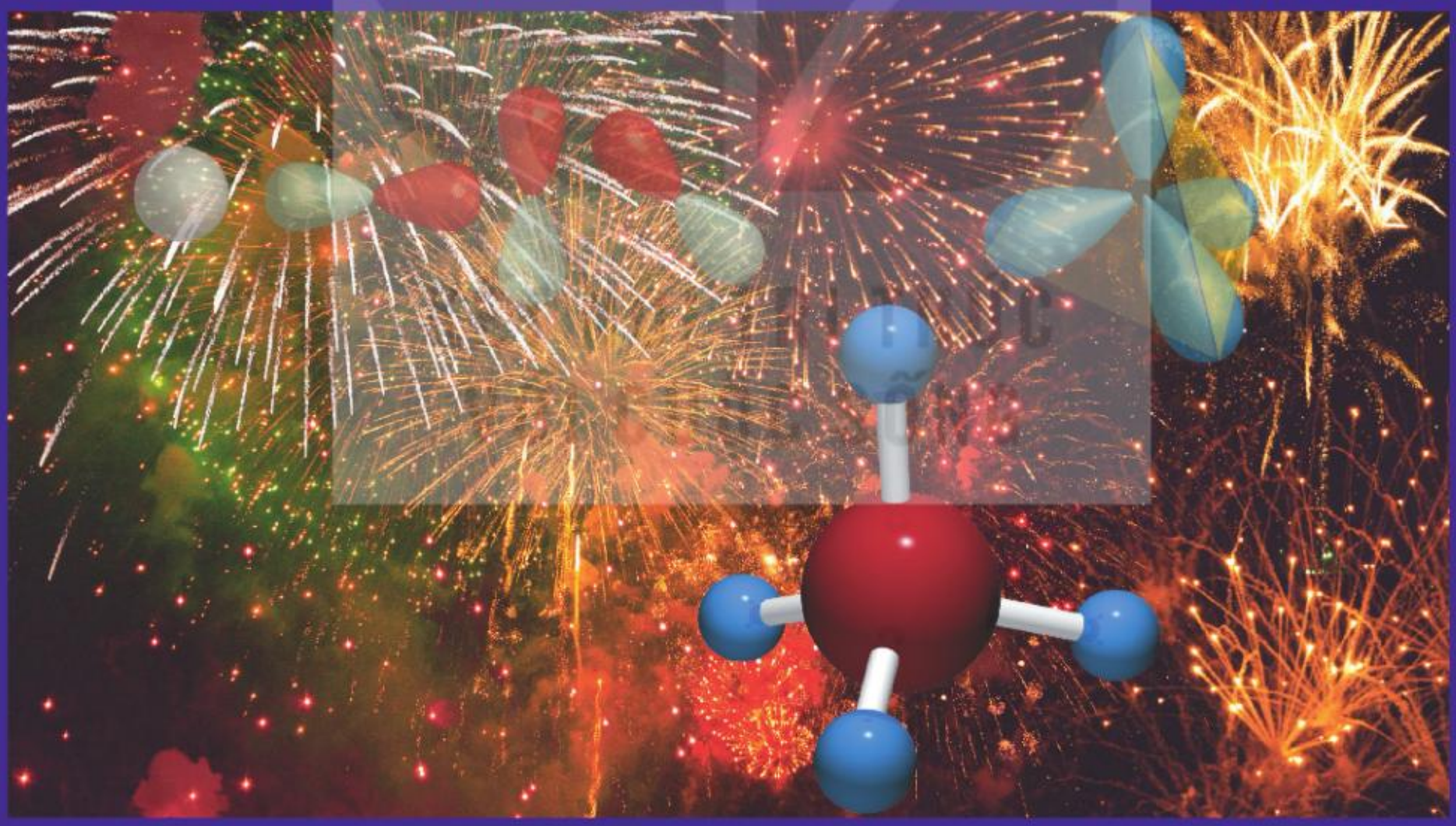
BỘ GIÁO DỤC VÀ ĐÀO TẠO

CHUYÊN ĐỀ HỌC TẬP
HOÁ HỌC 10

SÁCH GIÁO VIÊN



NHÀ XUẤT BẢN GIÁO DỤC VIỆT NAM

LÊ KIM LONG (Tổng Chủ biên)
ĐẶNG XUÂN THƯ (Chủ biên)
NGÔ TUẤN CƯỜNG – NGUYỄN VĂN HẢI – VŨ ANH TUẤN

CHUYÊN ĐỀ HỌC TẬP
HOÁ HỌC
10

SÁCH GIÁO VIÊN

KẾT NỐI TRI THỨC VỚI CUỘC SỐNG

(Tái bản lần thứ nhất)

NHÀ XUẤT BẢN GIÁO DỤC VIỆT NAM

QUY ƯỚC VIẾT TẮT DÙNG TRONG SÁCH

HS	học sinh
GV	giáo viên
SGK	sách giáo khoa
SGV	sách giáo viên
THCS	trung học cơ sở
THPT	trung học phổ thông
NTHH	nhận thức hoá học
THTN	tìm hiểu tự nhiên
VDKT	vận dụng kiến thức
GTHT	giao tiếp và hợp tác
GQVĐ	giải quyết vấn đề

KẾT NỐI TRI THỨC
VỚI CUỘC SỐNG

LỜI NÓI ĐẦU

Sách giáo viên *Chuyên đề học tập Hoá học 10* là tài liệu tham khảo cho giáo viên trong việc xây dựng kế hoạch bài dạy và giảng dạy *Chuyên đề học tập Hoá học 10*. Sách được biên soạn theo Chương trình giáo dục phổ thông môn Hoá học do Bộ Giáo dục và Đào tạo ban hành ngày 26 tháng 12 năm 2018.

Sách giáo viên *Chuyên đề học tập Hoá học 10* giới thiệu với giáo viên phương án dạy các bài học trong chuyên đề theo hướng tổ chức các hoạt động học tập đa dạng, mang tính khám phá, dựa trên các tình huống thực tiễn của cuộc sống. Giúp học sinh mở rộng kiến thức hoá học phổ thông, phát triển năng lực và trau dồi phẩm chất; đồng thời góp phần nâng cao khả năng định hướng nghề nghiệp cho các em sau này.

Sách gồm hai phần:

Phần một. Hướng dẫn chung

Phần một giới thiệu những đặc điểm cơ bản của Chương trình giáo dục phổ thông môn Hoá học ban hành năm 2018 cấp Trung học phổ thông và sách *Chuyên đề học tập Hoá học 10*.

Phần hai. Hướng dẫn dạy học

Phần hai tập trung vào việc giới thiệu các phương án tổ chức hoạt động dạy và học cho từng bài trong chuyên đề. Mỗi bài đều có các mục chính sau đây:

I. MỤC TIÊU

II. CHUẨN BỊ

III. THÔNG TIN BỔ SUNG

IV. GỢI Ý TỔ CHỨC CÁC HOẠT ĐỘNG DẠY, HỌC

V. HƯỚNG DẪN TRẢ LỜI CÂU HỎI TRONG SGK

VI. GỢI Ý KIỂM TRA, ĐÁNH GIÁ

Các phương án tổ chức hoạt động dạy và học trong mỗi bài bao gồm từ nội dung, hình thức tổ chức, phương thức đánh giá, những điều cần lưu ý,... đến phân phối thời gian đều chỉ là những gợi ý. Các thầy, cô giáo tuỳ ý lựa chọn, điều chỉnh, sáng tạo ra các phương án riêng của mình sao cho phù hợp với đặc điểm của học sinh, điều kiện dạy và học ở địa phương, trường và lớp.

Mong rằng cuốn sách này có thể góp phần giúp các thầy, cô dạy tốt *Chuyên đề học tập Hoá học 10*. Các tác giả rất mong nhận được ý kiến đóng góp, nhận xét của các thầy, cô và bạn đọc.

Các tác giả

KẾT NỐI TRI THỨC VỚI CUỘC SỐNG

MỤC LỤC

Trang

Lời nói đầu 3

Phần một. HƯỚNG DẪN CHUNG 5

Phần hai. HƯỚNG DẪN DẠY HỌC 10

Chuyên đề 1. CƠ SỞ HOÁ HỌC 10

Bài 1. Liên kết hoá học 10

Bài 2. Phản ứng hạt nhân 25

Bài 3. Năng lượng hoạt hoá của phản ứng hoá học 33

Bài 4. Entropy và biến thiên năng lượng tự do Gibbs 39

Chuyên đề 2. HOÁ HỌC TRONG VIỆC PHÒNG CHỐNG CHÁY, NỔ 50

Bài 5. Sơ lược về phản ứng cháy, nổ 50

Bài 6. Điểm chớp cháy. Nhiệt độ ngọn lửa. Nhiệt độ tự bốc cháy 55

Bài 7. Hoá học về phản ứng cháy, nổ 65

Bài 8. Phòng chống cháy, nổ 72

Chuyên đề 3. THỰC HÀNH HOÁ HỌC VÀ CÔNG NGHỆ THÔNG TIN 78

Bài 9. Thực hành vẽ cấu trúc phân tử 78

Bài 10. Thực hành thí nghiệm hoá học ảo 84

Bài 11. Thực hành tính tham số cấu trúc và năng lượng 89

KẾT NỐI TRI THỨC VỚI CUỘC SỐNG

PHẦN
MỘT HƯỚNG DẪN CHUNG

I MỤC ĐÍCH VÀ QUAN ĐIỂM BIÊN SOẠN CHUYÊN ĐỀ HỌC TẬP HOÁ HỌC 10

1. Mục đích biên soạn

Chương trình giáo dục phổ thông 2018 được chia thành hai giai đoạn: giai đoạn giáo dục cơ bản (từ lớp 1 đến lớp 9) và giai đoạn giáo dục định hướng nghề nghiệp (từ lớp 10 đến lớp 12). Giai đoạn giáo dục cơ bản thực hiện phương châm giáo dục toàn diện và tích hợp, trang bị cho HS tri thức phổ thông nền tảng, đáp ứng yêu cầu phân luồng mạnh sau cấp THCS. Giai đoạn giáo dục định hướng nghề nghiệp thực hiện phương châm giáo dục phân hoá, bảo đảm HS được tiếp cận nghề nghiệp, chuẩn bị cho giai đoạn học sau phổ thông có chất lượng.

Cả hai giai đoạn giáo dục cơ bản và giáo dục định hướng nghề nghiệp đều có các môn học tự chọn; giai đoạn giáo dục định hướng nghề nghiệp có thêm các môn học và chuyên đề học tập lựa chọn. Mỗi môn học có một số chuyên đề học tập tạo thành cụm chuyên đề học tập của môn học nhằm đáp ứng nguyện vọng, phát triển tiềm năng, sở trường của mỗi HS, thực hiện yêu cầu phân hoá sâu, giúp HS tăng cường kiến thức và kĩ năng thực hành, vận dụng kiến thức, kĩ năng đã học giải quyết những vấn đề của thực tiễn, đáp ứng yêu cầu định hướng nghề nghiệp.

Thời lượng dành cho mỗi chuyên đề học tập ở mỗi lớp 10, 11, 12 là 10 tiết hoặc 15 tiết; tổng thời lượng dành cho cụm chuyên đề học tập của một môn học là 35 tiết/năm học. Môn Hoá học thuộc nhóm môn Khoa học tự nhiên được HS lựa chọn theo định hướng nghề nghiệp, sở thích và năng lực của bản thân, giúp HS tiếp tục phát triển năng lực khoa học tự nhiên dưới các góc độ hoá học. Đồng thời, môn Hoá học cùng với các môn Toán, Vật lí, Sinh học, Tin học, Công nghệ có vai trò quan trọng trong việc thực hiện giáo dục STEM.

Các chuyên đề hoá học vừa bảo đảm phát triển tri thức và kĩ năng trên nền tảng những năng lực hoá học và năng lực khoa học tự nhiên, vừa đáp ứng yêu cầu định hướng nghề nghiệp vào một số ngành nghề cụ thể liên quan đến hoá học.

Bộ sách *Chuyên đề học tập Hoá học* của Nhà xuất bản Giáo dục Việt Nam đáp ứng đầy đủ các yêu cầu cần đạt được quy định trong Chương trình giáo dục phổ thông mới dành cho HS từ lớp 10 đến lớp 12 trên tất cả các vùng miền của đất nước.

2. Quan điểm biên soạn

Hai quan điểm mang tính chủ đạo cho việc biên soạn sách chuyên đề học tập nói chung và sách *Chuyên đề học tập Hoá học 10* nói riêng phục vụ cho việc triển khai Chương trình

giáo dục phổ thông 2018 là tuân thủ định hướng đổi mới Giáo dục phổ thông và bám sát các tiêu chuẩn SGK theo thông tư số 33/2017 của Bộ GD&ĐT. Quan điểm về lựa chọn nội dung và trình bày kiến thức trong sách *Chuyên đề học tập Hoá học 10* là coi trọng việc phát triển toàn diện phẩm chất và năng lực của người học nhưng không coi nhẹ vai trò của kiến thức. Kiến thức trong sách chuyên đề là chất liệu, làm cơ sở cho việc giúp HS hình thành và phát triển các phẩm chất và năng lực cần có trong cuộc sống hiện tại và tương lai. Theo cách tiếp cận đó, các kiến thức được lựa chọn và trình bày trong sách chuyên đề phải đảm bảo:

(1) Phát triển những năng lực hoá học thông qua mở rộng, đào sâu kiến thức hoá học đã được hình thành trong chương trình, SGK hoá học.

(2) Phản ánh những vấn đề của cuộc sống, cập nhật những thành tựu mới của khoa học và công nghệ, phù hợp với văn hoá và thực tiễn Việt Nam.

(3) Có nhiều ứng dụng thực tế và có ý nghĩa trong hiện tại và cả trong tương lai.

(4) Định hướng nghề nghiệp vào một số ngành nghề cụ thể liên quan đến hoá học.

(5) Phù hợp với đặc điểm tâm sinh lí và trải nghiệm của lứa tuổi.

(6) Việc lựa chọn trình bày kiến thức trong sách *Chuyên đề học tập Hoá học 10* không chỉ tập trung vào nội dung kiến thức mà còn phải đặc biệt chú ý tới phương pháp hình thành và phát triển năng lực. Sách *Chuyên đề học tập Hoá học 10* không phải là cuốn sách trình bày sẵn các nội dung kiến thức cần học mà là cuốn sách hướng dẫn HS hoạt động một cách có phương pháp để khám phá ra kiến thức mới và vận dụng chúng vào việc giải quyết các vấn đề của học tập cũng như của thực tế cuộc sống và bắt đầu định hướng nghề nghiệp, có kế hoạch lựa chọn học tập thích hợp nhằm đáp ứng các yêu cầu định hướng nghề nghiệp của mình.

(7) Tạo điều kiện thuận lợi để GV có thể tổ chức các hoạt động dạy và học đa dạng, áp dụng các phương pháp dạy học hiện đại (dạy học dựa trên vấn đề, dạy học dựa trên nhiệm vụ,…) nhằm phát triển toàn diện phẩm chất và năng lực của HS.

Nội dung kiến thức trong sách chuyên đề Hoá học được cấu trúc thành các chuyên đề, mỗi chuyên đề gồm một số bài học có thể thực hiện trong 2 – 4 giờ học. Mỗi bài học trong sách *Chuyên đề học tập Hoá học 10* đều được thiết kế thành một hệ thống các hoạt động từ đọc hiểu đến tìm tòi khám phá kiến thức mới và vận dụng kiến thức để giải quyết các vấn đề của học tập và của cuộc sống; từ hoạt động cá nhân đến hoạt động tập thể; từ hoạt động trong nhà trường đến hoạt động ngoài nhà trường;…

(8) Tạo điều kiện để HS có thể tự học khi cần thiết. Sách *Chuyên đề học tập Hoá học 10* được viết để HS học tập dưới sự hướng dẫn của GV, nhưng vẫn phải thiết kế để sao cho khi cần thiết HS vẫn có thể tự học được những kiến thức cơ bản cần thiết nhất của bài học.

(9) Tạo điều kiện thuận lợi cho việc GV đánh giá kết quả học tập của HS cũng như HS tự đánh giá kết quả học tập của mình qua từng bài học.

(10) Lựa chọn và trình bày kiến thức theo hướng tinh giản hợp lí. Cụ thể là:

– Tập trung vào nội dung cơ bản, loại bỏ những chi tiết phức tạp, chưa thực sự cần thiết cho việc hình thành kiến thức cơ bản, ít có vận dụng trong cuộc sống.

– Đơn giản hoá nội dung kiến thức tới mức tối đa có thể cho phù hợp với điều kiện dạy và học hiện nay ở nước ta.

– Tận dụng hình ảnh, biểu bảng, sơ đồ, giảm câu chữ.

– Không đưa ra các mức độ yêu cầu vượt các yêu cầu cần đạt quy định trong chương trình.

– Tăng cường kết nối giữa các lớp và các môn học.

– Thực hiện tích hợp nội môn và ngoại môn ở mức độ thích hợp.

Sách *Chuyên đề học tập Hoá học* theo định hướng phát triển năng lực là tài liệu giáo khoa mới mà trước đây chưa có trong giáo dục phổ thông. Mặc dù thời lượng dành cho chuyên đề chỉ là 35 tiết/năm, tuy nhiên sách chuyên đề đã đề cập đến kiến thức rộng, sâu và hiện đại. Để hiểu được các kiến thức này đòi hỏi năng lực tư duy, toán học và những kiến thức nền tảng khác, vì vậy việc trình bày kiến thức cần đơn giản, dễ hiểu đối với HS.

II GIỚI THIỆU SÁCH GIÁO KHOA CHUYÊN ĐỀ HỌC TẬP HOÁ HỌC 10

1. Cấu trúc và nội dung

Cuốn *Chuyên đề học tập Hoá học 10* gồm ba chuyên đề và có cấu trúc như sau:

Hướng dẫn sử dụng sách

Lời nói đầu

Chuyên đề 1. CƠ SỞ HOÁ HỌC (15 tiết)

Bài 1. Liên kết hoá học

Bài 2. Phản ứng hạt nhân

Bài 3. Năng lượng hoạt hoá của phản ứng hoá học

Bài 4. Entropy và biến thiên năng lượng tự do Gibbs

Chuyên đề 2. HOÁ HỌC TRONG VIỆC PHÒNG CHỐNG CHÁY, NỔ (10 tiết)

Bài 5. Sơ lược về phản ứng cháy, nổ

Bài 6. Điểm chớp cháy. Nhiệt độ ngọn lửa. Nhiệt độ tự bốc cháy

Bài 7. Hoá học về phản ứng cháy, nổ

Bài 8. Phòng chống cháy, nổ

Chuyên đề 3. THỰC HÀNH HOÁ HỌC VÀ CÔNG NGHỆ THÔNG TIN (10 tiết)

(Chọn 2 trong 3 nội dung dưới đây)

Bài 9. Thực hành vẽ cấu trúc phân tử

Bài 10. Thực hành thí nghiệm hoá học ảo

Bài 11. Thực hành tính tham số cấu trúc và năng lượng

Mỗi bài học được thiết kế thống nhất, hướng dẫn các hoạt động học tập bằng các kí hiệu biểu trưng cho các phương pháp và hình thức tổ chức dạy học.

Các hoạt động học tập phổ biến trong mỗi bài học:

Mở đầu: dẫn dắt HS tiếp cận bài học mới bằng sự tạo động lực khám phá, kết nối các tri thức đã biết, định hướng vào vấn đề sẽ học với tư thế của người nghiên cứu.

Khám phá: xây dựng tri thức mới dựa trên trải nghiệm của HS. HS thực hiện các nhiệm vụ học tập như đọc hiểu các nội dung khoa học hay thực hiện thí nghiệm dưới sự hướng dẫn của GV để tìm tòi, khám phá tri thức. Ví dụ, HS được giới thiệu về khái niệm phản ứng thu nhiệt và toả nhiệt qua đọc hiểu và rút ra quy luật.

Hoạt động: HS trực tiếp quan sát các hình ảnh hay trực tiếp thực hiện thí nghiệm, quá trình thử nghiệm và trải nghiệm để phát hiện, hình thành tri thức mới và vận dụng tri thức mới vào các tình huống giả định hoặc tình huống trong thực tế cuộc sống.

Câu hỏi: HS tự trả lời câu hỏi, giải bài tập vận dụng để hiểu rõ vấn đề nghiên cứu, phát triển năng lực tư duy, năng lực vận dụng kiến thức đã học, giúp GV đánh giá đúng việc học tập của HS.

Em đã học: nêu ra yêu cầu tối thiểu về kiến thức, kĩ năng cơ bản của bài học HS cần có được.

Em có thể: nêu ra yêu cầu tối thiểu về năng lực của HS trong việc vận dụng kiến thức đã học để giải quyết tình huống thực tiễn của cuộc sống liên quan đến nội dung đã học.

Ngoài ra, trong sách còn có các nội dung liên kết bài học với đời sống, các tri thức mở rộng tạo niềm say mê khám phá khoa học và mở ra định hướng học tập, nghiên cứu khoa học cho HS.

2. Đổi mới phương pháp và hình thức dạy học

Thuật ngữ chuyên đề là vấn đề chuyên môn được nghiên cứu riêng. Mỗi chuyên đề dạy học phải giải quyết trọn vẹn một vấn đề học tập.

Đặc trưng của phương pháp và hình thức dạy học chuyên đề:

– Dạy học theo chuyên đề khác với việc dạy theo bài học thông thường nhưng vẫn phải đảm bảo các yêu cầu cần đạt của chương trình và SGK, được nâng lên một mức độ nhất định cao hơn. Tuy vậy, cần chú ý đến tính vừa sức của chuyên đề: cân đối giữa khối lượng và mức độ kiến thức trong chuyên đề.

– Vấn đề được học tập trong chuyên đề là một vấn đề cơ bản của chương trình, SGK THPT có mối quan hệ mật thiết với nhau, có những điểm tương đồng về nội dung kiến thức, khi tổ chức dạy học chuyên đề thì cần tạo nên một chuỗi các vấn đề học tập cần giải quyết. Khi giải quyết được nhiệm vụ học tập đó sẽ tạo thành một nội dung hoàn chỉnh, toàn diện cả chiều dọc lẫn chiều ngang của chuyên đề.

– Nội dung được lựa chọn đưa vào cuốn sách *Chuyên đề học tập Hoá học 10* cần thiết thực và gần gũi với cuộc sống, bám sát mức độ, yêu cầu của Chương trình Giáo dục phổ thông 2018. Hoạt động học tập gắn liền với các vấn đề thực tế xung quanh, phù hợp với chương trình môn học để HS được bước đầu làm quen với nghiên cứu về những nội dung

cơ bản về hoá học, vận dụng tri thức cơ bản về hoá học vào các tình huống thực tế đã và đang xảy ra trong sản xuất, khoa học, công nghệ ở phạm vi gia đình, cộng đồng, đất nước và trên thế giới.

Cụ thể:

– *Tạo cơ hội cho HS tự học:* Sách được thiết kế nhằm cung cấp từng bước thông tin, sự kiện, tình huống thực tế,... để HS có thể tiếp nhận thông tin, tự tìm tòi, khám phá tri thức chuyên sâu về hoá học, thực hiện các nhiệm vụ học tập (khai thác thông tin, nhận xét, phân tích, tổng hợp, đánh giá,...) chủ động tạo ra các sản phẩm học tập, nhất là các sản phẩm của quá trình nghiên cứu, tìm hiểu để có định hướng về nghề nghiệp tương lai.

– *Bồi dưỡng khả năng giao tiếp và hợp tác:* Thông qua các hoạt động học tập và nghiên cứu theo nhóm, HS biết cách làm việc cá nhân dựa trên sự phân công và hợp tác, hình thành kĩ năng trình bày, bảo vệ ý kiến cá nhân và tổng hợp kết quả làm việc nhóm.

– *Hình thành và phát triển năng lực* nhận thức hoá học, tìm hiểu hoá học, vận dụng kiến thức và kĩ năng vào thực tiễn đời sống liên quan đến hoá chất và sử dụng hoá chất an toàn và hiệu quả: Thông qua các hoạt động học tập, khám phá và các hoạt động thực hành, HS hình thành và phát triển năng lực cần thiết liên quan đến tính đặc thù của ngành hoá học.

– *Bồi dưỡng phẩm chất cho HS:* Trong tất cả các hoạt động học tập và nghiên cứu khoa học, HS hình thành, phát triển và khẳng định các thành tố của phẩm chất cá nhân như sự ham hiểu biết, khách quan, trung thực, dũng cảm thể hiện qua sự sẵn sàng tiếp cận cái mới, kiên trì và trách nhiệm, có ý thức sáng tạo trong thực hành thí nghiệm an toàn và thành công,...

Các nội dung đưa ra còn nhằm mục đích bước đầu định hướng nghề nghiệp liên quan đến hoá học, như lĩnh vực hoá học hạt nhân, hoá học trong phòng cháy chữa cháy, hoá học và công nghệ thông tin.

– *GV có thể sử dụng phối hợp nhiều phương pháp và hình thức tổ chức dạy học tích cực khác nhau*: nghiên cứu tình huống, giao nhiệm vụ, hoạt động hợp tác, dự án học tập, tổng kết, sơ đồ hoá nội dung,... Các hoạt động trong SGK mang tính mở giúp GV sáng tạo, linh hoạt trong quá trình dạy học sao cho phù hợp với HS, với điều kiện của trường lớp, vùng miền,...

PHẦN
HAI

HƯỚNG DẪN DẠY HỌC

CHUYÊN ĐỀ 1. CƠ SỞ HOÁ HỌC

Bài 1. LIÊN KẾT HOÁ HỌC

I MỤC TIÊU

Sau bài học, HS sẽ:

– Viết được công thức Lewis, sử dụng được mô hình VSEPR để dự đoán dạng hình học của 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.

II CHUẨN BỊ

– Bảng tuần hoàn các nguyên tố hoá học cỡ lớn.

– Tranh ảnh và các video liên quan đến sự lai hoá orbital nguyên tử.

III THÔNG TIN BỔ SUNG

1. Nguyên tử trung tâm và phối tử

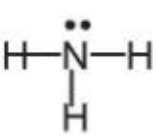
Nguyên tử trung tâm của một phân tử hay ion là nguyên tử cần nhiều nhất số electron để tạo octet cho vỏ hoá trị của nó (hay nguyên tử có số oxi hoá cao nhất về giá trị tuyệt đối), các nguyên tử khác của phân tử hay ion đó là phối tử.

Phối tử có 2 loại:

• Nguyên tử X có liên kết hoá học với trung tâm A được gọi là phối tử X. Kí hiệu: AX_n.

Ví dụ: CO_2, CH_4,… (nguyên tử trung tâm là C và phối tử là O và H).

• Cặp electron chưa liên kết của nguyên tử trung tâm A gọi là phối tử E. Kí hiệu: AX_nE_m.

Ví dụ:  (nguyên tử trung tâm là N, phối tử là các nguyên tử H và cặp electron chưa liên kết của nguyên tử N); có thể viết là NH_3E.

2. Cấu tạo cộng hưởng và các liên kết giải toả

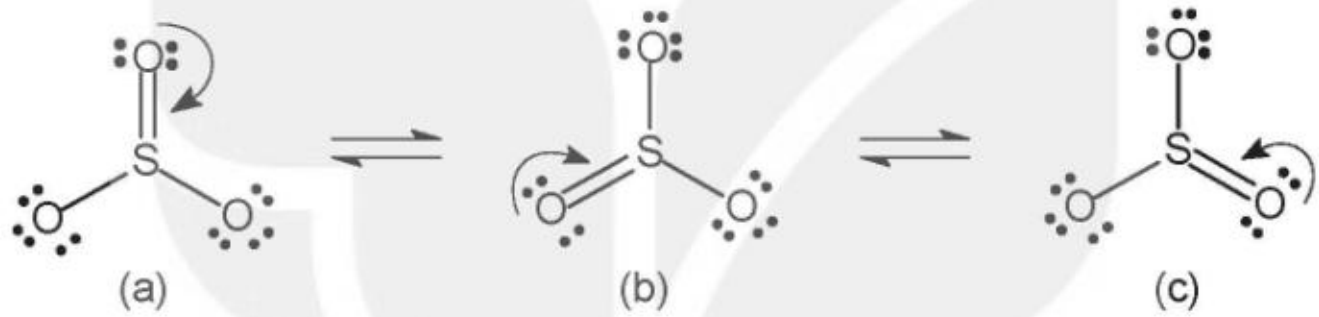
a) Cấu trúc cộng hưởng

Chúng ta có thể vẽ hai hoặc nhiều cấu trúc Lewis cho một số phân tử và ion đa nguyên tử, mà không thay đổi vị trí của các nguyên tử trong cấu trúc. Trong trường hợp này, chỉ có sự phân bố electron khác nhau từ cấu trúc này sang cấu trúc khác. Những cấu trúc này được gọi là *cấu trúc cộng hưởng*. Nhưng trong thực tế, các phân tử có cấu trúc trung gian của những cấu trúc Lewis có thể.

b) Xác định phân tử có cấu trúc cộng hưởng

Sự cộng hưởng chỉ tồn tại khi một cấu trúc Lewis có nhiều liên kết và một nguyên tử liền kề có ít nhất một cặp electron chưa liên kết. Mũi tên được sử dụng để chỉ sự dịch chuyển của các electron từ cấu trúc cộng hưởng này sang cấu trúc cộng hưởng khác.

Ví dụ: ba cấu tạo Lewis cộng hưởng (a), (b), (c) biểu diễn phân tử SO_3, có 3 liên kết S—O và nguyên tử O có từ 2 đến 3 cặp electron chưa liên kết (Hình 1.1).



Hình 1.1. *Cấu tạo cộng hưởng của phân tử SO_3*

c) Các liên kết giải toả

Thực nghiệm cho biết các liên kết S—O có độ dài như nhau (145 pm), theo các cấu trúc cộng hưởng nêu trên thì chưa phù hợp (vì độ dài của liên kết đơn phải lớn hơn so với liên kết đôi). Khi đó, có thể coi các liên kết kép được di chuyển và không định chỗ, nghĩa là các cặp electron liên kết được phân bố đều trên toàn hệ (như giải toả), ta có cấu trúc Lewis giải toả.

Ví dụ: các liên kết giải toả trong cấu trúc phân tử SO_3 và ion CO_3^{2-} (Hình 1.2).



Hình 1.2. *Các liên kết giải toả trong cấu trúc phân tử SO_3 (a) và ion CO_3^{2-} (b)*

3. Mô hình VSEPR (mô hình sức đẩy giữa các cặp electron hoá trị)

VSEPR (Valence Shell Electron Pair Repulsion) là thuyết về sức đẩy giữa các cặp electron hoá trị và dạng hình học của phân tử. Thuyết này còn có tên khác là thuyết Gillespie-Nyholm

hay còn gọi là thuyết đẩy, dựa theo tên của hai nhà khoa học là tác giả của thuyết. Thuyết VSEPR giúp dự đoán khá chính xác góc hoá trị trong những phân tử có những cặp electron không phân chia hoặc có liên kết kép.

Ý tưởng về sự liên quan giữa dạng hình học của cấu tạo phân tử với sức đẩy của các electron (giữa các electron liên kết và chưa liên kết) được giới thiệu lần đầu tiên bởi hai nhà khoa học Nevil Sidgwick và Herbert Powell tại Đại học Oxford năm 1940, trong bài giảng mang tên Bakerian Lecture. Năm 1957, hai nhà khoa học Ronald Gillespie và Ronald Sydney Nyholm tại Đại học London đã đưa ra kết quả nghiên cứu công nhận quan điểm trên, đồng thời đã xây dựng một lí thuyết chi tiết về dạng hình học của phân tử.

Vỏ electron hoá trị của nguyên tử trong phân tử liên kết cộng hoá trị có cặp electron liên kết và cặp electron chưa liên kết. Liên kết cộng hoá trị giữa hai nguyên tử được tạo thành nhờ cặp electron liên kết và được phân bố trong khoảng không gian giữa hai hạt nhân nguyên tử tạo nên liên kết đó. Liên kết cộng hoá trị là liên kết có tính định hướng không gian làm cho phân tử có hình dạng nhất định. Cấu hình các liên kết của nguyên tử phụ thuộc vào tổng số cặp electron liên kết và chưa liên kết của nguyên tử.

Mô hình VSEPR giải thích sự phân bố về phương diện hình học của các cặp electron xung quanh nguyên tử trung tâm dựa trên sự đẩy của các cặp electron đó.

Công thức VSEPR: phân tử AX_nE_m.

Trong đó:

A: nguyên tử trung tâm có các cặp electron hoá trị tạo liên kết;

X: cặp electron liên kết σ với A; n: số cặp electron tạo liên kết σ;

E: cặp electron chưa liên kết; m: số cặp electron chưa liên kết;

$m + n = q$: tổng số cặp electron bao quanh nguyên tử A.

Ví dụ: Kí hiệu phân tử nước: H_2OE_2, phân tử ammonia: NH_3E.

Nội dung của mô hình: "Các cặp electron (có khi là electron độc thân) trong vỏ hoá trị được phân bố xa nhau nhất tới mức có thể để lực đẩy giữa chúng ở mức thấp nhất".

Quy tắc thuyết sức đẩy:

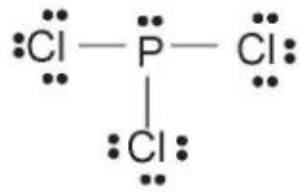
– Cấu hình các liên kết của nguyên tử hay ion trung tâm đa hoá trị chỉ phụ thuộc vào tổng số cặp electron hoá trị $m + n = q$ bao quanh nó.

– Kích thước các orbital của cặp electron hoá trị được phân bố sao cho sức đẩy giữa các cặp electron đó là tối thiểu.

– Sức đẩy của các cặp electron giảm theo thứ tự: E—E > E—X > X—X.

– Nguyên tử trung tâm A có độ âm điện lớn sẽ kéo mây electron của cặp electron liên kết về phía nó nhiều hơn làm cho góc liên kết tăng. Phối tử X có độ âm điện lớn sẽ kéo mây electron của cặp electron liên kết về phía nó nhiều hơn làm cho góc liên kết giảm.

Ví dụ: phân tử PCl_3 có công thức VSEPR là AX_3E với cấu tạo Lewis:

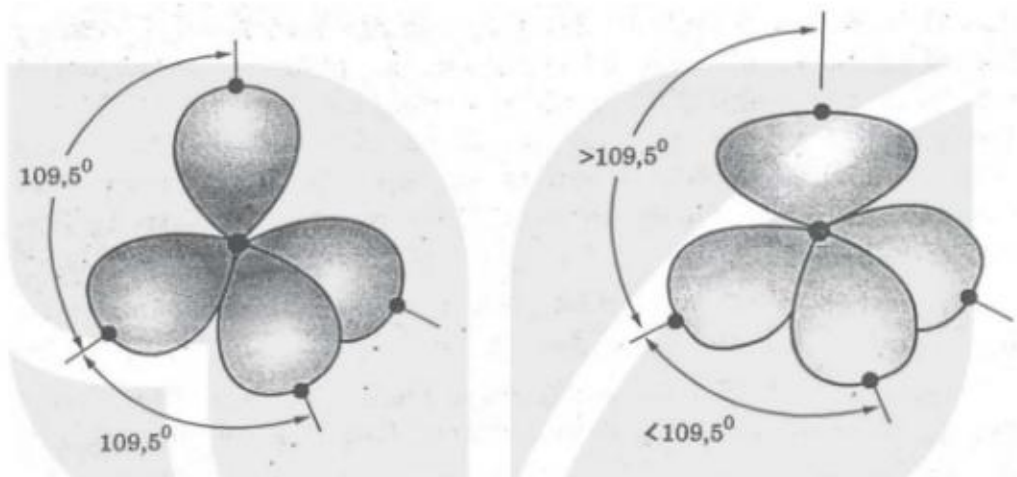


Trong đó, sức đẩy của cặp electron chưa liên kết (E) là lớn nhất, tiếp theo là sức đẩy giữa các cặp electron của P và Cl, cuối cùng là sức đẩy giữa các cặp electron của Cl.

4. Hình dạng một số phân tử

Trong nguyên tử, mỗi orbital chiếm một không gian nhất định.

Cặp electron liên kết và cặp electron chưa liên kết không tương đương nhau là do cặp electron liên kết chịu tác dụng hút của cả hai nguyên tử tham gia liên kết (nguyên tử trung tâm A và phối tử X), trong khi đó cặp electron chưa liên kết chỉ chịu lực hút của hạt nhân nguyên tử trung tâm A. Kết quả, obital của cặp electron chưa liên kết chiếm khoảng không gian lớn hơn so với obital của cặp electron liên kết (Hình 1.3).



Hình 1.3. *Vỏ electron hoá trị của nguyên tử trung tâm A*

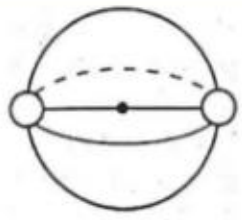
Trong hình (a) cả 4 cặp electron đều là cặp electron liên kết được phân bố theo tứ diện đều, góc tạo bởi sự cắt nhau giữa hai trục của hai AO cạnh nhau đều bằng $109,5^o$.

