

HỆ THỐNG TUẦN HOÀN CÁC NGUYÊN TỐ HÓA HỌC

A- TÓM TẮT LÝ THUYẾT

1. Nguyên tắc sắp xếp

- Các nguyên tố được sắp xếp theo chiều tăng dần của số điện tích hạt nhân Z.

- Các nguyên tố có cùng số electron trong nguyên tử được xếp thành một hàng gọi là chu kỳ (bảy chu kỳ gồm ba chu kỳ ngắn, bốn dài).

- n (số lớp electron) trùng với số thứ tự chu kỳ.

- Nói chung các nguyên tố có số electron ngoài cùng bằng nhau được xếp vào cùng một cột gọi là nhóm. (8 nhóm chia thành 8 nhóm A và 8 nhóm B).

- Nhóm A gồm các nguyên tố thuộc chu kỳ ngắn và dài. Số electron hóa trị lớp ngoài cùng của nhóm A bằng số thứ tự của nhóm.

- Nhóm B chỉ gồm các nguyên tố của chu kỳ dài. Nguyên tố của nhóm IB và IIB có số electron ngoài cùng bằng số thứ tự của nhóm.

Số thứ tự của nhóm B còn lại bằng số electron ngoài cùng cộng electron d kế cận.

- Các electron hóa trị quyết định tính chất hóa học của các nguyên tố.

2. Sự biến thiên tuần hoàn tính chất của các nguyên tố

- Chu kỳ bắt đầu bằng một kim loại kiềm và kết thúc bằng một khí trơ (trừ chu kỳ 1).

- Phía trái của bảng là các nguyên tố kim loại, phía phải là các nguyên tố phi kim.

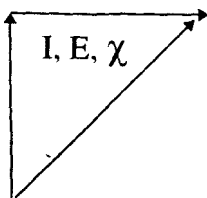
- Thế ion hóa I: $M - e \rightarrow M^+$.

- Ái lực với electron E: $X + e \rightarrow X^-$.

- Độ âm điện χ được định nghĩa theo Milliken.

$$\chi = \frac{1}{2}(I + E)$$

- Sự biến thiên của I; E; χ trong bảng tuần hoàn theo sơ đồ sau:



Một trong các cách xác định độ âm điện theo thang Pauling bằng biểu thức:

$$\chi_A - \chi_B = k \cdot \sqrt{\Delta_{AB}}$$

$$\Delta_{AB} = E_{D(AB)} - \sqrt{E_{D(A-A)} \cdot E_{D(B-B)}}$$

$\chi_A - \chi_B$ - Độ âm điện của nguyên tố A, B (A - B).

$E_{D(AB)}$ - Năng lượng phân ly của A - B.

$E_{D(A-A)}$; $E_{D(B-B)}$ - Năng lượng phân ly của A-A, B-B

k- hệ số tỷ lệ.

Nếu đơn vị tính là $\text{Cal} \cdot \text{mol}^{-1}$ thì $k = 0,208$

Nếu đơn vị tính là $\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}$ thì $k = 0,102$

Trong phép tính lấy $\chi_{\text{H}} = 2,1$

B- BÀI TẬP CÓ LỜI GIẢI

XII.1. a) Trong số các nguyên tố dưới đây, hãy cho biết những nguyên tố nào thuộc cùng một chu kỳ hoặc cùng một nhóm của bảng tuần hoàn.

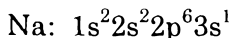
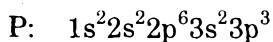
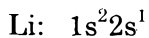
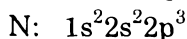
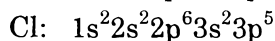
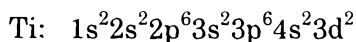
Ti($Z = 22$); Cl($Z = 17$); N($Z = 7$); Zn($Z = 30$); Li($Z = 3$); P($Z = 15$); Na($Z = 11$).

b) Cho một nguyên tố X thuộc chu kỳ 4 và ở cùng nhóm với nguyên tố Silic ($Z = 14$).

Hãy viết cấu hình electron rồi suy ra số thứ tự Z của X.

BÀI GIẢI

a) Trước hết, ta viết cấu hình electron của các nguyên tố



Ta lại biết số thứ tự của chu kỳ bằng số lượng tử chính n .
Căn cứ vào cấu hình electron ta suy ra các nguyên tố sau ở cùng một chu kỳ:

Li và Na: chu kỳ 2 ($n = 2$)

Na; P và Cl: chu kỳ 3 ($n = 3$)

Ti và Zn: chu kỳ 4 ($n = 4$).

