

ĐẠI HỌC BÁCH KHOA ĐÀ NẴNG



GIÁO TRÌNH CƠ SỞ LÝ THUYẾT HÓA HỌC

Đào Hùng Cường

ĐẠI HỌC ĐÀ NẴNG - 2008

LỜI NÓI ĐẦU

Giáo trình Cơ sở lý thuyết hoá học được viết nhằm phục vụ cho môn học này ở bậc đại học thuộc các chuyên ngành kỹ thuật (xây dựng, môi trường, cơ khí, nhiệt, điện...), hệ đào tạo chính quy tập trung.

Giáo trình trình bày tập hợp các khái niệm, định nghĩa, lý thuyết, quy luật biến đổi... trong hoá học nhằm cung cấp cho người học những kiến thức cơ bản nhất về hoá học để vận dụng trong các lĩnh vực chuyên môn của mình.

Giáo trình gồm có 9 chương.

Bốn chương đầu (1 – 4) trình bày các vấn đề về bản chất cấu tạo của nguyên tử, phân tử; quan hệ phụ thuộc về sự biến đổi các tính chất vật lý, hoá học của các hợp chất vào quy luật sắp xếp electron trong các nguyên tử, phân tử. Dựa trên cơ sở các quy luật biến đổi đó, nêu lên ý nghĩa của bảng biến thiên tuần hoàn các nguyên tố dưới ánh sáng của thuyết cơ học lượng tử hiện đại.

Chương 5 – 7 trình bày các vấn đề về nhiệt động và động hoá học. Ba nguyên lý nhiệt động học được trình bày đơn giản nhằm mục đích ứng dụng trong các hệ hoá học. Phần động học và cân bằng hoá học đưa ra một số công thức tính vận tốc phản ứng, hằng số cân bằng và yếu tố ảnh hưởng đến các đại lượng đó.

Chương 8 – chương dung dịch trình bày các vấn đề về quá trình hoà tan, nồng độ, độ pH...; mối quan hệ giữa các loại dung dịch với nhau.

Một số vấn đề liên quan đến các quá trình biến đổi điện hoá được trình bày trong chương cuối cùng – chương 9. Từ các mô hình thí nghiệm biến đổi hoá năng thành điện năng và điện năng thành hoá năng đã đưa ra các phương pháp tính, quy luật biến đổi thế điện cực, điện phân... và trên cơ sở đó đã nêu lên một số ứng dụng cơ bản của các quá trình điện hoá.

Giáo trình này được biên soạn lần đầu tiên nên chắc chắn còn nhiều thiếu sót. Tác giả rất mong nhận được các ý kiến nhận xét của các bạn đồng nghiệp, anh chị em sinh viên và các đọc giả.

Đà Nẵng 7 - 2006
Đào Hùng Cường

Mục lục

	Trang
Chương 1. Mở đầu	1
1.1. Hoá học và nhiệm vụ của hoá học	2
1.2. Một số khái niệm cơ bản trong hoá học	2
1.3. Một số đơn vị đo trong hoá học.....	2
Chương 2. Cấu tạo nguyên tử	6
2.1. Nguyên tử	6
2.2. Mô hình nguyên tử có hạt nhân.....	6
2.3. Mô hình nguyên tử của Bohr	9
2.4. Thuyết cơ học lượng tử về cấu tạo nguyên tử	9
Chương 3. Sự biến thiên tuần hoàn cấu tạo nguyên tử. Bảng hệ thống tuần hoàn Mendeleep	18
3.1. Sự biến thiên	18
3.2. Bảng hệ thống tuần hoàn các nguyên tố hoá học Mendeleep	22
Chương 4. Liên kết hoá học	28
4.1. Một số khái niệm cơ bản của liên kết hoá học	28
4.2. Liên kết ion	30
4.3. Liên kết cộng hoá trị	32
4.4. Cấu tạo phân tử	42
Chương 5. Nhiệt động hoá học	57
5.1. Một số khái niệm cơ bản về nhiệt động học	47
5.2. Phát biểu nguyên lý I nhiệt động học	50
5.3. Nhiệt đẳng tích, đẳng áp	51
5.4. Định luật Hess và cách xác định nhiệt phản ứng theo hệ quả của định luật Hess	53
5.5. Sự phụ thuộc của hiệu ứng nhiệt vào nhiệt độ	55
5.6. Nguyên lý II nhiệt động học. Entropi	57
5.7. Nguyên lý III nhiệt động học. Entropi tuyệt đối	61
5.8. Thế đẳng nhiệt - đẳng áp	62
Chương 6. Động hoá học	65
6.1. Vận tốc phản ứng hoá học	65
6.2. Các yếu tố ảnh hưởng đến vận tốc phản ứng	66
Chương 7. Cân bằng hoá học và cân bằng pha	70
7.1. Cân bằng hoá học	70
7.2. Hằng số cân bằng	70

