



CAO CỰ GIÁC (Chủ biên)

ĐẶNG THỊ THUẬN AN – NGUYỄN ĐÌNH ĐỘ

NGUYỄN XUÂN HỒNG QUÂN – PHẠM NGỌC TUẤN

CHUYÊN ĐỀ HỌC TẬP HÓA HỌC

10

Số hiệu nguyên tử
Kí hiệu nguyên tố hóa học
Tên nguyên tố
Nguyên tử khối tương đối
Số lớp electron
Số valence



NHÀ XUẤT BẢN GIÁO DỤC VIỆT NAM

CAO CỰ GIÁC (Chủ biên)

ĐẶNG THỊ THUẬN AN – NGUYỄN ĐÌNH ĐỘ

NGUYỄN XUÂN HỒNG QUÂN – PHẠM NGỌC TUẤN

CHUYÊN ĐỀ HỌC TẬP **HOÁ HỌC**



NHÀ XUẤT BẢN GIÁO DỤC VIỆT NAM

Hướng dẫn sử dụng sách

Trong mỗi bài học gồm các nội dung sau:

MỞ ĐẦU



Khởi động, đặt vấn đề, gợi mở và tạo hứng thú vào bài học

HÌNH THÀNH KIẾN THỨC MỚI



Hoạt động hình thành kiến thức mới



Thảo luận



Tóm tắt kiến thức trọng tâm

LUYỆN TẬP



Củng cố kiến thức và rèn luyện kỹ năng đã học

VẬN DỤNG



Vận dụng kiến thức và kỹ năng đã học vào thực tiễn cuộc sống

MỞ RỘNG



Giới thiệu thêm kiến thức và ứng dụng liên quan đến bài học, giúp các em tự học ở nhà

Các kí hiệu viết tắt trong sách

Kí hiệu	Tiếng Anh	Tiếng Việt
(s)	solid	chất rắn
(l)	liquid	chất lỏng
(g)	gas	chất khí (hơi)
(aq)	aqueous	chất tan trong nước (dung dịch)
E_b	bond energy	năng lượng liên kết
E_a	activation energy	năng lượng hoạt hoá
SATP	standard ambient temperature and pressure	điều kiện chuẩn về nhiệt độ và áp suất
ΔH	enthalpy change	biến thiên enthalpy
$\Delta_f H_{298}^\circ$	standard enthalpy of formation at 298 K	enthalpy tạo thành chuẩn ở 298 K
$\Delta_r H_{298}^\circ$	standard enthalpy change of reaction at 298 K	biến thiên enthalpy chuẩn của phản ứng ở 298 K
ΔS	entropy change	biến thiên entropy
$\Delta_r S_{298}^\circ$	standard entropy change of reaction at 298 K	biến thiên entropy chuẩn của phản ứng ở 298 K
$\Delta_r G_{298}^\circ$	standard free energy change of reaction at 298 K	biến thiên năng lượng tự do chuẩn của phản ứng ở 298 K
TCVN		Tiêu chuẩn Việt Nam

Hãy bảo quản, giữ gìn sách giáo khoa để dành tặng các em học sinh lớp sau!

LỜI NÓI ĐẦU

Các em học sinh thân mến!

Bên cạnh nội dung giáo dục cốt lõi, trong mỗi năm học, các em yêu thích khoa học tự nhiên sẽ được chọn học một số chuyên đề học tập. Mục tiêu của các chuyên đề bao gồm: Mở rộng, nâng cao kiến thức hoá học đáp ứng yêu cầu phân hoá sâu ở cấp Trung học phổ thông; Tăng cường rèn luyện kỹ năng thực hành, hoạt động trải nghiệm thực tế làm cơ sở giúp học sinh hiểu rõ hơn các quy trình kỹ thuật, công nghệ thuộc các ngành nghề liên quan đến hoá học; Tìm hiểu sâu hơn vai trò của hoá học trong đời sống thực tế, những ngành nghề có liên quan đến hoá học để các em có cơ sở định hướng nghề nghiệp sau này, cũng như có đủ năng lực để giải quyết những vấn đề có liên quan đến hoá học và tiếp tục tự học hoá học suốt đời.

Sách giáo khoa **Chuyên đề học tập Hoá học 10** sẽ giới thiệu 3 chuyên đề sau:

Chuyên đề 1. Cơ sở hoá học: Bao gồm những kiến thức nâng cao về liên kết hoá học, phản ứng hạt nhân, năng lượng hoạt hoá của phản ứng hoá học, entropy và biến thiên năng lượng tự do Gibbs. Những kiến thức này sẽ giúp các em hiểu sâu hơn về cấu tạo chất và lý thuyết các quá trình hoá học, cũng như ứng dụng hoá học trong thực tế.

Chuyên đề 2. Hoá học trong việc phòng chống cháy, nổ: Dựa trên cơ sở kiến thức hoá học, cung cấp cho các em những khái niệm về phản ứng cháy nổ, cũng như việc phòng chống cháy nổ.

Chuyên đề 3. Hoá học và công nghệ thông tin: Giới thiệu những ứng dụng của công nghệ thông tin trong việc viết công thức, mô phỏng cấu trúc phân tử, thực hiện các thí nghiệm hoá học ảo và một số tính toán liên quan đến học tập và nghiên cứu hoá học.

Sách giáo khoa **Chuyên đề học tập Hoá học 10** là cuốn sách thuộc bộ sách giáo khoa *Chân trời sáng tạo* của Nhà xuất bản Giáo dục Việt Nam. Sách được biên soạn theo định hướng phát triển phẩm chất và năng lực người học, giúp các em không ngừng sáng tạo trước thế giới tự nhiên rộng lớn, đồng thời tạo cơ hội cho các em vận dụng kiến thức vào cuộc sống hằng ngày.

Các tác giả hi vọng cuốn sách giáo khoa **Chuyên đề học tập Hoá học 10** sẽ là người bạn đồng hành hữu ích cùng các em khám phá thế giới tự nhiên dưới góc độ hoá học, vận dụng kiến thức, kỹ năng hoá học vào thực tiễn và định hướng nghề nghiệp cho tương lai.

CÁC TÁC GIẢ

MỤC LỤC


Hướng dẫn sử dụng sách	2
Các kí hiệu viết tắt trong sách	2
Lời nói đầu	3
CHUYÊN ĐỀ 1: CƠ SỞ HOÁ HỌC	5
Bài 1. Liên kết hoá học	5
Bài 2. Phản ứng hạt nhân	13
Bài 3. Năng lượng hoạt hoá của phản ứng hoá học	22
Bài 4. Entropy và biến thiên năng lượng tự do Gibbs	27
CHUYÊN ĐỀ 2: HOÁ HỌC TRONG VIỆC PHÒNG CHỐNG CHÁY, NỔ	33
Bài 5. Sơ lược về phản ứng cháy và nổ	33
Bài 6. Điểm chớp cháy, nhiệt độ tự bốc cháy và nhiệt độ cháy	38
Bài 7. Hoá học về phản ứng cháy, nổ	44
CHUYÊN ĐỀ 3: THỰC HÀNH HOÁ HỌC VÀ CÔNG NGHỆ THÔNG TIN	48
Bài 8. Vẽ cấu trúc phân tử	48
Bài 9. Thực hành thí nghiệm hoá học ảo	54
Bài 10. Tính tham số cấu trúc và năng lượng	63
Giải thích thuật ngữ.....	69



Liên kết hoá học

MỤC TIÊU

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

 Hình học phân tử (hình dạng phân tử) của một chất rất quan trọng trong việc xác định cách thức phân tử chất đó tương tác và phản ứng với các phân tử chất khác. Hình học phân tử cũng ảnh hưởng đến nhiệt độ sôi và nhiệt độ nóng chảy của chất. Nhiều đặc tính của chất được giải thích từ dữ liệu hình học phân tử của nó.

Yếu tố nào quyết định hình học phân tử các chất?



▲ Phân tử nước có cấu trúc dạng góc

1 CÔNG THỨC LEWIS

► Tìm hiểu công thức electron và công thức theo Lewis

Công thức Lewis của nguyên tử một nguyên tố hoá học biểu diễn các electron hoá trị (minh hoạ bằng các dấu “•”) xung quanh kí hiệu nguyên tử của nguyên tố hoá học đó.

Ví dụ 1: $\text{Na}\cdot$, $\cdot\text{C}\cdot$

Công thức electron của một phân tử biểu diễn các electron hoá trị riêng của các nguyên tử trong phân tử và các cặp electron chung trong phân tử đó.

Ví dụ 2: $\text{H}:\ddot{\text{Cl}}:$, $:\ddot{\text{Cl}}:\ddot{\text{Cl}}:$, $\text{H}:\ddot{\text{O}}:\text{H}$

Khi thay mỗi cặp electron chung bằng một gạch nối “–”, thu được công thức Lewis (Bảng 1.1).

Bảng 1.1. Công thức electron và công thức Lewis của một số phân tử

Công thức electron	$\text{H}:\ddot{\text{O}}:\text{H}$	$\text{H}:\ddot{\text{N}}:\text{H}$ H	$:\ddot{\text{O}}::\text{C}::\ddot{\text{O}}:$
Công thức Lewis	$\text{H}-\ddot{\text{O}}-\text{H}$	$\text{H}-\ddot{\text{N}}-\text{H}$ H	$:\ddot{\text{O}}=\text{C}=\ddot{\text{O}}:$



- 1 Viết công thức Lewis của nguyên tử oxygen và nguyên tử magnesium.
- 2 Viết công thức electron của phân tử methane (CH_4).



Công thức Lewis được viết dựa trên công thức electron, trong đó mỗi cặp electron chung được thay bằng một gạch nối “-”.

► Tìm hiểu quy tắc viết công thức Lewis của một phân tử hay ion

Bước 1: Tính tổng số electron hoá trị của phân tử hay ion cần biểu diễn.

Bước 2: Xác định nguyên tử trung tâm và vẽ sơ đồ khung biểu diễn liên kết giữa nguyên tử trung tâm với các nguyên tử xung quanh qua các liên kết đơn. Nguyên tử trung tâm thường là nguyên tử có độ âm điện nhỏ hơn (ngoại trừ một số trường hợp như Cl_2O , Br_2O , H_2O , NH_3 , CH_4 , ...).

Bước 3: Hoàn thiện octet cho các nguyên tử có độ âm điện lớn hơn (trừ hydrogen) trong sơ đồ.

Tính số electron hoá trị chưa tham gia liên kết bằng cách lấy tổng số electron trừ số electron tham gia tạo liên kết.

Nếu electron hoá trị còn dư, đặt số electron hoá trị dư trên nguyên tử trung tâm. Kiểm tra nguyên tử trung tâm đã đạt quy tắc octet chưa.

Nếu nguyên tử trung tâm chưa đạt quy tắc octet, chuyển sang Bước 4.

Bước 4: Chuyển cặp electron chưa liên kết trên nguyên tử xung quanh thành electron liên kết sao cho nguyên tử trung tâm thoả mãn quy tắc octet.

Ví dụ 3: Viết công thức Lewis của phân tử CO_2 .

Bước 1: Tổng số electron hoá trị của phân tử CO_2 là:

$$4 + 6 \times 2 = 16$$

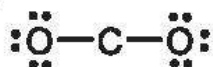
Bước 2: Sơ đồ khung biểu diễn liên kết của phân tử CO_2 :



Bước 3: Số electron hoá trị chưa tham gia liên kết trong sơ đồ là:

$$16 - 2 \times 2 = 12$$

Hoàn thiện octet cho các nguyên tử có độ âm điện lớn hơn trong sơ đồ:



Số electron hoá trị còn lại: $12 - 6 \times 2 = 0$.

Nguyên tử trung tâm C có 4 electron hoá trị, chưa đạt octet.



Khi dùng chlorine để khử trùng hồ bơi, chlorine sẽ phản ứng với urea trong nước tiểu và mồ hôi người tắm, tạo hợp chất nitrogen trichloride (NCl_3), gây ra nhiều tác động xấu đến sức khoẻ như đỏ mắt, hen suyễn, ...
Viết công thức Lewis của nitrogen trichloride.



3 Hãy tính tổng số electron hoá trị của phân tử BF_3 .

4 Xác định nguyên tử trung tâm trong BF_3 . Lập sơ đồ khung của phân tử BF_3 .

5 Thực hiện Bước 3 cho phân tử BF_3 và cho biết có cần tiếp tục Bước 4?

Bước 4: Vì C chưa đạt octet, cần chuyển một cặp electron của mỗi nguyên tử oxygen thành cặp electron chung giữa C và O để C đạt octet. Công thức Lewis của phân tử CO_2 thu được là:



Viết công thức Lewis của phân tử CCl_4 .

2 HÌNH HỌC MỘT SỐ PHÂN TỬ

► Tìm hiểu mô hình VSEPR (Valence Shell Electron Pair Repulsion – Lực đẩy của các cặp electron hoá trị)

Liên kết cộng hoá trị là liên kết có tính định hướng trong không gian, làm phân tử có những hình dạng nhất định, đó là hình học phân tử.

Mô hình VSEPR dựa vào sự đẩy nhau giữa các cặp electron chung và các cặp electron riêng của nguyên tử trung tâm trong công thức Lewis để dự đoán hình dạng phân tử hoặc ion.

Theo mô hình VSEPR, một phân tử bất kì có công thức VSEPR:



Trong đó: A là nguyên tử trung tâm.

X là nguyên tử xung quanh (phối tử).

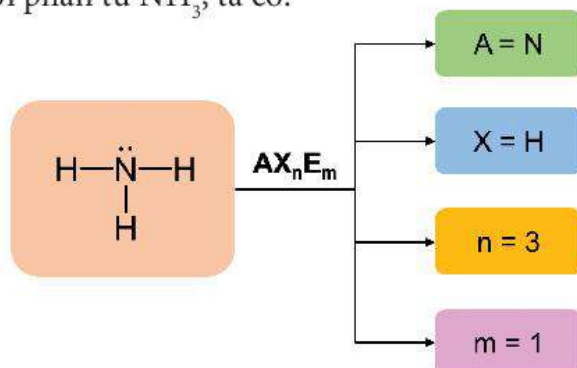
n là số nguyên tử X đã liên kết với nguyên tử A.

E là cặp electron riêng của nguyên tử A (cũng có thể là 1 electron hoá trị riêng của A, như trong trường hợp NO_2).

m là số cặp electron riêng của nguyên tử A.

Giá trị $(n + m)$ quyết định hình học phân tử AX_nE_m .

Ví dụ 4: Với phân tử NH_3 , ta có:



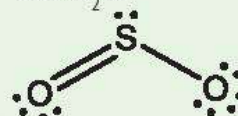
Nội dung mô hình VSEPR bao gồm:

1. Hình học phân tử phụ thuộc vào tổng số các cặp electron hoá trị của nguyên tử trung tâm $(n + m)$.



6 Theo công thức Lewis của nước, phân tử nước có bao nhiêu cặp electron chung và bao nhiêu cặp electron riêng ở nguyên tử trung tâm?

7 Xác định giá trị n, m trong công thức VSEPR của phân tử SO_2 . Cho biết công thức Lewis của SO_2 là



8 Viết công thức VSEPR của H_2O , NH_3 và SO_2 .


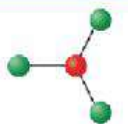
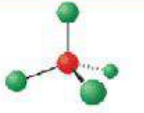
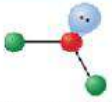
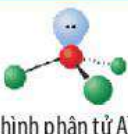
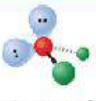
2. Các cặp electron hoá trị được phân bố xung quanh nguyên tử trung tâm sao cho lực đẩy giữa chúng là nhỏ nhất.

3. Lực đẩy của các cặp electron chung (X) và cặp electron riêng (E) giảm theo thứ tự:

$$E - E > E - X > X - X$$

➤ Mô tả hình học một số phân tử

Bảng 1.1. Mô tả hình học một số phân tử AX_nE_m

Công thức AX_nE_m	Nội dung	Dạng hình học của phân tử tương ứng
m = 0		
AX_2	Để giảm tối đa lực đẩy giữa 2 cặp electron chung, 2 cặp electron này phải chiếm 2 khu vực điện tích âm sao cho lực đẩy giữa chúng là nhỏ nhất nên phân tử có dạng đường thẳng , góc hoá trị liên kết là 180° (như $BeCl_2$, BeH_2 , CO_2 , ...).	 Mô hình phân tử AX_2
AX_3	Để giảm tối đa lực đẩy giữa 3 cặp electron chung, 3 cặp electron này phải chiếm 3 khu vực điện tích âm sao cho lực đẩy giữa chúng là nhỏ nhất nên phân tử có dạng tam giác phẳng (ví dụ BF_3 , SO_3 , ...).	 Mô hình phân tử AX_3
AX_4	Để giảm tối đa lực đẩy giữa 4 cặp electron chung, 4 cặp electron này phải chiếm 4 khu vực điện tích âm sao cho lực đẩy giữa chúng là nhỏ nhất nên phân tử có dạng tứ diện (ví dụ CH_4 , ...).	 Mô hình phân tử AX_4
m = 1		
AX_2E_1	Để giảm tối đa lực đẩy giữa 3 cặp electron hoá trị (gồm 2 cặp electron chung và 1 cặp electron riêng), 3 cặp electron này phải chiếm 3 khu vực điện tích âm sao cho lực đẩy giữa chúng là nhỏ nhất. Tuy nhiên cặp electron riêng đẩy mạnh hơn làm góc liên kết giảm, nên nhỏ hơn 120° (ví dụ SO_2 , ...).	 Mô hình phân tử AX_2E_1
AX_3E_1	Để giảm tối đa lực đẩy giữa 4 cặp electron hoá trị (gồm 3 cặp electron chung và 1 cặp electron riêng), 4 cặp electron này phải chiếm 4 khu vực điện tích âm sao cho lực đẩy giữa chúng là nhỏ nhất. Tuy nhiên cặp electron riêng đẩy mạnh hơn làm góc liên kết giảm, nên nhỏ hơn $109,5^\circ$ (ví dụ NH_3 , ...).	 Mô hình phân tử AX_3E_1
m = 2		
AX_2E_2	Để giảm tối đa lực đẩy giữa 4 cặp electron hoá trị (gồm 2 cặp electron chung và 2 cặp electron riêng), 4 cặp electron này phải chiếm 4 khu vực điện tích âm sao cho lực đẩy giữa chúng là nhỏ nhất. Tuy nhiên 2 cặp electron riêng đẩy mạnh hơn làm góc liên kết giảm mạnh hơn so với trường hợp AX_3E_1 tương ứng (ví dụ H_2O , ...).	 Mô hình phân tử AX_2E_2



Hình học một số phân tử chỉ phụ thuộc vào tổng số các cặp electron hoá trị (liên kết và chưa liên kết) của nguyên tử trung tâm.



Sử dụng mô hình VSEPR để dự đoán hình học của phân tử CS_2 .

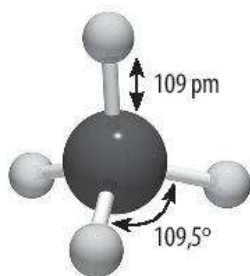


3 SỰ LAI HOÁ ORBITAL NGUYÊN TỬ

➤ Tìm hiểu khái niệm lai hoá orbital

Trong phân tử methane, độ dài các liên kết C-H đều như nhau, các góc liên kết HCH đều bằng nhau. Đây là kết quả của sự tổ

hợp 1 orbital 2s với 3 orbital 2p của nguyên tử carbon, tạo thành 4 orbital mới có năng lượng bằng nhau, có hình dạng, kích thước giống nhau, hướng đến 4 đỉnh của hình tứ diện đều. Đó là sự **lai hoá orbital nguyên tử**. Bốn orbital lai hoá này sẽ xen phủ với 4 orbital s của 4 nguyên tử hydrogen tạo nên phân tử methane.



▲ **Hình 1.1.** Mô hình mô phỏng cấu trúc phân tử methane



9 Vì sao góc liên kết HCH trong phân tử methane không thể là 90° ?



- Lai hoá orbital là sự tổ hợp các orbital của cùng một nguyên tử để tạo thành các orbital mới có năng lượng bằng nhau, hình dạng và kích thước giống nhau, nhưng định hướng khác nhau trong không gian.
- Điều kiện để các orbital nguyên tử (AO) có thể lai hoá với nhau là chúng có năng lượng gần bằng nhau.
- Số AO lai hoá bằng tổng số AO tham gia lai hoá.

10 Em có nhận xét gì về hình dạng, kích thước, năng lượng và hướng của các orbital nguyên tử lai hoá?

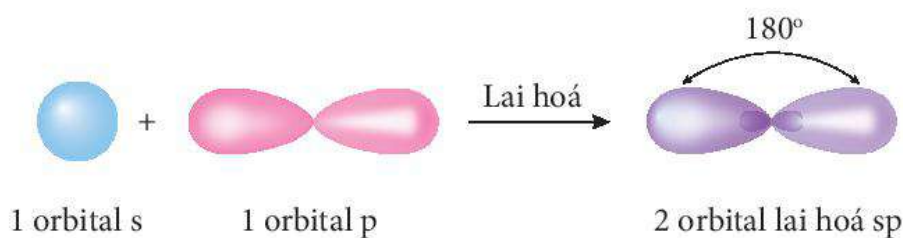
► Tìm hiểu một số dạng lai hoá cơ bản

a) Lai hoá sp

Trong một nguyên tử, 1 AO ns tổ hợp với 1 AO np tạo ra 2 AO lai hoá sp có góc liên kết 180° .

Lai hoá sp còn được gọi là **lai hoá đường thẳng**.

11 Nếu tổng số các AO tham gia lai hoá là 3 sẽ tạo ra bao nhiêu AO lai hoá?

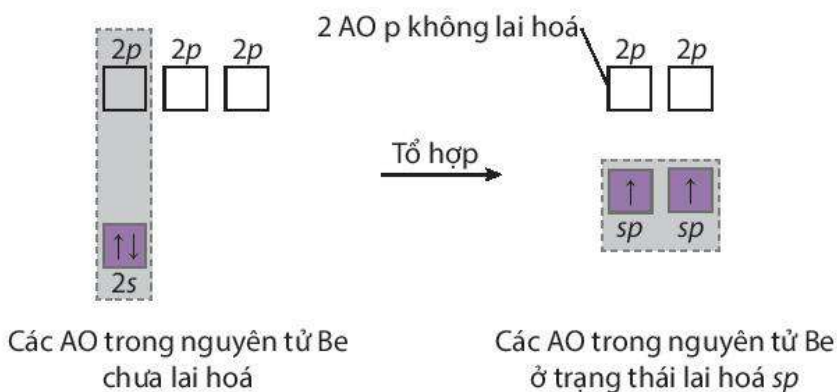


▲ **Hình 1.2.** Sự hình thành các orbital lai hoá sp

Ví dụ 5: Sự tạo thành phân tử beryllium chloride (BeCl_2).

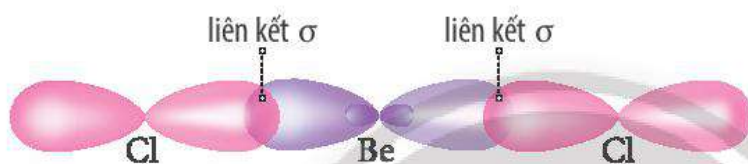
Cấu hình electron của Be: $1s^2 2s^2$.

1 AO 2s tổ hợp với 1 AO 2p, tạo 2 AO lai hoá sp.



12 Nguyên tử carbon trong phân tử CO_2 ở trạng thái lai hoá nào? Giải thích liên kết hoá học tạo thành trong phân tử CO_2 theo thuyết lai hoá.

2 AO lai hoá sp của nguyên tử Be xen phủ với 2 AO p của 2 nguyên tử Cl tạo thành 2 liên kết σ hướng về 2 phía của một đường thẳng. Góc liên kết là 180° .

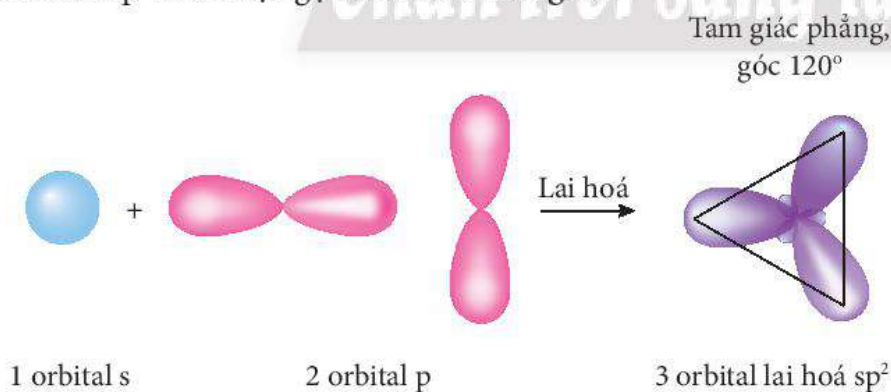


▲ Hình 1.3. Sự hình thành phân tử beryllium chloride (BeCl_2)

b) Lai hoá sp^2

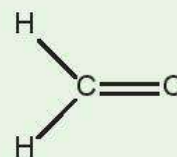
Trong một nguyên tử, 1 AO ns tổ hợp với 2 AO np tạo ra 3 AO lai hoá sp^2 hướng về 3 đỉnh của một tam giác đều. 3 AO này nằm cùng một mặt phẳng. Góc tạo bởi hai trục của hai AO là 120° .

