

ĐỀ CƯƠNG HỌC BỔ SUNG CHUYÊN ĐỀ HÓA HỌC 10

(Dành cho học sinh học chuyển đổi môn)

CHUYÊN ĐỀ 1: CƠ SỞ HÓA HỌC

BÀI 1: LIÊN KẾT HÓA HỌC

A. YÊU CẦU CẦN ĐẠT:

- Viết được công thức Lewis, sử dụng được mô hình VSEPR để dự đoán hình học cho một số phân tử đơn giản.
- Trình bày được khái niệm về sự lai hoá AO (sp , sp^2 , sp^3), vận dụng giải thích liên kết trong một số phân tử (CO_2 ; BF_3 ; CH_4 ; NH_3 . H_2O ...)

B. TÓM TẮT LÝ THUYẾT:

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

2. Hình học phân tử:

- ❖ Liên kết cộng hóa trị là liên kết có tính định hướng trong không gian, làm phân tử có hình dạng nhất định, đó là hình học phân tử.
- ❖ **Mô hình VSEPR**: dựa vào sự đẩy nhau giữa các cặp electron chung và các cặp electron riêng của nguyên tử trung tâm trong công thức Lewis để dự đoán hình dạng phân tử hay ion.

Công thức VSEPR: AX_nE_m

trong đó A là nguyên tử trung tâm, X là nguyên tử xung quanh, E là cặp e riêng của A

n là số nguyên tử X đã liên kết với A

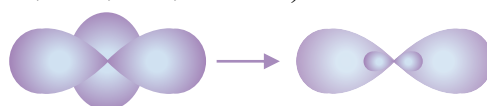
m là số cặp e riêng của A

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

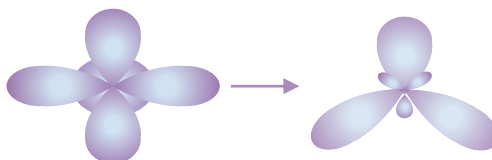
3. **Lai hóa orbital** là sự tổ hợp các orbital của cùng một nguyên tử để tạo thành các orbital mới có năng lượng bằng nhau, hình dạng và kích thước giống nhau, nhưng định hướng khác nhau trong không gian. Điều kiện: Các orbital nguyên tử (AO) có năng lượng gần bằng nhau. Số AO lai hóa bằng tổng số AO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

❖ **Một số dạng lai hóa cơ bản:**

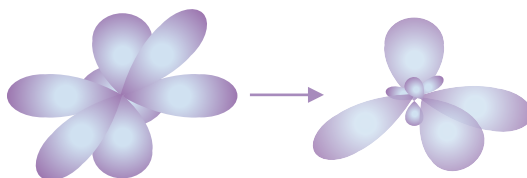
* **Lai hóa sp** : 1AO ns tổ hợp với 1AO np tạo ra 2AO lai hóa sp có góc liên kết 180° , còn được gọi là **lai hóa đường thẳng**. (vd: $BeCl_2$, CO_2 , CS_2 , BeH_2 ...)



* **Lai hóa sp^2** : 1AO ns tổ hợp với 2AO np tạo ra 3AO lai hóa sp^2 hướng về 3 đỉnh của một tam giác đều, góc tạo bởi hai trục của hai AO là 120° , còn được gọi là **lai hóa tam giác**. (vd: BF_3 , SO_3 , ...)



* **Lai hóa sp^3** : 1AO ns tổ hợp với 3AO np tạo ra 4AO lai hóa sp^3 hướng về 4 đỉnh của một tứ diện đều, góc tạo bởi hai trục của hai AO là $109,5^\circ$, còn được gọi là **lai hóa tứ diện**. (CH_4 , ...)



4. Cách viết công thức Lewis

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

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

Bước 3: Hoàn thiện octet cho các nguyên tử có độ âm điện lớn hơn (trừ hydrogen) trong sơ đồ. Tính số electron hóa trị chưa tham gia liên kết, nếu electron hóa trị còn dư, đặt số electron hóa trị dư trên nguyên tử trung tâm và kiểm tra nguyên tử trung tâm đã đạt quy tắc octet chưa. Nếu chưa thì chuyển sang bước 4.

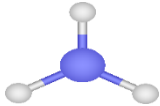
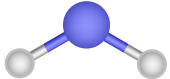
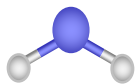
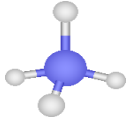
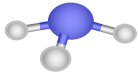
Bước 4: Chuyển cặp electron chưa liên kết trên nguyên tử trung tâm thành electron liên kết sao cho nguyên tử trung tâm thỏa mãn quy tắc octet.

Công thức phân tử	Công thức electron	Công thức Lewis
Cl_2	$\text{:}\ddot{\text{Cl}}\text{:}\ddot{\text{Cl}}\text{:}$	$\text{:}\ddot{\text{Cl}}\text{--}\ddot{\text{Cl}}\text{:}$
N_2	$\text{:}\text{N}:::\text{N}:$	$\text{:}\text{N}\equiv\text{N}:$
HCl	$\text{H}:\ddot{\text{Cl}}:$	$\text{H--}\ddot{\text{Cl}}:$
H_2O	$\text{H}:\ddot{\text{O}}:\text{H}$	$\text{H--}\ddot{\text{O}}\text{--}\text{H}$
H_2S	$\text{H}:\ddot{\text{S}}:\text{H}$	$\text{H--}\ddot{\text{S}}\text{--}\text{H}$
CO_2	$\ddot{\text{O}}::\text{C}::\ddot{\text{O}}$	$\ddot{\text{O}}=\text{C}=\ddot{\text{O}}$
CH_4	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \vdots \\ \text{H}:\text{C}:\text{H} \\ \vdots \\ \text{H} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{H--C--H} \\ \\ \text{H} \end{array}$
NH_3	$\begin{array}{c} \text{H}:\ddot{\text{N}}:\text{H} \\ \vdots \\ \text{H} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{H--}\ddot{\text{N}}\text{--}\text{H} \\ \\ \text{H} \end{array}$
SO_2	$\ddot{\text{O}}::\ddot{\text{S}}::\ddot{\text{O}}$	$\ddot{\text{O}}=\ddot{\text{S}}=\ddot{\text{O}}$
SO_3	$\begin{array}{c} \ddot{\text{O}}::\ddot{\text{S}}::\ddot{\text{O}}: \\ \vdots \\ \text{:}\ddot{\text{O}}\text{:} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{:}\ddot{\text{O}}=\ddot{\text{S}}=\ddot{\text{O}}\text{:} \\ \parallel \\ \text{:}\ddot{\text{O}}\text{:} \end{array}$
C_2H_6	$\begin{array}{cc} \text{H} & \text{H} \\ \vdots & \vdots \\ \text{H}:\text{C} & :\text{C}:\text{H} \\ \vdots & \vdots \\ \text{H} & \text{H} \end{array}$	$\begin{array}{cc} \text{H} & \text{H} \\ & \\ \text{H--C} & \text{--C--H} \\ & \\ \text{H} & \text{H} \end{array}$
C_2H_4	$\begin{array}{cc} \text{H} & \text{H} \\ \vdots & \vdots \\ \text{H}:\text{C} & ::\text{C}:\text{H} \\ \vdots & \vdots \\ \text{H} & \text{H} \end{array}$	$\begin{array}{cc} \text{H} & \text{H} \\ & \\ \text{H--C} & =\text{C--H} \\ & \\ \text{H} & \text{H} \end{array}$
C_2H_2	$\text{H}:\text{C}:::\text{C}:\text{H}$	$\text{H--C}\equiv\text{C--H}$

5. Dự đoán hình học phân tử:

Bước 1: Viết công thức phân tử dưới dạng AX_nE_m với A là nguyên tử trung tâm, X là nguyên tử xung quanh (phối tử), n là số nguyên tử X đã liên kết với A, E là cặp electron riêng của A, m là số cặp electron riêng của A.

Bước 2: Dựa vào công thức viết được, đối chiếu với bảng sau và suy ra dạng hình học phân tử:

Công thức AX_nE_m	Công thức Lewis	Dạng hình học	Ví dụ	Trạng thái lai hóa của nguyên tử trung tâm
AX_2E_0	$\begin{array}{c} \ddot{O}::C::\ddot{O} \\ \\ \ddot{S}=C=\ddot{S} \\ \\ :\ddot{Cl}-Be-\ddot{Cl}: \end{array}$	Đường thẳng 	$CO_2, CS_2, BeCl_2$ (góc liên kết 180°)	sp
AX_3E_0	$\begin{array}{c} :\ddot{F}-B-\ddot{F}: \\ \\ :\ddot{F}: \\ \\ :\ddot{O}=S=\ddot{O}: \\ \\ :\ddot{O}: \end{array}$	Tam giác đều 	BF_3, SO_3 (góc liên kết 120°)	sp^2
AX_2E_1	$\ddot{O}::\ddot{S}::\ddot{O}$	Hình chữ V (gấp khúc) 	SO_2 (góc liên kết $<120^\circ$)	sp^2
AX_2E_2	$H-\ddot{O}-H$	Hình chữ V (gấp khúc) 	H_2O (góc liên kết $109,5^\circ$)	sp^3
AX_4E_0	$\begin{array}{c} H \\ \\ H-C-H \\ \\ H \end{array}$	Tứ diện 	CH_4 (góc liên kết $109,5^\circ$)	sp^3
AX_3E_1	$\begin{array}{c} :\ddot{H}-\ddot{N}-\ddot{H} \\ \\ :\ddot{H}: \\ \\ :\ddot{Cl}-\ddot{P}-\ddot{Cl}: \\ \\ :\ddot{Cl}: \end{array}$	Hình chóp tam giác 	NH_3, PCl_3 (góc liên kết $<109,5^\circ$)	sp^3

D. Phân tử SO_3 có dạng hình học phân tử là tam giác đều.

D. 4.

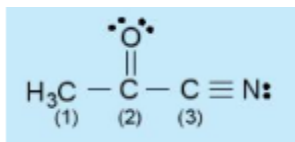
D. 4.

D. PCl_3 , BeCl_2 .

D. PCl_3 , BeCl_2 .

D. BÀI TẬP TỰ LUẬN

Câu 2. Các nguyên tử carbon (1), (2), (3) trong hình bên ở những trạng thái lai hóa nào?



b) Phân tử nào không phân cực, phân tử nào phân cực? Vì sao?

-----HẾT-----

BÀI 2 : PHẢN ỨNG HẠT NHÂN

A. YÊU CẦU CẦN ĐẠT :

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

B. TÓM TẮT LÝ THUYẾT

I. Phóng xạ tự nhiên: là hiện tượng các ngổ tự phát ra tia phóng xạ, không do tác động từ bên ngoài.

VD : ${}_{92}^{238}\text{U} \rightarrow {}_{86}^{222}\text{Rn} + \text{các tia bức xạ.}$

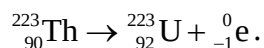
1. Phương trình tổng quát: Hạt nhân mẹ $\rightarrow$ Hạt nhân con + tia bức xạ

2. Tia phóng xạ gồm các hạt và bức xạ điện từ

- Dòng hạt α (hạt nhân tử ${}_2^4\text{He}$) mang điện tích dương
- Dòng hạt β là hạt ${}_{-1}^0\text{e}$ mang điện tích âm.
- Dòng hạt γ không mang điện.

3. Tia γ không bị lệch trong trường điện vì tia γ là dòng các hạt không mang điện tích.

4. Ví dụ: ${}_{92}^{238}\text{U} \rightarrow {}_Z^A\text{Th} + {}_2^4\text{He}$

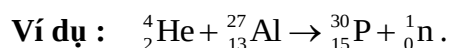


- Trong quá trình phóng xạ , số khối và điện tích được bảo toàn

II. Phản ứng hạt nhân: là phản ứng có sự biến đổi ở hạt nhân nguyên tử . Phản ứng hạt nhân không phải là pư hóa học

- Phóng xạ tự nhiên là một loại pư hạt nhân .
- Phản ứng hạt nhân tuân theo định luật bảo toàn số khối và bảo toàn điện tích.

* Phóng xạ nhân tạo là quá trình biến đổi hạt nhân không tự phát, gây ra bởi tác động bên ngoài lên hạt nhân , đồng thời phát ra tia phóng xạ



* **Định luật bảo toàn số khối và bảo toàn điện tích**

Đối với phản ứng hạt nhân có dạng: ${}_{Z_1}^{A_1}\text{A} + {}_{Z_2}^{A_2}\text{B} \rightarrow {}_{Z_3}^{A_3}\text{C} + {}_{Z_4}^{A_4}\text{D}.$

+ Bảo toàn số khối: $A_1 + A_2 = A_3 + A_4.$

+ Bảo toàn điện tích: $Z_1 + Z_2 = Z_3 + Z_4$

III. Ứng dụng của đồng vị phóng xạ và pư hạt nhân :

♦) Trong nghiên cứu khoa học

- Xác định tuổi của cổ vật
- Nghiên cứu bản chất của vật chất

♦) Trong y học

- Chuẩn đoán bệnh qua hình ảnh
- Trị bệnh ung thư
- Khử trùng

♦) Trong sản xuất và đời sống

- Các lò phản ứng hạt nhân được sử dụng với mục đích cung cấp năng lượng (thay than đá, dầu mỏ,...) trong các nhà máy phát điện, tàu ngầm,..
- Bức xạ có thể điều khiển có thể gây lên biến đổi gen theo hướng có lợi.

C. BÀI TẬP TRẮC NGHIỆM

Câu 1. Phóng xạ tự nhiên là hiện tượng

- A. các nguyên tố tự phát ra tia phóng xạ, không do tác động từ bên ngoài.
- B. hạt nhân nguyên tử không bền vững bị biến đổi thành hạt nhân nguyên tử khác.
- C. biến đổi hạt nhân không tự phát, gây ra bởi tác động bên ngoài lên hạt nhân, đồng thời phát ra tia phóng xạ.
- D. hóa học, phát ra tia phóng xạ, đồng thời giải phóng năng lượng.

Câu 2. Phát biểu nào sau đây **sai**?

- A. Phản ứng hạt nhân tuân theo định luật bảo toàn số khối.
- B. Phản ứng hạt nhân tuân theo định luật bảo toàn điện tích.
- C. Phóng xạ tự nhiên không phải là một loại phản ứng hạt nhân.
- D. Phản ứng nhiệt hạch là một loại phản ứng hạt nhân.

Câu 3. Phát biểu nào sau đây **sai**?

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

Câu 4. Phản ứng hạt nhân nào sau đây là phóng xạ tự nhiên?

- A. ${}^{238}_{92}\text{U} \rightarrow {}^{234}_{90}\text{Th} + {}^4_2\text{He}$.
- B. ${}^{238}_{92}\text{U} + {}^1_0\text{n} \rightarrow {}^{239}_{93}\text{Np} + {}^0_{-1}\beta$.
- C. ${}^{14}_7\text{N} + {}^1_0\text{n} \rightarrow {}^{14}_6\text{C} + {}^1_1\text{p}$.
- D. ${}^{26}_{12}\text{Mg} + {}^1_0\text{n} \rightarrow {}^{23}_{10}\text{Ne} + {}^4_2\text{He}$.

Câu 5. Phản ứng hạt nhân nào sau đây **không** phải là phóng xạ tự nhiên?

- A. ${}^{234}_{90}\text{Th} \rightarrow {}^{234}_{91}\text{Pa} + {}^0_{-1}\text{e}$.
- B. ${}^{226}_{88}\text{Ra} \rightarrow {}^{222}_{86}\text{Rn} + {}^4_2\text{He}$.
- C. ${}^{14}_7\text{N} + {}^1_0\text{n} \rightarrow {}^{14}_6\text{C} + {}^1_1\text{p}$.
- D. ${}^{14}_6\text{C} \rightarrow {}^{14}_7\text{N} + {}^0_{-1}\text{e}$.

Câu 6. Phản ứng hạt nhân nào sau đây là phóng xạ nhân tạo?

- A. ${}^{226}_{88}\text{Ra} \rightarrow {}^{222}_{86}\text{Rn} + {}^4_2\alpha$.
- B. ${}^{185}_{74}\text{W} \rightarrow {}^{181}_{72}\text{Hf} + {}^4_2\alpha + {}^0_0\gamma$.
- C. ${}^{238}_{92}\text{U} \rightarrow {}^{234}_{90}\text{Th} + {}^4_2\text{He}$.
- D. ${}^4_2\text{He} + {}^{27}_{13}\text{Al} \rightarrow {}^{30}_{15}\text{P} + {}^1_0\text{n}$.

Câu 7. Phản ứng hạt nhân nào sau đây **không** phải là phóng xạ nhân tạo?

- A. ${}^4_2\text{He} + {}^{10}_5\text{B} \rightarrow {}^{13}_7\text{N} + {}^1_0\text{n}$.
- B. ${}^{185}_{74}\text{W} \rightarrow {}^{181}_{72}\text{Hf} + {}^4_2\alpha + {}^0_0\gamma$.
- C. ${}^4_2\text{He} + {}^{24}_{12}\text{Mg} \rightarrow {}^{27}_{14}\text{Si} + {}^1_0\text{n}$.
- D. ${}^1_0\text{n} + {}^{59}_{27}\text{Co} \rightarrow {}^{60}_{28}\text{Ni} + {}^0_{-1}\text{e}$.

Câu 8. Cho phản ứng hạt nhân sau: ${}^{40}_{19}\text{K} + {}^A_Z\text{X} \rightarrow {}^{40}_{18}\text{Ar}$. X là hạt nào sau đây?