Các nguyên tố cùng một nhóm khi số electron ở lớp ngoài cùng như nhau. Vậy ta có:

Li và Na: thuộc nhóm IA($n - 1$) đã bão hòa ns^1 .

N và P: thuộc nhóm IIIA($n - 1$) đã bão hòa ns^2np^3 .

b) Si: $1s^22s^22p^63s^23p^2$.

$\Rightarrow Z_x = 32$ đó là nguyên tố Gecmani.

XII.2. Tính độ âm điện cho nguyên tử của các nguyên tố halogen: F; Cl; Br; I. Biết:

Hợp chất	H ₂	F ₂	Cl ₂	Br ₂	I ₂	HF	HCl	HBr	HI
E_D (kcal/mol)	104,2	37,5	58	46,1	36,1	135	103,1	87,4	71,1

Cho: $\chi_H = 2,20$

BÀI GIẢI

Áp dụng công thức: $\chi_A - \chi_B = 0,208 \sqrt{\Delta_{AB}}$

$$\Delta_{AB} = E_{D(AB)} - \sqrt{E_{D(AA)} \cdot E_{D(BB)}}$$

Thay các giá trị bằng số vào các công thức trên ta thu được kết quả ở bảng dưới đây:

Nguyên tố	F	Cl	Br	I
Δ_{AB}	62,51	77,74	12,3	1,24
$0,208 \sqrt{\Delta_{AB}}$	1,77	1,83	0,73	0,23
χ_A	$3,99 \approx 4$	3,52	2,93	2,43

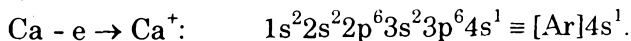
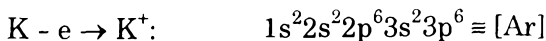
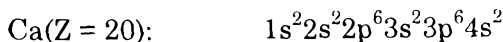
XII.3. a) Biết thế năng ion hóa thứ nhất (I_1) của K($Z = 19$) nhỏ hơn so với Ca($Z = 20$); Ngược lại thế năng ion hóa thứ hai (I_2 của K lại lớn hơn Ca). Hãy giải thích tại sao lại có sự ngược nhau đó.

b) Hãy so sánh bán kính nguyên tử và bán kính ion cho các trường hợp sau:

+ O(Z = 8) và ion hóa của nó.

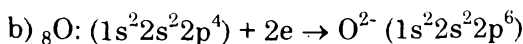
+ Mg(Z = 12) và ion hóa của nó.

BÀI GIẢI

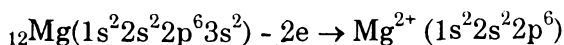
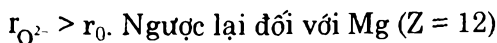


Rõ ràng khi mất một e⁻ thì K⁺ có cấu hình electron của khí trơ - Argon, còn Ca⁺ có cấu hình [Ar]4s¹.

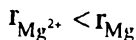
Để có thể ion hóa thứ hai, nghĩa là phải bứt tiếp electron thì trong trường hợp này năng lượng cần thiết để làm điều đó đối với Ca tiêu tốn ít hơn so với việc bứt e của K⁺ có cấu hình bền vững của khí trơ; Vì vậy: I₂ của K > Ca.



Nghĩa là oxi nhận thêm số electron vào sẽ dẫn tới:



Rõ ràng là ở Mg²⁺ mất 2e ở phân lớp 3s sẽ dẫn tới:



XII.4. Cho phân tử MX₂ với tổng số các hạt là 186. Hợp chất ion này được cấu tạo từ ion M²⁺ và X⁻ có đặc tính sau:

- Trong tổng số các hạt của phân tử thì số hạt mang điện nhiều hơn số hạt không mang điện là 54 hạt.

- Số khối của ion M^{2+} lớn hơn số khối của ion X^- là 21

- Tổng số hạt trong ion M^{2+} nhiều hơn trong ion X^- là 27 hạt

1) Hãy viết cấu hình electron của các ion M^{2+} và X^-

2) Xác định số thứ tự, số chu kỳ, số nhóm (A hoặc B) của M và X trong bảng tuần hoàn.

