

SỬ DỤNG CHỨC NĂNG SOLVE TRÊN MÁY TÍNH CẦM TAY CASIO ĐỂ GIẢI MỘT SỐ BÀI TOÁN HÓA HỌC Ở BẬC ĐẠI HỌC

Hoàng Thị Thuỳ Dương^{1*} và Hồ Sỹ Linh²

¹Phòng Khoa học và Công nghệ, Trường Đại học Đồng Tháp, Việt Nam

²Khoa Khoa học tự nhiên, Trường Đại học Đồng Tháp, Việt Nam

*Tác giả liên hệ: Hoàng Thị Thuỳ Dương, Email: httduong@dthu.edu.vn

Lịch sử bài báo

Ngày nhận: 04/7/2023; Ngày nhận chỉnh sửa: 16/8/2023; Ngày duyệt đăng: 24/8/2023

Tóm tắt

Máy tính cầm tay CASIO được mọi người sử dụng nhiều nhất do có tốc độ tính toán nhanh và độ chính xác cao, được cập nhật và nâng cấp khả năng tính toán liên tục. Hiện nay máy tính CASIO được sử dụng ở khắp nơi đặc biệt là ở trường học. Từ dòng máy tính CASIO fx-570MS trở lên, CASIO đã bổ sung chức năng SOLVE, đó là một bước đột phá lớn trong việc giải gần đúng phương trình bậc cao. Hóa học bậc đại học liên hệ chặt chẽ với toán học, trong quá trình xử lý các bài toán hóa học thường thu được các phương trình bậc cao, do đó việc sử dụng máy tính CASIO với chức năng SOLVE ngày càng cần thiết cho giảng viên, sinh viên. Trong bài báo này, chúng tôi đã sử dụng chức năng SOLVE trên máy tính CASIO để giải quyết một số bài toán hóa học ở bậc đại học trong các chuyên ngành Hóa lý và Hóa phân tích.

Từ khóa: Bài toán hóa học, máy tính CASIO, SOLVE.

USING THE SOLVE FUNCTION OF THE CASIO CALCULATOR TO RESOLVE SOME CHEMICAL PROBLEMS AT UNIVERSITY LEVEL

Hoang Thi Thuy Duong^{1*} and Ho Sy Linh²

¹Research Affairs Office, Dong Thap University, Vietnam

²Faculty of Natural Sciences, Dong Thap University, Vietnam

*Corresponding author: Hoang Thi Thuy Duong, Email: httduong@dthu.edu.vn

Article history

Received: 04/7/2023; Received in revised form: 16/8/2023; Accepted: 24/8/2023

Abstract

The CASIO handheld calculator is the most popular among users because of its high accuracy, quick calculation speed, and ongoing updating and upgrading of its calculation capabilities. CASIO calculators are available today at schools. With models in the CASIO calculator fx-570MS series and higher, CASIO has included the SOLVE function, a significant advancement of approximating higher-order equations. Due to the tight connection between Chemistry at the university level and the frequent generation of high-order equations during the processing of chemistry problems, using CASIO calculators with the SOLVE function is becoming increasingly crucial for chemistry teaching. This article solves some university-level chemistry problems in the disciplines of Physical Chemistry and Analytical Chemistry using the SOLVE function on the CASIO computer.

Keywords: CASIO calculator, SOLVE, chemistry problems.

DOI: <https://doi.org/10.52714/dthu.12.8.2023.1155>

Trích dẫn: Hoàng, T. T. D., & Hồ, S. L. (2023). Sử dụng chức năng SOLVE trên máy tính cầm tay CASIO để giải một số bài toán hóa học ở bậc đại học. *Tạp chí Khoa học Đại học Đồng Tháp*, 12(8), 79-87. <https://doi.org/10.52714/dthu.12.8.2023.1155>.

1. Đặt vấn đề

Máy tính cầm tay là một thiết bị điện tử được sử dụng để thực hiện các phép tính, từ số học cơ bản đến các phép tính phức tạp. Hiện nay, máy tính cầm tay được phổ biến khắp nơi, đặc biệt các dòng máy tính khoa học vì khả năng tính toán nhanh và chính xác. Trong các dòng máy tính khoa học thì các dòng máy CASIO được ưa chuộng nhất vì tốc độ tính toán nhanh và luôn được cập nhật, ngày càng có nhiều phép tính phục vụ việc học tập.

Trong hóa học, khi xử lý các bài toán thường thu được các phép tính hoặc các phương trình toán học khá phức tạp, đặc biệt là hóa học ở bậc đại học. Việc giải chính xác các phương trình toán học là rất phức tạp, do đó các bài toán hóa học thường chỉ yêu cầu tính các nghiệm gần đúng. Việc sử dụng các kỹ thuật toán học để tính nghiệm gần đúng khá khó khăn với các học sinh, sinh viên hóa học. Một số công trình công bố liên quan như Nguyễn và cs. (2020) gồm Hóa học 10, 11, 12..

Các máy tính CASIO từ fx-570MS trở đi đã tích hợp sẵn chức năng giải gần đúng phương trình $f(x) = 0$, kết quả thu được cuối cùng là nghiệm gần đúng của phương trình, đó là chức năng SOLVE. Chức năng này chỉ cho phép tìm ra một nghiệm của phương trình, do đó nếu phương trình có nhiều nghiệm thì việc tìm nghiệm phụ thuộc vào giá trị ban đầu (x_0). Hiện nay dòng máy tính CASIO mới nhất là fx-880BTG, tuy nhiên với chức năng SOLVE thì dòng fx-580VN X dễ sử dụng hơn. Một số công trình công bố liên quan như Lê và Lê (2019), Lê và Hoàng (2018), Lê và Lê (2015), Lê và Lê (2017), Nguyễn (2020), Nguyễn & cs. (2020).