Lai hoá sp^2 còn được gọi là **lai hoá tam giác**.



▲ Hình 1.4. Sự hình thành các orbital lai hoá sp^2

13 Theo mô hình VSEPR, phân tử formaldehyde có dạng tam giác phẳng. Xác định trạng thái lai hoá của nguyên tử trung tâm carbon. Cho biết formaldehyde có công thức như hình sau đây:

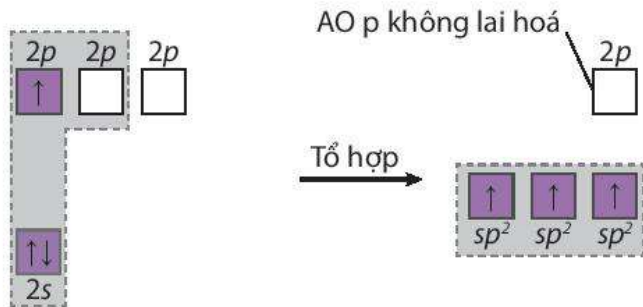


▲ Công thức phân tử formaldehyde

Ví dụ 6: Sự tạo thành phân tử boron trifluoride (BF_3).

Cấu hình electron của B: $1s^2 2s^2 2p^1$.

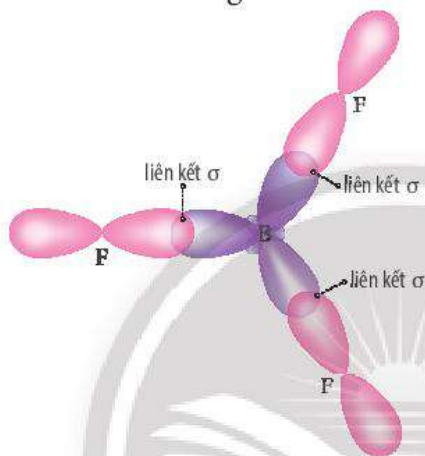
1 AO $2s$ tổ hợp với 2 AO $2p$ tạo 3 AO lai hoá sp^2 .



Các AO trong nguyên tử B chưa lai hoá

Các AO trong nguyên tử B ở trạng thái lai hoá sp^2

3 AO lai hoá sp^2 của nguyên tử B xen phủ với 3 AO p của 3 nguyên tử fluorine tạo thành 3 liên kết σ hướng về 3 đỉnh của một tam giác đều.

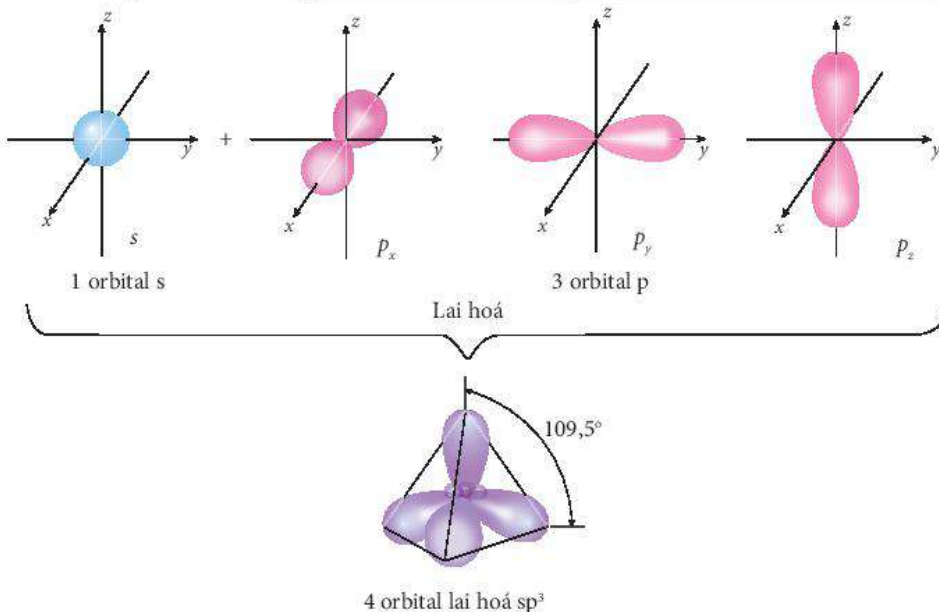


▲ Hình 1.5. Sự hình thành phân tử boron trifluoride (BF_3)

c) Lai hoá sp^3

Trong một nguyên tử, 1 AO ns tổ hợp với 3 AO np tạo ra 4 AO lai hoá sp^3 hướng về 4 đỉnh của một tứ diện đều. Góc tạo bởi hai trục của hai AO là $109,5^\circ$.

Lai hoá sp^3 còn được gọi là **lai hoá tứ diện**.



▲ Hình 1.6. Sự hình thành các orbital lai hoá sp^3



14 Tương tự như công thức VSEPR, có thể dự đoán nhanh trạng thái lai hoá của nguyên tử A (nguyên tố s, p) trong một phân tử bất kì như sau:

- Xác định số nguyên tử liên kết trực tiếp với A.
- Xác định số cặp electron hoá trị riêng của A.
- Nếu tổng hai giá trị là 2; 3 hoặc 4 thì trạng thái lai hoá của A lần lượt là sp ; sp^2 hoặc sp^3 .

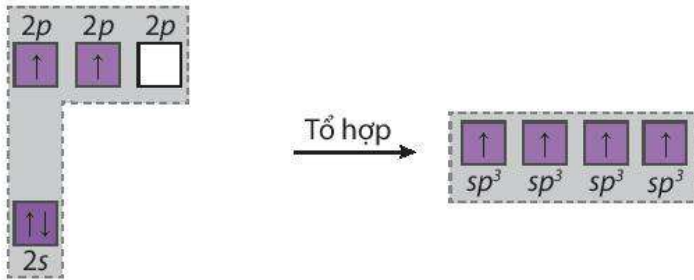
Dự đoán trạng thái lai hoá của nguyên tử C, S và N trong các phân tử CO_2 , SO_2 và NH_3 .

15 Phân tử chứa nguyên tử lai hoá sp^3 có cấu trúc phẳng không? Giải thích và cho ví dụ.

Ví dụ 7: Sự tạo thành phân tử methane (CH_4).

Cấu hình electron của C: $1s^2 2s^2 2p^2$.

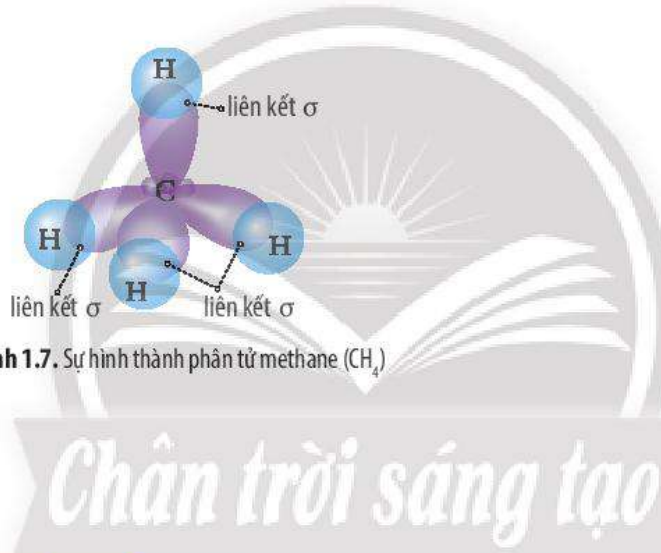
1 AO $2s$ tổ hợp với 3 AO $2p$ tạo 4 AO lai hoá sp^3 .



Các AO trong nguyên tử C chưa lai hoá

Các AO trong nguyên tử C ở trạng thái lai hoá sp^3

4 AO lai hoá sp^3 của nguyên tử C xen phủ với 4 AO s của 4 nguyên tử hydrogen tạo thành 4 liên kết σ hướng về 4 đỉnh của một tứ diện đều.



▲ Hình 1.7. Sự hình thành phân tử methane (CH_4)

BÀI TẬP

- Viết công thức Lewis của các phân tử sau:
 - HCN
 - SO_3
- Viết công thức VSEPR và dự đoán hình học của các phân tử sau:
 - HCN
 - SO_3
 - PH_3
- Trình bày sự tạo thành liên kết hoá học trong các phân tử sau dựa vào sự lai hoá của các nguyên tử trung tâm:
 - C_2H_2
 - C_2H_4
 - NH_3
- Dự đoán trạng thái lai hoá của nguyên tử trung tâm trong các phân tử sau:
 - PCl_3
 - CS_2
 - SO_2



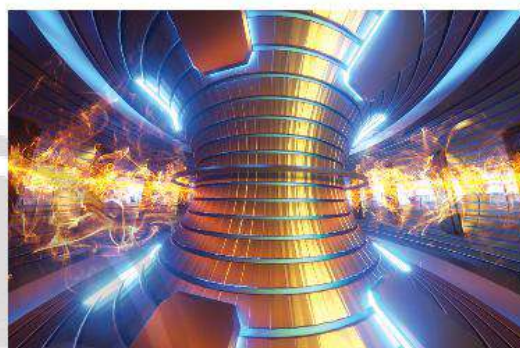
Biết nguyên tử oxygen trong phân tử H_2O ở trạng thái lai hoá sp^3 . Trình bày sự hình thành liên kết hoá học trong phân tử H_2O .

Phản ứng hạt nhân

MỤC TIÊU

- Nêu được sơ lược về sự phóng xạ tự nhiên; Lấy được ví dụ về sự phóng xạ tự nhiên.
- Vận dụng được các định luật bảo toàn số khối và điện tích cho phản ứng hạt nhân.
- Nêu được sơ lược về sự phóng xạ nhân tạo, phản ứng hạt nhân.
- Nêu được ứng dụng của phản ứng hạt nhân phục vụ nghiên cứu khoa học, đời sống và sản xuất.
- Nêu được các ứng dụng điển hình của phản ứng hạt nhân: xác định niên đại cổ vật, các ứng dụng trong lĩnh vực y tế, năng lượng, ...

Nhân loại luôn đi tìm những nguồn năng lượng xanh, sạch và chi phí thấp, nhưng năng lượng hoá thạch rẻ thì gây ô nhiễm môi trường, năng lượng tái tạo sạch thường có chi phí cao, năng lượng hạt nhân gây nên các rủi ro về phóng xạ. Những hạn chế trên sẽ được khắc phục khi công nghệ **Mặt Trời nhân tạo** phát triển thành công. Mặt Trời nhân tạo là lò phản ứng hạt nhân, thúc đẩy phản ứng xảy ra giữa 2 hạt nhân tritium và deuterium, nhằm giải phóng năng lượng phục vụ cho nhân loại. Phản ứng hạt nhân là gì? Phản ứng hạt nhân được ứng dụng trong những lĩnh vực nào?



▲ Lò phản ứng hạt nhân KSTAR (Hàn Quốc), trong dự án Mặt Trời nhân tạo, đạt 100 triệu độ Celcius và là thiết bị đầu tiên duy trì mức nhiệt này trong 20 giây

1 PHÓNG XẠ TỰ NHIÊN

► Tìm hiểu về phóng xạ tự nhiên

Phóng xạ là hiện tượng hạt nhân nguyên tử không bền vững bị biến đổi thành hạt nhân của nguyên tử khác, đồng thời phát ra bức xạ dạng hạt hoặc photon có năng lượng lớn, gọi là **tia phóng xạ**.



▲ Hình 2.1. Autunite, khoáng vật chứa uranium



1 Trong tự nhiên, có nhiều đồng vị không bền như ^3H (tritium), ^{14}C , ^{40}K , ... chúng bị biến đổi thành hạt nhân nguyên tử khác, hiện tượng này gọi là gì.

Trong tự nhiên, các nguyên tố phóng xạ tự nhiên có thể phân bố trong đất, nước và trong không khí, được chia thành 4 họ phóng xạ: họ uranium, họ actinium, họ thorium và họ neptunium. Uranium được tìm thấy trong tự nhiên gồm hai đồng vị phổ biến ^{235}U (0,711%) và ^{238}U (99,284%). Uranium có trong đất đá, cũng xuất hiện trong thực vật và trong các mô ở người; cùng họ uranium còn có ^{226}Ra và các sản phẩm phân rã của nó như ^{222}Rn , ^{210}Pb , ^{210}Bi , ... Thorium chỉ có đồng vị ^{232}Th xuất hiện trong tự nhiên, các đồng vị còn lại đều không bền.



- **Phóng xạ tự nhiên** là hiện tượng các nguyên tố tự phát ra tia phóng xạ, không do tác động từ bên ngoài.
- Các nguyên tố phóng xạ tự nhiên xuất hiện ở nhiều nơi: trong lòng đất, lớp đất đá bề mặt, không khí, nguồn nước, ...



Có nhiều dạng bức xạ được phát ra nhưng không do hiện tượng phóng xạ, chẳng hạn bóng đèn có thể phát ra bức xạ dưới dạng nhiệt và ánh sáng, nhưng không phải là chất phóng xạ.

➤ Tìm hiểu thành phần và đặc điểm tia phóng xạ

Tia phóng xạ gồm có hạt alpha (α), hạt beta (β) và bức xạ điện từ gamma (γ), được gọi tương ứng là phóng xạ α , phóng xạ β và phóng xạ γ .

- Hạt α (^4_2He) là hạt nhân nguyên tử helium, gồm 2 proton, 2 neutron và không có electron, nên mang điện tích dương. Hầu hết các đồng vị phóng xạ có $Z > 83$ là phóng xạ theo kiểu α .

Ví dụ phóng xạ α : $^{226}_{88}\text{Ra} \rightarrow ^{222}_{86}\text{Rn} + ^4_2\text{He}$

- Hạt β ($^0_{-1}\text{e}$) có điện tích -1 và số khối bằng 0. Phóng xạ β xảy ra trong các hạt nhân có nhiều neutron, khi neutron chuyển thành proton và electron có năng lượng cao, bị đẩy ra khỏi hạt nhân dưới dạng hạt $\beta^{(*)}$: $^1_0\text{n} \rightarrow ^1_1\text{p} + ^0_{-1}\text{e}$

Ví dụ phóng xạ β : $^{14}_6\text{C} \rightarrow ^{14}_7\text{N} + ^0_{-1}\text{e}$

Hạt β^+ ($^0_{+1}\text{e}$) còn gọi là positron, có cùng khối lượng với electron và mang điện tích $+1$. Phóng xạ β^+ xảy ra khi proton chuyển thành neutron và positron có năng lượng cao: $^1_1\text{p} \rightarrow ^1_0\text{n} + ^0_{+1}\text{e}$

Ví dụ phóng xạ β^+ : $^{11}_6\text{C} \rightarrow ^{11}_5\text{B} + ^0_{+1}\text{e}$

(*) Phóng xạ β là tên gọi thay cho phóng xạ β^- , do phóng xạ β^- phổ biến hơn β^+ .



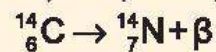
2 Quan sát Hình 2.1 và đọc thông tin, cho biết đồng vị uranium nào tồn tại phổ biến trong tự nhiên?



Xét 2 quá trình sau:

(1) Đốt cháy than củi (carbon) sẽ phát ra nhiệt lượng có thể nấu chín thực phẩm;

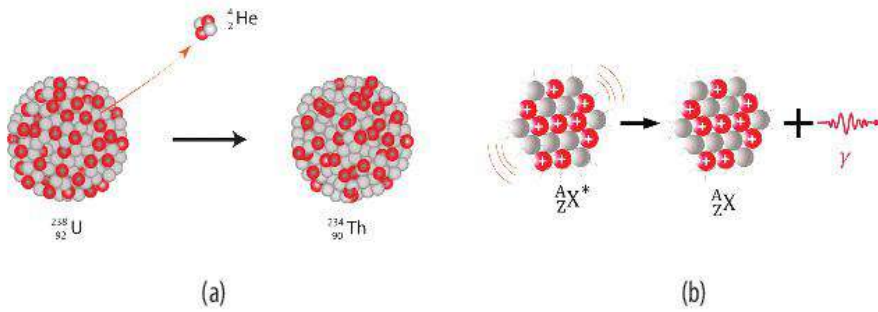
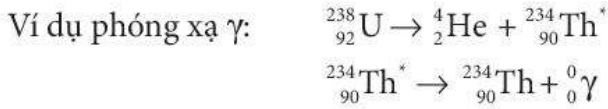
(2) Đồng vị ^{14}C phân huỷ theo phản ứng:



Quá trình nào là phóng xạ tự nhiên? Giải thích.

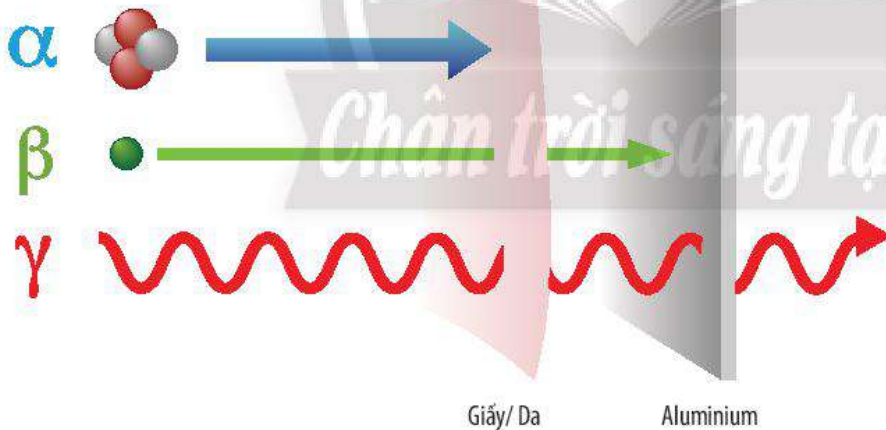
3 Tia phóng xạ có những loại nào? Cho biết đặc điểm của từng loại.

• Nhiều phản ứng phân rã hạt nhân tạo ra hạt nhân mới ở trạng thái kích thích có mức năng lượng cao, khi trở về trạng thái cơ bản (bền vững) sẽ phát bức xạ dưới dạng photon có năng lượng cao, gọi là phóng xạ γ . Phóng xạ γ thường đi kèm với phóng xạ α , β .



▲ Hình 2.2. Mô hình phóng xạ α (a) và phóng xạ γ (b)

Các tia phóng xạ có khả năng đâm xuyên một số vật chất khác nhau. Tia β có thể đi xuyên qua giấy; tia γ đi xuyên qua giấy, da, nhựa, aluminium, wolfram, ...



▲ Hình 2.3. Khả năng đâm xuyên qua một số vật chất của tia phóng xạ



Tia phóng xạ gồm các hạt và bức xạ điện từ:

- Hạt α là hạt nhân nguyên tử helium (${}^4_2\text{He}$).
- Hạt β có điện tích -1 và số khối bằng 0 .
- Tia γ là dòng photon có năng lượng cao.



4 Đặc điểm của hạt nhân nguyên tử xảy ra phóng xạ β và β^+ khác nhau như thế nào? So sánh khối lượng và điện tích của hạt β , β^+ .

5 Trong 3 loại phóng xạ α , β , γ , loại phóng xạ nào khác biệt cơ bản với 2 loại còn lại? Nêu sự khác biệt đó.

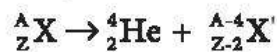


Khi chiếu chùm tia phóng xạ (α , β , γ) đi vào giữa 2 bản điện cực, hướng đi của các tia phóng xạ thay đổi như thế nào?

► Tìm hiểu định luật bảo toàn số khối và bảo toàn điện tích

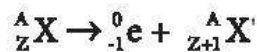
• Phóng xạ α

Sau phóng xạ α (${}^4_2\text{He}$), điện tích hạt nhân nguyên tử giảm 2 đơn vị và số khối giảm 4 đơn vị.



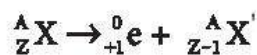
• Phóng xạ β

Sau phóng xạ β , điện tích hạt nhân nguyên tử tăng 1 đơn vị, số khối không thay đổi.

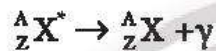


• Phóng xạ β^+

Sau phóng xạ β^+ , điện tích hạt nhân nguyên tử giảm 1 đơn vị, số khối không thay đổi.



• Phóng xạ γ không làm thay đổi điện tích hạt nhân nguyên tử và số khối của nguyên tử.

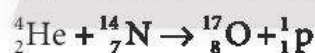


Trong quá trình phóng xạ, số khối và điện tích được bảo toàn.

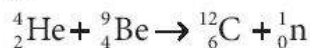
2 PHẢN ỨNG HẠT NHÂN

► Tìm hiểu về phản ứng hạt nhân

Phản ứng hạt nhân nhân tạo đầu tiên được thực hiện vào năm 1919 bởi Ernest Rutherford (Ơ-nốt Rơ-dơ-pho), khi bắn các hạt α do radium phát ra vào hạt nhân nguyên tử nitrogen, tạo thành hạt nhân nguyên tử oxygen và phát hiện ra hạt proton.

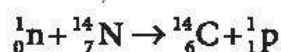


Thí nghiệm biến đổi hạt nhân của Rutherford là nền móng cho sự phát hiện hạt neutron. Đến năm 1932, James Chadwick (Dêm Chát-uych), học trò của Rutherford, đã bắn các hạt α vào hạt nhân nguyên tử beryllium, tạo thành hạt nhân nguyên tử carbon và hạt neutron.



Hạt α và hạt nhân nguyên tử đều mang điện tích dương nên tương tác đẩy nhau, chỉ những hạt α có động năng đủ lớn mới thắng được lực đẩy này. Neutron không mang điện tích nên khi bắn phá vào hạt nhân để tạo các đồng vị mới sẽ dễ dàng hơn.

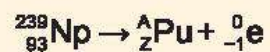
Đồng vị ${}^{14}_6\text{C}$ được hình thành trong tự nhiên do hạt neutron (từ tia vũ trụ) bắn vào hạt nhân ${}^{14}_7\text{N}$:



6 Quan sát và nhận xét số khối, điện tích của các thành phần trước và sau phóng xạ hạt nhân.



Vận dụng định luật bảo toàn số khối và bảo toàn điện tích, hoàn thành các phản ứng hạt nhân:



7 Phản ứng hạt nhân trong thí nghiệm của Rutherford và Chadwick có khác biệt cơ bản nào với sự phóng xạ tự nhiên?

8 Nêu sự khác nhau cơ bản của phản ứng hạt nhân với phản ứng hoá học.



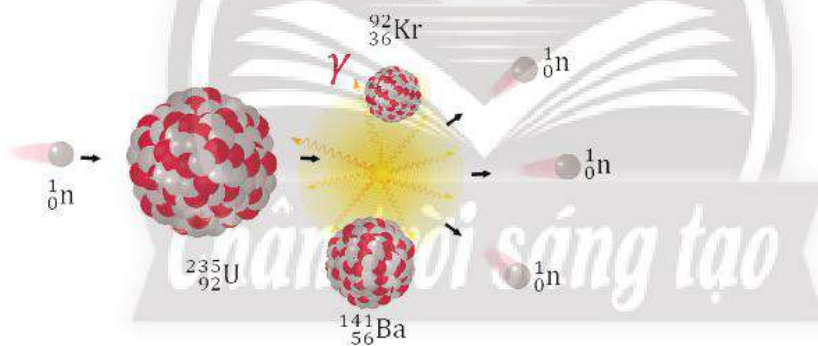
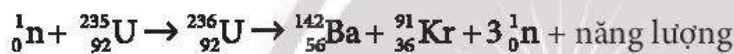
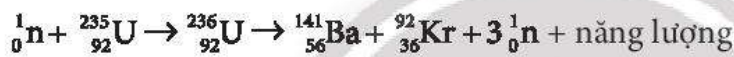
- Phản ứng hạt nhân là phản ứng có sự biến đổi ở hạt nhân nguyên tử. Phản ứng hạt nhân không phải là phản ứng hoá học.
- Phóng xạ tự nhiên là một loại phản ứng hạt nhân.
- Phản ứng hạt nhân tuân theo định luật bảo toàn số khối và bảo toàn điện tích.

► Tìm hiểu phản ứng phân hạch, phản ứng nhiệt hạch và phóng xạ nhân tạo

1. Phản ứng phân hạch

Dưới tác dụng của neutron, hạt nhân nguyên tử phân chia thành 2 hạt nhân mới, gọi là 2 mảnh phân hạch, đồng thời giải phóng năng lượng. Nhiên liệu chủ yếu của phản ứng phân hạch là ^{235}U và ^{239}Pu .

Ví dụ 1: Khi bắn các hạt neutron có năng lượng thấp vào hạt nhân ^{235}U sẽ xảy ra các phản ứng:



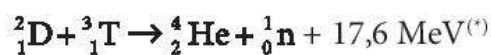
▲ Hình 2.4. Quá trình phân hạch ^{235}U

2. Phản ứng nhiệt hạch

Phản ứng nhiệt hạch, còn gọi là phản ứng tổng hợp hạt nhân, là quá trình 2 hạt nhân hợp lại để tạo thành hạt nhân mới nặng hơn, đồng thời giải phóng năng lượng.

Nhiên liệu thường dùng cho phản ứng nhiệt hạch là đồng vị deuterium và tritium của hydrogen.

