

# CHƯƠNG I

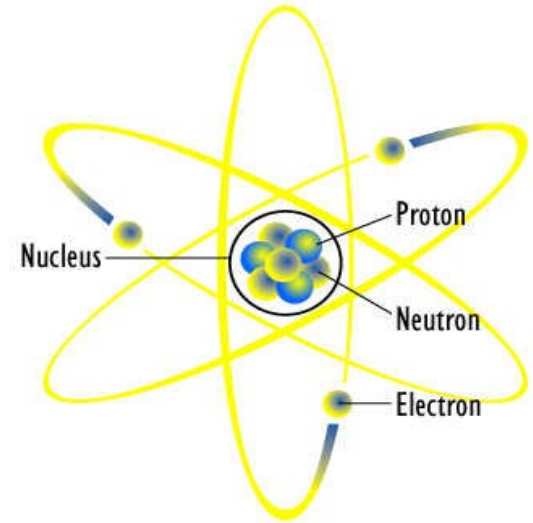
## CẤU TẠO NGUYÊN TỬ

### I. Các cấu tử chính:

#### 1. Các hạt cơ bản:

Nguyên tử	{	Electron(e)	-1	
		Nhân {	Proton(p)	+1    1dvc
			Neutron(n)	0    1dvc

$$m_e/m_p = 1/1840 \rightarrow Kl(ng.t) = Kl(nhân)$$



## 2. Ký hiệu nguyên tử:

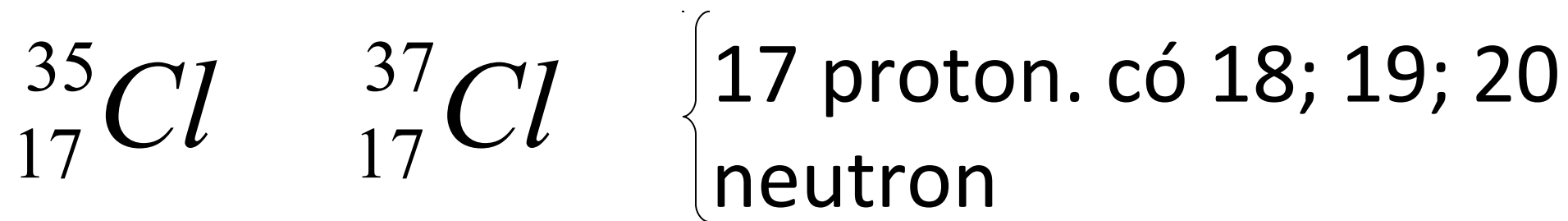
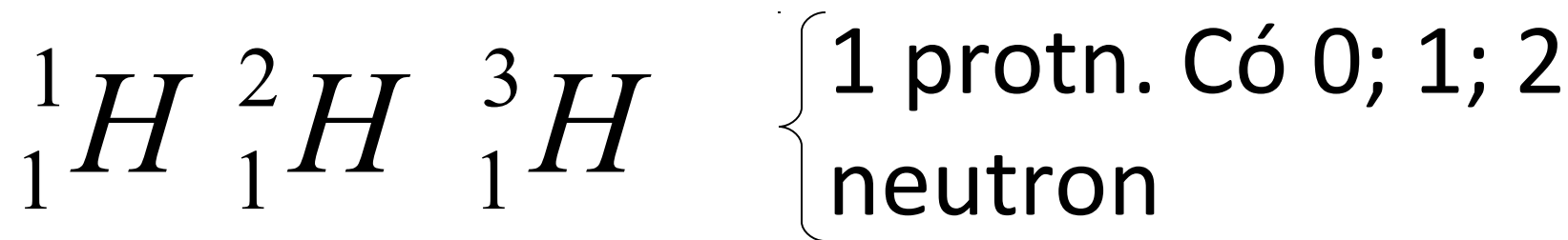
$${}_Z^AX \left\{ \begin{array}{l} Z: \text{Bậc số ng.tử} = \sum p \text{ trong nhân} \\ A = \text{Số khối} = \sum p + \sum n \end{array} \right.$$

$${}_{6}^{12}\text{C} \left\{ \begin{array}{l} \sum p = 6 \\ \sum n = 12 - 6 = 6 \end{array} \right.$$

Nguyên tử ở trạng thái cơ bản trung hòa điện

$$\rightarrow \sum e = \sum p = 6$$

### 3. Ng.tử đồng vị: Cùng Z, khác A



Các ng.t đồng vị có cùng Z  $\rightarrow$   $\Sigma e$  bằng nhau  $\rightarrow$  hóa tính giống nhau.

## 4. Nguyên tố – nguyên tử:

\* 1 ng.tố x.định khi có 1 giá trị **Z** x.định.

\* Trong 1 ng.tố có thể gồm nhiều ng. tử đồng vị với thành phần xác định

\*  $_1\text{H}$  gồm:  $^1\text{H}(99,985\%)$  và  $^2\text{H}(0,015\%)$

\*  $_{17}\text{Cl}$  gồm:  $^{35}\text{Cl}(75,4\%)$  và  $^{37}\text{Cl}(24,6\%)$

\*  $_6\text{C}$  gồm:  $^{12}\text{C}(98,982\%)$  và  $^{13}\text{C}(1,108\%)$

\*  $\text{Klnt (ng.tố)} = \frac{\sum A_i \cdot \% (i)}{100}$

Td:  $\text{klnt}(\text{Cl}) = \frac{35 \cdot 75,4 + 37 \cdot 24,6}{100} = 35,453$

## II. Cấu tạo ng.tử theo thuyết cơ lượng tử.

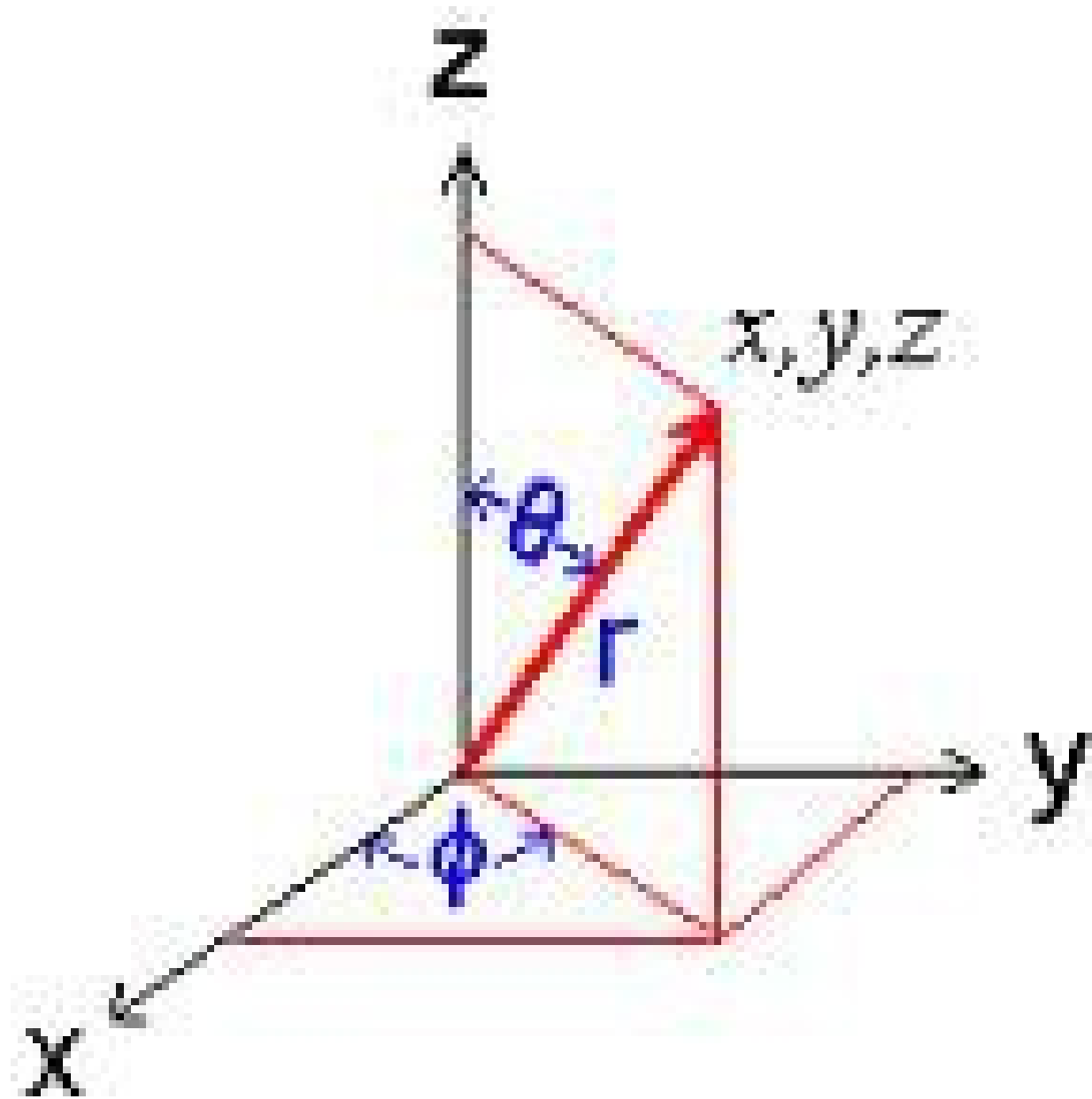
e di chuyển trên các **orbital** ng.tử (**AO**)

\* **Về ph.d vật lý:** **AO**: vùng k.g quanh nhân trên đó x.s tìm thấy e cực đại từ 90→99%

\* **Về ph.d toán học:** **AO** được biểu diễn bởi hàm số  **$\Psi_{n,l,m}$** : nghiệm của p.t Schrodinger

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - V) \Psi = 0$$

Giải p.t này → các cặp nghiệm E;  $\Psi$



# 1. Hệ 1 electron:

${}_1\text{H}$  : nhân  $1+$  và  $1e$  di chuyển quanh nhân

${}_2\text{He} \rightarrow {}_2\text{He}^+ + e$  : nhân  $2+$  và  $1e$  quanh nhân

${}_3\text{Li} \rightarrow {}_3\text{Li}^{2+} + 2e$  : nhân  $3+$  và  $1e$  quanh nhân

→ Hệ  $1e$  Nhân có  $Z+$  và  $1(e)$  quanh nhân

Giải p.t Schrodinger áp dụng cho hệ  $1(e)$

→ Các hàm  $\Psi_{n,l,m}$  biểu diễn các AO, và  $E_n$

AO có dạng x.định khi hàm  $\Psi_{n,l,m}$  x.định.

$\Psi_{n,l,m}$  xác định khi các số lượng tử  $n, l, m$  có giá trị xác định

## a. Các số lượng tử:

$\alpha$ . Số l.tử chính  $n$ : lớp mà e di chuyển trên đó, và kích thước của AO..

$n$	=	1	2	3	4	5	6	7..... $\infty$
Lớp		K	L	M	N	O	P	Q.....

$$E_n = -13,6 \cdot \left( \frac{Z}{n} \right)^2 eV \quad \left\{ \begin{array}{l} E_n < 0 \text{ và } E_n \uparrow \text{ khi } n \uparrow \\ n \uparrow \Rightarrow \text{kích thước AO} \uparrow \end{array} \right.$$

**Td:  ${}_1\text{H}$ :**

$$\left\{ \begin{array}{l} E_1 = -13,6 \cdot \left( \frac{1}{1} \right)^2 = -13,6 eV \\ n=1 \Rightarrow E_2 = -13,6 \cdot \left( \frac{1}{2} \right)^2 = -3,4 eV \end{array} \right.$$



$${}_2\text{He}^+(Z=2): \left[ \begin{array}{l} n=1 \Rightarrow E_1 = -13,6 \left( \frac{2}{1} \right)^2 = -54,4 eV \\ n=2 \Rightarrow E_2 = -13,6 \left( \frac{2}{2} \right)^2 = -13,6 eV \\ n=3 \Rightarrow E_3 = -13,6 \left( \frac{2}{3} \right)^2 = -6,05 eV \end{array} \right.$$

$${}_Z\text{X}^{n+}: \quad \Rightarrow E_\infty = -13,6 \left( \frac{Z}{\infty} \right)^2 = 0 eV$$

$$n = \infty$$

$\beta$ . Số lượng tử phụ  $l$ : Với 1 giá trị  $n$

$\rightarrow l$  có  $n$  trị số:  $0; 1; 2; 3; 4; 5; \dots; n-1$ .

Slt phụ  $l$ : hình dạng của AO và phân lớp có trong 1 lớp thứ  $n$  của nguyên tử.

$l$	0	1	2	3	4	5	6	7.....
-----	---	---	---	---	---	---	---	--------

Ph. $l$	s	p	d	f	g	h	i	j.....
---------	---	---	---	---	---	---	---	--------

$\gamma$ . Số lượng tử từ  $m$  ( $m_l$ ):

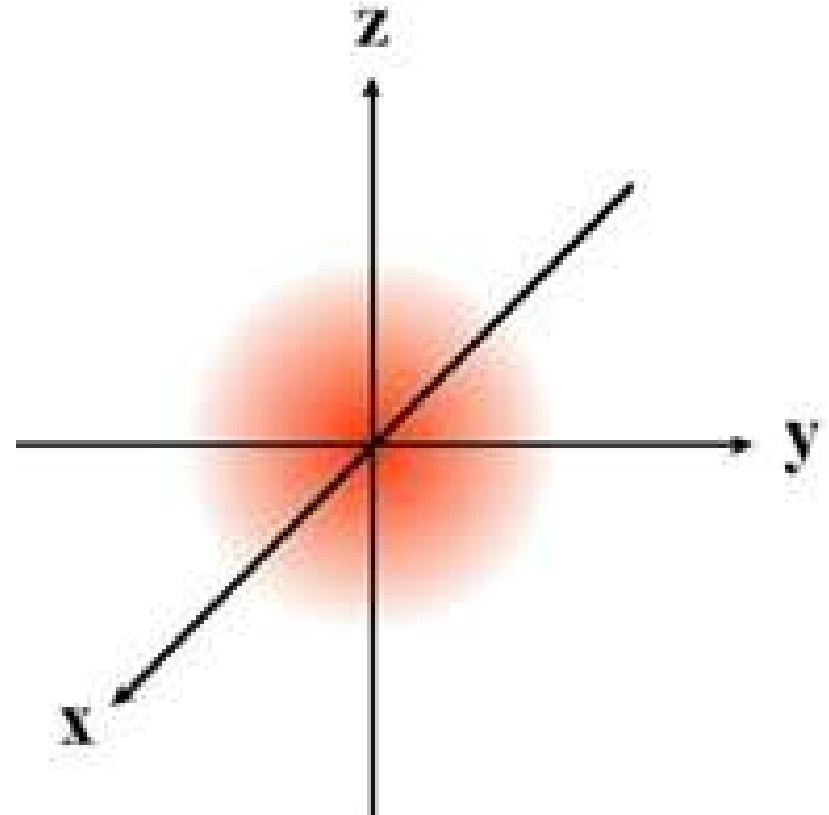
Với 1 giá trị của  $l \rightarrow m$  có  $(2l+1)$  trị số:

$m = -l; -(l-1); -(l-2); \dots; 0; 1; 2; \dots; +l$

Số lượng tử từ  $m$  cho biết sự định hướng của AO trong không gian

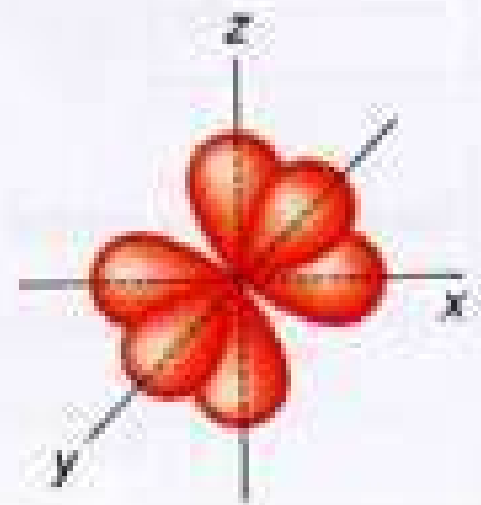
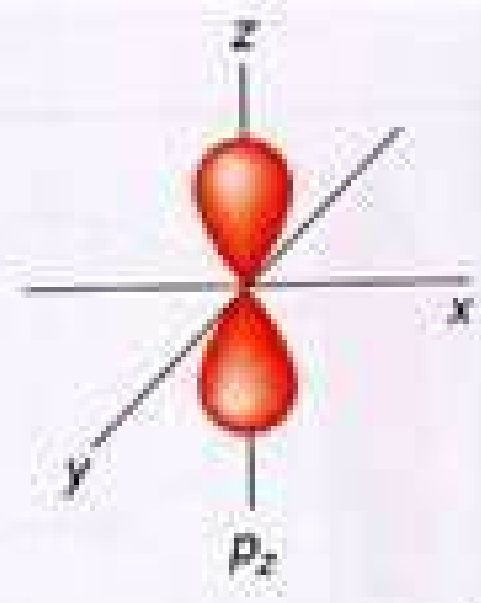
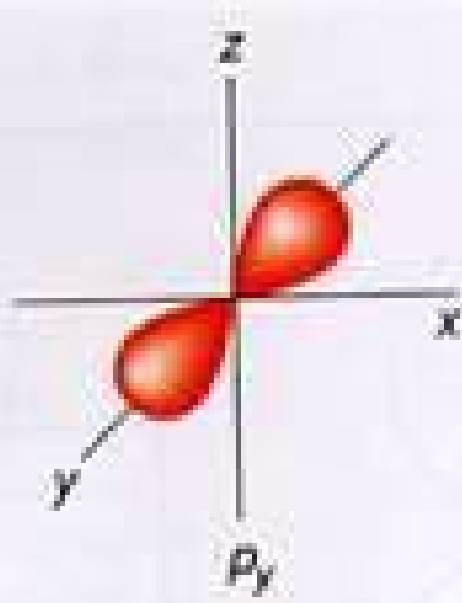
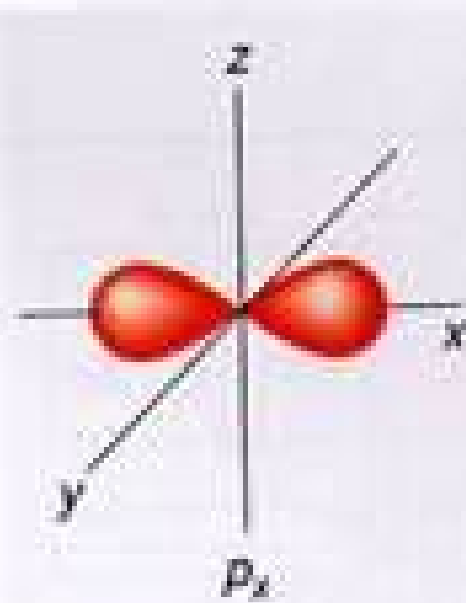
n	l	m	$\Psi_{n,l,m}$	(nl)	AO
1	0	0	$\Psi_{1,0,0}$	1s	1s

→ lớp K(n=1) có 1 phân lớp(1s) và chỉ có 1AO(1s)



n	l	m	$\Psi_{n,l,m}$	(nl)	AO
2	0	0	$\Psi_{2,0,0}$	2s	2s
	1	-1	$\Psi_{2,1,-1}$	2p	$2p_x$
		0	$\Psi_{2,1,0}$		$2p_y$
		+1	$\Psi_{2,1,+1}$		$2p_z$

➔ lớp L(n=2) có 2 phân lớp: 2s có 1 AO (2s)  
và 2p có 3 AO (  $2p_x$ ;  $2p_y$ ;  $2p_z$  )



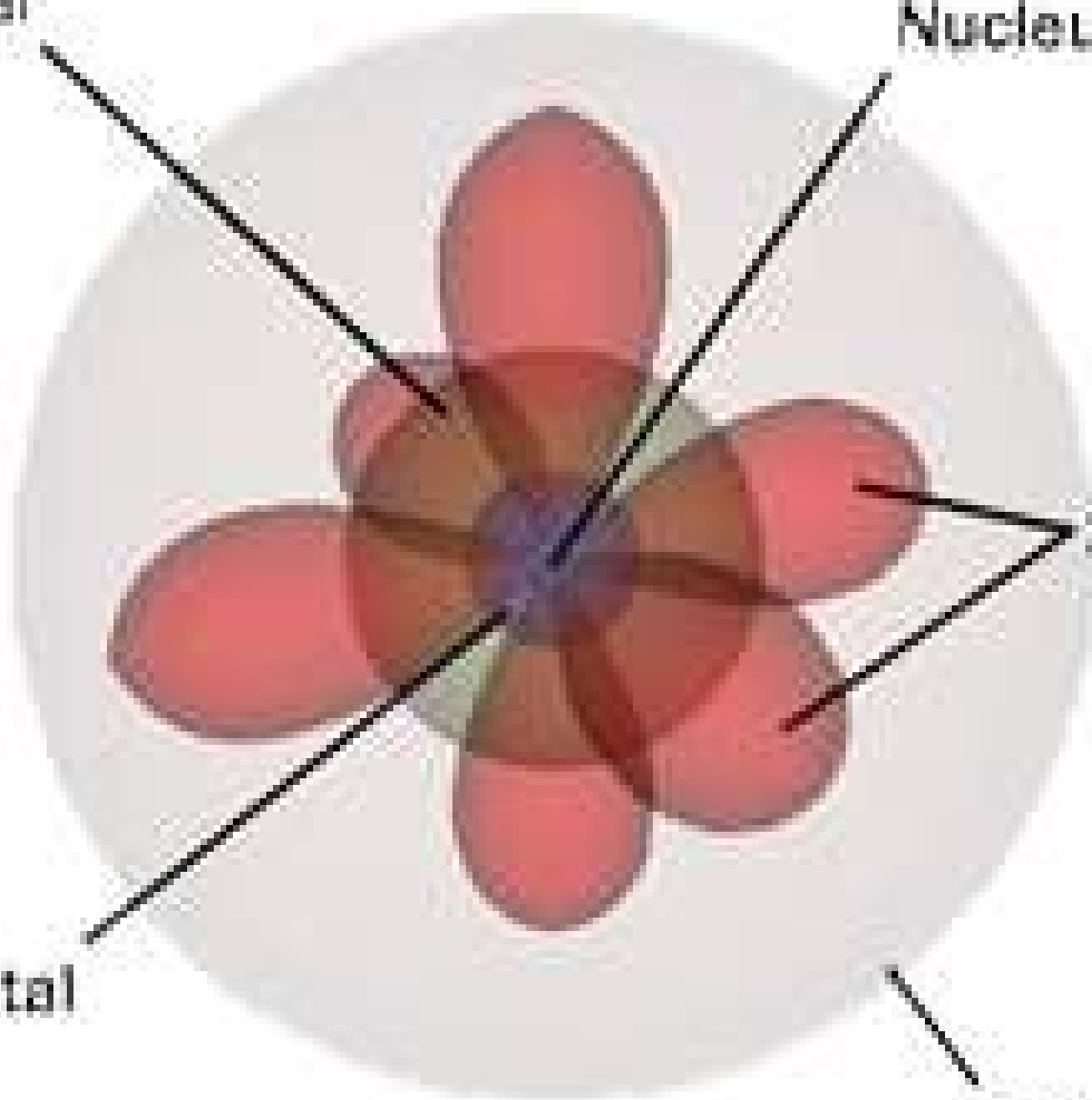
2s orbital

Nucleus

2p orbitals

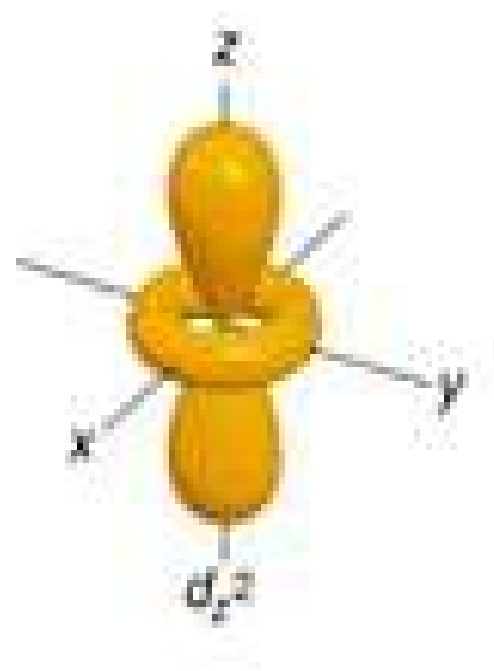
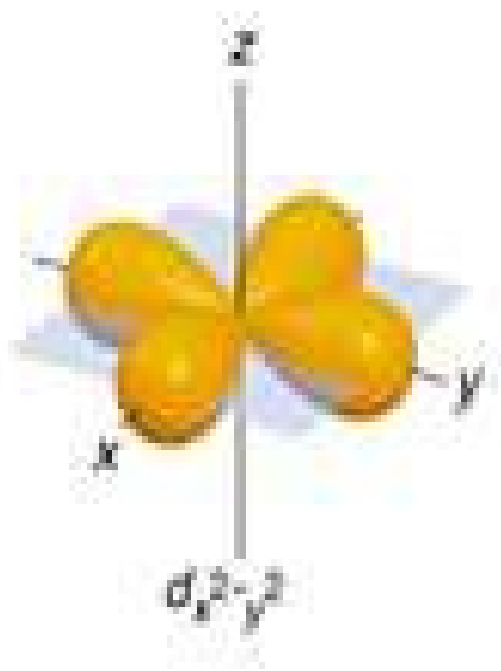
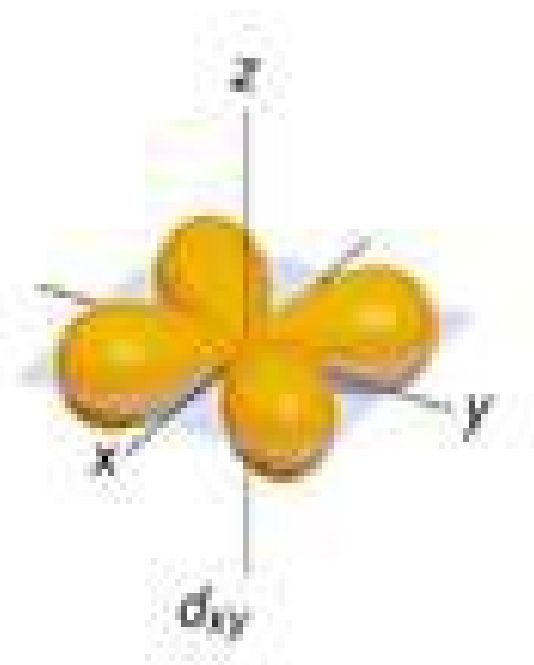
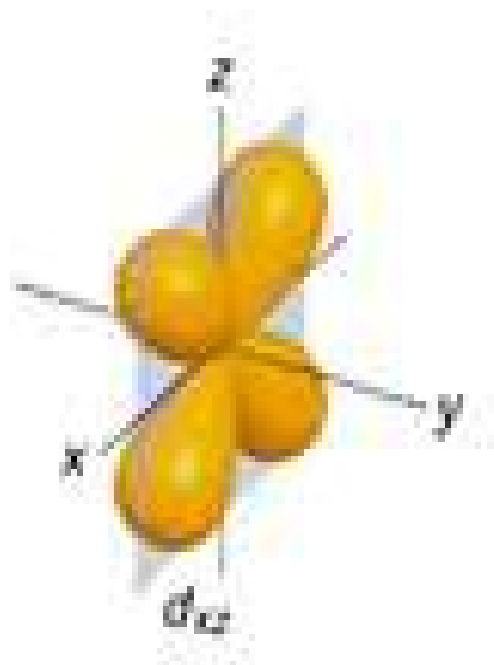
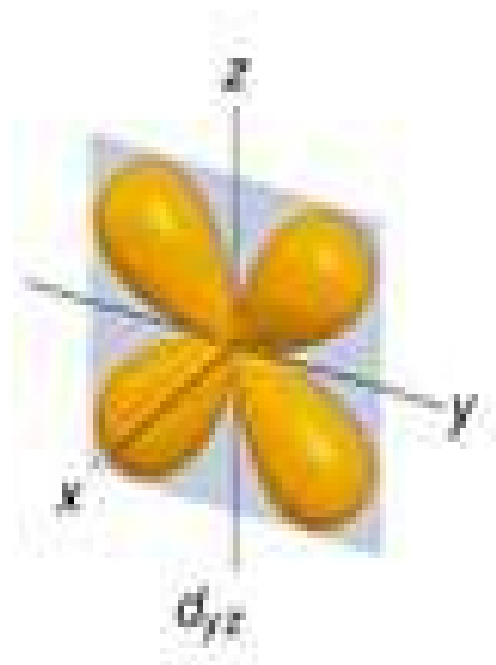
3s orbital

1s orbital



n	l	m	$\Psi_{n,l,m}$	nl	AO
3	0	0	$\Psi_{3,0,0}$	3s	3s
		-1	$\Psi_{3,1,-1}$		$3p_x$
	1	0	$\Psi_{3,1,0}$	3p	$3p_y$
		+1	$\Psi_{3,1,+1}$		$3p_z$
	2	-2	$\Psi_{3,2,-2}$	3d	$3d_{xy}$
		-1	$\Psi_{3,2,-1}$		$3d_{yz}$
		0	$\Psi_{3,2,0}$		$3d_{z^2}$
		+1	$\Psi_{3,2,+1}$		$3d_{xz}$
		+2	$\Psi_{3,2,+2}$		$3d_{x^2-y^2}$

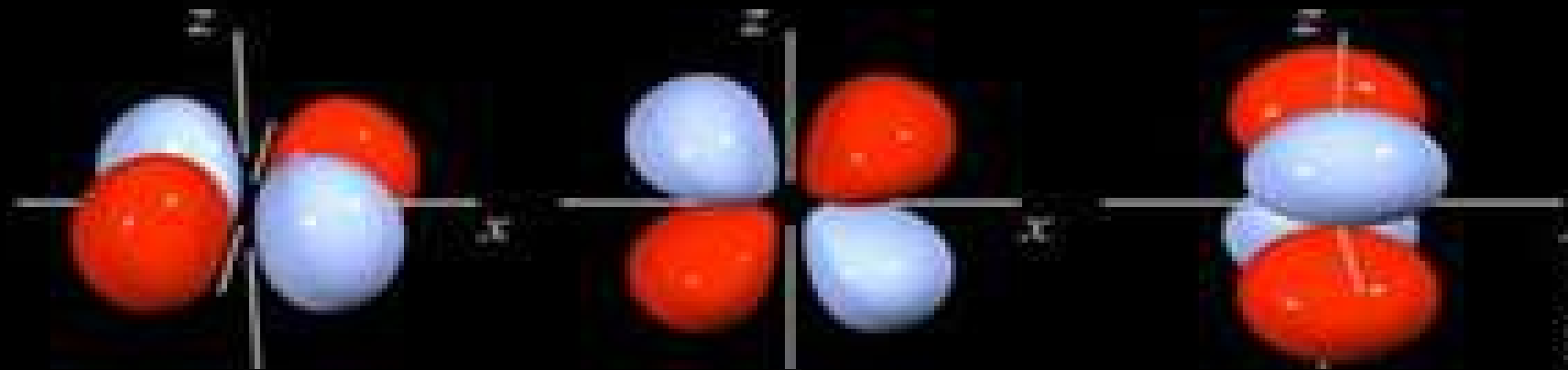
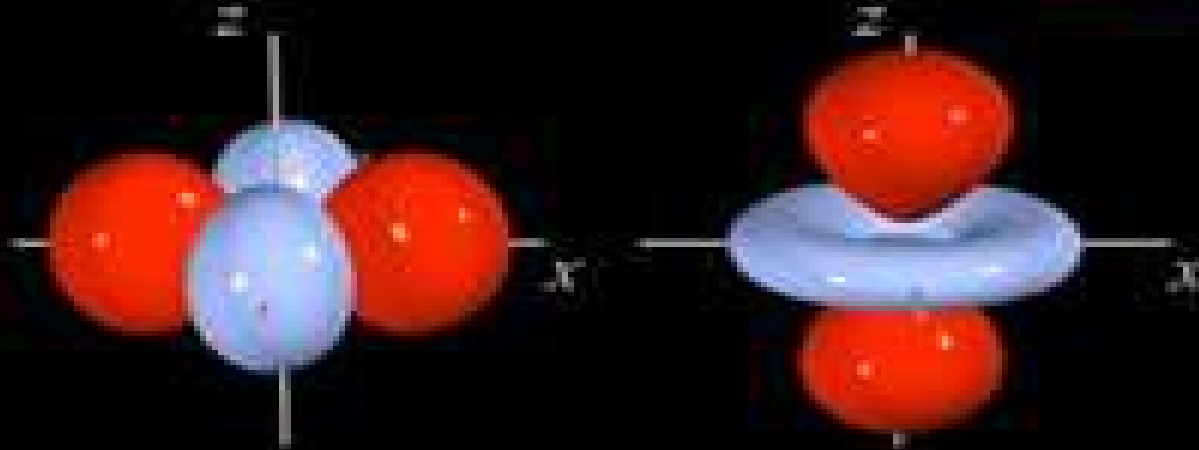
➔ lớp M(n=3) có 3 phân lớp: 3s (1AO);  
3p(3AO) ; 3d(5AO)







# The Orbitron



Toggle nodes

$n = 4 \rightarrow l = 0; 1; 2; 3 \rightarrow$  có 4 phân lớp:

$4s; 4p; 4d; 4f$

Phân lớp  $4f$  ( $l=3$ )  $\Rightarrow m$  có  $(2.3+1)=7$  giá trị

$\rightarrow 7AO$

$\rightarrow$  Lớp thứ  $n$  có  $n$  phân lớp:  $ns; np; nd; nf; \dots$

## δ. Số lượng tử spin $m_s$

Trạng thái chuyển động của electron còn được biểu diễn bởi một số thứ tư là  $m_s$ : khi di chuyển quanh nhân electron có thể tự quay quanh trục đối xứng theo 2 chiều trái nhau( thuận và ngược chiều kim đồng hồ)

Số  $m_s$  có 2 giá trị :  $m_s = -\frac{1}{2}$  và  $m_s = +\frac{1}{2}$

→ Trạng thái chuyển động của  $e$  được xác định bởi 4 số lượng tử:  $n, l, m, m_s$ . → Mỗi  $e$  trong 1 nguyên tử đều có 4 số  $n, l, m, m_s$  xác định.

**b. Ghi chú:** \*trong hệ 1(e)

Các ph.1  $\in$  1 lớp có  $E_n$  bằng nhau

\*e có thể di.ch ở bất kỳ lớp nào từ  $n=1 \rightarrow \infty$

\*Khi e di chuyển ở lớp nào  $\rightarrow E_n$  của lớp đó

$$E_n = -13,6 \cdot \left( \frac{Z}{n} \right)^2 eV$$

\*Ở tr.th cơ bản: Hệ có E nhỏ nhất  $\rightarrow e \in n=1$

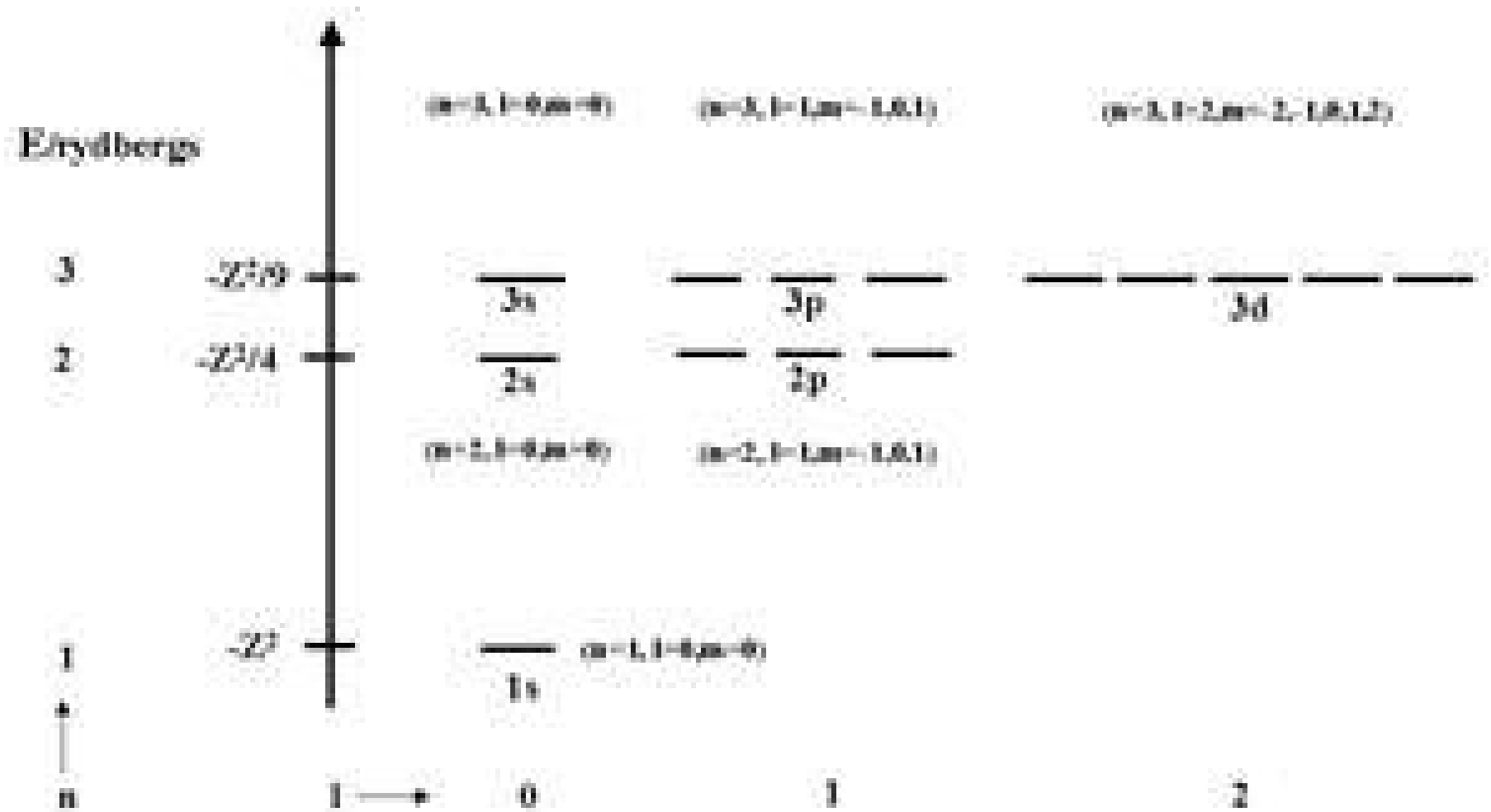
\*e từ  $n=1 \rightarrow n=2 \rightarrow \Delta E_{1 \rightarrow 2} = E_2 - E_1 > 0$

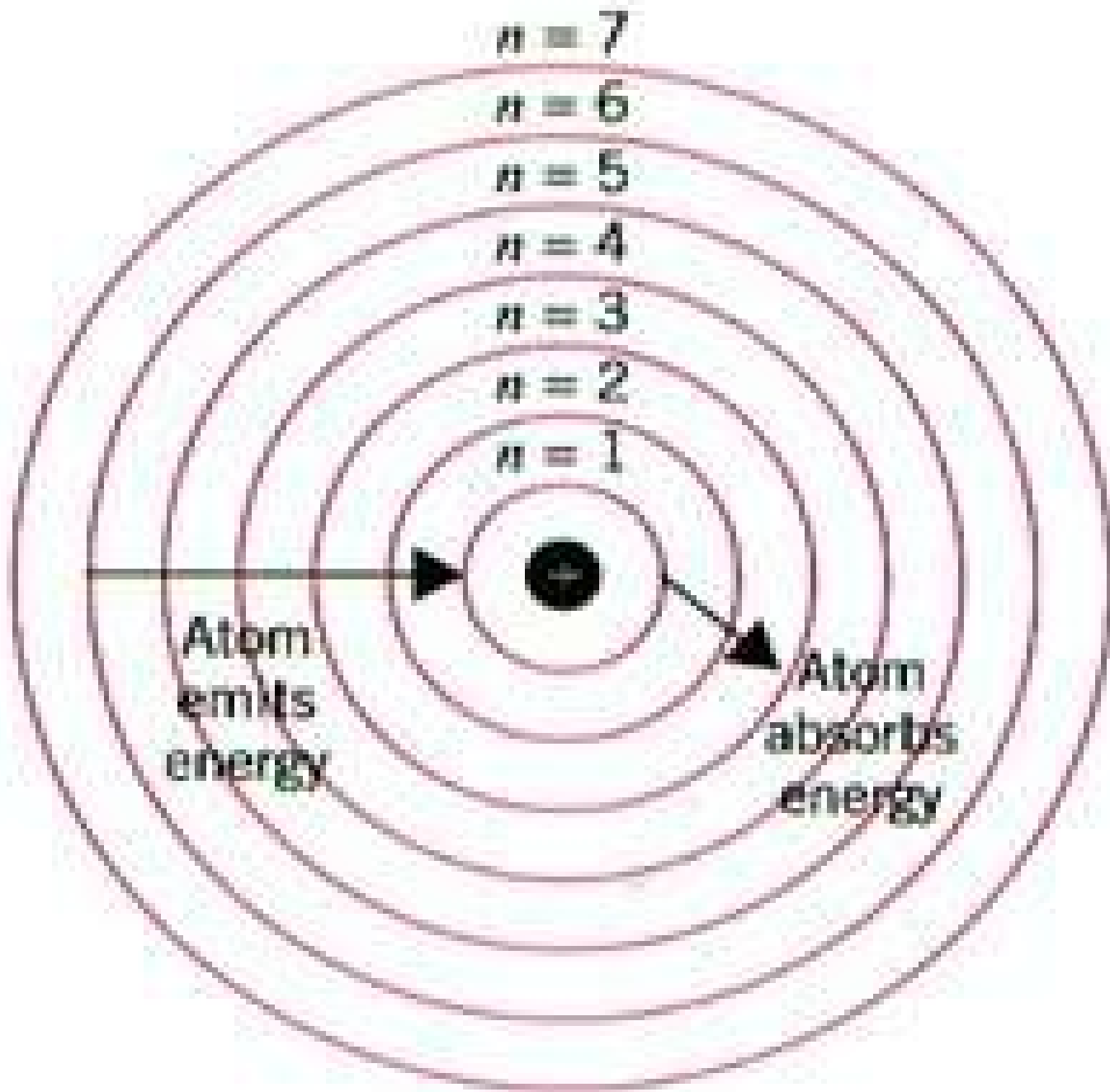
\*e từ  $n=2 \rightarrow n=1 \rightarrow \Delta E_{2 \rightarrow 1} = E_1 - E_2 < 0$

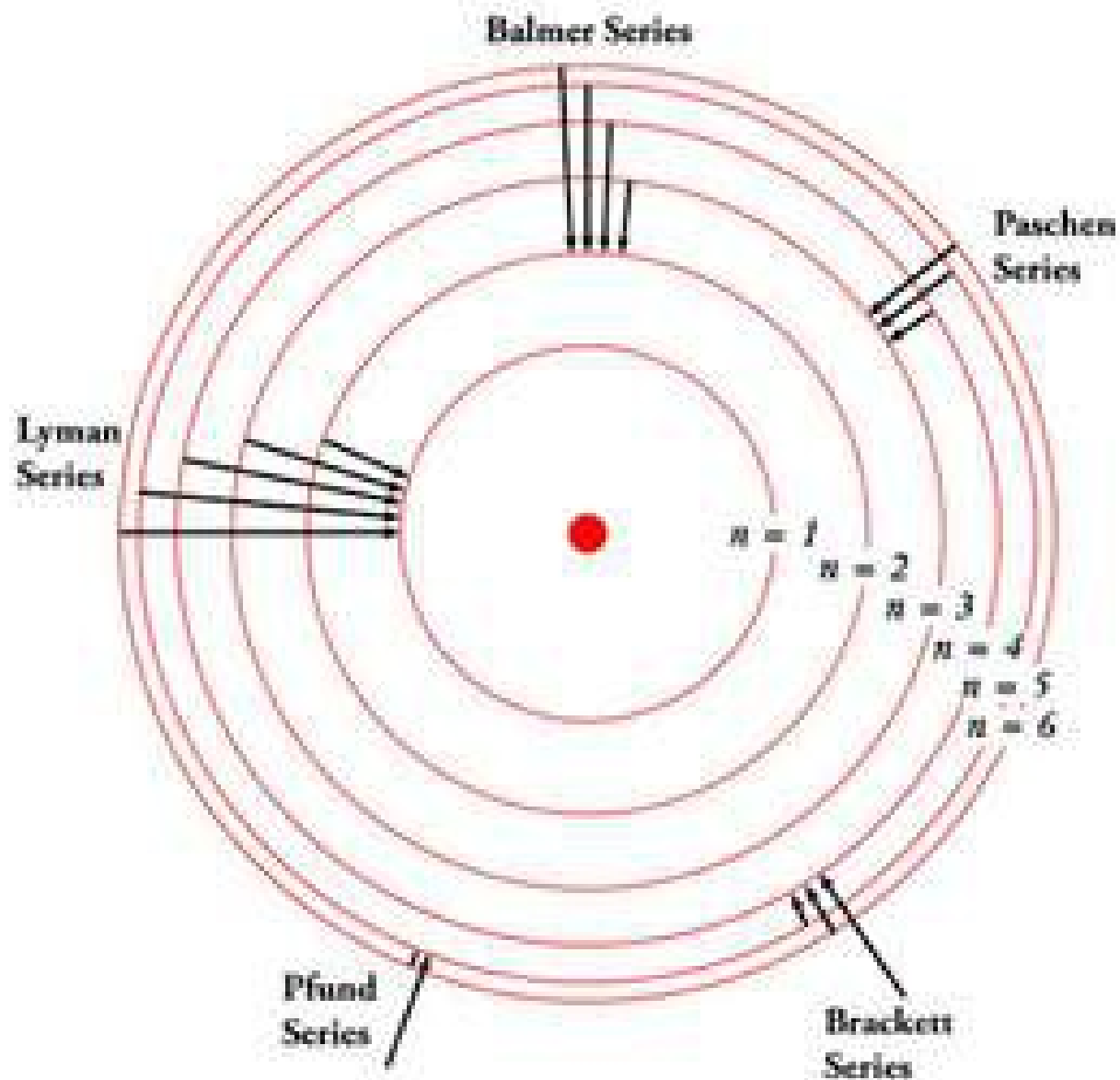
\*e từ  $E_n$  thấp  $\rightarrow E_n$  cao  $\rightarrow$  Hệ nhận năng lượng

\*e từ  $E_n$  cao  $\rightarrow E_n$  thấp  $\rightarrow$  Hệ phát năng lượng

# Energy -Level Diagram for One-Electron Atom/Ions







## 2. Hệ nhiều electron:

Gồm các nguyên tử chứa từ 2e trở lên:

- \* Các e đẩy lẫn nhau → các phân lớp trong cùng 1 lớp có E khác nhau
- \* Các e di chuyển quanh nhân cũng trên các lớp và phân lớp tương tự trường hợp hệ 1e.
- \* Trạng thái chuyển động của các e trong hệ nhiều e phải tuân theo các nguyên lý của cơ lượng tử.



a. Các nguyên lý của cơ lượng tử:

$\alpha$ . Nguyên lý ngoại trừ Pauli:

*Trong 1 ng.tử nhiều e, không có cặp e nào có 4 số lượng tử hoàn toàn giống nhau.*

\* Số e tối đa trong 1AO:

Các e di chuyển trên cùng 1AO( $\Psi_{n,l,m}$ ) phải có 3 số n,l,m giống nhau  $\rightarrow m_s$  khác nhau

Vì  $m_s$  chỉ có 2 giá trị:  $-1/2$  và  $+1/2$

$\rightarrow$  1AO chỉ có tối đa 2e với  $m_s$  ngược chiều

$m_s = +1/2 \rightarrow \boxed{\uparrow}$   $m_s = -1/2 \rightarrow \boxed{\downarrow}$

AO chứa 2e  $\rightarrow \boxed{\uparrow\downarrow}$

Còn  ~~$\boxed{\uparrow\uparrow}$~~

## \* Số electron tối đa trong 1 phân lớp:

Trong 1 ph.l thứ  $l$ : Có  $(2l+1)$  AO  $\rightarrow$  có  $2(2l+1)e$

Ph.lớp  $s(l=0) \rightarrow$  tối đa  $2(2.0+1)=2e \rightarrow s^2$

Ph.lớp  $p(l=1) \rightarrow$  tối đa  $2(2.1+1) = 6e \rightarrow p^6$

Ph.lớp  $d(l=2) \rightarrow$  tối đa  $2(2.2+1) = 10e \rightarrow d^{10}$

Ph.lớp  $f(l=3) \rightarrow$  tối đa  $2(2.3+1) = 14e \rightarrow f^{14}$

ns:  $s^0$  ;  $s^1$  ;  $s^2$

np:  $p^0$  ;  $p^1$  ;  $p^2$  ;  $p^3$  ;  $p^4$  ;  $p^5$  ;  $p^6$

nd:  $d^0$  ;  $d^1$  ;  $d^2$  ;  $d^3$  ;  $d^4$  ;  $d^5$  ;  $d^6$  ;  $d^7$  ;  $d^8$  ;  $d^9$  ;  $d^{10}$

nf:  $f^0$  ;  $f^1$  ;  $f^2$  ;  $f^3$  ;  $f^4$  ;  $f^5$  ;  $f^6$  ;  $f^7$  ;  $f^8$  ;  $f^9$  ;  $f^{10}$  ;  $f^{11}$  ;  $f^{12}$  ;  
 $f^{13}$  ;  $f^{14}$

## \* Số electron tối đa trong 1 lớp

Trong lớp thứ n: Chứa tối đa  $(2.n^2)$  e

$$n=1 \rightarrow \text{tối đa } 2.1^2 = 2 \text{ e}$$

$$n=2 \rightarrow \text{tối đa } 2.2^2 = 8 \text{ e}$$

$$n=3 \rightarrow \text{tối đa } 2.3^2 = 18 \text{ e}$$

$$n=4 \rightarrow \text{tối đa } 2.4^2 = 32 \text{ e}$$

$$n=5 \rightarrow \text{tối đa } 2.5^2 = 50 \text{ e}$$

$$n=6 \rightarrow \text{tối đa } 2.6^2 = 72 \text{ e}$$

$$n=7 \rightarrow \text{tối đa } 2.7^2 = 98 \text{ e}$$

## $\beta$ . Nguyên lý vững bền

*Trong 1 nguyên tử nhiều electron, các electron di chuyển quanh nhân như thế nào để năng lượng của hệ là nhỏ nhất.*

\* Các phân lớp nl: Có  $(n + 1) \uparrow \rightarrow E \uparrow$

Td:  $3s(3 + 0) < 3p(3 + 1) \rightarrow E_{3s} < E_{3p}$

\* Trường hợp 2 ph.lớp có  $(n + 1)$  bằng nhau:

Phân lớp nào có  $n \uparrow \rightarrow E_n \uparrow$

Td:  $3d(3 + 2)$  và  $4p(4 + 1) \rightarrow E_{3d} < E_{4p}$

$4p(4 + 1)$  và  $5s(5 + 0) \rightarrow E_{4p} < E_{5s}$

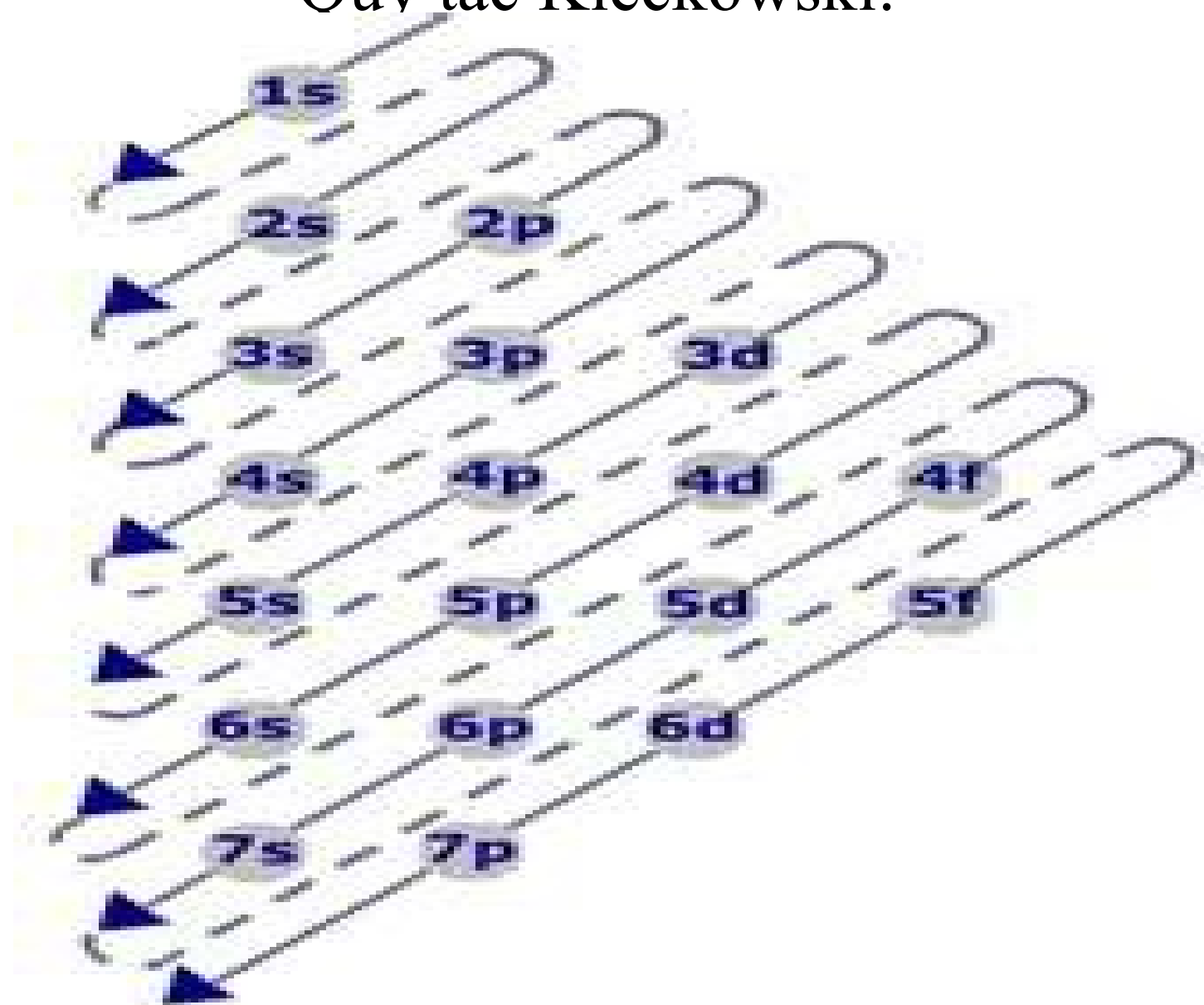
## \* Quy tắc Kleckowski:

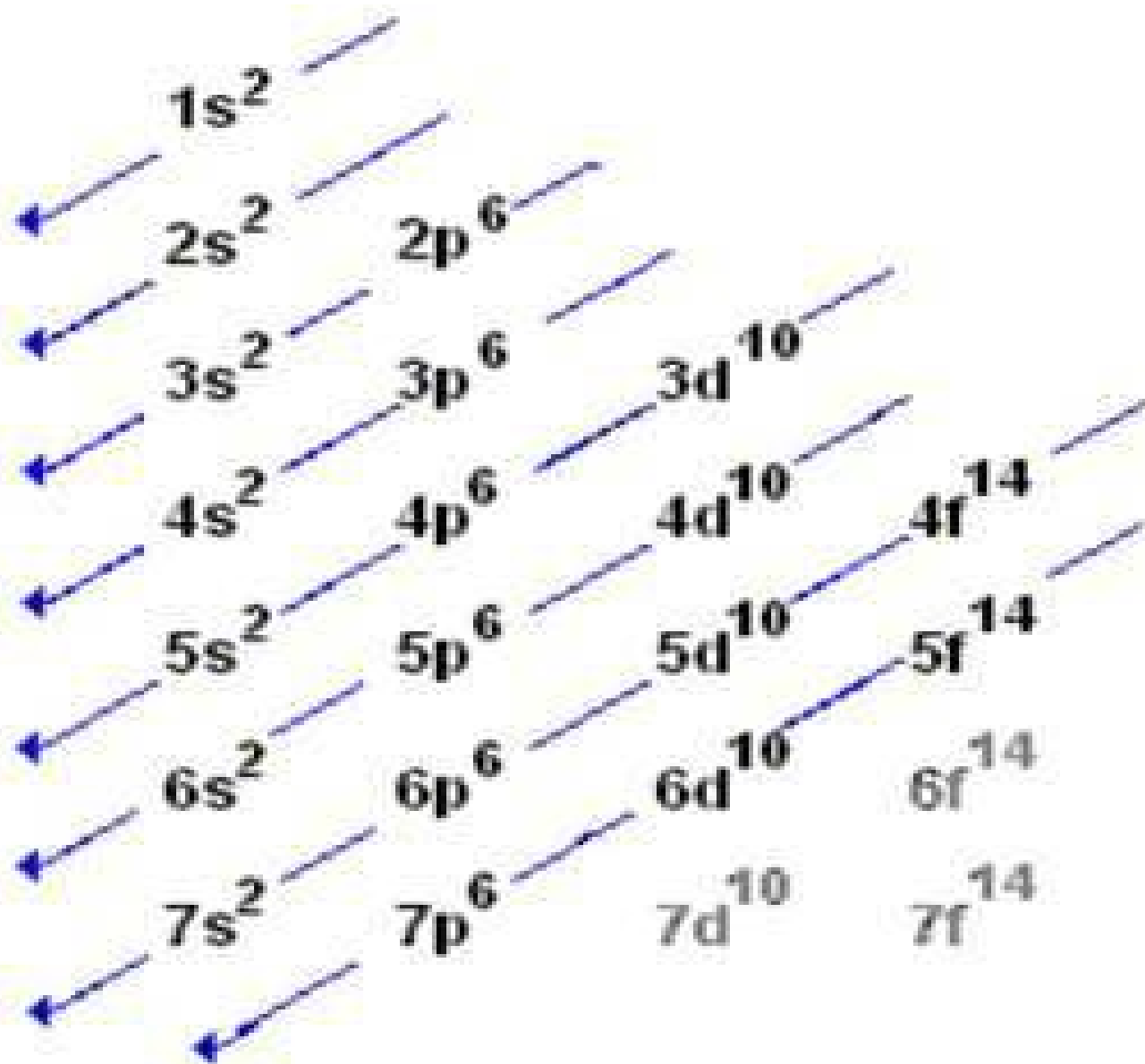
*Trong 1 ng.tử nhiều  $e$ , các  $e$  lần lượt vào chiếm các ph.l có  $E$  nhỏ nhất trước (mỗi AO chỉ chứa tối đa  $2e$  với spin ngược chiều). Khi nào ph.l có  $E$  nhỏ hơn đã bão hòa  $e$ , thì  $e$  tiếp theo mới vào chiếm ph.l có  $E$  cao hơn kế tiếp. Thứ tự tiến  $E$  của các ph.l được xác định bởi qui tắc **Kleckowski**.*

Thứ tự tiến năng lượng của các phân lớp:

1s 2s 2p 3s 3p 4s 3d 4p 5s 4d 5p 6s  
4f 5d 6p 7s 5f 6d 7p

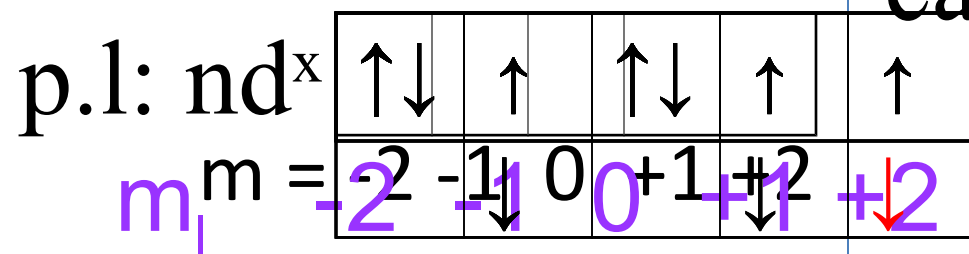
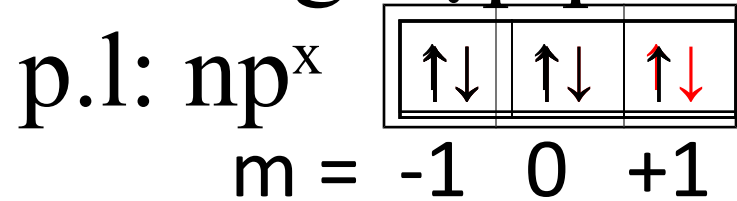
# Quy tắc Kleckowski:





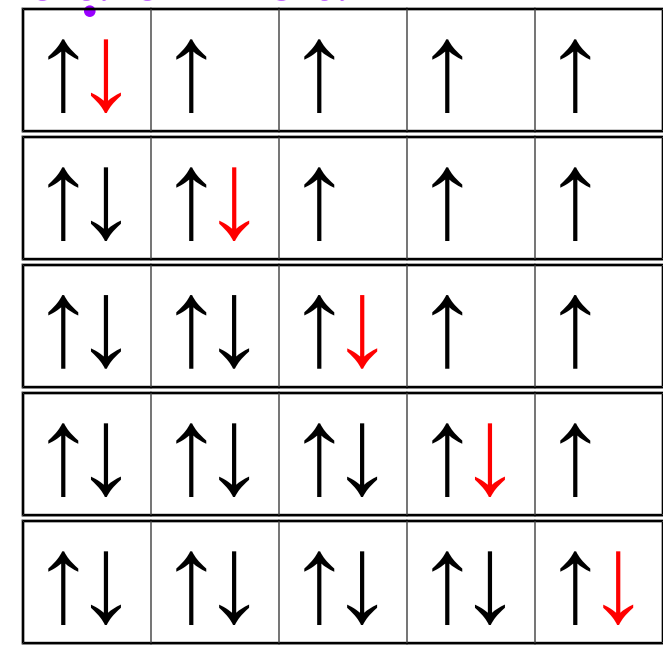
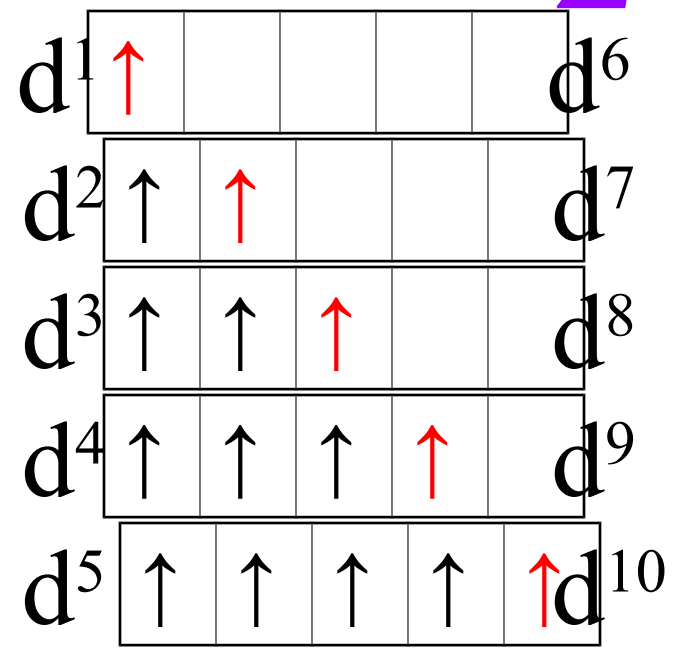
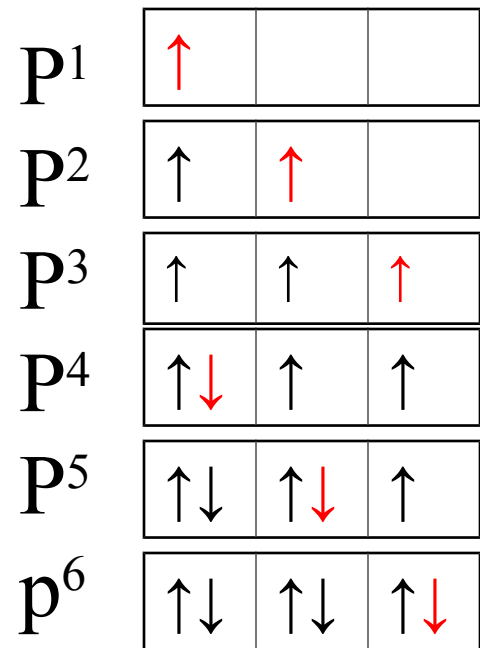
# $\gamma$ . Quy tắc Hund:

Trường hợp ph.1 có nhiều AO đồng năng:  
 p.1:  $np^x$  e lần lượt vào chiếm  
 các AO như thế nào để:



$\Sigma m_s$  cực đại

$\Sigma m$  cực tiểu





## δ. Ghi chú:

\* Các phân lớp p và d: Cấu hình bền nhất là cấu hình **bão hòa** và cấu hình **bán bão hòa**

p.1 p Bền là  $p^6$ 

↑↓	↑↓	↑↓
----	----	----

 và  $p^3$ 

↑	↑	↑
---	---	---

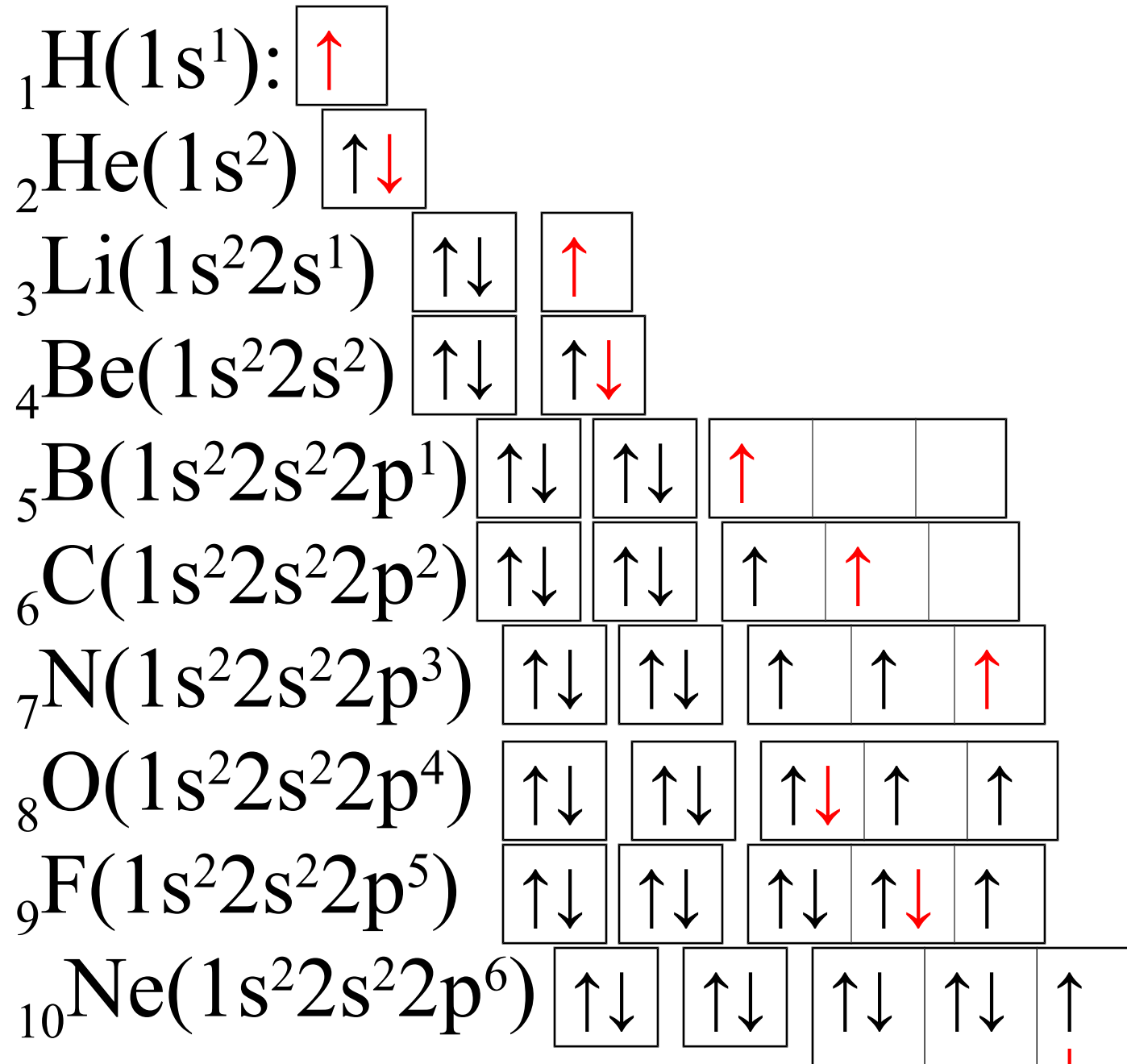
p.1 d Bền là  $d^{10}$ 

↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓
----	----	----	----	----

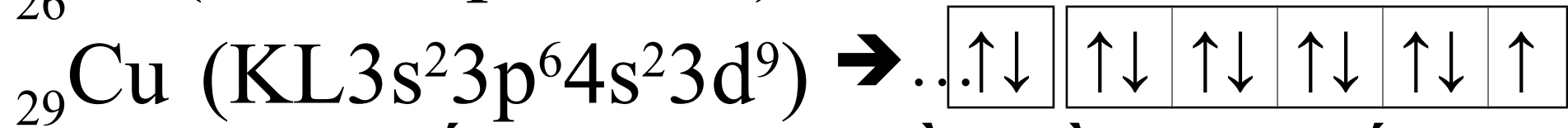
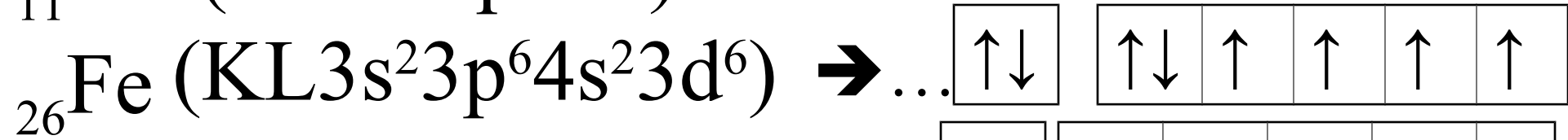
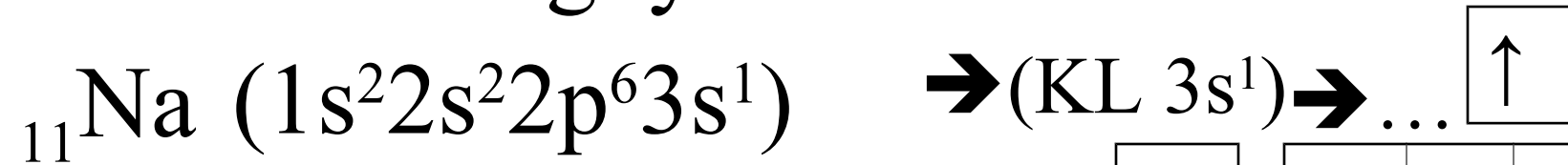
và  $d^5$ 

↑	↑	↑	↑	↑
---	---	---	---	---

## b. Cấu hình electron:

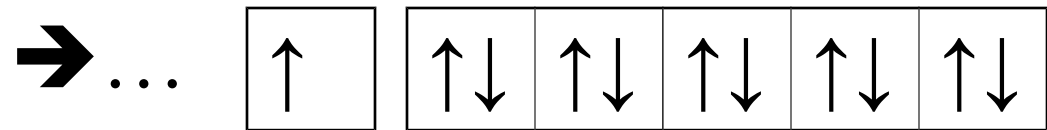
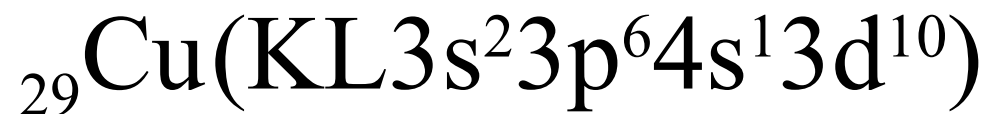


→ Có thể viết cấu hình electron của các nguyên tố nếu biết Z



Nhưng: cơ cấu  $d^9$  không bền bằng cơ cấu  $d^{10}$

→ Cu sẽ hiệu chỉnh thành cơ cấu  $4s^1 3d^{10}$



## c. Hiệu ứng chắn và hiệu ứng xâm nhập:

$\alpha$ . Trong ng.tử nhiều  $e$ , khi di chuyển

$e_j$  bị các  $e_i$  còn lại đẩy một lực đẩy

tổng cộng là  $S_j$

$S_j$ : hiệu ứng chắn của các  $e_i$  tác

dụng lên  $e_j$

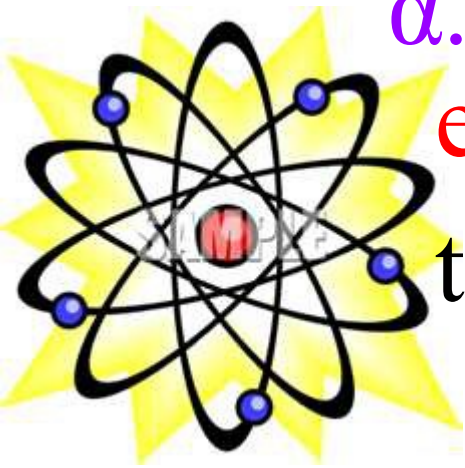
$\rightarrow e(j)$  bị nhân hút < tr.hợp ng.tử chỉ có  $1e(j)$

$1e_i$  sẽ gây 1 hiệu ứng chắn  $\sigma_{ij}$  lên  $e_j \rightarrow (S_j = \sum \sigma_{ij})$

\*  $e_j$  càng xa nhân  $\rightarrow S_j \uparrow$ ;  $e_j$  càng gần nhân  $\rightarrow S_j \downarrow$

\*  $e_i$  càng xa nhân  $\rightarrow \sigma_{ij} \downarrow$ ;  $e_i$  càng gần nhân  $\rightarrow \sigma_{ij} \uparrow$

Trong cùng 1 lớp:  $\begin{array}{cccc} s & p & d & f \\ \hline & & \downarrow & \\ & & \sigma_{ij} & \end{array}$



## β. Hiệu ứng xâm nhập:

Các e khi di chuyển, do lực hút của nhân tác dụng lên → tạo nên hiệu ứng xâm nhập  
(e xâm nhập vào gần nhân hơn)

→ e tạo hiệu ứng chắn  $\sigma$  mạnh hơn

Trong cùng 1 lớp  $\begin{array}{cccc} s & p & d & f \\ \hline \end{array}$  →  
h.ứ xâm nhập ↓

### III. Bảng phân loại tuần hoàn.

#### 1. Vị trí của các nguyên tố trong bảng phân loại tuần hoàn.

Là xác định chu kỳ và phân nhóm của ng.tố:

Chu kỳ: số lượng tử chính  $n$  lớn nhất của ng.tố đó

Phân nhóm: 

{	Phân nhóm chính A
	Phân nhóm phụ B

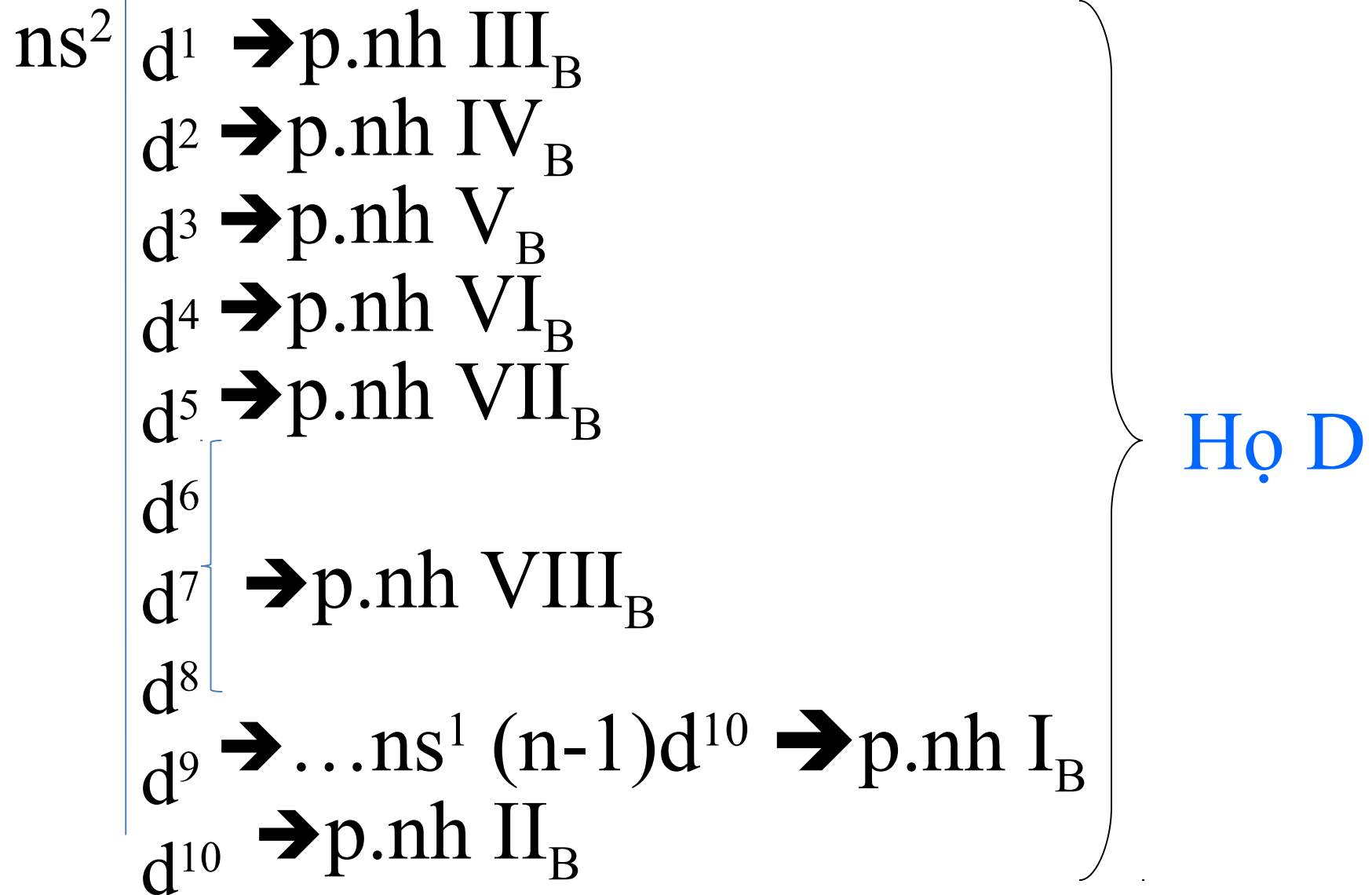
\* Nguyên tố thuộc phân nhóm chính A:

Là ng.tố mà **e cuối cùng** đang x.d ph.lớp **ns**  
**hoặc np** và ph.lớp (n-1)d không chứa hoặc  
đã chứa bão hòa e  $ns^x$ :  $\left. \begin{array}{l} ns^1 \rightarrow \text{p.nh } I_A \\ ns^2 \rightarrow \text{p.nh } II_A \end{array} \right\} \text{Họ S}$

$ns^2 np^y$   $\left. \begin{array}{l} ns^2 np^1 \rightarrow \text{p.nh } III_A \\ ns^2 np^2 \rightarrow \text{p.nh } IV_A \\ ns^2 np^3 \rightarrow \text{p.nh } V_A \\ ns^2 np^4 \rightarrow \text{p.nh } VI_A \\ ns^2 np^5 \rightarrow \text{p.nh } VII_A \\ ns^2 np^6 \rightarrow \text{khí trơ} \end{array} \right\} \text{Họ P}$

\* Nguyên tố thuộc phân nhóm phụ B:

Ng.tố mà **e cuối cùng** đang x.d ph.lớp **(n-1)d**





43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54	55
56	57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68

## 2. Tính chất của các nguyên tố:

### a. Tính kim loại và phi kim:

$\alpha$ . K.1: là ng.tố mà  $\sum e$  lớp ngoài cùng  $\leq 3$

→ K.1 gồm: ph.nh  $I_A; II_A; III_A$  và các p.nh B

$\beta$ . Phi kim: là ng.tố mà  $\sum e$  lớp ngoài cùng  $\geq 4$

→ phi kim gồm: phân nhóm  $IV_A; V_A; VI_A; VII_A$

\* Ng.tố thuộc ch.kỳ lớn của p.nh  $IV_A; V_A$  là k.1

### b. Soh (+) cao nhất và soh (-) thấp nhất

\* Soh (+) cao nhất của 1 ng.tố =  $\sum e$  hóa trị của ng.tố đó

e hóa trị là e có thể tham gia tạo liên kết

→ Các ng.tổ phân nhóm chính A có  $s_{oh}(+)$  cao nhất = cột phân nhóm của ng.tổ đó.



→ Số oxyd hóa (-) thấp nhất =  $\sum e$  hóa trị - 8

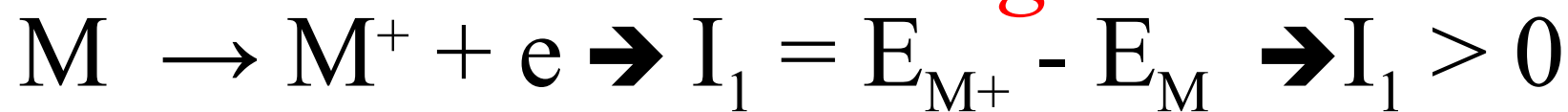
→ Kim loại chỉ có số oxyd hóa (+)

→ phi kim có : số oxyd hóa (+) và (-)

**b. Năng lượng ion hóa thứ nhất ( $I_1$ ) của ng.tổ**

*$I_1$  của 1 ng.tổ là n.l cần thiết mà ng.tổ nhận*

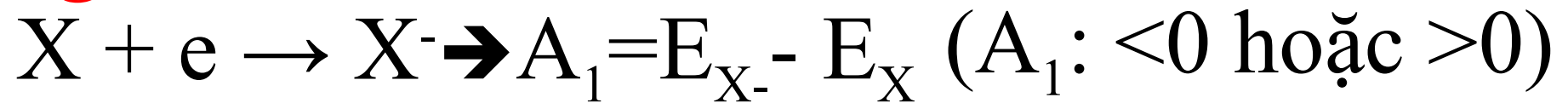
*vào để tách 1e ra khỏi ng.tổ → ion  $M^+$ .*



$I_1 \uparrow \rightarrow$  ng.tổ càng khó ion hóa, tính khử và tính Kl  $\downarrow$

### c. Ái lực electron:

*Ái lực electron là năng lượng trao đổi khi 1 ng.tổ nhận thêm 1e  $\rightarrow$  ion  $X^-$*



$A_1$  càng  $<0 \rightarrow$  nhận e  $\uparrow \rightarrow$  tính oh, đad, pk  $\uparrow$

### d. Bán kính ng.tử

\* Trong cùng 1 ph.nh, khi đi từ trên xuống số lượng tử chính  $n \uparrow \rightarrow$  bán kính ng.tử  $\uparrow$

\* Cùng 1 chu kỳ: các ng.tổ thuộc ph.nh A, khi đi từ trái sang phải  $Z \uparrow \rightarrow r_{\text{ng.tổ}} \downarrow$

$r_{\text{ng.tử}}$ , tính khử, kl  $\uparrow$ ,  $I_1 \downarrow$   $\xrightarrow{\hspace{10em}}$   $r_{\text{ng.tử}} \downarrow$ , oh, pk, đad  $\uparrow$

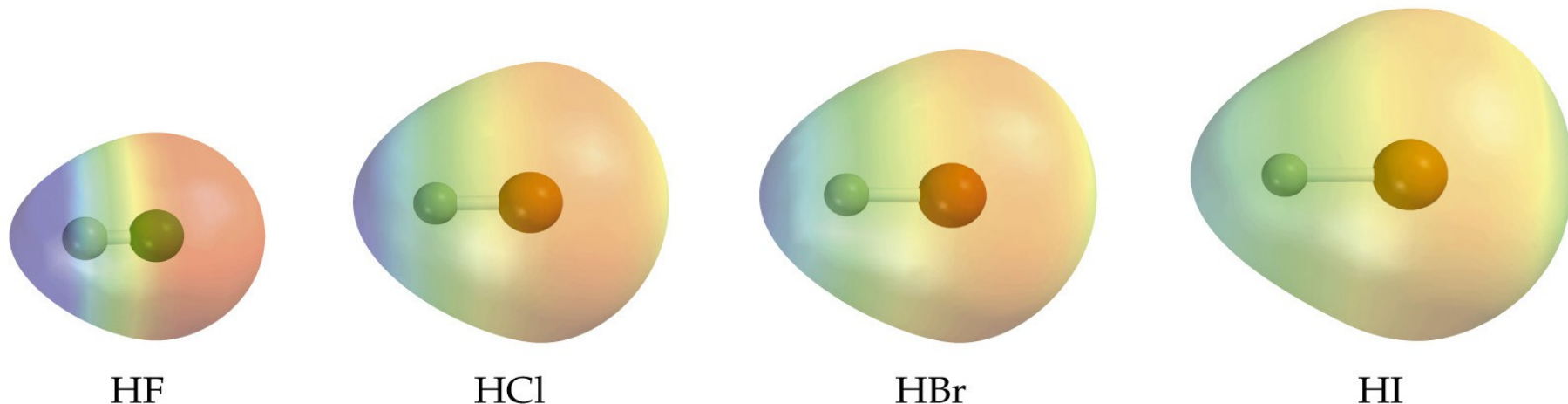
# CHƯƠNG II

## LIÊN KẾT HÓA HỌC

### I. Các đặc trưng của liên kết hóa học

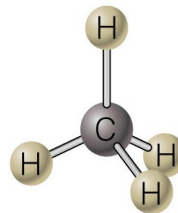
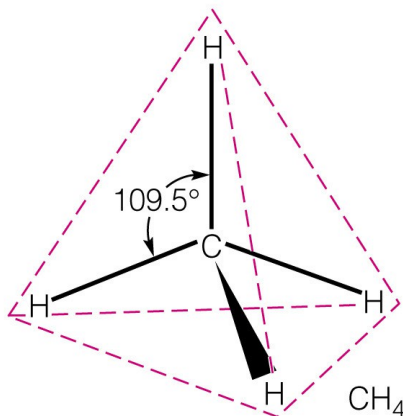
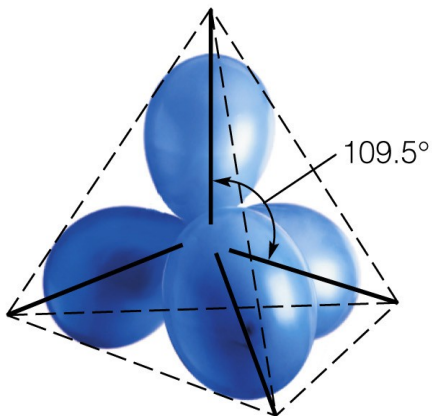
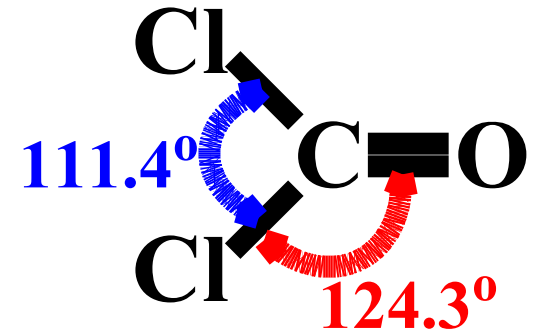
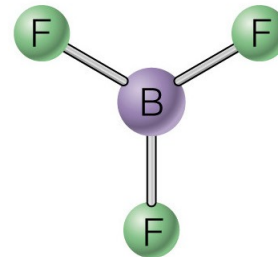
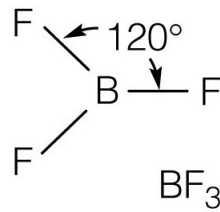
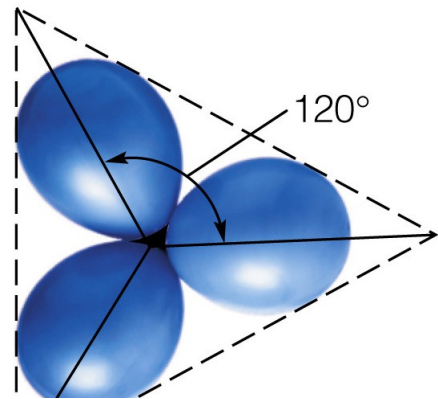
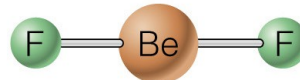
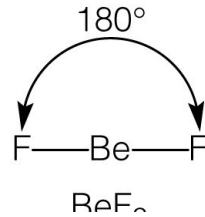
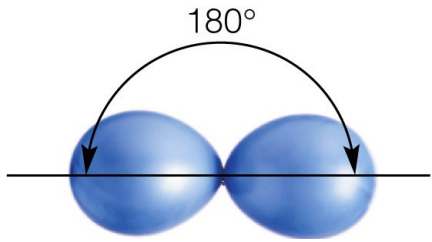
1. Độ dài liên kết: khoảng cách ngắn nhất nối 2 hạt nhân của 2 nguyên tử tham gia liên kết

Liên kết	H—F	H—Cl	H—Br	H—I
d(A°)	0,92	1,28	1,42	1,62



## 2. Góc liên kết:

Góc tạo thành bởi 2 đoạn thẳng nối liền  
ng. tử với 2 nhân của 2 ng. tử liên kết với nó.



### 3. Bậc liên kết:

Số mỗi 1.kết được hình thành giữa 2 ng.tử

Etan  $\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_3$  blk = 1

Eten  $\text{H}_2\text{C}=\text{CH}_2$  blk = 2

Etin  $\text{HC}\equiv\text{CH}$  blk = 3

### 4. Năng lượng liên kết

a. Phân tử 2 nguyên tử:  $\text{AB(k)} \xrightarrow{-Q} \text{A(k)} + \text{B(k)}$

: Q là nhiệt hấp thu của pư  $Q > 0 \rightarrow E_{\text{AB}} = Q$

b. Phân tử nhiều nguyên tử:

$\text{CH}_4(\text{k}) \xrightarrow{-Q} \text{C(k)} + 4\text{H(k)} \Rightarrow E_{\text{CH}} = \frac{1}{4} Q$

$E_{\text{AB}} > 0$  và  $E_{\text{AB}} \uparrow \rightarrow$  độ bền liên kết  $\uparrow$

$\text{Blk} \uparrow \rightarrow E_{\text{AB}}, d_{\text{blk}}, \uparrow$  nhưng  $d_{\text{AB}} \downarrow$

## 5. Các loại liên kết.

Gồm:

Liên kết ion

Liên kết cộng hóa trị

Liên kết Hidro

Lực Van Der Waals

Liên kết trong phức chất

Các loại liên kết  
yếu

*Để phân biệt lk ion và lkcht: căn cứ vào độ âm điện của 2 nguyên tử tham gia liên kết.*

Lk (AB)  $\left\{ \begin{array}{l} 0 \leq |\chi_A - \chi_B| < 1,7 \rightarrow \text{lkcht} \\ |\chi_A - \chi_B| \geq 1,7 \rightarrow \text{lk ion} \end{array} \right.$



## II. LIÊN KẾT CỘNG HÓA TRỊ

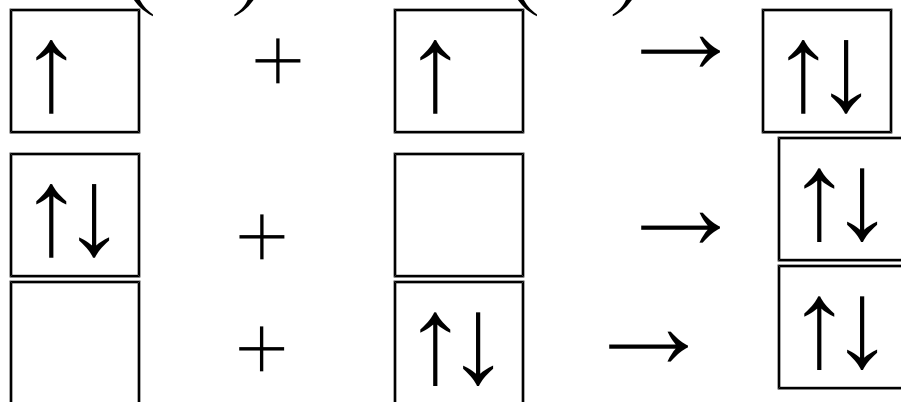
### 1. Nguyên tắc:

Liên kết AB:  $0 \leq |\chi_A - \chi_B| < 1,7 \rightarrow \text{lkcht}$

\*2 ng.tử A và B tiến lại gần nhau, các AOht tiến lại gần nhau, đến 1 khoảng cách xđ các AO của chúng sẽ che phủ lên nhau

$\rightarrow$  các Orbital ph.tử: **Molecular Orbital (MO)**

\* **MO**: vùng không gian quanh 2 nhân, trên đó xác suất tìm thấy e cực đại từ 90  $\rightarrow$  99%  
Mỗi MO cũng chỉ chứa tối đa 2e với spin ngược chiều.



Liên kết phối trí  
(cho nhận)

▪ Chỉ có các AO hóa trị(AO chứa các e hóa trị) mới tham gia che phủ tạo liên kết.

▪ Quy tắc che phủ hữu hiệu

\*Che phủ cực đại:các AO tiến lại với nhau theo hướng như thế nào để cácAO che phủ phủ lên nhau càng nhiều càng tốt

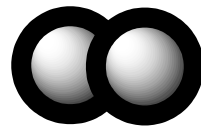
\*  $\Delta E_{2\text{AO}}$

Che phủ hữu hiệu  $\uparrow \Rightarrow$  độ bền lk  $\uparrow$

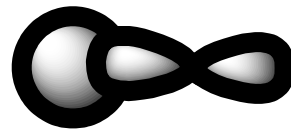
# Các kiểu xen phủ : sự tạo liên kết $\sigma, \pi$

• **Liên kết sigma ma:** Hình thành do sự xen phủ trục, tức là sự xen phủ xảy ra dọc theo trục liên kết giữa 2 nguyên tử

Kí hiệu  $\sigma$



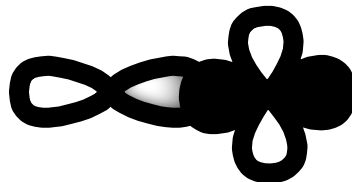
s-s



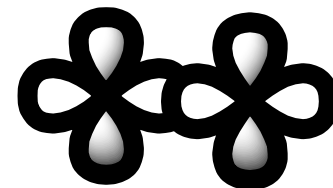
s-p



p-p

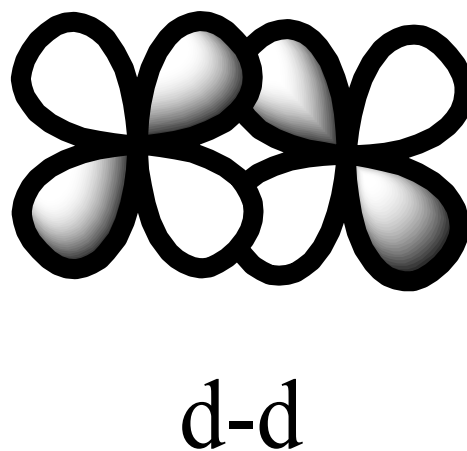
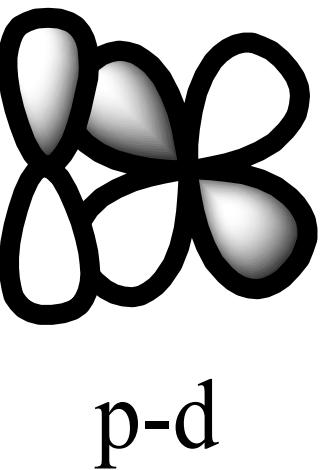
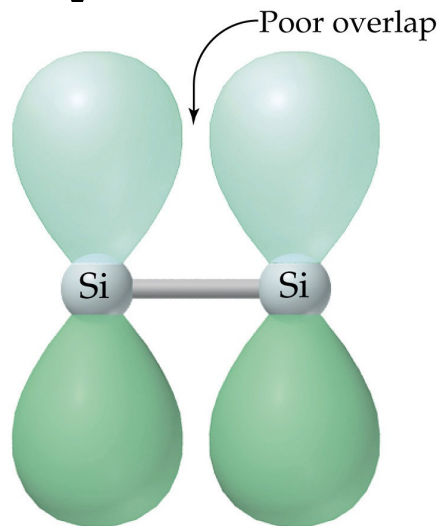
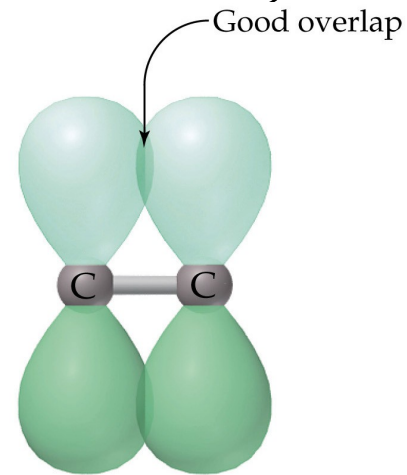


p-d

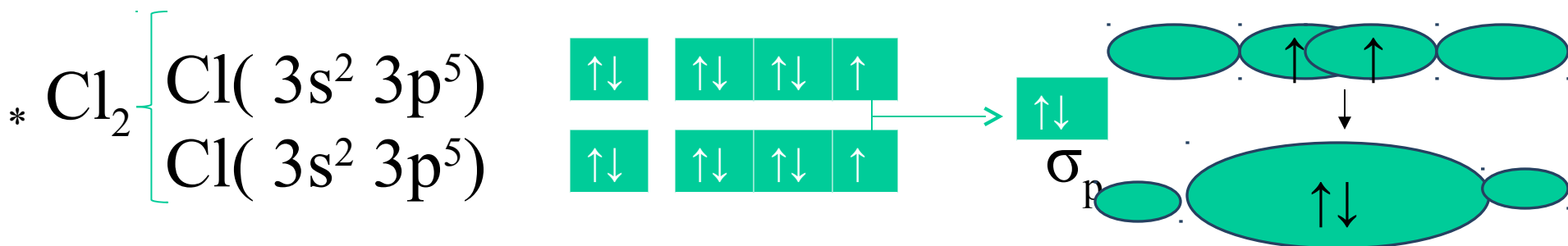
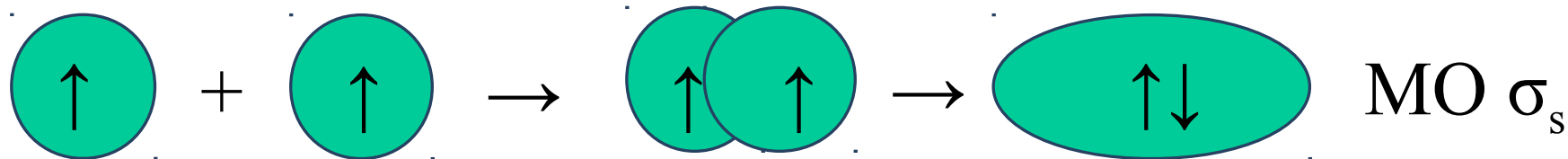
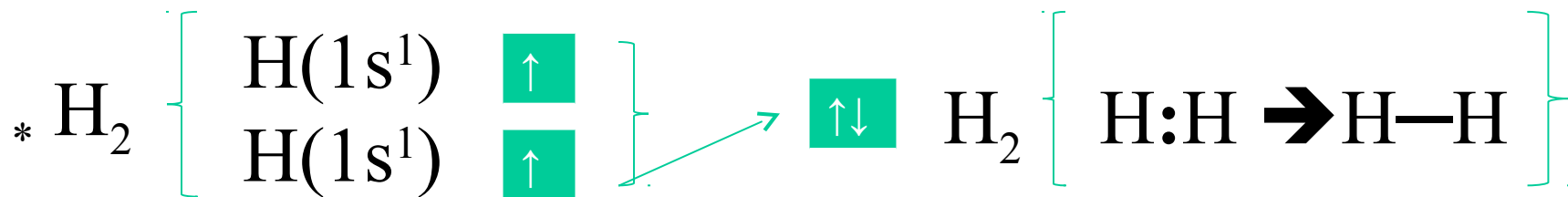


d-d

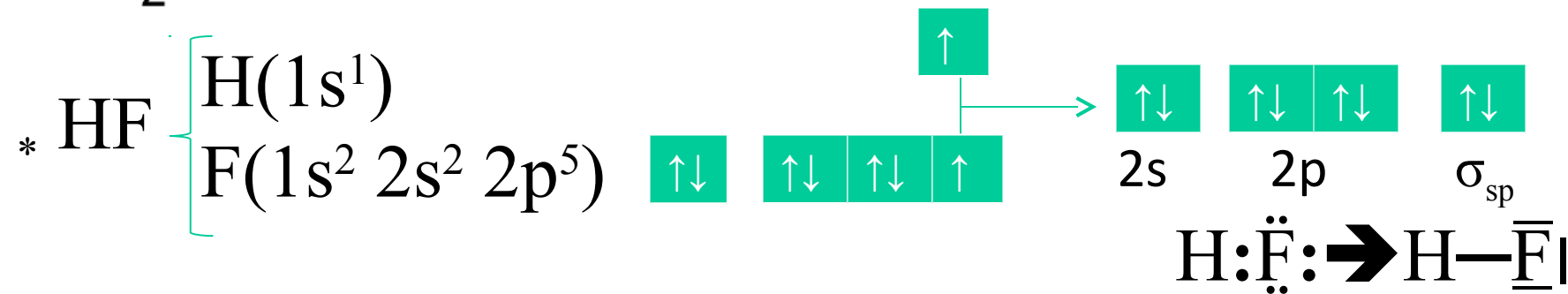
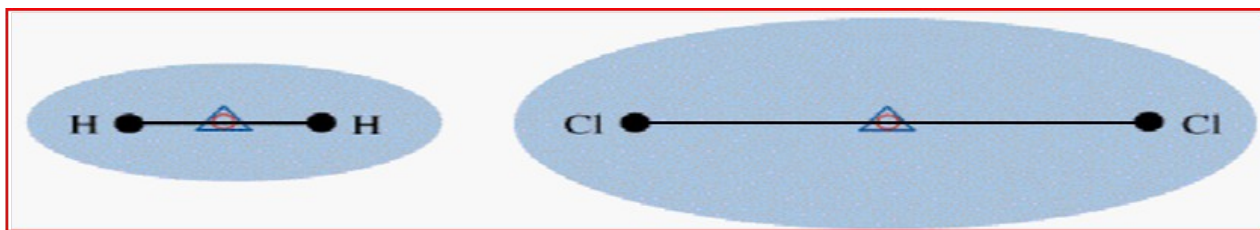
- **Liên kết  $\pi$ :** Hình thành do xen phủ bên, Kí hiệu  $\pi$

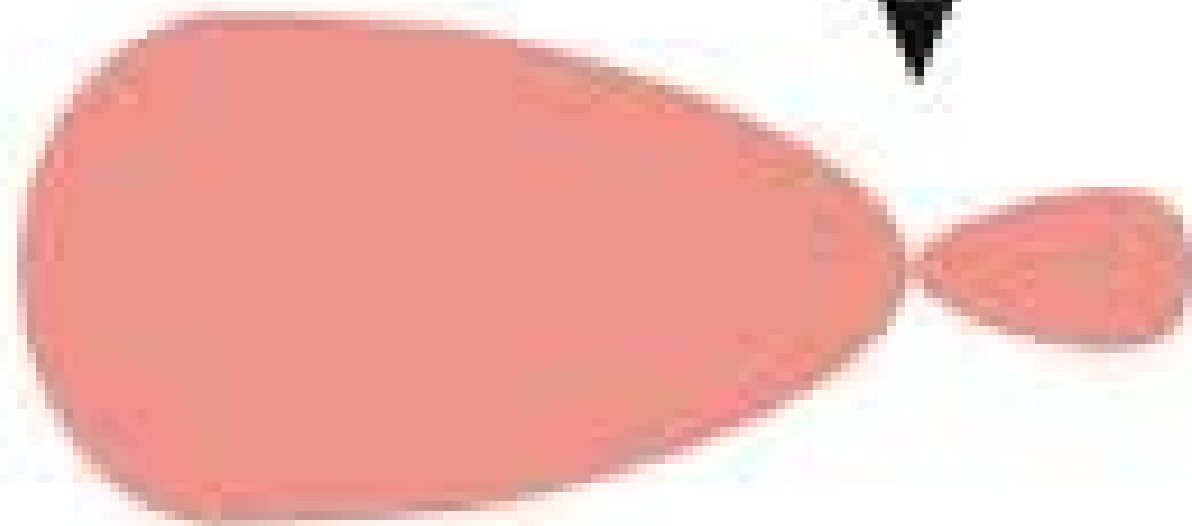
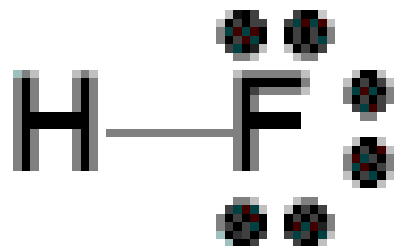
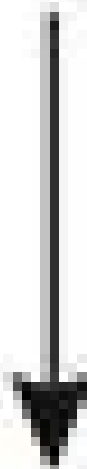
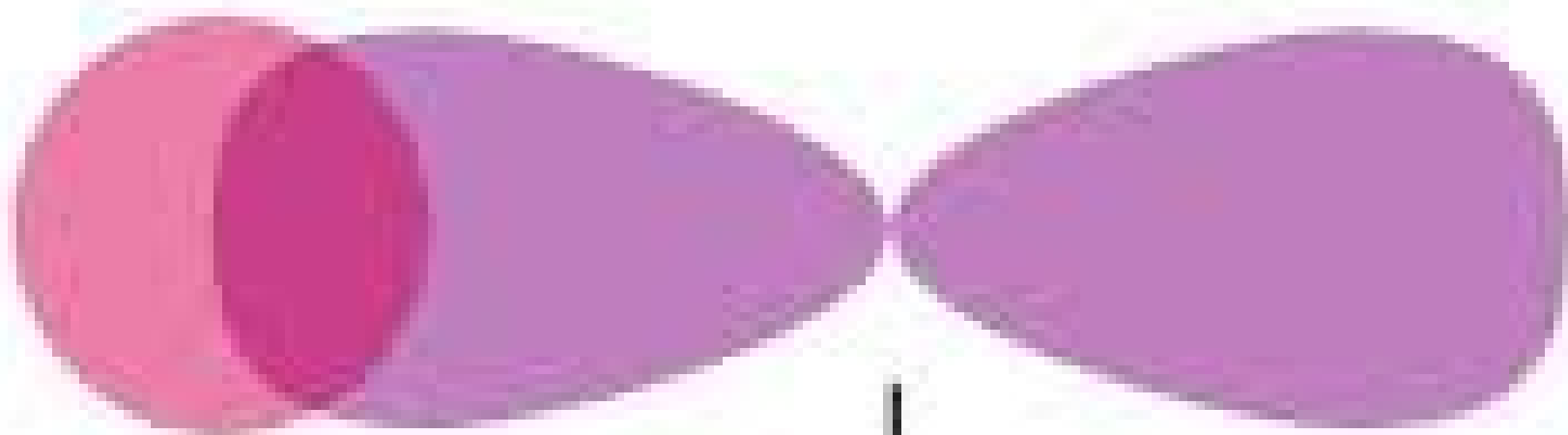


