

BÀI TẬP HÓA HỌC VÔ CƠ ĐẠI CƯƠNG



Phần 1: CẤU TẠO NGUYÊN TỬ

BÀI TẬP PHÂN RÃ PHÓNG XẠ - PHẢN ỨNG HẠT NHÂN

Câu 1: Chất phóng xạ ^{210}Po có chu kỳ bán rã $T = 138$ ngày. Tính khối lượng Po có độ phóng xạ là 1 Ci (**ĐS:** 0,222 mg)

Câu 2: Tính tuổi của một pho tượng cổ bằng gỗ biết rằng độ phóng xạ β^- của nó bằng 0,77 lần độ phóng xạ của một khúc gỗ cùng khối lượng vừa mới chặt. Biết $T_{C^{14}} = 5600$ năm. (**ĐS:** 2100 năm)

Câu 3: Xét phản ứng hạt nhân xảy ra khi bắn các hạt α vào bia Al: $^{27}_{13}\text{Al} + \alpha \rightarrow ^{30}_{15}\text{P} + n$. Cho biết: $m_{\text{Al}} = 26,974\text{u}$; $m_{\text{P}} = 29,970\text{u}$; $m_{\alpha} = 4,0015\text{u}$; $m_n = 1,0087\text{u}$; $m_p = 1,0073\text{u}$. Hãy tính năng lượng tối thiểu của hạt α cần thiết để phản ứng xảy ra. (**ĐS:** 3MeV)

Câu 4: Một mẫu poloni nguyên chất có khối lượng 2 (g), các hạt nhân Poloni ($^{210}_{84}\text{Po}$) phóng xạ phát ra hạt α và chuyển thành một hạt nhân ^A_ZX bền.

- Viết phương trình phản ứng và gọi tên ^A_ZX .
- Xác định chu kỳ bán rã của poloni phóng xạ biết trong 365 ngày nó tạo ra thể tích $V = 179 \text{ cm}^3$ khí He (đktc)
- Tìm tuổi của mẫu chất trên biết rằng tại thời điểm khảo sát tỉ số giữa khối lượng ^A_ZX và khối lượng chất đó là 2:1. (**ĐS:** a. $^{207}_{82}\text{Pb}$ Chì b. 138 ngày)

BÀI TẬP HOÁ LƯỢNG TỬ - MOMEN LƯỢNG CỰC – NĂNG LƯỢNG LIÊN KẾT

Câu 1: Thực nghiệm xác định được momen lưỡng cực của phân tử H_2O là 1,85D, góc liên kết $\angle \text{HOH}$ là $104,5^\circ$, độ dài liên kết O–H là 0,0957 nm. Tính độ ion của liên kết O–H trong phân tử oxy (bỏ qua momen tạo ra do các cặp electron hóa trị không tham gia liên kết của oxy). $1\text{D} = 3,33.10^{-30} \text{ C.m}$. Điện tích của electron là $-1,6.10^{-19}\text{C}$; $1\text{nm} = 10^{-9}\text{m}$.

Hướng dẫn giải:

Giả thiết độ ion của liên kết O – H là 100%

ta có:
$$\mu = \frac{0,0957.10^{-9}.1,6.10^{-19}}{3,33.10^{-30}} = 4,600\text{D} \Rightarrow \text{độ ion của liên kết O – H là } 32,8\%$$

Câu 2: Ánh sáng nhìn thấy có phân hủy được $\text{Br}_2(\text{k})$ thành các nguyên tử không. Biết rằng năng lượng phá vỡ liên kết giữa hai nguyên tử là 190kJ.mol^{-1} . Tại sao hơi Br_2 có màu? Biết $h = 6,63.10^{-34} \text{ J.s}$; $c = 3.10^8 \text{ m.s}^{-1}$; $N_A = 6,022.10^{23} \text{ mol}^{-1}$.

Hướng dẫn giải

$$E = h \frac{c}{\lambda} . N_A \Rightarrow \lambda = 6,3.10^{-7} \text{ m}$$

Do λ nằm trong vùng các tia sáng nhìn thấy nên phân hủy được và có màu.

Câu 3: Biết $E_n = -13,6 \times \frac{Z^2}{n^2}$ (eV) (n: số lượng tử chính, Z: số đơn vị điện tích hạt nhân).

- Tính năng lượng 1e trong trường lực một hạt nhân của mỗi hệ N^{6+} , C^{5+} , O^{7+} .
- Qui luật liên hệ giữa E_n với Z tính được ở trên phản ánh mối liên hệ nào giữa hạt nhân với electron trong các hệ đó ?

Hướng dẫn giải

a. Theo đầu bài, n phải bằng 1 nên ta tính E_1 . Do đó công thức là $E_1 = -13,6 Z^2$ (ev) (2°)

Thứ tự theo trị số Z: $Z = 6 \rightarrow \text{C}^{5+}$: $(E_1) \text{C}^{5+} = -13,6 \times 6^2 = -489,6 \text{ eV}$

$Z = 7 \rightarrow \text{N}^{6+}$: $(E_1) \text{N}^{6+} = -13,6 \times 7^2 = -666,4 \text{ eV}$

$Z = 8 \rightarrow \text{O}^{7+}$: $(E_1) \text{O}^{7+} = -13,6 \times 8^2 = -870,4 \text{ eV}$



b. Quy luật liên hệ E_1 với Z : Z càng tăng E_1 càng âm (càng thấp). Qui luật này phản ánh tác dụng lực hút hạt nhân tới e được xét: Z càng lớn lực hút càng mạnh \rightarrow năng lượng càng thấp \rightarrow hệ càng bền, bền nhất là O^{7+} .

Câu 4: Việc giải phương trình Schrodinger cho hệ nguyên tử 1electron phù hợp tốt với lý thuyết cổ điển của Bohr về sự lượng tử hóa năng lượng. $E_n = -13,6 \times \frac{Z^2}{n^2}$ (eV). Để cho tiện sử dụng thì các giá trị số của các hằng số xuất hiện trong công thức trên được chuyển hết về đơn vị eV. Điều thú vị là khi ta sử dụng công thức trên cho phân tử heli trung hòa. Trong nguyên tử heli lực hạt nhân tác dụng lên electron bị giảm bớt do electron khác chắn mất. Điều này có nghĩa là điện tích của hạt nhân tác dụng lên electron không phải là $Z = 2$ nữa mà sẽ nhỏ hơn gọi là điện tích hiệu dụng (Z_{eff}). Năng lượng ion hóa của nguyên tử heli ở trạng thái cơ bản là 24,46eV. Tính Z_{eff} .

Hướng dẫn giải

Mỗi electron ở lớp $n = 1$ của nguyên tử heli có năng lượng $-Z_{\text{eff}}^2 = 13,6\text{eV}$

Mức năng lượng thấp nhất của heli $-Z_{\text{eff}}^2 = 27,2\text{eV}$

Ở trạng thái cơ bản ion He^+ có năng lượng $= -4.13,6 = -54,4\text{eV}$

Năng lượng ion hoá $= (-54,4 + Z_{\text{eff}}^2. 27,2) = 24,46 \Rightarrow Z_{\text{eff}} = 1,70$

Câu 5: Bằng phương pháp quang phổ vi sóng người ta xác định phân tử SO_2 ở trạng thái hơi có: $\mu_{\text{SO}_2} = 1,6\text{D}$

$d_{\text{S-O}} = 1,432 \text{ \AA}$; $\angle \text{SO} = 109^\circ 5'$.

- a. Tính điện tích hiệu dụng của nguyên tử O và nguyên tử S trong phân tử SO_2
- b. Tính độ ion của liên kết S-O

Hướng dẫn giải

a. Đối với phân tử SO_2 có thể xem trung tâm điện tích dương trùng với hạt nhân nguyên tử S còn trung tâm điện tích âm sẽ nằm ở điểm giữa đoạn thẳng nối hai hạt nhân nguyên tử O. Như vậy momen lưỡng cực của phân tử SO_2 : $\mu_{\text{SO}_2} = \ell \times 2\delta$. Trong đó ℓ là khoảng cách giữa hai trung tâm điện tích và được tính như sau:

$\ell = 1,432 \times \cos 59^\circ 45' = 0,722 \text{ \AA}$. Theo dữ kiện đã cho: $\mu_{\text{SO}_2} = 1,6\text{D}$ nên từ đây rút ra:

$$\delta = \frac{1,6 \times 10^{-18}}{2 \times 0,722 \times 10^{-8} \times 4,8 \times 10^{-10}} = 0,23$$

Vậy điện tích hiệu dụng của nguyên tử O là -0,23 còn điện tích hiệu dụng của nguyên tử S là +0,46 điện tích tuyệt đối của electron

b. Mặt khác nếu xem liên kết S-O hoàn toàn là liên kết ion thì momen lưỡng cực của phân tử là:

$$\mu_{\text{SO}_2} = 0,722 \times 10^{-8} \times 2 \times 4,8 \times 10^{-10} = 6,93\text{D}$$

Vậy độ ion x của liên kết S-O bằng: $x = \frac{1,6}{6,93} \times 100\% = 23\%$

Câu 6: Tính năng lượng liên kết ion $E_{\text{Na-F}}$ của hợp chất ion NaF. Biết các trị số (kJ/mol): $I_{\text{Na}} = 498,5$;

$F_{\text{F}} = -328$; khoảng cách $r_0 = 1,84 \text{ \AA}$, $n_{\text{NaF}} = 7$ là hệ số đầy Born, $\epsilon_0 = 8,854.10^{-12}$ là hằng số điện môi trong chân không. $E_{\text{Na-F}}$ được tính theo công thức: $E_{\text{A-B}} = \frac{N_A \cdot e^2}{4\pi \cdot \epsilon_0 \cdot r_0} \left(1 - \frac{1}{n}\right) - I_{\text{A}} - F_{\text{B}}$. (**ĐS:** $E_{\text{Na-F}} = 497,2$)

Phần 2: SỰ BIẾN THIÊN TUẦN HOÀN CỦA MỘT SỐ TÍNH CHẤT THEO CHIỀU TĂNG DÀN ĐIỆN TÍCH HẠT NHÂN

Câu 1: Tính năng lượng mạng lưới của LiF dựa vào các số liệu cho bởi bảng sau:

Năng lượng (kJ/mol)	Năng lượng (kJ/mol)
Ái lực electron của $F_{(k)}$: $A_{\text{F}} = -333,000$	Liên kết F-F: $E_{\text{lk}} = 151,000$
Ion hoá thứ nhất của $Li_{(k)}$: $I_1 = 521,000$	Sinh nhiệt của LiF (tinh thể) = $-612,300$
Entanpi nguyên tử hoá $Li_{(tinh\ thể)} = 155,200$	$U_{\text{mạng lưới}} = ?$

ĐS: $U_{\text{ml}} = 1031 \text{ kJ.mol}^{-1}$



Câu 2: Năng lượng ion hóa thứ nhất của các nguyên tố chu kì 2 như sau

Nguyên tố	Li	Be	B	C	N	O	F	Ne
I_1 (kJ/mol)	521	899	801	1087	1402	1313	1681	2081

- a. Hãy cho biết vì sao khi đi từ Li đến Ne, năng lượng ion hóa thứ nhất của các nguyên tố nhìn chung tăng dần nhưng từ: Be sang B ; từ N sang O thì năng lượng ion hoá thứ nhất lại giảm dần
 b. Tính điện tích hạt nhân hiệu dụng Z' đối với một electron hóa trị có năng lượng lớn nhất trong các nguyên tố trên và giải thích chiều biến thiên giá trị Z' trong chu kì. Biết rằng: $13,6\text{eV} = 1312\text{kJ/mol}$;

$$I_1 = 13,6 \frac{Z'^2}{n^2} (\text{eV})$$

ĐS: 1,26 ; 1,66 ; 1,56 ; 1,82 ; 2,07 ; 2,00 ; 2,26 ; 2,52

Câu 3: Năng lượng liên kết đơn giản giữa hai nguyên tử A và B là E_{AB} lớn hơn giá trị trung bình cộng các năng lượng liên kết đơn E_{AA} ; E_{BB} là Δ_{AB} : $E_{AB} = \frac{1}{2}(E_{AA} + E_{BB}) + \Delta_{AB}$. Giá trị Δ_{AB} (kJ/mol) đặc trưng cho phần đặc tính ion của liên kết AB liên quan đến sự khác nhau về độ âm điện giữa A và B, tức là hiệu số $|\chi_A - \chi_B|$. Theo Pauling: $|\chi_A - \chi_B| = 0,1\sqrt{\Delta_{AB}}$. Để thu được giá trị độ âm điện của nguyên tử các nguyên tố khác nhau, Pauling gán giá trị độ âm điện của hydro là 2,2

- a. Tính độ âm điện của Flo và Clo dựa vào các số liệu năng lượng liên kết:

HF	HCl	F ₂	Cl ₂	H ₂
565	431	151	239	432

- b. Tính năng lượng liên kết E_{Cl-F}

Hướng dẫn giải

a. $\chi_F - 2,2 = 0,1\sqrt{565 - \frac{1}{2}(151 + 432)} \Rightarrow \chi_F = 3,85$

Cách tính tương tự: $\chi_{Cl} = 3,18$

b. $3,85 - 3,18 = 0,1\sqrt{x - \frac{1}{2}(151 + 239)} \Rightarrow x = E_{Cl-F} = 240\text{kJ.mol}^{-1}$



Câu 4: Dựa vào phương pháp gần đúng Slater, tính năng lượng ion hóa thứ nhất I_1 cho He ($Z = 2$).

