ về nổ hoá học.



7. Trong trường hợp nào thì phản ứng của CH_4 với O_2 là phản ứng cháy, phản ứng nổ?

Thảo luận tương tự với trường hợp của cồn.



Áp dụng điều kiện cháy theo “tam giác lửa” cho phản ứng nổ có luôn đúng hay không?



6. Quả bóng bay khi được bơm bằng hydrogen sẽ bay rất cao do khí hydrogen rất nhẹ. Tuy nhiên, đã có nhiều vụ nổ thương tâm gây ra bởi bóng bay hydrogen.

a) Có thể thay hydrogen bằng khí nào khác an toàn hơn?

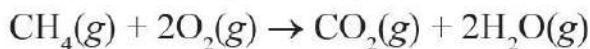
b) Thảo luận cách phòng tránh các vụ nổ gây bởi bóng bay hydrogen.



EM CÓ BIẾT

Năm 1785, vụ nổ bụi đầu tiên được ghi nhận tại kho bánh mì của ông Giacomelli (Gia-cô-mê-li), thương nhân người Ý. Nguyên nhân gây nổ là do bột mì lơ lửng trong không khí, bắt lửa từ chiếc đèn dầu. Hậu quả đã khiến cho hai công nhân bị thương.

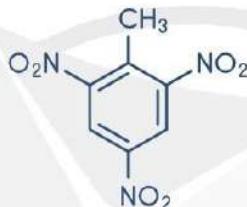
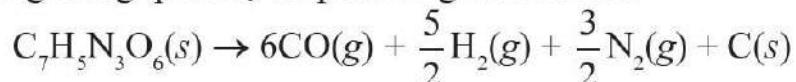
Ví dụ 1 Methane trong khí gas trộn với oxygen không khí gây nổ rất mạnh do phản ứng:



$$\Delta_r H_{298}^0 = -802,5 \text{ kJ}$$

Phản ứng này toả rất nhiều nhiệt, các sản phẩm bị đốt nóng mạnh, thể tích tăng đột ngột nên gây nổ.

Ví dụ 2 Thuốc nổ TNT (2, 4, 6-Trinitrotoluene, $\text{C}_7\text{H}_5\text{N}_3\text{O}_6$) dùng trong quân sự có phản ứng nổ như sau:

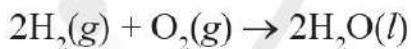


a) Công thức cấu tạo của thuốc nổ TNT

b) Một vụ nổ gây bởi thuốc nổ TNT

Hình 5.5. Thuốc nổ TNT

Ví dụ 3 Hydrogen (H_2) sẽ là một loại nhiên liệu của tương lai, phản ứng cháy của H_2 toả ra rất nhiều năng lượng.



$$\Delta_r H_{298}^0 = -571,6 \text{ kJ}$$

Đồng thời, sản phẩm phản ứng cháy là nước, không gây ảnh hưởng đến môi trường. Trong khi đó, khi đốt các nhiên liệu hoá thạch (than đá, dầu mỏ,...) sinh ra carbon dioxide (CO_2) làm tăng hiệu ứng nhà kính. Tuy nhiên, khi sử dụng nhiên liệu hydrogen phải rất thận trọng vì hydrogen tạo với oxygen hỗn hợp nổ rất mạnh.

3. Nổ bụi

Nhiều vụ nổ, đặc biệt xảy ra trong nhà máy, công xưởng lại có nguyên nhân từ những hạt bụi mịn như bột nhựa, bột than, bột kim loại, bột cao su, bột ngũ cốc,... trong không khí. Những vụ nổ như vậy có tên gọi chung là “nổ bụi”. Một vụ nổ bụi có thể xảy ra nếu hội tụ đủ 5 điều kiện sau:

- Nhiên liệu dạng bụi mịn.
- Bụi nhiên liệu phân tán trong không khí: bụi càng mịn, khả năng gây nổ càng cao do phát tán nhanh và dễ lơ lửng trong không khí.
- Có oxygen.
- Nguồn nhiệt gây kích nổ: có thể là ngọn lửa, tia lửa điện (gây bởi chập điện hoặc tĩnh điện do thiết bị không nối đất), nhiệt do ma sát,...
- Không gian kín: không gian trong nhà xưởng, thiết bị, tủ chứa, thiết bị ngăn bụi, ống dẫn,...



8. Nổ bụi có thể gây ra bởi (các) bụi mịn nào sau đây: bụi đường ăn, bụi giấy, bụi cát?



- Những phản ứng oxi hoá – khử mà chất oxi hoá thường là oxygen trong không khí, tỏa ra nhiều nhiệt và phát ra ánh sáng gọi là phản ứng cháy.
- Phản ứng cháy chỉ xảy ra khi có đủ ba điều kiện: chất cháy, chất oxi hoá (thường là oxygen trong không khí) và nguồn nhiệt khởi mào.
- Điểm cháy của một chất là nhiệt độ thấp nhất ở áp suất khí quyển mà hơi của chất đó sẽ bốc cháy trong không khí khi tiếp xúc với nguồn lửa.
- Nhiệt độ tự bốc cháy là nhiệt độ thấp nhất ở áp suất khí quyển mà chất cháy tự cháy trong không khí dù không cần tiếp xúc với nguồn lửa.
- Nhiệt độ ngọn lửa là nhiệt độ cao nhất có thể tạo ra bởi phản ứng cháy của chất cháy trong không khí ở áp suất khí quyển.
- Nổ vật lý là quá trình nổ gây ra bởi sự giãn nở rất nhanh về thể tích mà không kèm theo phản ứng hóa học.
- Nổ hóa học là quá trình nổ gây ra bởi phản ứng hóa học diễn ra với tốc độ rất nhanh, tỏa nhiều nhiệt nên gây ra sự tăng thể tích đột ngột.
- Nổ bụi là vụ nổ gây ra bởi các hạt bụi rắn có kích thước nhỏ (như bột nhựa, bột đường, bột ngũ cốc, bột kim loại,...) có khả năng tác dụng với oxygen và tỏa nhiệt mạnh trong không khí.

BÀI TẬP

- Bài 1.** Phân loại các chất, thiết bị sau vào ba nhóm *nhiên liệu, chất oxi hoá và nguồn nhiệt*: lò sưởi, ngọn lửa, oxygen trong bình chữa, diêm, bật lửa, gỗ, giấy, thiết bị điện, không khí.
- Bài 2.** Nhựa PVC có công thức cấu tạo là $-(\text{CH}_2 - \text{CHCl})_n$ khi bị đốt cháy có thể sinh ra các sản phẩm nào? Phân tích về tác hại (nếu có) của những sản phẩm đó.
- Bài 3.** Dựa vào điểm chớp cháy của các chất hữu cơ dưới đây, hãy cho biết những chất nào là chất lỏng dễ cháy; chất lỏng có thể cháy.

Bảng 5.1. Điểm chớp cháy của một số chất hữu cơ

Chất	Benzene	Ethanol	Butane	Hexanol	Acetone	Glycerol
Điểm chớp cháy (°C)	-11	13	-60	60	-18	160

- Bài 4.** Hãy nêu vai trò của dây dẫn điện tiếp đất (ở các nhà máy, công xưởng, sợi xích sắt tiếp đất của ô tô chở xăng dầu,...).
- Bài 5.** Nổ khí trong bếp gas gia đình thường là sự nổ hoá học nhưng đôi khi lại là nổ vật lí. Hãy cho biết khi nào thì gây ra sự nổ hoá học, khi nào thì gây ra sự nổ vật lí.

Bài 6

HOÁ HỌC VỀ PHẢN ỨNG CHÁY VÀ NỔ

Học xong bài học này, em có thể:

- Tính được $\Delta_f H^\circ$ một số phản ứng cháy, nổ để dự đoán mức độ mãnh liệt của phản ứng cháy, nổ.
- Tính được sự thay đổi của tốc độ phản ứng cháy, tốc độ phản ứng “hô hấp” theo giả định về sự phụ thuộc vào nồng độ oxygen.



Quan sát các phản ứng trong Hình 6.1 và Hình 6.2, cho biết tốc độ của phản ứng nào lớn hơn.



Hình 6.1. Than củi đang cháy



Hình 6.2. Pháo hoa nổ trên bầu trời

I

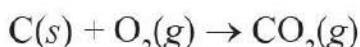
BIẾN THIÊN ENTHALPY CỦA PHẢN ỨNG CHÁY, NỔ

Các phản ứng cháy, nổ đều là phản ứng tỏa nhiệt ($\Delta_f H^\circ < 0$). Dựa vào dấu và giá trị biến thiên enthalpy của phản ứng cháy, nổ có thể đánh giá được mức độ mãnh liệt của phản ứng. Nói chung, phản ứng tỏa nhiệt hơn thường xảy ra mãnh liệt hơn.



1. Có những cách nào để tính biến thiên enthalpy của phản ứng?

Ví dụ 1 Cho phản ứng đốt cháy carbon:



Tính biến thiên enthalpy chuẩn của phản ứng. Tính nhiệt lượng (theo kJ) tỏa ra khi đốt cháy hoàn toàn 1 gam C.

Giá trị enthalpy tạo thành của một số chất được cho trong Phụ lục 2.

Giải: Biến thiên enthalpy của phản ứng:

$$\Delta_r H_{298}^0 = \Delta_f H_{298}^0(\text{CO}_2(g)) - [\Delta_f H_{298}^0(\text{C}(s)) + \Delta_f H_{298}^0(\text{O}_2(g))] \\ = -393,5 \text{ kJ.}$$

Đốt cháy 1 gam C toả ra nhiệt lượng là:

$$393,5 : 12 = 32,8 \text{ (kJ).}$$



2. Nhắc lại cách tính biến thiên enthalpy phản ứng theo năng lượng liên kết.

Giá trị năng lượng của một số liên kết được cho trong Phụ lục 3.

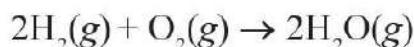
1. Đốt cháy hoàn toàn 1 gam (ở thể hơi) mỗi chất trong dãy CH_4 , CH_3Cl , CH_2Cl_2 , CHCl_3 , CCl_4 sẽ toả ra bao nhiêu kilôJun nhiệt lượng trong điều kiện chuẩn? Biết sản phẩm phản ứng là CO_2 , H_2O , HCl , Cl_2 đều ở thể khí. Năng lượng của một số liên kết được cho ở Phụ lục 3.

2. So sánh mức độ mảnh liệt của phản ứng đốt cháy các chất trên.



3. Xác định nhiệt lượng (kJ) toả ra khi đốt cháy hoàn toàn 1 gam mỗi chất CH_4 , C_2H_2 ở điều kiện chuẩn. Biết các sản phẩm thu được đều ở thể khí.

Ví dụ 2 Cho phản ứng sau:



- a) Tính $\Delta_r H_{298}^0$ của phản ứng theo năng lượng liên kết.
b) Cho biết đốt cháy hoàn toàn 1 gam H_2 sẽ toả ra bao nhiêu kilôJun nhiệt lượng.

Giải:

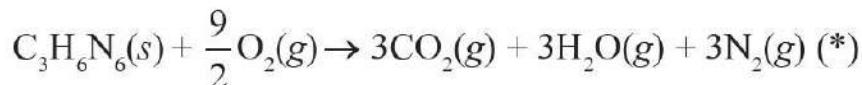
a) Biến thiên enthalpy của phản ứng:

$$\begin{aligned}\Delta_r H_{298}^0 &= 2 \times E_b(\text{H}_2) + 1 \times E_b(\text{O}_2) - 2 \times E_b(\text{H}_2\text{O}) \\ &= 2 \times E_{\text{H}-\text{H}} + 1 \times E_{\text{O}_2} - 2 \times 2E_{\text{O}-\text{H}} \\ &= 2 \times 436 + 1 \times 498 - 4 \times 464 \\ &= -486 \text{ (kJ).}\end{aligned}$$

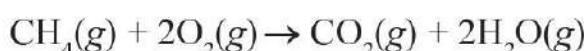
b) Đốt cháy 1 gam H_2 toả ra nhiệt lượng là:

$$486 : 4 = 121,5 \text{ (kJ).}$$

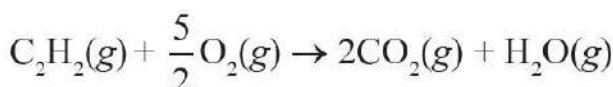
Ví dụ 3 Cho các phản ứng đốt cháy melamine, methane và acetylene:



$$\Delta_r H_{298}^0 = -1\ 841,6 \text{ kJ}$$



$$\Delta_r H_{298}^0 = -802,5 \text{ kJ}$$



$$\Delta_r H_{298}^0 = -1\ 256,2 \text{ kJ}$$

Giải thích tại sao phản ứng (*) có $\Delta_r H_{298}^0$ rất âm nhưng melamine ($C_3H_6N_6$) lại được sử dụng trong sợi vải chống cháy.