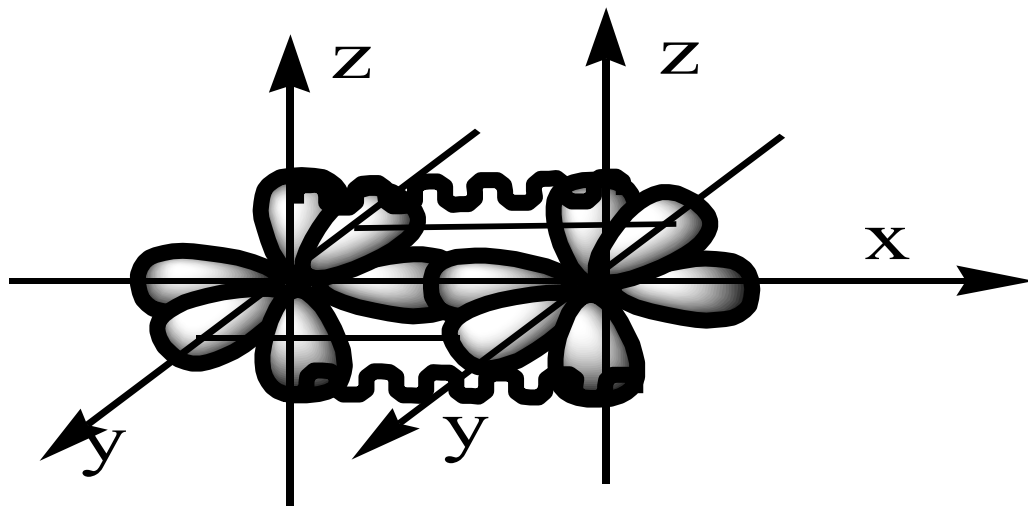
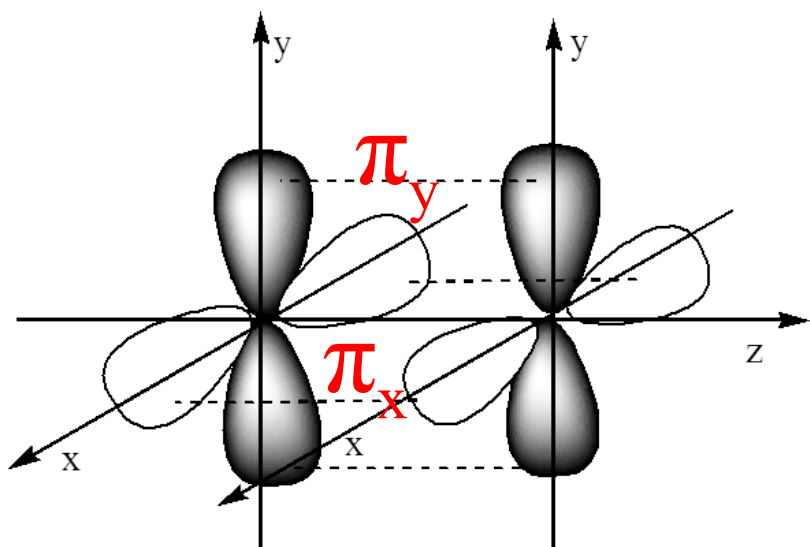
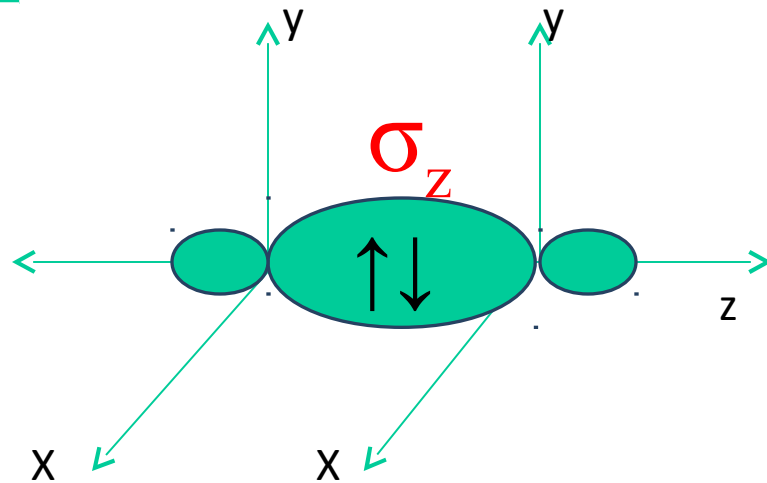
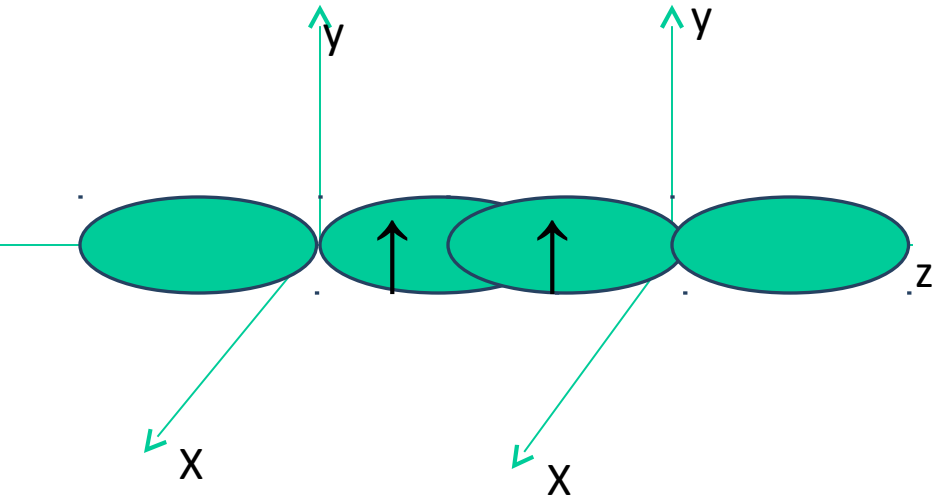
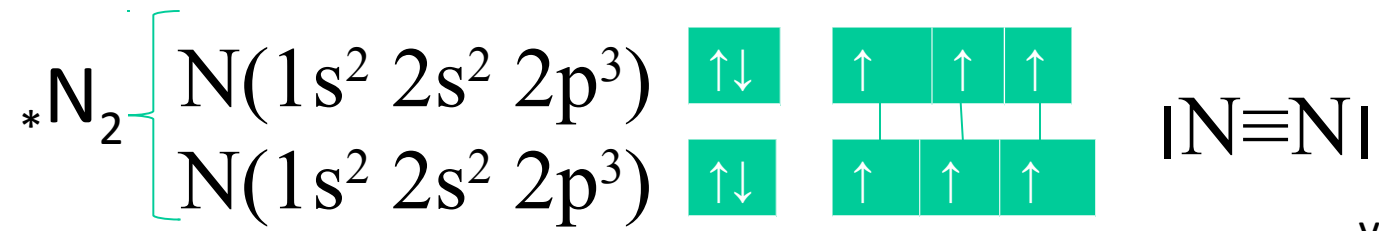
## 2. Các thí dụ:

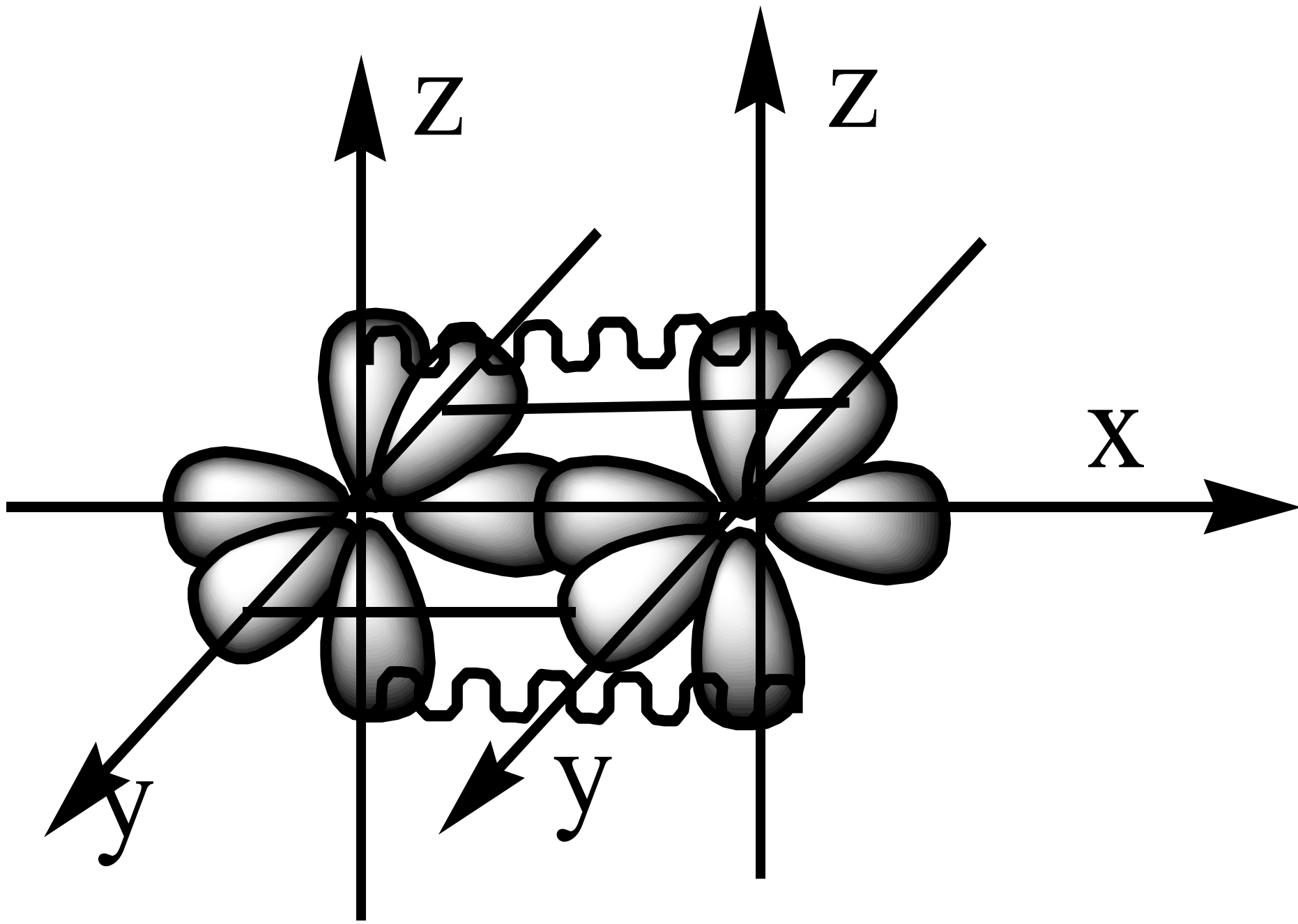


$\text{H}_2$ ,  
 $\text{Cl}_2$ :

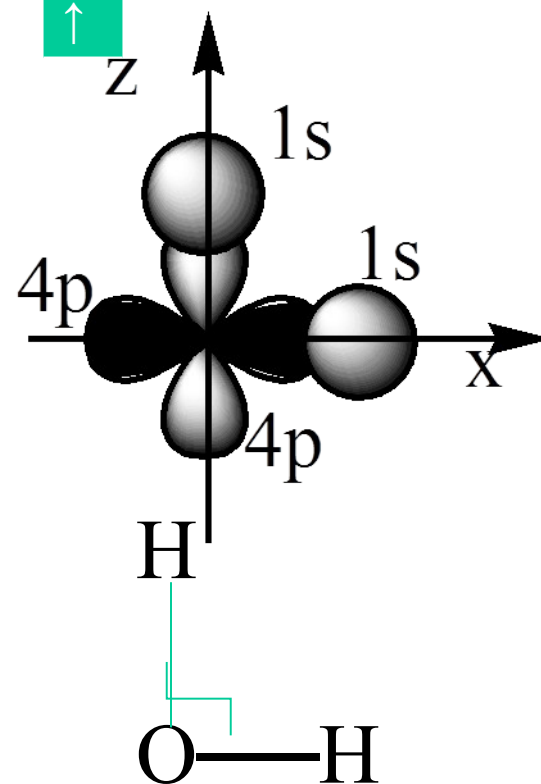
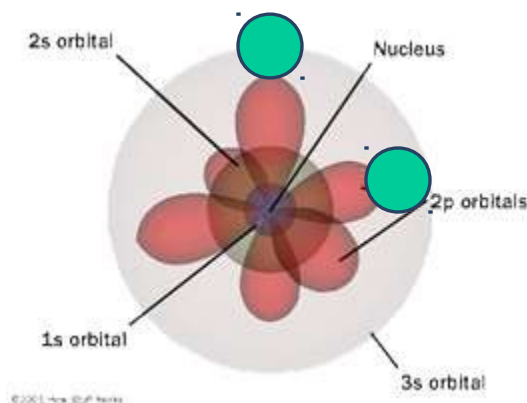
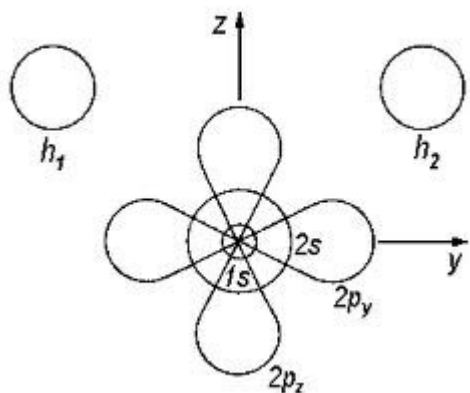
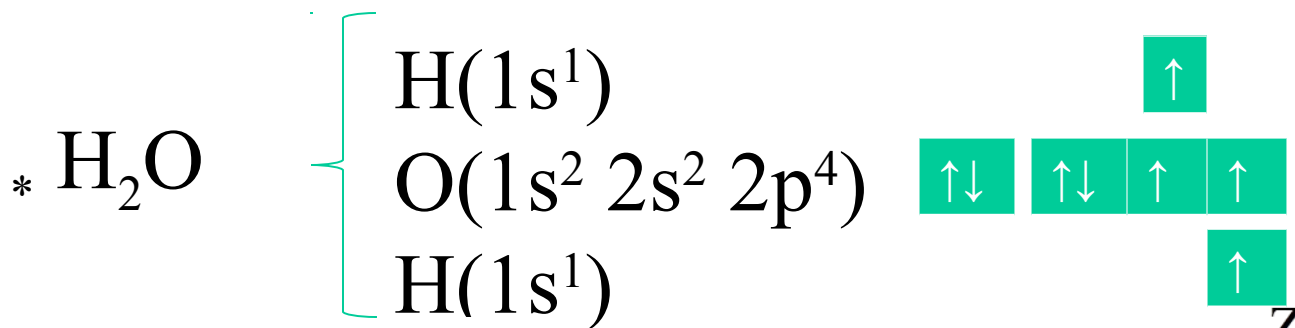






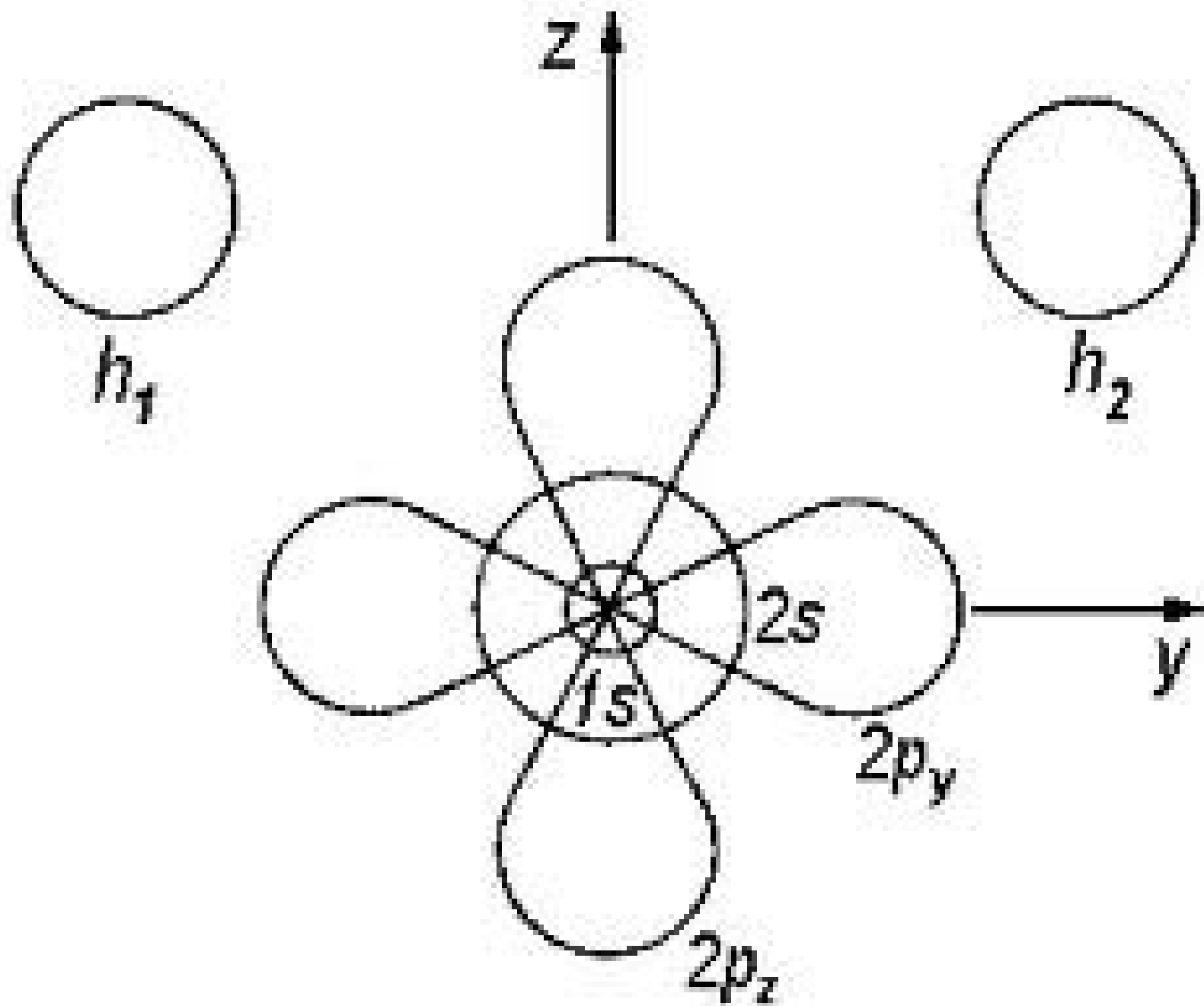


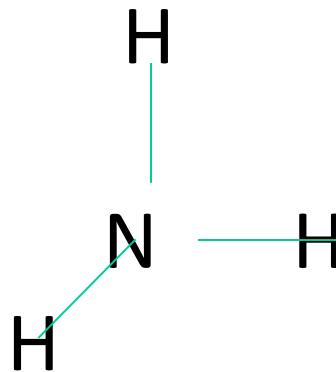
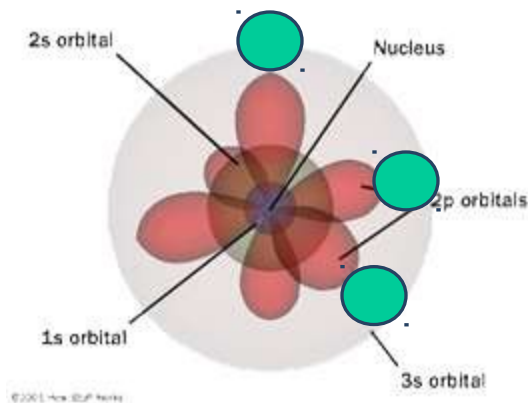
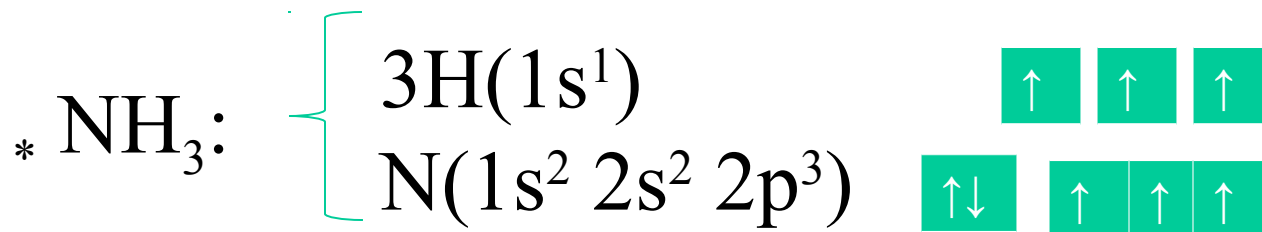




Lý thuyết:  $\text{HOH} = 90^\circ$

nhưng thực nghiệm:  $= 104,5^\circ$





Lý thuyết:  $\text{HNH} = 90^\circ$   
 nhưng thực nghiệm =  $107^\circ$

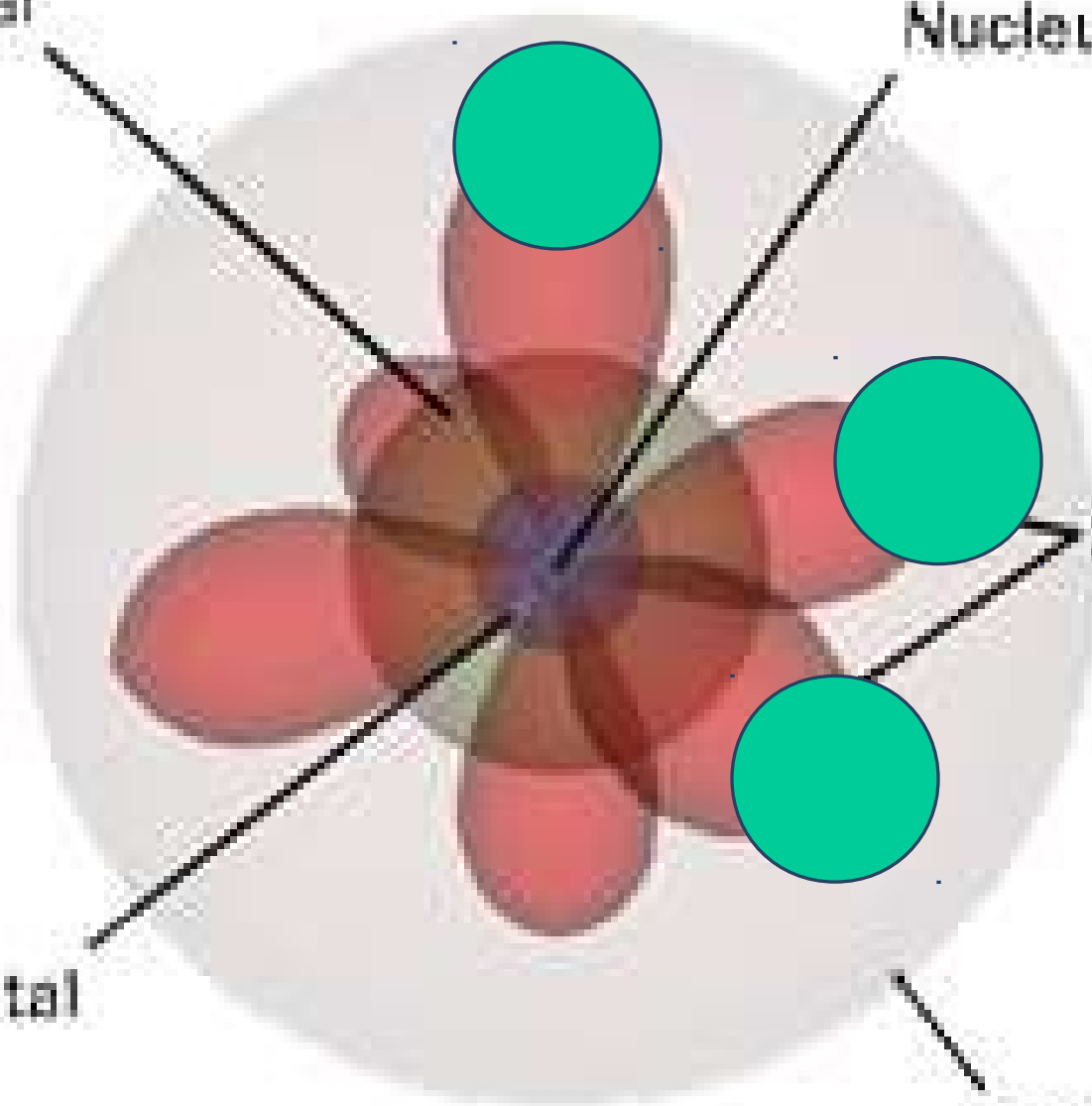
2s orbital

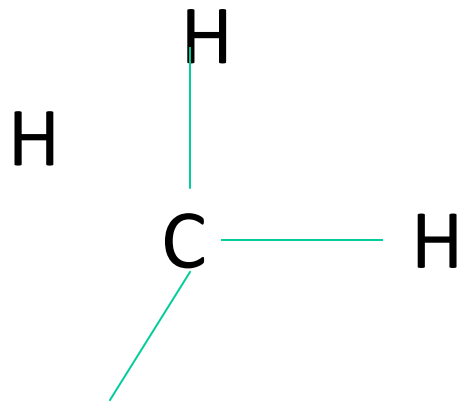
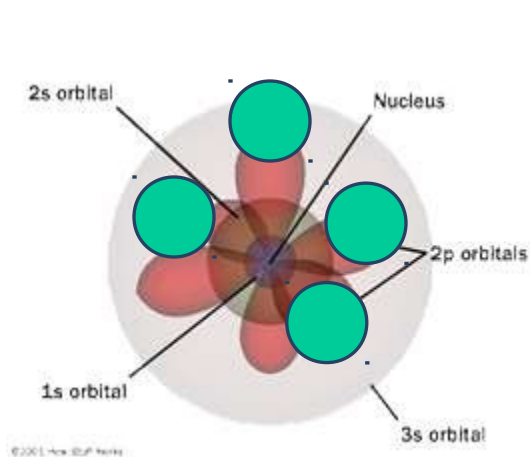
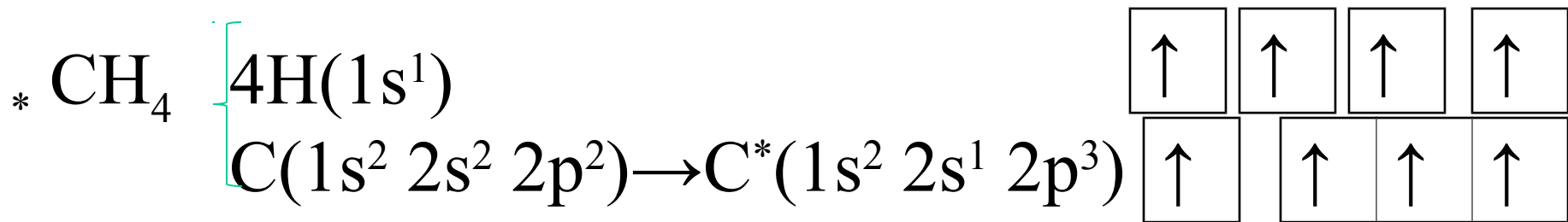
Nucleus

2p orbitals

1s orbital

3s orbital





Lý thuyết:  $\text{CH}_4$  gồm 2 loại liên kết C—H  
 3 C—H tạo thành tam diện vuông,  
 C—H thứ tư không định hướng  
 Thực nghiệm:  $\text{CH}_4$  có dạng tứ diện đều,  
 góc  $\text{HCH} = 109,5^\circ$

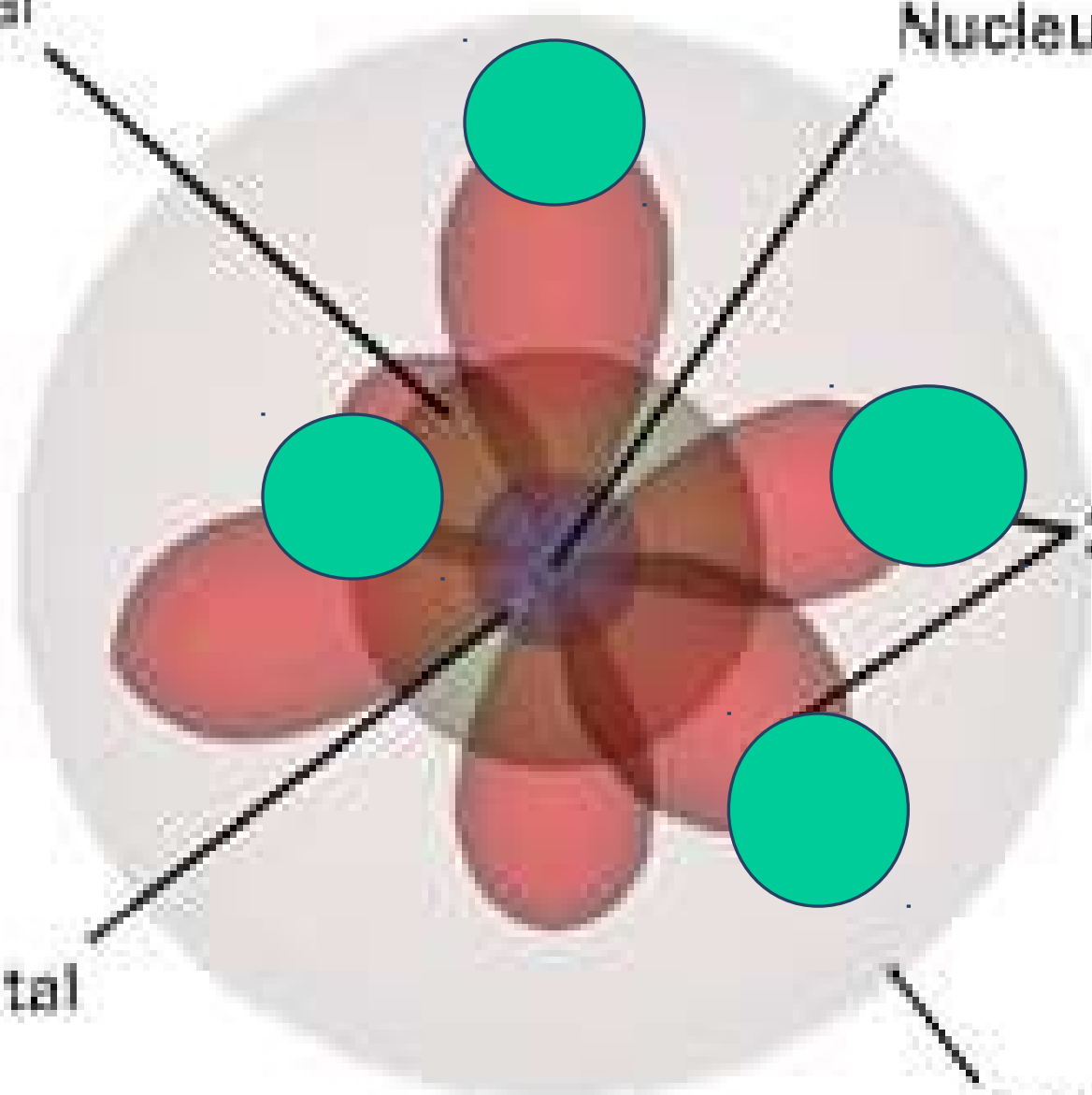
2s orbital

Nucleus

2p orbitals

1s orbital

3s orbital

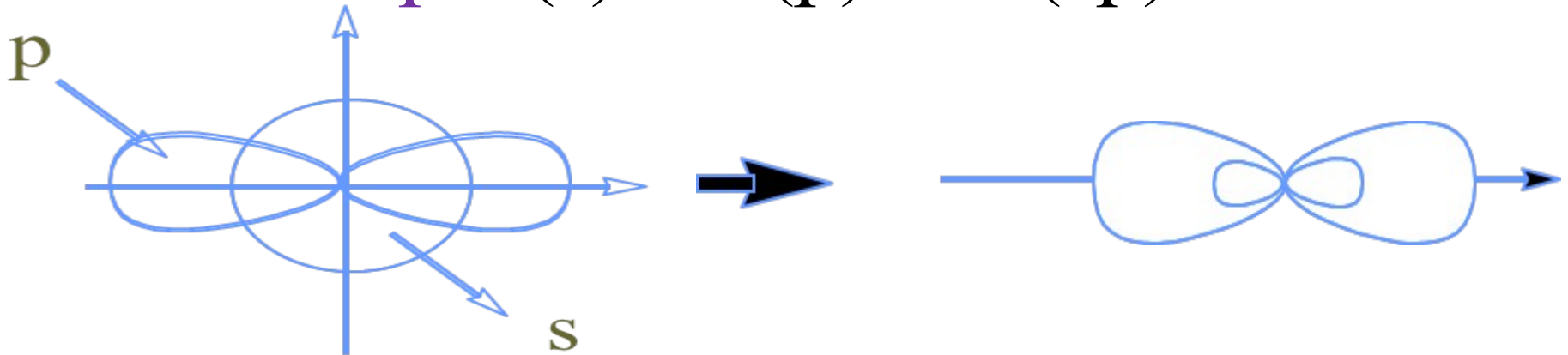


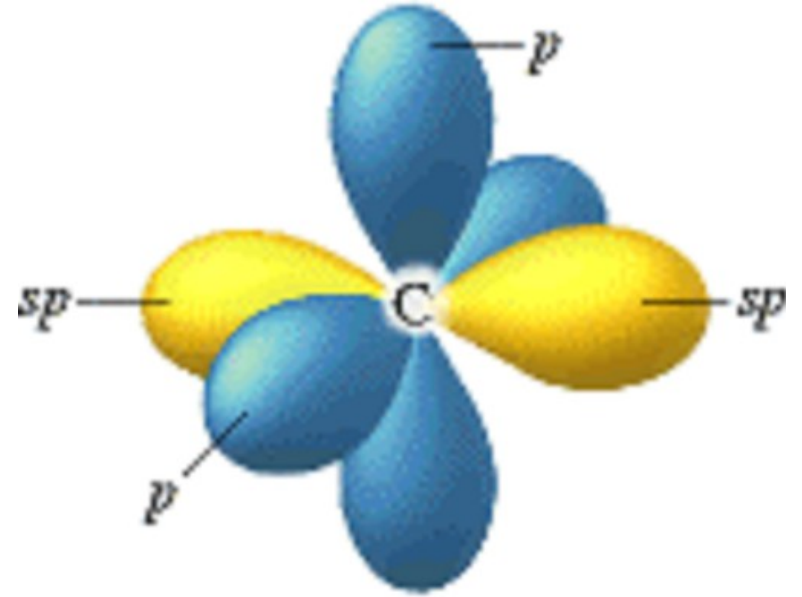
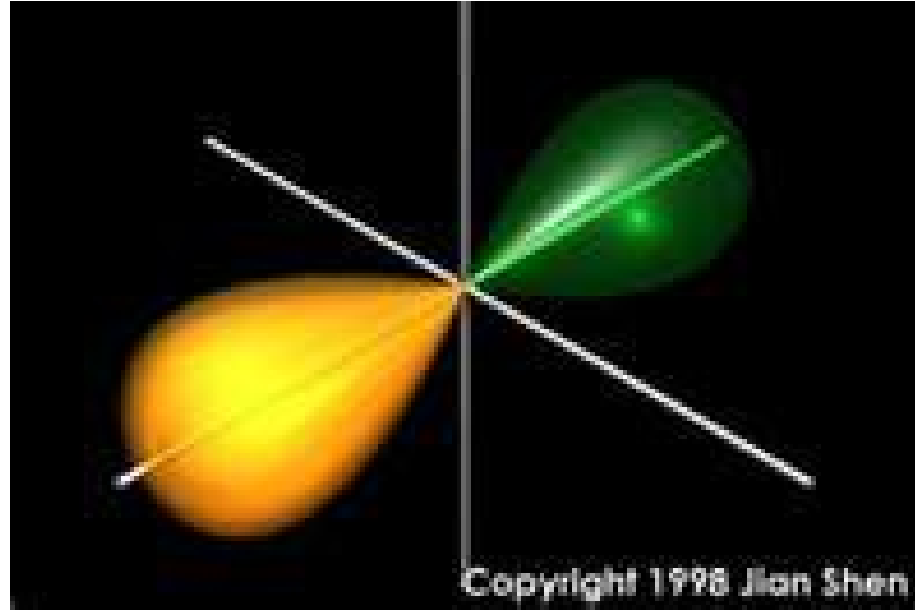
### 3. Thuyết lai hóa các AO

Trước khi tạo liên kết, 1 ng.tử tự che phủ các AO hóa trị  $\rightarrow$  những AO lai hóa có hình dáng, kích thước, E hoàn toàn giống nhau. Sau đó, nó dùng các AO 1.hóa này che phủ với các AO của những ng.tử khác để tạo 1.k

a. Các trạng thái lai hóa:

$\alpha$ . Lai hóa sp:  $1(s) + 1(p) \rightarrow 2(sp)$





Trạng thái lai hóa  $sp$  dùng để giải thích cơ cấu của các phân tử thẳng hàng.

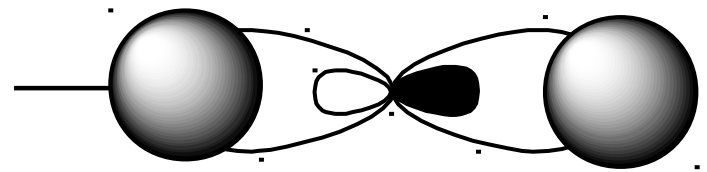
Trong hóa hữu cơ, lai hóa  $sp$  dùng để giải thích cơ cấu của carbon liên kết ba ( $C \equiv$ )

$sp$                    $sp$   $sp$

Td:  $O=C=O$  ;  $HC \equiv CH$

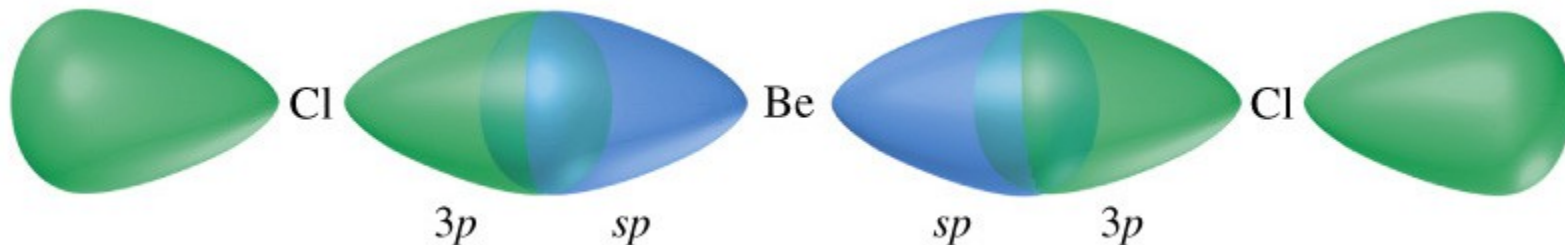
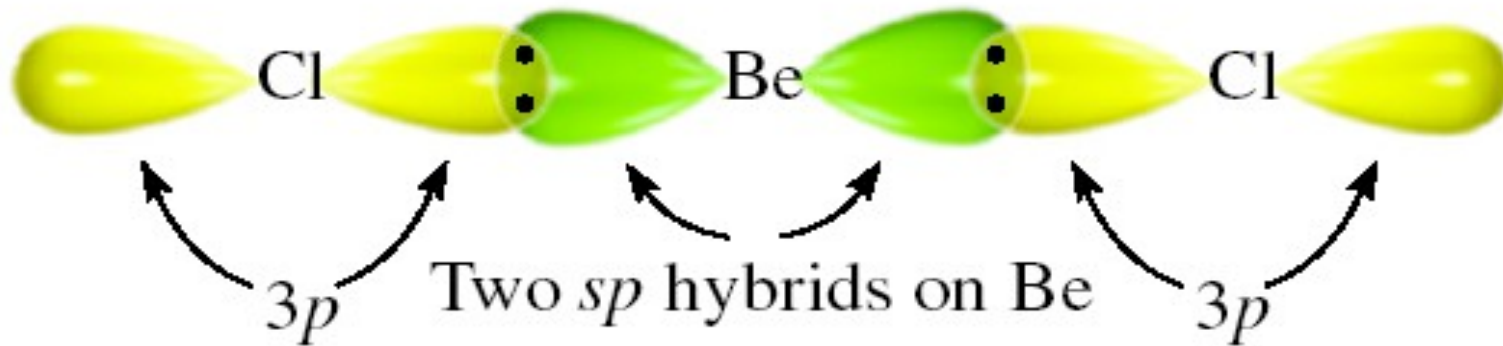


Td:  $\text{BeH}_2$ :  $\text{Be}(2 + 2.1=4) \Rightarrow \text{Be}(\text{sp})$

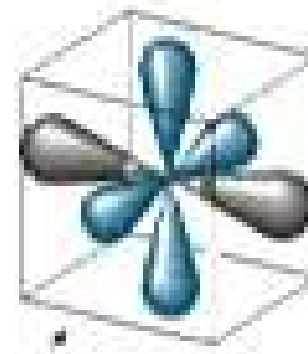
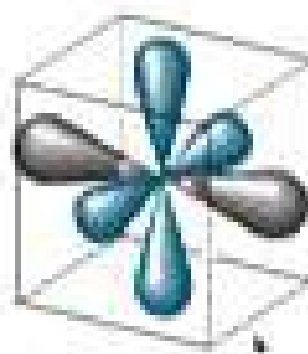


phân tử  $\text{BeH}_2$

$\text{BeCl}_2$ :  $\text{Be}(2 + 2.1 = 4) \Rightarrow (\text{sp})$

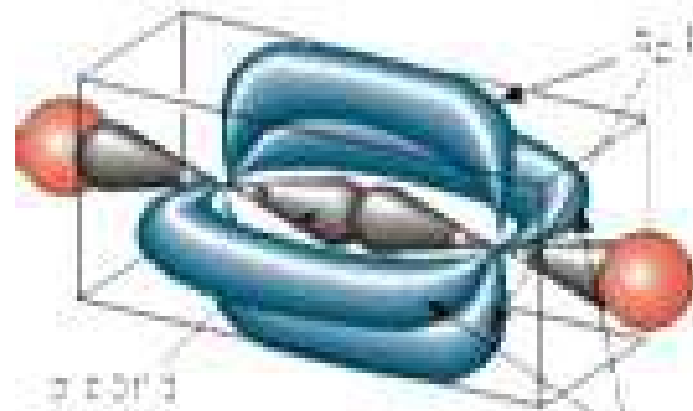


Hydrogen  
1s orbitals



2s and 2p orbitals of  
each carbon atom

(red lobes indicate positive phase, blue lobes  
negative phase)



sigma bond

pi bond

pi bond

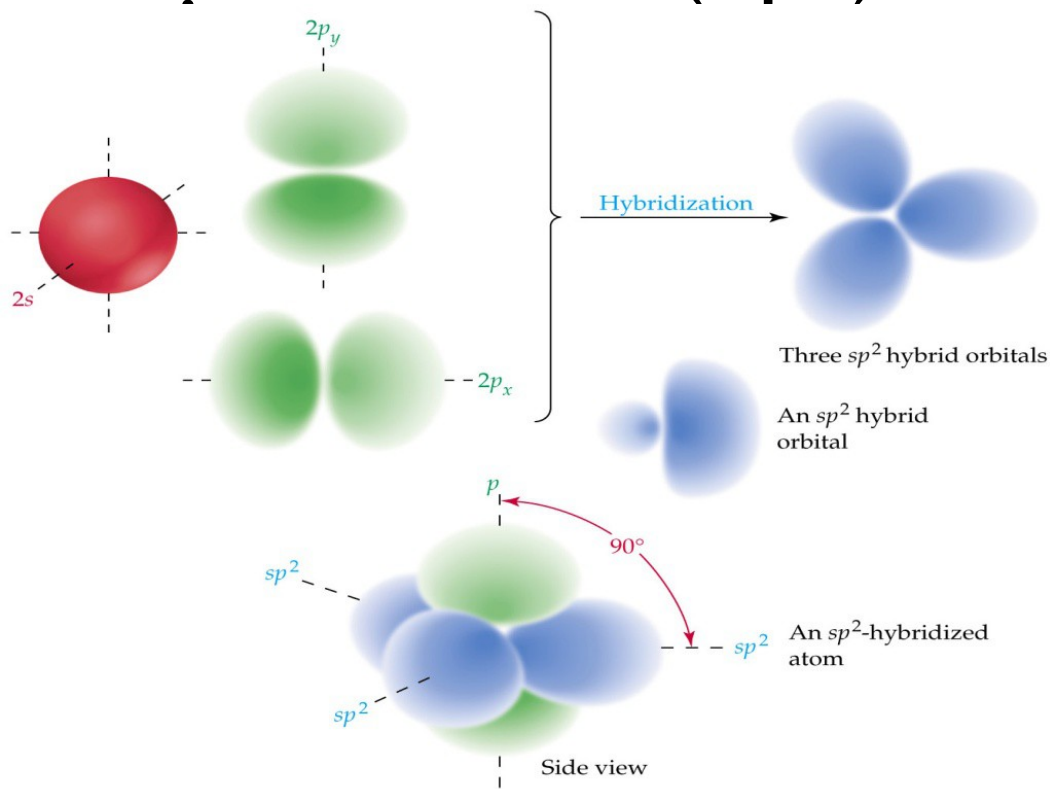
=

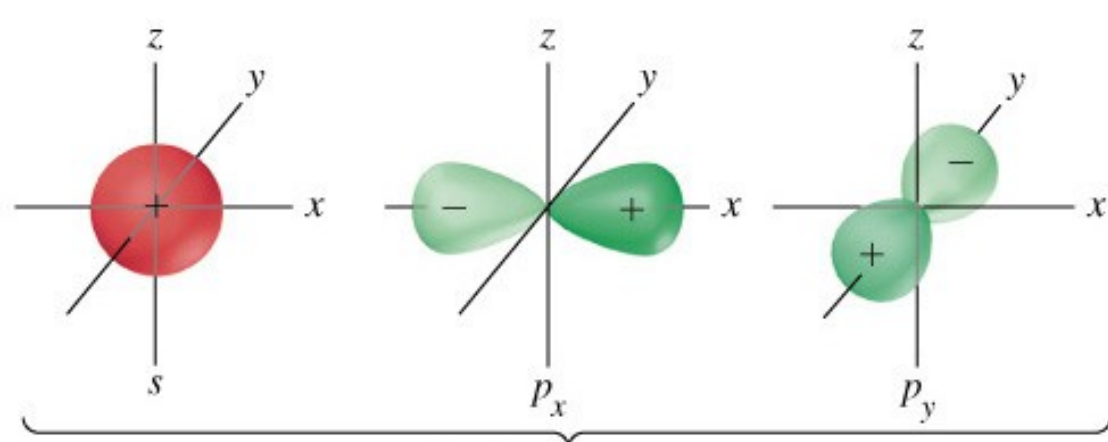


cylindrical electron  
density distribution  
of ethyne

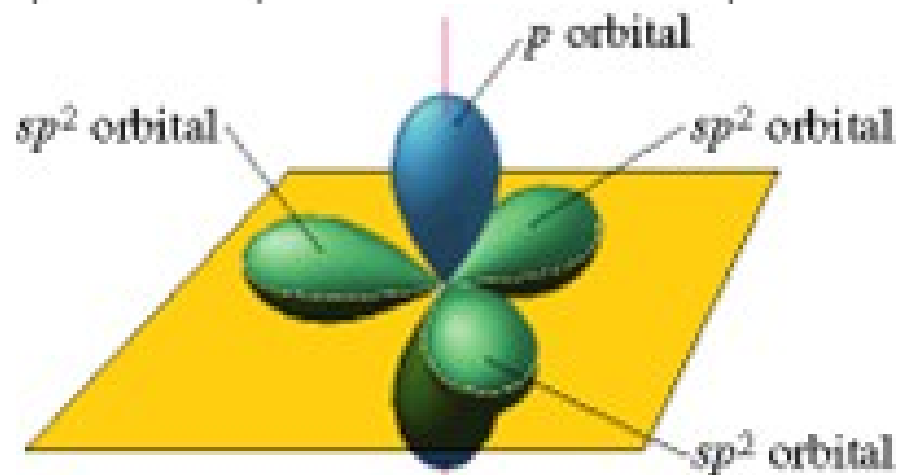
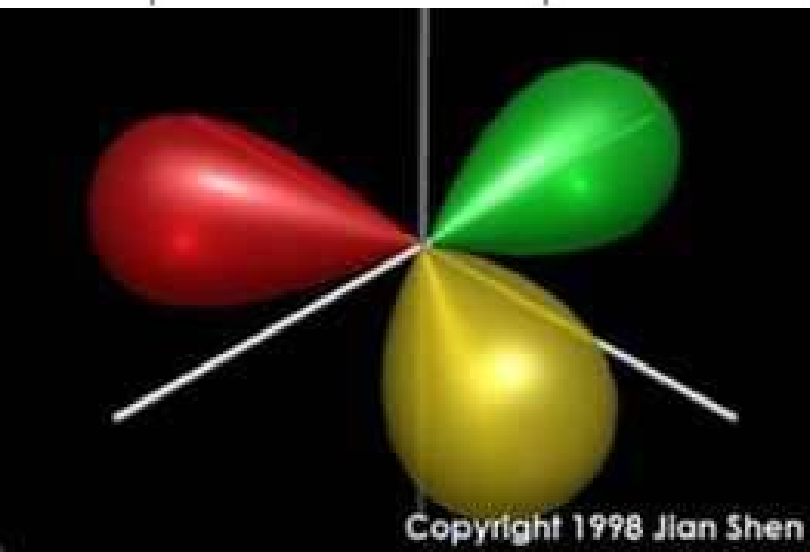
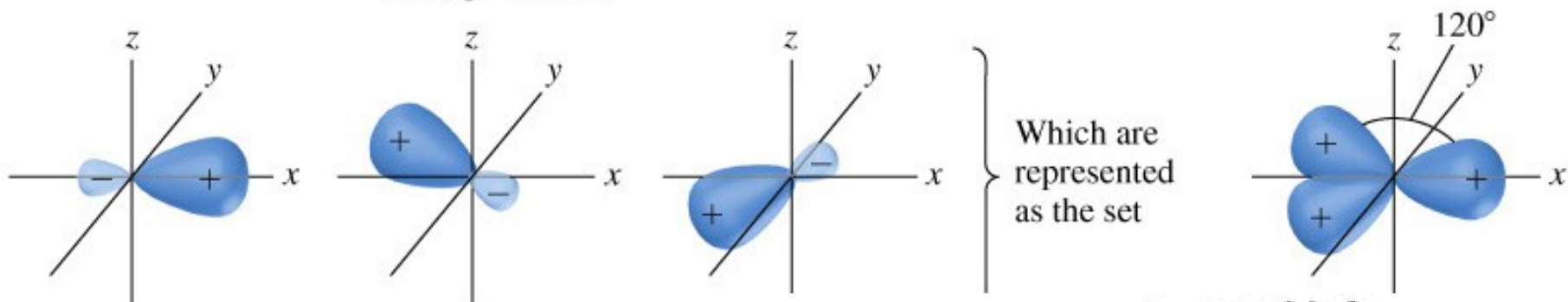