Hướng dẫn giải:

He có cấu hình $1s^2$, $E_{He}^* = 2 \left(-\frac{13,6(Z^*)^2}{n^{*2}} \right) = 2 \left[-\frac{13,6(2-0,3)^2}{1^2} \right] = -78,6\text{eV}$

He^+ có cấu hình $1s^1$, $E_{He^+}^* = -\frac{13,6Z^2}{n^2} = -\frac{13,6 \times 2^2}{1^2} = -54,4\text{eV}$

Quá trình ion hoá: $He \rightarrow He^+ + 1e \Rightarrow I_1 = E_{He^+}^* - E_{He}^* = (-54,4) - (-78,6) = 24,2\text{eV}$

Phần 3: CẤU TRÚC MẠNG TINH THỂ

Caâu 1: Tinh thể NaCl có cấu trúc lập phương tâm diện. Tính bán kính của ion Na^+ và khối lượng riêng của tinh thể NaCl biết cạnh của ô mạng cơ sở $a = 5,58 \text{ \AA}$; bán kính ion $r_{Cl^-} = 1,810 \text{ \AA}$; khối lượng mol của Na và Cl lần lượt là: $22,99 \text{ g.mol}^{-1}$ và $35,45 \text{ g.mol}^{-1}$ (**ĐS:** $r_+ = 0,98 \text{ \AA}$; $d = 2,23 \text{ g/cm}^3$)

Caâu 2: Tinh thể Fe- α có cấu trúc tinh thể lập phương tâm khối và cạnh a của ô mạng cơ sở là $a = 2,860 \text{ \AA}$ còn Fe- γ kết tinh dạng lập phương tâm diện với $a = 3,560 \text{ \AA}$. Tính bán kính kim loại và khối lượng riêng của sắt thuộc hai loại cấu trúc trên biết Fe = $55,800 \text{ g/mol}$

ĐS: Fe- α : $r = 1,24 \text{ \AA}$; $d = 7,92 \text{ g/cm}^3$; Fe- γ : $r = 1,26 \text{ \AA}$; $d = 8,21 \text{ g/cm}^3$

Câu 3: Tinh thể MgO có cấu trúc kiểu NaCl với cạnh của ô mạng cơ sở: $d = 4,100 \text{ \AA}$. Tính năng lượng mạng lưới của MgO theo phương pháp Born-Landré và phương pháp Kapustinxki biết rằng số Madelung của mạng lưới MgO: $a = 1,7475$; $e = 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ C}$; $\epsilon_0 = 8,85 \cdot 10^{-12}$; $N_A = 6,023 \cdot 10^{23}$; $n_B = 7$

Theo Born-Landré: $U = \frac{Z_+ Z_- e^2 a N_A}{4\pi\epsilon_0 R} \left(1 - \frac{1}{n_B}\right)$ với $R = r_+ + r_-$.

Theo Kapustinxki: $U = 1,08 \cdot 10^{-7} \frac{Z_+ Z_- \sum n}{R}$

Hướng dẫn giải

Thay số vào hai phương trình trên ta suy ra:

Theo Born-Landré: $U = 4062 \text{ kJ/mol}$; theo Kapustinxki: $U = 4215 \text{ kJ/mol}$

Câu 4: Sắt kim loại nóng chảy ở 1811K. Giữa nhiệt độ phòng và điểm nóng chảy của nó, sắt kim loại có thể tồn tại ở các dạng thù hình và các dạng tinh thể khác nhau. Từ nhiệt độ phòng đến 1185K, sắt có cấu tạo tinh thể dạng lập phương tâm khối (bcc) quen gọi là sắt- α . Từ 1185K đến 1667K sắt kim loại có cấu tạo mạng lập phương tâm diện (fcc) và được gọi là sắt- γ . Trên 1667K và cho tới điểm nóng chảy sắt chuyển về dạng cấu tạo lập phương tâm khối (bcc) tương tự sắt- α . Cấu trúc sau cùng (pha cuối) còn được gọi là sắt- α'

1. Cho biết khối lượng riêng của sắt kim loại nguyên chất là $7,874 \text{ g.cm}^{-3}$ ở 293K,

a. Tính bán kính nguyên tử của sắt (cm).

b. Ước lượng khối lượng riêng của sắt (tính theo g.cm^{-3}) ở 1250K

Chú ý: Bỏ qua các ảnh hưởng không đáng kể do sự giãn nở nhiệt của kim loại.

Thép là hợp kim của sắt và cacbon, trong đó một số khoảng trống giữa nguyên tử sắt (các hốc) trong mạng tinh thể bị chiếm bởi các nguyên tử nhỏ là cacbon. Hàm lượng cacbon trong hợp kim này thường trong khoảng 0,1% đến 4%. Trong lò cao, sự nóng chảy của sắt càng dễ dàng khi thép chứa 4,3% theo khối lượng. Nếu hỗn hợp này được làm lạnh quá nhanh (đột ngột) thì các nguyên tử cacbon được phân tán trong mạng sắt- α . Chất rắn mới này được gọi là martensite - rất cứng và giòn. Dù hơi bị biến dạng, cấu tạo tinh thể của chất rắn này là giống như cấu tạo tinh thể của sắt- α (bcc).

2. Giả thiết rằng các nguyên tử cacbon được phân bố đều trong cấu trúc của sắt.

a. Ước tính hàm lượng nguyên tử cacbon trong một tế bào đơn vị (ô mạng cơ sở) của sắt- α trong martensite chứa 4,3%C theo khối lượng.

b. Ước tính khối lượng riêng (g.cm^{-3}) của vật liệu này.

Khối lượng mol nguyên tử và các hằng số:

$M_{\text{Fe}} = 55,847 \text{ g.mol}^{-1}$; $M_{\text{C}} = 12,011 \text{ g.mol}^{-1}$; $N_A = 6,02214 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$.

Hướng dẫn giải

1. Các bước tính toán:

1. Định nghĩa các tham số của chiều dài (a, b, c, d_1 , d_2 và r) và thể tích (V_1 và V_2) cho cả hai cấu tạo bcc và fcc của sắt.

2. Tính thể tích V_1 của ô mạng đơn vị của sắt - α nhờ khối lượng riêng của nó (ρ_{bcc}) ở 293K, khối lượng mol nguyên tử của sắt (M_{Fe}), và số Avogadro N_A .

3. Tính chiều dài d_1 cạnh của ô mạng đơn vị bcc từ thể tích của nó.

4. Tính bán kính nguyên tử r của sắt từ chiều dài d_1 .

5. Tính chiều dài d_2 của cạnh ô mạng đơn vị fcc (ở 1250K) từ bán kính nguyên tử r của sắt.

6. Tính thể tích V_2 của ô mạng đơn vị fcc của sắt - γ từ chiều dài d_2 của cạnh.

7. Tính khối lượng m của số nguyên tử sắt trong một ô mạng đơn vị của sắt - γ từ khối lượng mol nguyên tử M_{Fe} của sắt và số Avogadro N_A .

8. Tính khối lượng riêng (ρ_{fcc}) của sắt - γ từ các giá trị của m và V_2 . Một hướng khác để tìm khối lượng riêng ρ_{fcc} của sắt - γ là tính tỉ lệ phần trăm khoảng không gian chiếm chỗ trong cả hai loại ô mạng đơn vị bcc và fcc,

có thể thay thế các bước từ 5 đến 8 bằng các bước từ 5' đến 8' sau đây:

5'. Tính tỉ lệ phần trăm khoảng không gian chiếm chỗ của ô mạng đơn vị bcc.

6'. Tính tỉ lệ phần trăm khoảng không gian chiếm chỗ của ô mạng đơn vị fcc.

7'. Từ tỉ lệ fcc/bcc ta suy ra được tỉ lệ: ρ_{bcc}/ρ_{fcc} .

8'. Từ giá trị cho trước ở bước 7' ta tính được ρ_{fcc} .

2. Các chi tiết:

1. Ở 293K sắt - α có cấu trúc tinh thể bcc. Mỗi ô mạng đơn vị thực sự chứa hai nguyên tử, trong đó một nguyên tử ở tâm của ô mạng. Ở 1250K, sắt - γ có cấu tạo tinh thể fcc. Mỗi ô mạng đơn vị thực sự chứa 4 nguyên tử và ở tâm của mỗi mặt có một nửa nguyên tử.

- r: bán kính nguyên tử của sắt
- a: chiều dài đường chéo một mặt của ô mạng đơn vị bcc.
- b: chiều dài đường chéo qua tâm của ô mạng đơn vị bcc.
- c: chiều dài đường chéo một mặt của ô mạng đơn vị fcc.
- d_1 : chiều dài cạnh của ô mạng đơn vị bcc của sắt - α .
- d_2 : chiều dài cạnh của ô mạng đơn vị bcc của sắt - γ .
- V_1 : Thể tích của ô mạng đơn vị bcc của sắt - α .
- V_2 : Thể tích của ô mạng đơn vị bcc của sắt - γ .
- V_a : thể tích chiếm bởi một nguyên tử.
- V_{a1} : Thể tích chiếm bởi hai nguyên tử trong một ô mạng đơn vị bcc.
- V_{a2} : Thể tích chiếm bởi bốn nguyên tử trong một ô mạng đơn vị fcc.
- R_1 : Tỉ lệ phần trăm khoảng không gian chiếm chỗ trong một ô mạng đơn vị bcc.
- R_2 : Tỉ lệ phần trăm khoảng không gian chiếm chỗ trong một ô mạng đơn vị fcc.

$$V_a = \frac{4}{3}\pi r^3 ; V_{a1} = 2V_a ; V_{a2} = 4V_a ; b = 4r ; a^2 = 2d_1 ;$$

$$b^2 = d_1^2 + a^2 = 3d_1^2 \Rightarrow d_1 = \sqrt{\frac{16r^2}{3}} \Rightarrow V_1 = d_1^3 = \left(\sqrt{\frac{16r^2}{3}}\right)^3$$

$$c = 4r ; c^2 = 2d_2^2 \Rightarrow d_2 = \sqrt{\frac{16r^2}{2}} \Rightarrow V_2 = d_2^3 = \left(\sqrt{\frac{16r^2}{2}}\right)^3$$

2. $1,000\text{cm}^3$ sắt có khối lượng 7,874g ở 293K (ρ_{bcc}).

1 mol sắt có khối lượng 55,847g (M_{Fe}).

Vậy 0,1410mol của sắt chiếm trong thể tích $1,000\text{cm}^3$ hoặc 1mol sắt sẽ chiếm thể tích $7,093\text{cm}^3$.

1 mol tương ứng chiếm $6,02214 \cdot 10^{23}$ nguyên tử.

$$V_1 = \frac{7,093 \cdot 2}{6,02214 \cdot 10^{23}} = 2,356 \cdot 10^{-23} \text{cm}^3 \text{ mỗi đơn vị ô mạng.}$$

1. $d_1 = V_1^{1/3} = 2,867 \cdot 10^{-8} \text{cm}$.

2. Với cấu tạo bcc, giá trị của d_1 có thể được biểu thị là: $d_1 = (16r^2/3)^{1/2}$. Vậy giá trị của r sẽ là:
 $r = (3d_1^2/16)^{1/2} = 1,241 \cdot 10^{-8} \text{cm}$.

3. Ở 1250K, trong cấu tạo fcc, $d_2 = (16r^2/2)^{1/2} = 3,511 \cdot 10^{-8} \text{cm}$.

4. $V_2 = d_2^3 = 4,327 \cdot 10^{-23} \text{cm}^3$.

5. Khối lượng m của 4 nguyên tử sắt trong ô mạng đơn vị fcc sẽ là:

$$m = 55,847 \cdot 4 / (6,02214 \cdot 10^{23}) = 3,709 \cdot 10^{-22} \text{g}$$

6. $\rho_{fcc} = m/V_2 = 8,572 \text{g/cm}^3$.

Cách giải khác để tìm khối lượng riêng ρ_{fcc} của sắt - γ :

$$5'. R_1 = [(V_{a1})/V_1] \cdot 100\% = 68,02\%$$

$$6'. R_2 = [(V_{a2})/V_2] \cdot 100\% = 74,05\%$$

$$7'. \rho_{bcc}/\rho_{fcc} = 74,05/68,02 = 1,089$$

$$8'. \rho_{fcc} = 8,572 \text{g/cm}^3$$

3. Các bước tính toán:

1. Từ phần trăm cấu thành của martensite (theo khối lượng), tính số mol tương ứng của cacbon và sắt.

- Đưa tỉ lệ mol C/Fe về một ô mạng đơn vị (Ghi chú: Hai nguyên tử Fe trong mỗi ô mạng đơn vị).
- Tìm số nguyên bé nhất các nguyên tử C trong số nguyên bé nhất của ô mạng đơn vị (không bắt buộc).
- Tính khối lượng sắt trong một ô mạng đơn vị
- Tính khối lượng cacbon trong một ô mạng đơn vị
- Tính tổng khối lượng sắt và cacbon trong một ô mạng đơn vị
- Tính khối lượng riêng của martensite [$\rho_{\text{(martensite có 4,3\%C)}}$] từ tổng khối lượng của C và Fe và thể tích V_1 của ô mạng đơn vị sắt - α cấu tạo bcc.

4. Chi tiết:

- Trong 100,0g martensite có 4,3%C $\Rightarrow n_C = 0,36\text{mol}$ và $n_{Fe} = 1,71\text{mol}$.
 Vậy cứ 1 nguyên tử cacbon có 4,8 nguyên tử sắt hay 0,21 nguyên tử cacbon cho mỗi nguyên tử sắt.
- Martensite có cấu tạo tinh thể bcc (2 nguyên tử sắt cho mỗi ô mạng đơn vị). Như vậy số nguyên tử cacbon trong mỗi ô mạng đơn vị là: $2 \cdot (1/4,8) = 0,42$ nguyên tử.
- 5 nguyên tử C [(0,42 nguyên tử C/0,42).5] trong 12 ô mạng đơn vị [1 ô mạng đơn vị/0,42).5]
- Số gam Fe trong mỗi ô mạng đơn vị là: $55,847 \cdot 2 / (6,02214 \cdot 10^{23}) = 1,8547 \cdot 10^{-22} \text{g}$
- Số gam C trong mỗi ô mạng đơn vị là: $12,011 / (6,02214 \cdot 10^{23}) = 1,9945 \cdot 10^{-23} \text{g}$
- Tổng khối lượng C và Fe = $1,8547 \cdot 10^{-22} + 0,42 \cdot 1,9945 \cdot 10^{-23} = 1,938 \cdot 10^{-22} \text{g}$.
- Mỗi ô mạng đơn vị của sắt - α chiếm thể tích $V_1 = 2,356 \cdot 10^{-23} \text{cm}^3$.
- $\rho_{\text{(martensite có 4,3\%C)}} = 1,938 \cdot 10^{-22} / (2,356 \cdot 10^{-23}) = 8,228 \text{g.cm}^{-3}$.

