



HDC1_Chương 6.3 Thuyết MO
46 Questions

NAME : _____

CLASS : _____

DATE : _____

1. Tuyên bố nào là sai? Một vân đạo phân tử sigma

- ☐ A có thể là liên kết hoặc phản liên kết.
- ☐ B có thể là kết quả của sự xen phủ các obitan nguyên tử p dọc theo trục phân tử (trực diện).
- ☐ C có thể là kết quả của sự xen phủ của một obitan nguyên tử s và một p.
- ☐ D có thể là kết quả của sự xen phủ của hai obitan nguyên tử s.
- ☐ E có thể là kết quả của sự xen phủ của các quỹ đạo nguyên tử p vuông góc với trục phân tử (mặt bên).

2. Tuyên bố nào là sai? Một vân đạo phân tử sigma

- ☐ A có thể là kết quả của sự xen phủ của một obitan nguyên tử s và một p.
- ☐ B có thể là kết quả của sự xen phủ của hai obitan nguyên tử s.
- ☐ C có thể là kết quả của sự xen phủ của các quỹ đạo nguyên tử p vuông góc với trục phân tử (mặt bên).
- ☐ D có thể là kết quả của sự xen phủ các obitan nguyên tử p dọc theo trục phân tử (trực diện).
- ☐ E có thể là liên kết hoặc phản liên kết.

3. Carbon monoxide có mười electron liên kết và bốn electron phản liên kết. Do đó, nó có bậc liên kết là:

- ☐ A 1
- ☐ B 5/2
- ☐ C 2
- ☐ D 3
- ☐ E 7

4. Cấu hình electron nào sau đây là đúng của phân tử C_2 ?

- ☐ A $\sigma_{1s}^2 \sigma_{1s}^{*2} \sigma_{2s}^2 \sigma_{2s}^{*2} (\pi_{2py}^2 \pi_{2pz}^1) \sigma_{2p}^1$
☐ B $\sigma_{1s}^2 \sigma_{1s}^{*2} \sigma_{2s}^2 \sigma_{2s}^{*2} \pi_{2py}^1 \pi_{2pz}^1 \pi_{2py}^1 \pi_{2pz}^1$
- ☐ C $\sigma_{1s}^2 \sigma_{2s}^2 \pi_{2py}^2 \sigma_{1s}^{*2} \sigma_{2s}^{*2} \pi_{2py}^2$
☐ D $\sigma_{1s}^2 \sigma_{1s}^{*2} \sigma_{2s}^2 \sigma_{2s}^{*2} (\pi_{2py}^1 \pi_{2pz}^1)$
- ☐ E $\sigma_{1s}^2 \sigma_{1s}^{*2} \sigma_{2s}^2 \sigma_{2s}^{*2} (\pi_{2py}^2 \pi_{2pz}^2)$

5. Cấu hình electron nào sau đây là đúng của ion phân tử B_2^+ ?

- ☐ A $\sigma_{1s}^2 \sigma_{1s}^{*2} \sigma_{2s}^2 \sigma_{2s}^{*2} \sigma_{2p}^2 \pi_{2py}^2$
☐ B Không có câu nào đúng
- ☐ C $\sigma_{1s}^2 \sigma_{1s}^{*2} \sigma_{2s}^2 \sigma_{2s}^{*2} \sigma_{2p}^2$
☐ D $\sigma_{1s}^2 \sigma_{1s}^{*2} \sigma_{2s}^2 \sigma_{2s}^{*2} \sigma_{2p}^1 \pi_{2py}^1$
- ☐ E $\sigma_{1s}^2 \sigma_{1s}^{*2} \sigma_{2s}^2 \sigma_{2s}^{*2} \sigma_{2p}^2 \pi_{2py}^2 \pi_{2pz}^1$