2. Sử dụng chức năng SOLVE trên máy tính cầm tay CASIO để giải bài tập hóa học ở bậc đại học

Trong hóa học các bài tập tính toán thường gặp ở hai chuyên ngành Hóa lý và Hóa phân tích. Trong đó chuyên ngành Hóa lý các phép tính toán thường gặp ở các học phần: Nhiệt động lực học hóa học và Động hóa học. Chuyên ngành Hóa phân tích các phép tính toán chủ yếu ở học phần Cơ sở lý thuyết Hóa phân tích như tính toán pH, tạo phức, kết tủa... và có thể sử dụng ở các học phần Hóa phân tích tiếp theo.

Trong hóa học, các bài tập thường kèm theo các điều kiện cụ thể và thường chỉ chấp nhận nghiệm dương, đó cũng là nghiệm duy nhất

thỏa mãn các điều kiện. Do đó việc xác định giá trị ban đầu (x_0) là rất quan trọng. Việc sử dụng chức năng SOLVE để tính nhanh chóng các nghiệm gần đúng sẽ giúp sinh viên tiết kiệm được thời gian và giải quyết nhanh hơn các vấn đề khó, từ đó nâng cao chất lượng học tập cũng như năng lực tư duy. Để sử dụng chức năng SOLVE, ấn tổ hợp phím **[SHIFT]** **[CALC]**.

2.1. Bài tập Nhiệt động lực học hóa học

Bài tập nhiệt động lực học hóa học rất phong phú và đa dạng, từ đơn giản đến phức tạp. Trong bài báo này, chúng tôi chỉ tập trung vào các bài tập có liên quan tới nhiệt độ như biến thiên entropy ΔS , enthalpy ΔH , thế đẳng áp ΔG ...

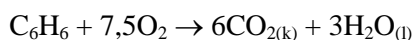
Ví dụ 2.1.1: Nhiệt đốt cháy của benzene $\Delta H^\circ_{298} = -3268 \text{ kJ/mol}$. Tính nhiệt độ của ngọn lửa benzene cháy ở 1 atm trong không khí (coi 20% O_2 và 80% N_2).

Cho biết lượng O_2 vừa đủ cho phản ứng, nhiệt độ lúc đầu là $25^\circ C$.

Nhiệt hóa hơi của nước $\Delta H^\circ_{H_2O \text{ hh}} = 40,66 \text{ kJ/mol}$ và các dữ liệu sau:

Chất	$C_p^\circ \text{ (J/mol.K)}$
$CO_{2(k)}$	$26,8 + 42,3 \cdot 10^{-3} T$
$N_{2(k)}$	$27,10 + 6 \cdot 10^{-3} T$
$H_2O_{(l)}$	75,3
$H_2O_{(k)}$	$30,2 + 1,0 \cdot 10^{-2} T$

Hướng dẫn: Phương trình phản ứng:



Vì nước có thể ở thể lỏng hoặc thể khí, nên cần xét 2 trường hợp:

- Nếu nước ở thể lỏng ($T < 373K$). Ta có :

$$C_p^\circ = 6C_{p(CO_2, k)}^\circ + 4,75 \cdot C_{p(N_2, k)}^\circ + 3C_{p(H_2O, l)}^\circ = 1199,7 + 0,4338T$$

Nhiệt độ cháy đẳng áp được xác định theo phương trình:

$$\Delta H_T^\circ = \Delta H_{298}^\circ + \int_{298}^T \Delta C_p^\circ dT = 0$$

Thay số ta có:

$$-3268 \cdot 10^3 + \int_{298}^T (1199,7 + 0,4338T) dT = 0 \quad (1)$$

Cách giải thông thường (không dùng máy tính CASIO): Biến đổi phương trình (1) ta thu được phương trình bậc 2:

$$0,2169T^2 + 1199,7T - 3644772,2 = 0$$

Giải phương trình bậc 2 ta có: $T = 2179K$ hoặc $T = -7710K$. Vì nhiệt độ tuyệt đối là $0K$ nên ta lấy nghiệm $T = 2179K > 373K$ (loại).

- Nếu nước ở thể khí ($T > 373K$). Ta có :

$$C_p^o = 6C_{p(CO_2, k)}^o + 4,7,5.C_{p(N_2, k)}^o + 3C_{p(H_2O, k)}^o = 1064,4 + 0,4638T$$

Nhiệt độ cháy đẳng áp được xác định theo phương trình:

$$\Delta H_T^o = \Delta H_{298}^o + \int_{298}^T \Delta C_p^o dT + \int_{298}^{373} \Delta C_{H_2O(l)}^o dT + \Delta H_{H_2O, hh}^o = 0$$

$$\Leftrightarrow -3268.10^3 + \int_{298}^T (1064,4 + 0,4638T) dT + \int_{298}^{373} 3,75,3 dT + 3,40,66.10^3 = 0 \quad (2)$$

Cách giải thông thường: Biến đổi phương trình (2) thu được phương trình bậc 2:

$$0,2319T^2 + 1064,4T - 3466862,35 = 0$$

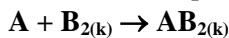
Giải phương trình bậc 2 ta có: $T = 2201$ hoặc $T = -6791K$. Vì nhiệt độ tuyệt đối là $0(K)$ nên ta lấy nghiệm $T = 2201K > 373K$ (thỏa mãn).

Sử dụng máy tính CASIO: Nhập phương trình (1) hoặc (2) bằng cách gán $T = x$ vào máy tính và sử dụng chức năng SOLVE với $x_0 = 373$ ta được $T = 2201K$ hoặc $T = -6791K$ như trên.

Vậy nhiệt độ ngọn lửa benzene cháy trong không khí là $2201K$, tức $1928^\circ C$.

Rõ ràng, việc sử dụng máy tính cầm tay làm cho việc tính toán trở nên nhanh chóng hơn nhiều, đồng thời độ chính xác còn cao hơn so với việc giải không dùng máy tính cầm tay. Mặt khác, việc tính toán thông thường biến đổi các phương trình (1), (2) dưới dấu tích phân về dạng phương trình đại số (hoặc phương trình siêu việt) còn tiềm ẩn các sai sót.