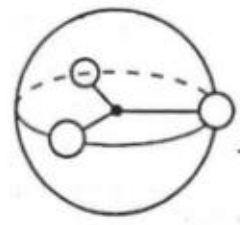
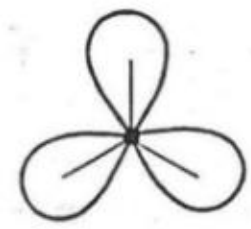
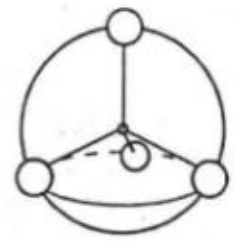
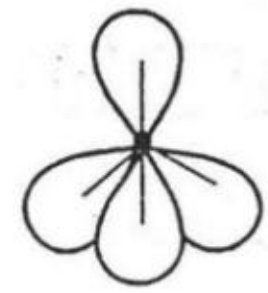
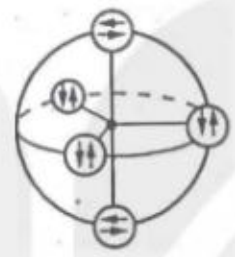
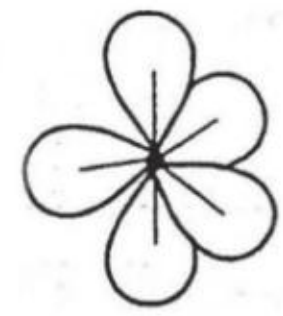
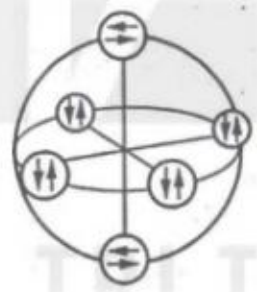
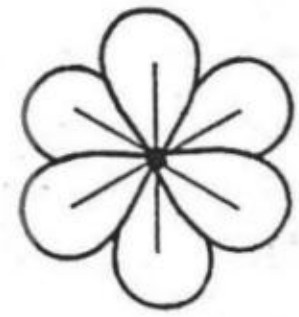
Trong hình (b) chỉ có 3 cặp electron liên kết, còn 1 cặp electron chưa liên kết. Khi đó, khoảng không gian chiếm bởi AO của cặp electron chưa liên kết lớn hơn so với khoảng không gian chiếm bởi mỗi một trong số 3 AO liên kết. Kết quả là góc $109,5^o$ không được bảo toàn và hình dạng phân tử không còn là tứ diện đều nữa.

Trường hợp AX_n (với $n = 2, 3, ..., 6$)

Số cặp electron trong vỏ hoá trị, hình dạng phân tử và sự sắp xếp các cặp electron đó trong không gian có mối liên hệ theo Bảng 1.1.

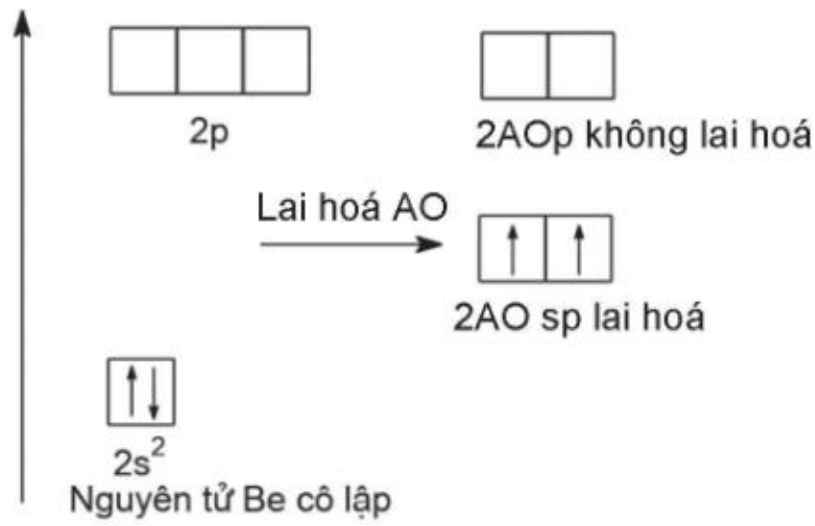
Bảng 1.1

Số cặp electron trong vỏ hoá trị	Hình dạng phân tử	Sự sắp xếp không gian
2	Thẳng 	

Số cặp electron trong vỏ hoá trị	Hình dạng phân tử	Sự sắp xếp không gian
3	Tam giác đều 	
4	Tứ diện đều 	
5	Lưỡng tháp tam giác 	
6	Bát diện đều 	

5. Sự lai hoá orbital nguyên tử

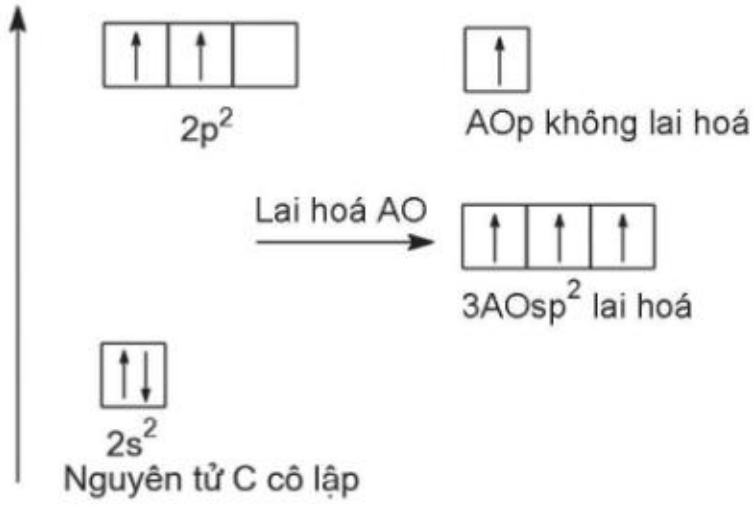
Về năng lượng, AO lai hoá sp có năng lượng thấp hơn các AO-p ban đầu. Một số giản đồ năng lượng biểu diễn sự lai hoá AO mô tả điều đó.



Hình 1.4. *Giản đồ biểu diễn sự lai hoá AO của nguyên tử Be tạo ra các AO lai hoá để xen phủ với AO-s của nguyên tử H tạo ra phân tử* BeH_2

KẾT NỐI TRI THỨC VỚI CUỘC SỐNG

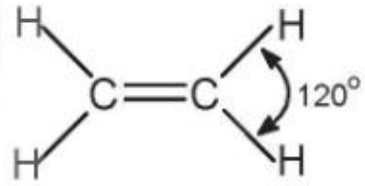
Phân tử BeH_2 có cấu trúc thẳng: H—Be—H.



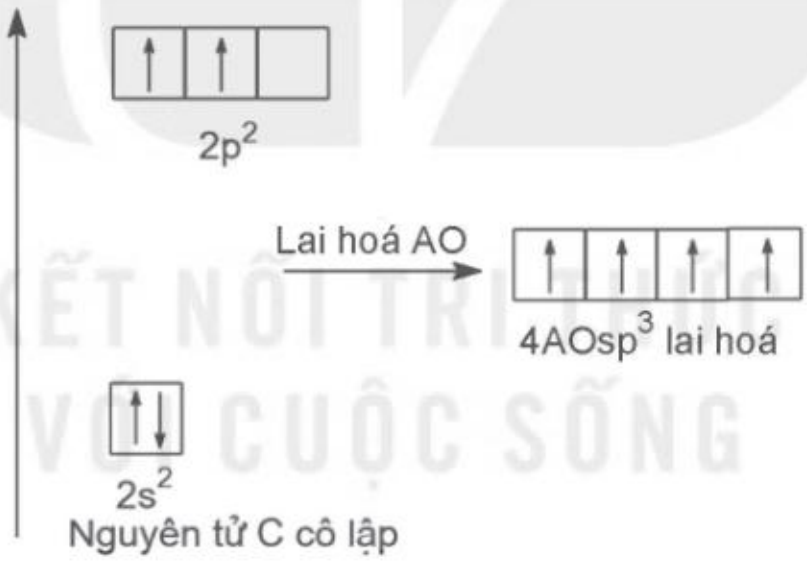
Hình 1.5. *Giản đồ biểu diễn sự lai hoá AO của nguyên tử C tạo ra các AO lai hoá để tạo ra phân tử C_2H_4*

Một AO lai hoá sp^2 xen phủ trục với AO lai hoá sp của nguyên tử C thứ hai để tạo liên kết σ (C—C). Hai AO lai hoá sp^2 xen phủ trục với AO-s của hai nguyên tử H để tạo hai liên kết σ (C—H).

Một AO-p không lai hoá xen phủ bên với một AO-p không lai hoá của nguyên tử C thứ hai để tạo một liên kết π.

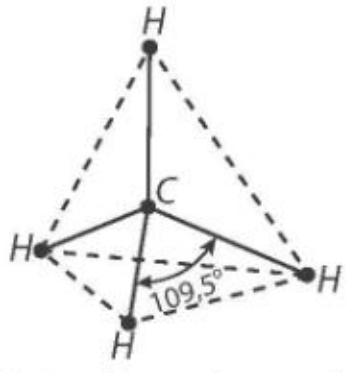


Phân tử có cấu trúc tam giác phẳng.



Hình 1.6. *Giản đồ biểu diễn sự lai hoá AO của nguyên tử C tạo ra các AO lai hoá để tạo ra phân tử CH_4*

Bốn AO lai hoá sp^3 xen phủ trục với bốn AO-s của nguyên tử H để tạo bốn liên kết σ (C—H) tương đương và sức đẩy của bốn cặp electron với lực như nhau nên phân tử có cấu trúc tứ diện đều.

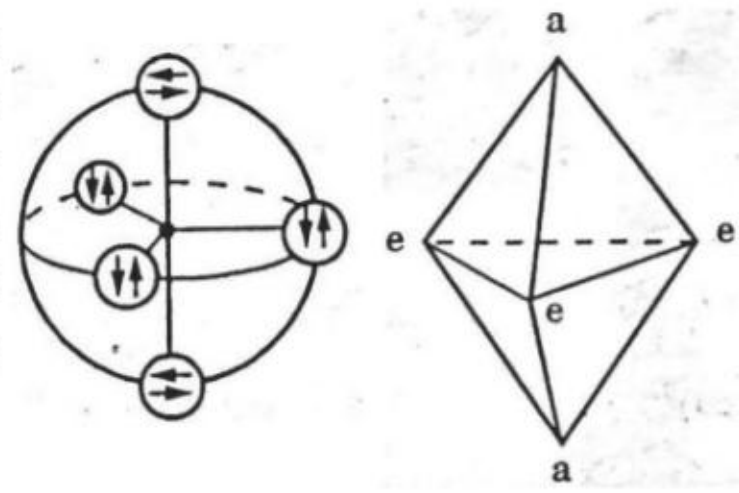


Ngoài ba dạng lai hoá cơ bản sp, sp^2, sp^3 đã nêu, còn một số dạng khác có sự tham gia của AO-d. Dưới đây là hai trường hợp phổ biến.

Lai hoá sp^3d

Một AO-s tổ hợp với ba AO-p và một AO d tạo ra năm AO lai hoá sp^3d.

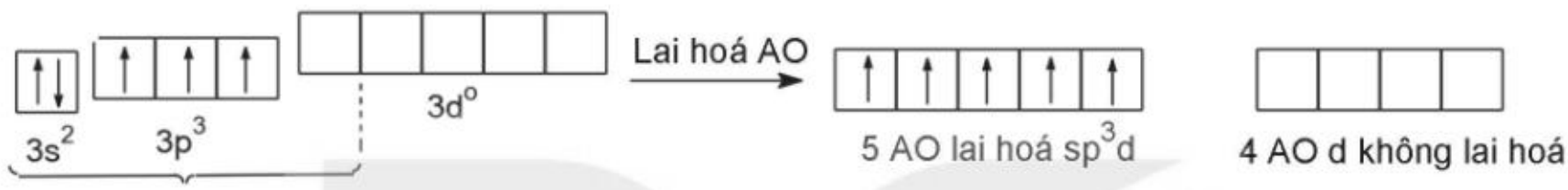
Theo mô hình VSEPR, 5 AO lai hoá này được phân bố trên 5 đỉnh của một lưỡng tháp tam giác, phân tử có cấu trúc lưỡng tháp tam giác. Mặt đáy của hai tháp này là tam giác đều chứa nguyên tử trung tâm A ở tâm của tam giác và 3 AO lai hoá ở 3 đỉnh của tam giác đều. Hai AO lai hoá còn lại được phân bố trên đường thẳng vuông góc với tam giác tại tâm A (hình bên).



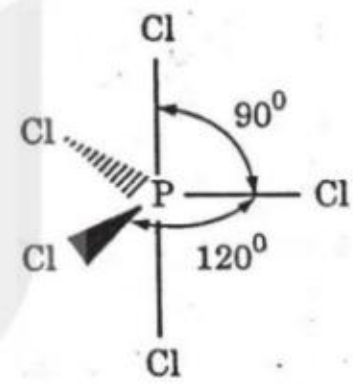
Ví dụ: phân tử phosphorus pentachloride PCl_5.

Cấu hình electron của P: [Ar] $3s^2 3p^3 3d^o$.

Một AO-3s lai hoá với ba AO-3p và một AO-d tạo ra năm AO lai hoá sp^3d.

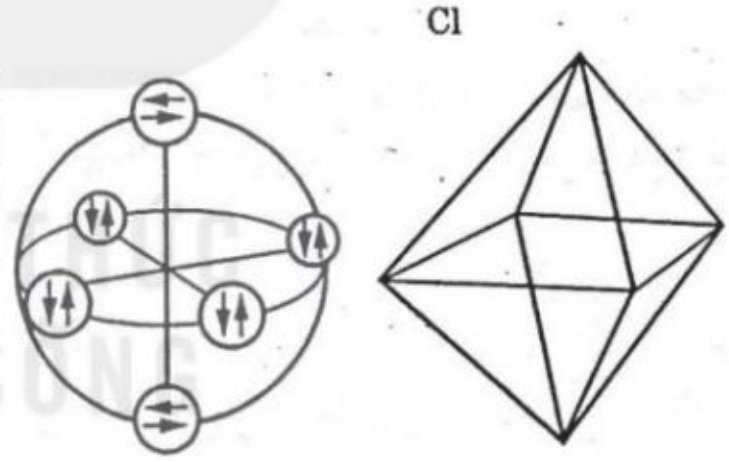


Sự xen phủ giữa AO-3p của nguyên tử chlorine (mỗi AO có 1 electron độc thân) với mỗi AO lai hoá sp^3d của nguyên tử phosphorus (mỗi AO có 1 electron độc thân) tạo thành 5 liên kết σ (P—Cl) tương đương nhau và được sắp xếp theo hình lưỡng tháp tam giác.



Lai hoá sp^3d^2

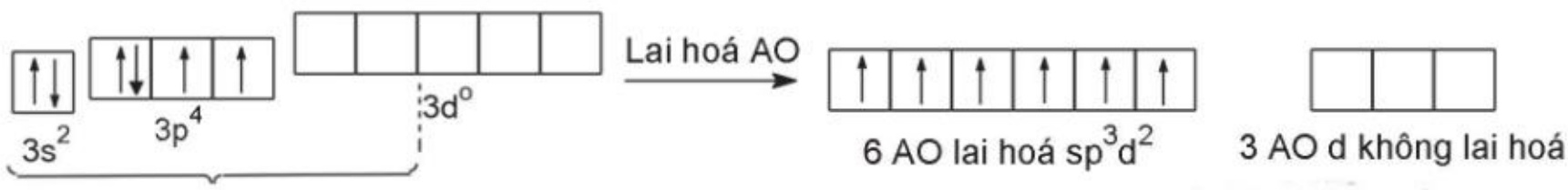
Một AO-s tổ hợp với ba AO-p và hai AO-d tạo ra sáu AO lai hoá sp^3d^2. Xung quanh nguyên tử trung tâm A có 6 AO lai hoá. Theo mô hình VSEPR, 6 AO này được phân bố trên 6 đỉnh của một bát diện đều, phân tử có cấu trúc bát diện đều như hình bên, tâm của bát diện đều là nguyên tử trung tâm A (hình bên).



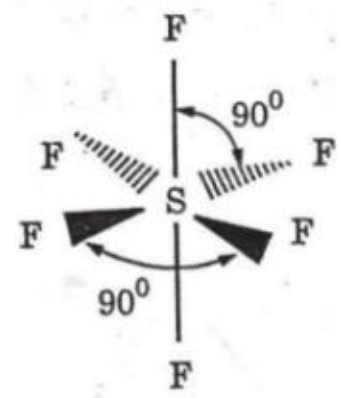
Ví dụ: phân tử sulfur hexafluoride SF_6.

Cấu hình electron của S: [Ar] $3s^2 3p^4 3d^o$.

Một AO-3s lai hoá với ba AO-3p và hai AO-d tạo ra sáu AO lai hoá sp^3d^2.



Sự xen phủ giữa AO-3p của nguyên tử fluorine (mỗi AO có 1 electron độc thân) với mỗi AO lai hoá sp^3d^2 của nguyên tử sulfur (mỗi AO có 1 electron độc thân) tạo thành 6 liên kết σ (S – F) tương đương nhau và được sắp xếp theo hình lưỡng tháp tứ giác (bát diện đều).



Các kiểu lai hoá quyết định dạng hình học của phân tử:

– Lai hoá sp: đường thẳng

– Lai hoá sp^2: tam giác phẳng

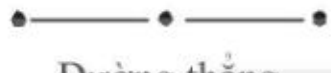
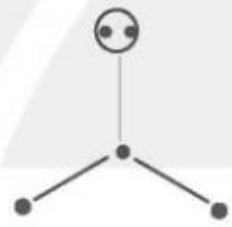
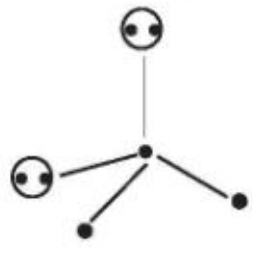
– Lai hoá sp^3: hình tứ diện (hoặc tháp tam giác)

– Lai hoá sp^3d: lưỡng tháp tam giác

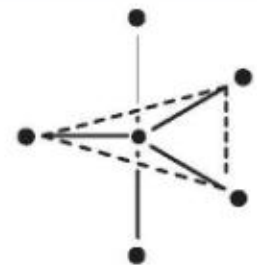
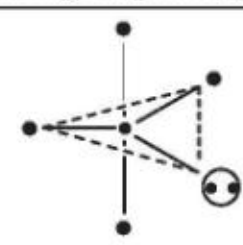
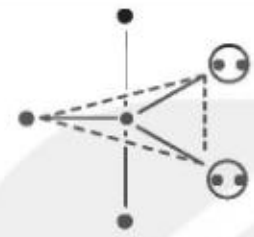
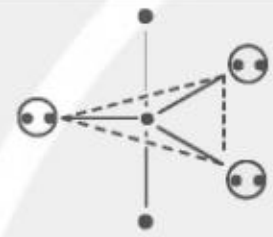
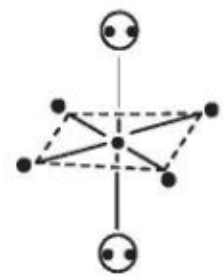
– Lai hoá sp^3d^2: hình bát diện đều

Mối liên hệ giữa công thức VSERP, kiểu lai hoá và dạng hình học phân tử được cho trong Bảng 1.2.

Bảng 1.2

m + n	Công thức VSEPR	Lai hoá	Hình học phân tử	Ví dụ
2	AX_2	sp	 Đường thẳng	BeH_2, CO_2, C_2H_2,…
3	AX_3	sp^2	 Tam giác phẳng	BF_3, CO_3^{2-}, C_2H_4, SO_3, $AlCl_3$, NO_3^-,…
3	AX_2E	sp^2	 Gấp khúc (chữ V)	SO_2, NO_2, O_3, NOCl,…
4	AX_4	sp^3	 Tứ diện	CH_4, CCl_4, NH_4^+, SO_4^{2-}, PO_4^{3-},…
4	AX_3E	sp^3	 Tháp tam giác	NH_3, PCl_3, SO_3^{2-}, ClO_3^-,…
4	AX_2E_2	sp^3	 Gấp khúc (chữ V)	H_2O, OF_2, NH_2^-,…

KẾT NỐI TRI THỨC VỚI CUỘC SỐNG

m + n	Công thức VSEPR	Lai hoá	Hình học phân tử	Ví dụ
5	AX_5	sp^3d	 Lưỡng tháp tam giác	PCl_5, AsF_5, $Fe(CO)_5$,...
5	AX_4E	sp^3d	 Tứ diện lệch	SF_4, PCl_4^-, $TeCl_4$, IF_4^+, XeF_2O_2,...
5	AX_3E_2	sp^3d	 Chữ T	ClF_3, IF_3, BrF_3, $ICl_2(C_6H_5)$,...
5	AX_2E_3	sp^3d	 Đường thẳng	I_3^-, XeF_2,...
6	AX_6	sp^3d^2	 Bát diện	SF_6, IF_5O,...
6	AX_5E	sp^3d^2	 Chóp vuông	IF_5, BrF_5, $SbCl_5^-$,...
6	AX_4E_2	sp^3d^2	 Vuông phẳng	XeF_4, ICl_4^-, $Pt(NH_3)_2Cl_2$,...

KẾT NỐI TRI THỨC VỚI CUỘC SỐNG

6. Mô hình VSEPR (mô hình sức đẩy giữa các cặp electron hoá trị)

Các trường hợp AX_n (với n = 2, 3, ..., 6): Công thức VSEPR đúng phải viết là AX_nE_o để phân biệt với công thức hoá học của một phân tử AX_n.

Tổng m + n quyết định dạng hình học của phân tử.

m + n = 2 (AX_2E_o)	phân tử có dạng đoạn thẳng;
m + n = 3 (AX_3E_o và AX_2E_1)	phân tử có dạng tam giác phẳng;
m + n = 4 (AX_4E_o, AX_3E_1 và AX_2E_2)	phân tử có dạng tứ diện;
m + n = 5 (AX_5E_o, AX_4E_1, AX_3E_2 và AX_2E_3)	phân tử có dạng lưỡng tháp tam giác;
m + n = 6 (AX_6E_o, AX_5E_1 và AX_4E_2)	phân tử có dạng lưỡng tháp tứ giác (bát diện).

7. Hệ quả của cấu trúc

a) Góc liên kết

Các cặp electron xung quanh nguyên tử trung tâm không phải là tuyệt đối tương đương nhau.

– Lực đẩy của các electron khác nhau tuỳ theo các cặp electron tham gia:

Hai cặp electron chưa liên kết > Hỗn hợp (cặp electron chưa liên kết – cặp electron liên kết) > Hai cặp electron liên kết.

Một cặp electron chưa liên kết sẽ làm tăng góc liên kết EAX và làm giảm góc liên kết XAX.

Ví dụ: Các phân tử CH_4, NH_3 và H_2O có công thức VSEPR tương ứng là AX_4E_0, AX_3E_1 và AX_2E_2 đều có giá trị m + n = 4 và đều có cấu trúc tứ diện. Sự tăng lực đẩy của các cặp electron chưa liên kết làm giảm góc HAH.

Phân tử CH_4 không có cặp electron chưa liên kết, góc HCH bằng $109,5^o$ (góc tứ diện đều).

Phân tử NH_3 có một cặp electron chưa liên kết, lực đẩy của cặp electron chưa liên kết – cặp electron liên kết E—H lớn hơn lực đẩy của hai cặp electron liên kết N—H làm giảm góc HNH còn 107^o.

Phân tử H_2O có hai cặp electron chưa liên kết, lực đẩy của hai cặp electron chưa liên kết là lớn nhất làm góc HOH giảm xuống chỉ còn $104,5^o$.

– Lực đẩy của cặp electron chưa liên kết lớn hơn một electron chưa liên kết:

Ví dụ: Nitrogen dioxide (NO_2) và ion nitrite (NO_2^-) có cấu trúc Lewis như sau:



Cả phân tử NO_2 và ion NO_2^- đều có công thức VSEPR kiểu AX_2E_1.

Cặp electron chưa liên kết ở N trong ion NO_2^- đẩy mạnh hơn e duy nhất ở N trong phân tử NO_2. Kết quả là góc ONO trong NO_2^- (115^o) khép lại và nhỏ hơn so với NO_2 (134^o).

Sự chênh lệch độ âm điện, bán kính nguyên tử của các nguyên tố tham gia liên kết cũng làm thay đổi góc liên kết do tác động đến không gian của các electron hoá trị.

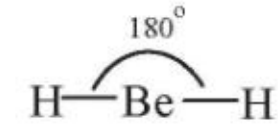
Nguyên tử trung tâm A có độ âm điện lớn sẽ kéo mây electron của cặp electron liên kết về phía nó nhiều hơn làm cho góc liên kết tăng. Phối tử X có độ âm điện lớn sẽ kéo mây electron của cặp electron liên kết về phía nó nhiều hơn làm cho góc liên kết giảm.

b) Sự phân cực phân tử

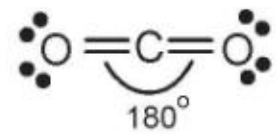
– Phân tử không phân cực

Một phân tử có momen lưỡng cực xấp xỉ bằng không được coi là không phân cực. Các phân tử đối xứng AX_n như BeH_2 , BH_3 và CO_2 là các ví dụ minh hoạ.

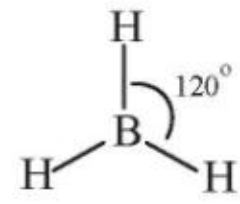
Trong BeH_2, phân tử có cấu trúc đoạn thẳng, nguyên tử H có độ âm điện (2,2) lớn hơn so với Be (1,57). Hai liên kết Be—H đều phân cực, nhưng momen lưỡng cực định hướng theo chiều Be→H của hai liên kết ngược chiều nhau và bằng nhau nên triệt tiêu nhau. Tổng momen lưỡng cực bằng không và phân tử không phân cực.



Trong CO_2, phân tử có cấu trúc đoạn thẳng, nguyên tử O có độ âm điện (3,44) lớn hơn so với C (2,55). Hai liên kết C=O đều phân cực, nhưng momen lưỡng cực định hướng theo chiều C→O của hai liên kết ngược chiều nhau và bằng nhau nên triệt tiêu nhau. Tổng momen lưỡng cực bằng không và phân tử không phân cực.



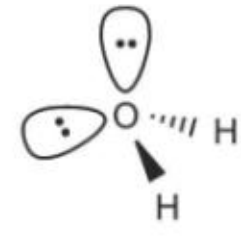
Trong BH_3, phân tử có cấu trúc tam giác phẳng, nguyên tử H có độ âm điện (2,2) lớn hơn so với B (2,04). Ba liên kết B—H đều phân cực, nhưng momen lưỡng cực định hướng theo chiều B→H của ba liên kết ngược chiều nhau trên cùng mặt phẳng và bằng nhau nên triệt tiêu nhau. Tổng momen lưỡng cực bằng không và phân tử không phân cực.



– Phân tử phân cực

Một phân tử có momen lưỡng cực lớn hơn không được coi là phân cực khi mà các trung tâm điện tích dương và âm không trùng nhau.

Ví dụ: phân tử nước, có công thức VSEPR kiểu AX_2E_2, do lực đẩy của các cặp electron chưa liên kết lớn hơn cặp electron liên kết nên phân tử có cấu trúc dạng góc, momen lưỡng cực lớn hơn không và phân tử phân cực.



IV GỢI Ý TỔ CHỨC CÁC HOẠT ĐỘNG DẠY, HỌC

Hoạt động 1. CÔNG THỨC LEWIS

GV treo bảng tuần hoàn lớn và bảng ghi các bước viết công thức Lewis (hoặc chiếu slide).

GV hướng dẫn HS hoàn thiện năng lực NTHH:

– Yêu cầu HS viết công thức electron của 1, 2 chất.

– Đưa ra công thức Lewis hoàn chỉnh của 1, 2 chất.

– Yêu cầu HS nhận xét về các thành phần của cấu tạo Lewis (kí hiệu nguyên tố, dấu chấm, dấu gạch,…), kết luận về cấu trúc của cấu tạo Lewis.

– Căn cứ vào các bước viết công thức Lewis (có sẵn trên bảng treo), giải thích từng bước khi viết công thức Lewis của chất thứ ba.

Dùng phương pháp trực quan, đàm thoại gợi mở để HS rèn luyện năng lực GTHT và năng lực GQVĐ khi vận dụng viết công thức Lewis của chất thứ tư.

Củng cố: sử dụng một số câu hỏi và bài tập tương tự câu hỏi và bài tập SGK để luyện tập.

Hoạt động 2. MÔ HÌNH VSEPR VÀ HÌNH DẠNG PHÂN TỬ

GV treo bảng ghi các thành phần của công thức VSEPR (hoặc chiếu slide).

GV hướng dẫn HS hoàn thiện năng lực NTHH:

– Giới thiệu nội dung của mô hình *sức đẩy giữa các cặp electron hoá trị*.

Phân tích sơ đồ cấu trúc phân tử H_2O để minh hoạ (phân tử có ba nguyên tử, bình thường hay viết dạng đường thẳng, nhưng theo mô hình *Sức đẩy giữa các cặp electron hoá trị*, hai cặp e chưa liên kết đẩy mạnh hơn cặp e liên kết nên phân tử có cấu trúc dạng góc).

– Đưa lần lượt các chất cụ thể: BeH_2, SO_3, CH_4, để giới thiệu các trường hợp AX_n (với n = 2, 3, 4) và SO_2, NH_3 để giới thiệu các trường hợp AX_nE_m.

Có thể sử dụng các hình ảnh sinh động trên slide trình chiếu.

GV hướng dẫn HS hoàn thiện năng lực GTHT khi yêu cầu HS viết công thức VSEPR của phân tử 5 chất trên và nhận xét hình dạng của mỗi phân tử.

Dùng phương pháp trực quan, đàm thoại gợi mở để HS rèn luyện năng lực GQVĐ khi vận dụng viết công thức VSEPR của phân tử một số chất khác kèm theo nêu hình dạng mỗi phân tử.

Củng cố: sử dụng một số câu hỏi và bài tập tương tự câu hỏi và bài tập SGK để luyện tập.

Hoạt động 3. SỰ LAI HOÁ ORBITAL NGUYÊN TỬ

GV treo bảng vẽ hình dạng của các orbital lai hoá sp, sp^2, sp^3 (hoặc chiếu slide).

GV hướng dẫn HS hoàn thiện năng lực NTHH:

– Giới thiệu khái niệm lai hoá AO dựa vào hoá trị của carbon trong phân tử CH_4 (lí thuyết và thực nghiệm).

– Đưa lần lượt các chất cụ thể: NF_3, BF_3 và BeF_2 để giới thiệu các trường hợp lai hoá AO sp^3, sp^2, sp. Có thể sử dụng các hình ảnh sinh động trên slide trình chiếu.

GV hướng dẫn HS hoàn thiện năng lực GTHT khi yêu cầu HS xác định trạng thái lai hoá của nguyên tử trung tâm trong một số phân tử và nhận xét hình dạng của mỗi phân tử dựa vào:

– Tổng số liên kết σ của nguyên tử trung tâm A với các nguyên tử xung quanh X + số cặp electron hoá trị của A chưa liên kết.

(Chú ý cặp electron liên kết được biểu diễn bằng dấu gạch, electron chưa liên kết có thể là electron độc thân và liên kết kép được coi là 1 liên kết).

Nếu tổng số này là 2 thì trạng thái lai hoá sp, là 3 thì trạng thái lai hoá sp^2, là 4 thì trạng thái lai hoá sp^3.

Ví dụ: Nguyên tử C trong CO_2 (O=C=O) chỉ có 2 liên kết nên ở trạng thái lai hoá sp.

Nguyên tử N trong NO_2 ($O-\dot{N}=O$) có 3 liên kết nên ở trạng thái lai hoá sp^2.

Dùng phương pháp trực quan, đàm thoại gợi mở để HS rèn luyện năng lực GQVĐ khi xác định trạng thái lai hoá của nguyên tử trung tâm trong phân tử một số chất khác kèm theo nêu hình dạng mỗi phân tử.

Củng cố: sử dụng một số câu hỏi và bài tập tương tự câu hỏi và bài tập SGK để luyện tập.

Hoạt động 4. HƯỚNG DẪN TỰ HỌC Ở NHÀ VÀ ĐỌC BÀI TIẾP THEO

GV hướng dẫn HS sử dụng phương pháp hoạt động nhóm để nêu lên kết luận cuối cùng của bài, qua đó rèn luyện năng lực GQVĐ bằng cách sử dụng một số câu hỏi và bài tập tương tự câu hỏi và bài tập SGK để luyện tập.

Kết luận:

1. Công thức Lewis dùng biểu diễn liên kết hoá học trong phân tử cộng hoá trị.

2. Mô hình VSEPR dùng biểu diễn dạng hình học của phân tử do sức đẩy khác nhau giữa các cặp electron liên kết và chưa liên kết.

3. Sự lai hoá AO dùng giải thích một số hiện tượng thực tế quan sát được hoặc đo lường được.

V HƯỚNG DẪN TRẢ LỜI CÂU HỎI TRONG SGK

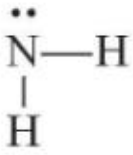
1. Đáp án B. Số electron lớp ngoài cùng của C và S đều tuân theo quy tắc octet.

2. Các bước viết công thức Lewis của phân tử NH_3:

Bước 1. Xác định tổng số electron hoá trị trong phân tử: $(1\cdot5) + (3\cdot1) = 8$

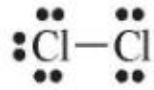
Bước 2. Vẽ khung phân tử với các liên kết đơn:

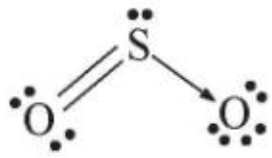
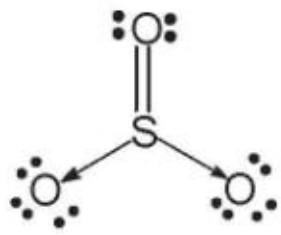


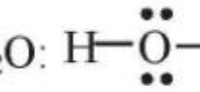
Bước 3. Hoàn thiện octet cho nguyên tử N: 

Bước 4. Tính số electron hoá trị còn lại = 8 – [(1·5) + (3·1)] = 0

3. Công thức Lewis của các phân tử:

a) Cl_2: ; N_2:

b) SO_2:  ; SO_3: 

c) H_2O:  ; H_2S:  ; HOCl: 

4. Đáp án C. Số electron lớp ngoài cùng của O tuân theo quy tắc octet, nguyên tử trung tâm N có số lẻ electron, dẫn đến phân tử NO_2 dễ dimer hoá $\Rightarrow (NO_2)_2$ để hoàn thiện octet.

5. Đáp án C. Nguyên tử P có 5 e hoá trị, sau khi liên kết với H còn lại 1 cặp e chưa liên kết nên công thức VSEPR có dạng PH_3E (E là cặp e chưa liên kết).

6. Công thức theo mô hình VSEPR:

Phân tử	CCl_4	H_2S	CO_2	SO_3	PH_3
VSEPR	AX_4	AX_2E_2	AX_2	AX_3	AX_3E
Số cặp electron liên kết	4	2	4	4	3
Số cặp electron chưa liên kết	0	2	0	0	1

7. Công thức theo mô hình VSEPR của OF_2 là AX_2E_2 với dạng hình học là gấp khúc (chữ V). Phân tử OF_2 phân cực do liên kết O—F phân cực về phía có nguyên tử F do độ âm điện F (3,98) > O (3,44).

8. Chọn A. Dạng hình học của NH_4^+ là tứ diện với nguyên tử N lai hoá sp^3 (trong đó 4 liên kết N—H tương đương).

9. Dạng hình học:

Phân tử	CO_2	CS_2	BF_3	SCl_2
Dạng hình học	Đường thẳng	Đường thẳng	Tam giác phẳng	Góc (chữ V)

10. Trạng thái lai hoá của $C_{(1)}$ là sp^3; $C_{(2)}$ là sp^2; $C_{(3)}$ là sp.

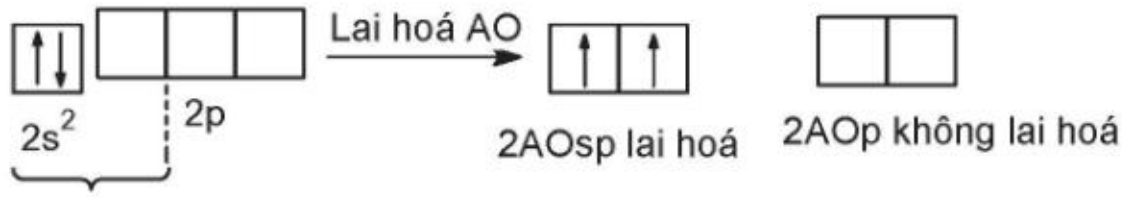
Nguyên tử $C_{(1)}$ có tổng số liên kết = 4 $\Rightarrow$ lai hoá sp^3.

$C_{(2)}$ có tổng số liên kết = 3 $\Rightarrow$ lai hoá sp^2.

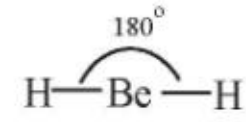
$C_{(3)}$ có tổng số liên kết = 2 $\Rightarrow$ lai hoá sp.

11. a) Phân tử BeH_2: Cấu hình electron của Be: $1s^2 2s^2$.

AO-2s lai hoá với 1AO-2p tạo hai AO lai hoá sp và còn hai AO p không lai hoá.

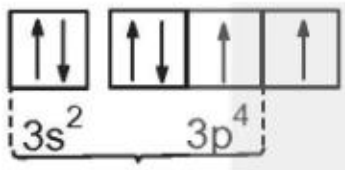


Hai AO lai hoá sp của Be xen phủ với hai AO-s của hai nguyên tử H tạo hai liên kết σ. Nguyên tử trung tâm Be không còn electron chưa liên kết nên hai AO lai hoá đẩy nhau với lực lớn nhất tạo góc 180°. Trong phân tử BeH_2, nguyên tử Be còn hai AO-p không lai hoá và là AO trống.



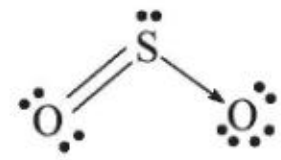
b) Phân tử SO_2: Cấu hình electron hoá trị của S: $3s^2 3p^4$.

Nguyên tử S ở trạng thái lai hoá sp^2:



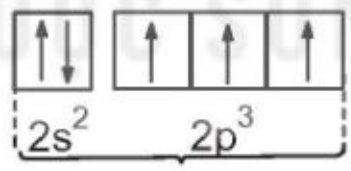
gồm 3AO lai hoá + 1AO không lai hoá.

Nguyên tử S dùng AO lai hoá sp^2 thứ nhất (chứa 1 e độc thân) xen phủ với AO p của một trong hai nguyên tử O tạo liên kết σ và dùng AO không lai hoá chứa 1 e độc thân xen phủ với AO p của chính nguyên tử O đó tạo ra liên kết π. Nguyên tử S dùng AO lai hoá sp^2 thứ hai chứa cặp e tạo liên kết cho – nhận với AO trống của nguyên tử O còn lại và nguyên tử S còn AO lai hoá sp^2 thứ ba chứa cặp e không liên kết. Do cặp e không liên kết đẩy mạnh hơn hai cặp e liên kết nên phân tử SO_2 có dạng góc (chữ V).