7.3. Sự chuyển dịch cân bằng.	
Nguyên lý chuyển dịch cân bằng Le Chatelier	72
7.4. Cân bằng pha	75
Chương 8. Dung dịch	78
8.1. Một số khái niệm chung	78
8.2. Tính chất của dung dịch chất không điện li	86
8.3. Tính chất của dung dịch chất điện li	90
8.4. Thuyết axit - bazơ	95
8.5. Chất chỉ thị màu	103
8.6. Tích số hoà tan	104
8.7. Dung dịch keo	105
Chương 9. Phản ứng oxi hoá khử và điện hoá	110
9.1. Phản ứng oxi hoá khử. Cặp oxi hoá - khử	110
9.2. Thế oxi hoá khử trong dung dịch. thế tiêu chuẩn	110
9.3. Quá trình biến đổi hoá năng thành điện năng	120
9.4. Pin và acquy	126
9.5. Ăn mòn điện hoá và cách chống ăn mòn điện hoá	129

Chương 1

MỞ ĐẦU

1.1. HOÁ HỌC VÀ NHIỆM VỤ CỦA HOÁ HỌC:

Hoá học là một trong những môn khoa học cơ bản nghiên cứu các quy luật và hình thức vận động, biến đổi của thế giới tự nhiên: trong quá trình phản ứng hoá học một chất bị mất đi và thay vào đó là xuất hiện một chất mới. Trong quá trình này vừa xảy ra sự biến đổi thành phần của hợp chất (thay đổi thành phần nguyên tử của phân tử), vừa xảy ra sự thay đổi về cấu tạo của phân tử.

Do vậy, nhiệm vụ của hoá học là nghiên cứu các hình thức vận động, các quy luật biến đổi của vật chất để trên cơ sở đó tìm cách điều khiển chúng.

Các quá trình hoá học xảy ra luôn kèm theo các hiện tượng vật lý. Ví dụ, ánh sáng sẽ phát ra khi đốt cháy magie, năng lượng sẽ thoát ra khi đốt cháy nhiên liệu. Trong nguyên tố ganvani, quá trình hoá học chính là nguyên nhân gây ra dòng điện.... Vì vậy nghiên cứu những hiện tượng này cũng chính là một trong những nhiệm vụ của hoá học.

Hoá học còn có một nhiệm vụ rất cơ bản, quan trọng nữa – đó là thu nhận, tổng hợp các hợp chất hoá học phục vụ thiết thực cho đời sống con người như: kim loại, hợp kim, phân bón, thuốc chữa bệnh, thuốc nhuộm, hợp chất cao phân tử, nhiên liệu, thủy tinh, cao su, hương liệu, thực phẩm...

ở nước ta hiện nay, việc thực hiện bốn Chương trình trọng điểm Quốc gia trong đó có hai chương trình (công nghệ vật liệu và công nghệ chế biến sau thu hoạch) đang đặt ra cho ngành hoá học những cơ hội và thách thức to lớn trong quá trình phát triển của mình.