Ví dụ 2.1.2: Cho phản ứng giữa $A_{(r)}$ và $B_{2(k)}$:



Cho biết:

$$\Delta H_T^o = -297740,1 + 0,77T \text{ (J/mol);}$$

$$\Delta S_T^o = 7,45 - 9,84 \ln T \text{ (J/mol.K)}$$

Hãy lập hàm biến thiên năng lượng tự do Gibbs theo nhiệt độ T và tính nhiệt độ để phản ứng tự diễn biến theo chiều nghịch.

Hướng dẫn: Ta có:

$$\Delta G_T^o = \Delta H_T^o - T.\Delta S_T^o = -297740,1 - 6,68T + 9,84T \ln T$$

Để phản ứng diễn biến theo chiều nghịch thì $\Delta G^o > 0$, tức là:

$$-297740,1 - 6,68T + 9,84T \ln T > 0 \quad (3)$$

Việc giải bất phương trình (3) không dùng CASIO là rất khó khăn vì đây là phương trình siêu việt, việc tìm nghiệm rất phức tạp.

Thao tác trên máy tính CASIO, nhập phương trình (3) và sử dụng chức năng SOLVE với $T_0 = 273$ ta được nghiệm $T > 3976K$ (*) \rightarrow Vậy nhiệt độ $t > 3703^\circ C$

Nhận xét (*) được kiểm tra bằng các giá trị ΔG_T^o lân cận: $\Delta G_{3975}^o = -40,16 \text{ J/mol} < 0$ và $\Delta G_{3977}^o = 44,56 \text{ J/mol} > 0$. Vì G_T^o đi từ $T = 3975$ đến $T = 3977$ chuyển từ âm sang dương. Bất đẳng thức (3) $G_T^o > 0 \rightarrow T > 3976$.

Tương tự các nghiệm của bất phương trình tiếp theo dưới đây cũng đã được kiểm tra.

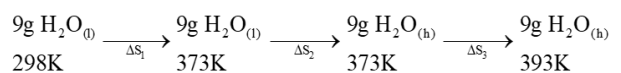
Ví dụ 2.1.3: Người ta xác định được biến thiên entropy của quá trình chuyển 9g nước lỏng từ $25^\circ C$ thành hơi ở $t^\circ C$ dưới áp suất 1atm là 63,76 J/K. Tính nhiệt độ t ?

Cho biết: Nhiệt hóa hơi của nước ở $100^\circ C$ là $\Delta H_{hh} = 40590 \text{ (J/g)}$;

Nhiệt dung mol của hơi nước $C_{p,h} = 30,13 + 11,3.10^{-3}T \text{ (J/mol.K)}$;

Nhiệt dung mol của nước lỏng $C_{p,l} = 75,30 \text{ (J/mol.K)}$

Hướng dẫn: Ta có quá trình chuyển hóa:



Ta có:

$$\Delta S = \Delta S_1 + \Delta S_2 + \Delta S_3 = \int_{T_1}^{T_2} nC_{p,l} \frac{dT}{T} + \frac{\Delta H}{T} + \int_{T_1}^{T_2} nC_{p,h} \frac{dT}{T}$$

$$\Leftrightarrow \int_{298}^{373} 0,5,75,3 \frac{dT}{T} + \frac{0,5,40590}{373} + \int_{373}^T 0,5(30,13 + 11,3.10^{-3}T) \frac{dT}{T} = 63,76 \text{ (J/K)} \quad (4)$$

Việc giải theo cách không dùng máy tính CASIO tính để dàng các đại lượng ΔS_1 ; ΔS_2

$$\Delta S_1 = \int_{298}^{373} 0,5.75,3 \frac{dT}{T} = 0,5.75,3(\ln 373 - \ln 298) = 8,452;$$

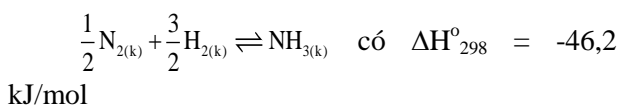
$$\Delta S_2 = \frac{0,5.40590}{373} = 54,410$$

Tuy nhiên, việc tính ΔS_3 là rất khó khăn, vì việc tính tích phân cũng như giải phương trình logarithm khá phức tạp.

$$\Delta S_3 = \int_{373}^T 0,5(30,13 + 11,3.10^{-3}T) \frac{dT}{T} \quad (5)$$

Thao tác trên máy tính CASIO, nhập phương trình (4) hoặc (5) và sử dụng chức năng SOLVE với $T_0 = 373$ ta được nghiệm $T = 393K \rightarrow$ Vậy nhiệt độ $t = 120^\circ C$

Bài tập đề xuất 2.1.4: Phản ứng:



Tính nhiệt độ để $\Delta H_T^0 > 0$.

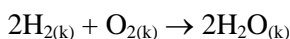
Cho: $\Delta C_p(NH_3, k) = 24,7 + 37,48.10^{-3}T$ (J/mol.K);

$$\Delta C_p(N_2, k) = 27,8 + 4,18.10^{-3}T \text{ (J/mol.K);}$$

$$\Delta C_p(H_2, k) = 28,6 + 1,18.10^{-3}T \text{ (J/mol.K)}$$

(Đáp số: $T > 2802K$)

Bài tập đề xuất 2.1.5: Cho phản ứng:



Có biến thiên năng lượng tự do Gibbs xác định theo biểu thức:

$$\Delta G^0 = -495856 + 0,03T^2 + 7,80T \ln T + 10^5 T^{-1}.$$

Tính nhiệt độ để phản ứng nghịch tự diễn biến.

(Đáp số: $T > 3151K$)

2.2. Bài tập Động hóa học

Bài tập động hóa học cũng đa dạng, phong phú. Trong bài báo này, chúng tôi chỉ tập trung vào các bài tập có liên quan tới hằng số tốc độ, thời gian của các phản ứng bậc 1, bậc 2...

Ví dụ 2.2.1: Phản ứng: $CH_3COOC_2H_5 + NaOH \rightarrow CH_3COONa + C_2H_5OH$ có hằng số tốc độ bằng 2,38 L/mol.min. Dung dịch ban đầu gồm ethyl acetate 0,05M và NaOH. Tính nồng độ NaOH

biết khi 50% ethyl acetate phản ứng thì hết khoảng thời gian là 3,4min.