BÀI GIẢI

1) Gọi số hạt proton, electron, nơtron trong nguyên tử M và X lần lượt là: p, e, n; p', e', n'. Theo đầu bài ta có các phương trình sau:

Tổng số hạt trong MX_2 :

$$2p + 4p' + n + 2n' = 186 \quad (1)$$

Tổng số hạt mang điện nhiều hơn số hạt không mang điện:

$$2p + 4p' - (n + 2n') = 54 \quad (2)$$

Số khối của ion M^{2+} lớn hơn số khối của X^- là:

$$(p - p') + (n - n') = 21 \quad (3)$$

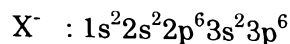
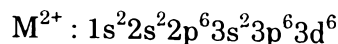
Tổng số hạt trong ion M^{2+} nhiều hơn trong X^- là:

$$2(p - p') + (n - n') = 30 \quad (4)$$

Từ 4 phương trình trên ta giải ra sẽ có

$$p = 26, n = 30 \text{ và } p' = 17, n' = 18$$

Vậy cấu hình electron của:



2) Với cấu hình electron vừa tìm được cho M^{2+} và X^- ta có thể xác định ngay số thứ tự của M chính là: $p = z = 26$ (ô 26) và X là $p' = z' = 17$ (ô 17). Cấu hình electron:

M: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^6 4s^2$; nguyên tử M thuộc chu kỳ 4, VIII B

X: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$; nguyên tử X thuộc chu kỳ 3 nhóm VII A.

XII. 5. Tổng số các hạt của một nguyên tố X bằng 108:

a) Cho biết nguyên tố X thuộc chu kỳ bao nhiêu trong bảng tuần hoàn.

b) Xác định vị trí của X, biết rằng X ở nhóm VA.

Biết nguyên tố X có $Z < 82$.

BÀI GIẢI

a) Theo đầu bài ta viết: $S = p + e + n = 2p + n = 108$.

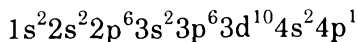
Mặt khác, theo điều đã chứng minh ở bài tập số I.5 chương I ta có:

$$1 \leq \frac{n}{p} < 1,524 \text{ hay } \frac{s}{3,524} < p \leq \frac{s}{3}$$

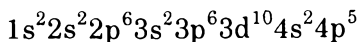
$$\text{Suy ra : } \frac{108}{3,524} < p \leq \frac{108}{3} \Rightarrow 30,65 < p \leq 36$$

Vậ p nhận các giá trị từ 31 đến 35

Giả thiết $p = 31 \Rightarrow Z = 31$ thì cấu hình electron là:



Hoặc $p = 35 \Rightarrow Z = 35$ thì cấu hình electron là:



Từ các cấu hình này ta khẳng định nguyên tố X thuộc chu kỳ 4.

b) Mặt khác ta biết nguyên tố X ở nhóm VA nên số e ngoài cùng là: 5. Vậy cấu hình của nó sẽ là:

$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^3$. Từ đó suy ra Z của X là 33.

C- BÀI TẬP TỰ GIẢI

XII.6. a) Hãy cho biết cấu hình electron của một nguyên tố chuyển tiếp, biết rằng nguyên tố này có 3 electron ở phân lớp d và thuộc chu kỳ 4 của bảng tuần hoàn.

b) Nitơ ($Z = 7$) đã biết cấu hình electron và nằm ở chu kỳ 2 của bảng tuần hoàn.

Hãy xác định số thứ tự (hạt nhân Z) và viết cấu hình electron của nguyên tố Arsen biết rằng nguyên tố này nằm cùng nhóm với nitơ và thuộc chu kỳ 4.

Đáp số: a) $Z_x = 23$

b) $Z_{As} = 33$

XII.7. Người ta nhận thấy ở cấu hình electron của nguyên tố A có phân lớp ngoài cùng là 3p. Nguyên tố B cũng có phân lớp 3p trong cấu hình của mình và ở phân lớp tiếp theo có 2 electron. Hai phân lớp 3p của A và B khác nhau một electron. Hãy xác định số thứ tự nguyên tố của A và B và cho biết nguyên tố nào là kim loại. Là khí trơ. Hoặc là phi kim.

Đáp số: a) $Z_A = 17$ là nguyên tố phi kim

b) $Z_B = 20$ là nguyên tố kim loại.