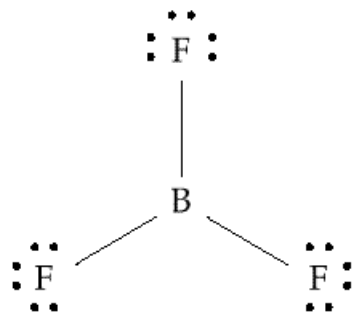
$\beta$ .Trạng thái lai hóa  $sp^2$ :  $1(s) + 2(p) \rightarrow 3(sp^2)$   
 Có cơ cấu tam giác đều: tâm là nhân ng.tử,  
 3 trục đ.x của  $3(sp^2)$  hướng ra 3 đỉnh của  $\Delta$   
 Trạng thái lai hóa  $sp^2$  dùng để giải thích các ph.tử có dạng  $\Delta$  hoặc góc.Trong hóa hữu cơ: giải thích cơ cấu của C liên kết đôi ( $C =$  )



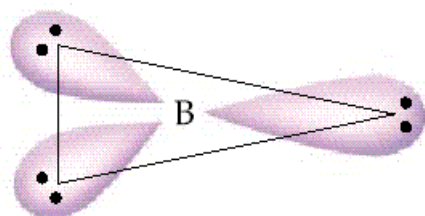


Combine to generate  
three  $sp^2$  orbitals

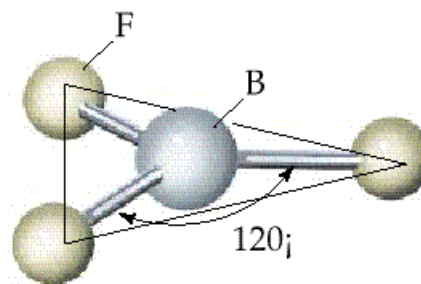




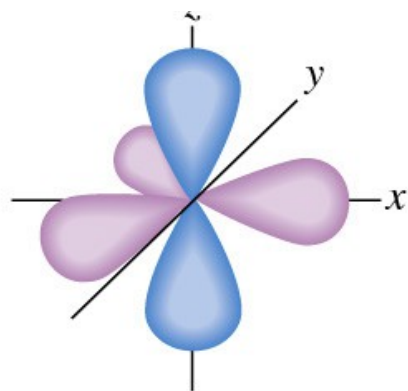
Lewis dot structure



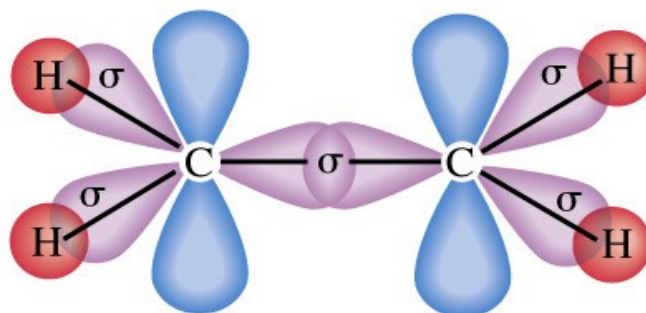
Electron-pair geometry



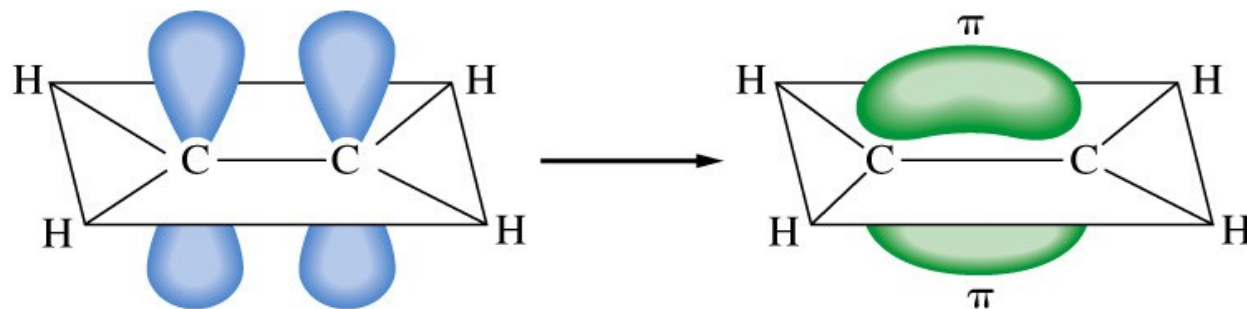
Molecular geometry



The set of orbitals  $sp^2 + p$



Sigma ( $\sigma$ ) bonds

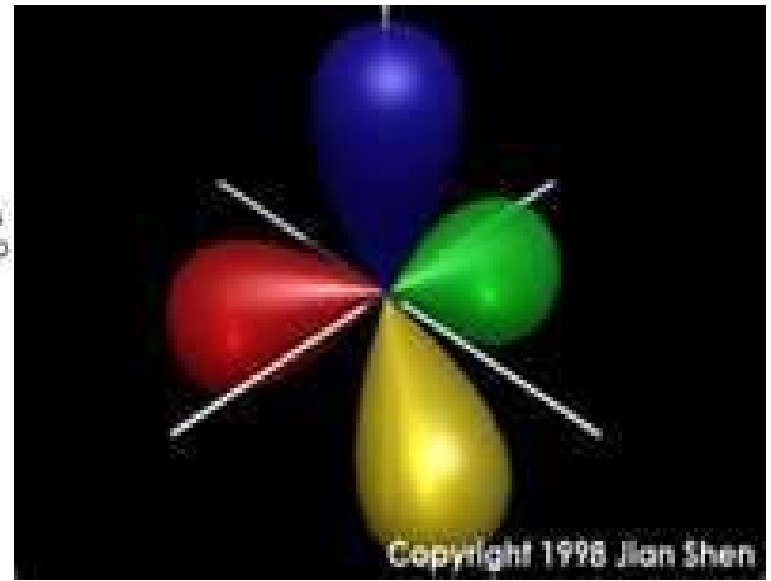
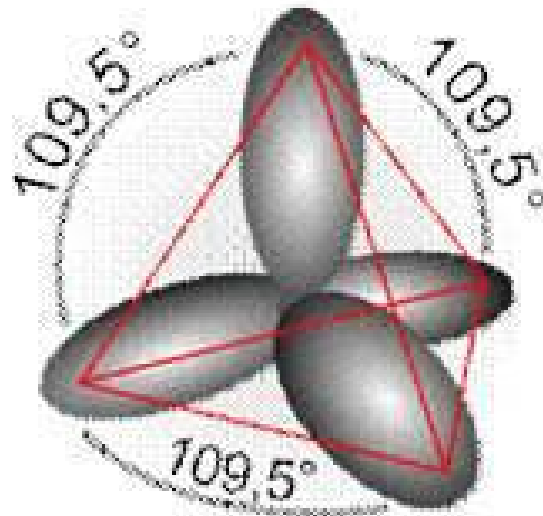
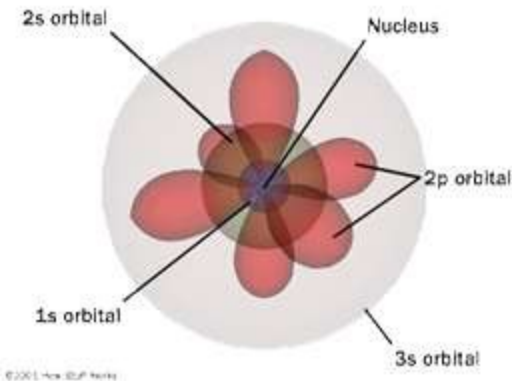


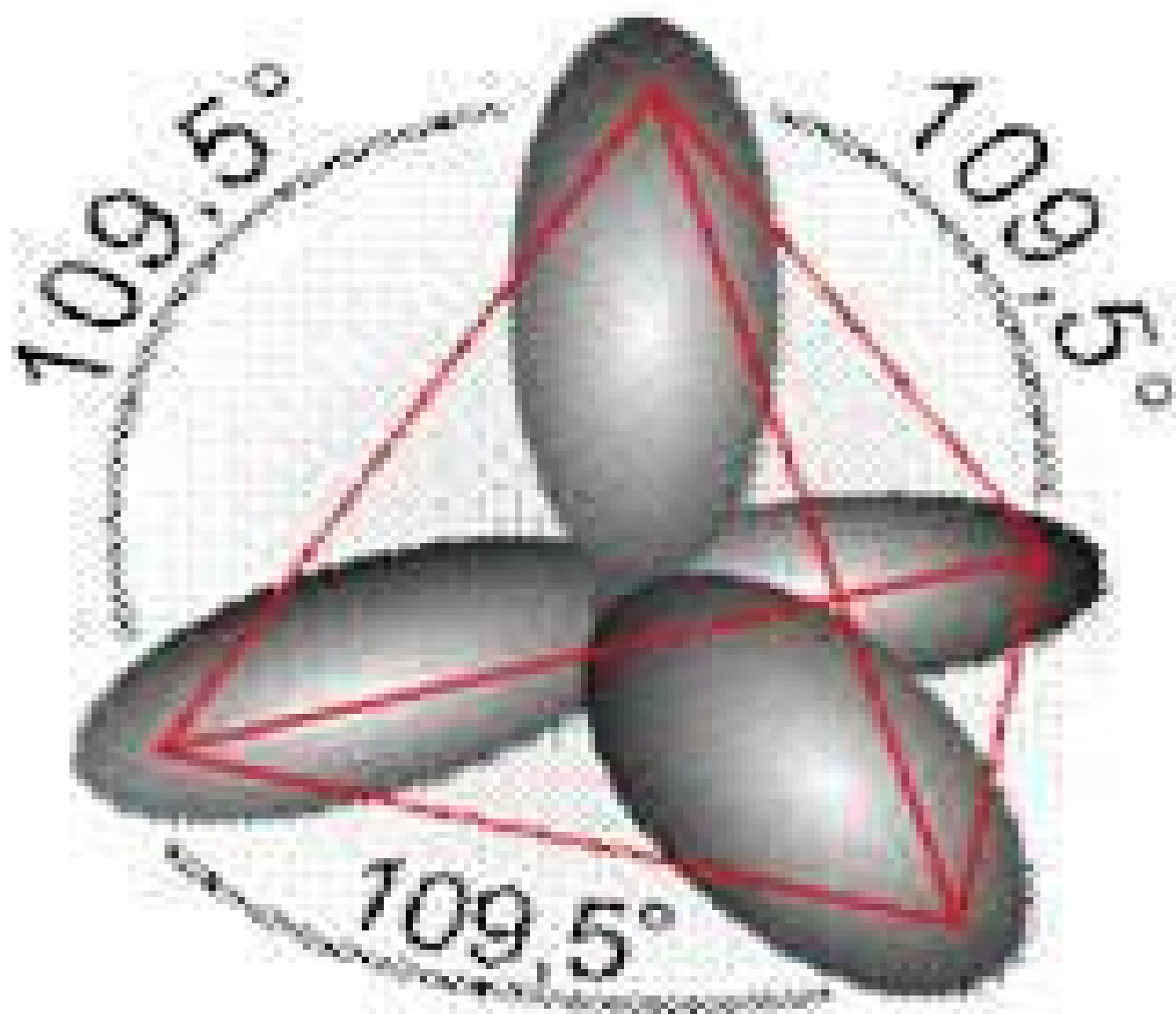
Overlap of  $p$  orbitals leading to pi ( $\pi$ ) bond

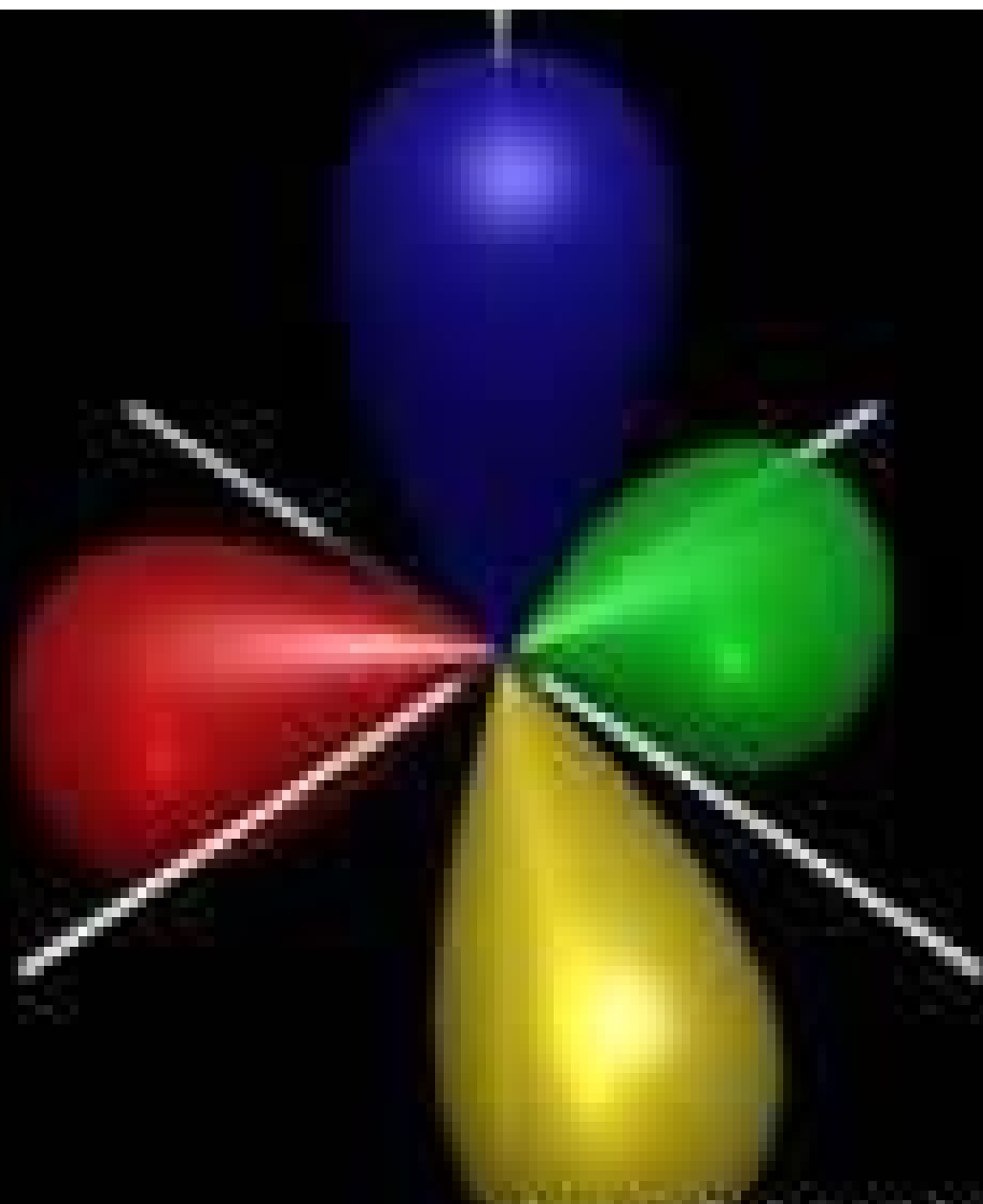
## γ. Trạng thái lai hóa $sp^3$ :

$1(s) + 3(p) \rightarrow 4(sp^3)$  :tứ diện đều, 4 trục đx  
Hướng ra 4 đỉnh của tứ diện đều

Trạng thái lai hóa  $sp^3$  được dùng để giải thích cơ cấu của phân tử có dạng tứ diện, tháp tam giác, góc. Trong hóa hữu cơ, dùng để giải thích cơ cấu của C nối đơn.



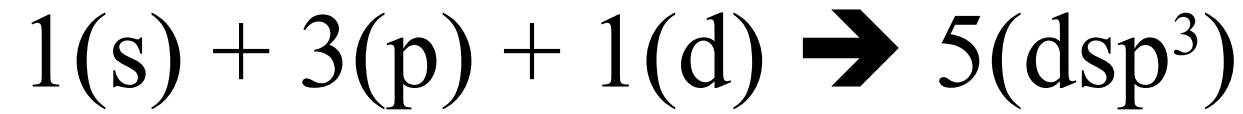




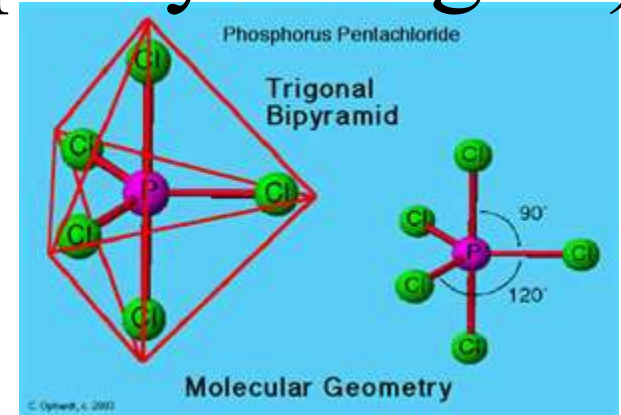
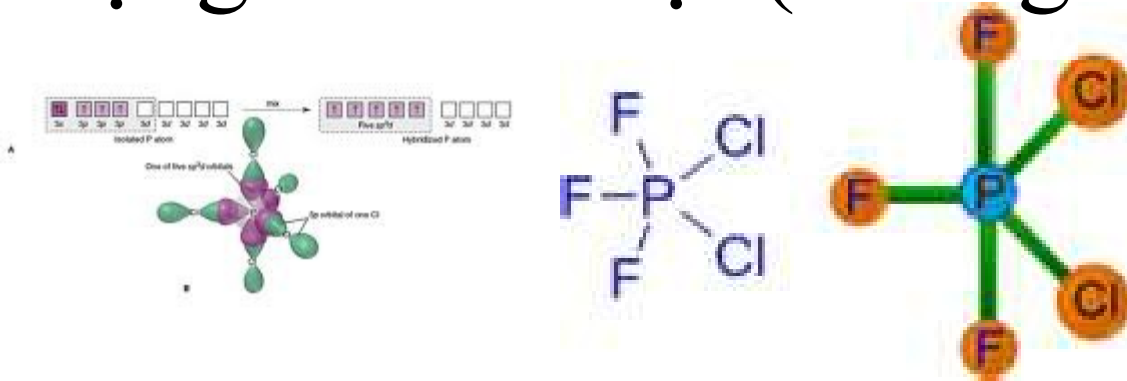
Copyright 1998 Jian Shen



δ. Trạng thái lai hóa  $dsp^3$ ;



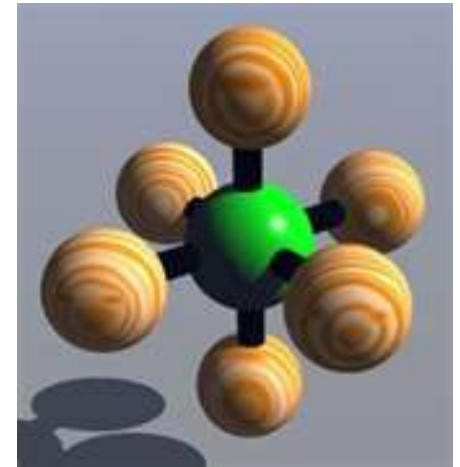
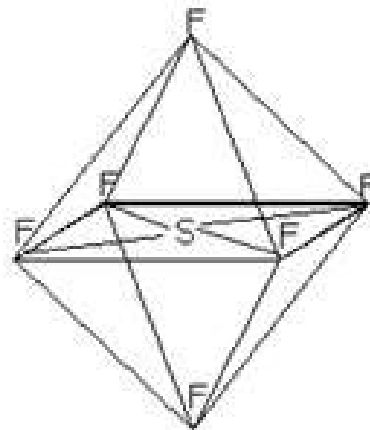
Dạng hình 6 mặt ( lưỡng tháp đáy tam giác)



ε. Trạng thái lai hóa  $d^2sp^3$



Có dạng hình 8 mặt  
(lưỡng tháp đáy  
hình vuông)



## 4. Dự đoán cơ cấu lập thể của hóa chất

Xem chất:  $ML_n$  ;  $ML_n^{x+}$  ;  $Ml_n^{y-}$

M:ng.tổ tr.tâm(ng.tổ có số ng.tử nhỏ nhất.)

L:ligand(các ng.tổ chung quanh l.k với M)

n; chỉ số ligand (  $n \geq 2$  )

X+: đ,t(+) của cation. Y- :đ.t (-) của anion

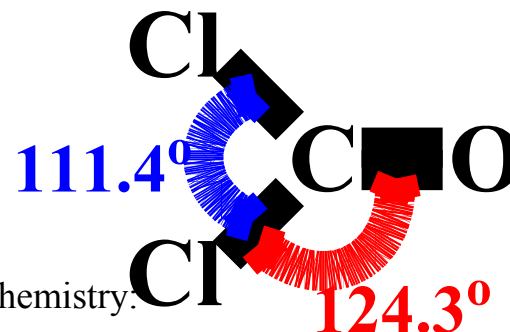
Để xác định dạng lập thể:

$$\begin{aligned} \blacksquare \sum e_{\text{th}}(M) = \sum e_{\text{tc}}(M) &+ \sum e: \text{ các L (1L góp} \\ &1e \text{ trừ O; S} = 0e) \\ &+ y(e) \text{ nếu là anion} \\ &- x(e) \text{ nếu là cation} \end{aligned}$$

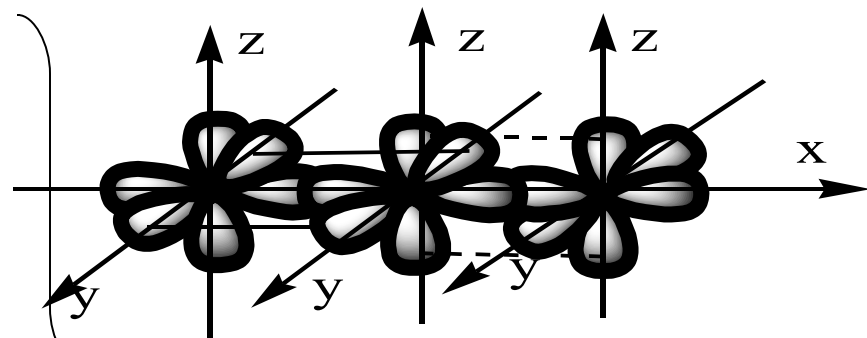
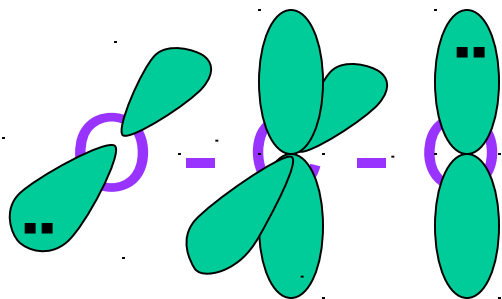
▪ Xác định trạng thái lai hóa của (M) và dạng lập thể

$\Sigma e_{htlh}$ :	$\Sigma AOl_{h}$ :	tr.thái lh	dạng lập thể
4	2	$sp$	thẳng hàng
6	3	$sp^2$	tam giác; góc
8	4	$sp^3$	tứ diện, tháp, góc
10	5	$dsp^3$	lưỡng tháp đáy $\Delta$
12	6	$d^2sp^3$	hình bát diện

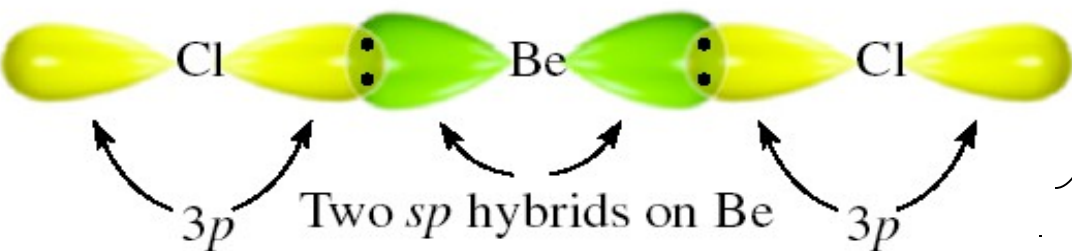
- \* Các cặp e hóa trị phải được phân bố cách xa nhau nhất để có được lực đẩy nhỏ nhất giữa chúng
- \* Hiệu ứng lập thể giảm dần: Cặp e không liên kết(K) > cặp e liên kết(L) > e không liên kết [K(1)]
- \* Lực đẩy của các cặp e giảm dần theo thứ tự sau:  $KK > KL > LL > K(1)L$
- \* e trong liên kết bội đẩy > e liên kết đơn.



Td:  $\text{CO}_2$ :  $\text{C}(4 + 2.0 = 4) \Rightarrow \text{sp} \Rightarrow \text{O}=\text{C}=\text{O}$

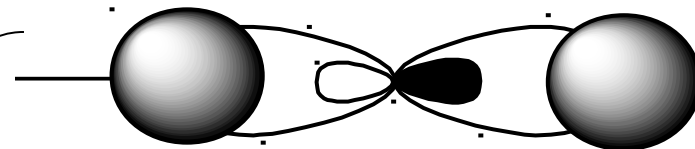


$\text{BeCl}_2$ :  $\text{Be}(2 + 2.1 = 4) \Rightarrow \text{sp}$



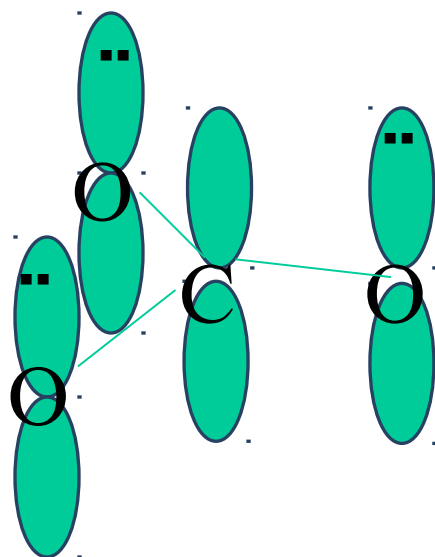
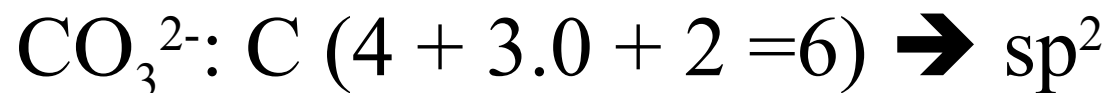
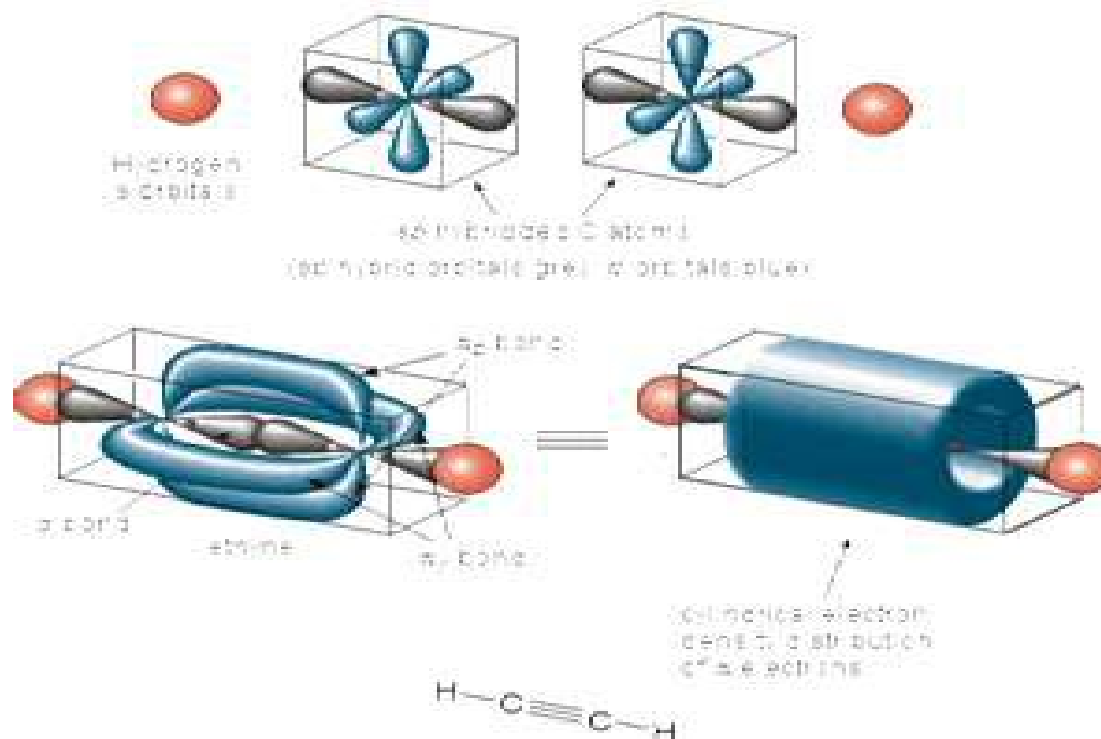
$$Blk = 1(\sigma) + \frac{2.2e}{2}(\pi) = 2$$

$\text{BeH}_2$ :  $\text{Be}(2 + 2.1 = 4) \Rightarrow \text{sp}$



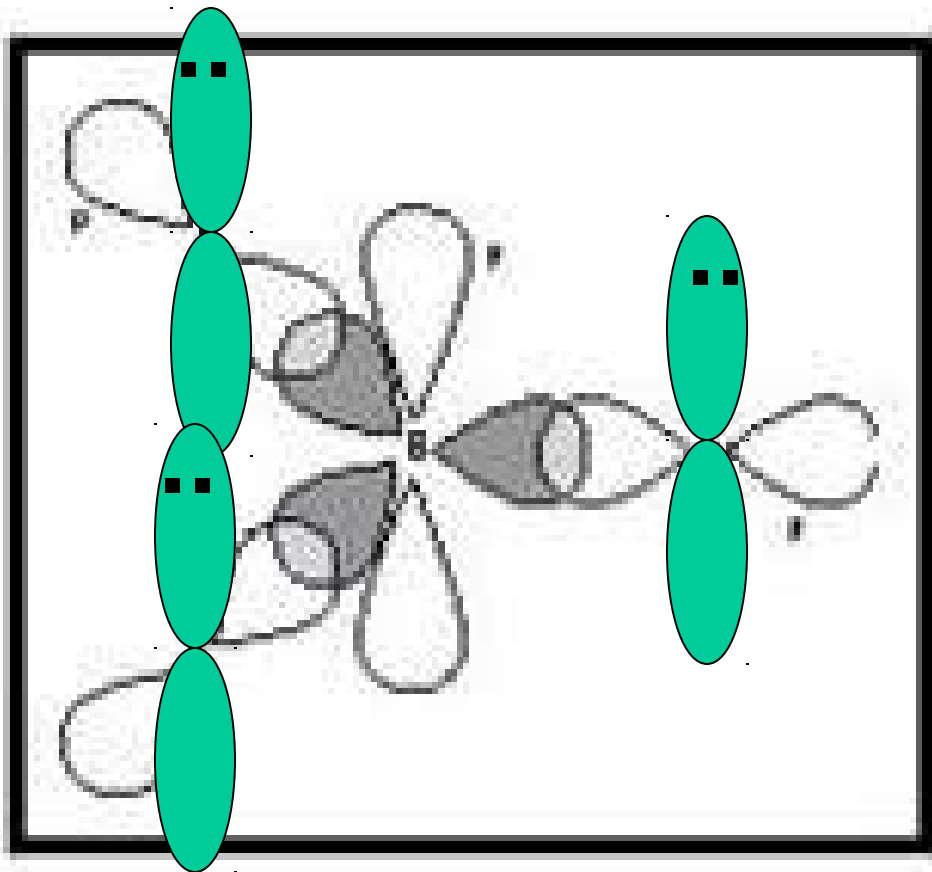
phân tử  $\text{BeH}_2$

$$Blk = 1$$

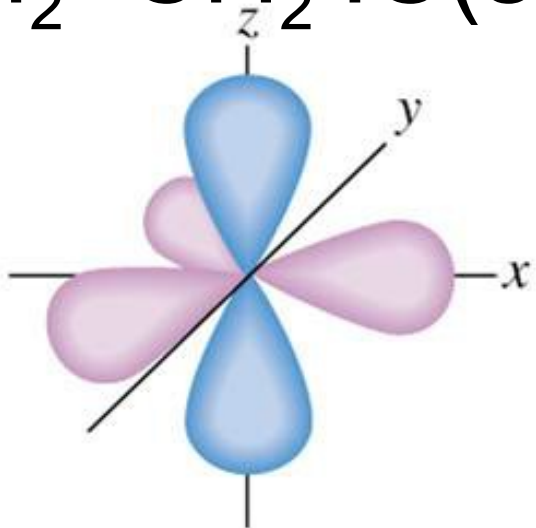
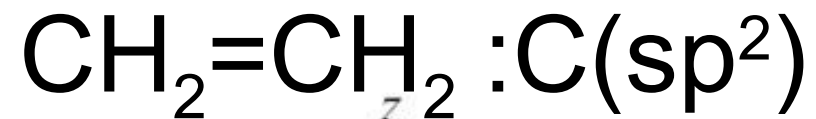


$$\text{Bk} = 1(\sigma) + \frac{1.2(e)}{3.2} (\pi) = 1,33$$

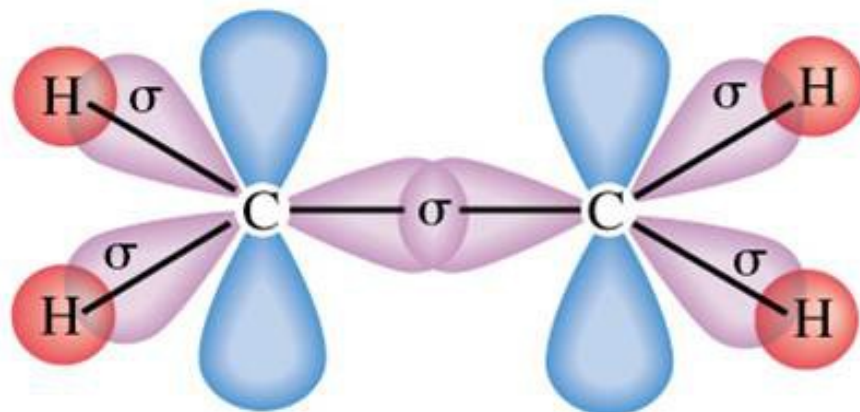
$\text{BF}_3$ :  $\text{B}(3+3.1=6\text{e}) \Rightarrow \text{sp}^2$



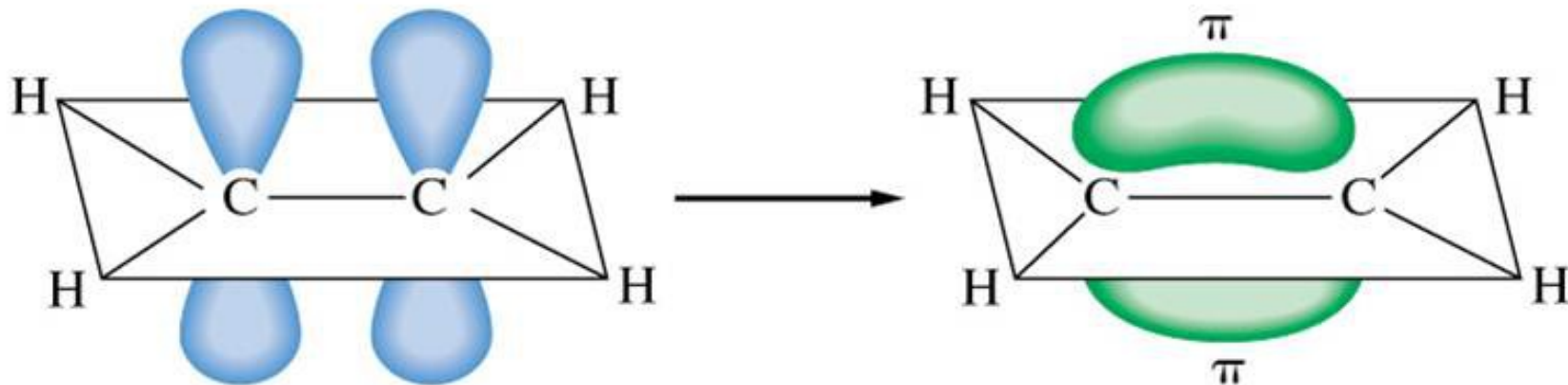
$$\text{Bbk} = 1(\sigma) + \frac{1.2(\text{e})}{3.2} (\pi) = 1,33$$



The set of orbitals  $\text{sp}^2 + p$



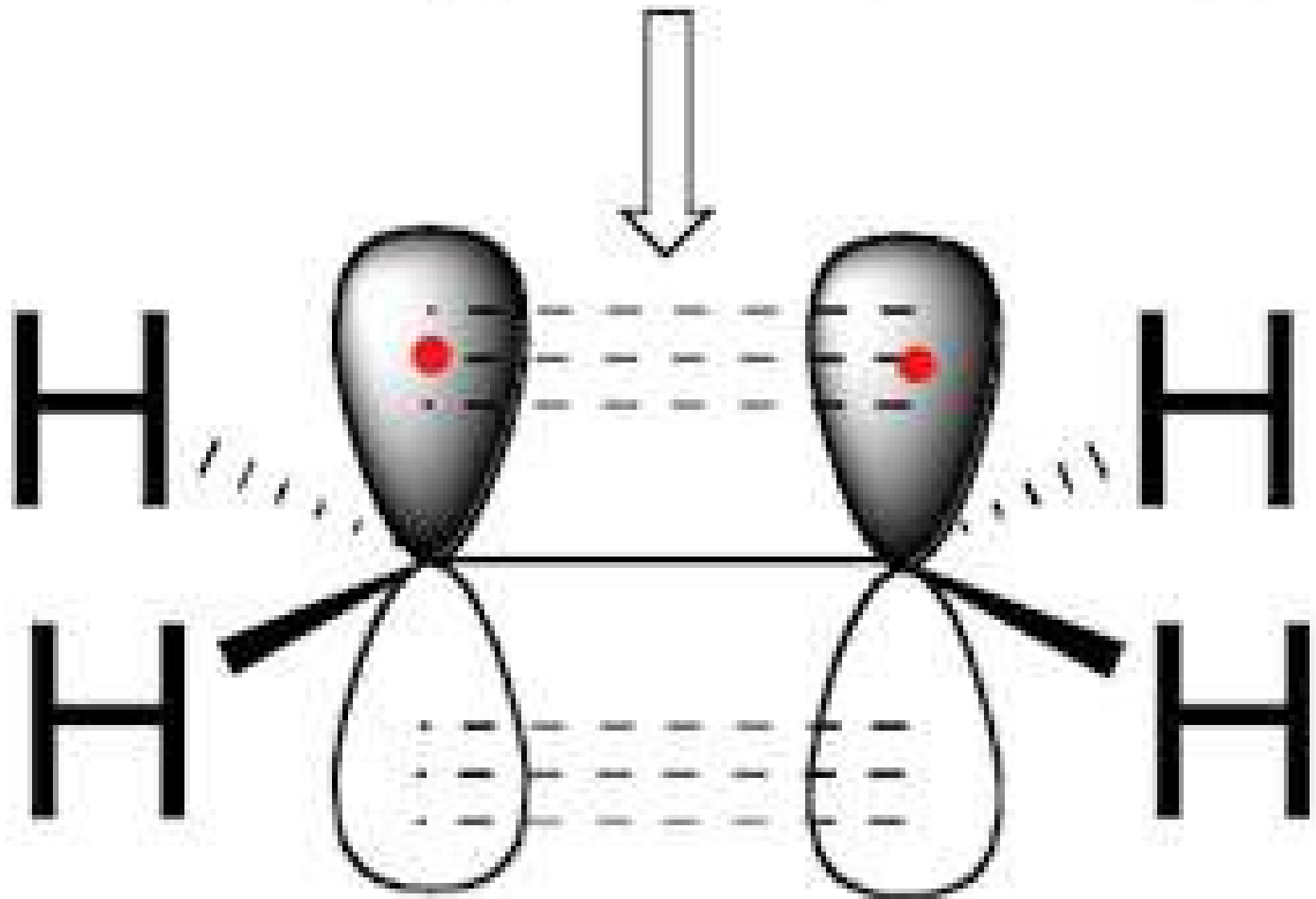
Sigma ( $\sigma$ ) bonds

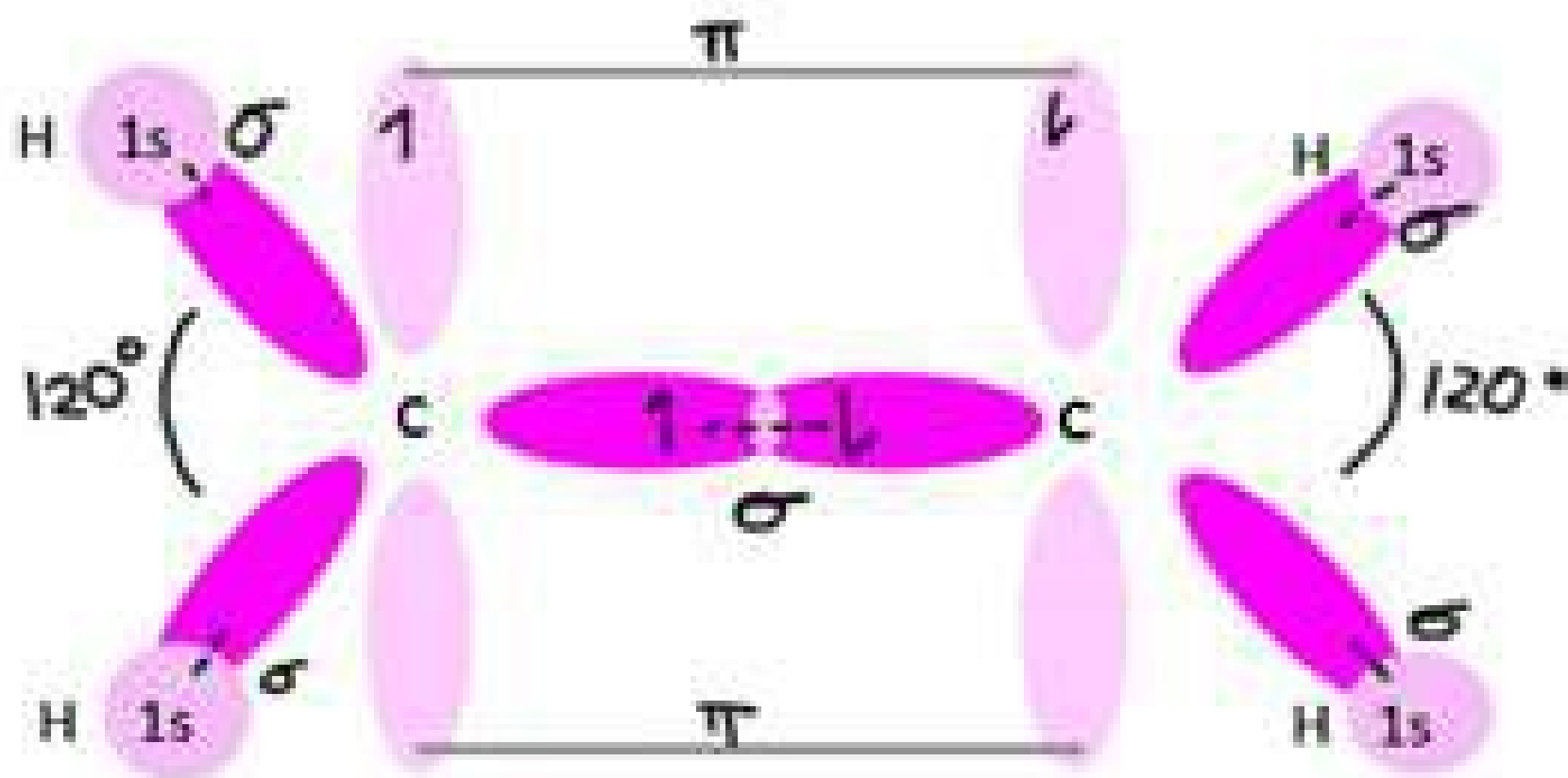


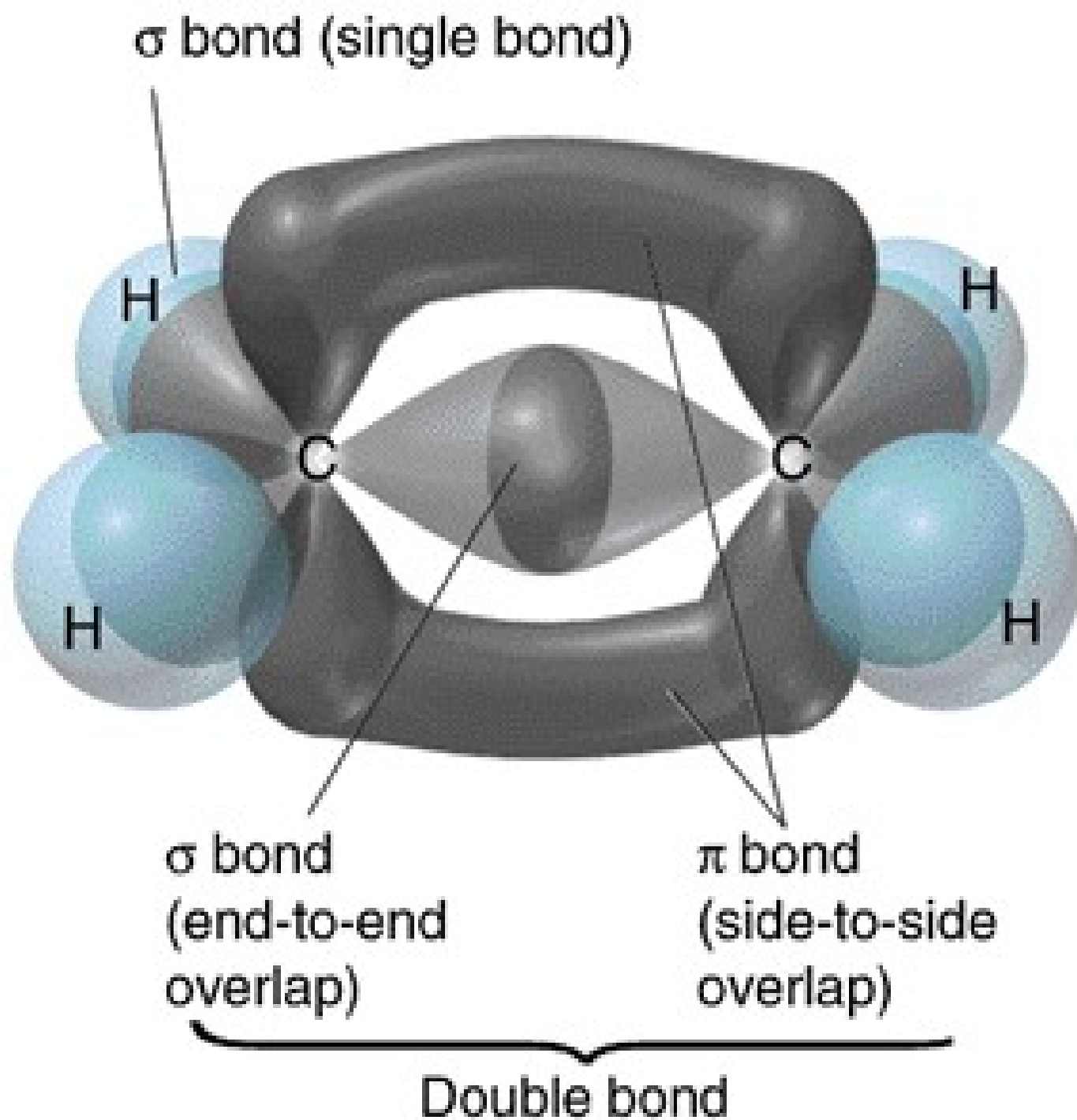
Overlap of  $p$  orbitals leading to pi ( $\pi$ ) bond



