

**TRƯỜNG ĐẠI HỌC KHOA HỌC  
KHOA HÓA HỌC**

# **SÁCH GIAO BÀI TẬP**

**HỌC PHẦN: HÓA CẤU TẠO  
SỐ TÍN CHỈ: 03**

**NGƯỜI BIÊN SOẠN: TS. BÙI MINH QUÝ**

**THÁI NGUYÊN – 2013**

**PHẦN 1:**  
**CẤU TẠO NGUYÊN TỬ**  
**HỆ THỐNG TUẦN HOÀN CÁC NGUYÊN TỐ**

## CHƯƠNG 1. KHÁI QUÁT VỀ NGUYÊN TỬ, PHÂN TỬ

1. Hãy phân biệt sự khác nhau giữa:

- Khối lượng nguyên tử và khối lượng mol nguyên tử
- Khối lượng phân tử và khối lượng mol phân tử

ĐS: - *Khối lượng nguyên tử cho biết khối lượng của nguyên tử đó gấp bao nhiêu lần đơn vị khối lượng nguyên tử ( $1/12 m_{12C}$ ). Như thế khối lượng nguyên tử không có thứ nguyên. Song về mặt vật lý phải hiểu rằng: khối lượng nguyên tử là số đo của nguyên tử tính ra đơn vị u (đvC).*

- *Khối lượng mol nguyên tử của một nguyên tố là khối lượng của một mol nguyên tử nguyên tố đó. Số trị của khối lượng mol nguyên tử đồng nhất với khối lượng nguyên tử của nguyên tố tương ứng.*

- *Khối lượng phân tử bằng tổng khối lượng nguyên tử của các nguyên tử tạo thành phân tử.*

- *Khối lượng mol phân tử của một chất là khối lượng của một mol phân tử chất đó.*

2. Phát biểu nội dung và cho ví dụ minh họa về các định luật sau:

- Định luật thành phần không đổi;
- ĐL bảo toàn khối lượng;
- ĐL Gay – Lussac
- Định luật Avogadro
- ĐL Dalton

3. Quan hệ giữa khối lượng  $m$  và năng lượng  $E$  được xác định như thế nào? Phân biệt mối quan hệ này trong các hệ vi mô và vĩ mô.

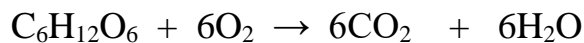
4. Hãy tính phân tử khối của một chất khí, biết rằng 2 g khí đó ở  $25^{\circ}\text{C}$ , dưới áp suất 1 atm có thể tích bằng 1,53 lit.

ĐS:  $M = 32$ .

5. Khi điện phân nước, người ta xác định được: ứng với 1g hidro sẽ thu được 7,936g oxi. Hỏi:

- a) Một nguyên tử oxi có khối lượng gấp bao nhiêu lần khối lượng của một nguyên tử hidro.
- b) Nếu quy ước chọn khối lượng nguyên tử hidro làm đơn vị thì nguyên tử oxi có nguyên tử khối là bao nhiêu.
- c) Ngược lại, nếu chọn 1/16 khối lượng nguyên tử oxi làm đơn vị thì H có nguyên tử khối bằng bao nhiêu.
- d) Biết rằng khối lượng của nguyên tử  $^{12}\text{C}$  gấp 11,9059 lần khối lượng của nguyên tử H, hỏi nếu chọn 1/12 khối lượng nguyên tử  $^{12}\text{C}$  làm đơn vị (quy ước hiện nay) thì H, O có nguyên tử khối là bao nhiêu.

6. a) Trong phản ứng cháy glucozo:



Một nhiệt lượng tỏa ra bằng 673 kcal/mol.

Hãy tính khối lượng hụt khối  $\Delta m$  trong phản ứng đó.

b) Trong phản ứng tổng hợp nước  $\text{H}_2 + 1/2\text{O}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O}$  hệ thống tỏa ra có năng lượng bằng 286 kJ/mol.

Hãy tính độ biến thiên tương đối của khối lượng:  $|\Delta m|/m$  ( $M_0 = 18\text{g/mol}$ )

c) Từ các kết quả thu được hãy cho nhận xét về độ hụt khối trong các phản ứng hóa học.

ĐS. a.  $3 \cdot 10^{-8}\text{g}$ .

b.  $1,8 \cdot 10^{-10}$

7. Hai nguyên tố hóa học X và Y ở điều kiện thường đều là chất rắn. Số mol của X có trong 8,4g nhiều hơn 0,15 mol so với số mol Y có trong 6,4 g. Biết khối lượng mol của X nhỏ hơn khối lượng mol của Y là 8,0 g.

a) Xác định điện tích hạt nhân Z và tên của 2 nguyên tố.

b) Tìm số mol của X và Y.

ĐS: a) X: Mg; Y: S

b)  $n_X = 0,35$ ;  $n_Y = 0,2$ .

8. Một nguyên tử gồm 2 đồng vị có số nguyên tử tỷ lệ với nhau là 27 : 23. Hạt nhân đồng vị thứ nhất chứa 35 proton và 44 notron. Hạt nhân thứ hai nhiều hơn hạt nhân thứ nhất 2 notron. Hãy xác định số khối trung bình và tên nguyên tố trên.

ĐS:  $A(\text{Br}) = 79,9$

9. Nguyên tử R có tổng số các loại hạt bằng 115. Số hạt mang điện nhiều hơn số hạt không mang điện là 25 hạt. Tính số khối và số điện tích hạt nhân của R.

ĐS:  $Z = 35; A = 80.$

10. Biết tổng số hạt của nguyên tử X là 126, trong đó số notron nhiều hơn số electron là 12 hạt.

a) Tính số proton Z và số khối A của X.

b) Biết rằng số nguyên tố R có 3 đồng vị X, Y, Z. Số khối của X bằng trung bình cộng số khối của Y và Z. Hiệu số notron của Y và Z gấp 2 lần số proton của hidro. Hãy xác định số khối của Y và Z.

ĐS: a)  $Z = 38; A_X = 88$

b)  $A_Y = 87; A_Z = 89$

11. Bốn dạng đồng vị của nguyên tố X có đặc điểm sau:

Tổng số khối của bốn đồng vị là 825.

Tổng số notron của đồng vị thứ ba và thứ tư lớn hơn số notron của đồng vị thứ nhất là 121 hạt.

Hiệu số số khối đồng vị thứ hai và thứ tư nhỏ hơn hiệu số số khối đồng vị thứ nhất và thứ ba là 5 đơn vị.

Số khối của đồng vị thứ tư bằng 33,5% tổng số số khối của 3 đồng vị kia.

Từ các dữ kiện trên, hãy xác định số khối của 4 đồng vị và điện tích hạt nhân của nguyên tử X.

ĐS:  $Z_X = 82; A_1 = 208; A_2 = 206; A_3 = 204; A_4 = 207;$

## CHƯƠNG 2. ĐẠI CƯƠNG VỀ HẠT NHÂN NGUYÊN TỬ

1. Nêu khái quát về hạt nhân nguyên tử: thành phần cấu trúc hạt nhân, kích thước hạt nhân, spin hạt nhân, năng lượng liên kết, năng lượng liên kết riêng.

2. Thế nào là hiện tượng phóng xạ tự nhiên, hiện tượng phóng xạ nhân tạo, bản chất của các tia phóng xạ.

3. Các quá trình phóng xạ tuân theo phương trình động học nào?

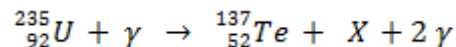
Chứng minh rằng chu kỳ bán rã của quá trình phóng xạ  $t_{1/2} = \ln 2/k$  ( $k$  – hằng số tốc độ phản ứng).

4. a) Electron – vôn (eV) là động năng của e khi chuyển động qua một đoạn đường có hiệu điện thế  $U = 1V$ . Hãy tính năng lượng đó ra jun (J).

b) Áp dụng hệ thức tương đối Einstein, hãy tính năng lượng tương ứng với một đơn vị khối lượng nguyên tử (1u) ra J và MeV.

c) Hạt nhân Liti có khối lượng  $m = 7,0160u$ . Hãy tính năng lượng liên kết riêng của hạt nhân Liti. ( $m_p = 1,00724u$ ,  $m_n = 1,00862u$ ).