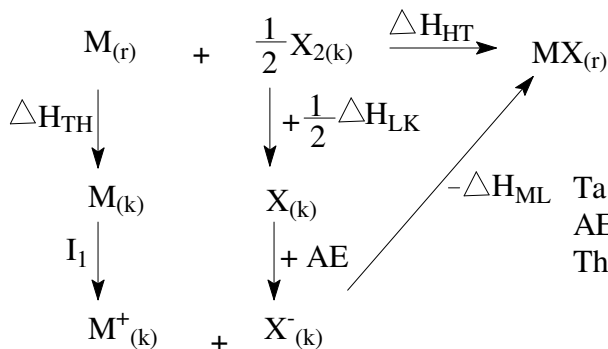
Câu 5: Cho các dữ kiện sau:

Năng lượng	KJ.mol ⁻¹	Năng lượng	KJ.mol ⁻¹
Thăng hoa Na	108,68	Liên kết của Cl ₂	242,60
Ion hóa thứ nhất của Na	495,80	Mạng lưới của NaF	922,88
Liên kết của F ₂	155,00	Mạng lưới của NaCl	767,00

Nhiệt hình thành của NaF_(rắn) là -573,60 KJ.mol⁻¹; nhiệt hình thành của NaCl_(rắn) là -401,28 KJ.mol⁻¹
 Tính ái lực electron của F và Cl. So sánh kết quả và giải thích.

Hướng dẫn giải:

Áp dụng định luật Hess vào chu trình



Ta được:
 $AE = \Delta H_{HT} - \Delta H_{TH} - I_1 - \frac{1}{2} \Delta H_{LK} + \Delta H_{ML} (*)$
 Thay số vào (*), $AE (F) = -332,70 \text{kJ.mol}^{-1}$ và
 $AE (Cl) = -360 \text{kJ.mol}^{-1}$.

$AE (F) > AE (Cl)$ dù cho F có độ âm điện lớn hơn Cl nhiều. Có thể giải thích điều này như sau:

- Phân tử F₂ ít bền hơn phân tử Cl₂, do đó $\Delta H_{LK} (F_2) < \Delta H_{LK} (Cl_2)$ và dẫn đến $AE (F) > AE (Cl)$.
- Cũng có thể giải thích: F và Cl là hai nguyên tố liền nhau trong nhóm VIIA. F ở đầu nhóm. Nguyên tử F có bán kính nhỏ bất thường và cản trở sự xâm nhập của electron.

Phần 4: NHIỆT – ĐỘNG HÓA HỌC

BÀI TẬP NHIỆT HÓA HỌC

Câu 1: Tính năng lượng liên kết trung bình của liên kết O–H và O–O trong phân tử H₂O₂ dựa vào các số liệu (kJ/mol) sau: $\Delta H^{\circ}_{(H_2O,k)} = -241,8$; $\Delta H^{\circ}_{(H,k)} = 218$; $\Delta H^{\circ}_{(O,k)} = 249,2$; $\Delta H^{\circ}_{(H_2O_2,k)} = -136,3$

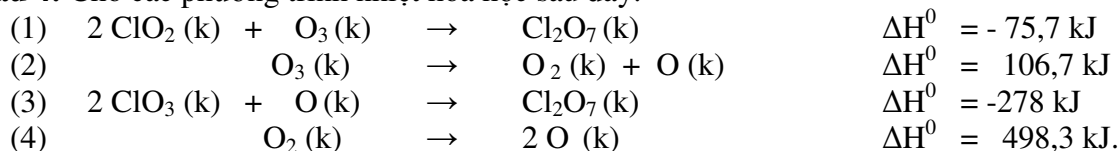
Câu 2: Tính ΔH° của phản ứng sau ở 423K: $H_{2(k)} + \frac{1}{2} O_{2(k)} \square H_2O_{(h)}$



Biết rằng: $\Delta H_{\text{H}_2\text{O(lông)}}^0 = -285,200(\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1})$; nhiệt hóa hơi của nước lỏng: $\Delta H_{373}^0 = 37,5(\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1})$ và nhiệt dung mol C_p^0 ($\text{J}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1}$) của các chất như sau:

H_2 (k)	O_2 (k)	H_2O (h)	H_2O (l)
$27,3 + 3,3\cdot 10^{-3}T$	$29,9 + 4,2\cdot 10^{-3}T$	$30 + 1,07\cdot 10^{-2}T$	75,5

Câu 4: Cho các phương trình nhiệt hóa học sau đây:



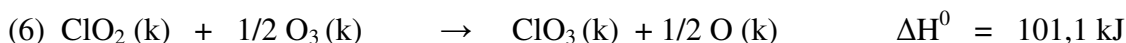
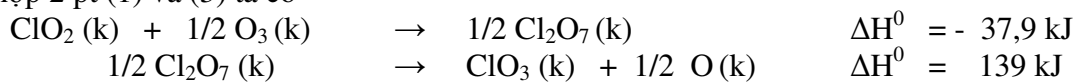
k: kí hiệu chất khí.

Hãy xác định nhiệt của phản ứng sau:

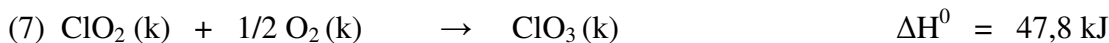
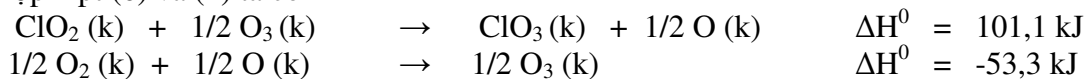


Hướng dẫn giải

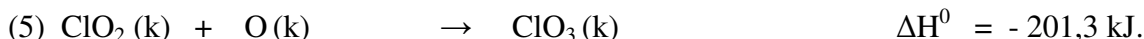
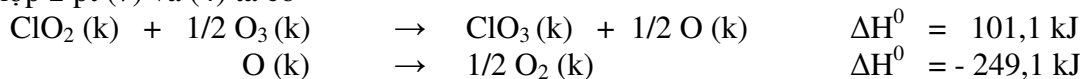
Kết hợp 2 pt (1) và (3) ta có



Kết hợp 2 pt (6) và (2) ta có

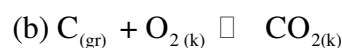
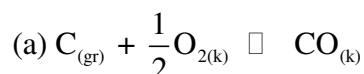


Kết hợp 2 pt (7) và (4) ta có



Đó là pt nhiệt hóa (5) ta cần tìm.

Câu 5: Cho hai phản ứng giữa graphit và oxi:



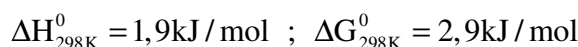
Các đại lượng ΔH^0 , ΔS^0 (phụ thuộc nhiệt độ) của mỗi phản ứng như sau:

	ΔH_T^0 (J/mol)	ΔS_T^0 (J/K.mol)
(a)	$-112298,8 + 5,94T$	$-393740,1 + 0,77T$
(b)	$54,0 + 6,21 \ln T$	$1,54 - 0,77 \ln T$

Hãy lập các hàm năng lượng tự do Gibbs theo nhiệt độ $\Delta G_T^0(a) = f(T)$, $\Delta G_T^0(b) = f(T)$ và cho biết khi tăng nhiệt độ thì chúng biến đổi như thế nào?

Câu 6: Trong một thí nghiệm người ta cho bột NiO và khí CO vào một bình kín, đun nóng bình lên đến 1400°C . Sau khi đạt tới cân bằng, trong bình có bốn chất là NiO (r), Ni (r), CO (k) và CO_2 (k) trong đó CO chiếm 1%, CO_2 chiếm 99% thể tích; áp suất khí bằng 1bar (10^5 Pa). Dựa vào kết quả thí nghiệm và các dữ kiện nhiệt động đã cho ở trên, hãy tính áp suất khí O_2 tồn tại cân bằng với hỗn hợp NiO và Ni ở 1400°C .

Câu 7: Cân bằng giữa C_{gr} với C_{kc} được đặc trưng bởi những số liệu sau: $C_{\text{gr}} \rightleftharpoons C_{\text{kc}}$



- a. Tại 298K, loại thù hình nào bền hơn
 b. Khối lượng riêng của C_{gr} và C_{kc} lần lượt là: 2,265 và 3,514 g/cm³. Tính hiệu số $\Delta H - \Delta U$ của quá trình chuyển hóa trên tại áp suất $P = 5.10^{10}$ Pa (ĐS: a. C_{gr} ; b. -94155 J/mol)

BÀI TẬP ĐỘNG HÓA HỌC – CÂN BẰNG HÓA HỌC

Câu 1: Đối với phản ứng : $A \xrightleftharpoons[k_2]{k_1} B$. Các hằng số tốc độ $k_1 = 300$ giây⁻¹ ; $k_2 = 100$ giây⁻¹ . Ở thời điểm $t = 0$ chỉ có chất A và không có chất B. Hỏi trong bao lâu thì một nửa lượng ban đầu chất A biến thành chất B. (ĐS: $2,7.10^{-3}$ s)

Câu 2: Ngay ở nhiệt độ thường giữa NO_2 và N_2O_4 đã tồn tại cân bằng sau: $2NO_{2(k)} \rightleftharpoons N_{2O_{4(k)}}$. Ở 24°C, hằng số cân bằng của phản ứng trên là $K_p = 9,200$. Tại nhiệt độ này, cân bằng sẽ dịch theo chiều nào nếu áp suất riêng phần của các chất khí như sau

- a. $P_{N_2O_4} = 0,900$ atm; $P_{NO_2} = 0,100$ atm
 b. $P_{N_2O_4} = 0,7202$ atm; $P_{NO_2} = 0,27979$ atm
 c. $P_{N_2O_4} = 0,100$ atm; $P_{NO_2} = 0,900$ atm

Câu 3: Xét phản ứng: $I^- + ClO^- \rightleftharpoons IO^- + Cl^-$. Thục nghiệm xác định vận tốc của phản ứng này xác định bởi biểu thức: $v = k \times \frac{[I^-][ClO^-]}{[OH^-]}$. Chứng minh cơ chế sau giải thích được thực nghiệm

- (1) $H_2O + ClO^- \xrightleftharpoons{K_1} OH^- + HClO$ (nhanh)
 (2) $HClO + I^- \xrightarrow{K_2} HIO + Cl^-$ (chậm)
 (3) $HIO + OH^- \xrightleftharpoons{K_3} H_2O + IO^-$ (nhanh)

Câu 4: Đối với phản ứng thuận nghịch pha khí $2 SO_2 + O_2 \rightleftharpoons 2 SO_3$

- a. Người ta cho vào bình kín thể tích không đổi 3,0 lít một hỗn hợp gồm 0,20 mol SO_3 và 0,15 mol SO_2 . Cân bằng hóa học (cbhh) được thiết lập tại 25°C và áp suất chung của hệ là 3,20 atm. Hãy tính tỉ lệ oxi trong hỗn hợp cân bằng.
 b. Cũng ở 25°C, người ta cho vào bình trên y mol khí SO_3 . Ở trạng thái cbhh thấy có 0,105 mol O_2 . Tính tỉ lệ SO_3 bị phân hủy, thành phần hỗn hợp khí và áp suất chung của hệ

Hướng dẫn giải

a. Xét

2 SO_2	+	O_2	\rightleftharpoons	2 SO_3	(1)
ban đầu		0,15		0,20	
lúc cbhh		(0,15 + 2z)		z	(0,20 – 2z)

Tổng số mol khí lúc cbhh là $n_1 = 0,15 + 2z + z + 0,20 - 2z = 0,35 + z$

Từ pt trạng thái: $P_1V = n_1RT \rightarrow n_1 = P_1V / (RT) = 3,2.3/(0,082.298) = 0,393 \Rightarrow z = 0,043$.

Vậy $x_{O_2} = z/n_1 = 0,043/0,393 = 0,1094$ hay trong hhcb oxi chiếm **10,94%**

b.

2 SO_2	+	O_2	\rightleftharpoons	2 SO_3	(2)
ban đầu		0		0	y
lúc cbhh		2. 0,105		0,105	(y – 2. 0,105).

Trạng thái cbhh được xét đối với (1) và (2) như nhau về T (và cùng V) nên ta có: $K = const$;
 vậy: $n_{SO_3}^2 / (n_{SO_2}^2 . n_{O_2}) = const$.

Theo (1) ta có $n_{SO_3}^2 / (n_{SO_2}^2 . n_{O_2}) = (0,20 - 2. 0,043)^2 / (0,15 + 0,086)^2 . 0,043 = 5,43$.

Theo (2) ta có $n_{SO_3}^2 / (n_{SO_2}^2 . n_{O_2}) = (y - 0,21)^2 / (0,21)^2 . 0,105 = 5,43$. Từ đó có phương trình:

$y^2 - 0,42 y + 0,019 = 0$. Giải pt này ta được $y_1 = 0,369$; $y_2 = 0,0515 < 0,105$
 (loại bỏ nghiệm y_2 này).

Do đó ban đầu có $y = 0,369$ mol SO_3 ; phân li 0,21 mol nên **tỉ lệ SO_3 phân li là 56,91%**

Tại cbhh: tổng số mol khí là $0,369 + 0,105 = 0,474$ nên:



SO₃ chiếm (0,159 / 0,474).100% = **33,54%**

SO₂ chiếm (0,21 / 0,474).100% = **44,30%** ;

O₂ chiếm 100% - 33,54% - 44,30% = **22,16%**.