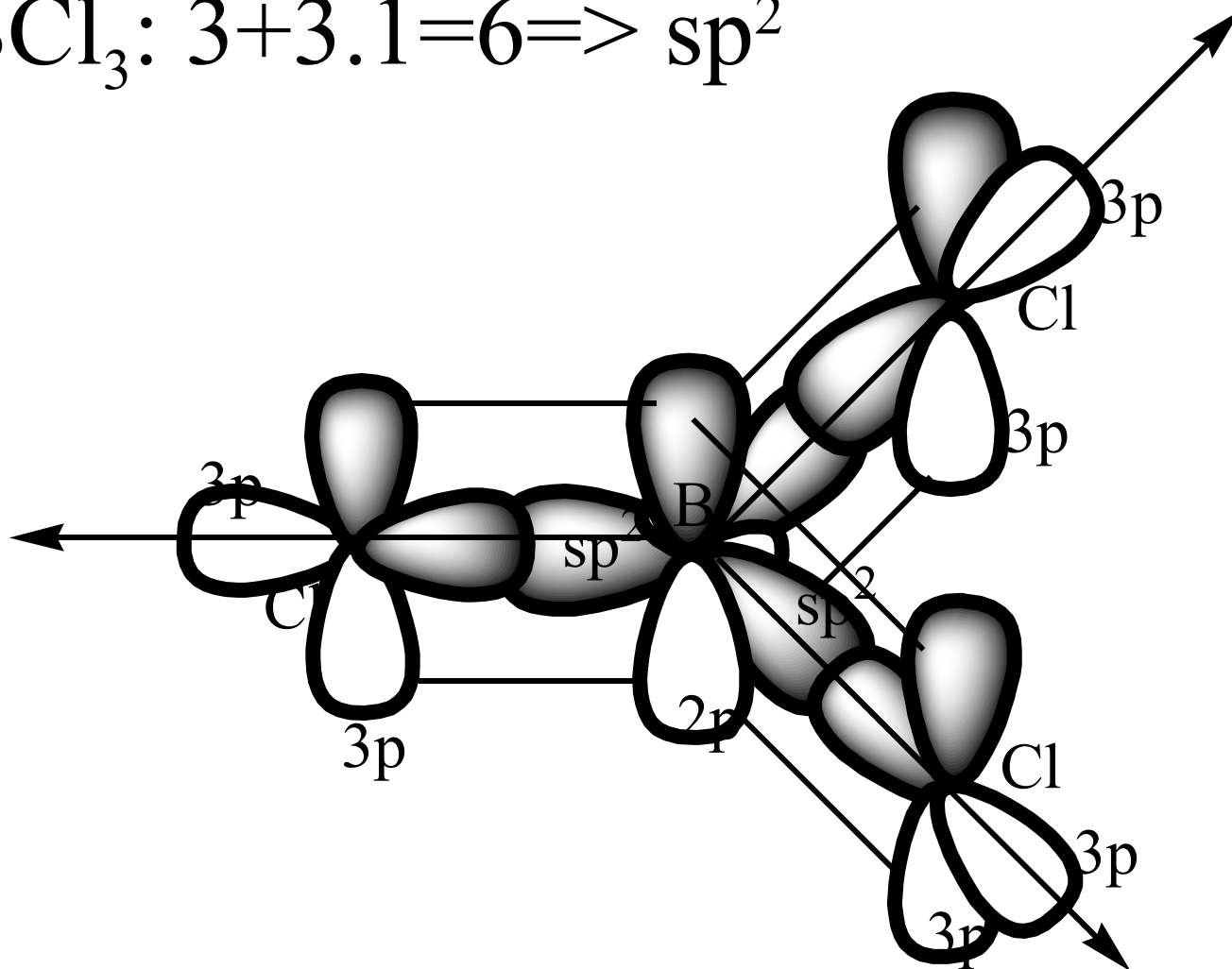
'side-by-side' ( $\pi$ ) overlap





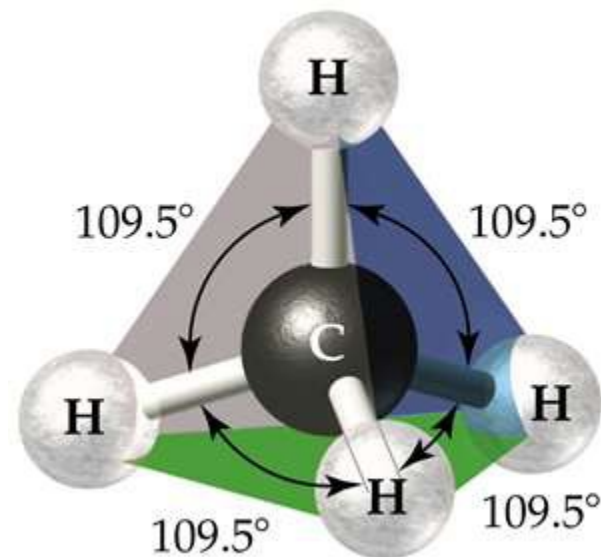
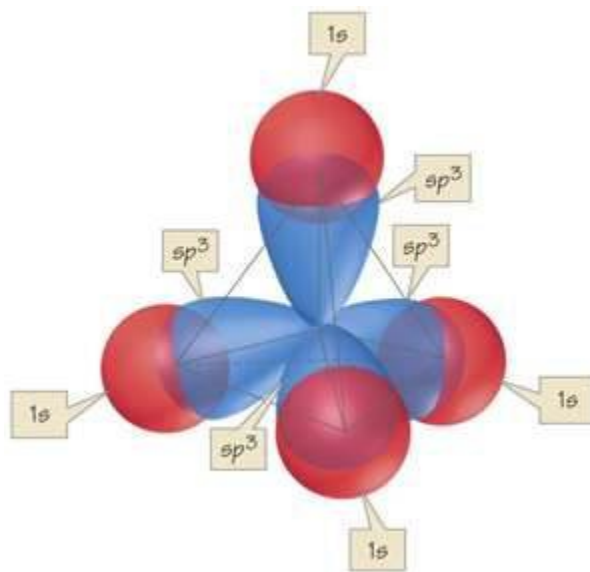
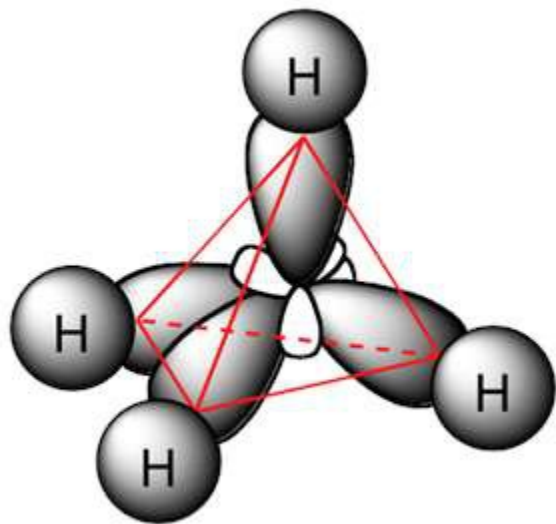


$$\text{BCl}_3: 3 + 3 \cdot 1 = 6 \Rightarrow \text{sp}^2$$



$$Blk = 1(\sigma) + \frac{1.2e}{3.2}(\pi) = 1,33$$

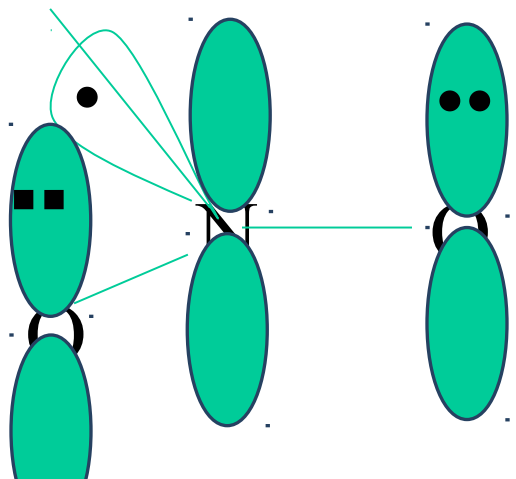
$$\text{CH}_4 \quad \sum \text{ehtlh} = 4 + 4.1 = 8 \rightarrow \text{lh } sp^3 \quad \text{Blk CH} = 1$$



$$\text{NO}_2: \sum \text{ehtlh} = 5 + 2.0 = 5 \rightarrow \text{lh } sp^2$$

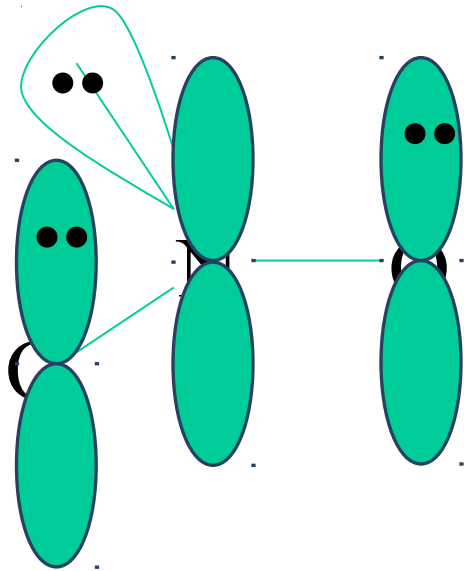
$$1.2e$$

$$\text{Blk} = 1(\sigma) + \frac{\quad}{2.2} (\pi) = 1.5$$



$$\text{ONO} > 120^\circ$$

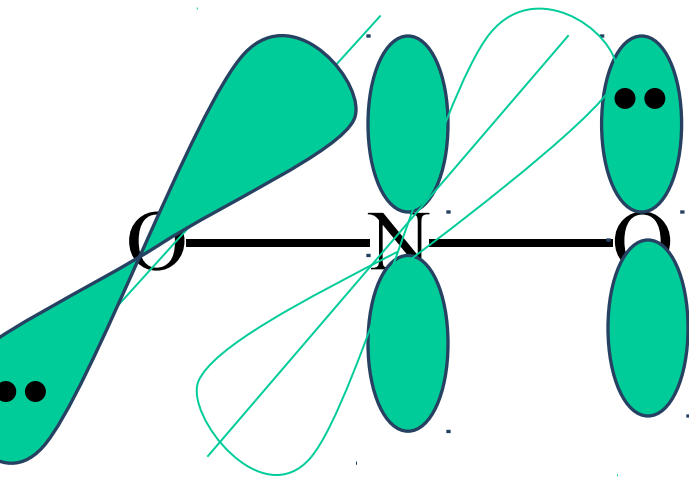
$$\text{NO}_2^- : \sum \text{ehtlh} = 5 + 2.0 + 1 = 6 \rightarrow \text{lh sp}^2$$



$$\text{Blk} = 1(\sigma) + \frac{2.2\text{e}}{2.2} (\pi) = 1,5$$

$$\text{ONO} < 120^\circ$$

$$\text{NO}_2^+ : \sum \text{ehtlh} = 5 + 2.0 - 1 = 4 \rightarrow \text{lh sp}$$

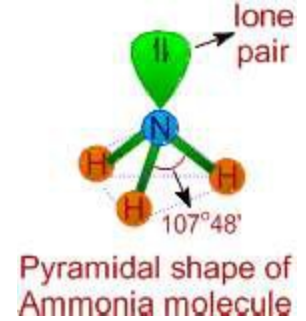


$$\text{Blk} = 1(\sigma) + \frac{2.2\text{e}}{2.2} (\pi) = 2$$

$$\text{NO}_2^+ \text{ thẳng hàng}$$

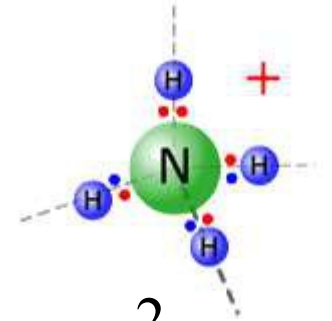
$$\text{NH}_3: \sum \text{ehtlh} = 5 + 3.1 = 8 \rightarrow 1 \text{h sp}^3$$

$$\text{Blk} = 1; \text{H-N-H} < 109,5^\circ$$

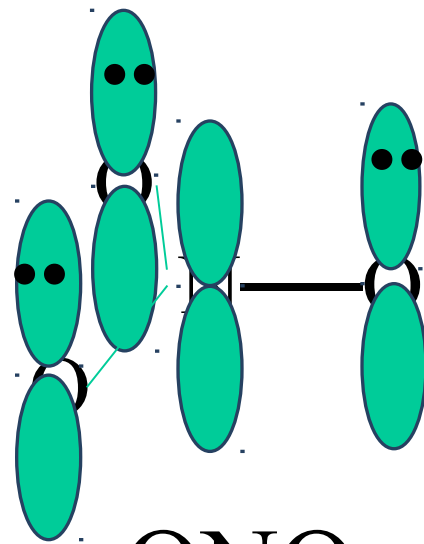
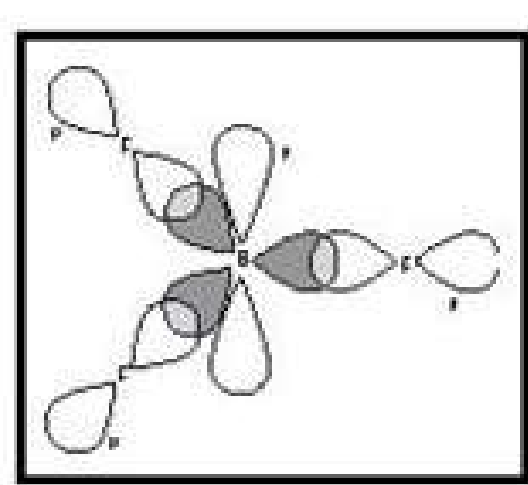


$$\text{NH}_4^+: \sum \text{ehtlh} = 5 + 4.1 - 1 = 8$$

$$\rightarrow 1 \text{h sp}^3: \text{Blk} = 1; \text{H-N-H} = 109,5^\circ$$



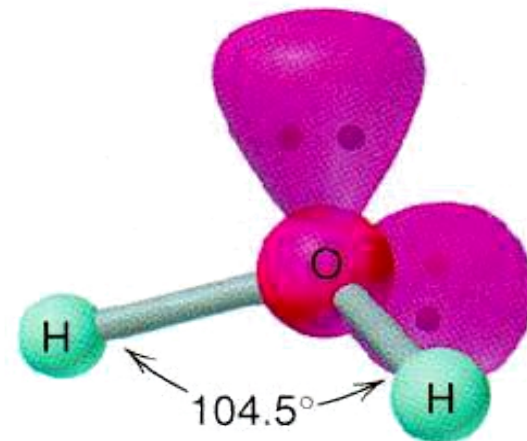
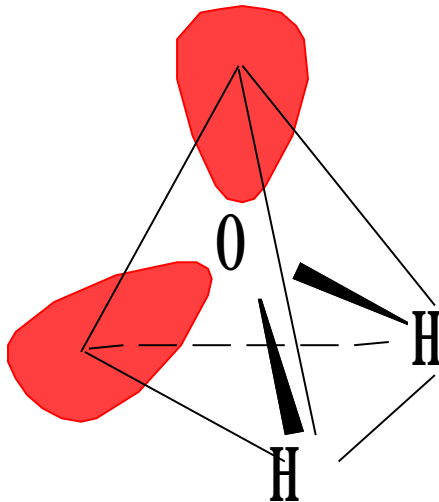
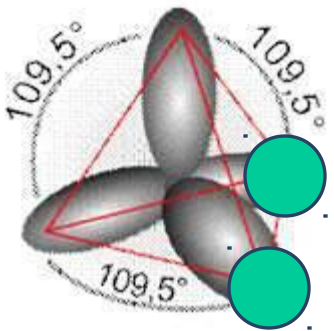
$$\text{NO}_3^-: \sum \text{ehtlk} = 5 + 3.0 + 1 = 6 \rightarrow 1 \text{h sp}^2$$



$$\text{Blk} = 1(\sigma) + \frac{1.2e}{3.2}(\pi)$$

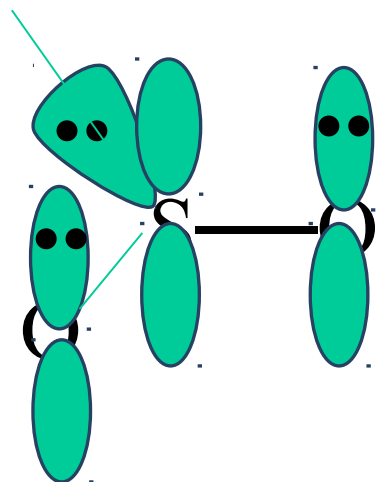
$$\text{ONO} = 120^\circ = 1,33$$

$$\text{H}_2\text{O} : \sum \text{ehtlh} = 6 + 2.1 = 8 \rightarrow \text{sp}^3$$



$$\text{HOH} < 109,5^\circ$$

$$\text{SO}_2 : \sum \text{ehtlh} = 6 + 2.0 = 6 \rightarrow \text{lh } \text{sp}^2$$

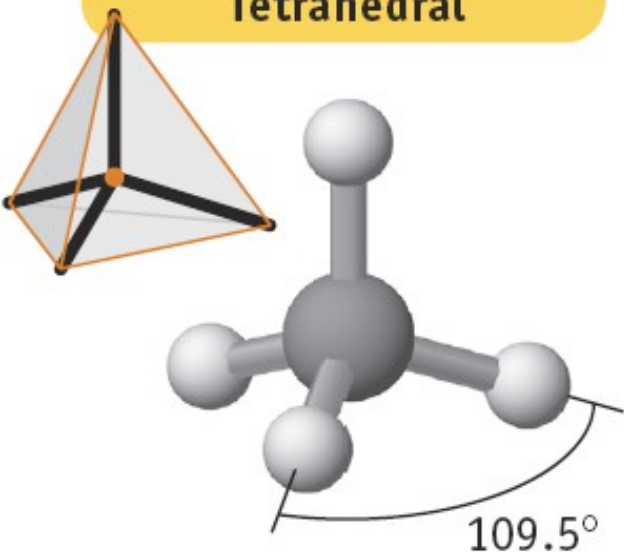


$$\text{Blk} = 1(\sigma) + \frac{1.2e}{2.2} (\pi) = 1,5$$

$$\text{OSO} < 120^\circ$$

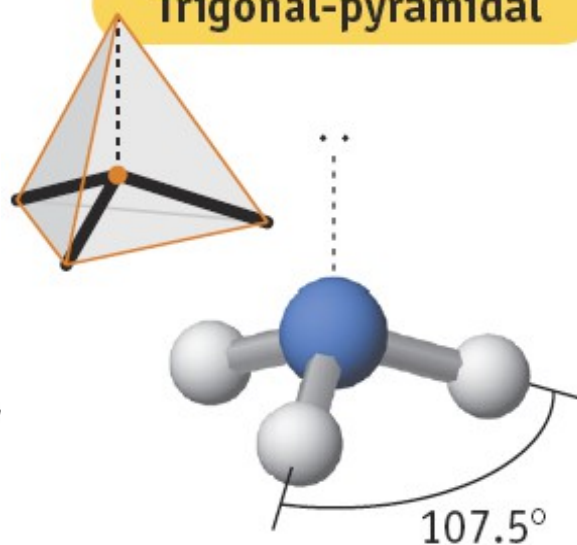


**Tetrahedral**



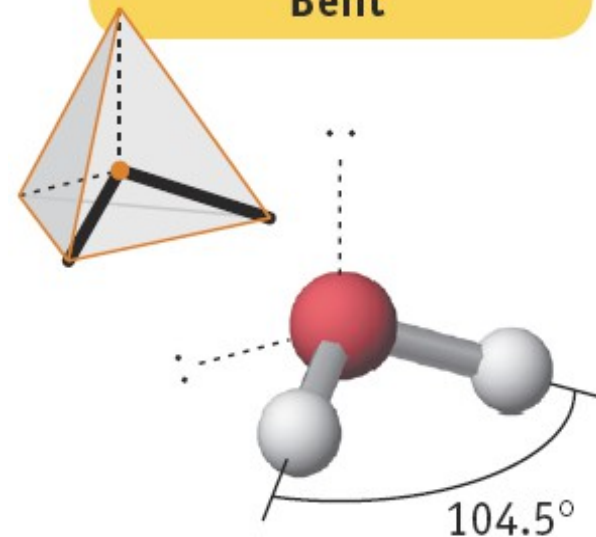
**Methane, CH<sub>4</sub>**  
4 bond pairs  
no lone pairs

**Trigonal-pyramidal**

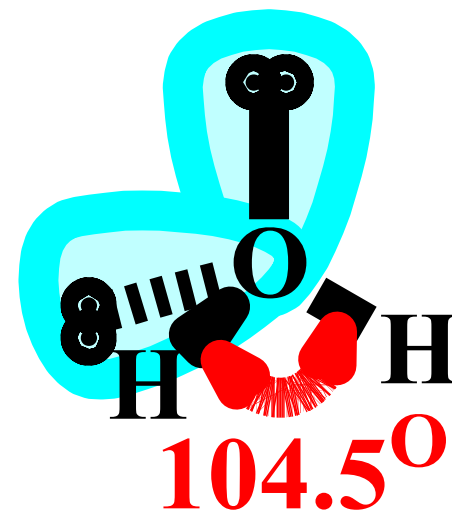
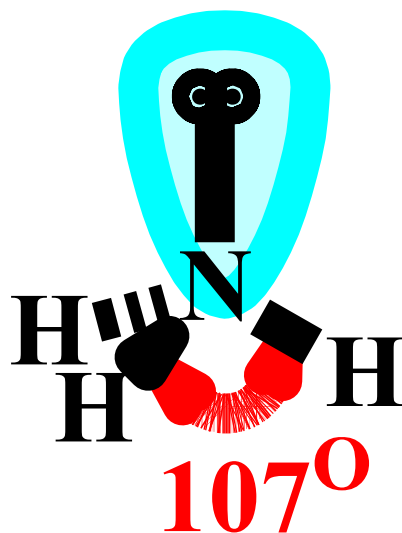
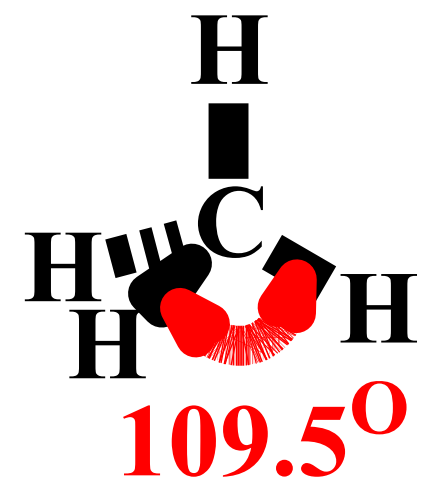


**Ammonia, NH<sub>3</sub>**  
3 bond pairs  
1 lone pair

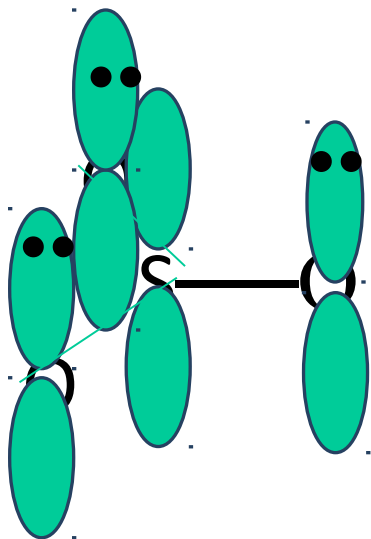
**Bent**



**Water, H<sub>2</sub>O**  
2 bond pairs  
2 lone pairs



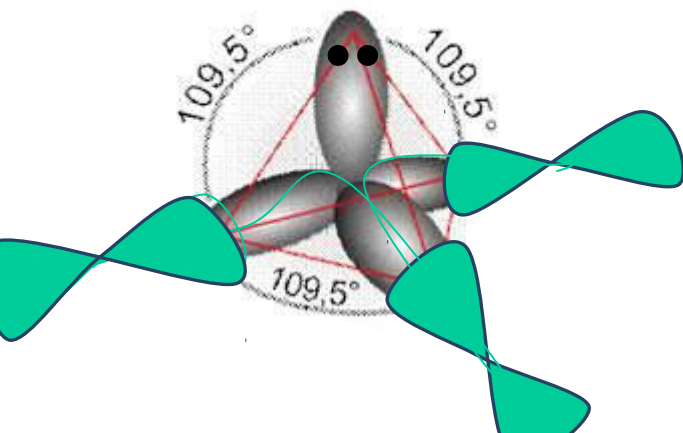
$$\text{SO}_3: \sum \text{ehtlk} = 6 + 3.0 = 6 \rightarrow \text{sp}^2$$



$$\text{Blk} = 1(\sigma) + \frac{1.2e}{3.2} (\pi) = 1,33$$

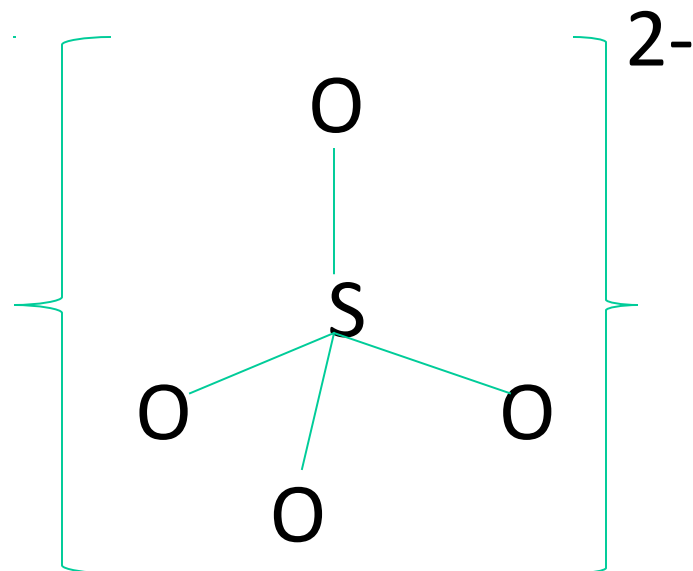
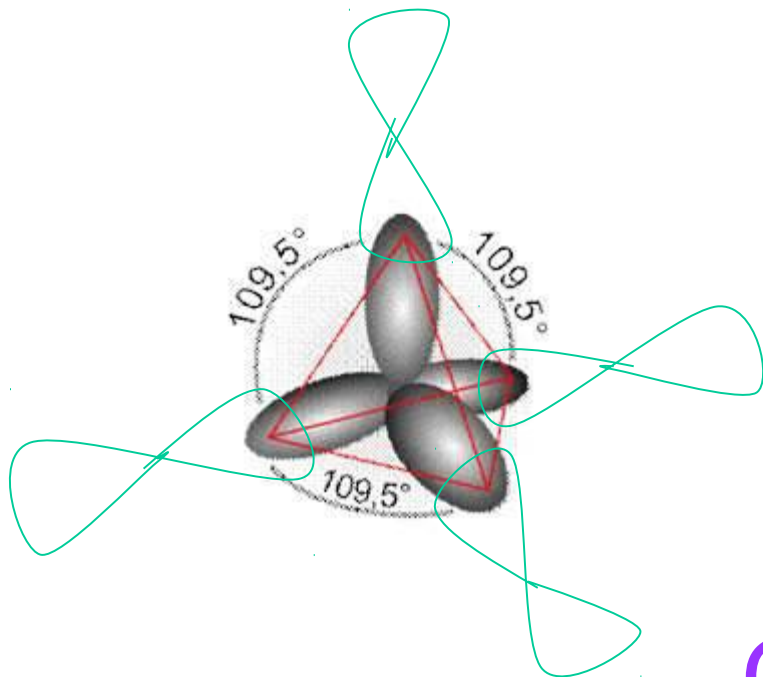
$$\text{OSO} = 120^\circ$$

$$\text{SO}_3^{2-}: \sum \text{ehtlh} = 6 + 3.0 + 2 = 8 \rightarrow \text{lh sp}^3$$



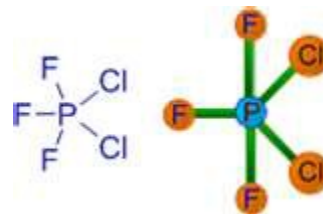
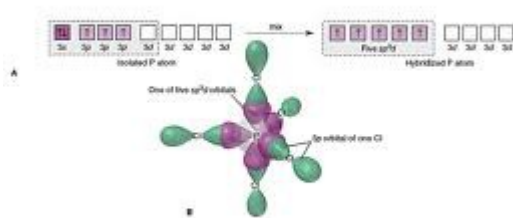
$$\text{OSO} < 109,5^\circ$$

$$\text{SO}_4^{2-} : \sum \text{ehtlh} = 6 + 4.0 + 2 = 8 \rightarrow \text{lh } sp^3$$



$$\text{OSO} = 109,5^\circ$$

$$\text{PCl}_5 : \sum \text{ehtlh} = 5 + 5.1 = 10 \rightarrow \text{lh } dsp^3$$



## 5. Tính chất:

a. Cộng hóa trị của 1 nguyên tố là số liên kết cộng hóa trị xuất phát từ nguyên tố đó.

Td:  $\text{H}-\text{O}-\text{H}$  {cht(H) = 1; cht(O) = 2 }

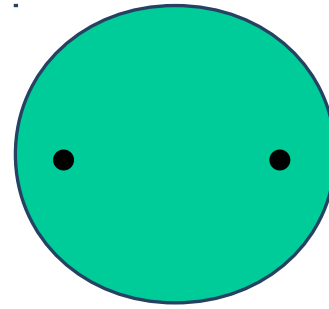
b. Bán kính của 1 ng.tố: là  $\frac{1}{2}$  độ dài liên kết đơn tạo bởi 2 ng.tử của ng.tố đó.

Td: N-N có  $d_{\text{N-N}} = 1,45 \text{ \AA} \rightarrow r_{\text{N}} = 1,45/2 = 0,725 \text{ \AA}$

c. Lkcht có tính bão hòa, định hướng, có thể không phân cực hoặc phân cực.

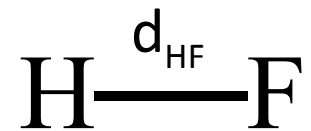
Lk: AB có  $|\chi_A - \chi_B| = 0 \rightarrow$  AB không phân cực;  $\mu_{AB} = 0$

Td:  $H_2$  có  $\mu = 0 \rightarrow$



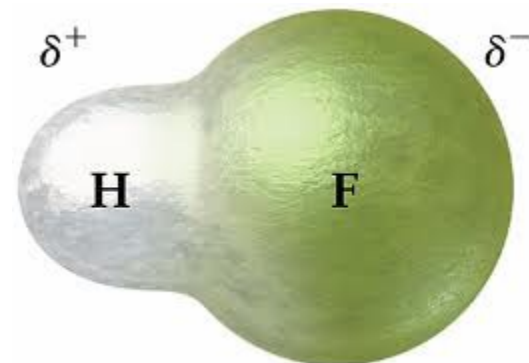
$0 < |\chi_A - \chi_B| < 1,7 \rightarrow$  AB phân cực;  $\mu_{AB} \neq 0$

Td: HF có  $\chi_F > \chi_H$



$$\mu_{HF} = 4,8 \cdot d_{HF} \cdot \delta \text{ (Deby)}$$

$\mu \uparrow \rightarrow$  độ phân cực  $\uparrow$



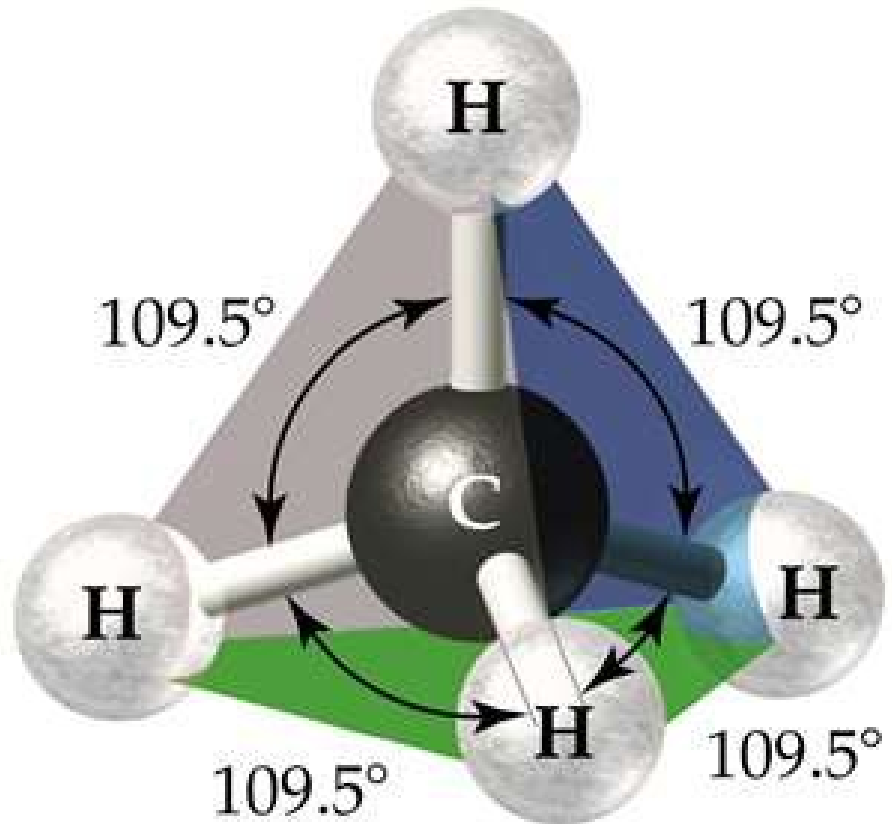
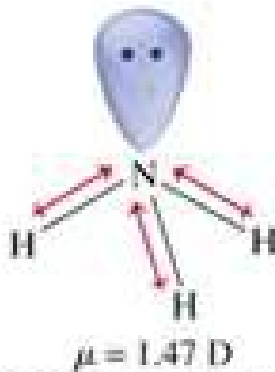
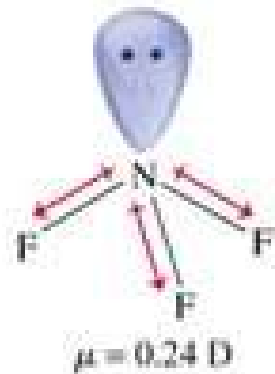
Trường hợp ph.tử nhiều ng.tử:  $ML_n$  mỗi 1.k

$M-L$  có 1 giá trị  $\mu_{ML} \rightarrow \mu_{MLn} =$  hợp lực của

$n\mu_{ML}$

Td:  $NH_3$  và  $NF_3$

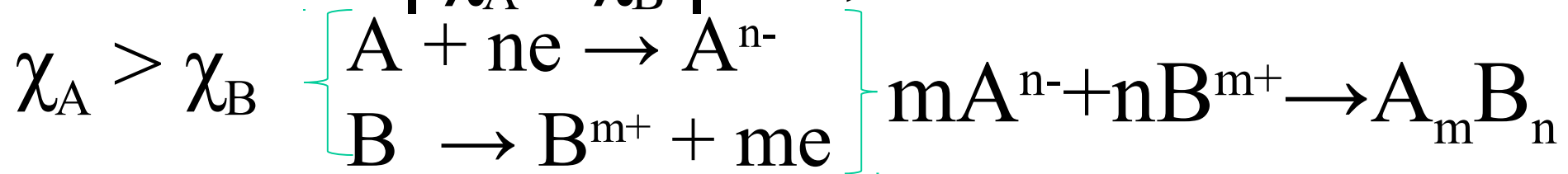
$CH_4$  có  $\mu = 0$



# III. LIÊN KẾT ION

## 1. Nguyên tắc:

$A + B$  nếu  $|\chi_A - \chi_B| \geq 1,7 \rightarrow$  lk ion



Các ion  $A^{n-}$  và  $B^{m+}$  phải có cấu hình e bền

\* Cấu hình e bền của các ion:

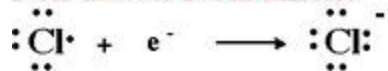
- cơ cấu 8e  $(...ns^2 np^6)$ : ng.tổ p.nh chính **A**
- Cơ cấu 18e  $(...ns^2 np^6 nd^{10})$ : p.nh phụ **B**
- Cơ cấu  $ns^2 (...ns^2)$  (thường gặp ở các ng.tổ chu kỳ lớn phân nhóm  $IV_A, V_A$ )

Td:

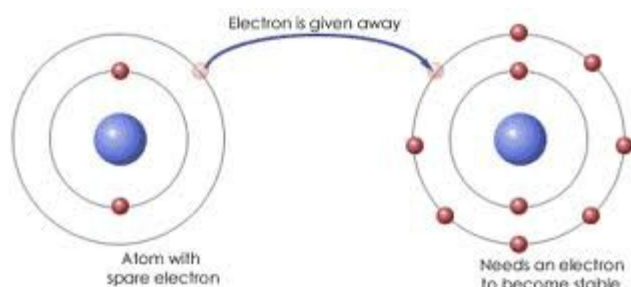
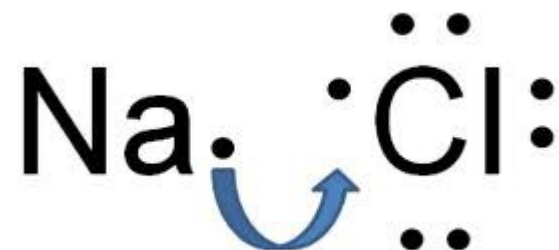
Metals for cations



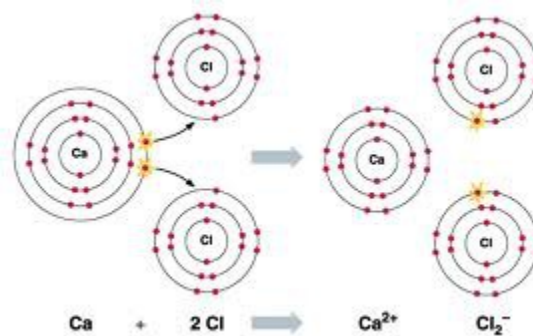
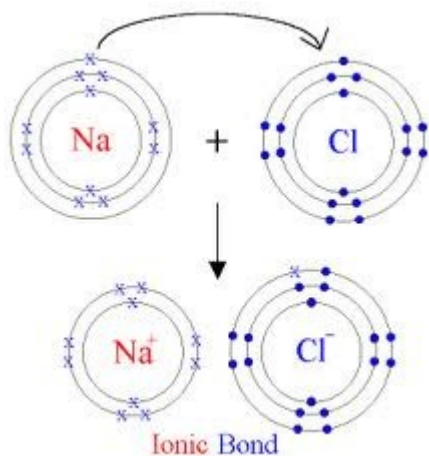
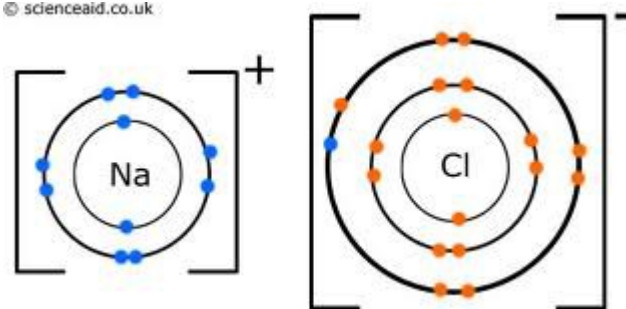
Non-metals form anions



Together these form ionic compounds



© scienceaid.co.uk



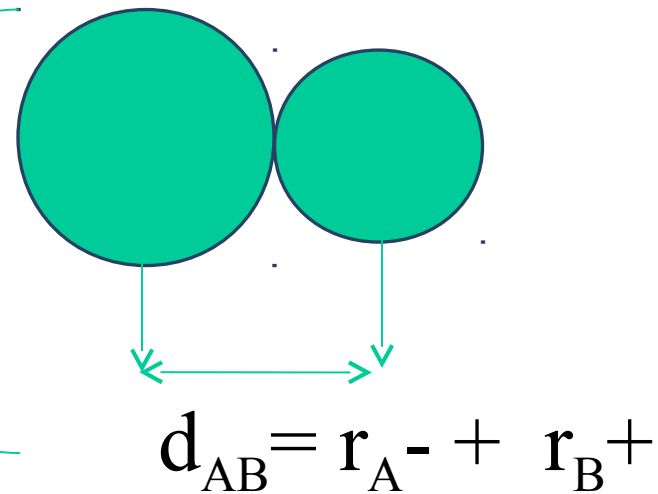
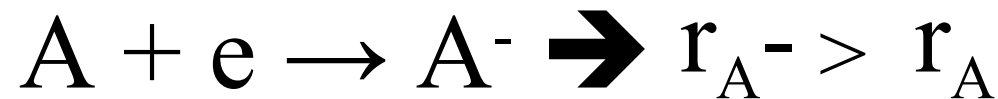
Copyright 1999 by John Wiley and Sons, Inc. All rights reserved.



## 2. Tính chất:

### a. Bán kính ion:

Xem phân tử AB:  $A-B^+$



Trong dãy ion đẳng e:



→ Trong các ion đẳng e:

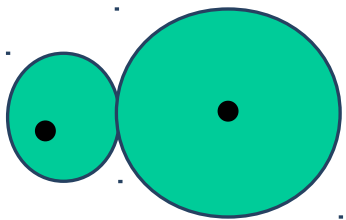
Ion nào có  $Z \uparrow \Rightarrow r_{ion} \downarrow$

## b. Tính cộng hóa trị của liên kết ion ( tính ion của liên kết cộng hóa trị).

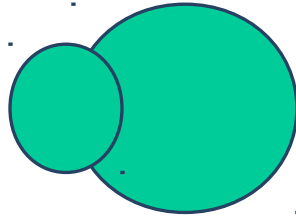
Cation  $M^{m+}$  có tính phân cực  $\uparrow$  khi

Anion  $A^{n-}$  có tính bị phân cực  $\uparrow$  khi

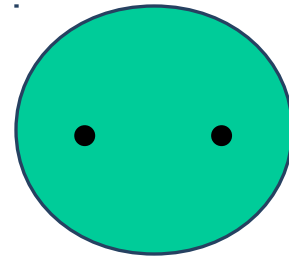
- $r_{M+} \downarrow$
  - $m(+) \uparrow$
  - $n(-) \uparrow$
  - $r_{A-} \uparrow$
- Tính cht  $\uparrow$   
Tính ion  $\downarrow$



100% ion



lkcht ph.cực



lkcht không cực

Tính cht  $\uparrow \Rightarrow$  độ bền  $\downarrow$ ;  $t^0_s$ ,  $t^0_{nc} \downarrow$

• Trường hợp 2 cation có bán kính và điện tích bằng nhau, tính phân cực tăng theo thứ tự:

$$(ns^2np^6) < (ns^2np^6nd^{(x<10)}) < (ns^2np^6nd^{10})$$

## IV: Các loại liên kết yếu:

### 1. Liên kết Hydro:

*Là l.k tạo thành bởi ng.tử H linh động( là H l.k với 1 ng.tử hay 1 nhóm ng.tử có độ âm điện lớn như: O, F, Cl, C≡C) với 1 ng.tử hay nhóm có độ âm điện lớn và có các cặp e không liên kết.*  $A \leftarrow H^{+\delta} \dots | B \leftarrow R$

Td:  $H \rightarrow F \dots H \rightarrow F$

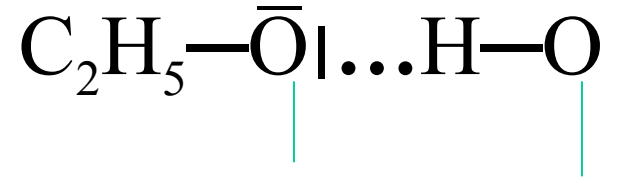
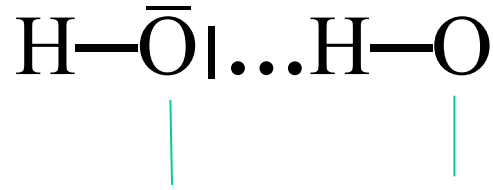
#### a. Phân loại

Có 2 loại: lkH liên phân tử và lkH nội phân tử

## $\alpha$ . Liên kết Hydro liên phân tử:

Được tạo thành bởi các p.tử riêng biệt nhau;

Td:  $\text{H}_2\text{O}$



H

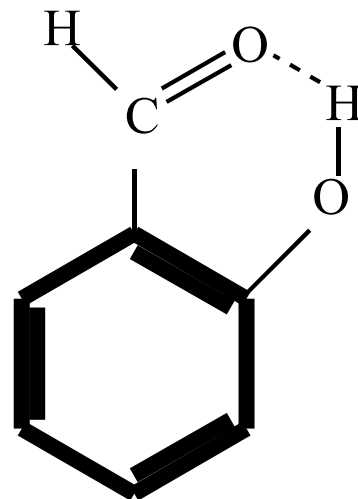
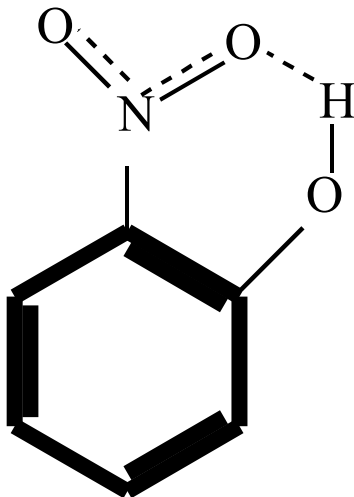
H

H

H

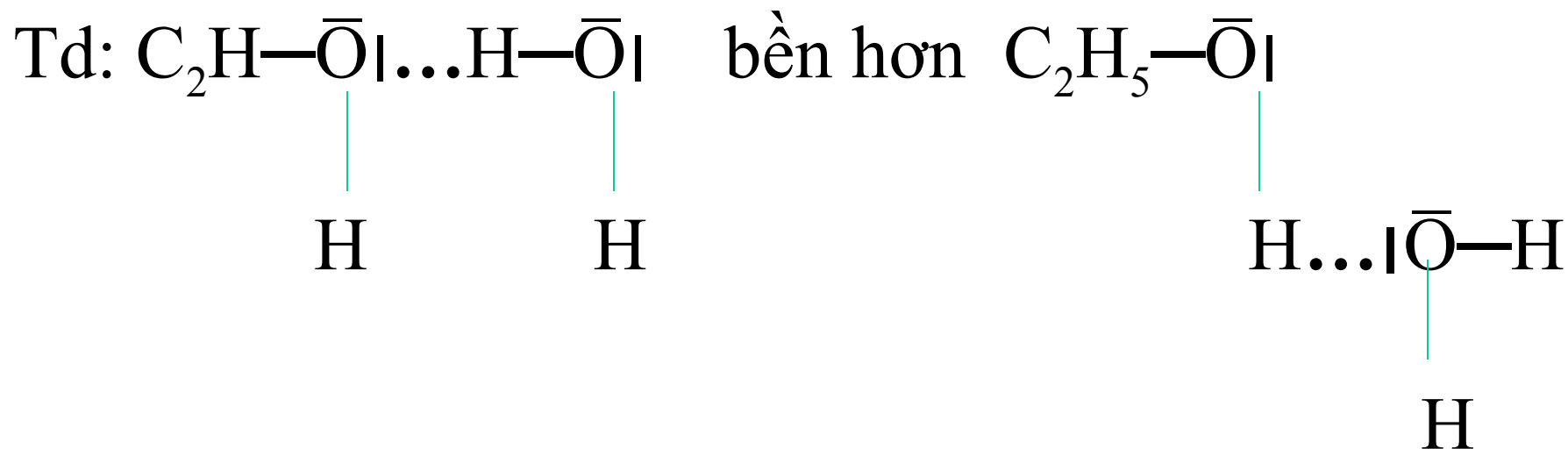
## $\beta$ . Liên kết Hydro nội phân tử:

Được tạo thành trong chính bản thân 1 phân tử



## b. Tính chất

α. Liên kết hydro càng bền khi H càng linh động và tâm B càng giàu e.



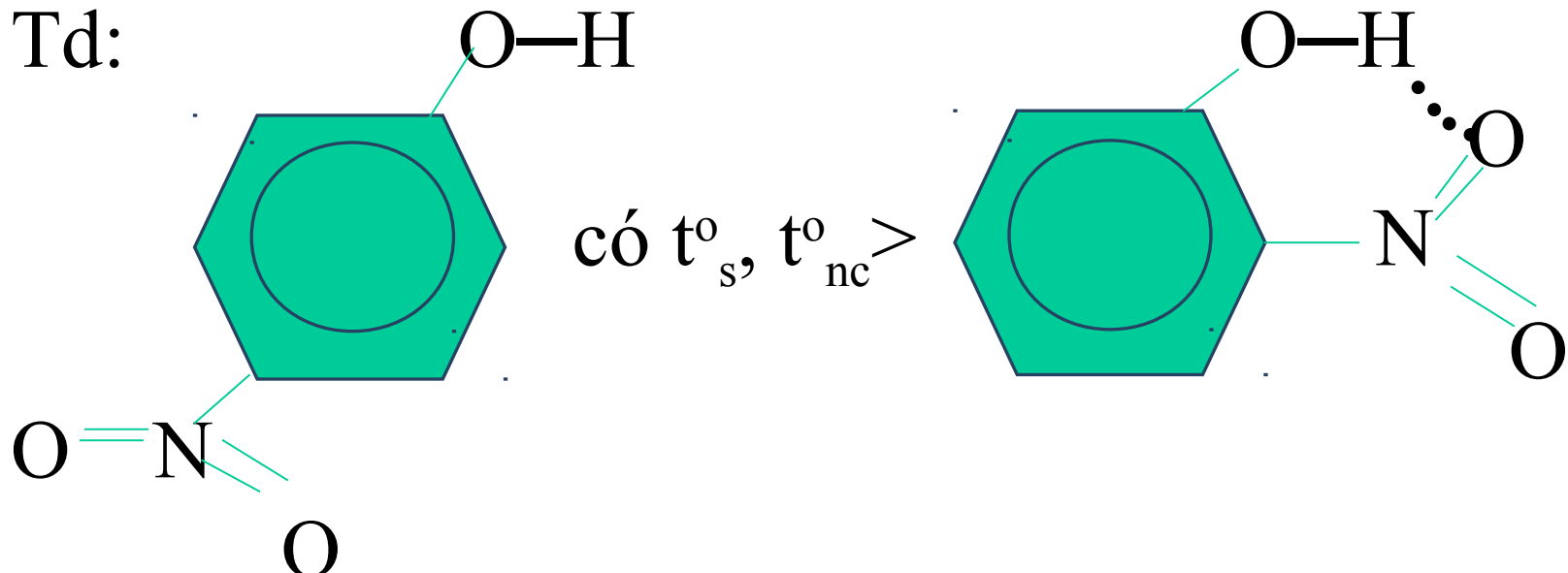
## β. Nhiệt độ sôi, nhiệt độ nóng chảy:

Hóa chất nào cho l.k(H) l.p.t  $\uparrow$  thì  $t_s^0$ ,  $t_{nc}^0$ ,  $\uparrow$ .

Td:  $\text{C}_2\text{H}_5-\text{O}|\dots\text{H}-\text{O}-\text{C}_2\text{H}_5$  bền hơn  $\text{CH}_3-\text{O}-\text{CH}_3$

Chất nào cho liên kết Hydro nội phân tử càng mạnh thì  $t_s^0$ ,  $t_{nc}^0$ , càng thấp

Td:



## $\gamma$ . Độ tan

Chất nào cho được 1.k(H) 1.p.t với d.môi càng  $\uparrow$  thì tan càng  $\uparrow$  trong d,môi đó.

Td:  $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$  tan trong  $\text{H}_2\text{O} > \text{CH}_3\text{OCH}_3$

## b. Lực Van Der Waals (VDW)

Là lực liên ph.tử, được tạo thành giữa các ph.tử trung hòa, lực VDW được dùng để giải thích sự có thể hóa lỏng của chất khí, hoặc có thể đông đặc của chất lỏng.

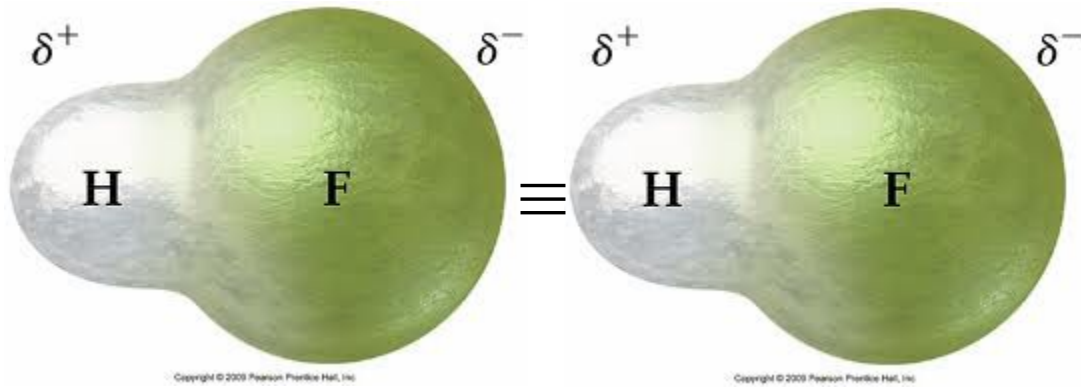
## $\alpha$ . Phân loại:

Lực VDW gồm các loại:



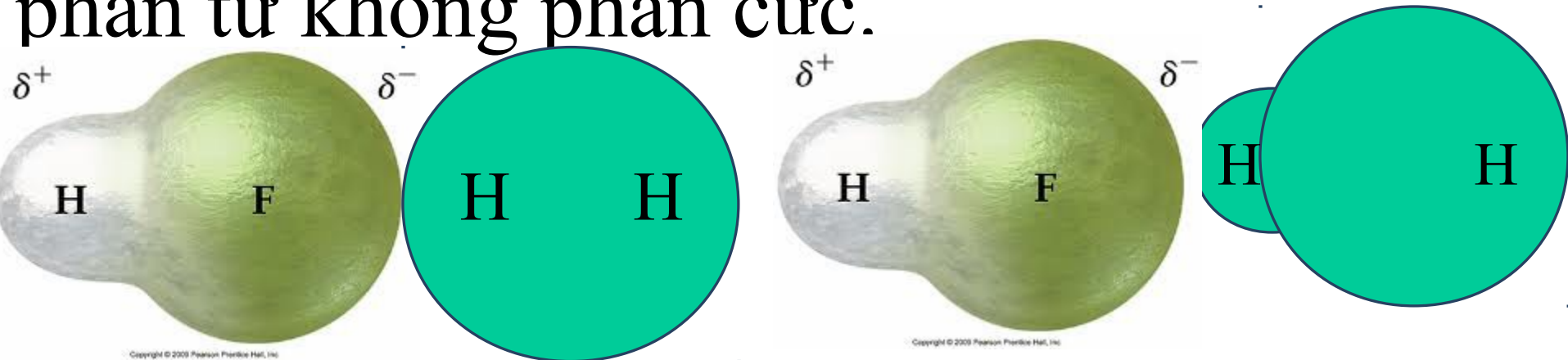
## \* Lực định hướng:

Được tạo thành bởi các ph.tử luôn phân cực.



## \* Lực cảm ứng:

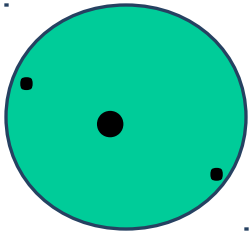
Được tạo thành bởi 1 phân tử phân cực và 1 phân tử không phân cực.



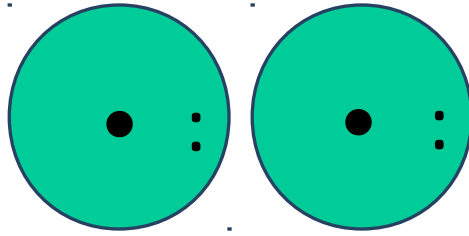
## \* Lực khuếch tán.

Tạo thành bởi các chất không phân cực

He



$\mu=0$



$\mu \neq 0$


Lực định hướng > lực cảm ứng > lực khuếch tán

Lực VDW  $\uparrow$   $\left\{ \begin{array}{l} \mu \uparrow \\ r(\text{phân tử}) \uparrow \\ M \uparrow \end{array} \right.$

## β. Tính chất

\* Chất nào cho lực  $\text{VDW} \uparrow \Rightarrow t^{\circ}_{\text{s}}, t^{\circ}_{\text{nc}} \uparrow$

Td:  $\text{F}_2 \quad \text{Cl}_2 \quad \text{Br}_2 \quad \text{I}_2 \Rightarrow t^{\circ}_{\text{s}}, t^{\circ}_{\text{nc}} \uparrow$



\* Các chất có độ phân cực giống nhau  $\Rightarrow$

hòa tan tốt vào nhau, và ngược lại.

Td:  $\text{HCl}$  hòa tan trong  $\text{H}_2\text{O}$  tốt hơn  $\text{CH}_4$

$\text{CH}_4$  hòa tan trong  $\text{CCl}_4$  tốt hơn  $\text{HCl}$

# CHƯƠNG III: NHIỆT HÓA HỌC

## I. Các khái niệm cơ bản:

### 1. Hệ:

Là 1 phần của vũ trụ có giới hạn trong phạm vi đang khảo sát về phương diện hóa học. Phần còn lại của vũ trụ quanh hệ được gọi là môi trường ngoài (mtng) đối với hệ.

Td: 1 cốc chứa nước đầy kín: phần bên trong cốc là hệ, còn thành cốc và khoảng không gian quanh cốc là (mtng).