5. Xét phản ứng phân hạch đơn giản sau:



Hãy xác định hạt nhân X.

6. a) Trong dãy phóng xạ  ${}_{92}^{238}\text{U}$ , qua một dãy phóng xạ liên tiếp  ${}_{92}^{238}\text{U}$  biến thành đồng vị bền  ${}_{82}^{206}\text{Pb}$ . Hỏi trong quá trình phóng xạ đó có bao nhiêu hạt  $\alpha$ , bao nhiêu hạt  $\beta$  được phóng ra từ một hạt nhân  ${}_{92}^{238}\text{U}$ .

b) Hỏi có bao nhiêu hạt  $\alpha$ , hạt  $\beta$  được phóng ra trong dãy biến đổi phóng xạ chuyển  ${}_{90}^{232}\text{Th}$  thành  ${}_{82}^{208}\text{Pb}$ .

ĐS: a)  $N_\alpha = 8$ ;  $N_\beta = 6$

b)  $N_\alpha = 6$ ;  $N_\beta = 4$

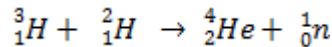
7. a) Một chất phóng xạ có chu kỳ bán rã  $t_{1/2} = 30$  năm. Hỏi trong bao lâu 99,9% số nguyên tử của chất đó bị phân rã phóng xạ.

b) Một chất phóng xạ có chu kỳ bán hủy  $t_{1/2} = 500$  năm. Hỏi sau bao lâu thì 75% khối lượng ban đầu của nguyên tố đó bị phân hủy phóng xạ?

ĐS: a)  $t = 300$  năm;

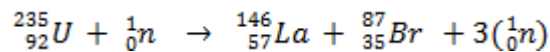
b)  $t = 1000$  năm.

8. a) Hãy tính năng lượng tỏa ra (năng lượng nhiệt hạch) trong phản ứng tổng hợp sau:



Cho biết khối lượng của  ${}^3_1\text{H}$ ,  ${}^2_1\text{H}$ ,  ${}^4_2\text{He}$ ,  ${}^1_0\text{n}$  theo thứ tự là: 3,01604u; 2,01410u; 4,00260u; 1,00862u.

b) Hãy tính năng lượng được giải phóng đối với một nguyên tử, một mol nguyên tử  ${}^{235}_{92}\text{U}$  trong phản ứng phân hạch



Cho biết: Khối lượng của  ${}^{235}_{92}\text{U}$ ,  ${}^1_0\text{n}$ ,  ${}^{146}_{57}\text{La}$ ,  ${}^{87}_{35}\text{Br}$  lần lượt bằng 235,044u; 1,00862u; 145,943u; 86,912u.

ĐS: a) 17,5624 MeV.

b) 159,23 MeV;  $1,54 \cdot 10^{13}$ J

9. a)  ${}^{226}_{88}\text{Ra}$  có chu kỳ bán hủy là 1590 năm. Hãy tính khối lượng của một mẫu Ra có cường độ phóng xạ bằng 1 Curi (  $1\text{Ci} = 3,7 \cdot 10^{10}\text{Bq}$  )

b) Cũng câu hỏi trên đối với  ${}^{40}_{19}\text{K}$  với chu kỳ bán hủy  $1,49 \cdot 10^9$  năm, đối với  ${}^{137}_{56}\text{Ba}$  với chu kỳ bán hủy là 2,6 phút.

ĐS:  $M_{\text{Ra}} = 1\text{g}$ ;  $m_{\text{K}} = 166\text{kg}$ ;  $m_{\text{Ba}} = 1,89 \cdot 10^{-9}\text{g}$ .

10. a) Một mẫu phóng xạ radon (Rn), ở thời điểm  $t = 0$ , phóng ra  $7,0 \cdot 10^4$  hạt  $\alpha$  trong 1 giây; sau 6,6 ngày mẫu đó phóng ra  $2,1 \cdot 10^4$  hạt  $\alpha$ /s. Hãy tính chu kỳ bán hủy  $t_{1/2}$ .

b) Chu kỳ bán hủy của Poloni (Po) bằng 138 ngày. Hỏi khối lượng của Po mà người ta cần phải sử dụng để có một cường độ phóng xạ bằng 1 Ci là bao nhiêu? (  $1\text{Ci} = 3,7 \cdot 10^{10}\text{Bq} = 3,7 \cdot 10^{10}\text{pr/s}$  )

ĐS: a)  $t_{1/2} = 3,8$  ngày; b) Áp dụng CT:  $I = -dN/dt = kN$ ;  $m = 0,222\text{mg}$ .

### CHƯƠNG 3: THUYẾT LƯỢNG TỬ PLANCK VÀ ĐẠI CƯƠNG VỀ CƠ HỌC LƯỢNG TỬ

1. Nêu mối quan hệ giữa năng lượng và tần số dao động.
2. Hãy cho biết quan hệ giữa tần số của ánh sáng chiếu vào bề mặt kim loại và động năng của e sau khi được giải phóng khỏi bề mặt kim loại. Cho biết ý nghĩa của ngưỡng quang điện  $\nu_0$ .
3. Hãy phát biểu giả thuyết De Broglie về sóng vật chất. Hãy cho biết tính nghiệm đúng của giả thuyết này đối với các vật vi mô, vĩ mô?
4. Hãy phát biểu nguyên lý bất định Heisenberg và cho biết những hệ quả rút ra từ nguyên lý đó.
5. Áp dụng giả thiết của De Broglie (Đờ Bơri), hãy tính bước sóng liên kết  $\lambda$  cho các trường hợp dưới đây rồi rút ra kết luận cần thiết.

a) Electron trong nguyên tử H chuyển động với vận tốc  $v = 10^6$  m/s;  $m = 9,1 \cdot 10^{-31}$  kg

b) Một chiếc xe khách với khối lượng 1 tấn chuyển động với vận tốc 100 km/h. Cho  $h = 6,625 \cdot 10^{-34}$  Js.

ĐS: a)  $\lambda = 7,27 \text{ \AA}$

b)  $\lambda = 2,38 \cdot 10^{-38}$  m – đối với hệ vĩ mô, sóng liên kết không có ý nghĩa.

6. Trên cơ sở của nguyên lý bất định Heisenberg, hãy tính độ bất định về vị trí  $\Delta x$  rồi cho nhận xét đối với các trường hợp sau đây:

a) Giả thiết electron chuyển động với vận tốc khá lớn:  $v = 3 \cdot 10^6$  m/s;  $m = 9,1 \cdot 10^{-31}$  kg.

b) Một viên đạn súng săn với  $m = 1$  g chuyển động với vận tốc  $v = 30$  m/s.

Giả thiết rằng sai số tương đối về tốc độ cho cả hai trường hợp là  $\Delta v/v = 10^{-5}$ .

ĐS:

7. Cho biết một viên bi có  $m = 1$  g và một electron chuyển động với độ bất định về vị trí là  $1 \text{ \AA}$ .

Căn cứ vào nguyên lý bất định Heisenberg, hãy tính độ bất định về vận tốc  $\Delta v$  cho 2 vật thể nói trên và cho nhận xét từ các kết quả thu được.



ĐS:  $\Delta v$  (viên bi) =  $6,62 \cdot 10^{-21} \text{ m/s}$

$\Delta v$  (electron) =  $7,27 \cdot 10^{-7} \text{ m/s}$

8. Hãy tính hai bước sóng liên kết  $\lambda$  với một e chuyển động trong một điện trường có hiệu điện thế  $U = 10^4 \text{ V}$  ( $h = 6,625 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$ ;  $e = 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ C}$ )

ĐS: Xác định  $v$  của e áp dụng CT  $E = qU = eU = 1/2mv^2$ ;  $\lambda = 0,12 \text{ A}^0$ .

9. Biết ngưỡng quang điện đối với nguyên tử Vonfram (W) có bước sóng  $\lambda_0 = 2300 \text{ A}^0$ . Hãy xác định bước sóng  $\lambda$  theo  $\text{A}^0$  của ánh sáng tới đập vào bề mặt kim loại W để làm bật e ra, biết rằng ánh sáng chiếu vào kim loại có năng lượng tối đa bằng  $1,5 \text{ eV}$ .