Từ pt trạng thái: P₂V = n₂RT → P₂ = n₂ RT/ V = 0,474.0,082.298/3 → **P₂ = 3,86 atm.**

Câu 5: NOCl bị phân hủy theo phản ứng: 2NOCl_(k) ⇌ 2NO_(k) + Cl_{2(k)}. Lúc đầu chỉ có NOCl. Khi cân bằng ở 500K có 27% NOCl bị phân hủy và áp suất tổng cộng của hệ là 1atm. Hãy tính ở 500K

b. K_p và ΔG^o của phản ứng.

c. Nếu hạ áp suất xuống dưới 1atm thì sự phân hủy NOCl tăng hay giảm? Vì sao?

Câu 6: Đối với phản ứng: A + B → C + D (phản ứng là đơn giản)

1. Trộn 2 thể tích bằng nhau của dung dịch chất A và dung dịch chất B có cùng nồng độ 1M:

a. Nếu thực hiện phản ứng ở nhiệt độ 333,2K thì sau 2 giờ nồng độ của C bằng 0,215M. Tính hằng số tốc độ của phản ứng.

b. Nếu thực hiện phản ứng ở 343,2K thì sau 1,33 giờ nồng độ của A giảm đi 2 lần. Tính năng lượng hoạt hóa của phản ứng (theo kJ.mol⁻¹).

2. Trộn 1 thể tích dung dịch chất A với 2 thể tích dung dịch chất B, đều cùng nồng độ 1M, ở nhiệt độ 333,2K thì sau bao lâu A phản ứng hết 90%?

Câu 7: N₂O₅ dễ bị phân hủy theo phản ứng sau: N₂O_{5(k)} → 4NO_{2(k)} + O_{2(k)}. Phản ứng là bậc nhất với hằng số tốc độ phản ứng là: k = 4,8.10⁻⁴ s⁻¹

a. Tính thời gian mà một nửa lượng N₂O₅ phân hủy

b. Áp suất ban đầu của N₂O₅ là 500 mmHg. Tính áp suất của hệ sau 10 phút

(ĐS: a. 1444s ; b. 687,5 mmHg)

Câu 8: Ở nhiệt độ T(K), hợp chất C₃H₆O bị phân hủy theo phương trình: C₃H₆O_(k) → C₂H_{4(k)} + CO_(k) + H_{2(k)}

Đo áp suất P của hỗn hợp phản ứng theo thời gian ta thu được kết quả cho bởi bảng sau:

t (phút)	0	5	10	15	?
P (atm)	0,411	0,537	0,645	0,741	0,822

a. Chứng minh phản ứng là bậc nhất theo thời gian

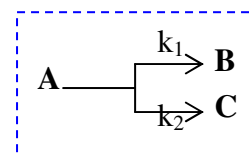
b. Ở thời điểm nào áp suất của hỗn hợp bằng 0,822 atm

Câu 9: Với phản ứng ở pha khí: A₂ + B₂ → 2AB (1), cơ chế phản ứng được xác định:

(a) A₂ ⇌ 2A (nhanh)

(b) A + B₂ ⇌ AB₂ (nhanh)

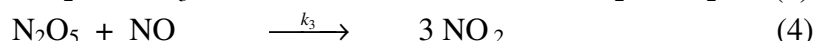
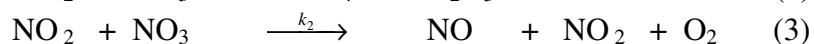
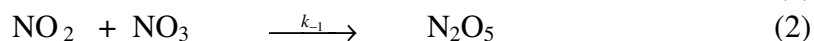
(c) A + AB₂ ⇌ 2AB (chậm)



Viết biểu thức tốc độ phản ứng (1) và giải thích.

Câu 10: Xác định các hằng số tốc độ k₁ và k₂ của phản ứng song song (Sơ đồ trên). Biết rằng hỗn hợp sản phẩm chứa 35% chất B và nồng độ chất A đã giảm đi một nửa sau 410 s. (k₁ = 0,591.10⁻³ ; k₂ = 1,099.10⁻³ s⁻¹)

Câu 11: Thực nghiệm cho biết sự nhiệt phân ở pha khí N₂O₅ $\xrightarrow{t^o}$ NO₂ + O₂ (*) là phản ứng một chiều bậc nhất. Cơ chế được thừa nhận rộng rãi của phản ứng này là



a. Áp dụng sự gần đúng trạng thái dừng cho NO, NO₃ ở cơ chế trên, hãy thiết lập biểu thức tốc độ của (*). Kết quả đó có phù hợp với thực nghiệm không?

b. Giả thiết rằng năng lượng hoạt hóa của (2) bằng không, của (3) bằng 41,570 kJ.mol⁻¹. Dựa vào đặc điểm cấu tạo phân tử khi xét cơ chế ở trên, phân tích cụ thể để đưa ra biểu thức tính k₋₁/ k₂ và hãy cho biết trị số đó tại 350 K.

c. Từ sự phân tích giả thiết ở điểm b) khi cho rằng các phản ứng (1) và (2) dẫn tới cân bằng hóa học có hằng số K, hãy viết lại biểu thức tốc độ của (*) trong đó có hằng số cbhh K.

Hướng dẫn giải:

a. Xét $d[NO_3]/dt = k_1[N_2O_5] - k_{-1}[NO_2][NO_3] - k_2[NO_2][NO_3] \approx 0$ (a)

$\rightarrow [NO_3] = k_1[N_2O_5] / \{(k_{-1} + k_2)[NO_2]\}$ (b).

Xét $d[NO]/dt = k_2[NO_2][NO_3] - k_3[NO][N_2O_5] \approx 0$ (c)

$\rightarrow [NO] = k_2[NO_2][NO_3] / k_3[N_2O_5] / \{(k_{-1} + k_2)[NO_2]\}$ (d).

Thế (b) vào (d) ta được $[NO] = k_1k_2 / k_3(k_{-1} + k_2)$ (d).

Xét $d[N_2O_5]/dt = -k_1[N_2O_5] + k_{-1}[NO_2][NO_3] - k_3[NO][N_2O_5]$ (e).

Thế (b), (d) vào (e) và biến đổi thích hợp, ta được

$d[N_2O_5]/dt = \{-k_1 + (k_{-1} - k_2)/(k_{-1} + k_2)\}[N_2O_5] = k'[N_2O_5]$ (f)

b. Trong (2) do sự va chạm giữa NO_2 với NO_3 nên $N_2O_5 \equiv O_2NONO_2$ được tái tạo, tức là có sự va chạm của 1 N với 1 O. Ta gọi đây là trường hợp 1.

Trong (3) NO được tạo ra do 1 O bị tách khỏi NO_2 ; NO_2 được tạo ra từ sự tách 1O khỏi NO_3 . Sau đó 2 O kết hợp tạo ra O_2 . Ta gọi đây là trường hợp 2. Như vậy ở đây số va chạm giữa các phân tử ảnh hưởng gấp 2 so với trường hợp 1 trên.

Phương trình Archéniux được viết cụ thể cho mỗi phản ứng đã xét:

P.ư (2): $k_{-1} = A_2e^{-E_2/RT}$ (*); P.ư (3): $k_2 = A_3e^{-E_3/RT}$ (**)

Theo lập luận trên và ý nghĩa của đại lượng A trong pt Archéniux đặc trưng cho số va chạm dẫn tới phản ứng, ta thấy $A_3 = 2A_2$. Ta qui ước $A_2 = 1$ thì $A_3 = 2$. Theo đề bài: $E_2 = 0$; $E_3 = 41,570 \text{ kJ.mol}^{-1}$; $T = 350$. Thay số thích hợp, ta có:

$k_{-1}/k_2 = 1/2 e^{E_3/RT} = 1/2 e^{41,578/8,314.10^{-3}.350} \approx 8.10^5$ (lần).

c. Kết hợp (1) với (2) ta có cbhh: $N_2O_5 \rightleftharpoons NO_2 + NO_3$ (I)

$K = k_1 / k_{-1} = [NO_2][NO_3] / [N_2O_5]$ (I.1)

Đưa (I.1) vào b/ thức (c): $[NO] = k_2[NO_2][NO_3] / k_3[N_2O_5] = k_2K/k_3$ (I.2).

Thế b/ thức (I.2) này và (b) trên vào (e), ta có

$d[N_2O_5]/dt = -k_1[N_2O_5] + k_{-1}[NO_2]\{k_{-1}[NO_2](k_1[N_2O_5]/(k_{-1} + k_2)[NO]) - k_3(k_2K/k_3)\}$.

Thu gọn b/ t này, ta được $d[N_2O_5]/dt = \{-k_1 + (k_{-1}k_1/(k_{-1} + k_2)) - k_2K\}[N_2O_5]$ (I.3)

Giả thiết $k_{-1} \gg k_2$ phù hợp với điều kiện $E_{a2} \approx 0$. Cbhh (I) nhanh chóng được thiết lập.

Vậy từ (I.3) ta có

$d[N_2O_5]/dt = \{-k_1 + (k_{-1}k_1/k_{-1}) - k_2K\}[N_2O_5]$ (I.4).

Chú ý $K = k_1 / k_{-1}$, ta được:

$d[N_2O_5]/dt = \{-k_1 + (k_{-1} - k_2)K\}[N_2O_5]$ (I.5).

Câu 12: Trong một hệ có cân bằng $3 H_2 + N_2 \rightleftharpoons 2 NH_3$ (*) được thiết lập ở 400 K người ta xác định được các áp suất riêng phần sau đây: $p(H_2) = 0,376.10^5 \text{ Pa}$, $p(N_2) = 0,125.10^5 \text{ Pa}$, $p(NH_3) = 0,499.10^5 \text{ Pa}$

1. Tính hằng số cân bằng K_p và ΔG^0 của phản ứng (*) ở 400 K.

2. Tính lượng N_2 và NH_3 , biết hệ có 500 mol H_2 .

(ĐS: 1. 38,45 ; -12,136 kJ.mol⁻¹ ; 2. n(N₂) = 166 mol ; n(NH₃) = 644 mol)

Câu 13: Cho phản ứng $A + B \rightarrow C + D$ (*) diễn ra trong dung dịch ở 25 °C.

Đo nồng độ A trong hai dung dịch ở các thời điểm t khác nhau, thu được kết quả:

Dung dịch 1

$[A]_0 = 1,27.10^{-2} \text{ mol.L}^{-1}$; $[B]_0 = 0,26 \text{ mol.L}^{-1}$

t(s)	1000	3000	10000	20000	40000	100000
[A] (mol.L ⁻¹)	0,0122	0,0113	0,0089	0,0069	0,0047	0,0024

Dung dịch 2

$[A]_0 = 2,71.10^{-2} \text{ mol.L}^{-1}$; $[B]_0 = 0,495 \text{ mol.L}^{-1}$

t(s)	2.000	10000	20000	30000	50000	100000
[A] (mol.L ⁻¹)	0,0230	0,0143	0,0097	0,0074	0,0050	0,0027

1. Tính tốc độ của phản ứng (*) khi [A] = 3,62.10⁻² mol.L⁻¹ và [B] = 0,495 mol.L⁻¹.

2. Sau thời gian bao lâu thì nồng độ A giảm đi một nửa?

(ĐS: 1. v = 4,32.10⁻⁶ mol.L⁻¹.s⁻¹ ; 2 T = 8371 s)

Phần 5: ĐIỆN HÓA HỌC

Câu 1: Để xác định hằng số tạo phức (hay hằng số bền) của ion phức [Zn(CN)₄]²⁻, người ta làm như sau:

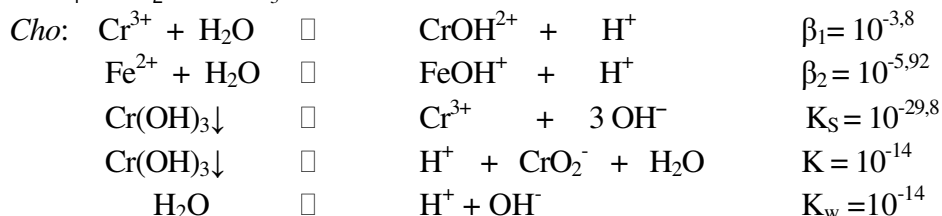
- Thêm 99,9 ml dung dịch KCN 1M vào 0,1 ml dung dịch ZnCl₂ 0,1 M để thu được 100ml dung dịch ion phức [Zn(CN)₄]²⁻ (dung dịch A).
- Nhúng vào A hai điện cực: điện cực kẽm tinh khiết và điện cực so sánh là điện cực calomen bão hoà có thế không đổi là 0,247 V (điện cực calomen trong trường hợp này là cực dương).
- Nối hai điện cực đó với một điện thế kế, đo hiệu điện thế giữa chúng được giá trị 1,6883 V.

Hãy xác định hằng số tạo phức của ion phức [Zn(CN)₄]²⁻. Biết thế oxi hoá - khử tiêu chuẩn của cặp Zn²⁺/Zn bằng -0,7628 V. (ĐS: β_{1,4} = 10^{18,92})

Câu 2: Dung dịch A gồm CrCl₃ 0,010 M và FeCl₂ 0,100 M.

