

I H C NÔNG LÂM TP. H CHÍ MINH

KHOA KHOA H C/B MÔN HÓA H C

HÓA ĐẠI CƯƠNG



N I DUNG (t p 1):

- *Chương 1: Cấu tạo nguyên tử*
- *Chương 2: Liên kết hóa học*
- *Chương 3: Nhiệt động hóa học*
- *Chương 4: Động hóa học*
- *Chương 5: Dung dịch*

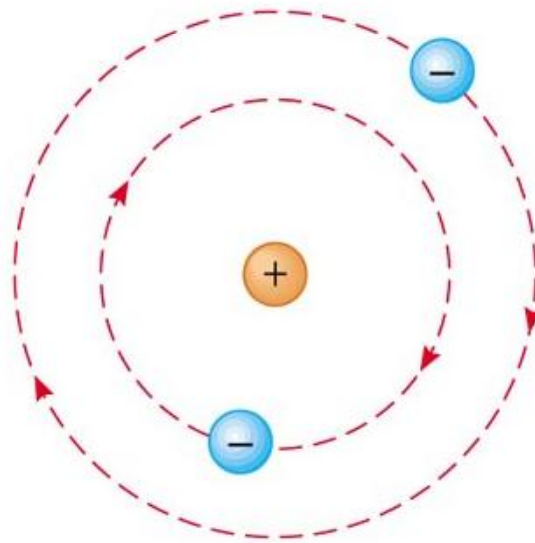
CHƯƠNG 1:

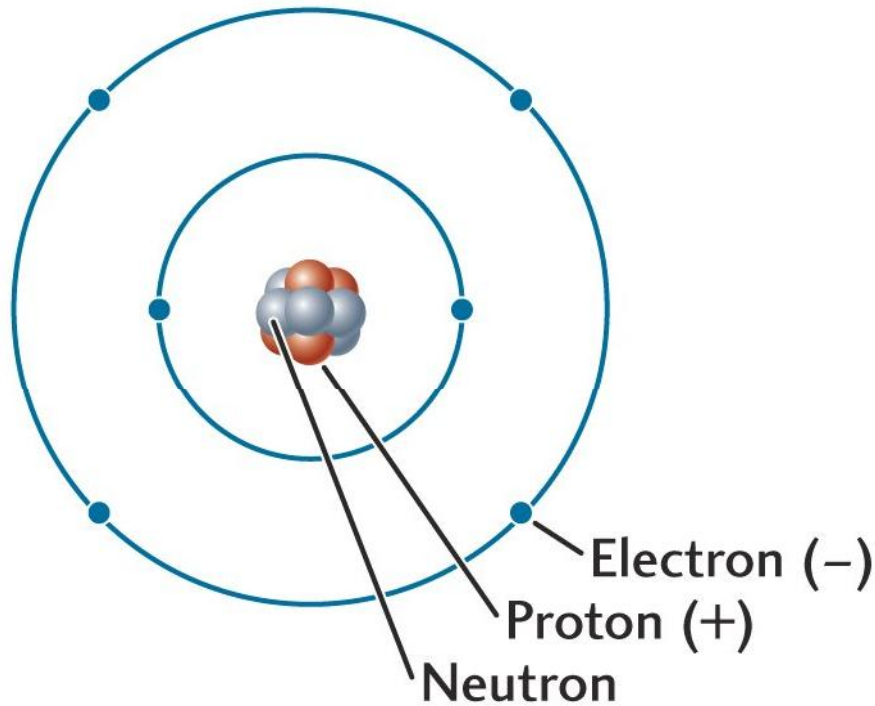
CUT O NGUYÊN T &
B NG PHÂN LO I TU N
HOÀN CÁC NGUYÊN T
HÓA H C

I. S I c v các thuy t c u t o nguyên t

Thuyết Rutherford

“Electron quay chung quanh hạt nhân nguyên tử giống như hành tinh quay xung quanh mặt trời”

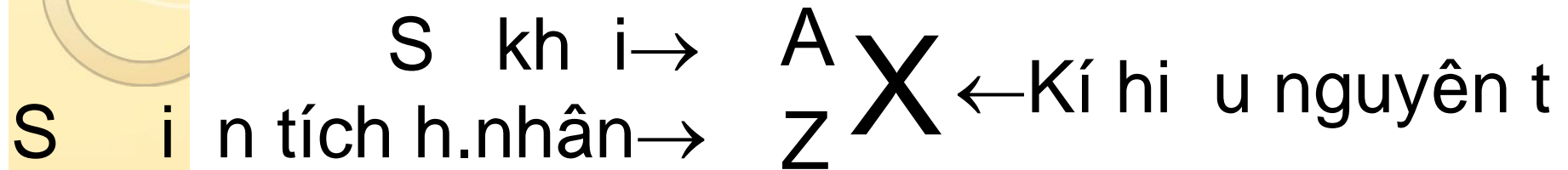




H t	i n tích	Kh i l n g (Kg)
Proton (p)	+1	$1,6726 \cdot 10^{-27}$
Electron (e)	-1	$9,1095 \cdot 10^{-31}$
Neutron (n)	0	$1,6750 \cdot 10^{-27}$

$$q = 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ Culong}$$

C u t o nguyên t



+ Kh i l ñg h t nhân kh i l ñg nguyên t

$$A = S \text{ kh } i = N + Z$$

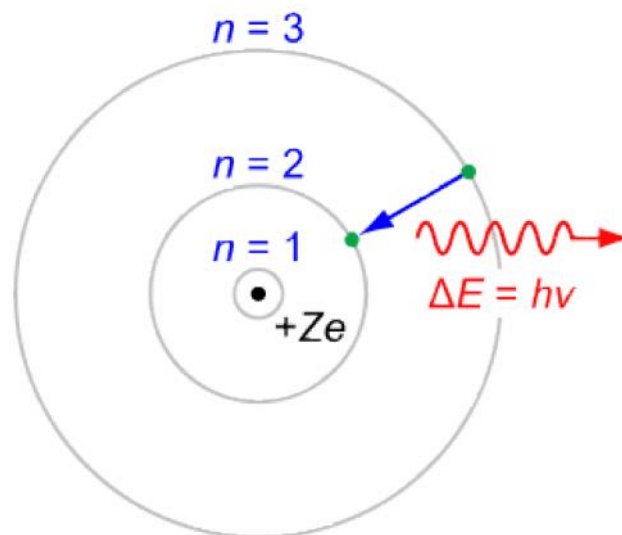
+ Trong nguyên t trung hòa s electron = s proton

Thuyết Bohr- Rutherford

- Hai tiên đề của Bohr

- ❖ Electron chỉ quay xung quanh hạt nhân trên những quỹ đạo tròn, đồng tâm, có bán kính xác định và moment động lượng xác định (lượng tử hóa). Electron không phát xạ hay hấp thụ năng lượng trên các quỹ đạo.

- ❖ Năng lượng (ΔE) chỉ được phát ra hay thu vào khi electron chuyển từ quỹ đạo này sang quỹ đạo khác.



$$\Delta E = h\nu = E_3 - E_2$$

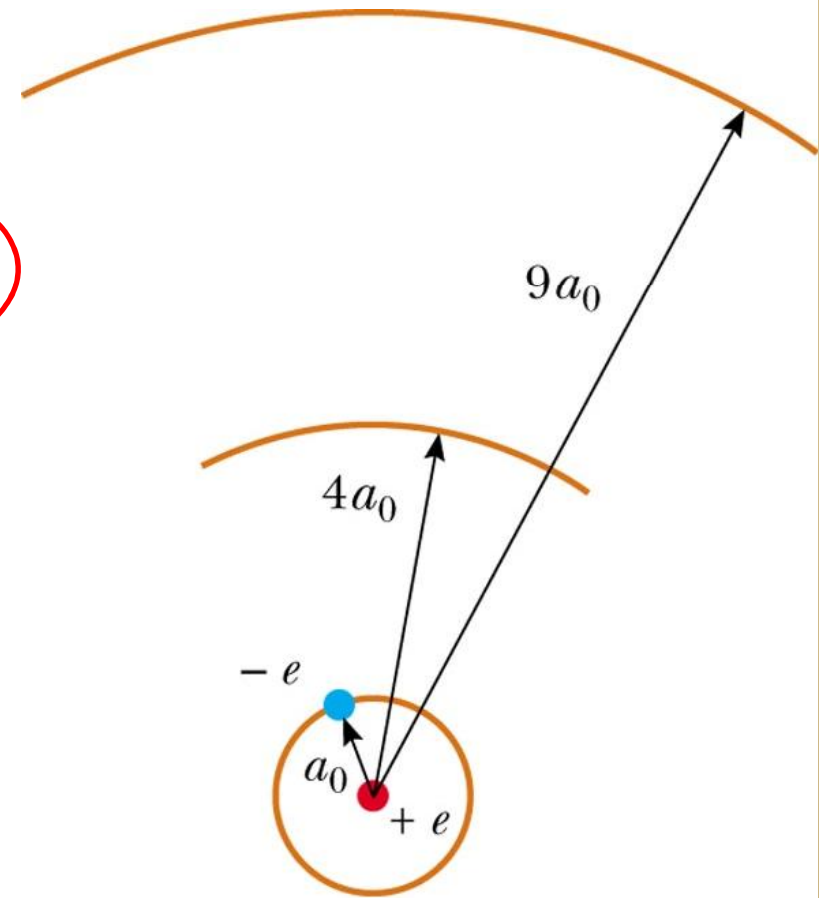
Thành công của thuyết Bohr

* Tính các bán kính quỹ đạo r_n , tốc độ v_n và năng lượng của electron khi chuyển động trên các quỹ đạo.

$$v = \frac{1}{n} \frac{Ze^2}{2\epsilon_0 h}$$

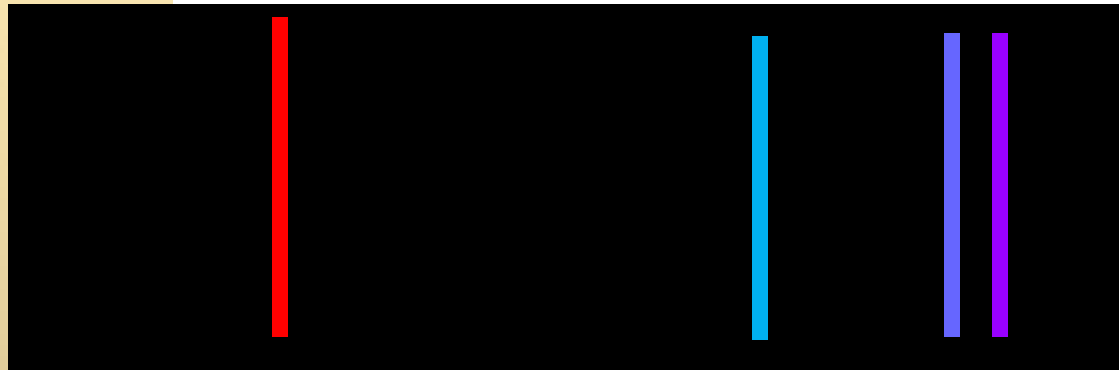
$$r_n = n^2 \frac{\epsilon_0 h^2}{\pi m e^2 Z}$$

$$E_n = - (13,6 / n^2) \text{ eV}$$

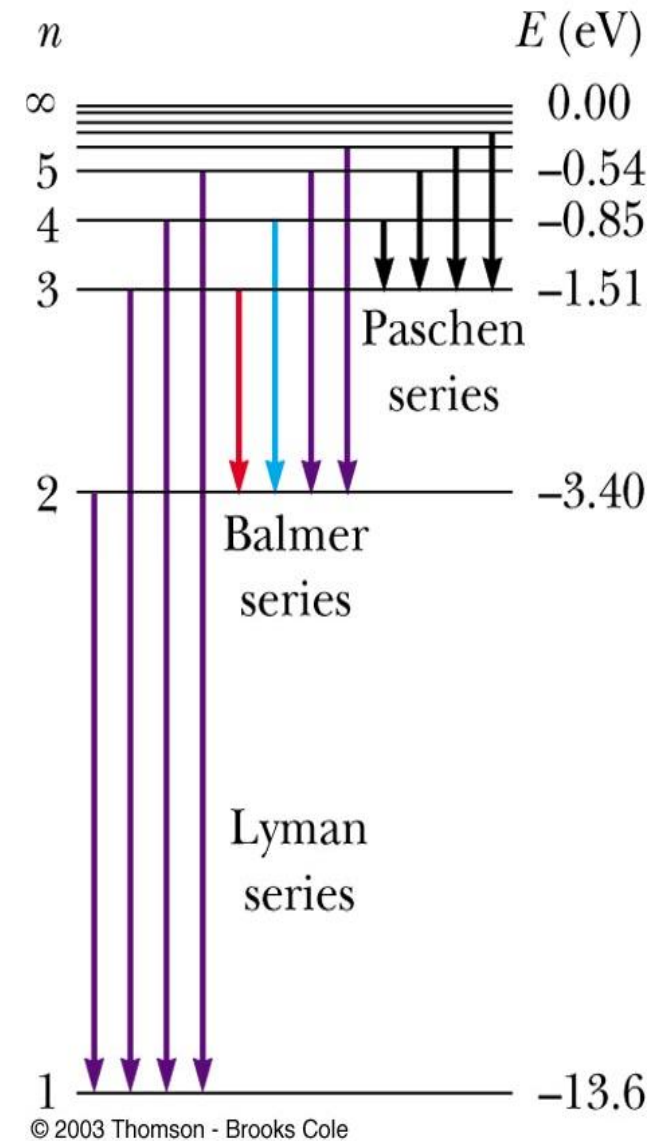


$$r_n = n^2 a_0 \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

* **Gi i thích c b n ch t
v t lý c a quang ph
nguyên t Hydro**



, **Lam, Chàm, Tím**



II. Thuyết cấu tạo nguyên tử hiện đại theo cơ học lượng tử

Những luận điểm của
cơ học lượng tử

❖ Tính chất sóng-hạt của vật vi mô

Thuyết lượng tử của Planck:

“Năng lượng của bức xạ không liên tục mà được phát ra hay hấp thụ một cách liên tục mà bản chất của nó lại gián đoạn là lượng tử.”

$$E = h\nu$$

Thuyết sóng kết hợp của De Broglie

$$\lambda = h/mv$$

Tiểu phân	Khoá löông (kg)	Tốc ñoä (ms ⁻¹)	Ñoädaï söng (pm)
e khí (300K)	$9 \cdot 10^{-31}$	$1 \cdot 10^5$	7000
e ngttöûhidro	$9 \cdot 10^{-31}$	$2,2 \cdot 10^6$	33
e ngttöûXe (n=1)	$9 \cdot 10^{-31}$	$1 \cdot 10^8$	7
NgttöûHe khí (300K)	$9 \cdot 10^{-27}$	1000	90
NgttöûXe khí (300K)	$9 \cdot 10^{-25}$	250	10
Traï banh bay nhanh	0,1	20	$3 \cdot 10^{-22}$
Traï banh bay chậm	0,1	0,1	$7 \cdot 10^{-20}$

❖ Nguyên lý bất định Heisenberg

Không thể xác định chính xác đồng thời động lượng và thị vị của hạt vi mô

$$\Delta v \cdot \Delta x \geq \frac{h}{2\pi m}$$

Δv : bất định vận tốc

Δx : độ bất định vị trí

Ví dụ

- Ví dụ electron $m = 9,1 \cdot 10^{-28} \text{g}$, chuyển động với vận tốc chính xác $v = 10^8 \text{cm/s}$ thì bất định vị trí như thế nào là:

$$\Delta x = \frac{h}{2\pi m \Delta v} = \frac{6,625 \cdot 10^{-27}}{2 \cdot 3,14 \cdot 9,1 \cdot 10^{-28} \cdot 10^8} = 1,6 \cdot 10^{-8} \text{cm} = 1,6 \text{ \AA}$$

- Do đó ngay cả khi nói xác suất tìm thấy electron (hay các hạt vi mô khác) tại một vị trí nào đó trong không gian thì tìm thấy ở vị trí nào đó.

❖ Phương trình sóng Schrodinger

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

h : hằng số Planck

m : khối lượng hạt vi mô

E : năng lượng toàn phần của hạt vi mô

V : thế năng của hạt vi mô phụ thuộc vào tọa độ x, y, z

Ψ : hàm sóng của hạt – mô tả chuyển động của hạt trong không gian x, y, z

Ý nghĩa của hàm sóng ψ

- Hàm sóng ψ xác định xác suất có mặt của hạt vi mô tại vị trí c tại thời điểm nào đó
- $\psi^2 dV$ cho biết xác suất có mặt của hạt vi mô trong thể tích dV tại thời điểm t .

❖ Trạng thái của electron trong nguyên tử là các mức năng lượng electron và các số lượng tử

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \Psi = 0$$

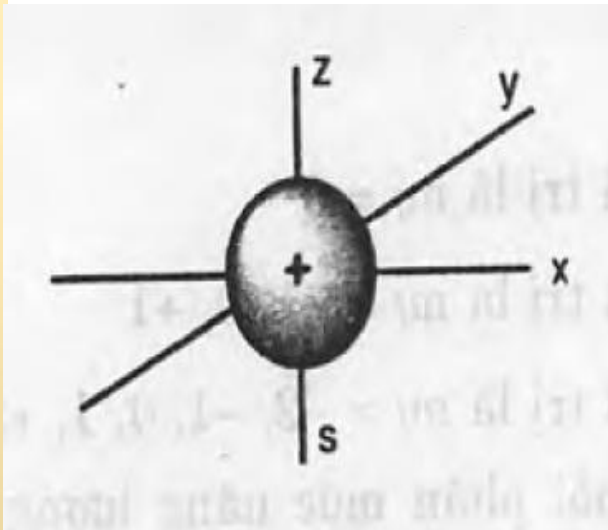
Hàm sóng ψ của electron **luôn** chứa 3 thông số là các số nguyên: n, l, m_l

→ Trạng thái chuyển động của electron trong Hydro phụ thuộc vào 3 số (n, l, m_l): **CÁC SỐ LƯỢNG TỬ**

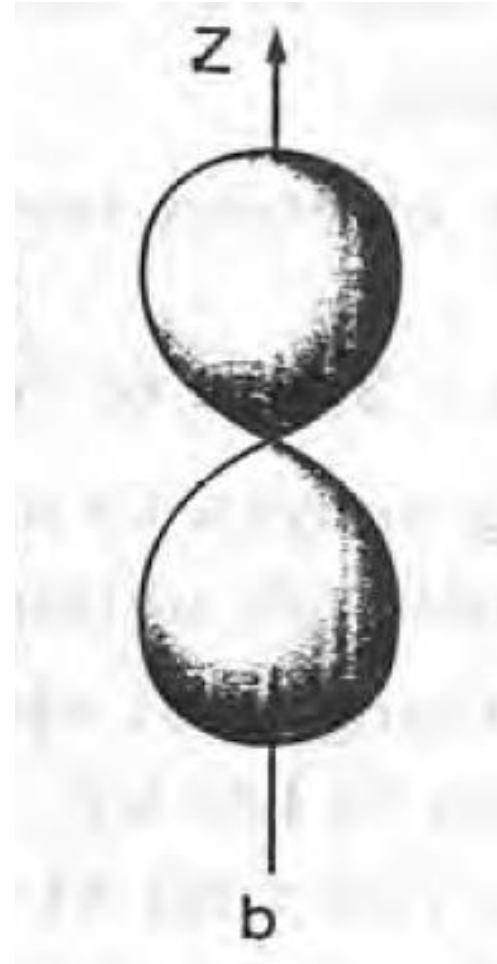
Mỗi b 3 s $(n, l, m_l) \rightarrow \mathbb{E}_{n,l,m_l}$: xác nh vùng không gian bao quanh h t nhân mà electron có th có m t b t k th i i m nào v i xác su t có m t khác nhau.

Vùng không gian nh v y g i là ám mây i n t hay **ORBITAL** nguyên t (Attomic Orbital - **AO**)

AO quy c là vùng không gian quanh h t nhân, trong ó xác su t có m t electron trên 90% và có hình d ng xác nh.



$$n = 1, l = 0, m_l = 0$$



$$n = 2, l = 1, m_l = 0$$

Các s l n g t

❖ S l n g t chính n

Xác định n ng l ng E và kích th c của orbital nguyên t

n	1	2	3	4
Lớp	K	L	M	N

$$E_n = - \frac{me^4}{8\epsilon_0 n^2 h^2} Z^2 = - 2,18 \cdot 10^{-18} \frac{Z^2}{n^2} \text{ J} = - 13,6 \frac{Z^2}{n^2} \text{ eV}$$

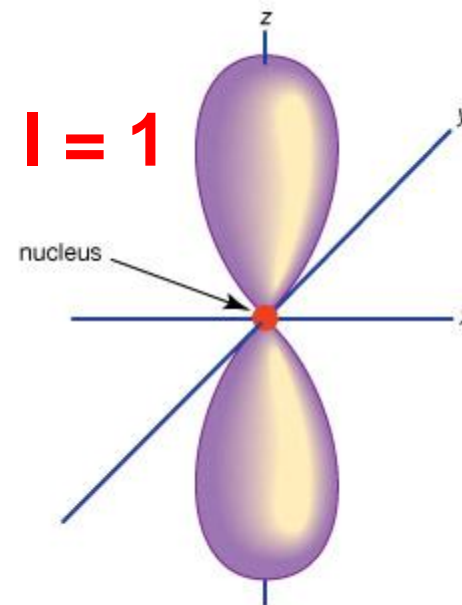
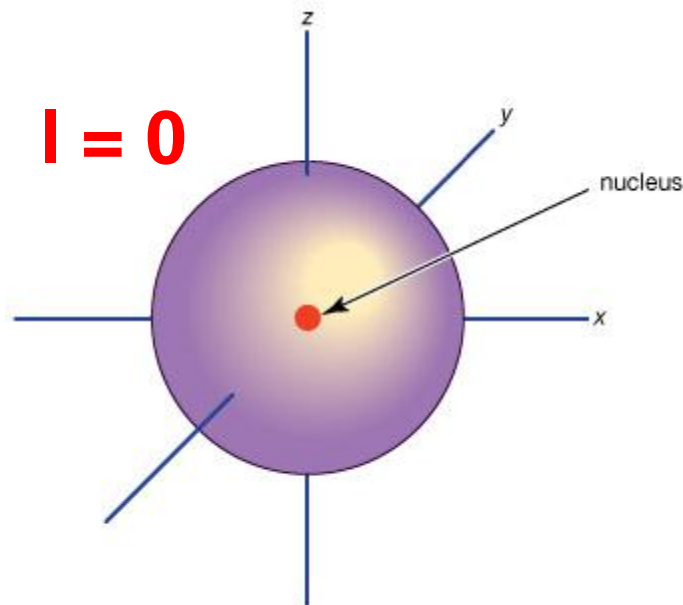
$$\bar{r} = \frac{a_0 n^2}{Z} \left\{ 1 + \frac{1}{2} \left[1 - \frac{1(l+1)}{n^2} \right] \right\}$$

❖ Số lượng phân tử

➤ Xác định hình dạng của các orbital

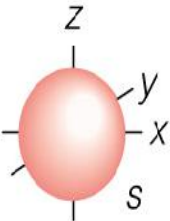
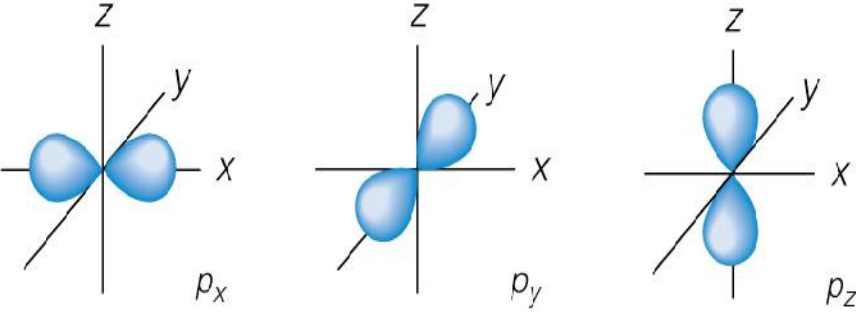
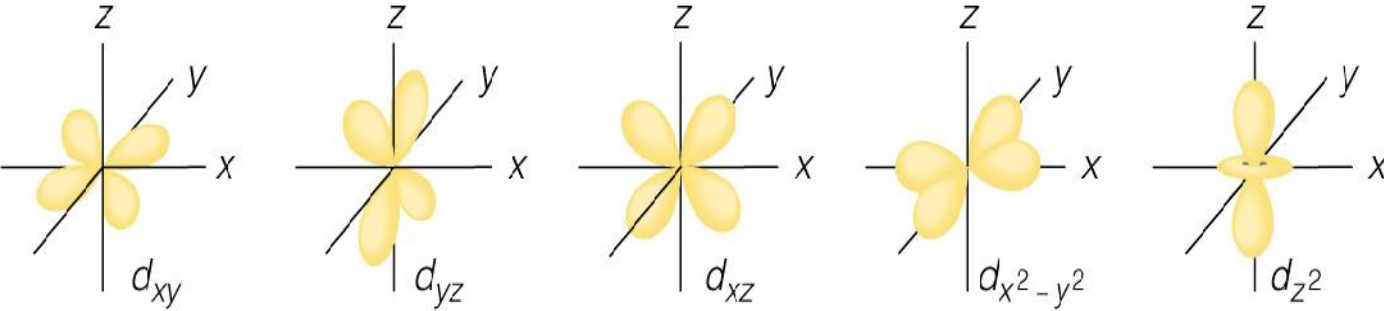
➤ Số lượng giá trị nguyên dương l là $(n-1)$, nghĩa là có n giá trị

l	0	1	2	3
Phân lớp	s	p	d	f



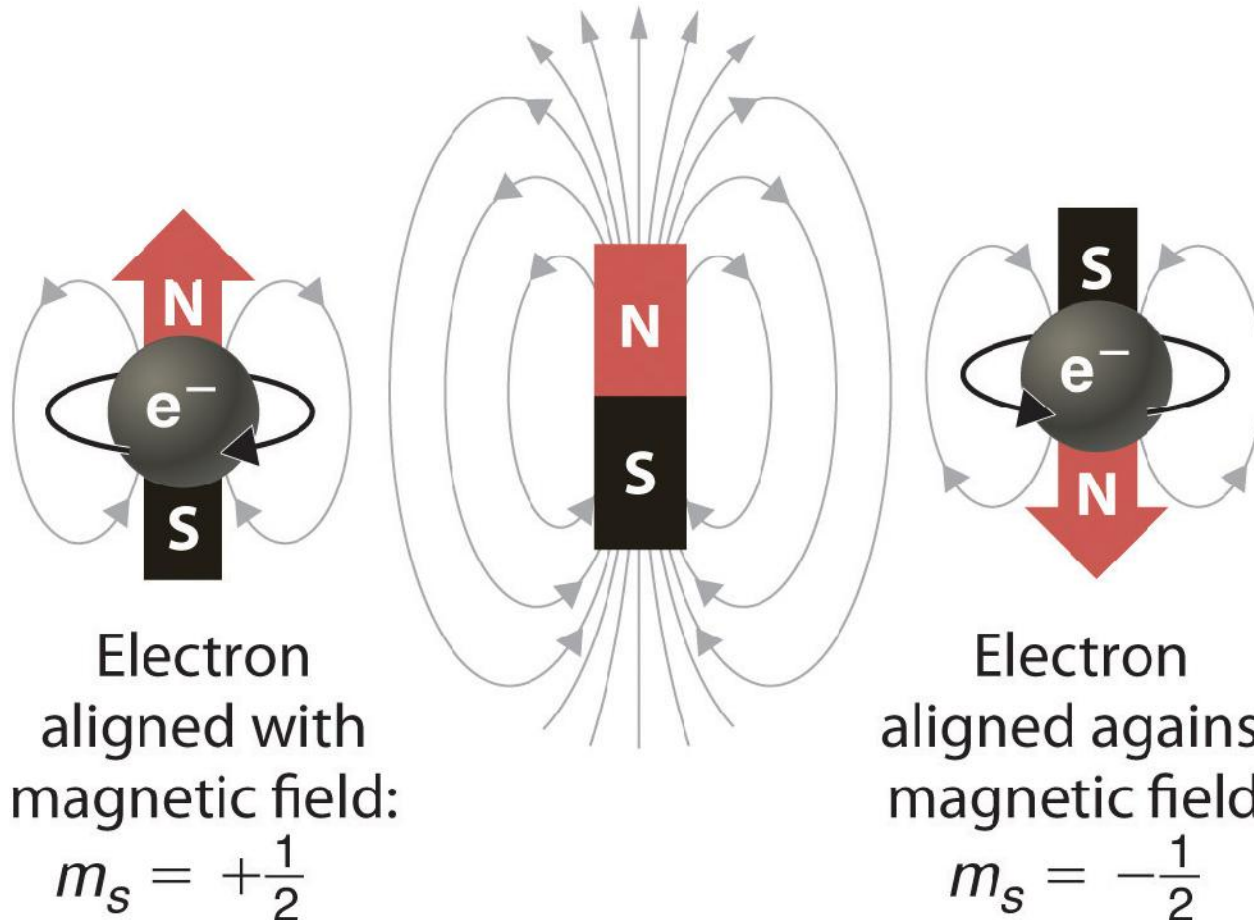
❖ Số lượng m_l

- ✓ Quyển sách số lượng & số lượng tổng các orbital nguyên tử
- ✓ m_l nhận $(2l + 1)$ giá trị từ $-l$ ÷ $+l$ kể cả giá trị 0

Sublevel	Orbital Shapes	Orbitals per Sublevel	Lobes per Orbital
s		1	1
p		3	2
d		5	4 [*]
f	Seven complex shapes	7	8 [*] 24

❖ **S** **I** **ng** **t** **spin** **m_s**

ác trọng cho số quỹ đạo của e xung quanh trục của mình, nhận một trong hai giá trị $-1/2$ & $+1/2$



Nguyên tử nhiều electron & cấu hình electron

- Trạng thái electron có thể phân tích vào 4 số lượng tử n, l, m_l, m_s
- Hình dạng của AO có thể mô tả bằng AO của nguyên tử hydro

Trạng thái năng lượng
của electron có thể khác

Phụ thuộc vào các giá trị n và l

Hệ thống

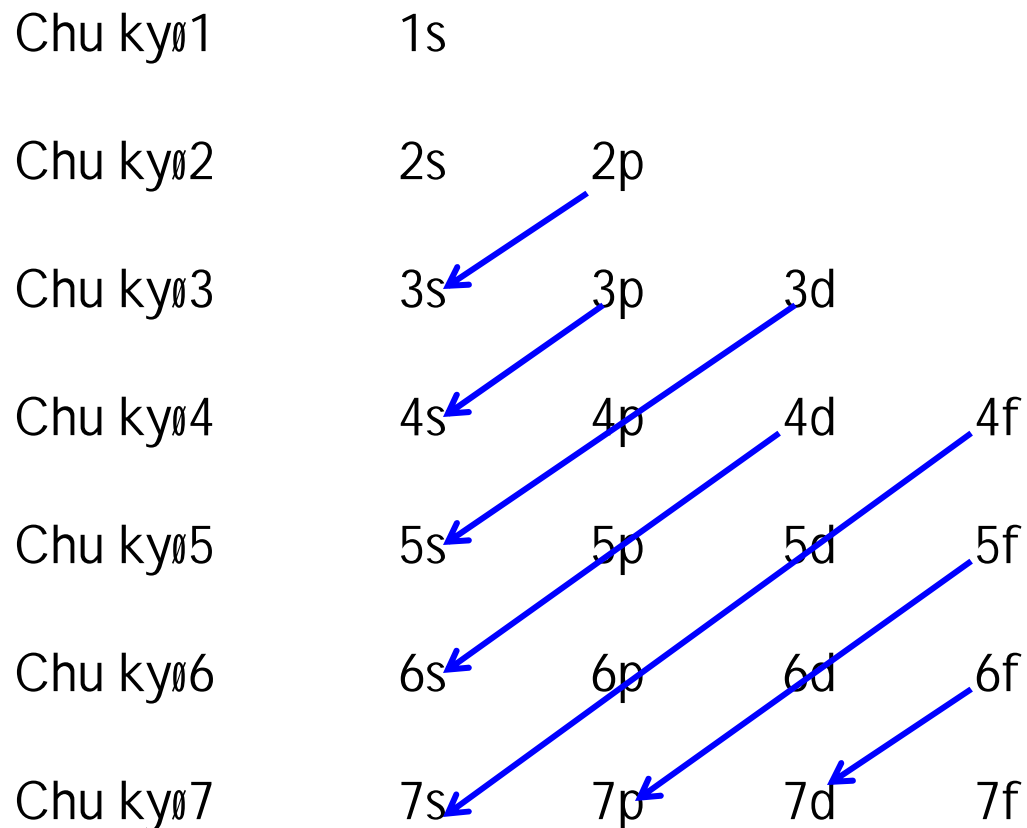
QUY T C SLATER

XEM TRANG 19

GIÁO TRÌNH HÓA I C NG T P 1

C U HÌNH ELECTRON

➤ Quy tắc Klechkowski



➤ Nguyên lý loại trừ Pauli:

Trong nguyên tử không thể có hai e có cùng 4 số lượng tử

⇒ Mỗi AO có các trung bình 3 số lượng tử n, l, m_l nhất định, chính là 2 e có spin khác nhau

⇒ trong mỗi phân lớp có $(2l+1)$ AO, chính là $2(2l+1)$ e

➤ Quy tắc Hund

Trong mỗi phân tử electron có khuynh hướng đi vào các AO sao cho tổng spin là cực đại.