XII.8. Biết tổng số hạt proton trong 2 hạt nhân của các nguyên tố X và Y là 32. Hãy xác định số thứ tự Z của X và Y, biết

rằng 2 nguyên tố này ở cùng một nhóm (A hoặc B) và thuộc 2 chu kỳ liên tiếp trong bảng tuần hoàn.

Đáp số: a) $Z_X = 12$ thuộc chu kỳ 2, nhóm IIA

b) $Z_Y = 20$ thuộc chu kỳ 3, nhóm IIA

XII.9. a) Hãy viết cấu hình electron của các nguyên tố với $Z \leq 18$ và có 1 electron độc thân ở trạng thái cơ bản.

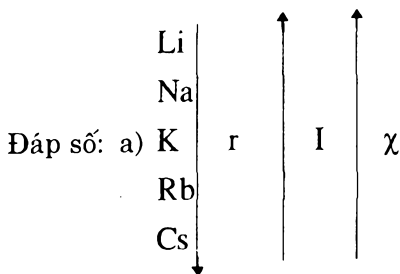
b) Dựa vào cấu hình electron của Na ($Z = 11$), hãy xác định số thứ tự nguyên tử của nguyên tố X, biết rằng nguyên tố này cùng chu kỳ với Na và cùng nhóm với Indi (${}_{49}\text{In}$).

Đáp số: a) Có 6 nguyên tố

b) $Z_X = 13$

XII.10. a) Dựa vào sự biến đổi tuần hoàn tính chất của các nguyên tố trong bảng tuần hoàn hãy đoán nhận sự biến thiên của một số tính chất vật lý quan trọng (I, E, χ) đối với họ kim loại kiềm (Li, Na, K, Rb, Cs) ns^1 .

b) Căn cứ vào cấu hình electron của khí trơ Ne ($Z = 10$) hãy lấy 6 ví dụ khác nhau cho các ion có cấu hình giống với cấu hình electron của Ne.



b) Các ion dương: Na^+ ; Mg^{2+} ; Al^{3+} .

Các ion âm: F^- ; O^{2-} ; N^{3-} .

XII.11. a) Giải thích tại sao chì $Pb(Z = 82)$ và cacbon cùng thuộc về một nhóm trong bảng tuần hoàn mà Pb là kim loại còn C lại là á kim.

b) Trong số các nguyên tố thuộc chu kỳ 4 của bảng tuần hoàn ($19 \leq Z \leq 36$) thì nguyên tố nào có cấu hình electron ở trạng thái cơ bản thỏa mãn điều kiện ứng với 2 electron độc thân.

Đáp số: b) có 4 nguyên tố với Z : 22; 28; 32; 34

XII.12. a) Giải thích tại sao nguyên tố kẽm $Zn(Z = 30)$ và $Ca(Z = 20)$ có cùng cấu hình electron lớp ngoài cùng như nhau nhưng lại không thuộc cùng một phân nhóm.

b) Hãy xác định số thứ tự Z của một nguyên tố X biết rằng nguyên tố này chiếm 1 ô cùng với chu kỳ của $Li(Z = 3)$ và cùng nhóm với thiếc $Sn(Z = 50)$.

Đáp số: a) Zn có phân lớp $3d^{10}$ là nguyên tố chuyển tiếp

Ca có phân lớp $4s^2$ thuộc nguyên tố s.

b) $Z_x = 6$

XII.13. Cho các nguyên tố với giá trị Z sau đây: $He(Z = 2)$; $H(Z = 1)$; $Li(Z = 3)$; $O(Z = 8)$; $F(Z = 9)$; $Na(Z = 11)$; $Rb(Z = 37)$. Căn cứ vào quy luật biến thiên tuần hoàn của độ âm điện trong bảng tuần hoàn hãy gán các giá trị χ cho từng nguyên tố kể trên và xếp chúng theo chu kỳ và nhóm χ : 0,8; 4,0; 0,9; 2,1; 1,0; 3,5; 3,0 biết $\chi_F = 4,0$

XII.14. 1/ Cho các nguyên tố sau đây: Cl ; Al ; Na ; P , căn cứ vào sự biến thiên tính chất của các nguyên tố trong một chu kỳ và trong 1 nhóm của bảng tuần hoàn.

a) Hãy sắp xếp theo thứ tự tăng dần của bán kính nguyên tử đối với các nguyên tố trên.

b) Cho biết thứ tự tăng dần về độ âm điện χ của các nguyên tố khảo sát nói trên.