10. Căn cứ vào phương trình Schrodinger, hãy mô tả bài toán về sự chuyển động của electron trong hộp thế một chiều và viết dạng cụ thể của phương trình sóng cho trường hợp này.

Hãy giải phương trình vừa thiết lập và biện luận các kết quả năng lượng  $E$  và hàm sóng  $\Psi$  thu được.

11. Một hạt có đường kính vào cỡ  $1 \mu\text{m}$ , khối lượng  $10^{-10} \text{ g}$ . Hạt chuyển động Brao với vận tốc khoảng  $10^{-4} \text{ cm/s}$ . Giả thiết phép đo tọa độ đạt mức chính xác vào khoảng 1% kích thước hạt. Có thể xem hạt đó là vi hạt (như electron) được không? Hãy giải thích cụ thể.

12. Giả thiết rằng phép đo tọa độ  $x$  của electron có độ chính xác vào khoảng  $10^{-3}$  đường kính của nguyên tử ( $10^{-8} \text{ cm}$ ). Có thể xác định chính xác tốc độ chuyển động  $v_x$  của electron hay không?

13. Trong một thí nghiệm người ta đã cung cấp một năng lượng gấp 1,5 lần năng lượng tối thiểu để làm bứt một e ra khỏi trạng thái cơ bản của nguyên tử H. Hỏi bước sóng  $\lambda$  ( $\text{A}^0$ ) bức xạ trong trường hợp này bằng bao nhiêu? Cho  $m = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$ ;  $h = 6,625 \cdot 10^{-34} \text{ J.s}$ .

ĐS:  $\lambda = 4,70 \text{ A}^0$ .

14. a) Khi chiếu sáng với  $\lambda = 434\text{nm}$  vào bề mặt các kim loại K, Ca, Zn thì đối với kim loại nào sẽ xảy ra hiệu ứng quang điện?

b) Với trường hợp xảy ra hiệu ứng quang điện, hãy tính tốc độ  $v$  bật ra khỏi bề mặt kim loại. Cho biết:

Kim loại	K	Ca	Zn
Ngưỡng quang điện $\nu_0$ ( $\text{s}^{-1}$ )	$5,5 \cdot 10^{14}$	$7,1 \cdot 10^{14}$	$10,4 \cdot 10^{14}$

ĐS: a) Kali;

b)  $v = 4,63 \cdot 10^5 \text{m/s}$

15. Khi chiếu một chùm ánh sáng với tần số  $\nu = 2 \cdot 10^{16} \text{Hz}$  xuống bề mặt kim loại M thì thấy  $e$  bị bật ra khỏi bề mặt và chuyển động với động năng  $T = 7,5 \cdot 10^{-18} \text{J}$ . Hãy xác định tần số ngưỡng quang điện  $\nu_0$ .

ĐS:  $\nu_0 = 8,7 \cdot 10^{15} \text{Hz} (\text{s}^{-1})$

## CHƯƠNG 4. NGUYÊN TỬ HIDRO VÀ ION GIỐNG HIDRO

1. Orbital nguyên tử là gì? Hãy cho biết ý nghĩa của hàm sóng và viết biểu thức toán học mô tả trạng thái cơ bản của electron trong nguyên tử hidro.

2. a) Hãy viết phương trình Srodinger cho bài toán nguyên tử hidro. Giải thích các biểu thức và kí tự trong phương trình.

b) Việc giải phương trình Schrodinger cho những nghiệm được gọi là hàm sóng. Những hàm thu được phụ thuộc vào mấy số lượng tử, cho biết tên và các trị số của các số lượng tử.

c) Việc giải phương trình Schrodinger cũng cho những biểu thức tính năng lượng, mômen động lượng, hình chiếu mômen động lượng trên một phương xác định của trường ngoài. Hãy viết biểu thức tính các đại lượng đó.

d) Hãy cho biết ý nghĩa của các số lượng tử.

3. Xét các orbital sau đây (của nguyên tử Hidro):  $\Psi_{100}$ ,  $\Psi_{211}$ ,  $\Psi_{320}$

a) Hãy vẽ hình dạng các orbital trên

b) Cho biết năng lượng E, momen động lượng M và hình chiếu momen động lượng  $M_z$  của electron khi electron ở trạng thái đó.

4. Orbital hay hàm sóng toàn phần là gì? Viết biểu thức orbital (hàm sóng) toàn phần của e và giải thích các kí tự xuất hiện trong biểu thức? Hàm sóng toàn phần có gì giống và khác so với hàm sóng không gian.

5. a) Hãy viết biểu thức tính năng lượng E của e trong nguyên tử H thu được từ việc giải phương trình Schroediger.

b) Hãy vẽ giản đồ năng lượng của e ứng với các giá trị khác nhau của n.

c) Từ giản đồ đó, hãy vẽ các bước chuyển e khác nhau ứng với các dãy phổ: Lyman, Balmer, Paschen, Brackett, Pfund.

6. Xét lớp electron đặc trưng bởi số lượng tử  $n = 3$ .

a) Hãy liệt kê các giá trị khả dĩ khác nhau của 3 số lượng tử còn lại ứng với lớp đó.

b) Ứng với  $n = 3$ , có bao nhiêu obitan không gian, bao nhiêu obitan toàn phần. Cho biết số electron tối đa mà lớp đó có thể có.

7. Vì sao mỗi bộ 4 số lượng tử dưới đây không thể là bộ bốn số lượng tử của một electron trong một nguyên tử nào đó?

a)  $n = 3; l = +3; m_l = +1; m_s = +1/2$

b)  $n = 3; l = -1; m_l = +2; m_s = +1/2$

c)  $n = 2; l = +1; m_l = +2; m_s = -1/2$

d)  $n = 4; l = +3; m_l = -4; m_s = -1/2$

8. Hãy lập bảng các giá trị 4 số lượng tử cho tổng e ở trạng thái cơ bản của nguyên tử có cấu hình:  $1s^2 2s^2 2p^2$ .

Electron	1	2	3	4	5	6
n						
l						
$m_l$						
$m_s$						

9. Xác định số thứ tự Z của nguyên tố có e cuối cùng điền vào cấu hình e ứng với bộ 4 số lượng tử như sau:

a)  $n = 2; l = 0; m_l = 0; m_s = +1/2$

b)  $n = 3; l = 1; m_l = +1; m_s = -1/2$

c)  $n = 4; l = 0; m_l = 0; m_s = +1/2$

d)  $n = 4; l = 1; m_l = -1; m_s = +1/2$

10. a) Chứng minh rằng, đối với nguyên tử H, số sóng của vạch phổ được tính theo hệ thức:

$$\bar{\nu} = R_H \left( \frac{1}{n_r^2} - \frac{1}{n_c^2} \right)$$

Trong đó  $R_H$  là hằng số Rydberg (Ritbe).

b) Hãy tính hằng số Rydberg bằng lý thuyết.

c) Vạch  $H_\alpha$  (màu đỏ) có bước sóng  $\lambda = 6563 \text{ \AA}$ . Hãy tính hằng số  $R_H$  từ cơ sở thực nghiệm đó.

(Cho biết:  $h = 6,625 \cdot 10^{-27} \text{ erg.s}$ ;  $c = 3 \cdot 10^8 \text{ m/s}$ ;  $m_e = 9,1 \cdot 10^{-28} \text{ g}$ ;  $e = 4,8 \cdot 10^{-10} \text{ đv.tđ cgs}$ )



## CHƯƠNG 5. NGUYÊN TỬ NHIỀU ELECTRON

1. Đối với nguyên tử nhiều e, phương trình Schroedinger không giải được chính xác, vậy việc giải bài toán về nguyên tử nhiều e dựa trên cơ sở của mô hình gần đúng nào? Hãy cho biết nội dung của mô hình gần đúng đó.

2. Trong nguyên tử nhiều electron thì năng lượng của electron phụ thuộc vào những số lượng tử nào? Hãy phát biểu qui tắc Klechowski. Áp dụng qui tắc này hãy xác định thứ tự các mức năng lượng từ 1s đến 7s.

3. Phát biểu các nguyên lý và quy tắc quy định sự phân bố các e trên các obitan nguyên tử. Cho ví dụ minh họa về các nguyên lý và quy tắc đó.