Giải: Đốt cháy 1 gam melamine toả ra lượng nhiệt là:

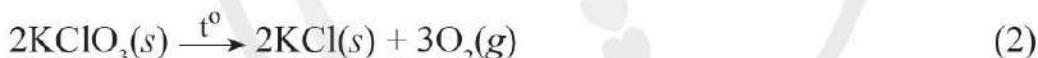
$$1\,841,6 : 126 = 14,6 \text{ (kJ).}$$

Nhiệt lượng toả ra khi đốt cháy 1 gam methane, acetylene lần lượt là 50,2 kJ và 48,3 kJ. Như vậy, phản ứng của melamine với oxygen toả ra lượng nhiệt ít hơn rất nhiều so với của hydrocarbon với oxygen khi so cùng một khối lượng chất đốt cháy. Do vậy, phản ứng cháy của melamine sẽ kém mảnh liệt hơn nhiều. Điều này giải thích tại sao melamine được sử dụng trong sợi vải chống cháy.

Nhận xét: Các chất hữu cơ được sử dụng làm vật liệu chống cháy có đặc điểm là nhiệt lượng sinh ra khi bị cháy nhỏ hơn rất nhiều so với các nhiên liệu dễ cháy.Thêm vào đó, nhiệt độ tự bốc cháy của các vật liệu này cũng rất cao, ví dụ melamine có nhiệt độ tự bốc cháy lớn hơn 500 °C.

Ví dụ 4 Một số muối giàu oxygen (KNO_3 , $KClO_3$, $KMnO_4$) khi phân huỷ sẽ giải phóng oxygen. Khả năng gây cháy, nổ của mỗi chất này tăng lên hay giảm xuống khi có mặt thêm chất khử (ví dụ như carbon)? Giải thích bằng các tính toán cụ thể.

Giải: Phương trình hoá học của các phản ứng phân huỷ khi chưa có mặt carbon:



Tính biến thiên enthalpy của các phản ứng (1), (2), (3).

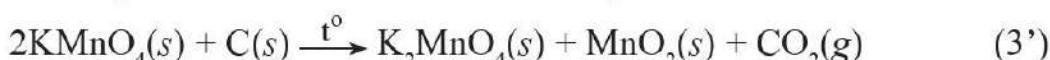
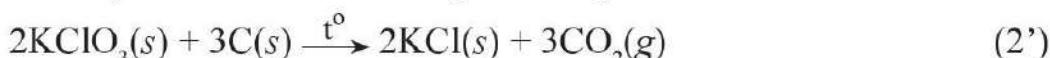
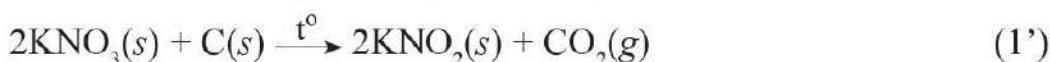
$$\begin{aligned}\Delta_r H_{298}^0(1) &= [2 \Delta_f H_{298}^0(KNO_2(s)) + \Delta_f H_{298}^0(O_2(g))] - 2 \Delta_f H_{298}^0(KNO_3(s)) \\ &= [2 \times (-369,8) + 0] - 2 \times (-494,6) = 249,6 \text{ (kJ)}.\end{aligned}$$

Tính tương tự với các phản ứng (2) và (3) được:

$$\Delta_r H_{298}^0(2) = -77,6 \text{ kJ};$$

$$\Delta_r H_{298}^0(3) = -25,6 \text{ kJ}.$$

Phương trình hoá học của các phản ứng khi có mặt carbon:



Tính biến thiên enthalpy của các phản ứng (1'), (2'), (3'):

$$\Delta_r H_{298}^0(1') = -143,9 \text{ kJ};$$

$$\Delta_r H_{298}^0(2') = -1\,258,1 \text{ kJ};$$

$$\Delta_r H_{298}^0(3') = -419,1 \text{ kJ}.$$

4. Hãy tính ứng với 1 gam mỗi muối trong các phản ứng (1'), (2'), (3') toả ra bao nhiêu kilôJulin nhiệt lượng.

1. Nếu thành phần trong đầu que diêm và vỏ quẹt bao diêm. Cho biết cơ sở hoá học sự tạo lửa của diêm.

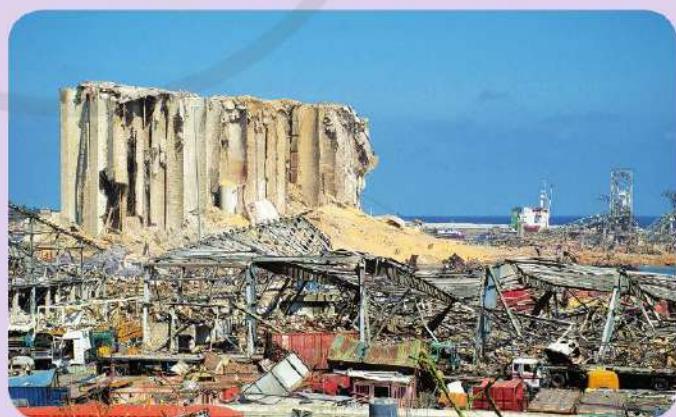
Như vậy, với cả ba phản ứng, khi có mặt thêm chất khử carbon, $\Delta_r H_{298}^0$ trở nên âm hơn nhiều, nghĩa là phản ứng trở nên mãnh liệt hơn.

Nhận xét: Khi trộn chất oxi hoá (oxygen hay muối giàu oxygen) với nhiên liệu theo tỉ lệ nhất định có thể tạo ra hỗn hợp gây nổ.

2. Việt Nam là một trong những quốc gia chịu ảnh hưởng nặng nề của các cuộc chiến tranh để lại. Một trong số đó chính là hàng nghìn tấn bom mìn, vật liệu nổ hiện còn sót lại trên khắp cả nước. Em hãy tìm hiểu và trả lời các câu hỏi:
- Có bao nhiêu tỉnh thành bị ô nhiễm bởi bom mìn? Tổng diện tích bị ô nhiễm bom mìn, vật liệu nổ trên cả nước là bao nhiêu? Ô nhiễm bom mìn và vật liệu nổ đã gây nên những thiệt hại như thế nào?
 - Hãy đề xuất những hành động để làm giảm nguy cơ thiệt hại gây ra do các vụ nổ bom mìn và vật liệu nổ.

3. Ngày 04-8-2020 tại cảng biển thành phố Beirut, thủ đô của Liban đã xảy ra hai vụ nổ liên tiếp. Nguyên nhân gây ra bởi sự nổ của 2 750 tấn ammonium nitrate, (NH_4NO_3). Vụ nổ này gây ra thiệt hại rất lớn về người và của: 207 người chết, khoảng 7 500 người bị thương, khoảng 300 000 người mất nhà cửa, tổng thiệt hại lên đến 10 – 15 tỉ USD.

Giải thích vì sao một loại đạm thông thường như ammonium nitrate lại có thể phát nổ được. Từ đó, đề xuất cách phòng chống cháy nổ phân đạm khi lưu trữ trong nhà kho.



Hình 6.3. Sự tàn phá do vụ nổ ammonium nitrate tại cảng biển thành phố Beirut, ngày 04-8-2020

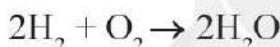
II SỰ THAY ĐỔI TỐC ĐỘ CỦA PHẢN ỨNG THEO NỒNG ĐỘ OXYGEN

Tốc độ phản ứng hóa học phụ thuộc vào nhiều yếu tố. Một trong những yếu tố đó là nồng độ chất tham gia phản ứng.

1. Phản ứng cháy

Để phản ứng cháy xảy ra, cần phải có sự tham gia của oxygen. Nếu nồng độ oxygen giảm thì tốc độ phản ứng cháy cũng bị giảm đi.

Ví dụ 5 Cho phản ứng đốt cháy hydrogen:



Tốc độ của phản ứng được xác định bằng thực nghiệm như sau:

$$v = kC_{\text{H}_2}^{1,5}C_{\text{O}_2}^{0,7}$$

Hãy cho biết tốc độ phản ứng này sẽ thay đổi như thế nào nếu nồng độ oxygen giảm đi 2 lần. Giả thiết các yếu tố khác không đổi.

Giải: Gọi nồng độ ban đầu của các chất như sau:

$$C_{\text{H}_2} = x \text{ M}, C_{\text{O}_2} = y \text{ M}$$

Biểu thức tốc độ phản ứng sẽ là:

$$v_t = kx^{1,5}y^{0,7} \quad (1)$$

Biểu thức tốc độ phản ứng sau khi giảm nồng độ oxygen là:

$$v_s = kx^{1,5}(0,5y)^{0,7} \quad (2)$$

Chia từng vế của (1) cho (2), ta được:

$$\frac{v_t}{v_s} = \frac{y^{0,7}}{(0,5y)^{0,7}} = \frac{1}{0,5^{0,7}} = 1,62.$$

Như vậy, tốc độ phản ứng đốt cháy hydrogen sẽ giảm 1,62 lần so với tốc độ ban đầu.

EM CÓ BIẾT

Với phản ứng:



- Nếu phản ứng đơn giản, tốc độ phản ứng có dạng:

$$v = kC_M^m C_N^n$$

- Nếu phản ứng phức tạp (đi qua nhiều giai đoạn trung gian):

$$v = kC_M^a C_N^b$$

Trong đó: a, b là các số thực và có thể khác m, n.

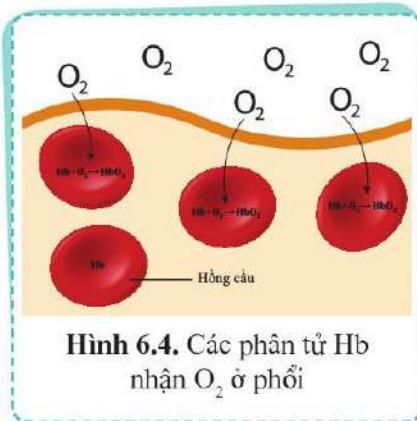
Một số phản ứng đốt cháy nhiên liệu (NL) có biểu thức tốc độ:

$$v = kC_{\text{NL}}^a C_{\text{O}_2}^b$$

NL	a	b
C ₃ H ₈	0,1	1,65
C ₄ H ₁₀	0,15	1,6
C ₈ H ₁₈	0,25	1,5
CH ₃ OH	0,25	1,5



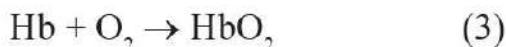
5. Giải thích vì sao ở một số nơi, người ta bơm khí nitrogen vào lốp xe ô tô thay cho không khí.



Hình 6.4. Các phân tử Hb nhận O₂ ở phổi

2. Phản ứng “hô hấp”

Các phân tử hemoglobin (Hb) trong tế bào máu làm nhiệm vụ vận chuyển oxygen từ phổi tới các cơ quan và vận chuyển carbon dioxide từ các cơ quan về phổi. Một trong những phản ứng quan trọng nhất của quá trình hô hấp là phản ứng giữa Hb với O₂ ở phổi:



Biểu thức tốc độ của phản ứng (3):

$$v = k C_{\text{Hb}} C_{\text{O}_2} \quad (4)$$

Biểu thức (4) cho thấy nếu nồng độ oxygen giảm bao nhiêu lần thì tốc độ phản ứng (3) giảm đi bấy nhiêu lần.

Ví dụ 6 Khi hàm lượng O₂ trong không khí giảm từ 21% xuống 16% (theo thể tích) thì tốc độ phản ứng (3) giảm bao nhiêu lần? Giả sử các yếu tố khác không đổi.

Giải: Từ biểu thức (4), tốc độ phản ứng (3) tỉ lệ bậc nhất với hàm lượng O₂ nên:

$$\frac{v_{21\%}}{v_{16\%}} = \frac{21}{16} = 1,31.$$

Như vậy, tốc độ phản ứng (3) giảm 1,31 lần so với tốc độ ban đầu.