2/ Căn cứ vào cấu hình electron của Na^+ ($Z=11$) và Ne ($Z=10$), hãy so sánh bán kính của chúng.

Đáp số: 1) a) $r: \text{Na} > \text{Al} > \text{P} > \text{Cl}$

b) $\chi: \text{Na} < \text{Al} < \text{P} < \text{Cl}$

2) $r_{\text{Na}^+} < r_{\text{Ne}}$

XII.15. a) Viết cấu hình electron ở trạng thái cơ bản cho các nguyên tố sau: Mg ($Z=12$); Ca ($Z=20$); Sr ($Z=38$); Zn ($Z=30$); Cd ($Z=48$).

b) Cho các giá trị thế ion hóa thứ nhất (đơn vị kJ/mol). Căn cứ vào quy luật biến thiên đại lượng I_1 trong bảng tuần hoàn, hãy gán các giá trị ấy cho các nguyên tố ở câu hỏi a) $I_1(\text{kJ/mol})$: 548; 585; 736; 903.

c) Người ta biết rằng Sr ($Z=38$) khi mất $2e$ sẽ có cấu hình electron bền vững; trong khi đó nguyên tử Fe ($Z=26$) lại cho 2 dạng cấu hình electron bền vững khi mất electron. Hãy viết cấu hình electron cho 3 trường hợp trên và chỉ rõ số electron độc thân cho từng trường hợp.

Đáp số: a) Tự viết

b) Tự sắp xếp.

c) Số electron độc thân lần lượt là: 0, 4 và 5.

XII.16. Hai nguyên tố X và Y tạo thành một hợp chất XY_2 có đặc điểm:

- Tổng số proton của hợp chất bằng 32 hạt

- Hiệu số nơtron của X và Y bằng 8 hạt

X, Y đều có số proton bằng số nơtron trong nguyên tử. Hãy xác định nguyên tố X và Y.

Đáp số: SO_2

XII.17. Ba nguyên tố A, B, C ở ba chu kỳ sát nhau và ở cùng một phân nhóm chính có tổng số điện tích hạt nhân là 70, trong đó $Z_A > Z_B > Z_C$. Hãy xác định ba nguyên tố này.

Đáp số: A là Sr; B là Ca; C là Mg.

XII.18. Một nguyên tố X có $Z < 36$. Cấu hình electron ở trạng thái cơ bản của nguyên tố này có 5 electron độc thân. Hãy cho biết đó là nguyên tử hay ion nào. Dự đoán tính chất của X.

Đáp số: Nguyên tử Mn
ion Fe^{3+} và Mn^{2+}

XII.19. Có 2 ion XY_m^{2-} và XY_n^{2-} . Tổng số electron trong 2 ion này lần lượt bằng 42 và 50. Hạt nhân nguyên tử của X và Y đều có số proton và nơtron bằng nhau.

Hãy xác định điện tích hạt nhân và số khối của X và Y.

Đáp số: X là ${}_{16}^{32}\text{S}$
Y là ${}_{8}^{16}\text{O}$

CÁC KHÁI NIỆM CHUNG VỀ LIÊN KẾT. THUYẾT VB

A- TÓM TẮT LÝ THUYẾT

1. Những vấn đề chung

- Phân tử được hình thành là do có các liên kết hóa học.
- Thuyết Lewis: đôi với các hợp chất phi ion, liên kết cộng hóa trị được hình thành là do một hay nhiều đôi electron góp chung.
- Một số dạng liên kết chính.

		Ví dụ	Đặc điểm liên kết
Liên kết cộng hóa trị	Không phân cực	Cl : Cl	đôi e ⁻ nằm giữa hai nguyên tử
	Phân cực	H : Cl	đôi e ⁻ lệch về phía nguyên tử có χ lớn
	Cho nhận (liên kết phối trí)	$\overset{\text{NH}_3}{\text{H}_3\text{N}} \rightarrow \text{:H}^+$	đôi e ⁻ chỉ do một nguyên tử đơn phương cung cấp
Liên kết ion		Na ⁺ Cl ⁻	e ⁻ chuyển hẳn về một nguyên tử trong phân tử tạo thành các ion

- Liên kết cộng hóa trị được đặc trưng bằng nhiều đại lượng khác nhau.

+ Năng lượng liên kết được tính dựa trên định luật Hess của nhiệt hóa học bằng các phương pháp khác. Năng lượng liên kết càng lớn thì độ dài liên kết càng nhỏ, phân tử càng bền vững.