6. Vẽ sơ đồ obitan phân tử của ion phân tử N_2^+ . Số electron trong obitan phân tử σ_{2p} là:

- ☐ A 4
 ☐ B 3
- ☐ C 2
 ☐ D 0
- ☐ E 1

7. Bậc liên kết trong O_2^+ là bao nhiêu?

- ☐ A 1.5
 ☐ B 0
- ☐ C 3.5
 ☐ D 2.5
- ☐ E 2.0

8. Vẽ sơ đồ obitan phân tử cho B_2 . Số electron chưa ghép cặp trong phân tử B_2 là _____.

- ☐ A 1
 ☐ B 4
- ☐ C 3
 ☐ D 0
- ☐ E 2

9. Chọn ra phát biểu **SAI** trong những phát biểu sau đây:

- | | |
|--|--|
| <p><input type="checkbox"/> A (c) Các vân đạo phân tử thường được mô tả là được định vị nhiều hơn so với các vân đạo nguyên tử lai hóa.</p> | <p><input type="checkbox"/> B (b) Khi xét các vân đạo phân tử do sự xen phủ của hai orbital nguyên tử cụ thể bất kỳ, các orbital liên kết luôn có năng lượng thấp hơn các orbital phản năng lượng.</p> |
| <p><input type="checkbox"/> C (a) Thuyết liên kết hóa trị và thuyết vân đạo phân tử có thể được mô tả như hai quan điểm khác nhau về cùng một sự vật.</p> | <p><input type="checkbox"/> D (e) Một trong những thiếu sót của lý thuyết liên kết cộng hóa trị là không có khả năng giải thích tính thuận từ của phân tử oxy, O_2.</p> |
| <p><input type="checkbox"/> E (d) Một trong những thiếu sót của thuyết orbital phân tử là không có khả năng tính đến liên kết ba trong phân tử nitơ, N_2.</p> | |

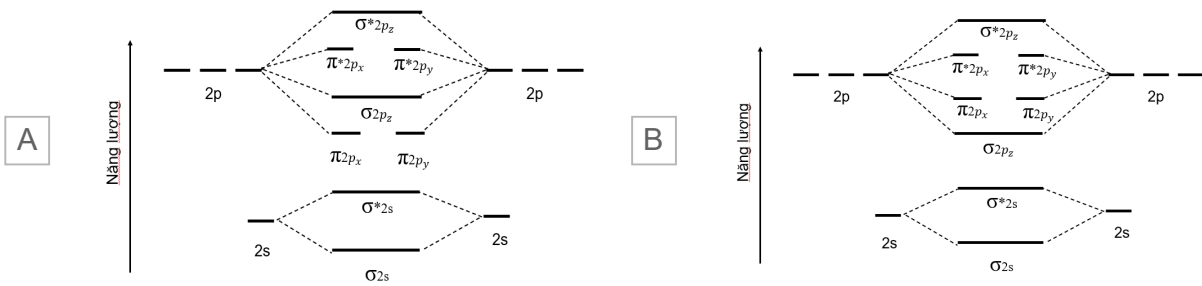
10. Các quỹ đạo phân tử phản liên kết được tạo ra bởi

- | | |
|---|---|
| <p><input type="checkbox"/> A Không có câu nào đúng</p> | <p><input type="checkbox"/> B Tất cả đều đúng</p> |
| <p><input type="checkbox"/> C tương tác mang tính xây dựng của các quỹ đạo nguyên tử.</p> | <p><input type="checkbox"/> D sự xen phủ orbital nguyên tử của hai ion âm</p> |
| <p><input type="checkbox"/> E tương tác triệt tiêu của các orbital nguyên tử.</p> | |

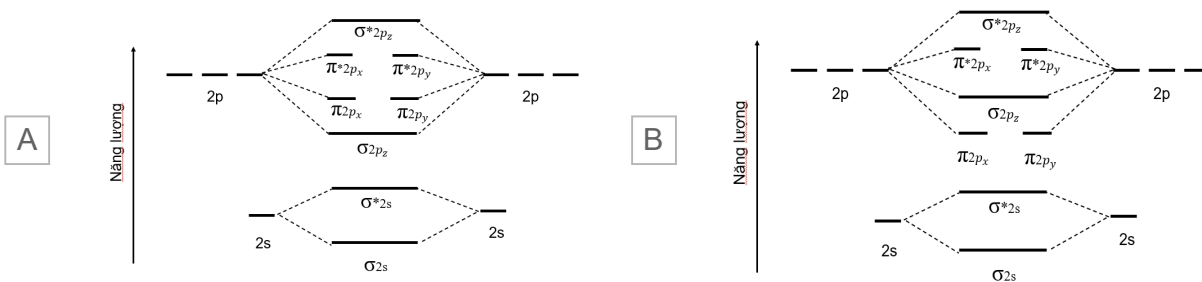
11. Phát biểu nào liên quan đến các phân tử nhị nguyên tử dị nhân ổn định là **SAI**?