- \*. **Hệ hở:** Có thể trao đổi E, vật chất với (mtn<sub>g</sub>)
  - \* **Hệ kín:** chỉ trao đổi E nhưng không trao đổi chất với (mtn<sub>g</sub>)
  - \* **Hệ cô lập:** không trao đổi E và vật chất với (mtn<sub>g</sub>)
- Td: Cốc chứa dd hóa chất không đậy nắp là hệ hở, còn trong bình đậy kín là hệ kín, trong bình cách nhiệt đậy kín là hệ cô lập.
- \* **Hệ đồng thể:** Chỉ có 1 pha, còn từ 2 pha trở lên là hệ dị thể [Hệ gồm nước(l) ng.chất là đồng thể, nước(l) và nước đá là dị thể]

## 2. Thông số trạng thái và hàm trạng thái;

### a. Thông số trạng thái:

Các đại lượng vật lý như:  $(p), (V), (T), (n)$  dùng để biểu diễn trạng thái của hệ được gọi là thông số trạng thái

Giữa các thông số trạng thái có 1 f.t liên hệ:

$$\begin{array}{l} pV = nRT \\ \text{Pt trạng thái} \left\{ \begin{array}{l} R \left\{ \begin{array}{l} 0,082 \text{ l.atm.mol}^{-1} \\ 1,987 \text{ cal.mol}^{-1} \\ 8,3 \text{ j.mol}^{-1} \end{array} \right\} \text{hs klt} \end{array} \right. \end{array}$$

Khi đã xđ được 3 trị số, trị số thứ 4 được xđ.  
Do đó: thường dùng 3 thông số:  $p, V, T$

**b. Hàm trạng thái:** Trạng thái của hệ thay đổi khi chỉ cần 1 thông số trạng thái thay đổi  
Hàm trạng thái là 1 đại lượng có giá trị chỉ phụ thuộc vào các thông số trạng thái của hệ

**c. Quá trình:** Xem 1 hệ ở tr.thái (1):  $(p_1, V_1, T_1)$ ,  
1 thông số tr.thái thay đổi  $\rightarrow$  tr.thái (2):  
 $(p_2, V_2, T_2) \rightarrow$  hệ đã thực hiện 1 quá trình từ tr.thái (1)  $\rightarrow$  trạng thái (2)

$*1 (p_1, V_1, T_1) \rightarrow *2 (p_2, V_2, T_2)$

- Q.t đẳng áp:  $p$  không đổi ( $\Delta p = 0; p = \text{const}$ )
- Q.t đẳng tích:  $V$  không đổi ( $\Delta V = 0; V = \text{const}$ )
- Q.t đẳng nhiệt:  $T$  không đổi ( $\Delta T = 0; T = \text{const}$ )

- Q.t đoạn nhiệt: không trao đổi nhiệt ( $Q=0$ )
- Q.t tn: khả năng xảy ra theo chiều thuận hay chiều nghịch là như nhau ( $\leftrightarrow$ ). Q.t chỉ xảy ra 1 chiều là qt tự nhiên ( $\rightarrow$ )

### c. Nhiệt và công

Khi thực hiện q.t từ tr.th(1) đến tr.th (2), hệ có thể trao đổi E với mtng dưới 2 dạng: nhiệt và công.

$$\alpha. \text{ Nhiệt: } Q = mc\Delta T \left\{ \begin{array}{l} m: \text{khối lượng (gam)} \\ c: \text{nhiệt dung} \\ \Delta T = T_2 - T_1 \end{array} \right.$$

$m=1\text{ g} ; \Delta T=1 \rightarrow c=Q \rightarrow c: \text{nhiệt dung riêng}$



$m=M, \Delta T= 1 \rightarrow Q= Mc = \bar{c}$ : nhiệt dung mol  
Có  $n$  mol chất  $\rightarrow Q = n\bar{c} \Delta T$

## $\beta$ . Công

Công  $A$   $\left\{ \begin{array}{l} * \text{ Công thay đổi thể tích hệ} \\ * \text{ Công hóa học} \end{array} \right.$

Trường hợp chỉ có công thay đổi thể tích:

$$A = p_{\text{ngoài}} \cdot \Delta V \quad \{ \Delta V = V_2 - V_1 \}$$

•  $p_{\text{ng}}=0$  (q.t xảy ra ở chân không)  $\rightarrow A = 0$

•  $\Delta V = V_2 - V_1 = 0$  (q.t đẳng tích)  $\rightarrow A = 0$

• Quá trình đẳng áp hoặc thuận nghịch:

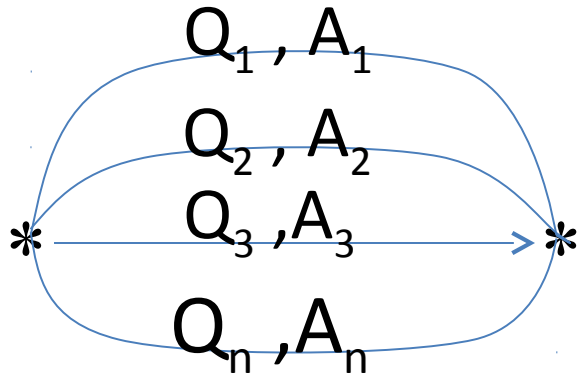
$$p_{\text{ng}} = p_{\text{hệ}} = p \rightarrow A = p \cdot \Delta V$$

Qui ước về dấu:  $Q < 0 \rightarrow$  phát nhiệt  
 $Q > 0 \rightarrow$  nhận nhiệt  
 $A < 0 \rightarrow$  nhận công  
 $A > 0 \rightarrow$  sinh công

## II. Áp dụng nguyên lý I nhiệt động lực học.

### 1. Nguyên lý I và nội năng

Xem hệ thực hiện q.t từ tr.th (1) đến tr.th (2) có thể theo nhiều đường q.t khác nhau:



$$Q_1 \neq Q_2 \neq Q_3 \neq Q_n; A_1 \neq A_2 \neq A_3 \neq A_n$$

$$Q_1 - A_1 = Q_2 - A_2 = Q_3 - A_3 = Q_n - A_n = \Delta U$$

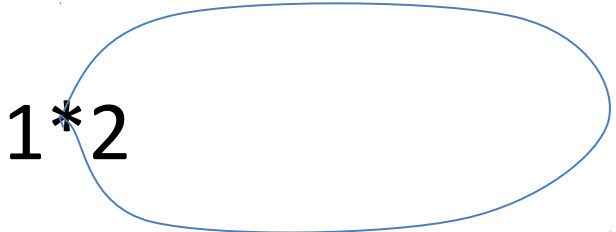
$\Delta U = U_2 - U_1$  ( $U_1$  và  $U_2$  nội năng của hệ ở trạng thái (1) và (2)).

$$\Delta U = Q - A$$

Nội năng  $U$  là tất cả các dạng năng lượng tích chứa bên trong hệ.

$$A = p_{\text{ng}} \cdot \Delta V \rightarrow \Delta U = Q - p_{\text{ng}} \cdot \Delta V$$

Trong trường hợp hệ thực hiện 1 chu trình:


$$\Delta U = U_2 - U_1 = Q - A = 0$$
$$\rightarrow Q = A$$

- $Q > 0 \rightarrow A > 0$ : hệ nhận nhiệt  $\rightarrow$  sinh công
- $A < 0 \rightarrow Q < 0$ : hệ nhận công  $\rightarrow$  phát nhiệt

**2. Entalpi:** 1 pư thường được thực hiện theo 1 trong 2 cách sau:

\* Bình kín,  $V_{\text{hệ}} = V_{\text{bình}} \Rightarrow$  q.t đẳng tích ( $\Delta V = 0$ )

$$\Delta U = Q - A = Q - p_{\text{ng}} \Delta V \Rightarrow \Delta U = Q_V: \text{nh đẳng tích}$$

•  $Q_V > 0 \Rightarrow \Delta U > 0 \Rightarrow$  hệ nhận nhiệt  $\rightarrow U_2 > U_1$  hệ nóng lên

•  $Q_V < 0 \Rightarrow \Delta U < 0 \Rightarrow$  hệ phát nhiệt  $\rightarrow U_2 < U_1$ :  
hệ lạnh đi

\* Bình hở, p tác dụng lên hệ là p khí quyển

1 atm  $\rightarrow$  quá trình đẳng áp

$$\Delta U = Q - A = Q - p\Delta V \rightarrow Q = \Delta U + p\Delta V$$

$$Q_p = U_2 - U_1 + p(V_2 - V_1) = (U_2 + pV_2) - (U_1 + pV_1)$$

$$\text{Đặt: } H_2 = U_2 + pV_2 ; H_1 = U_1 + pV_1$$

Là Entalpi của hệ ở trạng thái (2) và (1)

$$\text{Với } H = U + pV$$

$$\Delta H = H_2 - H_1 = Q_p \text{ nhiệt đẳng áp}$$

$Q_p > 0 \rightarrow \Delta H > 0 \rightarrow$  hệ nhận nhiệt:  $H_2 > H_1 \rightarrow$  hệ

nóng lên

$Q_p < 0 \rightarrow \Delta H < 0 \rightarrow$  hệ phát nhiệt:  $H_2 < H_1 \rightarrow$  hệ

lạnh đi

### 3. Hiệu ứng nhiệt

Hiệu ứng nhiệt của 1 p.ư là  $Q$  trao đổi giữa pư với mtng ở điều kiện  $\Delta V=0$  hoặc  $\Delta p = 0$ .

\*  $\Delta V=0 \rightarrow \Delta U=Q_v$ : hiệu ứng nhiệt đẳng tích.

\*  $\Delta p=0 \rightarrow \Delta H = Q_p$ : hiệu ứng nhiệt đẳng áp.

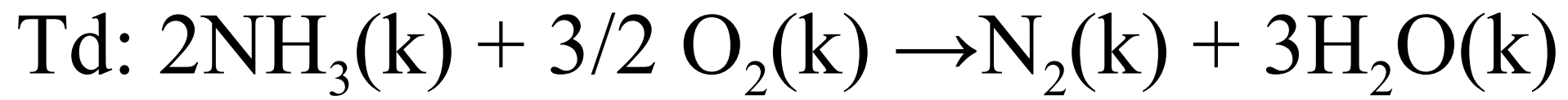
Sự liên quan giữa  $\Delta H$  và  $\Delta U$

Ta có:  $H = U + pV \rightarrow \Delta H = \Delta U + p\Delta V$

$$\Delta H = \Delta U + p(V_2 - V_1) = \Delta U + pV_2 - pV_1$$
$$\Delta H = \Delta U + n_2 RT - n_1 RT = \Delta U + (n_2 - n_1)RT$$

$$\Delta H = \Delta U + \Delta n \cdot RT \quad \Delta n = \sum n(k)(sp) - \sum n(k)(tc)$$

Trong quá trình:  $Q_p = Q_v + \Delta n \cdot RT$

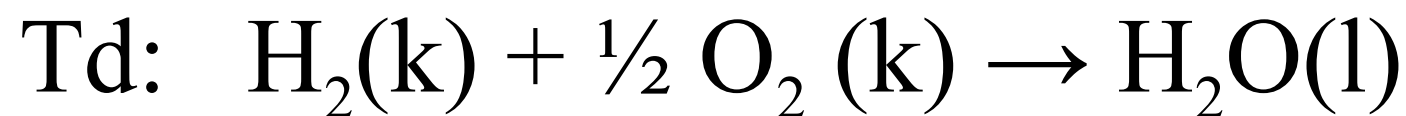


$$\Delta H = \Delta U + \Delta n.RT = \Delta U + \frac{1}{2} RT$$

a. Nhiệt tạo thành và nhiệt phân hủy

$\alpha$ . Nhiệt tạo thành mol tiêu chuẩn

*Là hiệu ứng nhiệt của phản ứng tạo thành 1 mol hóa chất từ các đơn chất bền ở điều kiện chuẩn ( $p=1\text{atm}$ ,  $T = 298^\circ\text{K}\{25^\circ\text{C}\}$ )*



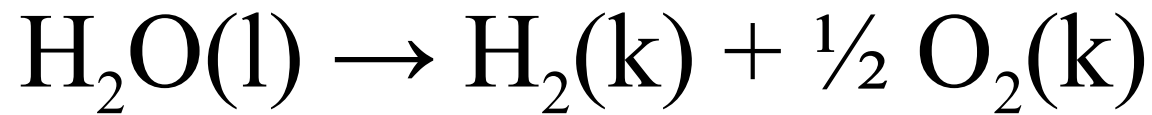
$$\Delta H^\circ_{298} = \Delta \bar{H}^\circ_{\text{tt},298} [\text{H}_2\text{O}(\text{l})]$$

$\Delta \bar{H}^\circ_{\text{tt},298}$  thường  $< 0$  và  $\Delta \bar{H}^\circ_{\text{tt},298} \downarrow \Rightarrow$  càng bền

$$\Delta \bar{H}^\circ_{\text{tt},298} [\text{đơn chất}] = 0$$

## β. Nhiệt phân hủy mol tiêu chuẩn

Là nhiệt trao đổi khi phân hủy hoàn toàn 1 mol hoá chất thành các đơn chất bền ở đkc



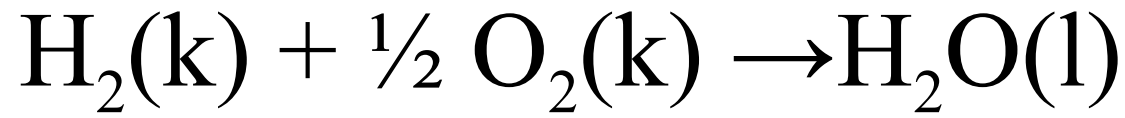
$$\Delta H^0_{298} = \Delta \bar{H}^0_{\text{ph},298} [\text{H}_2\text{O}(l)]$$

$\Delta \bar{H}^0_{\text{ph},298}$  thường  $> 0$  và  $\Delta \bar{H}^0_{\text{ph},298} \uparrow \rightarrow$  càng bền

## b. Nhiệt đốt cháy mol tiêu chuẩn.

Là hiệu ứng nhiệt của pư đốt cháy hoàn toàn 1 mol hoá chất bằng  $\text{O}_2(g)$ , sản phẩm tạo thành là các oxyt bền của các nguyên tố tạo thành hoá chất ở đkc.





$$\Delta H^0_{298} = \Delta \bar{H}^0_{\text{ch},298} [\text{H}_2(\text{k})]$$

$$\Delta \bar{H}^0_{\text{ch},298} \text{ thường} < 0$$

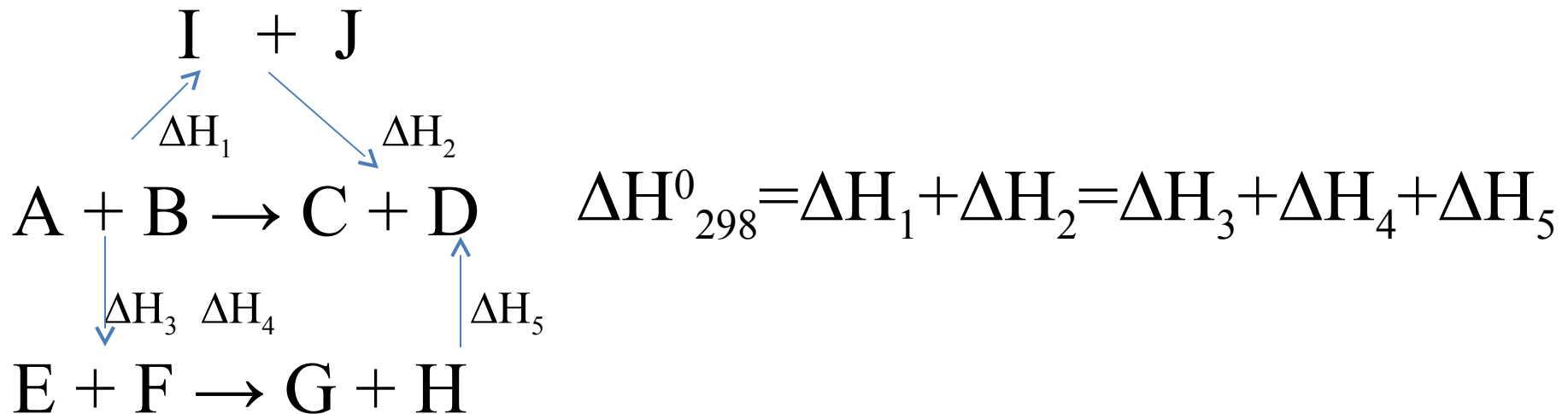
$$\text{và } \Delta \bar{H}^0_{\text{ch},298}$$

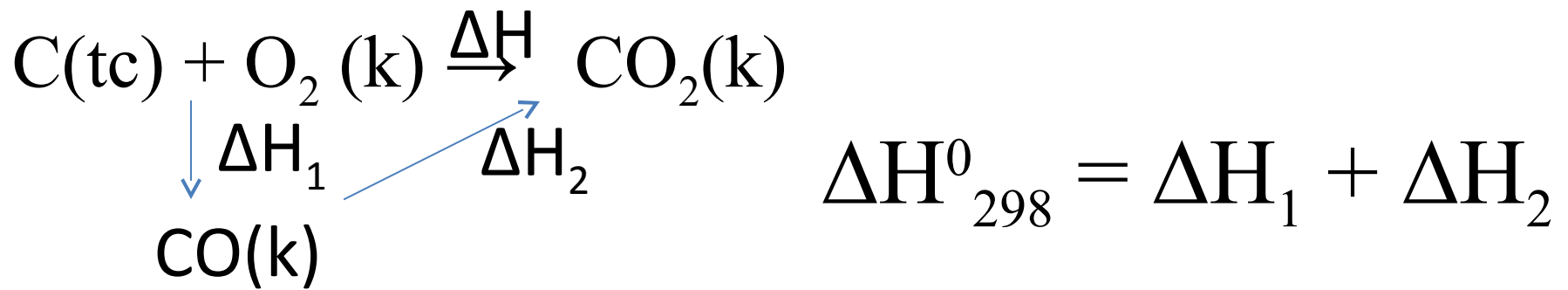
$$[\text{đơn chất}] \neq 0$$

## 4. Định luật Hess và hệ quả.

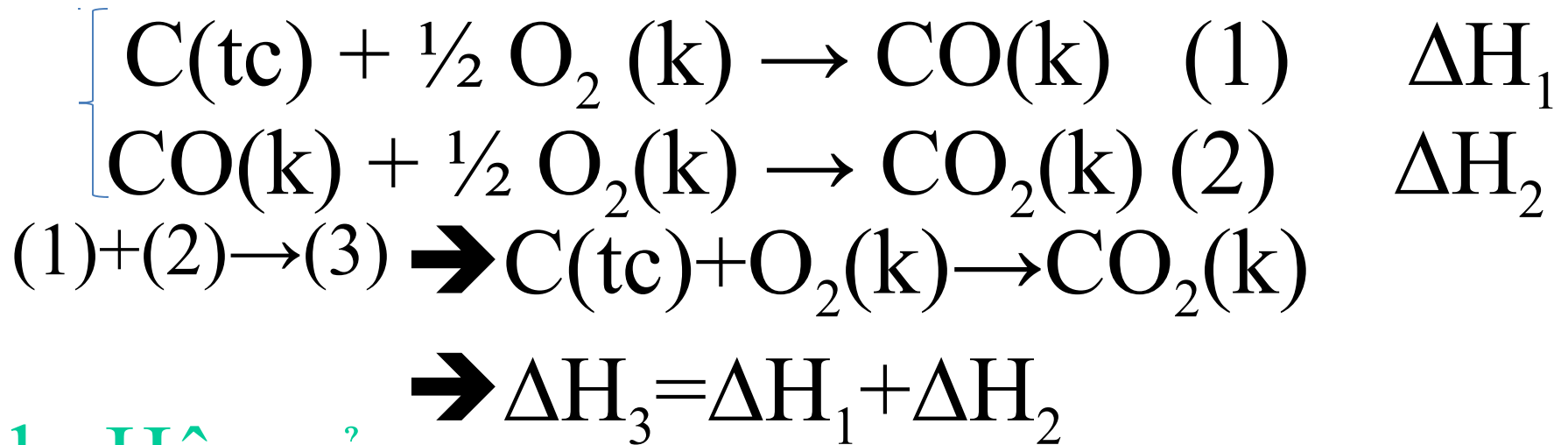
### a. Định luật Hess

*Một pư có thể xảy ra theo nhiều giai đoạn, hiệu ứng nhiệt tổng quát bằng tổng hiệu ứng nhiệt của các giai đoạn trung gian. Và hiệu ứng nhiệt tổng quát chỉ phụ vào trạng thái đầu và trạng thái cuối của pư*



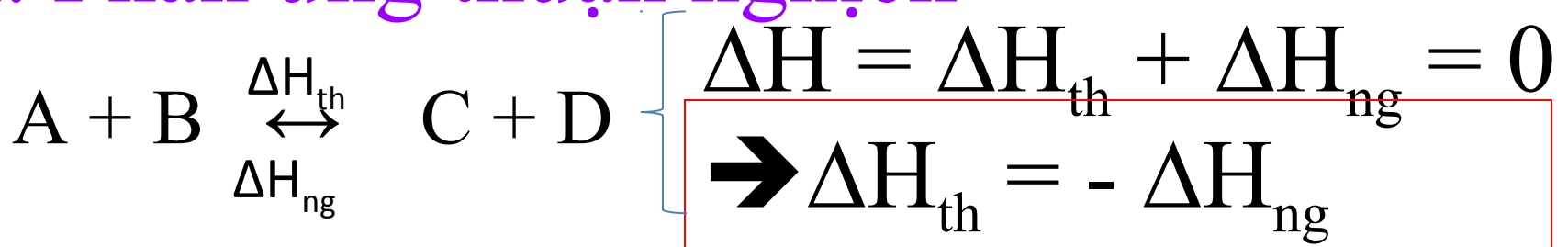


Có thể biểu diễn định luật Hess dưới dạng:

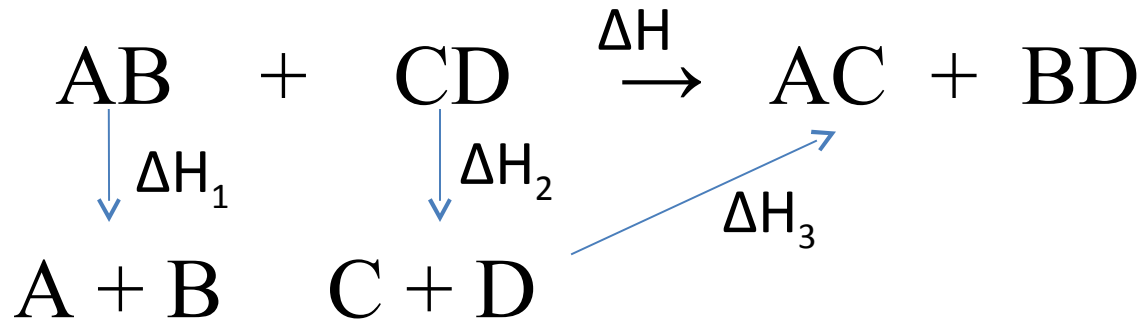


**b. Hệ quả:**

**α. Phản ứng thuận nghịch**



## $\beta$ . Tính h.ư nhiệt của pư theo nhiệt tạo thành



$$\Delta H = \Delta H_1 + \Delta H_2 + \Delta H_3$$

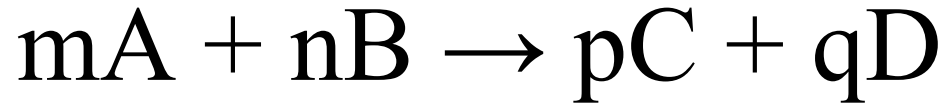
$$\Delta H_1 = -1 \cdot \Delta \bar{H}_{\text{tt},298}^0[\text{AB}]$$

$$\Delta H_2 = -1 \cdot \Delta \bar{H}_{\text{tt},298}^0[\text{CD}]$$

$$\Delta H_3 = +1 \cdot \Delta \bar{H}_{\text{tt},298}^0[\text{AC}] + 1 \cdot \Delta \bar{H}_{\text{tt},298}^0[\text{BD}]$$

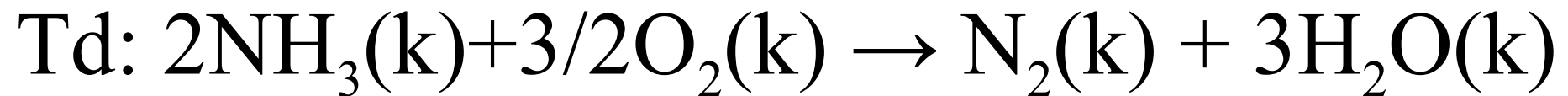
$$\begin{aligned} \Delta H = & \{ 1 \cdot \Delta \bar{H}_{\text{tt},298}^0[\text{AC}] + 1 \cdot \Delta \bar{H}_{\text{tt},298}^0[\text{BD}] \} \\ & - \{ 1 \cdot \Delta H_{298}^0[\text{AB}] + 1 \cdot \Delta H_{298}^0[\text{CD}] \} \end{aligned}$$

Xem pư tổng quát



$$\Delta H^0_{298} = \{ m\Delta H^0_{\text{tt},298}[\text{C}] + n\Delta H^0_{\text{tt},298}[\text{D}] \} \\ - \{ p\Delta H^0_{\text{tt},298}[\text{A}] + q\Delta H^0_{\text{tt},298}[\text{B}] \}$$

$$\Delta H^0_{298} = \sum \Delta H^0_{\text{tt},298}[\text{s.p}] - \sum \Delta H^0_{\text{tt},298}[\text{t.c}]$$



$$\Delta H^0_{298} = 3\Delta H^0_{\text{tt},298}[\text{H}_2\text{O}(\text{k})] - 2\Delta H^0_{\text{tt},298}[\text{NH}_3(\text{k})]$$

$$\Delta H^0_{298} = 3.(-241,8) - 2.(-46,2) = -633\text{kJ}$$

## $\gamma$ . Tính h.ư nhiệt của pư theo nhiệt cháy.

Xem pư:  $\text{H}_2\text{C}=\text{CH}_2(\text{k}) + \text{H}_2(\text{k}) \rightarrow \text{H}_3\text{C}-\text{CH}_3(\text{k})$



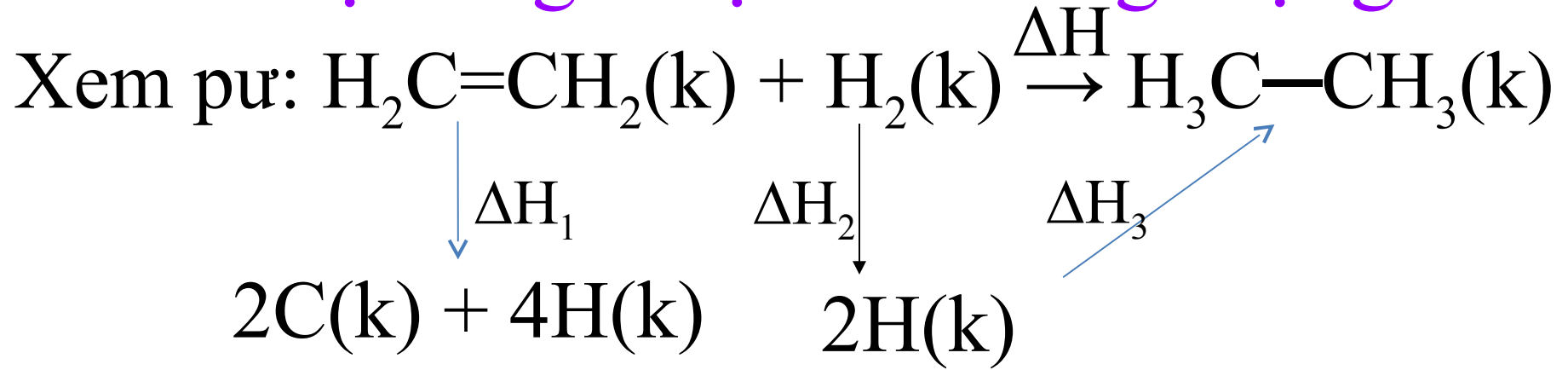
$(1) + (2) - (3) \rightarrow$  pư cần phải tính

$$\rightarrow \Delta H^\circ_{298} = \Delta H_1 + \Delta H_2 - \Delta H_3$$

$$\Delta H^\circ_{298} = 1 \cdot \Delta H^\circ_{\text{ch},298}[\text{C}_2\text{H}_4(\text{k})] + 1 \cdot \Delta H^\circ_{\text{ch},298}[\text{H}_2(\text{k})] \\ - 1 \cdot \Delta H^\circ_{\text{ch},298}[\text{C}_2\text{H}_6(\text{k})]$$

$$\Delta H^\circ_{298} = \sum \Delta H^\circ_{\text{ch},298}[\text{tc}] - \sum \Delta H^\circ_{\text{ch},298}[\text{sp}]$$

## δ. Tính hiệu ứng nhiệt theo năng lượng lk.



$$\Delta\text{H}^\circ_{298} = \Delta\text{H}_1 + \Delta\text{H}_2 + \Delta\text{H}_3$$

$$\Delta\text{H}_1 = E_{\text{C}=\text{C}} + 4E_{\text{CH}}$$

$$\Delta\text{H}_2 = E_{\text{H}-\text{H}}$$

$$\Delta\text{H}_3 = -E_{\text{C}-\text{C}} + -6E_{\text{C}-\text{H}}$$

$$\Delta\text{H}^\circ_{298} = \{E_{\text{C}=\text{C}} + 4E_{\text{C}-\text{H}} + E_{\text{H}-\text{H}}\} - \{E_{\text{C}-\text{C}} + 6E_{\text{C}-\text{H}}\}$$

$$\Delta\text{H}^\circ_{298} = \sum E_{\text{đứt}} - \sum E_{\text{ráp}}$$

Xét dấu  $\Delta H^\circ_{298}$  của phản ứng:

$\Delta H^\circ_{298} < 0 \Rightarrow$  pư phát nhiệt: pư dễ xảy ra.

$\Delta H^\circ_{298} > 0 \Rightarrow$  pư thu nhiệt: pư khó xảy ra.

$\Delta H^\circ_{298} = 0 \Rightarrow$  pư đoạn nhiệt: pư khó xảy ra.

Pư có  $\Delta H$  càng  $< 0 \Rightarrow$  càng dễ xảy ra.

Td: pư:  $H_2 + X_2 \rightarrow 2HX$        $X(\text{ halogen})$



$\Delta H^\circ_{298} \uparrow \Rightarrow$  pư càng khó xr



# III. Ng. lý 2 nhiệt động lực học - chiều q.t

## 1. Nguyên lý 2 nhiệt động lực học – Entropi

$n_A \text{ mol}$ khí	Chân không
--------------------------	---------------

(1)

Tự nhiên



$n_A \text{ mol}$ khí
-----------------------

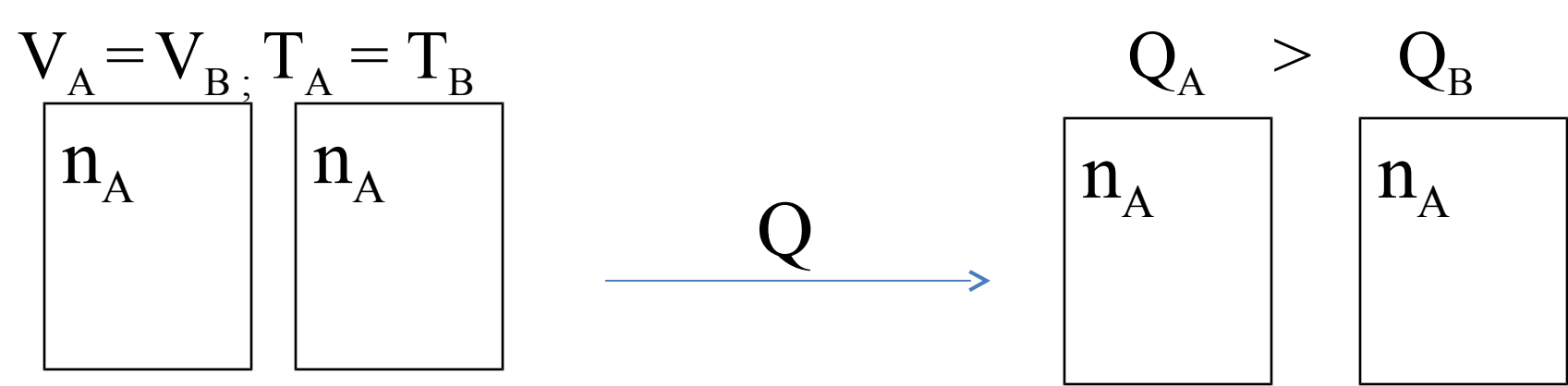
(2)

$$V_A = V_B$$

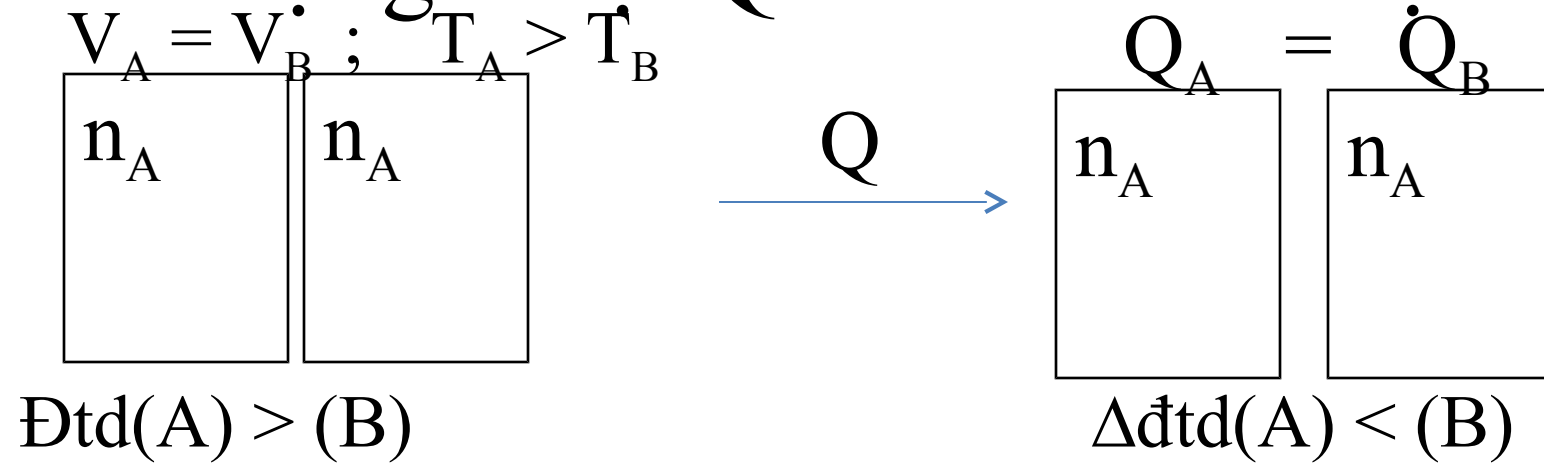
$$V = V_A + V_B$$

Khi hệ thực hiện quá trình từ (1)  $\rightarrow$  (2) :  
Độ: (tự do, xáo trộn, bất trật tự), xác suất  
hiện diện phân tử khí  $\uparrow$

Trong q.t tự nhiên, hệ luôn đi từ trạng thái có  
độ tự do, xs hiện diện p.tử khí thấp đến trạng  
thái có độ tự do, xs hiện diện ph.tử khí cao.



$\Delta_{\text{xt, đtd}}(A) = (B)$   $\Delta_{\text{xt, đtd}}(A) \uparrow > (B)$   
**→** Biến thiên của đxt, đtd của hệ tỷ lệ thuận  
 với lượng nhiệt  $Q$  trao đổi của hệ.



**→**  $\Delta$  đtd của hệ tỷ lệ nghịch với nhiệt độ  
 đang khảo sát của hệ

Vậy: Mỗi trạng thái của hệ được biểu diễn bởi 1 h.số x.s entropi  $S$  ( $S$  là h.số biểu diễn độ tự do, xáo trộn, bất trật tự, và x.s hiện diện ph.tử của hệ), mà biến thiên của  $S$  được cho bởi hệ thức:

$$\Delta S \geq \frac{Q}{T} \quad \begin{array}{l} \text{Q.t thuận nghịch} \rightarrow \Delta S_{\text{hệ}} = Q_{\text{tn}}/T \\ \text{Q.t tự nhiên} \rightarrow \Delta S_{\text{hệ}} > Q_{\text{ktn}}/T \end{array}$$

Mỗi hóa chất đều có 1 giá trị  $\bar{S}^0_{298} > 0$  x.đ .

Hóa chất có  $S \uparrow \rightarrow$  độ tự do  $\uparrow$

Với 1 hóa chất:  $S_k > S_l > S_r$

## 2. Tính biến thiên entropi của 1 phản ứng.

Xem pư:  $m\text{A} + n\text{B} \rightarrow p\text{C} + q\text{D}$

$$\Delta S^\circ_{298} = \{ p\bar{S}^\circ_{298}[\text{C}] + q\bar{S}^\circ_{298}[\text{D}] \} - \{ m\bar{S}^\circ_{298}[\text{A}] + n\bar{S}^\circ_{298}[\text{B}] \}$$

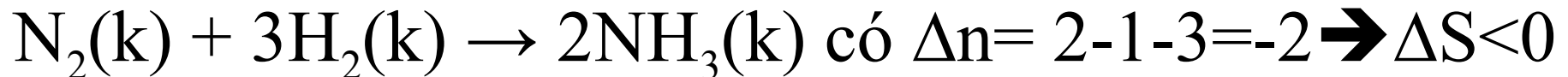
$$\Delta S^\circ_{298} = \sum S^\circ_{298}[\text{sp}] - \sum S^\circ_{298}[\text{tc}]$$

Td:  $\text{CaCO}_3(\text{r}) \rightarrow \text{CaO}(\text{r}) + \text{CO}_2(\text{k})$

$$\Delta S^\circ_{298} = 1.\bar{S}^\circ_{298}[\text{CaO}(\text{r})] + 1.\bar{S}^\circ_{298}[\text{CO}_2(\text{k})] - 1.\bar{S}^\circ_{298}[\text{CaCO}_3(\text{r})]$$

$$\Delta S^\circ_{298} = 39,7 + 213,7 - 88,7 = 164,7 \text{ kJ/}^\circ\text{K}$$

\* Có thể dự đoán dấu của  $\Delta S$  dựa vào  $\Delta n$  của pư:  
 $\Delta n > 0 \rightarrow \Delta S > 0$ ;  $\Delta n < 0 \rightarrow \Delta S < 0$ ;  $\Delta n = 0 \rightarrow$  tính cụ thể



### 3. Xét dấu $\Delta S$ của pư:

Một pư có:  $\left\{ \begin{array}{l} \Delta S > 0 \rightarrow \text{dễ xảy ra.} \\ \Delta S = 0 \rightarrow \text{khó xảy ra.} \\ \Delta S < 0 \rightarrow \text{khó xảy ra.} \end{array} \right. \begin{array}{l} \Delta S \uparrow \\ \rightarrow \text{dễ} \\ \text{xr} \end{array}$

### 4. Chiều của pư

Ng.lý 1; 2 không kết luận được pư xảy ra được hay không. Do đó phải kết hợp 2 ng.lý  $G=H-TS$  (G: hàm Gibb, năng lượng tự do)

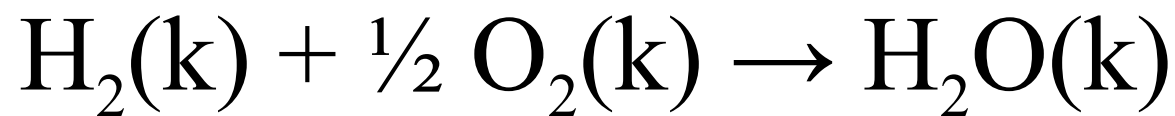
Khi hệ thực hiện quá trình từ (1)  $\rightarrow$  (2):

$$\Delta G = G_2 - G_1 = (H_2 - TS_2) - (H_1 - TS_1)$$

$$\Delta G = (H_2 - H_1) - T(S_2 - S_1) = \Delta H - T\Delta S$$

$$\Delta G^\circ_T = \Delta H^\circ_T - T\Delta S^\circ_T$$

$\Delta \bar{G}^{\circ}_{\text{tt},298}$  [hóa chất]:  $\Delta G^{\circ}_{298}$  của pư tạo thành 1 mol hóa chất từ các đơn chất bền ở đkc.



$$\Delta G^{\circ}_{298} = \Delta \bar{G}^{\circ}_{\text{tt},298}[\text{H}_2\text{O}(\text{k})]$$

$$\cdot \Delta \bar{G}^{\circ}_{\text{tt},298}[\text{đơn chất}] = 0$$

Xem pư:  $m\text{A} + n\text{B} \rightarrow p\text{C} + q\text{D}$

$$\Delta G^{\circ}_{298} = \{p\Delta \bar{G}^{\circ}_{\text{tt},298}[\text{C}] + q\Delta \bar{G}^{\circ}_{\text{tt},298}[\text{D}]\} \\ - \{m\Delta \bar{G}^{\circ}_{\text{tt},298}[\text{A}] + n\Delta \bar{G}^{\circ}_{\text{tt},298}[\text{B}]\}$$

$$\Delta G^{\circ}_{298} = \sum \Delta \bar{G}^{\circ}_{\text{tt},298}[\text{sp}] - \sum \Delta \bar{G}^{\circ}_{\text{tt},298}[\text{tc}]$$

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

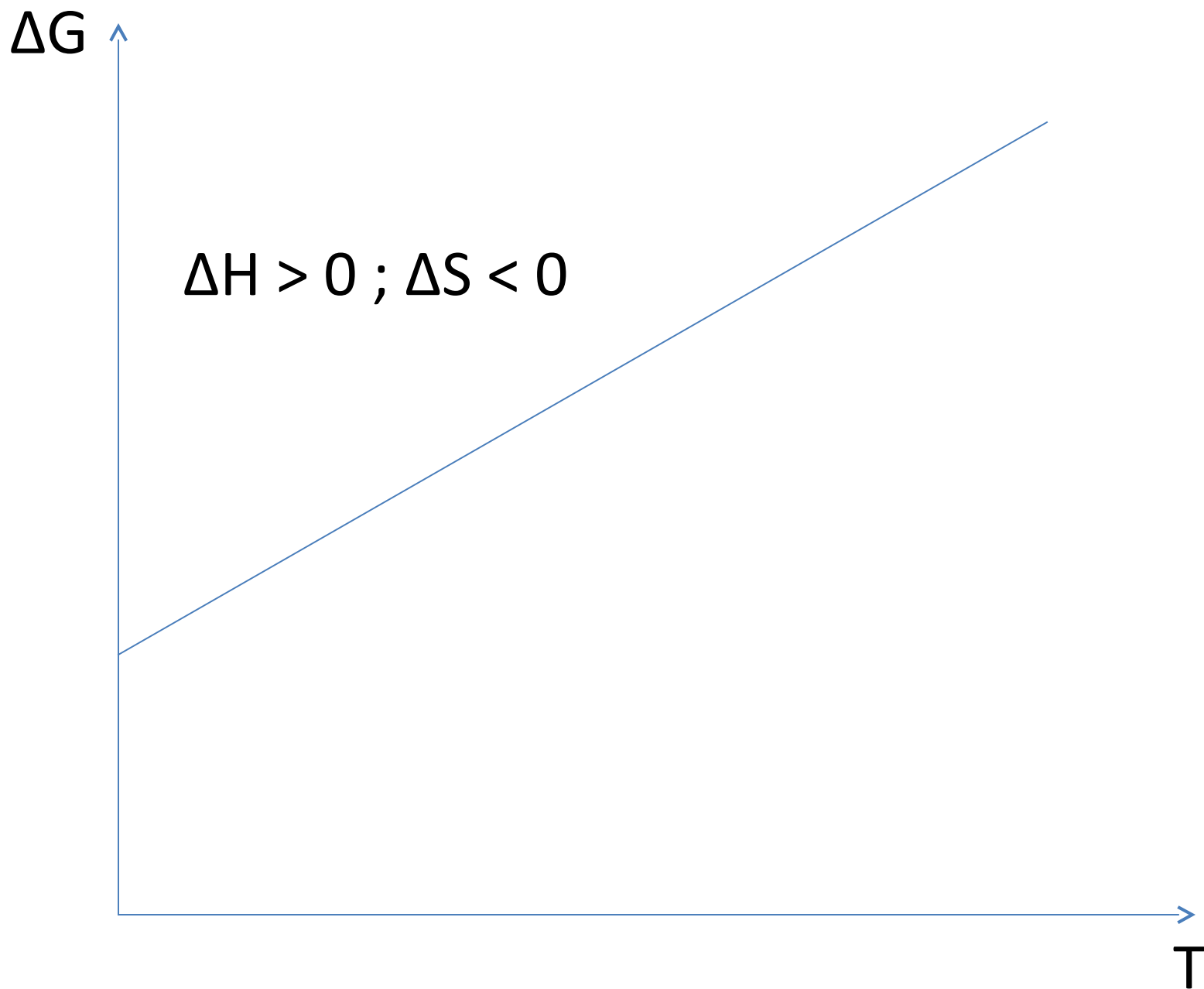
\*  $\Delta H < 0, \Delta S > 0 \rightarrow \Delta G < 0$ : pư tự xảy ra ( $\rightarrow$ )

\*  $\Delta H > 0, \Delta S < 0 \rightarrow \Delta G > 0$ : pư tự xảy ra ( $\leftarrow$ )

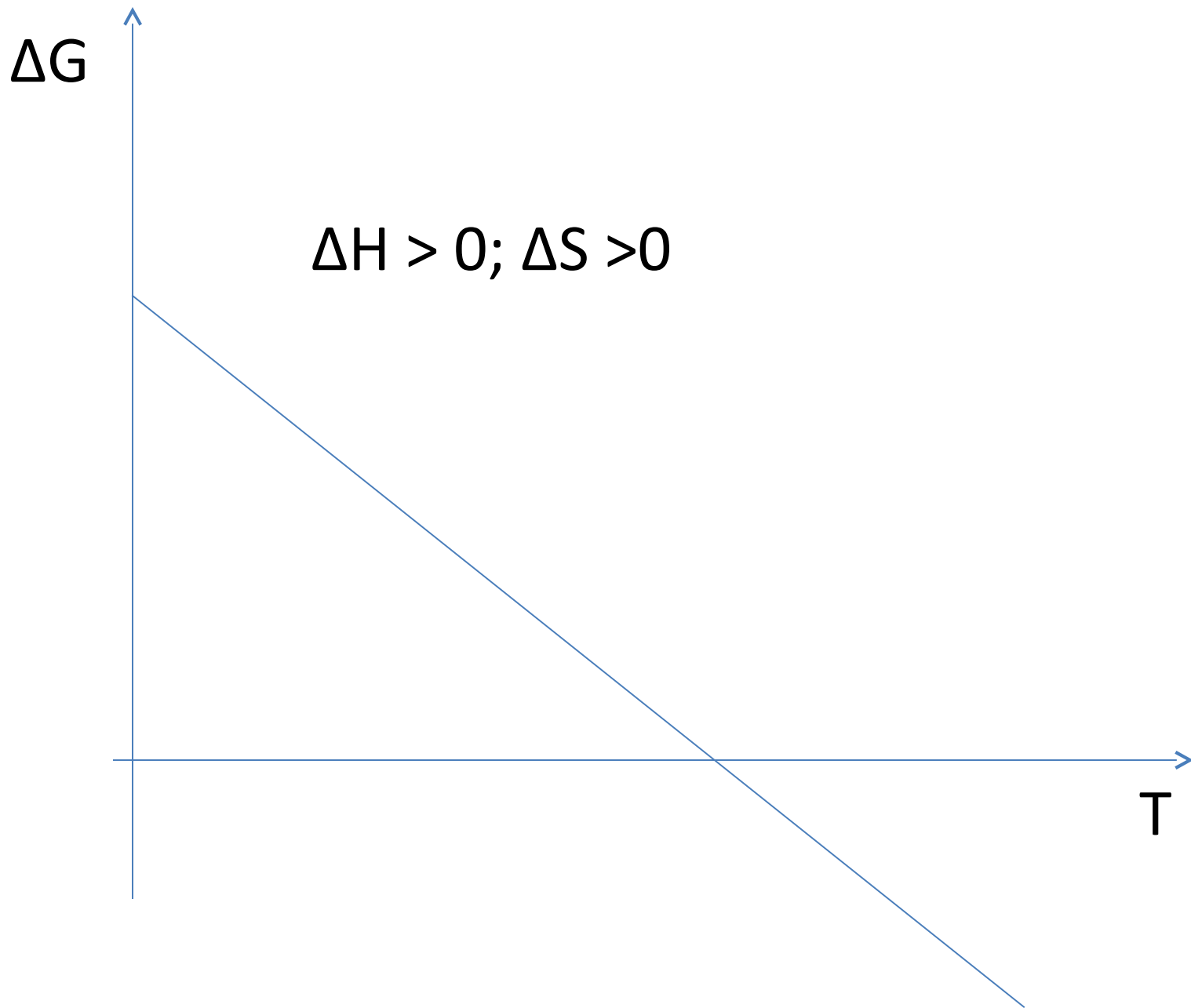
$$\begin{array}{l} \Delta H < 0, \\ \Delta S < 0: \end{array} \left\{ \begin{array}{l} |\Delta H| > |T\Delta S| \rightarrow \Delta G < 0: (\rightarrow). \\ |\Delta H| < |T\Delta S| \rightarrow \Delta G > 0: (\leftarrow). \\ |\Delta H| = |T\Delta S| \rightarrow \Delta G = 0: (\leftrightarrow) \end{array} \right.$$

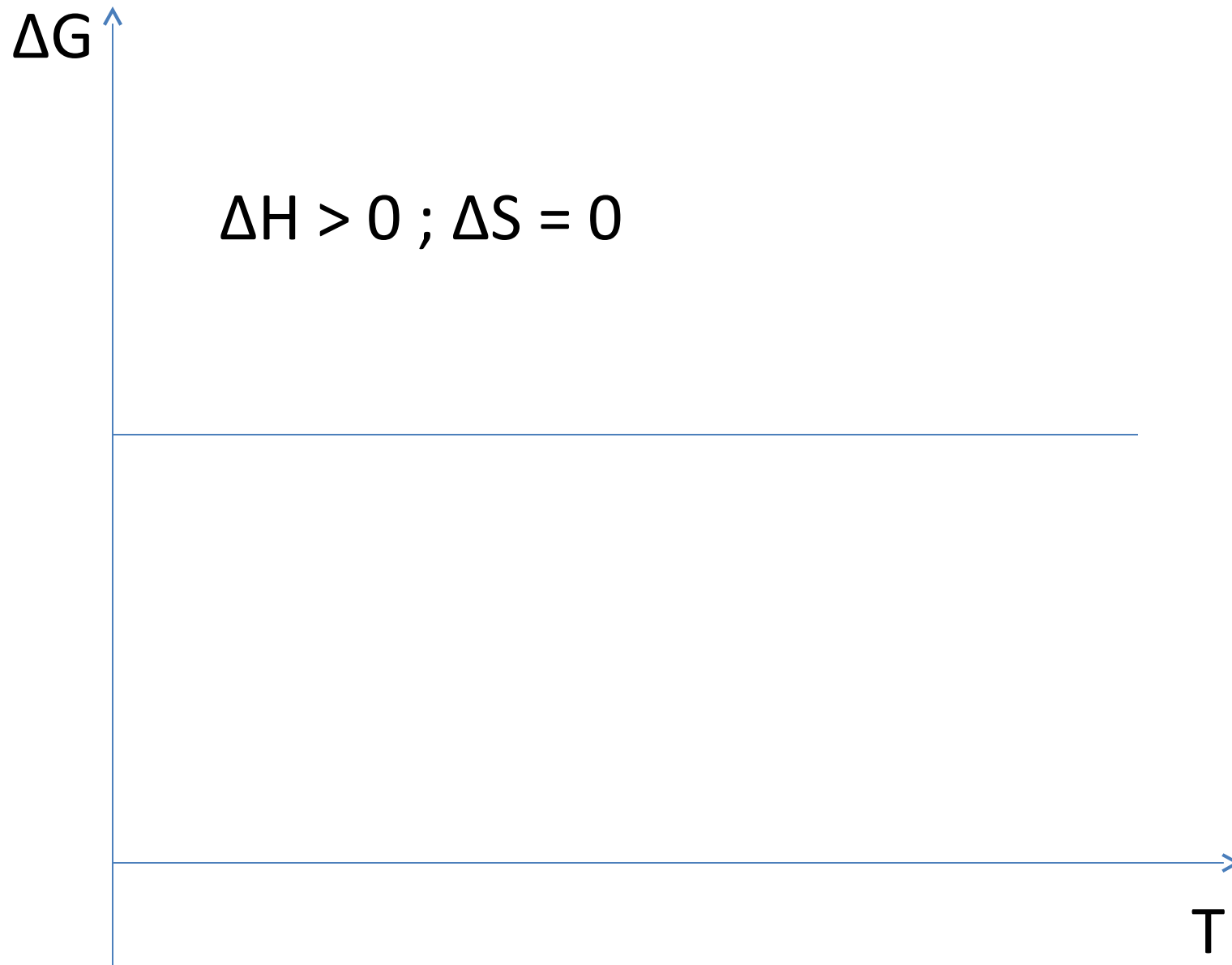
$$\begin{array}{l} \Delta H > 0, \\ \Delta S > 0: \end{array} \left\{ \begin{array}{l} |\Delta H| < |T\Delta S| \rightarrow \Delta G < 0: (\rightarrow) \\ |\Delta H| > |T\Delta S| \rightarrow \Delta G > 0: (\leftarrow) \\ |\Delta H| = |T\Delta S| \rightarrow \Delta G = 0: (\leftrightarrow) \end{array} \right.$$