+ Giá trị momen lưỡng cực đặc trưng cho khả năng phân cực của phân tử và được xác định bằng biểu thức $\bar{\mu} = e \cdot \bar{l}$

e - điện tích; l - độ dài liên kết

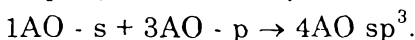
$$1D(\text{debye}) = 3,33 \cdot 10^{-30} \text{ C.m}$$

$$\left[\begin{array}{l} \text{Điện tích} \\ \text{hình thức} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{l} \text{Tổng số e} \\ \text{hoá trị ng.tử} \end{array} \right] - \left[\begin{array}{l} \text{Tổng số e} \\ \text{tự do} \end{array} + \begin{array}{l} \text{Tổng số liên kết} \\ \text{theo Lewis} \end{array} \right]$$

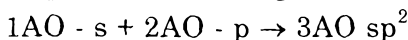
$$\text{hay theo ký hiệu: FC} = \sum \text{VE} - [\sum \text{FE} + \sum \text{NB}]$$

2. Lý thuyết VB về lai hóa các orbital nguyên tử

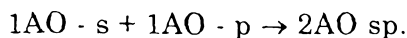
a) Lai hóa sp^3 . (Lai hóa tứ diện)



b) Lai hóa sp^2 (Lai hóa tam giác)



c) Lai hóa sp (Lai hóa thẳng)



Ngoài ra còn có các loại lai hóa khác như d^2sp^3 , sp^3d^2 .

3. Thuyết sức đẩy các cặp electron hóa trị theo Gillespie (VSEPR)

Đây là thuyết gần đúng dựa trên mô hình cặp electron định cư để mô tả dạng hình học của phân tử.

Dạng chung của phân tử: AX_nE_m

A- Nguyên tử trung tâm có các e⁻ hóa trị tạo liên kết

X- Các phối tử tạo liên kết σ với A

n - số cặp electron tạo thành liên kết σ

E - Cặp electron không phân chia.

m - số cặp electron không phân chia.

Trong phân tử trên thì nguyên tử trung tâm A được bao bọc bởi tổng số các cặp electron hóa trị $p = n + m$ hầu như không tương đương với nhau sẽ dẫn tới sự đẩy giữa các cặp theo thứ tự sau:

Hướng ↑ Cặp electron không phân chia (kpc) - Cặp kpc.
sức | Cặp kpc - Cặp electron liên kết
đẩy | Cặp electron liên kết - Cặp electron liên kết

4. Năng lượng tương tác giữa các ion dạng $A^{Z+}B^{Z-}$ là:

$$U_0 = -\frac{Z^+Z^-e^2}{r_0}k\left[1 - \frac{1}{n}\right]$$

n - Hệ số đẩy Born với 5, 7, 9, 10 ứng với cấu hình electron các khí trơ He, Ne, Ar, Kr, Xe.

r_0 - Khoảng cách cân bằng giữa A^{Z+} và B^{Z-} .

k - Hệ số tỷ lệ

5. Độ (phần trăm) ion của liên kết được xác định theo hệ thức

$$\delta\% = \frac{\bar{\mu}_t/n}{\mu_{l/t}} \cdot 100$$

$\mu_{t/n}$; $\mu_{l/t}$ - Giá trị momen lưỡng cực thực nghiệm và lý thuyết.

B- BÀI TẬP CÓ LỜI GIẢI

VII.1. a) Hãy biểu diễn liên kết cộng hóa trị của các phân tử: H_2S ; $BeCl_2$; N_2 theo sơ đồ Lewis.

b) Đối với phân tử CO có điện tích dư trên carbon và oxi.

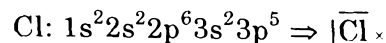
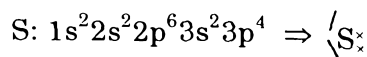
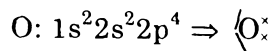
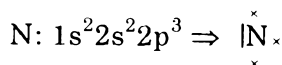
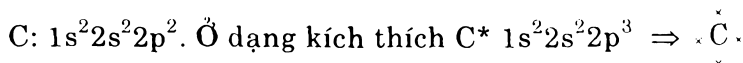
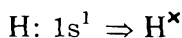
Hãy biểu diễn sơ đồ tạo liên kết theo Lewis và chỉ hướng của momen lưỡng cực.

c) Biết ozon (O_3) là phân tử có cấu tạo góc không đóng vòng. Cho biết sơ đồ Lewis của phân tử này.