❖ Ví dụ 1: Electron cuối cùng (*thuộc phân mức năng lượng cao nhất*) của nguyên tử có $Z = 30$ có 4 số lượng tử là:

a. $n = 3; l = 2; m_l = -2; m_s = +1/2$

b. $n = 4; l = 0; m_l = 0; m_s = -1/2$

c. $n = 3; l = 2; m_l = 2; m_s = -1/2$

d. $n = 4; l = 0; m_l = 0; m_s = +1/2$

❖ Ví dụ 2: 4 s l ng t c a
electron cu i cùng c a ng.t A:
 $n=4$; $l=2$; $m_l=0$; $m_s=-1/2$.
V y c u hình A là:



❖ Ví dụ 3: Tính giá trị hiệu điện thế của electron 3d của nguyên tử Zn ($Z = 30$)

a. 8,75

b. 9,25

c. 7,85

d. 10,5

III. Bảng thành phần hoàn thành các nguyên tố hóa học

Bảng HTTH

										Nhóm chính							
										13 14 15 16 17						18	
										3A 4A 5A 6A 7A						8A	
										5 6 7 8 9						10	
										B C N O F						Ne	
										10.811 12.011 14.0067 15.9994 18.9984						20.1797	
										13 14 15 16 17						18	
										Al Si P S Cl						Ar	
										26.9815 28.0855 30.9738 32.066 35.4527						39.948	
										19 20 21 22 23 24 25 26 27 28 29 30						31 32 33 34 35 36	
										K Ca Sc Ti V Cr Mn Fe Co Ni Cu Zn						Ga Ge As Se Br Kr	
										39.0983 40.078 44.9559 47.88 50.9415 51.9961 54.9381 55.847 58.9332 58.693 63.546 65.39						69.723 72.61 74.9216 78.96 79.904 83.80	
										37 38 39 40 41 42 43 44 45 46 47 48						49 50 51 52 53 54	
										Rb Sr Y Zr Nb Mo Tc Ru Rh Pd Ag Cd						In Sn Sb Te I Xe	
										85.4678 87.62 88.9059 91.224 92.9064 95.94 (98) 101.07 102.906 106.42 107.868 112.411						114.818 118.710 121.757 127.60 126.904 131.29	
										55 56 57 72 73 74 75 76 77 78 79 80						81 82 83 84 85 86	
										Cs Ba *La Hf Ta W Re Os Ir Pt Au Hg						Tl Pb Bi Po At Rn	
										132.905 137.327 138.906 178.49 180.948 183.84 186.207 190.23 192.22 195.08 196.967 200.59						204.383 207.2 208.980 (209) (210) (222)	
										87 88 89 104 105 106 107 108 109 110 111 112						114 116 118	
										Fr Ra †Ac Rf Db Sg Bh Hs Mt						(287) (289) (293)	
										(223) 226.025 227.028 (261) (262) (263) (262) (265) (266) (269) (272) (272)							
										*Lanthanide series						58 59 60 61 62 63 64 65 66 67 68 69 70 71	
										Ce Pr Nd Pm Sm Eu Gd Tb Dy Ho Er Tm Yb Lu							
										140.115 140.908 144.24 (145) 150.36 151.965 157.25 158.925 162.50 164.930 167.26 168.934 173.04 174.967							
										†Actinide series						90 91 92 93 94 95 96 97 98 99 100 101 102 103	
										Th Pa U Np Pu Am Cm Bk Cf Es Fm Md No Lr							
										232.038 231.036 238.029 237.048 (244) (243) (247) (247) (251) (252) (257) (258) (259) (260)							

Nhóm ph
KL chuyển tiếp

Nhóm chính

Nhóm chính

Lanthanides và Actinides

Số bit cần để mã hóa hoàn toàn tính chất các nguyên tố trong bảng HTTH

Bán kính nguyên tử, ion

Năng lượng ion hóa

Ái lực electron

Âm điện

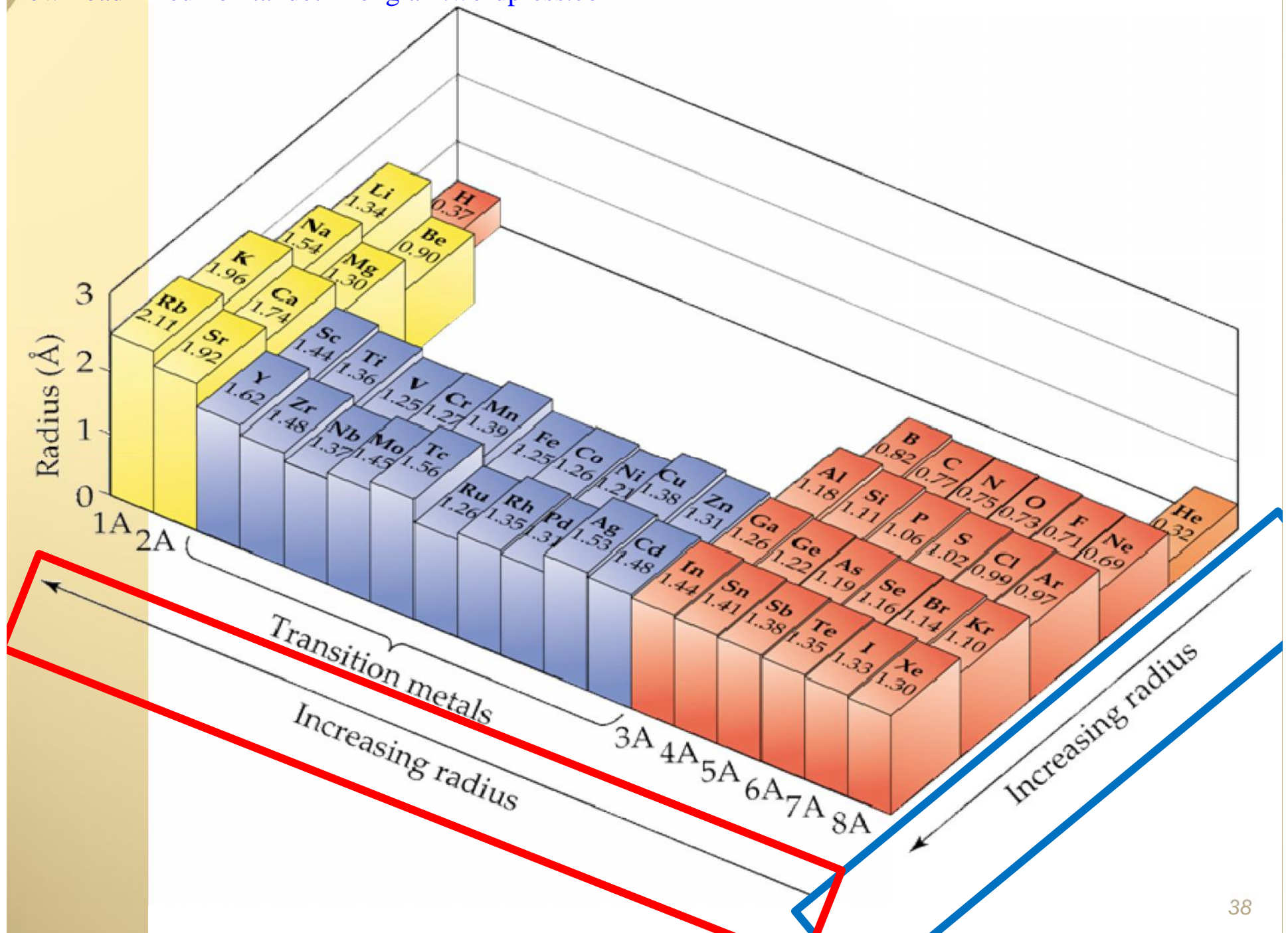
➤ Bán kính nguyên tử

Trong chu kỳ
(khi đi từ trái
sang phải)

- Bán kính nguyên tử **giảm dần**

**Trong phân
nhóm**
(khi đi từ trên
xuống dưới)

- Bán kính nguyên tử **tăng dần**



➤ Bán kính ion

❖ Khi chuyển nguyên tử trung hòa → **cation** thì bán kính ...

Giảm???

$$r_{Na^+} < r_{Na}$$

❖ Khi chuyển nguyên tử trung hòa → **anion** thì bán kính ...

tăng

$$r_{Cl^-} > r_{Cl}$$

❖ Ch so sánh bán kính nh ng ion có cùng s electron.

Vd1:



Vd2:



➤ **Tính kim loại, phi kim**

Tính phi kim

Tính kim loại

Tính phi kim

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

Chu kỳ	IA	IIA	BẢNG TUẦN HOÀN CÁC NGUYÊN TỐ HOÁ HỌC										IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	VIIIA
1	1 H Hydro [1s ¹]																[H]	2 He Helium [1s ²]
2	3 Li Lithium [1s ² 2s ¹]	4 Be Beryllium [1s ² 2s ²]																
3	11 Na Natrium [Ne] 3s ¹	12 Mg Magi [Ne] 3s ²																
4	19 K Kalium [Ar] 4s ¹	20 Ca Canxi [Ar] 4s ²	21 Sc Scandi [Ar] 3d ¹ 4s ²	22 Ti Titan [Ar] 3d ² 4s ²	23 V Vanadi [Ar] 3d ³ 4s ²	24 Cr Crom [Ar] 3d ⁵ 4s ¹	25 Mn Mangan [Ar] 3d ⁵ 4s ²	26 Fe Sắt [Ar] 3d ⁶ 4s ²	27 Co Coban [Ar] 3d ⁷ 4s ²	28 Ni Niken [Ar] 3d ⁸ 4s ²	29 Cu Đồng [Ar] 3d ¹⁰ 4s ¹	30 Zn Kẽm [Ar] 3d ¹⁰ 4s ²	31 Ga Gali [Ar] 3d ¹⁰ 4s ² 4p ¹	32 Ge Germani [Ar] 3d ¹⁰ 4s ² 4p ²	33 As Asen [Ar] 3d ¹⁰ 4s ² 4p ³	34 Se Selen [Ar] 3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁴	35 Br Brom [Ar] 3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁵	36 Kr Kripton [Ar] 3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁶
5	37 Rb Rubidi [Kr] 5s ¹	38 Sr Stronti [Kr] 5s ²	39 Y Ytri [Kr] 4d ¹ 5s ²	40 Zr Zirconium [Kr] 4d ² 5s ²	41 Nb Nio-bi [Kr] 4d ⁴ 5s ¹	42 Mo Molipden [Kr] 4d ⁵ 5s ¹	43 Tc Technetium [Kr] 4d ⁵ 5s ²	44 Ru Ruteni [Kr] 4d ⁷ 5s ¹	45 Rh Rodi [Kr] 4d ⁸ 5s ¹	46 Pd Paladi [Kr] 4d ¹⁰	47 Ag Bạc [Kr] 4d ¹⁰ 5s ¹	48 Cd Cadmium [Kr] 4d ¹⁰ 5s ²	49 In Indi [Kr] 4d ¹⁰ 5s ² 5p ¹	50 Sn Thiếc [Kr] 4d ¹⁰ 5s ² 5p ²	51 Sb Antimon (Sb) [Kr] 4d ¹⁰ 5s ² 5p ³	52 Te Telu [Kr] 4d ¹⁰ 5s ² 5p ⁴	53 I Iot [Kr] 4d ¹⁰ 5s ² 5p ⁵	54 Xe Xenon [Kr] 4d ¹⁰ 5s ² 5p ⁶
6	55 Cs Xesi [Xe] 6s ¹	56 Ba Bari [Xe] 6s ²	57 La Lantan [Xe] 5d ¹ 6s ²	58 Ce Cerium [Xe] 4f ¹ 5d ¹ 6s ²	59 Pr Praseodim [Xe] 4f ² 6s ²	60 Nd Neriođim [Xe] 4f ⁴ 6s ²	61 Pm Prometi [Xe] 4f ⁵ 6s ²	62 Sm Samiđim [Xe] 4f ⁶ 6s ²	63 Eu Europi [Xe] 4f ⁷ 6s ²	64 Gd Gadolini [Xe] 4f ⁷ 5d ¹ 6s ²	65 Tb Terbi [Xe] 4f ⁹ 6s ²	66 Dy Diprôđim [Xe] 4f ¹⁰ 6s ²	67 Ho Holmi [Xe] 4f ¹¹ 6s ²	68 Er Eribi [Xe] 4f ¹² 6s ²	69 Tm Tul [Xe] 4f ¹³ 6s ²	70 Yb Ytêrbi [Xe] 4f ¹⁴ 6s ²	71 Lu Luteti [Xe] 4f ¹⁴ 5d ¹ 6s ²	
7	87 Fr Fradium [Rn] 7s ¹	88 Ra Radi [Rn] 7s ²	89 Ac Actini [Rn] 6d ¹ 7s ²	104	105	106	107	108	109	110								

Kim loại ← → Phi kim

■ Các nguyên tố s ■ Các nguyên tố p ■ Các nguyên tố d ■ Các nguyên tố f

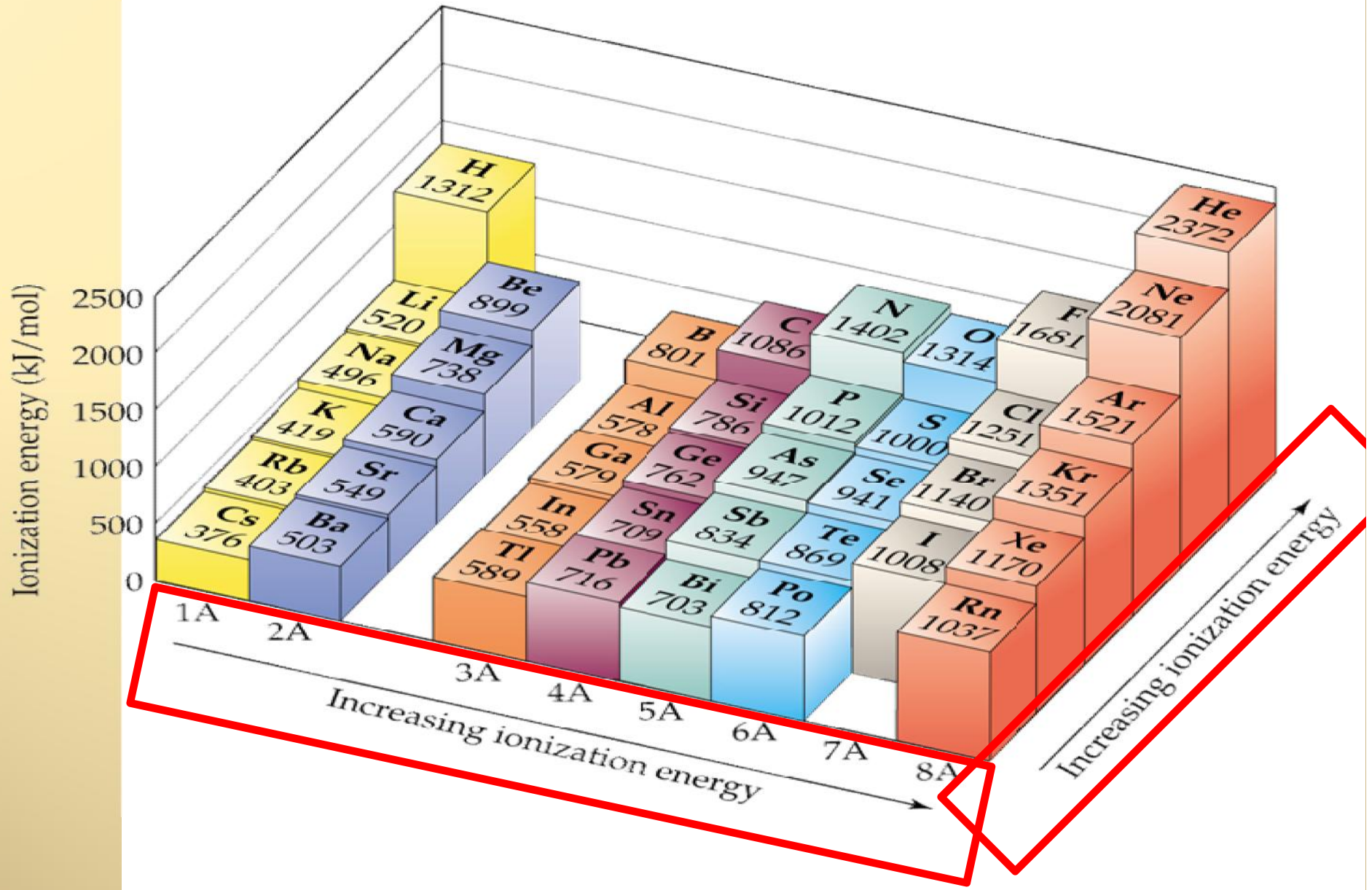
Họ Lantan	Họ Actini
58 140,12 Ce Cerium [Xe] 4f ¹ 5d ¹ 6s ²	88 226,07 Ra Radium [Rn] 7s ²
59 140,91 Pr Praseodim [Xe] 4f ² 6s ²	89 227,03 Ac Actini [Rn] 6d ¹ 7s ²
60 144,24 Nd Neriođim [Xe] 4f ⁴ 6s ²	90 223,04 Th Thori [Rn] 6d ² 7s ²
61 147,07 Pm Prometi [Xe] 4f ⁵ 6s ²	91 223,04 Pa Protactini [Rn] 5f ² 6d ¹ 7s ²
62 150,36 Sm Samiđim [Xe] 4f ⁶ 6s ²	92 238,03 U Uranium [Rn] 5f ³ 6d ¹ 7s ²
63 151,96 Eu Europi [Xe] 4f ⁷ 6s ²	93 237,04 Np Nepđuri [Rn] 5f ⁴ 6d ¹ 7s ²
64 157,25 Gd Gadolini [Xe] 4f ⁷ 5d ¹ 6s ²	94 244,06 Pu Pluton [Rn] 5f ⁶ 6d ¹ 7s ²
65 158,93 Tb Terbi [Xe] 4f ⁹ 6s ²	95 243,06 Am Ameđiđim [Rn] 5f ⁷ 6d ¹ 7s ²
66 162,50 Dy Diprôđim [Xe] 4f ¹⁰ 6s ²	96 247,07 Cm Curiđim [Rn] 5f ⁷ 6d ² 7s ²
67 164,93 Ho Holmi [Xe] 4f ¹¹ 6s ²	97 247,07 Bk Bekkeriđim [Rn] 5f ⁷ 6d ³ 7s ²
68 167,26 Er Eribi [Xe] 4f ¹² 6s ²	98 251,08 Cf Calđiđim [Rn] 5f ⁷ 6d ⁴ 7s ²
69 168,93 Tm Tul [Xe] 4f ¹³ 6s ²	99 252,08 Es Erenđiđim [Rn] 5f ⁷ 6d ⁴ 7s ²
70 173,04 Yb Ytêrbi [Xe] 4f ¹⁴ 6s ²	100 257,10 Fm Fermiđim [Rn] 5f ⁷ 6d ⁴ 7s ²
71 174,97 Lu Luteti [Xe] 4f ¹⁴ 5d ¹ 6s ²	101 259,10 Md Mendelêđim [Rn] 5f ⁷ 6d ⁵ 7s ²

Tính kim loại

➤ **N ng I ng ion hóa**

N ng I ng ion hóa I là **n ng I ng c n thi t**
tách m t electron ra kh i nguyên t th khí không
b kích thích





➤ **Ái l c electron**

Ái l c eletron F là n ng l ng phát ra (-) hay thu vào (+) khi k t h p m t electron vào nguyên t th khí không b kích thích



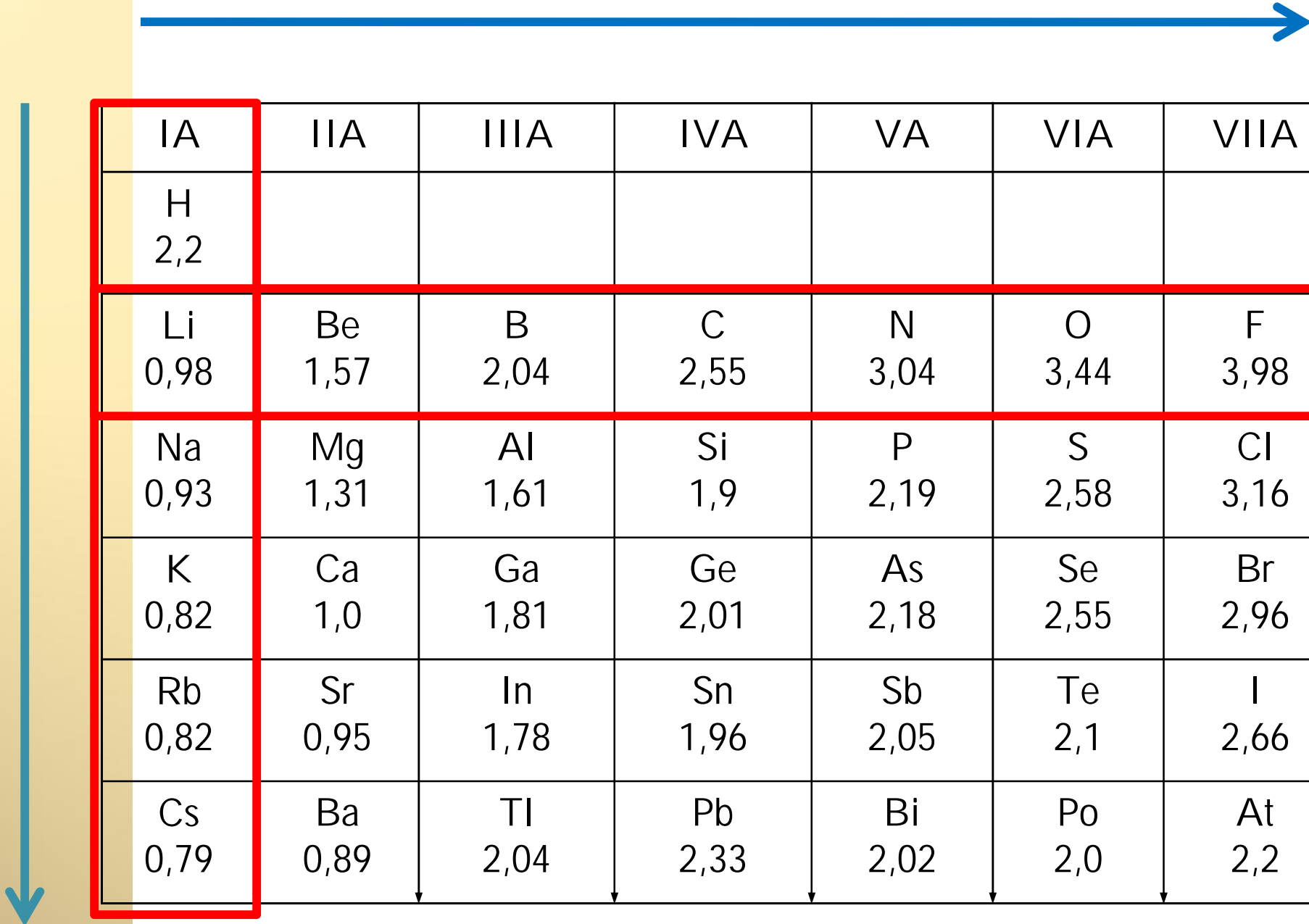


IA	IIA	IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	VIIIA
H -73							He >0
Li -60	Be +48	B -27	C -122	N +7	O -141	F -328	Ne > 0
Na -53	Mg +39	Al -44	Si -134	P -72	S -200	Cl -349	Ar > 0
K -48	Ca +29	Ga -29	Ge -118	As -77	Se -1985	Br -325	Kr > 0
Rb -47	Sr +29	In -29	Sn -121	Sb -101	Te -190	I -295	Xe > 0
Cs -45	Ba +29	Tl -30	Pb -110	Bi -110	Po ?	At ?	Rn > 0



âm i n

âm i n t là i l ng c tr ng cho kh n ng c a m t nguyên t (trong phân t) **hút electron v phía mình** khi t o liên k t v i nguyên t (c a nguyên t khác)



IA	IIA	IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA
H 2,2						
Li 0,98	Be 1,57	B 2,04	C 2,55	N 3,04	O 3,44	F 3,98
Na 0,93	Mg 1,31	Al 1,61	Si 1,9	P 2,19	S 2,58	Cl 3,16
K 0,82	Ca 1,0	Ga 1,81	Ge 2,01	As 2,18	Se 2,55	Br 2,96
Rb 0,82	Sr 0,95	In 1,78	Sn 1,96	Sb 2,05	Te 2,1	I 2,66
Cs 0,79	Ba 0,89	Tl 2,04	Pb 2,33	Bi 2,02	Po 2,0	At 2,2

CHƯƠNG 2:
LIÊN KẾT HÓA HỌC &
CỤT O PHÂN T

N i dung

1. Nh ng khái ni m c b n v liên k t hóa h c
2. Liên k t c ng hóa tr
3. Liên k t ion
4. Liên k t hy ro
5. Liên k t Van Der Vaal

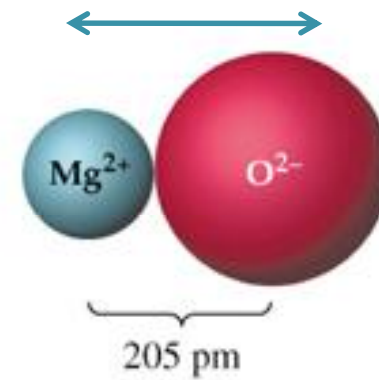
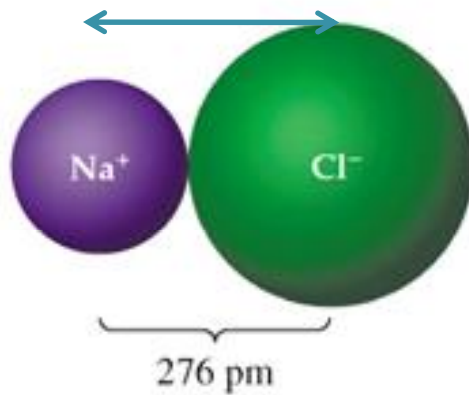
1. Những khái niệm cơ bản về liên kết hóa học

1.1 Bản chất của liên kết

- Các loại liên kết hoá học đều có bản chất in, do tương tác của hạt nhân nguyên tử và electron
- Chỉ có các electron hóa trị (electron lớp ngoài cùng tham gia vào liên kết hóa học)

1.2. dài liên kết

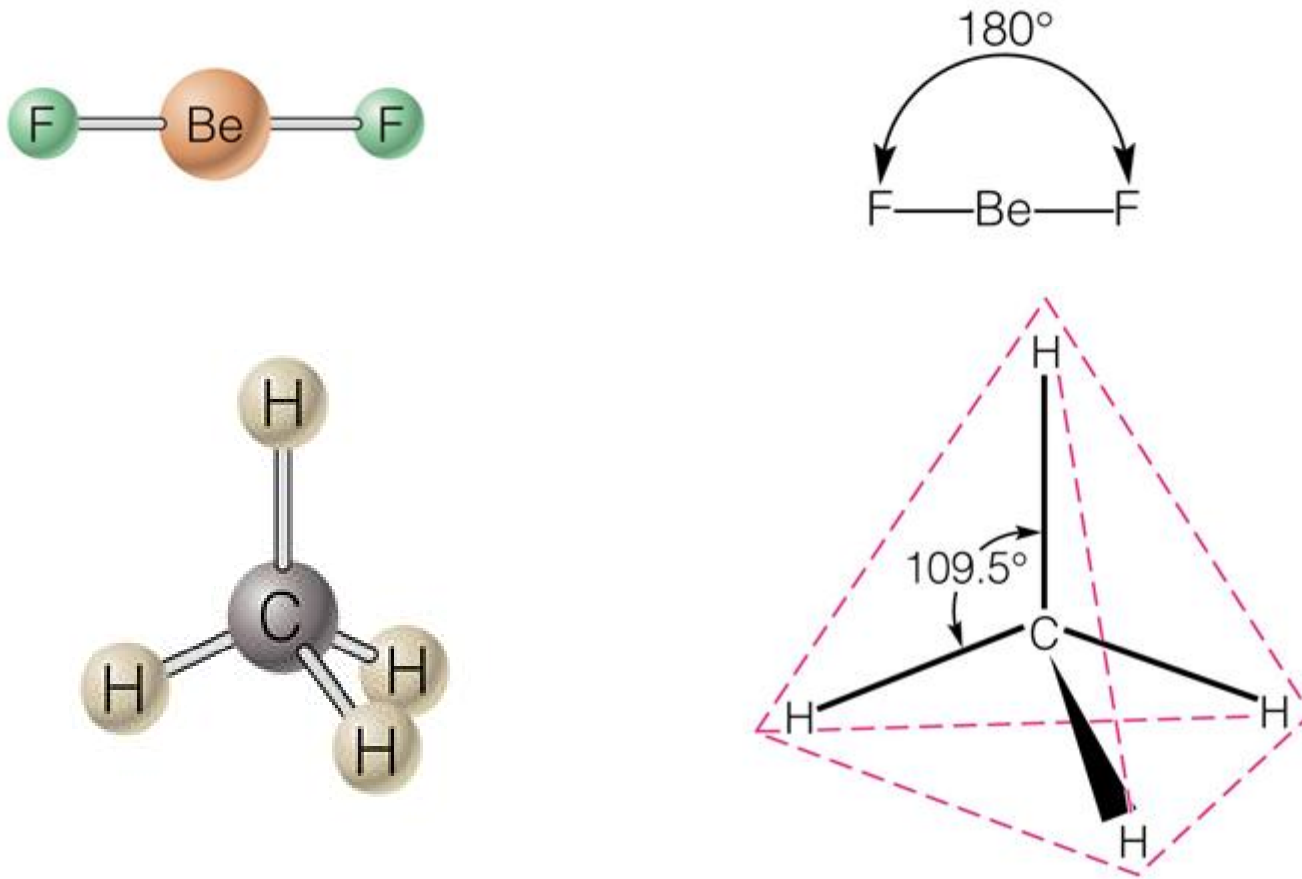
là khoảng cách giữa hai hạt nhân nguyên tử liên kết với nhau.



Ví dụ	Liên kết:	H-F	H-Cl	H-Br	H-I
	d (Å)	0,92	1,28	1,42	1,62

1.3. Góc hóa tr

Là góc t o thành b i 2 o n th ng n i h t nhân nguyên t trung tâm v i 2 h t nhân nguyên t liên k t.