- A. ${}^4_2\text{He}$.
- B. ${}^0_{-1}\text{e}$.
- C. ${}^1_0\text{n}$.
- D. ${}^1_1\text{p}$.

Câu 9. Phương trình phản ứng hạt nhân của quá trình phóng xạ một hạt β của nguyên tử ${}^{32}_{15}\text{P}$ là

- A. ${}^{32}_{15}\text{P} \rightarrow {}^{32}_{16}\text{S} + {}^0_{-1}\beta$.
- B. ${}^{32}_{15}\text{P} \rightarrow {}^{32}_{14}\text{Si} + {}^0_{-1}\beta$.
- C. ${}^{32}_{15}\text{P} \rightarrow {}^{33}_{15}\text{P} + {}^0_{-1}\beta$.
- D. ${}^{32}_{15}\text{P} \rightarrow {}^{31}_{15}\text{P} + {}^0_{-1}\beta$.

Câu 10. Phương trình phản ứng hạt nhân nào sau đây **sai**?

- A. ${}^{99}_{42}\text{Mo} \rightarrow {}^{99}_{43}\text{Tc} + {}^0_{-1}\beta$.
- B. ${}^{223}_{90}\text{Th} \rightarrow {}^{223}_{92}\text{U} + {}^0_{-1}\text{e}$.
- C. ${}^{43}_{19}\text{K} \rightarrow {}^{43}_{20}\text{Ca} + {}^0_{-1}\text{e}$.
- D. ${}^{32}_{15}\text{P} \rightarrow {}^{32}_{16}\text{S} + {}^0_{-1}\text{e}$.

Câu 11. Trong một phản ứng hạt nhân có sự bảo toàn

- A. khối lượng.
- B. số proton.
- C. số neutron.
- D. số khối.

Câu 12. Trong quá trình phân rã hạt nhân ${}^{226}_{88}\text{Ra}$ thành hạt nhân ${}^{222}_{86}\text{Rn}$, đã giải phóng ra hạt nào sau đây?

- A. Neutron.
- B. Hạt nhân helium.
- C. Electron.
- D. Proton.

Câu 13. Cho phản ứng hạt nhân sau: ${}^{239}_{93}\text{Np} \rightarrow {}^A_Z\text{Pu} + {}^0_{-1}\text{e}$. Điện tích của hạt nhân Pu thu được là

- A. 238. B. 240. C. 92. D. 94.

Câu 14. Cho phản ứng hạt nhân sau: ${}^{22}_{11}\text{Na} \rightarrow {}^A_Z\text{X} + {}^0_{+1}\text{e}$. Số neutron của hạt nhân X là

- A. 11. B. 12. C. 9. D. 10.

Câu 15. Cho phản ứng hạt nhân sau: ${}^A_Z\text{X} \rightarrow {}^{35}_{17}\text{Cl} + {}^0_{-1}\text{e}$. X là nguyên tố nào sau đây?

- A. Chlorine (Z=17). B. Argon (Z=18).
C. Bromine (Z=35). D. Lưu huỳnh (Z=16).

Câu 16. Cho phản ứng hạt nhân sau: ${}^{242}_{94}\text{Pu} + {}^{22}_{10}\text{Ne} \rightarrow 4{}_0^1\text{n} + \text{X}$. X là nguyên tử nào?

- A. ${}^{260}_{100}\text{Fm}$. B. ${}^{260}_{104}\text{Rf}$. C. ${}^{263}_{104}\text{Rf}$. D. ${}^{263}_{100}\text{Fm}$.

Câu 17. Cho các phát biểu dưới đây về phản ứng hạt nhân sau: ${}^{235}_{92}\text{U} + {}^1_0\text{n} \rightarrow {}^{103}_{42}\text{Mo} + \text{X} + 2{}_0^1\text{n}$.

- (1) Phản ứng trên là một dạng phóng xạ nhân tạo.
(2) X là nguyên tử ${}^{131}_{50}\text{Sn}$.
(3) Số hạt cơ bản trong hạt nhân của X là 181.
(4) Số hạt neutron trong nguyên tử X là 81.
(5) Số hạt mang điện trong hạt nhân nguyên tử X là 50.

Số phát biểu đúng là

- A. 1. B. 2. C. 3. D. 4.

Câu 18. Cho phản ứng hạt nhân sau: ${}^{10}_5\text{B} + {}^A_Z\text{X} \rightarrow {}^8_4\text{Be} + \alpha$. X là nguyên tử nào sau đây?

- A. ${}^4_2\text{He}$. B. ${}^1_1\text{H}$. C. ${}^2_1\text{H}$. D. ${}^3_2\text{He}$.

Câu 19. Cho phản ứng hạt nhân sau: ${}_0^1\text{n} + {}^{235}_{92}\text{U} \rightarrow {}^{95}_{42}\text{O} + {}^{139}_{57}\text{La} + 2{}_Z^A\text{X} + 7{}_0^0\text{e}$. X là hạt nào sau đây?

- A. ${}^4_2\text{He}$ B. ${}^2_1\text{H}$. C. ${}_0^1\text{n}$. D. ${}_1^1\text{p}$.

Câu 20. Cho phản ứng hạt nhân sau: ${}^{63}_{28}\text{Ni} \rightarrow {}^A_Z\text{X} + {}^0_{-1}\text{e}$. Phát biểu nào sau đây đúng?

- A. Số khối của X là 62. B. Điện tích hạt nhân của X là 27.
C. Phản ứng trên là phản ứng nhiệt hạch. D. Số hạt neutron trong hạt nhân X là 34.

D. BÀI TẬP TỰ LUẬN

Câu 1. Hoàn thành các phương trình hạt nhân sau đây:

- a) ${}^{32}_{15}\text{P} \rightarrow ? + {}^0_{-1}\text{e}$
b) ${}^{43}_{19}\text{K} \rightarrow {}^{43}_{20}\text{Ca} + ?$

Câu 2. Vận dụng định luật bảo toàn số khối và bảo toàn điện tích, hoàn thành các phản ứng hạt nhân:

- a) ${}^{238}_{92}\text{U} \rightarrow {}^A_Z\text{Th} + {}^4_2\text{He}$
b) ${}^{239}_{93}\text{Np} \rightarrow {}^A_Z\text{Pu} + {}^0_{-1}\text{e}$

Câu 3. Phân rã tự nhiên ${}^{232}_{90}\text{Th}$ tạo ra đồng vị bền ${}^{208}_{82}\text{Pb}$, đồng thời giải phóng một số hạt α và β . Xác định số hạt α và β cho quá trình phân rã một hạt nhân ${}^{232}_{90}\text{Th}$.

Bài 3: NĂNG LƯỢNG HOẠT HÓA CỦA PHẢN ỨNG HÓA HỌC

A. YÊU CẦU CẦN ĐẠT:

- Trình bày được khái niệm năng lượng hoạt hóa.
- Nêu được ảnh hưởng của năng lượng hoạt hóa 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.

B. TÓM TẮT LÝ THUYẾT:

I. NĂNG LƯỢNG HOẠT HÓA

1. Khái niệm năng lượng hoạt hóa.



Năng lượng hoạt hóa (E_a) là năng lượng tối thiểu mà các chất phản ứng cần có để phản ứng hóa học có thể xảy ra.

2. Ảnh hưởng của năng lượng hoạt hóa và nhiệt độ tới tốc độ phản ứng

a) Phương trình Arrhenius: biểu diễn sự ảnh hưởng của năng lượng hoạt hóa và nhiệt độ đến tốc độ phản ứng.

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

Trong đó: k : hằng số tốc độ phản ứng.

A : hằng số đặc trưng cho mỗi phản ứng.

$e = 2,7183$.

$R = 8,314 \text{ J/(mol.K)}$ hằng số khí lý tưởng.

T : nhiệt độ theo thang Kelvin.

E_a : năng lượng hoạt hóa của phản ứng (J/mol).

→ Khi năng lượng hoạt hóa E_a lớn, hằng số tốc độ phản ứng k nhỏ, phản ứng xảy ra chậm.

Khi năng lượng hoạt hóa E_a nhỏ, hằng số tốc độ phản ứng k lớn, phản ứng xảy ra nhanh.

b) Tại nhiệt độ T_1 và T_2 , tương ứng với hằng số tốc độ k_1 và k_2 , phương trình Arrhenius được viết lại như sau:

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

→ Khi nhiệt độ tăng, tốc độ phản ứng tăng.

II. CHẤT XÚC TÁC

1. Khái niệm chất xúc tác:

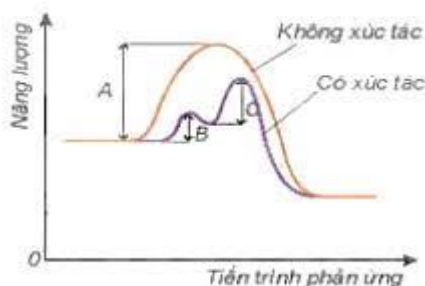
- Chất xúc tác là chất làm tăng tốc độ phản ứng nhưng không bị biến đổi về chất và lượng sau pư.

2. Đặc điểm chất xúc tác.

- Chất xúc tác làm giảm năng lượng hoạt hóa của phản ứng.

- Chất xúc tác làm tăng tốc độ phản ứng và không làm thay đổi chiều của phản ứng hóa học.

- Chất xúc tác có tính chọn lọc, mỗi chất xúc tác thường chỉ có tác dụng đối với phản ứng này mà không có tác dụng với phản ứng khác.



3. Vai trò chất xúc tác.

- Chất xúc tác được sử dụng làm tăng tốc độ các phản ứng hóa học trong sản xuất công nghiệp.
- Quy trình sản xuất có thể được cải tiến bằng cách lựa chọn các chất xúc tác thích hợp.

C. BÀI TẬP TRẮC NGHIỆM

Câu 1. Năng lượng hoạt hóa là:

- A. Năng lượng tối thiểu mà chất phản ứng cần phải có để phản ứng có thể xảy ra.
- B. Năng lượng tối đa mà chất phản ứng cần phải có để phản ứng có thể xảy ra.
- C. Năng lượng mà chất phản ứng có để phản ứng có thể xảy ra.
- D. Năng lượng tối đa mà chất phản ứng có để phản ứng có thể xảy ra

Câu 2. Mối liên hệ giữa nhiệt độ, năng lượng hoạt hóa với hằng số tốc độ phản ứng được biểu thị trong phương trình kinh nghiệm Arrhenius là:

- A. $k = A \cdot e^{\frac{E_a}{RT}}$
- B. $k = A \cdot e^{-\frac{E_a}{T}}$
- C. $k = A \cdot e^{-\frac{E_a}{RT}}$
- D. $\ln k = A \cdot e^{-\frac{E_a}{RT}}$

Câu 3. Phương trình Arrhenius viết lại cho 2 nhiệt độ T_1 và T_2 xác định, ứng với 2 hằng số tốc độ k_1 và k_2 là:

- A. $\ln \frac{k_2}{k_1} = \frac{E_a}{R} \cdot \left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right)$
- B. $\ln \frac{k_2}{k_1} = \frac{E_a}{R} \cdot \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right)$
- C. $\frac{k_2}{k_1} = \frac{E_a}{R} \cdot \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right)$
- D. $\frac{k_2}{k_1} = \frac{E_a}{R} \cdot \left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right)$

Câu 4. Phát biểu nào sau đây đúng?

- A. Năng lượng hoạt hóa là năng lượng của phản ứng tỏa ra.
- B. Tốc độ phản ứng chỉ phụ thuộc vào năng lượng hoạt hóa.
- C. Chất xúc tác làm tăng năng lượng hoạt hóa của phản ứng.
- D. Năng lượng hoạt hóa càng lớn thì tốc độ phản ứng càng nhỏ.

Câu 5. Phát biểu nào sau đây **sai**?

- A. Chất xúc tác có vai trò làm giảm năng lượng hoạt hóa để tăng tốc độ của phản ứng.
- B. Chất xúc tác làm tăng tốc độ của phản ứng hóa học, nhưng vẫn được bảo toàn về khối lượng và chất khi kết thúc phản ứng.
- C. Khi năng lượng hoạt hóa lớn, hằng số tốc độ k nhỏ, tốc độ của phản ứng nhanh.
- D. Năng lượng hoạt hóa là năng lượng tối thiểu mà chất phản ứng cần phải có để phản ứng có thể xảy ra.

Câu 6. Chất xúc tác là:

- A. Chất làm tăng tốc độ phản ứng nhưng có thể bị biến đổi về chất và lượng sau phản ứng.
- B. Chất làm tăng tốc độ phản ứng nhưng không bị biến đổi về lượng sau phản ứng.
- C. Chất làm tăng tốc độ phản ứng nhưng không bị biến đổi về chất sau phản ứng.
- D. Chất làm tăng tốc độ phản ứng nhưng không bị biến đổi về chất và lượng sau phản ứng.

Câu 7. Đặc điểm của chất xúc tác là:

- A. làm tăng tốc độ pư hoá học và cải tiến quy trình sản xuất, tạo nhiều hướng sản phẩm đa dạng.
- B. chỉ được sử dụng làm tăng tốc độ phản ứng trong phòng thí nghiệm.
- C. làm tăng tốc độ phản ứng hoá học tuy nhiên lại làm giảm sự đa dạng của sản phẩm.
- D. làm giảm tốc độ phản ứng hoá học và làm tăng tính chọn lọc của sản phẩm.

Câu 8. Cho các phát biểu sau:

- (1) Chất xúc tác làm giảm năng lượng hoạt hoá của phản ứng.
- (2) Chất xúc tác làm tăng tốc độ phản ứng và thay đổi chiều của phản ứng.
- (3) Chất xúc tác có tính chọn lọc, mỗi chất xúc tác thường chỉ có tác dụng với phản ứng này mà không có tác dụng với phản ứng khác.
- (4) Chất xúc tác làm phản ứng xảy ra theo nhiều giai đoạn và đều có năng lượng hoạt hoá thấp hơn năng lượng hoạt hoá của phản ứng.

Số phát biểu đúng là:

- A. 4 B. 3 C. 2 D. 1

Câu 9. Cho hằng số tốc độ của một phản ứng là 11 /M.s tại nhiệt độ 345°K và hằng số thực nghiệm Arrhenius là 20 /M.s. Năng lượng hoạt hóa của phản ứng trên là:

- A. 1414,8 J/mol B. 1117,8 J/mol C. 1718,8 J/mol D. 1714,8 J/mol

Câu 10. Tìm hằng số tốc độ phản ứng k ở 273°K của phản ứng phân hủy $\text{N}_2\text{O}_5(\text{g}) \rightarrow \text{N}_2\text{O}_4(\text{g}) + \frac{1}{2} \text{O}_2(\text{g})$.

Biết rằng ở 300°K, năng lượng hoạt hóa là 111 kJ/mol và hằng số tốc độ phản ứng là $10^{-10}/\text{s}$

- A. $1,3 \cdot 10^{-11}/\text{s}$ B. $1,3 \cdot 10^{-12}/\text{s}$ C. $1,22 \cdot 10^{-12}/\text{s}$ D. $1,22 \cdot 10^{-11}/\text{s}$

D. BÀI TẬP TỰ LUẬN

Câu 1. Các phản ứng tạo gỉ kim loại có thể xảy ra ngay ở điều kiện nhiệt độ phòng mà không cần đun nóng. Hãy dự đoán năng lượng hoạt hóa của phản ứng là thấp hay cao.

Câu 2. Giả sử 2 phản ứng hóa học khác nhau có cùng E_a , diễn ra ở cùng nhiệt độ. Vậy hằng số tốc độ k của 2 phản ứng đó có luôn bằng nhau không?

Câu 3. Vì sao trong lĩnh vực sản xuất hóa chất, người ta thường sử dụng chất xúc tác? Kể tên một số quá trình sản xuất hóa chất và chất xúc tác được sử dụng mà em biết.

Câu 4. Thực hiện 2 thí nghiệm hòa tan đá vôi vào dung dịch HCl 1M ở cùng một nhiệt độ.

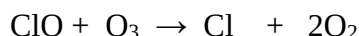
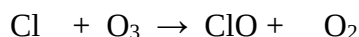
Thí nghiệm 1: Cho 0,5 gam đá vôi dạng bột vào 10 ml dung dịch HCl 1 M.

Thí nghiệm 2: Cho 0,5 gam đá vôi dạng viên vào 10 ml dung dịch HCl 1 M.

a) Tốc độ phản ứng ở thí nghiệm nào nhanh hơn? Giải thích.

b) So sánh năng lượng hoạt hóa của hai phản ứng trên?

Câu 5. Sự suy giảm tầng ozone và lỗ thủng tầng ozone đã gây ra mối lo ngại về việc gia tăng các nguy cơ ung thư da, cháy nắng, mù mắt, đục thủy tinh thể... Tầng ozone ngăn chặn hầu hết các tia cực tím có hại (tia UV) đi qua bầu khí quyển Trái đất. Các phân tử ozone có thể bị phân hủy qua 2 giai đoạn:



Chất xúc tác trong quá trình này là chất nào ?

-----HẾT-----

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

A. YÊU CẦU CẦN ĐẠT:

- Nêu được khái niệm về Entropy S (đại lượng đặc trưng cho độ mất trật tự của hệ).
- Nêu được ý nghĩa của dấu và trị số của biến thiên năng lượng tự do Gibbs (không cần giải thích $\Delta_r G$ là gì, chỉ cần nêu: Để xác định chiều hướng phản ứng, người ta dựa vào biến thiên năng lượng tự do $\Delta_r G$ của phản ứng (ΔG) để dự đoán hoặc giải thích chiều hướng của một phản ứng hoá học.
- Tính được $\Delta_r G^\circ$ theo công thức $\Delta_r G^\circ = \Delta_r H^\circ - T \cdot \Delta_r S^\circ$ từ bảng cho sẵn các giá trị $\Delta_f H^\circ$ và S° các chất.