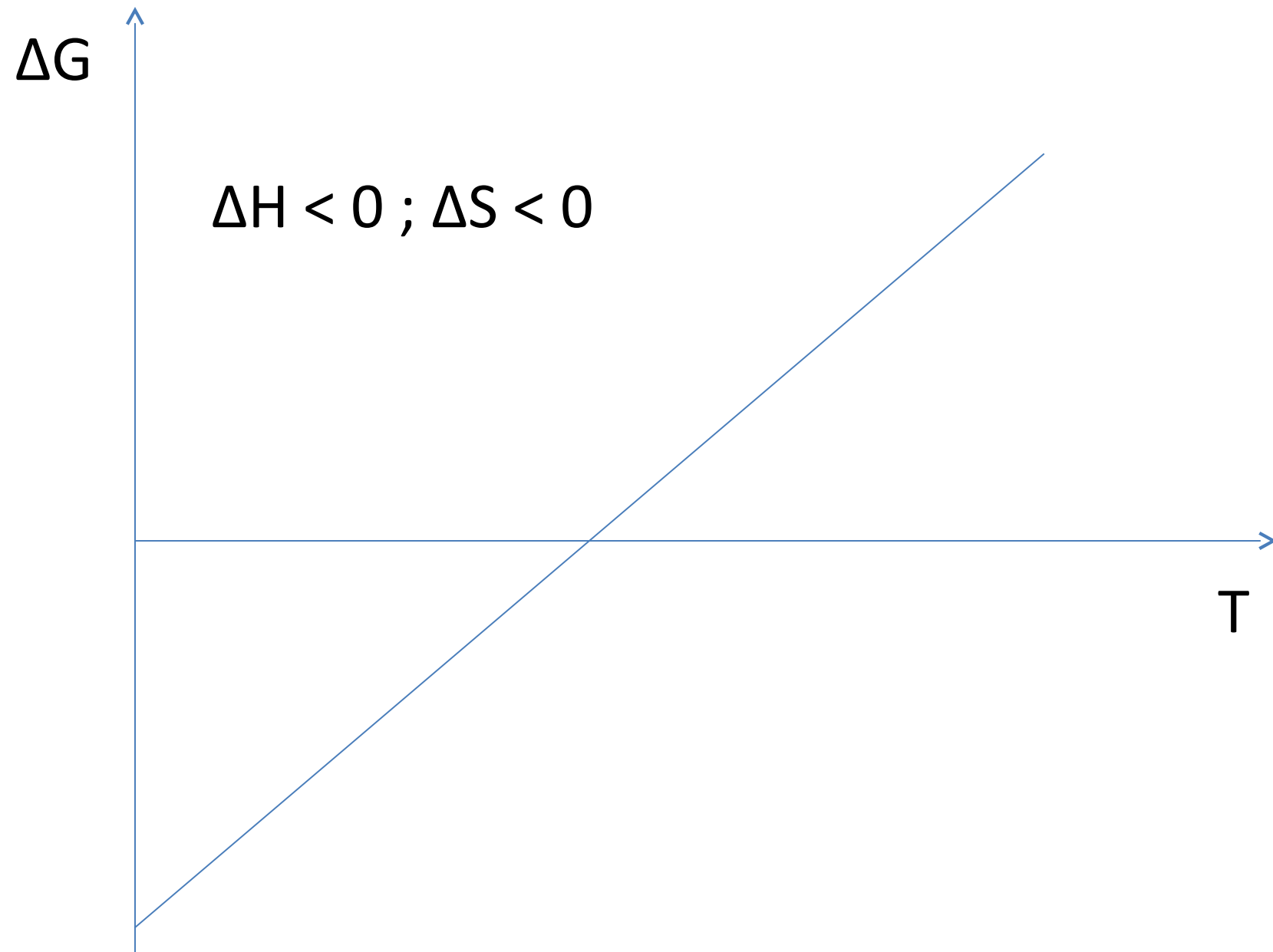
Vẽ đường biểu diễn  $\Delta G$  theo T ta có:

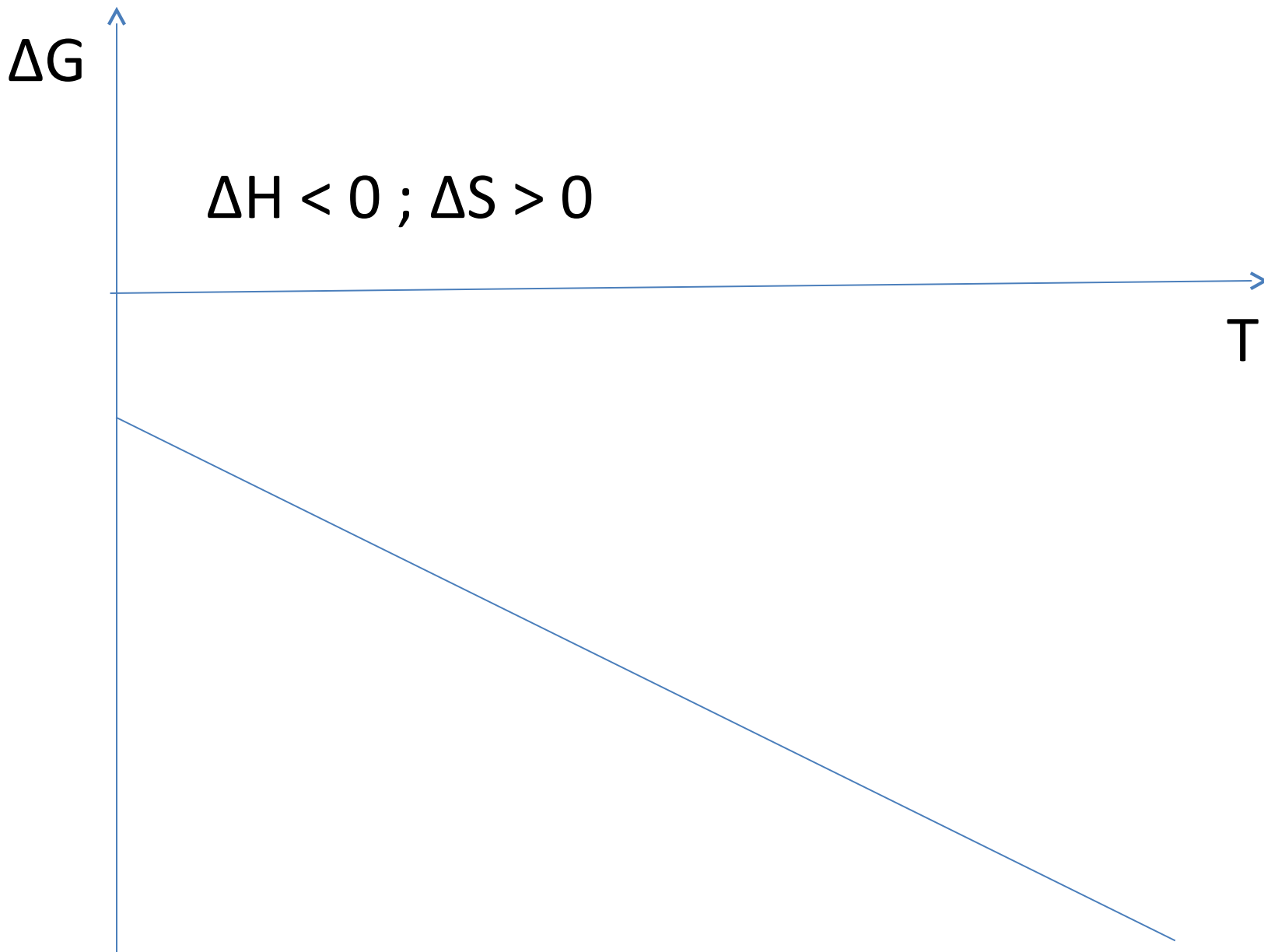


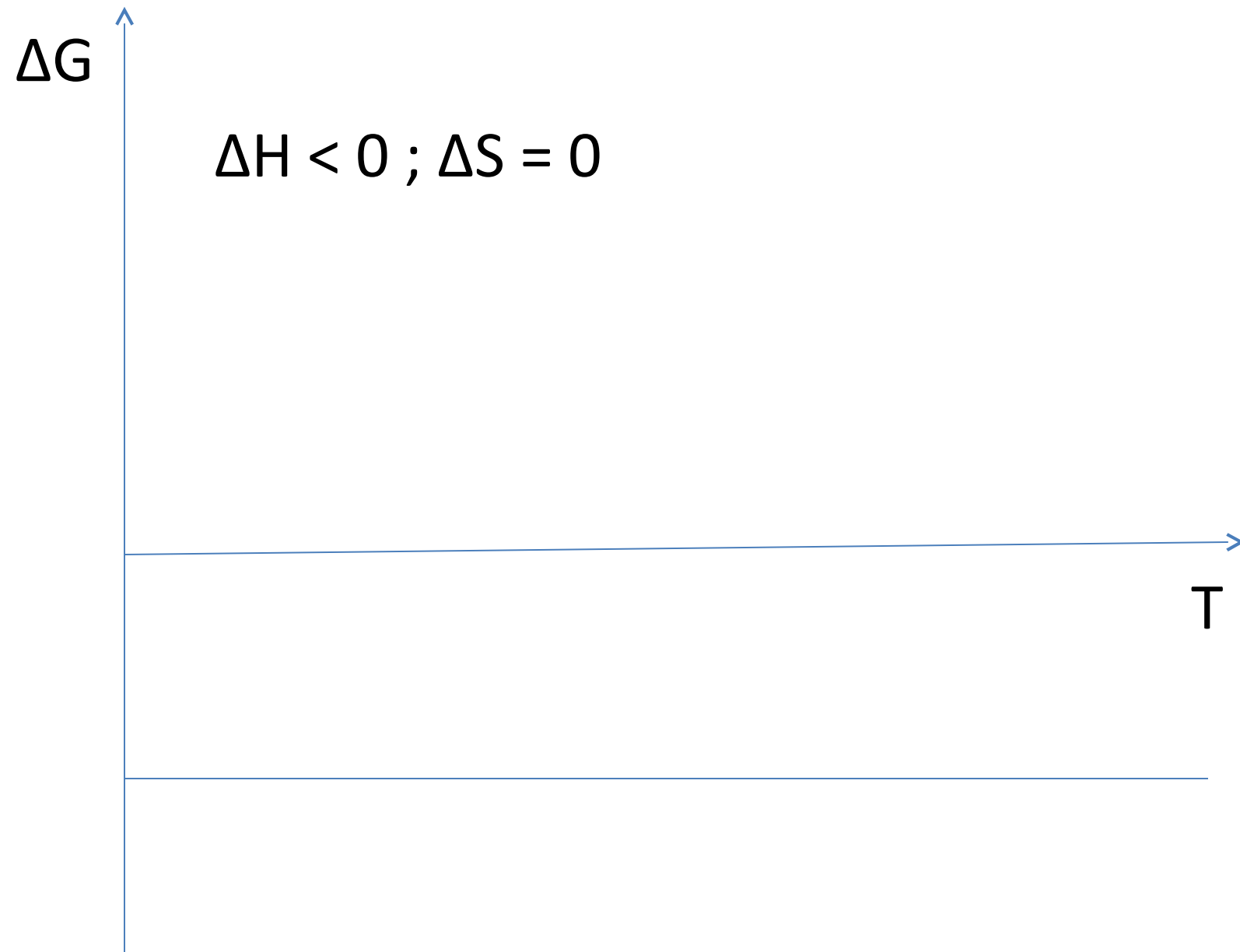


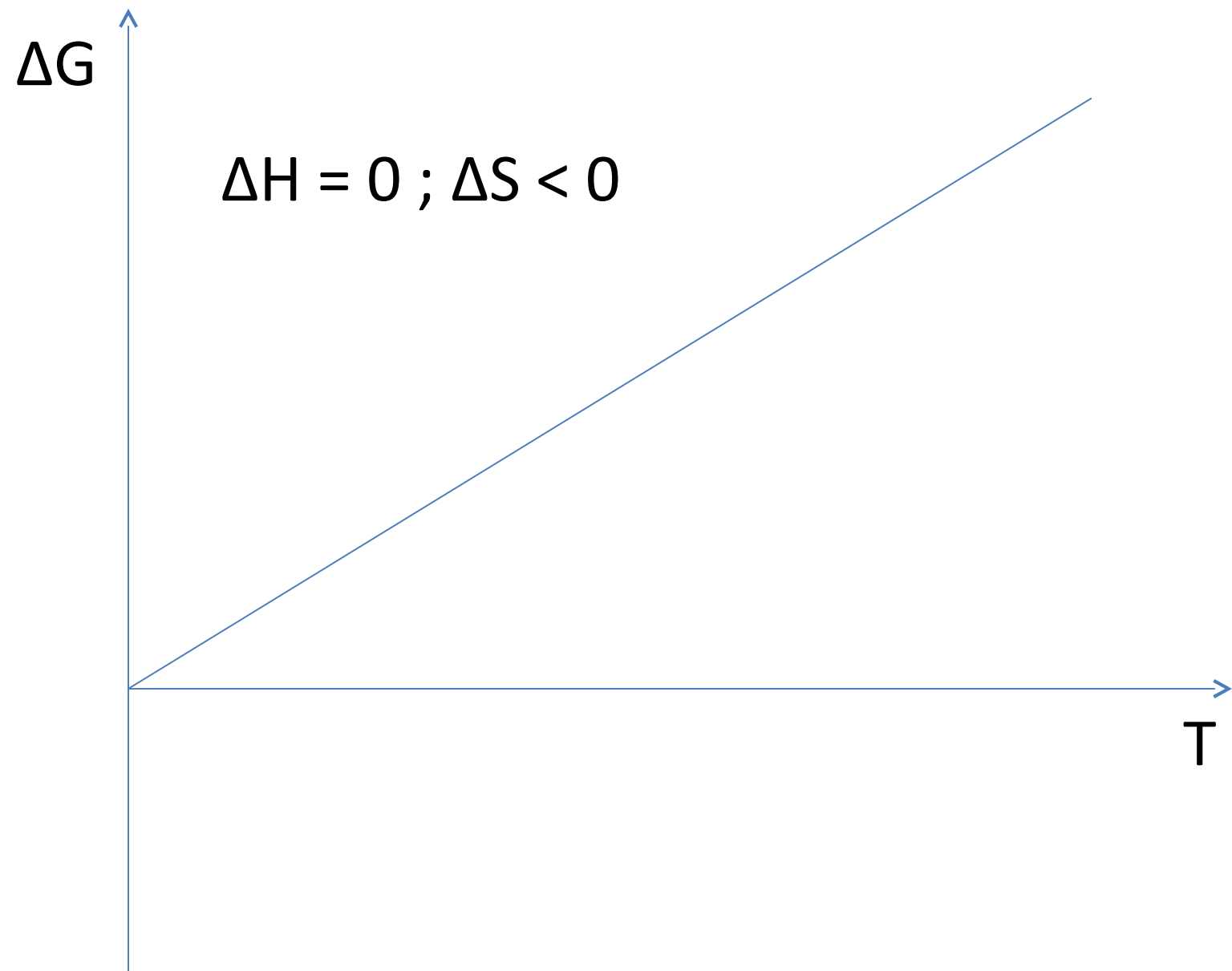


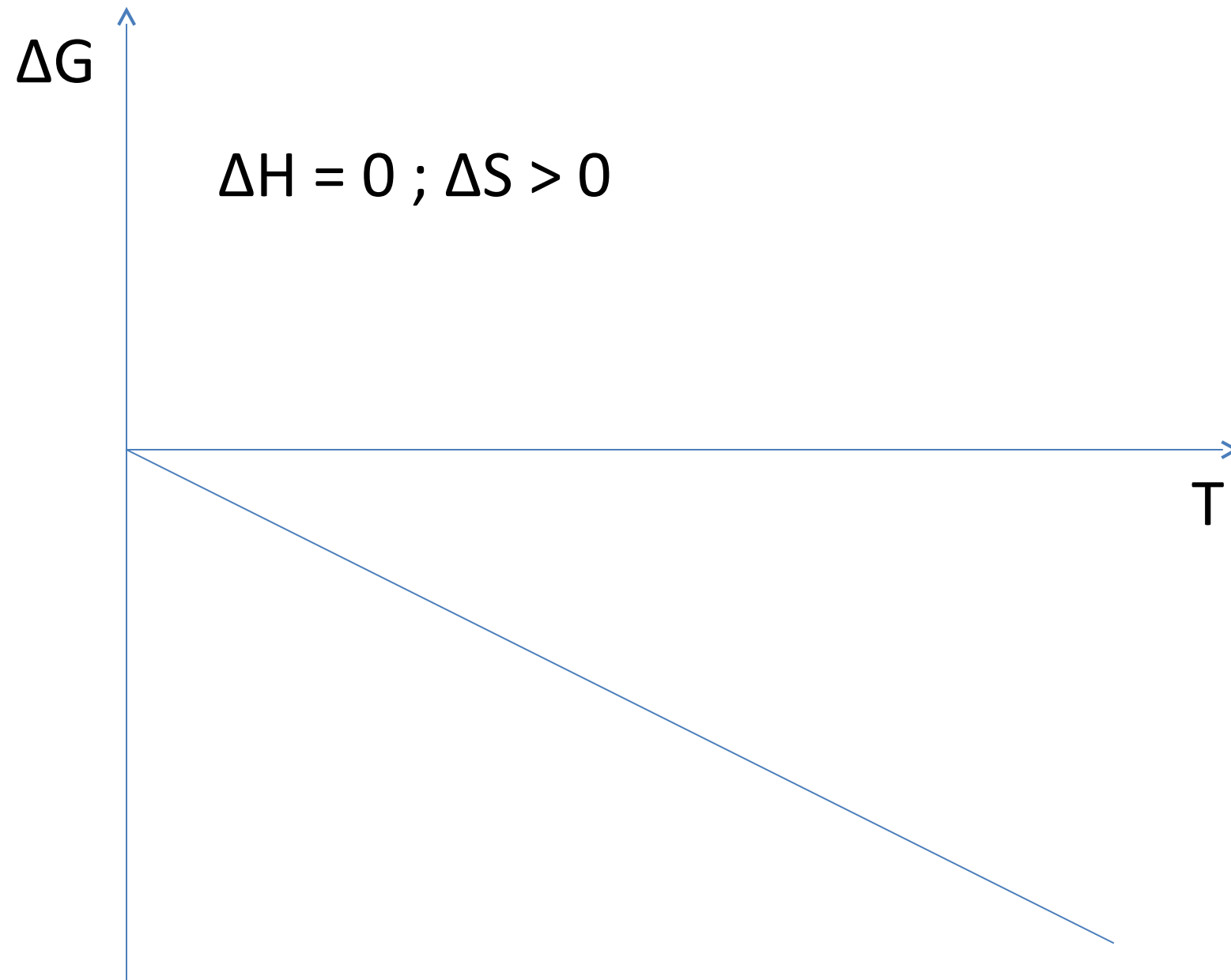


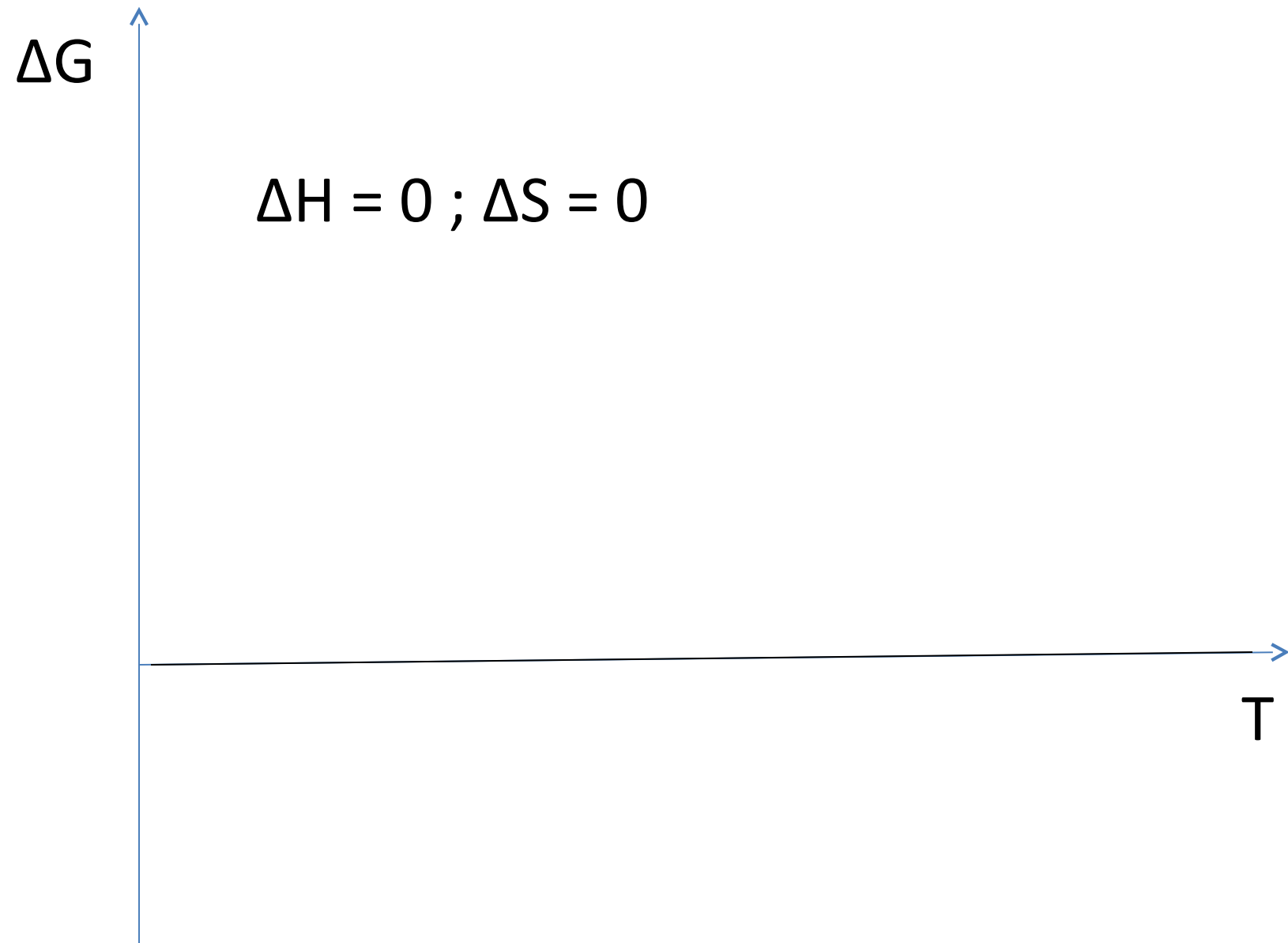














# CHƯƠNG IV

## TỐC ĐỘ PƯ-CÂN BẰNG HÓA HỌC

### I. Tốc độ phản ứng

#### 1. Biểu thức tốc độ phản ứng

Xem pư:  $m A + n B \rightarrow p C + q D$

$$v = k(C_A)^m(C_B)^n \left\{ \begin{array}{l} k: \text{hs tốc độ pư}; k > 0; k = f(T) \\ \text{Bậc } m \text{ theo } A, \text{ bậc } n \text{ theo } B \\ \text{Pư bậc } (m + n) \text{ tổng quát} \end{array} \right.$$

\*  $m, n$  là các trị số thực nghiệm: có thể là số nguyên, thập phân

\*  $m, n \neq$  hệ số pư, chỉ đối với pư đơn giản ( chỉ xảy ra 1 giai đoạn): bậc pư trùng hệ số pư

\* Trường hợp các chất tham gia pư là chất khí, ta có thể dùng nồng độ hoặc áp suất.

$$v = kC_A^m.C_B^n \quad \text{hoặc} \quad v = kp_A^m.p_B^n$$

\* trường hợp các chất pư gồm (lỏng và rắn)

Ta có:  $v = kS.C_i^m$  :  $S_i$  là bề mặt hoạt động của chất rắn.

\* Trường hợp các chất pư gồm khí và rắn, ta chỉ chú ý đến chất khí:  $v = kp_i^m$

## 2. Các yếu tố ảnh hưởng đến tốc độ pư

### a. Ảnh hưởng của nồng độ ( $T = \text{const}$ )

$m\text{A} + n\text{B} \rightarrow p\text{C} + q\text{D}$ : pư đơn giản.

$$v_1 = kC_A^m \cdot C_B^n : C'_A = xC_A \text{ và } C'_B = yC_B$$

$$v_2 = k(C'_A)^m \cdot (C'_B)^n = k(xC_A)^m \cdot (yC_B)^n$$
$$= kx^m y^n C_A^m C_B^n$$

$$v_2/v_1 = x^m \cdot y^n$$

\* Hỗn hợp pư là chất khí: Có thể dùng áp suất

$$v_1 = kp_A^m \cdot p_B^n ; v_2 = k(xp_A)^m \cdot (yp_B)^n$$

$$\rightarrow v_2/v_1 = x^m \cdot y^n$$

$$\text{Td}_1: \text{pr: } 2A + B \rightarrow C : C'_A = 2C_A; C'_B = C_B$$

$$v = kC_A^2.C_B : x=2; y=1; \mathbf{v_2/v_1} = x^2.y^1 = 2^2.1^1 = \mathbf{4}$$

$$\text{Td}_2; mA + nB \rightarrow pC + qD : V = kC_A^m.C_B^n$$

$$.C'_A = 2C_A; C'_B = C_B : v_2/v_1 = 4 = 2^m.1^n = 2^m \rightarrow \mathbf{m=2}$$

$$.C'_A = C_A; C'_B = 2C_B : v_2/v_1 = 2 = 1^m.2^n = 2^n \rightarrow \mathbf{n=1}$$

$$\rightarrow \mathbf{v = kC_A^2C_B}$$

$$\text{Td}_3: 2\text{NO}(k) + \text{O}_2(k) \rightarrow 2\text{NO}_2(k) : v = kp_{\text{NO}}^2.p_{\text{O}_2}$$

Khi tăng  $V_{\text{bình}}$  lên 2 lần  $\rightarrow$  áp suất các khí giảm 2 lần

$$p'_A = 1/2 p_A; p'_B = 1/2 p_B : \mathbf{v_2/v_1} = (1/2)^2.(1/2)^1 = \mathbf{1/8}$$

## b. Ảnh hưởng của nhiệt độ.(nồng độ không đổi)

### α. Hệ thức Van't Hoff

$$T_1 \rightarrow v_1, k_1, t_1; T_2 \rightarrow v_2, k_2, t_2$$

$$v_1 = k_1 C_A^m C_B^n; v_2 = k_2 C_A^m C_B^n$$

$$\frac{v_2}{v_1} = \frac{k_2}{k_1} = \frac{t_1}{t_2} = \gamma^{\frac{\Delta T}{10}}$$

$\gamma$ : hệ số nhiệt độ của k,  
 $\gamma > 1$

$$\Delta T = T_2 - T_1$$

$$\Delta T = 10^0 \Rightarrow v_2/v_1 = \gamma$$

$$*Td_1: T_1=20^{\circ}\text{C} \rightarrow T_2=50^{\circ}\text{C}; \gamma=3$$

$$\rightarrow v_2/v_1 = 3^{(50-20)/10} = 27$$

$$*Td_2: T_1=20^{\circ}\text{C} \rightarrow T_2=50^{\circ}\text{C};$$

$$v_2/v_1 = 8 = \gamma^{(50-20)/10} = \gamma^3 \rightarrow \gamma = 2$$

$$*Td_3: T_1=20^{\circ}\text{C}, t_1=3^{\text{h}} \rightarrow T_2=40^{\circ}\text{C}; \gamma=3 \rightarrow t_2=?$$

$$\bullet t_1/t_2 = \gamma^{(40-20)/10} = \gamma^2 = 3^2 = 9 = 180/t_2$$

$$\rightarrow t_2 = 180/9 = 20'$$

$$Td_4: T_1=20^{\circ}\text{C}, t_1=3^{\text{h}}, \gamma=3 \rightarrow t_2=20' \rightarrow T_2=?$$

$$\bullet t_1/t_2 = \gamma^{\Delta T/10} = 3^{\Delta T/10} = 180/20 = 9 \rightarrow \Delta T/10 = 2$$

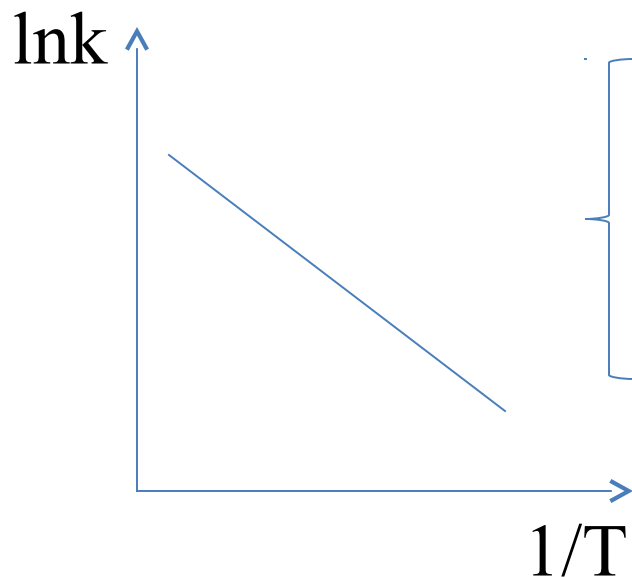
$$\rightarrow T_2 = 40^{\circ}\text{C}$$

## β. Hệ thức Arrhenius

$$k = \alpha \cdot e^{-E_a/RT} \left\{ \begin{array}{l} E_a: \text{năng lượng hoạt hóa pư} \\ \alpha = hs: \text{thừa số tần số.} \\ E_a > 0; E_a \uparrow \Rightarrow k \downarrow \end{array} \right.$$

$$T \rightarrow \infty \Rightarrow E_a/RT \rightarrow 0 \Rightarrow k = \alpha \text{ (hs tốc độ ở } T = \infty)$$

$$\ln k = -E_a/RT + \ln \alpha; \text{ vẽ } \ln k = f(1/T)$$



$\ln k$  nghịch biến với  $1/T$   
 $\Rightarrow \ln k$  đồng biến với  $T$   
 $T \uparrow \Rightarrow k \uparrow; T \downarrow \Rightarrow k \downarrow$

$$T_1, k_1 \rightarrow \ln k_1 = -E_a/RT_1 + \ln \alpha$$

$$T_2, k_2 \rightarrow \ln k_2 = -E_a/RT_2 + \ln \alpha$$

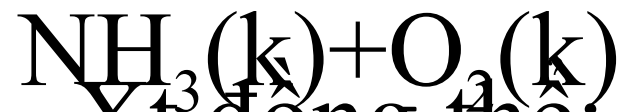
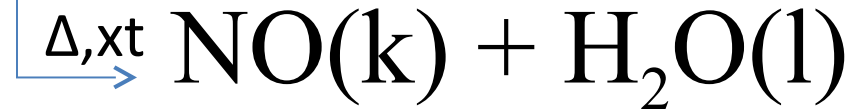
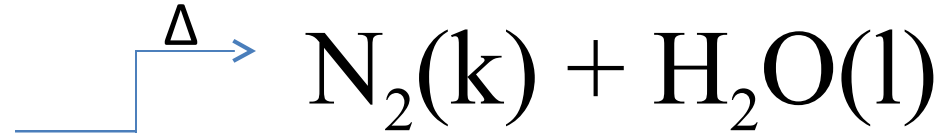
$$\ln k_2 - \ln k_1 = - \frac{E_a}{R} \left( \frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right)$$

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



### c. Ảnh hưởng của chất xúc tác(cxt)

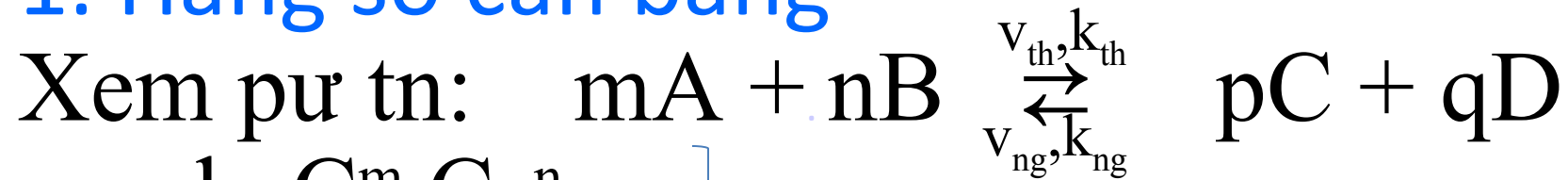
Cxt là chất được cho vào pư với lượng rất nhỏ, làm  $v \uparrow$  hoặc định hướng pư theo chiều mong muốn. Sau pư, cxt được hoàn trả lại mt



- Xt đồng thể: cxt và chất pư ở cùng 1 pha
- Xt dị thể: cxt và cpư ở 2 pha khác nhau
- Cxt làm  $v \uparrow$  là do làm giảm  $E_a$  của pư

## II. Cân bằng hóa học.

### 1. Hằng số cân bằng



$$\left. \begin{aligned} v_{th} &= k_{th} C_A^m \cdot C_B^n \\ v_{ng} &= k_{ng} C_C^p \cdot C_D^q \end{aligned} \right\} v_{tq} = v_{th} - v_{ng}$$

$$v_{tq} = k_{th} C_A^m \cdot C_B^n - k_{ng} C_C^p \cdot C_D^q$$

•  $t \rightarrow t_0: C_A \text{ và } C_B \gg C_C \text{ và } C_D$

$$\Rightarrow v_{th} \gg v_{ng} \Rightarrow v \gg 0$$

•  $t \uparrow: C_A \text{ và } C_B \downarrow; C_C \text{ và } C_D \uparrow \Rightarrow v_{th} \downarrow; v_{ng} \uparrow \Rightarrow v_{tq} \downarrow$

•  $v_{th} = v_{ng} \rightarrow v_{tq} = 0 \rightarrow$  pư đạt trạng thái cân bằng ( $t_{cb}$ )

$$t_{cb}: k_{th}[A]^m[B]^n = k_{ng}[C]^p[D]^q$$

$$K_C = \frac{k_{th}}{k_{ng}} = \frac{[C]^p[D]^q}{[A]^m[B]^n}$$

$K_C$ : hs cb độ;  $K_C = f(T)$

$K_C > 0$ ;  $K_C \uparrow$ , cb  $\Rightarrow$  thuận

$K_C \downarrow$ , cb  $\Rightarrow$  nghịch

• Khi phản ứng đạt trạng thái cb, trong hỗn hợp pư còn đủ các chất có thành phần được xác định bằng biểu thức hằng số cb.

• Khi hỗn hợp pư là chất khí: có thể dùng  $K_p$

$$K_p = \frac{(p_C)^p \cdot (p_D)^q}{(p_A)^m \cdot (p_B)^n} \quad \text{cb}$$

$K_p$ : hs cb áp suất.  
 $K_p \uparrow$ ; cb  $\Rightarrow$  thuận.  
 $K_p \downarrow$ ; cb  $\Rightarrow$  nghịch

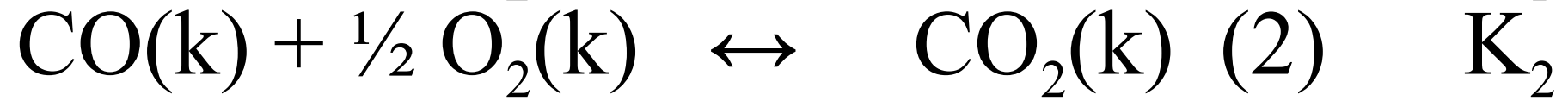
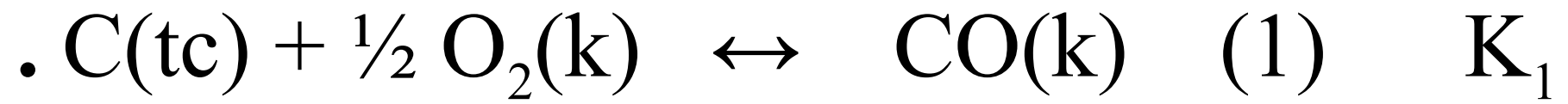
$$K_p = K_C \cdot (RT)^{\Delta n}; \quad K_p = f(T)$$

•  $2\text{NO}(k) + \text{O}_2(k) \leftrightarrow 2\text{NO}_2(k) \quad (1): \quad K_1$

a.  $(1) \Rightarrow 2a\text{NO}(k) + a\text{O}_2(k) \leftrightarrow 2a\text{NO}_2(k) \quad (2): \quad K_2$

$$K_1 = \frac{(p_{\text{NO}})^2 (p_{\text{O}_2})}{(p_{\text{NO}_2})^2} ; \quad K_2 = \frac{(p_{\text{NO}})^{2a} (p_{\text{O}_2})^a}{(p_{\text{NO}_2})^{2a}}$$

$$\Rightarrow K_2 = (K_1)^a$$



$$\rightarrow K_3 = K_1 \cdot K_2$$



• Pư có mặt các chất (r,l,k), ta dùng  $K_p$  và chỉ ghi áp suất chất khí trong biểu thức  $K_p$ .

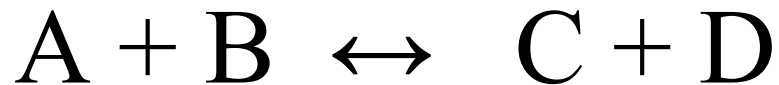
• Pư có mặt các chất (l,r), ta dùng  $K_c$  và chỉ ghi nồng độ chất lỏng trong biểu thức  $K_c$ .

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

### a. Định luật Le Chatelier

Khi pư đạt trạng thái cb, nếu ta thay đổi 1 yếu tố tác dụng lên hệ, thì cb sẽ dịch chuyển theo chiều ngược lại với sự thay đổi đó.

### b. Ảnh hưởng của nồng độ.



- + A vào hệ:  $C_A \uparrow \Rightarrow \text{cb} \Rightarrow C_A \downarrow$ : thuận( $\rightarrow$ )
- - A ra:  $C_A \downarrow \Rightarrow \text{cb} \Rightarrow C_A \uparrow$ : nghịch( $\leftarrow$ )
- + D vào hệ:  $C_D \uparrow \Rightarrow \text{cb} \Rightarrow C_D \downarrow$ : nghịch( $\leftarrow$ )
- - D ra:  $C_D \downarrow \Rightarrow \text{cb} \Rightarrow C_D \uparrow$ : thuận( $\rightarrow$ )

### c. Ảnh hưởng của áp suất

Áp suất chỉ ảnh hưởng đến cb nếu trong hệ có mặt chất khí.

Xét  $\Delta n = \sum n \text{ khí (sp)} - \sum n \text{ khí (tc)}$  của pư:  
Khi  $p \uparrow$  cb  $\Rightarrow \Delta n < 0$ ; khi  $p \downarrow$  cb  $\Rightarrow \Delta n > 0$

Td:  $\text{N}_2(\text{k}) + 3\text{H}_2(\text{k}) \leftrightarrow 2\text{NH}_3(\text{k})$ :  $\Delta n = -2$

$p \uparrow$  cb  $\Rightarrow \Delta n < 0$  : thuận( $\rightarrow$ )

$p \downarrow$  cb  $\Rightarrow \Delta n > 0$ : nghịch( $\leftarrow$ )

nếu  $\Delta n = 0 \rightarrow$  cb không dịch chuyển.

#### d. Ảnh hưởng của nhiệt độ.

Khi  $T \uparrow$  cb  $\Rightarrow$  thu nhiệt ( $\Delta H > 0$ )

Khi  $T \downarrow$  cb  $\Rightarrow$  phát nhiệt ( $\Delta H < 0$ )

Nếu  $\Delta H = 0 \Rightarrow$  cb không dịch chuyển

Td:  $\text{CaCO}_3(\text{r}) \leftrightarrow \text{CaO}(\text{r}) + \text{CO}_2(\text{k}) \quad \Delta H > 0$

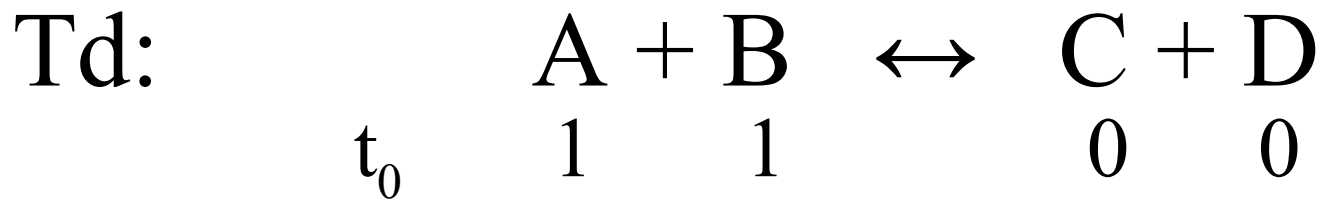
$T \uparrow$  cb  $\Rightarrow \Delta H > 0$  ; thuận ( $\rightarrow$ )

$T \downarrow$  cb  $\Rightarrow \Delta H < 0$  : nghịch ( $\leftarrow$ )

#### e. Ảnh hưởng của chất xúc tác.

Trong pư cb, thêm chất xt, nó làm  $v_{\text{th}} \uparrow$  đồng thời làm  $v_{\text{ng}} \uparrow$ ;  $\Delta v_{\text{th}} = \Delta v_{\text{ng}} \Rightarrow$  chất xt không làm dịch chuyển mức cb mà chỉ làm pư nhanh chóng đạt trạng thái cb.



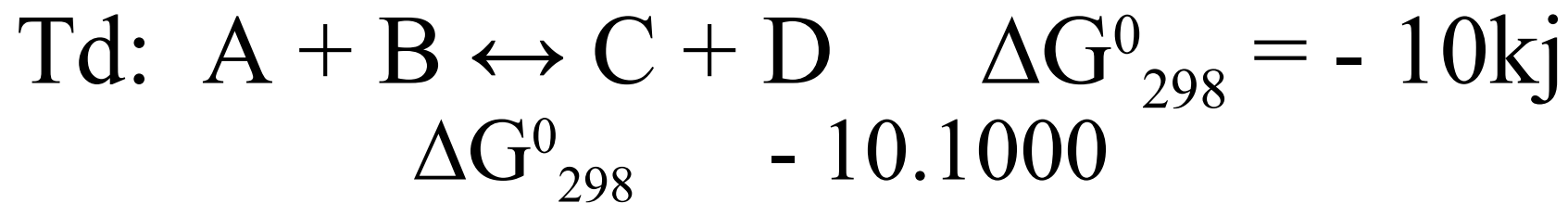


### 3. Sự liên hệ giữa $\Delta G^0_{298}$ và K của pư



Ta cũng tính được  $\Delta H^0_{298}$ ,  $\Delta S^0_{298}$ ,  $\Delta G^0_{298}$ , và K

$$\rightarrow \Delta G^0_T = -RT \ln K \quad \Delta G^0 \uparrow \rightarrow \ln K \downarrow \rightarrow K \downarrow$$

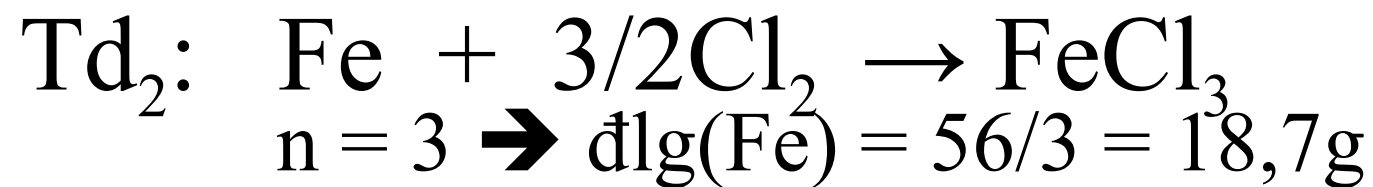


$$\rightarrow \ln K = - \frac{\Delta G^0_{298}}{RT} = - \frac{-10.1000}{8,3.298} = 4 \rightarrow K = 54,6$$

\* Đương lượng gam của 1 chất là số phần khối lượng của chất đó có thể kết hợp, thay thế với 1 phần khối lượng Hydro( $\text{đlg}=1$ ) hoặc 8 phần khối lượng Oxy( $\text{đlg}=8$ )

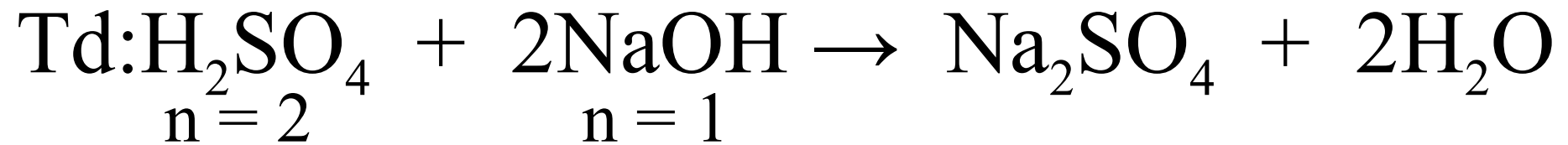
$$\text{Đ}_A = \frac{M_A(\text{g})}{n} \begin{cases} A: \text{ng.tử} \rightarrow M_A: \text{ng.tử gam} \\ A: \text{p.tử} \rightarrow M_A: \text{p.tử gam} \end{cases}$$

. A: nguyên tử; n: hóa trị của nguyên tử đó.

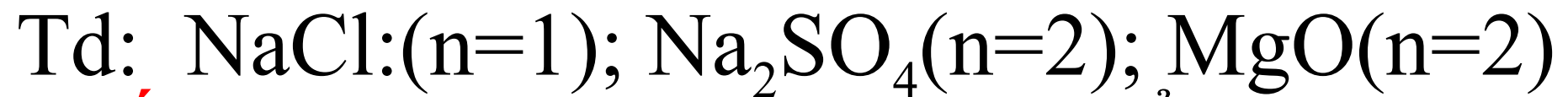


\* A: hợp chất

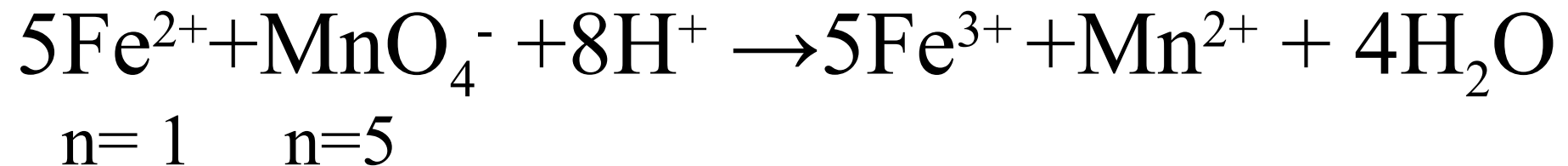
**Acid:**  
**Baz** }  $n = \sum H^+ = \sum OH^-$  trao đổi



**Muối**  
**Oxyt** }  $n = \sum (+) = \sum (-)$  của công thức  
phân tử đó.



**Chất oxy hóa khử:**  $n = \sum e$  trao đổi



Với 1 hóa chất A có khối lượng  $m_A(g)$ :

$$n_A = \frac{m_A}{M_A} ; N_A = \frac{m_A}{D_A} \rightarrow \frac{N_A}{n_A} = \frac{m_A/D_A}{m_A/M_A} = \frac{M_A}{D_A} = n \rightarrow N_A = n \cdot n_A$$

$$C_M = \frac{n_A}{V} ; C_N = \frac{N_A}{V} \rightarrow \frac{C_N}{C_M} = \frac{N_A/V}{n_A/V} = \frac{N_A}{n_A} = n \rightarrow C_N = n C_M$$

Td: hòa tan 4,9g  $H_2SO_4$  vào nước để tạo thành 1l dd.

$$4,9/98$$

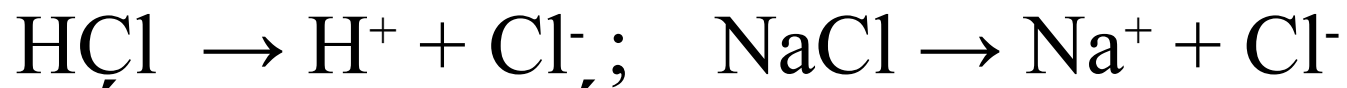
$$C_M = \frac{4,9/98}{1} = 0,05M \rightarrow C_N = 2C_M = 2 \cdot 0,05 = 0,1N$$

## 2. Dd không điện ly – dd điện ly.

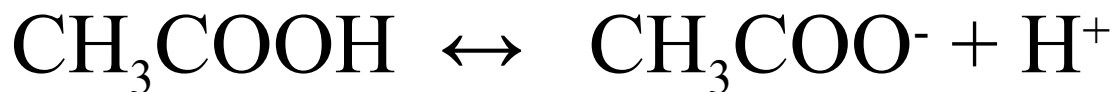
\* Dd không điện ly là dd mà chất tan là chất không điện ly (là chất khi hòa tan trong nước không phân ly thành các ion trái dấu).