1.4. Bậc liên kết

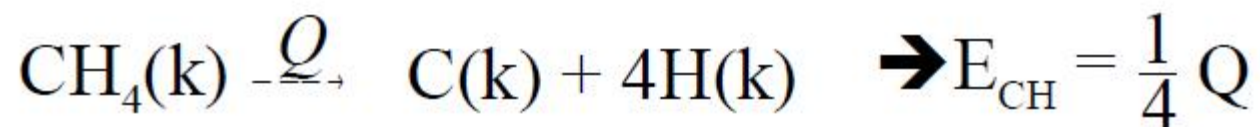
Bậc liên kết là số liên kết tạo thành giữa 2 nguyên tử trong tác tử phân tử với nhau

Etan	$\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_3$	$\text{bkk} = 1$
Eten	$\text{H}_2\text{C} = \text{CH}_2$	$\text{bkk} = 2$
Etin	$\text{HC} \equiv \text{CH}$	$\text{bkk} = 3$

1.5. Năng lượng liên kết

Năng lượng cần tiêu tốn phá hủy liên kết có trong 1 mol phân tử ở trạng thái khí

$$E_{\text{H-H}} = 431 \text{ kJ/mol}$$



- Năng lượng liên kết phụ thuộc vào dài liên kết, bội liên kết.
- Năng lượng liên kết càng lớn \rightarrow liên kết càng bền



Bond length:

148 pm

121 pm

110 pm

Bond strength:

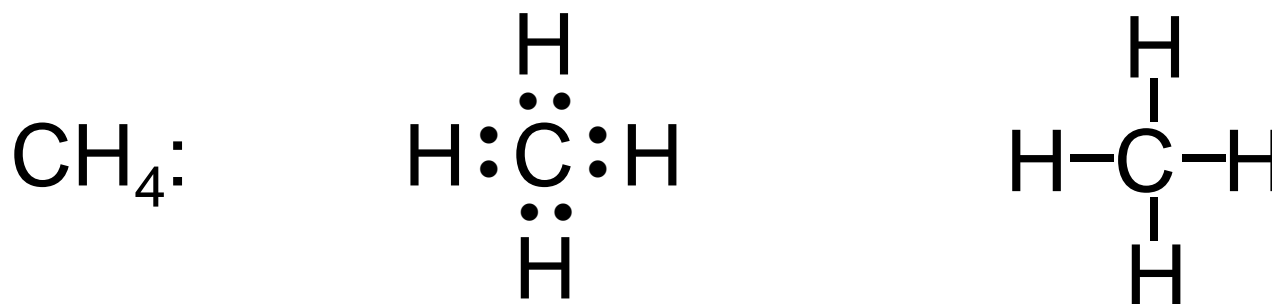
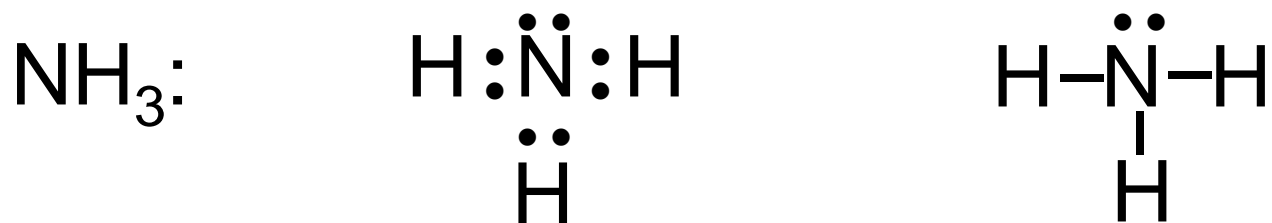
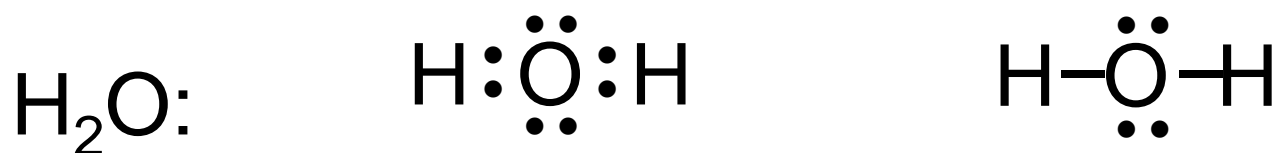
213 kJ/mol

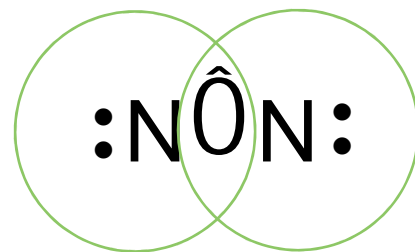
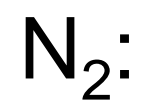
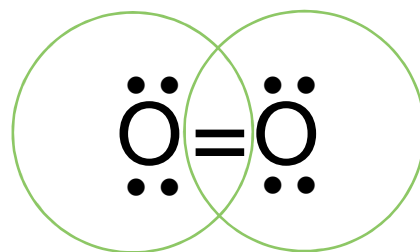
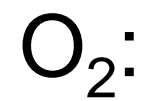
498 kJ/mol

945 kJ/mol

2. LIÊN KẾT CẤU TRÚC HÓA TR

Liên kết cấu trúc hóa tr theo Lewis (1916)



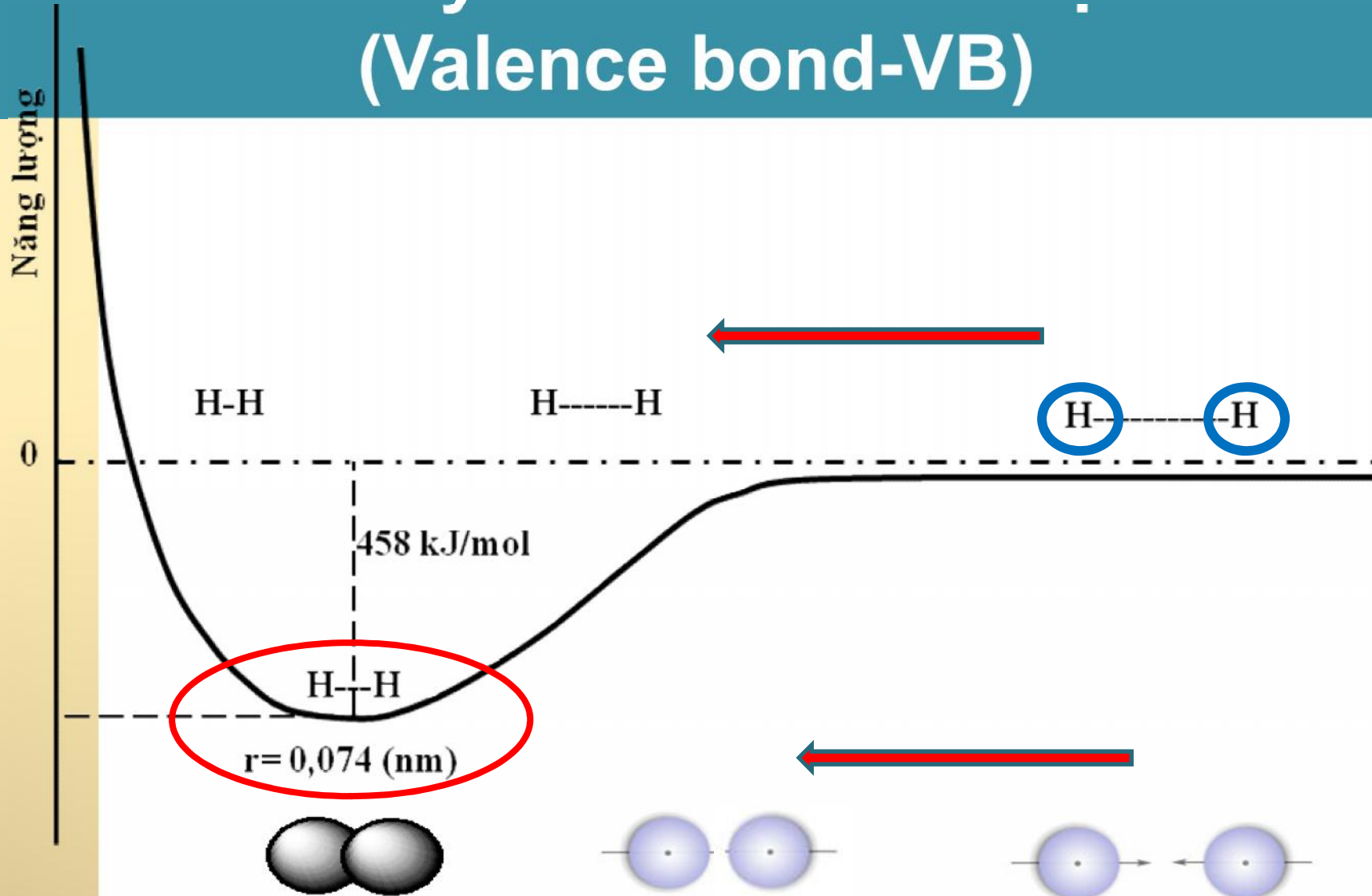


LIÊN KẾT HÓA TRẠNG THEO CÁCH LIÊN KẾT

PHƯƠNG PHÁP LIÊN KẾT HÓA TRẠNG
(VB)

PHƯƠNG PHÁP ORBITAL PHÂN TỬ
(MO)

Thuyết liên kết hoá trị (Valence bond-VB)



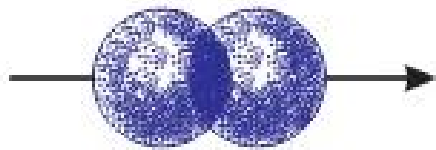
Liên kết cộng hóa trị hình thành do **s xen ph** của hai orbital, trong đó có 2 electron có spin trái dấu

Liên kết cộng hóa trị càng bền khi chênh lệch của các orbital nguyên tử càng lớn

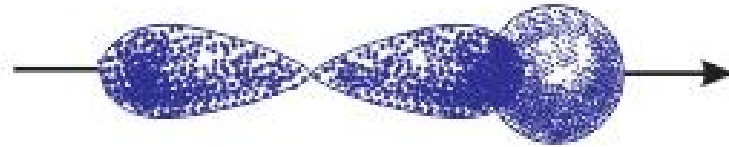
Các kiểu xen phủ

❖ Xen phủ trực tiếp liên nhân

Liên kết sigma



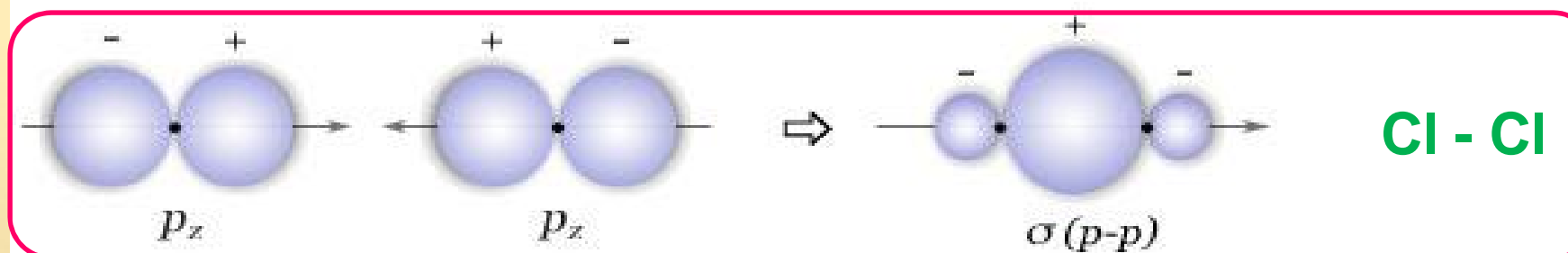
s-s



s-p

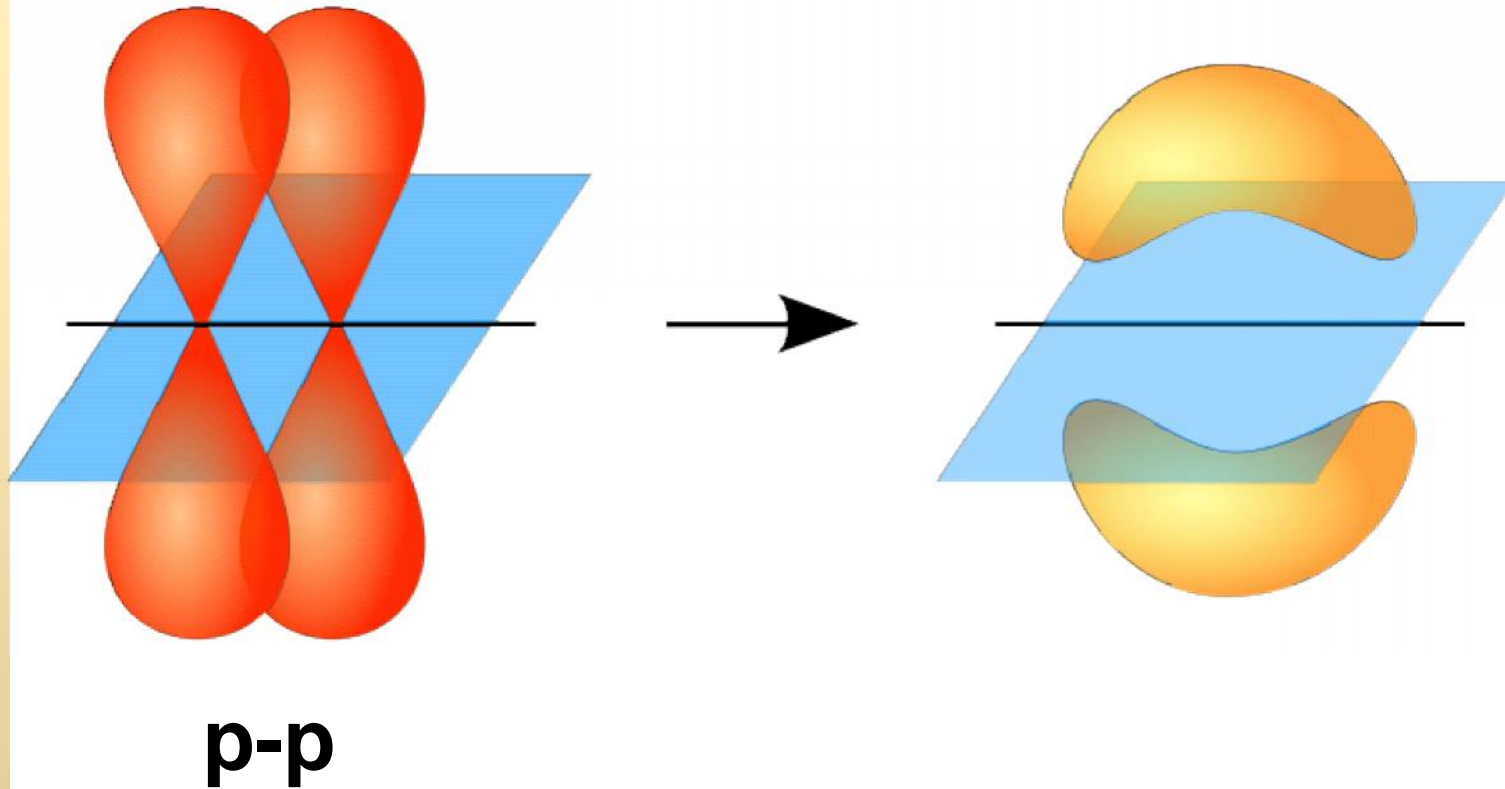


p-p



❖ Xen ph tr c hông (bên)

Liên k t pi f



Ví dụ :

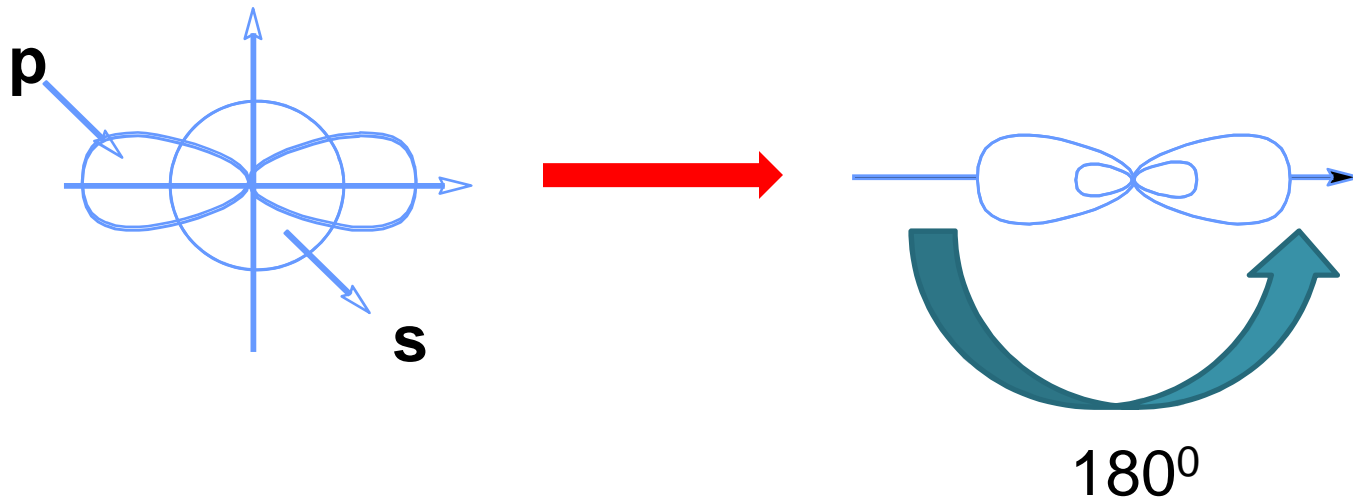
Xác định công thức cấu tạo (số bậc liên kết, loại liên kết, góc hóa trị) của các phân tử sau: F_2 , O_2 , N_2 , H_2O .

Thuyết lai hóa các orbital nguyên tử

- Trước khi tham gia liên kết, các orbital s, p, d trộn lẫn với nhau để tạo ra các orbital lai hóa.
- Các orbital lai hóa có năng lượng, hình dạng và kích thước giống nhau.
- Có bao nhiêu AO tham gia lai hóa thì có bao nhiêu AO lai hóa tạo thành, và bố trí vị trí trong không gian.
- Các kiểu lai hóa sp^3 , sp^2 , sp , sp^3d , sp^3d^2

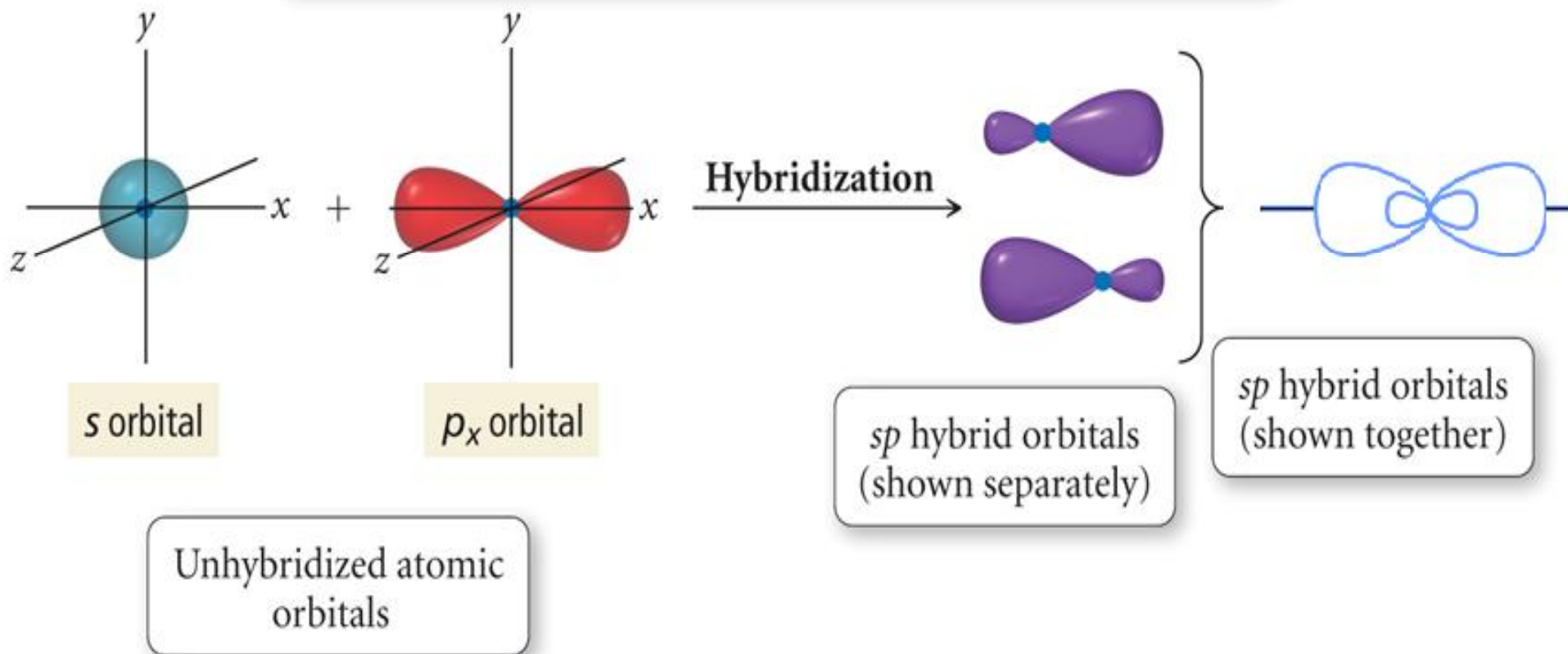
Lai hóa sp

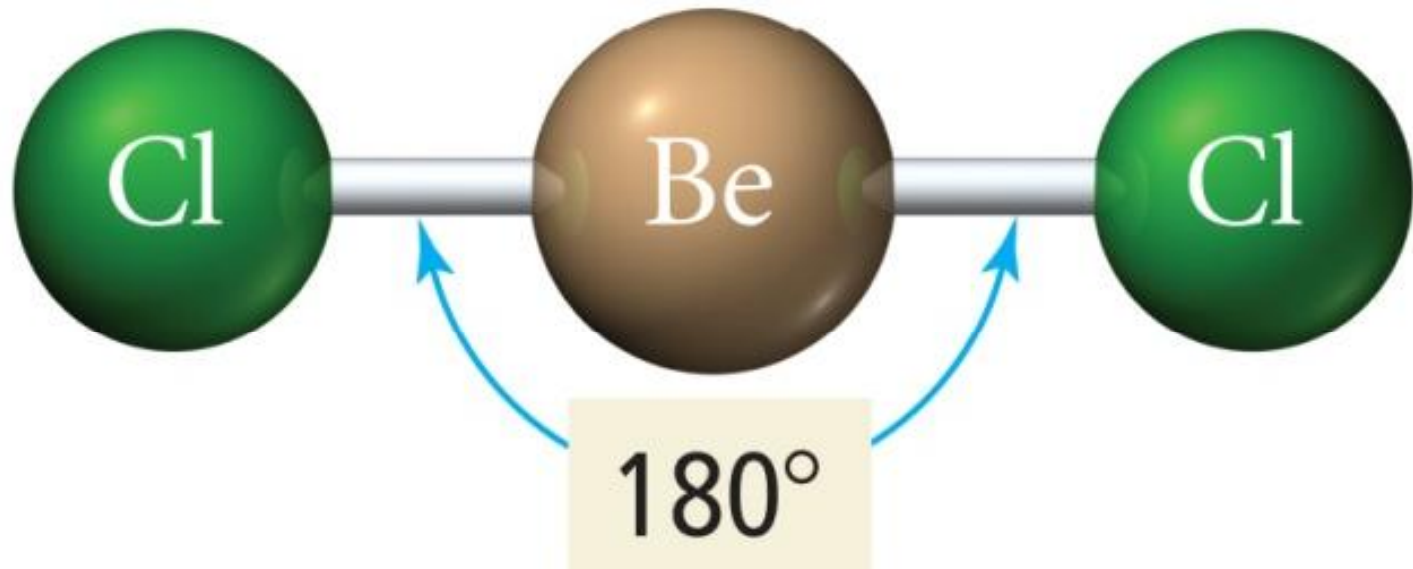
- ❖ Sự kết hợp của 1 orbital s và 1 orbital p hình thành 2 orbital sp.
- ❖ 2 orbital sp phân bố lệch nhau có cùng trục nằm trên một đường thẳng (180°)



Formation of sp Hybrid Orbitals

One s orbital and one p orbital combine to form two sp orbitals.

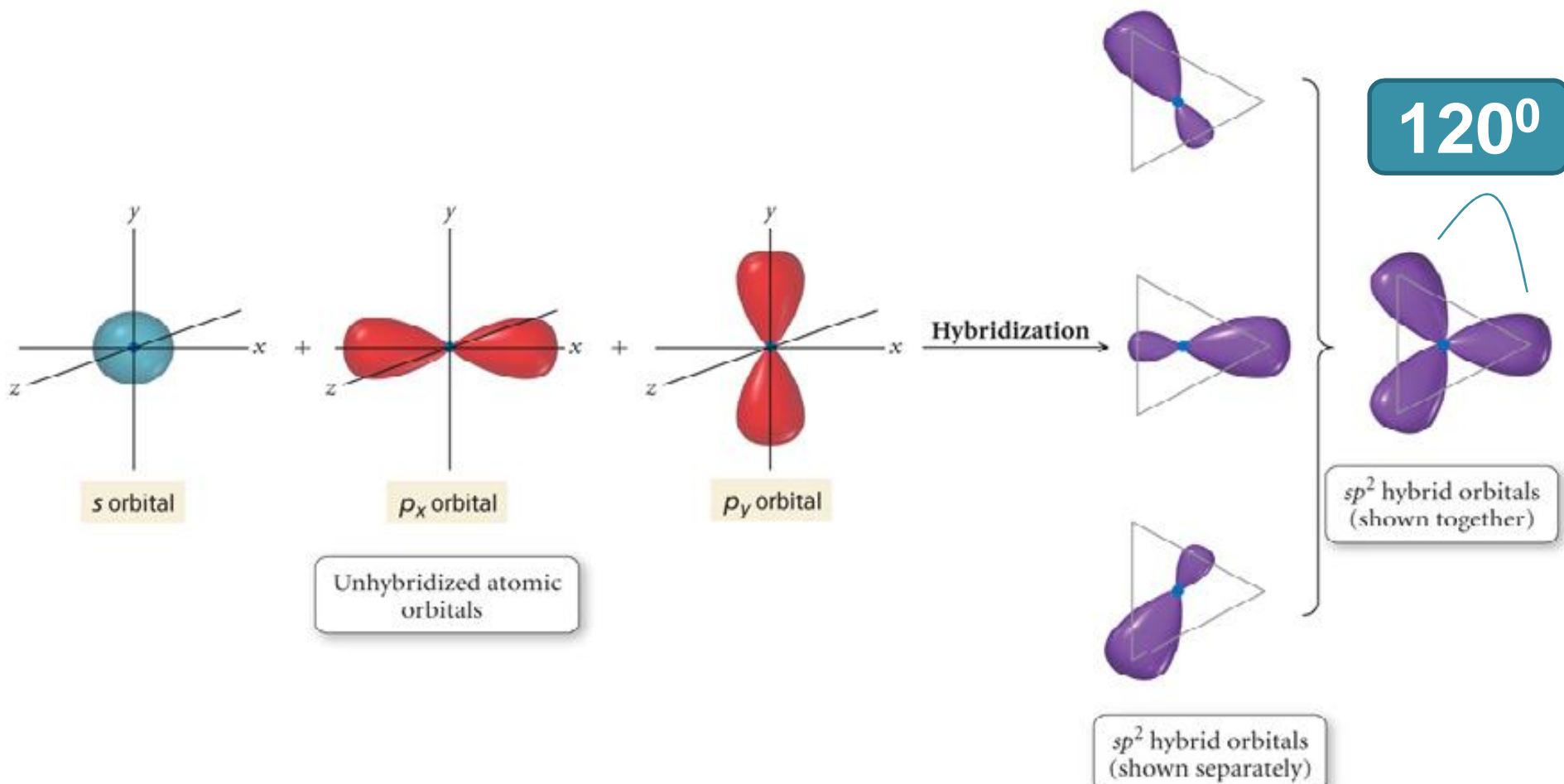


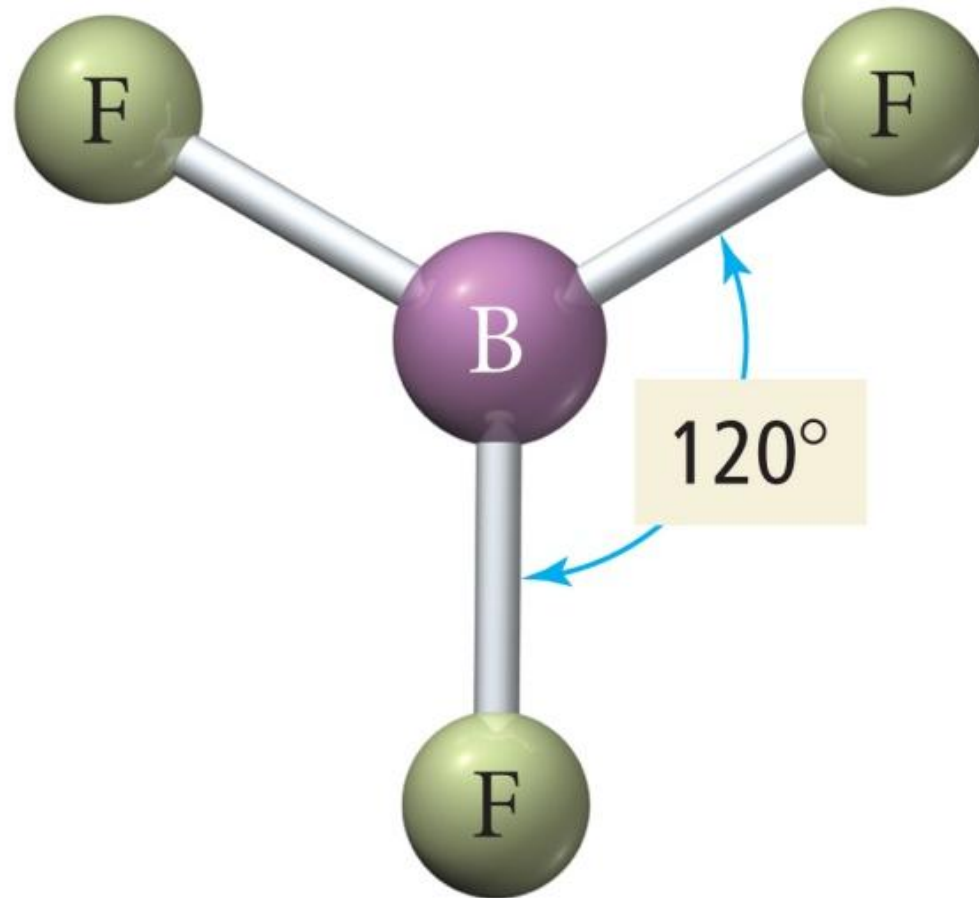


Lai hóa sp^2

Formation of sp^2 Hybrid Orbitals

One s orbital and two p orbitals combine to form three sp^2 orbitals.

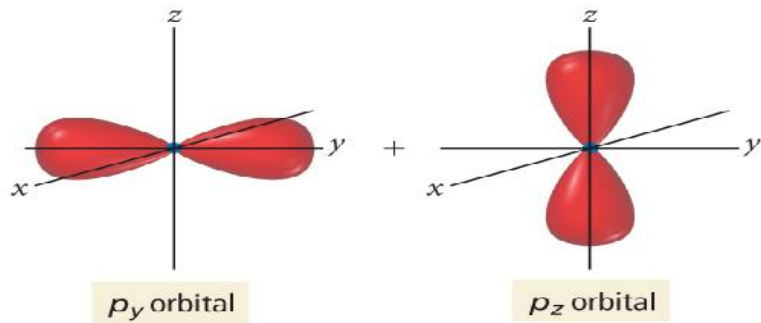
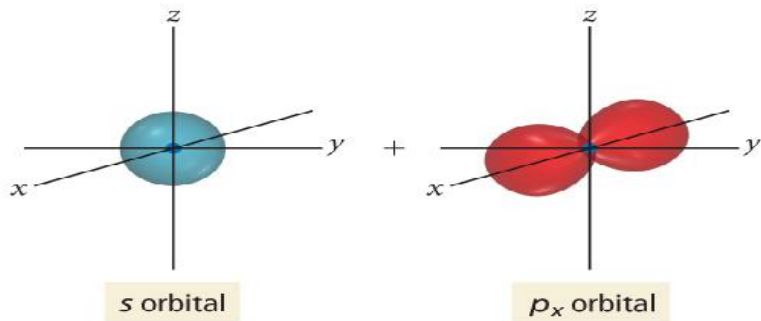




Lai hóa sp^3

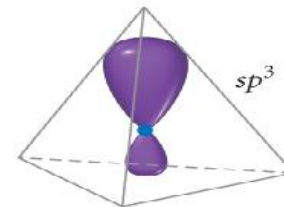
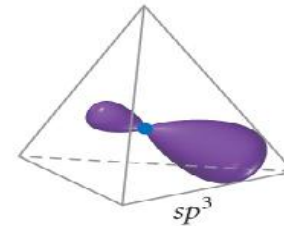
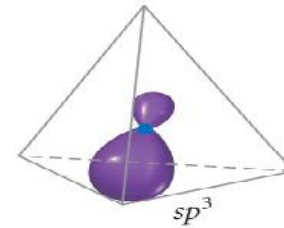
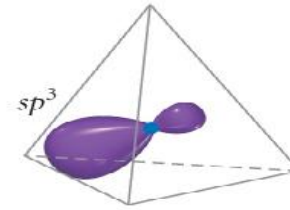
Formation of sp^3 Hybrid Orbitals

One s orbital and three p orbitals combine to form four sp^3 orbitals.



