Chuyên đề 3: Liên kết hóa học – Cấu tạo phân tử- Lai hóa orbital, thuyết VSEPR - Phần III, IV và V

**Phần III: HỆ THỐNG BÀI TẬP TỪ CÁC ĐỀ THI HSG CHÍNH THỨC CỦA TỈNH, OLYMIPIC,…**

Câu 1. Xét các phân tử sau: SO3, NH3, N(CH3)3. Phản ứng của SO3 lần lượt với NH3 và N(CH3)3 ở pha khí hình thành hai sản phẩm **A** và **B**.

**a)** Vẽ cấu trúc hình học của SO3, NH3, N(CH3)3, **A** và **B**….

**b)** Trong hai sản phẩm, độ dài liên kết S−N là 191,2 pm và 195,7 pm; góc liên kết  là 97,6o và 100,1o (chưa đúng theo thứ tự). Hãy gán giá trị đúng vào **A**, **B** và giải thích.

ĐÁP ÁN

|  |  |
| --- | --- |
| a) | Viết cấu trúc đúng của mỗi chất = 0,1 điểm x 5 = 0,50 điểm |
| |  |  |  |  |  | | --- | --- | --- | --- | --- | |  |  |  |  |  | | SO3 | NH3 | (CH3)3N | H3NSO3 | (CH3)3NSO3 | |
| Lưu ý:  - Học sinh không vẽ không gian chứa cặp electron vẫn cho điểm tối đa.  - Học sinh viết công thức cấu tạo của chất **A** là của H2N-SO3H cũng cho điểm tối đa. |
| b) | |  |  |  | | --- | --- | --- | | **Chất** | **A** | **B** | | Độ dài liên kết S – N | 195,7 pm | 191,2 pm | | Góc liên kết | 97,6o | 100,1o | |
|  | - Nhóm methyl gây hiệu ứng +I nên làm tăng mật độ electron tên N do đó N(CH3)3 có tính base mạnh hơn NH3, điều này dẫn đến N-S trong O3S-N(CH3)3 ngắn hơn O3S-NH3.  - Mật độ electron trên N-S của O3S-N(CH3)3 nhiều hơn O3S-NH3 nên làm góc liên kết N-S-O trong O3S-N(CH3)3 lớn hơn O3S-NH3. |

**Câu 2.** Bằng thực nghiệm người ta xác định được giá trị momen lưỡng cực của phân tử H2S là 1,09 D và độ dài của liên kết S–H là 1,33 Å. Hãy:

a. Xác định góc liên kết HSH.

b. Tính độ ion của liên kết S–H biết rằng moment của liên kết này là 2,61.10–3 C.m.

*Cho 1 D =3,33.10–30 C.m và giả sử moment của cặp e không phân chia của S là không đáng kể.*

ĐÁP ÁN

|  |
| --- |
| Phân tử H2S có cấu tạo thẳng và tạp thành góc HSH.  a. Theo hình vẽ giá trị momen lưỡng cực của phân tử H2S là:    => Thay các giá trị tương ứng, ta được α = 92o  b. Độ ion của liên kết S–H trong phân tử H2S được xác định theo công thức: |

**Câu 3**. Trong mạng tinh thể của Beri borua, nguyên tử Bo kết tinh ở mạng lưới lập phương tâm mặt và trong đó tất cả các hốc tứ diện đã bị chiếm bởi nguyên tử beri. Khoảng cách ngắn nhất giữa 2 nguyên tử Bo là 3,29Ǻ.

a. Biểu diễn sự chiếm đóng của nguyên tử Bo trong một ô mạng cơ sở.

b. Có thể tồn tại bao nhiêu hốc tứ diện, hốc bát diện trong một ô mạng? Từ đó cho biết công thức thực nghiệm của hợp chất này (công thức cho biết tỉ lệ nguyên tử của các nguyên tố). Trong một ô mạng cơ sở có bao nhiêu đơn vị công thức trên?

c. Cho biết số phối trí của Be và Bo trong tinh thể này là bao nhiêu?

d. Tính độ dài cạnh a0 của ô cơ sở , độ dài liên kết Be–B và khối lượng riêng của beri borua

theo đơn vị g/cm3. Biết Be: 10,81 ; Bo 9,01.

ĐÁP ÁN

|  |
| --- |
| a)  b) Có 8 hốc tứ diện, và 4 hốc bát diện.  Mỗi nguyên tử Be chiếm một hốc tứ diện nên trong một ô có 8 nguyên tử Be.  NB= 8\*1/8 + 6\*1/2 = 4  NB : NBe = 1:2 nên công thức thực nghiệm của hợp chất này là Be2B.  Trong một ô mạng chứa 4 đơn vị công thức trên (Be8B4)  c) Số phối trí của Be = 4; số phối trí của B = 8  d) a0= 2\*3,29 => a0 = 4,65  Độ dài liên kết Be–B = a0 = 2,01A0  m/V = \* = 1,90 gam/cm3 |

**Câu 4.** Cho các tiểu phân CN, N2 và NO.

a. Sử dụng thuyết MO, xác định bậc liên kết của các phân tử này và cho biết phân tử nào có năng lượng ion hoá (IE) lớn nhất và nhỏ nhất?

b. Tiểu phân nào có ái lực electron lớn nhất? (Ái lực electron là năng lượng giải phóng khi một tiểu phân nhận thêm 1 electron, và mang dấu + nếu sự nhận electron toả nhiệt.)

c. Sự nhận thêm hoặc bớt các electron từ CN hoặc NO tạo thành các tiểu phân đẳng điện tử (cùng số electron) với N2. Các tiểu phân đẳng điện tử này có liên kết bền hơn hay kém bền hơn N2? Giải thích.

ĐÁP ÁN

a. N2 : (σlk)2(σplk)2(πxlk= πylk)4(σzlk)2

Bậc liên kết = 3

NO : (σlk)2(σplk)2 (σzlk)2(πxlk= πylk)4(πxplk= πyplk)1

Bậc liên kết = 2,5

CN : (σlk)2(σplk)2(πxlk= πylk)4(σzlk)1

Bậc liên kết = 2,5

IE(NO) < IE(CN) < IE(N2)

b. Tiểu phân CN có ái lực electron lớn nhất.

c. Nhìn chung, sự xen phủ sẽ là mạnh nhất nếu xảy ra giữa các AO của nguyên tử giống nhau, do vậy tư có thể dự đoán N2 có liên kết bền nhất. Tuy nhiên, sự so sánh này phức tạp hơn thế bởi NO+ và CN– là những tiểu phân mang điện.

Sự tạo thành liên kết có xu hướng ổn định điện tích, bất kể là diện tích âm hay dương, do vậy kể cả khi sự xen phủ trong N2 là tốt hơn thì cũng không hẳn Ng đã có liên kết bền nhất trong số 3 tiểu phản đắng điện tử. Nếu không có thêm thông tin thì câu hỏi này không trả lời cụ thể được.

**Câu 5.** Sử dụng mô hình VSEPR dự đoán dạng hình học của các ion và phân tử sau: XeF4, BCl3, NF3, S2O, SiF62-, NO, I, IF5.

ĐÁP ÁN

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Phân tử | Mô hình VSEPR | Dạng hình học phân tử |
| XeF4 | AX4E2 | Vuông phẳng |
| BCl3 | AX3E0 | Tam giác đều |
| NF3 | AX3E1 | Tháp đáy tam giác đều |
| S2O | AX4E0 | Tứ diện |
| SiF | AX6E0 | Bát diện |
| NO | AX2E0 | Đường thẳng |
| I | AX2E3 | Đường thẳng |
| IF5 | AX5E1 | Tháp đáy vuông |

**Câu 6.** Đồng (I) oxit màu đỏ có nhiều ứng dụng trong thực tế, là một trong những vật liệu đầu tiên được sử dụng trong ngành điện tử chất rắn, Ngày nay, vật liệu này tiếp tục được quan tâm vì nó không độc và là một hợp phần rẻ tiền của các pin mặt trời.

|  |  |
| --- | --- |
|  | A  B |

Hai hình trên mô tả ô mạng cơ sở lập phương của tinh thể Cu2O. Hằng số mạng của cấu trúc trên là 427,0 pm.