1.2. MỘT SỐ KHÁI NIỆM CƠ BẢN TRONG HOÁ HỌC:

1.2.1. Vật chất:

Vật chất là một khái niệm tổng quát, chung (tiếng Latinh: mater rerum – người mẹ của mọi vật). Vật chất tồn tại dưới hai hình thức: chất và trường.

- Chất là tổng hợp những cấu thành gián đoạn có khối lượng tính dưới dạng hạt như electron, proton, neutron, nguyên tử, phân tử...

- Trường là lực tương tác giữa các vật, các tia... được đặc trưng bằng tính liên tục (truyền đi trong không gian dưới dạng sóng) và có khối lượng tính bằng không.

1.2.2. Nguyên tử, phân tử, chất hoá học:

a) Nguyên tử là phân tử nhỏ nhất của nguyên tố hoá học có trong thành phần của đơn chất và hợp chất.

b) Phân tử là hạt vi mô đại diện cho chất có khả năng tồn tại độc lập và mang đầy đủ tính chất hoá học của chất. Do vậy, nếu phân tử bị chia nhỏ thì nó không còn có đủ tính chất hoá học của chất. Thông thường, phân tử gồm 2 nguyên tử trở lên liên kết với nhau (ngoại trừ khí trơ gồm 1 nguyên tử). Những nguyên tử này có thể là cùng loại như phân tử oxi hay khác loại như phân tử nước, phân tử khí cacbonic... Các đơn chất của một kim loại là tập hợp những nguyên tử của kim loại đó, vì vậy trong kim loại, nguyên tử cũng chính là phân tử.

1.3. MỘT SỐ ĐƠN VỊ ĐO TRONG HOÁ HỌC:

Cũng như các ngành khoa học khác, hoá học sử dụng tất cả các đơn vị đo của Hệ thống đo lường quốc tế (SI). Ngoài ra hoá học còn sử dụng một số đơn vị đo riêng như sau:

1.3.1. Đơn vị khối lượng nguyên tử, phân tử

Đơn vị khối lượng nguyên tử (đơn vị cacbon - đ.v.C) có khối lượng bằng 1/12 khối lượng của nguyên tử cacbon ^{12}C .

Như vậy, 1 đơn vị khối lượng nguyên tử = 1 đ.v.C = $1,66 \cdot 10^{-27}$ kg, có nghĩa là trong 1 gam có chứa $6,022 \cdot 10^{23}$ đ.v.C. Giá trị $6,022 \cdot 10^{23}$ được gọi là số Avogadro (N_A).

*** Khối lượng nguyên tử tương đối của nguyên tố:**

Khối lượng nguyên tử tương đối của nguyên tố là khối lượng trung bình tính theo đ.v.C của nguyên tử của nguyên tố đó. Từ giá trị này sẽ tính ra được khối lượng nguyên tử kilogam (theo đơn vị SI). Ví dụ, khối lượng tương đối của nguyên tử lưu huỳnh bằng 32 có nghĩa là khối lượng của một nguyên tử lưu huỳnh là 32 đ.v.C tương ứng với:

$$1,66.10^{-27}\text{kg} \cdot 32 = 53,12.10^{-27}\text{kg}.$$

*** Khối lượng phân tử tương đối của hợp chất:**

Khối lượng phân tử tương đối của hợp chất là khối lượng trung bình tính theo đ.v.C phân tử của hợp chất. Từ giá trị này sẽ tính ra được khối lượng phân tử kilogam (theo đơn vị SI). Ví dụ, khối lượng phân tử tương đối của CaCO_3 bằng 100 có nghĩa là một phân tử CaCO_3 có khối lượng 100 đ.v.C, tương ứng với:

$$1,66.10^{-27}\text{kg} \cdot 100 = 1,66.10^{-25}\text{kg}.$$

1.3.2. Mol:

Mol là lượng vật chất chứa $6,022.10^{23}$ hạt vi mô (phân tử, nguyên tử, ion, electron, photon...).