B. TÓM TẮT LÝ THUYẾT:

I. ENTROPY

1. Khái niệm

- **Entropy** (kí hiệu là S) là đại lượng đặc trưng cho độ mất trật tự của các tiểu phân (phân tử, nguyên tử, ion) trong một hệ ở một trạng thái và điều kiện xác định $\rightarrow$ Entropy càng lớn hệ càng mất trật tự.
- Đơn vị của entropy thường là J/mol.K
- Entropy chuẩn (298°K, 1 bar = 0,99atm) kí hiệu S_{298}°

2. Lưu ý

- Khi **tăng nhiệt độ, entropy của hệ tăng**. Do các phân tử chuyển động hỗn loạn hơn, mức độ mất trật tự của hệ tăng.
- Khi **chuyển trạng thái chất từ rắn sang lỏng và khí, entropy của hệ tăng**. Do liên kết của các hạt càng yếu dao động của các hạt càng mạnh dẫn đến độ mất trật tự của hệ tăng.

II. BIẾN THIÊN ENTROPY TRONG PHẢN ỨNG HÓA HỌC

1. Công thức tính biến thiên entropy

- + Điều kiện bất kì: $\Delta_r S = \sum S(\text{sp}) - \sum S(\text{cđ})$.
- + Điều kiện chuẩn: $\Delta_r S_{298}^\circ = \sum S_{298}^\circ(\text{sp}) - \sum S_{298}^\circ(\text{cđ})$.

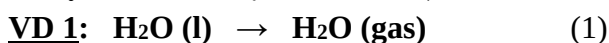
Cho phản ứng tổng quát: $aA + bB \rightarrow cC + dD$

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

Lưu ý:

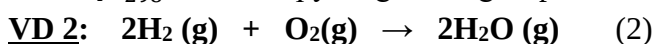
- + Đơn vị của $\Delta_r S$ thường là J/K
- + $\Delta_r S > 0 \rightarrow \sum S(\text{sp}) > \sum S(\text{cđ})$: hệ chuyển từ trạng thái có độ mất trật tự thấp sang trạng thái có độ mất trật tự cao hơn (entropy tăng).
- + $\Delta_r S < 0 \rightarrow \sum S(\text{sp}) < \sum S(\text{cđ})$: hệ chuyển từ trạng thái có độ mất trật tự cao sang trạng thái có độ mất trật tự thấp hơn (entropy giảm).

2. Áp dụng công thức tính $\Delta_r S_{298}^\circ$ của các trường hợp (Số liệu dựa vào bảng 4.1, trang 29, sách Chuyên đề Hóa học 10 - CTST)



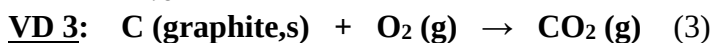
$$\Delta_r S_{298}^\circ = 188,72 - 69,94 = 118,78 \text{ (J/K)}$$

$\Delta_r S_{298}^\circ > 0$: entropy tăng do tăng số phân tử khí $\rightarrow$ làm tăng sự hỗn loạn trong hệ.



$$\Delta_r S_{298}^\circ = 2 \cdot 188,72 - (2 \cdot 130,6 + 205,03) = -88,79 \text{ (J/K)}$$

$\Delta_r S_{298}^\circ < 0$: entropy giảm do giảm số phân tử khí $\rightarrow$ làm giảm sự hỗn loạn trong hệ.



$$\Delta_r S_{298}^\circ = 213,7 - (5,69 + 205,03) = 2,98 \text{ (J/K)}$$

$\Delta_r S_{298}^0 > 0$: entropy tăng không đáng kể do số phân tử khí trước và sau phản ứng bằng nhau $\rightarrow$ mức độ hỗn loạn của các phân tử tăng không đáng kể $\rightarrow$ entropy tăng không đáng kể.

3. Chú ý.

- Các phản ứng hóa học mà:
 - + Làm tăng số mol (số phân tử) khí thường có $\Delta S > 0$
 - + Làm giảm số mol (số phân tử) khí thường có $\Delta S < 0$
 - + Không làm thay đổi số mol (số phân tử) khí hoặc phản ứng không có chất khí sẽ có ΔS nhỏ
- Quá trình hòa tan, bay hơi có $\Delta S > 0$
- Quá trình ngưng tụ, hóa rắn, kết tinh từ dung dịch có $\Delta S < 0$

III. BIẾN THIÊN NĂNG LƯỢNG TỰ DO GIBBS

1. Khái niệm.

- Một phản ứng hóa học có thể tự xảy ra hay không sẽ phụ thuộc vào hai yếu tố:
 - + $\Delta H < 0$: phản ứng tỏa nhiệt (năng lượng của hệ giảm).
 - + $\Delta S > 0$: hệ chuyển từ độ mất trật tự thấp sang độ mất trật tự cao (năng lượng tự do của hệ tăng)
- *Năng lượng tự do Gibbs (kí hiệu G) là đại lượng kết hợp cả hai yếu tố ΔH và ΔS để đánh giá chiều tự xảy ra của phản ứng hóa học.*

2. Công thức tính:

Ở điều kiện chuẩn: $\Delta_r G_T^0 = \Delta_r H_T^0 - T \cdot \Delta_r S_T^0$

Trong đó: $\Delta_r G_T^0$ biến thiên năng lượng tự do Gibbs chuẩn của phản ứng ở nhiệt độ T (kJ/mol)

$\Delta_r H_T^0$ biến thiên enthalpy chuẩn của phản ứng ở nhiệt độ T

$\Delta_r S_T^0$ biến thiên entropy chuẩn của phản ứng ở nhiệt độ T

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

3. Ý nghĩa.

$\Delta_r G_T^0 < 0$: Phản ứng tự xảy ra $\rightarrow$ giá trị $\Delta_r G_T^0$ càng âm, phản ứng càng dễ xảy ra.

$\Delta_r G_T^0 = 0$: Phản ứng đạt trạng thái cân bằng.

$\Delta_r G_T^0 > 0$: Phản ứng không tự xảy ra.

C. BÀI TẬP TRẮC NGHIỆM

Câu 1. Đại lượng đặc trưng cho độ mất trật tự của một hệ ở trạng thái và điều kiện xác định gọi là:

- | | |
|-------------|---------------------------|
| A. Enthalpy | B. Năng lượng tự do Gibbs |
| C. Entropy | D. Năng lượng hoạt hóa |

Câu 2. Entropy là đại lượng đặc trưng cho độ mất trật tự của hệ ở trạng thái và điều kiện xác định. Kí hiệu của biến thiên entropy là:

- | | | | |
|---------------|---------------|---------------|---------------|
| A. ΔS | B. ΔH | C. ΔG | D. ΔT |
|---------------|---------------|---------------|---------------|

Câu 3. Đơn vị của entropy thường là:

- | | | | |
|----------|-------------|---------------------------|---------------------------|
| A. J/mol | B. kJ/mol.K | C. kJ/K.mol ⁻¹ | D. kJ/mol.K ⁻¹ |
|----------|-------------|---------------------------|---------------------------|

Câu 4. Khi so sánh entropy của cùng một chất ở ba trạng thái khác nhau, cùng điều kiện, kết quả nào dưới đây là đúng?

- | | |
|-------------------------|-------------------------|
| A. $S(g) < S(s) < S(l)$ | B. $S(s) < S(l) < S(g)$ |
| C. $S(l) < S(s) < S(g)$ | D. $S(g) < S(l) < S(s)$ |

Câu 5. Đại lượng nào sau đây dùng để dự đoán hoặc giải thích chiều của một phản ứng phù hợp nhất ở điều kiện nhiệt độ, áp suất không đổi?

- | | |
|------------------------|---------------------------|
| A. Biến thiên enthalpy | B. Năng lượng tự do Gibbs |
| C. Biến thiên entropy | D. Năng lượng hoạt hóa |

Câu 6. Năng lượng tự do Gibbs và biến thiên năng lượng tự do Gibbs được kí hiệu lần lượt là:

- A. $G, \Delta G$ B. $H, \Delta H$ C. $S, \Delta S$ D. $T, \Delta T$

Câu 7. Đơn vị của biến thiên năng lượng tự do Gibbs thường là:

- A. kJ/mol B. kJ C. J/mol D. J

Câu 8. Chiều tự xảy ra của một phản ứng hóa học phụ thuộc vào yếu tố nào sau đây?

- A. ΔS B. ΔH
C. ΔH và ΔS D. ΔS và ΔT

Câu 9. Biến thiên năng lượng tự do Gibbs được tính theo công thức nào sau đây?

- A. $\Delta G = T.\Delta H - \Delta S$ B. $\Delta G = \Delta S - T.\Delta H$
C. $\Delta G = \Delta H - T.\Delta S$ D. $\Delta G = T.\Delta S - \Delta H$

Câu 10. Phát biểu nào sau đây đúng:

- A. Entropy càng lớn thì hệ càng ổn định
B. Khi tăng nhiệt độ thì entropy của hệ tăng
C. Một phản ứng có $\Delta H < 0$ thì $\Delta S > 0$
D. Entropy của chất lỏng lớn hơn entropy của chất khí.

Câu 11. Quá trình nào sau đây có biến thiên entropy âm?

- A. Quá trình ngưng tụ hơi nước thành nước mưa.
B. Quá trình nấu chảy sắt thép phế liệu.
C. Nước đá tan ra ở nhiệt độ thường.
D. Quá trình tiêu hóa thức ăn ở dạ dày.

Câu 12. Dãy nào sau đây các chất sắp xếp theo chiều tăng giá trị entropy chuẩn?

- A. $\text{CO}_2(\text{s}) < \text{CO}_2(\text{l}) < \text{CO}_2(\text{g})$ B. $\text{CO}_2(\text{g}) < \text{CO}_2(\text{l}) < \text{CO}_2(\text{s})$
C. $\text{CO}_2(\text{s}) < \text{CO}_2(\text{g}) < \text{CO}_2(\text{l})$ D. $\text{CO}_2(\text{g}) < \text{CO}_2(\text{s}) < \text{CO}_2(\text{l})$

Câu 13. Phản ứng nào dưới đây xảy ra kèm theo sự giảm entropy?

- A. $\text{N}_2(\text{g}) + \text{O}_2(\text{g}) \rightarrow 2\text{NO}(\text{g})$
B. $\text{N}_2\text{O}_4(\text{g}) \rightarrow 2\text{NO}_2(\text{g})$
C. $2\text{CO}(\text{g}) \rightarrow \text{C}(\text{s}) + \text{CO}_2(\text{g})$
D. $2\text{HCl}(\text{aq}) + \text{Fe}(\text{s}) \rightarrow \text{FeCl}_2(\text{aq}) + \text{H}_2(\text{g})$

Câu 14. Biến thiên entropy chuẩn của phản ứng nào sau đây có giá trị dương?

- A. $\text{Ag}^+(\text{aq}) + \text{Br}^-(\text{aq}) \rightarrow \text{AgBr}(\text{s})$
B. $2\text{C}_2\text{H}_6(\text{g}) + 3\text{O}_2(\text{g}) \rightarrow 4\text{CO}_2(\text{g}) + 6\text{H}_2\text{O}(\text{l})$
C. $\text{N}_2(\text{g}) + 3\text{H}_2(\text{g}) \rightarrow 2\text{NH}_3(\text{g})$
D. $2\text{H}_2\text{O}_2(\text{l}) \rightarrow 2\text{H}_2\text{O}(\text{l}) + \text{O}_2(\text{g})$

Câu 15. Biến thiên entropy chuẩn của phản ứng nào sau đây có giá trị âm?

- A. $\text{C}(\text{s}) + \text{CO}_2(\text{g}) \rightarrow 2\text{CO}(\text{g})$
B. $\text{Zn}(\text{s}) + 2\text{HCl}(\text{aq}) \rightarrow \text{ZnCl}_2(\text{aq}) + \text{H}_2(\text{g})$
C. $\text{CaCO}_3(\text{s}) \rightarrow \text{CaO}(\text{s}) + \text{CO}_2(\text{g})$
D. $2\text{H}_2(\text{g}) + \text{O}_2(\text{g}) \rightarrow 2\text{H}_2\text{O}(\text{aq})$

Câu 16. Cho phản ứng hóa học có dạng: $\text{A} \rightarrow 2\text{B} + \text{C}$. Biến thiên entropy chuẩn của phản ứng được tính bằng biểu thức nào sau đây?

- A. $\Delta_r S_{298}^0 = S_{298}^0(\text{A}) - S_{298}^0(\text{B}) - S_{298}^0(\text{C})$ B. $\Delta_r S_{298}^0 = S_{298}^0(\text{B}) + S_{298}^0(\text{C}) - S_{298}^0(\text{A})$
C. $\Delta_r S_{298}^0 = S_{298}^0(\text{A}) - 2S_{298}^0(\text{B}) - S_{298}^0(\text{C})$ D. $\Delta_r S_{298}^0 = 2S_{298}^0(\text{B}) + S_{298}^0(\text{C}) - S_{298}^0(\text{A})$

Câu 17. Một phản ứng hóa học có $\Delta H < 0$; $\Delta S > 0$; $\Delta G < 0$. Phát biểu nào sau đây đúng?

- A. Phản ứng trên tự xảy ra ở điều kiện đã cho. B. Phản ứng trên là phản ứng thu nhiệt.
C. Độ mất trật tự của hệ giảm xuống. D. Phản ứng trên đạt trạng thái cân bằng.

Câu 18. Trường hợp nào sau đây có entropy lớn nhất?

A. 1 mol C(s) ở 25°C

B. 1 mol CH₃Cl(l) ở 25°C

C. 1 mol C₂H₆(g) ở 25°C

D. 1 mol C₆H₆(l) ở 25°C

Câu 19. Một phản ứng thu nhiệt, và không tự xảy ra ở điều kiện xác định. Phản ứng đó sẽ có:

A. $\Delta S > 0$

B. $\Delta H > 0$

C. $\Delta G = 0$

D. $\Delta S < 0$

Câu 20. Cho phản ứng hóa học sau: $2\text{Cu(s)} + \text{O}_2\text{(g)} \rightarrow 2\text{CuO(s)}$.

Biến thiên entropy của phản ứng trên là bao nhiêu? Biết:

Chất	Cu(s)	O ₂ (g)	CuO(s)
S ₂₉₈ ⁰ (J/mol.K)	33,15	205,14	42,63

A. 186,18 J/K

B. 99,03 J/K

C. -186,18 J/K

D. -93,09 J/K

Câu 21. Một phản ứng hóa học có $\Delta H = 119$ kJ; $\Delta S = 263$ J/K. Ở nhiệt độ nào sau đây thì pư sẽ tự xảy ra?

A. 500K

B. 382K

C. 363K

D. 200K

Câu 22. Cho phản ứng hóa học sau xảy ra ở 298K: $\text{SnCl}_4\text{(l)} + 2\text{H}_2\text{O(l)} \rightarrow \text{SnO}_2\text{(s)} + 4\text{HCl(g)}$. Có biến thiên enthalpy và biến thiên entropy ở điều kiện chuẩn lần lượt là 133,0 kJ và 401,5 J/K. Biến thiên năng lượng tự do Gibbs của phản ứng trên là:

A. -252,6 kJ.

B. -13,4 kJ

C. 13,4 kJ

D. 252,6 kJ

Câu 23. Cho phản ứng hóa học: $2\text{H}_2\text{O}_2\text{(l)} \rightarrow 2\text{H}_2\text{O(l)} + \text{O}_2\text{(g)}$ và các dữ liệu sau:

Chất	H ₂ O ₂ (l)	H ₂ O(l)	O ₂ (g)
S ₂₉₈ ⁰ (J/mol.K)	109,6	69,9	205,1
$\Delta_f H_{298}^0$ (kJ/mol)	-187,8	-285,8	0

Biến thiên năng lượng tự do Gibbs chuẩn của phản ứng là:

A. -37700kJ

B. -342,6 kJ

C. -233,5 kJ

D. -157,9 kJ

Câu 24. Dinitrogen tetraoxide (N₂O₄) phân hủy tạo thành nitrogen dioxide (NO₂). Cho biết $\Delta H_{298}^0 = 58,02$ kJ/mol; $\Delta S_{298}^0 = 176,1$ kJ/mol.K. Ở nhiệt độ nào thì phản ứng trên đạt trạng thái cân bằng?

A. 329,5°C

B. 56,5°C

C. 25,0°C

D. 98,5°C

Câu 25. Hydrochloric acid (HCl) phản ứng với sodium hydroxide (NaOH) tạo thành sodium chloride (NaCl) và nước. Biết rằng: $\Delta H_{298}^0 = -56,13$ kJ/mol; $\Delta S_{298}^0 = 79,11$ kJ/mol.K. Cho các phát biểu sau:

(1) Phản ứng trên là phản ứng tỏa nhiệt.

(2) Ở 20°C phản ứng trên có $\Delta G_{298}^0 = -79,31$ kJ.

(3) Phản ứng trên tự xảy ra ở 25°C.

