

**ĐỀ CƯƠNG CHƯƠNG TRÌNH THI TUYỂN SAU ĐẠI HỌC
NĂM 2012**

**MÔN THI CƠ SỞ: CƠ SỞ LÝ THUYẾT HÓA HỌC
VÀ CẤU TẠO CHẤT**

PHẦN I: CƠ LÝ THUYẾT CÁC QUÁ TRÌNH HÓA HỌC

1. Nhiệt động học hóa học

- 1.1. Một số khái niệm và các định luật cơ bản hóa học.
- 1.2. Nguyên lý I của nhiệt động học
 - 2.2.1. Phát biểu nguyên lý I của nhiệt động học. Nội năng, entanpi, nhiệt dung, công.
 - 1.2.2. Nội năng, công
 - 1.2.3. Entanpi, nhiệt dung
- 1.3. Áp dụng nguyên lý I của nhiệt động học cho các quá trình hóa học. Nhiệt hóa học.
 - 1.3.1. Hiệu ứng nhiệt của các quá trình hóa học
 - 1.3.2. Định luật Hess và các hệ quả:
 - a. Sinh nhiệt và tiêu nhiệt của chất.
 - b. Hiệu ứng nhiệt của một số quá trình hóa học: nhiệt chuyển pha, nhiệt hòa tan, nhiệt hydrat hóa, năng lượng liên kết hóa học, nhiệt nguyên tử hóa, năng lượng ion hóa, ái lực electron, năng lượng mạng lưới tinh thể
 - 1.3.3. Sự phụ thuộc của hiệu ứng nhiệt vào nhiệt độ - Định luật Kirchoff
- 1.4. Nguyên lý II của nhiệt động học. Entropi
 - 1.4.1. Quá trình thuận nghịch và không thuận nghịch
 - 1.4.2. Entropi và ý nghĩa vật lý của nó.
 - 1.4.3. Biến thiên entropi của quá trình tự diễn biến trong hệ cô lập
 - 1.4.4. Tính biến thiên entropi của một số quá trình thuận nghịch: Giãn nở đẳng

nhật khí lí tưởng, chuyển pha tại nhiệt độ chuyển pha, phản ứng hóa học, sự phụ thuộc của entropi vào nhiệt độ

1.5. Thế đẳng nhiệt - đẳng áp và chiều diễn biến của các quá trình hóa học.

1.6. Tính biến thiên thế đẳng nhiệt - đẳng áp của một số quá trình. Thế đẳng áp đẳng nhiệt tạo thành chuẩn của chất.

2. Cân bằng hóa học

2.1. Khái niệm về phản ứng thuận nghịch và trạng thái cân bằng hóa học.

2.2. Hằng số cân bằng hóa học K_P và K_C trong hệ đồng thể và hệ dị thể.

2.3. Ảnh hưởng của nhiệt độ lên hằng số cân bằng hóa học

2.4. Sự chuyển dịch cân bằng hóa học. Nguyên lý Le Chatelier

2.5. Ứng dụng của hiện tượng chuyển dịch cân bằng hóa học

2.6. Cân bằng pha.

2.6.1. Khái niệm về cân bằng pha. Quy tắc pha.

2.6.2. Giảm đồ trạng thái của chất nguyên chất

3. Động hóa học

3.1. Định nghĩa tốc độ phản ứng hóa học.

3.2. Các yếu tố ảnh hưởng đến tốc độ của phản ứng hóa học.

3.2.1. Ảnh hưởng của nồng độ.

a. Định luật tác dụng khối lượng. Bậc phản ứng

b. Phản ứng đơn giản và phản ứng phức tạp: khái niệm cơ chế và phân tử số của phản ứng hóa học.

3.2.2. Ảnh hưởng của nhiệt độ

a. Hệ số nhiệt độ của tốc độ phản ứng.

b. Phương trình Arrhenius

c. Thuyết va chạm hoạt động. Khái niệm về năng lượng hoạt động hóa học của phản ứng.

d. Thuyết trạng thái chuyển tiếp

3.2.3. Ảnh hưởng của chất xúc tác

a. Định nghĩa và đặc điểm của quá trình xúc tác

b. Cơ chế xúc tác đồng thể.

c. Cơ chế xúc tác dị thể.

d. Cơ chế xúc tác enzim.