*** Mol nguyên tử:**

Mol nguyên tử là giá trị tính ra gam của khối lượng nguyên tử tương đối của nguyên tố (nó chính bằng số đ.v.C nguyên tử tính ra gam). Ví dụ, từ khối lượng tương đối của nguyên tử Na bằng 23 suy ra khối lượng một mol nguyên tử Na là 23 gam.

*** Mol phân tử:**

Mol phân tử là tổng khối lượng của 6.10^{23} phân tử của hợp chất tính ra gam (nó chính bằng số đ.v.C của phân tử tính ra gam). Ví dụ, từ khối lượng tương đối của phân tử đường glucozơ $\text{C}_{12}\text{H}_{22}\text{O}_{11}$ là 342 suy ra khối lượng một mol phân tử glucozơ là 342 gam.

1.3.3. Đương lượng:

- Đương lượng của một nguyên tố là số lượng nguyên tố đó có thể kết hợp hoặc thay thế một mol nguyên tử hydro trong phản ứng hoá học.

Ví dụ, trong các hợp chất HCl , H_2O , PH_3 , CH_4 đương lượng của các nguyên tố Cl, O, P, C lần lượt là 1, 1/2, 1/3, 1/4 mol nguyên tử của nguyên tố đó.

- Khối lượng đương lượng (Đ) hay còn gọi là đương lượng khối của một nguyên tố là khối lượng tính ra gam của một đương lượng của nguyên tố đó.

- Cách tính đương lượng khối:

+ Đương lượng khối của một nguyên tố bằng khối lượng nguyên tử (A_Z) của nguyên tố đó chia cho hoá trị (n) của nó:

$$Đ_Z = \frac{A_Z}{n} \quad (1-1)$$

Trong trường hợp nguyên tố có nhiều hoá trị thì $Đ_Z$ cũng có nhiều giá trị khác nhau. Ví dụ, Fe có hai hoá trị (2, 3) nên $Đ_{Fe}$ sẽ có các giá trị 56/2, 56/3.

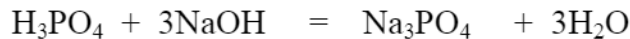
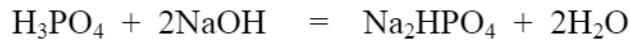
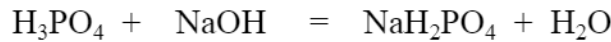
+ Đương lượng khối của một bazơ bằng khối lượng phân tử của bazơ (M_B) chia cho số nhóm OH (n) của nó:

$$Đ_B = \frac{M_B}{n} \quad (1-2)$$

+ Đương lượng khối của một axit bằng khối lượng phân tử của axit (M_A) chia cho số nguyên tử H (n) của nó:

$$Đ_A = \frac{M_A}{n} \quad (1-3)$$

Trong trường hợp axit có nhiều nguyên tử hydro tham gia phản ứng thì n được tính bằng số nguyên tử H tham gia vào phản ứng hoá học đó. Ví dụ, $Đ_A$ của H_3PO_4 ($M = 98$) trong 3 phản ứng sau:



lần lượt là 98/1, 98/2, 98/3.

+ Đương lượng khối của một ôxit bằng khối lượng phân tử của ôxit (M_O) chia cho (n) tích của số nguyên tử ôxi với 2 (tổng hoá trị của kim loại trong công thức của oxit):

$$Đ_O = \frac{M_O}{n} \quad (1-4)$$

+ Đương lượng khối của một muối bằng khối lượng phân tử của muối (M_M) chia cho (n) tích của số nguyên tử kim loại nhân với hoá trị của nó:

$$Đ_M = \frac{M_M}{n} \quad (1-5)$$

1.3.4. Số ôxi hoá

Số ôxi hoá (chỉ số ôxi hoá, bậc ôxi hoá) là giá trị điện tích nguyên tử của một nguyên tố có được nếu giả sử rằng tất cả các liên kết với nguyên tử đó đều là liên kết ion.