- | | |
|--|---|
| <p><input type="checkbox"/> A Sơ đồ vân đạo phân tử của chúng đối xứng hơn sơ đồ quỹ đạo của các phân tử nhị nguyên tử đồng nhân.</p> | <p><input type="checkbox"/> B Các vân đạo phân tử liên kết mang nhiều tính chất của nguyên tố có độ âm điện lớn hơn so với nguyên tố có độ âm điện nhỏ hơn.</p> |
| <p><input type="checkbox"/> C Sự chênh lệch năng lượng giữa hai obitan nguyên tử chồng lấn càng lớn thì liên kết tạo thành càng phân cực, do các electron chiếm giữ obitan phân tử liên kết tạo thành.</p> | <p><input type="checkbox"/> D Các vân đạo phân tử phản liên kết có nhiều đặc tính của nguyên tố có độ âm điện lớn hơn so với nguyên tố có độ âm điện lớn hơn.</p> |
| <p><input type="checkbox"/> E Tất cả đều có bậc liên kết lớn hơn 0.</p> | |

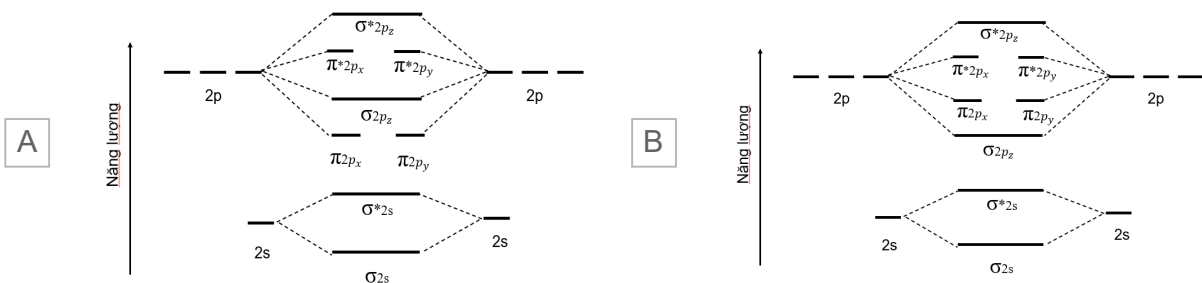
12. Hãy chọn giản đồ vân đạo phân tử phù hợp để giải thích sự hình thành liên kết trong phân tử C_2 .



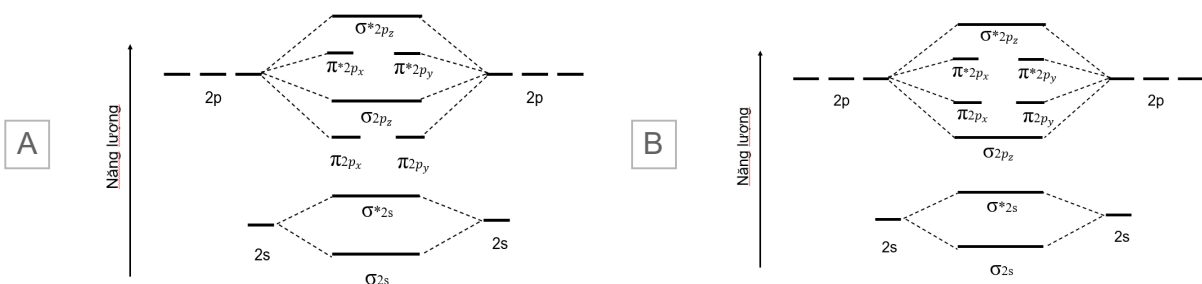
13. Hãy chọn giản đồ vân đạo phân tử phù hợp để giải thích sự hình thành liên kết trong phân tử O_2 .