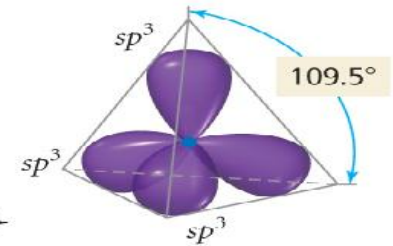
Unhybridized atomic orbitals

Hybridization \rightarrow



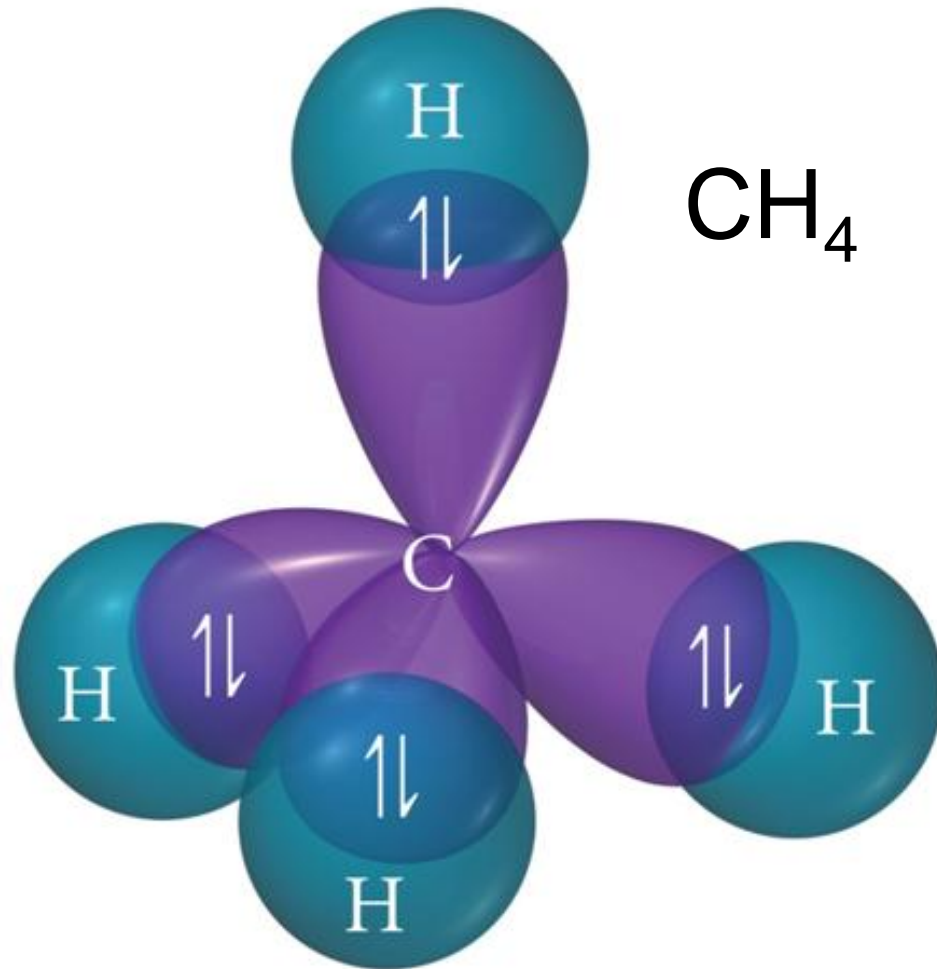
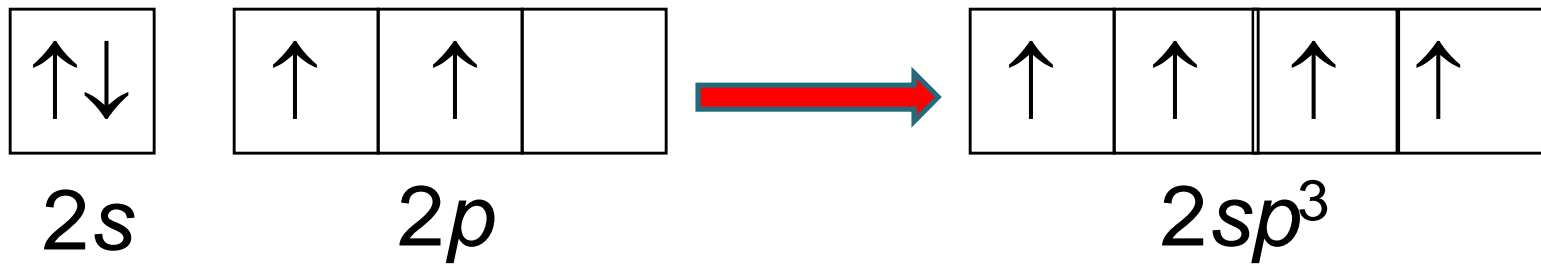
sp^3 hybrid orbitals (shown separately)

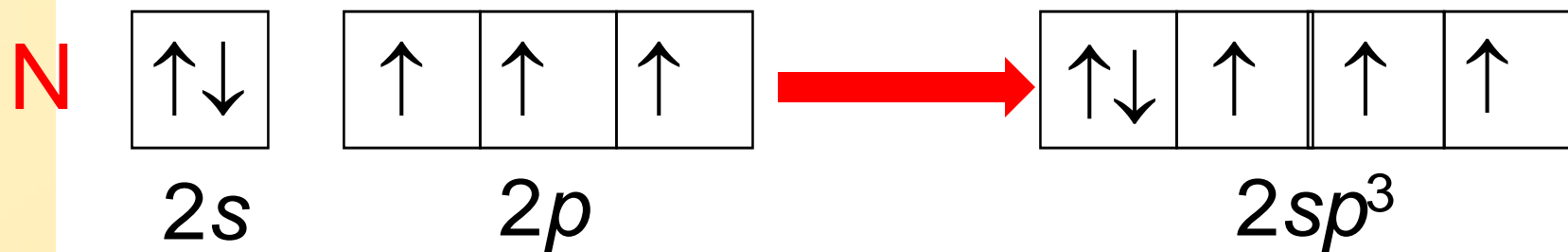
109,5°



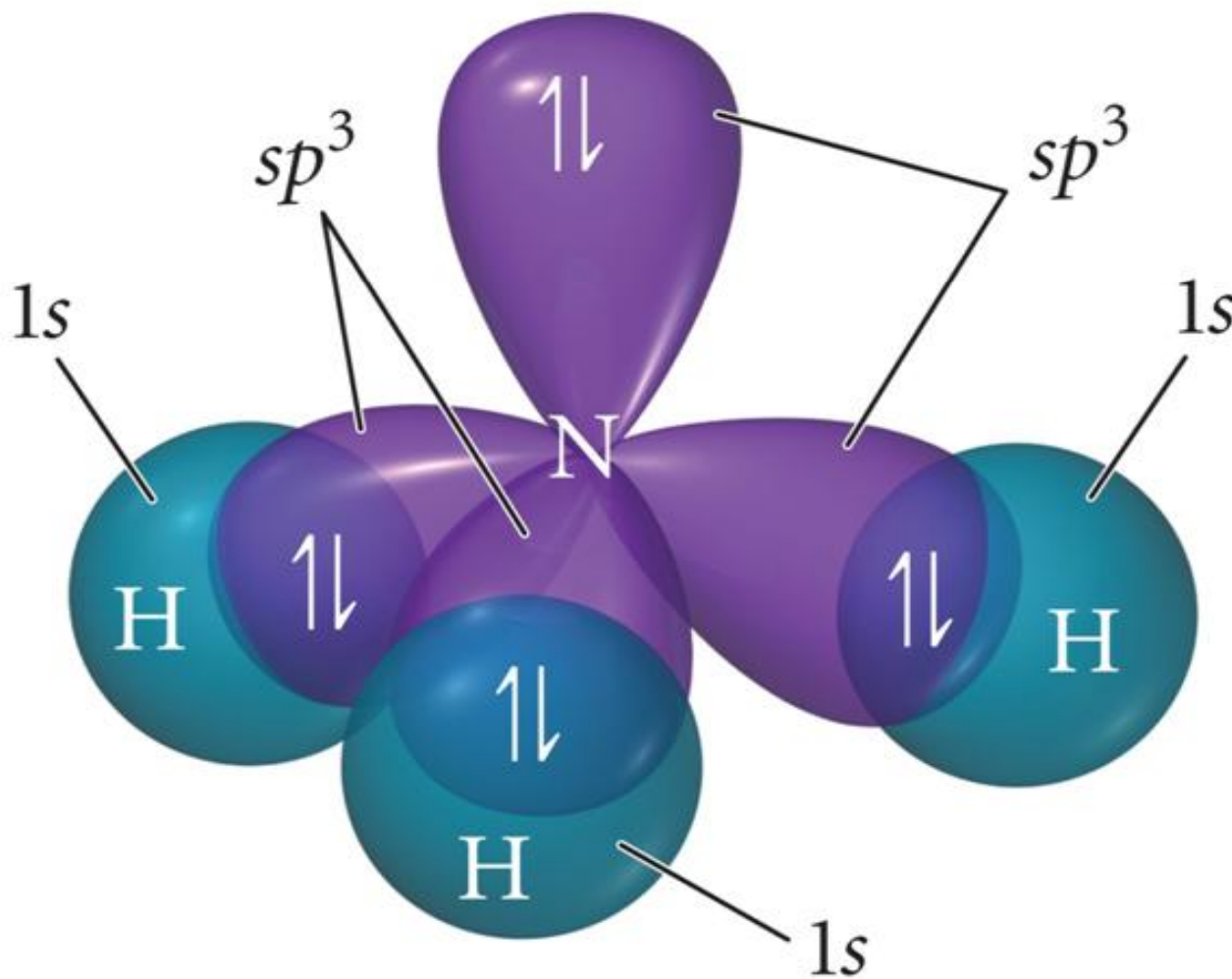
sp^3 hybrid orbitals (shown together)

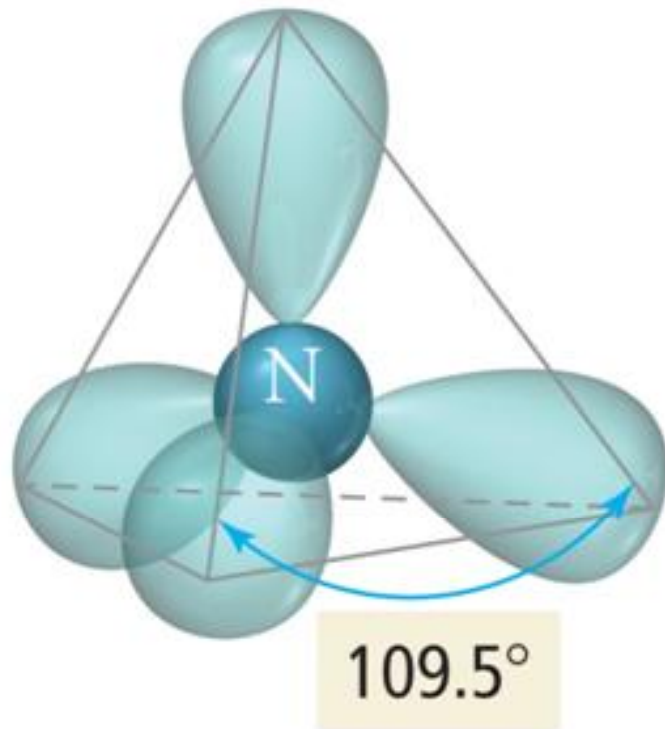
C



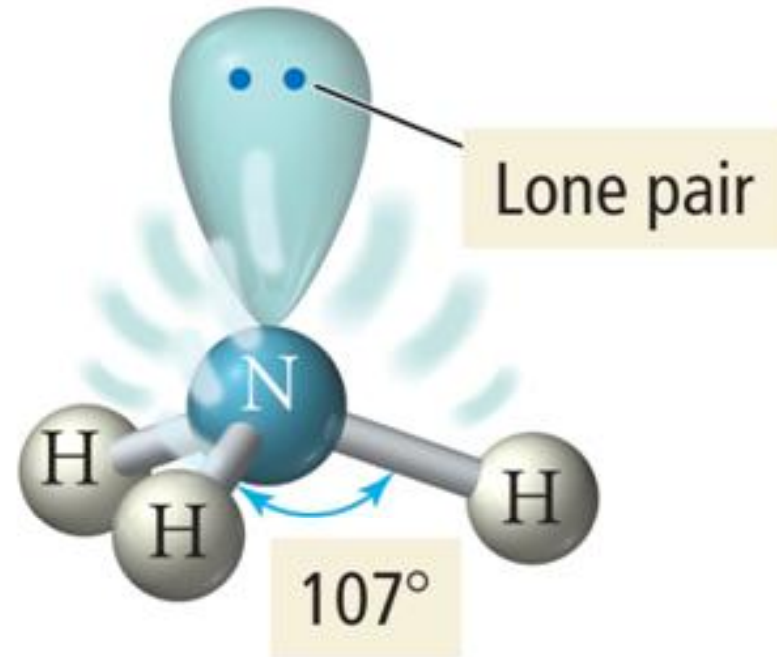


NH₃





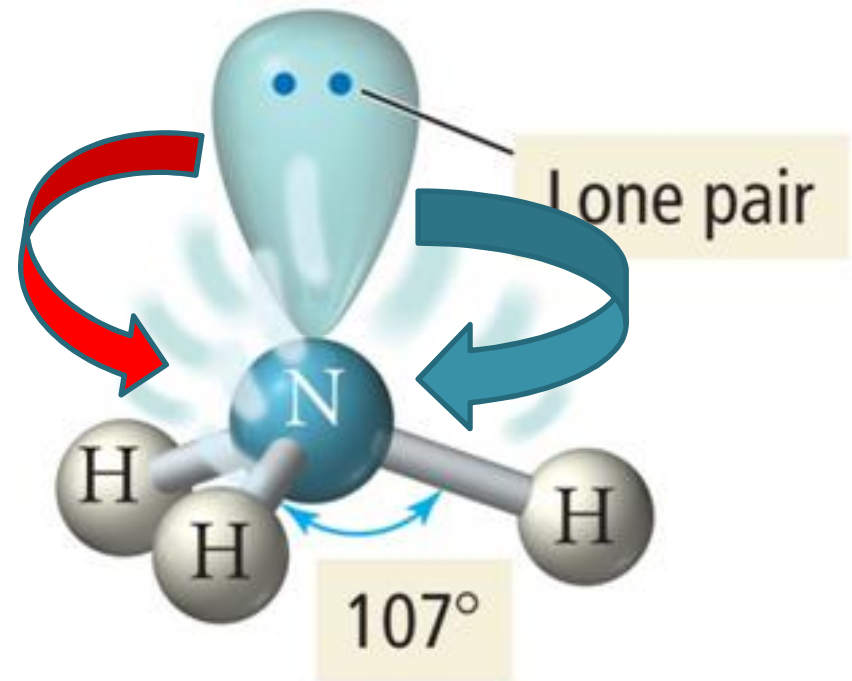
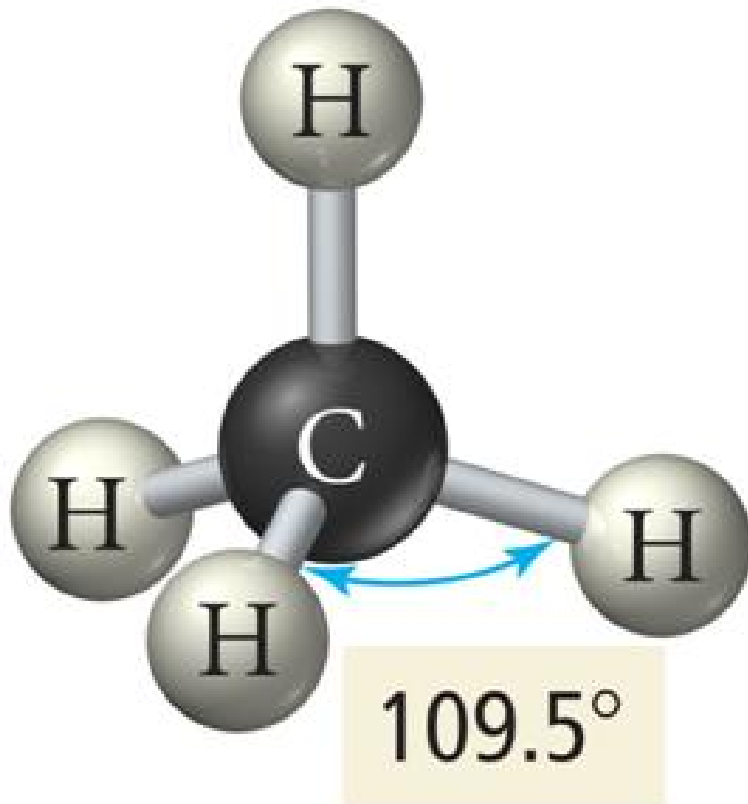
Ideal tetrahedral
geometry

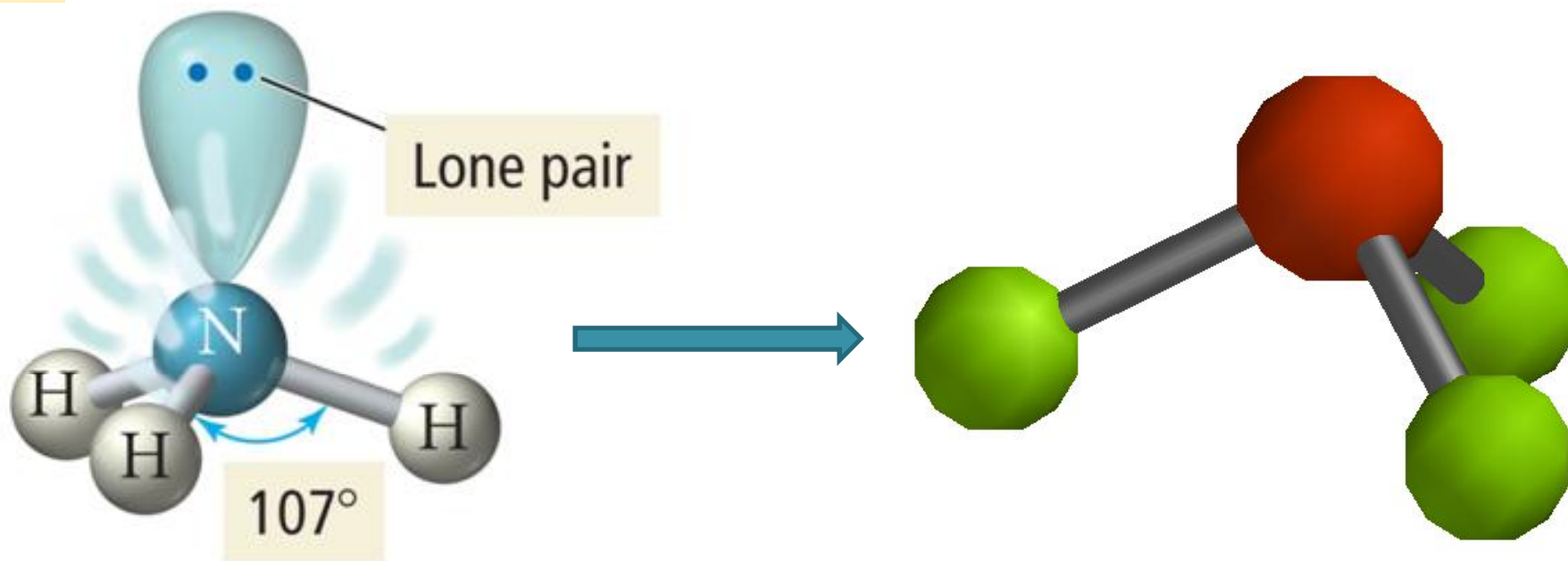


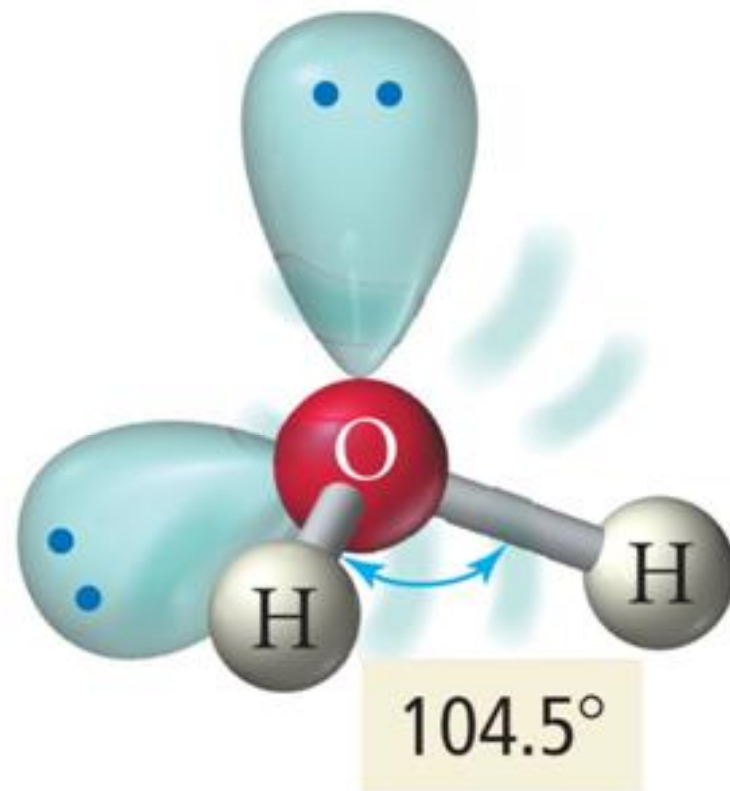
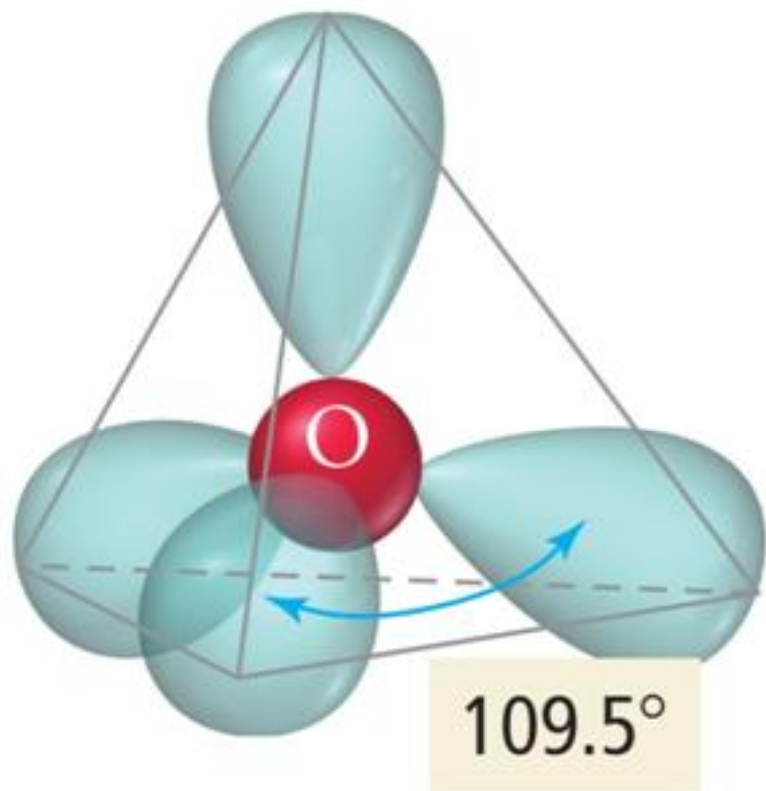
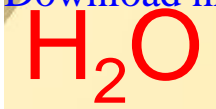
Actual molecular
geometry

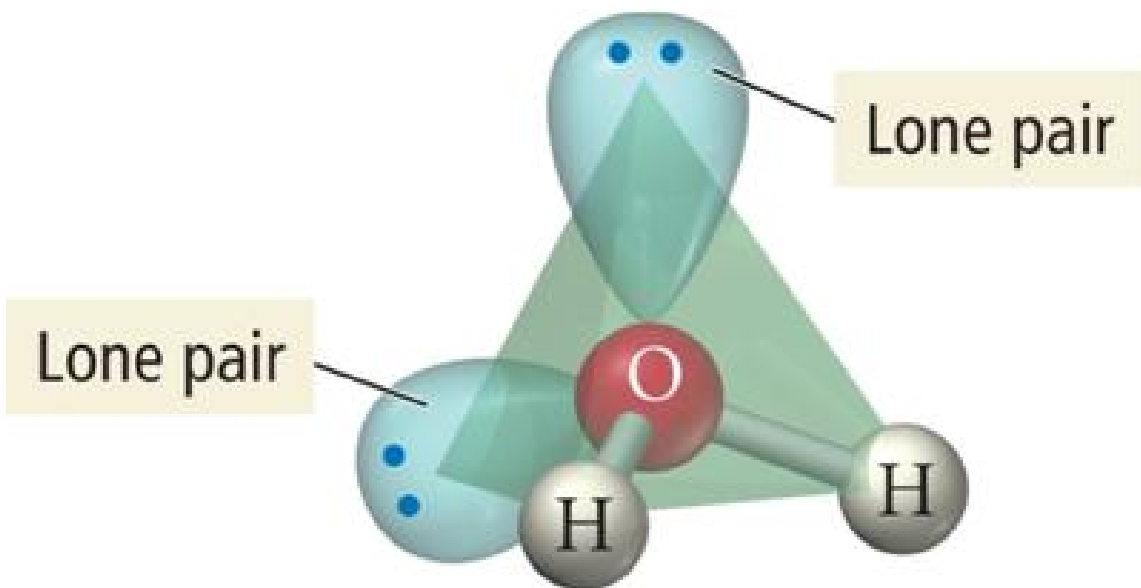
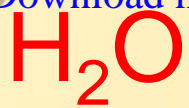
Thuyết đẩy nhau giữa các cặp electron hóa trị (VSEPR)

NH_3



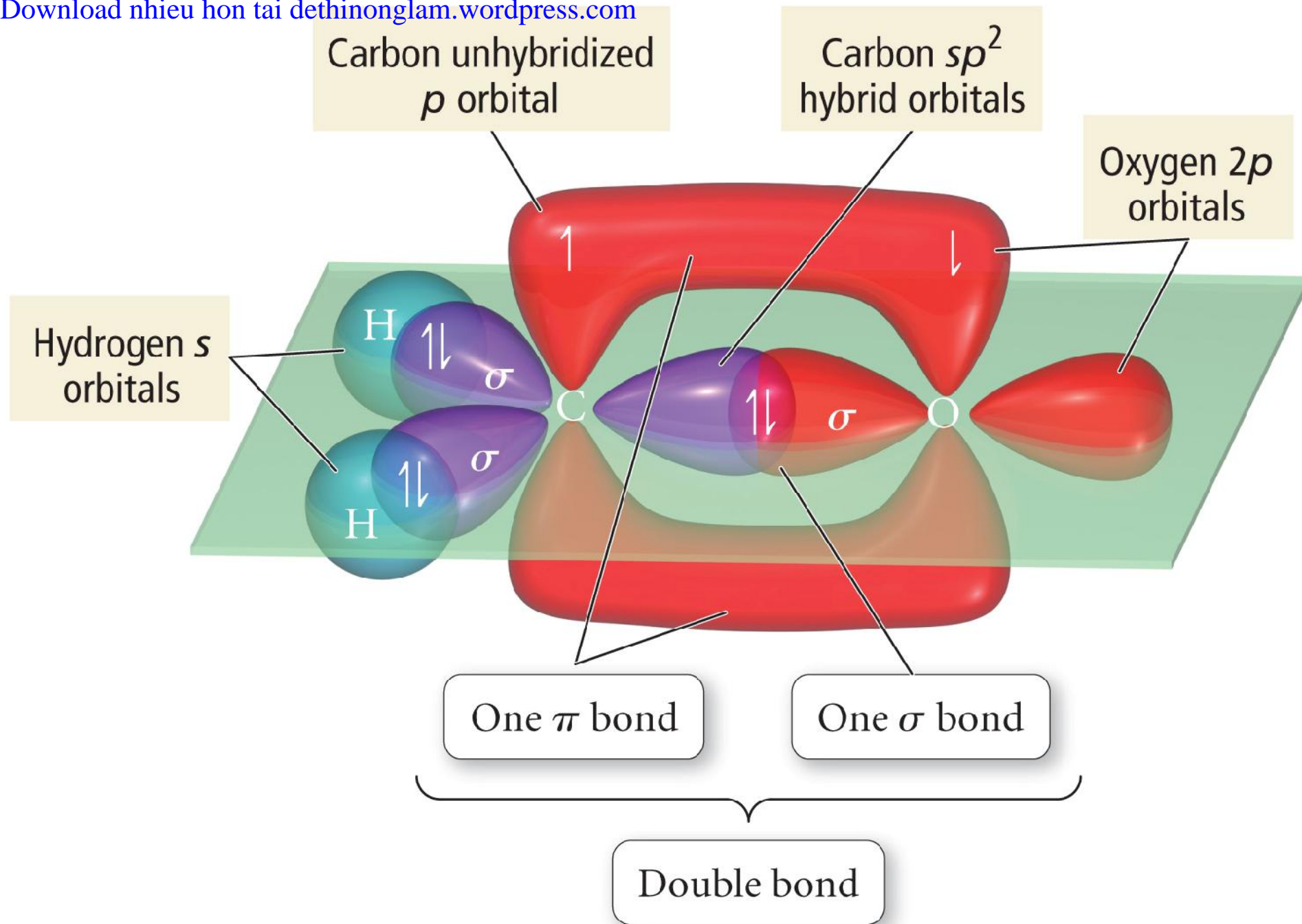






Ví dụ :

Xác định trạng thái lai hóa của nguyên tử C và công thức cấu tạo của HCHO.



D oán tr ng thái lai hóa

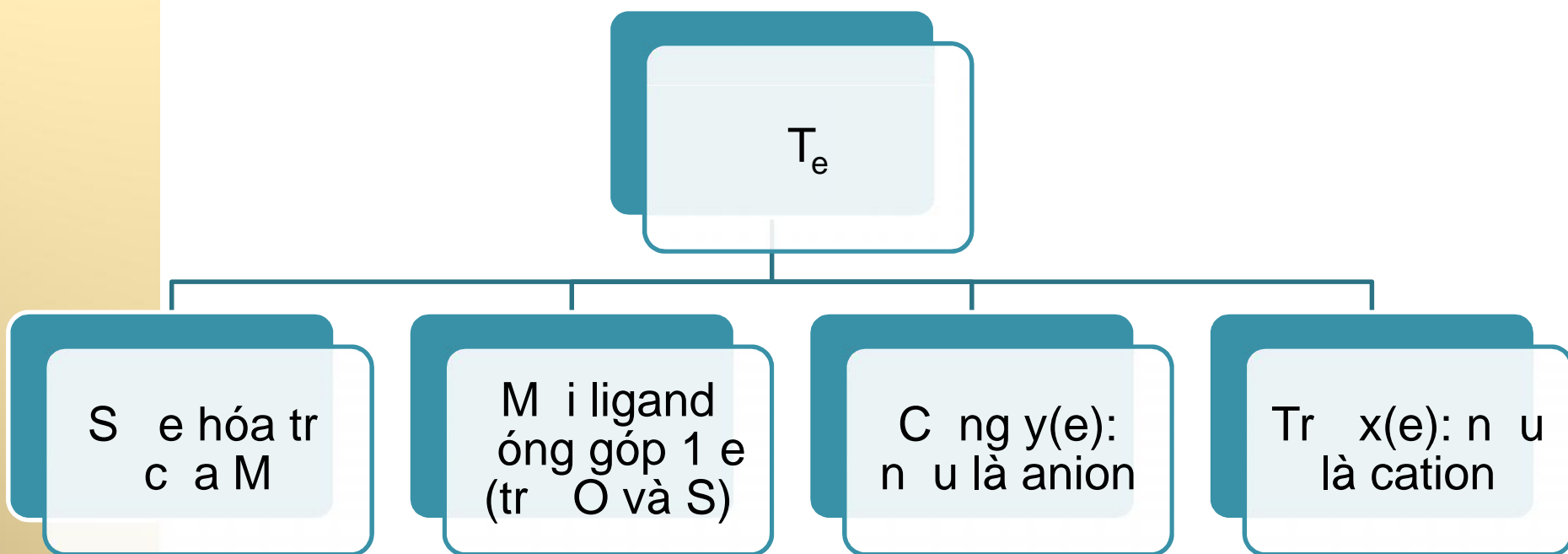
S i NT (T_e)	TR NG THÁI LAI HÓA
4	sp
6	sp ²
8	sp ³
10	sp ³ d
12	sp ³ d ²

Tính T_e

Xét các hợp chất: ML_n , ML_n^{x+} , ML_n^{y-}

M: nguyên tử trung tâm.