Phương trình nhiệt hạch của đồng vị deuterium và tritium:



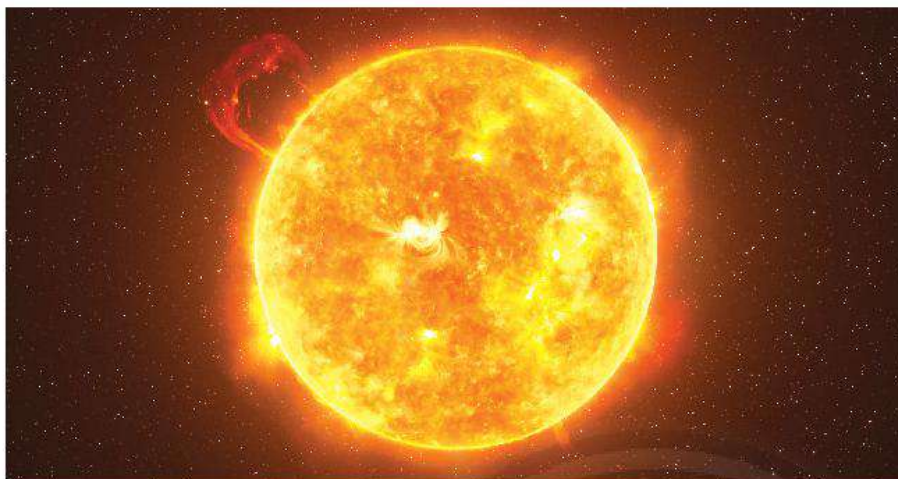
(*) Đơn vị Megaelectron volt, $1 \text{ MeV} = 1,602 \times 10^{-13} \text{ J}$



9 Quan sát Hình 2.4 và Ví dụ 1, hãy so sánh số khối của các mảnh phân hạch với số khối của hạt nhân ban đầu.

10 Phản ứng nhiệt hạch được xem là phản ứng ngược lại với phản ứng phân hạch. Giải thích.

Phản ứng nhiệt hạch của các hạt nhân nhẹ kèm theo sự phát sáng, như phản ứng nhiệt hạch trong Mặt Trời, các ngôi sao, ... Phản ứng nhiệt hạch xảy ra trong Mặt Trời giải phóng năng lượng vô cùng lớn là 26 MeV (Hình 2.5).

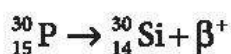
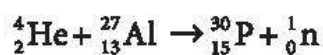


▲ Hình 2.5. Phản ứng nhiệt hạch xảy ra trong Mặt Trời

3. Phóng xạ nhân tạo

Trong nhiều phản ứng hạt nhân, có thể tạo ra các đồng vị không bền, gọi là đồng vị phóng xạ nhân tạo. Các đồng vị này bị phân rã tạo thành đồng vị bền hơn và phát bức xạ, gọi là sự **phóng xạ nhân tạo**.

Ví dụ 2: Năm 1933, Frédéric (Phê-đê-ric) và Irène Joliot-Curie (I-rê-na Giô-li-ốt Qui-ri) thực hiện bắn phá ${}^{27}\text{Al}$ bằng hạt α , tạo ra đồng vị ${}^{30}\text{P}$ không bền, phát ra phóng xạ β^+ và tạo thành ${}^{30}\text{Si}$:



11 Đồng vị phóng xạ nhân tạo được tạo ra như thế nào?

12 Trong Ví dụ 2, đồng vị nào là đồng vị phóng xạ nhân tạo?



So sánh điểm giống và khác nhau của phóng xạ tự nhiên và phóng xạ nhân tạo.



- Phóng xạ nhân tạo là quá trình biến đổi hạt nhân không tự phát, gây ra bởi tác động bên ngoài lên hạt nhân, đồng thời phát ra tia phóng xạ.
- Phản ứng phân hạch và phản ứng nhiệt hạch là phản ứng hạt nhân, tạo ra năng lượng rất lớn.
- Có thể tạo ra đồng vị phóng xạ nhân tạo để ứng dụng vào nhiều lĩnh vực.

3 ỨNG DỤNG CỦA ĐỒNG VỊ PHÓNG XẠ VÀ PHẢN ỨNG HẠT NHÂN

► Tìm hiểu về ứng dụng đồng vị phóng xạ và phản ứng hạt nhân

Đồng vị phóng xạ và phản ứng hạt nhân có ứng dụng hữu ích trong nhiều lĩnh vực của cuộc sống.

Y học

Ứng dụng kĩ thuật y học hạt nhân trong chẩn đoán và điều trị bệnh. Một trong những ứng dụng là kĩ thuật chụp hình phát hiện ung thư bằng máy SPECT (Single Photon Emission Computed Tomography – Kĩ thuật chụp cắt lớp đơn photon), PET (Positron Emission Tomography – Kĩ thuật chụp cắt lớp phát xạ positron), kết hợp với CT như SPECT/CT, PET/CT, giúp chẩn đoán ung thư, kiểm tra và đánh giá mức độ hiệu quả của các phương pháp điều trị, ...

Sử dụng dược chất phóng xạ vào cơ thể người bệnh, chẳng hạn, dùng đồng vị ^{131}I dưới dạng sodium iodide trong điều trị bệnh nhân ung thư tuyến giáp, ^{131}I sẽ truy tìm và lưu lại ở những nơi còn tế bào ung thư hoặc các tổ chức di căn, phát ra bức xạ β tiêu diệt tế bào ung thư tuyến giáp: $^{131}_{53}\text{I} \rightarrow ^{131}_{54}\text{Xe} + \beta$

Xạ trị là một trong những phương pháp phổ biến trong điều trị ung thư, sử dụng các hạt và sóng có năng lượng cao như: tia X (tia Röntgen (Rơn-ge-n)), tia gamma, chùm tia điện tử, proton, ... để tiêu diệt hoặc phá hủy tế bào ung thư.



▲ Hình 2.6. Chụp PET/CT là kĩ thuật chẩn đoán hình ảnh cao cấp trong y học

Công nghiệp, nông nghiệp, nghiên cứu khoa học

Đồng vị phóng xạ được dùng trong chụp X-quang công nghiệp, tìm kiếm các khuyết tật trong vật liệu, đo mực chất lỏng trong bồn chứa, đo độ dày của các vật liệu, kiểm tra tính toàn vẹn của mối hàn hay cấu trúc turbine của máy bay phản lực, ...



13 Tìm hiểu những thông tin về ứng dụng đồng vị phóng xạ và phản ứng hạt nhân, nhận xét vai trò của đồng vị phóng xạ và phản ứng hạt nhân trong các lĩnh vực y học, công nghiệp, khoa học, ...

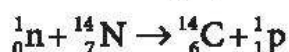


▲ Dược chất phóng xạ dùng trong lĩnh vực y học

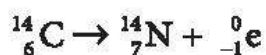
Sử dụng đồng vị phóng xạ trong theo dõi quá trình hấp thụ các nguyên tố trong phân bón hoặc làm thay đổi cấu trúc gene để tạo giống mới, năng suất và kinh tế hơn. Ngoài ra, còn sử dụng trong lĩnh vực xử lý nước thải, thăm dò vật chất gây ô nhiễm từ được phẩm phóng xạ; chẳng hạn, đồng vị tritium để đánh dấu, nghiên cứu nước thải và chất thải lỏng, đồng vị ^{54}Mn để đánh giá kim loại nặng trong nước thải, ...

Xác định niên đại cổ vật

^{14}C là đồng vị phóng xạ được dùng trong xác định niên đại cổ vật. Đồng vị ^{14}C được hình thành trong tự nhiên theo phản ứng sau:



Đồng vị ^{14}C trong tự nhiên phát phóng xạ β tạo ra ^{14}N :



Sau thời gian dài, quá trình tạo thành và phân rã ^{14}C cân bằng nhau, tỉ lệ ^{14}C trong tự nhiên là xác định. ^{14}C có mặt khắp nơi trong môi trường, chủ yếu ở dạng $^{14}\text{CO}_2$, thực vật quang hợp, hấp thụ CO_2 , chuyển hoá thành chất hữu cơ, làm thức ăn cho động vật, nên trong cơ thể động, thực vật luôn có đồng vị ^{14}C . Khi sinh vật chết, chúng ngừng hấp thụ ^{14}C và bắt đầu quá trình phân rã phóng xạ ^{14}C . Các nhà khoa học đã tính toán được khoảng thời gian để một nửa lượng ^{14}C bị phân huỷ, gọi là chu kì bán huỷ. Chu kì bán huỷ của ^{14}C là 5730 năm. Bằng cách đo tỉ lệ ^{14}C với tổng lượng carbon trong mẫu, so sánh với chu kì bán huỷ ^{14}C để xác định niên đại cổ vật.

Để xác định niên đại những mẫu vật như đá trong lớp địa chất của Trái Đất, người ta dựa vào tỉ lệ $^{238}\text{U}/^{206}\text{Pb}$ trong mẫu vật, chuỗi phân rã cuối cùng đồng vị ^{238}U là đồng vị bền ^{206}Pb . Chu kì bán huỷ của ^{238}U là 4,5 tỉ năm.

Sử dụng năng lượng của phản ứng hạt nhân

Năng lượng hạt nhân chủ yếu được sử dụng từ phản ứng phân hạch ^{235}U , năng lượng điện sử dụng trên thế giới từ phản ứng hạt nhân chiếm từ 10% – 15%. Ưu điểm lớn nhất của nguồn năng lượng này là không tạo ra khí thải nhà kính. Bên cạnh đó, cũng gây ra những hiểm hoạ về rò rỉ phóng xạ, tai nạn cháy nổ, một số quốc gia sử dụng trong mục đích chiến tranh, ...

Trong tương lai gần, con người có thể tạo ra và sử dụng nguồn năng lượng từ phản ứng nhiệt hạch.



14 Phương pháp dùng đồng vị ^{14}C để xác định tuổi của cổ vật, các mẫu hoá thạch có niên đại khoảng 75 000 năm, nhưng không dùng để xác định niên đại của các mẫu đá trong lớp địa chất Trái Đất, mà sử dụng đồng vị ^{238}U . Giải thích.



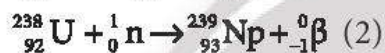
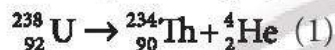
Hãy nêu một số vận dụng khác khi ứng dụng các đồng vị phóng xạ vào thực tiễn.



- Đồng vị phóng xạ ứng dụng trong nhiều lĩnh vực: y học, dược phẩm, công nghiệp, nông nghiệp, khoa học kĩ thuật, ...
- Sử dụng đồng vị ^{14}C để xác định niên đại các cổ vật và đồng vị ^{238}U để xác định thời gian tồn tại mẫu đá của Trái Đất.
- Năng lượng từ phản ứng hạt nhân là nguồn năng lượng không tạo ra khí thải gây hiệu ứng nhà kính.

BÀI TẬP

1. Cho 2 phản ứng hạt nhân:



Phản ứng hạt nhân nào là phóng xạ nhân tạo, phản ứng hạt nhân nào là phóng xạ tự nhiên?

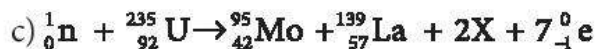
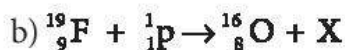
2. Viết các phương trình phản ứng hạt nhân cho quá trình:

a) Phát xạ 1 hạt β^+ của ${}_{6}^{11}\text{C}$.

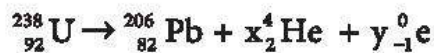
b) Phóng xạ 1 hạt β của ${}^{99}\text{Mo}$ (đồng vị molybdenum-99).

c) Phóng xạ 1 hạt α kèm theo γ từ ${}_{74}^{185}\text{W}$.

3. Tìm hạt X trong các phản ứng hạt nhân sau:



4. ${}^{238}\text{U}$ sau một loạt biến đổi phóng xạ α và β , tạo thành đồng vị ${}^{206}\text{Pb}$. Phương trình phản ứng hạt nhân xảy ra như sau:



(x, y là số lần phóng xạ α , β).

Xác định số lần phóng xạ α và β của ${}^{238}\text{U}$ trong phản ứng trên.

BÀI 3

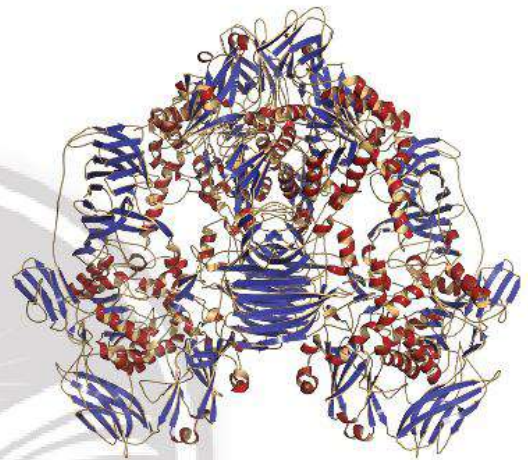
Năng lượng hoạt hoá của phản ứng hoá học

MỤC TIÊU

- Trình bày được khái niệm năng lượng hoạt hoá (theo khía cạnh ảnh hưởng đến tốc độ phản ứng).
- Nêu được ảnh hưởng của năng lượng hoạt hoá và nhiệt độ tới tốc độ phản ứng thông qua phương trình Arrhenius $k = A \times e^{(-E_a/RT)}$.
- Giải thích được vai trò của chất xúc tác.



Trong ruột non của hầu hết chúng ta đều có enzyme lactase, có tác dụng chuyển hoá lactose (còn gọi là đường sữa, $C_{12}H_{22}O_{11}$) có trong thành phần của sữa và các sản phẩm từ sữa thành đường glucose ($C_6H_{12}O_6$) và galactose ($C_6H_{12}O_6$) giúp cơ thể dễ dàng hấp thu; quá trình này đặc biệt quan trọng đối với sự phát triển và tăng cường miễn dịch cho trẻ nhỏ. Khi cơ thể thiếu hụt loại enzyme này, lactose không được tiêu hoá sẽ bị vi khuẩn lên men, sinh ra khí và gây đau bụng. Enzyme lactase đóng vai trò xúc tác trong quá trình chuyển hoá lactose. Xúc tác ảnh hưởng như thế nào đến tốc độ chuyển hoá giữa các chất?



▲ Enzyme lactase có trong ruột non của người

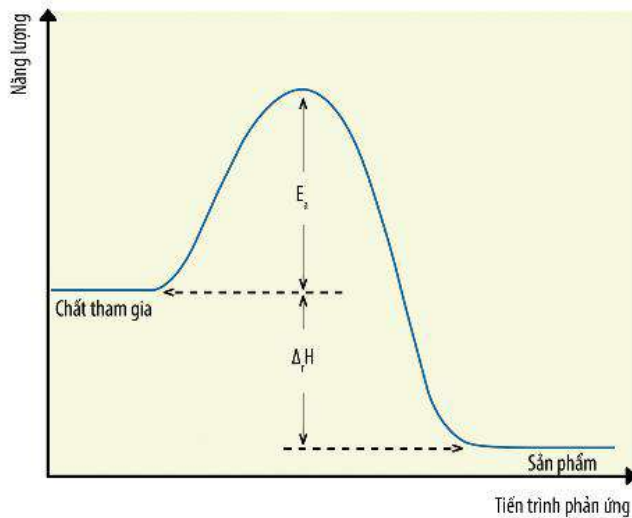
1 NĂNG LƯỢNG HOẠT HOÁ

► Tìm hiểu về năng lượng hoạt hoá

Để xảy ra phản ứng hoá học, các chất phản ứng phải va chạm với nhau, những va chạm đúng hướng và đủ năng lượng, sẽ tạo ra sản phẩm, gọi là **va chạm hiệu quả**; nếu các chất phản ứng không đủ năng lượng thì sẽ không xảy ra phản ứng. Năng lượng tối thiểu của chất phản ứng tạo ra được các va chạm hiệu quả, hình thành sản phẩm, gọi là **năng lượng hoạt hoá** (activation energy, kí hiệu là E_a).



1 Quan sát Hình 3.1, cho biết số va chạm hiệu quả và khả năng xảy ra phản ứng của chất tham gia thay đổi như thế nào khi giá trị của năng lượng hoạt hoá càng giảm.



▲ Hình 3.1. Quá trình biến đổi năng lượng trong phản ứng



2 Từ thông tin trong phần Khởi động, khi có chất xúc tác, năng lượng hoạt hoá của phản ứng chuyển hoá lactose tăng hay giảm? Giải thích.



Khả năng xảy ra của một phản ứng hoá học như thế nào khi năng lượng hoạt hoá của phản ứng rất lớn? Giải thích.



Năng lượng hoạt hoá là năng lượng tối thiểu mà chất phản ứng cần phải có để phản ứng có thể xảy ra.

2 ẢNH HƯỞNG CỦA NĂNG LƯỢNG HOẠT HOÁ VÀ NHIỆT ĐỘ ĐẾN TỐC ĐỘ PHẢN ỨNG

➤ Nghiên cứu ảnh hưởng của năng lượng hoạt hoá và nhiệt độ đến tốc độ phản ứng

Khi tăng nhiệt độ, sẽ có nhiều hơn số phân tử chất phản ứng va chạm hiệu quả với nhau.

Những nghiên cứu của Arrhenius (A-rê-ni-út) đã đưa ra phương trình kinh nghiệm biểu diễn mối quan hệ giữa nhiệt độ, năng lượng hoạt hoá và hằng số tốc độ phản ứng:

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

Trong đó:

k là hằng số tốc độ phản ứng

A là hằng số thực nghiệm Arrhenius

e là cơ số của logarit tự nhiên, $e = 2,7183$

E_a là năng lượng hoạt hoá (J/mol)

R là hằng số khí lí tưởng, $R = 8,314$ (J/mol·K)

T là nhiệt độ theo thang Kelvin (K)

Khi năng lượng hoạt hoá E_a lớn, hằng số tốc độ k nhỏ, tốc độ phản ứng giảm.

3 Dựa vào phương trình Arrhenius, tốc độ phản ứng thay đổi thế nào khi tăng nhiệt độ của phản ứng?

Ví dụ 1: Một phản ứng đơn giản xảy ra ở nhiệt độ 100 °C, trong điều kiện có xúc tác và không có xúc tác, năng lượng hoạt hoá của phản ứng lần lượt là: $E_{a1} = 25 \text{ kJ/mol}$, $E_{a2} = 50 \text{ kJ/mol}$. So sánh tốc độ phản ứng trong 2 điều kiện.

Hướng dẫn:

Ở nhiệt độ không đổi, năng lượng hoạt hoá của phản ứng trong 2 điều kiện là: $E_{a1} = 25 \text{ kJ/mol}$ và $E_{a2} = 50 \text{ kJ/mol}$.

Phương trình Arrhenius viết cho phản ứng trên trong 2 điều kiện:

$$k_1 = A \times e^{-\frac{E_{a1}}{RT}}$$

$$k_2 = A \times e^{-\frac{E_{a2}}{RT}}$$

$$\Rightarrow \frac{k_1}{k_2} = e^{\frac{E_{a2}-E_{a1}}{RT}} = e^{\frac{(50-25) \times 10^3}{8,314 \times 373}} = 3170,4$$

Vậy, khi năng lượng hoạt hoá giảm từ 50 kJ/mol về 25 kJ/mol, tốc độ phản ứng tăng 3170,4 lần.

Phương trình Arrhenius được viết lại cho 2 nhiệt độ T_1 và T_2 xác định, ứng với 2 hằng số tốc độ k_1 và k_2 :

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

Ví dụ 2: Phản ứng phân huỷ N_2O_5 xảy ra ở 45 °C theo phương trình phản ứng:



Tốc độ phản ứng thay đổi thế nào khi tăng nhiệt độ phản ứng lên 65 °C? Biết năng lượng hoạt hoá của phản ứng là 103,5 kJ/mol.

Hướng dẫn:

Phương trình Arrhenius viết cho phản ứng trên như sau:

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

$$\Rightarrow \ln \frac{k_2}{k_1} = \frac{103,5 \times 10^3}{8,314} \times \left(\frac{1}{45+273} - \frac{1}{65+273} \right) = 2,316$$

$$\Rightarrow \frac{k_2}{k_1} = 10,1.$$

Vậy, khi tăng nhiệt độ từ 45 °C lên 65 °C, tốc độ phản ứng tăng 10,1 lần.



4 Từ Ví dụ 2, tốc độ phản ứng phân huỷ N_2O_5 thay đổi như thế nào khi giảm nhiệt độ về 25 °C? Nhận xét sự ảnh hưởng của nhiệt độ đến tốc độ phản ứng.



- Phương trình kinh nghiệm Arrhenius biểu diễn sự ảnh hưởng của năng lượng hoạt hoá và nhiệt độ đến hằng số tốc độ phản ứng.
- Phản ứng có năng lượng hoạt hoá nhỏ hoặc nhiệt độ của phản ứng cao, tốc độ phản ứng càng lớn.



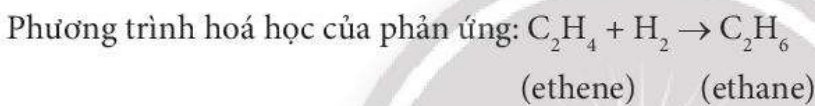
Một phản ứng có năng lượng hoạt hoá là 24 kJ/mol, so sánh tốc độ phản ứng ở 2 nhiệt độ là 27 °C và 127 °C.

3 VAI TRÒ CỦA CHẤT XÚC TÁC

► Tìm hiểu đặc điểm của chất xúc tác

Chất xúc tác làm tăng tốc độ của phản ứng hoá học, nhưng vẫn được bảo toàn về chất và lượng khi kết thúc phản ứng.

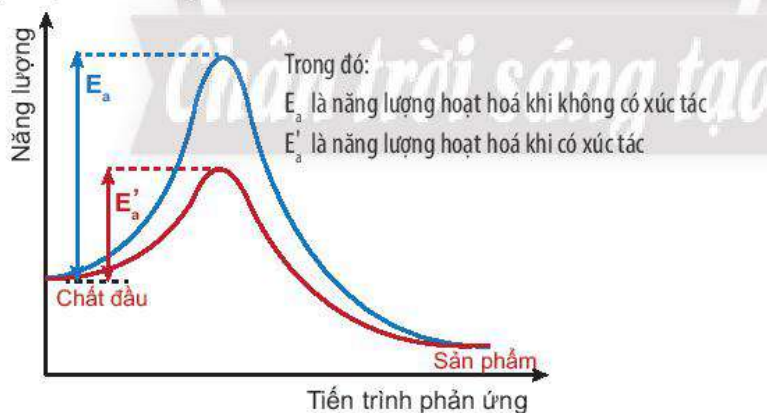
Ví dụ 3: Phản ứng cộng H₂ vào phân tử ethene (C₂H₄) xảy ra chậm trong điều kiện không có chất xúc tác, khi có mặt của kim loại Ni, Pd hoặc Pt, phản ứng xảy ra nhanh hơn.



Xúc tác sinh học, như enzyme, đóng vai trò quan trọng trong nhiều phản ứng, phổ biến cho các chất hữu cơ, môi trường hoạt động ở nhiệt độ không cao. Enzyme là các protein đặc trưng cho các phản ứng cụ thể. Enzyme tạo ra các tiến trình phản ứng có năng lượng hoạt hoá thấp hơn.



5 Nhận xét ảnh hưởng của enzyme đối với năng lượng hoạt hoá của phản ứng.



▲ Hình 3.2. Xúc tác làm giảm năng lượng hoạt hoá của phản ứng

Mỗi chất xúc tác thường phù hợp cho một số phản ứng theo hướng mong đợi (tính chọn lọc của xúc tác), điển hình là các xúc tác sinh học (enzyme).

Ví dụ 4: Enzyme amylase làm tăng tốc độ phản ứng thủy phân tinh bột thành đường glucose.



Trong công nghiệp hoá chất, người ta sử dụng chất xúc tác để tăng tốc độ của phản ứng, như phản ứng tổng hợp SO₃ từ SO₂ và O₂ dùng xúc tác V₂O₅. Hãy kể tên một số xúc tác cho các phản ứng mà em biết.

Entropy và biến thiên năng lượng tự do Gibbs

MỤC TIÊU

- Nêu được khái niệm về Entropy (S).
- Nêu được ý nghĩa của dấu và trị số của biến thiên năng lượng tự do Gibbs của phản ứng (ΔG) để dự đoán hoặc giải thích chiều hướng của một phản ứng hoá học.
- Tính được $\Delta_r G_T^\circ$ theo công thức $\Delta_r G_T^\circ = \Delta_r H_T^\circ - T \times \Delta_r S_T^\circ$ từ bảng cho sẵn các giá trị $\Delta_r H_T^\circ$ và S_T° của các chất.

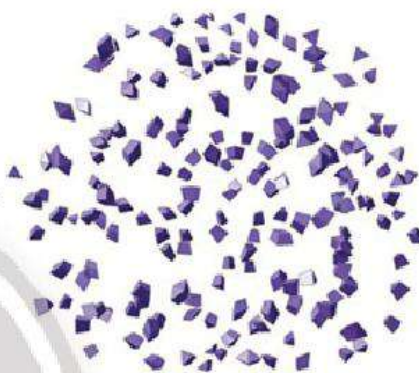


Nếu một lọ nước hoa được mở, chúng ta sẽ ngửi được mùi thơm từ xa, do các phân tử của thành phần nước hoa khuếch tán vào không khí, đó là *quá trình tự xảy ra*. Ngược lại, để thu hồi các phân tử nước hoa đó vào trong lọ như trạng thái ban đầu thì không thể thực hiện được, đó là *quá trình không tự xảy ra*. Các phản ứng hoá học cũng tương tự như vậy, có phản ứng tự xảy ra và có phản ứng không tự xảy ra. Các quá trình trong tự nhiên có xu hướng xảy ra theo chiều tăng độ mất trật tự (hỗn loạn) của các tiểu phân trong hệ, người ta gọi đó là quá trình tăng entropy. Entropy là gì? Entropy ảnh hưởng như thế nào đến chiều hướng diễn biến của phản ứng hoá học?