3.3. Phương trình động học của các phản ứng hóa học (bậc 0, bậc 1, bậc 2)

3.4. Giới thiệu về phản ứng dây chuyền và phản ứng quang hóa.

4. Dung dịch

4.1. Sự hình thành dung dịch

4.1.1. Khái niệm về các hệ phân tán: huyền phù, dung dịch keo và dung dịch phân tử.

4.1.2. Nhiệt động học của sự hình thành dung dịch lỏng

4.1.3. Các phương pháp biểu diễn nồng độ dung dịch

4.1.4. Định luật phân bố và sự chiết

4.2. Tính chất hóa lý của các dung dịch loãng của các chất tan không điện li và không bay hơi.

4.2.1. Sự giảm áp suất hơi bão hòa của dung dịch so với dung môi tinh khiết.

4.2.2. Hệ quả của sự giảm áp suất hơi của dung dịch: sự tăng nhiệt độ sôi và sự giảm nhiệt độ hóa rắn của dung dịch so với dung môi tinh khiết

4.2.3. Áp suất thẩm thấu của dung dịch

4.3. Cân bằng trong dung dịch các chất điện li.

4.3.1. Sự điện li của các axit, bazơ và muối trong dung dịch nước.

4.3.2. Độ điện li, hằng số điện li

4.3.3. Sự điện li của nước. Khái niệm về pH

4.3.4. Một số quan điểm hiện đại về axit, bazơ.

4.3.5. Tính pH của một số dung dịch axit, bazơ, muối.

4.3.6. Hệ đệm

4.3.7. Chuẩn độ axit - bazơ. Chất chỉ thị màu axit - bazơ

4.3.8. Cân bằng thủy phân

4.3.9. Cân bằng trong dung dịch của các chất điện li khó tan. Tích số tan

4.3.10. Cân bằng tạo phức trong dung dịch. Hằng số bền và hằng số không bền của phức chất.

5. Phản ứng oxi hóa - khử. Điện hóa học

5.1. Phản ứng oxi hóa - khử

5.1.1. Định nghĩa và các khái niệm. Cặp oxi hóa - khử

5.1.2. Phân loại phản ứng oxi hóa - khử

5.1.3. Cân bằng phương trình phản ứng oxi hóa - khử

5.2. Điện hóa học

5.2.1. Pin Ganvanic: Cấu tạo. Giải thích hoạt động của pin.

5.2.2. Sức điện động của pin, mối liên hệ giữa công điện và thế đẳng nhiệt đẳng áp (ΔG), thế khử chuẩn của cặp oxi hóa - khử

5.2.3. Sự phụ thuộc của sức điện động của pin và thế khử của cặp oxi hóa khử vào nồng độ, phương trình Nernst. Pin nồng độ

5.2.4. Sự phụ thuộc của sức điện động của pin vào nhiệt độ

5.2.4. Các loại điện cực.

5.2.5. Chiều và cân bằng của phản ứng oxi hóa - khử

5.2.6. Sự điện phân.

Phần II: CẤU TẠO CHẤT

6. Cấu tạo nguyên tử – hệ thống tuần hoàn các nguyên tố

6.1 Khái quát về nguyên tử.

6.1.1. Thành phần cấu trúc của nguyên tử (electron, proton, notron).

6.1.2. Hệ thức liên hệ giữa khối lượng và năng lượng, giữa khối lượng và vận tốc chuyển động của vật.

6.2. Thuyết lượng tử Plank và đại cương về cơ học lượng tử.

6.2.1. Thuyết lượng tử Plank.

6.2.1.1. Bức xạ điện từ và đại cương về quang phổ.

6.2.1.2. Thuyết lượng tử Plank. Tính sóng hạt của ánh sáng.

6.2.2. Đại cương về cơ học lượng tử.

6.2.2.1. Sóng vật chất de Broglie. Hệ thức bất định Heisenberg

6.2.2.2. Hàm sóng. Phương trình Schrodinger.

6.2.2.3. Ứng dụng cơ học lượng tử cho mô hình hộp thế một chiều.

6.3. Nguyên tử hiđro và ion giống hiđro.

6.3.1. Phương trình Schrodinger cho bài toán hiđro.

6.3.2. Kết quả giải bài toán nguyên tử hiđro (Năng lượng của electron. Hàm

sóng. Mômen động lượng và hình chiếu của mômen động lượng). ý nghĩa các số lượng tử: n, l, m_l .