L: các nguyên tử biên (ligand)



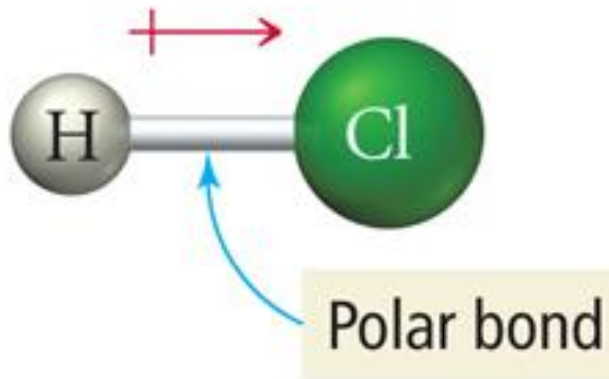
Ví dụ

PHÂN TỬ / ION	NGUYÊN TỬ TRUNG TÂM	T_e	TRẠNG THÁI LẠI HÓA
CO_2	C		
NO_2	N		
NH_4^+	N		
NH_2^-	N		
NO_2^-	N		
CO_3^{2-}	C		

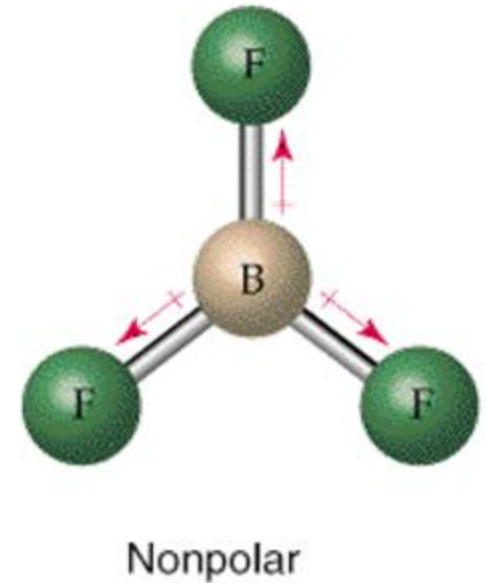
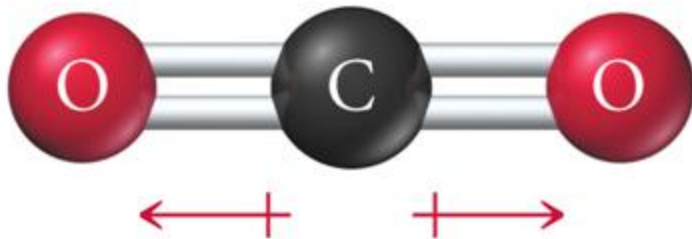
$$\text{Bậc liên kết} = \frac{\text{Tổng số e tham gia liên kết}}{\text{Số liên kết } \sigma * 2}$$

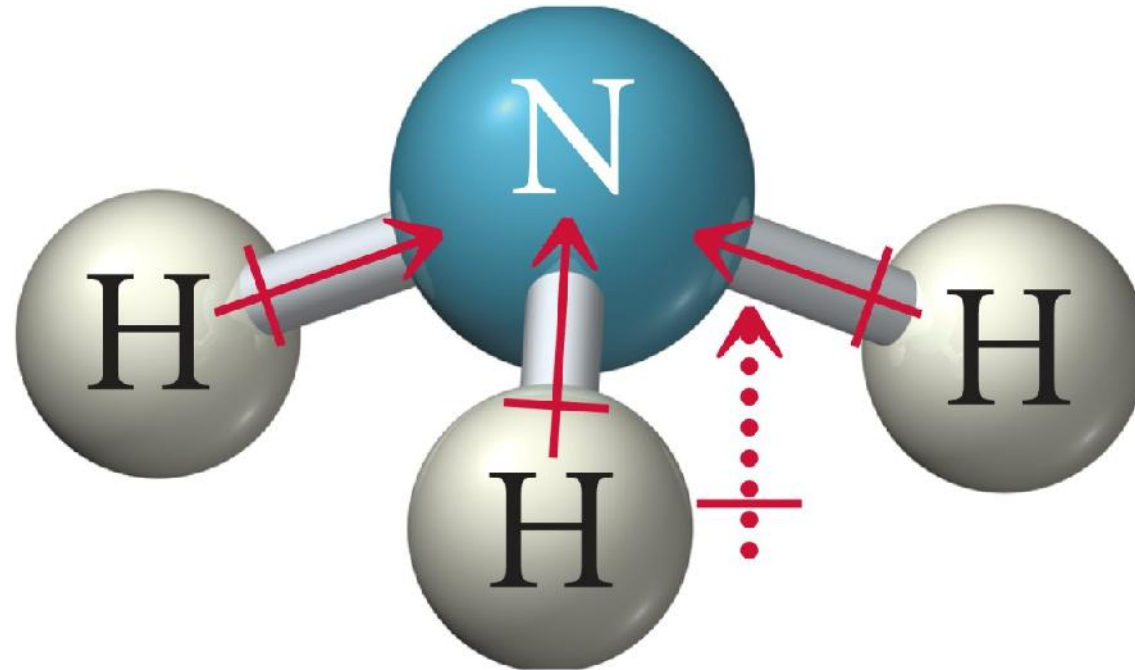
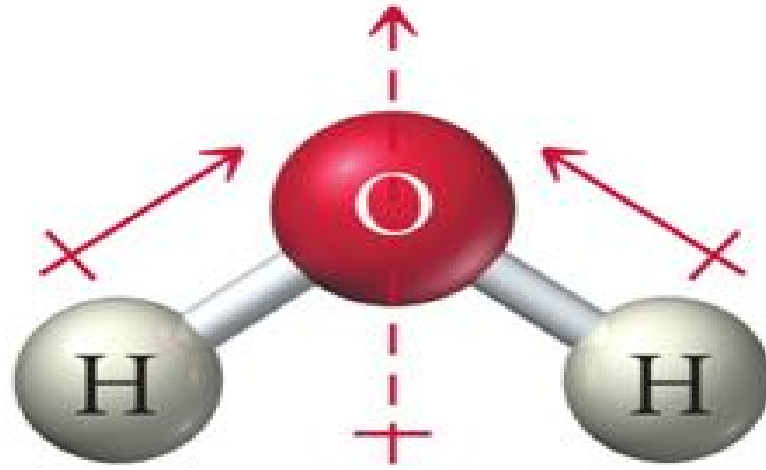
phân tử phân tử

Moment lưỡng cực



No net dipole moment

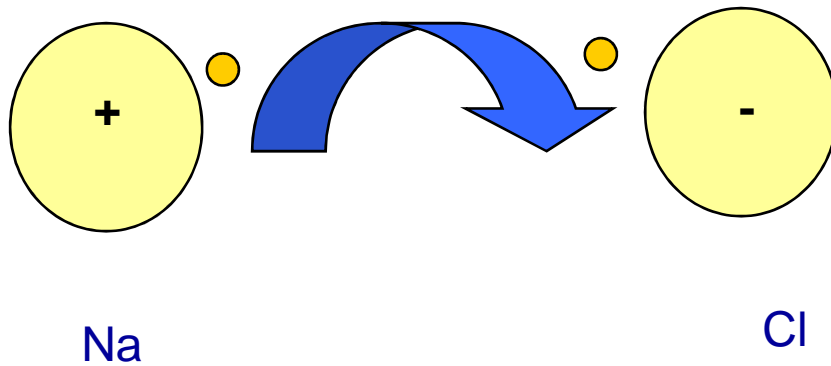




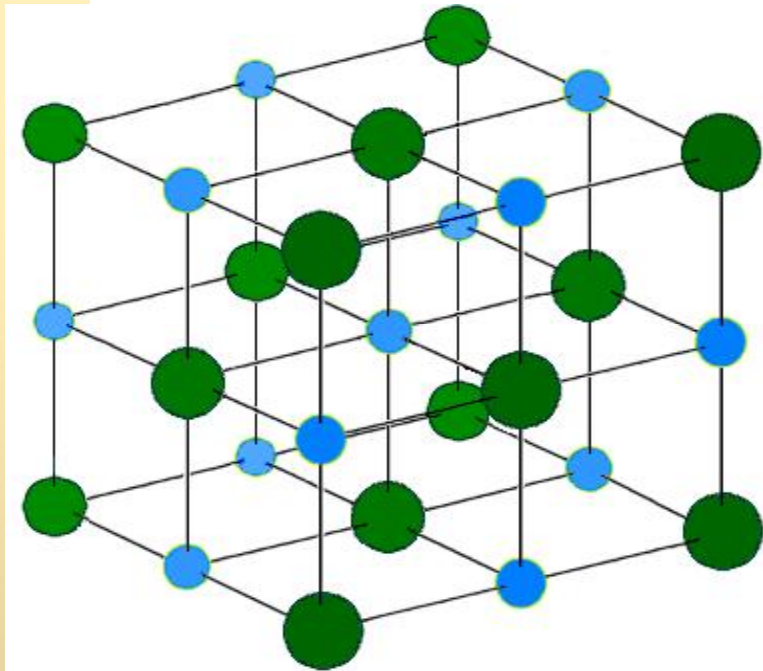
Copyright © 2008 Pearson Prentice Hall, Inc.

3. LIÊN KẾT ION

Liên kết ion là loại liên kết được tạo thành nhờ lực hút tĩnh điện giữa các ion trái dấu

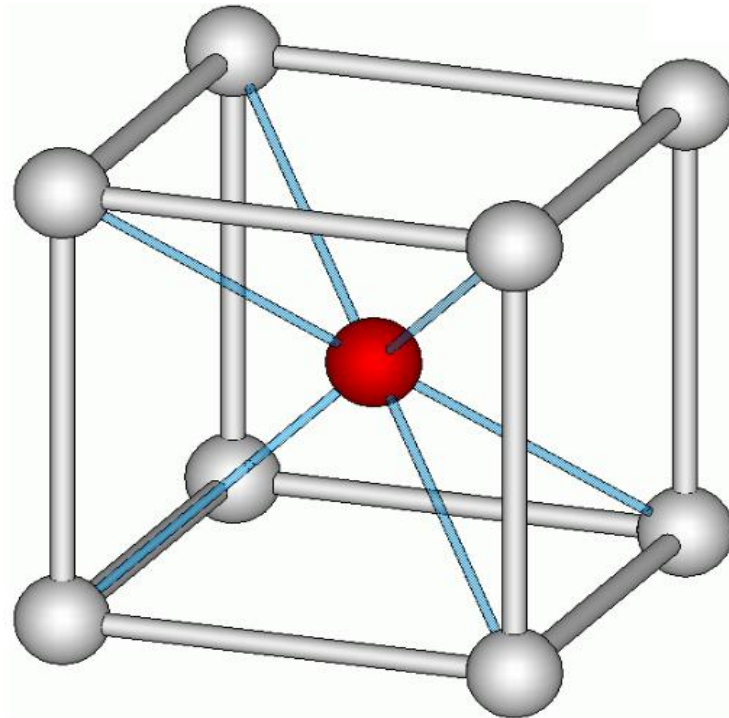


Mạng tinh thể ion



NaCl

L p ph ng tâm di n



CsCl

L p ph ng tâm kh i

QUAN HỆ GIỮA NĂNG LƯỢNG MÀNG LỎNG VÀ NHIỆT SÔI, NHIỆT NÓNG CHẤY

Tính chất	NaF	NaCl	NaBr	NaI
U_{ml} [kcal/mol]	217	183	176	164
Nhiệt sôi [°C]	1695	1441	1393	1300
Nhiệt n.chảy [°C]	993	801	766	665

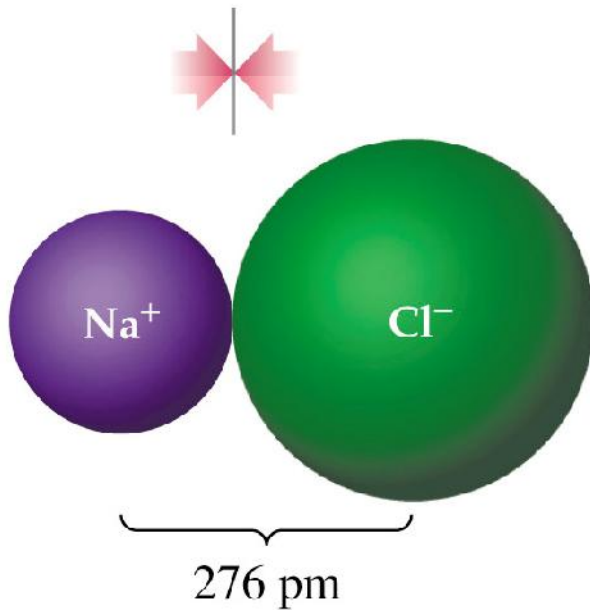
So sánh nhiệt độ nóng chảy NaCl và MgO

MgO
NaCl

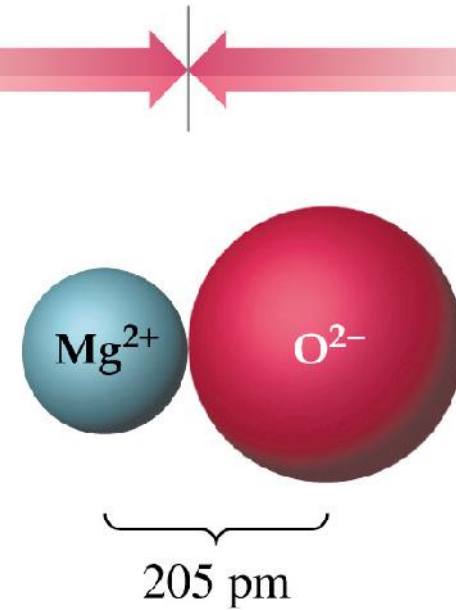
$T_{nc} = 2500^{\circ}\text{C}$
 $T_{nc} = 800^{\circ}\text{C}$

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

Attractive force



Attractive force



Copyright © 2005 Pearson Prentice Hall, Inc.

So sánh LK Cộng hóa trị & LK ion

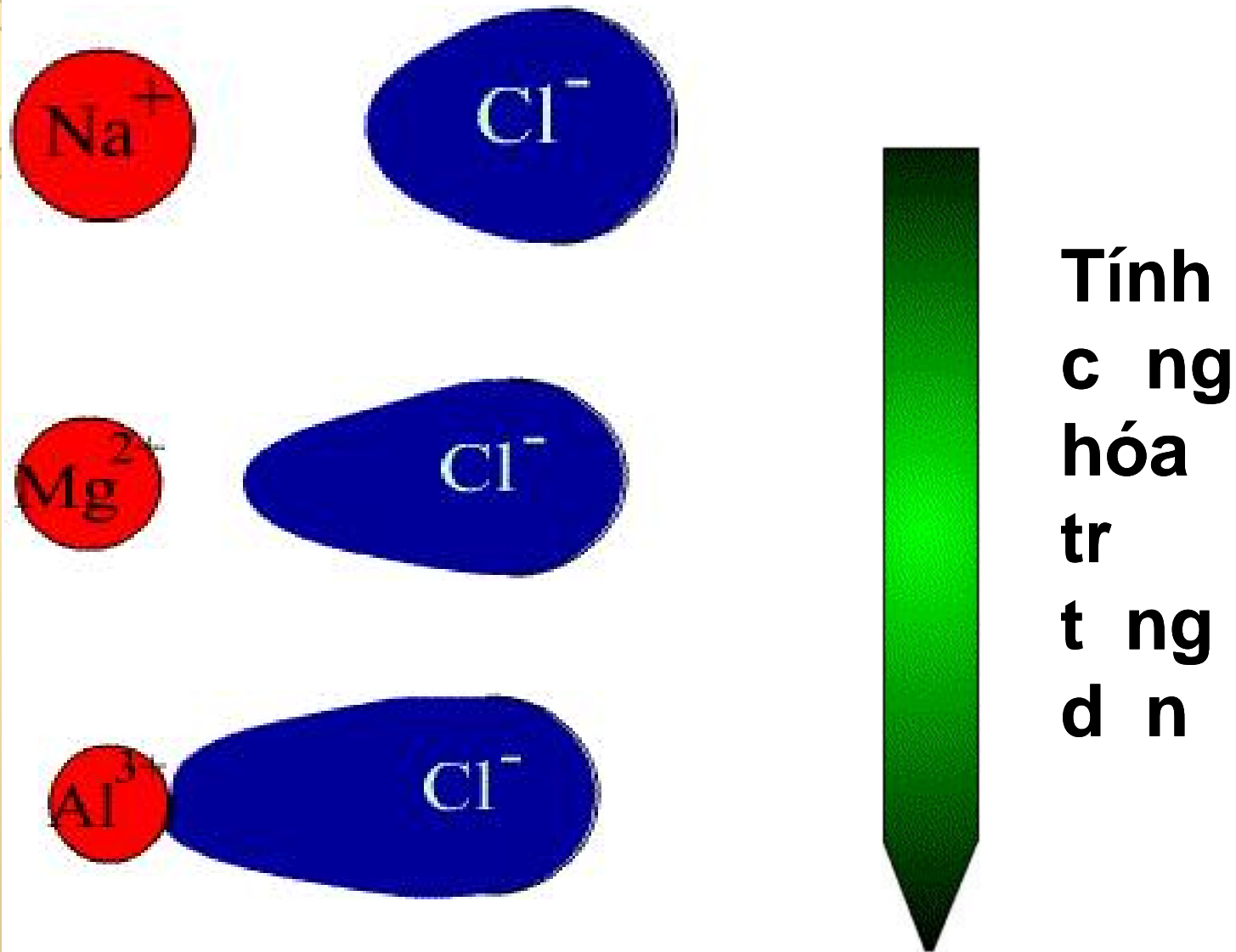
	LK CỘNG HÓA TRỊ	LK ION
	$< 1,7$	$> 1,7$
TÍNH CHẤT	Có tính nhớt	Bớt nhớt
	Có tính bão hòa	Bớt bão hòa

S phân c c ion

S chênh l ch âm i n c a các nguyên t càng
l n tính ion c a h p ch t càng cao.

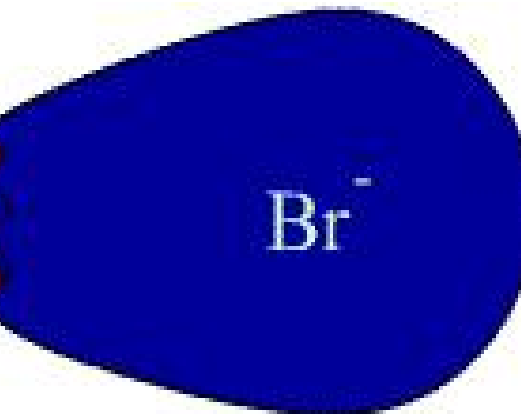
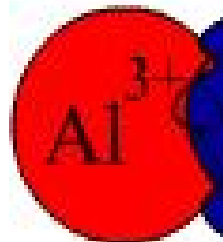
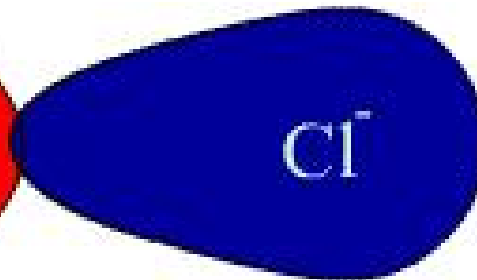
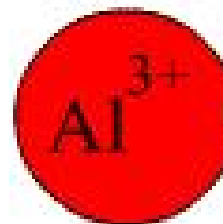
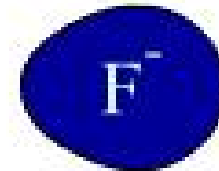
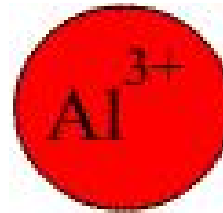
	ion %		ion %		ion %
0,2	1	1,2	30	2,2	70
0,4	4	1,4	39	2,4	76
0,6	9	1,6	47	2,6	82
0,8	15	1,8	55	2,8	86
1,0	22	2,0	63	3,0	89

Điện tích cation càng lớn, bán kính cation càng nhỏ, tác động phân cực càng mạnh.



Bán kính anion càng lớn, anion càng dễ bị biến dạng

Tính
cứng
hóa
tr
tứng
đòn



nh h ng c a s phân c c ion n tính ch t các h p ch t

➤ S phân c c ion làm **gi m b n tinh th** c a h p ch t

Ch t	LiF	LiCl	LiBr	LiI
Nhi t nóng ch y ($^{\circ}\text{C}$)	848	607	550	469

➤ S phân c c ion làm **gi m i n ly** c a h p ch t ion trong dung d ch

4. LIÊN KẾT HYDRO

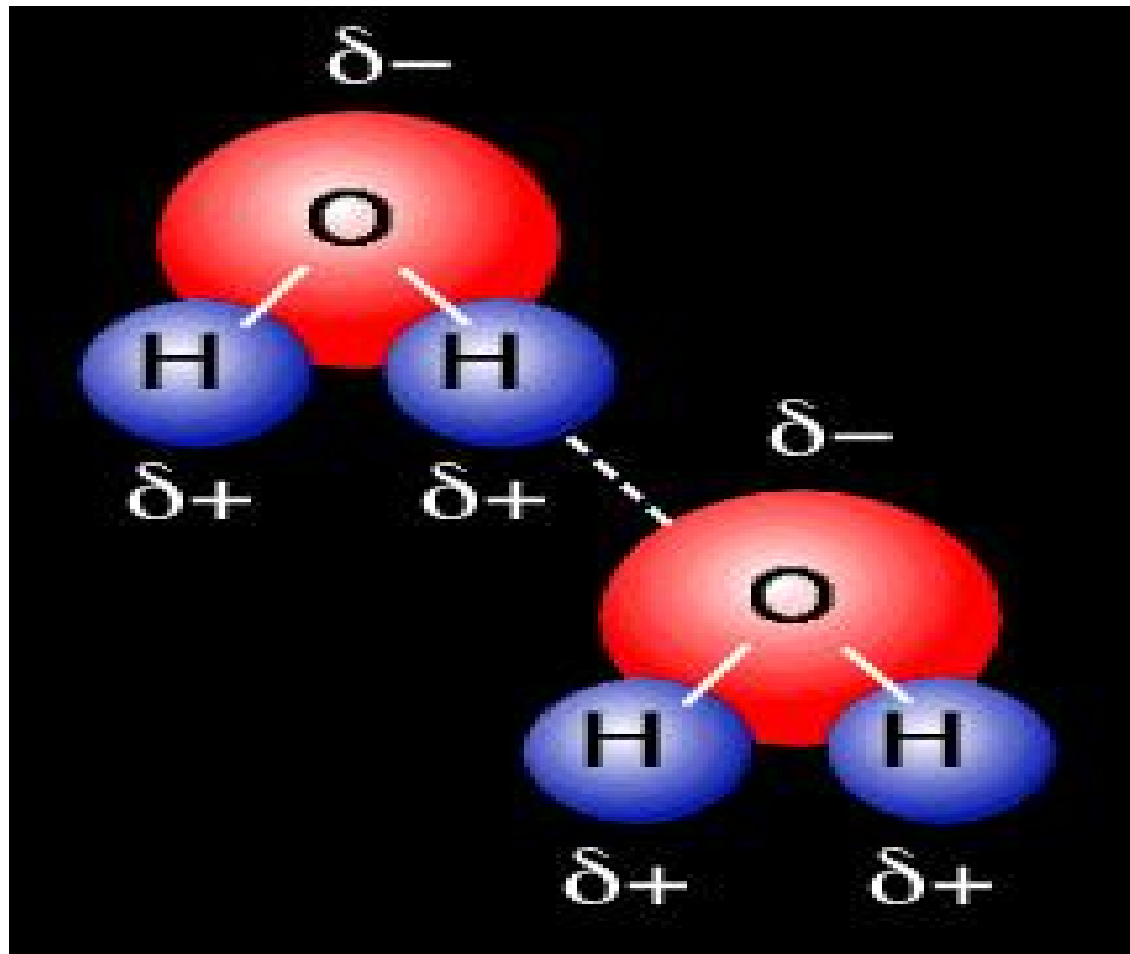
Là liên kết có hình thành bởi **nguyên tử H linh động** (H liên kết với 1 nguyên tử có âm điện) và 1 **nguyên tử có âm điện** khác.



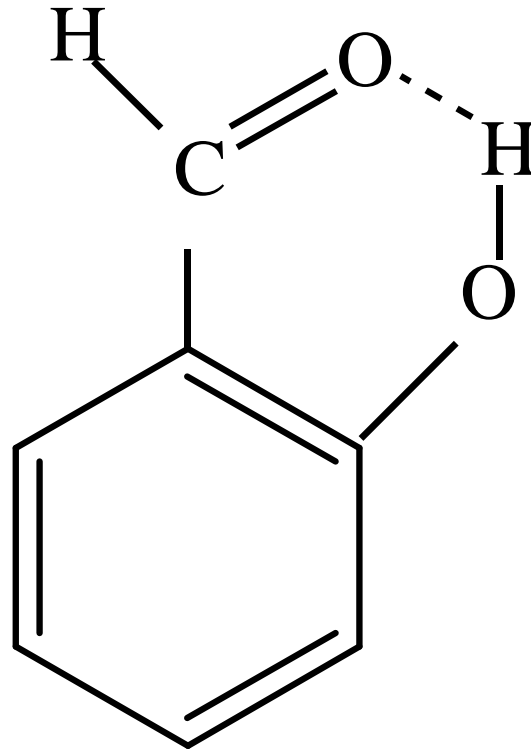
X, Y là các nguyên tử có âm điện (**F, O, Cl, N**)

PHÂN LOẠI

❖ Liên kết hydro liên phân tử



❖ Liên kết hydro n i phân t



andehit salyxilic

nh h ãng c a liên k t Hydro

➤ **Liên k t Hydro liên phân t** làm t ãng **nhi t sôi**,
nhi t nóng ch y c a h p ch t

○ C_2H_5OH có t_s , t_{nc} cao h ãn CH_3OCH_3

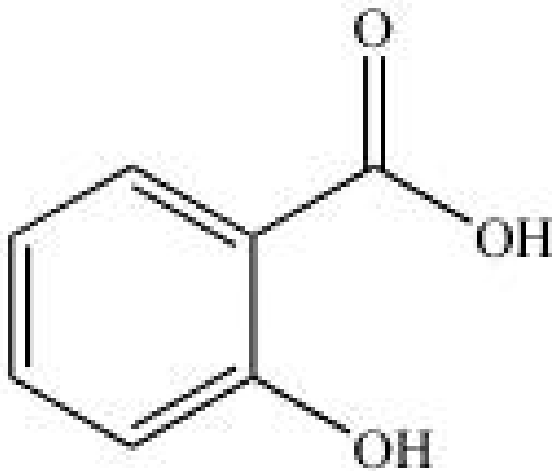
○ CH_3COOH có t_s , t_{nc} cao h ãn $HCOOCH_3$

➤ **Liên kết Hydro liên phân tử** vì dung môi làm tăng **tan** các chất trong dung môi đó.

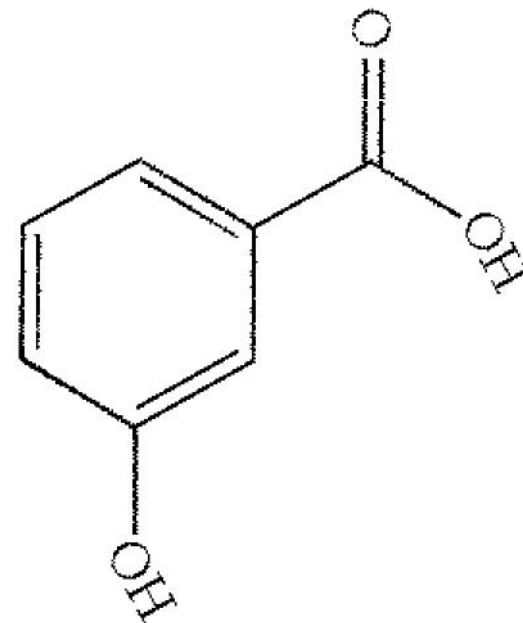
○ C_2H_5OH tan trong H_2O tốt hơn trong CH_3OCH_3

➤ **Liên kết Hydrogen phân tử**

So sánh tính acid của 2 acid sau



Acid **ortho**-hydroxy benzoic



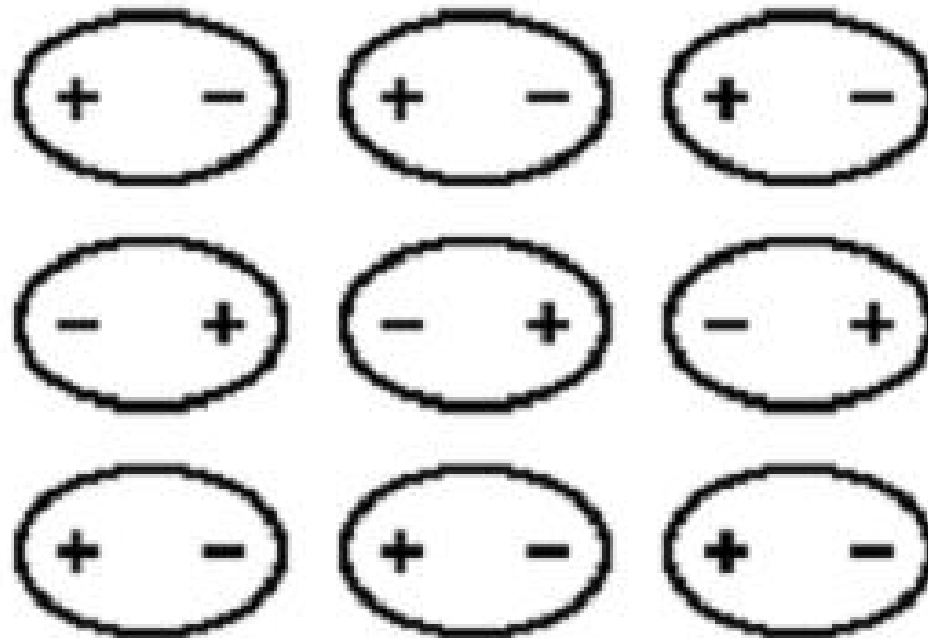
Acid **meta**-hydroxy benzoic

5. LIÊN KẾT VAN DER WAALS

- ❖ Là liên kết yếu hình thành giữa các phân tử trung hòa
- ❖ Có tính không định hướng, không bão hòa, không chọn lọc

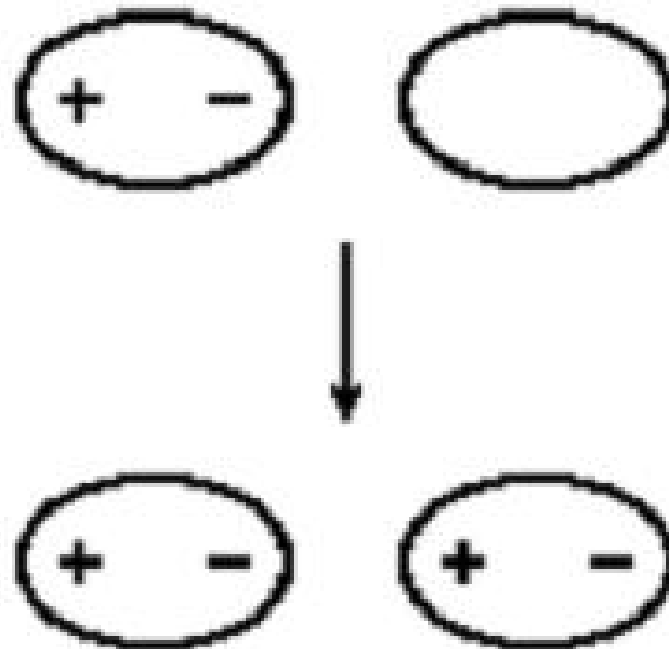
PHÂN LOẠI

❖ Tương tác nh hướng



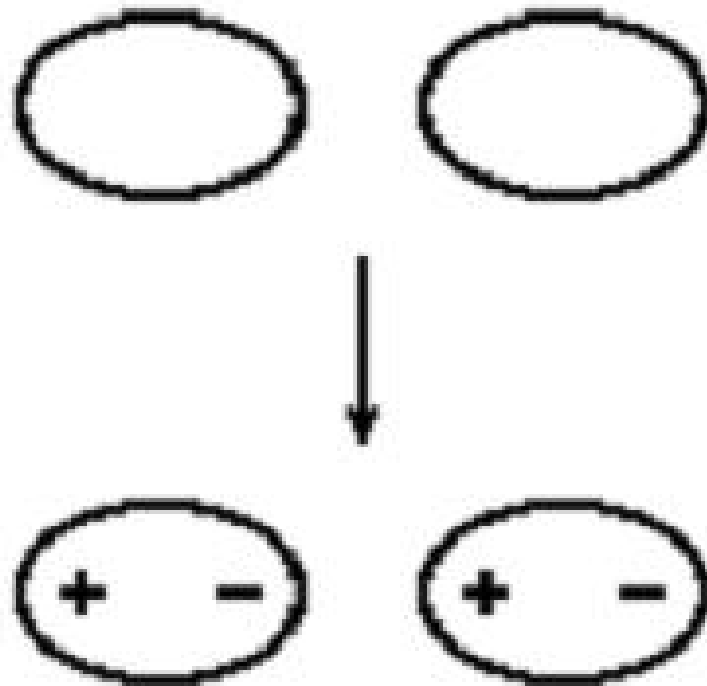
Tương tác định hướng

❖ Tương tác cảm ứng



Tương tác cảm ứng

❖ Tương tác khuếch tán



Tương tác khuếch tán

TÍNH CHẤT

❖ Lực nhớt \propto Lực cản \propto Lực khuếch tán

❖ Lực cản VDW càng lớn khi **kích thước** (khối lượng) càng lớn

CHƯƠNG 3:
NHIỆT ĐỘNG HỌC

N i dung

1. Các khái ni m c b n
2. Nguyên lý 1 c a N LH và hi u ng
nhi t c a quá trình HH
3. Nguyên lý th 2 c a N LH và chi u
quá trình HH

1. Các khái niệm cơ bản

ít nghiên cứu

❖ Nhiệt động lực học là khoa học nghiên cứu các quy luật biến hóa từ dạng năng lượng này sang dạng năng lượng khác. Các cơ sở nhiệt động lực học là 2 nguyên lý nhiệt động lực học

❖ Nhiệt động lực học hóa học là khoa học nghiên cứu các quy luật biến đổi qua liên kết hóa học và các dạng năng lượng khác trong các quá trình hóa học.

❖ H (nhiệt độ) là phần (trong phạm vi hóa học) ảnh hưởng trực tiếp đến quá trình trao đổi nhiệt và vận chuyển.

Phần còn lại xung quanh là môi trường ngoài môi trường.