Hướng dẫn: Dựa vào đơn vị của hằng số tốc độ \rightarrow Phản ứng và phản ứng hóa là bậc 2.

Vì phản ứng bậc 2 thì nồng độ đầu các chất ảnh hưởng đến cách tính \rightarrow cần xét 2 trường hợp.

- Nếu $C_{NaOH} = C_{ester} = 0,05M$ ta có:

$$t_{1/2} = \frac{1}{ka} = \frac{1}{2.83.0,05} = 7,07 \text{ min} > 3,4 \text{ min (Loại)}$$

- Nếu $C_{NaOH} = a \neq C_{ester} = 0,05M$ ta có:

$$kt = \frac{1}{a-b} \ln \frac{b(a-x)}{a(b-x)}$$

$$\Leftrightarrow 2.38.3,4 = \frac{1}{a-0,05} \ln \frac{0,05(a-0,025)}{a(0,05-0,025)} \quad (6)$$

Phương trình (6) là phương trình siêu việt nên việc giải thông thường không sử dụng máy tính CASIO là rất khó khăn. Thao tác trên máy tính CASIO, nhập phương trình (6) và sử dụng chức năng SOLVE với $a_0 = 0,03$ ta được nghiệm $a = 0,1002M$. Vậy $C_{NaOH} = 0,1002M$.

Ví dụ 2.2.2.: Cho phản ứng $HCHO + H_2O_2 \rightarrow HCOOH + H_2O$ có tốc độ tỉ lệ thuận với nồng độ các chất tham gia phản ứng.

- **Thí nghiệm 1:** Chuẩn bị dung dịch đầu có H_2O_2 và HCHO cùng nồng độ 1M thì sau 1,25h thấy nồng độ HCOOH là 0,5M.

- **Thí nghiệm 2:** Chuẩn bị dung dịch ban đầu có nồng độ H_2O_2 gấp đôi HCHO, sau 2h thấy nồng độ HCOOH là 0,2M.

Tính thời gian để HCHO bị oxy hóa 50% trong thí nghiệm 2.

Hướng dẫn: Vì $v = k.[HCHO].[H_2O_2]$ nên phản ứng bậc 2. Ta có:

- Thí nghiệm 1: Vì HCHO và H_2O_2 cùng nồng độ và $t_{1/2} = 1,25h$ nên:

$$k = \frac{1}{t_{1/2}.a} = \frac{1}{1,25.1} = 0,8 \text{ L/mol.h}$$

- Thí nghiệm 2: Gọi C_{HCHO} là $a > 0,2M$, ta có nồng độ H_2O_2 là $b = 2a$.

$$kt = \frac{1}{a-b} \ln \frac{b(a-x)}{a(b-x)} \Leftrightarrow 0,8.2 = \frac{1}{-a} \ln \frac{2(a-0,2)}{(2a-0,2)} \quad (7)$$

Phương trình (7) cũng là phương trình siêu việt nên giải không sử dụng máy tính CASIO rất phức tạp. Thao tác trên máy tính CASIO, nhập phương trình (7) và sử dụng chức năng SOLVE với $a_0 = 0,3$ ta có $a = 0,3389M > 0,2M$ (thỏa mãn).

Đề HCHO bị oxy hóa 50% $\rightarrow x = \frac{1}{2} a = 0,16945M$

$$t = \frac{1}{(a-b)k} \ln \frac{b(a-x)}{a(b-x)} = \frac{1}{-0,3389 \cdot 0,8} \ln \frac{2(0,3389-0,16945)}{(2 \cdot 0,3389-0,16945)} \approx 1,50 \text{ h}$$

Vậy thời gian để HCHO bị oxy hóa 50% là 1,5h.

Bài tập đề xuất 2.2.3: Cho phản ứng thuận nghịch: $A \xrightleftharpoons[k_2]{k_1} B$ có $k_1 + k_2 = 4 \text{ phút}^{-1}$.

Ban đầu chỉ có chất A, sau thời gian 1 phút thì 70% chất A biến thành chất B. Hãy tính các hằng số tốc độ k_1, k_2

(Đáp số: $k_1 = 2,852 \text{ phút}^{-1}; k_2 = 1,148 \text{ phút}^{-1}$)

Bài tập đề xuất 2.2.4: Cho phản ứng $2H_{2(k)} + O_{2(k)} \rightarrow 2H_2O_{(k)}$ có biến thiên năng lượng tự do Gibbs xác định theo biểu thức:

$$\Delta G^\circ = -495856 + 0,03T^2 + 7,80T \ln T + 10^5 T^{-1}.$$

Tính nhiệt độ để phản ứng nghịch tự diễn biến.

(Đáp số: $T > 3151K$)

Bài tập đề xuất 2.2.5: Phản ứng chuyển hóa của một loại kháng sinh trong cơ thể người có hằng số tốc độ bằng $5,3 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$. Việc điều trị bằng loại kháng sinh trên chỉ có kết quả nếu hàm lượng kháng sinh trong cơ thể luôn lớn hơn $2\text{mg}/1\text{kg}$ cơ thể. Một bệnh nhân nặng 70kg uống cứ 4h phải uống một viên kháng sinh đó. Khi bệnh nhân sốt trên đến $38,5^\circ\text{C}$ thì khoảng cách giữa hai lần uống thay đổi như thế nào? Biết $E_a = 93,322 \text{ kJ/mol}$.

Hướng dẫn: - Phản ứng chuyển hóa kháng sinh là bậc 1 (dựa vào đơn vị hằng số tốc độ)

- Hàm lượng kháng sinh trong mỗi viên thuốc:

Đáp số: 300mg

- Tính hằng số tốc độ ở $38,5^\circ\text{C}$ dựa vào E_a :

Đáp số: $k' = 6,307 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$

- Tính thời gian chuyển hóa:

Đáp số: $t = 12080\text{s} = 3,36\text{h}$.