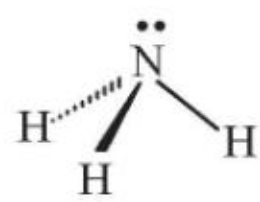


c) Phân tử NH_3: Cấu hình electron hoá trị của N: $2s^2 3p^3$.

Nguyên tử N ở trạng thái lai hoá sp^3:



Nguyên tử N dùng ba AO lai hoá sp^3 (chứa 1 e độc thân) xen phủ với AO s của ba nguyên tử H tạo liên kết σ và còn một AO lai hoá sp^3 thứ tư chứa cặp e không liên kết. Do cặp e không liên kết đẩy mạnh hơn ba cặp e liên kết nên phân tử NH_3 có dạng tứ diện (tháp tam giác) nguyên tử N ở đỉnh với cặp e chưa liên kết và 3 nguyên tử H ở 3 đỉnh của tam giác đáy.



12. a) Trong phân tử NCl_3, nguyên tử trung tâm ở trạng thái lai hoá sp^3.

Phân tử SO_3, nguyên tử trung tâm ở trạng thái lai hoá sp^2.

Phân tử CO_2, nguyên tử trung tâm ở trạng thái lai hoá sp.

b) Phân tử NCl_3 có dạng tháp tam giác và phân cực về phía các nguyên tử Cl ở tam giác đáy.

Phân tử SO_3 có dạng tam giác phẳng và không phân cực do góc liên kết $\widehat{OSO}$ bằng 120^o và các liên kết phân cực về phía nguyên tử O có độ lớn như nhau triệt tiêu nhau.

Phân tử CO_2 có dạng đường thẳng và không phân cực do hai liên kết phân cực về hai phía của đường thẳng có độ lớn bằng nhau triệt tiêu nhau.

VI GỢI Ý KIỂM TRA, ĐÁNH GIÁ

– Đánh giá năng lực NTHH của HS bằng các câu hỏi có các cụm từ "viết", "biểu diễn",... cấu tạo Lewis, công thức VSEPR, dạng hình học (không có giải thích).

– Đánh giá năng lực GQVĐ của HS bằng các câu hỏi có các cụm từ "viết", "trình bày",... cấu tạo Lewis, công thức VSEPR, dạng hình học, kèm theo sự giải thích.

– Đánh giá năng lực VDKT của HS bằng các câu hỏi có nội dung kiến thức tương tự bài học, kèm theo sự giải thích.

Bài 2. PHẢN ỨNG HẠT NHÂN

I MỤC TIÊU

Sau bài học, HS sẽ:

– 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 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.

II CHUẨN BỊ

– Một số câu chuyện về sự phóng xạ và phản ứng hạt nhân để tìm ra nguyên tố mới.

– Tranh ảnh và các clip video liên quan đến hiện tượng phóng xạ và phản ứng hạt nhân.

KẾT NỐI TRI THỨC VỚI CUỘC SỐNG

III THÔNG TIN BỔ SUNG

1. Hiện tượng phóng xạ

a) Lịch sử tìm ra sự phóng xạ tự nhiên

Năm 1896, nhà vật lí người Pháp A. H. Becquerel (1852 – 1908) khám phá ra tia phóng xạ từ hợp chất của uranium. Năm 1903, nhà vật lí và hoá học người Pháp gốc Ba Lan Marie Curie (1867 – 1934) cùng chồng là Pierre Curie được nhận giải thưởng Nobel Vật lí cùng Henri Becquerel do công lao đã phát hiện ra sự phóng xạ tự nhiên.

E. Rutherford nghiên cứu các tia này và phát hiện ra: "Do sự tự phân rã của hạt nhân nguyên tử mà nguyên tố này có thể biến thành nguyên tố khác. Đó là phóng xạ tự nhiên".

Năm 1911, Marie Curie nhận giải thưởng Nobel Hoá học do công lao tìm ra nguyên tố polonium, nguyên tố radium và những hợp chất của radium.

b) Một số kiểu phóng xạ tự nhiên. Phương trình hạt nhân

– Phóng xạ kiểu alpha (α): hạt α là hạt nhân helium ${}_2^4\text{He}$ (mang điện tích dương 2+).

Ví dụ: ${}_{92}^{238}\text{U} \longrightarrow {}_{90}^{234}\text{Th} + {}_2^4\text{He}$

Các đồng vị phóng xạ có $Z > 83$ thường phóng xạ kiểu α (như ${}^{226}\text{Ra}$, ${}^{238}\text{Pu}$, ${}^{218}\text{Po}$, ${}^{220}\text{Rn}$,…).

– Phóng xạ kiểu beta (β): hạt beta (β^-) là electron ${}_{-1}^{0}\text{e}$ (mang điện tích âm 1–).

Ví dụ: ${}_{19}^{40}\text{K} \longrightarrow {}_{20}^{40}\text{Ca} + {}_{-1}^{0}\text{e}$ hay ${}_{6}^{14}\text{C} \longrightarrow {}_{7}^{14}\text{N} + {}_{-1}^{0}\text{e}$

Các đồng vị phóng xạ có $Z < 83$ và Z chẵn chủ yếu phóng xạ kiểu β hoặc hạt nhân có khả năng thu nhận electron.

– Sự thâu đoạt electron (e^-): Hạt nhân nguyên tử của một số đồng vị có thể đoạt electron từ lớp electron gần nhất (lớp K); electron này lập tức kết hợp với một proton trong hạt nhân để tạo ra một neutron: ${}_{-1}^{0}\text{e} + {}_{1}^{1}\text{p} \longrightarrow {}_{0}^{1}\text{n}$. Ví dụ: ${}_{19}^{38}\text{K} + {}_{-1}^{0}\text{e} \longrightarrow {}_{18}^{38}\text{Ar}$.

– Hạt gamma (γ): là các photon, các lượng tử, cùng bản chất với ánh sáng (hạt trung hoà).

Năng lượng của các photon được xác định bởi phương trình: $E = h.\lambda$.

Tia γ được phát ra đồng thời cùng với tia α hoặc β (rất hiếm trường hợp chỉ phát ra γ). Đồng vị phóng xạ ở dạng hợp chất thường phát ra các tia α, β, γ; còn ở dạng đơn chất thường phát ra tia α hoặc β có thể kèm theo γ.

Các tia α, β, γ khác nhau về khả năng xuyên và gây ion hoá.

+ Tia γ có năng suất xuyên cực đại, nhưng khả năng ion hoá lại là cực tiểu.

+ Ngược lại, tia α có khả năng ion hoá cực đại, nhưng năng suất xuyên lại là cực tiểu.

c) Định luật phân rã phóng xạ

– Phương trình động học: Thực nghiệm xác nhận về mặt động học tất cả các quá trình phân rã phóng xạ đều tuân theo quy luật phản ứng một chiều bậc nhất.

Ta có: Chất A $\longrightarrow$ Sản phẩm

Phương trình động học: $v = -\frac{d_x}{d_t} = k(a - x)$

Trong đó, k là hằng số tốc độ của phản ứng (tại nhiệt độ xác định); a là nồng độ chất A ở thời điểm đầu (t = 0); x là nồng độ chất A bị mất đi sau thời gian t; nên (a – x) là nồng độ chất A còn lại tại thời điểm đang xét (t ≠ 0).

Sau một số biến đổi toán học cho: $k = \frac{1}{t}\ln\frac{a}{(a-x)}$ hay viết dạng hàm mũ: $(a - x) = a.e^{-kt}$.

Áp dụng cho phân rã phóng xạ: k là hằng số phân rã phóng xạ (có thể viết λ).

N_o tương ứng với a; N_t tương ứng với (a – x) ta có: $k = \frac{1}{t}\ln\frac{N_o}{N_t}$ và $N_t = N_o.e^{-kt}$.

– Chu kì bán huỷ ($t_{1/2}$): thời gian để lượng chất có ban đầu (N_o hoặc a) mất đi một nửa ($\frac{N_o}{2}$ hay $\frac{a}{2}$) được gọi là thời gian bán huỷ hay chu kì bán huỷ.

Thay $N = \frac{N_o}{2}$ vào biểu thức trên ta được: $k = \frac{1}{t_{1/2}}\ln 2$ hay $t_{1/2} = \frac{\ln 2}{k} = \frac{0,693}{k}$.

Chu kì bán huỷ càng lớn, quá trình phân huỷ càng chậm thì đồng vị càng bền.

Chu kì bán huỷ càng nhỏ, quá trình phân huỷ càng nhanh thì đồng vị càng kém bền.

Ví dụ: ^{238}U với $t_{1/2} = 4,5.10^9$ năm là đồng vị bền, còn ^{214}Po với $t_{1/2} = 1,5.10^{-4}$ giây là đồng vị kém bền.

Thực tế, sử dụng đồng vị phóng xạ trong chữa bệnh và diệt khuẩn, bảo quản lương thực, thực phẩm cần dùng những đồng vị có chu kì bán huỷ ngắn để không gây hại.

d) Độ phóng xạ (tốc độ phân rã)

Các sản phẩm của sự phân rã phóng xạ bay ra với tốc độ lớn, khi gặp vật chắn sẽ gây ra những biến đổi trong vật chắn đó. Tác động của bức xạ càng lớn nếu số phân rã xảy ra trong một đơn vị thời gian càng lớn, số phân rã đó được đo bằng độ phóng xạ $H = \lambda \cdot N$.

$$H_t = \lambda \cdot N_t = H_o \cdot 2^{-\frac{t}{t_{1/2}}}$$

Đơn vị của độ phóng xạ là Bq (Becquerel) hay Ci (Curie) với 1 Ci = $3,7 \cdot 10^{10}$ Bq (phân rã/giây).

Ví dụ: Đồng vị phóng xạ ^{210}Po bắt đầu phân rã từ 1,0 gam với chu kì bán huỷ là 138 ngày.

Độ phóng xạ của ^{210}Po:

$$H_o = \lambda \cdot N_o = \frac{\ln 2}{t_{1/2}} \cdot \frac{m_o}{A} \cdot N_A = \frac{0,693}{138 \cdot 24 \cdot 3600} \cdot \frac{1,0}{210} \cdot 6,023 \cdot 10^{23} = 1,667 \cdot 10^{14} \text{ Bq}.$$

2. Phản ứng hạt nhân

a) Phản ứng hoá học và phản ứng hạt nhân

– Trong các phản ứng hoá học, chỉ có lớp vỏ electron trong nguyên tử bị thay đổi (hoặc thêm vào, hoặc bớt đi, hoặc góp chung với nguyên tử khác,...) còn hạt nhân nguyên tử không thay đổi.

– Trong các phản ứng hạt nhân, thành phần của hạt nhân nguyên tử bị thay đổi, nguyên tố này có thể biến thành nguyên tố khác.

– Sự khác biệt quan trọng giữa phản ứng hoá học và phản ứng hạt nhân là sự biến đổi năng lượng trong các phản ứng hạt nhân lớn hơn nhiều so với các phản ứng hoá học.

b) Sự phóng xạ nhân tạo

– Hiện tượng phóng xạ nhân tạo

Năm 1919, E.Rutherford dùng các hạt α bắn phá khí nitrogen gây ra phản ứng hạt nhân biến nitrogen thành oxygen và phát ra một hạt proton.

$$^{14}_{7}\mathrm{N} + ^{4}_{2}\mathrm{He} \longrightarrow ^{17}_{8}\mathrm{O} + ^{1}_{1}\mathrm{H}$$

Trong vòng mấy năm, E. Rutherford và các cộng sự đã thực hiện nhiều phản ứng biến đổi F → Ne; Na → Mg; Al → Si;...

Có một số lớn phản ứng, trong đó sản phẩm sinh ra là những hạt nhân không bền, tiếp tục bị phân huỷ phóng xạ (giống như sự phân huỷ của các nguyên tố phóng xạ tự nhiên). Hiện tượng này gọi là phóng xạ nhân tạo và những đồng vị sinh ra từ phản ứng trên được gọi là đồng vị phóng xạ nhân tạo.

Khi bắn phá hạt nhân nguyên tử bằng các hạt cơ bản (hoặc các hạt nhân khác) được gia tốc, có thể gây ra phản ứng hạt nhân làm biến đổi nguyên tố này thành nguyên tố khác kèm theo các tia phóng xạ. Đó là sự phóng xạ nhân tạo.

Hiện tượng phóng xạ nhân tạo được Irène Curie và chồng là Joliot Curie (con gái và con rể bà Marie Curie) tìm ra khi bắn phá boron, aluminium hoặc magnesium bằng tia α phát ra từ radium hoặc polonium. Ví dụ: $^{27}_{13}\mathrm{Al} + ^{4}_{2}\mathrm{He} \longrightarrow ^{30}_{15}\mathrm{P} + ^{1}_{0}\mathrm{n}$.

Bằng công trình này, Irène Curie và Joliot Curie được nhận giải Nobel về hoá học, lần đầu tiên họ đã tổng hợp được nguyên tố phóng xạ mới.

Đồng vị $^{30}\mathrm{P}$ điều chế nhân tạo theo cách trên không bền, nó tự phân huỷ phóng xạ:

$$^{30}_{15}\mathrm{P} \longrightarrow ^{30}_{14}\mathrm{Si} + ^{0}_{+1}\mathrm{e}$$

Phản ứng phát ra hạt positron ($^{0}_{+1}\mathrm{e}$) có khối lượng bằng electron, điện tích bằng điện tích electron nhưng ngược dấu, còn gọi là phản hạt electron (kí hiệu là β^{+}).

– Điều chế đồng vị phóng xạ nhân tạo

Hiện nay, đã điều chế được rất nhiều đồng vị phóng xạ của hầu hết các nguyên tố (đạn hạt nhân gồm hạt α, proton, neutron, deuteron,…).

Từ năm 1937 đến 1940 đã điều chế bằng con đường nhân tạo được những nguyên tố: technetium ($_{43}Tc$), promethium ($_{61}P_m$), astatine ($_{85}At$), francium ($_{87}Fr$) và lấp được những ô trống trong bảng tuần hoàn.

Ngoài ra có thể biến thuỷ ngân thành vàng (nhưng giá thành rất đắt):

$$^{196}_{80}Hg + ^{1}_{0}n \longrightarrow ^{197}_{80}Hg$$

$$^{197}_{80}Hg + ^{0}_{-1}e \longrightarrow ^{197}_{79}Au$$

Hoặc các nguyên tố phóng xạ tạo ra theo con đường nhân tạo thành một dãy liên tục:

$$^{238}_{92}U \xrightarrow{+(^{1}_{0}n)} ^{239}_{92}U \xrightarrow{-(^{0}_{-1}e)} ^{239}_{93}Np \xrightarrow{-(^{0}_{-1}e)} ^{239}_{94}Pu, \ldots$$

Tiếp tục như thế, có $^{226}_{88}Ra$, $^{222}_{86}Rn$, $^{208}_{84}Po$,... và kết thúc ở đồng vị bền $^{206}_{82}Pb$.

Trong đó, $^{239}_{94}Pu$ là đồng vị phóng xạ nhân tạo duy nhất dùng làm nhiên liệu hạt nhân.

c) Sự phân hạch hạt nhân và phản ứng nhiệt hạch

– Phản ứng phân hạch hạt nhân

Những phản ứng đã xét ở trên đều có đặc điểm là hạt nhân mất đi một hay hai hạt nhẹ (p, e, n,…) và biến đổi thành hạt nhân của nguyên tử có Z và A gần nó.

Có một dạng phản ứng khác: hạt nhân bị vỡ thành hai hay nhiều mảnh có khối lượng xấp xỉ nhau, đó là phản ứng phân hạch hạt nhân (nổ hạt nhân). Trong quá trình phân hạch hạt nhân, tính trung bình với mỗi hạt nhân khi bắn vào một neutron thì khi phân hạch có tới hai, ba neutron mới phát ra có năng lượng đủ lớn, sau đó chúng tiếp tục làm phân hạch hạt nhân khác. Ví dụ: $^{235}_{92}U + ^{1}_{0}n \longrightarrow [^{236}_{92}U] \longrightarrow ^{141}_{56}Ba + ^{92}_{36}Kr + 3(^{1}_{0}n) +$ năng lượng

Phản ứng giải phóng một năng lượng khổng lồ $2 \cdot 10^{10}$ kJ/mol. Nếu khối lượng ^{235}U đủ lớn (900 – 1 000 gam) sẽ xảy ra phản ứng dây chuyền, một vụ nổ hạt nhân sẽ đưa nhiệt độ lên hàng triệu độ và có sức công phá tương đương 20 000 tấn thuốc nổ TNT. Trong tự nhiên, chỉ có các đồng vị U-235 và Pu-239 là có khả năng phân hạch hạt nhân, nhưng U-235 chỉ chiếm khoảng 0,7% lượng uranium tự nhiên, còn lại là U-238:

$$^{239}_{94}Pu + ^{1}_{0}n \longrightarrow ^{146}_{55}Cs + ^{91}_{39}Y + 3(^{1}_{0}n) +$$ năng lượng

Có hai trường hợp xảy ra phản ứng phân hạch dây chuyền:

+ Không điều khiển được (bom nổ).

+ Điều khiển được hay có thể dừng (trong lò phản ứng hạt nhân của tàu phá băng hoặc nhà máy điện nguyên tử).

– Phản ứng nhiệt hạch (tổng hợp hạt nhân)

Khi các hạt nhân tương đối nhẹ kết hợp với nhau thành hạt nhân nặng hơn (cơ sở của bom H) cũng giải phóng một năng lượng cao hơn nhiều so với phân hạch hạt nhân.

$$4({}_1^1\mathrm{H}) \longrightarrow {}_2^4\mathrm{He} + 2({}_{+1}^0\mathrm{e}) + 2{,}5\cdot10^9\ \mathrm{kJ}$$

$${}_1^2\mathrm{H} + {}_1^2\mathrm{H} \longrightarrow {}_2^3\mathrm{H} + {}_0^1\mathrm{n} + 2{,}9\cdot10^8\ \mathrm{kJ}$$

Để phản ứng xảy ra cần từ 1 – 10 triệu độ (nhiệt độ trên Mặt Trời) và phản ứng này cũng là nguồn năng lượng của Mặt Trời và là khởi đầu việc tổng hợp các nguyên tố trong vũ trụ.

IV GỢI Ý TỔ CHỨC CÁC HOẠT ĐỘNG DẠY, HỌC

Hoạt động 1. PHẢN ỨNG HẠT NHÂN

1. GV hướng dẫn HS hoàn thiện năng lực NTHH:

GV đưa ra ví dụ về phản ứng hạt nhân:

$${}_1^2\mathrm{D} + {}_1^3\mathrm{T} \longrightarrow {}_2^4\mathrm{He} + {}_0^1\mathrm{n} \qquad \Delta H = -17{,}6\ \mathrm{MeV}$$

$${}_1^1\mathrm{H} + {}_1^3\mathrm{T} \longrightarrow {}_2^4\mathrm{He} \qquad \Delta H = -19{,}8\ \mathrm{MeV}$$

Từ sơ đồ nêu khái niệm về phản ứng hạt nhân và so sánh với phản ứng hoá học.

2. GV hướng dẫn HS nội dung của định luật bảo toàn số khối và bảo toàn khối lượng.

Sử dụng nội dung định luật, yêu cầu HS viết một số phương trình hạt nhân:

Ví dụ: ${}_3^6\mathrm{Li} + {}_1^1\mathrm{H} \longrightarrow {}_2^4\mathrm{He} + ?$

${}_1^2\mathrm{D} + {}_1^2\mathrm{D} \longrightarrow {}_1^3\mathrm{T} + ?$

Hoạt động 2. PHÓNG XẠ TỰ NHIÊN

GV hướng dẫn HS hoàn thiện năng lực NTHH:

1. GV giúp HS tìm hiểu khái niệm về phóng xạ tự nhiên.

2. GV giúp HS tìm hiểu các kiểu phóng xạ alpha, beta và gamma (chú ý các hạt được giải phóng), từ đó giới thiệu khả năng đâm xuyên và ion hoá của các tia phóng xạ.

3. GV giúp HS tìm hiểu sự liên quan giữa chu kì bán rã và độ bền của các đồng vị phóng xạ.

Hoạt động 3. PHÓNG XẠ NHÂN TẠO

Dùng phương pháp trực quan, đàm thoại gợi mở để HS rèn luyện năng lực GQVĐ khi vận dụng viết một số phương trình:

${}_3^6\mathrm{Li} + {}_1^1\mathrm{H} \longrightarrow {}_2^4\mathrm{He} + \ldots$

${}_3^6\mathrm{Li} + {}_1^2\mathrm{D} \longrightarrow \ldots$

KẾT NỐI TRI THỨC VỚI CUỘC SỐNG

$^{235}_{92}U + {}^{1}_{0}n \longrightarrow {}^{141}_{56}Ba + \ldots + 3\,{}^{1}_{0}n$ + năng lượng

$^{239}_{94}Pu + {}^{1}_{0}n \longrightarrow \ldots + {}^{146}_{55}Cs + 3\,{}^{1}_{0}n$ + năng lượng

$4({}^{1}_{1}H) \longrightarrow {}^{4}_{2}He + 2(\ldots) + 2{,}5\cdot10^{9}$ kJ

${}^{2}_{1}H + {}^{2}_{1}H \longrightarrow \ldots + {}^{1}_{0}n + 2{,}9\cdot10^{8}$ kJ

Phần 2. *Sự phân chia hạt nhân và sự tổng hợp hạt nhân* được giới thiệu bởi 4 ví dụ, kèm theo giới thiệu hạt position ($^{0}_{+1}e$), đồng thời nêu các ứng dụng trong lĩnh vực nguyên tử và nhà máy điện nguyên tử.

Củng cố: sử dụng một số câu hỏi và bài tập tương tự câu hỏi trong bài học để luyện tập.

Hoạt động 4. ỨNG DỤNG CỦA ĐỒNG VỊ PHÓNG XẠ VÀ PHẢN ỨNG HẠT NHÂN

GV sử dụng phương pháp trực quan sinh động hướng dẫn HS hoàn thiện năng lực NTHH: bằng cách đưa ra tranh, ảnh hoặc chiếu video về ứng dụng của đồng vị phóng xạ trong các lĩnh vực sau:

– Trong y học.

– Trong nông nghiệp công nghệ cao.

– Trong công nghiệp, xây dựng và giao thông.

– Trong khảo cổ, địa chất.

– Trong sử dụng năng lượng sạch.

Củng cố: sử dụng một số câu hỏi và bài tập tương tự câu hỏi trong bài học để luyện tập.

Hoạt động 5. TỔNG KẾT, GHI NHỚ

Kết luận:

1. Phản ứng hạt nhân và vận dụng các định luật bảo toàn để viết phương trình.

2. Sự phóng xạ tự nhiên.

3. Sự phóng xạ nhân tạo.

3. Ứng dụng của đồng vị phóng xạ và phản ứng hạt nhân trong các lĩnh vực y học, khảo cổ, địa chất, nông nghiệp,...

V HƯỚNG DẪN TRẢ LỜI CÂU HỎI TRONG SGK

1. a) $^{32}_{15}P \longrightarrow {}^{32}_{16}S + {}^{0}_{-1}e$

b) $^{43}_{19}K \longrightarrow {}^{43}_{20}Ca + {}^{0}_{-1}e$

2. a) $^{226}_{88}Ra \longrightarrow {}^{222}_{86}Rn + {}^{4}_{2}He$

b) $^{237}_{93}Np \longrightarrow {}^{233}_{91}Pa + {}^{4}_{2}He$

c) $^{32}_{16}S \longrightarrow {}^{32}_{17}Cl + {}^{0}_{-1}e$

d) $^{3}_{1}H \longrightarrow {}^{3}_{2}He + {}^{0}_{-1}e$

3. $^{223}_{90}\text{Th} \longrightarrow {}^{223}_{92}\text{U} + 2({}^{0}_{-1}\text{e})$

4. $^{14}_{7}\text{N} + {}^{1}_{0}\text{n} \longrightarrow {}^{14}_{6}\text{C} + {}^{1}_{1}\text{H}.$

5. a) $^{26}_{12}\text{Mg} + {}^{1}_{0}\text{n} \longrightarrow {}^{23}_{10}\text{Ne} + {}^{4}_{2}\text{He}.$ b) $^{19}_{9}\text{F} + {}^{1}_{1}\text{H} \longrightarrow {}^{16}_{8}\text{O} + {}^{4}_{2}\text{He}.$

c) $^{242}_{94}\text{Pu} + {}^{22}_{10}\text{Ne} \longrightarrow 4({}^{1}_{0}\text{n}) + {}^{260}_{104}\text{Rf}$ d) $^{2}_{1}\text{H} + {}^{7}_{3}\text{Li} \longrightarrow 2({}^{4}_{2}\text{He}) + {}^{1}_{0}\text{n}.$

6. Đáp án B. Theo định luật bảo toàn điện tích và số khối:

Nguyên tử X có Z = 92 – 52 = 40 và A = 235 + 1 – 137 – 2 = 97 là $^{97}_{40}\text{Zr}$.

$$^{235}_{92}\text{U} + {}^{1}_{0}\text{n} \longrightarrow {}^{137}_{52}\text{Te} + {}^{97}_{40}\text{Zr} + 2({}^{1}_{0}\text{n})$$

7. Khi các tia gamma (γ) phát ra từ đồng vị phóng xạ $^{60}_{27}\text{Co}$ có khả năng xuyên sâu, dùng điều trị các khối u ở sâu trong cơ thể ($^{60}_{27}\text{Co}$ là nguồn phát xạ γ thông dụng nhất).

– Sự chiếu xạ lương thực, thực phẩm bằng tia γ phát ra từ đồng vị $^{60}_{27}\text{Co}$ có tác dụng diệt khuẩn, bảo quản lương thực, thực phẩm lâu dài hơn.

– Các bệnh ung thư bên ngoài như ung thư da có thể điều trị bằng các tia phóng xạ phát ra từ đồng vị $^{30}_{15}\text{P}$ hay $^{90}_{38}\text{Sr}$ bằng cách áp các túi nhựa đựng đồng vị phóng xạ vào vùng bị tổn thương.

– Phân bón có chứa đồng vị phóng xạ $^{32}_{15}\text{P}$ để theo dõi sự hấp thụ phosphate và sự chuyển hoá phosphorus của cây cối.

– Dùng đồng vị phóng xạ $^{131}_{53}\text{I}$ để chẩn đoán và chữa bệnh bướu cổ.

– Dùng $^{235}_{92}\text{U}$ và $^{239}_{94}\text{Pu}$ làm nhiên liệu trong các lò phản ứng hạt nhân để sản xuất điện (nhà máy điện nguyên tử) và chạy các con tàu phá băng,...

8. (1) Nhận 1 electron: $^{239}_{94}\text{Pu} + {}^{0}_{-1}\text{e} \longrightarrow {}^{239}_{93}\text{Np}$

(2) Bức xạ 1 positron: $^{239}_{94}\text{Pu} \longrightarrow {}^{239}_{93}\text{Np} + {}^{0}_{+1}\text{e}$

(3) Bức xạ 1 hạt alpha: $^{239}_{94}\text{Pu} \longrightarrow {}^{235}_{92}\text{U} + {}^{4}_{2}\text{He}$

VI GỢI Ý KIỂM TRA, ĐÁNH GIÁ

– Đánh giá năng lực NTHH của HS bằng các câu hỏi có các cụm từ "trình bày được"; "nêu được" sơ lược về phóng xạ tự nhiên, phóng xạ nhân tạo và phản ứng hạt nhân.

– Đánh giá năng lực GQVĐ của HS bằng các câu hỏi có các cụm từ "vận dụng được" định luật bảo toàn số khối và điện tích, "lấy được ví dụ" phóng xạ tự nhiên, phóng xạ nhân tạo và phản ứng hạt nhân.

– Đánh giá năng lực VDKT của HS bằng các câu hỏi có nội dung ứng dụng của phóng xạ và phản ứng hạt nhân.

Bài 3. NĂNG LƯỢNG HOẠT HOÁ CỦA PHẢN ỨNG HOÁ HỌC

I MỤC TIÊU

Sau bài học, HS sẽ:

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

– Giải thích được vai trò của chất xúc tác.

II CHUẨN BỊ

– Thí nghiệm về sự biến đổi của tốc độ phản ứng.

– Thí nghiệm về vai trò của xúc tác.

III THÔNG TIN BỔ SUNG

1. Sơ lược về tốc độ phản ứng

a) Tốc độ phản ứng

Tốc độ của phản ứng hoá học ($X + Y \longrightarrow Z + T$) được đo bằng sự giảm nồng độ của chất phản ứng (X hay Y) hoặc bằng sự tăng nồng độ của sản phẩm (Z hay T) trong một đơn vị thời gian.

Tốc độ kí hiệu là v; nồng độ (C) biểu diễn theo mol/L và thời gian (t) theo giây, phút, giờ,…

$v = \frac{C_1 - C_2}{t_2 - t_1} = -\frac{\Delta C}{\Delta t}$ đối với chất phản ứng và $v = \frac{C_2 - C_1}{t_2 - t_1} = +\frac{\Delta C'}{\Delta t}$ đối với sản phẩm.

(dấu – biểu thị lượng chất mất đi và dấu + biểu thị lượng chất tạo thành)

Các yếu tố ảnh hưởng đến tốc độ phản ứng là nồng độ, nhiệt độ và chất xúc tác.

b) Hằng số tốc độ phản ứng

Định luật tác dụng khối lượng đối với phản ứng đơn giản: "Tốc độ của phản ứng tỉ lệ với tích số nồng độ của các chất tham gia phản ứng (tại thời điểm xét) với số mũ bằng hệ số của chất trong phản ứng".

Xét phản ứng đơn giản: $aX + bY \longrightarrow cZ + dT$, ta có $v = k \cdot (C_X)^a \cdot (C_Y)^b$

(k là hằng số tốc độ phản ứng, cho biết mối quan hệ giữa nồng độ mol của chất phản ứng và tốc độ của một phản ứng hoá học).

Ví dụ: $2NO(g) + O_2(g) \longrightarrow 2NO_2(g)$ thì $v = k\cdot(C_{NO})^2\cdot(C_{O_2})$ (phương trình động học)

hay $v = -\frac{1}{2}\cdot\frac{\Delta[NO]}{\Delta t} = -\frac{\Delta[O_2]}{\Delta t} = +\frac{1}{2}\cdot\frac{\Delta[NO_2]}{\Delta t}$.

Đối với phản ứng dị thể như $C(s) + O_2(g) \longrightarrow CO_2(g)$ trong biểu thức tốc độ chỉ đưa vào nồng độ các chất tan trong dung dịch hay chất khí (nồng độ các chất rắn coi như không đổi và đưa vào hằng số tốc độ): $v = k'\cdot(C_{O_2})$.

Hằng số tốc độ phản ứng phụ thuộc vào bản chất phản ứng, nhiệt độ, xúc tác,... và không phụ thuộc vào nồng độ chất phản ứng.

c) Bậc phản ứng

– Bậc phản ứng

+ Bậc riêng phần của phản ứng: là trị số riêng rẽ của a, b,… trong phương trình động học.

+ Bậc toàn phần của phản ứng: là tổng các trị số a + b + … trong phương trình động học.

Trị số của bậc phản ứng có thể là số nguyên, thập phân hoặc bằng không, được xác định qua thực nghiệm.

– Một số phản ứng đơn giản

+ Phản ứng một chiều bậc nhất:

$$X \longrightarrow \text{sản phẩm} \quad (v = k\cdot C_X)$$

Khi đó $C_X = (a - x)$ với a là nồng độ ban đầu và x là nồng độ mất đi của X.

$$v = -\frac{dC_X}{dt} = -\frac{d(a-x)}{dt} = k\cdot(a-x) \text{ (biểu thức dạng vi phân)}$$

Biến đổi thích hợp rồi lấy tích phân ta được: $k = \frac{1}{t}\cdot\ln\frac{a}{a-x}$.

Ví dụ: Sự phân huỷ $2N_2O_5(g) \longrightarrow 2N_2O_4(g) + O_2(g)$ xảy ra ở 45 °C với nồng độ đầu của N_2O_5 là 2,33 $mol\cdot L^{-1}$; sau 10 phút nồng độ N_2O_5 giảm 0,75 $mol\cdot L^{-1}$. Hằng số tốc độ k được tính theo biểu thức:

$$k = \frac{1}{t}\cdot\ln\frac{a}{a-x} = \frac{1}{10}\cdot\ln\frac{2,33}{2,33-0,75} = 0,437\ (min^{-1}).$$

Các ví dụ nêu trong bài "Phản ứng hạt nhân" là phổ biến cho loại phản ứng này.

+ Phản ứng một chiều bậc hai:

$$2X \longrightarrow \text{sản phẩm}$$

hoặc $$X + Y \longrightarrow \text{sản phẩm}$$

Khi nồng độ X = Y, phương trình động học dạng tích phân là $k = \frac{1}{t} \cdot \ln \frac{x}{a(a-x)}$.

Khi nồng độ X ≠ Y, phương trình động học dạng tích phân là $k = \frac{t}{a-b} \cdot \ln \frac{b(a-x)}{a(b-x)}$.

Trong đó, a và b là nồng độ ban đầu của X và Y với a > b.

Ví dụ: $CH_3COOC_2H_5 + NaOH \longrightarrow CH_3COONa + C_2H_5OH$

2. Ảnh hưởng của nhiệt độ đến tốc độ phản ứng

a) Quy tắc Van't Hoff

Khi nhiệt độ tăng, tốc độ chuyển động của các phân tử tăng, năng lượng của chúng tăng, số va chạm có hiệu quả tăng lên. Sự tăng nhiệt độ làm tăng tốc độ phản ứng.

Một quy luật định lượng được Van't Hoff tổng kết từ thực nghiệm là: "Ở khoảng nhiệt độ gần nhiệt độ phòng, khi tăng nhiệt độ thêm 10 °C, tốc độ phản ứng tăng từ 2 đến 4 lần".

Biểu thức: $\frac{v_{T+10}}{v_T} = \frac{k_{T+10}}{k_T} \Rightarrow v_{T_2} = v_{T_1} \cdot \gamma^{\frac{\Delta T}{10}}$

Trong đó, v_{T_1} và v_{T_2} là tốc độ phản ứng ở nhiệt độ T_1 và T_2; γ là hệ số nhiệt độ Van't Hoff (γ = 2 ÷ 4 lần); ΔT là hiệu $T_2 - T_1$.

Ví dụ: Nếu tăng nhiệt độ của phản ứng từ 140 °C lên 200 °C và biết hệ số nhiệt độ Van't Hoff trong khoảng nhiệt độ đó bằng 2 thì tốc độ phản ứng sẽ tăng:

$$v_{200} = v_{140} \cdot 2^{\frac{200-140}{10}} = 64 \cdot v_{140} \Rightarrow \text{Tốc độ phản ứng tăng 64 lần.}$$

b) Phương trình Arrhenius

Quy luật định lượng tổng quát hơn về mối liên hệ giữa nhiệt độ với tốc độ phản ứng được biểu thị trong phương trình Arrhenius:

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

Trong đó: A là là thừa số Arrhenius, đặc trưng cho mỗi phản ứng;

e là cơ số logarit Nepe (e = 2,7183);

R là hằng số khí (R = 1,987 cal·mol^{-1}·độ$^{-1}$ hay = 8,314 J·mol^{-1}·độ$^{-1}$);

T là nhiệt độ (theo thang Kelvin);

E_a là năng lượng hoạt hoá.

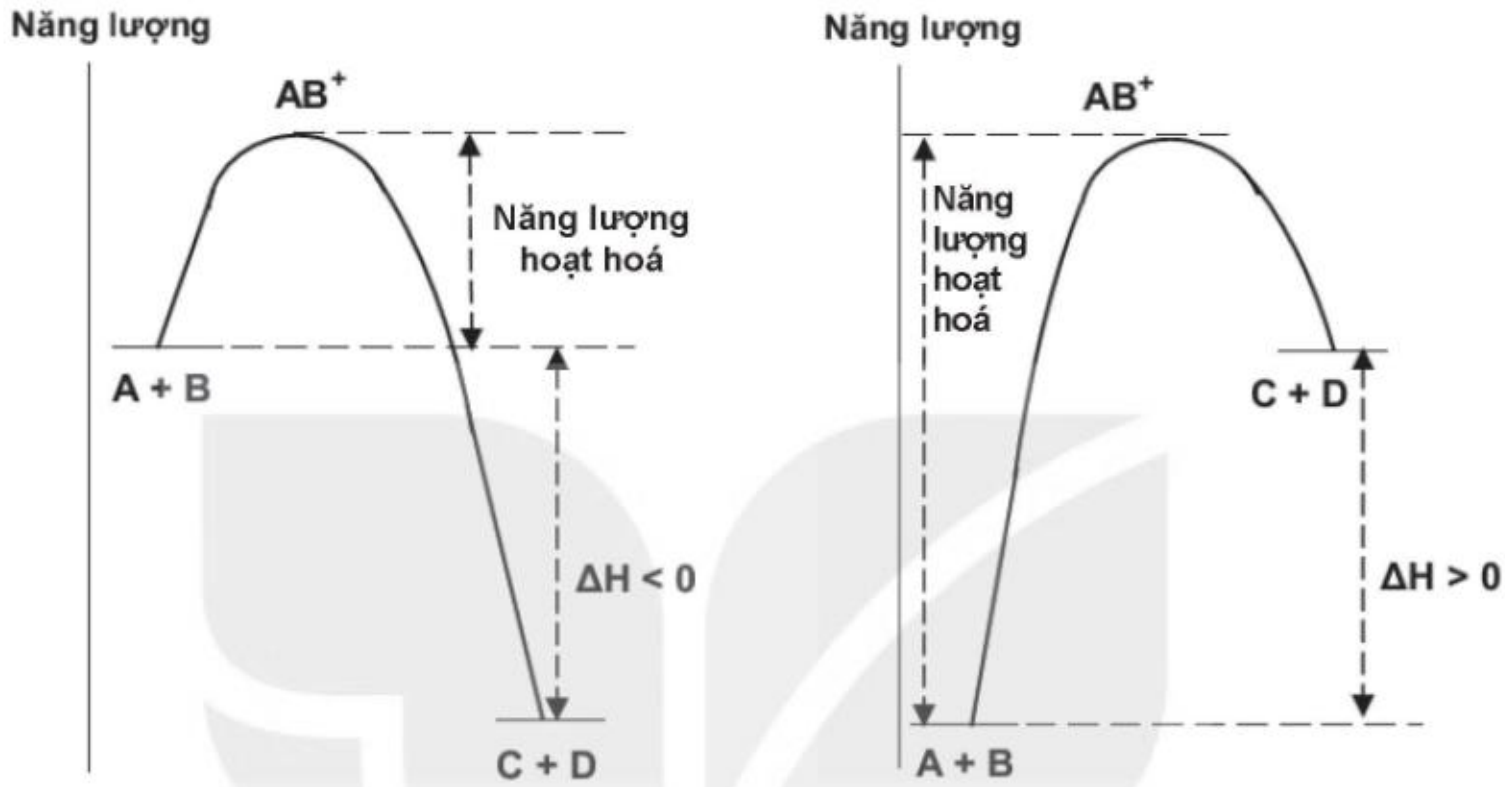
Phương trình Arrhenius viết cho hai nhiệt độ T_1 và T_2 với hai hằng số tốc độ k_1 và k_2 tương ứng như sau:

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

Ví dụ: Một phản ứng có năng lượng hoạt hoá là E_a = 120 kJ·mol^{-1}. Khi tăng nhiệt độ từ 27 °C lên 127 °C thì tốc độ phản ứng tăng:

$$\ln\frac{k_{T_2}}{k_{T_1}} = \frac{120\cdot10^3}{8,314}\cdot\left(\frac{1}{300}-\frac{1}{400}\right) = 12,1 \Rightarrow \frac{k_{T_2}}{k_{T_1}} = 167,36 \text{ (lần)}.$$

c) Năng lượng hoạt hoá



Phản ứng toả nhiệt *Phản ứng thu nhiệt*

Hình 3.1. *Đồ thị biểu diễn năng lượng hoạt hoá (AB^+ là sản phẩm trung gian)*

Năng lượng cần thiết để đưa phân tử các chất phản ứng đến va chạm có hiệu quả (tạo ra sản phẩm trung gian – phức hoạt động), sau đó tạo sản phẩm phản ứng. Năng lượng hoạt hoá càng thấp phản ứng càng dễ xảy ra.