Số ôxi hoá đặc trưng cho khả năng chuyển dịch điện tử từ một nguyên tử này sang một nguyên tử khác. Số ôxi hoá có các giá trị âm, dương hoặc bằng không. Số ôxi hoá cao nhất của một nguyên tố chính bằng chỉ số nhóm mà nguyên tố đó chiếm chỗ trong bảng tuần hoàn Mendeleev.

Để xác định số ôxi hoá trong hoá học người ta sử dụng các quy tắc sau:

1. Số ôxi hoá các nguyên tử trong các đơn chất bằng không. Ví dụ, N_2 , S, Cr ...).
2. Kim loại luôn luôn có số ôxi hoá dương. Số ôxi hoá của kim loại kiềm luôn luôn bằng +1.
3. Hydro luôn có số ôxi hoá +1, trừ các hợp chất hydrua (NaH , CaH_2 , ...) – hydro có số ôxi hoá -1.
4. Ôxi luôn có số ôxi hoá bằng -2, trừ các hợp chất peoxit chứa nhóm $-O-O-$ (H_2O_2 , Na_2O_2 , ...), trong đó ôxi có số ôxi hoá bằng -1.
5. Số ôxi hoá của các nguyên tố còn lại có thể có giá trị dương hoặc âm.
6. Tổng các giá trị số ôxi hoá của các nguyên tử trong một phân tử bằng không.

Chương 2

CẤU TẠO NGUYÊN TỬ

2.1. NGUYÊN TỬ

Cơ sở lý thuyết cơ bản nhất về cấu tạo vật chất - đó là khả năng phân chia vật lý các chất thành những phần nhỏ mà mỗi phần vẫn giữ nguyên tính chất hoá học của nó. Các phần nhỏ đó được gọi là phân tử. Nếu tiếp tục phân chia phân tử thì nhận được những phần nhỏ hơn - đó là những nguyên tử. Một loạt các phát hiện vào cuối thế kỷ thứ XIX và đầu thế kỷ thứ XX đã cho thấy rằng nguyên tử có cấu tạo rất phức tạp.

Khi cho dòng điện đi qua chất khí và chất lỏng người ta nhận thấy trong cả phân tử lẫn nguyên tử đều có một thành phần chung - đó là điện tử. Bằng phương pháp dòng catốt đã xác định được điện tử có khối lượng $9,1095 \cdot 10^{-28}$ gam và có điện tích $-1,6 \cdot 10^{-19}$ Culong.

Bằng phương pháp cho dòng điện đi qua dung dịch điện li cũng đã mở ra các định luật điện phân và phát hiện ra sự tồn tại các nguyên tử mang điện tích dương và mang điện tích âm (các cation và anion).

Kết quả các thực nghiệm trên đây đã cho thấy rằng nguyên tử được cấu tạo rất phức tạp từ một thành phần là điện tử mang điện tích âm và một phần khác mang điện tích dương. Vậy vấn đề đặt ra là quan hệ sắp xếp như thế nào giữa điện với phần mang điện tích dương của nguyên tử? Để trả lời câu hỏi này, trên cơ sở của các thí nghiệm các nhà khoa học đã đề nghị các mô hình cấu tạo nguyên tử.

2.2. MÔ HÌNH NGUYÊN TỬ CÓ HẠT NHÂN:

2.2.1. Mô hình Thomson

Thomson nhận thấy rằng khi dùng một chùm tia X bắn phá qua lá kim loại mỏng thì chùm tia X bị tán xạ không lớn lắm khỏi hướng đi ban đầu. Từ thí nghiệm này Thomson đã đề nghị mô hình : Nguyên tử là một hình cầu điện tích dương được gắn với những hạt electron điện tích âm. Các phần tử tích điện dương cũng như các electron phân tán đều trong một khối cầu trên các lớp vỏ đồng tâm khác nhau.