**a.** Hãy cho biết vị trí của nguyên tử Cu là A hay B?

**b.** Tính khoảng cách ngắn nhất giữa O-O, Cu-O và Cu-Cu

**c.** Tính số phối trí của mỗi nguyên tử.

**d.** Tính khối lượng riêng của tinh thể Cu2O.

**e.** Tinh thể đồng (I) oxit có sự khiếm khuyết của một số nguyên tử Cu trong khi số nguyên tử O không đổi. Trong một cấu trúc đã được nghiên cứu, người ta tìm thấy có 0,2% các nguyên tử đồng có số oxi hoá +2. Hãy tính % đồng bị trống trong mạng tinh thể và tính x trong công thức tổng quát của tinh thể như sau: Cu2-xO.

(*Cho:* MCu = 63,54 g/mol ; MO = 16 g/mol)

ĐÁP ÁN

|  |
| --- |
| a) A là oxi (chiếm các đỉnh và tâm của ô mạng cơ sở)  B là Cu (chiếm ½ số hốc tứ diện) |
| b) dO –O = = = 369,8 pm  dCu – O = =184,9 pm  dCu – Cu = = 301,9 pm |
| c) Số phối trí của O là 4; của Cu là 2. |
| d) Trong 1 ô mạng cơ sở có :  - Số nguyên tử Cu là : 4  - Số nguyên tử Oxi là :  → Trung bình trong 1 ô cơ sở có 2 phân tử Cu2O  Khối lượng riêng của tinh thể là : 6,106 (g/cm3) |
| e) Theo đề bài, người ta tìm thấy có 0,2% các nguyên tử đồng có số oxi hoá +2.  Giả sử có 1000 nguyên tử Cu trong tinh thể thì sẽ có 2 nguyên tử Cu2+ và 998 nguyên tử Cu+.  Áp dụng bảo toàn điện tích, tổng số nguyên tử O2- là (2.2+1.998)/2 = 501 nguyên tử.  Nếu không bị khiếm khuyết thì theo cấu trúc mạng tinh thể, số nguyên tử Cu luôn gấp 2 lần số nguyên tử O.  Vậy số nguyên tử Cu đáng lẽ phải có là : 2. 501 = 1002 (nguyên tử)  % đồng bị trống trong mạng tinh thể là (1002 – 1000)/ 1002 = 0,2%  Trong công thức tổng quát Cu2-xO có: x = 2.0,2% = 0,004 |

**Câu 7.**

**a)** Cả nitrogen và boron đều tạo hợp chất trifluoride. Năng lượng liên kết B-F trong BF3 là 646 kJ/mol và của liên kết N-F trong NF3 chỉ là 280 kJ/mol. Hãy giải thích sự khác nhau về năng lượng liên kết trong hai hợp chất.

**b)** Hãy vẽ các cấu trúc Lewis của dinitrogen oxide (N2O). Tính điện tích hình thức trên mỗi nguyên tử, từ đó chỉ ra cấu trúc hợp lí nhất.

**c)** Thực nghiệm độ dài các liên kết sau đây:

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| N - N | N = N | N ≡ N | N - O | N = O |
| 167 pm | 120 pm | 110 pm | 147 pm | 115 pm |

Độ dài liên kết N – N trong N2O là 112 pm và độ dài liên kết N – O là 119 pm. Kết quả thu được ở câu b) có phù hợp với số liệu thực nghiệm không?

Đáp án

|  |
| --- |
| **a)** Năng lượng liên kết trong BF3 cao hơn NF3 nhiều do trong BF3 có thêm liên kết π cho nhận giữa cặp electron hóa trị tự do của F và obitan p còn trống của B.  Diagram  Description automatically generated |
| **b)** N2O có 3 cấu trúc cộng hưởng chính: |
| Điện tích hình thức trên mỗi cấu trúc    - Cấu trúc (a) và (b) có điện tích hình thức “tối đa” là 2, còn cấu trúc (c) có điện tích hình thức “tối đa” là 4 nên cấu trúc (a) và (b) hợp lí hơn cấu trúc (c). Tuy nhiên, trong cấu trúc (b) điện tích hình thức -1 trên O là nguyên tử có độ âm điện lớn hơn N nên **cấu trúc (b) là cấu trúc hợp lí nhất.** |
| **c)** Trong N2O độ dài liên kết N – N là 112 pm nằm nữa liên kết đôi (120 pm) và liên kết ba (110 pm). Độ dài liên kết N – O là 119 pm nằm giữa liên kết đơn (147 pm) và liên kết đôi (115 pm), không có bằng chứng về liên kết ba N – O. Vậy các kết luận ở b) cấu trúc cộng hưởng (a) và (b) hợp lí là phù hợp với thực nghiệm. |

Câu 8. Kẽm tác dụng với phi kim Y tạo ra hợp chất ZnY, kết tinh theo kiểu mạng sphalerit. Phép phân tích nhiễu xạ tia X tinh thể ZnY cho biết cạnh ô mạng cơ sở a = 5,41 angstrom.

1. Cho biết Y là nguyên tố nào biết rằng khối lượng riêng của ZnA là 4,10 g/cm3.
2. Tính khoảng cách gần nhất giữa hai nguyên tử Zn và Y trong tinh thể ZnY theo pm.

ĐÁP ÁN

|  |
| --- |
| MZnY = = 97,7 g/mol ⇒ MY = 32,31 g/mol  **⇒ Y là lưu huỳnh (S).** |
| Xét một ô mạng cơ sở sphalerit ZnS cạnh a, và khoảng cách gần nhất giữa hai nguyên tử Zn-S được kí hiệu là d(Zn-S).    Ta có:  = 2d(Zn-S)sin  d(Zn-S) = a  = 5,41  = 234,2 angstroms  = 234,2 pm |

Câu 9. Viết công thức Lewis, dự đoán cấu trúc hình học cho các phân tử sau đây: XeO2F4, ICl4+, PCl4−, N3−.

**Đáp án**

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| Phân tử | Công thức VSEPR | Hình học cặp electron hóa trị | Hình học  phân tử | Công thức Lewis |
| XeO2F4 | XeO2F4L0 | Bát diện | Bát diện |  |
| ICl4+ | ICl4+L1 | Lưỡng tháp tam giác | Bập bênh |  |
| PCl4− | PCl4−L1 | Lưỡng tháp tam giác | Bập bênh |  |
| N3− | NN2L0 | Thẳng | Thẳng |  |

Câu 10. Sắp xếp các phân tử C2H6 , C2H2, C2H6 theo thứ tự giảm dần độ dài liên kết C-C từ trái sang phải. Giải thích.

**ĐÁP ÁN**

|  |
| --- |
| Thứ tự giảm dần độ dài liên kết C-C từ trái sang phải: C2H6, C2, C2H2. |
| Giải thích:  \* Theo thuyết VB, cấu tạo các phân tử C2H2, C2H6 như sau:    \* Theo thuyết MO, cấu hình electron phân tử C2 là:  (σ1s)2(σ\*1s)2(σ2s)2(σ\*2s)2(π1)2(π2)2  ⇒ bậc liên kết C-C: NC-C =  \* Bậc liên kết C-C càng lớn, độ dài liên kết càng bé. Do đó, thứ tự các phân tử theo chiều giảm dần độ dài liên kết C-C từ trái sang phải là: C2H6, C2, C2H2. |

**Câu 11.** Bằng thực nghiệm người ta xác định được giá trị momen lưỡng cực của phân tử H2S là 1,09 D và độ dài của liên kết S–H là 1,33 Å. Hãy:

a. Xác định góc liên kết HSH.

b. Tính độ ion của liên kết S–H biết rằng moment của liên kết này là 2,61.10–3 C.m.