➤ H₂

➤ H₂ kín

➤ H₂ cô lập

- **Hợp chất** là hợp chất có các tính chất lý hoá học riêng nhau mà mỗi thành phần là không có sự phân chia thành những phần có tính chất hoá lý khác nhau
- **Hỗn hợp** là hợp chất có bản chất phân chia thành những phần có tính chất hoá lý khác nhau
- **Hệ cân bằng** là hệ có nhiệt độ, áp suất, thành phần riêng nhau mà mỗi thành phần và không thay đổi theo thời gian

- **Trạng thái cân bằng** là toàn bộ các tính chất lý, hoá cân bằng.
- **Thông số trạng thái**: Trạng thái cân bằng được xác định bằng các thông số nhiệt động là: nhiệt độ T , áp suất P , thể tích V , nồng độ C ...
- **Hàm trạng thái** là đại lượng nhiệt động có giá trị chỉ phụ thuộc vào các thông số trạng thái cân bằng mà không phụ thuộc vào cách biến đổi cân bằng.

- **Quá trình** là sự biến đổi xảy ra trong hệ kín và ngược lại thay đổi ít nhất 1 thông số trạng thái
- ✓ Quá trình xảy ra áp suất không đổi ($P = \text{hằng số}$) gọi là quá trình **ng áp**
- ✓ thể tích không đổi gọi là quá trình **ng tích**
- ✓ nhiệt độ không đổi gọi là quá trình **ng nhiệt...**
- **Quá trình thuận nghịch**
- **Quá trình không thuận nghịch**

Nhiệt & Công

❖ Nhiệt

Nhiệt lượng Q cần dùng để làm nóng m (g) hóa chất lên từ nhiệt độ T_1 đến T_2

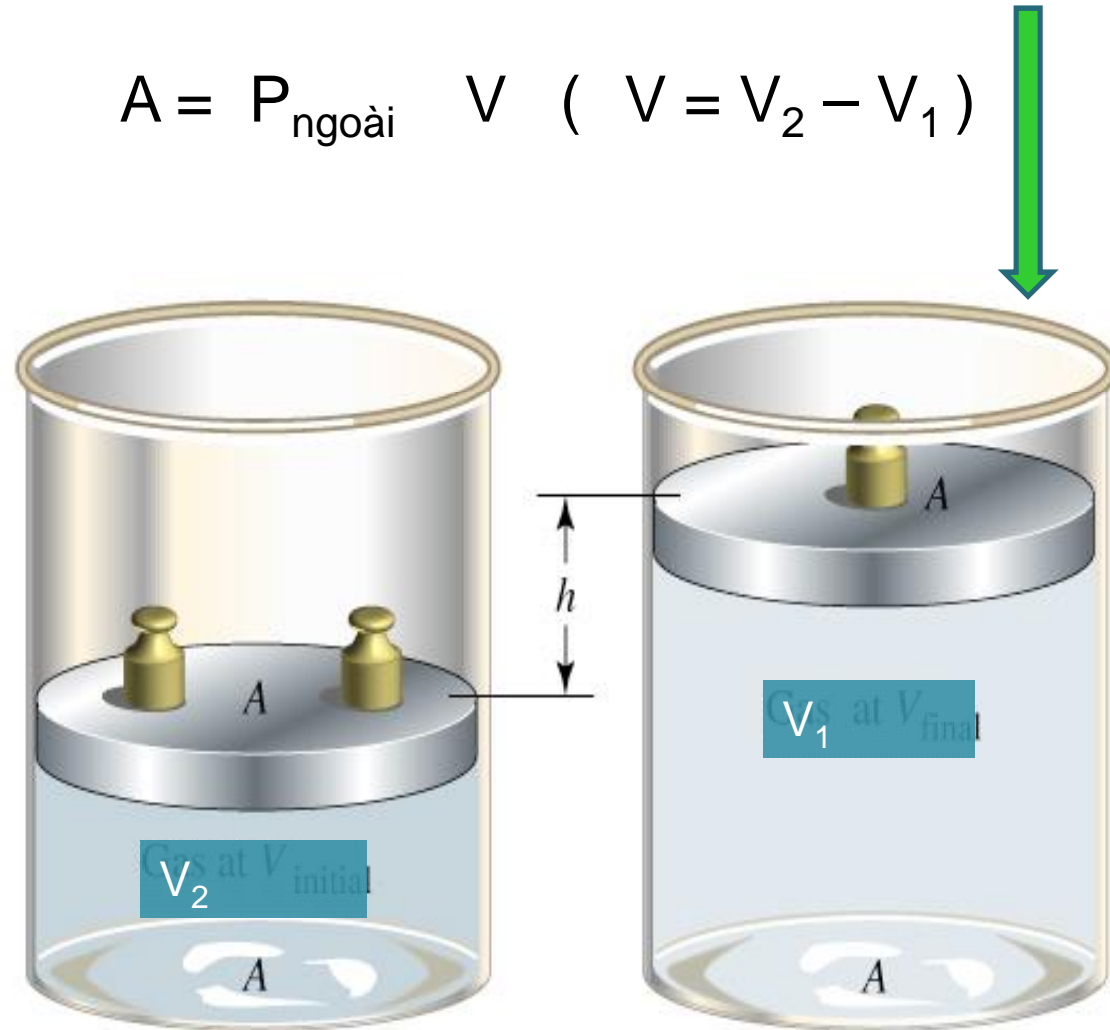
$$Q = m C (T_2 - T_1)$$

C : nhiệt dung riêng

❖ Công

Công thay i th tích

$$A = P_{\text{ngoài}} V \quad (V = V_2 - V_1)$$

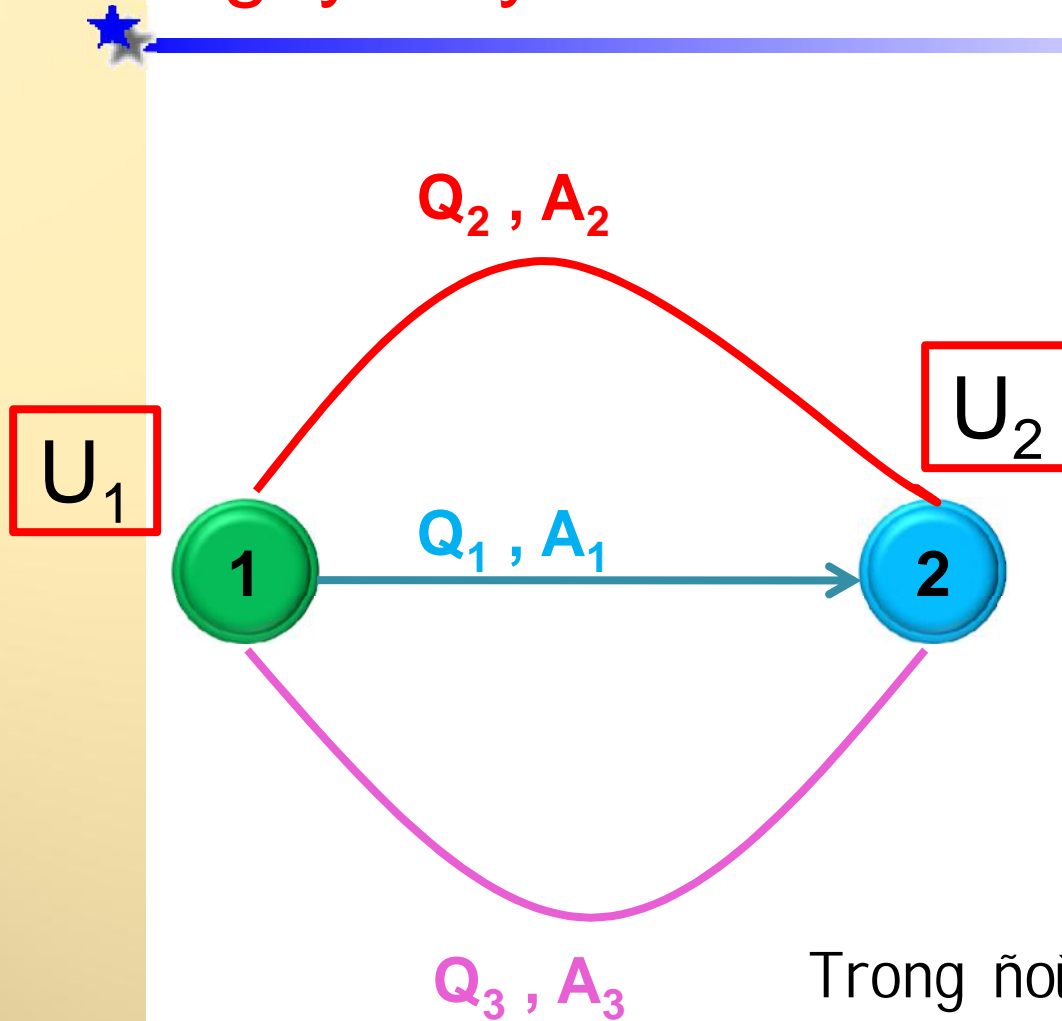


❖ Quy tắc dấu

N u h t a n h i t	$Q < 0$
N u h t h u n h i t	$Q > 0$
N u h n h n c o n g	$A < 0$
N u h s i n h c o n g	$A > 0$

2. Nguyên lý 1 N L H & Hiệu ứng nhiệt của các quá trình hóa học

Nguyên lý 1 N LH



$$U = Q - A$$

Trong đó $U = U_2 - U_1$ là biến thiên nội năng của hệ

Nhiệt động tích & Nhiệt động áp

Nguyên lý 1

$$\Delta U = Q - A = Q - P_{ngoài} \Delta V$$

➤ Nếu quá trình là đẳng tích

$$V = 0 \longrightarrow A = 0$$



$$\Delta U = Q_v$$

➤ Nếu quá trình là ng áp

$$P_{\text{ngoài}} = P_{\text{khí}} = P$$

$$\Delta U = Q - A \Rightarrow Q = \Delta U + A$$

$$\rightarrow Q_P = (U_2 - U_1) + P(V_2 - V_1)$$

$$\rightarrow Q_P = (U_2 + PV_2) - (U_1 + PV_1)$$

$H = U + PV$: hàm năng lượng *enthalpi*

$$Q_P = H_2 - H_1 = \Delta H$$

Hiệu ứng nhiệt của các quá trình hoá học (Nhiệt hóa học)

a. Nhiệt tạo thành (sinh nhiệt) của một hợp chất là hiệu ứng nhiệt của phản ứng tạo thành 1 mol chất từ các nguyên chất ở trạng thái tự do bền vững nhất trong những điều kiện nào cho về áp suất và nhiệt độ

Ví dụ: C (r) than chì + O₂ (k) → CO₂(k)

$$H_{tt}^0(\text{CO}_2, \text{k}) = - 393,51 \text{ kJ/mol} \quad (H_f^0)$$

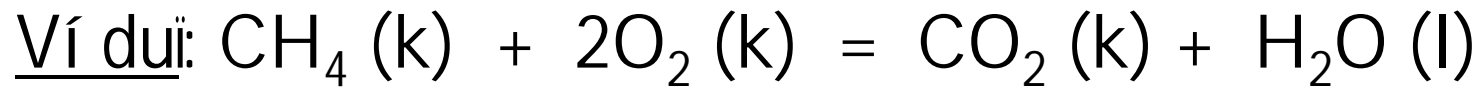
Nhiệt tạo thành chuẩn của nguyên chất bằng 0: $\Delta H_{298}^0 = 0$.

b. Nhiệt phân hủy của một hợp chất là hiệu ứng nhiệt của phản ứng phân hủy 1 mol chất đó thành các đơn chất.



$$H^0_{\text{ph}} (\text{H}_2\text{O}, \text{l}) = + 285,84 \text{ kJ/mol}$$

c. Nhiệt đốt cháy là hiệu ứng nhiệt của phản ứng đốt cháy 1 mol chất bằng oxy để tạo thành sản phẩm cháy ở áp suất không đổi.

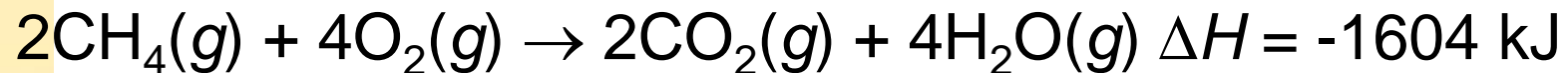
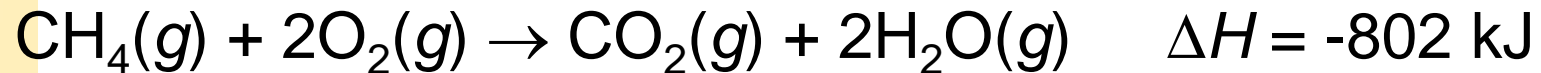


$$H^0_c (\text{CH}_4, \text{k}) = - 212,7 \text{ kcal/mol}$$

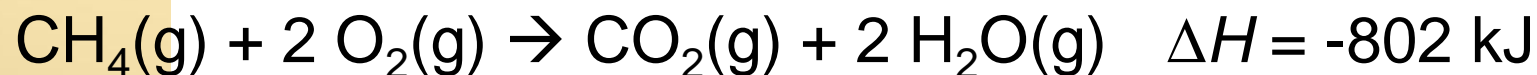
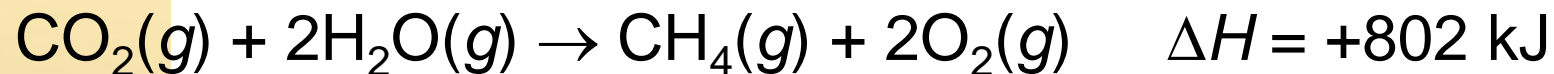
Entanpi c a p h n n g



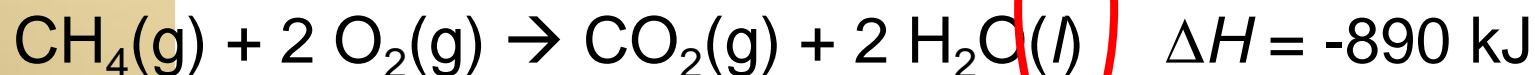
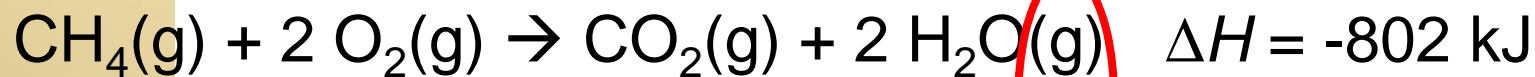
1. Entanpi t l v i h s h p th c p h n g tr ình



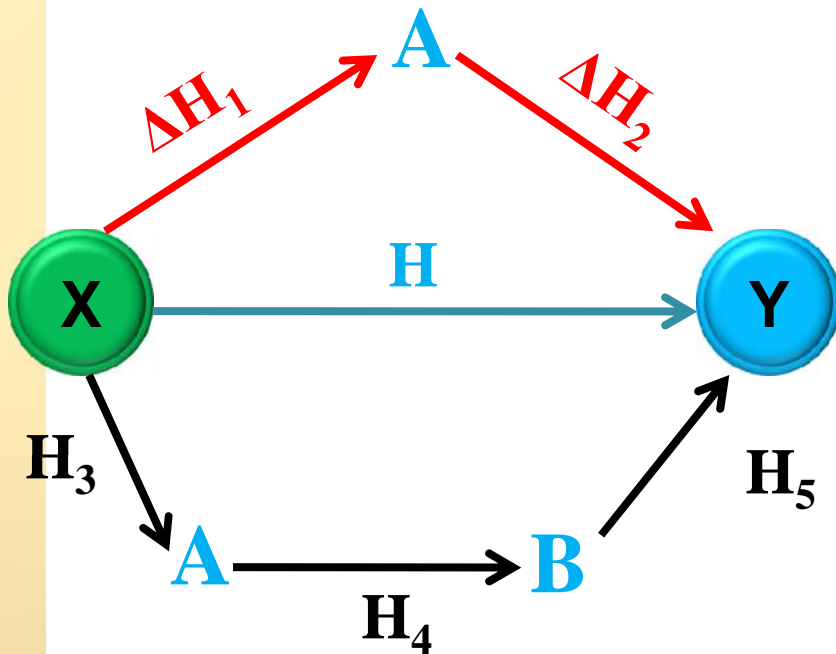
2. Khi ì chi u p h n n g th ì c n g ì d u c a entanpi:



3. Entanpi p h thu c tr ình th ái



nh luật Hess và h qu



Theo nh luật Hess

$$\Delta H = \Delta H_1 + \Delta H_2 = \Delta H_3 + \Delta H_4 + \Delta H_5$$

Heäquaü1: Hiệu òng nhiệt của một phản òng bằng tổng nhiệt tạo thành (sinh nhiệt) của các sản phẩm trò tổng nhiệt tạo thành của các tác chất (*có k các h s ph n ng c a tác ch t*)

$$H^0_{298} = H^0_{tt}(\text{s n ph m}) - H^0_{tt}(\text{tác ch t})$$

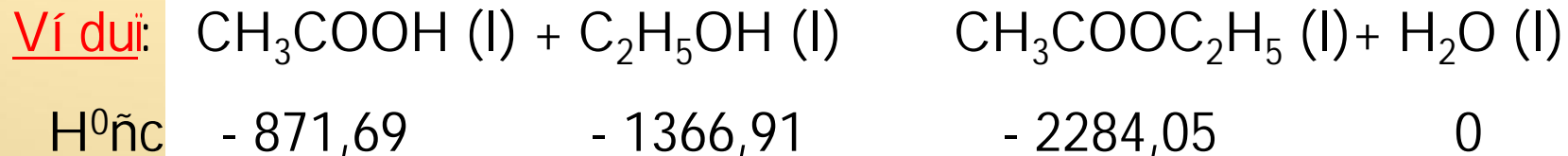
Ví d : Cho phản òng



Tính sinh nhiệt mol tiêu chuẩn của $PCl_5(r)$, biết sinh nhiệt mol tiêu chuẩn của $PCl_3(r)$ là $-607,2 \text{ kJ/mol}$

Heãquã2: Hiệũ òng nhiệã củã một phãn òng bãng tòng nhi t
ñõã chã ã củã các tãc chã trõ tòng nhiệã ñõã chã ã củã các sãn
phãm (*có k các h s ph n ng c a tác ch t*)

$$H^0_{298} = H^0_{\text{ñc}}(\text{tc}) - H^0_{\text{ñc}}(\text{sp})$$

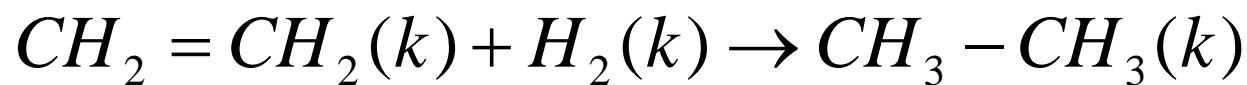


$$H^0_{298} = - 871,69 - 1366,91 + 2284,05 = + 45,45 \text{ kJ}$$

H qu 3: Hi u ng nhi t c a ph n ng b ng t ng n ng
l ng các liên k t b t tr_ t ng n ng l ng liên k t
c ráp. (có k các h s ph n ng c a tác ch t)

$$H^0_{298} = E(\text{t}) - E(\text{ráp})$$

Ví d: Tính hi u ng nhi t c a ph n ng:

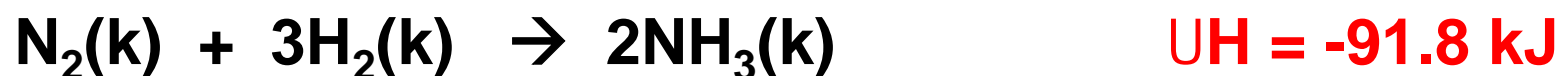
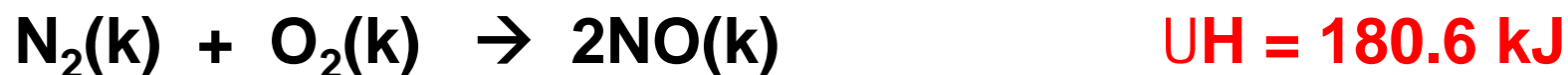


$$\Delta H^0_{298} = 4E_{C-H} + E_{C=C} + E_{H-H} - 6E_{C-H} + E_{C-C}$$

Ví dụ : Xác định nhiệt phản ứng cho phản ứng sau:



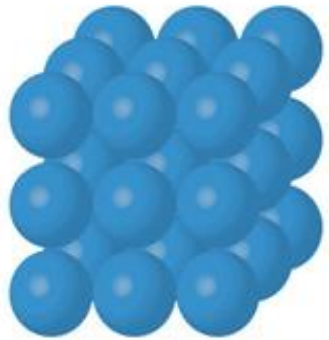
Sử dụng phản ứng sau



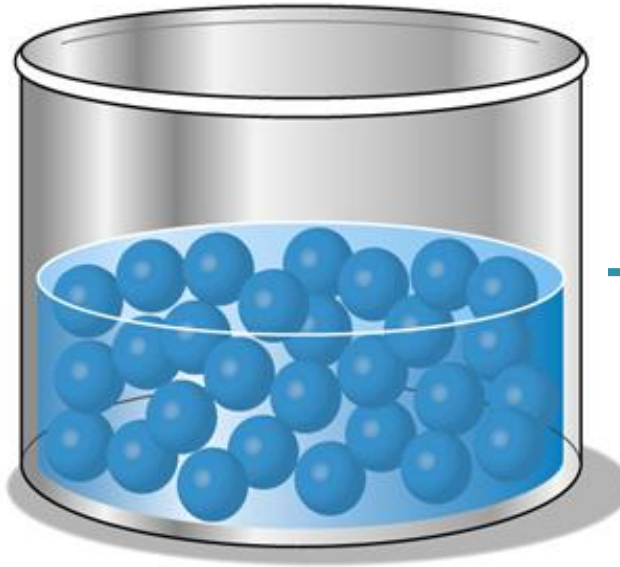
3. Nguyên lý 2 c a N LH và chi u quá trình HH

Tăng xáo trộn, mất trật tự

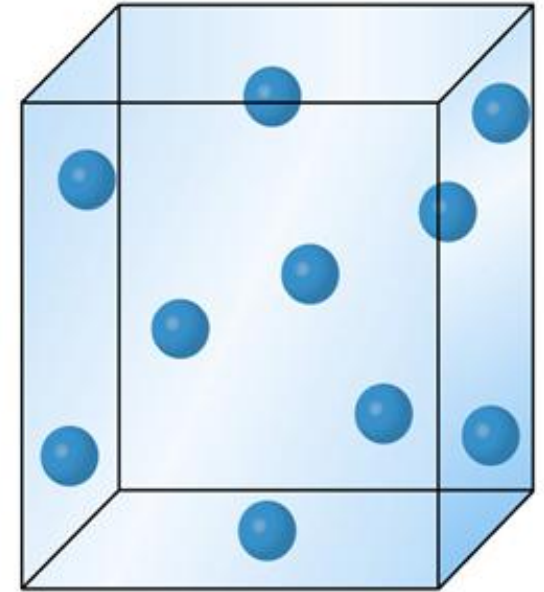
Tăng entropi S



$S > 0$



$S > 0$



Rắn

Lỏng

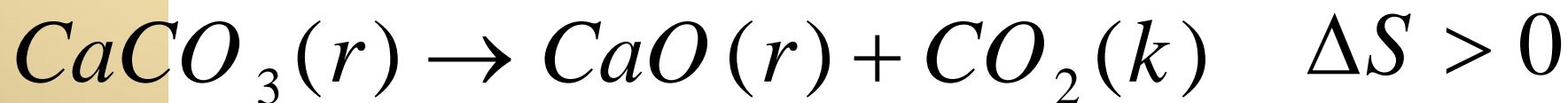
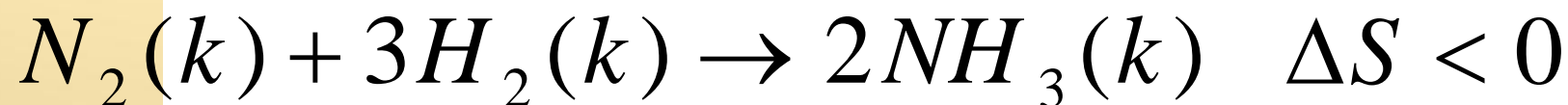
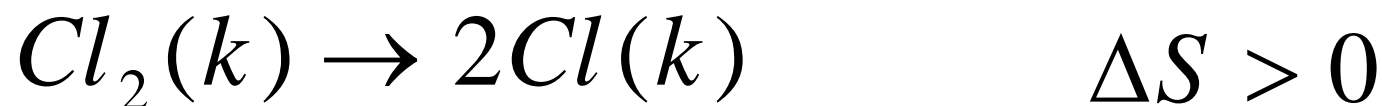
Khí

Entropi S

- ❖ Entropi là đại lượng đặc trưng cho mức độ hỗn loạn của hệ
- ❖ Nó biểu thị mức độ hỗn loạn, mất trật tự của các phân tử (nguyên tử) trong hệ đang xét.

$$\Delta S_{hệ} \geq \frac{Q}{T}$$

- Trong quá trình thuận nghịch $\Delta S_{hệ} = \frac{Q}{T}$
- Trong quá trình không thuận nghịch $\Delta S_{hệ} > \frac{Q}{T}$



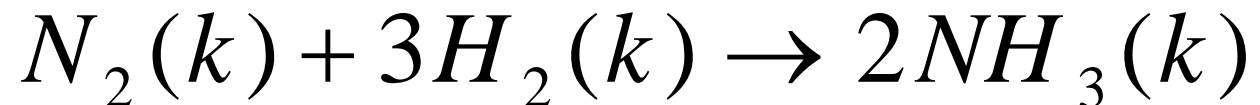
Biến thiên Entropi của phản ứng hóa học



$$\Delta S^{\circ} = \sum S^{\circ} (\text{sản phẩm}) - \sum S^{\circ} (\text{tác chất})$$

(có k các hệ số phản ứng của tác chất)

Ví dụ : Tính biến thiên Entropi tiêu chuẩn của phản ứng:



$S_{298}^{\circ} (J / mol.K)$	192	131	193
-------------------------------	-----	-----	-----

$$\Delta S_{298}^{\circ} = 2S_{298}^{\circ} (NH_3) - S_{298}^{\circ} (N_2) - 3S_{298}^{\circ} (H_2) = -199 (J / K)$$

K t h p nguyên lý 1 & 2 N HH : *CHI U PH N NG*

Ph ng trình c b n c a N HH

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

G (kJ/mol): th ng nhi t, ng áp (N ng l ng t do Gibbs)

$G < 0$: ph n ng x y ra t nhiên

$G > 0$: ph n ng ch x y ra chi u
ngh ch

$G = 0$: ph n ng t cân b ng

Chỉ số tiêu chuẩn

$$\Delta G_{298}^0 = \Delta H_{298}^0 - T\Delta S_{298}^0$$

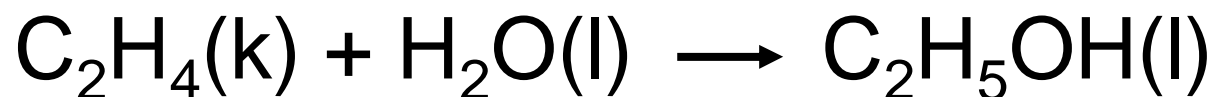
Thăng áp tạo thành tiêu chuẩn của một chất (tinh khiết) là biến thiên thăng áp của phản ứng tạo thành một mol chất ở các nhiệt độ và điều kiện tiêu chuẩn.

Kí hiệu G_{tt298}^0

Giá trị nhiệt thì G_{tt298}^0 quy bằng 0

Tính biến thiên thế năng áp trong phản ứng hóa học

$$\Delta G^{\circ}_{p\ddot{o}} = \sum \Delta G^{\circ}_{tt}(\text{sp}) - \sum \Delta G^{\circ}_{tt}(\text{tác chất})$$



Tính ΔG°_p , cho các giá trị sau

$$\Delta G^{\circ}_{tt}(\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}(\text{l})) = -175 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta G^{\circ}_{tt}(\text{C}_2\text{H}_4(\text{g})) = 68 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta G^{\circ}_{tt}(\text{H}_2\text{O}(\text{l})) = -237 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta G^{\circ}_p = -175 - 68 + 237 = -6 \text{ (kJ/mol)}$$

Ví dụ : Tính biến thiên thế năng áp tiêu chuẩn của phản ứng sau:



ΔH_{tt298}^0 (kJ/mol)	0	-393,5	-601,8	0
S_{298}^0 (J/mol.K)	32,5	213,6	26,78	5,69

$$\Delta G_{298}^0 = \Delta H_{298}^0 - T\Delta S_{298}^0$$

$$\Delta H_{298}^0 = 2(-601,8) - 1(-393,5) = -810,1 \text{ kJ}$$

$$\Delta S_{298}^0 = 2(26,78) + 5,69 - 2(32,5) - 213,6 = -219,35 \text{ J}$$

$$\Delta G_{298}^0 = \Delta H_{298}^0 - T\Delta S_{298}^0 = -810,1 - 298(-219,35 \cdot 10^{-3}) = 744,7 \text{ kJ}$$

CHƯƠNG 4:
NGHĨA HỮU C
& CÂN BẰNG NGHĨA HỮU C

N i dung

I. NG HÓA H C

1. M t s khái ni m
2. Ph ãng trình ãng h c m t s ph n ãng n gi n
3. Các y u t nh h ãng n v n t c ph n ãng

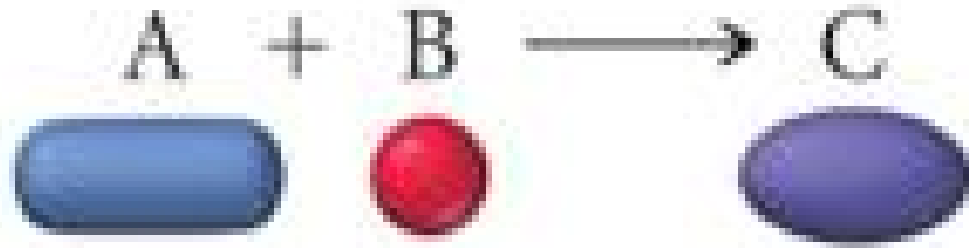
II. CÂN B NG HÓA H C

1. H ãng s cân b ãng
2. Các y u t nh h ãng n cân b ãng

I. NG HÓA H C

I.1. M t s khái ni m

❖ V n t c ph n ng



Time = 0
[A] = 8
[B] = 8
[C] = 0



Time = 16
[A] = 4
[B] = 4
[C] = 4

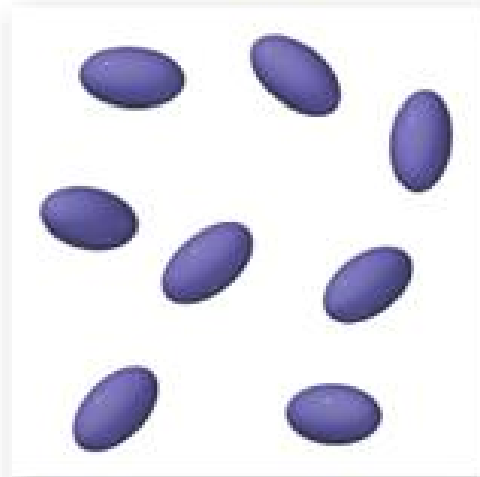


$$T_{it} = 32$$

$$[A] = 2$$

$$[B] = 2$$

$$[C] = 6$$



$$T_{it} = 48$$

$$[A] = 0$$

$$[B] = 0$$

$$[C] = 8$$

❖ Vận tốc phản ứng

$$\bar{v} = \frac{\Delta[C]}{\Delta t} = -\frac{\Delta[A]}{\Delta t}$$

Vận tốc tức thời là:

$$v = \frac{d[C]}{dt} = -\frac{d[A]}{dt}$$

❖ **Biểu thức vận tốc phản ứng**

Xét phản ứng: $A + B \rightarrow C + D$

$$v = k[A]^m[B]^n$$

Trong đó:

k: hằng số vận tốc

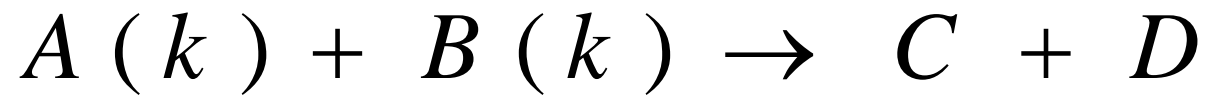
m: bậc phản ứng theo A

n: bậc phản ứng theo B

(m+n): bậc phản ứng tổng quát

Hai **giá trị m, n** suy ra từ **giá trị thực nghiệm**, có thể mang giá trị dương, âm, là số nguyên hay số thập phân

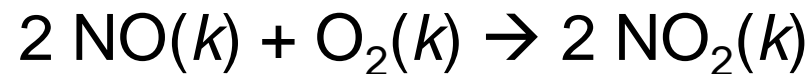
Nếu tác chất tham gia phản ứng là chất khí, thì dùng áp suất các khí tính vận tốc phản ứng



$$v = k \cdot p_A^m \cdot p_B^n$$

❖ Ph n ng n gi n & ph c t p

- **Ph n ng n gi n** (ph n ng s c p) là ph n ng x y ra m t giai o n
(b c ph n ng trùng v i h s t l ng c a ph n ng)

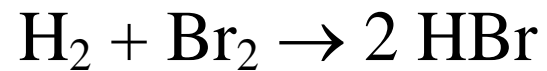
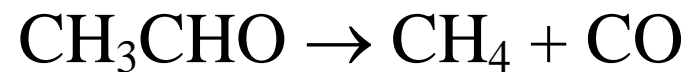


$$v = k[\text{NO}]^2[\text{O}_2]$$

- **Ph n ng ph c t p** là ph n ng x y ra nhi u giai o n
(b c ph n ng là các giá tr th c nghi m)

