BÀI TẬP HOÁ HỌC I – CH1012

Chương 1. CẤU TẠO NGUYÊN TỬ

1. Năng lượng phân ly liên kết I - I trong phân tử I_2 là 150,48kJ.mol^{-1}. Năng lượng này có thể sử dụng dưới dạng ánh sáng. Hãy tính bước sóng ánh sáng cần sử dụng trong quá trình này.

Đáp số: 795 nm

2. Cho biết tần số giới hạn của các kim loại

Kim loại	K	Ca	Zn
ν_o(s^{-1})	5,5.10^{14}	7,1.10^{14}	10,4.10^{14}

a. Khi chiếu ánh sáng với bước sóng λ = 434 nm vào bề mặt các kim loại: K, Ca, Zn, đối với kim loại nào sẽ xảy ra hiệu ứng quang điện?

b. Với trường hợp xảy ra hiệu ứng quang điện, hãy tính vận tốc electron khi bật ra khỏi bề mặt kim loại.

Đáp số: a. Kim loại K

b. v = 4,53.10^5 m.s^{-1}

3. Trong nguyên tử hidro ở trạng thái cơ bản giả thiết bán kính trung bình của quỹ đạo electron là 0,53.10^{-10} m, hãy tính độ bất định trong vận tốc chuyển động của electron.

Đáp số: $\Delta v_x \geq 6{,}9.10^6$ m/s.

4. Hãy tính bước sóng của sóng vật chất liên kết với một máy bay có khối lượng 100 tấn bay với vận tốc 1000 km/h và của sóng liên kết với một electron có khối lượng bằng 9,1.10^{-31} kg chuyển động với vận tốc 10^6 m/s.Rút ra nhận xét?

Đáp số: $\lambda_{mb} = 2{,}385.10^{-41}$ m

$\lambda_e = 7{,}28.10^{-10}$ m

5. Ion R^{3+} có hai phân lớp ngoài cùng là $3p^6 3d^2$

a. Viết cấu hình electron của R và R^{3+} dưới dạng chữ và ô.

b. Nêu các bộ trị số có thể có của 4 số lượng tử đối với 2 electron $3d^2$ của ion R^{3+}.

6. Trong số tổ hợp các số lượng tử sau, những tổ hợp nào có thể có và chúng ứng với những AO nào, những tổ hợp nào không thể có, vì sao?

a. n = 2, l = 2, m = 1

b. n = 4, l = 1, m = 0

c. n = 3, l = 0, m = 1

d. n = 4, l = 0, m = 0

7. Cho các ký hiệu sau: 4p (1), 1s (2), $\psi_{4,2,+2}$ (3), 3d (4), $\psi_{3,3,+2}$ (5); Những ký hiệu nào cho biết đó là một orbital?

8. Trong một nguyên tử, có nhiều nhất bao nhiêu electron thỏa mãn điều kiện bộ các số lượng tử sau: n = 3, l = 1, m = -1 và m_s = +1/2 ?

9. Người ta đề nghị những cấu hình electron cho nguyên tử có số Z = 12 như sau:

$1s^2 2s^2 2p^5 3s^1 3p^2$ (a) ; $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$ (b); $1s^2 2s^2 2p^7 3s^1$ (c)

$1s^2 2s^3 2p^4 3s^1 3p^2$ (d) ; $1s^2 2s^2 2p^5 3s^o 3p^3$ (e)

a. Những cấu hình nào không tuân theo nguyên lý loại trừ Pauli? Giải thích.

b. Những cấu hình nào tuân theo nguyên lý loại trừ Pauli có electron độc thân?

c. Hãy sắp xếp năng lượng tăng dần cho những cấu hình tuân theo nguyên lý loại trừ Pauli?

10. Vận dụng nguyên lý loại trừ Pauli, hãy tính số electron tối đa ở orbital $3p_x$, ở phân lớp 4d và ở lớp M.

11. Cấu hình electron của các ion sau, cấu hình nào ứng với trạng thái cơ bản:

Ti^{3+}(Z=22): a) $1s^22s^22p^63s^23p^63d^1$; b) $1s^22s^22p^63s^23p^64s^1$.