6.3.3. Giảm đồ năng lượng và phổ phát xạ của nguyên tử hydro. Những ion giống hydro.

6.3.4. Spin của electron- Obitan toàn phần.

6.4. Nguyên tử nhiều electron.

6.4.1. Các trạng thái của lớp vỏ electron. Mô hình về các hạt độc lập.

6.4.2. Các obitan nguyên tử và giảm đồ năng lượng của các electron.

6.4.3. Các nguyên lý và qui tắc để xây dựng cấu hình electron nguyên tử.

6.4.4. Phương pháp gần đúng Slater xác định các OA và năng lượng của electron.

6.5. Hệ thống tuần hoàn các nguyên tố.

6.5.1. Hệ thống tuần hoàn các nguyên tố (định luật tuần hoàn, cấu trúc hệ thống tuần hoàn).

6.5.2. Cấu hình electron nguyên tử của các nguyên tố (xét theo chu kỳ và theo nhóm).

6.5.3. Sự biến thiên tuần hoàn một số tính chất của các nguyên tố (bán kính nguyên tử, năng lượng ion hoá, ái lực với electron, độ âm điện,...).

7. Cấu tạo phân tử và liên kết hoá học.

7.1. Khái quát về phân tử và liên kết hoá học.

7.1.1. Khái niệm chung về phân tử

7.1.2. Sự phân loại liên kết. Sơ đồ biểu diễn liên kết cộng hoá trị theo Lewis.

7.1.3. Các đặc trưng quan trọng của liên kết và một số tính chất chính của phân tử.

7.2. Lý thuyết liên kết hoá trị (VB).

7.2.1. Khái quát về sự khảo sát phân tử bằng cơ học lượng tử. Phép tính biến phân và việc xác định các hàm gần đúng.

7.2.2. Phương pháp Heitler- London và phân tử H_2 .

7.2.3. Giải thích định tính các vấn đề về liên kết theo VB.

7.2.4. Qui tắc hoá trị spin.

7.2.5. Sự lai hoá các obitan nguyên tử. Các loại liên kết σ, π, δ .

7.3. Lý thuyết obitan phân tử (MO).

7.3.1. Luận điểm cơ bản của thuyết MO.

7.3.2. Thuyết MO và ion phân tử H_2^+ .

7.3.3. Thuyết MO và phân tử hai nguyên tử đồng hạch A_2 : O_2 , N_2 ,... và dị hạch AB : CO , NO , HF , LiH , ...

7.3.4. Thuyết MO và phân tử nhiều nguyên tử như BeH_2 , CO_2 ,...

7.3.5. Phương pháp HMO và hệ các electron π không định cư. Sơ đồ (hay giản đồ) phân tử π .

7.4. Liên kết ion. Tương tác giữa các phân tử. Liên kết hiđro.

7.4.1. Khái quát về liên kết ion trong phân tử.

7.4.2. Năng lượng liên kết trong phân tử ion.

7.4.3. Tính (độ) ion của liên kết.

7.4.4. Tương tác Van der waals. Liên kết hiđro.

7.5. Liên kết trong phân tử của phức chất.

7.5.1. Đại cương về phức chất.

7.5.2. Thuyết VB giải thích sự hình thành liên kết trong phức chất.

7.5.3. Thuyết trường phối tử về phức chất (mô hình và giới hạn; sự tách mức năng lượng d; phổ hấp thụ; năng lượng tách và dãy hoá học quang phổ; cấu hình electron và từ tính của phức).

7.5.4. Thuyết MO giải thích sự hình thành liên kết trong phức chất (khái quát, phức bát diện $[Ti(H_2O)_6]^{3+}$). Quan hệ kết quả của thuyết MO với các thuyết VB và trường phối tử.

8. Các hệ ngưng tụ: liên kết và cấu trúc.

8.1. Đại cương về tinh thể.

8.2. Tinh thể ion.

8.3. Tinh thể kim loại.

8.4. Tinh thể nguyên tử.

8.5. Tinh thể phân tử.

8.6. Chất rắn vô định hình. Tinh thể lỏng và trạng thái lỏng.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Vũ Đăng Độ, Cơ sở lý thuyết các quá trình hóa học, NXB Giáo Dục, tái bản lần 9, Hà Nội, 2010.
2. Vũ Đăng Độ, Trịnh Ngọc Châu, Nguyễn Văn Nội, Bài tập cơ sở lý thuyết các quá trình hóa học. NXB Giáo Dục, tái bản lần thứ 4, Hà Nội, 2010
3. René DiDier, Hóa đại cương (tập 1, tập 2, tập 3) NXB Giáo dục, 1997 (dịch từ tiếng Pháp)
4. Đào Đình Thức, Hoá học Đại cương. Tập 1. NXB ĐHQG Hà Nội, 2009
5. Đào Đình Thức, Bài tập Hoá học Đại cương. NXB ĐHQG Hà Nội, 2008
6. Lâm Ngọc Thiêm, Cấu tạo chất đại cương. NXB KH và KT Hà Nội, 1999.
7. Phạm Văn Nhiêu, Hóa đại cương (Phần cấu tạo chất), NXB ĐHQG Hà Nội, 2003.