Những phát biểu đúng là:

A. (1), (2), (3)

B. (1), (3)

C. (1), (2)

D. (1)

----- HẾT -----

CHUYÊN ĐỀ 2 :

HÓA HỌC TRONG VIỆC PHÒNG CHỐNG CHÁY, NỔ

BÀI 5 : SƠ LƯỢC VỀ PHẢN ỨNG CHÁY VÀ NỔ

A. YÊU CẦU CẦN ĐẠT:

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

B. TÓM TẮT LÝ THUYẾT:

1. Phản ứng cháy: là phản ứng oxi hóa - khử giữa chất cháy và chất oxi hóa, có tỏa nhiệt và phát ra ánh sáng.

Ví dụ về sự cháy các chất vô cơ và hữu cơ



a) Magnesium



b) Than đá (carbon)



c) Gas (thành phần chính là C_2H_2)

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

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

* **Điều kiện cần:** (1) chất cháy; (2) chất oxi hóa; (3) nguồn nhiệt.

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

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

- Đặc điểm của phản ứng nổ: năng lượng được giải phóng một cách đột ngột dưới áp lực rất cao, tăng nhanh, còn được gọi là sóng nổ hoặc sóng xung kích. Sóng xung kích gây ra thiệt hại lớn cho môi trường xung quanh nó. Ví dụ: như nổ bình gas

Phản ứng nổ được chia thành 2 loại chính:

- + **Nổ vật lý** là quá trình nổ gây ra bởi sự giãn nở rất nhanh về thể tích mà không kèm theo phản ứng hóa học.
Ví dụ: nổ nồi áp suất, nổ lốp xe
- + **Nổ hóa học** là quá trình nổ gây ra bởi phản ứng hóa học diễn ra với tốc độ rất nhanh, tỏa nhiều nhiệt nên gây ra sự tăng thể tích đột ngột.
Ví dụ: Pháo hoa, thuốc súng
- + **Nổ bụi** là vụ nổ gây bởi các hạt bụi rắn có kích thước hạt nhỏ (hầu hết các vật liệu hữu cơ rắn như bột nhựa, bột đường, bột ngũ cốc cũng như bột kim loại,...) với nồng độ đủ lớn, phân tán trong không khí, có khả năng tác dụng với oxygen và tỏa nhiệt mạnh trong không khí bên trong một không gian hạn chế.



Hình ảnh một vụ “nổ bụi” trong nhà xưởng



Hình ngũ giác nổ bụi

3. Những sản phẩm độc hại thường sinh ra trong các phản ứng cháy:

- Hầu hết những sự cố cháy, nổ đều gây ô nhiễm môi trường do các chất độc hại (như CO_2 , CO , HCl , SO_2 ,...) khuếch tán vào không khí hoặc nguồn nước, thấm thấu vào đất, gây nguy hại tới sinh vật và con người trực tiếp hoặc lâu dài.

- Lưu ý trong phản ứng cháy có thể tạo ra khí CO rất độc với con người, ở nồng độ 1,28% CO , con người bất tỉnh sau 2 – 3 hơi thở, chết sau 2 – 3 phút.

C. BÀI TẬP TRẮC NGHIỆM

Câu 1. Nổ bóng bay do bơm quá căng là hiện tượng nổ

- A. vật lí. B. hóa học. C. hạt nhân. D. sinh học.

Câu 2. Phản ứng cháy là phản ứng

- A. oxi hóa – khử. B. trao đổi. C. thế. D. hóa hợp.

Câu 3. Bản chất của phản ứng cháy là:

- A. cần có oxygen. B. sản phẩm tạo ra có mùi hắc.
C. phản ứng luôn không phát sáng. D. phản ứng thu nhiệt.

Câu 4. Thể tích oxygen trong không khí chiếm khoảng

- A. 23%. B. 79%. C. 21%. D. 0%.

Câu 5. Điều kiện cần để phản ứng cháy xảy ra bao gồm:

- A. chất khử, chất xúc tác, nguồn nhiệt. B. chất cháy, chất khử, nguồn nhiệt.
C. chất cháy, chất oxi hoá, nguồn nhiệt. D. chất oxi hoá, chất xúc tác, nguồn nhiệt.

Câu 6. Phản ứng nổ là phản ứng

- A. oxygen hóa – khử có tỏa nhiệt và phát sáng.
B. oxygen hóa – khử có tỏa nhiệt nhưng không phát sáng.
C. xảy ra với tốc độ rất lớn kèm theo sự tăng thể tích đột ngột và tỏa lượng nhiệt lớn.
D. xảy ra với tốc độ rất lớn không kèm theo sự tăng thể tích đột ngột và tỏa lượng nhiệt lớn.

Câu 7. Phản ứng nổ vật lí xảy ra do

- A. vật chất bị nén dưới áp suất cao trong một thể tích.
B. sự giải phóng năng lượng đột ngột và rất nhanh trong phản ứng hóa học.
C. quá trình bốc cháy nhanh của các hạt bụi mịn phân tán trong không khí.
D. sự tăng thể tích đột ngột.

Câu 8. Phản ứng nổ hóa học xảy ra do

- A. vật chất bị nén dưới áp suất cao trong một thể tích.
B. sự giải phóng năng lượng đột ngột và rất nhanh trong phản ứng hóa học.
C. quá trình bốc cháy nhanh của các hạt bụi mịn phân tán trong không khí.
D. phản ứng nhiệt hạch hoặc phản ứng phân hạch.

Câu 9. Nổ hạt nhân xảy ra do

- A. vật chất bị nén dưới áp suất cao trong một thể tích.
B. sự giải phóng năng lượng đột ngột và rất nhanh trong phản ứng hóa học.
C. quá trình bốc cháy nhanh của các hạt bụi mịn phân tán trong không khí.
D. phản ứng nhiệt hạch hoặc phản ứng phân hạch.

Câu 10. “Nổ bụi” là vụ nổ gây ra bởi

- A. vật chất bị nén dưới áp suất cao trong một thể tích.
B. sự giải phóng năng lượng đột ngột và rất nhanh trong phản ứng hóa học.
C. quá trình bốc cháy nhanh của các hạt bụi mịn phân tán trong không khí.
D. phản ứng nhiệt hạch hoặc phản ứng phân hạch.

Câu 11. Khí nào sau đây là nguyên nhân gây ra ngộ độc khi đốt than trong phòng kín?

- A. CO_2 . B. CO . C. SO_2 . D. H_2S .

Câu 12. Khi đốt cháy vật liệu có chứa nitrogen sẽ sinh ra khói có chứa chất X rất độc hại. X là

- A. NH_3 . B. N_2 . C. HCN . D. NO .

Câu 13. Các chất sinh ra trong phản ứng cháy gây ảnh hưởng đến hệ hô hấp, và hệ thống cơ quan thần kinh của con người là

- A. HCN , CO_2 , SO_2 . B. CO , CO_2 , NH_3 . C. CO , H_2S , NO_2 . D. HCl , HBr , HF .

Câu 14. Biểu tượng (1) và (2) sau đây lần lượt cảnh báo nguy hiểm cho



Biểu tượng (1)



Biểu tượng (2)

- A. chất cháy và chất oxi hóa. B. chất oxi hóa và chất cháy.
C. chất oxi hóa và nhiên liệu. D. chất cháy và nhiên liệu.

Câu 15. Điểm khác biệt giữa phản ứng nổ và phản ứng hóa học thông thường là

- A. tỏa nhiều nhiệt. B. tốc độ phản ứng rất nhanh.
C. cần chất xúc tác. D. có thể xảy ra trong bất cứ điều kiện nào.

Câu 16. Ngoài 3 điều kiện cần là tam giác cháy, điều kiện đủ để nổ bụi có thể xảy ra là

- A. nồng độ bụi mịn đủ lớn và không gian đủ kín.
B. nồng độ bụi mịn đủ lớn và không gian mở.
C. nồng độ bụi các kích cỡ vừa phải và không gian kín.
D. nồng độ bụi các kích cỡ vừa phải và không gian mở.

Câu 17. Cho các hiện tượng sau:

- (a) Nổ lốp xe. (b) Pháo hoa. (c) Vụ nổ hạt nhân. (d) Nổ nồi hơi do áp suất cao

Số hiện tượng thuộc phản ứng nổ vật lí là

- A. 1. B. 2. C. 3. D. 4.

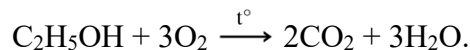
Câu 18. Phát biểu nào sau đây **sai** khi nói về nổ bụi?

- A. Nổ bụi là một trường hợp của nổ vật lí.
B. Nổ bụi gây ảnh hưởng nghiêm trọng các công trình, thiết bị và con người.
C. Nổ bụi gây ra bởi các hạt bụi rắn có kích thước nhỏ với nồng độ đủ lớn.
D. Có 5 yếu tố để hình thành nổ bụi (ngũ giác nổ bụi)

Câu 19. Phản ứng cháy không an toàn là phản ứng **không** có đặc điểm nào sau đây?

- A. Vượt quá phạm vi, mức độ cần thiết B. Người sử dụng hoàn toàn chủ động.
C. Xảy ra bất ngờ. D. Mất kiểm soát.

Câu 20. Phản ứng hóa học xảy ra khi đốt cháy cồn ($\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$) trong khí oxygen như sau:



Vai trò của $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ trong phản ứng trên là

- A. chất khử (chất cháy) B. chất oxi hóa
C. chất bị khử D. nguồn nhiệt

Câu 21. Hỗn hợp nào sau đây là hỗn hợp nổ

- A. H_2 và Cl_2 . B. CO_2 và O_2 . C. Cl_2 và O_2 . D. H_2 và O_2 .

Câu 22. Tại các nước Trung Đông, một lượng lớn trữ lượng dầu mỏ và khí đốt được lưu thông bằng các đường ống dẫn khí nén. Sự bảo trì đường ống dẫn khí luôn được chú trọng để tránh các vụ nổ đường ống dẫn khí nén. Nổ đường ống dẫn khí nén thuộc loại vụ nổ

- A. hạt nhân. B. vật lí. C. hóa học. D. sinh học.



Câu 23. Phát biểu nào sau đây là **sai**

- A. Nổ hạt nhân xảy ra do phản ứng nhiệt hạch hoặc phân hạch, thường gây ra hậu quả vô cùng khủng khiếp với con người.
- B. Những sản phẩm trong phản ứng cháy như CO_2 , SO_2 , CO , HCl , HBr ... thường là những chất độc hại gây ảnh hưởng trực tiếp đến con người và môi trường sống.
- C. Đốt que diêm trong không khí thì xảy ra phản ứng cháy.
- D. Nổ vật lý thường gây ra hậu quả nghiêm trọng hơn nổ hóa học.

Câu 24. Các sản phẩm quá trình cháy thường gây ô nhiễm môi trường đất, nước không khí và ảnh hưởng xấu đến sức khỏe con người như: CO_2 , CO , SO_2 , NO_2 , HCl , khói, bụi mịn, bồ hóng ... Trong số các sản phẩm cháy trên, tác nhân gây mưa axit là

- A. CO_2 , SO_2 B. SO_2 , NO_2 C. CO , NO_2 D. NO_2 , HCl .

Câu 25. Dãy gồm các chất đều tác dụng được với oxygen là

- A. Mg , Al , C , $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$. B. Al , P , Cl_2 , CO .
C. Au , C , S , CO . D. Fe , Pt , C , $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$.

-----**HẾT**-----

BÀI 6: ĐIỂM CHỚP CHÁY, NHIỆT ĐỘ TỰ BỐC CHÁY VÀ NHIỆT ĐỘ CHÁY

A. YÊU CẦU CẦN ĐẠT:

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

B. TÓM TẮT LÝ THUYẾT:

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

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

Bảng. Điểm chớp cháy của một số nguyên liệu lỏng

Nhiên liệu	Điểm chớp cháy (°C)	Nhiên liệu	Điểm chớp cháy (°C)
Xăng	-43	Biodiesel	130
Propane	-105	Dầu hỏa	38 – 72
Pentane	-57	Ethanol	13
Diethyl ether	-45	Methanol	11
Acetone	-20	Isopropyl alcohol	12
Benzene	-11	Pyridine	20
Isooctane	-12	Xylene	27 – 32
n-Hexane	-22	Toluene	4
Tinh dầu trà	53,5	Tinh dầu đinh hương	104
Tinh dầu dừa	52	Tinh dầu nhựa thông	38
Tinh dầu cam	55	Tinh dầu sả chanh	50

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

Bảng. Nhiệt độ tự bốc cháy của một số nguyên liệu lỏng

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

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

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

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

C. BÀI TẬP TRẮC NGHIỆM

Câu 1. Điểm chớp cháy là

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

B. nhiệt độ cao nhất ở áp suất của khí quyển mà một chất lỏng hoặc vật liệu dễ bay hơi tạo thành lượng hơi đủ để bốc cháy trong không khí khi gặp nguồn lửa.

C. nhiệt độ thấp nhất ở áp suất của khí quyển mà một chất lỏng hoặc vật liệu dễ bay hơi tạo thành lượng hơi đủ để bốc cháy trong không khí.

D. nhiệt độ cao nhất ở áp suất của khí quyển mà một chất lỏng hoặc vật liệu dễ bay hơi tạo thành lượng hơi đủ để bốc cháy trong không khí.

Câu 2. Chất lỏng có điểm chớp cháy nhỏ hơn $37,8^{\circ}\text{C}$ được gọi là:

A. Chất lỏng không cháy.

B. Chất lỏng dễ cháy.

C. Chất lỏng khó cháy.

D. Chất lỏng có thể cháy.

Câu 3. Các chất lỏng có điểm chớp cháy trên $37,8^{\circ}\text{C}$ được gọi là

A. chất khí có thể gây cháy.

B. chất lỏng có thể gây cháy.

C. chất rắn có thể gây cháy.

D. dung dịch có thể gây cháy.

Câu 4. Nhiệt độ tự bốc cháy là

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

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

C. nhiệt độ thấp nhất mà tại đó, chất cháy tự cháy khi tiếp xúc với nguồn nhiệt tại điều kiện áp suất khí quyển.

D. nhiệt độ cao nhất mà tại đó, chất cháy tự cháy khi tiếp xúc với nguồn nhiệt tại điều kiện áp suất khí quyển.

Câu 5. Nhiệt độ ngọn lửa là

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

B. nhiệt độ thấp nhất có thể tạo ra bởi phản ứng cháy của chất cháy ở áp suất cao.

C. nhiệt độ cao nhất có thể tạo ra bởi phản ứng cháy của chất cháy ở áp suất thấp.

D. nhiệt độ thấp nhất có thể tạo ra bởi phản ứng cháy của chất cháy ở áp suất khí quyển.

Câu 6. Khi đốt rác, ngọn lửa lan sang khu rừng cạnh đó gây cháy rừng. Hành vi này là vi phạm pháp luật về PCCC, ngọn lửa đó đóng vai trò gì trong việc gây ra cháy rừng

A. cung cấp nguồn nhiệt.

B. cung cấp chất cháy.

C. cung cấp chất oxi hóa.

D. cung cấp khí CO_2 , N_2 gây cháy.

Câu 7. Cho dữ liệu về điểm chớp cháy của một số loại tinh dầu:

Tinh dầu	Tràm trà	Sả chanh	Quế	Oải hương	Cam
Điểm chớp cháy ($^{\circ}\text{C}$)	59	71	87	68	46

Cục Hàng không Việt Nam quy định các loại chất lỏng được coi là hàng hoá nguy hiểm, không được phép mang lên máy bay nếu có điểm chớp cháy dưới 60°C . Trong các loại tinh dầu trên, tinh dầu nào hành khách được phép mang theo là

A. tràm trà, sả chanh, quế.

B. sả chanh, quế, oải hương.

C. quế, oải hương, cam.

D. oải hương, cam, tràm trà.

Câu 8. Cho bảng số liệu sau:

Nhiên liệu	Điểm chớp cháy($^{\circ}\text{C}$)
Biodiesel	130
Formic acid	50
Stearic acid	196
Benzene	- 11

Cho biết chất nào trong các chất trên khó bốc cháy nhất?

- A. Biodiesel. B. Formic acid. C. Stearic acid. D. Benzene.

Câu 9. Cho bảng số liệu nhiệt độ ngọn lửa của một số nhiên liệu cháy trong không khí và cháy trong khí quyển oxygen sau:

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

Loại nhiên liệu và chất oxi hóa nào được chọn để sử dụng cho hàn cắt kim loại phù hợp nhất là

- A. hydrogen và oxygen. B. acetylene và không khí.
C. methane và oxygen. D. acetylene và oxygen.

Câu 10. Từ bảng số liệu về điểm chớp cháy của một số nhiên liệu. Hãy cho biết

Nhiên liệu	Điểm chớp cháy ($^{\circ}\text{C}$)	Nhiên liệu	Điểm chớp cháy ($^{\circ}\text{C}$)
Xăng	-43	Biodiesel	130
Propane	-105	Dầu hoả	38 – 72
Pentane	-57	Ethanol	13
Diethyl ether	-45	Methanol	11
Acetone	-20	Isopropyl alcohol	12
Benzene	-11	Pyridine	20

Số nhiên liệu thuộc chất lỏng dễ cháy là

- A. 6. B. 4. C. 2. D. 10.

Câu 11. Cho các đặc điểm: (1) còn dễ bay hơi, (2) hơi còn dễ bắt lửa, (3) phản ứng tỏa nhiệt mạnh, (4) nhiệt độ ngọn lửa cao. Số đặc điểm tiềm ẩn nguy cơ gây bùng khi dùng cồn đốt là

- A. 4. B. 3. C. 2. D. 1.