Trạng thái trật tự

Tăng entropy



Trạng thái mất trật tự

1 ENTROPY

Tìm hiểu khái niệm entropy

Để đánh giá mức độ mất trật tự của hệ, người ta sử dụng đại lượng **entropy** (kí hiệu là S). Khi hệ càng mất trật tự thì giá trị entropy của hệ càng lớn. Giá trị entropy của hệ phụ thuộc vào các yếu tố như: nhiệt độ, thể của hệ, ...



- 1 Tại sao khi tăng nhiệt độ lại làm tăng entropy của hệ?



▲ Ấm nước đun sôi khiến hơi nước thoát ra



- Entropy là đại lượng đặc trưng cho độ mất trật tự của một hệ ở một trạng thái và điều kiện xác định. Entropy càng lớn hệ càng mất trật tự.
- Đối với cùng một chất, khi chuyển từ thể rắn, lỏng sang khí hoặc tăng nhiệt độ thì entropy của chất sẽ tăng.
- Đơn vị của entropy thường là $\text{J/mol}\cdot\text{K}$.



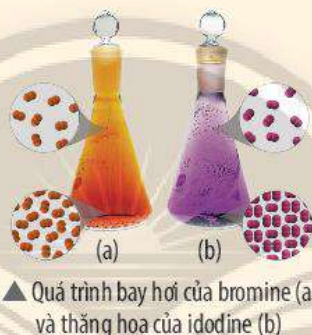
- 2 Khi chuyển thể của chất từ trạng thái rắn sang lỏng và khí thì entropy của chất tăng hay giảm? Giải thích.



Giá trị entropy S của một chất xác định ở điều kiện chuẩn (298 K, 1 bar) gọi là **entropy chuẩn** của chất đó và được kí hiệu S_{298}° ($\text{J/mol}\cdot\text{K}$)



Quan sát bình đựng $\text{Br}_2(l)$ đang bay hơi (a) và bình đựng $\text{I}_2(s)$ đang thăng hoa (b) trong hình bên và cho biết các quá trình trên làm tăng hay giảm entropy. Giải thích.



▲ Quá trình bay hơi của bromine (a) và thăng hoa của iodine (b)

2 BIẾN THIÊN ENTROPY TRONG PHẢN ỨNG HOÁ HỌC

➤ Tính biến thiên entropy của phản ứng hoá học

Biến thiên entropy của phản ứng hoá học, kí hiệu $\Delta_r S^{(*)}$, được tính bằng tổng entropy của các chất sản phẩm phản ứng (sp) trừ đi tổng entropy của các chất đầu phản ứng (cđ).

$$\Delta_r S = \sum S(\text{sp}) - \sum S(\text{cđ}) \quad (1)$$

Ở điều kiện chuẩn, ta có:

$$\Delta_r S_{298}^{\circ} = \sum S_{298}^{\circ}(\text{sp}) - \sum S_{298}^{\circ}(\text{cđ}) \quad (2)$$

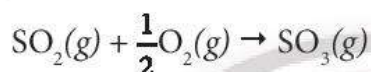
Giá trị entropy chuẩn của các chất được xác định bằng thực nghiệm.

(*) r là viết tắt của từ reaction: phản ứng

Bảng 4.1. Giá trị entropy chuẩn (J/mol·K) của một số chất (*)

Chất	S_{298}°	Chất	S_{298}°	Chất	S_{298}°
$H_2(g)$	130,60	$H_2O(g)$	188,72	C(graphite,s)	5,69
$O_2(g)$	205,03	$H_2O(l)$	69,94	Al(s)	28,32
$O_3(g)$	238,82	$N_2(g)$	191,49	$Al_2O_3(s)$	50,94
$SO_2(g)$	248,10	$NH_3(g)$	193,00	Fe(s)	27,30
$SO_3(g)$	256,66	$NO(g)$	210,65	$Fe_2O_3(s)$	87,40
$H_2S(g)$	205,60	$NO_2(g)$	239,90	$Fe_3O_4(s)$	145,30
$Cl_2(g)$	223,00	$CO(g)$	197,50	Cu(s)	33,10
$HCl(g)$	186,79	$CO_2(g)$	213,70	CuO(s)	42,63

Ví dụ 1: Dựa vào số liệu của entropy chuẩn trong Bảng 4.1, tính $\Delta_r S_{298}^{\circ}$ của phản ứng sau:



Áp dụng công thức (2) ta có:

$$\begin{aligned} \Delta_r S_{298}^{\circ} &= S_{298}^{\circ}(SO_3, g) - [S_{298}^{\circ}(SO_2, g) + \frac{1}{2} \times S_{298}^{\circ}(O_2, g)] \\ &= 256,66 - (248,10 + \frac{1}{2} \times 205,03) = -93,95 \text{ J/K} \end{aligned}$$



Xét phản ứng: $aA + bB \rightarrow cC + dD$

$$\Delta_r S_{298}^{\circ} = c \times S_{298}^{\circ}(C) + d \times S_{298}^{\circ}(D) - a \times S_{298}^{\circ}(A) - b \times S_{298}^{\circ}(B)$$



3 BIẾN THIÊN NĂNG LƯỢNG TỰ DO GIBBS

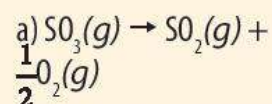
► Dự đoán hoặc giải thích chiều hướng của một phản ứng hoá học dựa vào biến thiên năng lượng tự do Gibbs

Bằng thực nghiệm, xác định được có hai yếu tố quyết định một quá trình hoá học có tự xảy ra hay không:

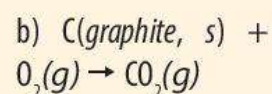
- $\Delta H < 0$: năng lượng của hệ giảm, trở thành hệ bền vững hơn (đó là các phản ứng tỏa nhiệt).
- $\Delta S > 0$: hệ chuyển từ trạng thái có độ mất trật tự thấp sang trạng thái có độ mất trật tự cao hơn (độ tự do cao hơn).



Dựa vào số liệu Bảng 4.1, hãy tính biến thiên entropy chuẩn của các phản ứng sau:



và so sánh giá trị $\Delta_r S_{298}^{\circ}$ của phản ứng này với phản ứng ở ví dụ 1. Giải thích.



Giải thích tại sao giá trị này lại lớn hơn 0 không đáng kể.



- 3 Hoà tan vôi sống (CaO) vào nước, phản ứng tỏa nhiệt hay thu nhiệt? Dự đoán dấu ΔH của phản ứng.

(*) Nguồn: Martin S. Silberberg, *Principles of General Chemistry* (2013, third edition), The McGraw-Hill Companies, Inc., New York, USA.

Khi xét chiều tự xảy ra của phản ứng, phải xem xét cả hai yếu tố ΔH và ΔS . Đại lượng kết hợp hai yếu tố này là **năng lượng tự do Gibbs** (ở điều kiện nhiệt độ, áp suất không đổi, kí hiệu là G). Ở điều kiện chuẩn, biến thiên năng lượng tự do Gibbs ($\Delta_r G_T^\circ$) là đại lượng phụ thuộc vào các yếu tố $\Delta_r H_T^\circ$, $\Delta_r S_T^\circ$ và T theo công thức:

$$\Delta_r G_T^\circ = \Delta_r H_T^\circ - T \times \Delta_r S_T^\circ \quad (3)$$

Trong đó:

$\Delta_r H_T^\circ$ là biến thiên enthalpy chuẩn của phản ứng ở nhiệt độ T

$\Delta_r S_T^\circ$ là biến thiên entropy chuẩn của phản ứng ở nhiệt độ T

T là nhiệt độ (theo thang Kelvin) tại đó xảy ra phản ứng

$\Delta_r G_T^\circ$ là biến thiên năng lượng tự do Gibbs chuẩn của phản ứng ở nhiệt độ T

Nếu đơn vị của ΔH là kJ/mol, của ΔS là kJ/ mol·K, thì đơn vị của ΔG là kJ/mol.

Dựa vào dấu của $\Delta_r G_T^\circ$ có thể dự đoán hoặc giải thích được chiều hướng của một phản ứng hoá học ở nhiệt độ T như sau:

- $\Delta_r G_T^\circ < 0$: phản ứng tự xảy ra ở điều kiện chuẩn, nhiệt độ T .
- $\Delta_r G_T^\circ > 0$: phản ứng không tự xảy ra ở điều kiện chuẩn, nhiệt độ T .
- $\Delta_r G_T^\circ = 0$: phản ứng đạt trạng thái cân bằng (phản ứng đồng thời xảy ra theo hai chiều ngược nhau với tốc độ như nhau).

► Tính biến thiên năng lượng tự do Gibbs ở điều kiện chuẩn

Sử dụng công thức (3), chúng ta có thể tính được biến thiên năng lượng tự do Gibbs ở điều kiện chuẩn.

Ví dụ 2: Xét phản ứng nung vôi



Biết các số liệu sau:

Chất	$\text{CaCO}_3(s)$	$\text{CaO}(s)$	$\text{CO}_2(g)$
S_{298}° (J/mol·K)	92,9	38,2	213,7
$\Delta_r H_{298}^\circ$ (kJ/mol)	-1206,9	-635,1	-393,5



a) Hãy cho biết ở điều kiện chuẩn và 25 °C, phản ứng nung vôi có tự xảy ra không? Tại sao?

b) Ở nhiệt độ nào thì phản ứng trên có thể tự xảy ra trong điều kiện chuẩn? Giả sử $\Delta_r H^\circ$ và $\Delta_r S^\circ$ không thay đổi theo nhiệt độ.

Hướng dẫn:

a) Ta có: $\Delta_r S_{298}^\circ = (38,2 + 213,7) - 92,9 = 158,9 \text{ J/K}$
 $\Delta_r H_{298}^\circ = (-635,1 - 393,5) - (-1206,9) = 178,3 \text{ kJ}$
 Ta có $\Delta_r G_{298}^\circ = \Delta_r H_{298}^\circ - 298 \times \Delta_r S_{298}^\circ$
 $= 178,3 - 298 \times 158,9 \times 10^{-3} = 131 \text{ kJ}$

Vì $\Delta_r G_{298}^\circ > 0 \Rightarrow$ chứng tỏ phản ứng nung vôi ở điều kiện chuẩn và 25 °C không thể xảy ra được.

b) Muốn phản ứng trên xảy ra ta phải có:

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

Ta có: $\Delta_r G_T^\circ = 178,3 \times 10^3 - T \times 158,8 < 0$
 $\Rightarrow T > \frac{178,3 \times 10^3}{158,8} \approx 1123 \text{ K}$

Như vậy, muốn phản ứng nung vôi xảy ra trong điều kiện chuẩn phải duy trì ở nhiệt độ lớn hơn $1123 - 273 = 850 \text{ }^\circ\text{C}$.



- Ở nhiệt độ T, một phản ứng có $\Delta_r G_T^\circ$ càng âm thì phản ứng tự xảy ra ở điều kiện chuẩn càng thuận lợi và ngược lại.
- $\Delta_r G_T^\circ$ được tính theo công thức: $\Delta_r G_T^\circ = \Delta_r H_T^\circ - T \times \Delta_r S_T^\circ$



Khi cho mẫu nhỏ sodium (Na) vào chậu thủy tinh chứa nước, mẫu sodium tan, có bọt khí xuất hiện, làm tăng nhiệt độ của nước trong chậu. Giải thích tại sao phản ứng này lại tự xảy ra một cách dễ dàng.

BÀI TẬP

1. Quan sát hình dưới: Khi trộn nước và propanol (bên trái) thu được dung dịch (bên phải). Hãy cho biết quá trình đó sẽ làm tăng hay giảm entropy.



2. Em hãy dự đoán trong các phản ứng sau, phản ứng nào có $\Delta S > 0$, $\Delta S < 0$ và $\Delta S \approx 0$. Giải thích.
- $C(s) + CO_2(g) \rightarrow 2CO(g)$
 - $CO(g) + \frac{1}{2}O_2(g) \rightarrow CO_2(g)$
 - $H_2(g) + Cl_2(g) \rightarrow 2HCl(g)$
 - $S(s) + O_2(g) \rightarrow SO_2(g)$
 - $Zn(s) + 2HCl(aq) \rightarrow ZnCl_2(aq) + H_2(g)$
3. Cho phản ứng hoá học: $CO_2(g) \rightarrow CO(g) + \frac{1}{2}O_2(g)$ và các dữ kiện:

Chất	$O_2(g)$	$CO_2(g)$	$CO(g)$
$\Delta_f H_{298}^\circ$ (kJ/mol)	0	-393,51	-110,05
S_{298}° (J/mol·K)	205,03	213,69	-197,50

- Ở điều kiện chuẩn phản ứng trên có tự xảy ra được không?
- Nếu coi $\Delta_f H^\circ$ và $\Delta_f S^\circ$ không phụ thuộc vào nhiệt độ, hãy cho biết ở nhiệt độ nào phản ứng trên có thể tự xảy ra ở điều kiện chuẩn?


HOÁ HỌC TRONG VIỆC PHÒNG CHỐNG CHÁY, NỔ



Sơ lược về phản ứng cháy và nổ

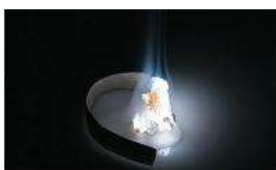
MỤC TIÊU

- Nêu được khái niệm, đặc điểm của phản ứng cháy.
- Nêu được một số ví dụ về sự cháy các chất vô cơ và hữu cơ.
- Nêu được điều kiện cần và đủ để phản ứng cháy xảy ra.
- Nêu được khái niệm, đặc điểm cơ bản của phản ứng nổ.
- Nêu được khái niệm phản ứng nổ vật lí và nổ hoá học.
- Trình bày được khái niệm về “nổ bụi”.
- Trình bày được những sản phẩm độc hại thường sinh ra trong các phản ứng cháy và tác hại của chúng với con người.

 Cháy, nổ là các hiện tượng thường gặp trong đời sống. Các hiện tượng này đã được các nhà khoa học quan tâm, nghiên cứu để phục vụ cho cuộc sống, đồng thời hạn chế những thiệt hại do chúng gây ra. Vậy phản ứng cháy, nổ là gì? Chúng có đặc điểm như thế nào? Khi nào phản ứng cháy, nổ xảy ra?

1 PHẢN ỨNG CHÁY

Trình bày khái niệm, đặc điểm của phản ứng cháy



a) Magnesium cháy trong không khí



b) Than đá (carbon) cháy trong không khí



c) Gas (thành phần chính là C_3H_8 và C_4H_{10}) cháy trong không khí

▲ Hình 5.1. Phản ứng cháy của một số chất vô cơ và hữu cơ

Quá trình cháy là một hoặc nhiều phản ứng hoá học xảy ra nối tiếp nhau. Quá trình này sẽ tiếp diễn nếu nhiên liệu vẫn còn và có nguồn cung cấp oxygen liên tục.



Phản ứng cháy là phản ứng oxi hoá – khử giữa chất cháy và chất oxi hoá, có toả nhiệt và phát ra ánh sáng.



1 Quan sát Hình 5.1, nêu hiện tượng và viết phương trình hoá học xảy ra. Xác định vai trò của các chất trong các phản ứng hoá học này và cho biết đây là loại phản ứng hoá học nào.

2 Các phản ứng cháy nêu trên có những đặc điểm chung nào?



Nêu một số ví dụ về phản ứng cháy.

➤ Tìm hiểu điều kiện cần và đủ để phản ứng cháy xảy ra



▲ Hình 5.2. Tam giác cháy (fire triangle)



a) Đốt giấy bằng kính lúp dưới ánh sáng mặt trời



b) Đốt giấy bằng nguồn lửa trực tiếp

▲ Hình 5.3. Giấy cháy ở những điều kiện khác nhau



Điều kiện cần và đủ để phản ứng cháy xảy ra:

- Điều kiện cần: (1) Chất cháy; (2) Chất oxi hoá; (3) Nguồn nhiệt.
- Điều kiện đủ: (1) Nồng độ oxygen trong không khí phải lớn hơn 14% thể tích (ngoại trừ đối với một số chất dễ cháy, gây nổ mạnh); (2) Nguồn nhiệt phải đạt tới giới hạn bắt cháy của chất cháy; (3) Thời gian tiếp xúc của 3 điều kiện cần phải đủ lâu để xuất hiện sự cháy.



2 PHẢN ỨNG NỔ

➤ Trình bày khái niệm, đặc điểm cơ bản của phản ứng nổ

Khi phản ứng nổ xảy ra, năng lượng được giải phóng một cách đột ngột dưới áp lực rất cao, tăng nhanh, còn được gọi là sóng nổ hoặc sóng xung kích. Sóng xung kích gây ra thiệt hại lớn cho môi trường xung quanh nó.



▲ Hình 5.4. Vụ nổ bình gas



▲ Hình 5.5. Vụ nổ bom nguyên tử ở Nagasaki, Nhật Bản vào năm 1945



3 Dựa vào Hình 5.2, kể tên chất cháy, chất oxi hoá và nguồn nhiệt của các phản ứng cháy có trong Hình 5.1.

4 Quan sát Hình 5.3, hãy cho biết trường hợp nào dễ bắt cháy hơn. Phản ứng cháy xảy ra phụ thuộc vào yếu tố nào?



Con người thở ra CO_2 không có khả năng gây cháy, nhưng vì sao khi ta thổi vào bếp than hồng, lại có thể làm than hồng bùng cháy?

5 Từ việc quan sát Hình 5.4 và 5.5, hãy mô tả hiện tượng và so sánh mức độ của mỗi vụ nổ.

6 Quan sát Hình 5.5, hãy cho biết hậu quả để lại sau vụ nổ bom nguyên tử.



Phản ứng nổ là phản ứng xảy ra với tốc độ rất lớn kèm theo sự tăng thể tích đột ngột và toả lượng nhiệt lớn.

➤ Phân loại phản ứng nổ

Phản ứng nổ vật lí xảy ra do vật chất bị nén dưới áp suất cao trong một thể tích, làm thể tích được giải phóng đột ngột, gây ra tiếng nổ.

Phản ứng nổ hoá học xảy ra do sự giải phóng năng lượng đột ngột và rất nhanh trong phản ứng hoá học (có đủ điều kiện của một phản ứng cháy), làm hỗn hợp khí xung quanh giãn nở nhanh chóng dưới áp suất lớn, sinh công và gây nổ.



a) Nổ lốp xe



b) Pháo hoa



c) Vụ nổ ở lò phản ứng hạt nhân

▲ Hình 5.6. Hình ảnh các loại phản ứng nổ

Ngoài phản ứng nổ vật lí và nổ hoá học, còn một loại phản ứng nổ là nổ hạt nhân, xảy ra do phản ứng nhiệt hạch hoặc phản ứng phân hạch, gây ra những hậu quả vô cùng nặng nề đến đời sống của con người.



Căn cứ vào tính chất nổ, phản ứng nổ được chia thành 2 loại chính: nổ vật lí, nổ hoá học.

➤ Trình bày khái niệm về “nổ bụi”

“Nổ bụi” là vụ nổ gây ra bởi quá trình bốc cháy nhanh của các hạt bụi mịn phân tán trong không khí bên trong một không gian hạn chế, tạo ra sóng xung kích. “Nổ bụi” là một trường hợp của nổ hoá học.



Nêu một số ví dụ về phản ứng nổ hoặc một số vụ nổ lớn trong nước và trên thế giới.



7 So sánh điểm giống và khác nhau giữa phản ứng nổ vật lí và nổ hoá học.

8 Quan sát Hình 5.6, cho biết hiện tượng nổ nào thuộc loại phản ứng nổ vật lí hoặc nổ hoá học.



Nêu một số ví dụ về nổ vật lí và nổ hoá học.



▲ Hình 5.7. Một vụ “nổ bụi” trong nhà xưởng



▲ Hình 5.8. Ngũ giác nổ bụi (dust explosion pentagon)

“Nổ bụi” có thể làm hỏng nghiêm trọng các công trình, thiết bị và khiến con người bị thương bởi áp suất cao, các vật thể và mảnh vụn bay trong vụ nổ cũng như hiệu ứng sóng xung kích của nó. Sức nóng toả ra có thể gây cháy và bỏng da nghiêm trọng nếu không được bảo vệ. Sự giảm đột ngột oxygen trong không gian nổ có thể gây ra ngạt khí.



Nổ bụi là vụ nổ gây bởi các hạt bụi rắn có kích thước hạt nhỏ (hầu hết các vật liệu hữu cơ rắn như bột nhựa, bột đường, bột ngũ cốc cũng như bột kim loại,...) với nồng độ đủ lớn, phân tán trong không khí, có khả năng tác dụng với oxygen và toả nhiệt mạnh trong không khí bên trong một không gian hạn chế.

3 NHỮNG SẢN PHẨM ĐỘC HẠI THƯỜNG SINH RA TRONG CÁC PHẢN ỨNG CHÁY

► **Tim hiểu tác hại của những sản phẩm độc hại thường sinh ra trong các phản ứng cháy đối với con người**

Sản phẩm sinh ra từ quá trình cháy phụ thuộc vào bản chất của chất cháy, chất oxi hoá và đặc điểm quá trình cháy (hoàn toàn hay không hoàn toàn).

Ví dụ: Các đám cháy có thể hình thành các chất khí như carbon monoxide (CO), hydrogen sulfide (H_2S), nitrogen dioxide (NO_2) hoặc sulfur dioxide (SO_2) gây ảnh hưởng đến khả năng hô hấp của con người.

Nếu vật liệu cháy có chứa nitrogen (như các vật dụng bằng len, nylon, polyacrylonitrile, melamine-formaldehyde, ...), khi cháy sẽ sinh ra khói chứa hydrogen cyanide (HCN) rất độc hại, độc hơn cả khí CO (một loại khí rất độc với con người; ở nồng độ 1,28% CO, con người bất tỉnh sau 2 – 3 nhịp thở, tử vong sau 2 – 3 phút).



9 Quan sát Hình 5.8, cho biết có bao nhiêu yếu tố để hình thành “nổ bụi”. Đó là những yếu tố gì?



Năm 2007, tại một phân xưởng sản xuất bột mì ở tỉnh Bình Dương đã xảy ra vụ nổ lớn khiến 5 công nhân bị bỏng nặng. Vụ nổ xảy ra sau khi các công nhân hàn để bảo trì lại bể chứa bột mì. Hiện tượng này có phải nổ bụi không? Giải thích.

10 Hãy nêu những tác hại của các sản phẩm độc hại thường sinh ra trong các phản ứng cháy đối với con người.



Nếu vật liệu cháy có chứa thành phần chlorine, bromine hoặc fluorine (như poly(vinyl chloride), neoprene, polytetrafluoroethylene, poly(vinyl fluoride), ...), khi cháy sẽ sinh ra khói chứa hydrogen chloride (HCl), hydrogen bromide (HBr) và hydrogen fluoride (HF) gây ảnh hưởng lớn đến các hệ cơ quan hô hấp và hệ thống cơ quan thần kinh của con người.



Tại sao nhân viên cứu hoả phải sử dụng đồ bảo hộ chuyên dụng?



Hầu hết những sự cố cháy, nổ đều gây ô nhiễm môi trường do các chất độc hại khuếch tán vào không khí hoặc nguồn nước, thấm thấu vào đất, gây nguy hại tới sinh vật và con người trực tiếp hoặc lâu dài.

BÀI TẬP

1. Hãy nêu đặc điểm của phản ứng cháy.
2. Nổ quả bóng bay do bơm quá căng là hiện tượng nổ
A. vật lí. B. hoá học.
C. hạt nhân. D. sinh học.
3. Viết phương trình hoá học khi đốt cháy hoàn toàn một số nhiên liệu sau: khí thiên nhiên (thành phần chính là CH_4), cồn ($\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$), gỗ ($(\text{C}_6\text{H}_{10}\text{O}_5)_n$).
4. Trung tâm Chống độc, Bệnh viện Bạch Mai đã tiếp nhận một số bệnh nhân trong tình trạng hôn mê sâu, phải thở máy và tổn thương thần kinh. Nguyên nhân được xác định là đốt than trong phòng kín. Hãy giải thích vì sao khi đốt than trong phòng ngủ để sưởi ấm có thể gây hôn mê, bại não, thậm chí tử vong.



BÀI

6

Điểm chớp cháy, nhiệt độ tự bốc cháy và nhiệt độ cháy

MỤC TIÊU

- Nêu được khái niệm về điểm chớp cháy.
- Nêu được khái niệm về nhiệt độ tự bốc cháy.
- Trình bày được việc sử dụng điểm chớp cháy để phân biệt chất lỏng dễ cháy và có thể gây cháy.
- Trình bày được khái niệm nhiệt độ ngọn lửa.
- Phân tích được dấu hiệu để nhận biết về những nguy cơ và cách giảm nguy cơ gây cháy, nổ; cách xử lý khi có cháy, nổ.