2.3. Bài tập tính pH dung dịch

Các định luật cơ bản của hóa học là cơ sở cho việc tính toán cân bằng trong dung dịch. Đặc biệt là định luật tác dụng khối lượng, định luật bảo toàn

điện tích và định luật bảo toàn nồng độ ban đầu (phân số nồng độ).

Nội dung Hóa phân tích thì khá đa dạng và phong phú, tuy nhiên bài tập nào cũng liên quan đến pH, do đó trong bài báo này chúng tôi chủ yếu tập trung vào các bài toán tính pH, tức tính toán cân bằng trung dung dịch acid – base.

Quy trình tính toán theo 4 bước như sau:

- **Bước 1:** Mô tả các cân bằng xảy ra trong dung dịch

- **Bước 2:** Viết biểu thức định luật bảo toàn điện tích

- **Bước 3:** Sử dụng biểu thức phân số nồng độ để biến đổi biểu thức định luật bảo toàn điện tích thành phương trình ẩn $h = [H^+]$, $m, C, V \dots$

- **Bước 4:** Thay số và giải phương trình thu được ở bước 3 và tính toán $[i] \dots$

Với bài tập cân bằng acid – base: giá trị pH được ghi với 2 chữ số thập phân; giá trị thể tích V (mL) được ghi với ít nhất 3 chữ số có nghĩa; giá trị khối lượng m (gam) và nồng độ C (M) được ghi với ít nhất 5 chữ số có nghĩa.

Với bài tập tính pH = $-\lg([H^+])$ chỉ lấy nghiệm $h = [H^+] > 0$. Do đó khi bấm trên máy tính CASIO cần chọn giá trị đầu h_0 phù hợp. Thường thì nhập giá trị đầu h_0 đầu tiên là $h_0 = 10^{-7}$.

Ví dụ 2.3.1: Phosphoric acid và muối của nó là một loại phân bón quan trọng và có nhiều ứng dụng trong xử lý kim loại, thực phẩm, chất tẩy rửa, chế tạo kem đánh răng. Một lượng nhỏ H_3PO_4 được sử dụng rộng rãi để tạo vị chua hay vị chát cho nhiều thức uống như cola và bia. Một loại cola (có $d = 1\text{g/mL}$) có chứa 0,05% H_3PO_4 về khối lượng. Tính pH của cola, giả sử nguyên nhân gây ra tính acid của cola là do H_3PO_4 .

Hướng dẫn: Ta có: $C_{H_3PO_4} = 5,1020 \cdot 10^{-3} \text{ M}$

Thực hiện các bước theo quy trình 4 bước nêu trên ta thu được phương trình:

$$h = \frac{10^{-14}}{h} + 5,1020 \cdot 10^{-3} \cdot \frac{10^{-2,15} h^2 + 2,10^{-9,36} h + 3 \cdot 10^{-21,68}}{h^3 + 10^{-2,15} h^2 + 10^{-9,36} h + 10^{-21,68}} \quad (8)$$

Với cách giải thông thường không sử dụng CASIO, biến đổi phương trình (8) ta thu được phương trình bậc 5:

$$h^5 + 7,0795 \cdot 10^{-3} h^4 - 3,6119 \cdot 10^{-5} h^3 - 4,4543 \cdot 10^{-12} h^2 - 7,5630 \cdot 10^{-24} h - 2,0893 \cdot 10^{-31} = 0 \quad (9)$$

Việc giải phương trình (8) rất phức tạp và dễ mắc sai lầm, còn phương trình (9) là phương trình bậc 5. Phương trình (8) hoặc (9) không thể giải theo cách thông thường.

Thao tác trên máy tính CASIO, nhập phương trình (8) và sử dụng chức năng SOLVE với giá trị $h_0 = 10^{-7}$ ta được nghiệm $h = 3,4352 \cdot 10^{-3} M$

Vậy pH của nước cola là:

$$pH = -\lg(3,4352 \cdot 10^{-3}) = 2,46.$$

Phương trình (9) là phương trình bậc 5 nên có tối đa 5 nghiệm thực. Dùng chức năng SOLVE trên máy tính CASIO có thể tìm các nghiệm thực (có 3 nghiệm $h_1 = 3,4352 \cdot 10^{-3}$; $h_2 = -1,2332 \cdot 10^{-7}$; $h_3 = -1,0515 \cdot 10^{-2}$) nhưng chỉ $h = 3,4352 \cdot 10^{-3} > 0$ là thỏa mãn.

Phương trình (8) ở dạng phức tạp hơn nhưng việc tính toán bằng chức năng SOLVE cũng tương tự phương trình (9). Tuy nhiên rõ ràng việc tính theo (8) sẽ nhanh hơn rất nhiều, do không cần phải biến đổi thành phương trình (9).

Ví dụ 2.3.2: Một trong những thuốc thử đặc trưng để tìm ion Pb^{2+} trong dung dịch là K_2CrO_4 , vì tạo kết tủa $PbCrO_4$ màu vàng, tan được trong dung dịch NaOH. Trong khi đó, Na_2S tạo với ion Pb^{2+} kết tủa PbS màu đen, không tan trong dung dịch NaOH. Tính pH của dung dịch X chứa Na_2S 0,02M và K_2CrO_4 0,03M. Cho H_2S có $pK_i = 7,02$; 12,90 và $HCrO_4^-$ có $pK_a = 6,50$.

Hướng dẫn: Thực hiện các bước theo quy trình 4 bước nêu trên ta thu được phương trình:

$$h + 0,1 = \frac{10^{-14}}{h} + 0,02 \cdot \frac{10^{-7,02} h + 2 \cdot 10^{-19,92}}{h^2 + 10^{-7,02} h + 10^{-19,92}} + 0,03 \cdot \frac{h + 2 \cdot 10^{-6,50}}{h + 10^{-6,50}} \quad (10)$$

Tương tự *Ví dụ 2.3.1* thì việc biến đổi phương trình (10) thu được phương trình bậc 5 nên nếu giải bằng cách thông thường sẽ rất khó khăn.