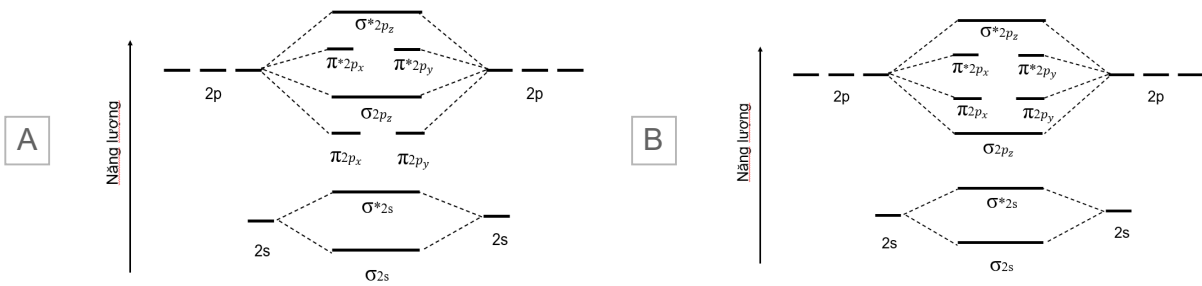
14. Hãy chọn giản đồ vân đạo phân tử phù hợp để giải thích sự hình thành liên kết trong phân tử B_2 .



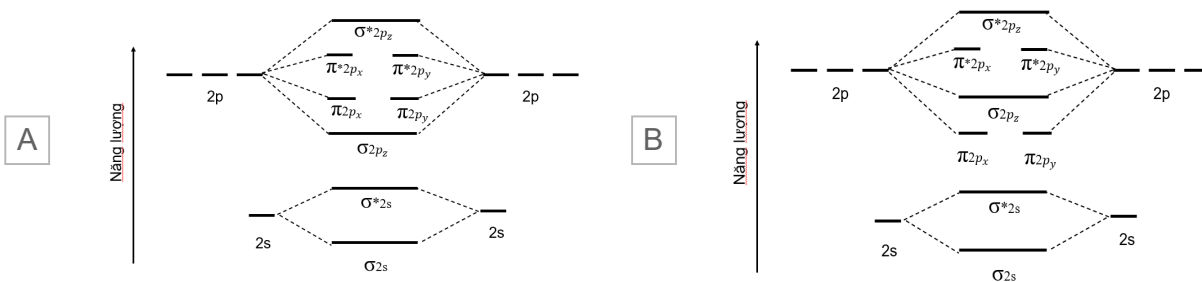
15. Hãy chọn giản đồ vân đạo phân tử phù hợp để giải thích sự hình thành liên kết trong phân tử Ne_2 .



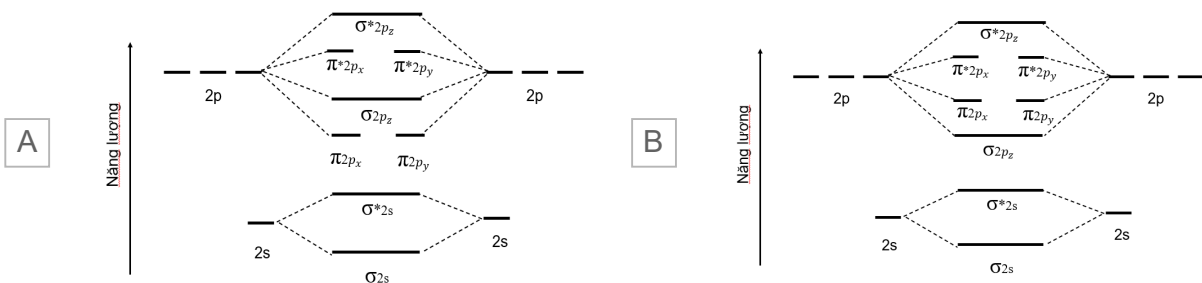
16. Hãy chọn giản đồ vân đạo phân tử phù hợp để giải thích sự hình thành liên kết trong phân tử CO.



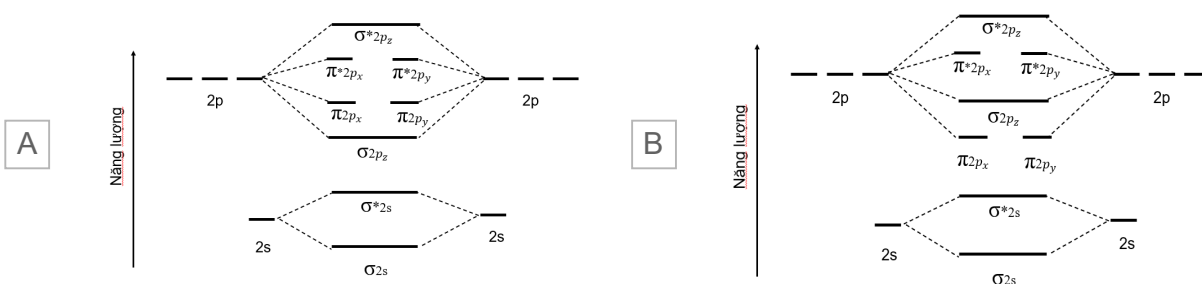
17. Hãy chọn giản đồ vân đạo phân tử phù hợp để giải thích sự hình thành liên kết trong ion phân tử BN^+ .