IV GỢI Ý TỔ CHỨC CÁC HOẠT ĐỘNG DẠY, HỌC

Hoạt động 1. NĂNG LƯỢNG HOẠT HOÁ

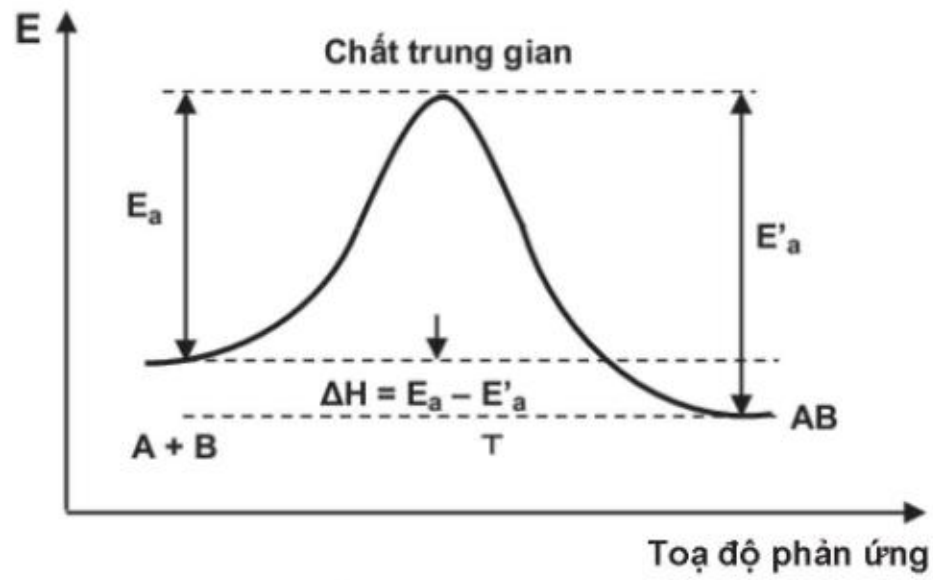
GV hướng dẫn HS hoàn thiện năng lực NTHH theo phương pháp tiên đề:

1. GV đưa ra đồ thị về năng lượng hoạt hoá và phân tích (có thể sử dụng video để theo dõi tiến trình phản ứng).

GV giới thiệu khái niệm về năng lượng hoạt hoá, có thể sử dụng sơ đồ đơn giản hơn trong SGK để HS dễ hiểu.

Ví dụ: Phản ứng có năng lượng E_a càng thấp thì càng dễ xảy ra, tốc độ của phản ứng càng lớn. Ta có thể thấy rõ ý nghĩa của E_a qua giản đồ năng lượng của phản ứng ở nhiệt độ xác định.

$$A(g) + B(g) \rightleftharpoons AB(g) \qquad (1)$$



Hình 3.2. *Giản đồ năng lượng của phản ứng (1)*

(E_a và E'_a là năng lượng hoạt hoá của phản ứng thuận và phản ứng nghịch)

Hiệu $E_a - E'_a = \Delta H$ là hiệu ứng nhiệt của phản ứng thuận, E_a và E'_a là hàng rào thế năng mà các phân tử tham gia phản ứng phải vượt qua để tạo thành các sản phẩm phản ứng.

2. GV giới thiệu phương trình Arrhenius để HS biết ảnh hưởng của năng lượng hoạt hoá và nhiệt độ đến tốc độ phản ứng (giới thiệu cả hai dạng của phương trình) và nêu ví dụ minh hoạ kèm theo.

$$k = A.e^{-\frac{E_a}{RT}} \quad \text{và} \quad \ln\frac{k_{T_1}}{k_{T_2}} = \frac{E_a}{R}.\left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1}\right)$$

Dùng phương pháp hoạt động nhóm, đàm thoại gợi mở để HS rèn luyện năng lực GTHT và năng lực GQVĐ khi vận dụng phương trình Arrhenius để tính:

– Năng lượng hoạt hoá của phản ứng.

– Hằng số tốc độ phản ứng.

– Nhiệt độ ảnh hưởng đến tốc độ phản ứng.

3. GV có thể giới thiệu thêm quy tắc Vant' Hoff để HS tính hệ số nhiệt độ Vant' Hoff.

Củng cố: sử dụng một số câu hỏi và bài tập tương tự câu hỏi trong bài học để luyện tập.

Hoạt động 2. CHẤT XÚC TÁC

GV hướng dẫn HS hoàn thiện năng lực NTHH:

1. Khái niệm về chất xúc tác:

GV giúp HS hoàn thiện năng lực THTN bằng cách nêu vấn đề cho HS tự tìm một số ví dụ trong điều chế các chất hoặc sản xuất hoá học mà các em biết.

GV hướng dẫn HS hoàn thiện năng lực NTHH:

2. Một số đặc điểm của xúc tác:

– Đồng thể và dị thể.

– Bản chất và lượng không thay đổi.

– Khối lượng dùng rất nhỏ so với chất phản ứng.

– Làm giảm năng lượng hoạt hoá của phản ứng.

– Làm tăng tốc độ phản ứng nhưng không thay đổi chiều của phản ứng.

– Tính chọn lọc.

Lấy ví dụ cho mỗi đặc điểm, hoặc gợi mở nêu vấn đề cho HS đề xuất ví dụ.

Dùng phương pháp trực quan, đàm thoại gợi mở để HS rèn luyện năng lực GQVĐ khi nêu vấn đề về vai trò của xúc tác trong công nghiệp hoá học và công nghệ sinh học (có thể sử dụng ví dụ, hình ảnh, video để dẫn dắt HS).

Củng cố: sử dụng một số câu hỏi và bài tập tương tự câu hỏi trong bài học để luyện tập.

Hoạt động 3. TỔNG KẾT, GHI NHỚ

Kết luận:

1. Năng lượng hoạt hoá, ảnh hưởng của năng lượng hoạt hoá và nhiệt độ đến tốc độ của phản ứng hoá học.

2. Áp dụng phương trình Arrhenius để tính năng lượng hoạt hoá của phản ứng và xác định sự thay đổi về tốc độ phản ứng khi nhiệt độ thay đổi.

3. Vai trò và ứng dụng của chất xúc tác trong công nghiệp.

V HƯỚNG DẪN TRẢ LỜI CÂU HỎI TRONG SGK

1. $\ln\frac{k_{T_2}}{k_{T_1}} = \frac{E_a}{R}\cdot\left(\frac{1}{T_1}-\frac{1}{T_2}\right) \Rightarrow \ln\frac{k_{400}}{8\cdot10^{-6}} = \frac{10^5}{8,314}\cdot\left(\frac{1}{350}-\frac{1}{400}\right)$

$\Rightarrow k_{400} = 5,9\cdot10^{-4}\ \text{mol}^{-1}\cdot\text{l}\cdot\text{s}^{-1}$.

2. $\ln\frac{k_{T_2}}{k_{T_1}} = \frac{E_a}{R}\cdot\left(\frac{1}{T_1}-\frac{1}{T_2}\right) \Rightarrow \ln 3 = \frac{E_a}{8,314}\cdot\left(\frac{1}{300}-\frac{1}{310}\right) \Rightarrow E_a = 84,966\ \text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$.

3. $\ln\frac{k_{T_2}}{k_{T_1}} = \frac{E_a}{R}\cdot\left(\frac{1}{T_1}-\frac{1}{T_2}\right) \Rightarrow \ln\frac{8,17\cdot10^{-3}}{k_{(273+65)}} = \frac{103\cdot500}{8,314}\cdot\left(\frac{1}{318}-\frac{1}{338}\right)$

$\Rightarrow k_{338} = 8,06\cdot10^{-4}\ \text{mol}^{-1}\cdot\text{l}\cdot\text{s}^{-1}$.

4. Quan sát phương trình hoá học biểu diễn các giai đoạn phản ứng thấy Cl là chất không mất đi trong phản ứng nên nó là chất xúc tác của quá trình phá huỷ tầng ozon.

5. $k_o = A.e^{-\frac{E_a^o}{RT}}$ và $k_x = A'\cdot e^{-\frac{E_a^x}{RT}} \Rightarrow \frac{k_x}{k_o} = e^{\frac{E_a^o - E_a^x}{RT}} = e^{\frac{\Delta E}{RT}}$

$$\frac{k_x}{k_o} = e^{\frac{55\,400-13\,500}{8,314\cdot773}} = e^{6,52} \approx 678,58$$

Chất xúc tác làm tăng tốc độ phản ứng lên 678,58 lần.

VI GỢI Ý KIỂM TRA, ĐÁNH GIÁ

– Đánh giá năng lực NTHH của HS bằng các câu hỏi có các cụm từ "trình bày được"; "nêu được" khái niệm năng lượng hoạt hoá và ảnh hưởng của năng lượng hoạt hoá, nhiệt độ đến tốc độ phản ứng.

– Đánh giá năng lực GQVĐ của HS bằng các câu hỏi có các cụm từ "giải thích được" vai trò của xúc tác với tốc độ phản ứng.

– Đánh giá năng lực VDKT của HS bằng các câu hỏi có nội dung xác định năng lượng hoạt hoá, nhiệt độ phản ứng và vai trò của xúc tác đến phản ứng hoá học.

Bài 4. ENTROPY VÀ BIẾN THIÊN NĂNG LƯỢNG TỰ DO GIBBS

I MỤC TIÊU

Sau bài học, HS sẽ:

– Nêu được khái niệm về entropy.

– Nêu được ý nghĩa của dấu và trị số của biến thiên năng lượng tự do Gibbs (Δ_rG^o).

– Tính được Δ_rG^o từ bảng cho sẵn các giá trị Δ_fH^o và S^o của các chất.

II CHUẨN BỊ

– Một số hình ảnh hoặc video về sự biến đổi entropy của một số chất.

– Bảng giá trị entropy chuẩn và enthalpy chuẩn của một số chất.

III THÔNG TIN BỔ SUNG

1. Nguyên lí thứ nhất của nhiệt động học

a) Phát biểu nguyên lí thứ nhất

– Có một số cách khác nhau để phát biểu nguyên lí. Nguyên lí có thể được phát biểu:

"Năng lượng không tự sinh ra và không tự biến mất mà chỉ biến đổi từ dạng này sang dạng khác". Đó cũng là cách phát biểu của định luật bảo toàn năng lượng.

– Cũng có thể phát biểu nguyên lí thứ nhất dưới dạng biểu thức định lượng:

$$\Delta U = Q - A \text{ hay } Q = \Delta U + A$$

Trong đó: U là hàm nội năng của hệ (tổng động năng và thế năng của các hạt trong hệ); ΔU là biến thiên nội năng của hệ; Q là nhiệt và A là công kèm theo quá trình biến đổi.

Trường hợp sự biến đổi xảy ra trong bình kín (dung tích không đổi, A = 0): $Q = \Delta U$.

Trường hợp sự biến đổi xảy ra ở áp suất không đổi (như áp suất khí quyển), với $A = P \cdot \Delta V$ ta có: $Q_p = \Delta U + P \cdot \Delta V$ hay $\delta Q = d(U + PV)$.

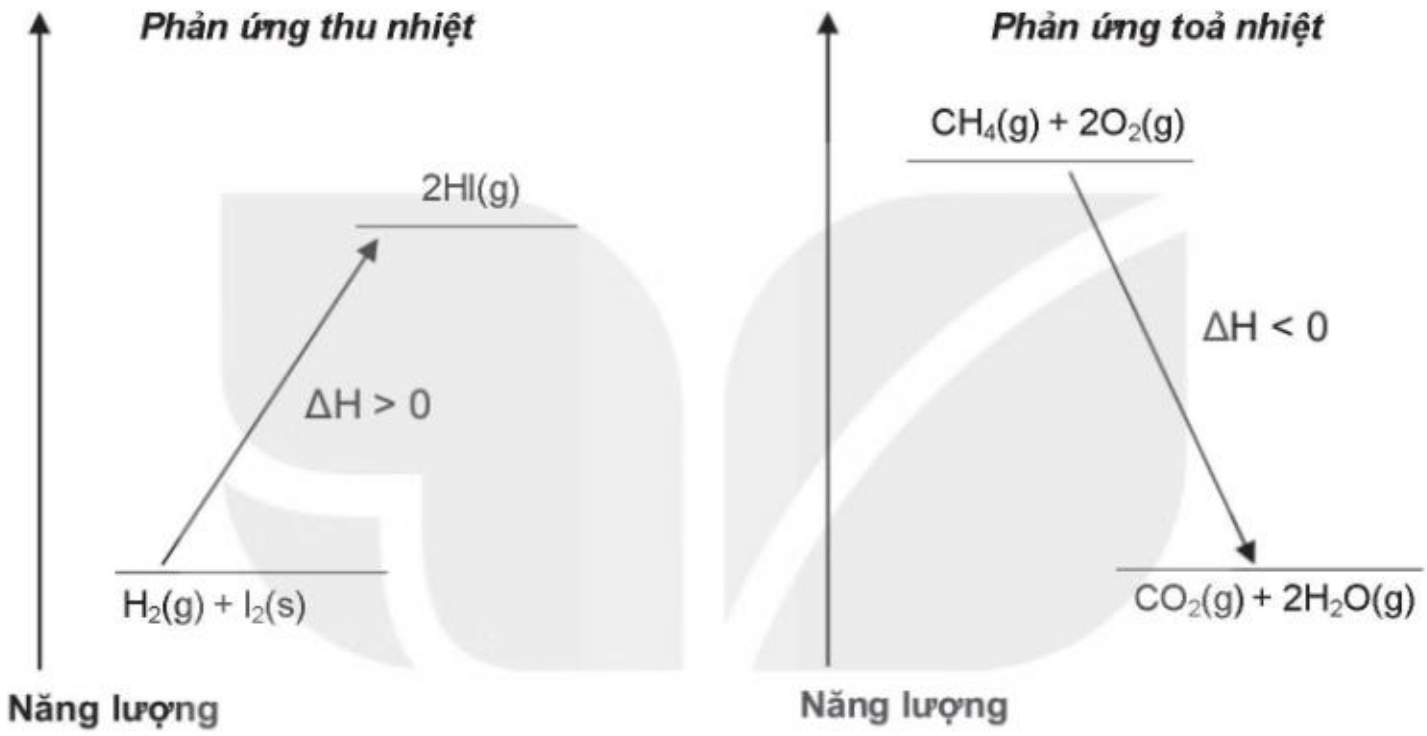
b) Hàm trạng thái (Enthalpy).

Biểu thức $H = U + PV$ gọi là hàm Enthalpy và biến thiên $\Delta H = \Delta U + P \cdot \Delta V$.

Nguyên lí thứ nhất đưa ra hai hàm trạng thái là nội năng U, enthalpy H.

Ta thấy, $Q_p = \Delta H$ (khi áp suất không đổi thì nhiệt lượng Q bằng biến thiên enthalpy).

Sự biến thiên ΔH đối với các phản ứng toả nhiệt và thu nhiệt biểu diễn qua sơ đồ sau:



Bài 4.1. *Sự biến thiên enthalpy đối với phản ứng thu nhiệt và phản ứng toả nhiệt*

2. Nhiệt hoá học và các phép tính về nhiệt hoá học

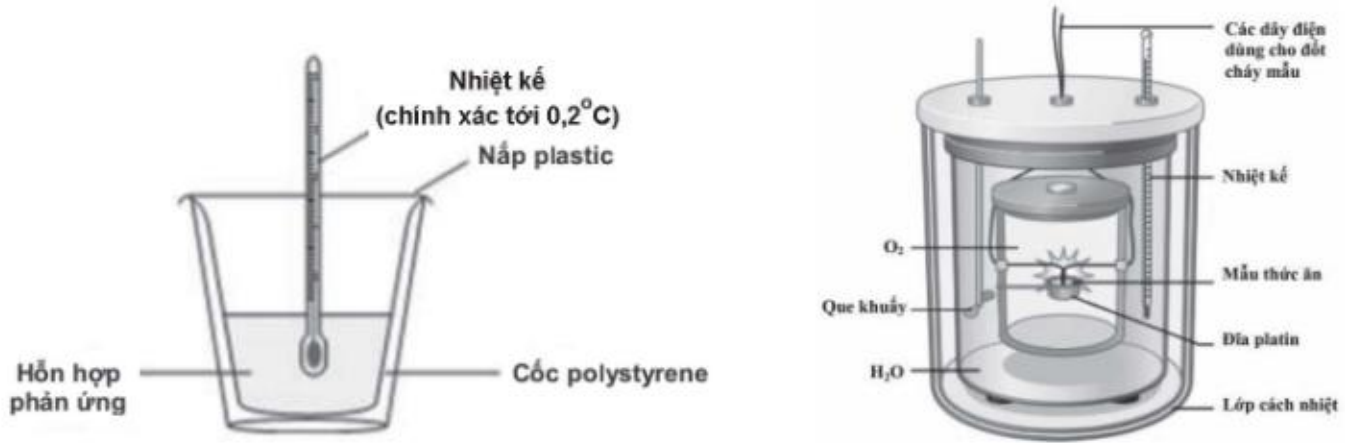
a) Khái niệm mở đầu

Có một số biểu hiện để nhận biết phản ứng hoá học xảy ra, như: sự tạo thành chất kết tủa (trộn dung dịch barium chloride với dung dịch sulfuric acid), tạo thành chất khí (cho dung dịch hydrochloric acid vào $CaCO_3$), sự đổi màu (sục khí SO_2 vào dung dịch Br_2), sự toả nhiệt (cho CaO vào nước),... Nhưng cũng có nhiều phản ứng hoá học không có hiện tượng gì xảy ra (cho dung dịch hydrochloric acid vào dung dịch sodium hydroxide),...

Mỗi phản ứng hoá học xảy ra đều kèm theo sự biến đổi năng lượng do sự khác nhau về năng lượng (động năng và thế năng) của các nguyên tử, phân tử giữa các chất phản ứng và sản phẩm. Năng lượng đó thể hiện dưới nhiều dạng: quang năng (phát sáng), cơ năng (nổ), điện năng (pin, acquy), nhiệt năng (nóng, lạnh),...

Về mặt nhiệt năng, khi phản ứng xảy ra có kèm theo năng lượng toả ra hay hấp thụ phải có sự chênh lệch về nhiệt lượng giữa chất phản ứng và sản phẩm. Sự chênh lệch đó gọi là hiệu ứng nhiệt của phản ứng. Những phản ứng giải phóng ra nhiệt gọi là phản ứng toả nhiệt, những phản ứng lấy nhiệt từ môi trường xung quanh gọi là phản ứng thu nhiệt. Lĩnh vực nghiên cứu nhiệt của phản ứng là đối tượng của ngành nhiệt hoá học.

Để xác định nhiệt phản ứng thường dùng nhiệt lượng kế (Hình 4.2).



Hình 4.2. *Cấu tạo của nhiệt lượng kế*

Ví dụ: Cho 1,56 gam một chất X có khối lượng mol 78 g/mol vào bom nhiệt lượng kế cùng lượng dư O_2 rất lớn (áp suất cao), lượng nước ở bình ngoài là 1 000 gam, nhiệt độ ban đầu là 25 ^oC. Sau khi đốt cháy X, nhiệt độ của nước ở bình ngoài tăng đến 32,8 ^oC (giả sử lượng nhiệt bị hấp thụ bởi các bộ phận xung quanh là không đáng kể). Biết để đun nóng 1,0 gam nước lên 1 ^oC cần 4,19 J nhiệt. Khi đó:

Nhiệt lượng do nước hấp thụ: $1\,000 \cdot 4{,}19 \cdot (32{,}8 - 25) = 32{,}682$ (kJ).

$n_X = 0{,}02$ mol $\Rightarrow$ Nhiệt lượng toả ra khi 1 mol X cháy: $\Delta H = \dfrac{32{,}682}{0{,}02} = 1634{,}1$ (kJ/mol).

Phản ứng toả nhiệt có $\Delta H < 0$ và phản ứng thu nhiệt có $\Delta H > 0$.

Nhiệt lượng toả ra hay hấp thụ còn phụ thuộc vào trạng thái vật lí nên trong phương trình hoá học biểu diễn phản ứng phải ghi kèm trạng thái vật lí của các chất. Phương trình viết như vậy là phương trình nhiệt hoá học.

Ví dụ: Phương trình nhiệt hoá học của phản ứng đốt cháy H_2 thành H_2O là:

$$H_2(g) + 0{,}5O_2(g) \longrightarrow H_2O(l) \qquad \Delta H = -285{,}8 \text{ kJ}$$

$$H_2(g) + 0{,}5O_2(g) \longrightarrow H_2O(g) \qquad \Delta H = -241{,}8 \text{ kJ}$$

Nguyên nhân ΔH khác nhau là do còn nhiệt lượng chuyển pha $H_2O(g) \longrightarrow H_2O(l)$.

b) Năng lượng liên kết (E_b) và nhiệt phản ứng ($\Delta_r H$)

Phản ứng hoá học xảy ra gồm sự phá vỡ liên kết hoá học của chất phản ứng và sự tạo thành liên kết hoá học của sản phẩm phản ứng. Năng lượng cần cung cấp (hấp thụ) để phá vỡ liên kết hoá học gọi là năng lượng liên kết. Năng lượng giải phóng ra khi tạo thành liên kết có trị số bằng năng lượng phá vỡ liên kết đó nhưng ngược dấu. Như vậy, phản ứng hoá học toả nhiệt hay thu nhiệt phụ thuộc vào độ bền của các liên kết trong chất phản ứng và sản phẩm phản ứng. Chữ b là viết tắt của bond (liên kết) và r là viết tắt của reaction (phản ứng).

Cách tính: Năng lượng giải phóng (có dấu –) + Năng lượng cần cung cấp (có dấu +).

Ví dụ 1: Cho năng lượng liên kết E_b của: C—H (414,2 kJ/mol); Cl—Cl (242,4 kJ/mol); C—Cl (326,3 kJ/mol) và H—Cl (431,0 kJ/mol).

Nhiệt của phản ứng: $CH_4(g) + 4Cl_2(g) \longrightarrow CCl_4(g) + 4HCl(g)$ được tính như sau:

Năng lượng cần cung cấp: (4·414,2) + (4·242,4) = 2626,4 (kJ/mol).

Năng lượng giải phóng ra: (4·326,3) + (4·431,0) = 3029,2 (kJ/mol).

Nhiệt giải phóng ra lớn hơn nhiệt cần cung cấp: 3029,2 – 2626,4 = 402,8 (kJ/mol) nên phản ứng toả nhiệt và phương trình nhiệt hoá học viết như sau:

$$CH_4(g) + 4Cl_2(g) \longrightarrow CCl_4(g) + 4HCl(g) \quad \Delta_rH = -402,8 \text{ kJ/mol}$$

hoặc: $\Delta_rH = (4\cdot414,2) + (4\cdot242,4) - (4\cdot326,3) - (4\cdot431,0) = -402,8$ (kJ/mol)

Ví dụ 2: Cho năng lượng liên kết E_b của:

Hg—O (355,7 kJ/mol); Hg (61,2 kJ/mol); và O—O (498,7 kJ/mol).

Nhiệt của phản ứng: $2HgO(s) \longrightarrow 2Hg(l) + O_2(g)$ được tính như sau:

Năng lượng cần cung cấp: 2·355,7 = 711,4 (kJ/mol).

Năng lượng giải phóng ra: 2·61,2 + 498,7 = 621,1 (kJ/mol).

Nhiệt giải phóng ra nhỏ hơn nhiệt cần cung cấp: 711,4 – 621,1 = 90,3 (kJ/mol) nên phản ứng thu nhiệt và phương trình nhiệt hoá học viết như sau:

$$2HgO(s) \longrightarrow 2Hg(l) + O_2(g) \quad \Delta_rH = +90,3 \text{ kJ/mol}$$

hoặc: $\Delta_rH = -[(2\cdot61,2) + 498,7] + (2\cdot355,7) = +90,3$ kJ/mol

Trong hai ví dụ trên, phản ứng ở ví dụ 1 thuộc loại phản ứng toả nhiệt, còn phản ứng ở ví dụ 2 thuộc loại phản ứng thu nhiệt.

c) Nhiệt tạo thành (nhiệt sinh) và nhiệt phân huỷ

Nhiệt tạo thành (Δ_fH) của một hợp chất hoá học là lượng nhiệt toả ra hay hấp thụ trong phản ứng tạo thành 1,0 mol hợp chất đó từ các đơn chất. (f là viết tắt của form ~ tạo thành).

Nhiệt phân huỷ (Δ_aH) của một hợp chất hoá học là lượng nhiệt toả ra hay hấp thụ trong phản ứng phân huỷ 1,0 mol hợp chất đó thành các đơn chất. (a là viết tắt của analysis ~ phân tích).

Đối với một hợp chất, nhiệt sinh (ΔH_f) và nhiệt phân huỷ (ΔH_a) có cùng trị số nhưng trái dấu.

Ví dụ: $2HgO(s) \longrightarrow 2Hg(l) + O_2(g)$ $\quad \Delta_aH = +90,3$ kJ/mol

$2Hg(l) + O_2(g) \longrightarrow 2HgO(s)$ $\quad \Delta_fH = -90,3$ kJ/mol

d) Định luật Hess và cách tính nhiệt phản ứng (Δ_rH)

– Định luật Hess do nhà hoá học người Nga Germain Henri Hess (1802 – 1850) đề xuất:

"Hiệu ứng nhiệt của phản ứng hoá học chỉ phụ thuộc vào bản chất và trạng thái của các chất đầu và sản phẩm cuối chứ không phụ thuộc vào đường đi của quá trình, nghĩa là không phụ thuộc vào số lượng và đặc điểm của các chất giai đoạn trung gian".

Ví dụ: Phản ứng tạo ra CO_2 từ graphite (C) có thể thực hiện theo 2 cách:

$$C_{(graphite)} + O_2(g) \longrightarrow CO_2(g) \qquad \Delta_rH$$

hoặc:

$$C_{(graphite)} + 0{,}5O_2(g) \longrightarrow CO(g) \qquad \Delta_rH_1$$

$$CO(g) + 0{,}5O_2(g) \longrightarrow CO_2(g) \qquad \Delta_rH_2$$

Theo định luật Hess: $\Delta_rH = \Delta_rH_1 + \Delta_rH_2$

– Cách tính nhiệt phản ứng (Δ_rH):

+ Ngoài cách tính nhiệt phản ứng theo năng lượng liên kết, có thể tính nhiệt phản ứng hay nhiệt tạo thành của các hợp chất theo định luật Hess:

"Nhiệt của một phản ứng bằng tổng nhiệt sinh của các chất sản phẩm trừ đi tổng nhiệt sinh của các chất phản ứng" (trong đó nhiệt sinh của đơn chất được coi bằng không).

$$\Delta_rH = \Sigma\Delta_fH_{(\text{sản phẩm})} - \Sigma\Delta_fH_{(\text{chất đầu})}$$

Ví dụ: Tính Δ_rH của phản ứng đốt cháy metan:

$$CH_4(g) + 2O_2(g) \longrightarrow CO_2(g) + 2H_2O(g).$$

Biết nhiệt tạo thành:

$CH_4(g) = -74{,}86$ kJ/mol; $CO_2(g) = -393{,}5$ kJ/mol và $H_2O(g) = -241{,}82$ kJ/mol.

Theo định luật Hess: $\Delta_rH = \Delta_fH_{CO_{2(g)}} + 2\cdot\Delta_fH_{H_2O_{(g)}} - \Delta_fH_{CH_4(g)}$

$$= (-393{,}5) + 2\cdot(-241{,}82) - (-74{,}86) = -802{,}28 \text{ (kJ/mol)}$$

+ Nếu coi nhiệt tạo thành:

$$C(s) + 2H_2(g) \longrightarrow CH_4(g) \quad \text{là } \Delta_fH_1$$

$$C(s) + O_2(g) \longrightarrow CO_2(g) \quad \text{là } \Delta_fH_2$$

$$H_2(g) + 0{,}5O_2(g) \longrightarrow H_2O(g) \quad \text{là } \Delta_fH_3$$

Có thể tính Δ_rH bằng cách tổ hợp:

$$CH_4(g) \longrightarrow C(s) + 2H_2(g) \qquad -\Delta_fH_1$$

$$C(s) + O_2(g) \longrightarrow CO_2(g) \qquad \Delta_fH_2$$

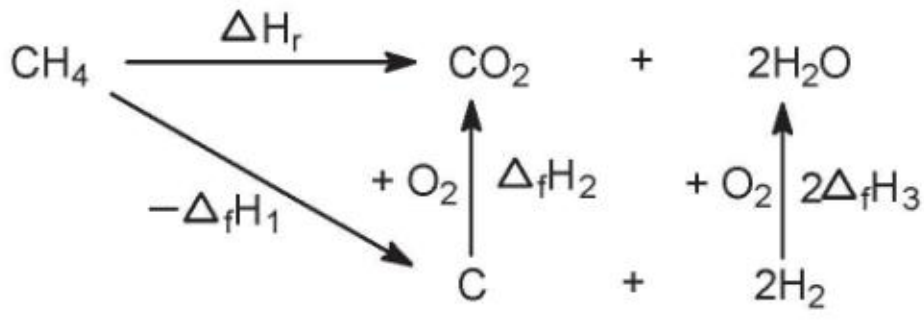
$$2H_2(g) + O_2(g) \longrightarrow 2H_2O(g) \qquad 2\Delta_fH_3$$

Tổ hợp lại:

$$CH_4(g) + 2O_2(g) \longrightarrow CO_2(g) + 2H_2O(g) \qquad \Delta_rH$$

cho $\Delta_rH = -\Delta_fH_1 + \Delta_fH_2 + 2\Delta_fH_3 = -(-74{,}86) + (-393{,}5) + 2\cdot(-241{,}82) = -802{,}28$ (kJ/mol)

+ Hoặc tính Δ_rH qua chu trình Hess:



Ta có: $\Delta_r H = -\Delta_f H_1 + \Delta_f H_2 + 2\Delta_f H_3$

$= -(-74,86) + (-393,5) + 2\cdot(-241,82) = -802,28$ (kJ/mol).

3. Nguyên lí thứ hai của nhiệt động học

a) Quá trình tự diễn biến và entropy

Trong tự nhiên có nhiều quá trình tự xảy ra và cũng có quá trình không tự xảy ra.

Ví dụ: Mở lọ nước hoa, mùi nước hoa bay từ lọ ra khắp phòng, chứ mùi nước hoa không tự chui từ phòng vào lọ. Hai vật có nhiệt độ khác nhau để cạnh nhau, nhiệt chỉ có thể truyền từ vật có nhiệt độ cao hơn sang vật có nhiệt độ thấp hơn mà không thể ngược lại.

Quá trình chuyển nước hoa từ lọ ra khắp phòng hay nói chung quá trình chuyển từ trạng thái lỏng thành khí làm cho hệ mất trật tự hơn (khi khoảng cách giữa các phân tử tăng lên, các phân tử sẽ chuyển động nhiều hơn dẫn đến hệ mất trật tự hơn). Tương tự, quá trình chuyển từ trạng thái lỏng về rắn làm cho hệ trật tự hơn.

Đánh giá sự tự diễn biến của một quá trình (kể cả phản ứng hoá học) thông qua một đại lượng kí hiệu là S (entropy), nó là tính chất nhiệt động của chất. Khi sự mất trật tự của các hạt càng lớn thì giá trị entropy càng cao. Sự biến thiên của entropy (ΔS) được xác định bằng thực nghiệm dựa vào nhiệt của quá trình, nó là một hàm trạng thái: $\Delta S = \frac{\Delta H}{T}$.

Quá trình chuyển trạng thái từ rắn → lỏng → khí là thu nhiệt và entropy tăng ($\Delta S > 0$).

Quá trình chuyển trạng thái từ khí → lỏng → rắn là toả nhiệt và entropy giảm ($\Delta S < 0$).

Biến thiên ΔS là độ đo tính không thuận nghịch của quá trình trong hệ cô lập và đặc trưng cho chiều diễn biến của các quá trình tự nhiên. (Hệ được gọi là cô lập nếu gồm hệ khảo sát và môi trường xung quanh).

Ví dụ 1: Quá trình chuyển 419 J nhiệt của hệ ở 300K cho môi trường xung quanh ở 200K có tự xảy ra không?

$$\Delta H_{hệ} = -\frac{100}{300} = -0,333\ (J\cdot K^{-1}).$$

$$\Delta H_{môi\ trường} = \frac{100}{200} = +0,500\ (J\cdot K^{-1}).$$

$\Delta H_{tổng} = -0,333 + 0,500 = +0,167\ (J\cdot K^{-1}) > 0$ nên quá trình tự xảy ra.

Ví dụ 2: Một mol nước đá tại nhiệt độ 0 °C và áp suất 1 bar nếu hấp thụ 6 003,734 J nhiệt thì có tự chảy ra thành nước lỏng không?

$\Delta S = \frac{6003,734}{273,15} = 21,98\ (J\cdot mol^{-1}\cdot K^{-1}) > 0$ nên quá trình tự xảy ra.

b) Phát biểu nguyên lí thứ hai

Tiên đề Clausius: "Nhiệt không thể tự truyền từ vật lạnh sang vật nóng hơn".

Trong bất kì một quá trình tự diễn biến nào, entropy tổng của hệ và môi trường xung quanh phải tăng.

4. Năng lượng tự do Gibbs

a) Khái niệm năng lượng tự do Gibbs (G)

Để đánh giá các quá trình tự diễn biến, năm 1875 nhà khoa học người Mỹ là Josiah Willard Gibbs (1839 – 1903) đưa ra một đại lượng gọi là năng lượng tự do Gibbs (kí hiệu G). Nó là một hàm trạng thái (được gọi là thế nhiệt động) với hai biến số là áp suất P và nhiệt độ T:

$$G = H - TS$$

Đối với các quá trình biến đổi ở nhiệt độ và áp suất không đổi: $\Delta G = \Delta H - T \cdot \Delta S$.

+ Quá trình tự diễn biến có $\Delta H < T \cdot \Delta S$ dẫn đến $\Delta H - T \cdot \Delta S < 0$ nên $\Delta G < 0$.

+ Khi $\Delta H = T \cdot \Delta S$ thì $\Delta G = 0$, quá trình đạt tới trạng thái cân bằng hoá học.

+ Đối với nhiều phản ứng hoá học: $\Delta H >> T \cdot \Delta S$ nên có thể coi $\Delta G \approx \Delta H$ và khi đó $\Delta H < 0$ là các phản ứng toả nhiệt.

b) Cách tính biến thiên năng lượng tự do Gibbs (ΔG)

– Tính biến thiên năng lượng tự do Gibbs của phản ứng:

$$\Delta_r G_T = \Delta_r H - T \cdot \Delta_r S$$

Ví dụ: Cho phản ứng và các số liệu: $C_2H_4(g) + H_2O(g) \rightleftharpoons C_2H_5OH(g)$

$\Delta_f H^o_{298}$ (kJ.mol^{-1})	52,28	–241,82	–235,30
$S_{f\,298}^o$ (J.K^{-1}.mol^{-1})	219,6	188,72	282,0

+ Ở điều kiện tiêu chuẩn: $\Delta_r H^o_{298}$ phản ứng = – 235,3 – 52,28 – (–241,82) = – 45,76 (kJ·mol^{-1})

$\Delta H < 0$ nên phản ứng toả nhiệt.

$\Delta_r S^o_{298}$ phản ứng = 282,0 – (219,45 + 188,72) = – 126,17 (J·K^{-1})

$\Delta_r G^o_{298}$ phản ứng = – 45,76 – (– 0,12617·298) = – 8,16 (kJ·mol^{-1})

+ Ở 25 °C: ΔG phản ứng < 0 nên phản ứng xảy ra theo chiều thuận.

– Biến thiên năng lượng tự do Gibbs với cân bằng hoá học:

Phản ứng: $xA + yB \longrightarrow zC + tD$ đạt tới trạng thái cân bằng hoá học có hằng số cân bằng $K = \dfrac{(C)^z \cdot (D)^t}{(A)^x \cdot (B)^y}$.