- Tính pH của dung dịch A.
- Tính pH để bắt đầu kết tủa và kết tủa hoàn toàn Cr(OH)₃ từ dung dịch CrCl₃ 0,010 M (coi một ion được kết tủa hoàn toàn nếu nồng độ còn lại của ion đó trong dung dịch nhỏ hơn hoặc bằng 1,0.10⁻⁶ M).
- Tính E^o_{CrO₄²⁻/CrO₂}. Thiết lập sơ đồ pin và viết phương trình phản ứng xảy ra trong pin được ghép bởi cặp

CrO₄²⁻/CrO₂ và NO₃⁻/NO ở điều kiện tiêu chuẩn.



$$E^o_{CrO_4^{2-}/Cr(OH)_3, OH^-} = -0,13V; E^o_{NO_3^-, H^+/NO} = 0,96V; 2,303 \frac{RT}{F} = 0,0592(25^\circ C)$$

Đáp số: a. pH = 2,9

b. Nếu kết tủa hoàn toàn Cr(OH)₃ ↓ từ dung dịch Cr³⁺ 0,010 M thì: pH ≥ 7,2

c. E^o = -0,13 V ; sơ ão pin: (-)Pt|CrO₄²⁻ 1M; CrO₂⁻ 1M; OH⁻ 1M || NO₃⁻ 1M ; H⁺ 1M | (Pt) NO, pNO = 1atm (+)

Câu 3: Trong không khí dung dịch natri sunfua bị oxi hoá một phần để giải phóng ra lưu huỳnh. Viết phương trình phản ứng và tính hằng số cân bằng.

Cho: E^o(O₂/H₂O) = 1,23V ; E^o(S/S²⁻) = - 0,48V; 2,3 RT/F ln = 0,0592lg

Câu 4: Để sản xuất 1 tấn nhôm người ta điện phân boxit chứa 50% Al₂O₃. Hỏi cần lượng Boxit và năng lượng kWh là bao nhiêu, biết rằng điện áp làm việc là 4,2V. Tính thời gian tiến hành điện phân với cường độ dòng điện 30000A

(ĐS: 12509 kWh ; t = 99h)

Câu 5: Thiết lập một pin tại 25°C: Ag | [Ag(CN)_n]⁽ⁿ⁻¹⁾⁻ = C mol.l⁻¹, [CN⁻] dư || [Ag⁺] = C mol.l⁻¹ | Ag

1. Thiết lập phương trình sức điện động E = f (n, [CN⁻], pβ), β là hằng số điện li của ion phức

2. Tính n và pβ, biết E_{pin} = 1,200 V khi [CN⁻] = 1M và E_{pin} = 1,32 V khi [CN⁻] = 10M

Câu 6: Dựa vào các số liệu thế khử chuẩn sau để xây dựng giản đồ thế khử chuẩn của Urani (giản đồ Latime) và cho biết ion nào không bền trong dung dịch.

	UO ₂ ²⁺ / UO ₂ ⁺	UO ₂ ⁺ / U ⁴⁺	U ⁴⁺ / U	U ³⁺ / U
E ^o , V	0,062	0,612	-1,5	-1,798

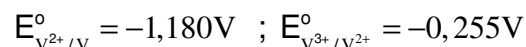
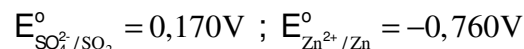
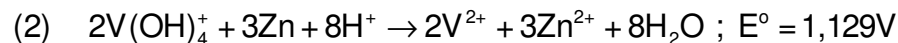
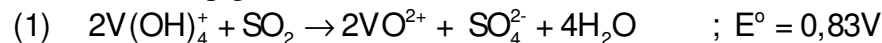
Câu 7: Ở 25°C xảy ra phản ứng sau: $\text{Fe}^{2+} + \text{Ce}^{4+} \rightleftharpoons \text{Fe}^{3+} + \text{Ce}^{3+}$. Cho các số liệu về thế khử chuẩn của các cặp: $E^\circ_{\text{Fe}^{3+}/\text{Fe}^{2+}} = 0,77\text{V}$; $E^\circ_{\text{Ce}^{4+}/\text{Ce}^{3+}} = 1,74\text{V}$

1. Tính hằng số cân bằng K của phản ứng

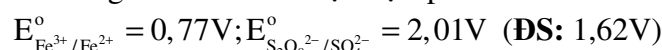
2. Tính thế phản ứng tại thời điểm tương đương, biết ban đầu số mol của Fe^{2+} và Ce^{4+} là bằng nhau.

(ĐS: $K = 2,76 \cdot 10^{16}$; $E = 1,255\text{V}$)

Câu 8: Thiết lập giản đồ Latimer của Vanadi dựa vào các dữ kiện sau:



Câu 9: Chuẩn độ 10 cm³ dung dịch FeCl_2 0,1 N bằng dung dịch $\text{K}_2\text{S}_2\text{O}_8$ 0,1N ở 25°C. Phản ứng được theo dõi bằng cách đo thế điện cực platin. Tính thế ở điểm tương đương biết rằng giá trị thế điện cực chuẩn:



Câu 10: Cho biết các số liệu sau tại 25°C: $E^\circ_{\text{Au}^+/\text{Au}} = 1,7\text{V}$; $E^\circ_{\text{O}_2/\text{H}_2\text{O}} = 1,23\text{V}$. Hằng số điện li tổng của ion phức $[\text{Au}(\text{CN})_2]^-$ là $7,04 \cdot 10^{-40}$. Chứng minh rằng khi có mặt ion CN^- trong dung dịch kiềm thì $E^\circ_{[\text{Au}(\text{CN})_2]^-/\text{Au}}$ nhỏ hơn $E^\circ_{\text{O}_2/\text{OH}^-}$ nghĩa là oxi có thể oxi hóa được vàng.

(ĐS: $-0,61\text{V} < 0,404\text{V} \Rightarrow$ đpcm)

Câu 11: Để xác định sự tồn tại của ion thủy ngân số oxi hóa +I trong dung dịch, người ta thiết lập một pin sau tại 25°C: $\text{Hg} | \text{Hg}_n(\text{ClO}_4)_n \ 2,5 \cdot 10^{-3}\text{M} || \text{Hg}_n(\text{ClO}_4)_n \ 10^{-2}\text{M} | \text{Hg}$. Suất điện động đo được là 0,018V. Tính giá trị của n từ đó suy ra sự tồn tại của Hg^{n+} trong dung dịch. (ĐS: n = 2)

Câu 12: Ở 25°C ta có: $E^\circ_{\text{Hg}_2^{2+}/\text{Hg}} = 0,85\text{V}$; $E^\circ_{\text{Hg}_2^{2+}/\text{Hg}} = 0,79\text{V}$; $T_{\text{t}(\text{Hg}_2\text{I}_2)} = 10^{-28}$; $\beta_{4[\text{HgI}_4]^{2-}} = 10^{-30}$; $\beta_{4[\text{HgI}_4]^{2-}}$ là hằng số điện li tổng của $[\text{HgI}_4]^{2-}$.

1. Tính $E^\circ_{\text{Hg}_2^{2+}/\text{Hg}_2^{2+}}$

2. Tính hằng số cân bằng của phản ứng sau trong dung dịch: $\text{Hg}_2^{2+} \rightleftharpoons \text{Hg}^{2+} + \text{Hg}$. Ion Hg_2^{2+} bền hay không bền trong dung dịch.

3. Trong dung dịch $\text{Hg}_2^{2+} \ 10^{-2}\text{M}$ chứa I sẽ tạo ra kết tủa. Tính nồng độ I khi bắt đầu kết tủa Hg_2I_2

4. Tính $E^\circ_{\text{Hg}_2\text{I}_2/\text{Hg}}$. Thiết lập phương trình $E^\circ_{\text{Hg}_2\text{I}_2/\text{Hg}} = f([\text{I}^-])$

5. $\text{Hg}^{2+} + 4\text{I}^- \rightleftharpoons [\text{HgI}_4]^{2-}$, ở nồng độ nào của I thì $[\text{Hg}^{2+}] = [\text{HgI}_4^{2-}]$

6. Tính $E^\circ_{\text{HgI}_4^{2-}/\text{Hg}_2\text{I}_2}$. Thiết lập phương trình $E^\circ_{\text{HgI}_4^{2-}/\text{Hg}_2\text{I}_2} = f([\text{HgI}_4^{2-}], [\text{I}^-])$

Phần 6: NỒNG ĐỘ DUNG DỊCH – SỰ ĐIỆN LI

Câu 1: Tính pH của dung dịch KHSO_3 1M biết các hằng số điện li của axit H_2SO_3 lần lượt là: $K_{a1} = 1,3 \times 10^{-2}$; $K_{a2} = 1,23 \times 10^{-7}$

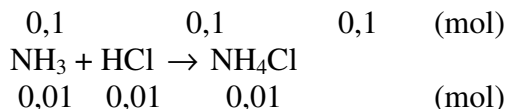
Câu 2: Tính độ tan của FeS ở pH = 5 cho biết: $\text{Fe}^{2+} + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons [\text{Fe}(\text{OH})]^+ + \text{H}^+$ có $\lg\beta = -5,92$ $T_{\text{FeS}} = 10^{-17,2}$; H_2S có $K_{a1} = 10^{-7,02}$; $K_{a2} = 10^{-12,9}$ (ĐS: $S = 2,43 \cdot 10^{-4}\text{M}$)

Câu 3: Cho 0,01 mol NH_3 , 0,1 mol CH_3NH_2 và 0,11 mol HCl vào H_2O được 1 lít dung dịch. Tính pH của dung dịch thu được? Cho $\text{p}K_{\text{NH}_4^+} = 9,24$, $\text{p}K_{\text{CH}_3\text{NH}_3^+} = 10,6$, $\text{p}K_{\text{H}_2\text{O}} = 14$

Hướng dẫn giải

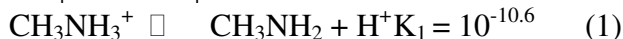
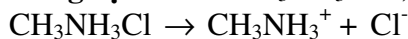
Xét các cân bằng sau





Do V= 1 (l) nên C_M = n.

Dung dịch chứa CH₃NH₃Cl 0,1M và NH₄Cl 0,01M



Tính gần đúng và do (1) và (2) là sự điện li của 2 axit yếu nên ta có:

$$[\text{H}^+] = \sqrt{C_1 \cdot K_1 + C_2 \cdot K_2} = \sqrt{0,1 \cdot 10^{-10,6} + 0,01 \cdot 10^{-9,24}} = 2,875 \cdot 10^{-6}$$

$$\Rightarrow \text{pH} = -\lg[\text{H}^+] = 5,54$$

Câu 4: Đánh giá khả năng hòa tan của HgS trong:

a. Axit Nitric HNO₃

b. Nước cường toan

Biết: E⁰_{NO₃/NO} = 0,96V ; E⁰_{S/H₂S} = 0,17V ; T_{HgS} = 10^{-51,8}; H₂S: K_{a1} = 10⁻⁷; K_{a2} = 10^{-12,92}; β_{HgCl₄²⁻} = 10^{14,92}

Câu 5: Tính pH của dd NH₄HCO₃ 0,1M. Cho biết: H₂CO₃: K_{a1} = 10^{6,35}; K_{a2} = 10^{10,33}; pK_{aNH₄⁺} = 9,24

Câu 6: Ion Cr₂O₇²⁻ bị thủy phân theo phương trình sau: Cr₂O₇²⁻ + H₂O ⇌ 2CrO₄²⁻ + 2H⁺; K = 10^{-14,4}

1. Thêm KOH vào dung dịch K₂Cr₂O₇ để nồng độ ban đầu của hai chất đều bằng 0,1M. Tính pH của dung dịch thu được

2. Trộn 20 ml dung dịch K₂Cr₂O₇ 0,1M với 20 ml dung dịch Ba(NO₃)₂ 1M sẽ tạo kết tủa BaCrO₄ (T_t = 10^{-9,7})
Tính pH của dung dịch thu được sau khi trộn.

(ĐS: 1. pH = 6,85 ; 2. pH = 1)

Câu 7: Dung dịch MgCl₂ 0,01M ở 25°C bắt đầu kết tủa Mg(OH)₂ tại pH = 9,5.

1. Tính tích số tan của Mg(OH)₂

2. Tính thế khử của cặp Mg²⁺/Mg khi pH = 11, biết rằng thế khử chuẩn của nó là -2,36

3. Giải thích tại sao khi ghép Mg vào các thiết bị bằng thép thì có thể bảo vệ được thép khỏi bị ăn mòn

ĐS: T_t = 10⁻¹¹; E_{Mg²⁺/Mg} = E⁰_{Mg²⁺/Mg} + $\frac{0,0592}{n} \lg \frac{T_{\text{Mg(OH)}_2}}{[\text{OH}^-]^2}$ = -2,51V ; E⁰_{Mg²⁺/Mg} < E⁰_{Fe²⁺/Fe} => ăn mòn điện hóa

Câu 8: Tính nồng độ tối thiểu của NH₃ có thể hòa tan hoàn toàn 0,1 mol AgCl biết rằng T_{AgCl} = 10⁻¹⁰, hằng số điện li tổng của phức [Ag(NH₃)₂]⁺ bằng 10^{-7,2} (ĐS: 2,7M)

Câu 9: Tính độ hòa tan (mol.l⁻¹) của AgCl trong dung dịch NH₃ 1M biết rằng T_{AgCl} = 10⁻¹⁰, hằng số bền tổng của phức [Ag(NH₃)₂]⁺ bằng 1,6.10⁷ (ĐS: 0,037M)

Câu 10: Hg²⁺ tạo với I⁻ kết tủa màu đỏ HgI₂ (T_t = 10⁻²⁸). Nếu dư I⁻ thì HgI₂ tan tạo thành [HgI₄]²⁻ (β₄ = 10⁻³⁰)
Thêm dung dịch KI 1M vào 10 ml dung dịch Hg²⁺ 0,01M. Tính thể tích V₁ dd KI cần thêm vào để bắt đầu kết tủa HgI₂ và thể tích V₂ dung dịch KI cần thêm vào để HgI₂ bắt đầu tan hết. Tính nồng độ các ion trong dung dịch khi cân bằng trong cả hai trường hợp

ĐS: Khi bắt đầu kết tủa V₁ = 10⁻¹² cm³; [Hg²⁺] = 0,01M; [I⁻] = 10⁻¹³ M; [HgI₄]²⁻ = 10⁻²⁴ M

Khi kết tủa bắt đầu hòa tan hết: V₂ = 0,5 cm³; [HgI₄]²⁻ = 0,01M; [I⁻] = 0,1M; [Hg²⁺] = 10⁻²⁴ M

Câu 11: Dung dịch chứa ion Fe(SCN)²⁺ có màu đỏ bắt đầu từ nồng độ 10⁻⁵M. Hằng số bền của ion Fe(SCN)²⁺ là β_b = 2×10²

1. Trong 500 cm³ dung dịch chứa 10⁻³ mol FeCl₃ và 5.10⁻³ mol KSCN. Tính nồng độ ion Fe(SCN)²⁺ tại trạng thái cân bằng. Hỏi dung dịch có màu đỏ không

2. Hòa tan tinh thể NaF vào dung dịch trên (thể tích dung dịch không biến đổi) tạo thành ion FeF²⁺ với hằng số bền là β_b = 1,6×10⁵. Hỏi bắt đầu từ lượng nào thì màu đỏ biến mất.