EM CÓ BIẾT

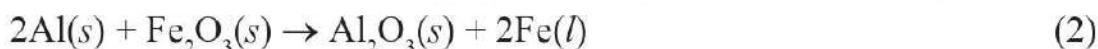
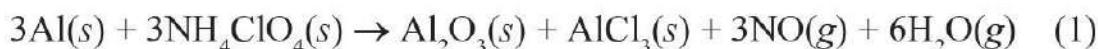
- Nếu hàm lượng oxygen trong không khí giảm xuống đến 16%, để có đủ oxygen cho cơ thể con người, nhịp thở và nhịp tim tăng lên, xuất hiện cảm giác đau đầu và buồn nôn. Nếu hàm lượng oxygen trong không khí giảm xuống còn 12% sẽ gây chóng mặt, không đứng vững. Nếu hàm lượng oxygen trong không khí còn 8% sẽ gây bất tỉnh, thiệt mạng trong 7 – 8 phút.
- Tất cả các cơ quan trong cơ thể con người đều cần dùng oxygen, trong đó não tiêu thụ nhiều oxygen nhất, khoảng 25% lượng oxygen cung cấp cho cơ thể (mặc dù não chỉ có khối lượng trung bình 1,4 kg).



- Dựa vào dấu và giá trị biến thiên enthalpy của phản ứng cháy, nổ có thể đánh giá được mức độ mãnh liệt của chúng. Nói chung, phản ứng tỏa ra nhiều nhiệt hơn thường xảy ra mãnh liệt hơn.
- Oxygen cần cho sự cháy và sự hô hấp. Khi nồng độ oxygen giảm, tốc độ phản ứng cháy và phản ứng “hô hấp” cũng giảm.

BÀI TẬP

Bài 1. Hỗn hợp bột Al và NH_4ClO_4 được dùng làm nhiên liệu rắn cho tên lửa. Hỗn hợp bột Al và Fe_2O_3 được dùng để hàn kim loại. Phản ứng xảy ra khi sử dụng các hỗn hợp bột này như sau:

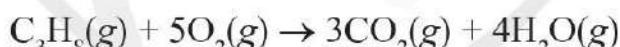


Các giá trị $\Delta_f H_{298}^0$ (kJ mol⁻¹) được cho ở Phụ lục 2.

- Bằng tính toán hãy cho biết 1 gam hỗn hợp bột nào (trộn theo đúng tỉ lệ phản ứng) tỏa ra nhiều nhiệt hơn. Từ đó dự đoán phản ứng nào xảy ra mãnh liệt hơn.
- Có thể dùng hỗn hợp bột Al và Fe_2O_3 làm nhiên liệu trong động cơ tên lửa được không?

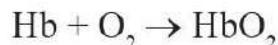
Bài 2. Hexachlorobenzene rắn (C_6Cl_6) là chất cực kì độc với con người nên phải được bảo quản rất kĩ lưỡng. Nếu xảy ra hỏa hoạn nhà kho có chứa C_6Cl_6 thì chất này có dễ dàng bị tiêu huỷ bởi phản ứng cháy với oxygen hay không? Hãy dự đoán bằng cách tính biến thiên enthalpy của phản ứng. Biết rằng phản ứng cháy sinh ra CO_2 và Cl_2 .

Bài 3. Cho phản ứng đốt cháy hoàn toàn khí propane:



Tốc độ của phản ứng trên sẽ thay đổi như thế nào nếu hàm lượng oxygen trong không khí giảm từ 21% xuống 15% (theo thể tích)? Các yếu tố khác coi như không đổi.

Bài 4. Cho phản ứng giữa Hb với O_2 ở phổi:



Giả sử lượng oxygen cung cấp cho cơ thể chỉ phụ thuộc vào tốc độ phản ứng; tần số nhịp thở trung bình của một người là 16 nhịp/phút. Hỏi nếu hàm lượng oxygen trong không khí giảm từ 21% xuống 18% (theo thể tích) thì tần số nhịp thở trung bình là bao nhiêu để đảm bảo lượng oxygen cung cấp cho cơ thể không thay đổi?

Bài 7

PHÒNG CHỐNG VÀ XỬ LÍ CHÁY NỔ

Học xong bài học này, em có thể:

- Nêu được nguyên tắc phòng chống và xử lý cháy nổ.
- Giải thích được nguyên tắc của việc sử dụng nước, cát, khí CO_2 , bọt chữa cháy để xử lý đám cháy cũng như các trường hợp không sử dụng được các chất chữa cháy này.



Hình 7.1 là hình ảnh ghi lại một đám cháy xảy ra tại kho chứa dầu. Theo em, có thể dùng nước để dập tắt đám cháy này hay không?



Hình 7.1. Đám cháy xảy ra tại một kho chứa dầu



1. Khi chữa cháy bằng nước, nước bị nóng đến hoá hơi và bay đi. Nếu vai trò của quá trình này trong việc xử lí đám cháy, so sánh với việc xử lí bằng cát.

I CÁC NGUYÊN TẮC CHUNG

- Nguyên tắc chung để phòng cháy, nổ:* tách rời ba yếu tố là chất cháy nổ, chất oxi hoá và môi lửa.
- Nguyên tắc chung để chống và xử lí cháy, nổ:* hạ thấp tốc độ cháy của vật liệu đang cháy đến mức tối thiểu và phân tán nhanh nhiệt lượng của đám cháy ra ngoài.

II CÁC PHƯƠNG PHÁP PHÒNG VÀ CHỮA CHÁY

1. Các phương pháp phòng cháy

- Không để chất cháy ở gần những nơi có nguồn nhiệt.
- Loại trừ các khả năng tiếp xúc, phát sinh nguồn nhiệt ở những nơi có chất cháy.

- Hạn chế đến mức độ tối thiểu lượng chất cháy trong khu vực dân cư.
- Thay thế các vật liệu (gia dụng, xây dựng,...) dễ cháy hoặc có khả năng cháy bằng các vật liệu không cháy, hoặc khó cháy.
- Cách ly chất cháy với môi trường ngoài bằng vật liệu không cháy: đựng các chất cháy trong can bằng thép, sơn chống cháy các bề mặt vật liệu,...
- Tạo môi trường không có oxygen hoặc có nồng độ oxygen thấp: Trong những trường hợp đặc biệt, có thể thay thế không khí bằng N_2 , CO_2 ,... để hạn chế sự cháy với các thiết bị đặc biệt.
- Luôn sẵn sàng các phương án thoát hiểm và chữa cháy.

2. Các phương pháp chữa cháy

a) Các phương pháp chung

- Phương pháp hạ nhiệt độ (làm lạnh): Dùng chất chữa cháy để hạ nhiệt độ đám cháy và làm giảm tốc độ phản ứng cháy. Khi nhiệt độ được hạ xuống dưới nhiệt độ tự bốc cháy, đám cháy sẽ được dập tắt.
- Phương pháp hạn chế nguồn oxygen (làm ngạt): Hạn chế oxygen tiếp xúc với chất cháy, chẳng hạn sử dụng lớp ngăn đám cháy với không khí.
- Phương pháp cách ly: Sử dụng lớp ngăn, tấm chắn, bờ chắn cách ly đám cháy,... để ngọn lửa không gây cháy các khu vực khác.

Trong thực tế, người ta có thể sử dụng kết hợp các phương pháp này để đạt hiệu quả chữa cháy cao nhất.

b) Các chất chữa cháy

- Nước: Làm giảm nhiệt độ đám cháy, hơi nước có tác dụng ngăn cản nguồn oxygen cho phản ứng cháy. Chú ý: cần ngắt điện khi chữa cháy bằng nước để tránh bị điện giật.
- Cát: Làm giảm nhiệt độ đám cháy, hạn chế nguồn oxygen cho phản ứng cháy và có thể dùng cát đắp thành bờ để cách ly đám cháy.



2. Vận dụng ý nghĩa của tam giác lửa để giải thích cơ sở của từng phương pháp phòng cháy.



3. Thảo luận về cơ sở của các phương pháp chữa cháy dựa theo tốc độ của phản ứng cháy:

- Ảnh hưởng của nhiệt độ tới tốc độ phản ứng cháy như thế nào?
- Ảnh hưởng của nồng độ oxygen tới tốc độ phản ứng cháy như thế nào?



1. Giải thích những trường hợp sau đây:

- Không dùng nước để chữa đám cháy do xăng, dầu và một số hoá chất như lithium, sodium,...
- Không dùng nước, cát, khí CO_2 để chữa đám cháy kim loại magnesium.



EM CÓ BIẾT

Trong thực tế, người ta thường sử dụng bột talc, dung dịch H_3BO_3 , 9 – 17% trong dung môi triethylene glycol để dập tắt đám cháy kim loại magnesium.

- Khí CO_2 : Thường được nén trong các bình thép chịu áp suất. CO_2 không gây cháy, khi phun ra khỏi bình ở dạng tuyết có nhiệt độ $-79^{\circ}C$ (do vậy cần cẩn thận khi sử dụng vì có thể gây bỏng lạnh) nên có tác dụng hạ nhiệt độ và hạn chế nguồn oxygen.
- Bột chữa cháy: Là hỗn hợp không khí, nước và chất hoạt động bề mặt,... Bột chữa cháy có thể sử dụng cho đám cháy xăng, dầu do bột nhẹ hơn xăng, dầu nên tạo lớp ngăn cách đám cháy với nguồn oxygen.

3. Các dụng cụ phòng cháy, chữa cháy tại gia đình

2. Tìm hiểu và giải thích ý nghĩa một số biểu tượng liên quan đến cháy, nổ dưới đây:



Ngày nay, việc phòng cháy chữa cháy (PCCC) không còn là nhiệm vụ của riêng lực lượng công an PCCC, mà còn là trách nhiệm của mỗi người dân, mỗi gia đình và toàn xã hội. Dưới đây là những dụng cụ PCCC mà mỗi hộ gia đình nên được trang bị:

- Bình chữa cháy
- Búa thoát hiểm
- Mặt nạ chống khói
- Đầu báo cháy
- Thang dây inox
- Chăn chống cháy (làm từ sợi thuỷ tinh có thể trùm lên ngọn lửa hoặc khoác lên người).



Tùy theo điều kiện thực tế, có thể thực hành (hoặc quan sát video) cách sử dụng bình chữa cháy, bình tạo bọt; sử dụng mặt nạ chống khói, đầu báo cháy, các loại thang và chăn chống cháy.



- Nguyên tắc chung để phòng cháy, nổ:** tách rời ba yếu tố là chất cháy nổ, chất oxi hoá và môi lửa.
- Nguyên tắc chung để chống và xử lí cháy, nổ:** hạ thấp tốc độ cháy của vật liệu đang cháy đến mức tối thiểu và phân tán nhanh nhiệt lượng của đám cháy.
- Các chất chữa cháy thông dụng là nước, cát, khí CO_2 , bột chữa cháy. Tuỳ vào tính chất đám cháy để sử dụng chất chữa cháy thích hợp.

THỰC HÀNH HOÁ HỌC VÀ CÔNG NGHỆ THÔNG TIN

Bài 8

VẼ CẤU TRÚC PHÂN TỬ

Học xong bài học này, em có thể:

- Sử dụng được phần mềm vẽ cấu trúc phân tử.
- Vẽ được công thức cấu tạo, công thức Lewis của các chất vô cơ và hữu cơ.
- Lưu được file hình ảnh từ phần mềm vẽ hình.
- Chèn được file hình ảnh vào file Microsoft Word, PowerPoint.

I GIỚI THIỆU VỀ PHẦN MỀM VẼ CẤU TRÚC HOÁ HỌC

Cấu trúc phân tử được thể hiện qua cách sắp xếp các nguyên tử trong một phân tử thông qua các liên kết hoá học (đơn, đôi, ba). Khi cần thiết, có thể thêm thông tin về độ dài liên kết, góc liên kết, vị trí các cặp electron riêng,...

Các phần mềm vẽ cấu trúc phân tử chia làm hai nhóm:

- Phần mềm thương mại: Người dùng phải mất phí để mua bản quyền sử dụng.
- Phần mềm miễn phí: Người dùng không phải trả phí, có thể tải tự do từ internet để dùng. Phần mềm miễn phí thông dụng là ChemSketch (thuộc bộ ACD/ChemSketch).