4. Ion  $X^{3+}$  có phân lớp e ngoài cùng là  $3d^2$ :

- Viết cấu hình e của nguyên tử X và  $X^{3+}$ .
- Xác định điện tích hạt nhân của  $X^{3+}$
- Xác định chu kỳ, phân nhóm của X;
- Hai e  $3d^2$  ứng với các giá trị nào của bộ 4 số lượng tử?

5. Ion  $M^{2+}$  có phân lớp electron ngoài cùng là  $4d^1$ :

- a) Hãy viết cấu hình electron của nguyên tử M và ion  $M^{2+}$
- b) Electron  $4d^1$  có thể ứng với những giá trị nào của bốn số lượng tử?
- c) Hãy cho biết M ở chu kì nào, nhóm nào?

ĐS: a) M:  $[Kr] 4d^1 5s^2$ ;  $M^{2+}$ :  $[Kr] 4d^1$ ;

b)  $n = 4$ ,  $l = 2$ ;  $m_s = +1/2$ ;

c) M ở chu kì 5, nhóm IIIB

6. Áp dụng các quy tắc Slater, hãy xác định hàm bán kính và các mức năng lượng tương ứng cho các e của nguyên tử O, C, Na, Fe, Cl.

7. a) Hãy tính năng lượng electron trong ion  $He^+$ .

b) Áp dụng các quy tắc Slater, hãy tính năng lượng của 2 e trong nguyên tử He ở trạng thái cơ bản.

c) Từ các kết quả thu được, hãy tính năng lượng ion hóa I ( $I + He \rightarrow He^+ + e$ ) của He

8. Xét nguyên tử Li:

a) Hãy tính năng lượng của nguyên tử Li và của ion  $\text{Li}^+$ , từ kết quả đó hãy tính năng lượng ion hóa I của nguyên tử Li.

b) Với các kết quả thu được, hãy viết biểu thức toán học của hàm bán kính  $R_{1s}$ ,  $R_{2s}$  đối với Li.

9. Hãy tính năng lượng  $E_n$  theo eV với  $n = 1 \rightarrow 3$  của hệ 1 electron 1 hạt nhân.

Hãy cho biết bậc (hay độ) suy biến của mỗi giá trị năng lượng tính được (có chỉ rõ kí hiệu hàm sóng trong mỗi trường hợp)

Trong các giá trị  $E_n$  tính được đó, trị nào là năng lượng ion hóa của H, He, Li? Hãy giải thích ?

## CHƯƠNG 6. HỆ THỐNG TUẦN HOÀN CÁC NGUYÊN TỐ HÓA HỌC

1. Phát biểu định luật tuần hoàn, từ đó cho biết nguyên tắc xây dựng bảng hệ thống tuần hoàn.

2. Hãy cho biết sự biến thiên bán kính nguyên tử, năng lượng ion hóa  $I_1$  và độ âm điện của các nguyên tố thuộc phân nhóm chính trong cùng một chu kỳ và trong cùng một nhóm.

Giải thích sự biến thiên đó.

3. Thế nào là nguyên tố họ s, nguyên tố họ p, d, f. Với mỗi nguyên tố hãy cho 1 ví dụ cụ thể.

Thế nào là nguyên tố phân nhóm chính (A), nguyên tố phân nhóm phụ (B).

4. Định nghĩa năng lượng ion hóa. Nêu các yếu tố ảnh hưởng đến năng lượng ion hóa của nguyên tử.

Sự biến thiên năng lượng ion hóa thứ nhất trong chu kỳ, trong nhóm như thế nào? Giải thích?

5. Định nghĩa ái lực với e của nguyên tử? Ái lực với e mạnh nhất và yếu nhất thuộc nguyên tố nào? Độ âm điện của một nguyên tố là gì? Nêu quy luật biến đổi độ âm điện của các nguyên tố trong hệ thống tuần hoàn?

6. Viết cấu hình e nguyên tố có số thứ tự: 19, 35; 52, 24, 83. Cho biết vị trí của chúng trong bảng HTTH, tính kim loại, phi kim của mỗi nguyên tố.

7. Cho biết electron có 4 số lượng tử dưới đây thuộc lớp nào? Phân lớp nào? Electron thứ mấy thuộc phân lớp này?

a)  $n = 2; l = 0; m_l = 0; m_s = +1/2$

b)  $n = 3; l = 1; m_l = -1; m_s = -1/2$

c)  $n = 3; l = 2; m_l = +2; m_s = +1/2$

d)  $n = 4; l = 2; m_l = +1; m_s = -1/2$

8. Viết bộ 4 số lượng tử ứng với e cuối cùng cho các trường hợp sau đây:

a) Mg ( $Z = 12$ )

b) Cl ( $Z = 17$ )



9. Viết cấu hình e cho Fe ( $Z = 26$ ) và các ion  $Fe^{2+}$ ,  $Fe^{3+}$ . Giải thích tại sao trạng thái e thuộc ion  $Fe^{2+}$  lại kém ổn định hơn trạng thái của electron trong  $Fe^{3+}$ ?
10. Hãy giải thích tại sao nguyên tố Cu ( $Z = 29$ ) lại thuộc nhóm IB trong bảng hệ thống tuần hoàn?

**Bài tập nâng cao:**

11. Hãy dự đoán số nguyên tố của chu kì 7, nếu nó được điền đầy đủ vào ô nguyên tố. Viết cấu hình e nguyên tử của nguyên tố có  $Z = 107$  và  $Z = 117$  và cho biết chúng sẽ được sắp xếp vào những phân nhóm nào trong bảng tuần hoàn.

*(Đề thi Olympic Hóa học sinh viên các trường CD – ĐH toàn quốc – 2005)*

12. Lý thuyết lượng tử dự đoán sự tồn tại những obitan  $ng$  tương ứng với số lượng tử phụ  $l = 4$  ( $g$  là ký hiệu của số lượng tử phụ  $l = 4$ ).

- Hãy cho biết số e tối đa mà phân mức  $ng$  có thể có.
- Dự đoán xem, sau phân mức năng lượng nào thì đến phân mức  $ng$ .
- Nguyên tử có e đầu tiên ở phân mức  $ng$  này thuộc nguyên tố có số thứ tự  $Z$  bằng bao nhiêu?

*(Đề thi Olympic Hóa học sinh viên các trường CD – ĐH toàn quốc – 2005)*

**Bài tập lớn (tiểu luận):**

- Hãy tìm hiểu về lịch sử ra đời của bảng hệ thống tuần hoàn.
- Tìm hiểu về nguyên tắc xây dựng bảng hệ thống tuần hoàn, từ đó đưa ra cấu trúc của bảng tuần hoàn.
- Tìm hiểu về sự biến thiên tuần hoàn trong cấu hình e của nguyên tử các nguyên tố theo chu kì và theo nhóm.
- Tìm hiểu về sự biến thiên tuần hoàn một số tính chất của các nguyên tố hóa học. (Năng lượng ion hóa, Ái lực electron, Độ âm điện, Bán kính nguyên tử và bán kính ion).

Yêu cầu về bài tiểu luận: Bài tiểu luận được làm ở nhà, chia nhóm theo sự sắp xếp của giáo viên. SV nộp lại bài tập, điểm bài tập tính vào điểm chuyên cần.

Trong tiết thảo luận, sinh viên trình bày về sự hiểu biết của mình về các vấn đề đã chuẩn bị trước lớp, các SV khác nghe, nhận xét, bổ sung, đánh giá.

**PHẦN 2:**  
**CẤU TẠO PHÂN TỬ VÀ LIÊN KẾT HÓA HỌC**

## CHƯƠNG 7. KHÁI QUÁT VỀ PHÂN TỬ VÀ LIÊN KẾT HÓA HỌC

1. a) Hãy cho biết nội dung của quy tắc bát tử và quan niệm của Kossel và Lewis về liên kết hóa học. Hãy phân biệt liên kết ion và liên kết cộng hóa trị. Cho biết thế nào là liên kết cho nhận? Cho ví dụ.

b) Hãy cho biết định nghĩa về hóa trị của một nguyên tố tham gia liên kết CHT và hóa trị của một nguyên tố tham gia liên kết ion.

c) Hóa trị và số oxi hóa của một nguyên tố khác nhau như thế nào? Trong các trường hợp sau đây thì hóa trị và số oxi hoá của cacbon là bao nhiêu?  $\text{CH}_4$ ;  $\text{HCHO}$ ;  $\text{CH}_3\text{OH}$ ;  $\text{HCOOH}$ .