ĐS: 1. 1,27.10⁻³M > 10⁻⁵M nên có màu đỏ ; 2. 0,0938 gam

Câu 12: Một sunfua kim loại MS có tích số tan T_t . Tính pH của dung dịch M^{2+} 0,01M để bắt đầu kết tủa MS bằng dung dịch H_2S bão hòa 0,1M và pH của dung dịch khi kết thúc sự kết tủa của sunfua này, nếu chấp nhận nồng độ của M^{2+} còn lại trong dung dịch là $10^{-6}M$

ĐS: Bắt đầu kết tủa : $pH = \frac{1}{2} \lg T_t + 12$, kết thúc kết tủa: $pH = \frac{1}{2} \lg T_t + 14$

Câu 13: Thêm 1 ml dung dịch NH_4SCN 0,10 M vào 1ml dung dịch Fe^{3+} 0,01 M và F^- 1M. Có màu đỏ của phức $FeSCN^{2+}$ hay không? Biết rằng màu chỉ xuất hiện khi $C_{FeSCN^{2+}} > 7.10^{-6}M$ và dung dịch được axit hóa đủ để sự tạo phức hydroxo của Fe (III) xảy ra không đáng kể. Cho $\beta_3^{-1} FeF_3 = 10^{-13,10}$; $\beta_1 FeSCN^{2+} = 10^{3,03}$ (β là hằng số bền).

Câu 14: Đánh giá thành phần cân bằng trong hỗn hợp gồm Ag^+ $1,0.10^{-3} M$; NH_3 1,0 M và Cu bột. Cho $\beta_{2Ag(NH_3)_2^+} = 10^{7,24}$; $\beta_{4Cu(NH_3)_4^{2+}} = 10^{12,03}$; $E^0_{Ag^+/Ag} = 0,799V$; $E^0_{Cu^{2+}/Cu} = 0,337V$ (ở 25^0C)

Câu 15: Cho: H_2SO_4 : $pK_{a2} = 2$; H_3PO_4 : $pK_{a1} = 2,23$, $pK_{a2} = 7,21$, $pK_{a3} = 12,32$

- Viết phương trình phản ứng và xác định thành phần giới hạn của hỗn hợp khi trộn H_2SO_4 C_1M với Na_3PO_4 C_2M trong trường hợp sau: $2C_1 > C_2 > C_1$
- Tính pH của dung dịch H_3PO_4 0,1M
- Cần cho vào 100ml dung dịch H_3PO_4 0,1M bao nhiêu gam NaOH để thu được dung dịch có pH= 4,72.

Thời gian làm bài: 180 phút (Không kể thời gian phát đề)

Câu 1: (2.0 điểm)

- Tại sao ion phức spin thấp $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{3+}$ lại có màu. Giải thích dựa vào $\Delta_o = 22900(\text{cm}^{-1})$. Cho biết: $1 \text{ cm}^{-1} = 11,962 \text{ J.mol}^{-1}$.
- Dựa trên mô hình VSEPR, giải thích dạng hình học của NH_3 , ClF_3 , XeF_4 .
- Quá trình: $\text{O} \rightarrow \text{O}^+ + 1e$ có $I_1 = 13,614 \text{ (eV)}$. Dựa vào phương pháp Slater xác định hằng số chắn của các electron trong nguyên tử đối với electron bị tách. So sánh độ bền tương đối của hai cấu hình electron của O và O^+ , giải thích.

Câu 2: (2.0 điểm) Thiết lập biểu thức phụ thuộc giữa thế oxi hóa – khử với pH của môi trường trong 2 trường hợp sau:

- $\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-} + 14\text{H}^+ + 6e \rightleftharpoons 2\text{Cr}^{3+} + 7\text{H}_2\text{O}$; $E^\circ_{\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}/2\text{Cr}^{3+}} = +1,33\text{V}$. Ở pH = 7, $\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$ có oxi hóa được I^- không? Biết rằng: $E^\circ_{\text{I}_2/2\text{I}^-} = 0,6197\text{V}$
- $\text{Co}(\text{OH})_3 + 1e \rightleftharpoons \text{Co}(\text{OH})_2 + \text{OH}^-$; $E^\circ_{\text{Co}(\text{OH})_3/\text{Co}(\text{OH})_2} = +0,17\text{V}$

Biết tích số ion của nước $K_w = 10^{-14}$ và $2,303 \frac{RT}{F} \ln x = 0,0592 \lg x$ (tại 25°C , 1atm)

Câu 3: (1.5 điểm) Cho phản ứng: $\text{A} + \text{B} \rightarrow \text{C} + \text{D}$ (1) là phản ứng đơn giản. Tại 27°C và 68°C , phương trình (1) có hằng số tốc độ tương ứng lần lượt là $k_1 = 1,44.10^7 \text{ mol}^{-1}.\text{s}^{-1}$ và $k_2 = 3,03.10^7 \text{ mol}^{-1}.\text{s}^{-1}$, $R = 1,987 \text{ cal/mol.K}$

- Tính năng lượng hoạt hóa E_A (theo cal/mol) và giá trị của A trong biểu thức $k = A \times e^{\left(\frac{-E}{RT}\right)} \text{ mol}^{-1}.\text{s}^{-1}$.
- Tại 119°C , tính giá trị của hằng số tốc độ phản ứng k_3 .
- Nếu $C_{\text{O}_A} = C_{\text{O}_B} = 0,1\text{M}$ thì $\tau_{1/2}$ ở nhiệt độ 119°C là bao nhiêu.

Câu 4: (2.5 điểm) Điện phân dung dịch NaCl dùng điện cực Katode là hỗn hống Hg dòng chảy đều và dùng cực titan bọc ruteni và rodi là Anode. Khoảng cách giữa Anode và Katode chỉ vài mm

- Viết phương trình phản ứng xảy ra tại điện cực khi mới bắt đầu điện phân pH = 7. Tính các giá trị thế điện cực và thế phân giải
- Sau một thời gian, pH tăng lên đến giá trị pH = 11. Giải thích tại sao. Viết các phương trình xảy ra tại pH đó. Tính thế điện cực và thế phân giải

Cho biết: $E^\circ_{\text{Na}^+/\text{Na}} = -2,71\text{V}$; $E^\circ_{2\text{H}_3\text{O}^+/\text{H}_2} = 0,00\text{V}$; $E^\circ_{\text{O}_2/\text{H}_2\text{O}} = 1,23\text{V}$. Với dung dịch NaCl 25% và 0,2% Na trong hỗn hống Na/Hg: $E^\circ_{\text{Na}^+/\text{Na}(\text{Hg})} = -1,78\text{V}$. $E^\circ_{\text{Cl}_2/\text{Cl}^-} = 1,34\text{V}$ cho dung dịch NaCl 25% theo khối lượng $\eta_{\text{H}_2} = 1,3\text{V}$ trên Hg ; $\eta_{\text{O}_2} = 0,8\text{V}$ trên Ru/Rd

Câu 5: (1.5 điểm) Trong các tinh thể α (cấu trúc lập phương tâm khối) các nguyên tử cacbon có thể chiếm các mặt của ô mạng cơ sở

- Bán kính kim loại của sắt là $1,24 \text{ \AA}$. Tính độ dài cạnh a của ô mạng cơ sở
- Bán kính cộng hóa trị của cacbon là $0,77 \text{ \AA}$. Hỏi độ dài cạnh a sẽ tăng lên bao nhiêu khi sắt α có chứa cacbon so với cạnh a khi sắt α nguyên chất
- Tính độ dài cạnh ô mạng cơ sở cho sắt γ (cấu trúc lập phương tâm diện) và tính độ tăng chiều dài cạnh ô mạng biết rằng các nguyên tử cacbon có thể chiếm tâm của ô mạng cơ sở và bán kính kim loại sắt γ là $1,26 \text{ \AA}$. Có thể kết luận gì về khả năng xâm nhập của cacbon vào 2 loại tinh thể sắt trên

Câu 6: (1.5 điểm) Kết quả phân tích một phức chất A của Platin (II) cho biết có: 64,78 % khối lượng là Pt, 23,59 % là Cl, 5,65 % là NH_3 và 5,98 % còn lại là H_2O

- Tìm công thức phân tử của phức chất biết rằng A là phức chất 1 nhân và Pt có số phối trí là 4. Viết công thức cấu tạo 2 đồng phân cis và trans của nó

2. Entanpi tự do chuẩn tạo thành ở 25°C của các đồng phân cis, trans lần lượt là: -396 và -402 kJ.mol⁻¹. Tính hằng số cân bằng K của phản ứng sau: cis_(A) ⇌ trans_(A)
3. Tính nồng độ mol/lit mỗi đồng phân trong dung dịch, biết rằng lúc đầu chỉ có đồng phân cis nồng độ 0,01M. Cho Pt = 195 ; Cl = 35,5 ; N = 14 ; O = 16 ; H = 1

Câu 7: (2.0 điểm) Nitramit có thể bị phân hủy trong dd H₂O theo phản ứng: NO₂NH₂ → N₂O_(k) + H₂O

Các kết quả thực nghiệm cho thấy vận tốc phản ứng tính bởi biểu thức: $v = k \frac{[NO_2NH_2]}{[H_3O^+]}$

- Trong môi trường đệm bậc của phản ứng là bao nhiêu
- Trong các cơ chế sau cơ chế nào chấp nhận được:



b. Cơ chế 2:



c. Cơ chế 3:



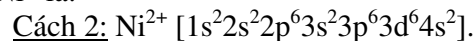
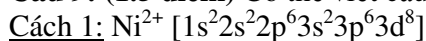
Câu 8: (3.0 điểm)

- Có 3 nguyên tố A, B và C. A tác dụng với B ở nhiệt độ cao sinh ra D. Chất D bị thủy phân mạnh trong nước tạo ra khí cháy được và có mùi trứng thối. B và C tác dụng với nhau cho khí E, khí này tan được trong nước tạo dung dịch làm quỳ tím hoá đỏ. Hợp chất của A với C có trong tự nhiên và thuộc loại chất cứng nhất. Hợp chất của 3 nguyên tố A, B, C là một muối không màu, tan trong nước và bị thủy phân. Viết tên của A, B, C và phương trình các phản ứng đã nêu ở trên.
- Để khảo sát sự phụ thuộc thành phần hơi của B theo nhiệt độ, người ta tiến hành thí nghiệm sau đây: Lấy 3,2 gam đơn chất B cho vào một bình kín không có không khí, dung tích 1 lít. Đun nóng bình để B hoá hơi hoàn toàn. Kết quả đo nhiệt độ và áp suất bình được ghi lại trong bảng sau:

Nhiệt độ (°C)	Áp suất (atm)
444,6	0,73554
450	0,88929
500	1,26772
900	4,80930
1500	14,53860

Xác định thành phần định tính hơi đơn chất B tại các nhiệt độ trên và giải thích.

Câu 9: (1.5 điểm) Có thể viết cấu hình electron của Ni²⁺ là:



Áp dụng phương pháp gần đúng Slater, tính năng lượng electron của Ni²⁺ với mỗi cách viết trên (theo đơn vị eV). Cách viết nào phù hợp với thực tế. Tại sao.

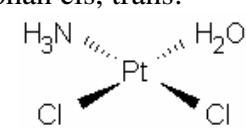
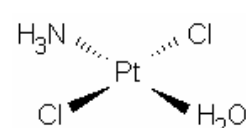
Câu 10: (2.5 điểm)

- Phòng thí nghiệm có mẫu phóng xạ Au¹⁹⁸ với cường độ 4,0 mCi/1g Au. Sau 48 giờ người ta cần một dung dịch có độ phóng xạ 0,5 mCi/1g Au. Hãy tính số gam dung môi không phóng xạ pha với 1g Au để có dung dịch nói trên. Biết rằng Au¹⁹⁸ có t_{1/2} = 2,7 ngày đêm.
- Hãy chứng minh rằng phần thể tích bị chiếm bởi các đơn vị cấu trúc (các nguyên tử) trong mạng tinh thể kim loại thuộc các hệ lập phương đơn giản, lập phương tâm khối, lập phương tâm diện tăng theo tỉ lệ 1 : 1,31 : 1,42.