II PHẦN MỀM CHEMSKETCH

Trong nội dung này, ChemSketch (phiên bản 2020.2.0 cho hệ điều hành Windows) được sử dụng để minh họa tính năng cơ bản trong việc vẽ công thức hoá học. Đường dẫn tải phần mềm ChemSketch:

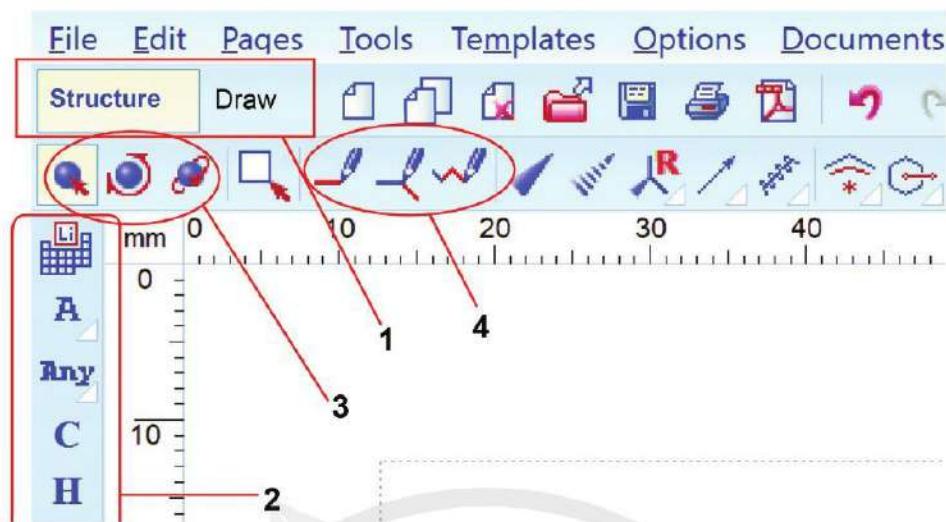
<https://www.acdlabs.com/resources/freeware/chemsketch/download.php>

Người dùng cần khai báo họ tên, địa chỉ email, tên trường, tên quốc gia để đăng ký tải phần mềm cũng như giấy phép sử dụng phần mềm.

Việc cài đặt phần mềm này rất đơn giản chỉ bằng cách nháy chuột trái vào file download và thực hiện theo các hướng dẫn hiện lên trong quá trình cài đặt.

1. Vẽ công thức cấu trúc 2D (cấu trúc 2 chiều)

Màn hình cửa sổ của ChemSketch được hiển thị như sau:



Hình 8.1. Cửa sổ ChemSketch

Giao diện chính này có các khu vực:

- Khu vực **1** gồm cửa sổ Structure (vẽ cấu trúc hoá học) và Draw (vẽ hình đồ họa), chúng ta sẽ chỉ nói về cửa sổ này trong các phần tiếp theo.
- Khu vực **2** gồm các nguyên tố trong bảng tuần hoàn, nơi lựa chọn các nguyên tố để vẽ.
- Khu vực **3** gồm các nút: lựa chọn kèm chuyển dịch (select/move, nút ngoài cùng bên trái); nút lựa chọn/quay cấu trúc/thay đổi kích thước cấu trúc (select/rotate/resize, nút ở giữa); nút lựa chọn/quay cấu trúc theo cả 3 chiều (3D rotation).
- Thanh công cụ phía trên có: khu vực **4** gồm 3 nút cho các chế độ vẽ; các khu vực công cụ để biểu diễn liên kết; khu vực công cụ để viết phương trình hoá học;...
- Thanh công cụ bên phải là thư viện mẫu các chất, có thể sử dụng luôn.

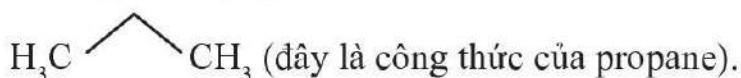
Ví dụ 1 Vẽ công thức cấu tạo của propyne ($\text{H}_3\text{C} — \text{C} \equiv \text{CH}$).

Bước 1: Chọn cửa sổ Structure (khu vực **1**) và chế độ vẽ thông thường (khu vực **4**, nút Draw normal).

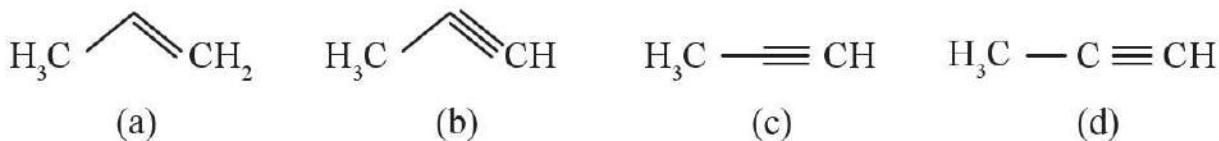
Bước 2: Thực hiện chuỗi động tác: Chọn C (carbon ở khu vực **2**); Nháy chuột vào màn hình sẽ hiện lên công thức: CH_4 ; Giữ chuột trái trên công thức CH_4 rồi di chuyển chuột một đoạn, thả tay sẽ xuất hiện công thức: $\text{H}_3\text{C} — \text{CH}_3$; Giữ chuột trái trên một nhóm CH_3 , di chuyển chuột một đoạn, thả tay sẽ xuất hiện công thức:



Bước 3: Vào menu Tools, nháy chuột vào Clean Structure (chuyển cấu trúc 2D về dạng phù hợp) sẽ xuất hiện công thức dạng chữ V:

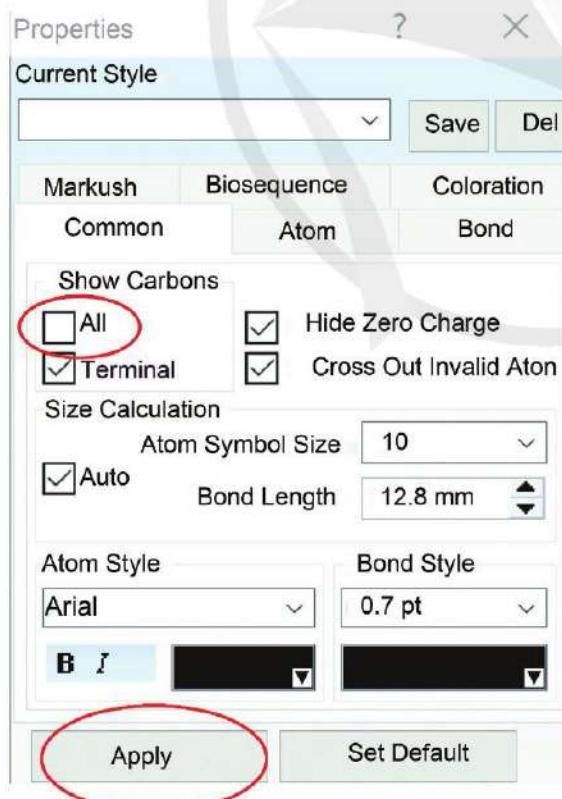


Bước 4: Tiếp tục chọn C (carbon ở khu vực 2), nháy chuột vào một liên kết C – C sẽ thu được công thức (a), là công thức của propene. Tiếp tục nháy chuột vào liên kết đôi sẽ thu được công thức (b):



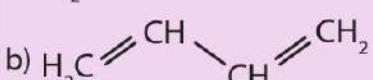
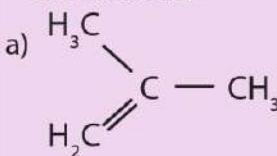
Bước 5: Vào menu Tools, nháy chuột vào Clean Structure sẽ thu được công thức (c) biểu diễn cấu trúc của propyne (phân tử có 3 nguyên tử C nằm trên một đường thẳng). Muốn hiện lên nhóm CH ở giữa thì thực hiện thêm bước 6.

Bước 6: Trong khu vực 3, chọn nút select/move; giữ chuột trái và di chuyển lên toàn bộ công thức, khi thả chuột trái, phân tử đã được chọn (xuất hiện các dấu chấm xung quanh công thức); nháy chuột phải lên công thức, chọn Object Properties bằng chuột trái, xuất hiện cửa sổ Properties (Hình 8.2). Chọn All (nếu muốn có thể thay đổi độ dài liên kết,...) rồi bấm vào Apply sẽ thu được công thức (d).



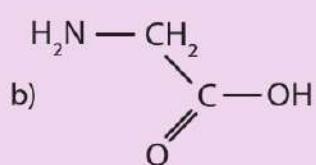
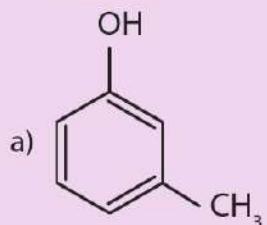
Hình 8.2. Cửa sổ Properties

1. Vẽ công thức cấu tạo của các chất sau:





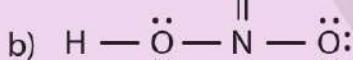
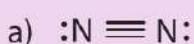
2. Vẽ công thức cấu tạo của các chất sau:



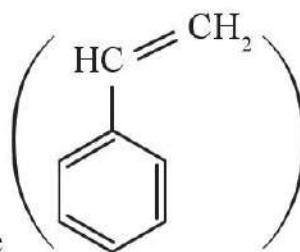
Gợi ý: Chọn O (oxygen, khu vực 2) rồi giữ chuột trái lèn một nguyên tử C, di chuyển một đoạn, thả chuột sẽ được nhóm -OH gắn vào.



3. Vẽ công thức Lewis của các chất sau:



Ví dụ 2



Vẽ công thức cấu tạo của styrene

Bước 1: Vào File chọn New để tạo trang vẽ mới.

Bước 2: Lấy vòng benzene (ở khu vực thư viện công cụ bên phải), sau đó vẽ tiếp tương tự các bước trong ví dụ 1.

Ví dụ 3

Vẽ công thức Lewis của carbon dioxide (CO_2).

Bước 1: Vẽ công thức: $\text{O} = \text{C} = \text{O}$

Bước 2: Trong menu Templates, chọn Template Windows, chọn Lewis Structure sẽ hiện lên một bảng có các mẫu công thức Lewis và mẫu các cặp electron (nếu không thấy cụm từ Lewis Structure trên thanh công cụ bên tay trái thì vào Organizer, chọn Lewis Structure). Chọn cặp electron nằm ngang (..), điều chỉnh kích thước cặp electron (nếu cần) rồi gắn vào công thức. Nhấn tổ hợp phím Ctrl + C lên cặp electron để sao chép, sau đó nhấn tổ hợp phím Ctrl + V để dán rồi kích chuột trái tại vị trí muốn thêm cặp electron. Lặp đi lặp lại đến khi thu được công thức $\ddot{\text{O}} = \text{C} = \ddot{\text{O}}$.

2. Lưu file và chuyển công thức sang Word, PowerPoint

Để lưu file, vào menu File, chọn Save As. ChemSketch cho phép lưu dưới nhiều dạng file khác nhau. Đáng chú ý là hai loại sau đây:

- Lưu file ChemSketch: Phần mở rộng (đuôi) là *.sk2*, dạng file này cho phép mở lại được bằng ChemSketch để dùng lại, sửa chữa,...
- Lưu dạng các file ảnh: Phần mở rộng là *.tif*, *.gif*, *.png*, *.jpg*,...

Để chuyển công thức sang Word, PowerPoint: Có thể dùng phương pháp trực tiếp là chọn công thức trong ChemSketch (bước 6 ở ví dụ 1) rồi nhấn tổ hợp phím Ctrl + C để sao chép. Trong môi trường Word, PowerPoint, nhấn tổ hợp phím Ctrl + V để dán hình ảnh.



4. Lưu các nội dung đã vẽ ở trên:

- Dưới định dạng file ChemSketch.
- Dưới định dạng file ảnh, chèn vào Word và PowerPoint.



File ảnh của công thức còn có thể được chèn vào Word bằng cách nháy chọn Insert (trong Word), chọn Picture rồi chọn file ảnh đã lưu. Với PowerPoint cũng làm tương tự như vậy.