*Cho 1 D =3,33.10–30 C.m và giả sử moment của cặp e không phân chia của S là không đáng kể.*

**ĐÁP ÁN**

|  |
| --- |
| Phân tử H2S có cấu tạo thẳng và tạp thành góc HSH.  a. Theo hình vẽ giá trị momen lưỡng cực của phân tử H2S là:    => Thay các giá trị tương ứng, ta được α = 92o  b. Độ ion của liên kết S–H trong phân tử H2S được xác định theo công thức: |

**Câu 12.** Cho các công thức cấu tạo của các hợp chất sau. Trường hợp nào có thể chuyển liên kết phối trí thành liên kết đôi được? Giải thích ngắn gọn

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| **STT** | **Phân tử** | **Cấu tạo** | **Chuyển được / không** | **Giải thích** |
| 1 | SO2 |  |  |  |
| 2 | HNO3 |  |  |  |
| 3 | NO2+ |  |  |  |
| 4 | H3PO4 |  |  |  |

**ĐÁP ÁN**

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| STT | Phân tử | Cấu tạo | Thay được hay không | Giải thích |
| 1 | SO2 |  | Được | Lưu huynh ở trạng thái kích thích lần thứ nhất có 4 electron độc thân |
| 2 | HNO3 |  | Không được | Không thể kích thích electron 2s lên 3s |
| 3 | NO2+ |  | Được | N ở 2s22sp3 mất một electron thì có cấu hình 2s22p2. ở trạng thái kích thích electron 2s có thể nhảy lên 2p tạo 2s12p3 có 4 electron độc thân |
| .4 | H3PO4 |  | Được | Photpho ở trạng thái kích thích lần thứ nhất có 5 electron độc thân |

**Câu 13.** Cho các phân tử sau: NO2, SO2, H2S, AlCl3, BH3, CO2. Các chất có khả năng đime hóa (đime hóa= hai phân tử kết hợp với nhau). Viết cấu tạo phân tử dạng đime và giải thích ngắn lý do đime hóa

**ĐÁP ÁN**

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| |  |  |  |  | | --- | --- | --- | --- | | Phân tử | Cấu tạo phân tử | Cấu tạo phân tử dime | Giải thích | | NO2 | Kết quả hình ảnh cho NO2 structure |  | N trong NO2 còn 1 electron độc thân có khả năng góp chung với với 1 electron độc thân của N trong phân tử NO2 còn lại để hình thành liên kết cộng hóa trị | | AlCl3 | Hình ảnh có liên quan |  | Clo sử dụng cặp electron để phối trí với obitan trống của nhôm | | BH3 |  | Kết quả hình ảnh cho b2h6 structure | Kết quả hình ảnh cho b2h6 structure  Liên kết ba tâm | |

**Câu 14.** Điền thông tin của các phân tử/ion CO2, PF5, SF4, IF5, SH42- vào bảng như ví dụ sau.

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| STT | Phân tử/ion | Dạng tổng quát AXmEn | Dạng lai hóa | Cấu trúc phân tử | |
| 0.(ví dụ) | NH3 | AX3E1 | sp3 | Kết quả hình ảnh cho NH3 structure | Gấp khúc |
| 1. |  |  |  |  |  |

**ĐÁP ÁN**

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| STT | Phân tử/ion | Dạng tổng quát AXmEn | Dạng lai hóa | Cấu trúc phân tử | |
| 0.(ví dụ) | NH3 | AX3E1 | sp3 | Kết quả hình ảnh cho NH3 structure | Gấp khúc |
| 1. | CO2 | AX2E0 | sp | Kết quả hình ảnh cho co2 structure | Đường thẳng |
| 2 | PF5 | AX4E1 | sp3d |  | Lưỡng tháp đáy tam giác |
| 3 | SF4 | AX4E1 | sp3d |  | Bập bênh |
| 4 | IF5 | AX4E2 | sp3d2 |  | Tháp đáy vuông |
| \*5 | SH42- | AX4E2 | sp3d2 |  | Vuông phẳng |

**Câu 15.** Xác định cấu trúc phân tử của các phân tử và ion sau đồng thời cho biết kiểu lai hóa các AO hóa trị của nguyên tử trung tâm: SOF4, TeCl4, BrF3, I3-, ICl4-?

**ĐÁP ÁN**

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Chất | Trạng thái lai hóa | Dạng hình học của phân tử |
| SOF4 | sp3d | lưỡng tháp tam giác |
| TeCl4 | sp3d | bập bênh |
| BrF3 | sp3d | hình chữ T cụp |
| I-3 | sp3d | thẳng |
| ICl-4 | sp3d2 | vuông phẳng |

**Câu 16.** Sử dụng phương pháp cặp electron hay phương pháp liên kết hoá trị (viết tắt là VB –

Valence Bond) và mô hình VSERP hãy cho biết sự tạo thành liên kết, trạng thái lai hóa của

nguyên tử trung tâm, dạng hình học của phân tử .

đáp án

|  |
| --- |
| Xét phân tử   A picture containing font, text, number, white  Description automatically generated  A picture containing diagram, plan, line, technical drawing  Description automatically generated  Ở trạng thái kích thích S lai hoá  với cấu trúc tứ diện, góc lai hoá . Khi hình thành phân tử, 4chứa electron độc thân sẽ xen phủ với 2  chứa electron độc thân của hai nguyên tử O và 2  chứa electron độc thân của hai nguyên tử Cl tạo 4 liên kết  . Ngoài ra, còn có sự xen phủ bên của 2 AO3d2 chứa electron độc thân của S với 2 chứa electron độc thân của 2 nguyên tử O tạo hai liên kết  .  Do các electron trên liên kết S = O đẩy mạnh hơn trên liên kết S - C1 nên góc liên kết khác góc lại hoá ban đầu và phân tử có cấu trúc tứ diện lệch. |

**Câu 17.** Selenium là nguyên tố cần thiết cho con người. Tính chất hóa học của nó giống với Sulfur và Tellerium, với một vài điểm tương đồng với Arsenic. Hợp chất **A** với thành phần nguyên tố CFNOSe.

**a)**Vẽ công thức Lewis của **A** với các gợi ý sau về cấu tạo của **A**: Se liên kết với ba trong bốn nguyên tử còn lại; O và N ở trạng thái oxi hóa thấp nhất; có hai liên kết bội; không có điện tích hình thức.

**b)** Cho biết góc liên kết nhỏ nhất trong phân tử **A**.

Kể từ khi phát hiện ban đầu về Xe[PtF6] bởi N.Bartlettin1962, nhiều hợp chất khí của khí hiếm đã được biết đến. Do đó, Xe hình thành liên kết không chỉ với các nguyên tố có độ âm điện lớn nhất là F và O mà còn với các nguyên tố có độ âm điện nhỏ hơn như C.

**c)** Vẽ cấu trúc hình học cho các phân tử sau: XeF2; XeF4; XeOF2; XeO3; XeO4; [XeF2(C6F5)]+

**ĐÁP ÁN**

|  |  |
| --- | --- |
| **Ý** | **Nội dung** |
| **a** |  |
| **b** | Góc C-Se-F nhỏ nhất do liên kết Se=O là liên kết đôi làm tăng lực đẩy các cặp e liên kết, dẫn đến tăng góc liên kết các góc chứa Se=O  Thực nghiệm: |
| **c** | Đường thẳng Vuông phẳng Chữ T    Chóp đáy vuông Chóp tam giác Chữ T |

**Câu 18.** Giả thiết ion F2- được tạo thành từ nguyên tử F và ion F-

**a)** Thuyết liên kết cộng hóa trị (thuyết VB) có thể giải thích được sự hình thành ion F2- bằng con đường nêu trên hay không? Giải thích.

**b)** Theo thuyết MO, ion F2- được hình thành theo cách trên có tồn tại hay không? Giải thích. Vẽ giản đồ năng lượng MO và viết cấu hình electron phân tử cho ion F2-.