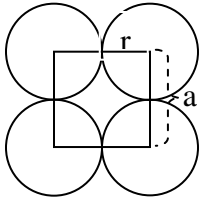
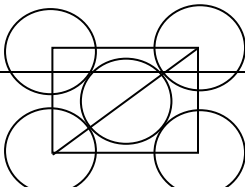
ĐÁP ÁN ĐỀ KIỂM TRA – ĐỀ SỐ 1

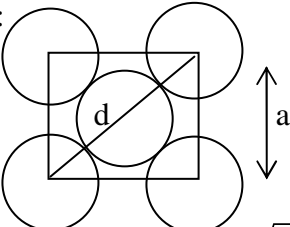
Câu	Ý	Nội dung	Điểm
1	1	Tính được: $\lambda = 437\text{nm}$. Sự hấp thụ ánh sáng nằm trong phổ nhìn thấy nên có màu.	0,5
	2	<p>Cấu tạo của NH_3 cho thấy quanh nguyên tử N trung tâm có 4 vùng không gian khu trú electron, trong đó có 1 cặp electron tự do (AB_3E) nên phân tử NH_3 có dạng tháp đáy tam giác với góc liên kết nhỏ hơn $109^\circ 28'$ (cặp electron tự do đòi hỏi một khoảng không gian khu trú lớn hơn)</p> <div style="display: flex; justify-content: space-around; align-items: center;"> <div style="text-align: center;"> $\begin{array}{c} \text{H} - \ddot{\text{N}} - \text{H} \\ \\ \text{H} \end{array}$ </div> <div style="text-align: center;"> </div> </div> <p>Cấu trúc tháp đáy tam giác tâm là nguyên tử N</p> <p>Phân tử ClF_3 có 5 khoảng không gian khu trú electron, trong đó có 2 cặp electron tự do (AB_3E_2) nên phân tử có dạng chữ T (Các electron tự do chiếm vị trí xích đạo)</p> <div style="display: flex; justify-content: space-around; align-items: center;"> <div style="text-align: center;"> $\begin{array}{c} \text{F} - \overset{\cdot\cdot}{\underset{\cdot\cdot}{\text{Cl}}} - \text{F} \\ \\ \text{F} \end{array}$ </div> <div style="text-align: center;"> </div> </div> <p>Phân tử XeF_4 có 6 vùng không gian khu trú electron, trong đó có hai cặp electron tự do (AB_4E_2) nên có dạng vuông phẳng (trong cấu trúc này các cặp electron tự do phân bố xa nhau nhất)</p> <div style="display: flex; justify-content: space-around; align-items: center;"> <div style="text-align: center;"> $\begin{array}{c} \text{F} \quad \cdot\cdot \\ \diagdown \quad \diagup \\ \text{Xe} \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{F} \quad \cdot\cdot \end{array}$ </div> <div style="text-align: center;"> </div> </div>	<p>$0,25 \times 3 = 0,75$</p>
	3	<ul style="list-style-type: none"> - Cấu hình electron: O $1s^2 2s^2 2p^4$ kém bền hơn $\text{O}^+ 1s^2 2s^2 2p^3$ do lực đẩy lẫn nhau của 2 ô trong một orbital của phân lớp 2p và do O^+ đạt cấu hình bán bão hòa phân lớp 2p nên bền - Đặt b là hằng số chắn của các electron trong nguyên tử đối với electron bị tách. <p>Ta có: $I_1 = 13,6 \frac{Z^{*2}}{n^2} = 13,614 \Rightarrow Z^{*2} = n^2 = 4 \Rightarrow (8-b)^2 = 4 \Rightarrow b = 6$</p>	<p>0,25</p> <p>0,5</p>
			2.0
2	1	$E_{\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}/2\text{Cr}^{3+}} = E_{\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}/2\text{Cr}^{3+}}^{\circ} + \frac{0,0592}{6} \lg \frac{[\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}][\text{H}^+]^{14}}{[\text{Cr}^{3+}]^2}$ $= E_{\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}/2\text{Cr}^{3+}}^{\circ} + \frac{0,0592}{6} \lg [\text{H}^+]^{14} + \frac{0,0592}{6} \lg \frac{[\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}]}{[\text{Cr}^{3+}]^2}$ $= E_{\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}/2\text{Cr}^{3+}}^{\circ} - 0,138\text{pH} + \frac{0,0592}{6} \lg \frac{[\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}]}{[\text{Cr}^{3+}]^2}$ <p>Đặt: $E'_{\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}/2\text{Cr}^{3+}} = E_{\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}/2\text{Cr}^{3+}}^{\circ} - 0,138\text{pH}$</p> <p>$\Rightarrow E'_{\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}/2\text{Cr}^{3+}}$ là thế điều kiện và phụ thuộc vào pH. pH càng giảm thì dung dịch càng có môi trường axit thì E' càng tăng, tính oxi hóa của $\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$ càng mạnh.</p> <ul style="list-style-type: none"> - Tại pH = 0, $[\text{H}^+] = 1\text{M}$ thì $E = E^{\circ} = 1,33\text{V}$ - Tại pH = 7 thì $E' = 0,364 < E_{\text{I}_2/2\text{I}^-}^{\circ} = 0,6197\text{V}$ nên không oxi hóa được I 	<p>0,5</p> <p>0,25</p> <p>0,25</p>
		2	$E_{\text{Co}(\text{OH})_3/\text{Co}(\text{OH})_2} = E_{\text{Co}(\text{OH})_3/\text{Co}(\text{OH})_2}^{\circ} + 0,0592 \lg \frac{1}{[\text{OH}^-]}$ <p>Thay $[\text{OH}^-] = \frac{K_w}{[\text{H}^+]}$ ta có:</p>

	$E_{\text{Co(OH)}_3/\text{Co(OH)}_2} = E_{\text{Co(OH)}_3/\text{Co(OH)}_2}^{\circ} + 0,0592 \lg \frac{[\text{H}^+]}{K_w}$ $= E_{\text{Co(OH)}_3/\text{Co(OH)}_2}^{\circ} + 0,0592 \lg [\text{H}^+] - 0,0592 \lg K_w \cdot \text{Thay } E_{\text{Co(OH)}_3/\text{Co(OH)}_2}^{\circ} = +0,17$ $= E_{\text{Co(OH)}_3/\text{Co(OH)}_2}^{\circ} - 0,0592 \text{pH} - 0,0592 \lg K_w \quad K_w = 10^{-14}$ $\Rightarrow E_{\text{Co(OH)}_3/\text{Co(OH)}_2} = 0,996 - 0,0592 \text{pH}$ <p>pH càng tăng thì E càng giảm nghĩa là tính oxi hóa của Co(OH)_3 giảm, tính khử của Co(OH)_2 tăng</p>	0,5																																			
		0,25																																			
		2.0																																			
3	<p>- Phản ứng động học bậc hai, áp dụng phương trình Archénius ta có:</p> $\ln k_1 = \frac{-E_A}{RT_1} + \ln A \quad ; \quad \ln k_2 = \frac{-E_A}{RT_2} + \ln A$ $\Rightarrow \ln k_2 - \ln k_1 = \frac{-E_A}{RT_2} + \ln A - \frac{-E_A}{RT_1} + \ln A$ $\Rightarrow \ln \frac{k_2}{k_1} = \frac{E_A}{R} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right)$ $\Rightarrow E_A = R \frac{T_2 \times T_1}{T_2 - T_1} \times \ln \frac{k_2}{k_1} \approx 3688,2 (\text{cal/mol})$ <p>- $k = A \times e^{\left(\frac{-E}{RT}\right)} \Rightarrow A = \frac{k}{e^{\left(\frac{-E}{RT}\right)}} = 7 \times 10^9 (\text{mol}^{-1} \cdot \text{s}^{-1})$</p>	0,5																																			
	2	$k_3 = A \times e^{\left(\frac{-E}{RT_3}\right)} = 6,15 \times 10^7 (\text{mol}^{-1} \cdot \text{s}^{-1})$	0,25																																		
	3	$\tau_{1/2} = \frac{1}{k_3 \cdot C_{\text{O}_A}} = 1,63 \times 10^{-7} (\text{s})$	0,25																																		
		1.5																																			
4	<p>Trong dung dịch NaCl có: $\text{NaCl} \rightarrow \text{Na}^+ + \text{Cl}^-$; $2\text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{H}_3\text{O}^+ + \text{OH}^-$</p> <p>Khi điện phân có thể có các quá trình sau xảy ra:</p> <table style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <tr> <td style="width: 15%;">Catode:</td> <td style="width: 55%;">$\text{Na}^+ + \text{Hg} + e \rightleftharpoons \text{Na(Hg)}$</td> <td style="width: 10%; text-align: center;"> </td> <td style="width: 10%; text-align: center;">$\times 1$</td> <td style="width: 10%; text-align: right;">(1)</td> </tr> <tr> <td></td> <td>$2\text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{H}_3\text{O}^+ + \text{OH}^-$</td> <td></td> <td style="text-align: center;">$\times 2$</td> <td></td> </tr> <tr> <td></td> <td>$2\text{H}_3\text{O}^+ + 2e \rightleftharpoons \text{H}_2 + 2\text{H}_2\text{O}$</td> <td></td> <td style="text-align: center;">$\times 1$</td> <td></td> </tr> <tr> <td colspan="5" style="border-top: 1px solid black;"></td> </tr> <tr> <td></td> <td>$2\text{H}_2\text{O} + 2e \rightleftharpoons \text{H}_2 + \text{OH}^-$</td> <td></td> <td></td> <td style="text-align: right;">(2)</td> </tr> <tr> <td>Anode:</td> <td>$6\text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{O}_2 + 4\text{H}_3\text{O}^+ + 4e$</td> <td></td> <td></td> <td style="text-align: right;">(3)</td> </tr> <tr> <td></td> <td>$2\text{Cl}^- \rightleftharpoons \text{Cl}_2 + 2e$</td> <td></td> <td></td> <td style="text-align: right;">(4)</td> </tr> </table>	Catode:	$\text{Na}^+ + \text{Hg} + e \rightleftharpoons \text{Na(Hg)}$		$\times 1$	(1)		$2\text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{H}_3\text{O}^+ + \text{OH}^-$		$\times 2$			$2\text{H}_3\text{O}^+ + 2e \rightleftharpoons \text{H}_2 + 2\text{H}_2\text{O}$		$\times 1$								$2\text{H}_2\text{O} + 2e \rightleftharpoons \text{H}_2 + \text{OH}^-$			(2)	Anode:	$6\text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{O}_2 + 4\text{H}_3\text{O}^+ + 4e$			(3)		$2\text{Cl}^- \rightleftharpoons \text{Cl}_2 + 2e$			(4)	4.0,125 = 0,5
	Catode:	$\text{Na}^+ + \text{Hg} + e \rightleftharpoons \text{Na(Hg)}$		$\times 1$	(1)																																
	$2\text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{H}_3\text{O}^+ + \text{OH}^-$		$\times 2$																																		
	$2\text{H}_3\text{O}^+ + 2e \rightleftharpoons \text{H}_2 + 2\text{H}_2\text{O}$		$\times 1$																																		
	$2\text{H}_2\text{O} + 2e \rightleftharpoons \text{H}_2 + \text{OH}^-$			(2)																																	
Anode:	$6\text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{O}_2 + 4\text{H}_3\text{O}^+ + 4e$			(3)																																	
	$2\text{Cl}^- \rightleftharpoons \text{Cl}_2 + 2e$			(4)																																	
1	$E_{\text{Na}^+/\text{Na(Hg)}} = -1,78\text{V}$, $E_{2\text{H}_3\text{O}^+/\text{H}_2} = 0,00\text{V} + 0,0592 \lg 10^{-7} = -0,413\text{V}$ $E'_{2\text{H}_3\text{O}^+/\text{H}_2} = E_{2\text{H}_3\text{O}^+/\text{H}_2}^{\circ} + \eta_{\text{H}_2} = -1,713$. Do $E'_{2\text{H}_3\text{O}^+/\text{H}_2} > E_{\text{Na}^+/\text{Na(Hg)}}^{\circ}$ nên khi mới bắt đầu điện phân, ở Katode quá trình (2) sẽ xảy ra, có H_2 thoát ở Anode Ở Anode: Từ (3) ta có: $E_{\text{O}_2/\text{H}_2\text{O}} = E_{\text{O}_2/\text{H}_2\text{O}}^{\circ} + 0,0592 \lg [\text{H}_3\text{O}^+] = 0,817\text{V}$; $E'_{\text{O}_2/\text{H}_2\text{O}} = E_{\text{O}_2/\text{H}_2\text{O}} + \eta_{\text{O}_2} = 1,617\text{V}$ Bởi vì: $E_{\text{Cl}_2/2\text{Cl}^-} < E'_{\text{O}_2/\text{H}_2\text{O}}$ nên ở Anode xảy ra quá trình (4) và có Cl_2 bay ra Phương trình điện phân: $2\text{Cl}^- + 2\text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{H}_2 + \text{Cl}_2 + 2\text{OH}^-$ Thế phân giải: $V = E'_A - E'_K = 3,053\text{V}$	0,25																																			
2	Sau một thời gian, do $[\text{OH}^-]$ tăng nên pH cũng tăng. Khi pH = 11, phản ứng điện phân xảy ra như sau:																																				