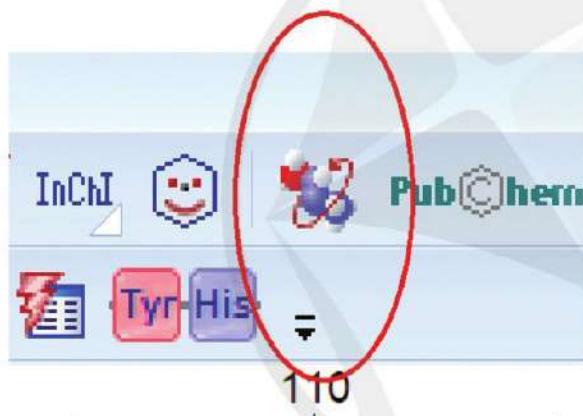
3. Chuyển sang hình ảnh 3D (cấu trúc 3 chiều)

Ví dụ 4 Vẽ cấu trúc 3D của propane ($\text{H}_3\text{C} - \text{CH}_2 - \text{CH}_3$).

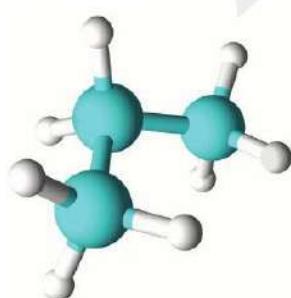
Bước 1: Vẽ cấu trúc 2D của propane (thực hiện các bước 1, 2 và 6 của ví dụ 1).

Bước 2: Vào Tools, chọn 3D Structure Optimization (chuyển cấu trúc 3D về dạng phù hợp) sẽ hiện lên cấu trúc 2D của propane với các liên kết C – H hiển thị rõ ràng.

Bước 3: Trên thanh trạng thái, chọn nút 3D Viewer (Hình 8.3) sẽ nhận được hình ảnh cấu trúc 3D của propane (Hình 8.4).



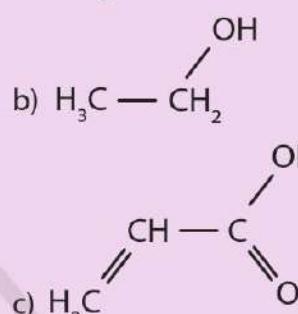
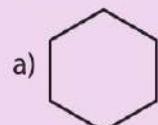
Hình 8.3. Vị trí nút 3D Viewer



Hình 8.4. Hình ảnh cấu trúc 3D của propane



5. Vẽ công thức 2D và 3D của các chất sau:



c) $\text{H}_2\text{C} = \text{CH} - \overset{\text{OH}}{\underset{\text{C=O}}{\text{C}}} - \text{O}$

6. Lưu các hình đã vẽ dưới dạng file ChemSketch và file ảnh, dán hình ảnh vào Word và PowerPoint.

Trong môi trường 3D Viewer, để chuyển sang màu nền là trắng thì vào menu Options, chọn Colors, phần Background chọn white. Áp dụng tương tự để thay đổi màu nguyên tố.

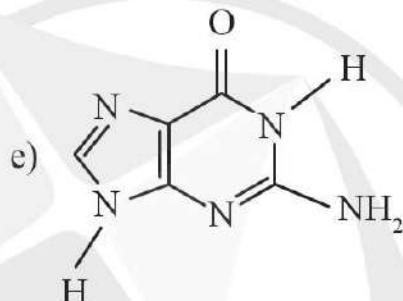
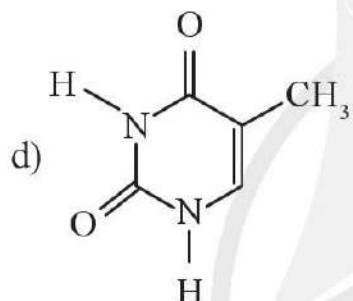
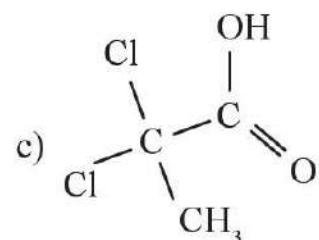
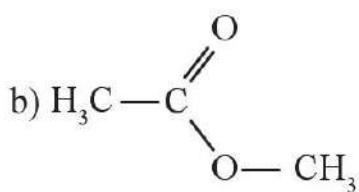
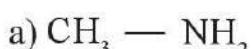
Có thể sử dụng tính năng khá hữu ích là chụp ảnh màn hình (phím PrtScr hoặc Print Screen), rồi dán vào ứng dụng Paint của Windows để cắt dán, chỉnh sửa hình ảnh.



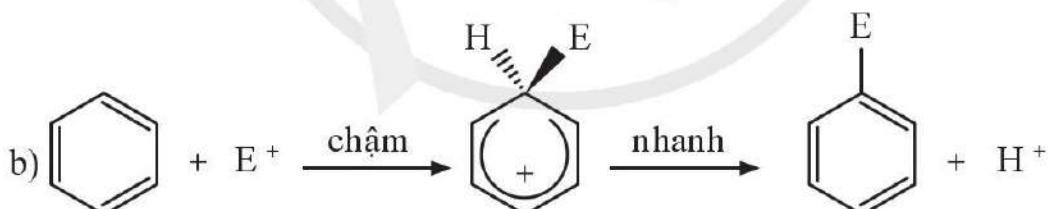
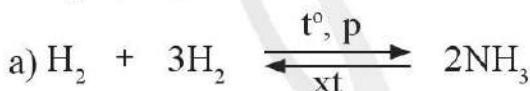
Đối với ChemSketch, để nhận được cấu trúc hợp lí cần phải thực hiện lệnh Clean Structure (cấu trúc 2D) và lệnh 3D Structure Optimization (cấu trúc 3D).

BÀI TẬP

Bài 1. Vẽ công thức 2D và 3D rồi lưu dưới dạng file ChemSketch và .tif, sau đó chèn vào Word và PowerPoint với từng chất sau:



Bài 2*. Tìm hiểu các tính năng của ChemSketch để trình bày các phản ứng sau trên trang Word:



Bài 9

THỰC HÀNH THÍ NGHIỆM HOÁ HỌC ẢO

Học xong bài học này, em có thể:

- Sử dụng được phần mềm thực hành thí nghiệm ảo.
- Thực hiện được thí nghiệm hoá học ảo.
- Phân tích và lí giải được kết quả thí nghiệm ảo.

I GIỚI THIỆU VỀ PHẦN MỀM THÍ NGHIỆM HOÁ HỌC ẢO

Hoá học là môn khoa học thực nghiệm. Do vậy, thực hành hoá học có ý nghĩa quan trọng trong việc học tập và nghiên cứu hoá học. Thực hành hoá học ảo được thực hiện khi không có điều kiện làm thí nghiệm thực tế (có thể vì lí do thí nghiệm nguy hiểm, thiếu dụng cụ và hoá chất,...).

Hiện nay, có nhiều phần mềm thí nghiệm hoá học ảo, đa số là miễn phí. Mỗi phần mềm có những ưu, nhược điểm khác nhau cả về nội dung và số lượng cũng như nội dung các bài thí nghiệm. Do vậy, có thể sử dụng nhiều phần mềm khác nhau trong thực hành hoá học ảo.

Một số phần mềm ứng dụng hoá học ảo miễn phí như:

- PhET: Cho phép thực hành trực tuyến (kết nối internet) và ngoại tuyến (không cần kết nối internet).
- Yenka (miễn phí có điều kiện): Cho phép thực hành trực tuyến.

II MỘT SỐ THÍ NGHIỆM HOÁ HỌC ẢO

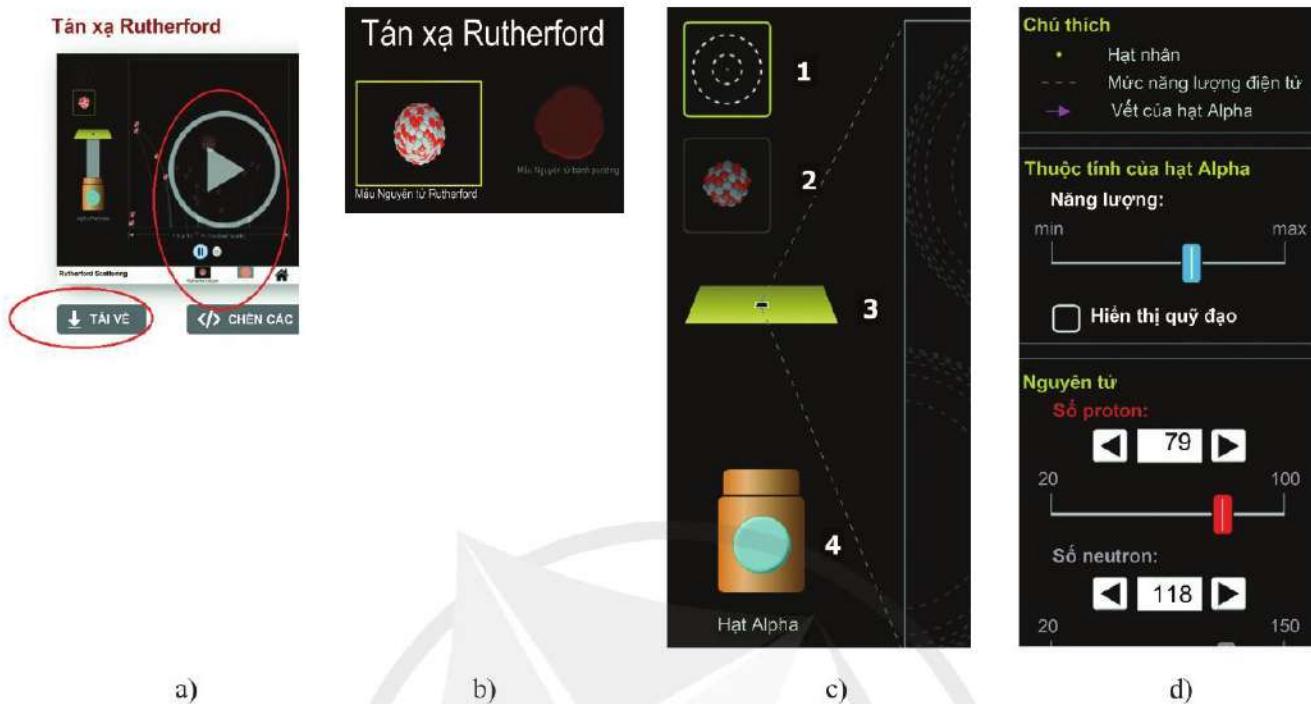
Phần sau đây trình bày một số thí nghiệm hoá học ảo, minh họa với phần mềm PhET và Yenka.

1. Thí nghiệm lá vàng của Rutherford (Tán xạ hạt α của Rutherford)

Trong nội dung bài này, chúng ta sẽ sử dụng nền tảng PhET để thực hiện thí nghiệm ảo. Trước khi bắt đầu tiến hành thí nghiệm, nên đọc trước các phần “THÔNG TIN”, “DÀNH CHO GIÁO VIÊN”,... hiện lên ở dưới mô hình thí nghiệm khi thực hành trực tuyến.

- Phiên bản tiếng Anh theo link: <https://phet.colorado.edu/>.
- Phiên bản tiếng Việt theo link: <https://phet.colorado.edu/vi/>. Lưu ý, phiên bản tiếng Việt dịch một số chỗ còn chưa hợp lí (chẳng hạn, dùng điện tử thay cho electron,...).

Để dễ hiểu, chúng ta sẽ sử dụng phiên bản tiếng Việt. Vào theo link trên, rồi chọn mục “Hoá học”, tiếp theo chọn “Tán xạ Rutherford” sẽ xuất hiện như Hình 9.1a:



Hình 9.1. Thí nghiệm lá vàng của Rutherford

- Nhấn chuột vào hình tam giác nếu muốn làm thí nghiệm trực tuyến.
- Bấm vào nút “TẢI VỀ” để lưu giữ file (rutherford-scattering_vi.html) nếu muốn làm thí nghiệm ngoại tuyến.

Thí nghiệm ảo này không những thực hiện với vàng mà còn có thể mở rộng với bất cứ nguyên tố nào có $20 \leq Z \leq 100$, với số khối khác nhau, cũng như ở các mức năng lượng của hạt alpha khác nhau.

Bước 1: Khi bấm vào hình tam giác, sẽ xuất hiện cửa sổ như Hình 9.1b. Cửa sổ này cho phép lựa chọn thí nghiệm ảo với mô hình nguyên tử của Rutherford hoặc mô hình bánh pudding (mô hình này có trước mô hình Rutherford). Nhấp chuột vào mô hình Rutherford sẽ hiện lên như Hình 9.1c.

