



Môn: HOÁ HỌC

Thời gian: 180 phút (không kể thời gian giao đề)

Ngày thi: 24/02/2023

Đề thi gồm 05 trang, 06 câu

**Cho:** H = 1,0; N = 14,0; O = 16,0; F = 19,0; Na = 23,0; Cl = 35,5; Co = 58,9; Br = 79,9;  $Z_H = 1$ ;  $Z_{Fe} = 26$ ;  $Z_{Co} = 27$ ;  $c = 3.10^8 \text{ m s}^{-1}$ ,  $e = 1,6.10^{-19} \text{ C}$ ;  $F = 96485 \text{ C mol}^{-1}$ ;  $R = 8,314 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ ; hằng số Boltzmann  $k_B = 1,381.10^{-23} \text{ J K}^{-1}$ ;  $h = 6,626.10^{-34} \text{ J s}$ ;  $N_A = 6,02.10^{23} \text{ mol}^{-1}$ ; ở 298 K:  $\frac{2,303RT}{F} = 0,0592$ ; 1 bar =  $10^5 \text{ Pa}$ ;  $0^\circ \text{C} = 273 \text{ K}$ .

**Kí hiệu:** *r*: rắn; *l*: lỏng; *k*: khí; *h*: hơi.

**Câu I (3,0 điểm)**

1. Năng lượng của electron ( $E_n$ ) trong nguyên tử hydrogen được tính theo công thức:

$$E_n = - \frac{1,312 \times 10^3}{n^2} \text{ (kJ mol}^{-1}\text{)}$$

trong đó,  $n$  là số lượng tử chính ( $n = 1, 2, 3, \dots$ ). Biết rằng sự chuyển dịch electron giữa các trạng thái của nguyên tử hydrogen chỉ được phép khi chênh lệch số lượng tử orbital ( $\Delta l$ ) giữa các trạng thái bằng  $\pm 1$ .

a) Một nguyên tử hydrogen ở trạng thái ban đầu ( $n = n_c$ ) chuyển về trạng thái  $n = 1$  thì phát ra một photon có bước sóng 102,57 nm. Xác định  $n_c$  và viết cấu hình electron của nguyên tử hydrogen ở trạng thái ban đầu.

b) Nguyên tử hydrogen ở ý **I.1.a** có thể chuyển về mức năng lượng thấp hơn khác. Lập luận và viết cấu hình electron của nguyên tử hydrogen ở mức năng lượng thấp hơn này.

c) Các nguyên tử hydrogen ở trạng thái ứng với  $n$  rất lớn được gọi là các nguyên tử kiểu Rydberg. Cho rằng, khi một nguyên tử hydrogen kiểu Rydberg ( $n = 110$ ) va chạm nhiệt với một nguyên tử khác thì nhận được một năng lượng  $\varepsilon = k_B T$  (J), trong đó  $k_B$  là hằng số Boltzmann,  $T$  (K) là nhiệt độ. Tính toán để chỉ ra xem năng lượng va chạm nhiệt ở  $0^\circ \text{C}$  có đủ để ion hóa nguyên tử Rydberg này không?

2. Liên kết hydrogen là một loại tương tác quan trọng. Một kết quả tính toán năng lượng liên kết hydrogen ( $E_{\text{IKH}}$ ) kiểu X-H...OH<sub>2</sub> và điện tích của nguyên tử H ( $q_H$ ) trong liên kết X-H (X = C, O, N) trong pha khí (tương tác C-H...OH<sub>2</sub> cũng được xét là một liên kết hydrogen rất yếu) như sau:

	C-H...OH <sub>2</sub> trong CH <sub>4</sub> ...OH <sub>2</sub>	O-H...OH <sub>2</sub> trong H <sub>2</sub> O...OH <sub>2</sub>	N-H...OH <sub>2</sub> trong NH <sub>4</sub> <sup>+</sup> ...OH <sub>2</sub>
$E_{\text{IKH}}$ (kJ mol <sup>-1</sup> )	3,0	20,0	80,0
$q_H$ (e)	0,066	0,165	0,352

a) Sử dụng ba cặp số liệu ( $E_{\text{IKH}}$ ,  $q_H$ ) ở bảng trên, xác định phương trình bậc một mô tả tốt nhất mối liên hệ giữa  $E_{\text{IKH}}$  (kJ mol<sup>-1</sup>) với  $q_H$  (e).

b) Liên kết hydrogen có trong cấu trúc của các proton hydrate dạng H(H<sub>2</sub>O)<sub>m</sub><sup>+</sup> ( $m = 1, 2, \dots, 20$ ). Trong proton hydrate H<sub>5</sub>O<sub>2</sub><sup>+</sup> có hai liên kết hydrogen, mỗi liên kết có độ dài 1,22 Å; bốn liên kết O-H, mỗi liên kết có độ dài 0,98 Å và khoảng cách giữa hai nguyên tử O là 2,44 Å.

i) Vẽ công thức cấu tạo của H<sub>5</sub>O<sub>2</sub><sup>+</sup> và quy gán (có giải thích) các độ dài liên kết.

ii) Giải thích tại sao năng lượng liên kết hydrogen trong H<sub>5</sub>O<sub>2</sub><sup>+</sup> (138 kJ mol<sup>-1</sup>) cao hơn so với các giá trị  $E_{\text{IKH}}$  trong bảng trên.

c) Nghiên cứu thực nghiệm xác định được khoảng cách giữa 2 nguyên tử oxygen cách nhau 2 liên kết trong proton hydrate H<sub>7</sub>O<sub>3</sub><sup>+</sup> là 2,43 Å và 2,73 Å. Vẽ (có giải thích) công thức cấu tạo của H<sub>7</sub>O<sub>3</sub><sup>+</sup> phù hợp với kết quả thực nghiệm.