**đáp án**

|  |
| --- |
| **a)** Không giải thích được sự hình thành ion F2- vì theo VB, một liên kết cộng hóa trị có thể được hình thành từ:  – Sự góp chung mỗi bên 1e độc thân: điều này không đạt được do F– không có electron độc thân.  – Cho nhận cặp e: điều này cũng không đạt được do F ở chu kì 2 nên không còn AO trống. |
| **b)** Bậc liên kết: N = .  Bậc liên kết khác 0 nên theo thuyết MO, ion này tồn tại.  Cấu hình electron phân tử của F2−:  Giản đồ MO của F2–: |

**Câu 19.**

a) Hãy vẽ các cấu trúc Lewis của dinitrogen oxide (N2O)

b) Tính điện tích hình thức trên mỗi nguyên tử, từ đó chỉ ra cấu trúc hợp lí nhất.

c) Thực nghiệm độ dài các liên kết sau đây:

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| N - N | N = N | N ≡ N | N - O | N = O |
| 167 pm | 120 pm | 110 pm | 147 pm | 115 pm |

Độ dài liên kết N – N trong N2O là 112 pm và độ dài liên kết N – O là 119 pm. Kết quả thu được ở câu (b) có phù hợp với số liệu thực nghiệm không?

**ĐÁP ÁN**

|  |
| --- |
| **a)** N2O có 3 cấu trúc cộng hưởng chính: |
| **b)** Điện tích hình thức trên mỗi cấu trúc    - Cấu trúc (a) và (b) có điện tích hình thức “tối đa” là 2, còn cấu trúc (c) có điện tích hình thức “tối đa” là 4 nên cấu trúc (a) và (b) hợp lí hơn cấu trúc (c). Tuy nhiên, trong cấu trúc (b) điện tích hình thức -1 trên O là nguyên tử có độ âm điện lớn hơn N nên cấu trúc (b) là cấu trúc hợp lí nhất. |
| **c)** Trong N2O độ dài liên kết N – N là 112 pm nằm nữa liên kết đôi (120 pm) và liên kết ba (110 pm). Độ dài liên kết N – O là 119 pm nằm giữa liên kết đơn (147 pm) và liên kết đôi (115 pm), không có bằng chứng về liên kết ba N – O. Vậy các kết luận ở b) cấu trúc cộng hưởng (a) và (b) là hợp lí nhất là phù hợp với thực nghiệm. |

**Câu 20.** Biểu diễn cấu trúc hình học và cho biết trạng thái lai hóa của nguyên tử chlorine (Cl) trong các phân tử và ion sau: [ClO4]-, F3ClO, [F2ClO2]+, [F4ClO]-

**ĐÁP ÁN**

|  |
| --- |
| [ClO4]-: Dạng tứ diện. Nguyên tử Cl lai hóa sp3.    F3ClO: Dạng bập bênh. Nguyên tử Cl lai hóa sp3d    [F2ClO2]+: Tứ diện. Nguyên tử Cl lai hóa sp3    [F4ClO]-: Tháp đáy vuông. Nguyên tử Cl lai hóa sp3d2 |

**Câu 21.**

*a.* Sử dụng lí thuyết MO, xây dựng giản đồ năng lượng của ion NO-. Từ đó, viết cấu hình electron của NO, NO+ và NO-. So sánh độ dài liên kết nitrogen-oxygen trong các tiểu phân trên.

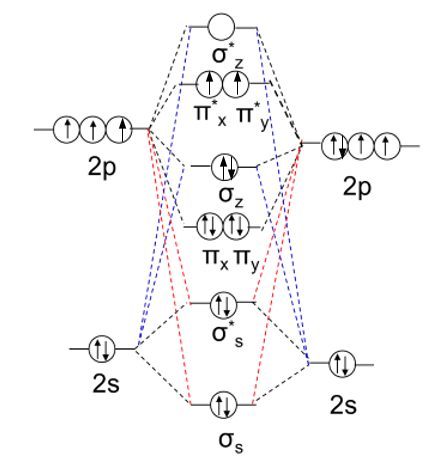
*b.* Khi cho H+ tác dụng với NO- để tạo thành phân tử HNO. Hãy cho biết H+ sẽ liên kết với nguyên tử nitrogen hay nguyên tử oxygen trong ion NO-. Giải thích?

**ĐÁP ÁN**

**a.**

Giản đồ MO của NO-

AO(N) MO(NO) AO(O)



Cấu hình electron của:

NO- σ1s2 σ1s\*2 σ2s2 σ2s\*2 (πx = πy)4 σz2 (πx\*1 = πy\*1 ⇒ Bậc liên kết = 2

NO σ1s2 σ1s\*2 σ2s2 σ2s\*2 (πx = πy)4 σz2 (πxy\*)1 ⇒ Bậc liên kết = 2,5

NO+  σ1s2 σ1s\*2 σ2s2 σ2s\*2 (πx = πy)4 σz2 ⇒ Bậc liên kết = 3

Độ dài liên kết nitrogen-oxygen: NO+ < NO < NO- do bậc liên kết giảm dần

**b.**

Khi NO- kết hợp với H+ để tạo thành phân tử HNO thì ion H+ sẽ tương tác với MO bị chiếm chứa electron độc thân và có năng lượng cao nhất, chính là các MO πx\* và πy\* . Sự đóng góp của nguyên tử N với các MO πx\* và πy\* lớn hơn so với nguyên tử O nên H+ sẽ ưu tiên liên kết với nguyên tử N trong ion NO- và tạo thành phân tử HNO.

**Phần IV: BÀI TẬP CÓ THÔNG TIN ỨNG DỤNG THỰC TẾ**

**Câu 1.** Natri hypochlorite là một hợp chất hóa học thường được sử dụng trong sản xuất xà phòng với vai trò là chất tẩy trắng và khử trùng. Nó là một chất oxy hóa mạnh được sử dụng để tiêu diệt vi khuẩn, vi rút và nấm trong quá trình sản xuất xà phòng.Áp dụng qui tắc Octet để giải thích sự hình thành liên kết trong hợp chất NaOCl.

ĐÁP ÁN

|  |
| --- |
| - Viết cấu hình electron của Na, Cl, O  - Na có 1e lớp ngoài cùng nên có xu hướng nhường 1e để đạt cấu hình bền của khí hiếm  Na → Na+ + 1e  - Cl có 7e lớp ngoài cùng, O có 6e lớp ngoài cùng nên Cl, O góp chung e tạo ion ClO-  - Viết sơ đồ liên kết bằng cách sử dụng công thức Lewis của Cl, O  + → → (ClO -) |
| - Hai ion Na+ và ClO-  hút nhau bằng lực tương tác tĩnh điện giữa các ion trái dấu tạo thành hợp chất NaClO.  Na+ + ClO-  → NaClO |

**Câu 2.** Nước (H2O)đóng vai trò vô cùng quan trọng không thể thay thế với sức khỏe và cuộc sống của con người. Nó giúp con người duy trì sự sống hàng ngày bởi nước chiếm 70-80% trọng lượng cơ thể.

Phân tử H2O có cấu tạo hình chữ V với góc liên kết HOH bằng 104,50.

1. Theo lý thuyết lai hóa, nguyên tử oxi trong phân tử H2O ở trạng thái lai hóa nào? Mô tả sự hình thành liên kết trong H2O theo giả thiết lai hóa đó.

2. Giải thích tại sao góc liên kết trong phân tử H2O lại nhỏ hơn so với góc của tứ đều (109,5o)?

3.Trình bày cấu trúc của tinh thể nước đá. Tinh thể nước đá thuộc kiểu tinh thể nguyên tử, phân tử hay ion? Hãy giải thích vì sao nước đá lại nổi trên bề mặt nước lỏng?