- Chọn 1 nếu muốn quan sát ở cấp độ nguyên tử. Chọn 2 để quan sát ở cấp độ hạt nhân. Giả sử chọn 1 thì sẽ thấy thanh công cụ bên phải như Hình 9.1d.
- Tấm vàng 3 với hình ảnh phóng to bên phải.

• Nguồn phát hạt alpha 4 (hạt nhân helium ${}^4_2\text{He}$ mang 2 điện tích dương).

Bước 2: Bấm vào nút xanh của nguồn phát hạt alpha để bắt đầu thí nghiệm. Quan sát đường đi (vết) của các hạt alpha. Ghi lại các hiện tượng quan sát được.

Bước 3: Thay đổi năng lượng của hạt alpha (bằng cách kéo thanh trượt năng lượng sang trái để giảm năng lượng hoặc sang phải để tăng năng lượng). Ghi lại hiện tượng quan sát được.

Bước 4: Lặp lại thí nghiệm và các ghi chép nhưng với quan sát ở cấp độ hạt nhân.

Bước 5: Lặp lại thí nghiệm và các ghi chép nhưng với mô hình nguyên tử bánh pudding.



1. Thực nghiệm quan sát chùm hạt alpha sau khi đi qua lá vàng: Có những hạt không thay đổi quỹ đạo ban đầu (vẫn đi thẳng), có những hạt thay đổi quỹ đạo (bị lệch hướng hoặc quay ngược trở lại). Từ kết quả thí nghiệm ảo, hãy cho biết mô hình nguyên tử theo Rutherford hay mô hình bánh pudding có kết quả phù hợp với thực nghiệm. Lí giải vì sao mô hình đó lại phù hợp với thực nghiệm.
2. Khi tăng năng lượng hạt alpha, hiện tượng quan sát thấy là gì? Năng lượng tăng lên thêm đó gọi là động năng hay thế năng? Hạt alpha có năng lượng cao hơn có làm thay đổi bản chất thí nghiệm hay không?
3. Đối với vàng, nếu tăng số hạt neutron ở hạt nhân thì hiện tượng quan sát được thay đổi ra sao?
- 4*. Vì sao khi quan sát ở cấp độ hạt nhân, trong khung hình quan sát thấy hầu như tất cả các hạt alpha đều bị lệch quỹ đạo ban đầu. Trái lại ở cấp độ nguyên tử, trong khung hình chỉ thấy số ít hạt alpha thay đổi quỹ đạo ban đầu?
- 5*. Vì sao electron (hạt mang điện tích âm, -1) hầu như không làm thay đổi quỹ đạo chuyển động của hạt alpha (hạt mang điện tích dương, +2).

2. Thí nghiệm về năng lượng hóa học qua phản ứng của magnesium tác dụng với dung dịch hydrochloric acid

Trong nội dung bài này, chúng ta sẽ sử dụng Yenka để thực hiện thí nghiệm ảo.

Link tải phần mềm: <https://yenka.com/science/>

(Có thể sử dụng phiên bản cũ là Crocodile Chemistry 6.0.5 để thay thế)

Bước 1: Cài đặt phần mềm

- Trong mục “Nội dung Yenka” chọn chủ đề là “Khoa học”, tiếp tục chọn Hóa học (315).
- Trong mục “Sử dụng tại nhà miễn phí”, click chuột vào dòng chữ “nhận bản sao Yenka cá nhân miễn phí”, trong giao diện tiếp theo chọn “...dành cho sinh viên”.
- Làm theo các bước như hướng dẫn trên màn hình để tải phần mềm về máy tính.

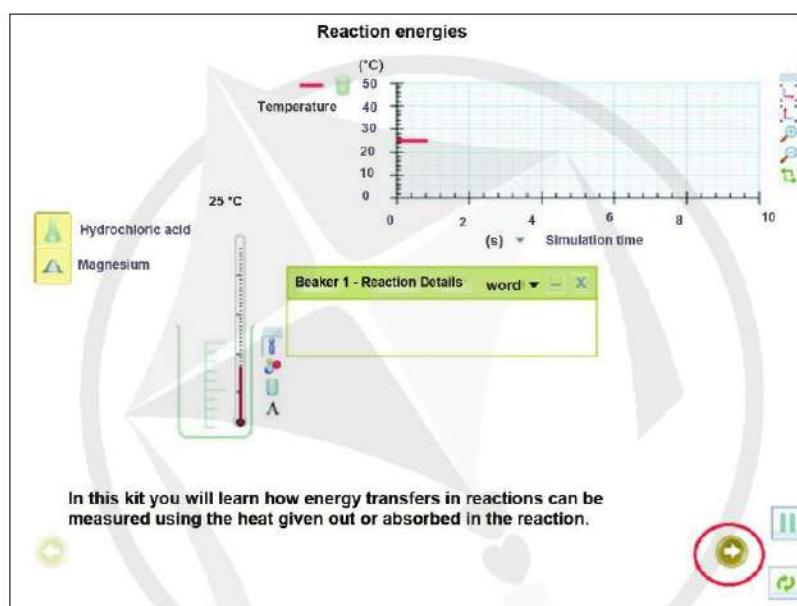
Bước 2: Chọn thí nghiệm

- Trong giao diện của Yenka chọn Chemistry rồi vào mục Reaction energies, chọn “open” (Hình 9.2), giao diện đầu của thí nghiệm sẽ hiện ra như Hình 9.3.

Results 41 - 50 of 137:

- Limestone** [\(open\)](#)
Learn about limestone reactions and their uses.
- Ionic, covalent and metallic (solubility)** [\(open\)](#)
Learn if ionic, covalent and metallic solids are soluble.
- Acid rain** [\(open\)](#)
Explore the formation of acid rain.
- Reaction energies** [\(open\)](#)
Learn how to measure energy transfers in reactions.

Hình 9.2. Lựa chọn thí nghiệm



Hình 9.3. Giao diện đầu của thí nghiệm

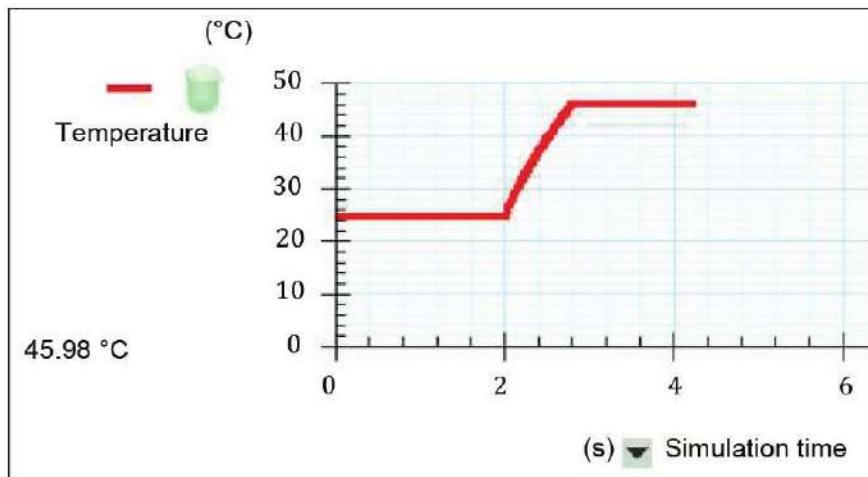
Quan sát:

- Hệ thống thiết bị thí nghiệm gồm một cốc chia độ, lọ đựng dung dịch hydrochloric acid và lọ đựng magnesium.
- Một nhiệt kế được cắm vào cốc, nhiệt kế chỉ nhiệt độ của môi trường (bao gồm cả Mg, dung dịch HCl) là 25 °C.

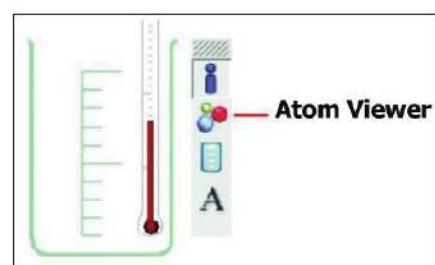
Bước 3: Bấm chọn nút mũi tên (Hình 9.3) sẽ hiện các hướng dẫn (bằng tiếng Anh) để làm thí nghiệm: Cho 0,24 gam Mg và 50 mL dung dịch HCl 2 M vào cốc chia độ (giữ chuột trái vào mỗi chất và di chuyển chuột tới vị trí mong muốn). Phản ứng bắt đầu xảy ra.

Tiếp tục quan sát:

- Trong cốc xuất hiện bọt khí.
- Nhiệt kế chỉ ra nhiệt độ tăng dần.



Hình 9.4. Sự thay đổi nhiệt độ theo thời gian



Hình 9.5. Nút quan sát Atom Viewer

Màn hình chỉ ra chi tiết sự thay đổi nhiệt độ theo thời gian: Nhiệt độ tăng lên đến 46 °C rồi dừng lại, tiếp theo nhiệt độ lại từ từ giảm dần (Hình 9.4).

- Trên màn hình xuất hiện thông tin cho biết biến thiên enthalpy của phản ứng là -466,0 kJ cho 1 mol Mg phản ứng.
- Có thể nhìn phản ứng ở cấp độ nguyên tử: Khi đưa chuột lên cốc, sẽ xuất hiện một thanh trạng thái, chọn Atom Viewer (Hình 9.5).

Bước 4: Có thể tiếp tục bấm mũi tên (Hình 9.3), sẽ hiện lên các hướng dẫn và câu hỏi (bằng tiếng Anh).



6. Vì sao lại phải sử dụng cốc chia độ?
7. Vì sao HCl được cho vào rất dư so với lượng cần phản ứng?
8. Vì sao nhiệt độ lại tăng lên khi phản ứng xảy ra?
9. Vì sao nhiệt độ hỗn hợp chỉ tăng lên tới 46 °C?
10. Vì sao sau đó nhiệt độ dung dịch lại giảm dần?
11. Một bạn học sinh tính nhiệt lượng toả ra trong thí nghiệm như sau. Biết rằng, nhiệt dung riêng của nước là $4,184 \text{ J g}^{-1}\text{K}^{-1}$ (nghĩa là để nâng nhiệt độ của 1,0 gam nước lên 1 °C thì cần cung cấp $4,184 \text{ J}$ nhiệt lượng); khối lượng riêng của nước, $D = 1 \text{ g mL}^{-1}$.
 - Khối lượng nước là: $m = V \times D = 50 \times 1,0 = 50 \text{ (g)}$.
 - Nhiệt lượng toả ra tính được theo công thức:

$$Q = C \times m \times (T_2 - T_1) = 4,184 \times 50 \times (46 - 25) = 4\,393,2 \text{ (J)}.$$

Nhiệt lượng toả ra thực tế trong thí nghiệm này là bao nhiêu kilôJun? Vì sao lại có sự sai khác giữa kết quả tính của bạn học sinh và kết quả thực tế?

12. Cho biết $\Delta_f H_{298}^0$ (kJ mol^{-1}) các chất ở trạng thái tương ứng như sau:

Chất	Mg(s)	$\text{H}_2(g)$	$\text{HCl}(g)$	$\text{HCl}(aq)$	$\text{MgCl}_2(s)$	$\text{MgCl}_2(aq)$
$\Delta_f H_{298}^0$	0	0	-92,3	-167,16	-641,1	-800

Hãy viết phương trình hóa học của phản ứng diễn ra trong thí nghiệm trên và tính $\Delta_r H_{298}^0$ của phản ứng.



- Phần mềm PhET cho phép thực hiện các thí nghiệm hóa học ảo trực tuyến cũng như ngoại tuyến. Các bài thí nghiệm ở đây được cập nhật liên tục. Ứng dụng này có chất lượng hình ảnh tốt và hoàn toàn miễn phí.
- Phần mềm Yenka cho phép thực hiện các thí nghiệm hóa học ảo trực tuyến với nhiều nội dung trong sách giáo khoa Hóa học 10 như bảng hệ thống tuần hoàn, năng lượng hóa học, tốc độ phản ứng,...



1. Thực hành về tính chất phân cực của phân tử qua bài thí nghiệm "Cực tính của phân tử", phần mềm PhET.

Cực tính của phân tử

- ▶ THÔNG TIN
- ▶ DÀNH CHO GIÁO VIÊN
- ▶ DỊCH THUẬT
- ▶ YÊU CẦU VỀ PHẦN MỀM
- ▶ CÔNG TRẠNG

Chú ý: Các mục "THÔNG TIN", "DÀNH CHO GIÁO VIÊN",... chỉ hiện ra với phiên bản online.