2. Hãy nêu một số hạn chế của lý thuyết phi cơ học lượng tử về liên kết.

3. Trình bày thuyết sức đẩy giữa các cặp electron hóa trị VSEPR.

4. Áp dụng quy tắc bát tử (octet) hãy viết sơ đồ Lewis về các phân tử sau:  $\text{N}_2$ ,  $\text{C}_2\text{H}_6$ ;  $\text{CH}_3\text{CN}$ ;  $\text{N}_2\text{O}_5$ ;  $\text{HNO}_3$ ;  $\text{Fe}_3\text{O}_4$ ;  $\text{SO}_2$ ;  $\text{SO}_3$ ;  $\text{H}_2\text{SO}_4$ ;  $\text{BaSO}_4$ ;  $\text{Na}_2\text{SO}_4$ ;  $\text{NaNO}_3$ ;  $\text{Mg}(\text{NO}_3)_2$ .

Hãy nêu ra 5 ví dụ về những trường hợp mà quy tắc bát tử không nghiệm đúng.

5. Hãy trình bày ngắn gọn các tính chất của phân tử (tính chất điện, quang, từ).

6. Trình bày ngắn gọn các đặc trưng của liên kết (Năng lượng liên kết, độ dài liên kết, góc hóa trị).

7. Xét phân tử  $\text{H}_2\text{O}$  và  $\text{NH}_3$ :

a) Trong các phân tử trên, O và N ở trạng thái lai hóa nào?

b) So sánh góc liên kết  $\text{HOH}$ ,  $\text{HNH}$  và giải thích.

8. Xét 2 phân tử  $\text{H}_2\text{O}$  và  $\text{H}_2\text{S}$ , hãy giải thích tại sao góc  $\text{HSH}$  ( $92^\circ 15'$ ) lại nhỏ hơn góc  $\text{HOH}$  ( $104^\circ 29'$ ).

9. Xét 2 phân tử  $\text{H}_2\text{O}$  và  $\text{F}_2\text{O}$ , hãy so sánh độ lớn giữa hai góc  $\text{HOH}$  và  $\text{FOF}$ , Giải thích?

10. Đối với mỗi hợp chất sau:  $F_2O$ ,  $NH_3$ ,  $BF_3$  hãy cho biết:

- Số cặp electron liên kết và không liên kết của nguyên tử trung tâm.
- Cấu trúc hình học của phân tử.

Đánh giá các góc liên kết  $FOF$ ,  $HNH$ ,  $FBF$ .

11. Đối với mỗi hợp chất sau:  $PH_3$ ,  $PCl_3$ ,  $PF_3$  hãy cho biết:

- Số cặp electron liên kết và không liên kết của nguyên tử trung tâm.
- Cấu trúc hình học của phân tử.
- Đánh giá các góc liên kết trong phân tử.

12. Hãy giải thích sự khác nhau về các góc liên kết trong phân tử  $SCl_2$ ,  $F_2O$ ,  $OCl_2$ .

Cho biết góc liên kết  $ClSCl = 103^\circ$ ;  $FOF = 105^\circ$ ;  $ClOCl = 111^\circ$ .

13. a) Biết rằng mono - clobenzen có momen lưỡng cực  $\mu_1 = 1,53D$ . Hãy tính momen lưỡng cực  $\mu_o$ ,  $\mu_m$ ,  $\mu_p$  của octo -, meta -, para -, diclobenzen.

b) Đo momen lưỡng cực của một trong ba đồng phân đó ta được  $\mu = 1,53D$ . Hỏi đó là dạng đồng phân nào của diclobenzen.

ĐS:  $\mu_o = \mu_1 3^{1/3}$ ;  $\mu_m = \mu_1$ ;  $\mu_p = 0$ .

14. Clobenzen có  $\mu_1 = 1,53D$  ( $\overline{\mu_1}$  hướng từ nhân ra ngoài), anilin có  $\mu_2 = 1,6D$  ( $\overline{\mu_2}$  hướng từ ngoài vào nhân benzen). Hãy tính  $\mu$  của octo - cloanilin; meta - cloanilin; para - cloanilin.

ĐS:  $\mu_o = 1,56D$ ;  $\mu_m = 2,71D$ ;  $\mu_p = 3,13D$ .

15. Có các phân tử  $XH_3$ :

- Hãy cho biết cấu hình hình học của các phân tử  $PH_3$ ,  $AsH_3$
- So sánh góc liên kết  $HXH$  giữa hai phân tử trên và giải thích.

16. Xét các phân tử  $POX_3$

- Các phân tử  $POF_3$  và  $POCl_3$  có cấu hình hình học như thế nào?
- Góc liên kết  $XPX$  trong phân tử nào lớn hơn?

17. Cho các phân tử:  $ClO_2$ ;  $O_3$ ;  $SO_2$ ;  $NO_2$ ;  $CO_2$  và các góc liên kết:  $120^\circ$ ,  $110^\circ$ ,  $132^\circ$ ,  $116,5^\circ$ ,  $180^\circ$ .

Hãy ghi giá trị góc liên kết trên cho phù hợp với các phân tử tương ứng. Giải thích?

18. So sánh và giải thích ngắn gọn độ phân cực (momen lưỡng cực) của các chất sau:  $\text{NH}_3$ ;  $\text{NF}_3$ ;  $\text{BF}_3$ .

19. Những phân tử nào sau đây có momen lưỡng cực lớn hơn 0?

$\text{BF}_3$ ,  $\text{NH}_3$ ,  $\text{SiF}_4$ ,  $\text{SiHCl}_3$ ;  $\text{SF}_2$ ;  $\text{O}_3$ .

## CHƯƠNG 8. LÝ THUYẾT LIÊN KẾT HÓA TRỊ (PHƯƠNG PHÁP VB)

1. Lý thuyết VB đã giải thích định tính các vấn đề về liên kết như thế nào? Cho ví dụ. (Sự hình thành và tính bão hòa của liên kết; nguyên lí xen phủ cực đại và tính định hướng của liên kết; hóa trị của nguyên tố).
2. Lai hóa là gì? Hãy trình bày các dạng lai hóa thường gặp trong phân tử. Cho biết sự liên quan giữa các dạng lai hóa và cấu tạo hình học của phân tử.
3. Thế nào là liên kết xích ma ( $\sigma$ ), liên kết pi ( $\pi$ )? Cho ví dụ. Trong hai loại liên kết xích ma ( $\sigma$ ) và liên kết pi ( $\pi$ ) giữa hai nguyên tử tương ứng như nhau thì liên kết nào mạnh hơn, tại sao?
4. Trên cơ sở của thuyết VB, hãy mô tả các loại liên kết trong phân tử  $C_3H_6$ ,  $CH_3CN$  bằng sự xen phủ các obitan. Ghi trên sơ đồ liên kết nào là liên kết  $\sigma$ , liên kết nào là liên kết  $\pi$ .
5. Hãy trình bày quan điểm của lý thuyết VB về hóa trị của các nguyên tố. Từ đó hãy giải thích hiện tượng đa hóa trị của nguyên tố S và Cl.
6. a) Hãy giải thích cách thành lập hàm sóng chung cho cặp e liên kết trong phân tử  $H_2$  theo phương pháp Heiler – London.  
b) Hãy cho biết điều kiện đối với hàm sóng toàn phần (kể cả spin). Để thỏa mãn điều kiện đó thì spin của 2 e phải như thế nào thì mới có sự tăng mật độ xác suất có mặt của e ở khoảng giữa hai hạt nhân và mới có sự giảm năng lượng của hệ thống.  
c) Từ đó rút ra kết luận về điều kiện đối với cặp e liên kết và hãy cho biết cách mô tả các liên kết cộng hóa trị theo VB.