Hoả hoạn do thiên tai hoặc tai nạn luôn thường trực trong đời sống con người và thường gây ra hậu quả rất nặng nề, ảnh hưởng lớn đến sức khoẻ, tính mạng và tài sản của con người. Chúng ta hoàn toàn có thể hạn chế, kiểm soát được vấn đề hoả hoạn và có cách ứng phó thích hợp khi xảy ra cháy, nổ nếu có những hiểu biết nhất định về các thông số đánh giá khả năng gây cháy của nhiên liệu, vật liệu cũng như phân tích được dấu hiệu để nhận biết về những nguy cơ và cách giảm nguy cơ cháy, nổ. Những chỉ số nào được dùng để cảnh báo nguy cơ cháy, nổ của một chất lỏng dễ cháy và có thể gây cháy?



▲ Hoả hoạn gây thiệt hại về tính mạng con người và tài sản



1 ĐIỂM CHỚP CHÁY, NHIỆT ĐỘ TỰ BỐC CHÁY, NHIỆT ĐỘ NGỌN LỬA

Trình bày khái niệm về điểm chớp cháy

Để xác định nhiệt độ chớp cháy của một chất cháy ở trạng thái lỏng, người ta đặt chất lỏng trong một cốc bằng thép (theo phương pháp sử dụng thiết bị cốc hồ Cleveland, TCVN 7498 : 2005). Cốc được nung nóng để nhiệt độ tăng dần với một tốc độ xác định. Khi nhiệt độ của nhiên liệu tăng dần thì tốc độ hoá hơi của nó cũng tăng theo. Nếu đưa nguồn lửa đến miệng cốc thì ngọn lửa sẽ xuất hiện kèm theo tiếng nổ nhẹ, sau đó ngọn lửa tắt ngay. Như vậy, nhiệt độ tối thiểu mà tại đó ngọn lửa xuất hiện khi tiếp xúc với nguồn phát tia lửa, sau đó tắt ngay gọi là **điểm chớp cháy** của nhiên liệu.



▲ Hình 6.1. Thiết bị xác định điểm chớp cháy: cốc hồ Cleveland tự động

Bảng 6.1. Điểm chớp cháy của một số nhiên liệu lỏng^(*)

Nhiên liệu	Điểm chớp cháy (°C)	Nhiên liệu	Điểm chớp cháy (°C)
Xăng	-43	Biodiesel	130
Propane	-105	Dầu hoả	38 – 72
Pentane	-57	Ethanol	13
Diethyl ether	-45	Methanol	11
Acetone	-20	Isopropyl alcohol	12
Benzene	-11	Pyridine	20
Isooctane	-12	Xylene	27 – 32
n-Hexane	-22	Toluene	4

Bảng 6.2. Điểm chớp cháy của một số loại tinh dầu^(**)

Tinh dầu	Điểm chớp cháy (°C)	Tinh dầu	Điểm chớp cháy (°C)
Thần cây đinh hương	104	Nhựa thông	38
Trà	53,5	Cam	55
Dứa	52	Sả chanh	50

Điểm chớp cháy hay nhiệt độ chớp cháy là một trong những thông số quan trọng để đánh giá khả năng gây cháy của vật liệu. Đây là tiêu chí quan trọng đánh giá được sự an toàn cũng như nguy cơ hoả hoạn của từng loại nhiên liệu.

Chất lỏng có điểm chớp cháy nhỏ hơn 37,8 °C được gọi là *chất lỏng dễ cháy*. Trong khi các chất lỏng có điểm chớp cháy trên nhiệt độ đó gọi là *chất lỏng có thể gây cháy*.



Điểm chớp cháy là nhiệt độ thấp nhất ở áp suất của khí quyển mà một chất lỏng hoặc vật liệu dễ bay hơi tạo thành lượng hơi đủ để bốc cháy trong không khí khi tiếp xúc nguồn lửa.

► Trình bày khái niệm về nhiệt độ tự bốc cháy

Khi rải bột chì (Pb) đen mịn lên một tờ giấy đặt trong bóng tối sẽ thấy những chấm lửa lốm đốm. Trong điều kiện thời tiết khô hanh, bột chì có thể bùng cháy. Tương tự, nhờ khả năng tự bốc cháy trong không khí, bột sắt mịn cũng từng được sử dụng làm vật liệu dẫn hoả.

^(*) Nguồn: R. Kohli, K. L. Mittal, J. B. Durkee (2016), *Developments in surface contamination and cleaning – Chapter 11 – Cleaning with solvents*, 479 – 577 (1), Elsevier Inc.

^(**) Nguồn: S. M. A. Rahman, T. J. Rainey, Z. D. Ristovski, A. Dowell, M. A. Islam, M. N. Nabi, R. J. Brown (2018), *Review on the use of essential oils in compression ignition engines*, 157 – 182 (1), Springer Nature Singapore Pte Ltd.



- 1 Quan sát Bảng 6.1, cho biết nhiên liệu nào là chất lỏng dễ cháy và chất lỏng có thể gây cháy.
- 2 Giải thích vì sao xăng dễ bốc cháy hơn dầu hoả.



Điểm chớp cháy được áp dụng trong các quy định an toàn về vận chuyển. Cục Hàng không Việt Nam đã có quy định: Tinh dầu là hàng hoá nguy hiểm nếu có điểm chớp cháy nhỏ hơn 60 °C. Quan sát Bảng 6.2, hãy cho biết các hãng hàng không có thể từ chối vận chuyển các loại tinh dầu nào.

- 3 Hãy phân biệt hai khái niệm "điểm chớp cháy" và "nhiệt độ tự bốc cháy".

Từ thực nghiệm cho thấy, kim loại thường phản ứng tương đối chậm với oxygen trong không khí và toả nhiệt. Nhiệt lượng sinh ra tích dần ở bề mặt kim loại khiến nhiệt độ tăng lên. Khi kim loại ở dạng bụi mịn, diện tích bề mặt tiếp xúc của kim loại với oxygen trong không khí tăng lên và tốc độ oxi hoá cũng tăng. Khi gom các hạt bụi mịn kim loại lại với nhau, nhiệt lượng của phản ứng oxi hoá kim loại thoát ra đủ lớn, làm các hạt bụi mịn đạt đến nhiệt độ tự bốc cháy và kim loại sẽ tự bốc cháy.

Bảng 6.3. Nhiệt độ tự bốc cháy của một số nhiên liệu^(*)

Nhiên liệu	Nhiệt độ tự bốc cháy (°C)	Nhiên liệu	Nhiệt độ tự bốc cháy (°C)
Benzene	560	Methane	540
Propane	450	Diethyl ether	160
Methanol	385	Hydrogen	400
Ethanol	558	Butane	405



Nhiệt độ tự bốc cháy là nhiệt độ thấp nhất mà tại đó, chất cháy tự cháy mà không cần tiếp xúc với nguồn lửa tại điều kiện áp suất khí quyển.

► Trình bày khái niệm nhiệt độ ngọn lửa

Nhiệt độ ngọn lửa cho biết mức độ toả nhiệt của phản ứng cháy. Phản ứng đốt cháy nhiên liệu thường toả nhiệt mạnh và tạo ra nhiệt độ ngọn lửa cao, được sử dụng trong sản xuất và đời sống. Tuy nhiên, nhiệt độ ngọn lửa càng cao thì nguy cơ bùng phát đám cháy càng mạnh trong các sự cố hoả hoạn, gây nguy hiểm cũng như thiệt hại lớn về người và tài sản.

Nhiệt độ ngọn lửa thường được xác định bằng tính toán lí thuyết trong điều kiện thực hiện phản ứng đốt cháy chất cháy ở áp suất khí quyển và không có sự trao đổi nhiệt giữa hệ phản ứng và môi trường.

Bảng 6.4. Nhiệt độ ngọn lửa (K) của một số nhiên liệu ở áp suất 1 atm^(*)

Nhiên liệu	Chất oxi hoá	Nhiệt độ ngọn lửa (K)	Nhiên liệu	Chất oxi hoá	Nhiệt độ ngọn lửa (K)
Acetylene	Không khí	2600	Methane	Không khí	2210
Acetylene	Oxygen	3410	Methane	Oxygen	3030
Carbon monoxide	Không khí	2400	Hydrogen	Không khí	2400
Carbon monoxide	Oxygen	3220	Hydrogen	Oxygen	3080

^(*) Nguồn: I. Glassman, R. A. Yetter (2008), *Combustion*, 722 – 761(4), Elsevier Inc.



4 Hãy cho biết nhiên liệu nào trong Bảng 6.3 có khả năng gây cháy, nổ cao nhất.



Hãy giải thích vì sao than chất thành đồng lớn có thể tự bốc cháy.

5 Phân biệt hai khái niệm “điểm chớp cháy” và “nhiệt độ ngọn lửa”.

6 Vì sao nhiên liệu cháy trong không khí tạo ra nhiệt độ ngọn lửa thấp hơn so với cháy trong oxygen tinh khiết?



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

2 NHỮNG NGUY CƠ VÀ CÁCH GIẢM NGUY CƠ GÂY CHÁY, NỔ; CÁCH XỬ LÝ KHI CÓ CHÁY, NỔ

➤ Phân tích được dấu hiệu để nhận biết về những nguy cơ và cách giảm nguy cơ gây cháy, nổ; cách xử lý khi có cháy, nổ

Điều kiện cần và đủ để xuất hiện cháy, nổ là có đủ ba yếu tố: nguồn nhiệt, chất cháy và chất oxi hoá.



▲ Hình 6.2. Một số nguồn nhiệt trong đời sống và sản xuất



▲ Hình 6.3. Một số nguồn phát sinh chất cháy



Bình chứa oxygen



NH_4NO_3

▲ Hình 6.4. Một số nguồn phát sinh chất oxi hoá

Thông thường, có 4 dấu hiệu phổ biến để nhận biết một đám cháy đang xảy ra, đó là mùi, khói, ánh lửa và tiếng nổ được tạo ra từ đám cháy. Ngoài những dấu hiệu trên, có thể nhận biết đám cháy thông qua tín hiệu cảnh báo sớm từ thiết bị báo cháy tự động hoặc tiếng ồn (tiếng la hét, còi hoặc keng báo động, ...).



7 Hãy kể tên nguồn nhiệt, nguồn phát sinh chất cháy và nguồn phát sinh chất oxi hoá có trong các hình 6.2, 6.3 và 6.4.



Hãy nêu một số biện pháp giảm thiểu nguy cơ cháy nổ từ các vật dụng, thiết bị trong gia đình.



Hãy mô tả cấu tạo của một loại bình chữa cháy thông dụng và cho biết cách sử dụng loại bình này.



▲ Bình chữa cháy dạng bột



▲ Hình 6.5. Tiêu lệnh chữa cháy do Cục cảnh sát phòng cháy, chữa cháy ban hành



8 Quan sát Hình 6.5, hãy mô tả chi tiết quy trình 4 bước theo tiêu lệnh chữa cháy khi xảy ra hoả hoạn.

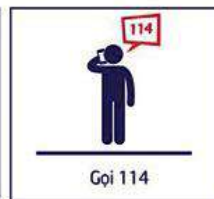
Tiêu lệnh chữa cháy là những quy định về an toàn phòng cháy, chữa cháy và những chỉ dẫn, hướng dẫn các bước nhằm chế ngự ngọn lửa, tránh lan rộng cũng như giữ an toàn tính mạng cho mọi người mỗi khi có hoả hoạn.



- Để đề phòng nguy cơ gây cháy, nổ cần kiểm soát chặt chẽ các nguồn nhiệt, chất cháy, chất oxi hoá, cũng như cần chuẩn bị sẵn sàng các phương tiện, nhân lực và không gian để phòng bị khi xảy ra sự cố cháy, nổ.
- Khi xảy ra hoả hoạn, cần bình tĩnh để xử lý kịp thời và đúng quy trình, tuân theo các bước được hướng dẫn trong tiêu lệnh chữa cháy để hạn chế tối đa những thiệt hại gây ra.



CÁCH THOÁT HIỂM TRONG TRƯỜNG HỢP XẢY RA HOẢ HOẠN



BÀI TẬP

1. Điểm chớp cháy là

- A. nhiệt độ thấp nhất ở áp suất của khí quyển mà một hợp chất hữu cơ hoặc vật liệu dễ bay hơi tạo thành lượng hơi đủ để bốc cháy trong không khí khi gặp nguồn lửa.
- B. nhiệt độ cao nhất ở áp suất của khí quyển mà một hợp chất hữu cơ hoặc vật liệu dễ bay hơi tạo thành lượng hơi đủ để bốc cháy trong không khí khi gặp nguồn lửa.
- C. nhiệt độ thấp nhất ở áp suất của khí quyển mà một hợp chất hữu cơ hoặc vật liệu dễ bay hơi tạo thành lượng hơi đủ để bốc cháy trong không khí.
- D. nhiệt độ cao nhất ở áp suất của khí quyển mà một hợp chất hữu cơ hoặc vật liệu dễ bay hơi tạo thành lượng hơi đủ để bốc cháy trong không khí.

2. Nhiệt độ tự bốc cháy là

- A. nhiệt độ cao nhất mà tại đó, chất cháy tự cháy mà không cần tiếp xúc với nguồn nhiệt tại điều kiện áp suất khí quyển.
- B. nhiệt độ thấp nhất mà tại đó, chất cháy tự cháy mà không cần tiếp xúc với nguồn nhiệt tại điều kiện áp suất khí quyển.
- C. nhiệt độ thấp nhất mà tại đó, chất cháy tự cháy khi tiếp xúc với nguồn nhiệt tại điều kiện áp suất khí quyển.
- D. nhiệt độ cao nhất mà tại đó, chất cháy tự cháy khi tiếp xúc với nguồn nhiệt tại điều kiện áp suất khí quyển.

3. Tinh dầu trầm hương được chiết xuất từ nhựa cây Dó bầu bị nhiễm dầu (tụ trầm) bằng phương pháp chưng cất lôi cuốn hơi nước. Một số tác dụng của tinh dầu trầm hương được biết đến như: giảm căng thẳng, giảm nguy cơ trầm cảm, ngủ ngon giấc hơn; ngăn ngừa sự phát triển của tế bào ung thư; tốt cho hệ tiêu hoá; giảm triệu chứng dị ứng ở đường hô hấp trên; chăm sóc da do đặc tính chống viêm, kháng khuẩn và chống oxi hoá; ... Tinh dầu trầm hương có điểm chớp cháy là 51 °C. Hãy cho biết tinh dầu trầm hương được gọi là chất lỏng dễ cháy hay chất lỏng có thể gây cháy.



Hoá học về phản ứng cháy, nổ

MỤC TIÊU

- Tính được $\Delta_r H^\circ$ một số phản ứng cháy, nổ để dự đoán mức độ mãnh liệt của phản ứng cháy, nổ.
- Tính được sự thay đổi của tốc độ phản ứng cháy, “tốc độ phản ứng hô hấp” theo giả định về sự phụ thuộc vào nồng độ O_2 .
- Nêu được các nguyên tắc chữa cháy dựa vào các yếu tố ảnh hưởng đến tốc độ phản ứng hoá học.
- Giải thích được vì sao lại hay dùng nước, CO_2 để chữa cháy.
- Giải thích được lí do vì sao một số trường hợp không được dùng nước để chữa cháy mà lại phải dùng cát, CO_2 , ...
- Giải thích được tại sao đám cháy có mặt các kim loại hoạt động mạnh thì không sử dụng nước, CO_2 , cát (thành phần chính là SiO_2), bột chữa cháy (hỗn hợp không khí, nước và chất hoạt động bề mặt) để dập tắt đám cháy.



Các hiện tượng cháy, nổ xảy ra hầu hết do các phản ứng hoá học gây nên, toả nhiều nhiệt, tốc độ phản ứng lớn. Do đó, hoá học đóng vai trò rất quan trọng trong việc nghiên cứu nguyên nhân, đưa ra các biện pháp phòng chống cũng như xử lí khi xảy ra hoả hoạn một cách hiệu quả và an toàn nhất. Nhiệt của phản ứng cháy, nổ được xác định như thế nào? Các yếu tố nào ảnh hưởng đến mức độ mãnh liệt của phản ứng cháy, nổ?



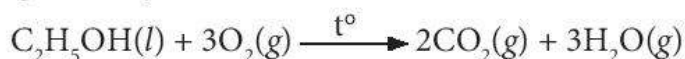
▲ Bình chữa cháy

1 BIẾN THIÊN ENTHALPY ($\Delta_r H^\circ$) CỦA MỘT SỐ PHẢN ỨNG CHÁY, NỔ

➤ **Tính giá trị $\Delta_r H^\circ$ một số phản ứng cháy, nổ để dự đoán mức độ mãnh liệt của phản ứng cháy, nổ**

Xét phản ứng cháy của một số nhiên liệu thường dùng trong đời sống và sản xuất như ethanol (C_2H_5OH , dùng trong sản xuất xăng sinh học E5) và khí gas (thành phần chính là propane (C_3H_8) và butane (C_4H_{10}), dùng trong đun nấu ở các hộ gia đình).

Phản ứng đốt cháy ethanol:

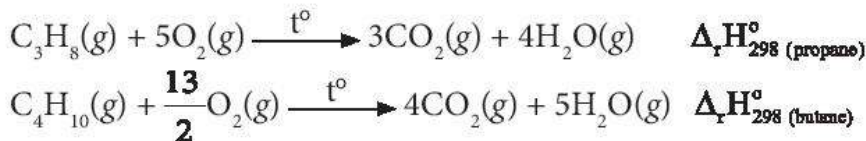


1 Dựa vào dữ liệu Bảng 7.1 và 7.2, em hãy tính biến thiên enthalpy của phản ứng đốt cháy 1 mol ethanol và 1 mol khí gas.

Bảng 7.1. Giá trị nhiệt tạo thành của các chất trong phản ứng đốt cháy ethanol

Chất	$C_2H_5OH(l)$	$O_2(g)$	$CO_2(g)$	$H_2O(g)$
$\Delta_f H_{298}^\circ$ (kJ/mol)	-277,63	0	-393,50	-241,826

Phản ứng đốt cháy khí gas chứa propane (40%) và butane (60%):



Bảng 7.2. Giá trị năng lượng liên kết (E_b) của một số liên kết cộng hoá trị

Liên kết	C-H	C-C	O=O	C=O	O-H
E_b (kJ/mol)	413	347	498	745	467



Khi xác định được biến thiên enthalpy của phản ứng cháy, nổ, có thể dự đoán mức độ mãnh liệt của phản ứng cháy, nổ đó.

2 TỐC ĐỘ PHẢN ỨNG CHÁY

➤ Tính sự thay đổi tốc độ phản ứng cháy theo giả định về sự phụ thuộc vào nồng độ oxygen

Xét phản ứng cháy của than đá trong không khí:



Số mol (n_{O_2}) và nồng độ mol/L (C_{O_2}) của oxygen được tính theo công thức:

$$n_{O_2} = \frac{p_{O_2} \times V_{O_2}}{R \times T} \quad \text{và} \quad C_{O_2} = \frac{n_{O_2}}{V_{O_2}}$$

Trong đó: p_{O_2} là áp suất khí oxygen (atm);

V_{O_2} là thể tích oxygen (L);

R là hằng số khí lí tưởng, có giá trị bằng 0,082 (L·atm/ mol·K);

T là nhiệt độ (đơn vị K).

Có thể coi tốc độ phản ứng cháy của than đá phụ thuộc nồng độ oxygen trong không khí theo phương trình tốc độ: $v = k \times C_{O_2}$.



Khi nồng độ oxygen giảm thì tốc độ phản ứng cháy giảm và ngược lại.



2 Tính biến thiên enthalpy của phản ứng đốt cháy 1 mol octane (C_8H_{18} , chất có trong xăng) và 1 mol methane (thành phần chính của khí thiên nhiên). Dự đoán mức độ mãnh liệt của các phản ứng này.

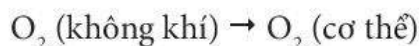
3 Ở điều kiện thường (298 K), oxygen chiếm khoảng 20,9% theo thể tích trong không khí, tương đương với áp suất 0,209 atm. Tính nồng độ mol/L của oxygen trong không khí.

4 Khi thể tích oxygen giảm còn 15% thể tích không khí thì nồng độ mol/L của oxygen là bao nhiêu?

5 Hãy cho biết tốc độ phản ứng cháy của than đá tăng hay giảm bao nhiêu lần khi thành phần phần trăm theo thể tích của oxygen trong không khí giảm từ 20,9% xuống 15%.

➤ **Tính sự thay đổi tốc độ “phản ứng hô hấp” theo giả định về sự phụ thuộc vào nồng độ oxygen**

Đối với nhiều loài sinh vật, trong đó có con người, quá trình hô hấp được xem là dấu hiệu nhận biết sự sống. Hô hấp cung cấp oxygen cho quá trình trao đổi chất của các loài sinh vật. Do đó, nếu nguồn oxygen bị thiếu hụt do ô nhiễm, hoả hoạn, không gian kín, ở vùng núi cao, ... đều có những ảnh hưởng không tốt đến sức khoẻ của các loài sinh vật. “Phản ứng hô hấp” được biểu diễn qua quá trình:



Có thể coi tốc độ “phản ứng hô hấp” phụ thuộc nồng độ oxygen theo phương trình tốc độ: $v = k \times C_{O_2}$.



Khi nồng độ oxygen giảm thì tốc độ “phản ứng hô hấp” giảm và ngược lại.

3 NGUYÊN TẮC CHỮA CHÁY

➤ **Trình bày các nguyên tắc chữa cháy**

Khi xác định được những yếu tố ảnh hưởng đến tốc độ phản ứng cháy sẽ đề xuất được các biện pháp phù hợp để dập tắt đám cháy. Việc xác định chất cháy giúp phân loại đám cháy, từ đó có thể lựa chọn chất chữa cháy thích hợp để dập tắt đám cháy.

Bảng 7.3. Phân loại đám cháy theo chất cháy (theo TCVN 4878 : 2009)

Loại đám cháy	Chất cháy
Loại A	Đám cháy các chất rắn (thông thường là các chất hữu cơ) khi cháy thường kèm theo sự tạo ra than hồng.
Loại B	Đám cháy các chất lỏng và chất rắn hoá lỏng.
Loại C	Đám cháy các chất khí.
Loại D	Đám cháy các kim loại.
Loại F	Đám cháy dầu và mỡ của động vật hay thực vật trong các thiết bị nấu nướng.

Bảng 7.4. Một số chất chữa cháy thông dụng

Chất chữa cháy	Tác dụng – Lưu ý khi sử dụng
Nước	<ul style="list-style-type: none"> – Làm giảm nhiệt độ xuống dưới nhiệt độ cháy, làm loãng khí cháy. – Dùng trong các đám cháy là chất rắn như gỗ (điển hình là cháy rừng, cháy nhà), nhựa trong các nhà xưởng sản xuất, ... và một số khí cháy. – Tuyệt đối không sử dụng nước để chữa cháy các thiết bị điện khi chưa tắt nguồn điện, kim loại và hợp chất hoạt động hoá học mạnh như Na, K, Ca, đất đèn, đám cháy xăng, dầu, ...



6 Giả sử một căn phòng có thành phần phần trăm theo thể tích của oxygen trong không khí là 17%. Tốc độ “phản ứng hô hấp” của người ở trong phòng tăng hay giảm bao nhiêu lần so với ở ngoài phòng? Biết rằng oxygen chiếm khoảng 20,9% theo thể tích trong không khí.

7 Nêu những yếu tố ảnh hưởng đến tốc độ phản ứng cháy. Từ đó hãy nêu một số biện pháp dập tắt một đám cháy.

8 Hãy cho ví dụ về một số chất cháy thuộc từng loại đám cháy trong Bảng 7.3.

9 Vì sao trong một số trường hợp không được dùng nước để chữa cháy (cháy xăng, dầu, ...)?



Carbon dioxide (CO ₂)	<ul style="list-style-type: none"> – Làm giảm nồng độ oxygen dưới 14%, ngăn chặn và dập tắt đám cháy loại A, B, C. – Khi phun không được để dính lên người hoặc phun lên người vì sẽ làm bỏng lạnh, gây nguy hiểm cho sức khỏe con người. – Không dùng cho các đám cháy kim loại, kiềm thổ, than cốc, ... đám cháy có nhiệt độ trên 1 000 °C, đám cháy điện có hiệu điện thế > 380 kV.
Dạng bọt (Foam gồm không khí, nước và chất hoạt động bề mặt)	<ul style="list-style-type: none"> – Ngăn không cho oxygen tiếp xúc với đám cháy. – Áp dụng cho đám cháy loại A, B, C, F. – Không dùng cho các đám cháy thiết bị có điện, các kim loại có hoạt động mạnh và đám cháy có nhiệt độ trên 1 700 °C.
Dạng bột khô (NaHCO ₃)	<ul style="list-style-type: none"> – Cách li và làm loãng nồng độ oxygen tiếp xúc với đám cháy. – Áp dụng cho loại đám cháy phụ thuộc vào kí hiệu ghi trên bình: <ul style="list-style-type: none"> + Bình chữa cháy bột ABC: phù hợp chữa cháy cho cả chất rắn, chất lỏng và chất khí (gỗ, giấy, một số chất dẻo, cỏ khô, rơm và sợi, nhiên liệu xăng dầu, sơn, vecni và rượu). + Bình chữa cháy bột BC: nhiên liệu xăng dầu, sơn, vecni và rượu. – Không nên sử dụng bình bột chữa cháy phun lên đám cháy là đồ điện tử vì sẽ làm hư hại các vi mạch điện tử.