Nhiệt động học đã chứng minh được quan hệ giữa năng lượng tự do Gibbs và hằng số cân bằng: $\Delta G^o = - RT\ln K$.

Ví dụ: Phản ứng: $2H_2(g) + O_2(g) \longrightarrow 2H_2O(l)$ có các số liệu sau:

$\Delta_f H^o_{298}$ (kJ·mol^{-1})	0	0	– 285,8
$S_{f\,298}^o$ (J.K^{-1}·mol^{-1})	130,52	205,04	70,08

$\Delta_rH^o_{298} = 2\Delta_fH^o_{H_2O} - (2\Delta_fH^o_{H_2} + \Delta_fH^o_{O_2}) = -571{,}6$ kJ

$\Delta_rS^o_{298} = 2S^o_{H_2O} - (2S^o_{H_2} + S^o_{O_2}) = (2\cdot 70{,}08) - 205{,}04 - (2\cdot 130{,}52) = -325{,}92$ (J)

$\Delta_rG^o_{298} = \Delta_rH - T\cdot\Delta_rS = -571{,}6 - (-0{,}32592\cdot 298) = -474{,}48$ (kJ)

Suy ra: $-474\,480 = -8{,}314\cdot 298\cdot \ln K \Rightarrow \ln K = 191{,}51 \Rightarrow K = 1{,}49\cdot 10^{83}$

IV GỢI Ý TỔ CHỨC CÁC HOẠT ĐỘNG DẠY, HỌC

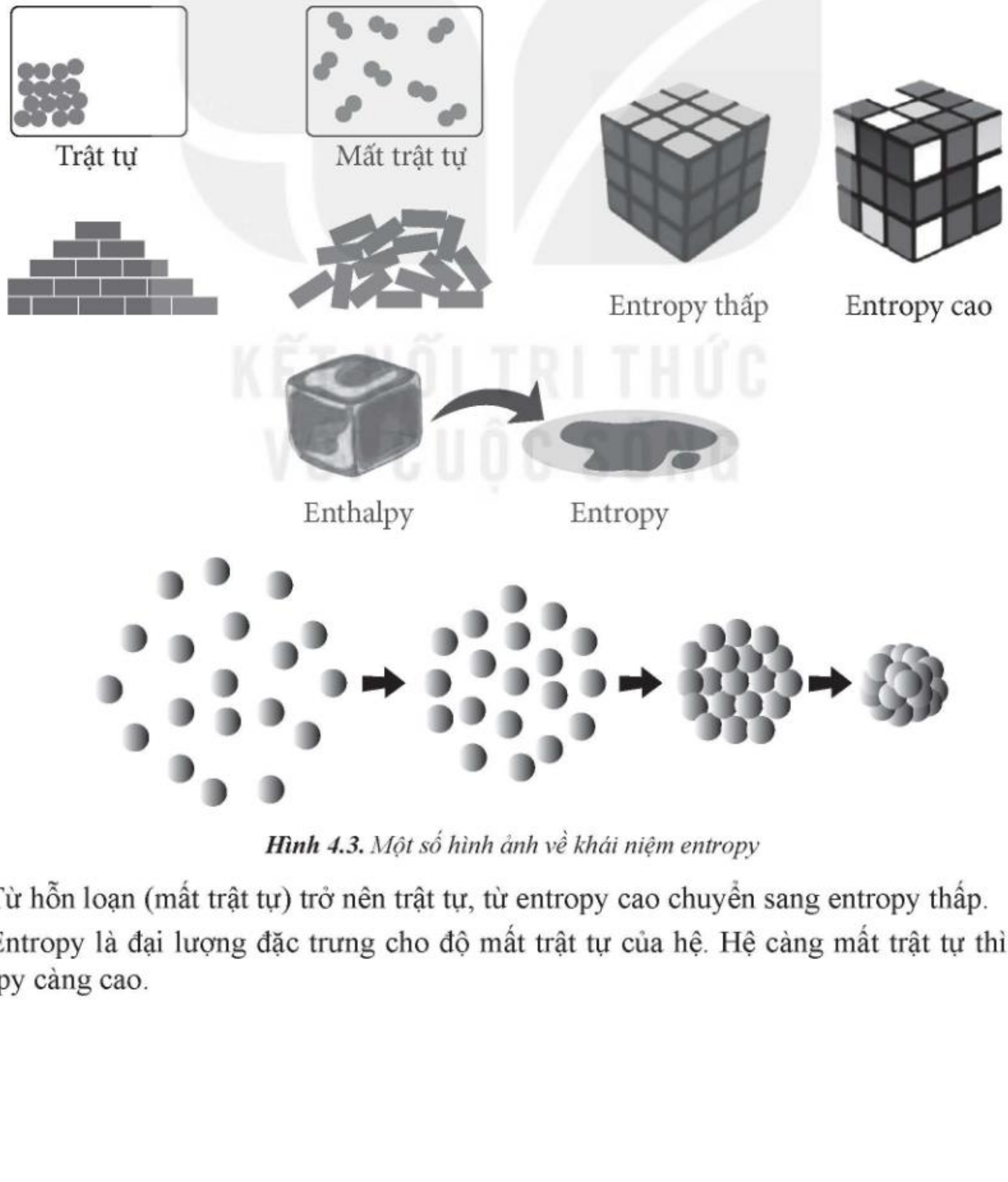
Hoạt động 1. ENTROPY

1. Khái niệm entropy

GV hướng dẫn HS hoàn thiện năng lực NTHH: khái niệm entropy.

GV so sánh các trường hợp hỗn loạn, mất trật tự với trật tự, cố định,…

Sử dụng một số hình ảnh hoặc video để hình thành khái niệm entropy:



Hình 4.3. *Một số hình ảnh về khái niệm entropy*

Từ hỗn loạn (mất trật tự) trở nên trật tự, từ entropy cao chuyển sang entropy thấp.

Entropy là đại lượng đặc trưng cho độ mất trật tự của hệ. Hệ càng mất trật tự thì giá trị entropy càng cao.

2. Sự biến đổi giá trị entropy

Dùng phương pháp đàm thoại gợi mở để HS rèn luyện năng lực GTHT và năng lực GQVĐ khi lấy một số ví dụ để tổng kết một số trường hợp làm tăng, giảm entropy.

Chất khí → chất lỏng → chất rắn: quá trình toả nhiệt, giá trị entropy giảm dần $\Delta S < 0$ (khoảng cách giữa các phân tử giảm, độ trật tự của các phân tử tăng lên).

Quá trình ngược lại, thu nhiệt, giá trị entropy tăng dần $\Delta S > 0$ (khoảng cách giữa các phân tử tăng, độ mất trật tự của các phân tử tăng lên).

Phản ứng giữa các dung dịch tạo ra chất kết tủa, làm giảm giá trị entropy.

Phản ứng giữa các dung dịch hay chất rắn tạo ra chất khí, làm tăng giá trị entropy.

Phản ứng giữa các chất khí mà giảm số mol, sẽ làm giảm giá trị entropy và ngược lại số mol khí tăng làm tăng giá trị entropy.

Dùng phương pháp hoạt động nhóm, đàm thoại gợi mở để rèn luyện HS các năng lực GTHT và THTN khi lấy một số ví dụ để tổng kết một số trường hợp làm tăng, giảm entropy.

$AgNO_3(aq) + NaCl(aq) \longrightarrow AgCl(s) + NaNO_3(aq)$

$Na_2CO_3(aq) + 2HCl(aq) \longrightarrow 2NaCl(aq) + CO_2(g) + H_2O(l)$

$CaCO_3(s) \longrightarrow CaO(s) + CO_2(g)$

$2H_2(g) + O_2(g) \longrightarrow 2H_2O(g)$

$CO_2(g) + C(s) \longrightarrow 2CO(g)$

Dùng phương pháp hoạt động nhóm để HS rèn luyện các năng lực GTHT và GQVĐ:

GV cung cấp giá trị entropy chuẩn (298K, 1bar) (J/mol.K) và hướng dẫn HS tính biến thiên entropy: $\Delta S = \sum S_{\text{sản phẩm}} - \sum S_{\text{chất phản ứng}}$

HS hoạt động nhóm tính ΔS của một số phản ứng nêu trên.

Củng cố: sử dụng một số câu hỏi và bài tập tương tự câu hỏi trong bài học để luyện tập.

Hoạt động 2. NĂNG LƯỢNG TỰ DO GIBBS

GV hướng dẫn HS hoàn thiện năng lực NTHH theo phương pháp tiên đề:

Giới thiệu biểu thức: $\Delta_r G^o_T = \Delta_r H^o_T - T \cdot \Delta_r S^o_T$

Giới thiệu bảng giá trị enthalpy chuẩn (kJ/mol) của một số chất.

GV hướng dẫn HS hoàn thiện năng lực NTHH bằng một số ví dụ về tính ΔH và ΔG.

Hướng dẫn HS hoạt động nhóm để tính ΔG và sử dụng dấu của ΔG để xét khả năng phản ứng xảy ra.

GV hướng dẫn HS hoàn thiện năng lực vận dụng kiến thức bằng cách sử dụng một số câu hỏi và bài tập tương tự câu hỏi trong bài học để luyện tập.

Hoạt động 3. TỔNG KẾT, GHI NHỚ

Kết luận:

1. Entropy và biến thiên enthalpy trong phản ứng hoá học.

2. Năng lượng tự do Gibbs và biến thiên ΔG^o trong phản ứng hoá học.

3. Ứng dụng của Năng lượng tự do Gibbs để xác định chiều phản ứng hoá học.

V HƯỚNG DẪN TRẢ LỜI CÂU HỎI TRONG SGK

1. Đáp án A.

Khoảng cách giữa các phân tử càng lớn, tính hỗn loạn của hệ càng tăng. Khoảng cách giữa các phân tử tăng dần theo thứ tự : rắn < lỏng < khí nên giá trị entropy tăng dần theo thứ tự: $CO_2(s) < CO_2(l) < CO_2(g)$.

2. Đáp án C.

Phản ứng làm giảm số mol khí làm giảm entropy của hệ do sự hỗn loạn giảm xuống.

Chỉ có phản ứng C là phản ứng có $\Delta n < 0$ nên đó là phản ứng làm giảm entropy.

3. Đáp án D.

Phản ứng : $2H_2O_2(l) \longrightarrow 2H_2O(l) + O_2(g)$ làm tăng số mol khí, $\Delta n = 1$, nên $\Delta S^o > 0$.

Phản ứng $Ag^+(aq) + Br^-(aq) \longrightarrow AgBr(s)$ chuyển các ion $Ag^+(aq)$, $Br^-(aq)$ từ trạng thái chuyển động tự do sang cố định trong tinh thể làm tăng tính trật tự của hệ $\Rightarrow \Delta S^o < 0$.

Các phản ứng: $2C_2H_6(g) + 3O_2(g) \longrightarrow 4CO_2(g) + 6H_2O(l)$

$$N_2(g) + 2H_2(g) \longrightarrow N_2H_4(g)$$

đều làm giảm số mol khí nên biến thiên entropy âm.

4. Tính $\Delta_r S$ (tương tự cách tính ΔH) = ΣS^o_{298} (sản phẩm) – ΣS^o_{298} (chất phản ứng)

a) $$\Delta_r S^o_{298} = 2\,S^o_{298}(Fe_2O_3) - 4\,S^o_{298}(Fe) - 3\,S^o_{298}(O_2)$$
$$= (2\cdot 87{,}6) - (4\cdot 27{,}3) - (3\cdot 205) = 549\ J\cdot K^{-1}$$

b) $$\Delta_r S^o_{298} = S^o_{298}(SO_3) - \frac{1}{2}\,S^o_{298}(O_2) - S^o_{298}(SO_2)$$
$$= (256{,}7) - (\frac{1}{2}\cdot 205{,}0) - (248{,}1) = -93{,}90\ J\cdot K^{-1}$$

5. $$KClO_3(s) \xrightarrow{t^o} KCl(s) + \frac{3}{2}O_2(g)$$

$$\Delta_r S^o_{298} = S^o_{298}(KCl) + \frac{3}{2}\,S^o_{298}(O_2) - S^o_{298}(KClO_3)$$
$$= 82{,}6 + (\frac{3}{2}\cdot 205{,}0) - 143{,}1 = 247{,}0\ (J\cdot mol^{-1}\cdot K^{-1})$$

$$\Delta_r H^o_{298} = \Delta_f H^o_{298}(KCl) + \frac{3}{2}\Delta_f H^o_{298}(O_2) - \Delta_f H^o_{298}(KClO_3)$$

$$= -436,7 - (-397,7) = -39,0 \text{ kJ·mol}^{-1} \quad (\Delta H^o \text{ của } O_2 = 0)$$

$\Delta_r G^o_{298} = -39,0 - (298 \cdot 0,247) = -112,6 \text{ kJ·mol}^{-1} < 0 \Rightarrow$ phản ứng tự xảy ra.

6. $3C_{(\text{than chì})} + 2Fe_2O_3(s) \rightarrow 4Fe(s) + 3CO_2(g)$.

$\Delta_r H^o_{298} = (-393,5 \cdot 3) - (-825,5 \cdot 2) = 470,5 \text{ (kJ·mol}^{-1}\text{)}$ (ΔH^o của C và Fe = 0)

$\Delta_r S^o_{298} = (27,3 \cdot 4) + (3 \cdot 213,7) - (5,7 \cdot 3) - (87,4 \cdot 2) = 558,4 \text{ (J·mol}^{-1}\text{·K}^{-1}\text{)}$

$\Delta_r G^o_{298} = 470,5 - (298 \cdot 0,5584) = 304,1 \text{ (kJ·mol}^{-1}\text{)} > 0$

$\Rightarrow$ C không khử được Fe_2O_3 ở 25 °C.

VI GỢI Ý KIỂM TRA, ĐÁNH GIÁ

– Đánh giá năng lực NTHH của HS bằng các câu hỏi có các cụm từ "trình bày được"; "nêu được" khái niệm về entropy và ý nghĩa của dấu cùng trị số của biến thiên năng lượng tự do Gibbs ($\Delta_r G^o$).

– Đánh giá năng lực GQVĐ của HS bằng các câu hỏi có các cụm từ "tính được"; "xác định được" $\Delta_r G^o$ từ bảng cho sẵn các giá trị $\Delta_f H^o$ và S^o của các chất.

– Đánh giá năng lực VDKT của HS bằng các câu hỏi có nội dung xác định $\Delta_r G^o$ của phản ứng hoá học và cho biết phản ứng có xảy ra được không.

KẾT NỐI TRI THỨC
VỚI CUỘC SỐNG

CHUYÊN ĐỀ 2. HOÁ HỌC TRONG VIỆC PHÒNG CHỐNG CHÁY, NỔ

Bài 5. SƠ LƯỢC VỀ PHẢN ỨNG CHÁY, NỔ

I MỤC TIÊU

Sau bài học, HS sẽ:

– Nêu được khái niệm, đặc điểm của phản ứng cháy và một số ví dụ về sự cháy một số 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.

– Trình bày được khái niệm về "nổ bụi".

– Trình bày được những sản phẩm độc hại thường sinh ra trong các phản ứng cháy.

II CHUẨN BỊ

– Dụng cụ thí nghiệm: panh, đèn cồn, bật lửa.

– Hoá chất thí nghiệm: than gỗ, bình đựng khí oxygen.

III THÔNG TIN BỔ SUNG

1. Phản ứng cháy

a) Đặc điểm

Phản ứng cháy là một phản ứng oxi hoá – khử tự diễn biến với tốc độ phản ứng nhanh, năng lượng của phản ứng được giải phóng ra ở dạng nhiệt năng và dạng quang năng.

Các phản ứng cháy tự diễn biến do cả hai yếu tố enthalpy và entropy đều thuận lợi:

– Biến thiên enthalpy ΔH^o thường rất âm (toả nhiệt mạnh) do phản ứng có sự chuyển từ trạng thái ban đầu gồm chất cháy và chất oxi hoá có thế năng cao hơn về trạng thái các sản phẩm bền có thế năng thấp hơn rất nhiều.

– Biến thiên entropy ΔS^o rất dương (tăng mạnh độ hỗn loạn) do phản ứng cháy tạo ra các sản phẩm cháy dạng khí và hơi có độ mất trật tự cao.

Như vậy, phản ứng cháy có $\Delta H^o < 0$ và $\Delta S^o > 0$ nên biến thiên enthalpy tự do của phản ứng $\Delta G^o = \Delta H^o - T\Delta S^o$ luôn âm.

Về mặt nhiệt động học, các phản ứng cháy đều có khả năng tự diễn biến ở điều kiện thường. Tuy nhiên, để phản ứng cháy xảy ra cần thoả mãn yếu tố động học.

b) Điều kiện cần và đủ để xảy ra phản ứng cháy

– Chất cháy

Một trong các yếu tố trong tam giác cháy là chất cháy, chất cháy phổ biến và có nhiều ứng dụng đó là nhiên liệu.

Nhiên liệu là những chất cháy được, khi cháy toả nhiệt và phát sáng. Đặc điểm chung của nhiên liệu là phổ biến, dễ cháy và toả nhiệt mạnh.

Dựa vào trạng thái, nhiên liệu được phân làm 3 loại: rắn, lỏng và khí.

Phân loại	Ví dụ	Lĩnh vực sử dụng
Nhiên liệu rắn	than đá, than bùn, than cốc, gỗ…	nhiệt điện, luyện kim, đời sống
Nhiên liệu lỏng	xăng, dầu hoả, dầu diesel, cồn đốt,…	động cơ đốt trong, đời sống
Nhiên liệu khí	khí thiên nhiên, khí dầu mỏ, khí than…	nhiệt điện, luyện kim, đời sống

Dựa vào nguồn gốc, nhiên liệu được phân chia thành: nhiên liệu tái tạo (gỗ, mùn cưa, than gỗ), nhiên liệu hoá thạch (than đá, dầu mỏ, khí tự nhiên), nhiên liệu hạt nhân (uranium,…).

Năng suất toả nhiệt của nhiên liệu là đại lượng vật lí cho biết nhiệt lượng toả ra khi đốt cháy hoàn toàn 1 kg nhiên liệu.

Đối với các nhiên liệu khi cháy tạo ra nước thì năng suất toả nhiệt có hai giá trị: năng suất toả nhiệt trên (nước tạo thành ở thể lỏng) và năng suất toả nhiệt dưới (nước tạo thành ở thể hơi).

Bảng 5.1. *Năng suất toả nhiệt (dưới) của một số nhiên liệu*

Nhiên liệu	Năng suất toả nhiệt (kJ/kg)	Nhiên liệu	Năng suất toả nhiệt (kJ/kg)
Than đá	27 000	Xăng	44 000
Than bùn	14 000	Dầu hoả	44 000
Than gỗ	34 000	Dầu diesel	42 000
Củi khô	10 000	Gas	46 000
Hydrogen	120 000	Khí thiên nhiên	42 000

– Chất oxi hoá

Chất oxi hoá trong các đám cháy thường là oxygen, đây là chất khí phổ biến thứ hai trong khí quyển và có mặt ở khắp mọi nơi trên bề mặt Trái Đất. Có thể nói, trong ba yêu tố của tam giác cháy luôn có sẵn yếu tố chất oxi hoá, chỉ cần hội tụ thêm hai yếu tố còn lại (chất cháy và nguồn nhiệt) là có thể hình thành đám cháy.

– *Nguồn nhiệt*

Khởi đầu một đám cháy, nguồn nhiệt đóng vai trò cung cấp một năng lượng cần thiết (năng lượng hoạt hoá E_a) cho chất cháy và chất oxi hoá để tạo thành trạng thái trung gian. Giá trị E_a phụ thuộc bản chất mỗi phản ứng, tức phụ thuộc vào từng loại chất cháy và chất oxi hoá. Nếu giá trị E_a càng cao, năng lượng cần cung cấp càng nhiều và cần thời gian tiếp xúc lâu hơn.

2. Phản ứng nổ

Nổ bụi (dust explosion) xuất phát từ bụi dễ cháy được sinh ra trong quá trình sản xuất các nguyên liệu thô dễ cháy như bụi kim loại, bụi ngũ cốc, bụi thuốc lá,... Quy trình công nghệ thường tạo bụi dễ cháy là nghiền, mài, phay, cắt, cưa, đánh bóng,...

Các vụ nổ bụi được hình thành khi nồng độ các hạt bụi đạt nồng độ cao trong không gian tương đối kín và bắt lửa khi tiếp xúc với tia lửa điện, than hồng, tàn thuốc, bật diêm,... Quá trình đốt cháy hạt bụi nhanh chóng lan rộng và tạo ra một áp suất không khí cao, gây ra nổ, tiềm ẩn nguy cơ gây sát thương và phá huỷ công trình nhà xưởng.

Khi đốt cháy vật liệu ở dạng khối rắn thì quá trình cháy xảy ra từ từ do diện tích tiếp xúc giữa mặt chất cháy với oxygen không khí bị giới hạn. Tuy nhiên, tốc độ đốt cháy sẽ rất nhanh và có thể gây nổ nếu khối vật liệu trên được nghiền thành bột mịn và phân tán trong không khí dưới dạng bụi.

Ví dụ, xét một khối cầu nặng 1000 gam được làm từ vật liệu có khối lượng riêng là 1 g/cm^3.

Khối cầu trên có thể tích là 1000 cm^3, đường kính là 12,4 cm ($V = \frac{4}{3}\pi R^3$) và diện tích bề mặt là 483 cm^2 ($S = 4\pi R^2$).

Bây giờ, giả thiết khối cầu được nghiền thành các hạt bụi hình cầu có đường kính 0,005 cm (bằng hạt bột mì), sẽ được $\frac{1000}{\frac{4}{3}\pi \cdot 0,0025^3} = 15,28 \cdot 10^9$ hạt bụi và tổng diện tích bề mặt các hạt bụi là $15,28 \cdot 10^9 \cdot 4\pi \cdot 0,0025^2 = 1200000$ cm^2. Khi đó, diện tích bề mặt các hạt bụi tiếp xúc với oxygen là rất lớn, nếu xuất hiện mồi lửa, toàn bộ đám mây bụi sẽ bốc cháy rất nhanh, toả nhiệt lượng nhiệt lớn và gây ra nổ mạnh.

Tuy nhiên, một vụ nổ bụi xảy ra nếu mật độ bụi phải đạt đến một giới hạn nhất định. Ví dụ, nồng độ giới hạn gây nổ của bụi ngũ cốc (bột ngô, bột gạo, đậu nành) là 50 – 60 g/m^3.

Nổ bụi là nguyên nhân gây ra nhiều thảm hoạ trong sản xuất công nghiệp. Ngày 07 tháng 02 năm 2008 đã xảy ra vụ nổ bụi ở nhà máy đường Imperial Sugar (Port Wentworth, Georgia, Mỹ) làm 14 người chết và 38 người bị thương. Ban đầu, vụ nổ xuất phát từ một băng tải chạy

phía dưới các tháp chứa đường, làm tăng mạnh lượng bụi đường, khơi mào cho một vụ nổ nghiêm trọng, áp lực gây ra làm hỏng trần nhà và sập tường. (Xem video *What led to the Imperial Sugar explosion* mô phỏng về vụ nổ bụi này trên kênh youtube.com).

IV GỢI Ý TỔ CHỨC CÁC HOẠT ĐỘNG DẠY, HỌC

Hoạt động 1. PHẢN ỨNG CHÁY

1. Khái niệm

GV hướng dẫn HS tiến hành hoạt động nhóm để tìm hiểu về phản ứng cháy, chất cháy và ứng dụng.

GV nhấn mạnh phản ứng cháy an toàn và không an toàn:

– Phản ứng cháy an toàn: đúng mục đích, đúng mức độ, trong tầm kiểm soát, người sử dụng hoàn toàn chủ động.

– Phản ứng cháy không an toàn: vượt quá phạm vi, mức độ cần thiết, mất kiểm soát, người sử dụng bị động và bất ngờ.

Đặc điểm của phản ứng cháy: GV tổ chức cho HS vận dụng chương năng lượng hoá học để tìm hiểu tại sao phản ứng cháy luôn kèm toả nhiệt và phát sáng. Kể tên một số ví dụ sử dụng năng lượng phản ứng cháy để đốt nóng và chiếu sáng.

GV tổ chức cho HS sưu tầm về một số vụ hoả hoạn để tìm hiểu nguyên nhân và biện pháp phòng, chống.

2. Tam giác cháy

GV tổ chức cho HS tiến hành hoạt động nhóm để viết, vẽ, thiết kế mô hình về tam giác cháy, khắc sâu và minh hoạ sinh động về điều kiện cần thiết để xảy ra cháy.

Đánh giá vai trò của từng yếu tố trong tam giác cháy để hình thành một đám cháy hoặc để dập tắt một đám cháy.

GV hướng dẫn HS tìm hiểu về các sản phẩm cháy của một số nhiên liệu thông dụng. Từ đó, đề xuất giải pháp để sử dụng nhiên liệu hiệu quả, an toàn thông qua các việc:

– Sử dụng lượng chất cháy phù hợp, điều khiển phản ứng đốt cháy xảy ra hoàn toàn

– Giảm thải các khí độc hại, gây ô nhiễm và tái sử dụng các sản phẩm cháy

– Các biện pháp phòng ngừa ngộ độc khí thải.

Hoạt động 2. PHẢN ỨNG NỔ

GV tổ chức cho HS sưu tầm về 1 vụ nổ hoá học, 1 vụ nổ hạt nhân, 1 vụ nổ bụi rồi thuyết trình về phản ứng nổ: đặc điểm, phân loại, quy mô, tác hại, biện pháp phòng ngừa.

GV giúp HS phân biệt phản ứng cháy với phản ứng nổ thông qua đặc điểm của từng phản ứng.

V HƯỚNG DẪN TRẢ LỜI CÂU HỎI TRONG SGK

1. GV hướng dẫn HS trình bày khái niệm và đặc điểm cơ bản của phản ứng cháy.

2. Số mol carbon có trong 1 kg than đá: $n_C = \frac{1000 \cdot \frac{84}{100}}{12} = 70$ (mol).

Xét phản ứng đốt cháy: $C(s) + O_2(g) \xrightarrow{t^o} CO_2(g)$ $\Delta H^o = -394$ kJ/mol

Đốt cháy hoàn toàn 1 mol carbon giải phóng ra 394 kJ nhiệt nên đốt cháy 70 mol carbon toả ra nhiệt lượng là: $Q = 394 \cdot 70 = 27\,580$ (kJ).

Năng suất toả nhiệt của loại than đá trên là 27 580 kJ/kg.

3. a) Số mol C trong viên than là: $n_C = \frac{1200 \cdot \frac{40}{100}}{12} = 40$ (mol).

b) Phản ứng đốt cháy: $C(s) + O_2(g) \xrightarrow{t^o} CO_2(g)$

Thể tích khí O_2 tham gia phản ứng: $V_{O_2} = 24,79 \cdot 40 = 991,6$ (L).

Thể tích không khí cần dùng: $V_{kk} = 991,6 \cdot \frac{100}{21} = 4721,9$ (L).

c) Đun bếp than tổ ong trong phòng ngủ để sưởi ấm sẽ làm nồng độ O_2 trong phòng giảm đi nhanh, quá trình hô hấp không cung cấp đủ O_2 cho não, dẫn đến gây hậu quả hôn mê, bại não.

4. a) Phần trăm thể tích propane và butane trong khí gas là:

$\%V_{C_3H_8} = \frac{2}{5} \cdot 100 = 40\%$; $\%V_{C_4H_{10}} = \frac{3}{5} \cdot 100 = 60\%$.

b) Phân tử khối trung bình của khí gas: $\overline{M}_{gas} = 44 \cdot 40\% + 58 \cdot 60\% = 52,4$.

Tỉ khối của khí gas so với không khí: $d = \frac{52,4}{29} = 1,81$.

Khí gas nặng hơn không khí 1,81 lần nên hơi gas rò rỉ thường tích tụ ở những nơi thấp so với mặt đất.

5. a) Nổ quả bóng bay do bơm quá căng là nổ vật lí, trường hợp này không xảy ra phản ứng hoá học.

b) Nổ chùm bóng bay chứa khí hydrogen do bắt lửa là nổ hoá học do xảy ra phản ứng sau khi hỗn hợp bị kích thích bởi nhiệt độ:

$$H_2(g) + \frac{1}{2}O_2(g) \xrightarrow{t^o} H_2O(g) \qquad \Delta H^o = -242 \text{ kJ/mol}$$

Phản ứng trên xảy ra theo cơ chế dây chuyền với tốc độ rất nhanh kèm toả nhiệt lớn, làm không khí xung quanh giãn nở đột ngột gây ra tiếng nổ.

VI GỢI Ý KIỂM TRA, ĐÁNH GIÁ

– Câu hỏi kiểm tra, đánh giá bám sát yêu cầu cần đạt.

– GV sử dụng hiệu quả câu hỏi và các bảng số liệu trong SGK và SGV để xây dựng các câu hỏi.

– Đánh giá năng lực NTHH của HS bằng các câu hỏi có các cụm từ "xác định", "trình bày" các đặc điểm của phản ứng cháy, phản ứng nổ, "nổ bụi"; điều kiện cần và đủ để xảy ra phản ứng cháy.

– Đánh giá năng lực GQVĐ của HS bằng các câu hỏi có các cụm từ "nhận xét" thành phần sản phẩm cháy,"đánh giá" về tác động đến sức khoẻ và môi trường.

– Đánh giá năng lực THTN của HS bằng các câu hỏi có các cụm từ "đề xuất" về phương pháp dập tắt một đám cháy bằng cách làm giảm hoặc triệt tiêu một trong các yếu tố của tam giác cháy.

– Đánh giá năng lực VDKT của HS bằng các câu hỏi có nội dung kiến thức về việc tận dụng, xử lí các sản phẩm cháy thành các sản phẩm có ích.

Bài 6. ĐIỂM CHỚP CHÁY. NHIỆT ĐỘ NGỌN LỬA. NHIỆT ĐỘ TỰ BỐC CHÁY

I MỤC TIÊU

Sau bài học, HS sẽ:

– Nêu được khái niệm về điểm chớp 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 và nhiệt độ tự bốc cháy.

II CHUẨN BỊ

– Dụng cụ thí nghiệm: chén sứ nhỏ, bật lửa.

– Hoá chất thí nghiệm: cồn 70^{o}.

III THÔNG TIN BỔ SUNG

1. Điểm chớp cháy – Flash point

Dựa vào điểm chớp cháy quy ước là 100 °F (37,8 °C), Hiệp hội phòng cháy chữa cháy quốc gia (National Fire Protection Association - NFPA) của Hoa Kỳ phân loại cảnh báo chất lỏng dễ cháy (flammable liquid) và chất lỏng có thể gây cháy (combustible liquid) như sau.

Bảng 6.1. *Phân loại cảnh báo chất lỏng dễ cháy và chất lỏng có thể gây cháy*

Phân loại cảnh báo chất lỏng dễ cháy			
Nhóm	**Điểm chớp cháy**	**Điểm sôi**	**Ví dụ**
	< 73 °F (23 °C)	< 100 °F (38 °C)	diethyl ether, pentane, petroleum, ether.
I-B	< 73 °F (23 °C)	≥ 100 °F (38 °C)	acetone, benzene, cyclohexane, ethanol.
I-C	73–100 °F (24–38 °C)		p-xylene
Phân loại cảnh báo chất lỏng có thể gây cháy			
II	101–140 °F (39–60 °C)		diesel fuel, motor oil, kerosene.
III-A	141–199 °F (61–93 °C)		sơn (paints), dầu lanh (linseed oil) dầu khoáng (mineral oil).
III-B	≥ 200 °F (93 °C)		sơn (paints)

Số liệu về điểm chớp cháy của nhiều chất lỏng không chứa halogen (non-halogenated được liệt kê ở bảng 6.2.

Bảng 6.2. *Điểm chớp cháy của một số chất cháy*

Chất cháy	**Điểm chớp cháy**		**Điểm sôi**		**Phân loại**
	°F	**°C**	**°F**	**°C**	**NFPA**
Propane	–157	–105	–44	–42	IA
Pentane	–57	–49	97	36	IA
Ethyl ether	–49	–45	95	35	IA
Acetaldehyde	–38	–39	69	21	IA

KẾT NỐI TRI THỨC VỚI CUỘC SỐNG

Chất cháy	Điểm chớp cháy		Điểm sôi		Phân loại
	°F	°C	°F	°C	NFPA
Carbon disulfide	–22	–30	115	46	IB
Ethylene oxide	–20	–29	55	13	IA
Hexane	–7	–22	156	69	IB
Acetone	–4	–20	56	133	IA
Cyclohexane	–4	–20	179	81	IB
Tetrahydrofuran	6	–14	153	67	IB
Benzene	12	–11	176	80	IB
Triethylamine	20	–7	193	89	IB
Methyl ethyl ketone	25	–4	176	80	IB
Toluene	40	4	231	111	IB
Methyl alcohol	52	11	149	65	IB
Isopropyl alcohol	53	12	180	82	IB
Ethyl alcohol	55	13	173	78	IB
Pyridine	68	20	239–241	116	IB
2-Nitropropane	75	24	248	120	IC
Chlorobenzene	82	28	270	132	IC
Xylene	81–90	27–32	280–291	138–144	IC
Acetic acid, glacial	103	39	244	48	II
Bromobenzene	118	48	307–316	153–158	II
Formic acid	122	50	213	101	II
Benzaldehyde	145	63	352	178	IIIA
Cyclohexanol	154	68	322	161	IIIA
Nitrobenzene	190	88	412	211	IIIA
Benzyl alcohol	213	101	401	205	IIIB
Caproic acid	215	102	400	204	IIIB
Ethylene glycol	232	111	388	198	IIIB
Phenyl ether	239	115	498	258	IIIB
Stearic acid	385	196	726	386	IIIB

Nguồn: John B. Durkee, in Developments in Surface Contamination and Cleaning (Second Edition), 2008.

Phản ứng cháy nổ cần phải có 3 yếu tố: chất cháy, khí oxygen và nguồn tạo lửa. Mỗi loại hơi/khí cháy nổ chỉ bốc cháy khi nồng độ của chúng nằm ở một khoảng nhất định trong hỗn hợp với không khí. Nếu nồng độ hơi/khí cháy nằm ngoài khoảng này thì không sinh ra cháy nổ. Vì vậy, mỗi hơi/khí cháy thường có giới hạn cháy nổ dưới và giới hạn cháy nổ trên.

Giới hạn gây cháy nổ dưới (Lower Explosive Limit - LEL) là nồng độ tối thiểu về thể tích của hơi chất cháy trong không khí tại đó hỗn hợp có thể cháy được.

Giới hạn gây cháy nổ trên (Upper Explosive Limit - UEL) là nồng độ tối đa về thể tích của hơi chất cháy trong không khí tại đó hỗn hợp có thể cháy được.

Ở nồng độ chất cháy cao hơn giới hạn gây nổ trên thì sẽ không đủ oxygen trong hỗn hợp để cung cấp cho phản ứng cháy.

Các nồng độ LEL và UEL đều được tính bằng đơn vị phần trăm thể tích.



Giá trị LEL được đo bằng máy nhằm xác định mức độ an toàn cũng như cảnh báo nguy cơ gây cháy, dải đo của máy có đơn vị từ 0 đến 100% LEL.



Hình 6.1. *Một loại máy đo phát hiện khí dễ cháy*

Thông thường với hơi/khí dễ cháy, mức LEL 40% là dấu hiệu cảnh báo nguy cơ cháy nổ.

Bảng 6.3. *Giới hạn cháy nổ dưới (LEL) và giới hạn cháy nổ trên (UEL) của một số chất cháy*

Chất cháy	LEL	EUL	Chất cháy	LEL	EUL
Acetone	2,6	13	Gasoline	1,2	7,1
Acetylene	2,5	100	Heptane	1,1	6,7
Acrylonitrile	3	17	Hexane	1,2	7,4
Allene	1,5	11,5	Hydrogen	4	75
Ammonia	15	28	Hydrogen cyanide	5,6	40
Benzene	1,3	7,9	Hydrogen sulfide	4	44
Butadiene-1,3	2	12	Isobutane	1,8	8,4
Butane	1,8	8,4	Methane	5	17
Butanol	1,7	12	Methanol	6,7	36
But-1-ene	1,6	10	Methyl acetylene	1,7	11,7
Butyl acetate	1,4	8	Methyl ethyl ketone	1,9	10
Carbon monoxide	12,5	74	Ethylamine	3,5	14
Cumene	0,9	6,5	Methylamine	4,9	20,7
Cyclohexane	1,3	7,8	Pentane	1,4	7,8
Dimethylamine	2,8	14,4	Propane	2,1	9,5
Dimethyl ether	3,4	27	Propylene	2,4	11
Ethane	3	12,4	Tetrafluoro ethylene	4	43
Ethanol	3,3	19	Toluene	1,2	7,1
Ethyl acetate	2,2	11	Trimethylamine	2	12
Ethylene	2,7	36	Vinyl chloride	4	22
Ethylene oxide	3,6	100	Xylene	1,1	6,6

Phân biệt điểm chớp cháy và điểm sôi: Điểm sôi là nhiệt độ tại đó áp suất hơi của chất lỏng bằng với áp suất môi trường xung quanh. Hầu hết chất lỏng có điểm sôi, cho dù cháy được hay không, miễn là chất lỏng đó chưa bị phân huỷ khi đun nóng đến nhiệt độ sôi. Ví dụ, ethyl alcohol có điểm chớp cháy là 13 ^{o}C và điểm sôi là 78 ^{o}C.

2. Nhiệt độ ngọn lửa – Flame temperature

Nhiệt độ ngọn lửa được xác định trong quá trình đoạn nhiệt (adiabatic process), đó là quá trình không có sự trao đổi nhiệt của hệ phản ứng với môi trường bên ngoài.

Quá trình đoạn nhiệt thường được thực hiện trong điều kiện đẳng áp.

Chất oxi hoá trong phản ứng cháy là oxygen nguyên chất hoặc không khí. Các chất cháy trong oxygen tinh khiết cho nhiệt độ ngọn lửa cao hơn nhiều trong không khí.