Trả lời:

a) Trong phân tử  $H_2$ , xuất phát từ cấu hình  $s_a^1, s_b^1$  nghĩa là coi mỗi hạt nhân nguyên tử H có một e. Gọi hàm  $\Phi_a(1)$  mô tả trạng thái của electron 1 quanh hạt nhân a; hàm  $\Phi_b(2)$  mô tả trạng thái chuyển động của electron 2 xung quanh hạt nhân b. Vì các electron chuyển động độc lập với nhau nên hàm sóng chung của hệ là:

$$\Psi_I = \Phi_a(1) \Phi_b(2) \quad (1)$$

Theo nguyên lý không phân biệt các hạt đồng nhất nên ta cũng có thể viết:

$$\Psi_{II} = \Phi_a(2) \Phi_b(1) \quad (2)$$

Xuất phát từ nguyên lý chồng chất trạng thái ta có tổ hợp của hai hàm trên cũng là hàm sóng chung của cặp e liên kết:

$$\Psi = c_1 \Psi_I \pm c_2 \Psi_{II} \quad (3)$$

$$\text{Hay: } \psi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_a(1)\phi_b(2) + \phi_a(2)\phi_b(1)] \quad \text{hay } \psi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_I + \psi_{II}) \quad (4)$$

$$\psi_- = \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_a(1)\phi_b(2) - \phi_a(2)\phi_b(1)] \quad \text{hay } \psi_- = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_I - \psi_{II}) \quad (5)$$

$\Psi_+$  là hàm đối xứng vì khi hoán vị electron 1 và 2 thì dấu của hàm không thay đổi. Ngược lại  $\Psi_-$  là hàm phản đối xứng. Mỗi hàm đó nhân với hàm spin của hai e sẽ thu được hàm sóng toàn phần.

b) Theo nguyên lý Pauli, đối với e thì hàm toàn phần phải là hàm phản xứng. Vì vậy, ứng với hàm  $\Psi_+$  hai e phải có spin đối song ( $\uparrow\downarrow$ ), ứng với hàm  $\Psi_-$  hai e phải có spin song song ( $\uparrow\uparrow$ ).

Giá trị  $|\Psi_+|^2$  và  $|\Psi_-|^2$  chỉ sự phân bố mật độ xác suất có mặt của electron.

$|\Psi_+|^2 = \frac{1}{2}(\Psi_I^2 + \Psi_{II}^2 + 2\Psi_I\Psi_{II}) \rightarrow$  chỉ rõ khoảng cách giữa hai hạt nhân a, b có sự tăng mật độ xác suất tương ứng với spin của 2 e đối song ( $\uparrow\downarrow$ ) và từ đó dẫn đến sự hình thành liên kết tạo thành phân tử  $H_2$ . Khi đó năng lượng của hệ thống thấp hơn năng lượng của 2 nguyên tử e riêng rẽ.

c) Kết quả trên cho thấy: điều kiện để có sự hình thành liên kết là 2 e phải có spin đối song.

Vì hàm sóng chung được thành lập từ hai AO nên mỗi liên kết được mô tả bằng sự xen phủ của 2 AO chứa các e độc thân có spin khác nhau.

7. Trên cơ sở của thuyết VB hãy mô tả sự hình thành các liên kết trong phân tử  $H_2$ ,  $HCl$ ,  $Cl_2$ ,  $N_2$ .

Gợi ý trả lời: liên kết do sự xen phủ của 2 e độc thân có spin đối song tạo thành các liên kết  $\sigma$  hay  $\pi$ .

VD:  $H_2$ : Mỗi nguyên tử H có 1 e trên AO 1s hình cầu, 2 AO này liên kết với nhau tạo thành một liên kết  $\sigma$ . (hình vẽ)

8. Dựa vào lý thuyết về liên kết, hãy giải thích sự hình thành liên kết trong các hợp chất sau:  $NH_3$ ,  $NO_3^-$ ,  $CH_3CN$ .

9. Viết công thức cấu tạo Lewis, nêu trạng thái lai hóa và vẽ dạng hình học của các phân tử và ion sau:  $B_2H_6$ ;  $XeO_3$ ;  $NO_2^+$ ,  $NO_2^-$ .

## CHƯƠNG 9. LÝ THUYẾT OBITAN PHÂN TỬ (PHƯƠNG PHÁP MO)

1. Nêu các luận điểm cơ bản của phương pháp obitan phân tử (MO).
2. Thế nào là MO liên kết, MO phản liên kết. Phân biệt MO  $\sigma$  và MO  $\pi$ .
3. Phân biệt sự khác nhau giữa các obitan nguyên tử và obitan phân tử.
4. Điều kiện để các AO tổ hợp được với nhau và để sự tổ hợp có hiệu quả là gì?

Vẽ giản đồ năng lượng các MO của phân tử  $A_2$  thuộc chu kì 1 và 2. Từ đó viết các dãy năng lượng tăng dần các MO của chúng.

5. Viết công thức tính số liên kết đối với phân tử 2 nguyên tử theo phương pháp MO. Lấy VD minh họa. Quan hệ giữa số liên kết và độ bền liên kết như thế nào?

6. Căn cứ vào phương pháp MO, xem xét các phân tử sau đây, phân tử nào tồn tại, phân tử nào không tồn tại?  $Li_2$ ;  $Be_2$ ;  $B_2$ ;  $C_2$ ;  $N_2$ ;  $O_2$ ;  $F_2$ ;  $Ne_2$ ;  $NO$ ;  $CO$ .

7. Cho các phân tử:  $C_2$ ,  $N_2$ ,  $O_2$ ,  $F_2$ .

- a) Viết cấu hình electron của các phân tử.
- b) Vẽ giản đồ các mức năng lượng.
- c) So sánh độ dài liên kết của các phân tử trên.
- d) Xác định từ tính của các phân tử.

8. So sánh độ dài liên kết và năng lượng liên kết của các phân tử và ion phân tử sau:  $O_2$ ,  $O_2^+$ ,  $O_2^-$ ,  $O_2^{2-}$ .

9. Cho các cặp phân tử dị hạch AB sau:  $(CO, CO^+)$ ,  $(CN, CN^-)$  và  $(NO, NO^+)$ .

- a) Viết cấu hình electron của các phân tử và biểu diễn trên giản đồ các mức năng lượng.
- b) So sánh độ dài liên kết của các phân tử trong từng cặp.



## CHƯƠNG 10. LIÊN KẾT ION

1. Liên kết ion trong các phân tử được hình thành như thế nào. Cho biết ý nghĩa và định nghĩa của khái niệm độ ion của liên kết. Công thức xác định độ (tính) ion của liên kết ( $\delta$ ).

2. LiF có momen lưỡng cực  $\mu = 6,5D$ , khoảng cách giữa hai hạt nhân  $d = 1,56A^0$ . Xác định tính chất ion của liên kết trong LiF.

ĐS: 87%.

3. Hãy xác định tính chất ion của liên kết và số điện tích hiệu dụng  $n'$  của các phân tử sau:

Phân tử	$\mu$ (D)	$d$ ( $A^0$ )
HF	1,83	0,92
HCl	1,08	1,27
HBr	0,82	1,41
HI	0,44	1,61

$\mu$  – momen lưỡng cực;  $d$  – độ dài liên kết.

4. Số liệu thực nghiệm cho biết  $\mu$  (LiH) = 5,58D, độ dài liên kết Li – H bằng 0,16nm. Tính phần trăm ion của liên kết Li – H.

ĐS: 77%.

5. Năng lượng liên kết trong phân tử ion được hình thành như thế nào. Vẽ biểu đồ biểu diễn sự biến đổi năng lượng  $U$  theo  $r$ .

## CHƯƠNG 11. TƯƠNG TÁC GIỮA CÁC PHÂN TỬ

1. Giữa các phân tử, nhóm liên kết yếu bao gồm các loại liên kết nào? Hãy nêu vai trò của các liên kết đó trong liên kết giữa các phân tử? Cho ví dụ.

2. Liên kết cầu nối hidro là gì? Hãy cho biết những điều kiện để hình thành liên kết hidro và nói rõ bản chất của liên kết đó.

Cho biết các loại (kiểu) liên kết hidro thường gặp qua một số ví dụ điển hình.

