

CHƯƠNG TRÌNH THI TUYỂN VÀO CAO HỌC
NGÀNH: HÓA HỌC
Môn thi: Toán cho hóa

I. Toán cao cấp

1. Ma trận và định thức: định nghĩa, tính chất, hạng của ma trận, ma trận nghịch đảo
2. Hệ phương trình tuyến tính: định nghĩa, tính chất và các phương pháp giải
3. Giới hạn và tính liên tục của hàm số một biến số
4. Đạo hàm và vi phân của hàm một biến
5. Tích phân và tích phân suy rộng của hàm một biến
6. Chuỗi số: định nghĩa, các tiêu chuẩn hội tụ
7. Giải phương trình vi phân biến số phân ly

II. Xác suất và Thống kê

1. Xác suất và xác suất có điều kiện của các biến cố; dãy phép thử Bernoulli
2. Đại lượng ngẫu nhiên: Các loại đại lượng ngẫu nhiên, bảng phân phối, hàm phân phối, hàm mật độ, các số đặc trưng
3. Khái niệm về mẫu và các đặc trưng mẫu
4. Ước lượng điểm và ước lượng khoảng cho giá trị trung bình và tỉ lệ

Tài liệu tham khảo

5. Nguyễn Văn Giám, Mai Quý Năm, Nguyễn Hữu Quang, Nguyễn Sum, Ngô Sỹ Tùng, Toán cao cấp, Tập 1, NXB Giáo dục, 1998
6. Phan Văn Danh, Lê Viết Ngự, Trần Văn Ân, Đinh Huy Hoàng, Tạ Quang Hải, Toán cao cấp, Tập 2, NXB Giáo dục, 1999
7. Đào Hữu Hồ, *Xác suất thống kê*, NXB ĐHQG Hà Nội, 1996
4. Nguyễn Văn Quảng, *Giáo trình xác suất*, NXB ĐHQG Hà Nội, 2007

CHƯƠNG TRÌNH THI TUYỂN SAU ĐẠI HỌC

NGÀNH: HÓA

Môn thi: Cơ sở lý thuyết hoá học và cấu tạo chất

PHẦN I : CẤU TẠO CHẤT

1.1. Một số vấn đề tiền cơ học lượng tử

1. Hệ thức tương đối Einstein: hệ thức liên hệ giữa khối lượng và năng lượng, giữa khối lượng và vận tốc của hạt chuyển động.
2. Thuyết lượng tử Planck; thuyết lượng tử ánh sáng của Einstein và sự giải thích hiệu ứng quang điện, hiệu ứng Compton.

1.2. Một số cơ sở Cơ học lượng tử

1. Sóng vật chất de Broglie; hệ thức bất định Heisenberg (Heisenberg)
2. Toán tử và hàm sóng
 - Toán tử, toán tử tuyến tính
 - Tích vô hướng hai véc tơ, hệ hàm trực giao, chuẩn hoá, đầy đủ.
 - Hàm riêng, trị riêng; toán tử tuyến tính Hermit; giao hoán tử của hai toán tử.
 - Hàm sóng và phương trình Schrödinger
3. Các tiên đề và nguyên lý của cơ học lượng tử
 - Tiên đề về hàm sóng và nguyên lý chồng chất trạng thái
 - Tiên đề về toán tử tuyến tính Hermit, trị riêng, trị trung bình
 - Tiên đề về phương trình Schrödinger, trạng thái dừng.
4. Bài toán hạt chuyển động tự do trong hộp thế hình chữ nhật một chiều (hai chiều, ba chiều); dao động tử điều hoà, quay tử cứng.