Thực hành để làm rõ được những vấn đề nêu ra trong mục "THÔNG TIN" như sau:

Mô tả

Khi nào thì phân tử phân cực? Thay đổi độ âm điện của nguyên tử trong một phân tử để thấy ảnh hưởng của nó lên sự phân cực. Quan sát phản ứng của một phân tử đặt trong điện trường. Thay đổi góc liên kết để thấy ảnh hưởng của hình dạng lên sự phân cực.

Mục tiêu học tập

- Quan sát được sự thay đổi cực tính của phân cực khi thay đổi độ âm điện các nguyên tử.
- Hiển thị cực tính bằng mũi tên hay điện tích riêng phần.
- Sắp xếp các liên kết theo thứ tự độ phân cực.
- Tiên đoán cực tính của phân tử bằng cách thay đổi độ phân cực của liên kết và hình dạng phân tử.

2. Thực hành về tính chất của các nguyên tố halogen qua mục "Halogens" của phần mềm Yenka. Thực hiện theo các chỉ dẫn của phần mềm và trả lời câu hỏi phần mềm đưa ra.

3. (*Làm việc nhóm*) Tìm hiểu các bài thí nghiệm hóa học ảo trong phần mềm Yenka và phần mềm PhET có liên quan đến các chủ đề và chuyên đề trong Chương trình môn Hóa học 10 (mỗi chủ đề, chuyên đề ít nhất một thí nghiệm). Tiến hành thí nghiệm, quan sát để liên hệ với các nội dung lí thuyết đã học.

Bài 10

TÍNH THAM SỐ CẤU TRÚC VÀ NĂNG LƯỢNG CỦA PHÂN TỬ

Học xong bài học này, em có thể:

- Nêu được các bước sử dụng phần mềm tính theo phương pháp bán kinh nghiệm.
- Sử dụng được kết quả tính để thấy được hình học phân tử, xu hướng thay đổi độ dài, góc liên kết và năng lượng phân tử trong dãy các chất (cùng nhóm, chu kì, dãy đồng đẳng,...).

1. Giới thiệu sơ lược về phần mềm tính toán (hoá học lượng tử) bán kinh nghiệm

Phương pháp tính bán kinh nghiệm sử dụng sẵn một số tham số từ thực nghiệm nên có ưu điểm là thời gian tính nhanh, mức độ chính xác phù hợp cho việc giảng dạy và học tập. Phương pháp bán kinh nghiệm mới nhất là phương pháp PM7 được tích hợp trong phần mềm miễn phí MOPAC (http://openmopac.net/Download_MOPAC_Executable_Step2.html). Do phương pháp tính, tham số thực nghiệm đã được tích hợp sẵn trong MOPAC nên người dùng đơn giản chỉ cần quan tâm đến các thao tác thực hiện chạy chương trình và phân tích kết quả. Các nội dung tính trong bài này sẽ sử dụng phần mềm MOPAC.

2. Cài đặt phần mềm MOPAC

Vào link ở trên, click vào “Download stand-alone 64-bit MOPAC 2016 for window” để tải phần mềm. Giải nén file này và tiến hành cài đặt theo hướng dẫn trong file “Installation instructions.txt”. Lưu ý phải **để chế độ hiện phân mở rộng của file** (Với Windows 10, vào Control Panel/File Explorer Options/View để **bỏ tick ô Hide extensions for known file types**) cho các thao tác sau này.



EM CÓ BIẾT

Hoá học lượng tử là một nhánh của Hoá học, nghiên cứu về cấu trúc và tính chất của nguyên tử, phân tử. Các tính toán hoá học lượng tử giúp chúng ta dự đoán được cấu trúc hình học (độ dài liên kết, góc liên kết) cũng như các tính chất của phân tử (năng lượng phân tử, nhiệt tạo thành, điện tích,...) mà trong nhiều trường hợp rất khó hoặc không tìm được từ thực nghiệm.

Việc cài đặt phần mềm MOPAC có thể nhờ những người thành thạo về công nghệ thông tin.

3. Thực hiện tính và hiển thị kết quả

Ví dụ Xác định cấu trúc của phenol và nhiệt tạo thành của chất này.

Bước 1: Sử dụng ChemSketch để vẽ cấu trúc 2D của phenol, vào Tools chọn 3D Structure Optimization. Chọn 3D viewer để hiện cấu trúc 3D của chất này.

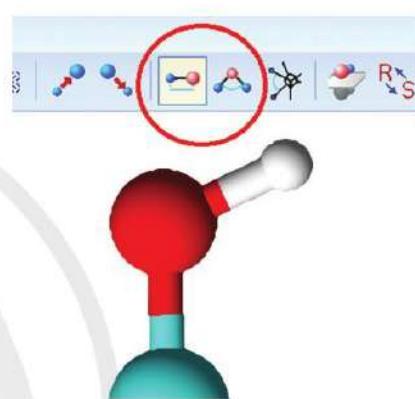
Bước 2: Trong 3D Viewer, vào menu File chọn Save As, đặt tên file là C6H5OH, lưu file dưới dạng .mop (phần Save as type chọn MOPAC Z-Matrix) vào một thư mục nào đó (chú ý, không để trong thư mục có đường dẫn bằng tiếng Việt).

Bước 3: Nhấn chuột phải lên file C6H5OH.mop, Open with NotePad, ở dòng trống trên cùng thêm lệnh OPT và ENPART (lệnh xác định cấu trúc và năng lượng) như Hình 10.1.

```
C:\Users\Pc\Desktop\TH\noname01.mop

C      0.0000      0      0.0000      0
C      1.4562      1      0.0000      0
C      1.4562      1     120.0187      1
C      1.4562      1     119.9898      1
```

Hình 10.1. Thêm lệnh OPT ENPART vào file .mop



Hình 10.2. Nút cho biết độ dài liên kết, góc liên kết

Bước 4: Nháy đúp chuột trái vào file C6H5OH.mop, chương trình sẽ chạy và kết thúc trong vài giây (nếu không thấy chạy thì nhấn chuột phải vào C6H5OH.mop, Open with để mở bằng MOPAC2016.exe nằm trong thư mục C:\Program Files\MOPAC). Thêm 2 file mới xuất hiện là file kết quả C6H5OH.out và C6H5OH.arc.

Bước 5: Hiển thị kết quả.

- Mở file C6H5OH.out bằng NotePad.
- Phân kết quả:

FINAL HEAT OF FORMATION =	-22.15797 KCAL/MOL =	-92.70893 KJ/MOL
ETOT (EONE + ETWO)	-1113.0198 EV	

(Các giá trị kết quả em nhận được có thể khác nhau đôi chút với kết quả này)

Như vậy, kết quả này cho biết nhiệt tạo thành (ở điều kiện chuẩn, theo tính toán PM7) là $-92,7 \text{ kJ mol}^{-1}$ phù hợp với kết quả thực nghiệm là $-90,4 \text{ kJ mol}^{-1}$. Tổng năng lượng của phân tử phenol là $-1113,0 \text{ eV}$ * (đơn vị eV trong file C6H5OH.out ghi là EV).

* $1 \text{ eV} = 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ J}$

Chú ý:

- Đối với đơn chất: Sử dụng enthalpy tạo thành của đơn chất (ở dạng bền vững nhất) bằng 0 ở điều kiện chuẩn thay cho giá trị tính từ MOPAC.
- Kết quả mặc định enthalpy tạo thành theo MOPAC là của chất ở thể khí.
- Để quan sát cấu trúc nhận được sau khi tính, nháy chuột phải lên file C6H5OH.arc, chọn rename để thêm .mop vào cuối; nhận được file C6H5OH.arc.mop. Trong menu File của 3D Viewer vào Open, phần Files of Type chọn MOPAC Z-Matrix rồi chọn file C6H5OH.arc.mop sẽ hiện hình ảnh 3D của phenol. Để biết độ dài liên kết, góc liên kết, chọn công cụ (Hình 10.2) rồi nháy chuột lên các nguyên tử tương ứng. Kết quả tính cho thấy độ dài của các liên kết $d(O - H)$ là 0,987 Å, $d(C - O)$ là 1,359 Å, góc liên kết \widehat{HOC} là $112,319^\circ$.

- FINAL HEAT OF FORMATION: nhiệt tạo thành
- ETOT (EONE + ETWO): năng lượng tổng

Giá trị đo từ thực nghiệm độ dài của các liên kết $d(O - H)$ là 0,956 Å, $d(C - O)$ là 1,364 Å, góc liên kết \widehat{HOC} là 109° .

Chú ý: Các kết quả trên là cho phenol ở pha khí. Để nhận được kết quả phenol trong dung dịch nước thì cần thêm lệnh $EPS = 78.4$ (chú ý dấu “.” chứ không phải là dấu “,”; giá trị này là hằng số điện môi của nước ở $25^\circ C$, có thể tính trong dung môi khác bằng cách thay đổi thích hợp giá trị này) sau OPT (phải viết cách OPT ít nhất một kí tự). Mục “NET ATOMIC CHARGES AND DIPOLE CONTRIBUTIONS” cho kết quả điện tích của từng nguyên tử với số thứ tự tương ứng (di chuyển chuột lên nguyên tử trong 3D Viewer để biết số thứ tự nguyên tử).



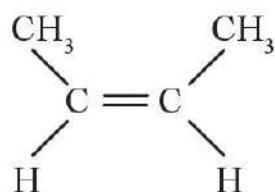
Tính lại cấu trúc của C_6H_5OH trong dung môi nước. Các giá trị nhiệt tạo thành, năng lượng tổng, độ dài liên kết $O - H$ và góc liên kết \widehat{HOC} là bao nhiêu?



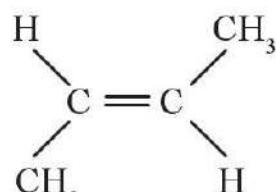
- Phương pháp bán kính nghiệm PM7 trong phần mềm MOPAC cho phép tính được cấu trúc hình học (độ dài liên kết, góc liên kết) và tính chất phân tử (năng lượng, nhiệt tạo thành, điện tích,...).
- Phần mềm ChemSketch (3D Viewer) dùng để xây dựng cấu trúc ban đầu và hiển thị cấu trúc kết quả tính toán PM7 của phân tử.

BÀI TẬP

Bài 1. Sử dụng phương pháp PM7 để xác định đồng phân *cis*-2-butene hay *trans*-2-butene bền hơn. Biết rằng, đồng phân có năng lượng tổng âm hơn sẽ bền hơn.

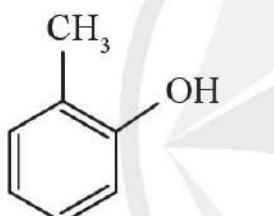


cis-2-butene

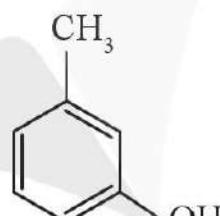


trans-2-butene

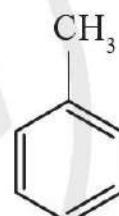
Bài 2. Sử dụng phương pháp PM7 tính cấu trúc (độ dài liên kết, góc liên kết), nhiệt tạo thành, năng lượng tổng của 3 đồng phân *o*, *m*, *p*-cresol. So sánh độ bền giữa các đồng phân.



o-cresol



m-cresol



p-cresol

Bài 3. Cho dãy hợp chất H_2X , với X là các nguyên tố nhóm VIA gồm O, S, Se. Sử dụng phương pháp tính PM7 để tối ưu hóa cấu trúc, từ đó tính độ dài liên kết X – H và góc HXH. Tìm quy luật biến đổi các giá trị này trong dãy nêu trên.

Bài 4. Sử dụng phương pháp PM7 để tối ưu hóa cấu trúc, từ đó tính cấu trúc (độ dài liên kết, góc liên kết) các chất có trong các phương trình phản ứng sau:



a) Tính biến thiên enthalpy của phản ứng (1) và (2) theo phương pháp PM7. So sánh kết quả nhận được với kết quả tính từ enthalpy tạo thành chuẩn của các chất trong Phụ lục 2.

b*) Tính biến thiên năng lượng của phản ứng (1) và (2). Từ đó, so sánh khả năng phản ứng của oxygen và fluorine với hydrogen.