Câu 12. Trường hợp nào sau đây có thể xảy ra sự tự bốc cháy?

- A. Chất giẻ lau có dính dầu mỡ thành đống. B. Để xăng dầu trong không khí.
C. Sắt để trong không khí lâu ngày. D. Que diêm để gần vỏ bao diêm.

Câu 13. Điểm chớp cháy của xăng là -43°C có nghĩa là:

A. nhiệt độ thấp nhất ở áp suất khí quyển mà xăng sẽ bốc cháy trong không khí khi tiếp xúc với nguồn lửa là -43°C .

B. nhiệt độ thấp nhất ở áp suất khí quyển mà xăng không bốc cháy trong không khí khi tiếp xúc với nguồn lửa là -43°C .

C. nhiệt độ cao nhất ở áp suất khí quyển mà xăng sẽ bốc cháy trong không khí khi tiếp xúc với nguồn lửa là -43°C .

D. nhiệt độ cao nhất ở áp suất khí quyển mà xăng không bốc cháy trong không khí khi tiếp xúc với nguồn lửa là -43°C .

Câu 14. Chất chữa cháy là chất có tác dụng làm giảm tốc độ của phản ứng cháy và dập tắt được đám cháy. Đặc điểm nào sau đây **không phải** đặc điểm chung của chất chữa cháy?

- A. Tham gia pư với tác nhân gây cháy để tạo lớp ngăn cách khí oxygen với vật liệu, ngưng pư cháy.
- B. Pha loãng nồng độ oxygen có tại khu vực cháy (khí carbonic, hơi nước, bột chữa cháy phân hủy ra chất và hơi).
- C. Không tham gia vào bất kỳ yếu tố nào trong tam giác cháy.
- D. Hạ thấp nhiệt độ của đám cháy xuống dưới điểm cháy.

D. BÀI TẬP TỰ LUẬN

Câu 1. Tại sao nghiêm cấm nguồn lửa tại các trạm xăng, biết điểm chớp cháy của octane, chất có nhiều trong xăng là 14°C ?

Câu 2. Khi sử dụng cồn để đốt, nếu không cẩn thận có thể bị bỏng cồn.

- a) Những đặc điểm nào sau đây tiềm ẩn nguy cơ gây bỏng cồn: Cồn dễ bay hơi, hơi cồn dễ bắt lửa, phản ứng tỏa nhiệt mạnh, nhiệt độ ngọn lửa cao?
- b) Nêu các biện pháp đảm bảo an toàn khi dùng cồn để đốt

Câu 3. a) Tại sao phản ứng đốt cháy các nhiên liệu thường có nhiệt độ ngọn lửa cao ? Điều này có ý nghĩa gì trong đời sống và sản xuất ?

- b) Tại sao nhiệt độ ngọn lửa khi đốt cháy một chất trong oxygen tinh khiết cao hơn khi đốt cháy trong không khí ?

Câu 4. Một số vụ nổ xe bồn chở xăng, dầu xảy ra khi thợ sửa chữa đang hàn xì nắp bồn.

- a) Hãy chỉ ra 3 yếu tố gây nổ dù bồn đã được tháo hết nhiên liệu lỏng.
- b) Nếu trong quá trình hàn xì, nắp bồn vẫn đóng thì vụ nổ gây ra bởi hỗn hợp hơi trong bồn đã đạt điểm chớp cháy hay đã đạt nhiệt độ tự bốc cháy ?

-----HẾT-----

BÀI 7. HÓA HỌC VỀ PHẢN ỨNG CHÁY, NỔ

A. YÊU CẦU CẦN ĐẠT:

- Tính được $\Delta_r H^0$ 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

B. TÓM TẮT LÝ THUYẾT:

I. Biến thiên enthalpy ($\Delta_r H^0$) của một số phản ứng cháy, nổ

✚ Tính giá trị ($\Delta_r H^0$) của một số phản ứng cháy, nổ để dự đoán mức độ mãnh liệt của phản ứng cháy, nổ

- Các phản ứng cháy, nổ đều là các phản ứng tỏa nhiệt ($\Delta_r H_{298}^0 < 0$)
- Phản ứng cháy 1 mol chất có giá trị càng âm thì phản ứng đó xảy ra mãnh liệt hơn.
- Khi xác định được biến thiên enthalpy của phản ứng cháy, nổ có thể dự đoán mức độ mãnh liệt của phản ứng cháy, nổ đó.
- Cách tính biến thiên enthalpy của phản ứng:

♦ Dựa vào enthalpy tạo thành: $\Delta_r H_{298}^0 = \sum \Delta_f H_{298}^0(sp) - \sum \Delta_f H_{298}^0(cd)$

♦ Dựa vào năng lượng liên kết: $\Delta_r H_{298}^0 = \sum E_b(cd) - \sum E_b(sp)$

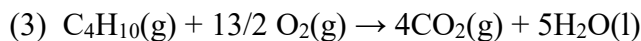
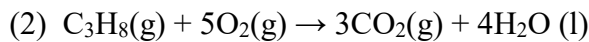
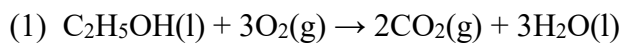
Ví dụ: Cho bảng giá trị nhiệt tạo thành của các chất (bảng 7.1 SCD. Trang 45)

Chất	CO ₂ (g)	H ₂ O(l)	O ₂	C ₂ H ₅ OH (l)
$\Delta_f H_{298}^0$ (kJ / mol)	-393,5	-241,826	0	-277,63

Cho bảng giá trị năng lượng liên kết (E_b) của một số liên kết cộng hóa trị (bảng 7.2 SCD. Trang 45)

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

1/. Hãy tính biến thiên enthalpy của phản ứng đốt cháy 1 mol ethanol và 1 mol khí gas. Các phản ứng này tỏa nhiệt hay thu nhiệt? cho biết;



2/. Tính biến thiên enthalpy của phản ứng đốt cháy 1 mol octan (C₈H₁₈, chất có trong xăng) và 1 mol methane (thành phần chính của khí thiên nhiên)

BÀI GIẢI

1/. Biến thiên enthalpy của phản ứng đốt cháy:

1mol ethanol (tính theo nhiệt tạo thành của các chất)

$$\Delta_r H_{298}^0 (1) = 2(-393,5) + 3(-241,826) - (-277,63) = -1234,848 \text{ kJ}$$

1 mol propane; 1 mol butane (tính theo năng lượng liên kết (E_b))

$$\Delta_r H_{298}^0 (2) = 8(413) + 2(347) + 5(498) - 6(745) + 8(467) = -1718 \text{ kJ / mol}$$

$$\Delta_r H_{298}^0 (3) = 10(413) + 3(347) + 6,5(498) - 8(745) + 10(467) = -2222 \text{ kJ / mol}$$

1 mol khí gas

$$\Delta_r H_{298}^0 (3) = 0,4(-1718) + 0,6(-2222) = -2020,4 \text{ kJ / mol}$$

Giá trị của $\Delta_r H_{298}^0 < 0$ nên phản ứng đều tỏa nhiệt, trong đó phản ứng đốt cháy gas xảy ra mãnh liệt hơn.

2/. 1 mol octane; 1 mol methane (tính theo năng lượng liên kết (E_b))

$$\Delta_r H_{298}^0 (3) = 0,4(-1718) + 0,6(-2222) = -2020,4 \text{ kJ / mol}$$

$$\Delta_r H_{298}^0 (\text{methane}) = 4(413) + 2(498) - 2(745) + 4(467) = -710 \text{ kJ / mol}$$

Giá trị $\Delta_r H_{298}^0 < 0$ nên phản ứng đều tỏa nhiệt, trong đó phản ứng đốt cháy octane xảy ra mãnh liệt hơn.

II. Tốc độ của phản ứng cháy

♦ **Phản ứng cháy:** $C_{(s)} + O_{2(g)} \rightarrow CO_{2(g)}$

- Tốc độ phản ứng: $v = k.C_{O_2}$

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

- Công thức tính mol và nồng độ oxygen:

$$n_{O_2} = \frac{P_{O_2} \cdot V_{O_2}}{RT}; \quad C_{O_2} = \frac{n_{O_2}}{V_{O_2}} = \frac{P_{O_2}}{RT}$$

(P_{O_2} : áp suất khí oxygen (atm); V_{O_2} : thể tích khí oxygen (L); $R = 0,082$; T là nhiệt độ (K))

♦ **Phản ứng hô hấp:** O_2 (không khí) $\rightarrow O_2$ (cơ thể)

- Tốc độ phản ứng: $v = k.C_{O_2}$

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

Ví dụ: Ở điều kiện thường (298K), oxygen chiếm khoảng 20,9% theo thể tích trong không khí, tương đương với áp suất 0,209 atm.

(a) Tính nồng độ mol/l của oxygen trong không khí.

(b) Khi thể tích oxygen giảm còn 15% thể tích k^0 khí thì nồng độ mol/l của oxygen là bao nhiêu.

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

BÀI GIẢI

$$(a) \quad C_{O_2} = \frac{0,209}{0,082 \times 298} = 8,55 \times 10^{-3} (M)$$

$$(b) \quad C_{O_2} = \frac{0,15 \times 8,55 \times 10^{-3}}{0,209} = 6,13 \times 10^{-3} (M)$$

(c) Xét phản ứng đốt cháy than đá: $C_{(s)} + O_{2(g)} \rightarrow CO_{2(g)} \Rightarrow v = k.C_{O_2}$

$$\frac{V_{(20,9\%O_2)}}{V_{(15\%O_2)}} = \frac{k \times 8,55 \times 10^{-3}}{k \times 6,13 \times 10^{-3}} \approx 1,4$$

C. BÀI TẬP TRẮC NGHIỆM

Câu 1. Phản ứng nổ là phản ứng xảy ra với

- A. tốc độ rất lớn kèm sự giảm thể tích đột ngột và toả lượng nhiệt lớn.
- B. tốc độ rất lớn kèm sự tăng thể tích đột ngột và toả lượng nhiệt lớn.
- C. tốc độ rất nhỏ kèm sự tăng thể tích đột ngột và toả lượng nhiệt lớn.
- D. tốc độ rất nhỏ kèm sự giảm thể tích đột ngột và toả lượng nhiệt lớn.

Câu 2. Phản ứng cháy là phản ứng

- A. phân huỷ các chất cháy, có toả nhiệt và phát ra ánh sáng.
- B. trao đổi giữa chất cháy và chất oxi hoá, có toả nhiệt và phát ra ánh sáng.
- C. oxi hoá – khử giữa chất cháy và chất oxi hoá, có toả nhiệt và phát ra ánh sáng.
- D. hoá hợp giữa chất cháy và chất oxi hoá, có toả nhiệt và phát ra ánh sáng.

Câu 3: Tốc độ phản ứng cháy thay đổi như thế nào khi nồng độ oxygen tăng.

- A. Tăng
- B. Giảm.
- C. Không thay đổi.
- D. Không xác định được.

Câu 4: Phương trình thể hiện tốc độ phản ứng cháy của than đá phụ thuộc vào nồng độ oxygen trong không khí là

- A. $v = \frac{C_{O_2}}{k}$.
- B. $v = \frac{k}{C_{O_2}}$.
- C. $v = k.C_{O_2}$.
- D. $\frac{1}{k.C_{O_2}}$.

Câu 5: “Phản ứng hô hấp” phụ thuộc vào nồng độ chất nào trong không khí

- A. O_2
- B. CO_2
- C. CO
- D. N_2

Câu 6: Một người ngủ quên trong ô tô tắt máy, đóng kín cửa. Sau một thời gian khi phần trăm thể tích oxygen giảm xuống còn 6% thì ảnh hưởng đến sức khỏe như thế nào?

- A. Bất tỉnh, hôn mê
B. cảm giác ngột ngạt
C. Tim đập nhanh, đau đầu
D. Chóng mặt, mắt thẳng băng

Câu 7. Để dự đoán mức độ mãnh liệt của phản ứng, người ta dựa vào

- A. $\Delta_r H_{298}^0$
B. $\Delta_r S_{298}^0$
C. $\Delta_r G_{298}^0$
D. E_b

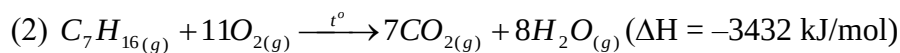
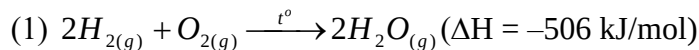
Câu 8. Phản ứng cháy 1 mol chất có giá trị càng âm thì phản ứng đó xảy ra

- A. mãnh liệt hơn
B. Yếu hơn
C. chậm hơn
D. không ảnh hưởng

Câu 9. Cách tính biến thiên enthalpy của phản ứng dựa vào năng lượng phản ứng là

- A. $\Delta_r H_{298}^0 = \sum E_b(cđ) - \sum E_b(sp)$
B. $\Delta_r H_{298}^0 = \sum \Delta_f H_{298}^0(sp) - \sum \Delta_f H_{298}^0(cđ)$
C. $\Delta_r S_{298}^0 = \sum S_{298}^0(sp) - \sum S_{298}^0(cđ)$
D. $\Delta G = \Delta H - T \cdot \Delta S$

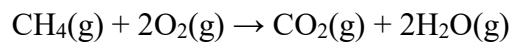
Câu 10: Xét 2 phản ứng đốt cháy H_2 và C_7H_{16}



Dự đoán nào sau đây là chính xác.

- A. Phản ứng (1) xảy ra mãnh liệt hơn phản ứng (2).
B. Phản ứng (2) xảy ra mãnh liệt bằng phản ứng (1).
C. Phản ứng (1) xảy ra không mãnh liệt bằng phản ứng (2).
D. Không xác định độ mãnh liệt của phản ứng dựa vào enthalpy.

Câu 11: Tính biến thiên enthalpy của phản ứng cháy methane

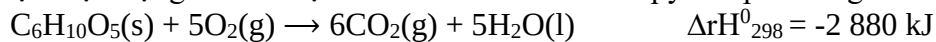


Biết $\Delta_r H_{298}^0$ (kJ/mol) của $CH_4(g) = -74,8$; $O_2(g) = 0$; $CO_2(g) = -393,5$; $H_2O(g) = -241,82$

- A. -802,34.
B. 802,34.
C. -560,52.
D. 560,52.

Câu 12: Tính nhiệt lượng tỏa ra khi đốt cháy 1 kg một loại củi khô, biết củi khô chứa 54% khối lượng cellulose và phân tử cellulose được cấu tạo bởi các gốc glucose.

Giả thiết toàn bộ nhiệt lượng tỏa ra được tính từ biến thiên enthalpy của phản ứng đốt cháy glucose:



- A. 9600
B. 960
C. -9600
D. 8640

Câu 13. Đỉnh Fansipan (có độ cao 3147 m so với mực nước biển) là ngọn núi cao nhất Việt Nam. Giả thiết không khí trên đỉnh Fansipan có áp suất 0,66 atm và chứa 21% thể tích oxygen. Hỏi tốc độ "phản ứng hô hấp" giảm bao nhiêu lần so với điều kiện bình thường? Giả thiết $V_{\text{hô hấp}} = k \cdot C_{O_2}$

- A. 3,143
B. 3,413
C. 3,2
D. 0,32.

Câu 14. Một người ngủ quên trong ô tô tắt máy, đóng kín cửa. Sau một thời gian, khi phần trăm thể tích oxygen giảm xuống còn 16% thì rất may có người kịp thời phát hiện, phá vỡ kính xe để đưa đi cấp cứu. Hỏi tại thời điểm có người đến cứu, tốc độ "phản ứng hô hấp" của người trong xe giảm bao nhiêu lần so với bình thường? Giả thiết $V_{\text{hô hấp}} = k \cdot C_{O_2}$

- A. 1,3125
B. 1,5
C. 2,0
D. 1,2

-----HẾT-----

BÀI 8: PHÒNG CHỐNG CHÁY, NỔ.

A. YÊU CẦU CẦN ĐẠT

- Phân tích được dấu hiệu để nhận biết về những nguy cơ và cách giảm nguy cơ gây cháy nổ, cách xử lý khi có cháy nổ
- Nêu được các nguyên tắc chữa cháy dựa vào các yếu tố ảnh hưởng đến tốc độ phản ứng hóa 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, nhôm,...không sử dụng nước, carbon dioxide, cát, bột chữa cháy để dập tắt đám cháy.