ĐÁP ÁN

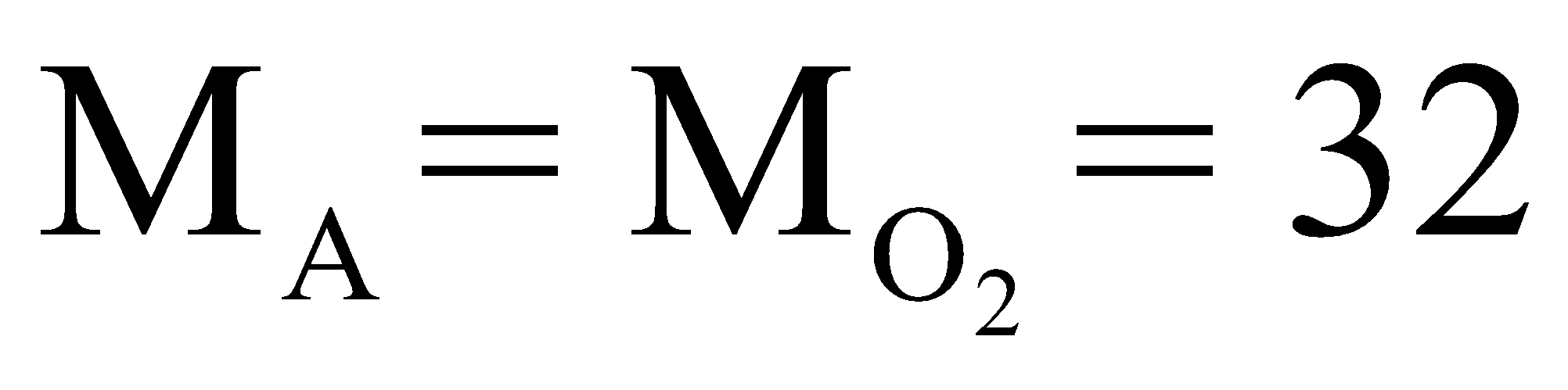
|  |  |
| --- | --- |
| **1.** Để giải thích cấu trúc hình học của phân tử H2O, thuyết lai hóa cho rằng nguyên tử O ở trạng thái lai hóa tứ diện sp3.  sp3  Sự hình thành các liên kết trong phân tử H2O được giải thích như sau:  Hai obitan lai hóa chứa electron độc thân sẽ xen phủ với 2 obitan 1s của 2 nguyên tử H tạo thành 2 liên kết .  Hai obitan lai hóa chứa cặp electron của O không tham gia liên kết hướng về hai đỉnh của hình tứ diện. | |
| 1. Do 2 cặp electron không liên kết trên nguyên tử O chỉ chịu lực hút của hạt nhân nguyên tử O nên 2 cặp electron này chiếm vùng không gian rộng hơn so với 2 cặp electron liên kết (chịu lực hút của hai hạt nhân). Do vậy nó tạo ra lực đẩy đối với đám mây các cặp electron liên kết, làm các đám mây này hơi bị ép lại, do vậy góc liên kết thực tế là 104,50 nhỏ hơn so với góc của tứ diện đều. | Hình: Cấu tạo phân tử H2O |
| **3.** Mạng tinh thể nước đá thuộc kiểu mạng tinh thể phân tử. Mỗi phân tử nước liên kết với 4 phân tử nước khác gần nó nhất nằm trên bốn đỉnh của một hình tứ diện đều.  Như vậy, trong mạng tinh thể, mỗi phân tử nước đều ở tâm của một hình tứ diện đều và liên kết với 4 phân tử nước trên 4 đỉnh nhờ tạo thành 4 liên kết hiđro. | Hình: Mô hình tinh thể nước đá |
| Cấu trúc tinh thể phân tử nước đá là cấu trúc tứ diện, là cấu trúc rỗng nên có tỉ khối nhỏ hơn khi nước ở trạng thái lỏng, do vậy nước đá nổi trên bề mặt nước lỏng. Thể tích nước của đá khi đông đặc lớn hơn khi ở trạng thái lỏng. | |

**Câu 3.** Chất **A** là hợp chất có thành phần chỉ gồm nitơ và hiđro. Chất **A** được sử dụng làm nhiên liệu cho tên lửa. Ở cùng điều kiện về nhiệt độ và áp suất, một thể tích hơi của **A** có khối lượng bằng khối lượng của cùng một thể tích khí oxi.

**a)** Xác định công thức phân tử, công thức cấu tạo của **A** và cho biết trạng thái lai hóa của nitơ trong **A**.

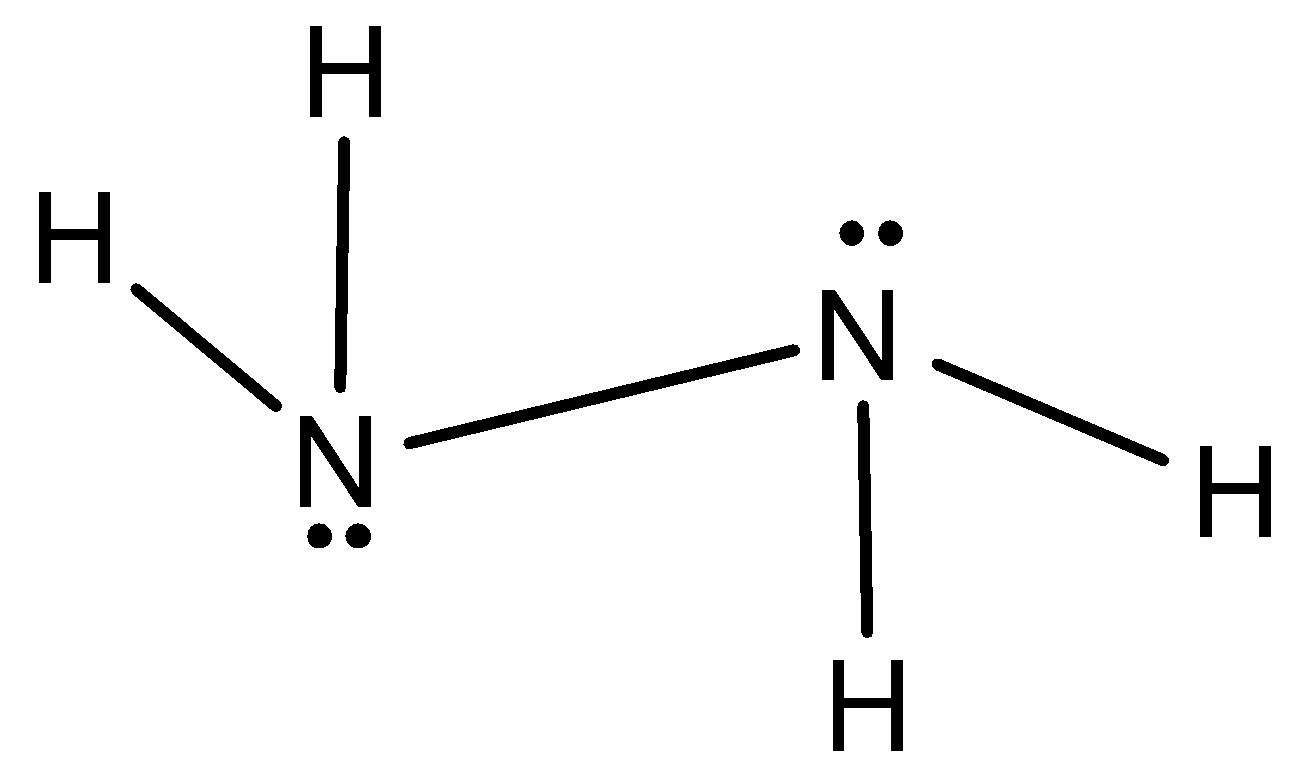
**b)** Dựa vào đặc điểm cấu tạo, hãy so sánh tính bazơ của **A** với NH3. Giải thích.

**ĐÁP ÁN**

**a)** Gọi công thức của chất **A** là NxHy. Ở cùng điều kiện về nhiệt độ và áp suất, một thể tích khí **A** có khối lượng bằng khối lượng của cùng một thể tích khí oxi → 

14x + y = 32 → x = 2, y = 4 → chất A là N2H4 (hiđrazin)

Công thức cấu tạo của N2H4:



Trong N2H4, cả hai nguyên tử N đều ở trạng thái lai hóa sp3.