Thao tác trên máy tính CASIO, nhập phương trình (10) và sử dụng chức năng SOLVE với giá trị $h_0 = 10^{-12}$ ta được nghiệm $h = 6,0418 \cdot 10^{-13} M$

Vậy pH của dung dịch X:

$$pH = -\lg(6,0418 \cdot 10^{-13}) = 12,22.$$

Khi sử dụng máy tính CASIO để giải phương trình (10), nếu nhập $h_0 = 10^{-7}$ thu được nghiệm $h = -4,1625 \cdot 10^{-8} < 0$. Vì dung dịch X chứa muối của ion kim loại kiềm và ion S^{2-} nên có môi trường kiềm, do đó cần nhập giá trị đầu $h_0 \ll 10^{-7}$.

Ví dụ 2.3.3: Giấm có tính acid với thành phần chính là acetic acid. Từ xưa, giấm đã được sử dụng nhiều trong ẩm thực. Nồng độ acetic acid với giấm ăn thường là 5%, còn với mục đích bảo quản thực phẩm thì dùng nồng độ cao hơn, lên tới 18%. Từ “giấm” có nguồn gốc từ *vin aigre*, từ tiếng Pháp cổ, có nghĩa là “rượu chua”.

Một mẫu giấm ăn chứa 5% acetic acid được pha loãng thành dung dịch acetic acid 0,10M. Thêm 5,0 mL dung dịch NaOH 0,10M vào 50 mL dung dịch acetic acid trên. Hãy tính pH dung dịch Y thu được. Biết CH_3COOH có $pK_a = 4,76$

Hướng dẫn: Thực hiện các bước theo quy trình 4 bước nêu trên ta thu được phương trình:

$$h + \frac{1}{110} = \frac{10^{-14}}{h} + \frac{1}{11} \cdot \frac{10^{-4,76}}{h + 10^{-4,76}} \quad (11)$$

Phương trình (11) là phương trình bậc 3:

$$h^3 + 9,1083 \cdot 10^{-3} h^2 - 1,4218 \cdot 10^{-6} h - 1,7378 \cdot 10^{-19} = 0 \quad (12)$$

Phương trình (12) là phương trình bậc 3, có thể giải bằng cách không cần dùng máy tính CASIO. Tuy nhiên, công thức nghiệm là rất phức tạp.

Nếu dùng máy tính CASIO thì có thể sử dụng chức năng giải phương trình bậc 3 sẽ thu được 3 nghiệm thực ($h_1 = -9,2618 \cdot 10^{-3}$; $h_2 = 1,5351 \cdot 10^{-4}$; $h_3 = -1,2223 \cdot 10^{-13}$), nhưng chức năng này không thể dùng cho phương trình (11).

Nhập phương trình (11) và sử dụng chức năng SOLVE với $h_0 = 10^{-7}$ ta có $h = 1,5352 \cdot 10^{-4}$

Vậy pH của dung dịch Y:

$$pH = -\lg(1,5352 \cdot 10^{-4}) = 3,81.$$

Ví dụ 2.3.4: Khác với nước nguyên chất chỉ có pH bằng 7,0, nước mưa lại có tính acid yếu do hoà tan các oxide acid. Trong không khí, sulfur dioxide (SO_2) và nitrogen monoxide (NO) bị oxid hoá thành sulfur trioxide (SO_3) và nitrogen dioxide (NO_2), các chất này phản ứng với nước tạo thành sulfuric acid (H_2SO_4) và nitric acid (HNO_3). Những nguyên nhân này tạo thành mưa acid có pH khoảng 4,2, tuy nhiên cũng có lúc đo được những giá trị rất thấp cỡ 1,7.

a) Ở điều kiện chuẩn ($25^\circ C$, 1 bar), SO_2 có độ tan 33,9 lít SO_2 /lít nước. Tính pH của dung dịch bão hòa SO_2 . Cho $SO_2(aq)$ có $pK_i = 1,76$; 7,21.

b) Sau một vụ phun trào núi lửa, pH của nước mưa là 3,2. Giả sử chỉ có H_2SO_4 gây ra hiện tượng

này, tính nồng độ H_2SO_4 trong nước mưa. Cho H_2SO_4 có $pK_2 = 1,99$.

Hướng dẫn:

a) Ta có: $n_{SO_2} = 1,3675 \text{ mol} \Rightarrow C_{SO_2} = 1,3675 \text{ M}$.

Thực hiện các bước theo quy trình 4 bước nêu trên ta thu được phương trình:

$$h = \frac{10^{-14}}{h} + 1,3675 \cdot \frac{10^{-1,76}h + 2 \cdot 10^{-8,97}}{h^2 + 10^{-1,76}h + 10^{-8,97}} \quad (13)$$

Tương tự các ví dụ trên, phương trình (13) là phương trình bậc 4 nên không thể giải theo cách thông thường sẽ khó khăn. Giải phương trình (13) bằng máy tính CASIO, nhập phương trình và SOLVE với $h_0 = 10^{-7}$ ta có $h = 1,4571 \cdot 10^{-1}$.

Vậy pH của dung dịch SO_2 bão hòa:

$$pH = -\lg(1,4571 \cdot 10^{-1}) = 0,84.$$

b) Gọi nồng độ H_2SO_4 là C. Tương tự, thực hiện theo quy trình 4 bước nêu trên ta có:

$$h = \frac{10^{-14}}{h} + C \cdot \frac{h + 2 \cdot 10^{-1,99}}{h + 10^{-1,99}} \quad (14)$$

Thay $h = 10^{-pH} = 10^{-3,2}$ vào phương trình (14) và SOLVE ta được $C = 3,2491 \cdot 10^{-4} \text{ M}$.

Ví dụ 2.3.5: Dung dịch đệm vạn năng còn gọi là đệm Britton-Robinson, được dùng rất phổ biến trong hóa học thực nghiệm do có khoảng đệm rất rộng từ pH = 2 – 12. Để pha dung dịch đệm có pH khác nhau, người ta thêm dung dịch NaOH 0,2M vào dung dịch hỗn hợp các acid: H_3PO_4 0,04M, CH_3COOH 0,04M và H_3BO_3 0,04M.

a) Tính pH của dung dịch thu được khi thêm 6,0mL dung dịch NaOH 0,2M vào 10,0mL hỗn hợp acid. Cho H_3PO_4 có $pK_i = 2,15; 7,21; 12,32$; CH_3COOH có $pK_a = 4,76$; H_3BO_3 có $pK'_a = 9,25$

b) Tính thể tích NaOH 0,2M vào 10 mL dung dịch acid trên để được dung dịch có pH = 4,50.