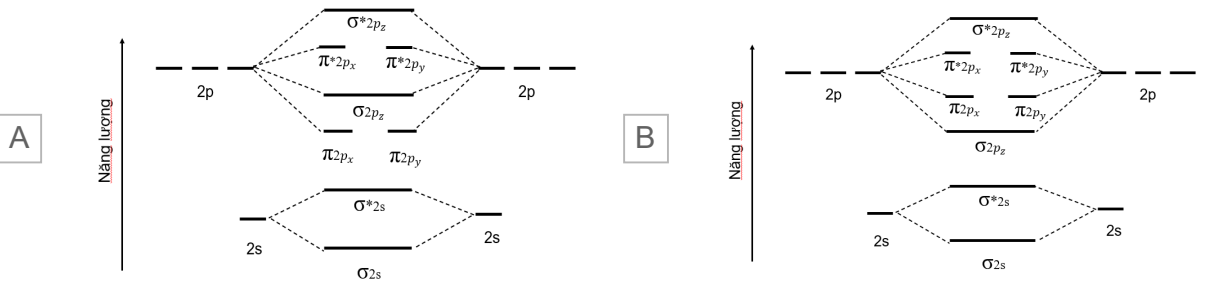
18. Hãy chọn giản đồ vân đạo phân tử phù hợp để giải thích sự hình thành liên kết trong phân tử N_2 .



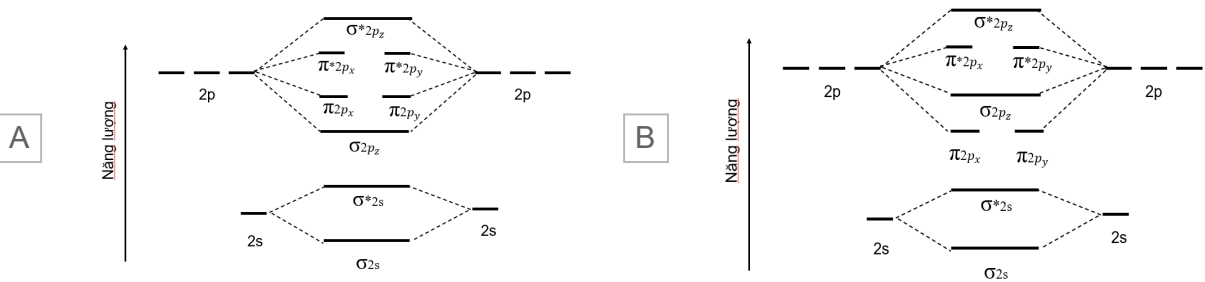
19. Hãy chọn giản đồ vân đạo phân tử phù hợp để giải thích sự hình thành liên kết trong phân tử NO.



20. Hãy chọn giản đồ vân đạo phân tử phù hợp để giải thích sự hình thành liên kết trong phân tử F₂.



21. Hãy chọn giản đồ vân đạo phân tử phù hợp để giải thích sự hình thành liên kết trong ion phân tử CN.



22. Hãy phân bố electron vào giản đồ năng lượng của phân tử O₂.

Năng lượng

(a) _____

(b) _____

(c) _____

(d) _____

(e) _____

(f) _____

(g) _____

- A

↑
- B

↑↓
- C

↑↓
- D

↑↓
- E

↑↓
- F

↓
- G

↑
- H

↑↓
- I

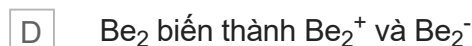
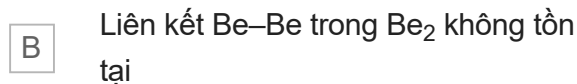
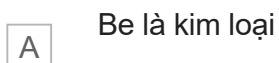
↓