**b)** Tính bazơ của NH3 lớn hơn N2H4 do phân tử N2H4 có thể coi là sản phẩm thế một nguyên tử H trong NH3 bằng nhóm NH2, nguyên tử N có độ âm điện lớn, nhóm NH2 hút electron làm giảm mật độ electron trên nguyên tử nitơ của N2H4 hơn so với của NH3 → tính bazơ của N2H4 yếu hơn NH3.

**Câu 4.** Phốtpho triflorua (công thức PF3 ), là một chất khí không màu và không mùi . Nó rất độc và phản ứng chậm với nước. Công dụng chính của nó là làm phối tử trong phức kim loại .Cho hai phân tử PF3

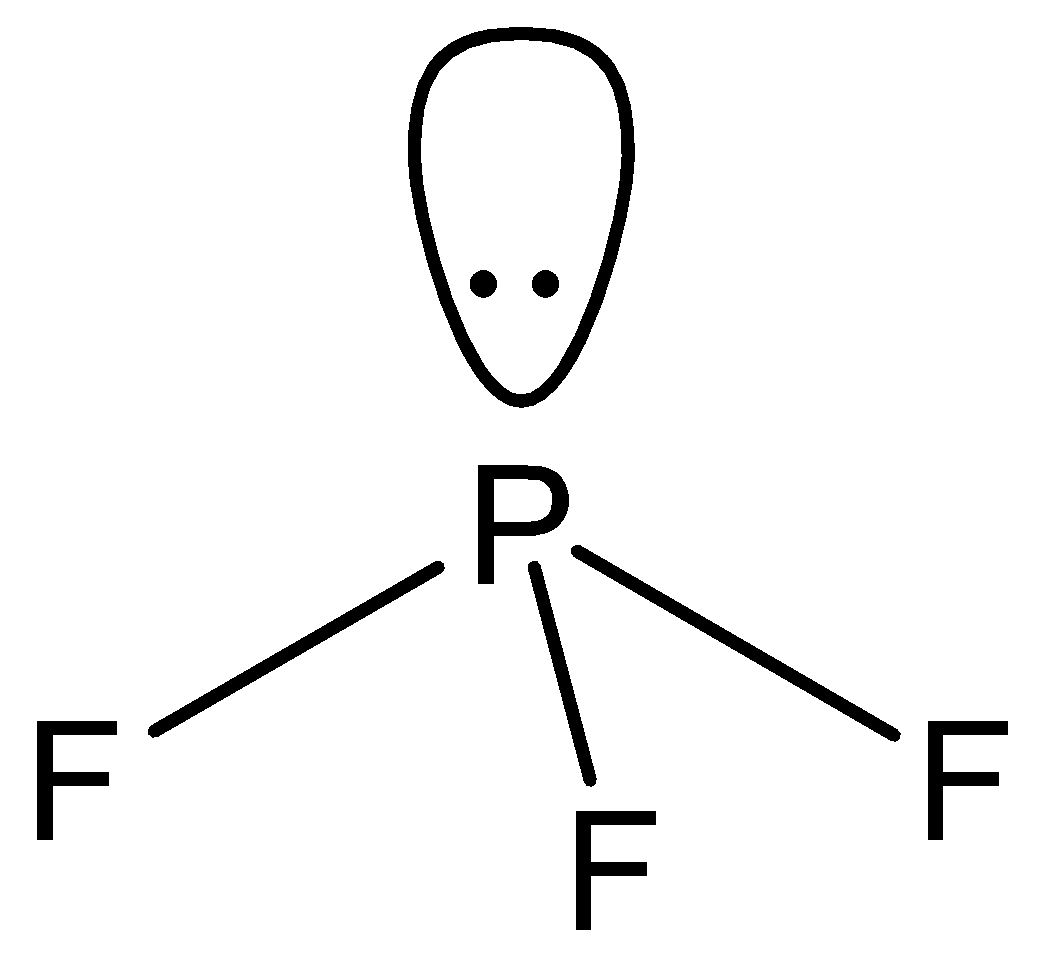
**a)** Hãy cho biết trạng thái lai hóa của nguyên tử trung tâm và dạng hình học phân tử của chúng.

**b)** Cho biết sự phân cực của phân tử trên? Giải thích?

**Giải:**

**a)**

PF3: P lai hóa sp3, PF3 dạng chóp tam giác.



**b)** PF3 có μ > 0.

**Câu 5.** Phosphine (PH3) có nhiều ứng dụng trong các lĩnh vực khác nhau, được sử dụng trong ngành công nghiệp điện tử, khử trùng và bảo quản nông sản trong các kho chứa và các quy trình công nghiệp khác.Đây là chất khí không màu, rất độc, có mùi tỏi, rất kém bền so với amonia cháy trong không khí ở 1500C, khi có mặt diphosphan (P2H4) nó tự cháy trong không khí ở nhiệt độ thường tạo khối cầu lửa bay lơ lửng. PH3 sinh ra trong quá trình phân hủy xác động thực vật, nhất là ở xương. Nó thường xuất hiện ở bãi tha ma trong thời tiết mưa phùn, gió bấc nên gọi là “ma trơi”.

**a)** Hãy cho biết cấu hình hình học của các phân tử PH3 và AsH3.

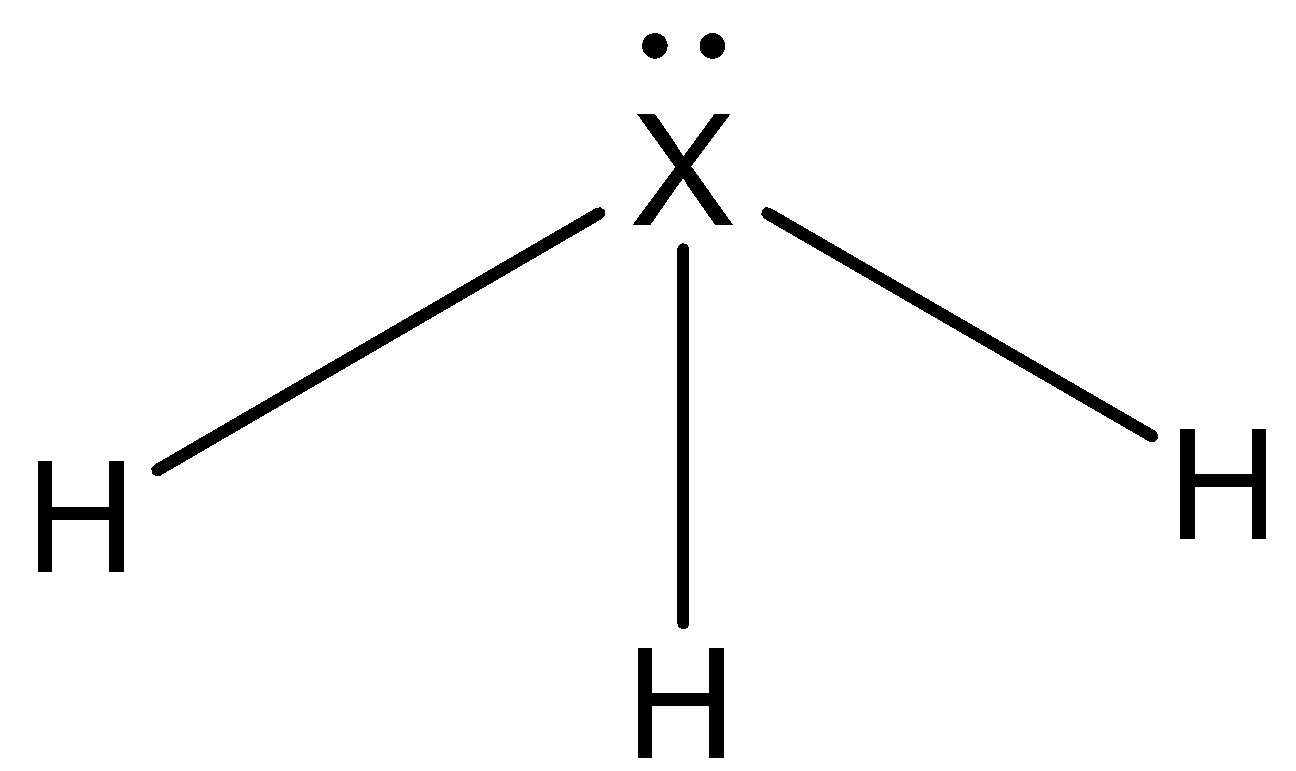
**b)** So sánh góc liên kết HXH giữa hai phân tử PH3 và AsH3 và giải thích?