B. TÓM TẮT LÝ THUYẾT

I. PHÒNG CHÁY, NỔ

1. Nguy cơ gây cháy, nổ

- Điều kiện cần và đủ để xuất hiện cháy, nổ là có đủ 3 yếu tố: nguồn nhiệt, chất cháy và chất oxi hóa.
- Các nguồn phát sinh cháy, nổ phổ biến:
 - + Nguồn phát sinh nhiệt: nguồn lửa, bức xạ nhiệt, ma sát tĩnh điện, đun bếp, thiết bị điện
 - + Nguồn phát sinh chất cháy: nhiên liệu, vật liệu, hóa chất
 - + nguồn phát sinh chất oxi hóa: hóa chất, thuốc nổ

2. Các biện pháp cơ bản phòng cháy, nổ

- Để đề phòng nguy cơ gây cháy, nổ cần kiểm soát chặt chẽ các nguồn nhiệt, chất cháy, chất oxi hóa.
- Chuẩn bị sẵn các phương tiện, nhân lực và không gian để phòng bị khi xảy ra sự cố cháy, nổ

II. CHỮA CHÁY

1. Các dấu hiệu để nhận biết đám cháy

- Đó là mùi, khói, ánh lửa và tiếng nổ được tạo ra từ đám cháy

Bảng 8.3 phân loại đám cháy theo chất cháy (theo TCVN 4878: 2009)

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

2. Nguyên tắc chữa cháy

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

3. Cách xử lý sự cố cháy, nổ

- Bước 1: Báo động cho mọi người biết
- Bước 2: Cúp cầu dao điện khu vực bị cháy
- Bước 3: Dùng bình chữa cháy cát và nước để dập tắt
- Bước 4: Gọi 114 để đội phòng cháy chữa cháy chuyên nghiệp đến



4. Các chất chữa cháy thông dụng

Chất chữa cháy	Tác dụng- Lưu ý khi sử dụng
Nước	-Làm giảm nhiệt độ xuống dưới nhiệt độ cháy, làm loãng khí cháy. -Dùng trong các đám cháy là chất rắn như gỗ (điển hình là cháy rừng, cháy nhà), nhựa trong các nhà xưởng sản xuất,... và một số khí cháy. -Tuyệt đối không sử dụng nước để chữa cháy các thiết bị điện khi chưa tắt nguồn điện, kim loại và hợp chất hoạt động hóa học mạnh như Na, K, Ca, đất đèn, đám cháy xăng, dầu,..
Carbon dioxide (CO ₂)	-Làm giảm nồng độ oxygen dưới 14%, ngăn chặn và dập tắt đám cháy loại A,B,C -Khi phun không được để dính lên người hoặc phun lên người vì sẽ làm bỏng lạnh, gây nguy hiểm cho sức khỏe con người. -Không dùng cho các đám cháy kim loại, kiềm thổ, than cốc,.. đám cháy có nhiệt độ trên 1000 ⁰ C, đám cháy điện có hiệu điện thế >380kV.
Dạng bột (Foam gồm không khí, nước và chất hoạt động bề mặt)	_Ngăn không cho oxygen tiếp xúc với đám cháy. -Áp dụng cho đám cháy loại A,B,C,F. -Không dùng cho các đám cháy thiết bị có điện, các kim loại có hoạt động mạnh và đám cháy có nhiệt độ trên 1700 ⁰ C.
Dạng bột khô (NaHCO ₃)	-Cách li và làm loãng nồng độ oxygen tiếp xúc với đám cháy. -Áp dụng cho loại đám cháy phụ thuộc vào kí hiệu ghi trên bình: +Bình chữa cháy bột ABC: phù hợp chữa cháy cho cả chất rắn, chất lỏng và chất khí (gỗ, giấy, một số chất dẻo, cỏ khô, rơm và sợi, nhiên liệu xăng dầu, sơn, vecni và rượu). +Bình chữa cháy bột ABC: nhiên liệu xăng dầu, sơn, vecni và rượu. -Không nên sử dụng bình bột chữa cháy phun lên đám cháy là đồ điện tử vì sẽ làm hư hại các vi mạch điện tử.

Hình 8.4 mô tả cấu tạo bình chữa cháy khí nén carbon dioxide và bình chữa cháy dạng bột.



C. BÀI TẬP TRẮC NGHIỆM

Câu 1. Khi một đám cháy đang xảy ra, thường có các dấu hiệu để nhận biết là

- A. mùi, ánh lửa, có tiếng nổ được tạo ra từ đám cháy.
- B. mùi, khói, có tiếng nổ được tạo ra từ đám cháy.
- C. mùi, khói, ánh lửa.
- D. mùi, khói, ánh lửa và tiếng nổ được tạo ra từ đám cháy.

Câu 2. Điều kiện cần và đủ để xuất hiện cháy, nổ là có đủ 3 yếu tố:

- A. nguồn nhiệt, chất cháy và chất khử.
- B. nguồn nhiệt, chất oxi hóa và nước.
- C. chất oxi hóa, chất cháy và nguồn nhiệt.
- D. nguồn điện, nguồn nhiệt và chất cháy.

Câu 3. Để phòng chống nguy cơ cháy nổ, cần kiểm soát chặt chẽ các

A. nguồn nhiệt, chất cháy, chất oxi hóa.

B. chất cháy, chất oxi hóa, chuẩn bị sẵn sàng các phương tiện, nhân lực và không gian để phòng bị khi xảy ra sự cố cháy, nổ.

C. chất cháy, chất khử, chuẩn bị sẵn sàng các phương tiện, nhân lực để phòng bị khi xảy ra sự cố cháy, nổ.

D. Chất oxi hóa, chuẩn bị sẵn sàng các phương tiện, nhân lực và không gian để phòng bị khi xảy ra sự cố cháy, nổ.

Câu 4: Không thể dùng loại chất chữa cháy nào sau đây để dập tắt đám cháy xăng, dầu, khí đốt

A. CO₂.

B. Nước.

C. Bọt chữa cháy.

D. Bột khô.

Câu 5. Bình chữa cháy bột ABC phù hợp với các đám cháy

A. chất rắn nóng chảy, chất khí.

B. chất rắn, chất lỏng, chất khí.

C. chất lỏng, chất khí.

D. chất rắn, chất lỏng.

Câu 6. Đám cháy nào **không** được dùng nước để chữa cháy mà phải dùng CO₂?

A. Đám cháy xưởng gỗ.

B. Đám cháy xăng dầu.

C. Đám cháy nhựa.

D. Đám cháy kim loại

Câu 7. Không dùng CO₂ để chữa cháy các đám cháy nào?

A. Đám cháy nhà cửa, quần áo.

B. Đám cháy kim loại Mg, Al, than nóng đỏ

C. Đám cháy trạm xăng dầu.

D. Đám cháy thiết bị điện, điện tử

Câu 8. Khi xảy ra cháy nổ lớn trong nhà cửa, chợ búa, khu sản xuất..., người mắc kẹt trong đó cần được thực hiện bước nào trước tiên

A. nhanh chóng chạy thoát khỏi đám cháy.

B. khăn trương thu dọn đồ đạc, hàng hóa.

C. tìm cách dập tắt đám cháy, nổ.

D. gọi người đến hỗ trợ.

Câu 9. Nước có thể dùng để dập tắt đám cháy nào sau đây?

A. Đám cháy do chập điện mà chưa được cắt nguồn điện.

B. Đám cháy xe chở xăng.

C. Đám cháy do vật liệu gỗ, tre, rơm rạ, vải sợi.

D. Đám cháy do khí gas.

Câu 10. Cách nào sau đây **không** phải cách thoát hiểm trong trường hợp xảy ra hỏa hoạn?

A. Kích hoạt chuông báo cháy.

B. Sử dụng bình chữa cháy nếu có.

C. Cúi thấp người khi thoát hiểm.

D. Gọi ngay số 113

Câu 11: Bình chữa cháy dạng bột khô thường chứa hóa chất nào sau đây:

A. NaHSO₃.

B. NaHCO₃.

C. CaCO₃.

D. NaHSO₄.

Câu 12: Một đám cháy thiết bị điện tử, có thể dùng chất chữa cháy thông dụng nào sau đây:

(1) Nước; (2) Carbon dioxide; (3) Dạng bột khô; (4) Dạng bột.

A. (1), (2).

B. (3), (4).

C. (2).

D. (3).

Câu 13: Nguyên lý chống cháy nổ là:

(1) Giảm tốc độ cháy của vật liệu đến mức tối thiểu.

(2) Loại bỏ hoặc làm suy yếu bất kì yếu tố nào trong tam giác cháy (chất cháy, chất oxi hóa, nguồn nhiệt).

(3) Phân tán nhanh nhiệt lượng của đám cháy ra môi trường xung quanh.

A. (1), (2).

B. (1), (3).

C. (2), (3).

D. (1), (2), (3).

Câu 14. Số chất trong dãy các chất sau có thể dùng chất chữa cháy đám cháy rừng:

(a) Nước; (b) Carbon dioxide; (c) Dạng bột khô; (d) Dạng bột.

A. 2.

B. 3.

C. 4.

D. 1.

Câu 15: Phản ứng hóa học nào xảy ra khi dùng CO₂ để chữa đám cháy kim loại Mg.

A. $\text{CO}_2 + \text{Mg} \xrightarrow{t^\circ} \text{CO} + \text{MgO}$.

B. $\text{CO}_2 + 2\text{Mg} \xrightarrow{t^\circ} \text{C} + 2\text{MgO}$.

C. $2\text{CO}_2 + 2\text{Mg} + \text{O}_2 \xrightarrow{t^\circ} 2\text{MgCO}_3$.

D. Không có phản ứng xảy ra.

Câu 16. Trong các ký túc xá, nhà trọ, người ta thường dùng bếp dầu để đun nấu. Khi xảy cháy, bếp dầu do chế dầu lúc đun nấu, phạm vi cháy mới chỉ xung quanh bếp dầu, tại chỗ không có bình chữa cháy, chỉ có: nước, cát, chăn (mền). Em sẽ xử lý như thế nào?

A. Xối nước.

B. Tạt cát.

C. Lấy chăn (mền) nhúng nước trùm lên.

D. Gọi ngay 114.

Câu 17. Tiêu lệnh chữa cháy do Cục cảnh sát phòng cháy chữa cháy ban hành bao gồm các bước:

a) Dùng bình chữa cháy cát và nước để dập tắt.

b) Điện thoại số 114 đội chữa cháy chuyên nghiệp.

c) Khi xảy ra cháy báo động gấp.

d) Cúp cầu dao điện nơi xảy ra cháy.

Thứ tự đúng của các bước trên là

A. d, c, a, b.

B. c, d, a, b.

C. d, b, a, c.

D. c, d, b, a.

CHUYÊN ĐỀ 3:

THỰC HÀNH HÓA HỌC VÀ CÔNG NGHỆ THÔNG TIN

BÀI 9: THỰC HÀNH VẼ CẤU TRÚC PHÂN TỬ

A. YÊU CẦU CẦN ĐẠT

- Biết được các bước cài đặt phần mềm Chemscketch.
- Cài đặt được phần mềm Chemscketch vào máy.
- Viết được công thức Lewis, công thức cấu tạo các chất bằng các phần mềm chuyên biệt.

B. TÓM TẮT LÝ THUYẾT

1. Tải và cài đặt phần mềm

Bước 1: Truy cập trang: <https://www.acdlabs.com/resources/freeware/chemsketch/index.php>

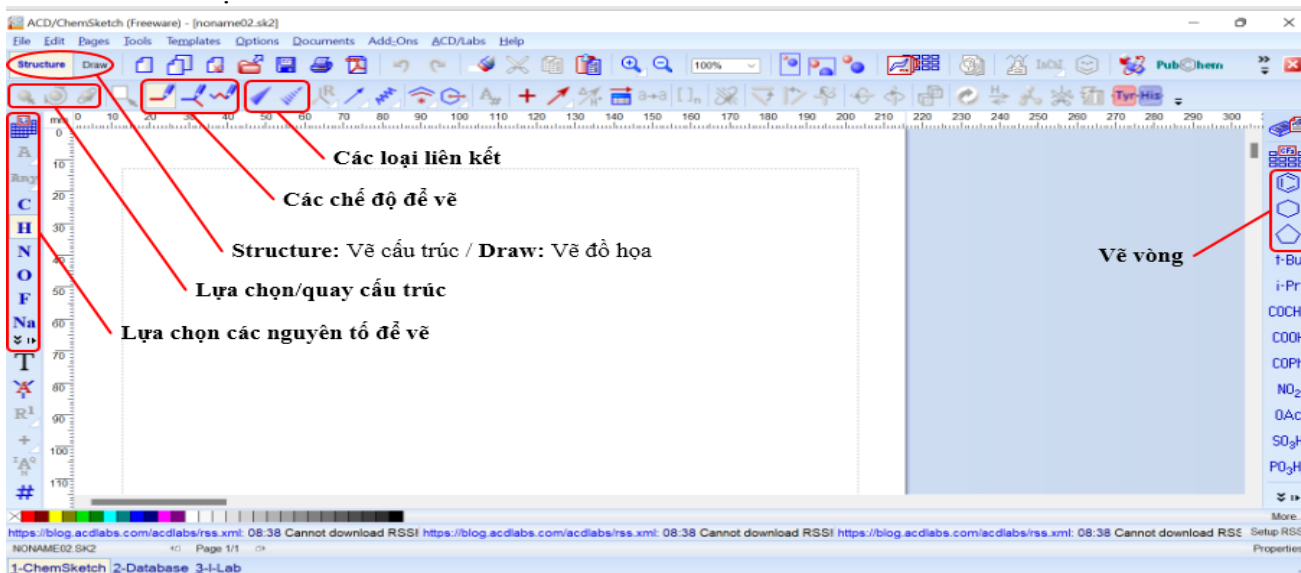
Bước 2: Sau đó điền các thông tin cần thiết để tải phần mềm. Chọn free ADC/ Chemscketch Freeware. Tải phần mềm và cài đặt theo hướng dẫn.

2. Sử dụng phần mềm

Khởi động: Mở Chemscketch hoặc nhấn đúp chuột trái vào Màn hình làm việc Chemscketch như sau:



biểu tượng trên Destop.



3. Thực hành vẽ công thức cấu tạo của một số phân tử

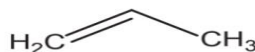
3.1. Vẽ tử propyne (C_3H_4)

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

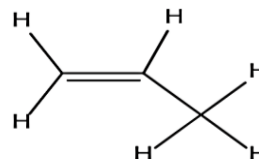
Bước 2: Chọn nguyên tố C ở khu vực (2). Nhấp chuột trái vào màn hình sẽ xuất hiện CH_4 . Nhấp và giữ chuột trái rồi kéo, nhả chuột, thấy xuất hiện CH_3-CH_3 . Kéo, tiếp tục nhả chuột thu được $H_3C-CH_2-CH_3$.

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

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



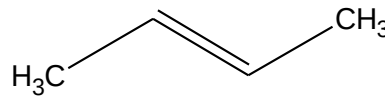
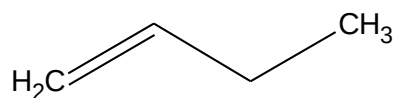
Bước 4: Để hiển thị các liên kết C-H, chọn **Tool** → **Add Explicit Hydrogens**.



▲ Hiển thị liên kết C-H

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

3.2. Vẽ phân tử C_4H_{10} chuyển liên kết đơn thành liên kết đôi, tạo thành 2 phân tử sau:



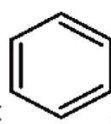
Bước 1: Chọn cửa sổ **Structure** và chế độ **Draw Normal**. Chọn nguyên tố C.

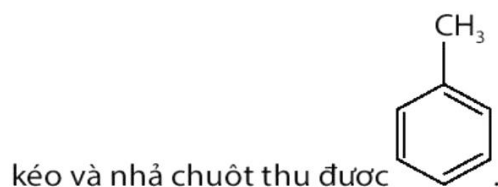
Bước 2: Nhấp chuột trái vào màn hình sẽ xuất hiện CH_4 . Nhấp và giữ chuột trái rồi kéo, nhả chuột 3 lần thu được $H_3C-CH_2-CH_2-CH_3$.

Bước 3: Nhấp chuột trái lên liên kết đơn ở 2 vị trí khác nhau để tạo liên kết đôi theo yêu cầu.

3.3. vẽ công thức cấu tạo của phân tử Toluene

Bước 1: Chọn cửa sổ **Structure** và chế độ **Draw Normal**. Chọn  ở khu vực (6).

Bước 2: Nhấp chuột trái vào  rồi kéo, nhả chuột thu được . Chọn nguyên tố C



4. Thực hành vẽ công thức Lewis

Điểm khác nhau giữa cách vẽ công thức Lewis với các vẽ công thức cấu tạo là công thức Lewis vẽ đầy đủ các cặp electron hoặc electron chưa liên kết

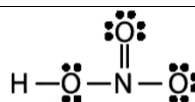
4.1. Vẽ công thức Lewis của phân tử N_2 .

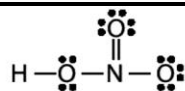
– Vẽ phân tử N_2 tương tự theo các bước ở trên. Chọn nguyên tố N, nhấp chuột trái vào màn hình, xuất hiện NH_3 . Nhấp và giữ chuột trái rồi kéo, nhả chuột thu được H_2N-NH_2 . Nhấp chuột trái 2 lần lên liên kết đơn để tạo liên kết ba $N \equiv N$.

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

– Chọn cặp electron phù hợp trong bảng (⦿), rồi gắn vào công thức, điều chỉnh kích thước (nếu cần), thu được $:N \equiv N:$.

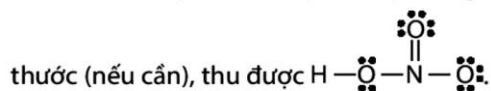
4.2. Vẽ công thức Lewis của phân tử HNO_3





– Vẽ phân tử HNO_3 tương tự theo các bước ở trên để được công thức cấu tạo $\text{H}-\text{O}-\text{N}(\text{O})-\text{O}$.

– Chọn cặp electron phù hợp trong bảng (8), rồi gắn vào công thức, điều chỉnh kích

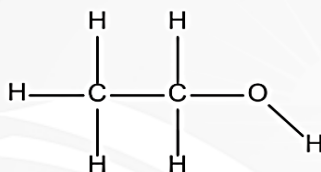


– Chọn lệnh **File** → **Save** hoặc **Save as**. Có thể sử dụng tổ hợp phím **Ctrl+S**. Chọn vị trí thư mục để lưu file ở hộp thoại **Save as**, đặt tên file.