Giải thích tại sao đám cháy có mặt các kim loại hoạt động mạnh như kim loại kiềm, kiềm thổ và nhôm, ... không sử dụng nước, CO₂, cát (thành phần chính là SiO₂), bột chữa cháy (hỗn hợp không khí, nước và chất hoạt động bề mặt) để dập tắt đám cháy?



Một đám cháy có thể được ngăn ngừa bằng cách loại bỏ hoặc làm suy yếu bất kì yếu tố nào trong tam giác cháy (chất cháy, chất oxi hoá, nguồn nhiệt). Nguyên lí chống cháy, nổ là giảm tốc độ cháy của vật liệu đang cháy đến mức tối thiểu và phân tán nhanh nhiệt lượng của đám cháy ra môi trường xung quanh.

BÀI TẬP

1. Tốc độ phản ứng cháy phụ thuộc nồng độ oxygen. Khi nồng độ oxygen giảm thì tốc độ phản ứng cháy thay đổi như thế nào?
2. Tốc độ phản ứng hô hấp phụ thuộc nồng độ oxygen. Khi nồng độ oxygen tăng thì tốc độ “phản ứng hô hấp” thay đổi như thế nào?
3. Không khí trên đỉnh ngọn núi cao rất loãng. Điều này có thể gây ảnh hưởng xấu đến những người leo núi. Vì vậy, những nhà leo núi luôn trang bị bình dưỡng khí khi họ leo lên những đỉnh núi cao. Giả sử không khí trên đỉnh núi đó có 16% oxygen theo thể tích. Tốc độ “phản ứng hô hấp” tăng hay giảm bao nhiêu lần so với nơi mà không khí có 20,9% oxygen theo thể tích?
4. Hãy kể tên một số chất có thể sử dụng để dập tắt đám cháy khi xảy ra hoả hoạn ở
 - a) xưởng gỗ.
 - b) trạm xăng, dầu.
5. Trong một đám cháy do xăng, dầu, người ta có thể dùng một chiếc chăn thấm ướt hoặc cát để dập tắt đám cháy. Giải thích tại sao có thể làm như vậy.

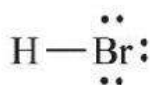
THỰC HÀNH HOÁ HỌC VÀ CÔNG NGHỆ THÔNG TIN



Vẽ cấu trúc phân tử

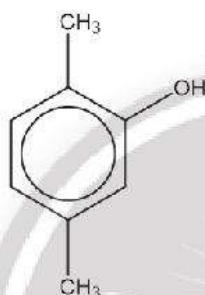
MỤC TIÊU

- Vẽ được công thức cấu tạo, công thức Lewis của một số chất vô cơ và hữu cơ.
- Lưu được các file, chèn được hình ảnh vào file Word, PowerPoint.



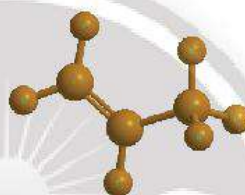
HBr

Công thức Lewis



$\text{C}_6\text{H}_3(\text{CH}_3)_2(\text{OH})$

Công thức cấu tạo



C_2H_6

Cấu trúc phân tử



$\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$

▲ Công thức và cấu trúc phân tử của một số chất



Các chất vô cơ và hữu cơ được trình bày bằng công thức cấu tạo, công thức Lewis, ... Em có thể thực hiện viết, vẽ các công thức hoá học, có thể trình bày cấu trúc phân tử dưới dạng 2D và 3D, viết chuỗi phản ứng, phương trình hoá học và những công thức phân tử phức tạp, ... Sử dụng phần mềm chuyên biệt có thể giúp cho việc vẽ các công thức hoá học nhanh chóng và dễ dàng.

Phần mềm nào sẽ hỗ trợ hiệu quả cho việc viết, vẽ các công thức hoá học? Cần thực hiện như thế nào để vẽ và chèn vào file Word hoặc PowerPoint?

1 VẼ CÔNG THỨC CẤU TẠO


Hiện nay có nhiều phần mềm sử dụng để vẽ cấu trúc phân tử vô cơ và hữu cơ như HyperChem, ChemsKetch, gói phần mềm ChemBioOffice, ...

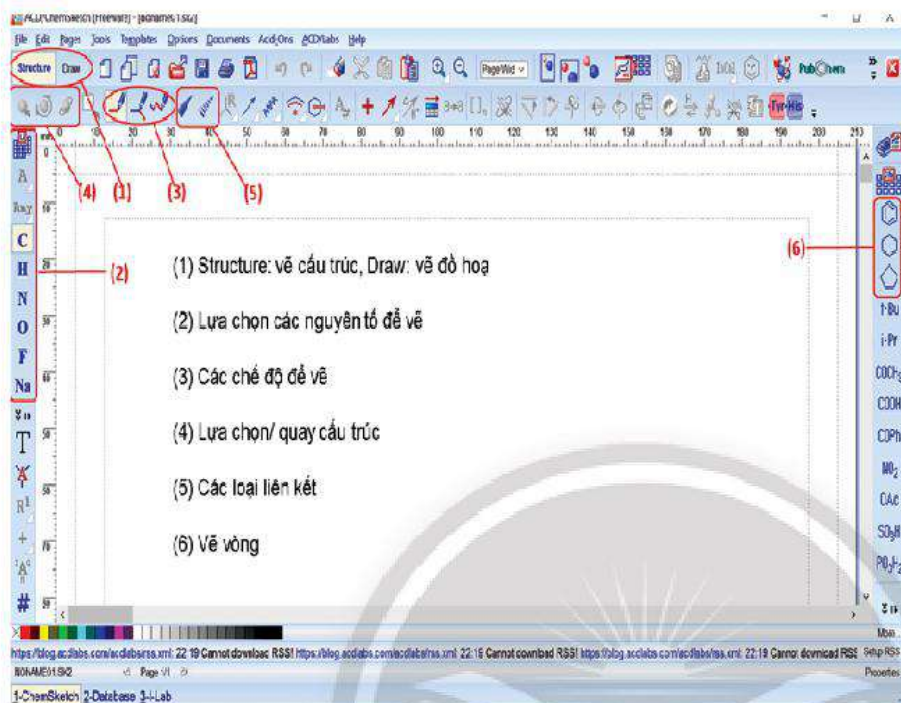
➤ Cài đặt và sử dụng phần mềm ChemSketch

Cài đặt: Truy cập trang chủ của nhà cung cấp theo đường dẫn:

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

Sau đó điền các thông tin cần thiết để tải phần mềm. Chọn **free ACD/ ChemSketch Freeware**. Tải phần mềm và cài đặt theo hướng dẫn.

Khởi động: Mở ChemSketch hoặc nhấp đúp chuột trái vào biểu tượng  trên Desktop. Màn hình làm việc của ChemSketch như sau:

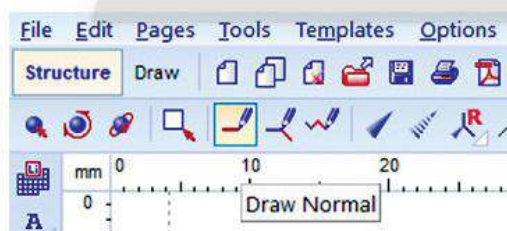


▲ Hình 8.1. Màn hình làm việc phần mềm ChemSketch

Thực hành vẽ công thức cấu tạo bằng phần mềm ChemSketch

Ví dụ 1: Vẽ công thức cấu tạo của phân tử propene (C_3H_6).

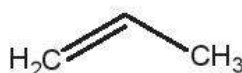
Bước 1: Chọn cửa sổ **Structure** và chế độ **Draw Normal**.



Bước 2: Chọn nguyên tố C ở khu vực (2). Nhấp chuột trái vào màn hình sẽ xuất hiện CH_4 . Nhấp và giữ chuột trái rồi kéo, nhả chuột, thấy xuất hiện CH_3-CH_3 . Kéo, tiếp tục nhả chuột thu được $H_3C-CH_2-CH_3$.


Chọn **Tool** → **Clean Structure**, thu được $H_3C-CH_2-CH_3$.

Bước 3: Nhấp chuột trái một lần lên liên kết đơn để tạo liên kết đôi. Nếu cần tạo liên kết ba thì nhấp chuột thêm một lần nữa.

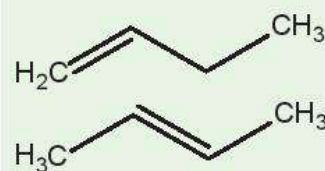


- 1 Tìm hiểu các thanh công cụ trong Hình 8.1 và cách sử dụng chúng trong phần mềm ChemSketch.

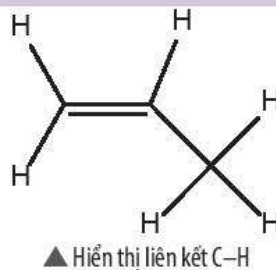
CHÚ Ý

Nếu nguyên tố không có trên thanh lệnh thì nhấp chuột vào biểu tượng bảng tuần hoàn (Periodic table of Elements)  để chọn.


- 2 Để vẽ liên kết ba trong phân tử propyne (C_3H_4), cần chọn các công cụ nào?
- 3 Hãy vẽ phân tử C_4H_{10} , chuyển liên kết đơn thành liên kết đôi, tạo thành hai phân tử sau:

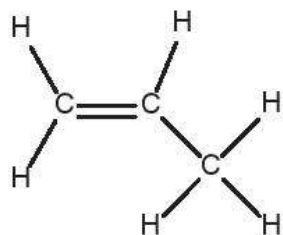


Bước 4: Để hiển thị các liên kết C-H, chọn **Tool** → **Add Explicit Hydrogens**.



▲ Hiển thị liên kết C-H

Bước 5: Để hiển thị nguyên tử C, chọn biểu tượng  (**Edit Atom Label**), nhấp chuột trái vào vị trí của nguyên tử C trên công thức, xuất hiện hộp thoại Edit Label, gõ C và nhấn Insert.



▲ Hiển thị nguyên tử C

Bước 6: Lưu và chèn công thức vào file Word, Powerpoint.

a) Lưu công thức

Chọn lệnh **File** → **Save** hoặc **Save as** hoặc sử dụng tổ hợp phím **Ctrl+S**. Khi xuất hiện hộp thoại lưu, đặt tên file và chọn kiểu file, sau đó nhấn **Save**.

– Lưu file ChemSketch: Chọn phần mở rộng đuôi là **sk2**, cho phép mở lại để sửa chữa.










– Lưu dạng ảnh: Chọn phần mở rộng là **.gif** hoặc **.jpg** hoặc **.tif**.

b) Chèn công thức

– Chọn phân tử, chọn lệnh **Edit** → **Copy** hoặc sử dụng tổ hợp phím **Ctrl + C**.

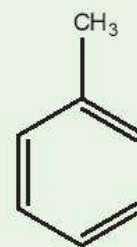
– Mở ứng dụng Word hoặc PowerPoint, chọn lệnh Dán (**Paste**) hoặc sử dụng tổ hợp phím **Ctrl + V**. Nếu chèn file ảnh sang Word hay Power Point, chọn **Insert** → **Picture** rồi chọn file ảnh đã lưu.

Một số menu lệnh

	Hiển thị kí hiệu nguyên tử		Vẽ cấu tạo gấp khúc		Bảng tuần hoàn các nguyên tố hoá học
	Vẽ liên kết cho – nhận		Tối ưu hoá 3D		Xoay các liên kết
	Vẽ các liên kết trước và sau		Hiển thị cấu trúc 3D		Các dấu ngoặc



4 Trình bày các bước để vẽ công thức cấu tạo của phân tử toluene.

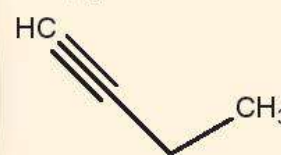


▲ Phân tử toluene

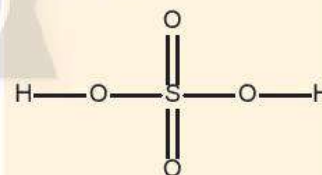


Thực hành vẽ công thức cấu tạo của các chất được biểu diễn như sau:

a) C_4H_6



b) H_2SO_4

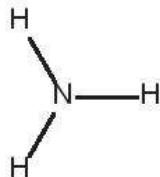


2 VẼ CÔNG THỨC LEWIS

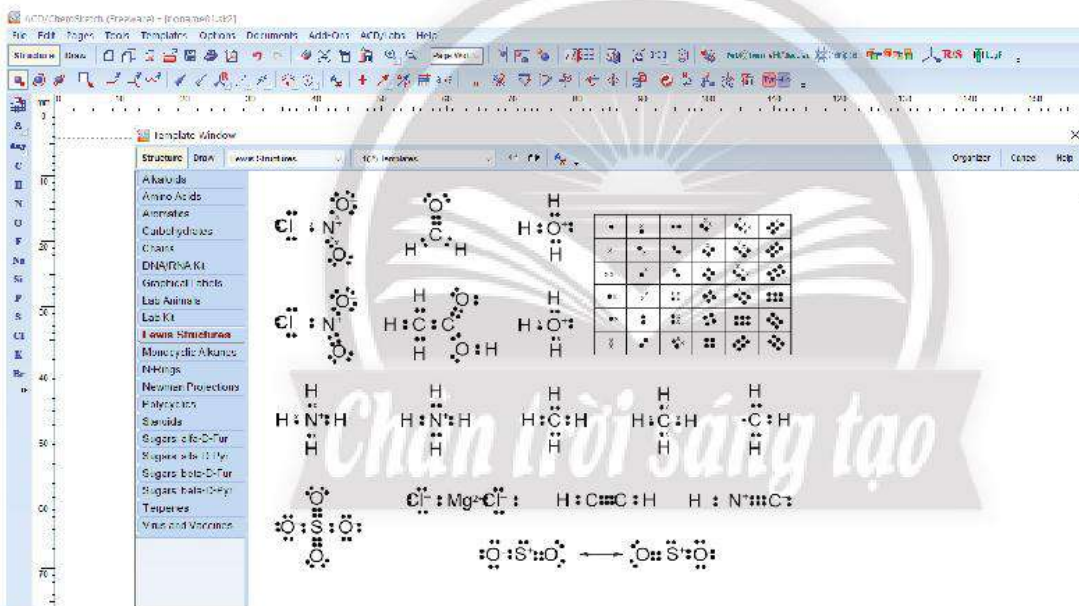
Thực hành vẽ công thức Lewis bằng phần mềm ChemSketch

Ví dụ 2: Vẽ công thức Lewis của phân tử ammonia (NH_3).

Bước 1: Vẽ phân tử NH_3 tương tự theo các bước ở Ví dụ 1. Chọn nguyên tố N, nhấp chuột trái vào màn hình, xuất hiện NH_3 . Chọn lệnh **Tool** → **Add Explicit Hydrogens** để hiển thị các liên kết N–H, thu được



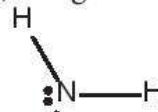
Bước 2: Chọn lệnh **Templates** → **Template Organizer** và tích chọn **Lewis Structures**. Sau đó, chọn lệnh **Templates** → **Template Window**, xuất hiện hộp thoại **Template Window**, chọn thẻ **Structure** → **Lewis Structure**.



▲ Hình 8.5. Hộp thoại **Template Window**

Bước 3: Chọn cặp electron phù hợp trong bảng (●), rồi gắn vào công

thức, điều chỉnh kích thước (nếu cần), thu được



Bước 4: Lưu và chèn công thức vào file Word, PowerPoint.



Sử dụng phần mềm ChemSketch vẽ được công thức cấu tạo, công thức Lewis của một số chất vô cơ và hữu cơ.



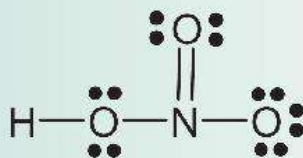
5 Từ hướng dẫn cách vẽ công thức Lewis ở Ví dụ 2, nêu điểm khác nhau giữa cách vẽ công thức Lewis với cách vẽ công thức cấu tạo.



Thực hành vẽ công thức Lewis của phân tử N_2 . Lưu file dưới định dạng file ChemSketch và dưới định dạng file ảnh. Chèn công thức vào Word hoặc PowerPoint.



Vẽ công thức Lewis của phân tử HNO_3 , lưu dưới định dạng file ChemSketch. Lưu dưới định dạng file ảnh, chèn vào Word và PowerPoint như biểu diễn sau:

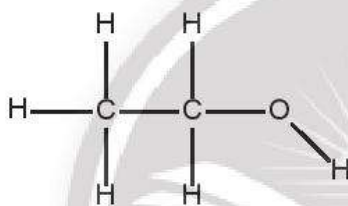


3 VẼ CẤU TRÚC PHÂN TỬ

➤ Thực hành vẽ cấu trúc phân tử bằng phần mềm ChemSketch

Ví dụ 3: Vẽ cấu trúc 3D của phân tử ethanol ($\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$).

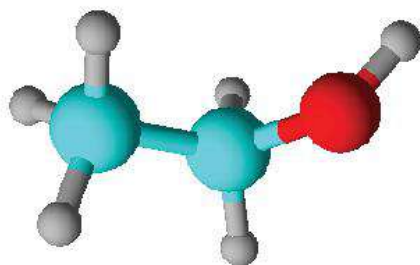
Bước 1: Vẽ cấu trúc 2D của phân tử $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ tương tự theo các bước ở Ví dụ 1.



Bước 2: Nhấp chuột vào biểu tượng tối ưu cấu trúc 3D (3D Structure Optimization) ở thanh công cụ.



Bước 3: Chọn nút 3D Viewer , xuất hiện hộp thoại ACD/3D Viewer (Freeware) cùng cấu trúc 3D của phân tử.



6 Từ các bước vẽ cấu trúc 3D, hãy chuyển cấu trúc hoá học từ 2D sang 3D của các phân tử đã vẽ ở trên: propyne, toluene.

7 Để chuyển hình nền từ đen sang trắng thực hiện chọn: **Options** → **Colors** → **Background** → **White**. Tương tự thực hiện đổi màu của các nguyên tử trong phân tử. Hãy chuyển màu hình nền và màu các nguyên tử trong các phân tử trên.

CHÚ Ý

Đối với phần mềm ChemSketch, để nhận được công thức hợp lí cần thực hiện lệnh “**Clean Structure**” (cấu trúc 2D) và lệnh “**3D Structure Optimization**” (cấu trúc 3D).

Bước 4: Thay đổi một số chế độ hiển thị cấu trúc phân tử (dạng cầu đặc, liên kết dạng hình trụ, dạng cầu và que, dạng que hoặc dạng dây mảnh).



▲ Hình 8.3. Các cách hiển thị cấu trúc phân tử

Bước 5: Lưu được các file, chèn được hình ảnh vào file Word, PowerPoint.

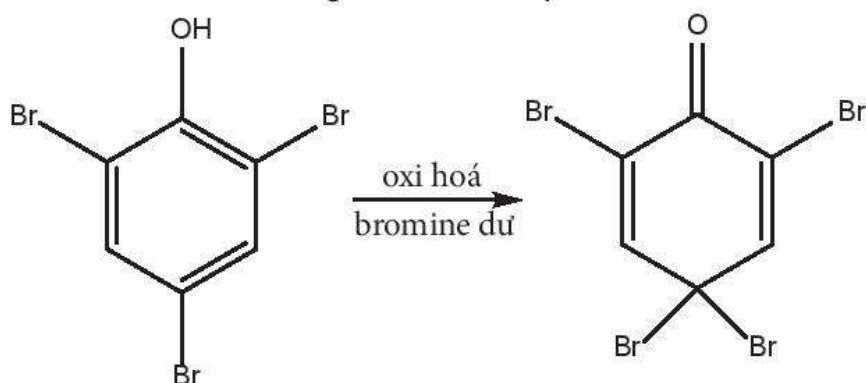
Chọn mô hình cần lưu. Sử dụng lệnh **Edit** → **Copy**. Trong ứng dụng phần mềm khác (Word hoặc PowerPoint), nhấn tổ hợp phím **Ctrl + V** để dán mô hình vào.



Có thể sử dụng phần mềm ChemSketch để vẽ cấu trúc dạng 2D và 3D của các phân tử.

BÀI TẬP

- Sử dụng phần mềm ChemSketch vẽ cấu trúc dưới dạng 2D và 3D của các phân tử SO_2 , SO_3 . Lưu file dưới dạng ChemSketch và file hình ảnh. Chèn hình ảnh vào file Word và PowerPoint.
- Hãy vẽ công thức Lewis của các hợp chất sau: SO_3 , Cl_2 , CO_2 . Lưu file hình ảnh, chèn vào file Word và PowerPoint.
- Tìm hiểu thêm các tính năng khác của phần mềm ChemSketch, vẽ cấu trúc của các phân tử rồi chèn vào trang Word trình bày như hình sau:



Thực hành vẽ cấu trúc các phân tử sau:

a) $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}=\text{CH}_2$

b) CH_3COOH

Chuyển cấu trúc hoá học từ 2D sang 3D.

Lưu các file, chèn được hình ảnh cấu trúc phân tử vào file Word, PowerPoint.



Thực hành thí nghiệm hoá học ảo

MỤC TIÊU

- Thực hiện được các thí nghiệm ảo theo nội dung được cho trước từ giáo viên.
- Phân tích và lí giải được kết quả thí nghiệm ảo.



▲ Một số hình ảnh thí nghiệm



Thí nghiệm hoá học có vai trò quan trọng đối với quá trình nhận thức và phát triển năng lực trong dạy và học môn Hoá học. Khi thiếu phương tiện, điều kiện thí nghiệm không đảm bảo hay thí nghiệm quá độc hại, tốn kém hoặc mất nhiều thời gian, chúng ta có thể thực hiện thí nghiệm hoá học ảo trên máy tính.

Những phần mềm nào có thể hỗ trợ thí nghiệm ảo trong học tập hoá học? Thực hiện thí nghiệm hoá học ảo như thế nào?



1 GIỚI THIỆU VỀ PHẦN MỀM THÍ NGHIỆM HOÁ HỌC ẢO

Những phần mềm như ChemLab (Portable Virtual Chemistry Lab), PhET, Yenka (phiên bản cũ là Crocodile Chemistry), ... được sử dụng để mô phỏng thí nghiệm hoá học.

Yenka là tập hợp các phòng thí nghiệm ảo, trong đó có phòng thí nghiệm hoá học với các hoá chất, dụng cụ phổ biến để thực hiện các thí nghiệm hoá học vô cơ và điện hoá. Yenka mô phỏng các thí nghiệm ảo dễ dàng, nhanh chóng và hiệu quả. Có thể sử dụng Yenka để tiến hành một số thí nghiệm với những chất độc hại hay những thí nghiệm không an toàn.

PhET gồm các mô phỏng tương tác miễn phí thuộc lĩnh vực Toán và khoa học. PhET minh hoạ bài học một cách trực quan, có thể tương tác trực tuyến.




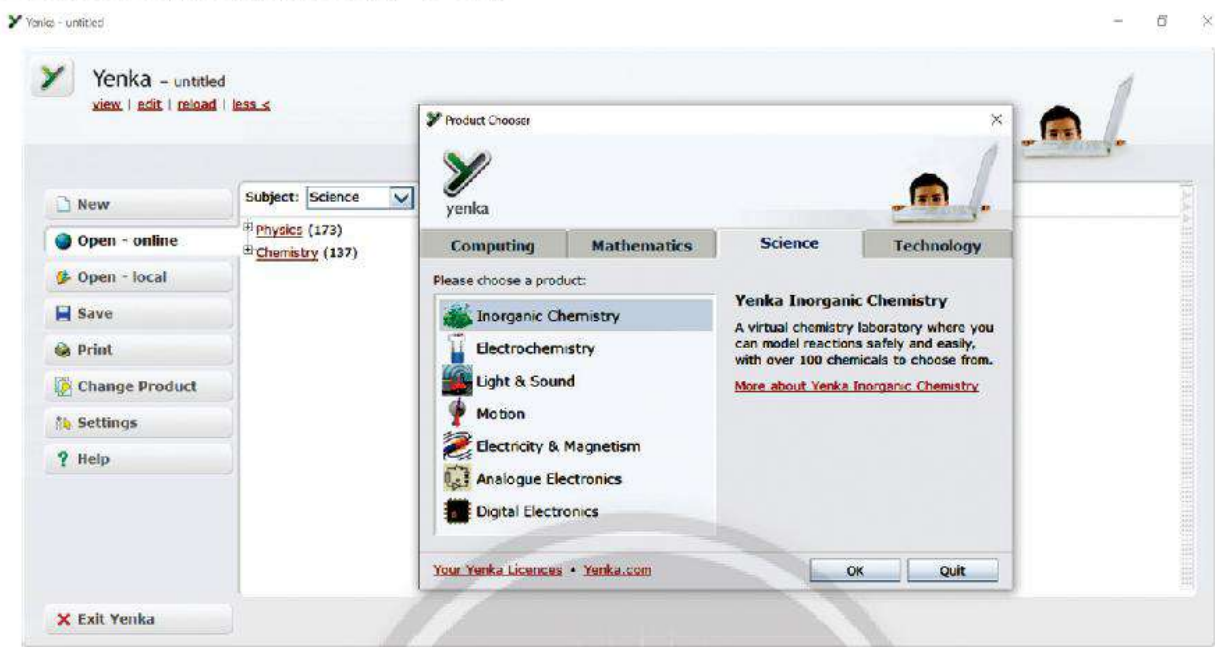
2 THỰC HÀNH THÍ NGHIỆM HOÁ HỌC ẢO BẰNG PHẦN MỀM YENKA

➤ Cài đặt và sử dụng phần mềm Yenka

Cài đặt: Truy cập trang chủ của nhà cung cấp theo đường dẫn: <https://www.yenka.com>, chọn thẻ **Use Yenka** → **Use Yenka free at home** → **...for students**, chọn phiên bản, sau đó tải phần mềm. Sau khi tải phần mềm, tiếp tục cài đặt theo hướng dẫn.