**c)** Những phân tử nào sau đây có moment lưỡng cực lớn hơn 0? BF3, NH3, SiF4, SiHCl3, SF2, O3.

ĐÁP ÁN

**a)** P: 1s22s22p63s23p3; As: 1s22s22p63s23p63d104s24p3

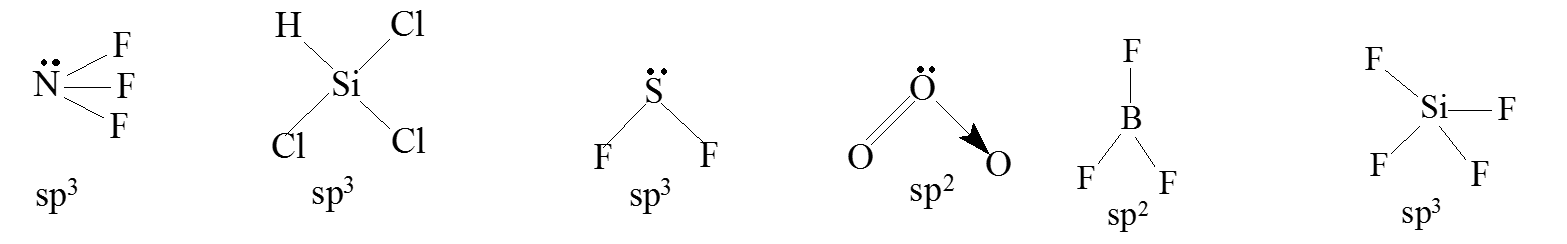
P và As đều có 5 electron hóa trị và đã có 3 electron độc thân trong XH3



X ở trạng thái lai hóa sp3.

**b)** XH3 hình tháp tam giác, góc HPH > góc AsH, vì độ âm điện của nguyên tử trung tâm P lớn hơn so với As nên lực đẩy mạnh hơn.

**c)** 4 chất đầu tiên có cấu tạo bất đối xứng nên có moment lưỡng cực > 0.



**Phần V: BÀI TẬP TRẮC NGHIỆM (ÍT NHẤT 20 CÂU)**

**Câu 1.** Công thức Lewis của CS2 là

**A.** . **B.** .

**C.** . **D.** .

***Đáp án:*** B, công thức đúng theo quy tắc bát tử.

**Câu 2.** Phân tử nào sau đây có nguyên tử trung tâm không tuân theo quy tắc octet?

**A.** NO. **B.** CS2. **C.** PF3. **D.** HCN.

***Đáp án:*** A, do tổng số electron hóa trị trong phân tử là số lẻ (5 + 6 = 11), nên không thể tuân theo quy tắc bát tử.

**Câu 3.** Số cặp electron liên kết và số cặp electron không liên kết của nguyên tử N trong phân tử NH3 lần lượt là

**A.** 3 và 0. **B.** 4 và 0. **C.** 3 và 1. **D.** 2 và 2.

***Đáp án:*** C, nguyên tử N chỉ sử dụng 3 electron hóa trị để tạo thành 3 liên kết với 3 nguyên tử H xung quanh, còn lại 1 cặp electron riêng.

**Câu 4.** Dạng hình học của phân tử C2H2 là

**A.** Đường thẳng. **B.** Tam giác. **C.** Gấp khúc (chữ V). **D.** Tứ diện.

***Đáp án:*** A, cả 2 nguyên tử C đều có công thức VSEPR dạng AX2E0.

**Câu 5.** Cho các phân tử sau: F2O, CCl4, SO2, BeCl2, H2O, CO2. Hãy cho biết số phân tử có dạng hình học phân tử là đường thẳng.

**A.** 1. **B.** 2. **C.** 3. **D.** 4.

***Đáp án:*** B, gồm BeCl2 và CO2, phân tử có dạng AX2E0.

**Câu 6.** Phát biểu nào sau đây **sai**?

**A.** Phân tử CO2 có dạng hình học phân tử là đường thẳng.

**B.** Phân tử BF3 có dạng hình học phân tử là chóp tam giác.

**C.** Phân tử CH4 có dạng hình học phân tử là tứ diện đều.

**D.** Phân tử SO3 có dạng hình học phân tử là tam giác đều.

***Đáp án:*** B, do phân tử có dạng AX2E0 là dạng đường thẳng.

**Câu 7.** Cho công thức Lewis của phân tử BF3 như sau:



Dựa trên mô hình VSEPR, góc liên kết trong phân tử BF3 là

**A.** 180o. **B.**120o. **C.** 109,5o. **D.** 104,5o.

***Đáp án:*** B, phân tử có dạng AX3, dạng tam giác đều, góc liên kết là 120o.

**Câu 8.** Dãy nào sau đây sắp xếp theo chiều góc liên kết tăng dần?

**A.** BeH2, SO2, CH4, NH3. **B.** H2O, CH4, BF3, CO2.

**C.** SO2, CH4, H2O, CO2. **D.** BF3, BeH2, NH3, CH4.

***Đáp án:*** B, H2O (<109,5o), CH4 (109,5o), BF3 (120o), CO2 (180o).

**Câu 9.** Phân tử nào sau đây không phân cực?

**A.** CF4. **B.** CH3F. **C.** HCl. **D.** SO2.

***Đáp án:*** A, do CF4 có dạng hình học phân tử là tứ diện đều, độ phân cực của các liên kết C–F triệt tiêu lẫn nhau.

**Câu 10.** Cho các phân tử sau : SO3, H2O, NH3, CS2, CO2, BF3. Số phân tử mà nguyên tử trung tâm có trạng thái lai hóa sp3 là

**A.** 1. **B.** 2. **C.** 3. **D.** 4.

***Đáp án:*** B,

SO3 : Phân tử có dạng AX3E0 → m + n = 3 → Lai hóa sp2.

H2O : Phân tử có dạng AX2E2 → m + n = 4 → Lai hóa sp3.

NH3: Phân tử có dạng AX3E1 → m + n = 4 → Lai hóa sp3.

CS2 : Phân tử có dạng AX2E0 → m + n = 2 → Lai hóa sp.

CO2 : Phân tử có dạng AX2E0 → m + n = 2 → Lai hóa sp.

BF3 : Phân tử có dạng AX3E0 → m + n = 3 → Lai hóa sp2.

**Câu 11.** Cặp phân tử nào sau đây đều chứa nguyên tử trung tâm có trạng thái lai hóa sp?

**A.** CS2, CO2. **B.** NH3, H2O.

**C.** BF3, SO2. **D.** PCl3, BeCl2.

***Đáp án:*** A,

CS2 : Phân tử có dạng AX2E0 → m + n = 2 → Lai hóa sp.

CO2 : Phân tử có dạng AX2E0 → m + n = 2 → Lai hóa sp.

**Câu 12.** Trạng thái lai hóa của nguyên tử S trong H2S, SO3, SO42– lần lượt là

**A.** sp3, sp3, sp3. **B.** sp2, sp3, sp3.

**C.** sp, sp2, sp3. **D.** sp3, sp2, sp3.

***Đáp án:*** D,

H2S : Phân tử có dạng AX2E2 → m + n = 4 → Lai hóa sp3.

SO3: Phân tử có dạng AX3E0 → m + n = 3 → Lai hóa sp2.

SO42–: Phân tử có dạng AX4E0 → m + n = 4 → Lai hóa sp3.