Nhiệt độ ngọn lửa thường phản ứng mức độ toả nhiệt của phản ứng cháy hoặc năng suất toả nhiệt của nhiên liệu. Mức độ toả nhiệt của phản ứng cháy được biểu thị bằng biến thiên enthalpy của phản ứng đốt cháy (thường gọi là nhiệt cháy – enthalpy of combustion), đó là hiệu ứng nhiệt của quá trình đốt cháy hoàn toàn 1 mol chất bằng oxygen tạo thành các sản phẩm bền.

Bảng 6.4. *Nhiệt cháy và nhiệt độ ngọn lửa của một số nhiên liệu*

Nhiên liệu	Trạng thái	Công thức	Nhiệt cháy chuẩn ở 298,15 K (kJ/g)	Chất oxi hoá	Áp suất (atm)	Nhiệt độ ngọn lửa đoạn nhiệt, (K)
Carbon	Solid (graphite)	C	32,8			
Hydrogen	Gas	H_2	141,8	Air	1	2400
				O_2	1	3080
Carbon monoxide	Gas	CO	10,1	Air	1	2400
Methane	Gas	CH_4	55,0	Air	1	2220
				Air	20	2270
				O_2	1	3030
				O_2	20	3460
Ethane	Gas	C_2H_6	51,9	Air	1	2240
Ethene	Gas	C_2H_4	50,3	Air	1	2370
Acetylene	Gas	C_2H_2	48,2	Air	1	2600
				O_2	1	3410

KẾT NỐI TRI THỨC VỚI CUỘC SỐNG

Nhiên liệu	Trạng thái	Công thức	Nhiệt cháy chuẩn ở 298,15 K (kJ/g)	Chất oxi hoá	Áp suất (atm)	Nhiệt độ ngọn lửa đoạn nhiệt, (K)
Propane	Gas	C_3H_8	50,4	Air	1	2260
Heptane	Liquid	C_7H_{16}	48,4	Air	1	2290
Dodecane	Liquid	$C_{12}H_{26}$	47,7	Air	1	2300
Benzene	Liquid	C_6H_6	41,8	Air	1	2370
Methanol	Liquid	CH_3OH	22,7			
Fuel oil	Liquid		42–47	Air	1	2300
Coal	Solid		20–36	Air	1	2200
Wood	Solid		19–23	Air	1	2100

Nguồn: F.A. Williams, Encyclopedia of Physical Science and Technology (Third Edition), 2003

3. Nhiệt độ tự bốc cháy – Autoignition temperature

Dù không tiếp xúc với nguồn lửa, nhưng khi bị nung nóng nhiệt đến một nhiệt độ nào đó, một số phân tử chất cháy và chất oxi hoá bị kích thích tới trạng thái năng lượng đủ lớn, vượt qua hàng rào năng lượng và xảy ra phản ứng cháy.

Phản ứng cháy lúc đầu xảy ra ở vị trí được kích thích nhiệt, nhiệt lượng toả ra nhanh chóng khơi mào cho một loạt phản ứng khác, dẫn đến hệ tự bốc cháy.

Bảng 6.5. *Nhiệt độ tự bốc cháy của một số chất cháy*

Chất cháy	Phân tử khối	Nhiệt độ tự bốc cháy [°C]	Áp suất hơi bão hoà ở 25 °C [mmHg]
Methane	16,04	537	gas
Ethane	30,07	510	gas
Ethylene	28,05	543	gas
Acetylene	26,04	335	gas
Propane	44,10	468	gas
Butane	58,12	430	gas

Chất cháy	Phân tử khối	Nhiệt độ tự bốc cháy [°C]	Áp suất hơi bão hoà ở 25 °C [mmHg]
Isobutane	58,12	543	gas
Pentane	72,15	260	512,54
Isopentane	72,15	420	688,03
Cyclopentane	72,15	385	317,41
Hexane	86,18	247	151,28
Cyclohexane	86,18	259	97,60
Heptane	100,20	223	45,67
Octane	114,23	220	13,95
Benzene	78,11	580	100,84
Toluene	92,14	552	28,47
Ethylbenzene	106,17	477	9,51
o-Xylene	106,17	475	6,62
m-Xylene	106,17	465	8,29
p-Xylene	106,17	496	8,75
Methanol	32,04	470	127,05
Ethanol	46,07	426	59,02
Propanol	60,10	439	20,46
Isopropanol	60,10	456	42,74
Acetone	58,08	538	229,52
Diethyl ether	74,12	186	501,87
Methyl ethyl ketone	72,11	516	90,00
Butanol	74,12	367	6,15
Ethylene glycol	62,07	413	0,07

KẾT NỐI TRI THỨC VỚI CUỘC SỐNG

Chất cháy	Phân tử khối	Nhiệt độ tự bốc cháy [°C]	Áp suất hơi bão hoà ở 25 °C [mmHg]
Ethyl acetate	88,11	486	94,63
Hydrogen	2,02	580	gas
Hydrogen sulfide	34,08	260	gas
Ammonia (anhydrous)	17,03	379	
Carbon disulfide	76,14	100	
Carbon monoxide	28,01	651	gas
Dichloroethylene	96,94	458	

Nguồn: Eric Stauffer, Reta Newman, Fire Debris Analysis, 2008

IV GỢI Ý TỔ CHỨC CÁC HOẠT ĐỘNG DẠY, HỌC

Hoạt động 1. ĐIỂM CHỚP CHÁY

GV hướng dẫn HS tiến hành hoạt động nhóm để tìm hiểu về khái niệm điểm chớp cháy, sưu tầm số liệu về điểm chớp cháy của một số chất lỏng thông dụng.

GV nhấn mạnh ranh giới về nhiệt độ chớp cháy là 100 ^{o}F (37,8 ^{o}C) để phân chia chất lỏng dễ cháy và chất lỏng có thể gây cháy. Tổ chức cho HS hoạt động nhóm để phân chia hai loại chất lỏng này dựa trên điểm chớp cháy.

GV tổ chức cho HS so sánh về mức độ dễ cháy của một số nhiên liệu lỏng thông dụng: xăng, dầu hoả, cồn,... từ đó giúp HS đề xuất phương pháp phòng, chống cháy nổ.

GV có thể tiến hành thực nghiệm sử dụng máy đo hơi gas cầm tay để đo hàm lượng khí rò rỉ.

Hoạt động 2. NHIỆT ĐỘ NGỌN LỬA

GV hướng dẫn HS tiến hành hoạt động nhóm để tìm hiểu về khái niệm nhiệt độ ngọn lửa, sưu tầm số liệu về nhiệt độ ngọn lửa của một số chất cháy thông dụng.

GV tổ chức cho HS sưu tầm về hậu quả một vụ cháy liên quan đến nhiệt độ (cháy cồn, cháy xăng dầu, cháy bình gas mini, dầu mỡ khi nấu nướng,...) rồi thuyết trình về nguyên nhân, tác hại, biện pháp phòng ngừa.

Hoạt động 3. NHIỆT ĐỘ TỰ BỐC CHÁY

GV tiến hành hoạt động nhóm để tìm hiểu về khái niệm nhiệt độ tự bốc cháy, sưu tầm số liệu về nhiệt độ tự bốc cháy của một số chất cháy thông dụng.

Tổ chức cho HS sưu tầm về một vụ nổ hơi xăng, dầu liên quan đến hàn xì ngoài vỏ thùng chứa xăng của xe bồn hoặc một vụ nổ liên quan đến cưa, khoan cắt bình khí dẫn tới tăng nhiệt độ khí tới nhiệt độ tự bốc cháy.

V HƯỚNG DẪN TRẢ LỜI CÂU HỎI TRONG SGK

1. a) GV hướng dẫn HS phân loại: chất dễ cháy có điểm chớp cháy thấp hơn 100 °F (37,8 °C), còn chất dễ cháy có điểm chớp cháy cao hơn 100 °F (37,8 °C).

b) Các chất lỏng dễ bay hơi và có khả năng cháy được mới có điểm chớp cháy. Ví dụ, nước là chất lỏng không có điểm chớp cháy nhưng có điểm sôi là 100 °C dưới áp suất 1 atm.

2. Tại các trạm bán xăng dầu luôn có hàm lượng hơi xăng bay ra nhất định trong quá trình bơm xăng. Điểm chớp cháy của octane là 14 °C, nhỏ hơn nhiệt độ thường (25 °C) chứng tỏ octane có thể bắt lửa và bốc cháy ngay ở nhiệt độ thường.

Do vậy, việc tạo nguồn lửa tại các trạm bán xăng dầu bị nghiêm cấm vì bất kì nguồn lửa nào xuất hiện ở trạm xăng dầu đều có nguy cơ gây hoả hoạn.

3. a) Tất cả các đặc điểm trên đều tiềm ẩn nguy cơ gây bỏng cồn: cồn dễ bay hơi, hơi cồn dễ bắt lửa, phản ứng toả nhiệt mạnh, nhiệt độ ngọn lửa cao.

b) Không sử dụng nhiều cồn một lúc, không đổ cồn trực tiếp vào lửa, sử dụng ở nơi thoáng gió, xung quanh không có các vật dụng dễ cháy,....

4. a) Nhiên liệu là các chất có năng suất toả nhiệt lớn, tạo ra được nhiều nhiệt ở vùng cháy, dẫn tới nhiệt độ ngọn lửa cao.

Trong đời sống, sản xuất, nhiệt độ ngọn lửa cao sẽ làm tăng tốc độ và hiệu suất các quá trình theo mục đích của con người.

b) Khi đốt cháy trong oxygen tinh khiết, toàn bộ nhiệt lượng toả ra chỉ dùng đốt nóng sản phẩm cháy.

Khi đốt cháy trong không khí, nhiệt lượng toả ra vừa dùng đốt nóng sản phẩm cháy, vừa dùng đốt nóng nitrogen, lượng nitrogen này cao gấp gần 4 lần lượng oxygen ban đầu.

5. a) Mặc dù xe bồn đã tháo hết xăng và việc hàn xì ở ngoài vỏ bình, nắp bình đậy kín thì vẫn có nguy cơ gây nổ vì 3 yếu tố gây cháy nổ: (i) trong bồn vẫn còn nhiều hơi xăng, (ii) trong bồn có không khí, (iii) hàn xì tạo ra nguồn nhiệt.

b) Khi hàn xì, nhiệt từ ngoài vỏ bồn bằng kim loại được truyền vào trong, gây tăng nhiệt mạnh ở nơi hàn xì. Khi đạt tới nhiệt độ tự bốc cháy, hỗn hợp hơi xăng trong bình sẽ tự bốc cháy, phản ứng lan truyền rất nhanh, toả nhiệt lớn và gây nổ rất mạnh, phá vỡ vỏ bồn.

VI GỢI Ý KIỂM TRA, ĐÁNH GIÁ

– Câu hỏi kiểm tra đánh giá bám sát yêu cầu cần đạt.

– GV sử dụng hiệu quả câu hỏi và các bảng số liệu trong SGK và SGV để xây dựng các câu hỏi.

– Đánh giá năng lực NTHH của HS bằng các câu hỏi có các cụm từ "xác định", "trình bày" khái niệm điểm chớp cháy, nhiệt độ ngọn lửa và nhiệt độ tự bốc cháy; "phân loại" chất lỏng dễ cháy và chất lỏng có thể gây cháy dựa vào điểm chớp cháy.

– Đánh giá năng lực GQVĐ của HS bằng các câu hỏi có các cụm từ "đề xuất" biện pháp phòng ngừa nguy cơ gây cháy, nổ cho một số loại nhiên liệu điển hình như gas, xăng, cồn dựa vào điểm chớp cháy và nhiệt độ ngọn lửa.

– Đánh giá năng lực THTN của HS bằng các câu hỏi có các cụm từ "phương pháp", "nguyên tắc" sử dụng an toàn các nhiên liệu dễ cháy trong gia đình.

– Đánh giá năng lực VDKT của HS bằng các câu hỏi về cách đề phòng nguy cơ cháy nổ dựa trên nhiệt độ tự bốc cháy.

Bài 7. HOÁ HỌC VỀ PHẢN ỨNG CHÁY, NỔ

I MỤC TIÊU

Sau bài học, HS sẽ:

– Tính được Δ_rH^o của một số phản ứng cháy, nổ để dự đoán mức độ mãnh liệt của phản ứng cháy, nổ.

– Tính được sự thay đổi của tốc độ phản ứng cháy, "tốc độ phản ứng hô hấp" theo giả định về sự phụ thuộc vào nồng độ oxygen.

II CHUẨN BỊ

– Dụng cụ thí nghiệm: panh, đèn cồn, bật lửa.

– Hoá chất thí nghiệm: than gỗ, bình đựng khí oxygen.

III THÔNG TIN BỔ SUNG

1. Biến thiên enthalpy của một số phản ứng cháy, nổ

a) Đốt cháy than đá

$$C(graphite) + O_2(g) \xrightarrow{t^o} CO_2(g)$$

Biến thiên enthalpy Δ_rH của phản ứng được tính thông qua các giá trị E_b

Chất	C(graphite)	$O_2(g)$	$CO_2(g)$
E_b, kJ/mol	712	494	799

theo công thức:

$$\Delta_r H = \sum E_b(\text{cđ}) - \sum E_b(\text{sp}) = 712 + 494 - 799 \cdot 2 = -392 \text{ (kJ/mol)}.$$

Lưu ý rằng, năng lượng liên kết trong tinh thể graphite bằng nhiệt thăng hoa của graphite.

Kết quả này có sự sai lệch nhỏ với giá $\Delta_r H$ tính theo nhiệt hình thành của các chất. Biến thiên enthalpy thu được cũng đồng thời là nhiệt cháy của C(graphite).

b) Đốt cháy khí thiên nhiên

Xét phản ứng đốt cháy methane: $CH_4(g) + 2O_2(g) \xrightarrow{t^o} CO_2(g) + 2H_2O(g)$

Biến thiên enthalpy $\Delta_r H$ của phản ứng được tính thông qua các giá trị $\Delta_f H$:

Chất	$CH_4(g)$	$O_2(g)$	$CO_2(g)$	$H_2O(g)$
$\Delta_f H$ (kJ/mol)	–75	0	–394	–242

theo công thức:

$$\Delta_r H = \sum \Delta_f H(\text{sp}) - \sum \Delta_f H(\text{cđ}) = -394 - 242 \cdot 2 - (-75) = -803 \text{ (kJ/mol)}.$$

Kết quả này có sự sai lệch nhỏ với giá $\Delta_r H$ tính theo năng lượng liên kết của các chất. Biến thiên enthalpy thu được cũng đồng thời là nhiệt cháy của methane.

c) Đốt cháy gas

Xét các phản ứng đốt cháy gas chứa propane và butane với tỉ lệ số mol tương ứng là 2 : 3.

Biến thiên enthalpy $\Delta_r H$ của phản ứng đốt cháy 1 mol khí gas được tính từ các giá trị $\Delta_f H$:

Chất	$C_3H_8(g)$	$C_4H_{10}(g)$	$O_2(g)$	$CO_2(g)$	$H_2O(g)$
$\Delta_f H$ (kJ/mol)	–105	–126	0	–394	–242

Xét các phản ứng đốt cháy:

$$C_3H_8(g) + 5O_2(g) \xrightarrow{t^o} 3CO_2(g) + 4H_2O(g)$$

Mol: 0,4 → 1,2 1,6

$$C_4H_{10}(g) + \frac{13}{2}O_2(g) \xrightarrow{t^o} 4CO_2(g) + 5H_2O(g)$$

Mol: 0,6 → 2,4 3,0

$\Delta_r H = -394 \cdot 3{,}6 - 242 \cdot 4{,}6 - (-105 \cdot 0{,}4 - 126 \cdot 0{,}6) = -2\,414$ (kJ/mol).

Kết quả này có sự sai lệch nhỏ với giá $\Delta_r H$ tính theo năng lượng liên kết của các chất.

d) Đốt cháy xăng

Xét phản ứng đốt cháy octane, một loại alkane có nhiều trong xăng:

$$C_8H_{18}(l) + \frac{25}{2}O_2(g) \xrightarrow{t^o} 8CO_2(g) + 9H_2O(g)$$

Biến thiên enthalpy Δ_rH của phản ứng được tính thông qua các giá trị Δ_fH:

Chất	$C_8H_{18}(l)$	$O_2(g)$	$CO_2(g)$	$H_2O(g)$
Δ_fH (kJ/mol)	–250	0	–394	–242

theo công thức:

$$\Delta_rH = \sum \Delta_fH(sp) - \sum \Delta_fH(cđ) = -394 \cdot 8 - 242 \cdot 9 - (-250) = -5\,080 \text{ (kJ/mol)}.$$

Kết quả này có sự sai lệch nhỏ với giá Δ_rH tính theo năng lượng liên kết do ở đây Δ_fH của octane C_8H_{18} được tính khi chất ở trạng thái lỏng.

e) Đốt cháy cồn

$$C_2H_5OH(g) + 3O_2(g) \xrightarrow{t^o} 2CO_2(g) + 3H_2O(g)$$

Biến thiên enthalpy Δ_rH của phản ứng được tính thông qua các giá trị E_b:

Liên kết	C—H	C—C	C—O	O=O	C=O	O—H
Năng lượng (kJ/mol)	411	346	358	494	799	459

theo công thức:

$$\Delta_rH = \sum E_b(cđ) - \sum E_b(sp) = 411 \cdot 5 + 346 + 358 + 459 + 494 \cdot 3 - 799 \cdot 4 - 459 \cdot 6$$

$$= -1\,250 \text{ (kJ/mol)}.$$

Kết quả này có sự sai lệch nhỏ với giá Δ_rH tính theo năng lượng liên kết do ở đây Δ_fH của ethanol được tính khi chất ở thể hơi.

2. Tốc độ phản ứng

a) Phản ứng đốt cháy

Xét phản ứng đốt cháy các chất cháy ở dạng rắn:

$$\text{Chất cháy(s)} + O_2(g) \xrightarrow{t^o} CO_2(g)$$

Giả thiết phản ứng là đơn giản, tốc độ phản ứng phụ thuộc bậc nhất vào nồng độ O_2 không khí theo phương trình: $v = k[O_2]$.

Bằng cách tăng hoặc giảm nồng độ O_2, con người có thể thúc đẩy hoặc làm chậm/dập tắt phản ứng cháy.

Hoạt động tăng cường phản ứng cháy	Hoạt động làm chậm/dập tắt phản ứng cháy
– Dùng quạt thổi không khí vào lò bếp than (gia đình), than đá (nhà máy nhiệt điện), than cốc (lò luyện gang). – Đặt bếp lò ở nơi thoáng gió.	– Đóng cửa lò bếp than khi ủ bếp. – Đậy nắp để tắt đèn cồn trong phòng thí nghiệm. – Dùng bình chữa cháy phun khí CO_2 pha loãng nồng độ O_2. – Phủ cát, chăn lên đám cháy để nồng độ O_2 giảm dần.

Đối với chất cháy dạng khí/hơi, nếu phản ứng cháy là đơn giản, ta có:

$$v = k[\text{chất cháy}][O_2].$$

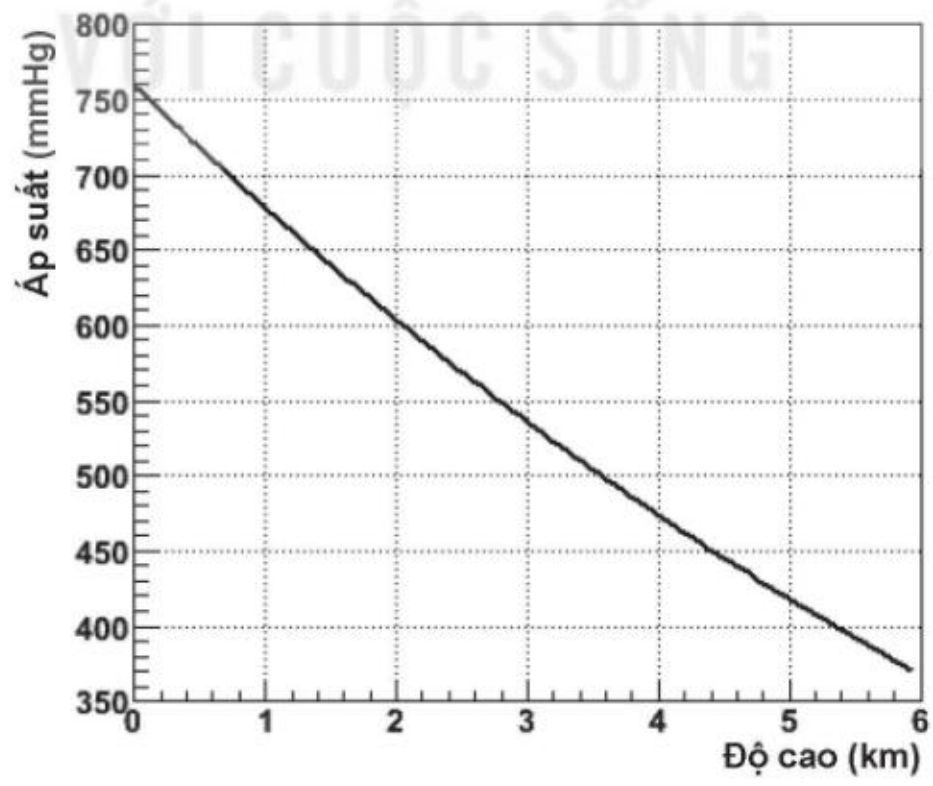
Khi đó, để phòng chống cháy nổ cũng như điều khiển quá trình cháy xảy ra an toàn và đúng mục đích, bên cạnh thay đổi nồng độ O_2, chúng ta có thể thay đổi nồng độ chất cháy.

Ví dụ, khi phát hiện rò rỉ khí gas trong nhà, chúng ta có thể ngăn chặn nguy cơ cháy nổ bằng cách vặn chặt nắp bình gas và mở thông các cửa để làm loãng nồng độ khí cháy xuống dưới ngưỡng LEL.

b) "Phản ứng hô hấp"

Giả thiết tốc độ "phản ứng hô hấp" phụ thuộc nồng độ O_2 trong không khí: $v = k[O_2]$.

Phổi và hệ tuần hoàn con người được tối ưu hoá để hoạt động trong điều kiện áp suất khí quyển ở độ cao tương ứng với mực nước biển. Ở tầng sát mặt đất, không khí đậm đặc nhất và chứa nhiều oxygen. Áp suất khí quyển giảm dần theo độ cao, tuy nhiên thành phần không khí hầu như không thay đổi ở tầng đối lưu do tác động trộn lẫn liên tục của thời tiết.



Hình 7.1. *Sự phụ thuộc của áp suất vào độ cao*

Ở độ cao 2500 m, áp suất khí quyển bằng 570 mmHg, một số người xuất hiện biểu hiện chóng mặt, đau đầu, thở dồn, tăng nhịp tim do nồng độ O_2 trong không khí giảm dẫn tới thiếu O_2 lên não.

Sự thiếu O_2 tăng lên khi ở độ cao 5500 m, khi đó áp suất khí quyển chỉ còn 390 mmHg, tức lượng O_2 giảm khoảng một nửa so với bình thường.

Ở độ cao 7600 m được gọi là "vùng chết". Ở độ cao này không khí rất loãng, con người sẽ nhanh chóng hôn mê do thiếu O_2 nghiêm trọng.

Trên đỉnh núi Everest cao nhất thế giới (cao 8848 m), áp suất khí quyển chỉ còn 253 mmHg, vận động viên leo núi phải được hỗ trợ thở bằng bình oxygen, nếu không sẽ chết sau vài phút.

Trong đợt dịch bệnh Covid-19, nhiều bệnh nhân cần hỗ trợ thở bằng bình O_2 nhằm tăng nồng độ O_2, tăng tốc độ phản ứng hô hấp.

Tại nhiều bệnh viện, buồng oxygen cao áp được sử dụng để tăng lượng oxygen vào máu khi cấp cứu các bệnh nhân bị ngộ độc khí, hỗ trợ điều trị bệnh, bệnh giảm áp của thợ lặn,...

IV GỢI Ý TỔ CHỨC CÁC HOẠT ĐỘNG DẠY, HỌC

Hoạt động 1. BIẾN THIÊN ENTHALPY CỦA MỘT SỐ PHẢN ỨNG CHÁY NỔ

GV hướng dẫn HS tiến hành hoạt động nhóm, giao cho mỗi nhóm tìm hiểu về thành phần một loại nhiên liệu phổ biến, tra cứu thông tin để xác định biến thiên enthalpy của phản ứng đốt cháy mỗi loại nhiên liệu đó theo 2 cách: tính theo nhiệt hình thành và tính theo năng lượng liên kết.

GV hướng dẫn HS đánh giá năng suất toả nhiệt của nhiên liệu đó. Từ đó đề xuất các phương pháp thực hiện phản ứng cháy an toàn, tiết kiệm. Ví dụ, GV có thể yêu cầu HS tính lượng nhiên liệu cần dùng để đun sôi 1 kg nước từ 25 °C, biết nhiệt dung riêng của nước lỏng là 4200 J/(kg·độ).

GV tổ chức cho HS sưu tầm về một số sự cố hoả hoạn có liên quan đến loại nhiên liệu của nhóm mình, từ đó tìm hiểu nguyên nhân, đề xuất biện pháp phòng, chống cháy nổ.

GV có thể tổ chức cho HS so sánh ưu, nhược điểm của từng nhiên liệu như: thể tồn tại, trữ lượng trên vỏ Trái Đất, cách thức vận chuyển, năng suất toả nhiệt, yêu cầu về an toàn cháy nổ,... của các nhiên liệu đã nghiên cứu.

Hoạt động 2. TỐC ĐỘ PHẢN ỨNG

1. Tốc độ phản ứng cháy

GV tổ chức cho HS sưu tầm và thuyết trình về các biện pháp thông thường để thúc đẩy quá trình đốt cháy hoặc làm chậm/dập tắt đám cháy thông qua việc thay đổi nồng độ O_2 cung cấp cho quá trình đốt cháy.

2. "Phản ứng hô hấp"

GV tổ chức hoạt động nhóm giúp HS đánh giá vai trò của O_2 với hô hấp và sự sống. Mỗi nhóm tìm hiểu và trình bày về một chủ đề như: thở ở độ cao, thở ở độ sâu, bệnh giảm áp, liệu pháp oxygen cao áp trong y học, đề xuất các giải pháp duy trì và cải thiện nồng độ oxygen cho hô hấp (nơi ở thông thoáng, trồng nhiều cây xanh, bảo vệ rừng), nhận biết các nguy cơ làm giảm oxygen khi hô hấp (đốt than tổ ong, chạy máy phát điện trong phòng ngủ, ở lâu trong phòng kín, nơi đông người, mắc kẹt trong xe ô tô,…).

V HƯỚNG DẪN TRẢ LỜI CÂU HỎI TRONG SGK

1. Xét phản ứng: $CH_4(g) + 2O_2(g) \longrightarrow CO_2(g) + 2H_2O(g)$ $\Delta_rH = -802$ kJ

Sử dụng công thức:

$$\Delta_rH = \sum \Delta_fH(sp) - \sum \Delta_fH(cđ) = -394 - 242\cdot 2 - \Delta_fH^o_{CH_4(g)} = -802 \text{ (kJ)}.$$

$$\Rightarrow \Delta_fH^o_{CH_4(g)} = -76 \text{ kJ/mol}.$$

2. Số mol gốc glucose trong 1 kg củi khô:

$$n_{C_6H_{10}O_5} = \frac{1000\cdot\frac{54}{100}}{162} = \frac{10}{3} \text{ (mol)}$$

Nhiệt lượng toả ra khi đốt cháy hoàn toàn 1 kg củi khô:

$$Q = 2880\cdot\frac{10}{3} = 9600 \text{ (kJ)}$$

Năng suất toả nhiệt của loại củi khô trên là 9600 kJ/kg.

3. a) Phương trình hoá học:

$$2NH_4NO_3(s) \xrightarrow{t^o} 2N_2(g) + O_2(g) + 4H_2O\,(g)$$

$$\Delta_rH^o_{298} = -242\cdot 4 - (-365,6\cdot 2) = -236,8 \text{ (kJ)}$$

Vậy, nhiệt lượng toả ra khi có 160 gam NH_4NO_3 phân huỷ trong phản ứng nổ là 236,8 kJ.

b) Nhiệt lượng giải phóng ra từ vụ nổ nếu toàn bộ 2 700 tấn NH_4NO_3 bị phân huỷ:

$$\frac{2700\cdot 10^6}{160} = 16,88\cdot 10^6 \text{ (kJ)}$$

4. Giả thiết tốc độ "phản ứng hô hấp" phụ thuộc bậc nhất vào nồng độ oxygen:

$$v = k[O_2]$$

Khi O_2 giảm xuống còn 16% thể tích, tương ứng với áp suất riêng phần của O_2 thì nồng độ oxygen là:

$$C_{O_2(0,16\ atm)} = 8,58 \cdot 10^{-3} \cdot \frac{0,16}{0,21} = 6,54 \cdot 10^{-3}\ (M)$$

Tốc độ phản ứng hô hấp giảm: $\frac{k(8,58 \cdot 10^{-3})}{k(6,54 \cdot 10^{-3})} = 1,31$ (lần).

5. Giả thiết tốc độ "phản ứng hô hấp" phụ thuộc bậc nhất vào nồng độ oxygen:

$$v = k[O_2]$$

Trên đỉnh Phan Xi Păng, áp suất khí quyển là 0,66 atm thì áp suất riêng phần của O_2 là 0,14 atm, tương ứng với nồng độ oxygen là:

$$C_{O_2(0,14\ atm)} = 8,58 \cdot 10^{-3} \cdot \frac{0,14}{0,21} = 5,72 \cdot 10^{-3}\ (M)$$

Tốc độ phản ứng hô hấp giảm: $\frac{k(8,58 \cdot 10^{-3})}{k(5,72 \cdot 10^{-3})} = 1,5$ (lần).

VI GỢI Ý KIỂM TRA, ĐÁNH GIÁ

– Câu hỏi kiểm tra, đánh giá bám sát yêu cầu cần đạt.

– GV sử dụng hiệu quả câu hỏi và các bảng số liệu trong SGK và SGV để xây dựng các câu hỏi.

– Đánh giá năng lực NTHH của HS bằng các câu hỏi có các cụm từ "xác định", "tính toán" biến thiên enthalpy của phản ứng đốt cháy các nhiên liệu phổ biến.

– Đánh giá năng lực GQVĐ của HS bằng các câu hỏi có các cụm từ "tính toán" lượng nhiên liệu phù hợp cho từng mục đích sử dụng; lượng oxygen cần thiết cho quá trình hô hấp.

– Đánh giá năng lực THTN của HS bằng các câu hỏi có các cụm từ "phương pháp", "nguyên tắc" "đề xuất" biện pháp sử dụng hiệu quả, an toàn nguồn nhiệt toả ra từ các phản ứng đốt cháy nhiên liệu trong gia đình.

– Đánh giá năng lực VDKT của HS bằng các câu hỏi về cách đảm bảo đủ nguồn cung cấp oxygen cho sự cháy và sự hô hấp, đảm bảo an toàn cháy nổ và duy trì không gian thông thoáng để cung cấp đủ oxygen cho cơ thể.

Bài 8. PHÒNG CHỐNG CHÁY, NỔ

I MỤC TIÊU

Sau bài học, HS sẽ:

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

– 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 thường dùng carbon dioxide, dùng nước để chữa cháy, nhưng trong một số trường hợp không được dùng nước để chữa cháy mà lại phải dùng cát, carbon dioxide,...

– Giải thích được tại sao đám cháy có mặt các kim loại hoạt động mạnh như kim loại kiềm, kiềm thổ và nhôm,... không sử dụng nước, carbon dioxide, cát, bọt chữa cháy để dập tắt đám cháy.

II CHUẨN BỊ

– Dụng cụ thí nghiệm: bình chữa cháy mini, bông, bát sứ.

– Hoá chất thí nghiệm: cồn 70^{o}.

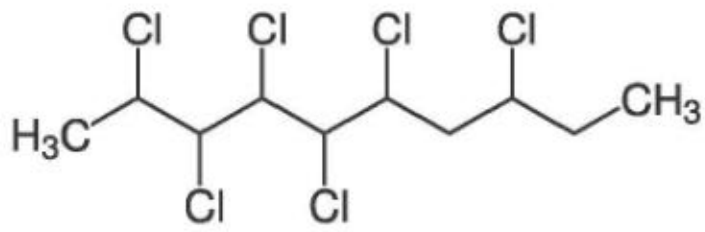
III THÔNG TIN BỔ SUNG

1. Phòng cháy

Chất chống cháy (firestop) là chất có tác dụng làm chậm hoặc ức chế các phản ứng hoá học tạo ra sự cháy hoặc tạo một lớp bảo vệ trên bề mặt của vật liệu.

Chất chống cháy có các đặc điểm sau: làm tăng nhiệt độ bắt cháy của vật liệu, làm chậm tốc độ cháy, làm giảm tỉ lệ giải phóng nhiệt, làm giảm lượng khói sinh ra.

Chất chống cháy	Thành phần, cơ chế
Dẫn xuất halogen	– Thành phần: là các dẫn xuất chứa halogen (R–X), trong đó X thường là chlorine, bromine. – Cơ chế: (i) Giải phóng gốc halogen tự do (X•) từ (R–X), (ii) Hình thành hợp chất hydrogen halide (HX) bằng sự kết hợp giữa gốc X• với các gốc H• và HO• hình thành trong ngọn lửa, (iii) Trung hoà các gốc tự do giàu năng lượng.

Chất chống cháy	Thành phần, cơ chế
	– Ví dụ: Chất chống cháy halogen điển hình là chloroparaffin. Nhóm này được chia thành 3 loại, tuỳ thuộc vào số nguyên tử C trong mạch paraffin: ngắn (C_{10}–C_{13}), trung bình (C_{14}–C_{17}), và dài (> C_{17}).  ***Hình 8.1.*** *Phân tử C_{10} chloroparaffin* – Công dụng: sử dụng cho các vật liệu điện, điện tử. – Hạn chế: Các chất chống cháy halogen có hiệu quả ngay cả ở hàm lượng thấp, tuy nhiên nhóm này tiềm ẩn nguy cơ gây hại cho sức khoẻ và môi trường.
Aluminium hydroxide	– Thành phần: $Al(OH)_3$ – Cơ chế: $2Al(OH)_3(s) \xrightarrow{t^o} Al_2O_3(s) + 3H_2O(g)$ $\Delta H^o > 0$ Phản ứng thu nhiệt giúp làm giảm nhiệt độ vật liệu, hơi nước pha loãng nồng độ oxygen, Al_2O_3 hấp thụ một số khí giúp giảm khói. – Công dụng: sử dụng phổ biến cho các chất dẻo. – Hạn chế: chỉ có hiệu quả chống cháy và ức chế khói khi dùng với hàm lượng cao.
Phosphorus và hợp chất	– Thành phần: phosphorus đỏ, P_2O_3, phosphate, cơ phosphorus,… – Cơ chế: $P(s) \xrightarrow[t^o]{+O_2} P_4O_{10}(s) \xrightarrow[t^o]{+H_2O} (HPO_3)_n\ (s)$ Một lớp bảo vệ được phát triển bởi metaphosphoric acid do tính háo nước, lớp bảo vệ gồm mạng lưới của carbon và phosphorus oxide: $(HPO_3)_n(s) + C_x(H_2O)_y(s) \longrightarrow xC(s) + (HPO_3)_n \cdot yH_2O(s)$ – Công dụng: sử dụng phổ biến cho vật liệu polymer.
Antimony trioxide	– Thành phần: Sb_2O_3 + dẫn xuất halogen – Cơ chế: Antimony trioxide được sử dụng kết hợp với dẫn xuất halogen để tạo ra các đặc tính chống cháy: bẫy gốc tự do, ngăn cản oxygen, hình thành lớp than trong vật liệu để cách nhiệt. – Hạn chế: tăng lượng khói, gây ảnh hưởng xấu đến sức khoẻ.

2. Chữa cháy

a) Nguyên tắc phòng cháy, chữa cháy

Nguyên tắc phòng cháy, chữa cháy được quy định ở Điều 4 của Luật Phòng cháy và chữa cháy:

1. Huy động sức mạnh tổng hợp của toàn dân tham gia hoạt động phòng cháy và chữa cháy.

2. Trong hoạt động phòng cháy và chữa cháy lấy phòng ngừa là chính; phải tích cực và chủ động phòng ngừa, hạn chế đến mức thấp nhất các vụ cháy xảy ra và thiệt hại do cháy gây ra.

3. Phải chuẩn bị sẵn sàng lực lượng, phương tiện, phương án và các điều kiện khác để khi có cháy xảy ra thì chữa cháy kịp thời, có hiệu quả.

4. Mọi hoạt động phòng cháy và chữa cháy trước hết phải được thực hiện và giải quyết bằng lực lượng và phương tiện tại chỗ.

b) Biện pháp phòng cháy, chữa cháy

Điều 14 của Luật Phòng cháy và chữa cháy quy định hai biện pháp sau:

1. Quản lí chặt chẽ và sử dụng an toàn các chất cháy, chất nổ, nguồn lửa, nguồn nhiệt, thiết bị và dụng cụ sinh lửa, sinh nhiệt, chất sinh lửa, sinh nhiệt; bảo đảm các điều kiện an toàn về phòng cháy.

2. Thường xuyên, định kì kiểm tra phát hiện các sơ hở, thiếu sót về phòng cháy và có biện pháp khắc phục kịp thời.

c) Chất chữa cháy

– Đặc điểm

Điều kiện cần	– Không tham gia vào bất kì yếu tố nào trong tam giác cháy.
Điều kiện đủ	– Hình thành lớp bảo vệ bề mặt vật liệu (bọt chữa cháy). – Pha loãng nồng độ oxygen trong không khí (khí carbonic, hơi nước, bột chữa cháy phân huỷ ra khí và hơi). – Hạ thấp nhiệt độ đám cháy xuống dưới điểm cháy (phun nước).