Cu^{2+}(Z=29): a) $1s^22s^22p^63s^23p^64s^13d^8$; b) $1s^22s^22p^63s^23p^63d^9$.

Chương 2. HỆ THỐNG TUẦN HOÀN CÁC NGUYÊN TỐ HÓA HỌC

1. Ion R^{3+} có hai phân lớp ngoài cùng là $3p^63d^2$

a. Xác định Z, chu kỳ, nhóm, phân nhóm của R.

b. Viết công thức oxit cao nhất của R

2. Nguyên tố X là kim loại, tạo được oxit X_2O_7, trong đó X có số oxi hóa cao nhất, nguyên tử của X có 4 lớp electron. Xác định chu kỳ, nhóm (A, B) và viết cấu hình electron nguyên tử của X.

3. Nguyên tử của nguyên tố X có 5 electron ở lớp ngoài cùng thuộc chu kỳ 4. Hãy viết cấu hình electron của nguyên tử X.

4. Một nguyên tố R thuộc chu kỳ 4 có thể tạo hợp chất khí dạng RH_3 và tạo oxit cao nhất dạng R_2O_5. Hãy viết cấu hình electron của nguyên tử R và các ion R^{3+}, R^{5+}. Xác định vị trí của R trong bảng hệ thống tuần hoàn.

5. Viết cấu hình electron của các nguyên tử có Z = 9, 11, 16. Từ đó hãy cho biết:

a. Nguyên tố nào trong các nguyên tố trên có năng lượng ion hoá I_1 lớn nhất, nguyên tố nào có năng lượng ion hoá I_1 nhỏ nhất.

b. Cation và anion nào dễ được tạo thành nhất từ mỗi nguyên tử.

6. Tính năng lượng ion hoá của nguyên tử H; ion He^+ và ion Li^{2+} ở trạng thái cơ bản và giải thích sự biến thiên năng lượng ion hoá theo dãy H, He^+, Li^{2+}.

Đáp số: I_H = 13,6eV

I_{He^+} = 54,4eV

$I_{Li^{2+}}$ = 122,4eV

I tăng vì Z đối với electron tăng

7. a. Năng lượng ion hóa của nguyên tử hidro là 13,6eV. Nếu nguyên tử hidro ở trạng thái cơ bản nhận một năng lượng bằng 99% năng lượng ion hóa thì electron của nó sẽ chuyển lên mức năng lượng ứng với giá trị số lượng tử n bằng bao nhiêu?

b. Tính bước sóng phát ra khi electron ở trạng thái kích thích này trở về trạng thái cơ bản

Đáp số: a. n = 10

b. $9{,}23.10^{-8}$ *m*

8. Dựa vào phương pháp Slater, hãy tính năng lượng của một electron ở lớp ngoài cùng của P.

Đáp số: - 34,8eV

9. Dựa vào phương pháp Slater hãy tính năng lượng tổng của các electron trong nguyên tử Li và ion Li^+, từ đó tính năng lượng ion hóa thứ nhất của Li.

Đáp số: - 203 eV; - 196,8 eV; 5,7 eV

10. Nguyên tố có Z = 19 có thể viết cấu hình electron:

$1s^22s^22p^63s^23p^63d^1$ (1) hay $1s^22s^22p^63s^23p^64s^1$ (2)

Dựa vào việc tính Z^* và từ đó tính $E_e(3d^1)$ và $E_e(4s^1)$ theo qui tắc Slater, hãy chứng minh cấu hình (2) hợp lý.

11. a. Tính độ điện âm của flo và clo theo Pauling dựa vào các số liệu năng lượng liên kết (kJ.mol^{-1}) sau, biết $\chi_H = 2,2$:

	HF	HCl	F_2	Cl_2	H_2
E (kJ.mol^{-1})	565	431	151	239	432

b. Tính năng lượng liên kết Cl - F.