1.3. Nguyên tử

1. Nguyên tử hiđro và ion dạng hiđro (He^+ , Li^{2+} , ...)
 - Trường xuyên tâm
 - Phương trình Schrödinger cho hệ nguyên tử H và ion dạng H.
 - Orbital nguyên tử; năng lượng và quang phổ hiđro; Spin electron; Ý nghĩa của các số lượng tử; hàm sóng toàn phần.
2. Nguyên tử nhiều electron

Mô hình các hạt độc lập; nguyên lý phản đối xứng (nguyên lý Pauli); những phương pháp xác định các orbital nguyên tử (phương pháp Slater, phương pháp trường tự hợp); cấu hình electron; trạng thái nguyên tử; số hạng nguyên tử và quang phổ nguyên tử.
3. Cấu tạo nguyên tử của các nguyên tố trong hệ thống tuần hoàn Mendeleev
 - Cấu trúc của hệ thống tuần hoàn các nguyên tố; quan hệ giữa cấu tạo nguyên tử và vị trí nguyên tố trong bảng tuần hoàn.
 - Sự biến đổi tính chất của các nguyên tố: Bán kính nguyên tử, bán kính ion, năng lượng ion hóa, ái lực electron, độ âm điện.
 - Định luật tuần hoàn.

1.4. Phân tử

1. Khái quát về phân tử. Liên kết hóa học và cấu tạo phân tử.

Tính chất của phân tử.
2. Khảo sát phân tử bằng cơ học lượng tử.

Hàm sóng và năng lượng điện tử của phân tử.
Phương pháp biến thiên và việc xác định các hàm gần đúng.

3. Lý thuyết nhóm và các phép đối xứng của phân tử .
Nhóm đối xứng. Ma trận và biểu diễn nhóm
4. Thuyết liên kết hóa trị (VB) :
Luận điểm cơ bản của thuyết liên kết hoá trị.
Phương pháp VB và phân tử hai nguyên tử.
Phương pháp VB và phân tử nhiều nguyên tử.
Thuyết liên kết hóa trị và sự giải thích định tính các vấn đề về liên kết.
5. Thuyết orbital phân tử (MO):
Luận điểm cơ bản của thuyết MO.
Thuyết MO và phân tử hai nguyên tử.
Thuyết MO và phân tử nhiều nguyên tử.
Phương pháp MO - Huckel và hệ điện tử π không định cư; Quy tắc Huckel về tính thơm.
6. Liên kết trong phân tử lớn
Phân tử lớn.
Năng lượng liên kết trong phân tử lớn.
7. Tương tác giữa các phân tử :
Tương tác Van der waals. Liên kết Hydro.
8. Liên kết trong phức chất
Đại cương về phức chất
Các thuyết về liên kết trong phân tử phức chất
 - Thuyết liên kết hóa trị về phức.
 - Thuyết trường phối tử.
 - Thuyết MO.
 Phức Cacbonyl, phức olefin và các hợp chất "Sandwich".
9. Đại cương về tinh thể
Các mạng lưới tinh thể.
Các dạng cấu trúc tinh thể điển hình.
Hiện tượng khiếm khuyết trật tự trong tinh thể.
Liên kết trong tinh thể.
Năng lượng mạng lưới tinh thể (chu trình Born - Haber).
Chất rắn vô định hình. Tinh thể lỏng và trạng thái tập hợp lỏng.

PHẦN 2: CƠ SỞ LÝ THUYẾT CÁC QUÁ TRÌNH HÓA HỌC

2.1 Nhiệt động lực học của các quá trình hoá học

1 Đối tượng và phương pháp của nhiệt động lực học hoá học; các khái niệm và định luật cơ bản.

2. Nguyên lý 1 của nhiệt động lực học

- Nội dung của nguyên lý 1. Nội năng. Entanpi. Nhiệt dung, Công
- Hiệu ứng nhiệt của các quá trình hoá học. Định luật Hess. Hiệu ứng nhiệt của các quá trình chuyển pha, hoà tan, hydrat hoá, phản ứng hoá học, năng lượng liên kết hoá học, năng lượng mạng lưới tinh thể, ảnh hưởng của nhiệt độ đến hiệu ứng nhiệt. Định luật Kirchoff.

3. Chiều hướng và giới hạn của các quá trình hoá học

- Nguyên lý II của nhiệt động lực học: Các cách phát biểu và các biểu thức định lượng của nguyên lý II, entropi, ý nghĩa vật lý của entropi, cách tính entropi.
- Các thể nhiệt động, các hàm đặc trưng. Thế hoá học.
- Điều kiện tự diễn biến và điều kiện cân bằng của các quá trình hoá học

4. Cân bằng hoá học và cân bằng pha

- Phản ứng thuận nghịch. Điều kiện cân bằng hoá học
- Định luật tác dụng khối lượng. Hằng số cân bằng. Mối quan hệ giữa hằng số cân bằng với biến thiên thế đẳng áp- đẳng nhiệt.