\* Dd điện ly là dd: chất tan là chất đ.ly (khi  $\xrightarrow{\text{H}_2\text{O}}$  các ion trái dấu)

. Chất đ.l mạnh: phân ly hoàn toàn, quá trình phân ly là 1 chiều ( $\rightarrow$ )



. Chất điện ly yếu: chỉ phân ly 1 phần, quá trình phân ly là thuận nghịch ( $\leftrightarrow$ )



. Độ điện ly của chất đ.ly là tỷ số giữa số mol đã đ.ly và số mol ban đầu của chất đ.ly.

$$\alpha = \frac{x}{a} \quad \left\{ \begin{array}{l} x: \text{số mol(hay nồng độ) đã đ.ly} \\ a: \text{số mol(hay nồng độ) ban đầu} \end{array} \right.$$

$$0 \leq x \leq a \Rightarrow 0 \leq \alpha \leq 1$$

$\alpha \uparrow$  và  $\alpha \rightarrow 1 \rightarrow$  chất điện ly càng mạnh

$\alpha \downarrow$  và  $\alpha \rightarrow 0 \rightarrow$  chất điện ly càng yếu

. Để tiện so sánh, người ta qui ước:

$\alpha > 0,3 \rightarrow$  chất điện ly mạnh

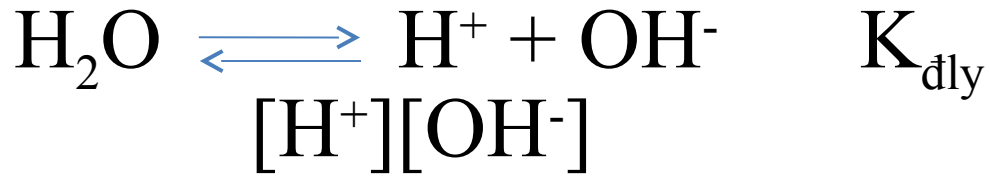
$\alpha < 0,03 \rightarrow$  chất điện ly yếu

$0,03 \leq \alpha \leq 0,3 \rightarrow$  chất điện ly trung bình

## II. TÍNH CHẤT DUNG DỊCH ĐIỆN LY

### 1. Sự điện ly của nước – chỉ số pH và pOH

Nước nguyên chất là chất điện ly yếu.



$$K_{\text{đly}} = \frac{[\text{H}^+][\text{OH}^-]}{[\text{H}_2\text{O}]} = 1,8 \cdot 10^{-16} \quad \text{ở } 25^\circ\text{C}$$

Vì lượng  $\text{H}_2\text{O}$  đã đ.ly rất nhỏ so với lượng

$\text{H}_2\text{O}$  ban đầu  $\rightarrow [\text{H}_2\text{O}]$  xem như không đổi.  
 $\rightarrow K_n = K_{\text{đly}} [\text{H}_2\text{O}] = (1000/18) \cdot 1,8 \cdot 10^{-16} = 10^{-14}$

Vậy  $K_n = [\text{H}^+][\text{OH}^-] = 10^{-14} \quad \text{ở } 25^\circ\text{C}$

$K_n$ : tích ion của  $\text{H}_2\text{O}$

\* Với 1 dd (dm là  $\text{H}_2\text{O}$ ) bất kỳ, ta vẫn có:

$$K_n = C_{\text{H}^+} \cdot C_{\text{OH}^-} = 10^{-14} \quad \text{ở } 25^\circ\text{C}$$

$$-\lg K_n = -\lg C_{\text{H}^+} - \lg C_{\text{OH}^-} = 14$$

Đặt:  $\text{p}K_n = -\lg K_n$ ;  $\text{pH} = -\lg C_{\text{H}^+}$ ;  $\text{pOH} = -\lg C_{\text{OH}^-}$

$$\rightarrow \text{p}K_n = \text{pH} + \text{pOH} = 14 \quad \text{ở } 25^\circ\text{C}$$

. Môi trường trung tính:  $C_{\text{H}^+} = C_{\text{OH}^-} = 10^{-7}$

$$\rightarrow \text{pH} = \text{pOH} = -\lg 10^{-7} = 7$$

. Môi trường axit:  $C_{\text{H}^+} > C_{\text{OH}^-} \rightarrow C_{\text{H}^+} > 10^{-7}$

$$\rightarrow \text{pH} = -\lg C_{\text{H}^+} < 7; \text{pOH} > 7$$

. Môi trường baz:  $C_{\text{H}^+} < C_{\text{OH}^-} \rightarrow C_{\text{H}^+} < 10^{-7}\text{M}$

$$\rightarrow \text{pH} > 7; \text{pOH} < 7$$



## 2. Tính pH của dung dịch axit- baz

### a. Định nghĩa axit-baz

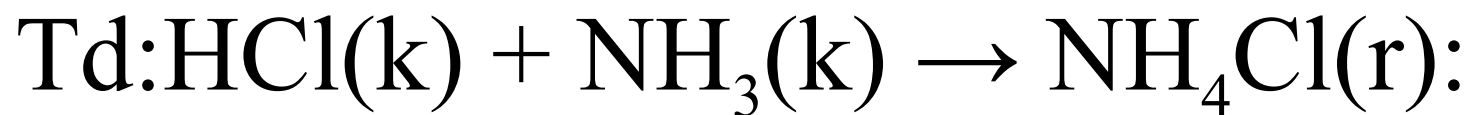
#### $\alpha$ . Quan điểm Arrhenius



. Dm = H<sub>2</sub>O;

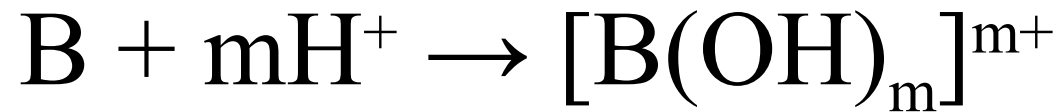
. Axit: n chức; baz: m chức

.  $C_{H^+} \uparrow \Rightarrow \text{axit} \uparrow$ ;  $C_{OH^-} \uparrow \Rightarrow \text{baz} \uparrow$

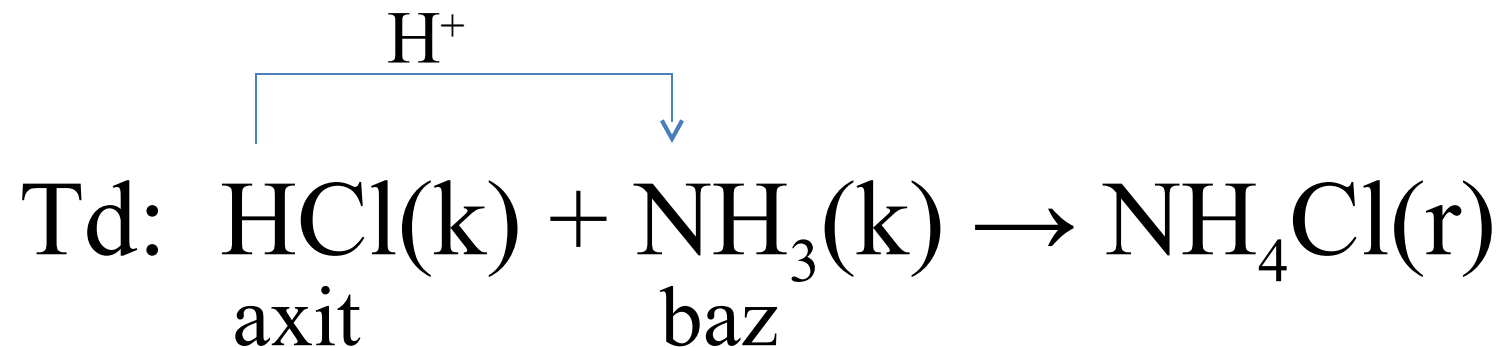


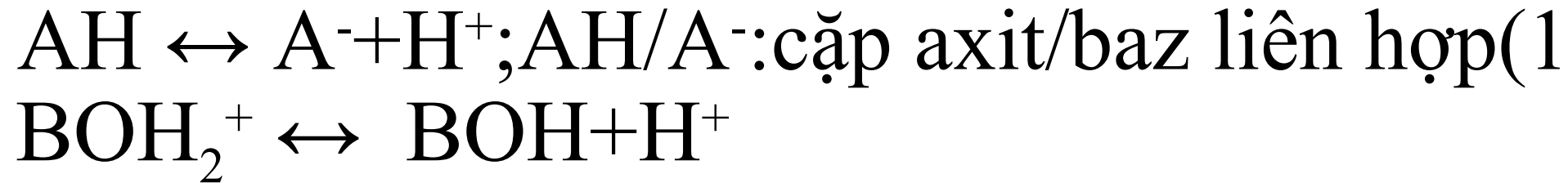
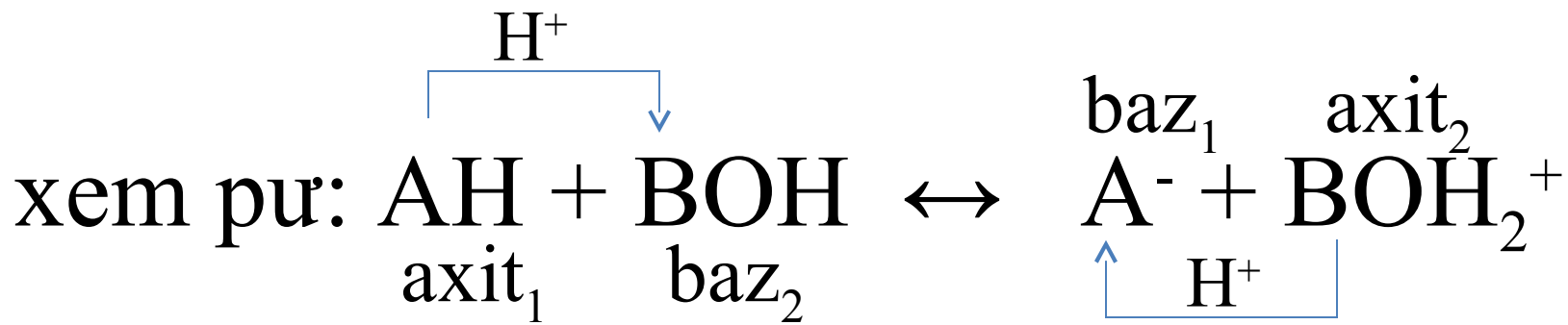
không là pư(a-b)

## β. Quan điểm Bronsted



- . Dm không bắt buộc là  $\text{H}_2\text{O}$
- . Axit n chức, baz m chức
- . Phóng thích  $\text{H}^+ \uparrow \Rightarrow \text{axit} \uparrow$
- . Nhận  $\text{H}^+ \uparrow \Rightarrow \text{baz} \uparrow$

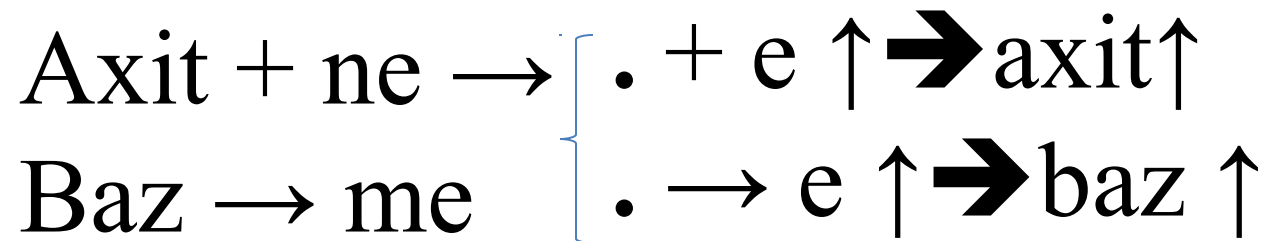




$\text{BOH}_2^+/\text{BOH}$ : cặp a/b liên hợp(2)

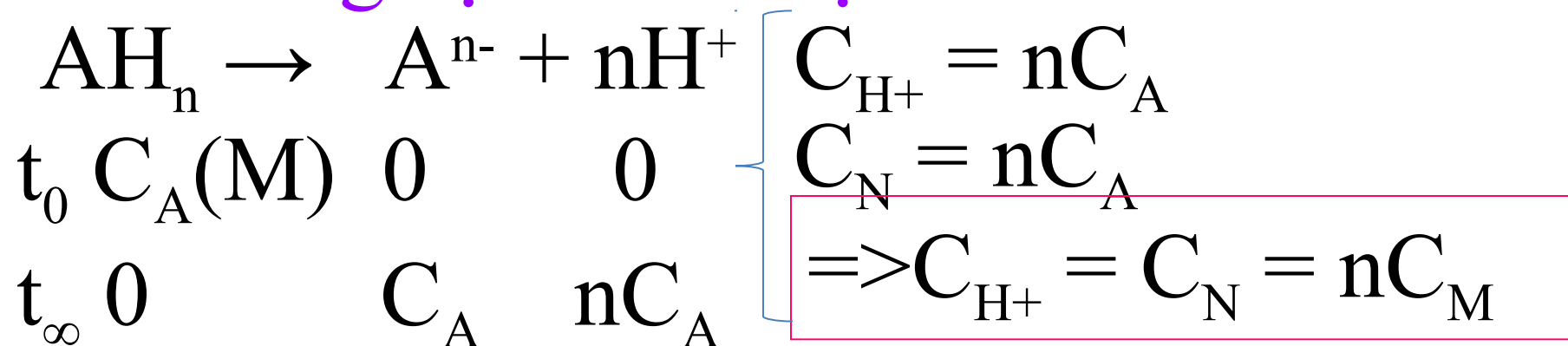
→ pu(a-b) phải có sự tham gia của 2 cặp a/b liên hợp.

## γ. Quan điểm Lewis



## b. pH của dung dịch axit

### $\alpha$ . Dung dịch axit mạnh



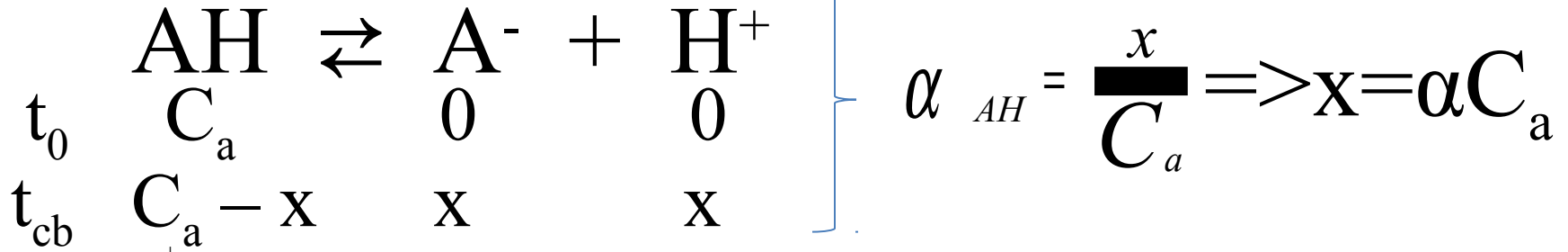
$$\Rightarrow \text{pH} = -\lg C_{\text{H}^+} = -\lg(nC_A)$$

- . HCl 0,1N:  $\Rightarrow C_{\text{H}^+} = C_{\text{N}} = 0,1(\text{iong/l}) \Rightarrow \text{pH} = -\lg 0,1 = 1$
- . HCl 0,1M:  $n=1 \Rightarrow C_{\text{H}^+} = C_{\text{N}} = C_M = 0,1(\text{iong/l}) \Rightarrow \text{pH} = 1$
- .  $\text{H}_2\text{SO}_4$  0,1N  $\Rightarrow C_{\text{H}^+} = C_{\text{N}} = 0,1(\text{iong/l}) \Rightarrow \text{pH} = -\lg 0,1 = 1$
- .  $\text{H}_2\text{SO}_4$  0,1M:  $n=2 \Rightarrow C_{\text{H}^+} = C_{\text{N}} = 2C_M = 2.0,1 = 0,2(\text{iong/l})$

$$\text{Vậy: } \text{pH} = -\lg 0,2 = 0,67$$

## β. Dung dịch axit yếu

### \* Dung dịch axit yếu đơn chức



$$K_a = \frac{[H^+][A^-]}{[AH]} = \frac{\alpha C_a \alpha C_a}{C_a(1-\alpha)} = \frac{\alpha^2 C_a}{1-\alpha} : \alpha \ll 1 \Rightarrow 1-\alpha = 1$$

$$\Rightarrow K_a = \alpha^2 C_a \Rightarrow \alpha = \sqrt{\frac{K_a}{C_a}} \quad \left\{ \begin{array}{l} K_a \uparrow \Rightarrow \alpha \uparrow \\ C_a \uparrow \Rightarrow \alpha \downarrow; C_a \downarrow \Rightarrow \alpha \uparrow \end{array} \right.$$

$$\Rightarrow [H^+] = x = \alpha C_a = C_a \sqrt{\frac{K_a}{C_a}} = \sqrt{K_a \cdot C_a}$$

$$pH = -\lg \sqrt{K_a \cdot C_a} = \frac{1}{2} (-\lg K_a - \lg C_a)$$

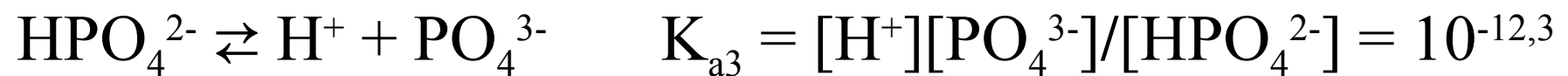
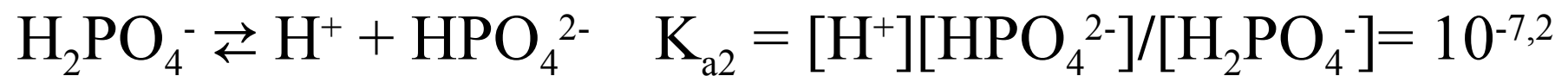
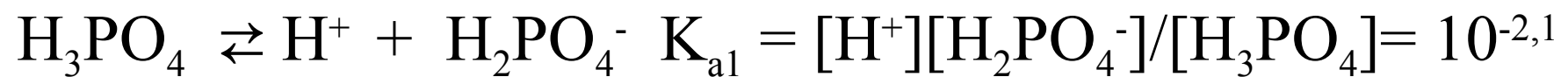
$$\text{Đặt: } pK_a = -\lg K_a : K_a \uparrow \Rightarrow pK_a \downarrow \Rightarrow pH = \frac{1}{2} (pK_a - \lg C_a)$$

Td: dd  $\text{CH}_3\text{COOH}$  0,1M,  $K_a = 10^{-5}$  có:

$$\alpha = \sqrt{\frac{K_a}{C_a}} = \sqrt{\frac{10^{-5}}{10^{-1}}} = \sqrt{10^{-4}} = 10^{-2} = 0.01$$

$$pH = \frac{1}{2}(pK_a - \lg C_a) = \frac{1}{2}(5 - \lg 10^{-1}) = 3$$

\* Dung dịch axit yếu đa chức



\* trường hợp tổng quát:  $K_{a1}/K_{a2}/K_{a3} \geq 10^4 \rightarrow$

chỉ chú ý chức thứ nhất, xem như là axit yếu đơn chức có  $K_a = K_{a1}$

Với :  $H_3PO_4$  có:  $K_{a1}/K_{a2}/K_{a3} = 10^{-2,1}/10^{-7,2}/10^{-12,3} = 10^5$

$$pH = \frac{1}{2}(pK_a - \lg C_a) = \frac{1}{2}(-\lg 10^{-2,1} - \lg 10^{-1}) = 1,55$$

c. pH của dung dịch baz

$\alpha$ . Dung dịch baz mạnh



$$\begin{array}{ccc} t_0 & C_b & 0 \end{array} \quad \begin{array}{ccc} & & 0 \end{array}$$

$$\begin{array}{ccc} t_\infty & 0 & C_b \end{array} \quad \begin{array}{ccc} & & nC_b \end{array}$$

$$C_{OH^-} = nC_b \quad ; \quad C_N = nC_M \rightarrow C_{OH^-} = C_N = nC_M$$

$$pOH = -\lg C_{OH^-} \rightarrow pH = 14 - pOH$$

$$\text{Vậy } pH = 14 - (-\lg C_{OH^-})$$

\* Dd NaOH 0,1 N

$$C_{\text{OH}^-} = C_{\text{N}} = 0,1 \text{ iong/l} \rightarrow \text{pH} = 14 - (-\lg 0,1) = 13$$

\* Dd NaOH 0,1 M

$$C_{\text{OH}^-} = C_{\text{N}} = C_{\text{M}} = 0,1 \text{ iong/l} \rightarrow \text{pH} = 13$$

\* Dd Ba(OH)<sub>2</sub> 0,1 N

$$C_{\text{OH}^-} = C_{\text{N}} = 0,1 \text{ iong/l}$$

$$\rightarrow \text{pH} = 14 - (-\lg 0,1) = 13$$

\* Dd Ba(OH)<sub>2</sub> 0,1 M

$$C_{\text{OH}^-} = C_{\text{N}} = 2C_{\text{M}} = 2 \cdot 0,1 = 0,2 \text{ iong/l}$$

$$\rightarrow \text{pH} = 14 - (-\lg 0,2) = 13,33$$



## β. Dd baz yếu

\* Dung dịch baz yếu đơn chức



$$\alpha = \frac{x}{C_b} \rightarrow x = \alpha C_b$$

$$K_b = \frac{[B^+][OH^-]}{[BOH]} = \frac{\alpha C_b \alpha C_b}{C_b(1-\alpha)} = \frac{\alpha^2 C_b}{1-\alpha}$$

$$\alpha \ll 1 \rightarrow 1 - \alpha = 1 \quad K_b = \alpha^2 C_b \Rightarrow$$

$$\alpha = \sqrt{\frac{K_b}{C_b}}$$

$$[OH^-] = x = \alpha C_b = C_b \sqrt{\frac{K_b}{C_b}} = \sqrt{K_b C_b}$$

$$pOH = -\lg[OH^-] = -\lg \sqrt{K_b C_b} = \frac{1}{2}(-\lg K_b - \lg C_b)$$

$$\text{Đặt } pK_b = -\lg K_b \Rightarrow pOH = \frac{1}{2}(pK_b - \lg C_b)$$

$$pH = 14 - pOH \Rightarrow pH = 14 - \left[ -\frac{1}{2}(pK_b - \lg C_b) \right]$$

Td: dung dịch  $NH_4OH$  0,1 M có  $pK_b = 5$

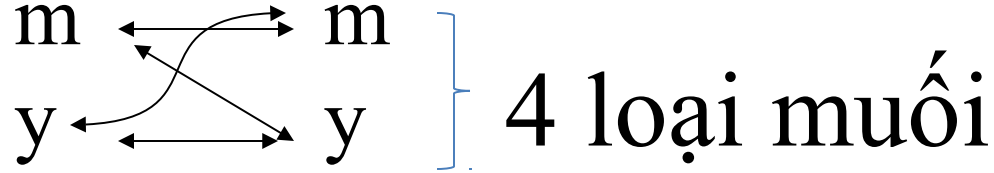
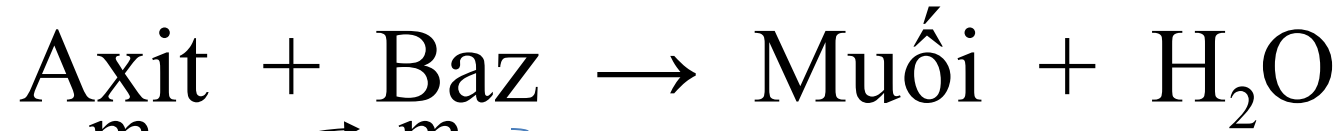
$$pH = 14 - \left[ -\frac{1}{2}(5 - \lg 10^{-1}) \right] = 11$$

**\*Baz yếu đa chức:** nếu  $K_{b1}/K_{b2}/K_{b3} \geq 10^4$

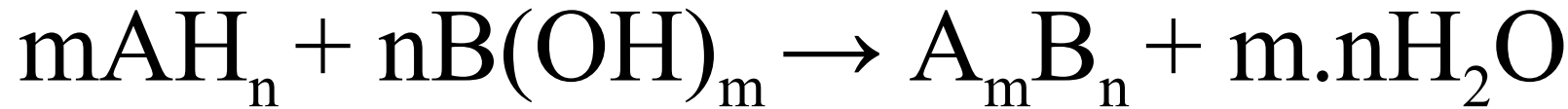
→ ta chỉ chú ý đến chức thứ nhất, và xem nó như là 1 baz yếu đơn chức với  $K_b = K_{b1}$ .

## c. pH của dung dịch muối

Muối được xem là sp của pư giữa axit và baz



### $\alpha$ . Muối tạo thành bởi axit (m) và baz (m)



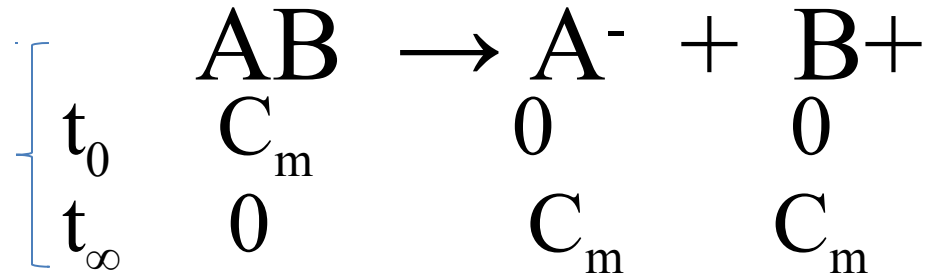
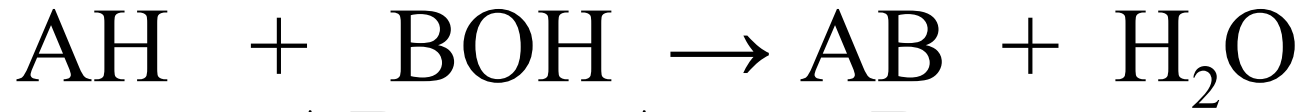
$\text{A}^{n-}$  và  $\text{B}^{m+}$  là gốc của axit và baz mạnh  $\rightarrow$

không bị thủy phân : dung dịch có  $\text{pH} = 7$

Td:  $\text{NaCl}$ ,  $\text{NaNO}_3$ ,  $\text{Na}_2\text{SO}_4$ ,  $\text{KCl}$ ,  $\text{KNO}_3$ ,

$\text{K}_2\text{SO}_4$ .....

## β. Muối của axit (y) và baz (m) (đơn chức)

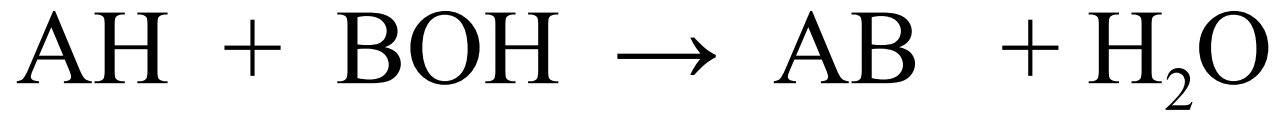


$$pH = \frac{1}{2}(pK_n + pK_a + \lg C_m)$$

Td: dd  $CH_3COONa$  0,1 M

$$pH = \frac{1}{2}(14 + 5 + \lg 0,1) = 9$$

## γ. Muối của baz yếu và axit mạnh



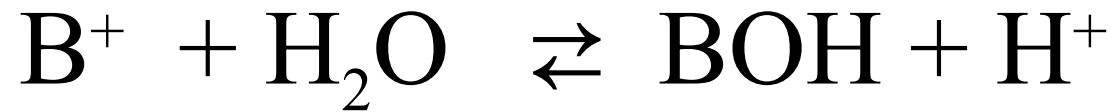
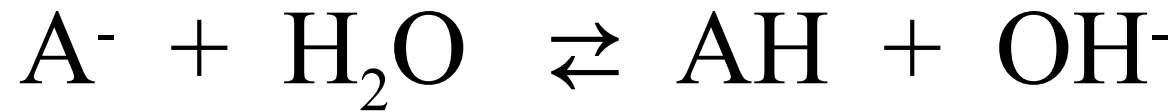
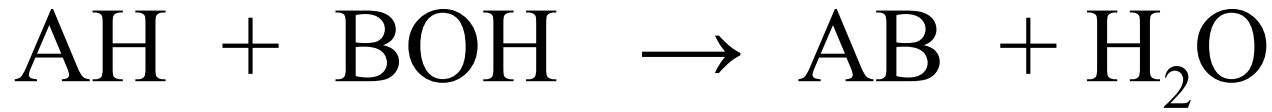
Gọi  $C_m$  là nồng độ muối ban đầu

$$\text{pH} = \frac{1}{2}(\text{p}K_n - \text{p}K_b - \lg C_m)$$

Td: dd  $\text{NH}_4\text{Cl}$  0,1 M,  $\text{p}K_b = 5$

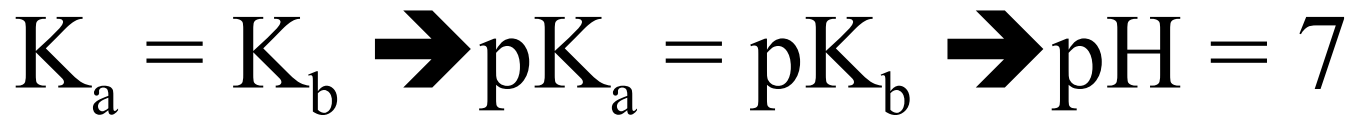
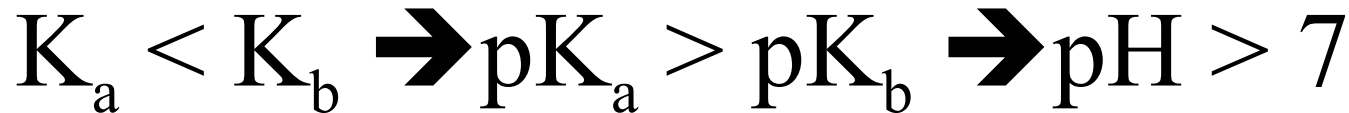
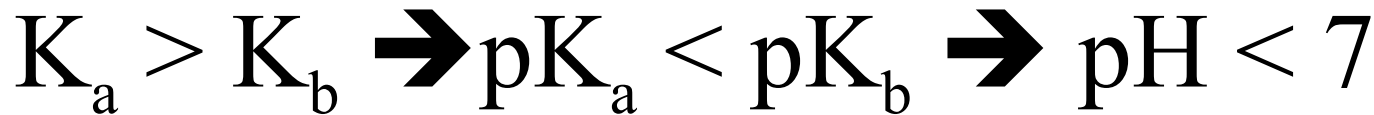
$$\text{pH} = \frac{1}{2}(14 - 5 - \lg 0,1) = 5$$

## δ. Muối tạo bởi axit yếu và baz yếu



pH dd tùy thuộc  
vào sự so sánh  
giữa  $K_a$  và  $K_b$

$$pH = \frac{1}{2}(pK_n + pK_a - pK_b)$$



## d. Dung dịch đệm

Dung dịch đệm là dd có pH thay đổi không đáng kể, khi thêm vào dd 1 lượng nhỏ axit mạnh hay baz mạnh, hoặc pha loãng dd.

$\alpha$ . Dd đệm tạo bởi 1 axit yếu và muối của nó với baz mạnh( dd đệm axit yếu).

Xem dd đệm (  $\text{CH}_3\text{COOH} + \text{CH}_3\text{COONa}$  )

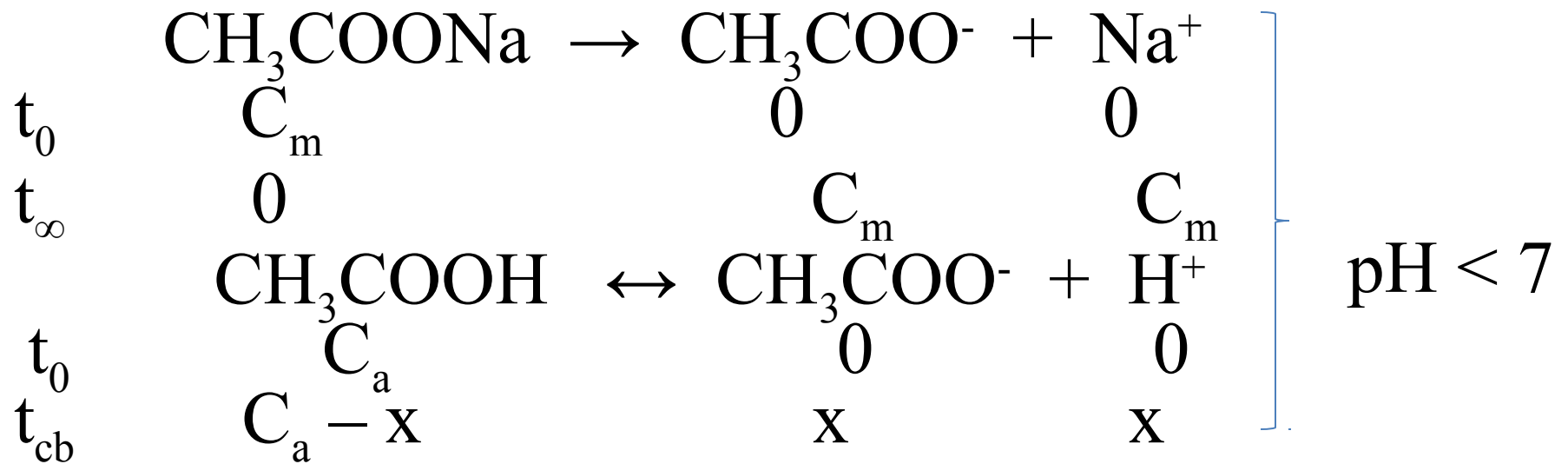


\*  $+ \text{H}^+ \text{ cb} \Rightarrow \text{ngịch}(\text{H}^+ \downarrow)$ ;  $\text{H}^+$  bị pư hết  $\rightarrow$  pH không đổi

\*  $+ \text{OH}^- : \text{OH}^- + \text{H}^+ \rightarrow \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{C}_{\text{H}^+} \downarrow$ ;  $\text{cb} \Rightarrow \text{thuận}(\text{H}^+ \uparrow)$

$\text{OH}^-$  bị pư hết  $\Rightarrow$  pH không đổi.

Gọi  $C_a$  và  $C_m$  là nồng độ của axit yếu và muối;



$$[\text{CH}_3\text{COOH}] = C_a - x = C_a; [\text{CH}_3\text{COO}^-] = C_m + x = C_m$$

$$K_a = \frac{[\text{H}^+][\text{CH}_3\text{COO}^-]}{[\text{CH}_3\text{COOH}]} \Rightarrow [\text{H}^+] = K_a \cdot \frac{[\text{CH}_3\text{COOH}]}{[\text{CH}_3\text{COO}^-]}$$

$$\text{pH} = -\lg\left(K_a \frac{C_a}{C_m}\right) = -\lg K_a - \lg \frac{C_a}{C_m}$$

$$\Rightarrow \text{pH} = \text{p}K_a - \lg \frac{C_a}{C_m} \quad * \quad C_a = C_m \Rightarrow \text{pH} = \text{p}K_a$$

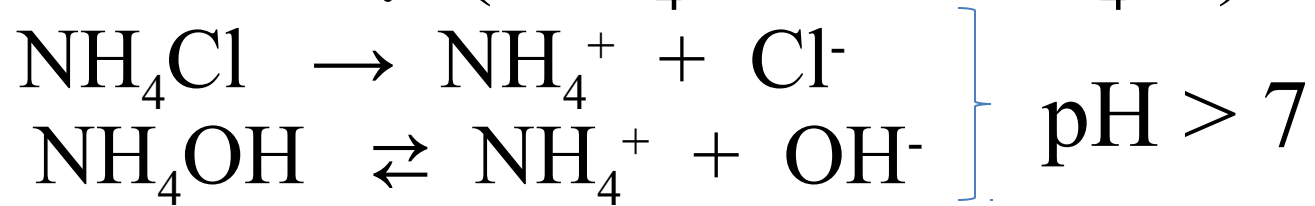


Td: dd độ (CH<sub>3</sub>COOH 0,1 M và CH<sub>3</sub>COONa 0,01M)

$$\text{pH} = 5 - \lg(0,1/0,01) = 5 - \lg 10 = 4$$

β.dd độ tạo bởi baz (y) và muối của nó với axit (m)

Xem dd độ( NH<sub>4</sub>OH và NH<sub>4</sub>Cl): dd độ axit yếu



Thêm H<sup>+</sup> : H<sup>+</sup> + OH<sup>-</sup> → H<sub>2</sub>O → OH<sup>-</sup> ↓: cb≡>

thuận (OH<sup>-</sup>↑)→ H<sup>+</sup> bị pư hết→ pH không đổi.

Thêm OH<sup>-</sup>→ OH<sup>-</sup>↑→ cb≡> nghịch(OH<sup>-</sup>↓)→ OH<sup>-</sup> bị pư hết→ pH không đổi.

Gọi  $C_b$  và  $C_m$  là nồng độ của  $\text{NH}_4\text{OH}$  và  $\text{NH}_4\text{Cl}$ , chứng minh tương tự trường hợp dd độ axit:

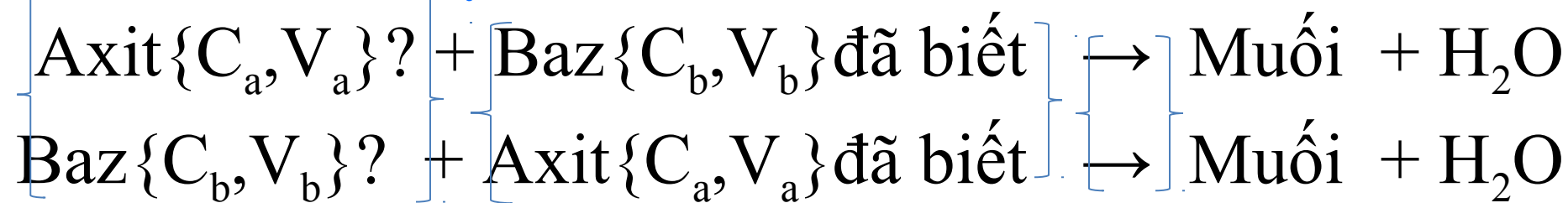
$$pH = 14 - (pK_b - \lg \frac{C_b}{C_m})$$

$$\cdot C_b = C_m \Rightarrow pH = 14 - pK_b$$

Td: dd độ:  $\text{NH}_4\text{OH}$  0,1 M và  $\text{NH}_4\text{Cl}$  0,1 M có:

$$pH = 14 - (5 - \lg 0,1/0,1) = 5$$

### 3. Chuẩn độ Axit - Baz



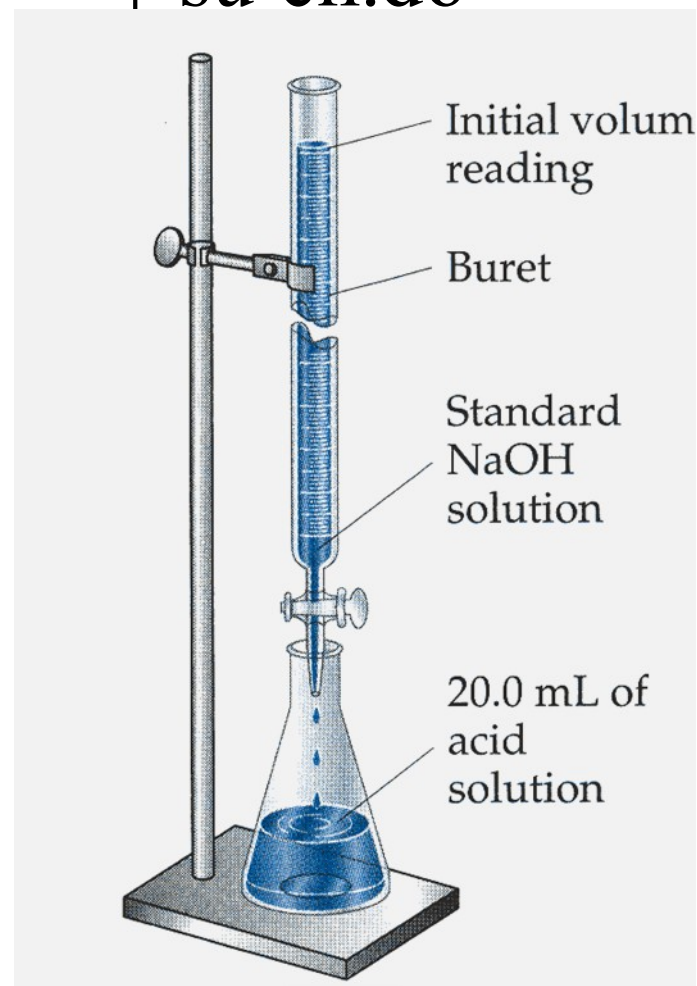
Dd cần ch.độ  
(có thể mạnh  
hoặc yếu)

dd chuẩn  
(mạnh)

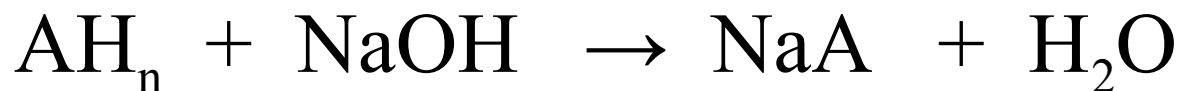
↑ sự ch.độ

\* Chất cần chuẩn độ: ở bình tam giác.

\* Dung dịch chuẩn: ở ống nhĩ giọt.



## a. phản ứng :



$C_a, V_a$        $C_b, V_b$       Với  $C_a, C_b$ : nồng độ ( $C_N$ )

\* **Tại điểm tương đương** (là thời điểm mà lượng chất cần chuẩn độ vừa hết với lượng chất chuẩn nhỏ từ ống nhả giọt xuống).

Theo định luật đương lượng ta có:









$$N_A = N_B \Rightarrow C_a V_a = C_b V_b$$

**b. Để xác định điểm tương đương:** dùng chất chỉ thị màu.

Chất chỉ thị màu là chất cho vào dd cần chuẩn độ. Tại điểm tương đương: màu của dd thay đổi.

\* **Chất chỉ thị màu** thường là 1 axit hoặc baz yếu, mà màu của dd thay đổi tùy theo pH của dd.

Mỗi chất chỉ thị màu có 1 khoảng pH đổi màu xác định.

	pH range for color change									
	0	2	4	6	8	10	12	14		
Methyl violet	Yellow		Violet							
Thymol blue	Red		Yellow		Yellow		Blue			
Methyl orange		Red		Yellow						
Methyl red			Red		Yellow					
Bromthymol blue				Yellow		Blue				
Phenolphthalein					Colorless		Pink			
Alizarin yellow R						Yellow		Red		

### c. Các thí dụ:

Td1: Chuẩn độ 10ml dd HCl phải dùng hết 12ml dd NaOH 0,1 N  $\rightarrow C_{\text{HCl}} = ?$

Tại điểm tương đương:

$$C_a V_a = C_b V_b \rightarrow C_a = \frac{C_b V_b}{V_a} = \frac{0,1 \cdot 12}{10} = 0,12 \text{ N}$$

Td2: Chuẩn độ 10ml dd NaOH phải dùng hết 15 ml dd HCl 0,1N ,  $\rightarrow C_{\text{NaOH}} = ?$

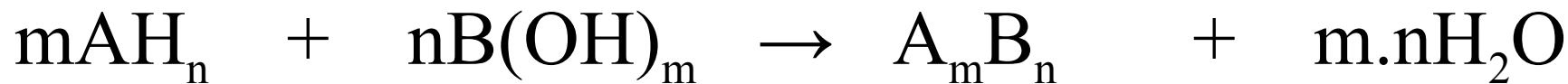
$$C_a V_a = C_b V_b \rightarrow C_b = \frac{C_a V_a}{V_b} = \frac{0,1 \cdot 15}{10} = 0,15 \text{ N}$$

Td3: nhỏ 1 giọt metyl da cam vào nước , có màu ?

Nước có pH = 7, khoảng pH đổi màu của metyl da cam từ 3,3  $\rightarrow$  4,4  $\rightarrow$  màu vàng

## 4. Trộn lẫn dd axit – baz.

### a. Trộn lẫn dd axit mạnh và baz mạnh



$$(\text{N}_a = \text{C}_a \text{V}_a) = (\text{N}_b = \text{C}_b \text{V}_b) \quad \text{M(trung tính)} \rightarrow \text{pH} = 7$$

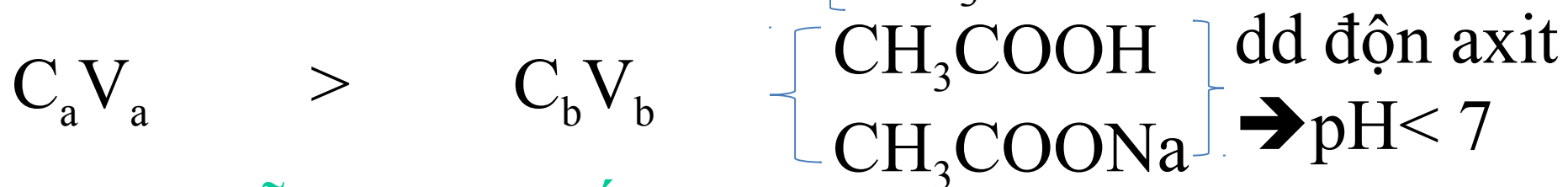
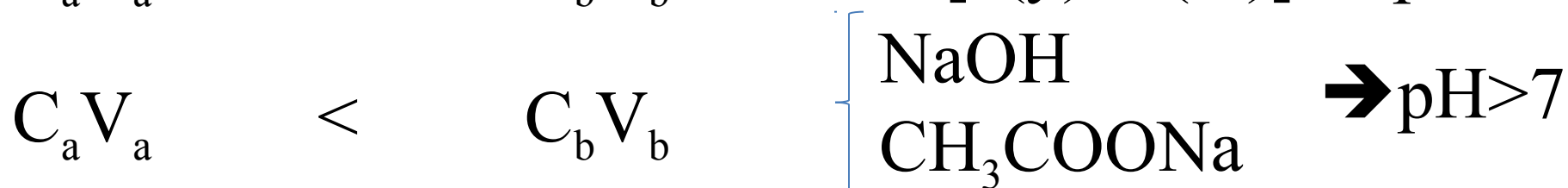
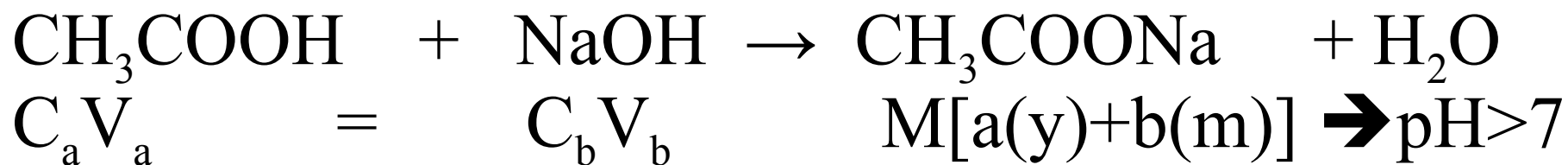
$$\text{C}_a \text{V}_a < \text{C}_b \text{V}_b$$

$$\left[ \begin{array}{c} \text{B}(\text{OH})_m \\ \text{A}_m\text{B}_n \end{array} \right] \text{pH} > 7$$

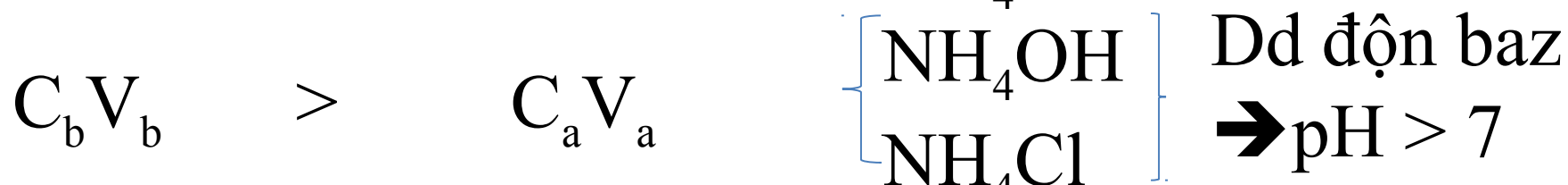
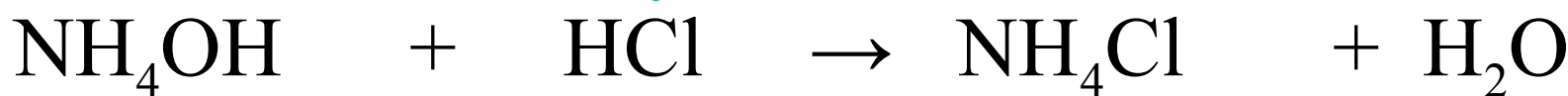
$$\text{C}_a \text{V}_a > \text{C}_b \text{V}_b$$

$$\left[ \begin{array}{c} \text{AH}_n \\ \text{A}_m\text{B}_n \end{array} \right] \text{pH} < 7$$

## b. Trộn lẫn dd axit yếu và baz mạnh



## c. Trộn lẫn dd baz yếu và axit mạnh





### III. Cân bằng hòa tan của chất khó tan (tích số tan)

#### 1. Tích số tan.

Đem hòa tan chất khó tan  $A_m B_n(r)$  vào nước:

lượng đã hòa tan rất nhỏ,  $\rightarrow$  Dd rất loãng:

phần đã hòa tan xem như điện ly hoàn toàn: có cb

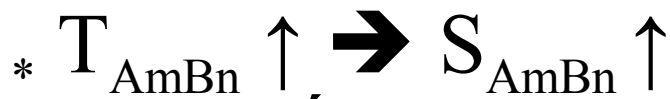


$t_0$	a	0	0	} Nồng độ của dd bảo hòa gọi là độ tan(S) của $A_m B_n$ .
$t_{cb}$	-S	mS	nS	

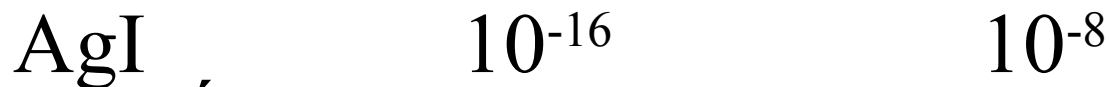
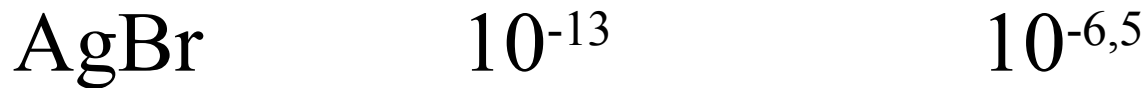
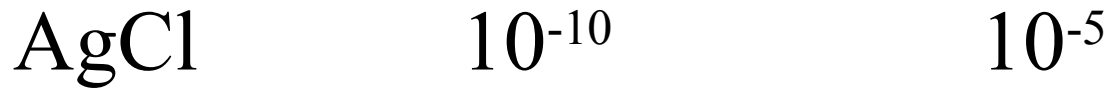
$$K_c = [A^{n-}]^m [B^{m+}]^n = (mS)^m (nS)^n = m^m n^n S^{(m+n)}$$

$$K_c = T_{AmBn} = m^m n^n S^{(m+n)}$$

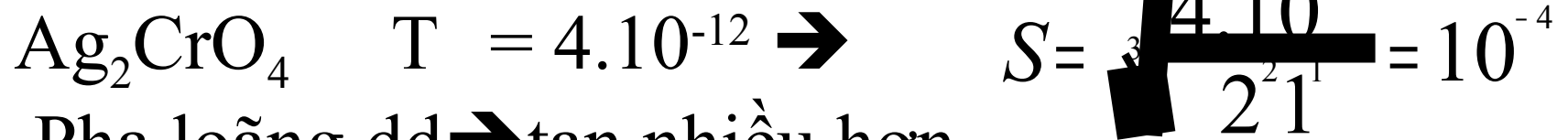
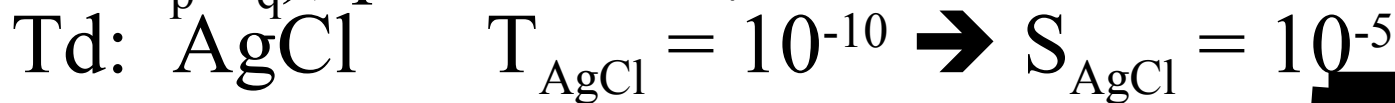
$$S_{AmBn} = \sqrt[m+n]{\frac{T_{AmBn}}{m^m n^n}}$$



\* Các chất có công thức tương tự nhau ( $A_mB_n \equiv C_mD_n$ )  
chất nào có  $T \uparrow \Rightarrow S \uparrow$



\* Các chất có công thức không tương đương ( $A_mB_n$   
và  $C_pD_q$ ), phải tính cụ thể



\* Pha loãng dd  $\Rightarrow$  tan nhiều hơn

\* Đun sôi:  $H_2O$  bay hơi  $\Rightarrow C(ion) \uparrow \Rightarrow$  kết tủa nhiều hơn

## 2. Điều kiện để có kết tủa

a. Hòa tan 1 lượng xác định chất khó tan  $A_mB_n$

\* Nếu tan hết :



$$t_{\infty} \quad -C'_0 \quad mC'_0 \quad nC'_0 \quad \text{Với } C'_0 = m_0/M_{AmBn}$$

$$T'_{AmBn} = (mC'_0)^m \cdot (nC'_0)^n$$

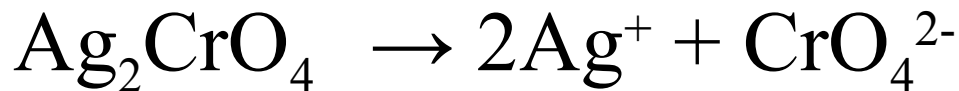
So sánh  $T'_{AmBn}$  và  $T_{AmBn}$ : ta có

$T' < T \rightarrow$  dd chưa bão hòa: tan hết

$T' = T \rightarrow$  dd bão hòa: tan hết

$T' > T \rightarrow$  dd quá bão hòa: tan 1 phần, có ( $r \leftrightarrow 1$ )

Td: hòa tan  $10^{-3}$  mol  $Ag_2CrO_4(r)$  vào nước  $\rightarrow$  1l dd



$$C'_0 = 10^{-3}M \rightarrow T' = (2 \cdot 10^{-3})^2 \cdot (10^{-3}) = 4 \cdot 10^{-9} > T \rightarrow \text{tan 1 phần}$$

## b. Trộn lẫn 2 dd:

dd(1)  $A^{n-} \{C_1, V_1\} + \text{dd}(2) B^{m+} \{C_2, V_2\} \rightarrow \text{dd}(3)$  có  $\downarrow$ ?



\* Sau khi trộn lẫn nhưng chưa pư:

$$\left[ \begin{array}{l} n_1 = C_1 V_1 = n'_1 = C'_1 V_3 \\ n_2 = C_2 V_2 = n'_2 = C'_2 V_3 \end{array} \right] \quad C'_1 = \frac{C_1 \cdot V_1}{V_3} ; C'_2 = \frac{C_2 \cdot V_2}{V_3}$$

$$T'_{A_mB_n} = (A^{n-})^m \cdot (B^{m+})^n ; \text{ so sánh với } T_{A_mB_n}$$

$T' < T \rightarrow$  dd chưa bão hòa  $\rightarrow$  chưa có  $\downarrow$

$T' = T \rightarrow$  dd bão hòa  $\rightarrow$  chưa có  $\downarrow$

$T' > T \rightarrow$  dd quá bão hòa  $\rightarrow$  có  $\downarrow$

$$\left[ \begin{array}{l} 10\text{ml dd}(1) \text{ AgNO}_3 (2 \cdot 10^{-3} \text{ M}) + 10\text{ml dd}(2) \text{ Na}_2\text{CrO}_4 (2 \cdot 10^{-3} \text{ M}) \\ C'_{\text{Ag}^+} = 2 \cdot 10^{-3} \cdot 10 / 20 = 10^{-3} \text{ M} ; C'_{\text{CrO}_4} = 2 \cdot 10^{-3} \cdot 10 / 20 = 10^{-3} \text{ M} \\ T'_{\text{Ag}_2\text{CrO}_4} = (10^{-3})^2 \cdot (10^{-3}) = 10^{-9} > T_{\text{Ag}_2\text{CrO}_4} \rightarrow \text{có } \downarrow \end{array} \right]$$