– Bột chữa cháy (powder fire extinguisher): BC, ABC

Bột BC có thành phần hoá học chứa $NaHCO_3$, được nạp vào bình chứa không khí nén. Bột BC có tác dụng chữa các đám cháy loại B và C. Ban đầu, khi phun bột BC vào chất cháy (lỏng, rắn), bột BC ngăn sự tiếp xúc giữa chất cháy với chất oxi hoá. Tiếp đó, bột BC hấp thụ nhiệt từ đám cháy và bị phân huỷ nhanh chóng theo phản ứng:

$$2NaHCO_3(s) \xrightarrow{t^o} Na_2CO_3(s) + CO_2(g) + H_2O(g) \qquad \Delta H^o > 0$$

Các sản phẩm khí và hơi sinh ra pha loãng nồng độ oxygen trong đám cháy, giảm cháy lan.

Bột ABC có thành phần hoá học chứa 90% $NH_4H_2PO_4$ và 10% $(NH_4)_2SO_4$. Ban đầu, khi phun bột ABC vào chất cháy (lỏng, rắn), bột ABC ngăn sự tiếp xúc giữa chất cháy với chất oxi hoá. Tiếp đó, bột ABC hấp thụ nhiệt từ đám cháy và bị phân huỷ nhanh chóng theo phản ứng:

$$NH_4H_2PO_4(s) \xrightarrow{t^o} NH_3(g) + HPO_3(s) + H_2O(g) \qquad \Delta H^o > 0$$

Các sản phẩm khí và hơi sinh ra pha loãng nồng độ oxygen trong đám cháy, giảm cháy lan.

– Bọt chữa cháy (foam fire extinguisher): bọt hoà không khí, bọt hoá học.

Bọt hoà không khí là loại bọt được tạo thành nhờ sự khuấy trộn nước, không khí và chất tạo bọt. Bọt hoà không khí nhẹ, bền trong khoảng 10 phút, rất nhẹ nên đặc biệt thích hợp cho các đám cháy xăng dầu.

Bọt hoá học là loại bọt được tạo ra từ phản ứng hoá học, thường chứa thành phần gồm $Al_2(SO_4)_3$, $NaHCO_3$, chất phụ gia. Cơ chế tạo bọt khi chữa cháy như sau:

$$Al_2(SO_4)_3(s) + 6H_2O\ (l) \xrightarrow{t^o} 2Al(OH)_3(s) + 2H_2SO_4(aq)$$

$$H_2SO_4(aq) + 2NaHCO_3(s) \xrightarrow{t^o} Na_2SO_4(aq) + CO_2(g) + H_2O(l)$$

Khí CO_2 tạo ra cùng với $Al(OH)_3$ dạng keo và chất phụ gia thúc đẩy quá trình tạo bọt. Bọt sinh ra nhẹ và nổi được trên bề mặt chất lỏng, ngăn cách chất cháy với không khí.

IV GỢI Ý TỔ CHỨC CÁC HOẠT ĐỘNG DẠY, HỌC

Hoạt động 1. PHÒNG CHÁY, NỔ

GV hướng dẫn HS tổ chức hoạt động nhóm, mỗi nhóm tìm hiểu về các nguồn phát sinh gây cháy nổ trên cơ sở ba yếu tố của tam giác cháy: nguồn phát sinh nhiệt, nguồn phát sinh chất cháy và nguồn phát sinh chất oxi hoá.

Hướng dẫn HS thảo luận, đề xuất các biện pháp ngăn ngừa các nguồn phát sinh đó trong phòng cháy.

GV cho HS sưu tầm video một vụ hoả hoạn có liên quan đến mỗi nguồn phát sinh đó để khắc sâu kiến thức, rèn luyện kĩ năng.

Hoạt động 2. CHỮA CHÁY

a) Dấu hiệu đám cháy

GV giao cho một nhóm HS sưu tầm và thuyết trình về các dấu hiệu cảnh báo đám cháy, đề xuất phương pháp sớm nhận biết các dấu hiệu đó.

b) Cách xử lí sự cố cháy, nổ

GV tổ chức hoạt động nhóm giúp HS bình tĩnh xử lí kịp thời, đúng quy trình khi xảy ra sự cố cháy nổ.

c) Chất chữa cháy

GV tổ chức hoạt động nhóm, mỗi nhóm tìm hiểu về thành phần, cơ chế, ưu và nhược điểm của mỗi loại chất chữa cháy: nước, carbon dioxide, bột chữa cháy, bọt chữa cháy. Tổ chức cho HS thực hành sử dụng 1 – 2 loại bình chữa cháy.

V HƯỚNG DẪN TRẢ LỜI CÂU HỎI TRONG SGK

1. Các biện pháp đề phòng nguy cơ cháy nổ từ các thiết bị điện trong gia đình:

– Tắt bàn là, bếp điện, máy sấy sau khi sử dụng và để xa các vật liệu dễ cháy.

– Sử dụng thiết bị điện, đường dây điện, đúng công suất, cầu dao điện đảm bảo tiếp xúc điện tốt, có sự giám sát khi sử dụng các thiết bị có nhiệt độ cao như nồi chiên, bếp điện...

– Tập trung khi đun nấu bằng bếp điện để tránh nồi cạn nước hoặc cháy dầu mỡ bên trong.

2. Các biện pháp đề phòng nguy cơ cháy nổ khi sử dụng bếp gas:

– Sử dụng các bình gas đạt tiêu chuẩn an toàn, van chất lượng tốt, có địa chỉ tin cậy.

– Tập trung khi đun nấu bằng bếp gas, để các đồ vật dễ cháy cách xa nơi đun nấu.

– Khoá van tổng bình gas ngay sau khi sử dụng.

Khi phát hiện sự cố rò rỉ khí gas trong nhà cần: khoá ngay van bình gas, mở tất cả các cửa, bật quạt để làm phân tán nồng độ khí gas xuống dưới giới hạn cháy nổ dưới (LEL), cảnh báo mọi người không làm phát sinh nguồn lửa.

3. a) Các dấu hiệu nhận biết sớm đám cháy: khói bốc lên, mùi khét, ánh lửa và tiếng nổ.

Các dấu hiệu này được phát hiện bởi con người hoặc sử dụng các thiết bị báo cháy.

b) Khi phát hiện đám cháy, em cần làm ngay các công việc sau:

– Hô hoán, gõ kẻng, gọi loa, bấm chuông báo cháy để báo động cho mọi người.

– Cúp cầu dao điện ở khu vực cháy.

– Sử dụng ngay các vật dụng có sẵn như: bình chữa cháy, nước, đất, chăn, cát, vòi chữa cháy để dập lửa.

– Gọi điện cho lực lượng phòng cháy, chữa cháy theo số **114** để thông báo cụ thể, rõ ràng địa điểm, loại công trình đang cháy, sơ bộ về quy mô và số người mắc kẹt bên trong nếu có.

4. a) Với các đám cháy Mg, không dùng nước, bọt chữa cháy để dập lửa vì Mg vẫn cháy được trong hơi nước:

$$Mg(s) + H_2O(g) \xrightarrow{t^o} MgO(s) + H_2(g)$$

$$2H_2(g) + O_2(g) \xrightarrow{t^o} 2H_2O\,(g)$$

Cũng không dùng carbon dioxide, bột chữa cháy vì Mg cháy được trong khí carbon dioxide:

$$Mg(s) + CO_2(g) \xrightarrow{t^o} MgO(s) + CO(g)$$

b) Có thể sử dụng cát, sỏi hoặc khí hiếm để phủ lên đám cháy.

VI GỢI Ý KIỂM TRA, ĐÁNH GIÁ

– Câu hỏi kiểm tra, đánh giá bám sát yêu cầu cần đạt.

– GV sử dụng hiệu quả câu hỏi và các bảng số liệu trong SGK để xây dựng các câu hỏi.

– Đánh giá năng lực NTHH của HS bằng các câu hỏi có các cụm từ "xác định", "trình bày" các dấu hiệu của một đám cháy.

– Đánh giá năng lực GQVĐ của HS bằng các câu hỏi có các cụm từ "đề xuất" biện pháp phòng ngừa nguy cơ gây cháy, nổ trong một số trường hợp điển hình như sử dụng thiết bị điện, đun nấu ở gia đình.

– Đánh giá năng lực THTN của HS bằng các câu hỏi có các cụm từ "nêu cách" xử lí khi có sự cố cháy nổ, tiêu lệnh phòng cháy, chữa cháy, sử dụng được bình chữa cháy và loại chất chữa cháy phù hợp cho từng đám cháy.

– Đánh giá năng lực VDKT của HS bằng các câu hỏi về nguyên tắc dập tắt một đám cháy dựa trên cơ sở các yếu tố ảnh hưởng đến tốc độ phản ứng, giáo dục ý thức tuân thủ nghiêm các quy tắc về phòng cháy, chữa cháy tại các nơi có biển báo cấm lửa.

KẾT NỐI TRI THỨC
VỚI CUỘC SỐNG

CHUYÊN ĐỀ 3. THỰC HÀNH HOÁ HỌC VÀ CÔNG NGHỆ THÔNG TIN

Bài 9. THỰC HÀNH VẼ CẤU TRÚC PHÂN TỬ

I MỤC TIÊU

Sau bài học, HS sẽ:

– 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.

II CHUẨN BỊ

– Các máy tính điện tử có cài đặt phần mềm hoá học tính toán Chem3D, ChemOffice.

– Các phiếu học tập.

III THÔNG TIN BỔ SUNG

1. Tổng quan về hoá học tính toán

Hoá học tính toán cho phép chúng ta sử dụng máy tính điện tử để nghiên cứu các hệ phân tử. Một số khía cạnh thông dụng của hoá học tính toán bao gồm:

– Các phương pháp tính toán.

– Mô phỏng ở cấp độ phân tử, thiết kế các tổng hợp hữu cơ.

– Dữ liệu hoá học (Chemical database).

Mô phỏng phân tử có thể được coi là việc xây dựng mô hình 2D hoặc 3D về cấu trúc và đặc tính của phân tử. Trong một chương trình mô phỏng như Chem3D, các phương pháp tính toán được gọi là công cụ tính toán, trong khi công cụ hình học và công cụ đồ hoạ dùng hiển thị mô hình. Chem3D hỗ trợ một số phương pháp hoá học tính toán mạnh mẽ và các tuỳ chọn trực quan hoá mở rộng.

2. Tổng quan về các phương pháp tính toán

Hoá học tính toán bao gồm nhiều phương pháp toán học khác nhau được chia thành hai loại lớn:

Cơ học phân tử: Áp dụng các định luật vật lí cổ điển cho các nguyên tử trong phân tử mà không cần xem xét rõ ràng các electron.

Cơ học lượng tử: Dựa vào phương trình Schrödinger để mô tả một phân tử có cấu trúc electron được xét đến rõ ràng.

Phương pháp cơ lượng tử có thể được chia thành hai lớp: phương pháp *ab initio* (phương pháp tính toán khởi đầu) và phương pháp bán kinh nghiệm.

Bảng 1. *Một số phương pháp hoá học tính toán và phần mềm tương ứng*

Phương pháp tính toán	Một số ví dụ cụ thể về phương pháp tính toán	Một số phần mềm
Cơ học phân tử	MM2	Chem3D
Bán kinh nghiệm	Huckel AM1, MINDO/3, PM3	Chem3D, MOPAC, Gaussian
Tính toán khởi đầu	RHF, UHF, MP2,…	Gaussian, GAMESS

3. Sử dụng các phương pháp tính toán

Nói chung các phương pháp hoá học tính toán thực hiện các loại tính toán cơ bản sau:

Tính toán năng lượng điểm đơn: Năng lượng của một dạng hình học nhất định của các nguyên tử trong một phân tử.

Tối ưu hoá cấu trúc hình học: Một sửa đổi có hệ thống các toạ độ nguyên tử của một phân tử dẫn đến một cấu trúc hình học, trong đó các lực tác động lên mỗi nguyên tử trong phân tử bằng không. Thông thường việc tối ưu hoá cấu trúc hình học là để tìm ra cấu trúc phân tử có mức năng lượng tối thiểu.

Tính toán các tính chất của phân tử: Dự đoán các tính chất vật lí và hoá học nhất định, chẳng hạn như điện tích trên các nguyên tử, mômen lưỡng cực, nhiệt hình thành, tần số dao động vùng hồng ngoại (IR), phổ hấp thụ electron vùng tử ngoại – khả kiến.

IV GỢI Ý TỔ CHỨC CÁC HOẠT ĐỘNG DẠY, HỌC

Hoạt động 1.

VẼ CÔNG THỨC CẤU TẠO VÀ CÔNG THỨC LEWIS CỦA MỘT SỐ CHẤT HỮU CƠ

GV tổ chức hoạt động cho HS đọc, thực hành nội dung mục I. Vẽ công thức cấu tạo và công thức Lewis, mục *I.1. Vẽ công thức cấu tạo và công thức Lewis của chất*, trang 51 SGK. GV làm trước rồi hướng dẫn HS thực hành.

GV tổ chức hoạt động cho HS vừa đọc, vừa thực hành các hoạt động ở mục I.1. Cụ thể: vẽ cấu trúc phân tử ethane (C_2H_6), ethene (C_2H_4) và ethyne (C_2H_2) (trang 51 SGK).

GV hướng dẫn HS đọc các bước tiến hành (trang 51, 52, 53 SGK), rồi GV thực hiện vẽ cấu trúc các phân tử theo các bước đó (Hình 9.1, 9.2 trang 51, 52 SGK).

Sau đó GV tổ chức cho HS thực hiện hoạt động vẽ cấu trúc các phân tử đã cho theo các bước, bằng cách thực hiện yêu cầu của câu hỏi 1 (trang 53 SGK).

Hoạt động 2. VẼ CÔNG THỨC CẤU TẠO CỦA SULFURIC ACID

GV tổ chức hoạt động cho HS vừa đọc, vừa thực hành các hoạt động 2 mục I.1. Cụ thể: vẽ công thức cấu tạo của sulfuric acid (H_2SO_4), trang 53 SGK.

GV hướng dẫn HS đọc các bước tiến hành, trang 53, 54 SGK rồi GV thực hiện vẽ công thức cấu tạo của sulfuric acid theo các bước đó. GV chú ý nhấn mạnh cách chọn hoá trị VI cho nguyên tử lưu huỳnh, xem Hình 9.3 trang 53 SGK.

GV hướng dẫn HS trả lời câu hỏi 2 trang 54 SGK và thực hiện yêu cầu của câu hỏi 3, trang 54 SGK.

Hoạt động 3. VẼ CÔNG THỨC LEWIS CỦA AMMONIA

GV tổ chức hoạt động cho HS vừa đọc, vừa thực hành các hoạt động 3, trang 54 SGV. Cụ thể: vẽ công thức Lewis của ammonia (NH_3).

GV hướng dẫn HS đọc các bước tiến hành, trang 54, 55 SGK rồi GV thực hiện vẽ công thức Lewis của ammonia theo các bước đó. GV chú ý nhấn mạnh thao tác đi đến Template Window, chọn Lewis Structure và chọn hai dấu chấm để biểu diễn cặp electron riêng cho nguyên tử N, xem Hình 9.4 trang 55 SGK.

GV hướng dẫn HS thực hiện yêu cầu của câu hỏi 4, trang 55 SGK.

Hoạt động 4. HIỂN THỊ CẤU TRÚC PHÂN TỬ BA CHIỀU CỦA MỘT SỐ CHẤT

GV tổ chức hoạt động cho HS vừa đọc, vừa thực hành mục *I.2. Hiển thị cấu trúc phân tử ba chiều của một số chất* và thực hiện Hoạt động 4, trang 56: Hiển thị cấu trúc phân tử của ethane (C_2H_6) và sulfuric acid (H_2SO_4) dưới dạng 3D.

Sau khi HS thực hiện được hoạt động, GV giải thích cho HS một số biểu tượng trên thanh công cụ của giao diện 3D Viewer, xem Hình 9.6 trang 57 SGK.

Sau đó GV tổ chức cho HS thực hiện yêu cầu của câu hỏi 5, trang 58 SGK.

Hoạt động 5. SAO CHÉP HÌNH ẢNH CẤU TRÚC PHÂN TỬ

GV hướng dẫn HS sao chép hình ảnh cấu trúc phân tử đã vẽ được ở giao diện của phần mềm ChemSketch sang file Word hoặc PowerPoint.

GV giảng cho HS mục II. Chèn hình ảnh vào file word, powerpoint, mục II.1. Sao chép dưới dạng có thể chỉnh sửa, trang 58 SGK.

GV tổ chức cho HS thực hiện hoạt động 5, trang 58 SGK. GV hướng dẫn HS đọc các bước tiến hành, kết hợp xem các Hình 9.7 trang 58 SGK rồi thực hiện.

Sau đó GV vừa giảng vừa thực hiện các bước chỉnh sửa cấu trúc phân tử mà HS đã dán sang file word hoặc powerpoint. GV yêu cầu HS làm theo.

GV giảng tiếp cho HS mục II.2. Sao chép dưới dạng hình ảnh tĩnh, trang 59 SGK.

Sau đó GV tổ chức cho HS thực hiện hoạt động 6, trang 59 SGK.

Hoạt động 6. GHI NHỚ, TỔNG KẾT

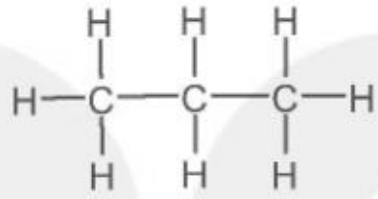
Ở hoạt động này, GV có thể cho HS tự tóm tắt ngắn gọn những nội dung mà HS đã thực hành trong bài.

GV tổng kết ngắn gọn các nội dung kiến thức, kĩ năng mà HS đã lĩnh hội được ở bài thực hành.

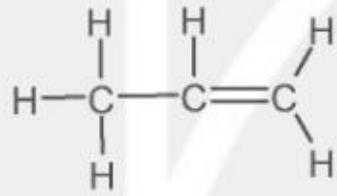
V HƯỚNG DẪN TRẢ LỜI CÂU HỎI TRONG SGK

I. VẼ CÔNG THỨC CẤU TẠO VÀ CÔNG THỨC LEWIS

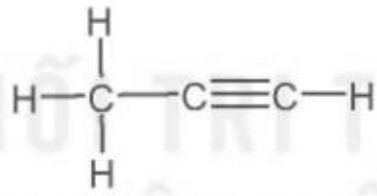
1. Công thức cấu tạo của C_3H_8:



Công thức cấu tạo của C_3H_6:

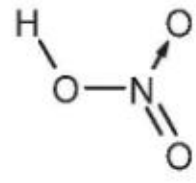


Công thức cấu tạo của C_3H_4:

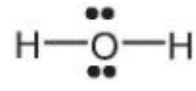


2. Hoá trị của nguyên tố C trong phần mềm ChemSketch được mặc định bằng 4, do vậy ở hoạt động 1 khi vẽ công thức cấu tạo của C_2H_6, C_2H_4 và C_2H_2 không cần chọn hoá trị cho nguyên tử carbon.

3. Công thức cấu tạo của nitric acid HNO_3 vẽ được bằng phần mềm ChemSketch:

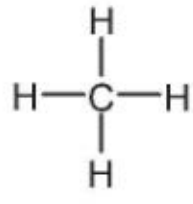


4. Công thức Lewis của H_2O:

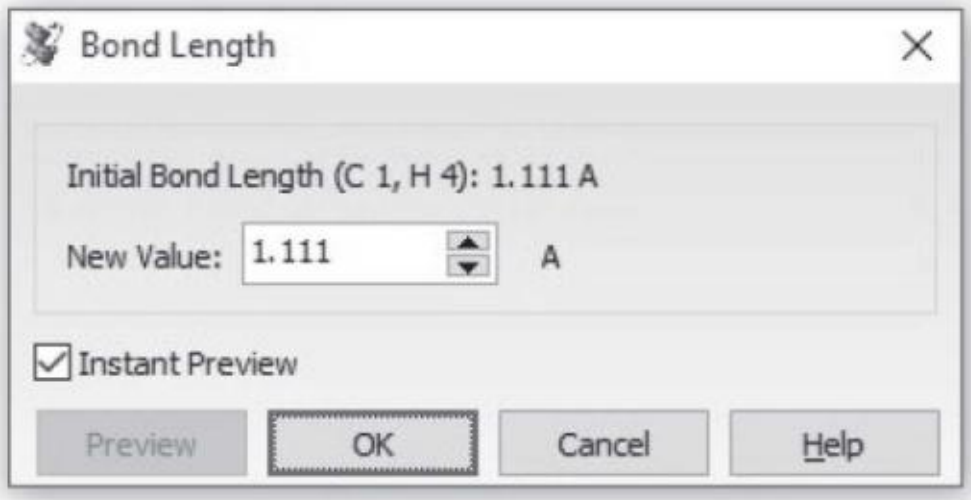


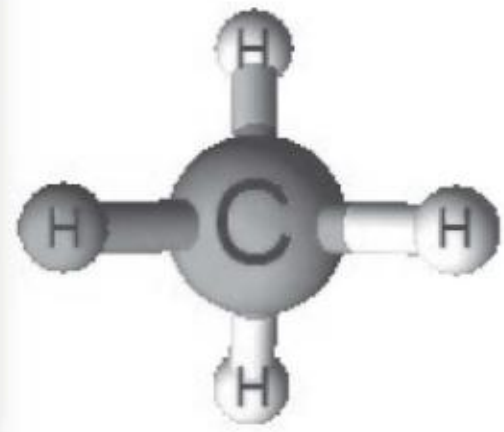
5. Phân tử CH_4:

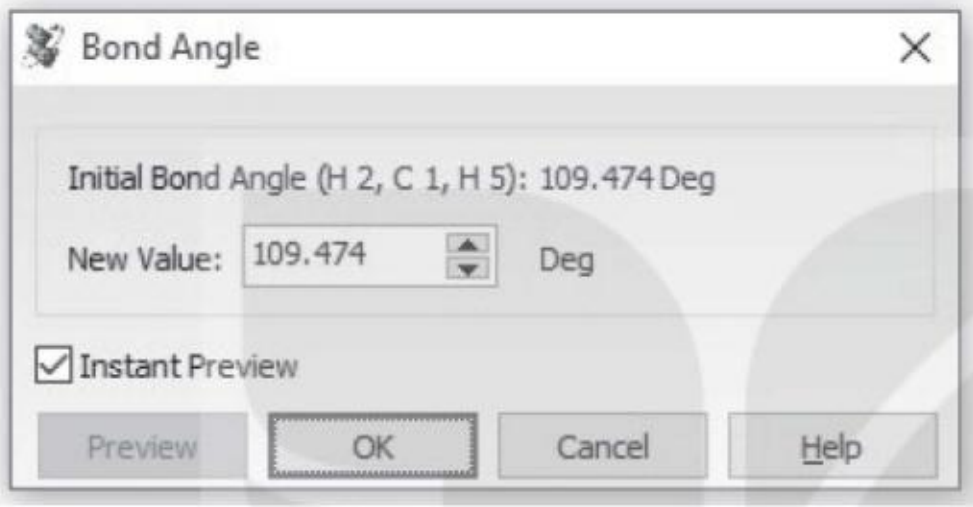
– Công thức cấu tạo của CH_4, NH_3, H_2O:

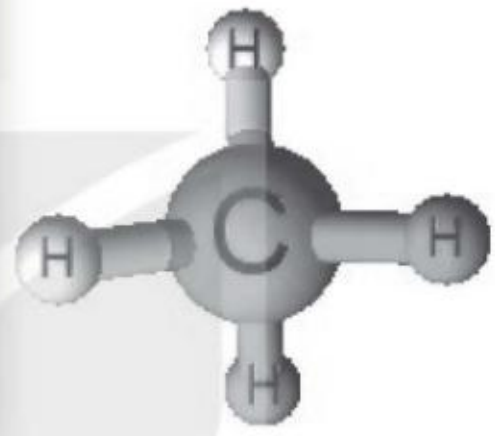


– Hiển thị cấu trúc và tham số cấu trúc trong không gian ba chiều:







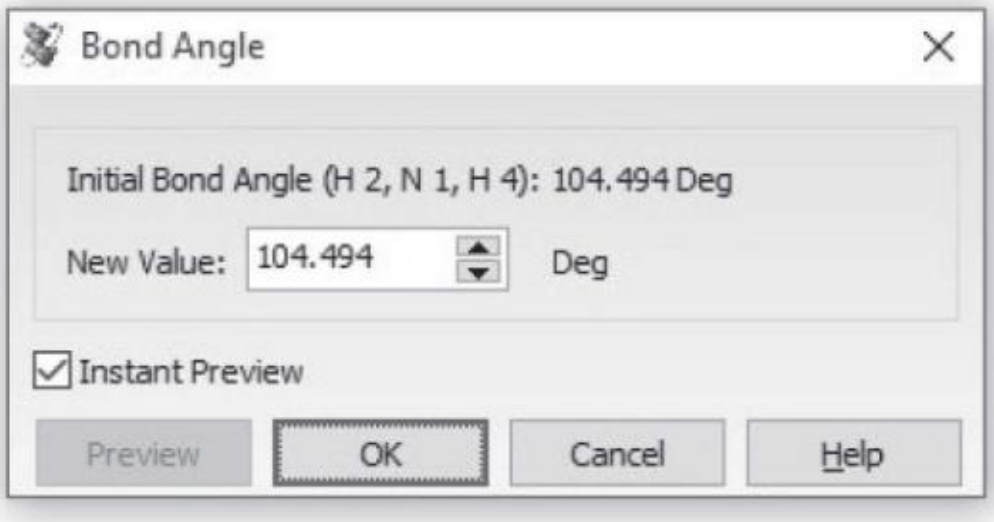


Phân tử NH_3:

– Hiển thị cấu trúc và tham số cấu trúc trong không gian ba chiều:





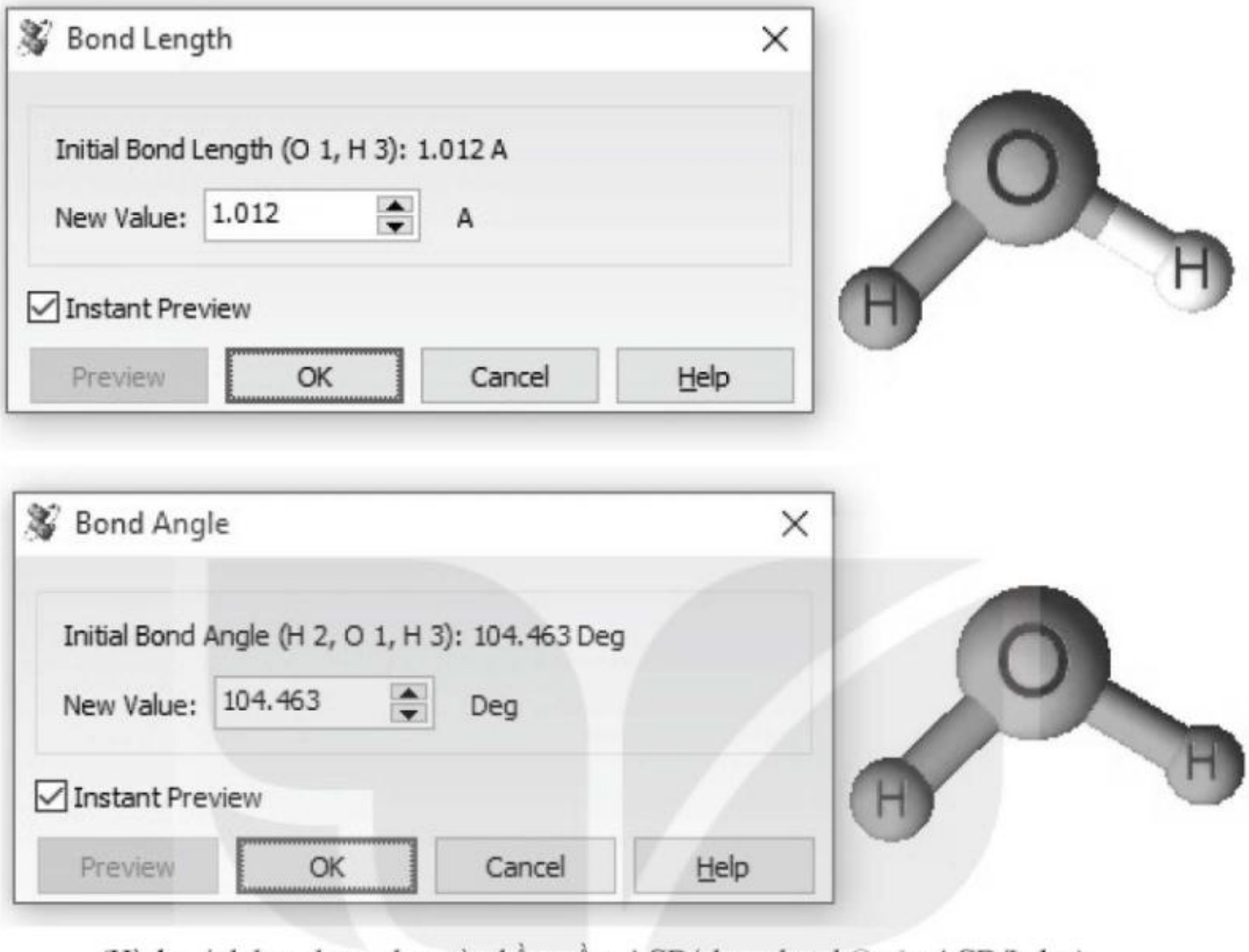




KẾT NỐI TRI THỨC VỚI CUỘC SỐNG

Phân tử H_2O:

– Hiển thị cấu trúc và tham số cấu trúc trong không gian ba chiều:



(Hình minh hoạ được chụp từ phần mềm ACD/chemsketch® của ACD/Labs.)

VI GỢI Ý KIỂM TRA, ĐÁNH GIÁ

Đề bài

1. Sử dụng phần mềm ChemSketch

a) Hãy vẽ công thức cấu tạo của các phân tử C_2H_6, C_2H_4, C_2H_2, H_2SO_3, H_3PO_4.

b) Hãy vẽ công thức cấu tạo Lewis của F_2, Cl_2.

2. Lưu hình ảnh công thức cấu tạo vừa vẽ được và chèn chúng vào file word và powerpoint.

3. Hiển thị được cấu trúc ba chiều của các phân tử đã cho ở câu 1.

Đánh giá

Câu 1, 2: Khá.

Câu 3: Giỏi.

KẾT NỐI TRI THỨC VỚI CUỘC SỐNG

Bài 10. THỰC HÀNH THÍ NGHIỆM HOÁ HỌC ẢO

I MỤC TIÊU

Sau bài học, HS sẽ:

– Thực hiện được các thí nghiệm ảo theo nội dung được cho trước từ GV.

– Phân tích và lí giải được kết quả thí nghiệm ảo.

II CHUẨN BỊ

– Các máy tính điện tử có cài đặt phần mềm mô phỏng thí nghiệm hoá học Yenka.

– Các phiếu học tập.

III THÔNG TIN BỔ SUNG

Một số phần mềm và ứng dụng để mô phỏng thí nghiệm hoá học

Yenka hỗ trợ mô phỏng các thí nghiệm hoá học trên máy tính, mô phỏng các bài thực hành hoá học trên máy tính điện tử mà không cần sử dụng các hoá chất thực và phòng thí nghiệm thực. Bên cạnh phần mềm Yenka, một số phần mềm và ứng dụng như Portable Virtual Chemistry Lab hay Chemlab cung cấp phòng thí nghiệm hoá học ảo để làm thí nghiệm hoá học trên máy tính điện tử.

IV GỢI Ý TỔ CHỨC CÁC HOẠT ĐỘNG DẠY, HỌC

Hoạt động 1. LÀM QUEN VỚI PHẦN MỀM YENKA

Hoạt động này có mục đích là để HS biết và làm quen với các tính năng thông dụng của phần mềm Yenka.

GV giảng, đồng thời tổ chức hoạt động cho HS đọc nội dung mục *I. Mở đầu*, trang 60 SGK. GV làm trước rồi hướng dẫn HS thực hành bằng cách điều hướng con trỏ đến các nội dung GV yêu cầu.

Sau đó, GV yêu cầu HS trả lời câu hỏi: Trong giao diện của phần mềm Yenka, kho chứa các bài thí nghiệm đã mô phỏng sẵn ở chỗ nào? Kho chứa các dụng cụ, thiết bị thí nghiệm ở chỗ nào?

Trả lời: Ở phía bên trái của giao diện Yenka.

Thẻ New: Kho chứa các dụng cụ, thiết bị thí nghiệm để tạo những mô phỏng thí nghiệm mới.

Thẻ Open-local chứa các bài thí nghiệm đã mô phỏng sẵn.

Hoạt động 2. DÙNG THÍ NGHIỆM ĐƯỢC THIẾT KẾ SẴN TRONG THẺ OPEN-LOCAL

Hoạt động này có mục đích là để HS sử dụng được các mô phỏng thí nghiệm được thiết kế sẵn trong cửa sổ Open-local của phần mềm Yenka.

GV giảng mục II. Mô phỏng thí nghiệm hoá học, mục *II.1. Dùng thí nghiệm được thiết kế sẵn*, trang 61 SGK.

GV tổ chức cho HS vừa đọc các bước tiến hành, vừa thực hành Hoạt động 1, trang 61 SGK: Sử dụng thẻ Open-local để mô phỏng thí nghiệm đo tốc độ phản ứng:

$$2HCl(aq) + CaCO_3(s) \longrightarrow CaCl_2(aq) + CO_2(g) + H_2O(l)$$

GV yêu cầu HS xem Hình 10.2, trang 62 SGK, trong lúc tiến hành các bước của hoạt động.

GV yêu cầu HS trả lời câu hỏi 1, trang 62 SGK.

Hoạt động 3. SỬ DỤNG THẺ OPEN-LOCAL ĐỂ MÔ PHỎNG THÍ NGHIỆM VỀ ẢNH HƯỞNG CỦA NỒNG ĐỘ CHẤT LÊN TỐC ĐỘ PHẢN ỨNG

Hoạt động này có mục đích là để HS mô phỏng được thí nghiệm về ảnh hưởng của nồng độ chất lên tốc độ phản ứng.

GV tổ chức hoạt động cho HS vừa đọc cách tiến hành, vừa thực hành Hoạt động 2, trang 62 SGK: Sử dụng thẻ Open-local để mô phỏng thí nghiệm về ảnh hưởng của nồng độ HCl lên tốc độ phản ứng:

$$2HCl(aq) + CaCO_3(s) \longrightarrow CaCl_2(aq) + CO_2(g) + H_2O(l)$$

GV yêu cầu HS xem Hình 10.3, trang 63 SGK, trong lúc tiến hành các bước của hoạt động.

GV yêu cầu HS trả lời câu hỏi 2 và 3, trang 63 SGK.

Hoạt động 4. TỰ THIẾT KẾ MÔ PHỎNG MỘT THÍ NGHIỆM

Hoạt động này có mục đích là để HS tự thiết kế được một mô phỏng thí nghiệm sử dụng phần mềm Yenka.

GV giảng cho HS mục *II.2. Tự thiết kế mô phỏng một thí nghiệm*, trang 64 SGK.

Sau đó GV tổ chức cho HS thực hiện Hoạt động 3, trang 65 SGK: Sử dụng thẻ New để mô phỏng thí nghiệm copper tác dụng với dung dịch nitric acid.

GV hướng dẫn HS đọc các bước tiến hành, kết hợp xem Hình 10.5 và Hình 10.6, trang 65, 66 SGK rồi HS thực hiện.

GV yêu cầu HS trả lời các câu hỏi 4, trang 66 SGK.

Hoạt động 5. GHI NHỚ, TỔNG KẾT

Ở hoạt động này, GV có thể cho HS tự tóm tắt ngắn gọn những nội dung/việc mà HS đã thực hành trong bài.

GV tổng kết ngắn gọn các nội dung kiến thức, kĩ năng mà HS đã lĩnh hội được ở bài thực hành.

V HƯỚNG DẪN TRẢ LỜI CÂU HỎI TRONG SGK

Hoạt động 1

Tốc độ trung bình của phản ứng trong khoảng thời gian từ 0 đến 20 giây:

$$\frac{V(CO_2 \text{ tại thời điểm 20 giây}) - V(CO_2 \text{ tại thời điểm 0 giây})}{20} \ (cm^3/s).$$

Hoạt động 2

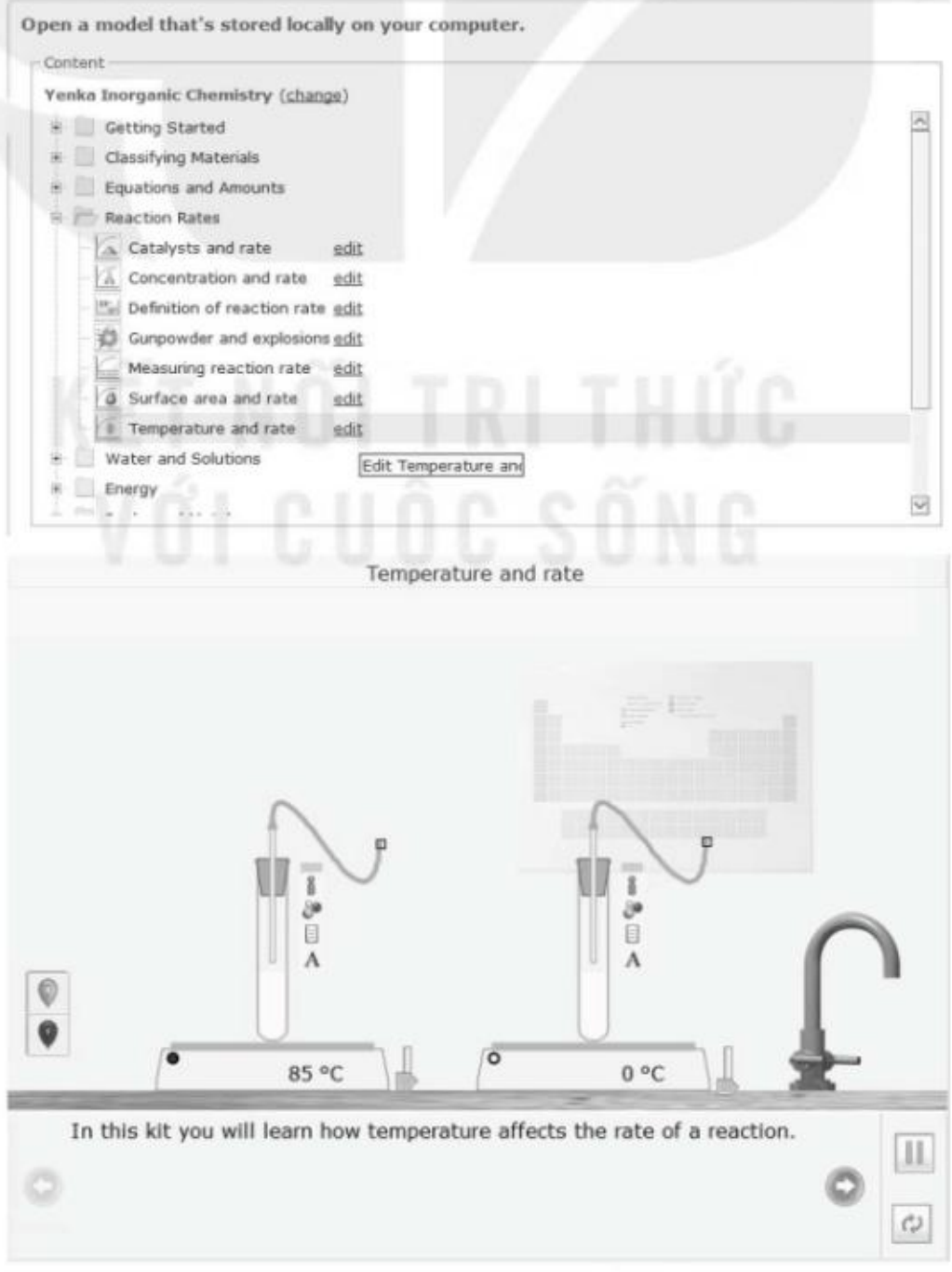
1. Tốc độ tăng dần kích thước của các quả bóng như sau: bóng xanh lam < bóng xanh lá cây < bóng đỏ. Tốc độ thoát khí CO_2 ở ống nghiệm bên trái nhỏ nhất, ở bên phải lớn nhất. Như vậy: khi nồng độ dung dịch tăng, tốc độ phản ứng tăng lên.