Đáp số: a. $\chi_F = 3,85$; $\chi_{Cl} = 3,18$

b. 240 kJ.mol^{-1}

12. Tính độ điện âm của flo và clo theo Mulliken dựa vào các số liệu (kJ.mol^{-1}) sau: $I_1(F) = 1681$; $I_1(Cl) = 1255$; $A_1(F) = - 333$; $A_1(Cl) = - 348$.

Đáp số: $\chi_F \approx 4,07$; $\chi_{Cl} \approx 3,28$

13. Radi (Ra) là nguyên tố thuộc nhóm IIA (ở chu kỳ 7). Hãy dự đoán nguyên tố tiếp theo của nhóm IIA sẽ có số thứ tự là bao nhiêu? Cho biết Ra (Z = 88).

Đáp số: Z = 120

Chương 3. LIÊN KẾT HOÁ HỌC VÀ CẤU TẠO PHÂN TỬ

1. Viết công thức Lewis của các phân tử và ion sau: CO_2, CO_3^{2-}, NO_2^-, NO_2^+, SO_2, SO_4^{2-}, BF_3 và SF_4.

2. Theo quan điểm của thuyết VB, hãy giải thích:

a. Các trạng thái hoá trị có thể có của S (Z = 16) và Cl (Z = 17)?

b. Vì sao nguyên tử Nitơ (Z = 7) không thể có hoá trị 5?

3. Dùng thuyết VB, hãy giải thích sự tạo thành các phân tử và ion: B_2, BF, BF_3, BF_4^- ?

4. Vì sao phân tử NH_3 có dạng tháp tam giác, còn phân tử BF_3 có dạng tam giác phẳng?

5. Viết công thức Lewis, công thức Gillespie AX_mE_n, cho biết kiểu lai hóa của nguyên tử trung tâm, dự đoán cấu hình không gian của các phân tử và ion sau: IOF_5, ClF_3, SF_4, SOF_4, OCN^-, PCl_6^- ?

6. Có các phân tử sau: SOF_2, $SOCl_2$và $SOBr_2$. Dựa vào thuyết Gillespie:

a. Cho biết kiểu lai hóa của nguyên tử trung tâm và cấu trúc hình học của phân tử?

b. So sánh góc liên kết OSF và FSF trong phân tử SOF_2; góc XSX giữa các phân tử?

7. Hãy dự đoán xem trong dãy hợp chất sau, góc liên kết tăng hay giảm? Giải thích.

a. $NCl_3 – PCl_3 – AsCl_3 – SbCl_3$

b. $PF_3 – PCl_3 – PBr_3$

Từ đó rút ra nhận xét về quan hệ giữa:

- Độ âm điện của nguyên tử trung tâm với góc liên kết.
- Độ âm điện của nguyên tử bao quanh với góc liên kết.

8. Trên cơ sở thuyết VB và lai hoá, hãy mô tả các liên kết trong các phân tử: $CH_3 – CH_3$; $CH_2 = CH_2$; CH ≡ CH bằng sự xen phủ các AO. Ghi trên sơ đồ: liên kết nào là liên kết σ, liên kết nàolà liên kết π?

9. Bằng khối phổ kế đã đo được năng lượng tối thiểu cần cho phản ứng sau là 18 eV:

$$H_2 (k) \rightarrow H^+(k) + e + H(k)$$

Năng lượng ion hóa của hidro là 13,6 eV. Tính năng lượng phá vỡ liên kết H - H trong điều kiện thí nghiệm này.

Đáp số: 4,4 eV

10. Cho các phân tử và ion B_2, B_2^+, F_2, F_2^-

a. Hãy vẽ giản đồ năng lượng các MO và viết cấu hình electron của các phân tử và ion đó.

b. Tính bậc liên kết của các phân tử và ion đó.

c. Nhận xét về độ bền liên kết và độ dài liên kết của B_2 với B_2^+, F_2 với F_2^-.

d. Nhận xét từ tính của các phân tử và ion đó.

e. So sánh các kết quả trên với phương pháp VB.