Ví dụ :

Phản ứng



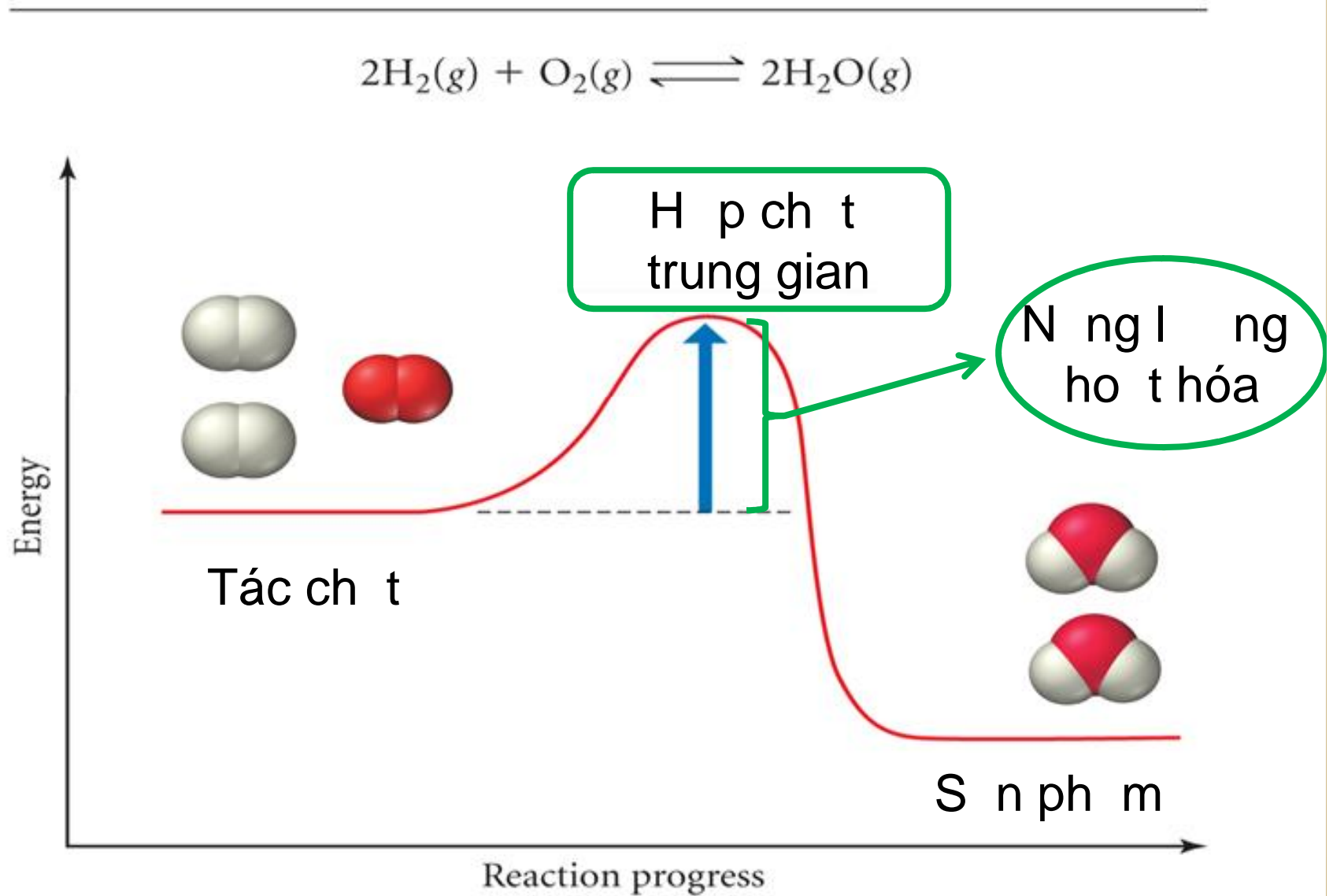
Phương trình

$$v = k[\text{CH}_3\text{CHO}]^{3/2}$$

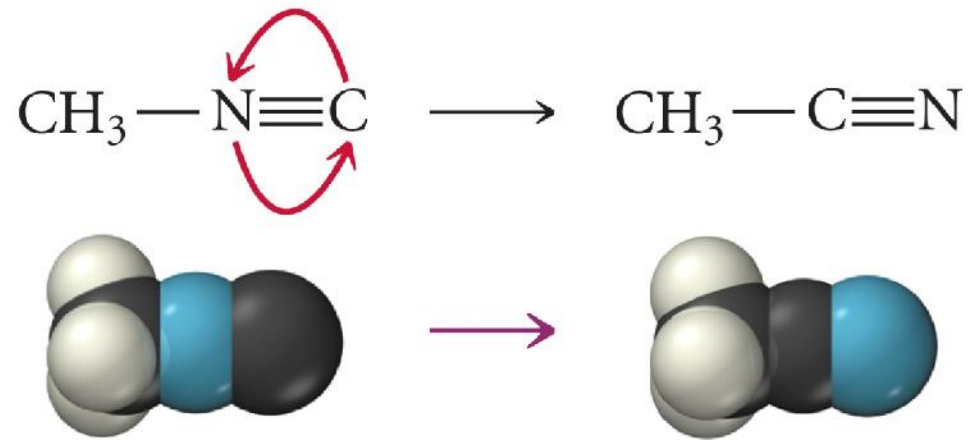
$$v = k[\text{N}_2\text{O}_5]$$

$$v = k[\text{H}_2][\text{Br}_2]^{1/2}$$

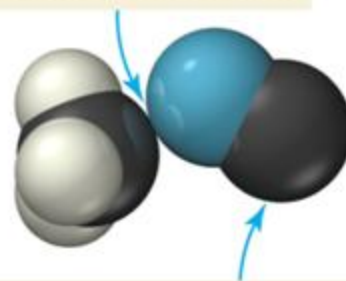
❖ H p ch t trung gian & n ng l ng ho t hóa



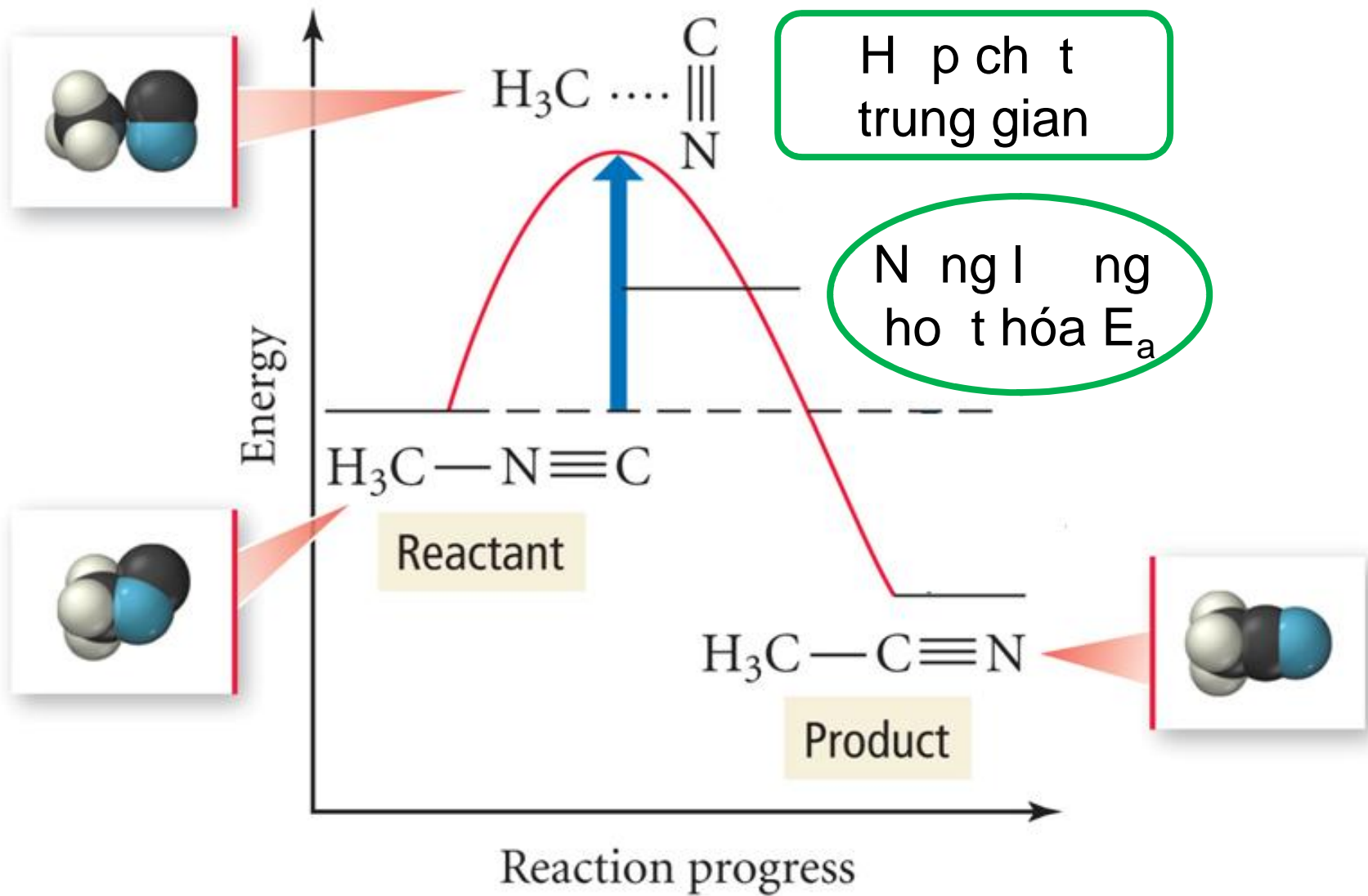
Ví dụ :



Bond weakens



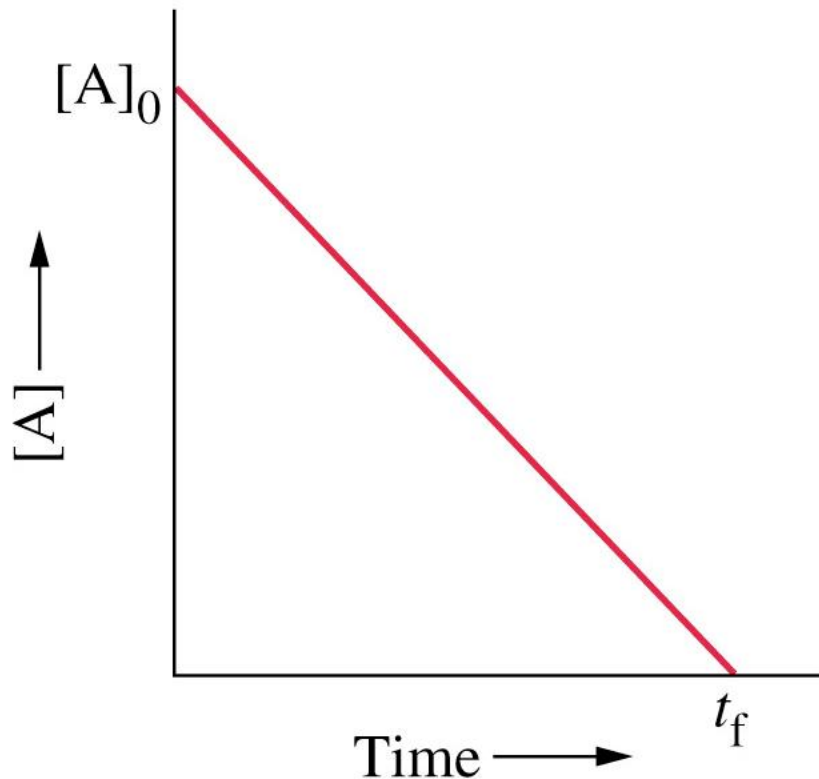
NC group begins to rotate



I.2. Phản ứng trình tự bậc không

❖ Phản ứng bậc không

Tốc độ phản ứng không phụ thuộc vào nồng độ chất phản ứng



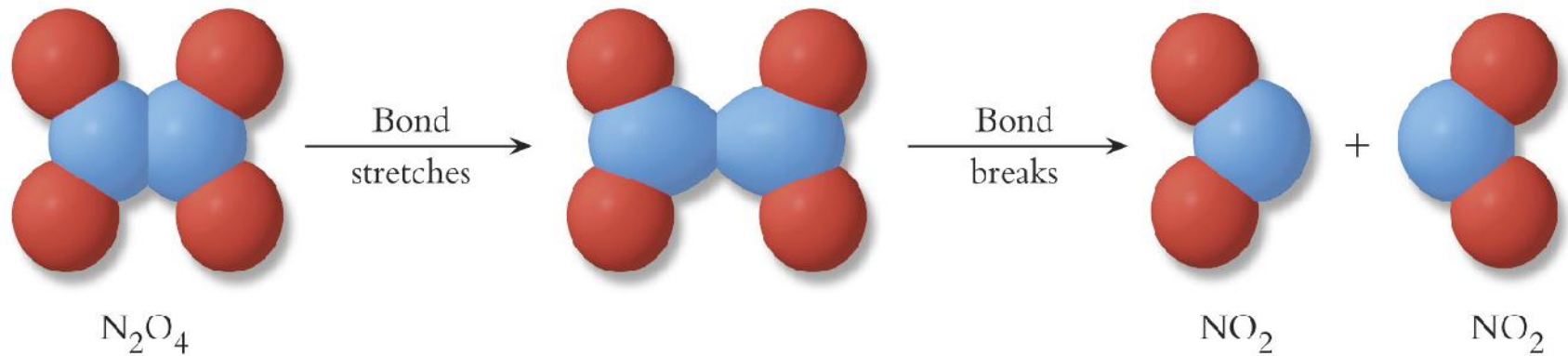
Phương trình

$$v = k[A]^0 = k = \text{const}$$

❖ Ph ản ứng b ậc m ột

A S ản phẩm

$$v = k[A]$$

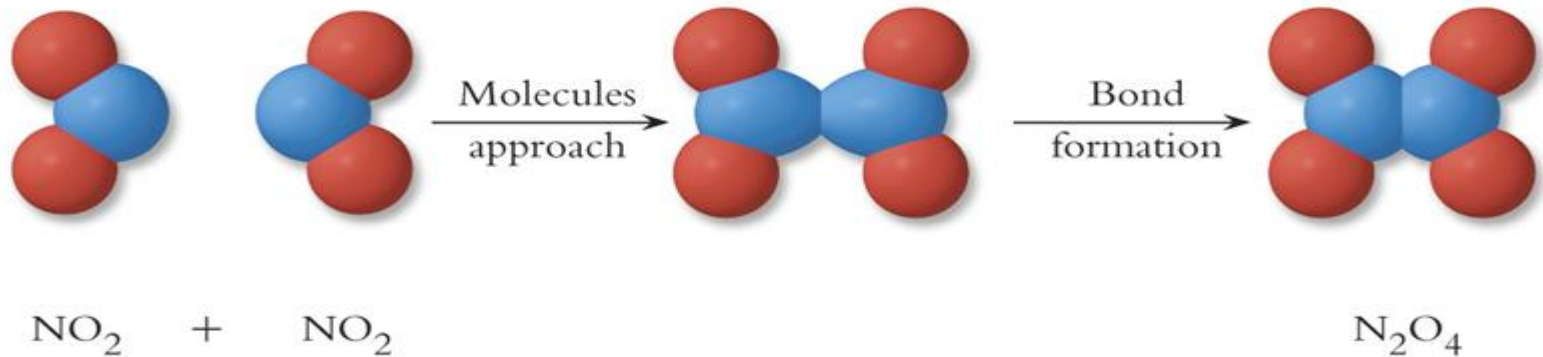


$$v = k[\text{N}_2\text{O}_4]$$

❖ Phản ứng bậc hai



$$v = k[A]^2$$



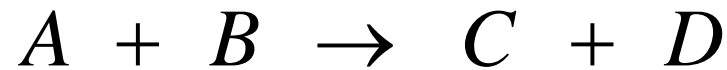
$$v = k[\text{NO}_2]^2$$



$$v = k[A][B]$$

I.3. Các yếu tố ảnh hưởng đến vận tốc phản ứng

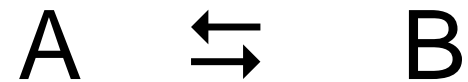
❖ **Ảnh hưởng của nồng độ tác chất**



$$v = k[A]^m[B]^n$$

- Nồng độ tác chất tăng thì vận tốc phản ứng tăng
- Vận tốc phản ứng **giảm** theo thời gian

+ i v i p h n n g t h u n n g h c h



Theo chi u thu n ($A \rightarrow B$) $v_{th} = k_{th} [A]^m$

Theo chi u ngh ch ($B \rightarrow A$) $v_{ng} = k_{ng} [B]^n$

Theo th i gian

- $[A]$ gi m $\rightarrow v_{th}$ gi m \searrow
- $[B]$ t ng $\rightarrow v_{ng}$ t ng \nearrow

Khi $v_{th} = v_{ng} \rightarrow$ ph n n g t cân b ng

❖ nh h ng c a nhi t

Quy t c Van't Hoff

Khi t ng nhi t lên 10^0 thì v n t c ph n ng t ng lên $2 \rightarrow 4$ l n

S l n t ng này g i là **h s nhi t** :

$$\frac{v_2}{v_1} = \frac{k_2}{k_1} = X^{\frac{\Delta T}{10}}$$

V i

v_2, k_2 là v n t c và h ng s v n t c c a ph n ng
nhi t T_2

v_1, k_1 là v n t c và h ng s v n t c c a ph n ng
nhi t T_1

$$T = T_2 - T_1$$

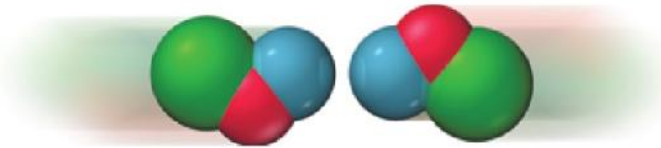
H th c Arrhenius

$$k = A \cdot e^{-\frac{E_a}{RT}}$$

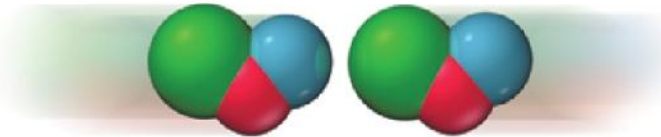
E_a : n ng l ng ho t hóa c a ph n ng

A : th a s t n s (th hi n ***xác suất va chạm hữu hiệu***
c a các phân t tham gia ph n ng)

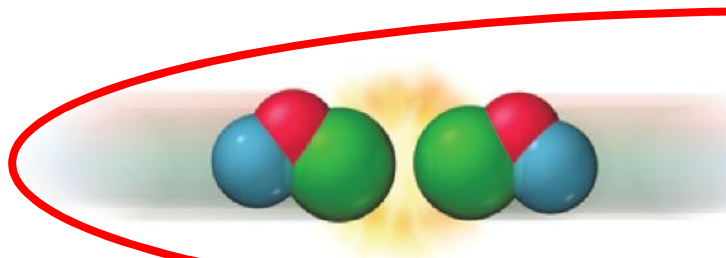
Ví dụ : Xét phản ứng



Ineffective collision




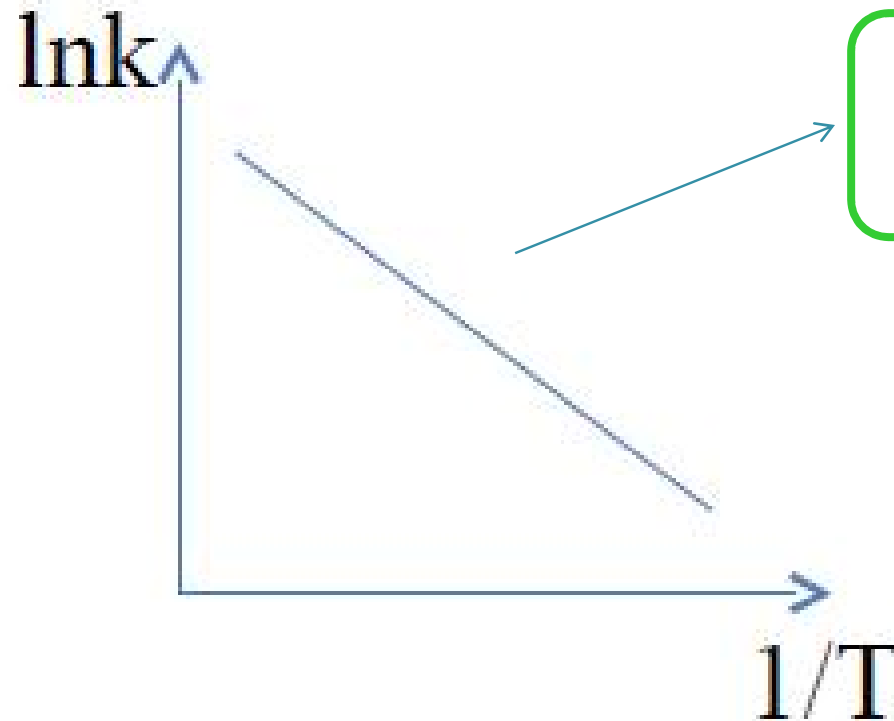
Ineffective collision



Effective collision

$$k = A \cdot e^{-\frac{E_a}{RT}}$$


$$\ln k = \ln A - \frac{E_a}{RT}$$



Xác định
c A & E_a

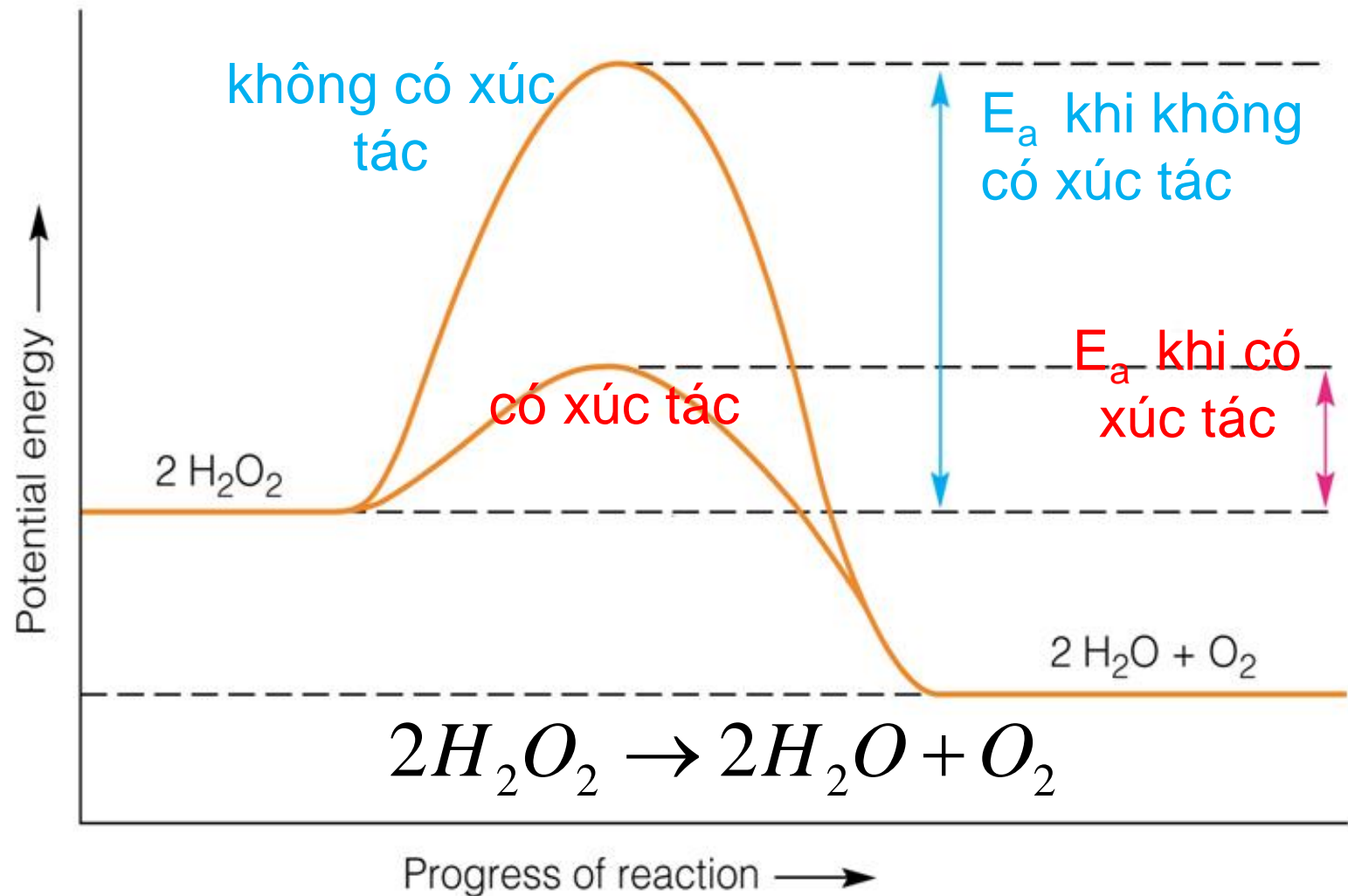
❖ **nh h ng c a xúc tác**

- Chất xúc tác là nh ng chất có khả năng làm tăng vận tốc phản ứng.
- Chất xúc tác tham gia vào phản ứng, nh ng sau phản ứng c ph c h i, **không b bi n i v kh i l ng và ch t l ng**

Phân loại chất xúc tác:

- Xúc tác đồng thể: có cùng pha với chất tham gia phản ứng
- Xúc tác dị thể: không cùng pha với chất tham gia phản ứng, phản ứng hoá học xảy ra trên bề mặt chất xúc tác
- Xúc tác enzym

- ❖ Chất xúc tác làm thay đổi đường đi trên đồ thị thế phản ứng (**thụ** **n** & **ng** **h** **ch**), không làm thay đổi điểm cân bằng của phản ứng thụ n ng h ch
- ❖ Chất xúc tác làm thay đổi đường đi trên đồ thị thế phản ứng bằng cách làm giảm năng lượng hoạt hóa





Tốc độ phản ứng trên thay đổi như thế nào khi **tăng** thể tích bình phản ứng lên **2 l n**

- a. Tăng lên 4 l n
- b. Tăng lên 16 l n
- c. Giảm xuống 16 l n
- d. Giảm xuống 4 l n

Ví dụ :

Một phần nghìn kết thúc sau **3h 20⁰C**. Nhiệt độ phần nghìn kết thúc sau **20 phút**, biết hệ số nhiệt capacity phần nghìn là **3**.

- a. 30⁰C
- b. 40⁰C
- c. 50⁰C
- d. 60⁰C

Ví dụ :

Khi thể tích n m t ph n ng **20°C** thì h ng s t c c a ph n ng là **k**. Khi t ng nhi t ph n ng lên **30°C** thì h ng s t c ph n ng t ng lên **2 l n**.

Tính n ng l ng ho t hóa c a ph n ng.

II. CÂN BẰNG HÓA HỌC

II.1. Hệ số cân bằng

Xét phản ứng (nhiệt độ) thuận nghịch



- $v_{th} = k_{th} [A]^a [B]^b$
- $v_n = k_n [C]^c [D]^d$

trạng thái cân bằng: $v_t = v_n$

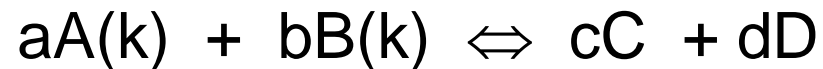
$$\Rightarrow k_t [A]^a [B]^b = k_n [C]^c [D]^d .$$

$$K = \frac{k_t}{k_n} = \frac{[C]^c [D]^d}{[A]^a [B]^b}$$

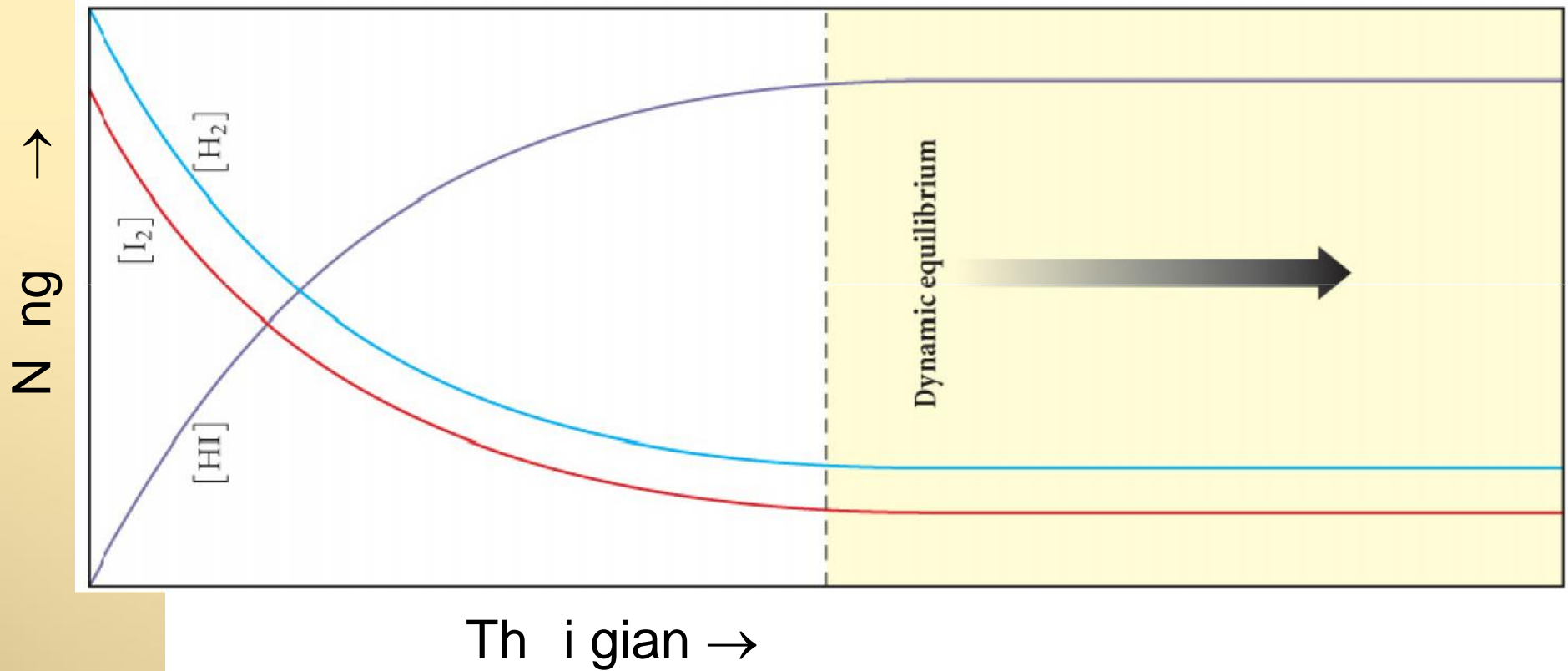
+N u p h n n g trong dung d ch

$$K_c = \left[\frac{C_C^c C_D^d}{C_A^a C_B^b} \right]$$

+N u h n h p p h n n g là ch t khí



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



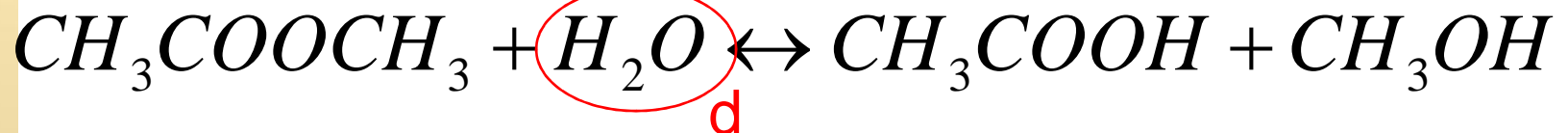
Cách viết biểu thức cân bằng



$$K_P = P_{CO_2}$$

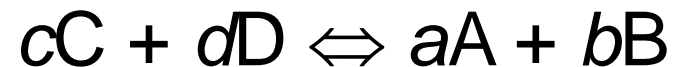


$$K_P = P_{NH_3} \cdot P_{HCl}$$




$$K_C = \frac{[CH_3COOH] \cdot [CH_3OH]}{[CH_3COOCH_3] \cdot [H_2O]}$$

$$K_C = \frac{[CH_3COOH] \cdot [CH_3OH]}{[CH_3COOCH_3]}$$



$$K_1 = \frac{[C]^c \times [D]^d}{[A]^a \times [B]^b}$$

$$K_2 = \frac{[A]^a \times [B]^b}{[C]^c \times [D]^d}$$



$$K_1 = \frac{1}{K_2}$$



$$K_1 = \frac{[C]^c}{[A]^a \times [B]^b}$$



$$\begin{aligned} K_2 &= \frac{[C]^{2c}}{[A]^{2a} \times [B]^{2b}} \\ &= \left(\frac{[C]^c}{[A]^a \times [B]^b} \right)^2 \end{aligned}$$