ĐS: Điều kiện để hình thành liên kết hidro: liên kết được hình thành giữa nguyên tử H trong phân tử đã bão hòa hóa trị với một nguyên tử khác có độ âm điện lớn hơn để tạo ra liên kết phụ.

- Bản chất: tương tác tĩnh điện

- 2 kiểu liên kết: Liên kết nội phân tử (axit salixilic, nitro phenol); liên kết ngoại phân tử (nước, axit cacboxylic)

3. Lực Van der Waals giữa các phân tử trung hòa được giải thích bằng hiệu ứng gì?

4. a) Cho các độ đặc trưng về độ dài liên kết H và năng lượng hình thành nó như sau:

O – H ... O (H<sub>2</sub>O) 2,8 Å; 25kJ/mol

O – H ... O (axit cacboxylic) 2,5Å; 30 kJ/mol

Giải thích vì sao cùng là liên kết H mà trong 2 trường hợp lại khác nhau?

b) Sự biến đổi độ dài liên kết H trong các hợp chất sau:

NH<sub>3</sub> | HF : N – H ...F            2,6Å

NH<sub>3</sub> | H<sub>2</sub>O : N – H ...O            2,7Å

NH<sub>3</sub> | NH<sub>3</sub> : N – H ...N            2,9Å

ĐS: a) liên kết O-H...O A XUỞ trong các dung môi khác nhau có trạng thái lai hóa khác nhau (O: sp<sup>3</sup>; C: sp<sup>2</sup>)

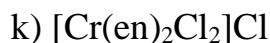
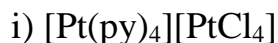
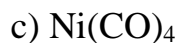
b) độ âm điện giảm từ F đến N làm cho độ dài liên kết H tăng lên.

5. a) Đối với những hợp chất tương tự thì những hợp chất có khối lượng phân tử lớn thường có nhiệt độ sôi cao. Hãy giải thích tại sao  $\text{H}_2\text{S}$  lại có nhiệt độ sôi thấp ( $61^\circ$ ) hơn nước ( $100^\circ$ ).

b) Giải thích tại sao nước đá lại nhẹ hơn nước.

## CHƯƠNG 12. LIÊN KẾT TRONG PHÂN TỬ PHỨC

1. Đọc tên các phức sau:



Trong đó: py: Piridin

en: etylen amin

2. Trình bày những luận điểm cơ bản của thuyết VB về liên kết trong phức chất.

3. Trình bày những luận điểm cơ bản của thuyết trường tinh thể về liên kết trong phức chất.

4. Dựa trên cơ sở của lý thuyết lai hóa áp dụng cho phức chất, hãy giải thích sự hình thành liên kết trong các phức  $[Ni(CN)_4]^{2-}$  và  $[NiCl_4]^{2-}$  và cho biết từ tính của chúng. Biết rằng tương tác giữa  $Ni^{2+}$  và  $CN^-$  mạnh hơn giữa  $Ni^{2+}$  và  $Cl^-$ .

5. Biết rằng năng lượng tách mức  $\Delta_0$  cho phức  $[Fe(CN)_6]^{4-}$  và  $[Fe(H_2O)_6]^{2+}$  lần lượt bằng 394,2 kJ/mol và 124,146 kJ/mol. Năng lượng cần thiết để ghép electron là 210,254 kJ/mol.

Sử dụng lý thuyết trường tinh thể, hãy vẽ giản đồ tách mức năng lượng và cho biết sự phân bố e trên các mức năng lượng của 2 phức nói trên, cũng như từ tính của chúng.

Cho biết: Hai phức Fe đều có cấu trúc kiểu bát diện. Fe ( $Z = 26$ ).

6. Khi bị kích thích, electron được chuyển từ mức năng lượng thấp lên mức năng lượng cao hơn và xảy ra sự hấp thụ ánh sáng ứng với bước sóng  $\lambda$ . Hãy tính bước sóng này (Å), biết rằng năng lượng tách mức của phức  $[Co(CN)_6]^{3-}$  là 99,528 kcal/mol. Cho  $h = 6,625 \cdot 10^{-34} Js$ ;  $c = 3 \cdot 10^8 m/s$ .

ĐS:  $\lambda = 2874 \text{ \AA}$

7. a) Ion  $[\text{Mn}(\text{CN})_6]^{3-}$  có 2 electron không cặp đôi, ion  $[\text{MnBr}_4]^{2-}$  có 5 electron không cặp đôi, ion  $[\text{Ni}(\text{CN})_4]^{2-}$  tất cả các electron đều cặp đôi.

Dựa vào thuyết liên kết hóa trị VB, hãy viết cấu hình electron (dưới dạng ô lượng tử) của các ion phức trên và cấu hình hình học của chúng.

Cho biết:  $Z_{\text{Mn}}=25$ ,  $Z_{\text{Ni}}=28$ .

c) Hãy giải thích liên kết trong phức hexa aquaferat (II) dựa trên quan điểm của thuyết VB và trường phối tử về liên kết trong phức chất.

8. Trên cơ sở của thuyết trường phối tử hãy:

a) Trình bày ảnh hưởng của trường phối tử bát diện đến trạng thái năng lượng của các electron d trong ion trung tâm.

b) Tại sao phức  $[\text{Ti}(\text{H}_2\text{O})_6]^{3+}$  có màu tím đỏ? (Cho  $Z_{\text{Ti}} = 22$ ).

9. Cho năng lượng tách  $\Delta_0 = 155,1 \text{ kJ/mol}$  đối với phức  $[\text{CoF}_6]^{3-}$  và  $\Delta_0 = 275,1 \text{ kJ/mol}$  đối với phức  $[\text{Co}(\text{NH})_6]^{3+}$ , năng lượng ghép đôi các electron có giá trị  $P = 250,8 \text{ kJ/mol}$ . Dựa vào thuyết trường tinh thể, hãy:

a) Lập sơ đồ năng lượng và viết cấu hình e của 2 phức trên.

b) Xác định từ tính của phức và giải thích.

Biết rằng cả 2 phức trên đều có cấu trúc bát diện, Co ( $Z = 27$ ).

10. Trên cơ sở của thuyết trường phối tử hãy giải thích tại sao các phức của các kim loại chuyển tiếp thường có màu, trong khi đó một số phức của  $\text{Cu}^+$  và  $\text{Zn}^{2+}$  thường không màu?

**PHẦN 3**  
**TRẠNG THÁI NGỪNG TỤ CỦA CÁC CHẤT**

## CHƯƠNG 13. CÁC HỆ NGỪNG TU, LIÊN KẾT VÀ CẤU TRÚC TINH THỂ

1. Hãy cho biết quan hệ giữa các góc và quan hệ giữa các cạnh của 7 hệ tinh thể.
2. Nêu các đại lượng đặc trưng quan trọng của tinh thể.
3. Nêu các cách tính năng lượng mạng lưới tinh thể.
4. Hãy nêu một số phương pháp nghiên cứu tinh thể và cơ sở của các phương pháp này?
5. Trình bày đặc điểm của liên kết trong mạng tinh thể kim loại?
6. Trình bày đặc điểm của liên kết trong mạng tinh thể nguyên tử?
7. Trình bày đặc điểm của liên kết trong mạng tinh thể phân tử?
8. Khi kết tinh, Fe( $\alpha$ ) có dạng tinh thể lập phương nội tâm.
  - a) Xác định hằng số mạng  $a$  (Å), biết khối lượng riêng của sắt là  $7,95 \cdot 10^3 \text{kg/m}^3$ .
  - b) So sánh kết quả này với kết quả thu được bằng phương pháp nhiễu xạ tia X khi ta chiếu chùm tia e có bước sóng  $\lambda = 2 \text{Å}$  vào mặt mạng lưới (110) làm sao thành một góc  $\theta = 30^\circ$ . Cho  $Fe = 56$ .
9. Nguyên tố sắt dạng  $\alpha$  kết tinh trong mạng lập phương nội tâm và có tỉ khối  $d = 7,95$ . Hãy tính:
  - a) Khối lượng của một tế bào sơ đẳng.
  - b) Cạnh của tế bào sơ đẳng. ( $Fe = 56$ ).ĐS:  $m = 18,6 \cdot 10^{-23} \text{g}$ ;  $a = 2,85 \text{Å}$ .
10. Sắt dạng  $\alpha$  kết tinh trong mạng lập phương nội tâm, nguyên tử có bán kính  $r = 1,24 \text{Å}$ . Hãy tính cạnh  $a$  của tế bào sơ đẳng và tỉ khối của sắt.