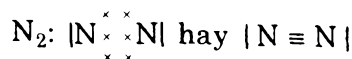
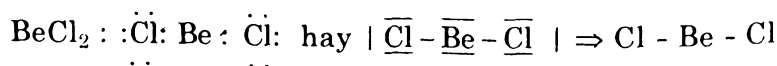
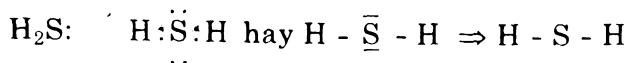
Cho: ${}_1H$; ${}_4Be$; ${}_7N$; ${}_8O$; ${}_6C$; ${}_{17}Cl$.

BÀI GIẢI

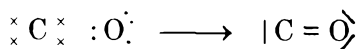
a) Để biểu diễn liên kết cộng hóa trị của phân tử, trước hết ta phải viết cấu hình electron của nguyên tử các nguyên tố tham gia tạo liên kết.



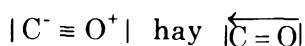
Từ cấu hình electron trên ta suy ra sơ đồ liên kết của các phân tử theo Lewis:



b) Với CO ta có:

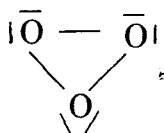


Với cách biểu diễn này C không thỏa mãn cấu hình bát tử. Vì vậy ở C và O sẽ xuất hiện điện tích dư: - và +

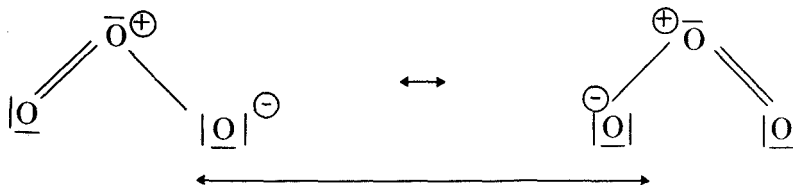


c) Đối với O₃ ta giả thiết phân tử đóng vòng

Song thực nghiệm chỉ rõ O₃ không đóng vòng. Vậy sơ đồ cấu tạo của O₃ là:



Song thực nghiệm chỉ rõ O₃ không đóng vòng. Vậy sơ đồ cấu tạo của O₃ là:

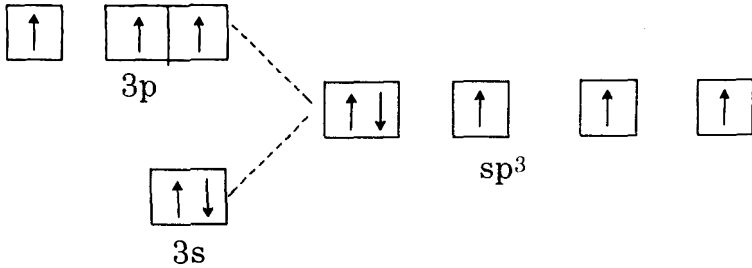


Các dạng hổ biến (Mesome)

XIII.2. Trên cơ sở các lý thuyết đã biết về liên kết. Hãy cho biết cấu trúc hình học của các hợp chất sau đây: PH₃; SiO₂. Chỉ rõ loại liên kết hình thành, nguyên tử trung tâm và trạng thái lai hóa của các nguyên tử tham gia liên kết. Cho ₁H; ₈O; ₁₄Si; ₁₅P.

BÀI GIẢI

P: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3$. Khi hình thành liên kết thì AO - 3s và 3p lai hoá để tạo ra 4AO - sp^3 như sau:

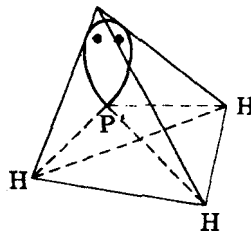
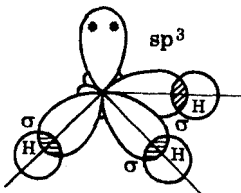
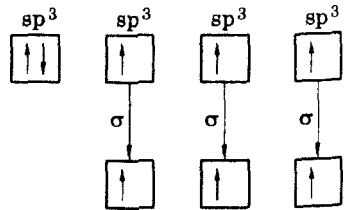


Sơ đồ hình thành liên kết trong PH_3 .