Hướng dẫn:

a) Ta có: $C_{NaOH} = 0,075 \text{ M}; C_{\text{mỗi acid}} = 0,025 \text{ M}$

Thực hiện theo quy trình 4 bước trên ta có:

$$h + 0,075 = \frac{10^{-14}}{h} + 0,025 \cdot \frac{10^{-2,15}h^2 + 2 \cdot 10^{-9,36}h + 3 \cdot 10^{-21,68}}{h^3 + 10^{-2,15}h^2 + 10^{-9,36}h + 10^{-21,68}} + 0,025 \cdot \frac{10^{-4,76}}{h + 10^{-4,76}} + 0,025 \cdot \frac{10^{-9,25}}{h + 10^{-9,25}} \quad (15)$$

Phương trình (15) là phương trình bậc 7 nên không thể giải theo cách thông thường. Nhập

phương trình (15) và sử dụng chức năng SOLVE với $h_0 = 10^{-7}$ ta có $h = 5,8814 \cdot 10^{-9}$.

Vậy pH của dung dịch SO_2 bão hòa:

$$pH = -\lg(5,8814 \cdot 10^{-9}) = 8,23.$$

b) Gọi V là thể tích NaOH cần thêm, ta có:

$$C_{NaOH} = \frac{0,2V}{V+10}; C_{\text{acid}} = \frac{0,4}{V+10} \text{ (M)}.$$

Thực hiện tương tự câu a) ta có phương trình:

$$h + \frac{0,2V}{V+10} = \frac{10^{-14}}{h} + \frac{0,4}{V+10} \cdot \frac{10^{-2,15}h^2 + 2 \cdot 10^{-9,36}h + 3 \cdot 10^{-21,68}}{h^3 + 10^{-2,15}h^2 + 10^{-9,36}h + 10^{-21,68}} + \frac{0,4}{V+10} \cdot \left(\frac{10^{-4,76}}{h + 10^{-4,76}} + \frac{10^{-9,25}}{h + 10^{-9,25}} \right) \quad (16)$$

Nhập phương trình (16) và SOLVE theo ẩn V với $h = 10^{-4,50}$ ta có $V = 2,70 \text{ mL}$.

Ví dụ 2.3.6: Tiêu chuẩn nước sinh hoạt chỉ cho phép hàm lượng chì nhỏ hơn $10 \mu\text{g/L}$. Để làm giảm hàm lượng chì trong nước thải nhiễm độc chì, người ta có thể dùng vôi để kết tủa chì dưới dạng $Pb(OH)_2$. Biết tích số tan $Pb(OH)_2$ có $pK_S = 20$. Các phức hidroxơ của chì: $Pb(OH)^+$, $Pb(OH)_2^*$; $Pb(OH)_3^-$ có hằng số bền tổng cộng tương ứng là: $\beta_1 = 10^{6,9}$; $\beta_2 = 10^{10,8}$; $\beta_3 = 10^{13,3}$ ($Pb(OH)_2^*$ là $Pb(OH)_2$ ở dạng phức tan) và $M_{Pb} = 207 \text{ g/mol}$. Ở pH bao nhiêu thì hàm lượng chì tan trong nước đạt tiêu chuẩn nước sinh hoạt?

Hướng dẫn:

Gọi độ tan của chì trong nước là S ($\mu\text{g/L}$), ta có:

$$S = ([Pb^{2+}] + [Pb(OH)^+] + [Pb(OH)_2] + [Pb(OH)_3^-]) \cdot 207 \cdot 10^6$$

Đặt $[OH^-] = oh$ và sử dụng quy trình tương tự tính pH ta thu được phương trình:

$$S = 10^{-20} \left(\frac{1}{oh^2} + \frac{10^{6,9}}{oh} + 10^{10,8} + 10^{13,3} \cdot oh \right) \cdot 207 \cdot 10^6 \quad (17)$$

Để hàm lượng chì đạt tiêu chuẩn nước sinh hoạt thì $S \leq 10 \mu\text{g/L}$, tức là:

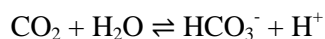
$$10^{-20} \left(\frac{1}{oh^2} + \frac{10^{6,9}}{oh} + 10^{10,8} + 10^{13,3} \cdot oh \right) \cdot 207 \cdot 10^6 \leq 10 \quad (18)$$

Biến đổi bất phương trình (18) thu được bất phương trình bậc 3, có thể giải bằng phương pháp thông thường, nhưng mất nhiều thời gian. Việc giải bất phương trình bậc 3 có thể dùng chức năng có sẵn trong máy tính CASIO.

Nhập phương trình (18) vào máy và SOLVE với $oh_0 = 10^{-7}$ ta có $oh > 1,7836 \cdot 10^{-6}$.

Vậy pH để hàm lượng chỉ tan trong nước đạt tiêu chuẩn nước sinh hoạt là $\text{pH} > 8,25$.

Bài tập đề xuất 2.3.7: Trong cơ thể người, pH của máu được giữ ổn định tại khoảng 7,35 - 7,45. Sự thay đổi pH rất nguy hiểm và có thể dẫn đến tử vong. Carbonic acid giữ vai trò đệm rất quan trọng để giữ pH của máu ổn định theo cân bằng:



Ở điều kiện sinh lý (37°C) carbonic acid có $\text{pK}_i = 6,1; 10,0$. Giả sử nồng độ carbonate tổng trong huyết tương là $2,52 \cdot 10^{-2}\text{M}$.