11. a) Hãy cho biết cấu trúc tinh thể của đồng (lập phương mặt tâm) và mô tả cấu trúc của một ô mạng cơ sở bằng hình vẽ?

b) Tính số nguyên tử của Cu ứng với một tế bào cơ sở?

c) Tính khối lượng trung bình của mỗi ô mạng cơ sở?

12. Cho biết khối lượng riêng tinh thể của NaCl là  $2,15\text{g/cm}^3$ , các bán kính ion của  $\text{Na}^+$  và  $\text{Cl}^-$  lần lượt là:  $0,98\text{Å}$ ,  $1,81\text{Å}$ . Từ dữ liệu này, hãy xác định lại số phân tử NaCl chứa trong tinh thể.

ĐS:  $N=4$ , cấu trúc lập phương mặt tâm.

13. Tinh thể CsBr kết tinh dưới dạng lập phương nội tâm. Hãy:

a) Biểu diễn mạng tinh thể và cho biết số ion  $\text{Cs}^+$  và  $\text{Br}^-$  có trong tâm khối.

b) Xác định hằng số mạng  $a$  (Å) biết khối lượng riêng tinh thể là  $4,77\text{g/cm}^3$ .

c) Tính độ xếp khít tương đối của CsBr.

Cho:  $r_{\text{Cs}^+} = 1,69\text{Å}$ ;  $r_{\text{Br}^-} = 1,95\text{Å}$ ;  $\text{Cs} = 132,9$ ;  $\text{Br} = 79,9$ .

ĐS: a) 1  $\text{Cs}^+$  và 1  $\text{Br}^-$ ; b)  $a = 5,29\text{Å}$ .

14. Mạng lưới tinh thể KBr có dạng lập phương mặt tâm với hằng số mạng  $a = 6,56\text{Å}$ .

Hãy:

a) Vẽ mạng tinh thể KBr và xác định số ion  $\text{K}^+$  và  $\text{Br}^-$  trong ô mạng cơ sở.

b) Tính khối lượng riêng của tinh thể khảo sát.

Cho  $\text{K} = 39$ ,  $\text{Br} = 79,9$ .

ĐS: a) 4 ion  $\text{K}^+$  và 4 ion  $\text{Br}^-$ ;  $d = 2,79\text{g/cm}^3$ .

15. Dựa vào chu trình Born – Haber hãy xác định năng lượng mạng lưới ion của hợp chất AgCl.

Biết: - Nhiệt hình thành  $\Delta H_F^\circ = -159\text{kJ/mol}$

- Năng lượng phân li liên kết  $D_{\text{Cl}-\text{Cl}} = 242\text{kJ/mol}$



- Năng lượng ion hóa của Ag  $I_{Ag} = 727 \text{ kJ/mol}$ .
- Ái lực electron của Cl  $E_{Cl} = -364 \text{ kJ/mol}$ .
- Năng lượng thăng hoa của Ag  $\Delta H_S = 255 \text{ kJ/mol}$ .

ĐS:  $U_o = -898 \text{ kJ/mol}$ .

16. Xây dựng chu trình Born – Haber và xác định năng lượng mạng lưới ion cho phân tử  $\text{CaCl}_2$  với số liệu sau:

- Nhiệt hình thành  $\text{CaCl}_2$   $\Delta H_F^\circ = -795 \text{ kJ/mol}$
- Năng lượng phân li liên kết  $\text{Cl}_2$   $D_{Cl-Cl} = 243 \text{ kJ/mol}$
- Năng lượng ion hóa thứ nhất và thứ hai của Ca:  
 $\text{Ca}(k) - 2e \rightarrow \text{Ca}^{2+}$ ,  $I_1 + I_2 = 1745 \text{ kJ/mol}$ .
- Ái lực electron của Cl  $E_{Cl} = -364 \text{ kJ/mol}$
- Năng lượng thăng hoa của Ca  $\Delta H_S = 192 \text{ kJ/mol}$ .

ĐS:  $U_o = -2247 \text{ kJ/mol}$ .

17. a) Năng lượng mạng lưới  $U_{ml}$  là gì?

b) Áp dụng công thức Kapustinski hãy tính năng lượng mạng lưới của NaCl. Cho biết:

$$r_{\text{Na}^+} = 0,96 \text{ \AA}; r_{\text{Cl}^-} = 1,81 \text{ \AA}.$$

c) Bằng chu trình Born – Haber hãy tính năng lượng mạng lưới đó từ các dữ kiện thực nghiệm sau:

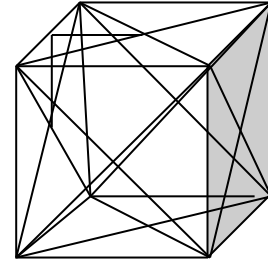
- Năng lượng hình thành NaCl:  $\text{Na} + 1/2\text{Cl}_2 \rightarrow \text{NaCl}_{tt}$ ;  $\Delta H_F^\circ = -96,0 \text{ kcal/mol}$
- $D_{Cl-Cl} = 58 \text{ kcal/mol}$ ;  $I_{Na} = 118,5 \text{ kcal/mol}$
- $E_{Cl} = -86,5 \text{ kcal/mol}$ ;  $\Delta H_S(\text{Na}) = 26,0 \text{ kcal/mol}$ ;

ĐS: b)  $U = -181 \text{ kcal/mol}$

c)  $U = -183 \text{ kcal/mol}$

18. Kim loại Paladi kết tinh trong mạng lưới lập phương mặt tâm. Cạnh của tế bào sơ đẳng  $a = 3,88 \text{ \AA}$  ở  $20^\circ\text{C}$ .

- a) Hãy vẽ cấu trúc của tế bào sơ đẳng.  
 b) Cho biết số nguyên tử Pd trong một tế bào sơ đẳng.  
 c) Tính khoảng cách ngắn nhất giữa hai nguyên tử Pd.  
 d) Có bao nhiêu nguyên tử láng giềng gần nhất (có khoảng cách bằng khoảng cách ngắn nhất trên) bao quanh một nguyên tử đã cho.  
 e) Tính khối lượng riêng của Pd ( $M_{Pd} = 106,4$ ).  
 ĐS:  $n = 4$ ;  $l = 2,74\text{Å}$ ; Số phối trí bằng 12;  $d = 12$ .



19. Phân tử CuCl kết tinh dưới dạng lập phương mặt tâm.

- a) Hãy biểu diễn ô mạng cơ sở của phân tử này.  
 b) Tính số ion  $\text{Cu}^+$  và  $\text{Cl}^-$  rồi suy ra số phân tử CuCl chứa trong mạng tinh thể cơ sở.  
 c) Xác định bán kính ion của  $\text{Cu}^+$ .

Cho:  $d(\text{CuCl}) = 4,136 \text{ g/cm}^3$ ;  $r_{\text{Cl}^-} = 1,84\text{Å}$ ;  $M_{\text{Cu}} = 63,5$ ;  $M_{\text{Cl}} = 35,5$ .

ĐS: 4 ion  $\text{Cu}^+$ ; 4 ion  $\text{Cl}^-$ ;  $r_{\text{Cu}^+} = 0,868\text{Å}$ .

20. Một hợp kim bạc - vàng tương ứng với một thành phần đặc biệt của dung dịch rắn  $\alpha$  được kết tinh dưới dạng lập phương mặt tâm với hằng số mạng thu được bằng phương pháp nhiễu xạ tia X là  $4,08\text{Å}$ . Biết rằng trong hợp kim, vàng chiếm 0,10 phần khối lượng.

- a) Tính hàm lượng phần trăm vàng trong hợp kim.  
 b) Xác định khối lượng riêng của hợp kim đang khảo sát.

Cho  $M_{\text{Au}} = 197$ ;  $M_{\text{Ag}} = 108$ .

ĐS:  $\text{Au} = 5,7\%$ ;  $d = 110,5 \text{ kg/m}^3$ .