		<p>Tại Catode: $[H^+] = 10^{-11}$. $E_{2H_3O^+/H_2} = -0,649V$; $E'_{2H_3O^+/H_2} = -1,949V > E_{Na^+/Na}^0$ nên ở Anode có quá trình (1) xảy ra</p> <p>Tại Anode: $E_{O_2/H_2O} = E_{O_2/H_2O}^0 + 0,0592 \lg[H_3O^+] = 0,581V$; $E'_{O_2/H_2O} = 1,381V$</p> <p>Do $E_{Cl_2/2Cl^-} < E'_{O_2/H_2O}$ nên ở Anode vẫn có Cl_2 bay ra</p> <p>Phương trình điện phân: $2Na^+ + 2Cl^- + 2Hg \rightarrow Cl_2 + 2Na(Hg)$</p> <p>Thế phân giải: $V = E'_A - E'_K = 3,12V$</p>	0,25 0,25 0,25 0,25
			2.5
5	1	Độ dài cạnh a của ô mạng cơ sở của sắt α là: $a = \frac{4r}{\sqrt{3}} = \frac{4 \times 1,24}{\sqrt{3}} = 2,86 \text{ \AA}$	0,25
	2.	Khi sắt α có chứa cacbon, độ tăng chiều dài cạnh a của ô mạng cơ sở là: $\Delta = 2 \times (r_{Fe-\alpha} + r_C) - a = 2(1,24 + 0,77) - 2,86 = 1,16 \text{ \AA}$	0,25
	3	Độ dài cạnh a của ô mạng cơ sở của sắt γ là: $a = \frac{4r}{\sqrt{2}} = \frac{4 \times 1,26}{\sqrt{2}} = 3,56 \text{ \AA}$ Khi sắt γ có chứa cacbon, độ tăng chiều dài cạnh a của ô mạng cơ sở là: $\Delta = 2 \times (r_{Fe-\gamma} + r_C) - a = 2(1,26 + 0,77) - 3,56 = 0,5 \text{ \AA}$ Kết luận: Khả năng xâm nhập của cacbon vào sắt α khó hơn vào sắt γ , do có độ hòa tan của C trong sắt α nhỏ hơn trong sắt γ	0,25 0,25 0,5
			1.5
6	1	<p>Đặt CTPT của A là: $Pt_xCl_y(NH_3)_z(H_2O)_t$. Vì phức chất A là phức 1 nhân nên phân tử khối của A: $M_A = \frac{M_{Pt} \times 100\%}{\%Pt} = \frac{195 \times 100}{64,78} = 301(g/mol)$. Từ % của các thành phần có trong A $\Rightarrow x = 1, y = 2, z = 1, t = 1 \Rightarrow$ CTPT là: $PtCl_2(NH_3)(H_2O)$</p> <p>CTCT 2 đồng phân cis, trans:</p> <div style="display: flex; justify-content: space-around; align-items: center;"> <div style="text-align: center;">  <p>Cis</p> </div> <div style="text-align: center;">  <p>Trans</p> </div> </div>	0,125.2 = 0,25
	2	<p>Xét phản ứng chuyển hóa:</p> <p style="text-align: center;">Cis Trans</p> <p>Cân bằng: $10^{-2} - x$ x</p> <p>$\Delta G_{298K}^0 = -402 + 396 = -6kJ = -6000J$; $K = e^{\frac{6000}{8,314 \times 298}} = 11,27$</p>	0,5
	3	<p>Xét phản ứng chuyển hóa:</p> <p style="text-align: center;">Cis Trans $K = 11,27$</p> <p>Cân bằng: $10^{-2} - x$ x</p> <p>$K = \frac{[trans]}{[cis]} = \frac{x}{10^{-2} - x} = 11,27 \Rightarrow x = [trans] = 9,2 \times 10^{-3} \Rightarrow [cis] = 8 \times 10^{-4}$</p>	0,25.2 = 0,5
			1.5
7	1	Do trong môi trường đệm $[H_3O^+] = const$ nên biểu thức tốc độ phản ứng là: $v = k[NO_2, NH_2]$ là phản ứng bậc nhất theo thời gian	0,5

	2	<p>- Cơ chế 1: $v = k_1[\text{NO}_2\text{NH}_2] \Rightarrow$ loại</p> <p>- Cơ chế 2: $v = k_3[\text{NO}_2\text{NH}_3^+]$</p> <p>Mà: $[\text{NO}_2\text{NH}_3^+] = k_2 \frac{[\text{NO}_2\text{NH}_2][\text{H}_3\text{O}^+]}{[\text{H}_2\text{O}]}$</p> <p>Vậy: $v = k_3k_2 \frac{[\text{NO}_2\text{NH}_2][\text{H}_3\text{O}^+]}{[\text{H}_2\text{O}]} \Rightarrow$ loại</p> <p>- Cơ chế 3: $v = k_5[\text{NO}_2\text{NH}^-]$</p> <p>Mà: $[\text{NO}_2\text{NH}^-] = k_4 \frac{[\text{NO}_2\text{NH}_2][\text{H}_2\text{O}]}{[\text{H}_3\text{O}^+]}$</p> <p>Vậy: $v = k_5k_4 \frac{[\text{NO}_2\text{NH}_2][\text{H}_2\text{O}]}{[\text{H}_3\text{O}^+]}$</p> <p>Trong môi trường dung dịch nước $[\text{H}_2\text{O}] = \text{const}$. Chọn cơ chế 3</p>	<p>0,25</p> <p>0,25</p> <p>0,25</p> <p>0,25</p> <p>0,5</p>
			2.0
	1	<p>- Hợp chất A_xB_y là một muối. Khi bị thủy phân cho thoát ra H_2S.</p> <p>- Hợp chất A_nC_m là Al_2O_3 nhôm oxit</p> <p>- Vậy A là Al nhôm, B là S lưu huỳnh, C là O oxit</p> <p>- Hợp chất $\text{A}_o\text{B}_p\text{C}_q$ là $\text{Al}_2(\text{SO}_4)_3$ nhôm sunfat</p> <p>$2 \text{ Al} + 3 \text{ S} \rightarrow \text{Al}_2\text{S}_3$</p> <p>$\text{Al}_2\text{S}_3 + 6 \text{ H}_2\text{O} \rightarrow 2 \text{ Al}(\text{OH})_3 + 3 \text{ H}_2\text{S}$</p> <p>$4 \text{ Al} + 3 \text{ O}_2 \rightarrow 2 \text{ Al}_2\text{O}_3$</p> <p>$\text{S} + \text{O}_2 \rightarrow \text{SO}_2$</p> <p>$\text{Al}^{3+} + 2 \text{ H}_2\text{O} \rightarrow \text{Al}(\text{OH})^{2+} + \text{H}_3\text{O}^+$</p>	<p>5 chất</p> <p>0,125.5 = 0,625</p> <p>5 pt</p> <p>0,125.5 = 0,625</p>
8	2	<p>Số mol nguyên tử S trong 3,2 gam lưu huỳnh: $n_s = \frac{3,2}{32} = 0,1 \text{ mol}$</p> <p>Dùng công thức: $n = \frac{PV}{RT}$ tính được số mol các phân tử lưu huỳnh ở trạng thái hơi tại các nhiệt độ :</p> <p>* $444,6^\circ\text{C}$: $n_1 = 0,0125 \text{ mol}$ gồm các phân tử S_8 vì $0,0125 \times 8 = 0,1 \text{ mol}$</p> <p>* 450°C: $n_2 = 0,015 \text{ mol}$, số nguyên tử S trung bình trong 1 phân tử: $\frac{0,1}{0,015} \approx 6,67$</p> <p>$\Rightarrow$ Thành phần hơi lưu huỳnh ở nhiệt độ này có thể gồm các phân tử lưu huỳnh có từ 1 đến 8 nguyên tử.</p> <p>* 500°C: $n_3 = 0,02 \text{ mol}$, số nguyên tử S trung bình trong 1 phân tử: $\frac{0,1}{0,02} = 5$</p> <p>\Rightarrow Thành phần hơi lưu huỳnh ở nhiệt độ này có thể gồm các phân tử lưu huỳnh có từ 1 đến 8 nguyên tử hoặc chỉ gồm các phân tử S_5.</p> <p>* 900°C: $n_4 = 0,05 \text{ mol}$, số nguyên tử S trung bình trong 1 phân tử: $\frac{0,1}{0,05} = 2$</p> <p>\Rightarrow Thành phần hơi lưu huỳnh ở nhiệt độ này có thể gồm các phân tử lưu huỳnh có từ 1 đến 8 nguyên tử hoặc chỉ gồm các phân tử S_2.</p> <p>* 1500°C: $n_5 = 0,1 \text{ mol}$: Hơi lưu huỳnh chỉ gồm các nguyên tử S.</p>	<p>0,25</p> <p>0,25</p> <p>0,25</p> <p>0,25</p> <p>0,25</p> <p>0,25</p> <p>0,25</p>
			3.0
9		<p>Năng lượng của một electron ở phân lớp l có số lượng tử chính hiệu dụng n^* được tính theo biểu thức Slater:</p> <p>$\epsilon_l = -13,6 \times (Z - b)^2 / n^{*2}$ (theo eV)</p>	0,25

	<p>Hằng số chắn b và số lượng tử n* được tính theo quy tắc Slater. Áp dụng cho Ni²⁺ (Z=28, có 26e) ta có: <u>Với cách viết 1 [Ar]3d⁸:</u> $\epsilon_{1s} = -13,6 \times (28 - 0,3)^2/1^2 = -10435,1 \text{ eV}$ $\epsilon_{2s,2p} = -13,6 \times (28 - 0,85 \times 2 - 0,35 \times 7)^2/2^2 = -1934,0 \text{ eV}$ $\epsilon_{3s,3p} = -13,6 \times (28 - 1 \times 2 - 0,85 \times 8 - 0,35 \times 7)^2/3^2 = -424,0 \text{ eV}$ $\epsilon_{3d} = -13,6 \times (28 - 1 \times 18 - 0,35 \times 5)^2/3^2 = -86,1 \text{ eV}$ $E_1 = 2\epsilon_{1s} + 8\epsilon_{2s,2p} + 8\epsilon_{3s,3p} + 8\epsilon_{3d} = -40423,2 \text{ eV}$ <u>Với cách viết 2 [Ar]sd⁶4s²:</u> $\epsilon_{1s}, \epsilon_{2s,2p}, \epsilon_{3s,3p}$ có kết quả như trên. Ngoài ra: $\epsilon_{3d} = -13,6 \times (28 - 1 \times 18 - 0,35 \times 5)^2/3^2 = -102,9 \text{ eV}$ $\epsilon_{4s} = -13,6 \times (28 - 1 \times 10 - 0,85 \times 14 - 0,35)^2/4^2 = -32,8 \text{ eV}$ Do đó $E_2 = -40417,2 \text{ eV}$. E₁ thấp (âm) hơn E₂, do đó cách viết 1 ứng với trạng thái bền hơn. Kết quả thu được phù hợp với thực tế là ở trạng thái cơ bản ion Ni²⁺ có cấu hình electron [Ar]3d⁸.</p>	<p>0,125.5 = 0,625 0,125.3 = 0,375 0,25</p>
<p>1</p>	<p>- t = 48 h = 2 ngày đêm. - Áp dụng biểu thức tốc độ của phản ứng một chiều bậc một cho phản ứng phóng xạ, ta có: $\lambda = 0,693/t_{1/2}$; Với $t_{1/2} = 2,7$ ngày đêm, $\lambda = 0,257 \text{ (ngày đêm)}^{-1}$. Từ pt động học p, r một chiều bậc nhất, ta có: $\lambda = (1/t) \ln N_0/N$. Vậy: $N/N_0 = e^{-\lambda t} = e^{-0,257 \times 2} = 0,598$. Như vậy, sau 48 giờ độ phóng xạ của mẫu ban đầu còn: $0,598 \times 4 = 2,392 \text{ (mCi)}$. Do đó số gam dung môi trơ cần dùng là: $(2,392 : 0,5) - 1,0 = 3,784 \text{ (g)}$</p>	<p>1,5 0,25 0,25 0,25 0,25</p>
<p>10</p>	<p>Phân thể tích bị chiếm bởi các nguyên tử trong mạng tinh thể cũng chính là phân thể tích mà các nguyên tử chiếm trong một tế bào đơn vị (ô mạng cơ sở). - <u>Đối với mạng đơn giản:</u> + Số nguyên tử trong 1 tế bào: $n = 8 \times 1/8 = 1$ + Gọi r là bán kính của nguyên tử kim loại, thể tích V₁ của 1 nguyên tử kim loại: $V_1 = 4/3 \times \pi r^3 \quad (1)$ + Gọi a là cạnh của tế bào, thể tích của tế bào là: $V_2 = a^3 \quad (2)$ Trong tế bào mạng đơn giản, tương quan giữa r và a được thể hiện trên hình sau:  hay $a = 2r \quad (3)$. Thay (3) vào (2) ta có: $V_2 = a^3 = 8r^3 \quad (4)$ Phần thể tích bị chiếm bởi các nguyên tử trong tế bào là: $V_1/V_2 = 4/3 \pi r^3 : 8r^3 = \pi/6 = 0,5236$ <u>Đối với mạng tâm khối:</u> + Số nguyên tử trong 1 tế bào: $n = 8 \times 1/8 + 1 = 2$. Do đó $V_1 = 2 \times (4/3) \pi r^3$. + Trong tế bào mạng tâm khối quan hệ giữa r và a được thể hiện trên hình sau: </p>	<p>0,5</p>

	<p>Do đó: $d = a\sqrt{3} = 4r. \Rightarrow ra \ a = 4r/\sqrt{3}$ Thể tích của tế bào: $V_2 = a^3 = 64r^3/3\sqrt{3}$ Do đó phần thể tích bị chiếm bởi các nguyên tử trong tế bào là: $V_1 : V_2 = 8/3 \pi r^3 : 64r^3/3\sqrt{3} = 0,68$ <p><u>Đối với mạng tâm diện:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> + Số nguyên tử trong 1 tế bào: $n = 8 \times 1/8 + 6 \times 1/2 = 4$. Do đó thể tích của các nguyên tử trong tế bào là: $V_1 = 4 \times 4/3 \pi r^3$ + Trong tế bào mạng tâm diện quan hệ giữa bán kính nguyên tử r và cạnh a của tế bào được biểu diễn trên hình sau:  <p>Từ đó ta có: $d = a\sqrt{2} = 4r$, do đó $a = 4r/\sqrt{2}$ Thể tích của tế bào: $V_2 = a^3 = 64r^3/2\sqrt{2}$ Phần thể tích bị các nguyên tử chiếm trong tế bào là: $V_1/V_2 = 16/3 \pi r^3 : 64r^3/2\sqrt{2} = 0,74$ Như vậy tỉ lệ phần thể tích bị chiếm bởi các nguyên tử trong 1 tế bào của các mạng đơn giản, tâm khối và tâm diện tỉ lệ với nhau như $0,52 : 0,68 : 0,74 = 1 : 1,31 : 1,42$.</p> </p>	<p>0,5</p> <p>0,5</p> <p>2.5</p>
--	--	---

HÓA HỌC: NGHỆ THUẬT, KHOA HỌC VÀ NHỮNG BẤT NGỜ THÚ VỊ