23. Theo thuyết VB, số liên kết cộng hóa trị tối đa mà N có thể tạo thành trong các hợp chất là:
- | | | | |
|----------------------------|---|----------------------------|---|
| <input type="checkbox"/> A | 4 | <input type="checkbox"/> B | 6 |
| <input type="checkbox"/> C | 5 | <input type="checkbox"/> D | 3 |
24. Trong các hợp chất CO_2 , CH_3OH , CO , CO_3^{2-} , hợp chất có độ dài nối C–O ngắn nhất là:
- | | | | |
|----------------------------|------------------------|----------------------------|--------------------|
| <input type="checkbox"/> A | CH_3OH | <input type="checkbox"/> B | CO_3^{2-} |
| <input type="checkbox"/> C | CO_2 | <input type="checkbox"/> D | CO |
25. Phân tử H_2O có góc nối H–O–H là
- | | | | |
|----------------------------|-------------|----------------------------|-----------------------|
| <input type="checkbox"/> A | 90° | <input type="checkbox"/> B | nhỏ hơn $109,5^\circ$ |
| <input type="checkbox"/> C | 180° | <input type="checkbox"/> D | $109,5^\circ$ |
26. Bậc liên kết của nối C–O trong CO_3^{2-} là:
- | | | | |
|----------------------------|-----|----------------------------|------|
| <input type="checkbox"/> A | 1,5 | <input type="checkbox"/> B | 1,33 |
| <input type="checkbox"/> C | 2 | <input type="checkbox"/> D | 1 |
27. Bậc liên kết của nối C–O trong CO_3^{2-} là:
- | | | | |
|----------------------------|---|----------------------------|------|
| <input type="checkbox"/> A | 2 | <input type="checkbox"/> B | 1,33 |
| <input type="checkbox"/> C | 1 | <input type="checkbox"/> D | 1,5 |
28. Phân tử IF_5 có cơ cấu hình học nào?
- | | | | |
|----------------------------|---------------------|----------------------------|------------|
| <input type="checkbox"/> A | lưỡng tháp tam giác | <input type="checkbox"/> B | tứ diện |
| <input type="checkbox"/> C | bát diện | <input type="checkbox"/> D | tháp vuông |
29. Trong các tiểu phân sau, CO_2 , NO_2^- , NO_2^+ , NO_2 , tiểu phân nào có cơ cấu thẳng hàng?
- | | | | |
|----------------------------|---------------------------------|----------------------------|-----------------------------------|
| <input type="checkbox"/> A | CO_2 , NO_2 | <input type="checkbox"/> B | NO_2^- , NO_2^+ |
| <input type="checkbox"/> C | CO_2 , NO_2^- | <input type="checkbox"/> D | CO_2 , NO_2^+ |

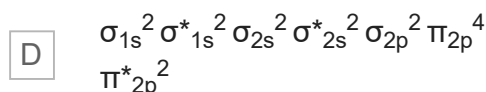
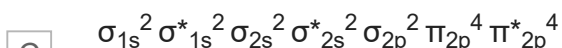
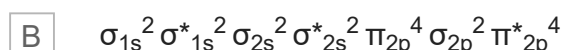
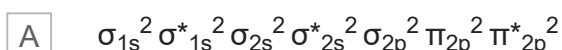
30. Trong các tiểu phân sau, tiểu phân nào không tồn tại (theo thuyết MO)?



31. Phân tử Be_2 không tồn tại vì:



32. Cấu hình electron của ion peroxide O_2^{2-} là:



33. Bậc nối giữa 2 nguyên tử O trong O_2^{2-} là:

☐ A 1,5

☐ B 1

☐ C 2,5

☐ D 2

34. Cho các phân tử Be_2 , N_2 , C_2 , B_2 . Theo thuyết MO:
(i).Phân tử nào có bậc liên kết là 2?



35. Cho các phân tử Be_2 , N_2 , C_2 , B_2 . Theo thuyết MO:
Phân tử nào có tính thuận từ?



36. Cho các phân tử Be_2 , N_2 , C_2 , B_2 . Theo thuyết MO:
Phân tử nào có bậc liên kết là 3?



37. Cho các phân tử Be_2 , N_2 , C_2 , B_2 . Theo thuyết MO:
Phân tử nào không tồn tại?

- | | | | |
|----------------------------|--------------|----------------------------|---------------|
| <input type="checkbox"/> A | N_2 | <input type="checkbox"/> B | B_2 |
| <input type="checkbox"/> C | C_2 | <input type="checkbox"/> D | Be_2 |