 $K_2 = K_1^2$




$$K_1 = \frac{[B]^b}{[A]^a}$$

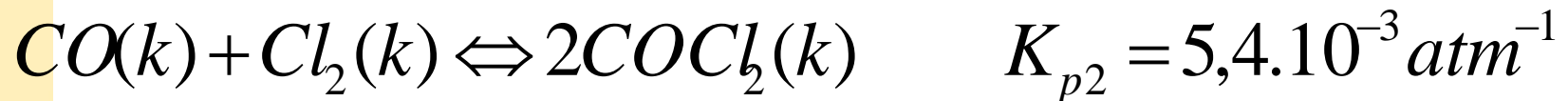
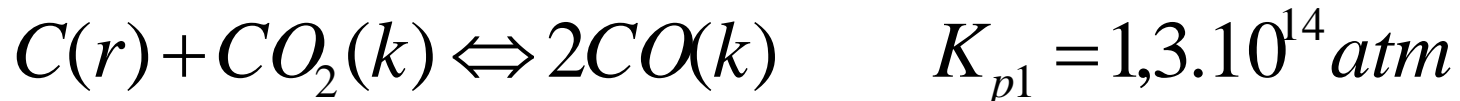
$$K_2 = \frac{[C]^c}{[B]^b}$$



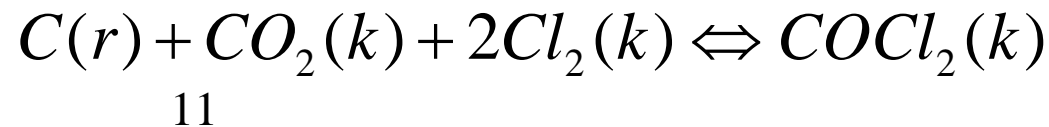
$$K_3 = \frac{[C]^c}{[A]^a}$$
$$= \frac{[B]^b}{[A]^a} \times \frac{[C]^c}{[B]^b}$$


$$K_3 = K_1 \times K_2$$

Ví dụ : Cho các cân bằng ở 850°C



Tính hằng số cân bằng K_p của phản ứng:



a) $7,54 \cdot 10^{11}$

b) $3,79 \cdot 10^9$

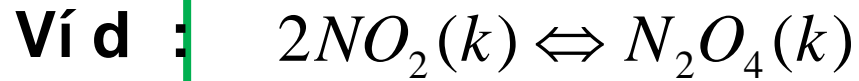
c) $7,54 \cdot 10^{-11}$

d) $4,37 \cdot 10^{-9}$

S liên hệ giữa G^0 và K

$$\Delta G^0 = -RT \ln K$$

- Nếu $K > 1$ thì $\Delta G^0 < 0 \rightarrow$ phản ứng diễn ra theo chiều thuận
- Nếu $K < 1$ thì $\Delta G^0 > 0 \rightarrow$ phản ứng diễn ra theo chiều nghịch
- Nếu $K = 0$ thì $\Delta G^0 = 0 \rightarrow$ hệ ở trạng thái cân bằng



Có ΔH và ΔS lần lượt là $-57,4\text{Kcal}$ và $-176,74\text{ cal.}^{-1}$

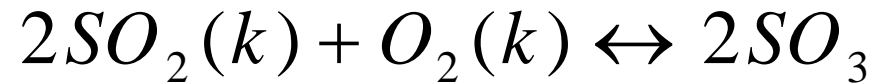
- Tính nhiệt độ trạng thái cân bằng
- Tính giá trị hằng số cân bằng 25°C

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

Nguyên lý Le Chatelier về sự chuyển dịch cân bằng:

Vì mặt khác trạng thái cân bằng, nếu ta thay đổi bất kỳ một yếu tố xác định điều kiện cân bằng (p , T , C) thì cân bằng sẽ dịch chuyển theo chiều ngược lại để thay đổi

Ví dụ :

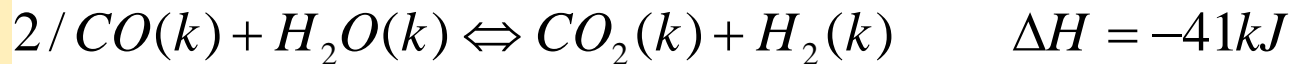
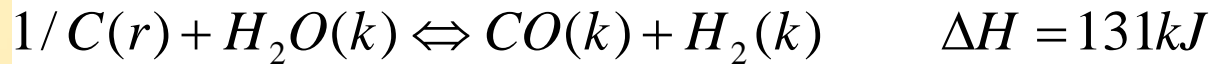


$$\Delta H_{pu}^0 = -198,4kJ$$

thụ c nhi u SO_3 c n ph i:

- a) Tăng áp suất, tăng nhiệt
- b) Giảm áp suất, tăng nhiệt
- c) Tăng áp suất, giảm nhiệt
- d) Giảm áp suất, giảm nhiệt

Xét các hệ cân bằng sau trong bình kín



Các cân bằng trên sẽ chuyển dịch như thế nào khi thay đổi điều kiện trong các trường hợp sau:

- a. Tăng nhiệt độ
- b. Thêm lượng hơi nước vào
- c. Thêm khí H_2 vào
- d. Giảm thể tích của bình kín
- e. Dùng thêm chất xúc tác

CH NG 5: DUNG D CH

Nội dung

1. Một số khái niệm
2. Dung dịch chất rắn ly
3. Cân bằng trong dung dịch chất rắn ly khó tan

Dung dịch

Là hợp chất gồm 2 hay nhiều chất (***chất tan & dung môi***) mà thành phần của chúng thay đổi trong giới hạn rộng.

- Dung dịch khí: không khí
- Dung dịch lỏng
- Dung dịch rắn: hợp kim Ag-Au.

Nồng độ dung dịch

❖ **Nồng độ mol** $C_M (M) = \frac{n(\text{mol})}{V(l)}$

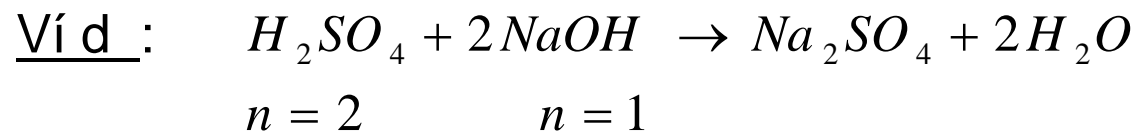
❖ **Nồng độ mol/l (C_N):** số mol chất tan có trong 1 lít dung dịch.

$$C_N = n * C_M$$

h s t l

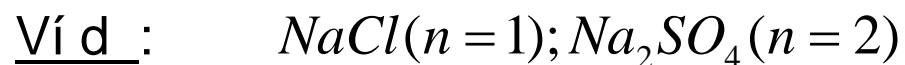
❖ N u là h p ch t **Acid/ Baz**

$$n = \sum H^+ = \sum OH^- \text{ trao i}$$



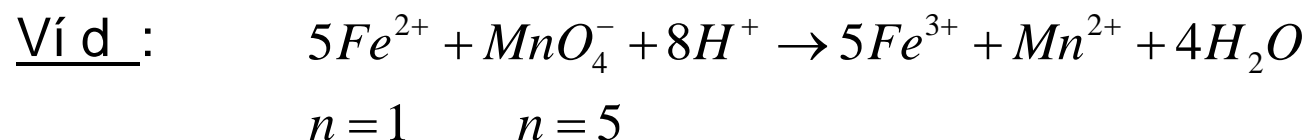
❖ N u là h p ch t **Mu i**

$$n = \sum (+) = \sum (-)$$



❖ N u là h p ch t **Oxy Hóa Kh**

$$n = \sum e \text{ trao i}$$



Quá trình hòa tan tạo thành dung dịch

Nguyên tắc

Các chất “giống nhau” thì hòa tan vào nhau

Các chất phân cực thì hòa tan vào các chất phân cực và ngược lại

Xét quá trình hòa tan chất rắn vào chất lỏng: **2 giai đoạn**.

➤ Quá trình chuyển pha: quá trình phá vỡ mạng tinh thể chất rắn để tạo thành các phân tử/ion.

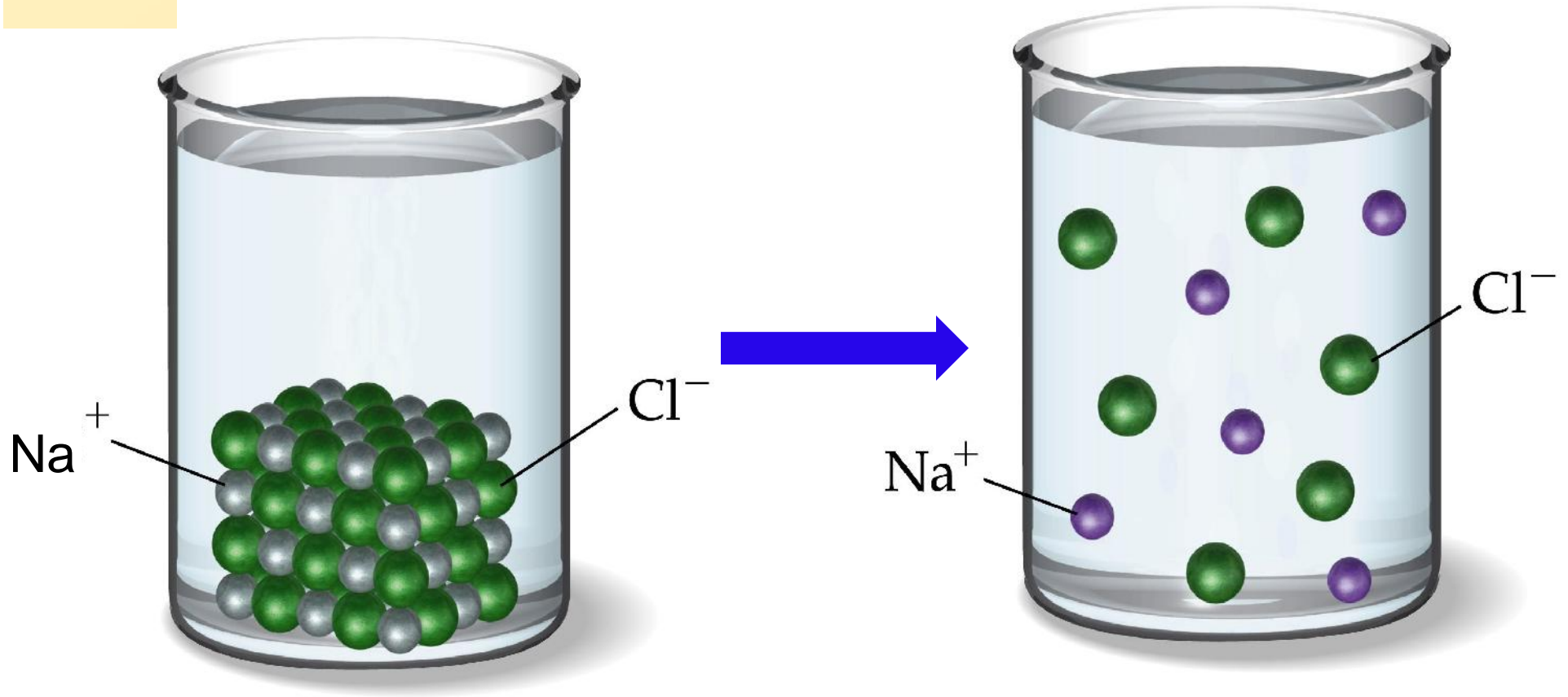
Quá trình thu nhiệt $H_{CP} > 0$

➤ Quá trình solvat hóa: quá trình tương tác giữa các phân tử/ion chất tan với dung môi.

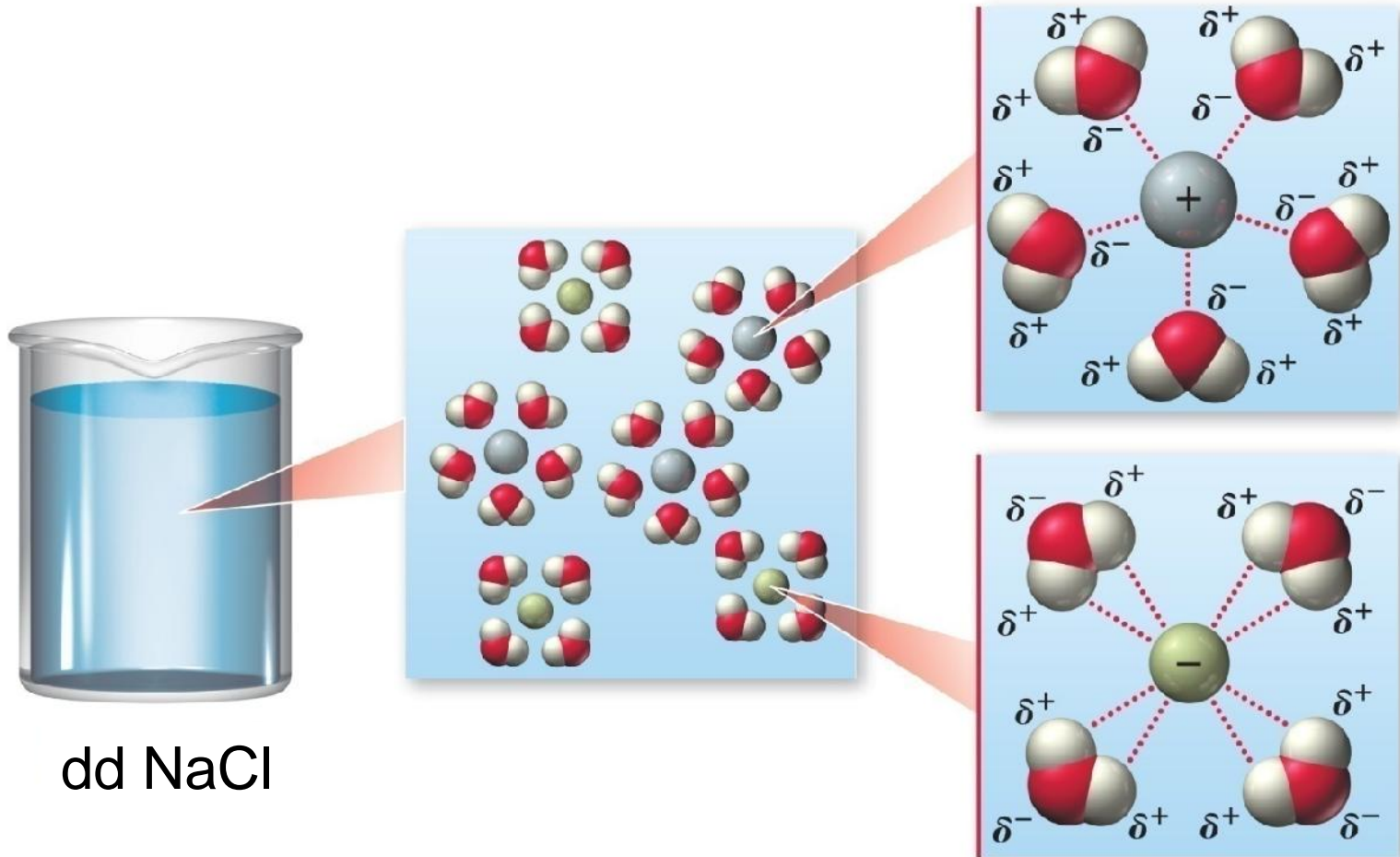
Quá trình tỏa nhiệt $H_{solvat} < 0$

$$\Delta H_{ht} = \Delta H_{CP} + \Delta H_{solvat}$$

Quá trình chuyển pha

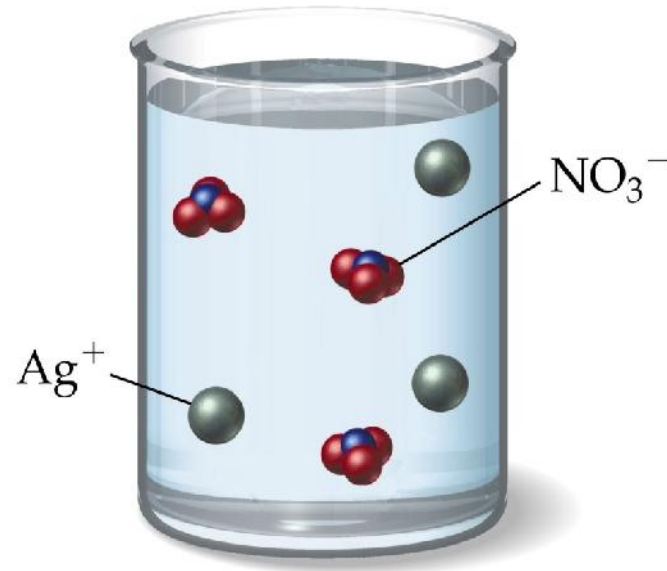


Quá trình solvat hóa (hydrat hóa)



2. Dung dịch chất i n ly

Là dung dịch có chất tan là chất i n ly (chất trong dung dịch phân ly thành các ion trái dấu)



Chất i n ly

- Ch t i n l y m nh: phân ly **hoàn toàn** thành ion



- Ch t i n l y y u: phân ly **m t ph n** thành ion



i n ly

Là tỉ số phân tử phân ly thành ion (n') trên tổng số phân tử đã hòa tan trong dung dịch (n)

$$r = \frac{n'}{n}$$

Quy c

- $> 0,3 \rightarrow$ chất i n ly mạnh
- $< 0,03 \rightarrow$ chất i n ly yếu
- $0,03 < < 0,3 \rightarrow$ chất i n ly trung bình

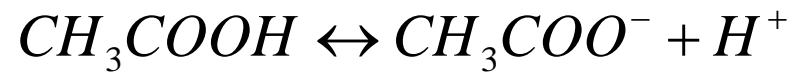
Cân bằng trong dung dịch chất i n l y u



$$K_{CB} = \frac{[A^{n+}]^m [B^{m-}]^n}{[A_m B_n]} = \text{const}$$

- ✓ K_{CB} chỉ phụ thuộc vào nhiệt độ
- ✓ K_{CB} càng lớn \rightarrow chất i n l y càng mạnh

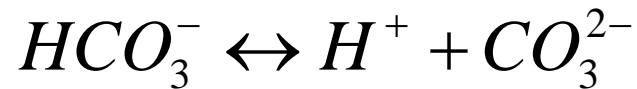
❖ Hằng số ion ly của axit yếu



$$K_{CB} = K_a = \frac{[CH_3COO^-].[H^+]}{[CH_3COOH]} = 1,8.10^{-5}$$



$$K_{a1} = \frac{[H^+].[HCO_3^-]}{[H_2CO_3]} = 4.10^{-7}$$



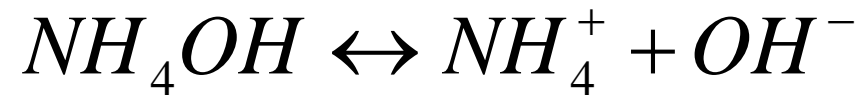
$$K_{a2} = \frac{[H^+].[CO_3^{2-}]}{[HCO_3^-]} = 5,6.10^{-11}$$

iv i axit nhi u n c

$$K_1 \gg K_2$$

→ Axit nhi u n c ch y u phân ly n c 1

❖ Hằng số phân ly của bazơ yếu



$$K_{CB} = K_b = \frac{[NH_4^+].[OH^-]}{[NH_4OH]} = 1,8.10^{-5}$$

Mối liên hệ giữa hằng số ion ly & độ ion ly

Phương trình ion ly AB



Ban đầu	C_0	0	0
ion ly	$C = C_0$	C_0	C_0
Cân bằng	$C_0 - C_0$	C_0	C_0

$$K = \frac{[A^+].[B^-]}{[AB]} = \frac{C_0^2 r^2}{C_0(1-r)}$$

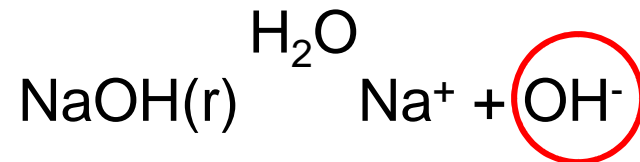
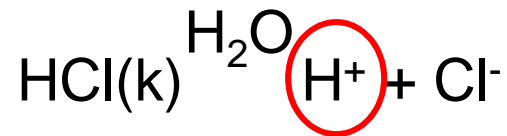
Nếu AB là chất ion yếu: $\ll 1$

$$\Rightarrow K = C_0 r^2$$

2.1. pH của dung dịch axit – bazơ

2.1.1. Lý thuyết axit – bazơ

❖ Quan niệm Arrhenius



Hạn chế :

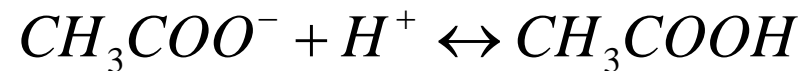
- Không áp dụng được cho chất trong nước không phân ly ra H^+ hoặc OH^- . Ví dụ : NH_3
- Chỉ xét trong dung môi nước

❖ Quan hệ Bronsted

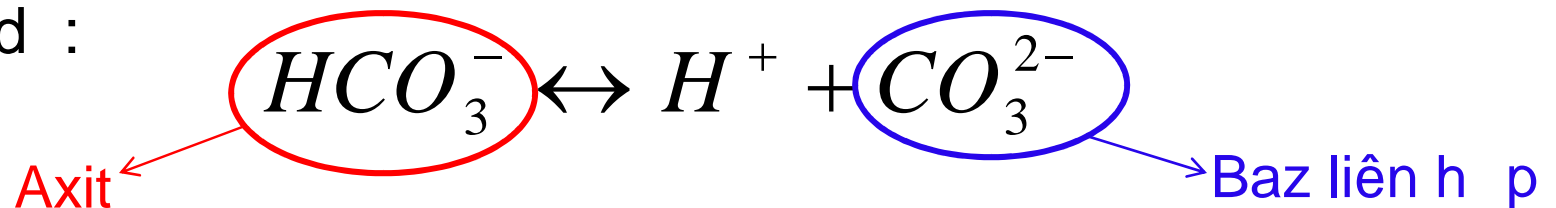
- Axit là chất **cho** proton H^+



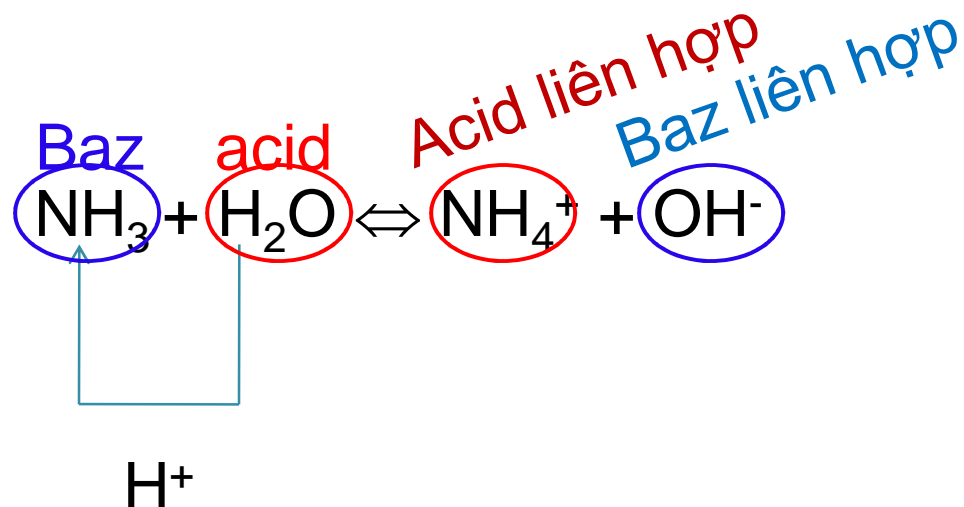
- Bazơ là chất **nhận** proton H^+



Ví dụ :



HCO_3^- và CO_3^{2-} : là cặp axit, bazơ liên hợp



❖ Ví dụ về cặp axit – baz liên hợp:

$$K_a + K_b = 10^{-14}$$

$$\text{hay } \text{p}K_a + \text{p}K_b = 14$$

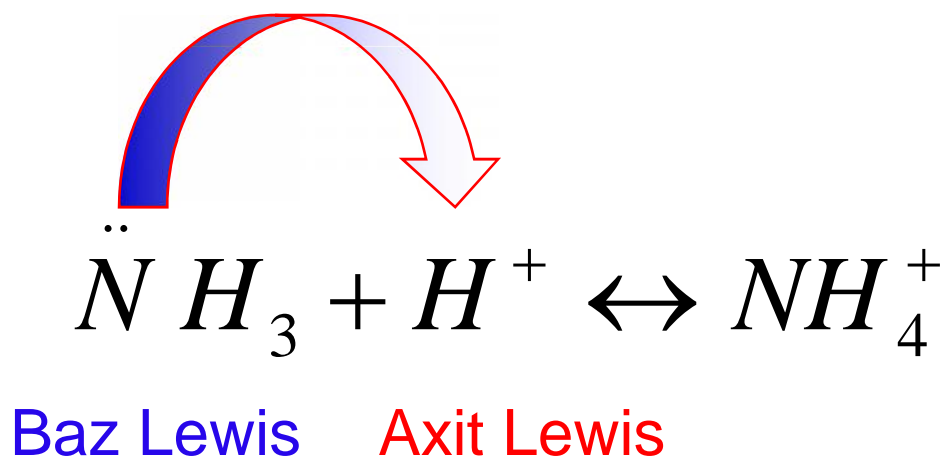
Ví dụ :



$$K_a = 1,8 \cdot 10^{-5} \quad K_b = \frac{10^{-14}}{1,8 \cdot 10^{-5}} = 5,62 \cdot 10^{-10}$$

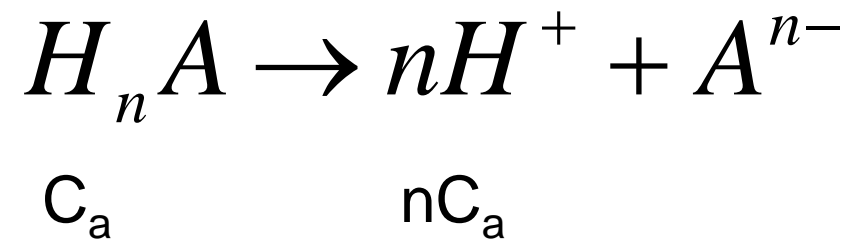
❖ Quan niệm Lewis

- Axit là chất nhận electron liên kết
- Bazơ là chất cho electron liên kết



2.1.2. Tính pH của dung dịch axit

❖ Axit mạnh



$$pH = -\lg C_{H^+} = -\lg(n C_a)$$

❖ Axit yếu đơn chức



$$pH = \frac{1}{2} (pK_a - \lg C_a)$$

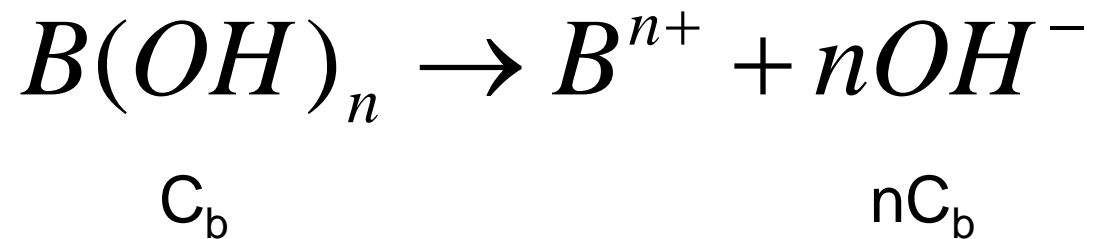
Vì: C_a nồng độ ban đầu của axit HA

K_a hằng số axit HA.

$$pK_a = -\lg K_a$$

2.1.3. Tính pH của dung dịch bazơ

❖ Bazơ mạnh



$$pOH = -\lg C_{OH^-} = -\lg(nC_b)$$

$$pH = 14 - pOH$$

❖ Baz y u n ch c







$$pH = 14 - \frac{1}{2}(pK_b - \lg C_b)$$

V i: C_b n ng ban u c a baz BOH

K_b h ng s baz BOH.

$$pK_b = - \lg K_b$$

2.1.4. Tính pH của dung dịch muối

				
Muối	Acid mạnh + Bazơ mạnh (NaCl)	Acid yếu + Bazơ mạnh (CH ₃ COONa)	Acid mạnh + Bazơ yếu (NH ₄ Cl)	Acid yếu + Bazơ yếu (CH ₃ COONH ₄)
Giá trị pH	=7	>7	<7	Tùy thuộc vào acid và bazơ
Công thức tính		$pH = \frac{1}{2}(14 + pK_a + \lg C_m)$	$pH = \frac{1}{2}(14 - pK_b - \lg C_m)$	$pH = \frac{1}{2}(14 + pK_a - pK_b)$

Ví dụ :

Trộn lẫn 10ml dung dịch CH_3COOH 0,2M và 10ml dung dịch NaOH 0,2M. Dung dịch mới có pH bằng ? (Cho $\text{pK}_a = 4,8$).

- a. 2,4
- b. 6
- c. 8,9
- d. 12,5

2.1.5. Tính pH của dung dịch đệm

Dung dịch đệm là dung dịch khi thêm một lượng nhỏ axit, một lượng nhỏ bazơ hay pha loãng thì pH của dung dịch rất ít thay đổi

Dung dịch **m axit**

Gồm axit yếu và muối của axit yếu
 CH_3COOH & CH_3COONa

Dung dịch **m bazơ**

Gồm bazơ yếu và muối của bazơ yếu
 NH_4OH & NH_4Cl

❖ Dung dịch axit

$$pH = pK_a - \lg \frac{C_a}{C_{muôi}}$$

❖ Dung dịch bazơ

$$pH = 14 - \left(pK_b - \lg \frac{C_b}{C_{muôi}} \right)$$

Ví dụ :

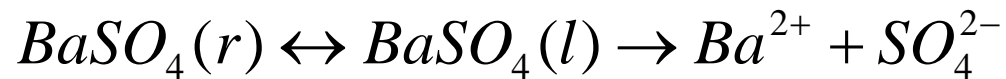
Trộn lẫn 10ml dung dịch NH_4OH 0,4M và 10ml dung dịch HCl 0,2M. Dung dịch mới có pH bằng ?

(Cho $\text{pK}_b = 4,8$).

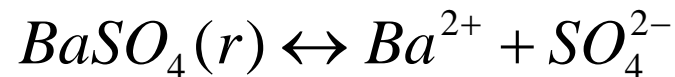
- a. 2,4
- b. 6
- c. 9,2
- d. 11,6

3. Cân bằng trong dung dịch chất ít tan

Xét cân bằng ít tan của muối $BaSO_4$



Dạng ngắn gọn

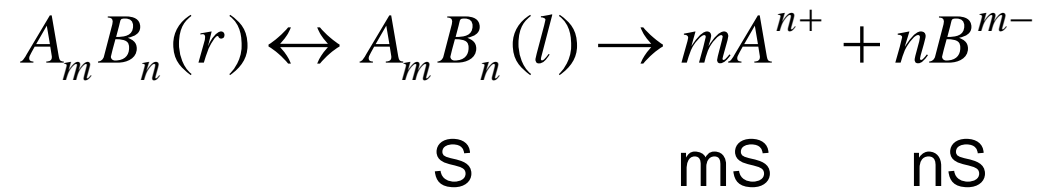


Hằng số cân bằng

$$K_{CB} = [Ba^{2+}] \cdot [SO_4^{2-}] = T_{BaSO_4}$$

T_{BaSO_4} tích số tan của $BaSO_4$

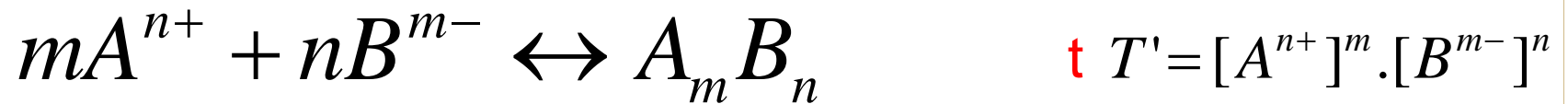
Mối liên hệ giữa tích số tan & tan (S)



$$T_{A_m B_n} = [A^{n+}]^m \cdot [B^{m-}]^n = [mS]^m \cdot [nS]^n = m^m n^n S^{(m+n)}$$

$$\Rightarrow S = \sqrt[m+n]{\frac{T_{A_m B_n}}{m^m \cdot n^n}} \text{ (mol / lit)}$$

i u k i n c ó k t t a



$$T' < T_{AmBn}$$

- Dung dịch chưa bão hòa

$$T' = T_{AmBn}$$

- Dung dịch bão hòa

$$T' > T_{AmBn}$$

- Dung dịch quá bão hòa
→ Xu hướng kết tủa

Ví dụ :

Ngay khi ta dung dịch của CaCl_2 và BaCl_2 (có cùng nồng độ) vào dung dịch H_2SO_4 cho đến khi *xuất hiện kết tủa*. Chất nào kết tủa trước?

Cho $T_{\text{BaSO}_4} = 1,1 \cdot 10^{-10}$

$$T_{\text{CaSO}_4} = 2,4 \cdot 10^{-6}$$