**Câu 13.** Phát biểu nào sau đây đúng khi nói về sự hình thành phân tử BF3?

**A.** Trên nguyên tử B, AO–2s tổ hợp với 2AO–2p để tạo 3AO lai hóa sp2 và còn 1AO p không lai hóa.

**B.** Ba AO lai hóa sp2 của B xen phủ với 3AO–p của 3 nguyên tử F tạo thành 3 liên kết σ hướng về 3 đỉnh của một tứ diện đều.

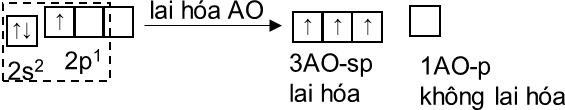
**C.** Phân tử BF3 có dạng hình học là tứ diện đều.

**D.** Góc liên kết trong phân tử BF3 là 180.

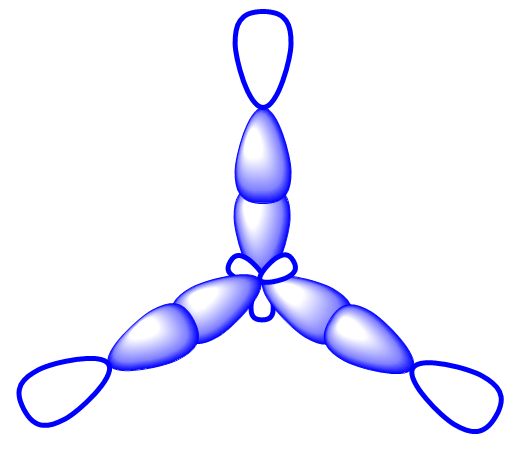
***Đáp án:*** A,

Phân tử BF3: Cấu hình electron của B là 1s22s22p1.

AO-2s tổ hợp với 2AO-2p tạo 3AO lai hóa sp2 và còn 1AO p không lai hóa.



Ba AO lai hóa sp2 của B xen phủ với 3AO-p của 3 nguyên tử F tạo thành 3 liên kết σ hướng về 3 đỉnh của một tam giác đều.



Sự hình thành phân tử BF3

**Câu 14.** Cho các phát biểu sau về sự hình thành phân tử NH3:

(a) Có sự tổ hợp của AO–2s với 3AO–2p để tạo thành 4AO lai hóa sp.

(b) Ba AO lai hóa sp3 của N xen phủ với 3AO–s của 3 nguyên tử H tạo thành 3 liên kết σ.

(c) Trong phân tử có hai electron chưa liên kết nằm trên 2AO lai hóa sp3.

(d) Góc liên kết trong phân tử NH3 nhỏ hơn 109,5 do sự có mặt của cặp electron chưa liên kết.

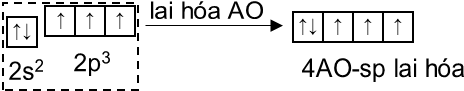
Số phát biểu đúng là

**A.** 1. **B.** 2. **C.** 3. **D.** 4.

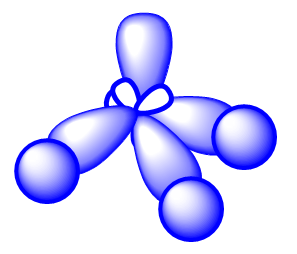
***Đáp án:*** B, ý b và d.

Phân tử NH3: Cấu hình electron của N là 1s22s22p3.

AO-2s tổ hợp với 3AO-2p tạo 4AO lai hóa sp3.



Ba AO lai hóa sp3 của N xen phủ với 3AO-s của 3 nguyên tử H tạo thành 3 liên kết σ hướng về 3 đỉnh của một hình tứ diện, còn lại 1AO lai hóa sp3 chứa một cặp electron chưa liên kết nằm hướng về đỉnh còn lại của hình tứ diện, góc liên kết trong phân tử NH3 bị giảm xuống do sự có mặt của cặp electron này.



Sự hình thành phân tử NH3

**Câu 15.** Phát biểu nào sau đây về phân tử SO3 là đúng?

**A.** Trong phân tử SO3, nguyên tử *S* ở trạng thái lai hóa sp3.

**B.** Phân tử SO3 có dạng hình học là chóp tam giác.

**C.** Góc liên kết O–*S*–O trong phân tử SO3 nhỏ hơn 109,5o.

**D.** Tổng số electron hóa trị trong phân tử SO3 là 24.

***Đáp án:*** D, S và O đều có 6 electron hóa trị => 6 x 4 = 24 electron hóa trị.

**Câu 16.** \*Phát biểu nào sau đây về ion NH4+ là sai?

**A.** Tổng số electron hóa trị trong ion NH4+ là 8.

**B.** Trên nguyên tử N không còn cặp electron không liên kết.

**C.** Trong ion NH4+, nguyên tử N ở trạng thái lai hóa sp3.

**D.** Góc liên kết H–N–H trong ion NH4+ nhỏ hơn 109,5o.

***Đáp án:*** D, do ion NH4+ có dạng hình học là tứ diện đều.

**Câu 17.** Xét hai phân tử NH3 và CH4. Phát biểu nào sau đây sai?

**A.** Trong cả hai phân tử, nguyên tử trung tâm lai hóa sp3

**B.** Góc liên kết trong phân tử NH3 lớn hơn trong CH4.

**C.** Trong các phân tử này chỉ có liên kết đơn.

**D.** Phân tử NH3 phân cực, phân tử CH4 không phân cực.

***Đáp án:*** B, góc liên kết trong NH3 nhỏ hơn CH4 do trên nguyên tử N còn cặp electron không liên kết, làm giảm góc liên kết trong phân tử NH3, nhỏ hơn 109,5o.

**Câu 18.** Phát biểu nào sau đây **sai** khi nói về phân tử H2O?

**A.** Có hai cặp electron chưa liên kết nằm hướng về 2 đỉnh của hình tứ diện.

**B.** Hai AO lai hóa sp3 của O xen phủ với 2AO–s của 2 nguyên tử H tạo thành 2 liên kết σ.

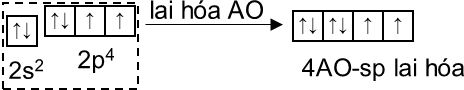
**C.** Góc liên kết trong phân tử H2O lớn hơn 109,5 do còn hai cặp electron chưa liên kết.

**D.** Có sự tổ hợp của AO–2s với 3AO–2p để tạo thành 4AO lai hóa sp3.

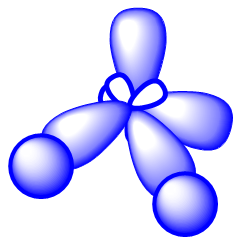
***Đáp án:*** C,

Phân tử H2O: Cấu hình electron của O là 1s22s22p4.

AO-2s tổ hợp với 3AO-2p tạo 4AO lai hóa sp3.



Hai AO lai hóa sp3 của O xen phủ với 2AO-s của 2 nguyên tử H tạo thành 2 liên kết σ hướng về 2 đỉnh của một hình tứ diện, còn lại 2AO lai hóa sp3 chứa hai cặp electron chưa liên kết nằm hướng về 2 đỉnh còn lại của hình tứ diện, góc liên kết trong phân tử H2O bị giảm xuống do sự có mặt của cặp electron này.



Sự hình thành phân tử H2O

**Câu 19.** Cho công thức Lewis của phân tử H2O như sau:



Dựa trên mô hình VSEPR, góc liên kết trong phân tử H2O là

**A.** 180o. **B.** 120o. **C.** 109,5o. **D.** 104,5o.

**Câu 20.** Phân tử X có công thức là AB3. Phân tử có dạng hình học là chóp tam giác. Số cặp electron hóa trị riêng của nguyên tử trung tâm là

**A.** 0. **B.** 1. **C.** 2. **D.** 3.

***Đáp án:*** B, phân tử dạng chóp tam giác đều thì công thức VSEPR tương ứng là AX3E1, nên có 1 cặp electron hóa trị riêng.