11. Giải thích vì sao năng lượng ion hoá của các phân tử H_2, N_2, C_2, CO cao hơn năng lượng ion hoá của các nguyên tử tương ứng và năng lượng ion hoá của các phân tử F_2, O_2, NO lại thấp hơn năng lượng ion hoá của các nguyên tử tương ứng.

	H	C	N	O	F
I_1 (kJ/mol)	1308	1083	1396	1312	1675

	H_2	C_2	N_2	O_2	F_2	CO	NO
I_1 (kJ/mol)	1488	1154	1507	1173	1526	1354	913

12. Có các phân tử và ion sau: SO_2, CO_2, OF_2, BF_3, CF_4, H_3O^+

Hãy cho biết ở mỗi nguyên tử trung tâm của các phân tử và ion trên có dạng lai hoá gì và cấu trúc không gian của chúng. Phân tử nào có mômen lưỡng cực phân tử bằng không, phân tử nào có mômen lưỡng cực phân tử khác không? Giải thích.

13. Biết nhiệt độ sôi và nhiệt hoá hơi của các hợp chất sau:

	HF	HCl	HBr	HI
T_s (K)	292	189	206	238
ΔH_{hh} (KJ/mol)	32,6	16,3	17,6	19,6

Nhận xét và giải thích quy luật biến thiên của các đại lượng đó?

14. LiF có mômen μ = 6,5D, khoảng cách giữa hai hạt nhân l = 1,56A°. Hãy tính độ ion của liên kết trong LiF.

Đáp số: 87%

15. Thực nghiệm xác định được mômen lưỡng cực của phân tử H_2O là 1,85D, góc liên kết HOH = 104,5°, độ dài liên kết O – H là 0,0957 nm

a. Tính momen lưỡng cực liên kết O – H (bỏ qua mômen tạo ra do các cặp electron không liên kết của oxi).

b. Tính độ ion có trong liên kết O – H.

Đáp số: a. μ_{O-H} = 1,51D; b. 32,8%.

Chương 4. TRẠNG THÁI TẬP HỢP CỦA VẬT CHẤT

1. So sánh tính chất, đặc điểm của chất rắn tinh thể và chất rắn vô định hình.

2. Nêu ví dụ và chỉ ra các liên kết chính trong: tinh thể nguyên tử, tinh thể phân tử, tinh thể ion và tinh thể kim loại.

3. Tinh thể MgO có cấu trúc kiểu NaCl. Khoảng cách R_o giữa hai ion gần nhau nhất trong tinh thể là 0,205 nm. Biết hằng số Madelung của MgO là a = 1,7475. Tính năng lượng hình thành mạng lưới MgO theo Born – Lande và theo Kapustinxki.

Đáp số: - 4060 $kJ.mol^{-1}$; - 4215 $kJ.mol^{-1}$

4. Tính năng lượng mạng lưới NaCl theo phương pháp Born – Lande. Biết $r_{Na^+} = 0,95A^o$; $r_{Cl^-} = 1,81A^o$; $A_{NaCl} = 1,7475$.

Hãy so sánh với kết quả tính theo phương pháp Kapustinxki và kết quả tính theo chu trình Born - Haber. Biết $\Delta H^o_{s,NaCl} = -411,14$ kJ.mol^{-1}, $\Delta H^o_{nt(Na)} = 108,44$ kJ.mol^{-1}, $I_{1(Na)} = 495,7$ kJ.mol^{-1}, $E_{Cl-Cl} = -240$ kJ.mol^{-1}, $A_{e(Cl)} = -349$ kJ.mol^{-1}. Hãy cho nhận xét về kết quả tính được?

Đáp số: - 768414 J.mol^{-1}; - 762140 kJ.mol^{-1}; - 786280 J.mol^{-1}