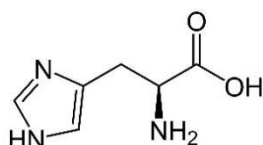
a) Tính nồng độ các dạng carbonate trong máu ở pH 7,4.

b) Hệ đệm này chống lại sự thay đổi acid hay base tốt hơn? Giải thích?

c) Trong máu, lactic acid (ở 37°C $\text{pK}_{\text{HL}} = 3,6$) được trung hòa bởi bicarbonate. Khi hoạt động thể chất cường độ cao, lactic acid (HL) được tạo thành trong các cơ, đặc biệt là trong chuyển hóa kỵ khí. Tính pH của máu trong các cơ khi nồng độ HL là $2,70 \cdot 10^{-3}\text{M}$ (**Đáp số: pH = 6,84**)

Bài tập đề xuất 2.3.8: Histidine là α -amino acid có nhóm imidazole, có liên quan đến các quá trình trao đổi chất trong cơ thể. Khi acid hóa, histidine (HA) bị proton hóa thành H_2A^+ , H_3A^{2+} .

Biết H_3A^{2+} có $\text{pK}_i = 1,82; 6,00; 9,17$



a) Tính pH dung dịch HA 0,0100M.

(**Đáp số: pH = 7,58**)

b) Tính nồng độ HClO_4 cần thiết lập trong dung dịch HA 0,01M để có pH = 2 (coi thể tích dung dịch thay đổi không đáng kể). Tính nồng độ dạng trung hòa của histidine trong dung dịch thu được (dung dịch X).

(**Đáp số: C = $2,3978 \cdot 10^{-2}\text{M}$; $[\text{HA}] = 6,0212 \cdot 10^{-7}\text{M}$**)

Bài tập đề xuất 2.3.9: Vôi tôi có tên khoa học là calci hydroxide với công thức $\text{Ca}(\text{OH})_2$, được sử dụng nhiều trong công, nông nghiệp. Nhưng vôi tôi được sử dụng rộng rãi nhất trong việc xử lý nước thải, giúp cản trở sự ăn mòn và bảo vệ môi trường tự nhiên bằng cách trung hòa các acid tạo nên chất thải trong ngành công nghiệp, làm mềm nước cứng tạm thời (chứa bicarbonate HCO_3^-), giúp tẩy uế và diệt trừ vi khuẩn.

Ở điều kiện thường độ tan của $\text{Ca}(\text{OH})_2$ trong nước là $2,2942 \cdot 10^{-2}\text{M}$. Tính pH của dung dịch bão hòa $\text{Ca}(\text{OH})_2$. Cho Ca^{2+} có $\eta = 10^{-12,6}$.

(**Đáp số: pH = 12,55**)

3. Kết luận

Chức năng SOLVE có thể dùng để giải quyết nhiều dạng bài tập hóa học khác, đặc biệt là hóa học ở phổ thông. Tuy nhiên, trong phạm vi bài báo này chúng tôi đưa ra một số dạng bài tập hóa học thường gặp ở bậc đại học, đặc biệt là các chủ đề Hóa lý và Hóa phân tích. Các phép tính trong bài báo có thể sử dụng các dòng máy tính CASIO từ fx-570MS trở lên, tuy nhiên chúng tôi khuyên dùng dòng máy tính CASIO fx-580VN X là tốt nhất do tốc độ tính toán nhanh và đa dạng.

Lời cảm ơn. Bài báo được hỗ trợ bởi đề tài khoa học và công nghệ cấp cơ sở, mã số SPD2022.01.11.

Tài liệu tham khảo

- Lê, N. N. H. & Lê, T. H. (2019), “Dùng máy tính cầm tay Casio fx-580VN X hỗ trợ giải một số dạng toán giải tích lớp 12”, *Tạp chí Khoa học Trường Đại học Đồng Tháp*, 38, 26-33. <https://doi.org/10.52714/dthu.38.6.2019.695>.
- Lê, T. H. & H. C. H. (2018). Dùng máy tính cầm tay Casio fx 570 VNplus hỗ trợ giải một số dạng bài tập trắc nghiệm môn toán nội dung Giải tích. *Tạp chí Khoa học Đại học Đồng Tháp*, 32, 28-35. <https://doi.org/10.52714/dthu.32.6.2018.584>.
- Lê, T. H. & Lê, V. H. (2015). Đề xuất một số giải thuật sử dụng phím CALC trong lập trình giải toán máy tính cầm tay. *Tạp chí Khoa học Đại học Sư phạm Thành phố Hồ Chí Minh*, 12(78), 126-137.
- Lê, V. H. & Lê, T. H. (2017). Đề xuất một số giải thuật lập trình trên máy tính CASIO fx-570VN PLUS để giải nhanh một số dạng toán sơ cấp. *Tạp chí Khoa học Đại học Đồng Tháp*, 26, 92-99. <https://doi.org/10.52714/dthu.26.6.2017.478>.
- Nguyễn, T. N. (2020). Dùng máy tính cầm tay CASIO fx-580VN X hỗ trợ giải một số dạng bài tập toán thực tiễn. *Tạp chí Khoa học Đại học Sài Gòn*, 77, 111-123.
- Nguyễn, T. N., Lê, T. H. & Phạm, N. K. (2020). Nghiên cứu ứng dụng chức năng Table của

- máy tính Casio fx-580VN X vào hỗ trợ giải một số dạng toán phổ thông. *Tạp chí Khoa học Đại học Đồng Tháp*, 9(3), 3-12. <https://doi.org/10.52714/dthu.9.3.2020.785>.
- Nguyễn, X. T., Hoàng, T. T. H. & Quách, V. L. (2020). *Giải nhanh bằng máy tính bỏ túi môn Hóa học 10*. NXB Đại học Quốc gia Hà Nội.
- Nguyễn, X. T., Hoàng, T. T. H. & Quách, V. L. (2020). *Giải nhanh bằng máy tính bỏ túi môn Hóa học 11*. NXB Đại học Quốc gia Hà Nội.
- Nguyễn, X. T., Hoàng, T. T. H., & Quách, V. L. (2020). *Giải nhanh bằng máy tính bỏ túi môn Hóa học 12*. NXB Đại học Quốc gia Hà Nội.