38. Vân đạo phân tử làm giảm xác suất có mặt của điện tử ở khoảng cách giữa các hạt nhân gọi là vân đạo

- | | | | |
|----------------------------|----------------|----------------------------|---------------|
| <input type="checkbox"/> A | lai hóa | <input type="checkbox"/> B | liên kết |
| <input type="checkbox"/> C | không liên kết | <input type="checkbox"/> D | phản liên kết |

39. Theo thuyết MO, mệnh đề nào sau đây **SAI**?

- | | | | |
|----------------------------|---|----------------------------|--|
| <input type="checkbox"/> A | Nguyên lý ngoại trừ Pauli được tuân thủ | <input type="checkbox"/> B | MO liên kết có năng lượng cao hơn các AO tương ứng |
| <input type="checkbox"/> C | Điện tử chiếm các orbital theo thứ tự tăng dần các mức năng lượng | <input type="checkbox"/> D | Số orbital phân tử tạo thành bằng số orbital nguyên tử tham gia liên kết |

40. Xét phân tử NO, mệnh đề nào sau đây **sai**?

- | | | | |
|----------------------------|---|----------------------------|---|
| <input type="checkbox"/> A | MO có năng lượng cao nhất chứa electron (HOMO) là p^* | <input type="checkbox"/> B | Nếu phân tử bị ion hóa thành NO^+ thì liên kết N–O sẽ mạnh hơn và ngắn hơn |
| <input type="checkbox"/> C | Bậc liên kết là 2 | <input type="checkbox"/> D | Phân tử có tính thuận từ |

41. Công thức electron của N_2^+ là:

- | | | | |
|----------------------------|--|----------------------------|--|
| <input type="checkbox"/> A | $\sigma_{1s}^2 \sigma_{1s}^{*2} \sigma_{2s}^2 \sigma_{2s}^{*2} \pi_{2p}^4 \pi_{2p}^1$ | <input type="checkbox"/> B | $\sigma_{1s}^2 \sigma_{1s}^{*2} \sigma_{2s}^2 \sigma_{2s}^{*2} \sigma_{2p}^1 \pi_{2p}^4$ |
| <input type="checkbox"/> C | $\sigma_{1s}^2 \sigma_{1s}^{*2} \sigma_{2s}^2 \sigma_{2s}^{*2} \pi_{2p}^4 \sigma_{2p}^1$ | <input type="checkbox"/> D | $\sigma_{1s}^2 \sigma_{2s}^2 \sigma_{1s}^{*2} \sigma_{2s}^{*2} \pi_{2p}^4 \sigma_{2p}^1$ |

42. So sánh N_2 và N_2^+ . Chọn phát biểu đúng:

- | | | | |
|----------------------------|---|----------------------------|--|
| <input type="checkbox"/> A | N_2 mất 1 electron trên vân đạo σ_{2pz} để thành N_2^+ | <input type="checkbox"/> B | N_2 mất 1 electron trên vân đạo π_{2px} để thành N_2^+ |
| <input type="checkbox"/> C | Năng lượng nối N–N trong N_2^+ lớn hơn trong N_2 | <input type="checkbox"/> D | N_2 có tính thuận từ |

43. Nguyên tử O có thể tạo thành tối đa bao nhiêu orbital lai hóa?

☐ A

3

☐ B

4

☐ C

5

☐ D

6

44. Nguyên tử B có thể tạo thành tối đa bao nhiêu orbital lai hóa?

☐ A

3

☐ B

5

☐ C

4

☐ D

6

45. Nguyên tử P có thể tạo thành tối đa bao nhiêu orbital lai hóa?

☐ A

5

☐ B

3

☐ C

4

☐ D

6

46. Mệnh đề nào sau đây **sai**?

☐ A

Số liên kết π được tạo thành bằng số orbital nguyên tử tham gia tạo liên kết.

☐ B

Để tạo thành 1 liên kết π , các nguyên tử chu kỳ 2 phải có 1 orbital p không lai hóa.

☐ C

Đám mây điện tử liên kết của liên kết π có mặt phẳng đối xứng chứa trục liên kết.

☐ D

Liên kết π sẽ không tạo thành nếu các nguyên tử không tạo thành liên kết σ trước.