- Các yếu tố ảnh hưởng đến cân bằng. Sự chuyển dịch cân bằng pha, quy tắc pha. Giảm độ pha của hệ một cấu tử, hai cấu tử.

2.2. Dung dịch

1. Nhiệt động lực học của sự hình thành dung dịch

2. Tính chất của dung dịch loãng chứa chất tan không điện li không bay hơi

3. Dung dịch chất điện ly

- Cơ chế phân ly của chất điện li trong dung dịch
- Hằng số điện ly và độ điện li. Các phương pháp xác định độ điện li.
- Tích số ion của nước. Khái niệm pH. Tính pH của các dung dịch axit, bazơ và muối. Dung dịch đệm.
- Các thuyết axit - bazơ.
- Cân bằng trong dung dịch chất điện li khó tan. Sự thủy phân.
- Cân bằng tạo phức trong dung dịch. Hằng số bền của phức chất. Các yếu tố quyết định độ bền của phức chất.

2.3. Động hóa học

1. Khái niệm chung

Tốc độ của phản ứng hóa học. Bậc phản ứng và phân tử số
Định luật tác dụng khối lượng.

2. Các quy luật động học đơn giản

Phản ứng bậc 1, bậc 2, bậc n và bậc không

3. Các yếu tố ảnh hưởng đến tốc độ phản ứng

- Ảnh hưởng của nồng độ
 - Ảnh hưởng của nhiệt độ: Phương trình Arrhenius.
- Năng lượng hoạt động hóa. Hệ số nhiệt độ của tốc độ phản ứng.
- Thuyết Va chạm hoạt động và thuyết phức chất hoạt động.

4. Xúc tác

- Khái niệm, chức năng, phân loại chất xúc tác
- Xúc tác đồng thể. Xúc tác dị thể. Xúc tác men

5. Phản ứng dây chuyền và phản ứng quang hóa

2.4. Điện hóa học

1. Pin ganvani: Cơ chế phát sinh dòng điện trong pin ganvani. Thế điện cực. Sức điện động của pin.
2. Phương trình Nernst. Quan hệ giữa sức điện động và biến thiên thế đẳng áp - đẳng nhiệt của phản ứng xảy ra trong pin Chiều của phản ứng oxy hóa - khử.
3. Sự điện phân (Điện phân muối nóng chảy. Điện phân dung dịch muối của các chất điện ly. Sự phân cực. Quá thế. Thế phân hủy. Các định luật điện phân.
4. Sự ăn mòn điện hóa học. Các phương pháp chống ăn mòn.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Nguyễn Đình Huệ, Nguyễn Đức Chuy, *Thuyết lượng tử về nguyên tử*, Nxb Giáo dục- 1986(tái bản 2002)
2. Lâm Ngọc Thiềm, Trần Hiệp Hải: Những nguyên lý cơ bản của Hoá học. Phần bài tập. NXB Khoa học kỹ thuật-2002
3. Đào Đình Thúc, *Cấu tạo nguyên tử* (tập I, 1975); *Cấu tạo phân tử và liên kết Hoá học* (tập II, 1980); NXB Đại học và Trung học chuyên nghiệp.
4. Lâm Ngọc Thiềm (Chủ biên), Trần Hiệp Hải, *Bài tập Hoá học đại cương*, Nxb Giáo dục -1998.
5. Đặng Trần Phách, *Hoá cơ sở*, Nxb Giáo dục - 1990
6. Vũ Đăng Độ, *Cơ sở lý thuyết các quá trình hoá học*, Nxb Giáo dục-1991
7. Nguyễn Đức Chuy, *Hoá học đại cương*, Nxb Đại học Quốc gia; Nxb Giáo dục -1998
8. Lê Mậu Quyền, *Cơ sở lý thuyết Hoá học*, NXB Khoa học Kỹ thuật-1999.