2. Sử dụng cửa sổ Open-local để mô phỏng các thí nghiệm sau:

a) Ảnh hưởng của nhiệt độ lên tốc độ phản ứng (giữa $CaCO_3$ (s) và HCl (aq)):

• Bước 1. Làm tương tự như Hoạt động 2, trang 62 SGK.

• Bước 2. Nhấp vào Temperature and rate (ảnh hưởng của nhiệt độ lên tốc độ phản ứng). Một mô phỏng đã được thiết kế xuất hiện ở màn hình bên phải, xem các hình sau:



(Hình minh hoạ được chụp từ phần mềm Yenka)

KẾT NỐI TRI THỨC VỚI CUỘC SỐNG

Các em sẽ quan sát thấy ở màn hình mô phỏng có:

– Tiêu đề của mô phỏng: Temperature and rate. (Ảnh hưởng của nhiệt độ đến tốc độ phản ứng hoá học).

– Hoá chất và dụng cụ thí nghiệm: hai ống nghiệm chứa calcium carbonate ($CaCO_3$) và hydrochloric acid (HCl) được đun ở hai nhiệt độ khác nhau: 85 °C và 0 °C. Ống nghiệm có nút cao su kín, có ống dẫn khí xuyên qua nút cao su. Hai quả bóng bay có màu xanh lá cây và màu đỏ.

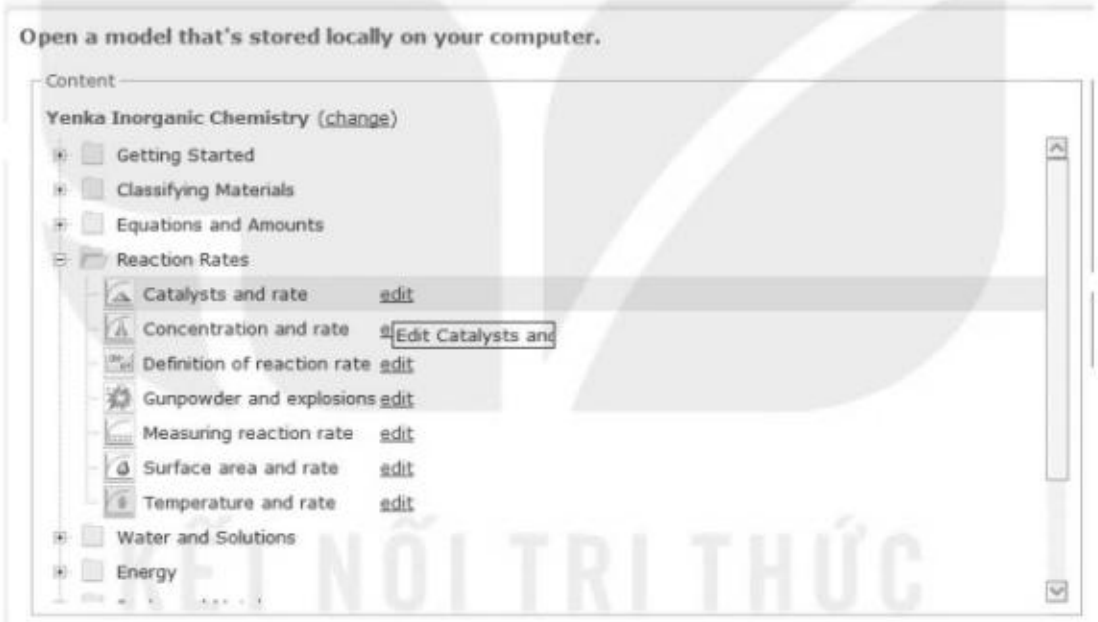
• Bước 3. Nhấp quả bóng màu xanh lá cây, kéo thả vào cuối ống dẫn khí ở nhiệt độ 85 °C; quả bóng màu đỏ vào cuối ống dẫn khí ở nhiệt độ 0 °C (hoặc ngược lại).

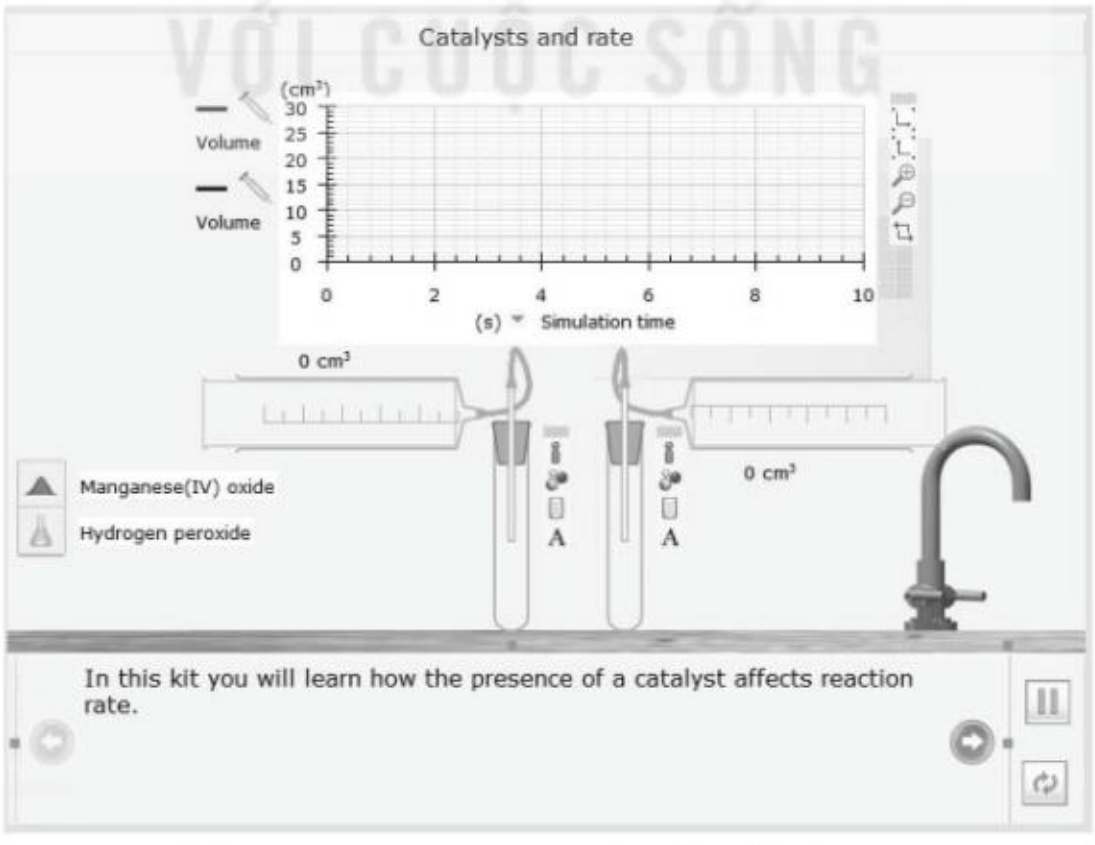
• Bước 4. Nhấp vào nút Pause (||) ở góc dưới bên phải của màn hình mô phỏng để thực hiện mô phỏng. Sau khoảng 2 giây nhấp chuột lại vào nút Pause để dừng mô phỏng.

b) Ảnh hưởng của chất xúc tác lên tốc độ phản ứng:

• Bước 1. Làm tương tự như Hoạt động 2, trang 62 SGK.

• Bước 2. Nhấp vào Catalysts and rate (ảnh hưởng của chất xúc tác lên tốc độ phản ứng). Một mô phỏng đã được thiết kế xuất hiện ở màn hình bên phải, xem các hình sau:





(Hình minh hoạ được chụp từ phần mềm Yenka)

Các em sẽ quan sát thấy ở màn hình mô phỏng có:

– Tiêu đề của mô phỏng: Catalysts and rate. (Ảnh hưởng của chất xúc tác đến tốc độ phản ứng hoá học).

– Hoá chất và dụng cụ thí nghiệm: hai ống nghiệm có nút cao su kín, có ống dẫn khí xuyên qua nút cao su nối với hai ống đong đo thể tích khí thoát ra. Hai hoá chất là manganese (IV) oxide (chất xúc tác) và hydrogen peroxide (chất phản ứng).

• Bước 3. Nhấp hoá chất hydrogen peroxide, kéo thả vào cả hai ống nghiệm; nhấp hoá chất manganese (IV) thả vào ống nghiệm bên trái (hoặc ngược lại, chỉ thả vào một ống nghiệm).

• Bước 4. Nhấp vào nút Pause (||) ở góc dưới bên phải của màn hình mô phỏng để thực hiện mô phỏng. Sau khoảng 5 giây nhấp chuột lại vào nút Pause để dừng mô phỏng.

Hoạt động 3

Nếu dung dịch HNO_3 loãng, phương trình hoá học của phản ứng như sau:

$$3Cu(s) + 8HNO_3(aq) \longrightarrow 3Cu(NO_3)_2(aq) + 4H_2O(l) + 2NO(g)$$

Hiện tượng: Cu tan, dung dịch chuyển sang màu xanh nước biển, có sủi bọt khí. Khí NO không màu hoá nâu trong không khí do xảy ra phản ứng:

$$2NO(g) + O_2(g) \longrightarrow 2NO_2(g)$$

Nếu dung dịch HNO_3 đặc, phương trình hoá học của phản ứng như sau:

$$Cu(s) + 4HNO_3(aq) \longrightarrow Cu(NO_3)_2(aq) + 2H_2O(l) + NO_2(g)$$

Hiện tượng: Cu tan, dung dịch chuyển sang màu xanh nước biển, có sủi bọt khí màu nâu.

VI GỢI Ý KIỂM TRA, ĐÁNH GIÁ

Đề bài

1. Sử dụng phần mềm Yenka, hãy mô phỏng thí nghiệm ảnh hưởng của diện tích bề mặt đến tốc độ phản ứng (Surface area and rate).

2. Sử dụng phần mềm Yenka, hãy mô phỏng thí nghiệm về phản ứng thu nhiệt và phản ứng toả nhiệt (Endothermic and Exothermic).

Đánh giá

Câu 1: Đánh giá NL VDKT ở mức 1.

Câu 2: Đánh giá NL VDKT ở mức 2.

Bài 11. THỰC HÀNH TÍNH THAM SỐ CẤU TRÚC VÀ NĂNG LƯỢNG

I MỤC TIÊU

Sau bài học, HS sẽ:

– 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 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,…).

II CHUẨN BỊ

– Các máy tính điện tử có cài đặt phần mềm mô phỏng thí nghiệm hoá học Avogadro và phần mềm MOPAC.

– Các phiếu học tập.

III THÔNG TIN BỔ SUNG

1. Tổng quan về MOPAC

MOPAC là một chương trình (hay phần mềm) tính toán hoá học để thực hiện các phép tính bán thực nghiệm trên các hệ nguyên tử và phân tử. Chương trình được vận hành bằng cách tạo tệp đầu vào ASCII sử dụng bất kì chương trình soạn thảo văn bản thuận tiện nào, ví dụ như Notepad hay Wordpad, sau đó chạy chương trình. Kết quả của phép tính là một hoặc nhiều tệp đầu ra.

Một số phương pháp tính toán bán kinh nghiệm có trong phần mềm MOPAC: MNDO (phương pháp mặc định), AM1, PM3 và MINDO/3.

Các phương pháp tính bán kinh nghiệm trong MOPAC ban đầu được thiết kế cho các phép tính trên các phân tử hữu cơ, vì vậy nó không tính được cho tất cả các nguyên tố trong Bảng tuần hoàn. Tuy nhiên các phương pháp AM1 và PM3 có thể tính được cho các nguyên tử, phân tử của một số nguyên tố chuyển tiếp, các kim loại kiềm và một số á kim.

2. Một số ví dụ về nội dung file đầu vào của một chương trình MOPAC

a) File đầu vào cho phép tính trên một nguyên tử

Am1 triplet

Oxygen triplet atom

Nguyen tu oxygen

O

Dòng 1: "Am1 triplet vectors" là dòng lệnh để yêu cầu máy tính thực hiện các phép tính. "Am1" là từ khoá tương ứng với phương pháp bán kinh nghiệm AM1; "triplet" là từ khoá để xác định nguyên tử O có 2 electron độc thân. Dòng 2: "Oxygen triplet atom" và dòng 3 là các dòng kí tự do người dùng viết và không ảnh hưởng đến phép tính. Dòng 4 "O" để định dạng nguyên tử O.

b) File đầu vào cho phép tính trên phân tử hai nguyên tử

PM3 singlet bonds dipole mullik force

Carbon Monoxide

PM3 bond length optimization

C

O 0.9550 1 1 0 0

Dòng 1: "PM3 singlet bonds dipole mullik force" là dòng lệnh để yêu cầu máy tính thực hiện phép tính. Từ khoá "PM3" tương ứng với phương pháp bán kinh nghiệm PM3; "singlet" cho biết tất cả các electron trong phân tử đã ghép đôi; từ khoá "dipole" yêu cầu máy tính thực hiện phép tính mô-men lưỡng cực của phân tử; từ khoá "mullik" yêu cầu máy tính phân tích mật độ electron/mật độ điện tích theo phương pháp Mulliken; từ khoá "force" yêu cầu máy tính thực hiện phép tính các tần số dao động chuẩn của phân tử. Dòng 2 và 3 là các kí tự do người dùng viết và không ảnh hưởng đến phép tính.

Dòng 4: "C" xác định nguyên tử carbon.

Dòng 5: "O 0.9550 1 1 0 0". Kí tự "O" xác định nguyên tử O; "0.9550" xác định độ dài liên kết CO. Số "1" thứ nhất để yêu cầu máy tính tối ưu liên kết CO này (nếu thay bằng "0" máy tính sẽ không tối ưu). Đoạn kí tự "1 0 0" để xác định liên kết, góc liên kết và góc nhị diện, trong đó số "1" có nghĩa là độ dài liên kết ở dòng này (0.9550) tương ứng với liên kết giữa nguyên tử ở dòng này và nguyên tử thứ nhất (là nguyên tử C ở dòng 4), các kí tự tiếp sau là "0 0" vì phân tử hai nguyên tử này không có góc, hay góc nhị diện.

IV GỢI Ý TỔ CHỨC CÁC HOẠT ĐỘNG DẠY, HỌC

Hoạt động 1. CÁCH CHẠY PHẦN MỀM MOPAC TRÊN WINDOWS–10

Hoạt động này có mục đích là để HS biết cách sử dụng phần mềm MOPAC được cài đặt trên Windows–10.

GV giảng mục *I. Mở đầu*, trang 73 SGK.

Hoạt động 2. TẠO FILE DỮ LIỆU (FILE DATA SET) ĐỂ CHẠY MỘT CHƯƠNG TRÌNH MOPAC

Hoạt động này có mục đích là để HS biết cách tạo file dữ liệu dùng để chạy một chương trình MOPAC.

GV giảng mục II. Tối ưu hoá cấu trúc hình học và tính nhiệt tạo thành của một cấu trúc phân tử bằng phương pháp bán kinh nghiệm, mục II.1. Tạo file dữ liệu.

GV tổ chức cho HS vừa đọc hiểu nội dung của một file dữ liệu đầu vào, vừa đọc các bước tiến hành, vừa thực hành hoạt động 1 trang 68 SGK: *Tạo file dữ liệu để tối ưu hoá cấu trúc của phân tử H_2O*. Sau khi HS đọc hiểu nội dung và thực hiện xong hoạt động, GV nêu câu hỏi: Nội dung của một file dữ liệu đầu vào để chạy chương trình tính MOPAC thường chứa nội dung gì?

Trả lời: Tệp dữ liệu đầu vào MOPAC thường gồm:

– Một dòng từ khoá. Một số từ khoá: "AM1" để sử dụng phương pháp bán kinh nghiệm AM1, "OPT" dùng để tối ưu cấu trúc hình học, "ENPART" để tính năng lượng phân tử.

– Hai dòng văn bản do người dùng xác định.

– Ma trận Z mô tả phân tử. Sau ma trận Z phải có một dòng trống hoặc một dòng số 0.

Hoạt động 3. THỰC HIỆN MỘT CHƯƠNG TRÌNH TÍNH MOPAC

Hoạt động này có mục đích là để HS chạy được một chương trình MOPAC tính tối ưu hoá cấu trúc và tính nhiệt hình thành của phân tử H_2O.

GV tổ chức hoạt động cho HS vừa đọc cách tiến hành, vừa thực hành hoạt động 2, trang 68 SGK: *Tối ưu hoá cấu trúc của phân tử H_2O bằng phương pháp bán kinh nghiệm*.

GV bổ sung: giá trị nhiệt hình thành của phân tử H_2O có trong file "H2O_AM1.out".

Hoạt động 4. ĐỌC FILE KẾT QUẢ VÀ SỬ DỤNG KẾT QUẢ CỦA CHƯƠNG TRÌNH MOPAC

Hoạt động này có mục đích là để HS đọc và sử dụng được kết quả tính tối ưu hoá cấu trúc và tính nhiệt hình thành của phân tử H_2O.

GV giảng mục *III. Cách đọc file kết quả và sử dụng kết quả*, mục *III.1. Cách đọc file kết quả*, trang 69 SGK.

GV tổ chức hoạt động cho HS vừa đọc cách tiến hành, vừa thực hành hoạt động 3, trang 69 SGK: *Đọc file kết quả và sử dụng kết quả tính tối ưu hoá cấu trúc của phân tử, tính nhiệt tạo thành và năng lượng phân tử của H_2O*. GV hướng dẫn HS mở file "H2O_AM1.out", tìm đến các đoạn văn bản như được trích dẫn ở trang 69 và 70 SGK.

GV yêu cầu HS tìm trong file đầu ra của phép tính, file "H2O_AM1.out" giá trị nhiệt hình thành của phân tử H_2O. GV bổ sung: nhiệt hình thành của phân tử H_2O tính được trong pha khí bằng phương pháp bán kinh nghiệm AM1 gần với giá trị thực nghiệm.

Tiếp theo GV tổ chức hoạt động cho HS vừa đọc cách tiến hành, vừa thực hành hoạt động 4, trang 70 SGK: *Xác định độ dài liên kết và góc liên kết trong file kết quả tính tối ưu hoá cấu trúc của H_2O*. GV hướng dẫn HS mở file "H2O_AM1.out", tìm đến các đoạn văn bản như được trích dẫn ở trang 70 SGK.

GV yêu cầu HS trả lời câu hỏi 1.

Hoạt động 5. SỬ DỤNG KẾT QUẢ TÍNH TỐI ƯU HOÁ CẤU TRÚC ĐỂ THẤY ĐƯỢC CẤU TRÚC HÌNH HỌC CỦA PHÂN TỬ H_2O

Hoạt động này có mục đích là để HS sử dụng kết quả tính tối ưu hoá cấu trúc bằng phần mềm MOPAC để biểu diễn được cấu trúc phân tử nước bằng phần mềm Avogadro.

GV giảng mục *III.2. Sử dụng file kết quả để hiển thị hình học phân tử*. GV tổ chức cho HS thực hiện hoạt động 5 trang 70 SGK: *Sử dụng kết quả tính tối ưu hoá cấu trúc để thấy được cấu trúc hình học của phân tử* H_2O. GV hướng dẫn HS đọc các bước tiến hành, GV thực hiện mẫu các bước rồi yêu cầu HS thực hiện. Trong lúc tiến hành các bước của hoạt động, HS xem hình 11.1 trang 71 SGK.

Hoạt động 6. HIỂN THỊ CÁC THAM SỐ CẤU TRÚC CỦA MỘT CẤU TRÚC PHÂN TỬ BẰNG AVOGADRO

Hoạt động này có mục đích là để HS sử dụng phần mềm Avogadro để hiển thị được các tham số cấu trúc của một phân tử (từ đó HS có thể so sánh được các tham số cấu trúc của các chất trong cùng một dãy đồng đẳng hoặc trong cùng một nhóm).

GV tổ chức cho HS vừa đọc cách tiến hành, vừa thực hành các bước hiển thị tham số cấu trúc, trang 72 SGK. Xem hình 11.2 trang 72 SGK.

GV yêu cầu HS thực hiện các yêu cầu của câu hỏi 2 và 3, trang 74 SGK.

Hoạt động 7. GHI NHỚ, TỔNG KẾT

Ở hoạt động này, GV có thể cho HS tự tóm tắt ngắn gọn những nội dung/việc mà HS đã thực hành trong bài.

GV tổng kết ngắn gọn các nội dung kiến thức, kĩ năng mà HS đã lĩnh hội được ở bài thực hành.

V HƯỚNG DẪN TRẢ LỜI CÂU HỎI TRONG SGK

1. Độ dài liên kết O–H và góc liên kết $\widehat{HOH}$ trong phân tử nước, tính tối ưu được theo phương pháp AM1 lần lượt là 0,96 Å và 103,5 Å. Kết quả này gần với các giá trị thực nghiệm đã cho.

2. File dữ liệu để tối ưu hoá cấu trúc, tính nhiệt hình thành và năng lượng phân tử của NH_3:

AM1 OPT ENPART

NH3

Geometry Optimization

H 0.0 0 0.0 0 0.0 0

N 1.01 1 0.0 0 0.0 0 1 0 0

H 1.01 1 107.0 1 0.0 0 2 1 0

H 1.01 1 107.0 1 120.0 1 2 3 1

File dữ liệu để tối ưu hoá cấu trúc, tính nhiệt hình thành và năng lượng phân tử của CH_4:

AM1 OPT ENPART

CH4

Geometry Optimization

H 0.0 0 0.0 0 0.0 0

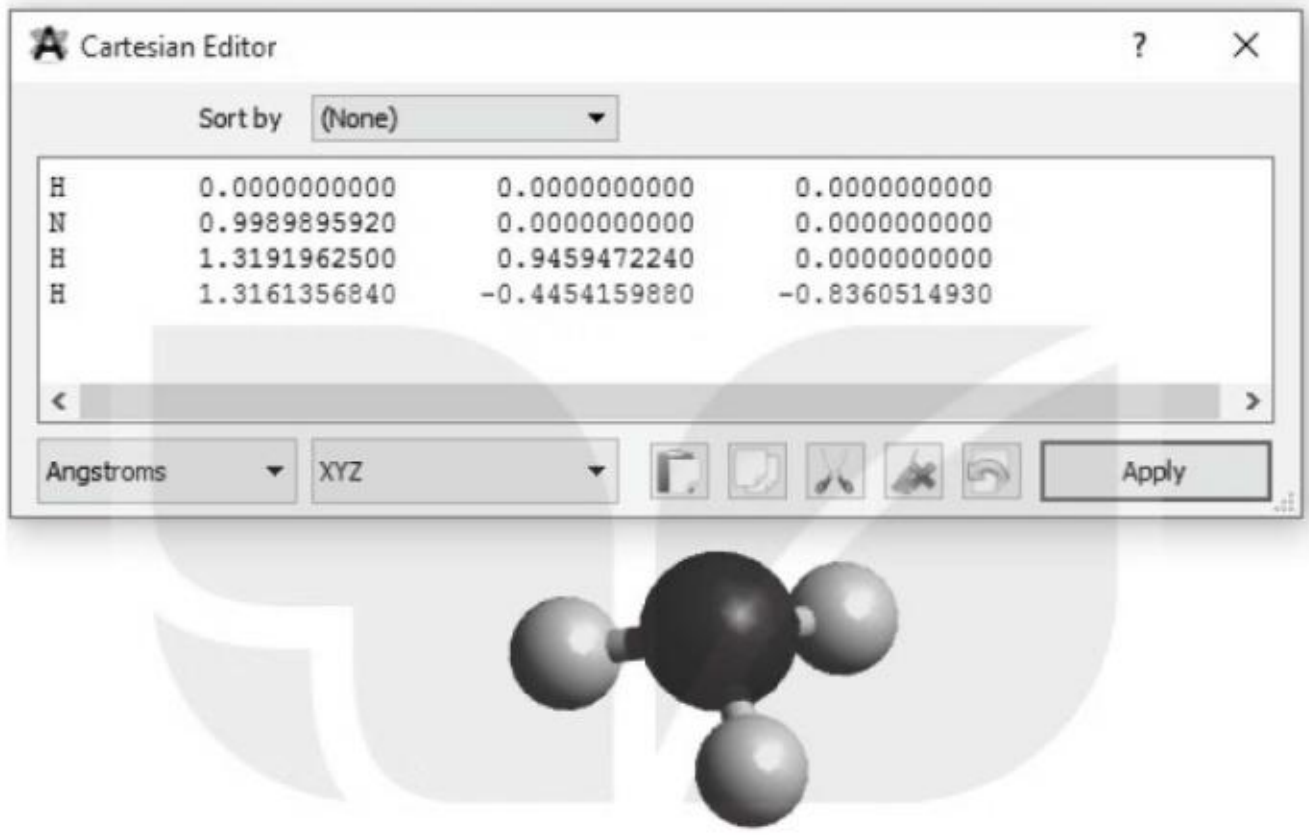
C 1.10 1 0.0 0 0.0 0 1 0 0

H 1.10 1 105.0 1 0.0 0 2 1 0

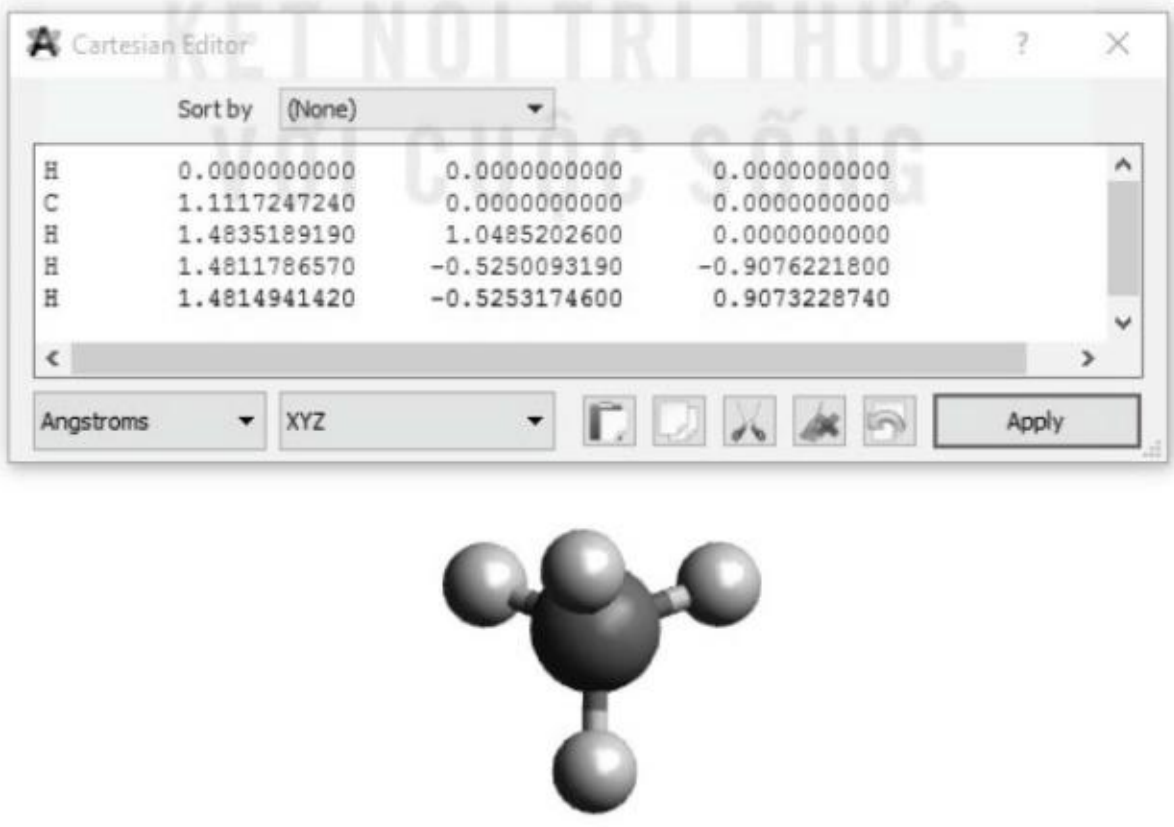
H 1.10 1 105.0 1 120.0 1 2 3 1

H 1.10 1 105.0 1 -120.0 1 2 3 1

3. Cấu trúc hình học của phân tử NH_3 và CH_4 hiển thị bằng phần mềm Avogadro được thể hiện ở hình 11.1.a), 11.1.b) dưới đây.



a)



b)

Hình 11.1. *a) Cấu trúc hình học của phân tử NH_3; b) cấu trúc hình học phân tử CH_4*

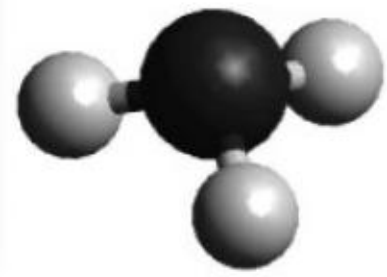
(Hình minh hoạ được chụp từ phần mềm Avogadro)

KẾT NỐI TRI THỨC VỚI CUỘC SỐNG

Các tham số cấu trúc của phân tử NH_3 và CH_4 hiển thị bằng phần mềm Avogadro được thể hiện ở hình 11.2a), 11.2b) dưới đây.

Angle Properties

	Type	Start Atom	Vertex	End Atom	Angle (°)
Angle 1	HNH	H1	N	H3	108.5
Angle 2	HNH	H2	N	H3	108.6
Angle 3	HNH	H1	N	H2	108.7



Bond Properties

	Type	Start Atom	End Atom	Bond Order	Rotatable	Length (Å)
Bond 1	H-N	H3	N	1	No	0.998979
Bond 2	H-N	H1	N	1	No	0.99899
Bond 3	N-H	N	H2	1	No	0.998673

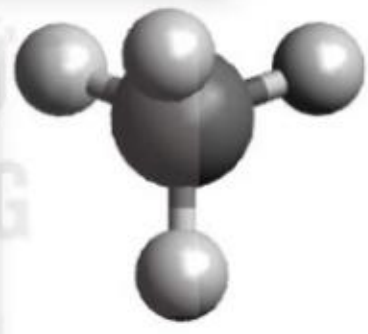
a)

Bond Properties

	Type	Start Atom	End Atom	Bond Order	Rotatable	Length (Å)
Bond 1	H-C	H	C	1	No	1.11171
Bond 2	H-C	H	C	1	No	1.11172
Bond 3	C-H	C	H	1	No	1.11249
Bond 4	C-H	C	H	1	No	1.11172

Angle Properties

	Type	Start Atom	Vertex	End Atom	Angle (°)
Angle 1	HCH	H	C	H	109.4101
Angle 2	HCH	H	C	H	109.5138
Angle 3	HCH	H	C	H	109.4282
Angle 4	HCH	H	C	H	109.5240
Angle 5	HCH	H	C	H	109.4273
Angle 6	HCH	H	C	H	109.5238



b)

Hình 11.2. *Hiển thị các tham số cấu trúc của a) phân tử NH_3; b) phân tử CH_4*

(Hình minh hoạ được chụp từ phần mềm Avogadro)

Chúng ta thấy độ dài liên kết O—H (0,96 Å, xem Hoạt động 4) nhỏ hơn độ dài liên kết N—H (0,999 Å) và nhỏ hơn độ dài liên kết C—H (1,11 Å). Góc liên kết HOH (103,5°, xem Hoạt động 4) nhỏ hơn góc liên kết HNH ($108,5^0$), và nhỏ hơn góc liên kết HCH (109,5°).

Các độ dài liên kết và góc liên kết tính được có thể có sai khác so với số liệu thực nghiệm, nhưng độ dài liên kết X—H giảm dần khi X lần lượt là C, N đến O; góc liên kết HXH cũng giảm dần theo chiều tương tự.

VI GỢI Ý KIỂM TRA, ĐÁNH GIÁ

Đề bài

1. Tạo file dữ liệu và thực hiện phép tính tối ưu hoá cấu trúc của phân tử, tính nhiệt hình thành của phân tử SiH_4, PH_3, H_2S bằng phần mềm MOPAC.

2. Sử dụng kết quả tính tối ưu hoá cấu trúc để thấy được cấu trúc hình học, hiển thị được các tham số cấu trúc của phân tử SiH_4, PH_3, H_2S. Từ đó thấy được xu hướng biến đổi độ dài liên kết H–X và góc liên kết HXH (X là Si, P, S).

Đánh giá

Câu 1 hoặc Câu 2: Đánh giá NL VDKT ở mức 1.

Cả 2 câu 1, 2: Đánh giá NL VDKT ở mức 2.

KẾT NỐI TRI THỨC
VỚI CUỘC SỐNG

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 – Tổng Giám đốc NGUYỄN TIẾN THANH

Chịu trách nhiệm nội dung:

Tổng biên tập PHẠM VĨNH THÁI

Biên tập lần đầu: NGUYỄN THANH GIANG – NGUYỄN VĂN NGUYÊN

Biên tập tái bản: NGUYỄN VĂN NGUYÊN – PHÙNG THỊ PHƯƠNG LIÊN

Thiết kế sách: NGUYỄN THÀNH TRUNG

Trình bày bìa: NGUYỄN BÍCH LA

Sửa bản in: PHẠM THỊ TÌNH – PHAN THỊ THANH BÌNH

Chế bản: CÔNG TY CP DỊCH VỤ XUẤT BẢN GIÁO DỤC HÀ NỘI

Bản quyền thuộc Nhà xuất bản Giáo dục Việt Nam.

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 – SÁCH GIÁO VIÊN

Mã số:

In ..... cuốn (QĐ ..... SLK), khổ 19 x 26,5cm.

In tại Công ty cổ phần in .....

Số ĐKXB: ...../CXBIPH/...../GD

Số QĐXB: ..... / QĐ-GD ngày ... tháng ... năm ...

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

Mã số ISBN: .....



HUÂN CHƯƠNG HỒ CHÍ MINH

BỘ SÁCH GIÁO VIÊN LỚP 10 – KẾT NỐI TRI THỨC VỚI CUỘC SỐNG

1. Ngữ văn 10, tập một – SGV
2. Ngữ văn 10, tập hai – SGV
3. Chuyên đề học tập Ngữ văn 10 – SGV
4. Toán 10 – SGV
5. Chuyên đề học tập Toán 10 – SGV
6. Lịch sử 10 – SGV
7. Chuyên đề học tập Lịch sử 10 – SGV
8. Địa lí 10 – SGV
9. Chuyên đề học tập Địa lí 10 – SGV
10. Giáo dục Kinh tế và Pháp luật 10 – SGV
11. Chuyên đề học tập Giáo dục Kinh tế và Pháp luật 10 – SGV
12. Vật lí 10 – SGV
13. Chuyên đề học tập Vật lí 10 – SGV
14. Hoá học 10 – SGV
15. Chuyên đề học tập Hoá học 10 – SGV
16. Sinh học 10 – SGV
17. Chuyên đề học tập Sinh học 10 – SGV
18. Công nghệ 10 – Thiết kế và Công nghệ – SGV
19. Chuyên đề học tập Công nghệ 10 – Thiết kế và Công nghệ – SGV
20. Công nghệ 10 – Công nghệ trồng trọt – SGV
21. Chuyên đề học tập Công nghệ 10 – Công nghệ trồng trọt – SGV
22. Tin học 10 – SGV
23. Chuyên đề học tập Tin học 10 – Tin học ứng dụng – SGV
24. Chuyên đề học tập Tin học 10 – Khoa học máy tính – SGV
25. Mĩ thuật 10 – SGV
26. Chuyên đề học tập Mĩ thuật 10 – SGV
27. Âm nhạc 10 – SGV
28. Chuyên đề học tập Âm nhạc 10 – SGV
29. Hoạt động trải nghiệm, hướng nghiệp 10 – SGV
30. Giáo dục thể chất 10 – Bóng chuyền – SGV
31. Giáo dục thể chất 10 – Bóng đá – SGV
32. Giáo dục thể chất 10 – Cầu lông – SGV
33. Giáo dục thể chất 10 – Bóng rổ – SGV
34. Giáo dục quốc phòng và an ninh 10 – SGV
35. Tiếng Anh 10 – Global Success – SGV

Website: https://www.nxbgd.vn

KẾT NỐI TRI THỨC VỚI CUỘC SỐNG