Biết rằng, biến thiên năng lượng của phản ứng cũng được tính giống như biến thiên enthalpy của phản ứng, nhưng thay nhiệt tạo thành bởi năng lượng tổng của phân tử.

Chú ý: Enthalpy tạo thành chuẩn của các đơn chất ở trạng thái bền bằng 0.

- Bài 5.** Bằng cách tối ưu hoá cấu trúc, hãy xác định độ dài các liên kết H – X (với X là F, Cl, Br, I).



PHỤ LỤC 1
ENTROPY CỦA MỘT SỐ CHẤT Ở ĐIỀU KIỆN CHUẨN

Chất	S_{298}^0 (J mol ⁻¹ K ⁻¹)	Chất	S_{298}^0 (J mol ⁻¹ K ⁻¹)	Chất	S_{298}^0 (J mol ⁻¹ K ⁻¹)
Ag(s)	42,6	CaO(s)	38,1	N ₂ (g)	191,6
AgCl(s)	96,3	Ca(OH) ₂ (s)	83,4	NH ₃ (g)	192,8
Al(s)	28,3	CaSO ₄ (s)	106,5	NH ₄ Cl(s)	94,6
Al ₂ O ₃ (s)	50,9	CaSO ₄ · $\frac{1}{2}$ H ₂ O(s)	131,0	NO(g)	210,8
C(s) (graphite)	5,7	CaSO ₄ · 2H ₂ O(s)	194,0	NO ₂ (g)	240,1
CO(g)	197,7	Cl ₂ (g)	223,1	N ₂ O(g)	220,0
CO ₂ (g)	213,8	Fe(s)	27,3	N ₂ O ₄ (g)	304,4
CH ₄ (g)	186,3	Fe ₂ O ₃ (s)	87,4	Na(s)	51,3
CH ₃ Cl(g)	234,6	H ₂ (g)	130,7	Na ₂ CO ₃ (s)	135,0
CH ₃ OH(l)	126,8	H ₂ O(g)	188,7	NaHCO ₃ (s)	101,7
CO(NH ₂) ₂ (s)	104,6	H ₂ O(l)	70,0	NaCl(s)	72,1
CO(NH ₂) ₂ (aq)	173,8	HCl(g)	186,9	NaOH(s)	64,5
C ₂ H ₂ (g)	200,9	HNO ₃ (l)	155,6	Na ₂ SO ₄ (s)	149,6
C ₂ H ₄ (g)	219,3	H ₂ SO ₄ (l)	156,9	O ₂ (g)	205,2
C ₂ H ₆ (g)	229,2	HC ₂ H ₃ O ₂ (l)	159,8	PbO(s)	68,7
C ₅ H ₁₂ (l)	466,9	Hg(l)	75,9	S(s)	32,1
C ₂ H ₅ OH(l)	160,7	Hg(g)	175,0	SO ₂ (g)	248,2
Ca(s)	41,6	K(s)	64,7	SO ₃ (g)	256,8
CaCO ₃ (s)	92,9	KCl(s)	82,6	ZnO(s)	43,7
CaCl ₂ (s)	108,4	K ₂ SO ₄ (s)	175,6	Na ₂ O ₂ (s)	95,0
				ZnCO ₃ (s)	82,4

* Chú thích: (s): solid (thể rắn)

(l): liquid (thể lỏng)

(aq): aqueous (dạng dung dịch tan trong nước)

(g): gas (thể khí)

PHỤ LỤC 2
 ENTHALPY TẠO THÀNH CỦA MỘT SỐ CHẤT
 Ở ĐIỀU KIỆN CHUẨN (25 °C, 1 bar)

Chất	$\Delta_f H_{298}^0$ (kJ mol ⁻¹)	Chất	$\Delta_f H_{298}^0$ (kJ mol ⁻¹)	Chất	$\Delta_f H_{298}^0$ (kJ mol ⁻¹)
KNO ₃ (s)	-494,6	KClO ₃ (s)	-397,7	K ₂ MnO ₄ (s)	-1180
KNO ₂ (s)	-369,8	KCl(s)	-436,5	MnO ₂ (s)	-520,0
C ₃ H ₆ N ₆ (s)	-64,3	KMnO ₄ (s)	-837,2	Cl ₂ (g)	0
CO ₂ (g)	-393,5	H ₂ O(l)	-285,8	N ₂ (g)	0
Fe ₂ O ₃ (s)	-824,2	H ₂ O(g)	-241,8	C(s) (graphite)	0
Al ₂ O ₃ (s)	-1675,7	NH ₄ ClO ₄ (s)	-295,3	O ₂ (g)	0
AlCl ₃ (s)	-704,2	NO(g)	91,3	Al(s)	0
Fe(l)	13,1	C ₆ Cl ₆ (s)	-127,6	C _s Cl ₆ (s)	-11,7
HF(g)	-273,3	F ₂ (g)	0	H ₂ (g)	0
CH ₄ (g)	-74,6	C ₂ H ₂ (g)	227,4		

PHỤ LỤC 3
 NĂNG LƯỢNG CỦA MỘT SỐ LIÊN KẾT Ở ĐIỀU KIỆN CHUẨN (25 °C, 1 bar)

Liên kết	Năng lượng liên kết (kJ mol ⁻¹)	Liên kết	Năng lượng liên kết (kJ mol ⁻¹)
C – H	414	O – H	464
C – Cl	339	H – Cl	431
C = O	736	Cl – Cl	243
H – H	436	O ₂	498

BẢNG GIẢI THÍCH THUẬT NGỮ

	Giải thích thuật ngữ	Trang
bức xạ	sóng điện từ phát ra từ một vật	15
đồng phân	(hợp chất) có thành phần giống nhau, nhưng tính chất khác nhau	66
lò phản ứng hạt nhân	thiết bị để khởi động, thực hiện và kiểm soát phản ứng hạt nhân	20
máy gia tốc	máy dùng để làm tăng tốc độ các hạt mang điện	19
phân rã	(hiện tượng) biến đổi của một hạt nhân nguyên tử sang một trạng thái hoặc sang một hạt nhân nguyên tử khác bằng cách phát ra các loại phóng xạ khác nhau	19
phương pháp bán kinh nghiệm	phương pháp sử dụng một số phép gần đúng và các tham số từ thực nghiệm để đơn giản hóa trong hóa học tính toán	63
thí nghiệm ảo	tập hợp các tài nguyên số đa phương tiện dưới hình thức đối tượng học tập, nhằm mục đích mô phỏng các hiện tượng vật lí, hoá học, sinh học,... xảy ra trong tự nhiên hay trong phòng thí nghiệm	57
vật liệu chống cháy	vật liệu sử dụng trong sản xuất và đời sống, có tác dụng ngăn chặn hoặc làm chậm quá trình lây lan các đám cháy nhờ đặc tính chịu nhiệt độ cao	43

BẢNG TRẠC CỨU TÊN RIÊNG NƯỚC NGOÀI

Tên riêng gốc	Tên riêng (phiên âm)	Trang
Svante Arrhenius	S. A-rê-ni-út	24
Antoine Henri Becquerel	A. H. Béc-cô-ren	15
Giacomelli	Gia-cô-mê-li	38
Frederic Joliot-Curie	F. J. Quy-ri	17
Irene Joliot-Curie	I. J. Quy-ri	17
Marie Curie	Ma-ri Quy-ri	15

BẢNG TRÍCH NGUỒN TÀI LIỆU

Tên nội dung	Nguồn	Trang
Mở đầu	R. Sherr, K. T. Bainbridge and H. H. Anderson (1941). Transmutation of mercury by fast neutrons. Phys. Rev. 60, 473.	15
Hình 2.3	https://commons.wikimedia.org/wiki/File:_Genesis_1_Dead_Sea_Scroll.jpg . User:KetefHinnomFan	21
Mục I.3.a	E. Stauffer, J. A. Dolan and R. Newman (2008). Fire Debris Analysis. Academic Press.	36
Mục I.3.b	E. Stauffer, J. A. Dolan and R. Newman (2008). Fire Debris Analysis. Academic Press.	37
Mục I.3.c	F. A. Williams (2003). Encyclopedia of Physical Science and Technology 3rd edition, Academic Press Inc.	37
Phụ lục 1	D. R. Lide (2000). Standard thermodynamic properties of chemical substances; CRC Handbook of Chemistry and Physics. CRC Press LLC.	68
Phụ lục 2	D. R. Lide (2000). Standard thermodynamic properties of chemical substances; CRC Handbook of Chemistry and Physics. CRC Press LLC.	69
Phụ lục 3	Nivaldo J. Tro (2014). Chemistry: A Molecular Approach, 3rd Edition. Pearson Learning Solutions.	69

NHÀ XUẤT BẢN ĐẠI HỌC SƯ PHẠM

Địa chỉ: Tầng 6, Toà nhà số 128 đường Xuân Thuỷ, quận Cầu Giấy, TP. Hà Nội

Điện thoại: 024.37547735

Email: nxb@hnue.edu.vn | Website: www.nxbdhsp.edu.vn

Chịu trách nhiệm xuất bản:

Giám đốc – Tổng biên tập: NGUYỄN BÁ CƯỜNG

Chịu trách nhiệm tổ chức bản thảo và bản quyền nội dung:

CÔNG TY CỔ PHẦN ĐẦU TƯ XUẤT BẢN – THIẾT BỊ GIÁO DỤC VIỆT NAM

Chủ tịch Hội đồng Quản trị: NGÙT NGÔ TRẦN ÁI

Tổng Giám đốc: VŨ BÁ KHÁNH

Biên tập:

NGUYỄN THỊ HƯƠNG THẢO – BÙI ĐỨC TĨNH

Thiết kế sách:

VŨ THỊ OANH – NGUYỄN THỊ PHƯƠNG YÊN

Trình bày bìa:

NGUYỄN MẠNH HÙNG – NGUYỄN THỊ HƯƠNG

Sửa bản in:

VŨ THỊ HÀ

Trong sách có sử dụng tư liệu, hình ảnh của một số tác giả. Trân trọng cảm ơn.

CHUYÊN ĐỀ HỌC TẬP HÓA HỌC 10

Mã số:

ISBN: 978-604-54-9445-5

In cuốn, khổ 19 x 26,5 cm, tại.....

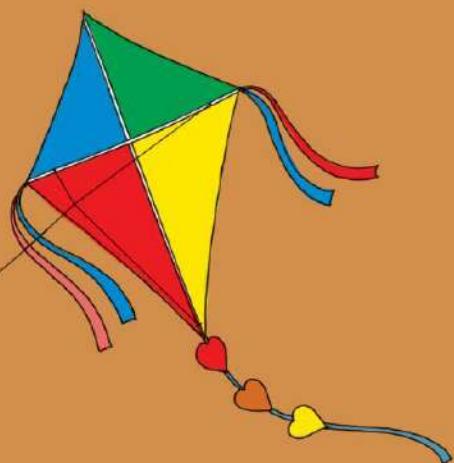
Địa chỉ:

Số xác nhận đăng ký xuất bản /CXBIPH/ /ĐHSP

Quyết định xuất bản số: /QĐ - NXBDHSP, ngày

In xong và nộp lưu chiểu

Mang cuộc sống vào bài học Đưa bài học vào cuộc sống



Sách Chuyên đề học tập Hóa học 10 được tập thê các nhà khoa học, nhà giáo giàu kinh nghiệm biên soạn theo Chương trình Giáo dục phổ thông 2018 nhằm đáp ứng yêu cầu đổi mới về nội dung và phương pháp dạy học; gồm những bài học được thiết kế công phu nhằm góp phần giúp học sinh phát triển được những phẩm chất và năng lực cần thiết cũng như hình thành định hướng nghề nghiệp cho tương lai.

Sách Chuyên đề học tập Hóa học 10 được biên soạn kèm theo sách điện tử có tương tác nhằm giúp các em củng cố và vận dụng được tốt nhất các kiến thức, kỹ năng trên lớp.



SỬ DỤNG
TEM CHỐNG GIẢ

- Quét mã QR hoặc dùng trình duyệt web để truy cập website bộ sách Cánh Diều: www.hoc10.com
- Vào mục Hướng dẫn (www.hoc10.com/huong-dan) để kiểm tra sách giả và xem hướng dẫn kích hoạt sử dụng học liệu điện tử.

ISBN: 978-604-54-9445-5

9 786045 494455