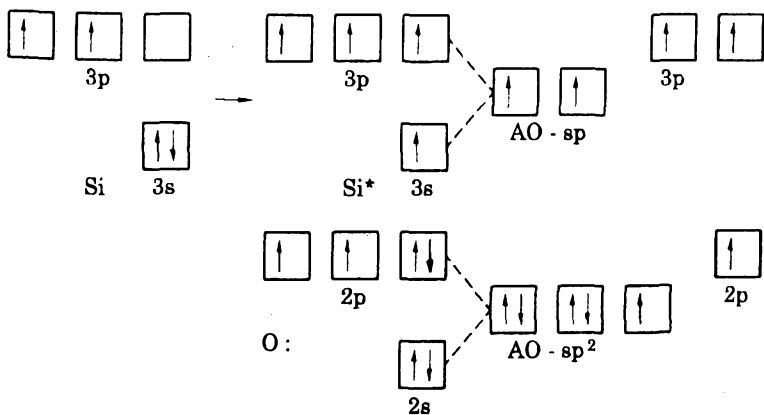
4AO - lai hóa của P:

AO của 3H

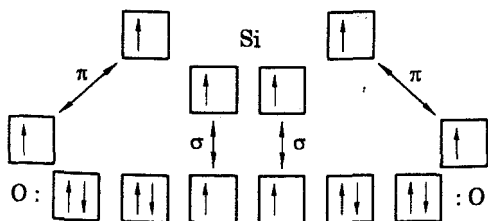
- Nguyên tử trung tâm: P
- Trạng thái lai hóa: sp^3
- Liên kết hình thành: σ



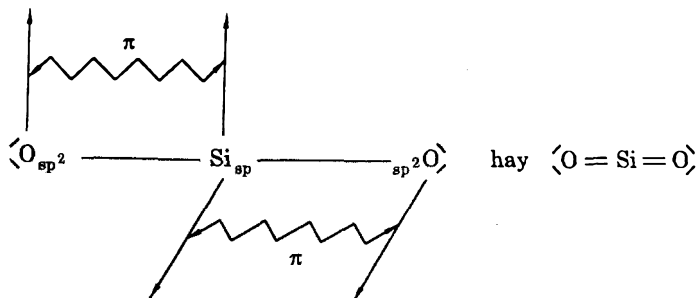
SiO_2 : Một cách tương tự ta cũng có thể biểu diễn sự hình thành liên kết trong phân tử này như sau:



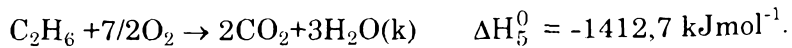
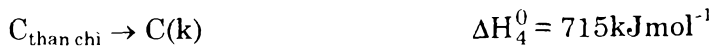
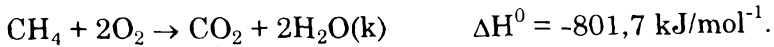
Sơ đồ hình thành liên kết trong SiO_2 :



Vật: Nguyên tử trung tâm: Si
 Trạng thái lai hoá: sp
 Liên kết được hình thành thành σ và π

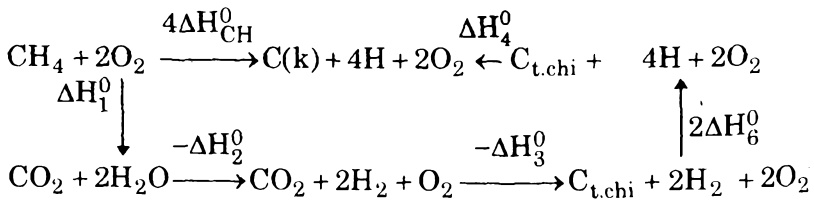


XIII.3. Tính entanpi của các liên kết C - H và C-C từ các giá trị ΔH^0 của các phản ứng sau:



BÀI GIẢI

Để xác định ΔH_{CH}^0 ta lập chu trình sau:



Theo định luật Hess ta viết:

$$4\Delta H_{\text{CH}}^0 = \Delta H_1^0 - \Delta H_2^0 - \Delta H_3^0 + \Delta H_4^0 + 2\Delta H_6^0$$

$$= -801,7 + 483 + 393,4 + 2(431,5) + 715 = 1652,7 \text{ kJ/mol}^{-1}$$

$$\text{Vậy } \Delta H_1^0 = \frac{1652,7}{4} = 413,2 \text{ kJ/mol}$$

Một cách tương tự ta có thể xác định được $\Delta H_{\text{C-C}}^0$