5. Thực hành vẽ cấu trúc 3D của chất

Vẽ cấu trúc 3D của phân tử $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$

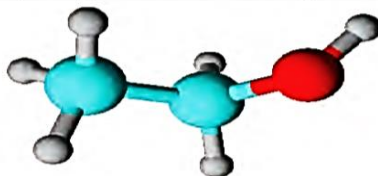
Bước 1: Vẽ cấu trúc 2D của phân tử $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ tương tự theo các bước ở Ví dụ 1.



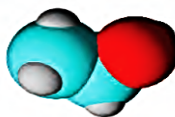
Bước 2: Nhấp chuột vào biểu tượng tối ưu cấu trúc 3D (3D Structure Optimization) ở thanh công cụ.



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



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



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

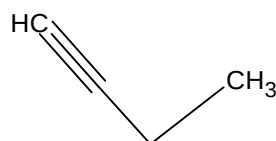
Bước 5: Lưu được các file, chèn được hình ảnh vào file Word, PowerPoint.

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

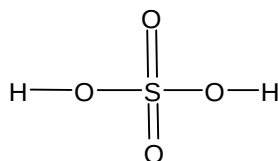
C. BÀI TẬP

Câu 1: Thực hành vẽ công thức cấu tạo của các chất được biểu diễn sau:

a. C_4H_6



b. H_2SO_4



Câu 2: Thực hành Vẽ công thức Lewis của phân tử SO_2 , SO_3 , H_2SO_4

Câu 3: Thực hành vẽ cấu trúc các phân tử sau:

a) $CH_2=CH-CH=CH_2$

b) CH_3COOH

Chuyển cấu trúc hóa học từ 2D sang 3D. Lưu các file, chèn được hình ảnh cấu trúc phân tử vào file Word, Powerpoint.

BÀI 10: THỰC HÀNH THÍ NGHIỆM HÓA HỌC ẢO

A. YÊU CẦU CẦN ĐẠT

- Biết được một số phần mềm để thực hiện thí nghiệm ảo
- Biết được các bước cài đặt phần mềm một số phần mềm thí nghiệm ảo
- + **ChemLab (Portable Virtual Chemistry Lab) :**
https://www.modelscience.com/cl20_evl.exe
- + **Yenka (phiên bản cũ là Crocodile Chemistry)**
<https://download.com.vn/download/yenka-25670>
- + **PhET**
<https://phet.colorado.edu/vi/>
- Cài đặt được một số phần mềm thí nghiệm ảo vào máy.
- Thực hiện được các thí nghiệm ảo theo nội dung được cho trước từ GV.
- Phân tích và lí giải được thí nghiệm ảo.

B. TÓM TẮT LÝ THUYẾT

1. Tải và cài đặt phần mềm Yenka

- Tải phần mềm: <https://www.yenka.com>
- Cài đặt yenka

Bước 1: Khởi động Yenka bằng cách click đúp chuột trái vào **biểu tượng Yenka** trên màn hình

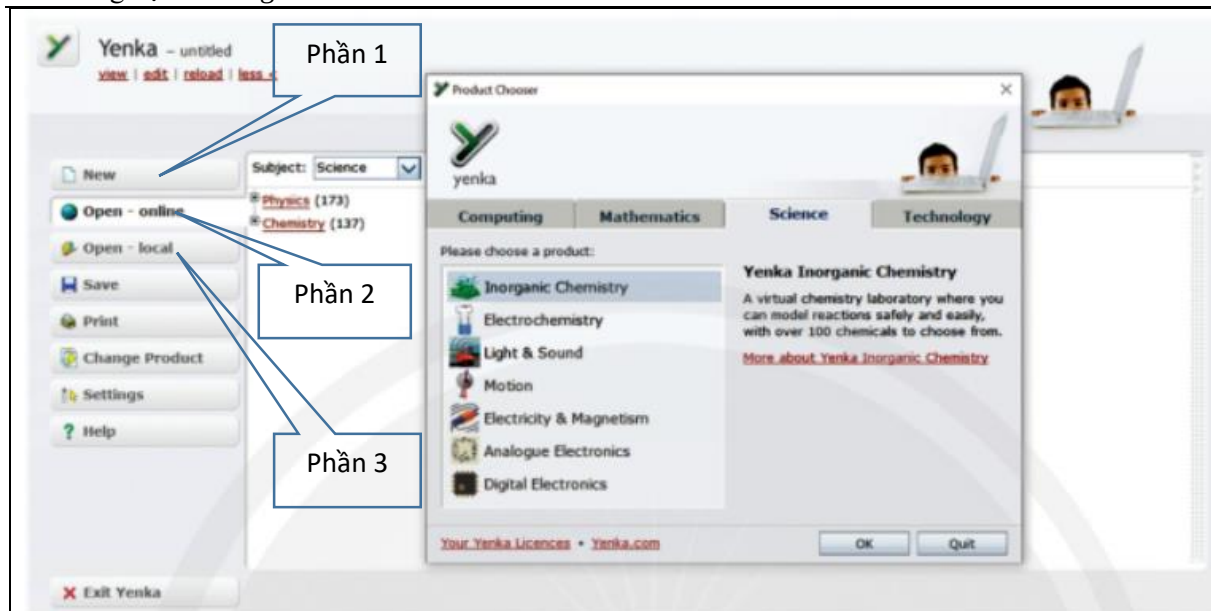
Bước 2: Trong cửa sổ **Your Yenka licences**, bạn click vào **Use all products for free** dưới mục

At home

Bước 3: Đăng nhập **tài khoản email** và nghề nghiệp (**Occupation**), bạn chỉ cần đăng nhập email một lần duy nhất cho các lần sử dụng tiếp theo.

Bước 4: Nhấn **Request Licence**.

2. Sử dụng phần mềm: Sau khi cài đặt và mở ứng dụng, màn hình làm việc Yenka như sau:



-Phần 1: **New**: sử dụng hóa chất, thiết bị và dụng cụ để tự thiết kế thí nghiệm.

-Phần 2: **Open-online**: kho các bài thí nghiệm mở trực tuyến.

-Phần 3: **Open-local**: kho các bài thí nghiệm đã được chuẩn bị sẵn có hướng dẫn.

❖ Tính năng chính của phòng thí nghiệm ảo Yenka

***Công nghệ truyền thông và máy tính (Computing)**: giới thiệu lập trình theo cách thức mới, hấp dẫn hơn, cho phép người dùng điều khiển nhân vật hoạt hình 3D bằng cách sử dụng lệnh sơ đồ đơn giản.

***Toán học (Mathematics)**: cho phép tạo mô hình toán học 3D một cách dễ dàng để chứng minh các số liệu thống kê, xác suất, hình học và tọa độ.

***Khoa học (Science)**: phòng thí nghiệm ảo của Yenka vô cùng lí tưởng cho các bài giảng khoa học, chứng minh các khái niệm đầy an toàn, mô phỏng chính xác.

***Công nghệ (Technology)**: cho phép kiểm tra các dự án điện tử, các chương trình PIC, PICAE và tạo giao diện PCB 3D.

-Sau khi chọn tính năng, chọn môn học (**Chemistry**).Chọn: **New**; **Open-online** hay **Open-local**. Tìm thí nghiệm đã được chuẩn bị sẵn có hướng dẫn hay tự thiết kế thí nghiệm.

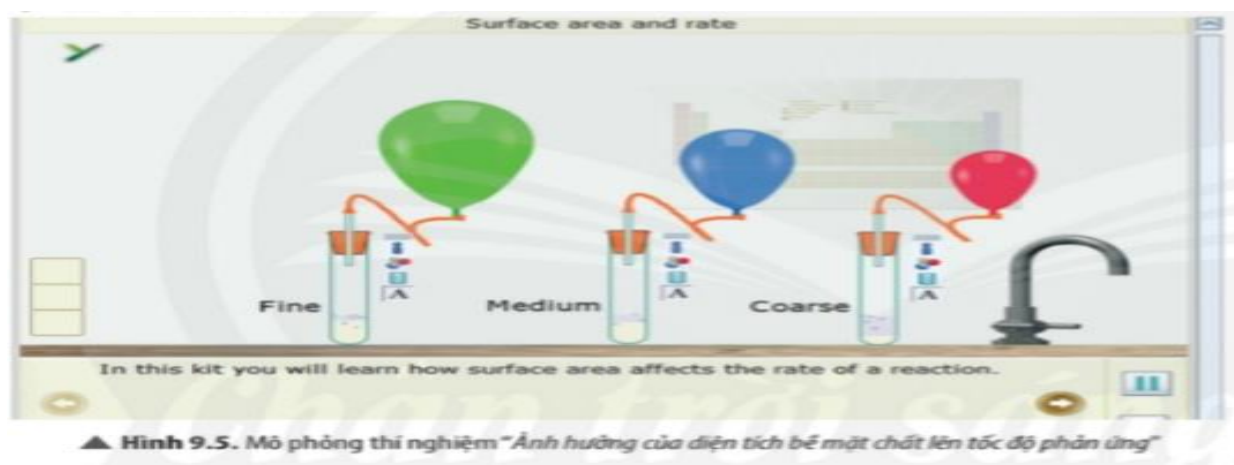
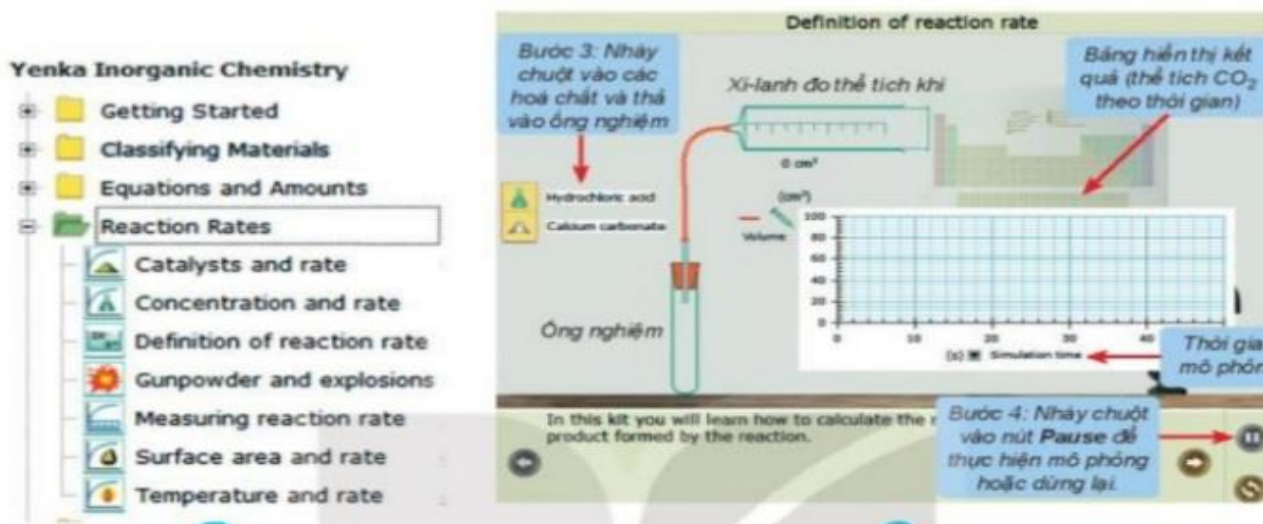
3. Thực hành thí nghiệm ảo

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

Mở Kho các bài thí nghiệm có hướng dẫn Open-local

- Chọn **Reaction rates Definition of reaction rate**.

- Lấy hóa chất cho vào ống nghiệm. Nếu muốn hiển thị chuyển động các ion, ngử, phân tử chọn vào biểu tượng bên ống nghiệm phản ứng.  để bắt đầu phản ứng. Kết quả như hình dưới.



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

- Sử dụng các quả bóng có hình khác nhau trong thí nghiệm để dễ phân biệt các ống nghiệm với kích thước hạt khác nhau.
- Tốc độ thoát khí ở ống nghiệm (1) nhanh nhất kích thước nhỏ nhất, ở ống nghiệm (3) chậm nhất với kích thước lớn nhất.
- Diện tích bề mặt càng lớn, tốc độ phản ứng càng nhanh.

3.2. Sử dụng thẻ Open-local để mô phỏng thí nghiệm “acid and base”. Phân tích và lí giải kết quả của thí nghiệm.

Bước 1: Nhấp chuột vào thẻ **Open – local**, chọn **Acids, Bases and Salts** → **Acids and bases**, mô phỏng đã được thiết kế xuất hiện ở màn hình.

Trang 36

Bước 2: Nhấp chuột vào Next page  để thực hiện theo hướng dẫn

Bước 3: Ghi lại kết quả thí nghiệm và nhận xét

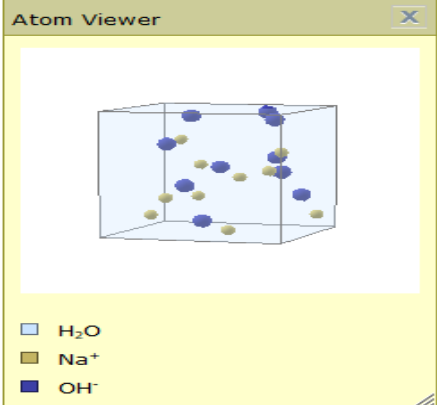
Trong thí nghiệm mô phỏng này em sẽ biết rằng acid là chất cho proton (quan sát thấy các ion H^+ xuất hiện khi axit ở trong dung dịch) và một base là chất nhận proton (quan sát thấy các ion OH^- xuất hiện khi base ở trong dung dịch).

Nhấp vào biểu tượng  Sodium hydroxide, giữ và kéo cho vào cốc, quan sát các ion trong dung dịch. Ta quan sát được các ion OH^- màu xanh. Chứng tỏ dung dịch sodium hydroxide là dung dịch base

Acids and bases

-  Sodium hydroxide
-  Hydrochloric acid
-  Solution1
-  Solution2
-  Solution3





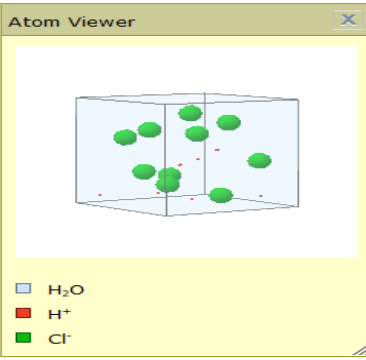
In this kit you will learn that an acid is a proton donor (H^+ ions appear when the acid is in solution) and a base is a proton acceptor (OH^- ions appear when the base is in solution).

Tương tự nhấp vào biểu tượng  Hydrochloric acid để quan sát các ion trong dung dịch hydrochloric acid.

Acids and bases

-  Sodium hydroxide
-  Hydrochloric acid
-  Solution1
-  Solution2
-  Solution3





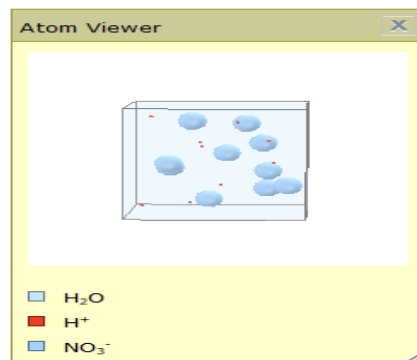
In this kit you will learn that an acid is a proton donor (H^+ ions appear when the acid is in solution) and a base is a proton acceptor (OH^- ions appear when the base is in solution).

Ta quan sát thấy các ion H^+ màu đỏ chứng tỏ hydrochloric acid là dung dịch acid.

- Kéo thả solution 1 (dung dịch 1) vào cốc ta quan sát thấy có ion H^+ . Chứng tỏ dung dịch 1 là acid.

Acids and bases

-  Sodium hydroxide
-  Hydrochloric acid
-  Solution1
-  Solution2
-  Solution3



Repeat for each of the mystery solutions in turn, remembering to empty the beaker each time. Which solution contains a base?



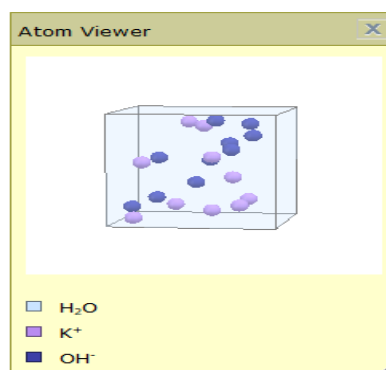
- A. Solution 1
- B. Solution 2
- C. Solution 3



- Kéo thả solution 2 (dung dịch 2) vào cốc quan sát thấy có ion OH⁻. Chứng tỏ dung dịch 2 là base.

Acids and bases

-  Sodium hydroxide
-  Hydrochloric acid
-  Solution1
-  Solution2
-  Solution3



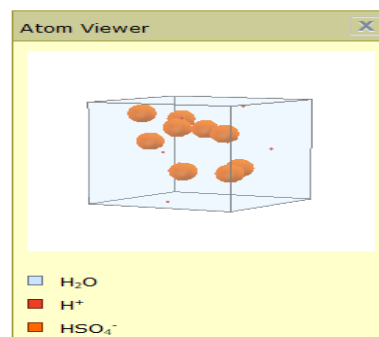
In this kit you will learn that an acid is a proton donor (H⁺ ions appear when the acid is in solution) and a base is a proton acceptor (OH⁻ ions appear when the base is in solution).



Kéo thả solution 3 (dung dịch 3) vào cốc quan sát thấy có ion H⁺. Chứng tỏ dung dịch 3 là acid

Acids and bases

-  Sodium hydroxide
-  Hydrochloric acid
-  Solution1
-  Solution2
-  Solution3



In this kit you will learn that an acid is a proton donor (H⁺ ions appear when the acid is in solution) and a base is a proton acceptor (OH⁻ ions appear when the base is in solution).