Khởi động: Mở Yenka hoặc nhấp đúp chuột trái vào biểu tượng  trên Desktop. Màn hình làm việc của Yenka như Hình 9.1. Tại hộp thoại **Product Chooser**, chọn thẻ **Science**, tiếp tục chọn mục **Inorganic chemistry** (hoá vô cơ) hoặc **Electrochemistry** (điện hoá) → OK.



▲ Hình 9.1. Màn hình làm việc phần mềm Yenka

Phần 1: New: Sử dụng hoá chất, thiết bị và dụng cụ để tự thiết kế thí nghiệm.

Phần 2: Open – online: Kho các bài thí nghiệm mở trực tuyến.

Phần 3: Open – local: Kho các bài thí nghiệm đã được chuẩn bị sẵn có hướng dẫn.



1 Từ giao diện của phần mềm (Hình 9.1), nêu những thành phần chính của các vùng trên giao diện phần mềm. Kho các bài thí nghiệm (**open – online** hay **open – local**) có vai trò gì cho người sử dụng?

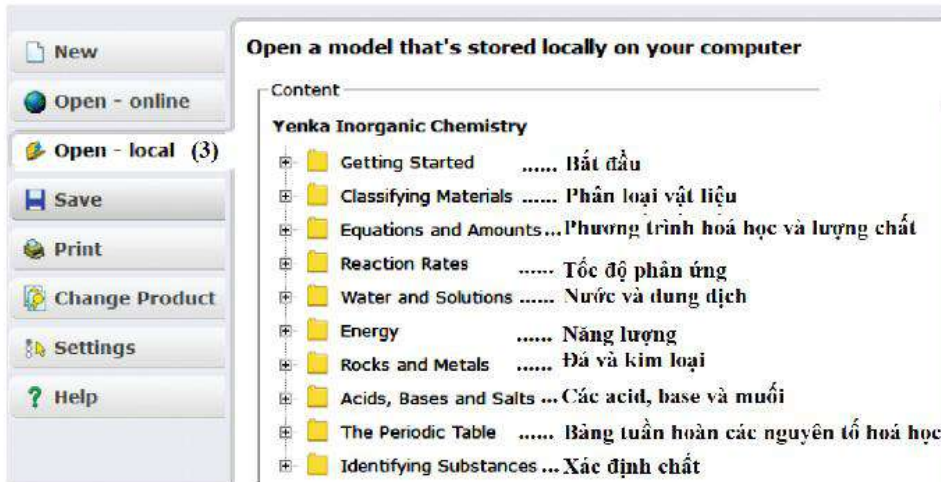
2 Tìm hiểu cách sử dụng các thanh công cụ trong phần mềm Yenka.



▲ Hình 9.2. Các phần chính của phần mềm Yenka

Sử dụng kho các bài thí nghiệm thiết kế sẵn có hướng dẫn

Kho các bài thí nghiệm có hướng dẫn **Open – local** chứa các thí nghiệm được sắp xếp theo các chủ đề theo thứ tự như sau:



▲ Hình 9.3. Các bài thí nghiệm có hướng dẫn Open – local

Các bước sử dụng thẻ Open – local của phần mềm Yenka

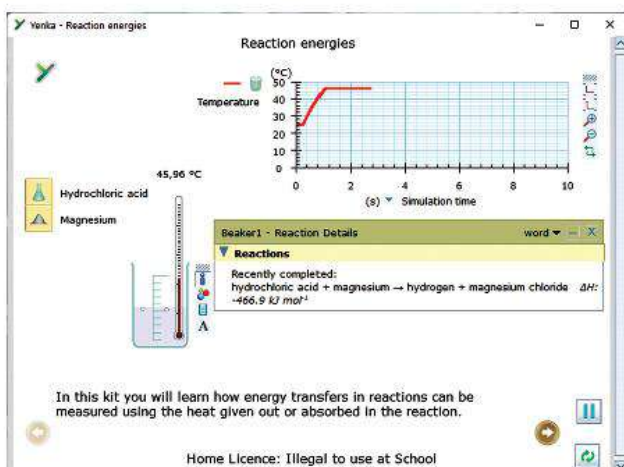
Ví dụ 1: Mô phỏng thí nghiệm “Năng lượng hoá học”.

Bước 1: Nhấp chuột vào thẻ **Open – local**, chọn **Energy** → **Reaction Energies**, mô phỏng đã được thiết kế xuất hiện ở màn hình.

Bước 2: Nhấp chuột vào **Next page** để thực hiện theo hướng dẫn. Nhấp vào biểu tượng Hydrochloric acid, giữ và kéo cho vào cốc đã có sẵn nhiệt kế, tương tự thêm tiếp Magnesium vào cốc.

Bước 3: Nhấp chuột vào nút **Play/Pause** để thực hiện thí nghiệm. Trên bảng giấy kẻ xuất hiện đường màu đỏ biểu diễn nhiệt độ của phản ứng theo thời gian. Sau khoảng thời gian 2 – 3 phút, sử dụng nút **Play/Pause** để dừng mô phỏng.

Bước 4: Ghi lại sự thay đổi nhiệt độ và hiệu ứng nhiệt của phản ứng (trong mục Reaction Details). Giải thích.



▲ Hình 9.4. Mô phỏng thí nghiệm “Năng lượng hoá học”



3 Từ các bước sử dụng thẻ **Open – local**, hãy thực hiện mô phỏng thí nghiệm “Định nghĩa tốc độ phản ứng” (**Definition of reaction rate**) trong mục “Tốc độ phản ứng” (**Reaction Rates**).

CHÚ Ý

Một số thanh menu của đồ thị

	Điều chỉnh trục x
	Điều chỉnh trục y
	Phóng to
	Thu nhỏ
	Làm lại



Sử dụng thẻ **Open – local** để mô phỏng thí nghiệm “Acids and bases”. Phân tích và lí giải kết quả của thí nghiệm.

Ví dụ 2: Mô phỏng thí nghiệm “Ảnh hưởng của diện tích bề mặt chất lên tốc độ phản ứng”.

Bước 1: Nhấp chuột vào thẻ **Open – local**, chọn **Reaction Rates** → **Surface area and rate**, mô phỏng được thiết kế xuất hiện ở màn hình hộp thoại.

Bước 2: Nhấp chuột vào **Next page** để thực hiện theo hướng dẫn. Nhấp và thả chuột vào các quả bóng có màu khác nhau, kéo thả vào cuối ống dẫn khí ở các ống nghiệm có kích cỡ hạt calcium carbonate khác nhau.

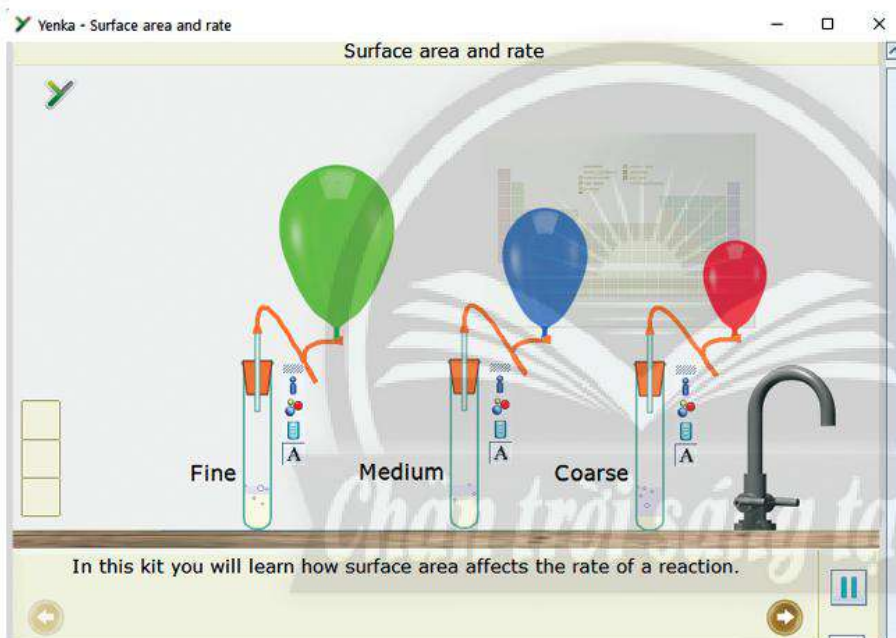
Bước 3: Nhấp nút **Play/Pause** để thực hiện mô phỏng.

Bước 4: Quan sát tốc độ tăng dần kích thước của các quả bóng. Khi kích thước của các quả bóng khác nhau rõ, nhấp nút **Play/Pause** để dừng thí nghiệm. Giải thích hiện tượng và rút ra kết luận về ảnh hưởng của diện tích bề mặt đến tốc độ của phản ứng.



4 Từ kết quả thí nghiệm “**Surface area and rate**” (Hình 9.5), hãy cho biết:

- Mục đích sử dụng các quả bóng có màu khác nhau trong thí nghiệm.
- Tốc độ thoát khí ở ống nghiệm nào nhanh nhất, ở ống nghiệm nào chậm nhất.
- Diện tích bề mặt ảnh hưởng như thế nào đến tốc độ phản ứng.



▲ Hình 9.5. Mô phỏng thí nghiệm “Ảnh hưởng của diện tích bề mặt chất lên tốc độ phản ứng”

► Tự thiết kế thí nghiệm bằng phần mềm Yenka

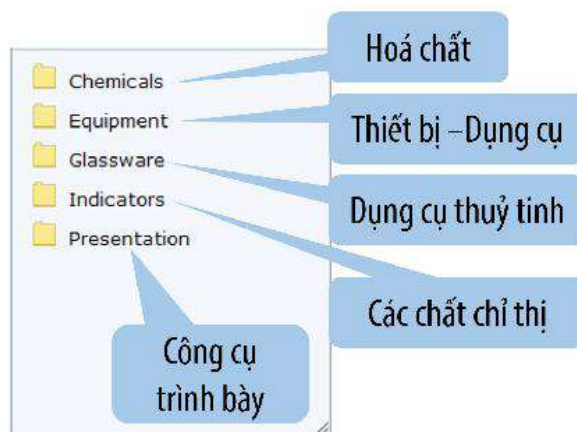
Thực hiện mô phỏng thí nghiệm hoá học với phần mềm Yenka, các hoá chất (Chemicals), dụng cụ – thiết bị (Equipments), chất chỉ thị (Indicators), ... được lấy trong phần **New**.



5 Chọn hoá chất, dụng cụ và thực hiện thí nghiệm điều chế khí sulfur dioxide từ sulfur và oxygen.

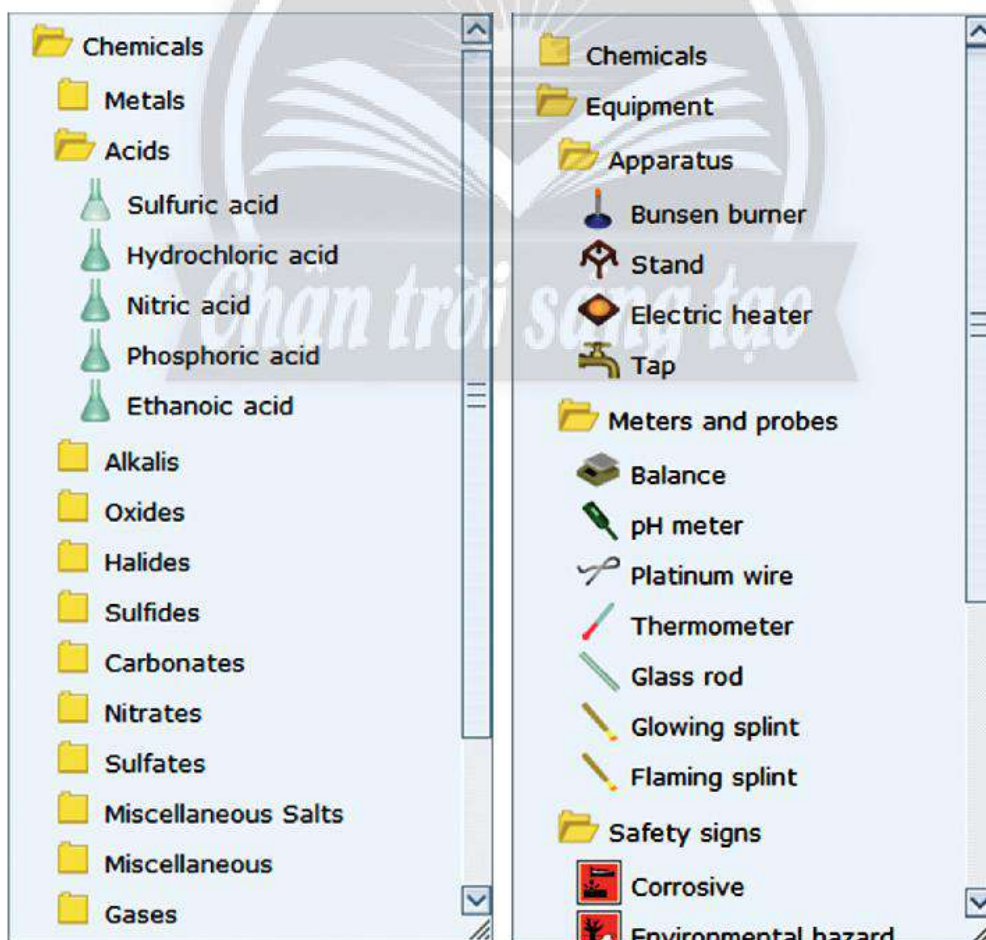
Kho hoá chất, thiết bị và dụng cụ:

Kho hoá chất (**Chemicals**) bao gồm: kim loại, acid, base, oxide, halogen, sulfide, carbonate, nitrate, sulfate, các muối và các chất khí. Chúng ta có thể chọn các dạng chất khác nhau cho phù hợp với mỗi thí nghiệm, phần mềm cho phép chọn: dạng bột (power), bột mịn (fine), mịn vừa (medium), thô (coarse), cục/ miếng (lups), dạng lỏng (liquid), dạng khí (gas).



Thiết bị, dụng cụ thí nghiệm (**Equipment**): bao gồm đầy đủ các thiết bị, dụng cụ thí nghiệm hoá học thông dụng.

Dụng cụ thủy tinh (**Glassware**), chỉ thị (**Indicators**), ...



▲ Hình 9.6. Kho hoá chất (**Chemicals**) và Thiết bị – dụng cụ (**Equipment**)



Các bước tiến hành thí nghiệm hoá học ảo với thẻ “New”

Ví dụ 3: Thực hiện thí nghiệm mô phỏng kim loại sắt tác dụng với dung dịch sulfuric acid loãng.

Bước 1: Nhấp chuột vào thẻ **New**, chọn **Presentation** → **A Text** rồi kéo ra màn hình làm việc, gõ tên thí nghiệm “Kim loại sắt tác dụng với sulfuric acid loãng”. Sau đó chọn **Tray** (khay để hoá chất, dụng cụ).

Bước 2: Lấy hoá chất

– Chọn sắt: Nhấp chuột vào thẻ **Chemicals** → **Metals** → **Powders & Liquids** → **Iron**, rồi kéo vào vùng làm thí nghiệm. Nếu thí nghiệm nhiều hoá chất và dụng cụ nên cho vào khay.

– Chọn dung dịch sulfuric acid, Nhấn vào thẻ **Chemicals** → **acids** → **sulfuric acid**, thả sang màn hình hoặc vào khay.

– Nhấp vào các thông số về nồng độ và thể tích để điều chỉnh cho phù hợp với thí nghiệm. Chọn nồng độ 0,5 M và thể tích là 25 cm³.


Bước 3: Lấy dụng cụ

– Chọn bình tam giác: Nhấp chuột vào thẻ **Glassware** → **Standard** → **Erlenmayer flash**.

– Chọn ống thu khí: Nhấp chuột vào thẻ **Glassware** → **Measuring** → **Gas syringe**.

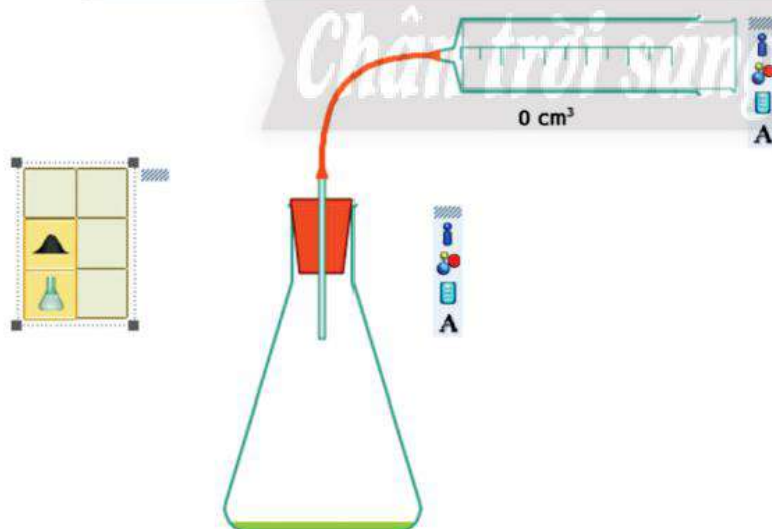
– Chọn nút: Nhấp chuột vào thẻ **Equipment** → **Stoppers** → **Large** → **One tube**.

Đưa trỏ chuột vào ống thu khí, ở đầu ống sẽ xuất hiện hình vuông, nhấp vào đó và kéo sang đầu hình vuông của nút, ống dẫn màu cam sẽ nối các dụng cụ với nhau.


Bước 4: Nhấp nút **Play/Pause**  trên thanh công cụ. Cho sulfuric acid vào bình tam giác, chọn tiếp kim loại sắt và kéo vào bình đã có acid. Đậy nắp nối với syringe như hình bên dưới.



Thí nghiệm: Kim loại sắt tác dụng với sulfuric acid loãng

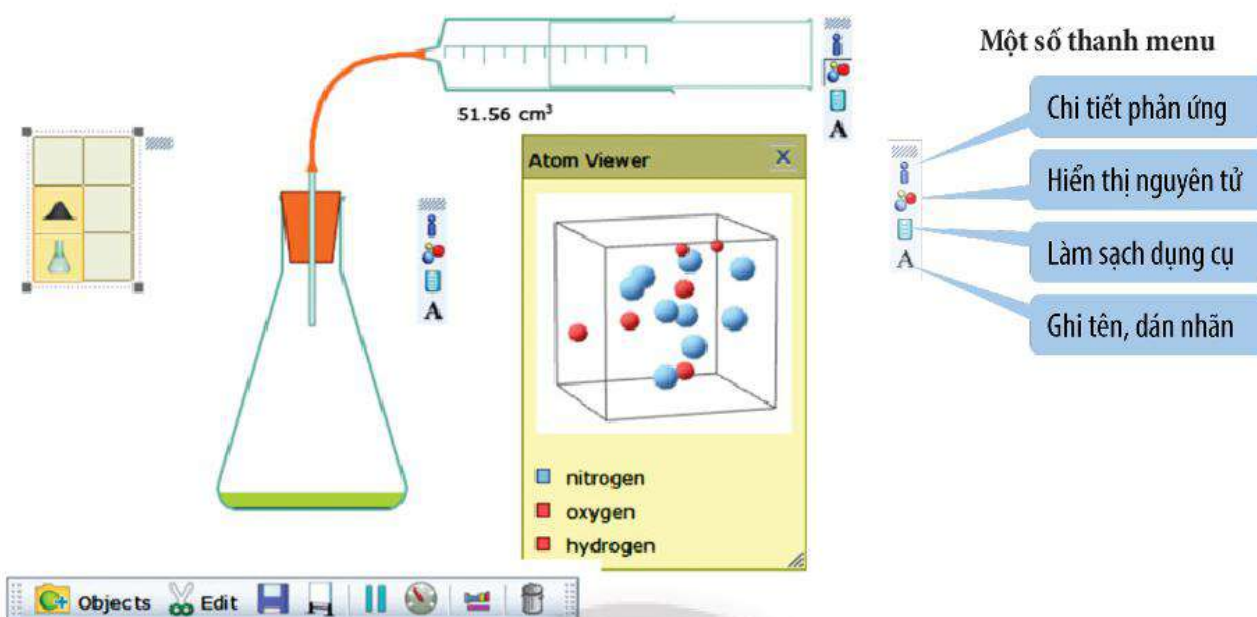


Sử dụng thẻ **New** để mô phỏng thí nghiệm copper(II) oxide tác dụng với 10 mL dung dịch hydrochloric acid 1 M. Nêu hiện tượng và viết phương trình hoá học của phản ứng giữa các chất.

Bước 5: Nhấn nút **Play/Pause** trên thanh công cụ để thí nghiệm bắt đầu diễn ra, quan sát hiện tượng xảy ra. Muốn phản ứng xảy ra nhanh hay chậm, nhấp chuột vào nút **Simulation Speed** .



Thí nghiệm: Kim loại sắt tác dụng với sulfuric acid loãng



▲ Hình 9.7. Mô phỏng thí nghiệm “Kim loại sắt tác dụng với dung dịch sulfuric acid loãng”

Bước 6: Quan sát – Giải thích thí nghiệm.

Sau khi các chất phản ứng với nhau, nhấn chuột vào các icon bên phải của dụng cụ để biết các thông tin như hình trên.



Phần mềm Yenka dễ sử dụng, cho phép mô phỏng nhiều thí nghiệm trong chương trình hoá học trung học phổ thông. Ngoài ra còn thực hiện được các chức năng: vẽ đồ thị, hiển thị chi tiết phản ứng, chuyển động của các ion, phân tử trong thí nghiệm, chèn văn bản, ... giúp việc học tập hoá học thuận lợi hơn.

3 THỰC HÀNH THÍ NGHIỆM HOÁ HỌC ẢO BẰNG PHẦN MỀM PHET

Phần mềm miễn phí cho phép chạy các thí nghiệm ảo trực tiếp trên website tại đường dẫn: <https://phet.colorado.edu/vi/> (bản tiếng Việt), chọn Hoá học.

Thực hành thí nghiệm bằng phần mềm PhET

Ví dụ 4: Thực hiện thí nghiệm mô phỏng “Thang đo pH”.

Bước 1: Bấm vào hình tam giác sẽ xuất hiện bảng mức độ thể hiện khác nhau, chọn **Vĩ mô**.

Bước 2: Sau đó hiện màn hình hiển thị thí nghiệm, chọn dung dịch cần đo pH ở dòng trên cùng, ví dụ là “Nước”.



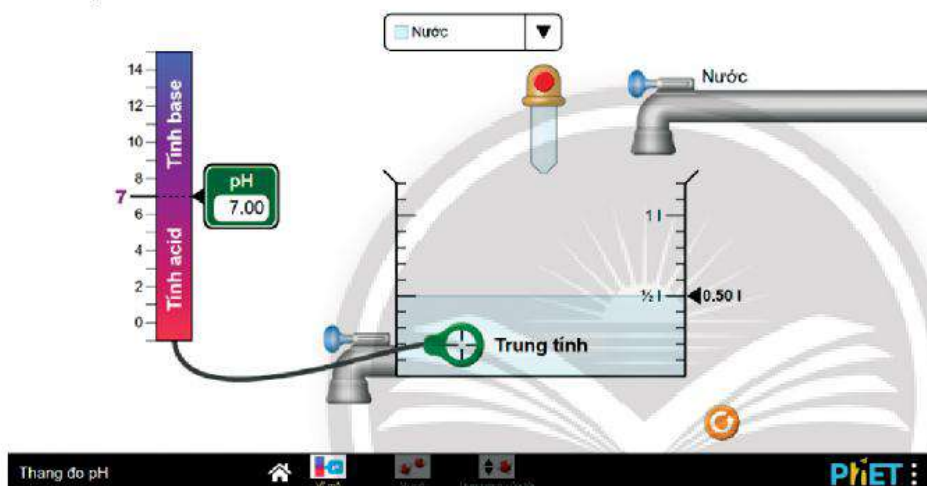


Thang đo pH

▲ Hình 9.8. Giao diện thí nghiệm "Thang đo pH"

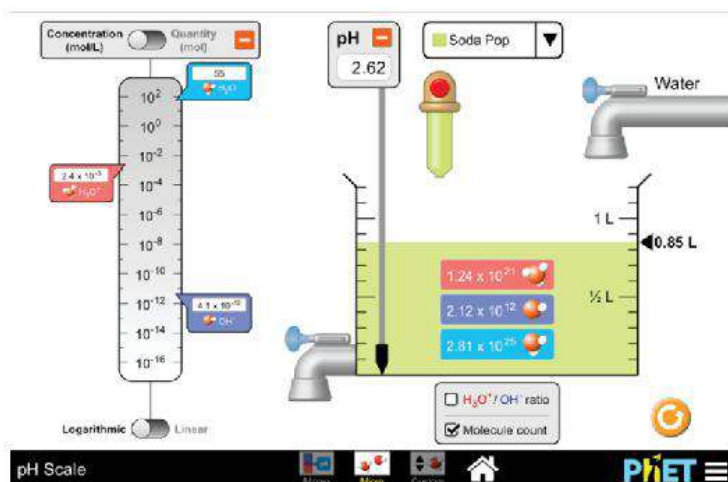
Bước 3: Kéo dụng cụ đo pH (pH meter) vào dung dịch, quan sát và ghi lại kết quả.

Bước 4: Thay đổi các dung dịch cần đo, lặp lại cách đo, ghi kết quả đo được.



▲ Hình 9.9. Thí nghiệm "Thang đo pH"

Bước 5: Đưa ra kết luận về giá trị đo được của các dung dịch, sắp xếp theo thứ tự tăng dần giá trị pH. Có thể hiển thị kết quả dưới các dạng vẽ mô hay vi mô.



▲ Hình 9.10. Cách hiển thị kết quả của thí nghiệm ở dạng Vi mô



Thực hành thí nghiệm "Dung dịch acid-base" bằng phần mềm PhET.

- Hiện thị các dung dịch dưới dạng phân tử hoặc đồ thị.
- Thực hiện thí nghiệm với các dụng cụ khác nhau được cung cấp trong mô phỏng.
- Ghi lại kết quả của thí nghiệm.
- Nhận xét về giá trị pH của dung dịch acid – base.

BÀI TẬP

- Sử dụng của sổ **Open – local** của phần mềm Yenka nghiên cứu về mưa acid (theo hình hướng dẫn sau). Rút ra kết luận từ kết quả thí nghiệm.

In this kit you will learn that when fossil fuels are burnt any sulfur present forms sulfur dioxide gas. This gas is very acidic and can result in acid rain.

Observe what happens to the acidity of the water as the gases from the flask pass through it.

▲ Thí nghiệm nghiên cứu về mưa acid

- Sử dụng thẻ **Open – local** của phần mềm Yenka, thực hiện thí nghiệm ảnh hưởng của nhiệt độ lên tốc độ phản ứng “**Temperature and rate**”. Phân tích và lí giải kết quả của thí nghiệm.
- Hãy thiết kế thí nghiệm (thẻ **New**): Phản ứng của dung dịch copper (II) chloride 1 M (CuCl_2) với dung dịch potassium hydroxide 1 M (KOH).
 - Ghi rõ các bước chuẩn bị hoá chất, dụng cụ, cách tiến hành thí nghiệm.
 - Nêu hiện tượng xảy ra và giải thích.
- Thực hành thí nghiệm “**Hình dạng phân tử**” bằng phần mềm PhET. Rút ra kết luận từ kết quả thu được.

Thật Mô hình

Phân tử: H_2O

Tùy chọn:

- Hiện thị các cặp điện tử không liên kết
- Hiện thị góc liên kết

Tên hình:

- Hình học phân tử
- Hình học điện tử

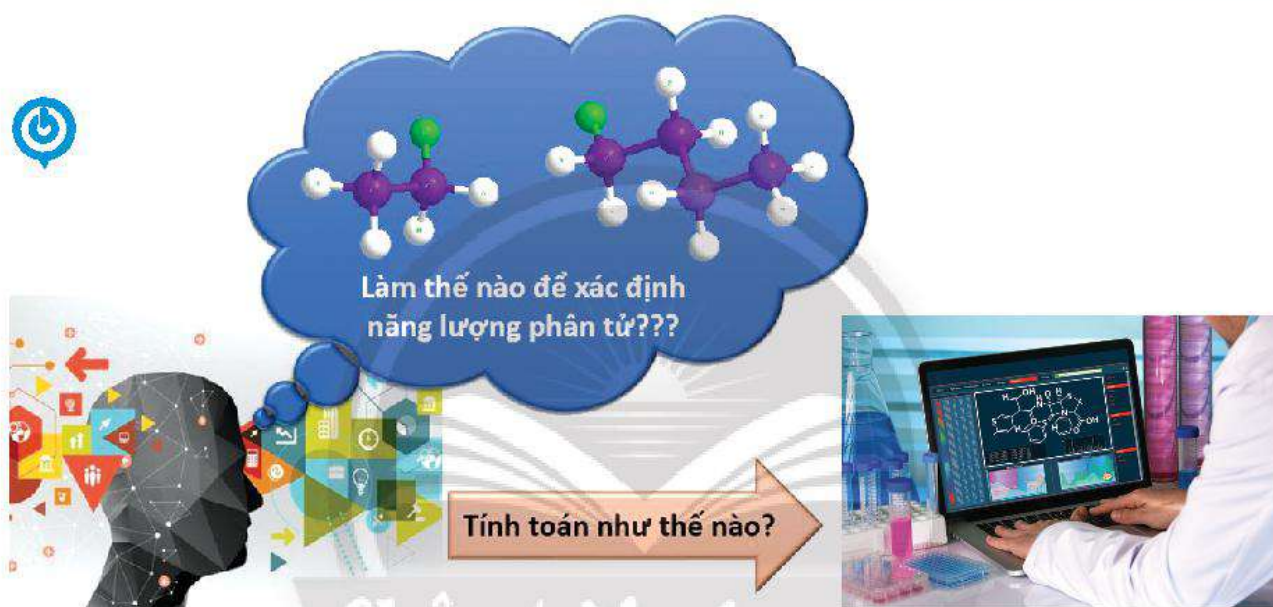
Hình dạng phân tử Mô hình Phân tử thật

PhET

Tính tham số cấu trúc và năng lượng

MỤC TIÊU

- Nêu được quy trình tính toán bằng phương pháp bán kinh nghiệm (nhập file đầu vào, chọn phương pháp tính, thực hiện tính toán, lưu kết quả).
- Sử dụng được kết quả tính toán để thấy được hình học phân tử, xu hướng thay đổi độ dài, góc liên kết và năng lượng phân tử trong dãy các chất (cùng nhóm, chu kì, dãy đồng đẳng, ...).



1 HOÁ HỌC TÍNH TOÁN

Hoá học tính toán là một chuyên ngành của hoá học lí thuyết với mục đích chính là tạo ra các mô hình toán học và sử dụng các chương trình máy tính để tính toán cấu trúc và các tính chất của phân tử (như hình học phân tử, độ dài, góc liên kết, năng lượng tổng cộng, ...) và ứng dụng các chương trình tính toán này cho các bài toán cụ thể. Tên gọi chuyên ngành này cho thấy sự giao thoa giữa khoa học máy tính và hoá học. Hoá học tính toán có hai phương thức phổ biến:

1. **Cơ học phân tử MM (Molecular Mechanics)** sử dụng những định luật vật lí cổ điển để dự đoán các tính chất và cấu trúc phân tử.
2. **Lí thuyết cấu trúc electron (electronic structure)** sử dụng các định luật cơ học lượng tử thay cho vật lí cổ điển làm cơ sở tính toán. Có hai phương pháp chủ yếu: Phương pháp bán kinh nghiệm và phương pháp tính toán lượng tử (ab initio).



1 Hãy tìm hiểu thêm những ưu điểm của Hoá học tính toán khi ứng dụng để tối ưu hoá các quá trình hoá học phức tạp.

► Tìm hiểu về quy trình tính toán bằng phương pháp bán kinh nghiệm

Các phương pháp tính toán bán kinh nghiệm, chẳng hạn như AM1, ZINDO/1, ZINDO/s, MINDO/3, PM3, ... được sử dụng trong các bộ phần mềm MOPAC, AMPAC, HyperChem và Gaussian. Các phương pháp này sử dụng những thông số đã được rút ra từ dữ liệu thực nghiệm nhằm để đơn giản hoá việc tính toán. Phương pháp này thực hiện tương đối nhanh, cung cấp những kết quả và những dự đoán định lượng khá chính xác về năng lượng và cấu trúc cho hệ trong điều kiện là các thông số phù hợp tốt với hệ khảo sát.

Phần mềm MOPAC đã tích hợp sẵn phương pháp PM7 nên rất thuận tiện cho người dùng.

► Cài đặt và sử dụng phần mềm MOPAC

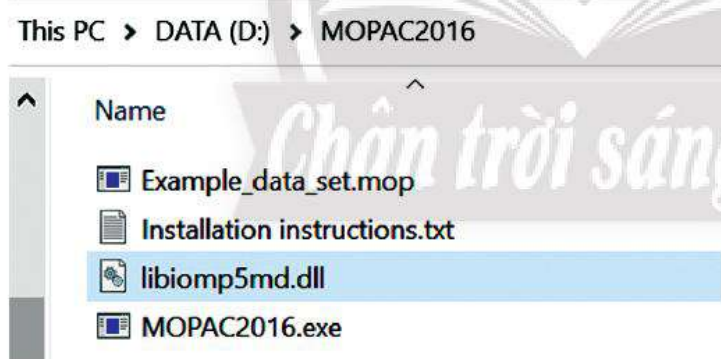
Cài đặt: Truy cập trang chủ của nhà cung cấp theo đường dẫn: http://openmopac.net/Download_MOPAC_Executable_Step2.html, nhấp vào “Download 64 bit MOPAC 2016 for windows” tải phần mềm. Lưu và giải nén trong thư mục của máy tính.

Ví dụ: D:\MOPAC2016.

Cài đặt theo hướng dẫn trong file “Installation instructions.txt”.

CHÚ Ý

Cài đặt phần mềm MOPAC có thể nhờ hỗ trợ.



▲ Hình 10.1. Phần mềm MOPAC cho Windows

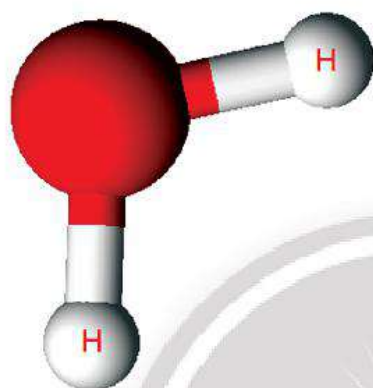
Khởi chạy phần mềm MOPAC (Windows 10): Nhấp chuột vào file MOPAC data set. Cụ thể là file **Example_data_set.mop**. Chọn **Open with**, bỏ chọn **Always use this app to open.mop files** → **Look for another app on this PC**.

Tới D:\MOPAC2016, nhấp chuột trái vào **MOPAC2016.exe**. “MOPAC2016.exe” xuất hiện trong hộp thoại **File name**. Chọn **Open**.

2 TÍNH TOÁN BẰNG PHƯƠNG PHÁP BÁN KINH NGHIỆM

Tính nhiệt tạo thành của phân tử ammonia sử dụng phần mềm MOPAC

Bước 1: Sử dụng kết quả từ phần mềm ChemSketch ở Bài 8 cho phân tử H_2O . Sau khi vẽ xong, chọn **Tool**, chọn **3D Optimization**. Sau đó chọn nút **3D Viewer** để nhận được cấu trúc 3D của phân tử.



▲ Hình 10.2. Cấu trúc 3D của phân tử H_2O

Bước 2: Trong 3D viewer vào menu file, chọn **Save as**, đặt tên file **H2O.mop** (save as file chọn **MOPAC Z Maxtrix**).

Ví dụ: Save as → D:\MOPAC2016 → H2O.mop

Bước 3: Nhấp chuột phải lên file **H2O.mop** → **Open with Notepad** → **Thêm lệnh OPT ENPART** (Xác định cấu trúc và năng lượng). Sau đó lưu lại.

```
*H2O - Notepad
File Edit Format View Help
OPT ENPART
D:\MOPAC2016\H2O.mop
```

O	0.0000	0	0.0000	0	0.0000	0	0	0	0
H	1.0120	1	0.0000	0	0.0000	0	1	0	0
H	1.0120	1	104.4999	1	0.0000	0	1	2	0

▲ Hình 10.3. Thêm lệnh vào file mop

Bước 4: Nhấp đúp chuột trái lên file **H2O.mop**, chương trình sẽ chạy và cho 2 file mới xuất hiện là **H2O.out** và **H2O.arc**. Nếu không thấy kết quả thì nhấn chuột phải lên file **H2O.mop** → **open with MOPAC2016** nằm trong thư mục D:\MOPAC2016

Bước 5: Xem xét dữ liệu xuất

Mở file **H2O.out** bằng Notepad. Ở đầu của cửa sổ output có thông tin như sau:



2 Thực hiện nhập dữ liệu như hướng dẫn cho phân tử C_2H_6 (ethane).

Options ACD/Labs Help



```

*****
** Cite this program as: MOPAC2016, Version: 21.361 , James J. P. Stewart, **
** web-site: HTTP://OpenMOPAC.net. **
*****
**
** MOPAC2016 **
**
*****

```

PM7 CALCULATION RESULTS

Ở cuối của cửa sổ output có thông tin như sau:

```

*****
*
* JOB ENDED NORMALLY *
*
*****
TOTAL JOB TIME:          0.07 SECONDS

== MOPAC DONE ==

```

Kết quả cho biết phép tính đã được thực hiện tốt và cung cấp một số dữ liệu thống kê về phép tính.

Bước 6: Diễn giải dữ liệu xuất

Phân kết quả:

```

FINAL HEAT OF FORMATION = -57.79955 KCAL/MOL
                        = -241.83333 KJ/MOL
ETOT (EONE + ETWO)      -322.6792 EV

```

Kết quả cho biết nhiệt tạo thành (FINAL HEAT OF FORMATION) của phân tử H₂O (ở điều kiện chuẩn theo tính toán) là -241,83 kJ/mol.

Tổng năng lượng của phân tử H₂O (ETOT (EONE + ETWO)) là -322,6792 eV.

Độ dài liên kết (BOND LENGTH) và góc liên kết (BOND ENGLE) của phân tử nước trong file **H2O.out** được thể hiện như hình dưới.

ATOM NUMBER (I)	CHEMICAL SYMBOL	BOND LENGTH (ANGSTROMS)	BOND ANGLE (DEGREES)		TWIST ANGLE (DEGREES)
		NA:I	NB:NA:I	NC:NB:NA:I	
1	O	0.00000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
2	H	0.95575602 *	0.0000000	0.0000000	0.0000000
3	H	0.95572694 *	105.3943918 *	0.0000000	0.0000000



Phần mềm MOPAC cho phép tính được tham số cấu trúc (độ dài liên kết, góc liên kết, ...), năng lượng phân tử, nhiệt tạo thành, ...



3 Từ kết quả nhiệt tạo thành của phân tử H₂O. So sánh với giá trị thực nghiệm, đưa ra kết luận (Giá trị thực nghiệm của phân tử H₂O(g) là -241,8 kJ/mol).

4 Từ kết quả độ dài liên kết O-H và góc liên kết H-O-H trong phân tử H₂O, so sánh với giá trị thực nghiệm, đưa ra nhận xét (Độ dài liên kết O-H là 0,97 Å, góc liên kết H-O-H là 104,5°).



Thực hành tạo file dữ liệu
a) (C2H6.mop)
b) (C3H8.mop)
Tối ưu hoá cấu trúc của phân tử và tính nhiệt tạo thành của phân tử C₂H₆, C₃H₈ bằng phương pháp PM7.

3 SỬ DỤNG KẾT QUẢ TÍNH TOÁN HIỂN THỊ ĐỘ DÀI, GÓC LIÊN KẾT CÁC CHẤT

➔ Tìm hiểu cách hiển thị các tham số cấu trúc của phân tử dựa vào kết quả tính toán phân tử

Các bước hiển thị các tham số cấu trúc:

Bước 1: Để quan sát cấu trúc nhận được sau khi tính, tìm file **H2O.arc** rồi chuyển đuôi file thành **H2O.arc.mop**.

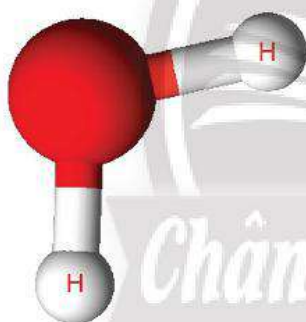
Bước 2: Mở **3D viewer** → **Open**, xuất hiện hộp thoại **Open**, chọn file **MOPAC Z Maxtrix** rồi chọn file **H2O.arc.mop** sẽ hiện hình ảnh 3D của phân tử H₂O.

Bước 3: Chọn công cụ, nháy chuột vào các nguyên tử sẽ hiển thị độ dài các liên kết và góc liên kết.



Độ dài liên kết

Góc liên kết



H #2 | X:0.60 Y:-0.46 Z:0.00 H (2)-O (1)-H (3)=105.40 Deg

H2O (2).MOP H₂O 2D | Bond Angle H (2)-O (1)-H (3)=105.40 Deg Select 2 atoms | X:0.60 Y:-0.46 Z:0.00

1-ChemSketch 2-Copy to ChemSk 3-3D View 4-3D Optimization

CHÚ Ý

Phải để chế độ hiện phần mở rộng của file. Với Windows 10, vào **Control Panel** → **File Explorer Option** → **View**, bỏ tick ở **Hide extension for known file types** để thực hiện thao tác đổi tên đuôi file ở Bước 1.

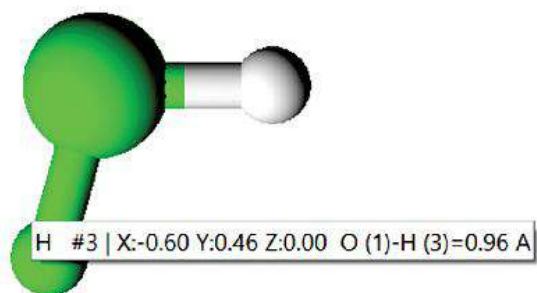
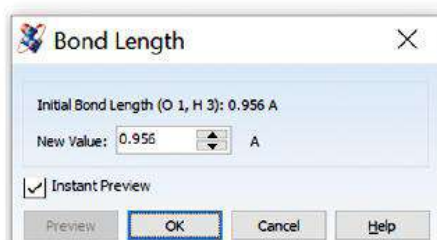


5 Sử dụng dữ liệu "Output" của phân tử C₂H₆, C₃H₈, xem và so sánh dữ liệu năng lượng của các phân tử với giá trị thực nghiệm. Biết giá trị thực nghiệm của phân tử C₂H₆, C₃H₈ lần lượt là -84,66 kJ/mol, -105,00 kJ/mol.

6 Thực hiện các bước hiển thị các tham số cấu trúc: độ dài các liên kết và góc liên kết của phân tử C₂H₆, C₃H₈.



Từ kết quả của các giá trị về năng lượng phân tử, độ dài các liên kết và góc liên kết của phân tử C₂H₆, C₃H₈ so sánh và nhận xét xu hướng thay đổi các kết quả thu được.



H2O (2).MOP H₂O 2D | Distance O (1)-H (3)=0.96 A Select 1 atom | X:-0.60 Y:0.46 Z:0.00

1-ChemSketch 2-Copy to ChemSk 3-3D View 4-3D Optimization

▲ Hình 10.4. Hiển thị độ dài liên kết và góc liên kết của phân tử H₂O



Phần mềm ChemSketch 3D Viewer cho phép xây dựng cấu trúc phân tử ban đầu và hiển thị cấu trúc của phân tử sau tính toán.

BÀI TẬP

- Tối ưu hoá cấu trúc của phân tử và tính nhiệt tạo thành của phân tử, độ dài các liên kết và góc liên kết của các phân tử bằng phương pháp PM7. Xác định quy luật biến đổi các giá trị trong dãy các chất sau:
 - Cl₂, Br₂ và I₂.
 - CH₄, NH₃, H₂O.
- Tối ưu hoá cấu trúc của phân tử và tính độ dài các liên kết H-X (Với X là F, Cl, Br, I).
- Bằng phương pháp PM7, tối ưu hoá cấu trúc của phân tử CH₄, C₄H₁₀. So sánh giá trị nhiệt tạo thành của phân tử tính được với giá trị thực nghiệm, đưa ra kết luận. Biết giá trị thực nghiệm của phân tử CH₄ và C₄H₁₀ lần lượt là -74,8 kJ/mol và -126,00 kJ/mol.
 - Sử dụng kết quả tính toán ở trên để xác định quy luật biến đổi giá trị nhiệt tạo thành của phân tử trong dãy chất: CH₄, C₂H₆, C₃H₈ và C₄H₁₀.



GIẢI THÍCH THUẬT NGỮ

Thuật ngữ	Giải thích	Trang
Phương pháp bán kinh nghiệm	Phương pháp sử dụng các thông số đã được rút ra từ các dữ liệu thực nghiệm nhằm đơn giản hoá việc tính toán	64
Phương pháp tính toán lượng tử (ab initio)	Phương pháp dựa trên những định luật cơ bản và đã được kiểm chứng	64
Tiêu lệnh chữa cháy	Những quy định về an toàn phòng cháy, chữa cháy và những chỉ dẫn, hướng dẫn các bước nhằm chế ngự ngọn lửa, tránh lan rộng cũng như giữ an toàn tính mạng cho mọi người mỗi khi có hoả hoạn	42







Nhà xuất bản Giáo dục Việt Nam xin trân trọng cảm ơn các tác giả có tác phẩm, tư liệu được sử dụng, trích dẫn trong cuốn sách này.

Chịu trách nhiệm xuất bản:

Chủ tịch Hội đồng Thành viên NGUYỄN ĐỨC THÁI
Tổng Giám đốc HOÀNG LÊ BÁCH

Chịu trách nhiệm nội dung:

Tổng biên tập PHẠM VĨNH THÁI

Biên tập nội dung: NGUYỄN ĐỨC HIẾU – PHẠM CÔNG TRÌNH

Thiết kế sách: HOÀNG CAO HIỀN

Trình bày bìa: THÁI HỮU DƯƠNG

Minh họa: BAN KẾ – MỸ THUẬT – CÔNG TY CP DỊCH VỤ XBGD GIA ĐỊNH

Sửa bản in: PHẠM BẢO QUÝ – PHẠM CÔNG TRÌNH

Chế bản: CÔNG TY CP DỊCH VỤ XBGD GIA ĐỊNH

Bản quyền © (2022) thuộc Nhà xuất bản Giáo dục Việt Nam.

Xuất bản phẩm đã đăng kí quyền tác giả. Tất cả các phần của nội dung cuốn sách này đều không được sao chép, lưu trữ, chuyển thể dưới bất kì hình thức nào khi chưa có sự cho phép bằng văn bản của Nhà xuất bản Giáo dục Việt Nam.



CHUYÊN ĐỀ HỌC TẬP HOÁ HỌC 10 (CHÂN TRỜI SÁNG TẠO)

Mã số: G2HHXH002M22

In bản, (QĐ in số) khổ 19 x 26,5 cm

Đơn vị in:

Địa chỉ:

Số ĐKXB: 593-2022/CXBIPH/48-397/GD

Số QĐXB:, ngày tháng năm 20...

In xong và nộp lưu chiểu tháng năm 20...

Mã số ISBN: 978-604-0-32007-0



HUÂN CHƯƠNG HỒ CHÍ MINH

BỘ SÁCH GIÁO KHOA LỚP 10 – CHÂN TRỜI SÁNG TẠO

1. Toán 10, Tập một
2. Toán 10, Tập hai
3. Chuyên đề học tập Toán 10
4. Ngữ văn 10, Tập một
5. Ngữ văn 10, Tập hai
6. Chuyên đề học tập Ngữ văn 10
7. Tiếng Anh 10
Friends Global - Student Book
8. Lịch sử 10
9. Chuyên đề học tập Lịch sử 10
10. Địa lí 10
11. Chuyên đề học tập Địa lí 10
12. Giáo dục Kinh tế và Pháp luật 10
13. Chuyên đề học tập Giáo dục Kinh tế và Pháp luật 10
14. Vật lí 10
15. Chuyên đề học tập Vật lí 10
16. Hoá học 10
17. Chuyên đề học tập Hoá học 10
18. Sinh học 10
19. Chuyên đề học tập Sinh học 10
20. Âm nhạc 10
21. Chuyên đề học tập Âm nhạc 10
22. Hoạt động trải nghiệm, hướng nghiệp 10 (BẢN 1)
23. Hoạt động trải nghiệm, hướng nghiệp 10 (BẢN 2)
24. Giáo dục quốc phòng và an ninh 10

Các đơn vị đầu mối phát hành

- **Miền Bắc:** CTCP Đầu tư và Phát triển Giáo dục Hà Nội
CTCP Sách và Thiết bị Giáo dục miền Bắc
 - **Miền Trung:** CTCP Đầu tư và Phát triển Giáo dục Đà Nẵng
CTCP Sách và Thiết bị Giáo dục miền Trung
 - **Miền Nam:** CTCP Đầu tư và Phát triển Giáo dục Phương Nam
CTCP Sách và Thiết bị Giáo dục miền Nam
 - **Cửu Long:** CTCP Sách và Thiết bị Giáo dục Cửu Long
- Sách điện tử:** <http://hanhtrangso.nxbgd.vn>

Kích hoạt để mở học liệu điện tử: Cào lớp nhũ trên tem để nhận mã số. Truy cập <http://hanhtrangso.nxbgd.vn> và nhập mã số tại biểu tượng chia khoá.



ISBN 978-604-0-32007-0



9 786040 320070

Giá: 13.000 đ