C. BÀI TẬP

Câu 1. Sử dụng cửa sổ Open - local của phần mềm Yenka nghiên cứu về mưa acid. Rút ra kết luận từ kết quả thí nghiệm.

Câu 2. Sử dụng thẻ Open - local của phần mềm Yenka, thực hiện thí nghiệm ảnh hưởng của nhiệt độ lên tốc độ phản ứng “Temperature and rate”. Phân tích và lí giải kết quả của thí nghiệm.

Câu 3. Hãy thiết kế thí nghiệm (thẻ New): Phản ứng của dung dịch iron(II) chloride 1 M (FeCl_2) với dung dịch potassium hydroxide 1 M (KOH).

Ghi rõ các bước chuẩn bị hoá chất, dụng cụ, cách tiến hành thí nghiệm.

Nêu hiện tượng xảy ra và giải thích.

BÀI 11: THỰC HÀNH TÍNH THAM SỐ CẤU TRÚC VÀ NĂNG LƯỢNG

A. YÊU CẦU CẦN ĐẠT

-Nêu được quy trình tính toán bằng phương pháp bán kinh nghiệm (nhập file đầu vào, chọn phương pháp tính, thực hiện tính toán, lưu kết quả)

-Sử dụng được kết quả tính toán để thấy được hình học phân tử, xu hướng thay đổi độ dài, góc liên kết và năng lượng phân tử trong dãy các chất (cùng nhóm, chu kì, dãy đồng đẳng)

B. TÓM TẮT LÝ THUYẾT

I. CÁCH KHỞI CHẠY PHẦN MỀM MOPAC (WINDOWS 10)

- Bước 1. Nháy chuột phải vào file MOPAC data set, ví dụ file Example_data_set.mop.
- Bước 2. Chọn Open with. Bỏ chọn Always use this app to open .mop files.
- Bước 3. Nháy chuột trái vào More apps. Bỏ chọn Always use this app to open .mop files.
- Bước 4. Cuộn xuống dưới và chọn Look for another app on this PC.
- Bước 5. Đi đến D:\Phanmem\MOPAC2016, nháy chuột trái vào MOPAC2016.exe. "MOPAC2016.exe" xuất hiện trong hộp thoại File name. Chọn Open.

II. TỐI ƯU HÓA CẤU TRÚC HÌNH HỌC VÀ TÍNH NHIỆT TẠO THÀNH CỦA MỘT CẤU TRÚC PHÂN TỬ BẰNG PHƯƠNG PHÁP BÁN KINH NGHIỆM

1. Tạo file dữ liệu để tối ưu hóa cấu trúc của phân tử H_2O .

Bước 1. Sử dụng Notepad hoặc Wordpad tạo file dữ liệu. File dữ liệu để tối ưu hoá cấu trúc của phân tử và tính nhiệt hình thành của phân tử H_2O có nội dung như sau:

AM1 OPT ENPART

Water

Example of geometry optimization

O 0.0 0 0.0 0 0.0 0

H 0.97 1 0.0 0 0.0 0 1 0 0

H 0.97 1 104.5 1 0.0 0 1 2 0

Trong đó:

- Từ khóa AM1 là để sử dụng phương pháp bán kinh nghiệm AM1.

- Từ khoá OPT là để tối ưu hoá cấu trúc hình học. Từ ENPART là để tính năng lượng phân tử.

- Cấu trúc hình học của phân tử H_2O ở file dữ liệu này được hiểu như sau: Nguyên tử thứ nhất là oxygen (O1) được mô tả ở hàng thứ nhất. Nguyên tử thứ 2 là hydrogen (H(2)) được mô tả ở hàng thứ hai. H(2) liên kết với O(1) bằng liên kết có độ dài $0.97\text{\AA}$. Nguyên tử thứ 3 là hydrogen (H(3)) được mô tả ở hàng thứ ba, H(3) liên kết với O(1) bằng liên kết có độ dài $0.97\text{\AA}$. Góc $\text{H(3)O(1)H(2)} = 104,5^\circ$.

- Số 0 đứng sau mỗi giá trị độ dài liên kết hay góc liên kết có nghĩa là độ dài liên kết hay góc liên kết này được giữ cố định.

- Số 1 đứng sau mỗi giá trị độ dài liên kết hay góc liên kết có nghĩa là độ dài liên kết hay góc liên kết này sẽ được tối ưu

Bước 2: Lưu file dữ liệu vào thư mục “D:\Nguyen Van A\MOPAC_Working”. Kiểu file là “.txt”. Ví dụ: “H2O_AM1.txt” → Đóng file vừa soạn thảo “H2O.AM1.txt”.

2. Tối ưu hóa cấu trúc của phân tử H_2O bằng phương pháp bán kinh nghiệm.

Cách tiến hành:

- Bước 1. Đổi file dữ liệu đã tạo (ở hoạt động 1) sang dạng đuôi “.mop”, ví dụ: “H2O_AM1.mop”. Vào thư mục “D:\Nguyen_Van_A\MOPAC_Working”, nhấp chuột phải chọn Rename rồi thay đuôi “.txt” thành đuôi “.mop”.

- Bước 2. Nhấp chuột phải vào file “H2O_AM1.mop”

Chọn Open with → MOPAC2016.exe.

Lúc này file dữ liệu “H2O_AM1.mop” được chạy bằng MOPAC. Sau khi chạy xong, xuất hiện file kết quả tính “H2O_AM1.out” trong thư mục “D:\Nguyen_Van_A\MOPAC_Working”.

Xem thêm lời giải bài tập Chuyên đề học tập Hóa học 10 Kết nối tri thức hay, chi tiết khác:

III. CÁCH ĐỌC FILE KẾT QUẢ VÀ SỬ DỤNG KẾT QUẢ

1. Đọc file kết quả và sử dụng kết quả tính tối ưu hóa cấu trúc của phân tử, tính nhiệt tạo thành và năng lượng phân tử của H_2O .

Cách tiến hành:

Nhấp chuột phải vào file “H2O_AM1.out”, chọn Open with Wordpad.

Đoạn văn bản đầu của file như sau:

```
*****
** Site#: 36579    For non-commercial use only    Version 21.125W **
*****
** Cite this program as: MOPAC2016, Version: 21.125W, James J. P. Stewart, **
** Stewart Computational Chemistry, web: HTTP://OpenMOPAC.net. Days left: 361**
*****
**                                     **
**          MOPAC2016                  **
**                                     **
*****
```

Đoạn văn bản kết thúc file “H2O_AM1.out” như sau:

```
*****
*
*
* JOB ENDED NORMALLY *
*
*
*****
TOTAL JOB TIME:      0.75 SECONDS
== MOPAC DONE ==
```

Giá trị nhiệt tạo thành của phân tử H₂O (thể hơi) ở file "H2O_AM1.out".

FINAL HEAT OF FORMATION= -59.25050 KCAL/MOL = -247.90410 KJ/MOL

Giá trị này khá gần đúng so với giá trị thực nghiệm. Theo thực nghiệm, nhiệt tạo thành của phân tử H₂O(thể hơi) là -241,826 kJ/mol.

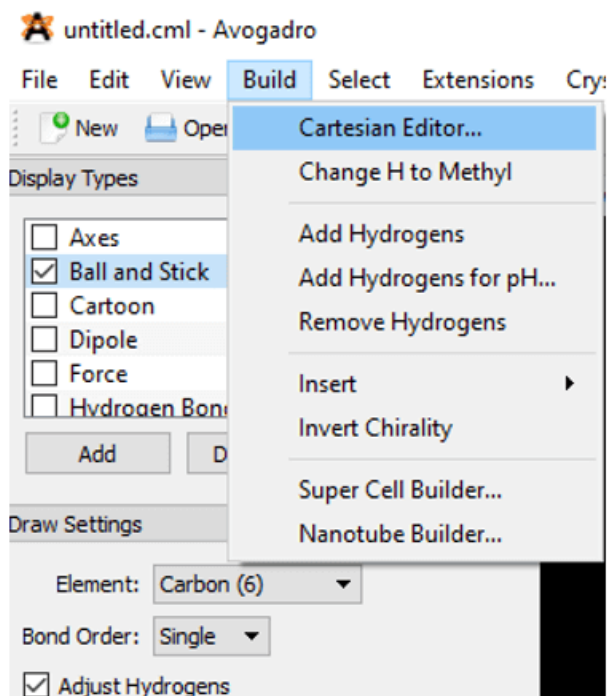
Giá trị năng lượng phân tử của H₂O (thể hơi), kí hiệu là ETOT (EONE + ETWO) ở file "H2O_AM1.out":

ETOT (EONE + ETWO) -348.5632 EV

2.Sử dụng kết quả tính tối ưu hóa cấu trúc để thấy được cấu trúc hình học của phân tử H₂O.

Cách tiến hành:

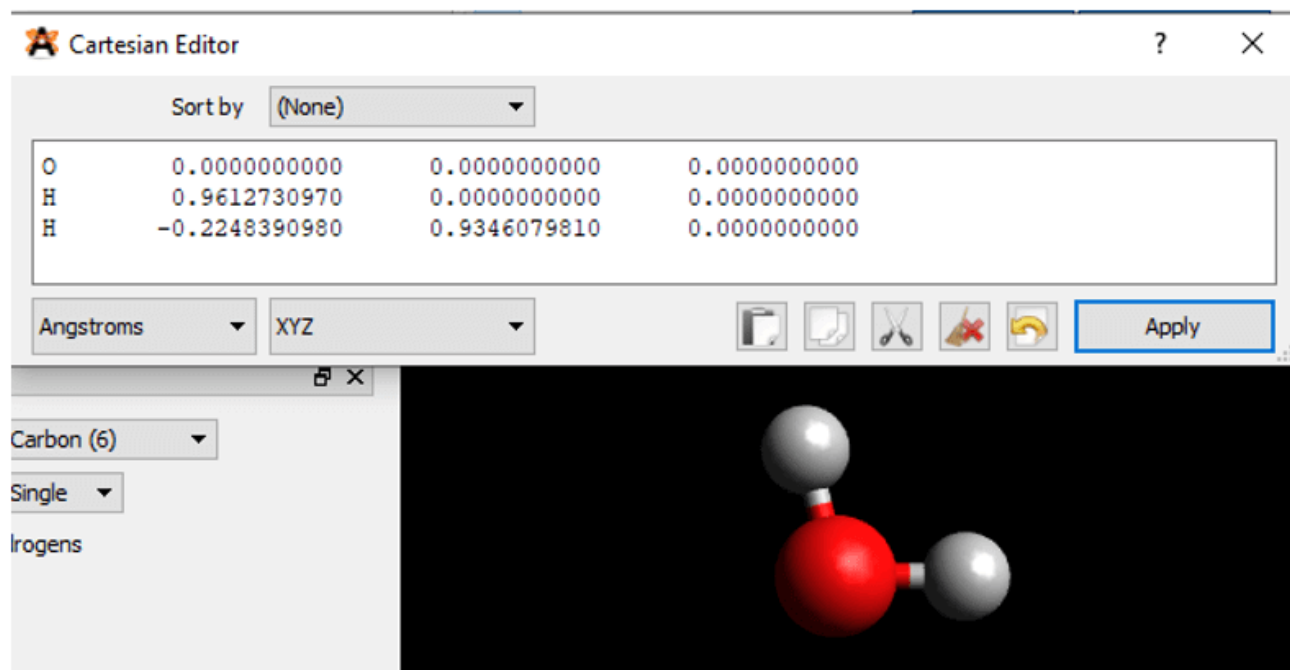
Bước 1. Mở phần mềm Avogadro. Chọn lệnh File → New → Display Settings (Cài đặt hiển thị) → Display Types (Kiểu hiển thị) → Ball and Stick (Quả cầu và que nối). Sau đó chọn lệnh Build → Cartesian Editor (Hình 11.1a), một cửa sổ xuất hiện cho phép dán tọa độ Descartes của phân tử để hiển thị cấu trúc.



Bước 2. Mở file kết quả tính "H2O_AM1.out" thu được ở trên, đi đến đoạn văn bản sau:

"CARTESIAN COORDINATES"				
1	O	0.000000000	0.000000000	0.000000000
2	H	0.961314917	0.000000000	0.000000000
3	H	-0.224991466	0.934570699	0.000000000

Bước 3. Copy các dòng tọa độ Descartes này dán sang vị trí mô tả tọa độ Descartes tương ứng ở cửa sổ Cartesian Editor của giao diện Avogadro. Nháy chuột vào Apply rồi nháy vào giao diện Avogadro, hình ảnh cấu trúc hình học phân tử H₂O xuất hiện trên màn hình Avogadro



Các bước hiển thị các tham số cấu trúc:

- Hiển thị độ dài các liên kết

Chọn lệnh View → Properties → Bond Properties.

Một bảng số liệu độ dài của các liên kết xuất hiện ở màn hình.

Bond Properties						
	Type	Start Atom	End Atom	Bond Order	Rotatable	Length (Å)
Bond 1	O-H	O	H1	1	No	0.961273
Bond 2	O-H	O	H2	1	No	0.961272

- Hiển thị góc các liên kết

Chọn lệnh View → Properties → Angle Properties.

Một bảng số liệu các góc liên kết xuất hiện ở màn hình, nối tiếp phía dưới của độ dài liên kết.

Angle Properties					
	Type	Start Atom	Vertex	End Atom	Angle (°)
Angle 1	HOH	H1	O	H2	103.5266

Lưu ý: Các giá trị kết quả mà em thu được có thể có sai khác so với kết quả trên.

Bond Properties						
	Type	Start Atom	End Atom	Bond Order	Rotatable	Length (Å)
Bond 1	H-C	H3	C	1	No	1.11166
Bond 2	H-C	H4	C	1	No	1.11158
Bond 3	C-H	C	H1	1	No	1.11161
Bond 4	C-H	C	H2	1	No	1.11164

Angle Properties					
	Type	Start Atom	Vertex	End Atom	Angle (°)
Angle 1	HCH	H3	C	H4	109.5102
Angle 2	HCH	H1	C	H3	109.4558
Angle 3	HCH	H2	C	H3	109.4521
Angle 4	HCH	H1	C	H4	109.4730
Angle 5	HCH	H2	C	H4	109.4703
Angle 6	HCH	H1	C	H2	109.4659

Kết quả độ dài liên kết N – H và góc liên kết HNH là:

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

Angle Properties					
	Type	Start Atom	Vertex	End Atom	Angle (°)
Angle 1	HNH	H1	N	H3	108.5100
Angle 2	HNH	H2	N	H3	108.6956
Angle 3	HNH	H1	N	H2	108.7012

C. BÀI TẬP TRẮC NGHIỆM

Câu 1. Phương pháp tính toán sử dụng các thông số đã được rút ra từ các dữ liệu thực nghiệm nhằm đơn giản hóa việc tính toán được gọi là:

- A. Phương pháp bán kinh nghiệm
B. Phương pháp thực nghiệm.
C. Phương pháp áp dụng thực tiễn.
D. Phương pháp lý thuyết đơn giản.

Câu 2. Thông số nào sau đây không tính được bằng phần mềm MOPAC?

- A. Thông số cấu trúc (độ dài liên kết, góc liên kết,...).
B. Năng lượng phân tử.
C. Nhiệt tạo thành.
D. Nồng độ oxygen ở các địa điểm khác nhau.

Câu 3. Ảnh sau đây thể hiện kết quả tính toán thông số nào bằng phần mềm MOPAC?

ATOM NUMBER (I)	CHEMICAL SYMBOL	BOND LENGTH (ANGSTROMS) NA:I	BOND ANGLE (DEGREES) NB:NA:I	TWIST ANGLE (DEGREES) NC:NB:NA:I	NA	NB	NC
1	C	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0	0	0
2	C	1.52735721 *	0.00000000	0.00000000	1	0	0
3	H	1.09506131 *	111.6389308 *	0.00000000	1	2	0
4	H	1.09505005 *	111.6312506 *	119.9919242 *	1	2	3
5	H	1.09505955 *	111.6381626 *	-120.0128522 *	1	2	3
6	H	1.09508546 *	111.6366118 *	0.0078891 *	2	1	3
7	H	1.09508643 *	111.6355454 *	120.0148624 *	2	1	3
8	H	1.09507125 *	111.6293090 *	-119.9898905 *	2	1	3

- A. Độ dài liên kết và góc liên kết.
B. Góc liên kết và năng lượng liên kết.
C. Nhiệt tạo thành và tổng năng lượng.
D. Độ dài liên kết và năng lượng phân tử.

Câu 4. Lệnh **OPT ENPART** được thêm vào khi mở file .mop bằng Note Pad có ý nghĩa gì?

- A. Xác định năng lượng phân tử.
B. Xác định các thông số phân tử.
C. Xác định nhiệt lượng.
D. Xác định cấu trúc và năng lượng.

Câu 5. Chọn ý đúng trong các câu sau đây.

A. Phần mềm MOPAC cho phép xây dựng cấu trúc phân tử ban đầu và hiển thị cấu trúc của phân tử sau khi tính toán.

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

C. Phần mềm Yenka cho phép xây dựng cấu trúc phân tử ban đầu và hiển thị cấu trúc của phân tử sau khi tính toán.

D. Phần mềm Note Pad cho phép xây dựng cấu trúc phân tử ban đầu và hiển thị cấu trúc của phân tử sau khi tính toán.

-----HẾT-----