

Trường Đại Học Khoa Học Tự Nhiên
Đại Học Quốc Gia Thành Phố Hồ Chí Minh

HÓA ĐẠI CƯƠNG 1

ĐÁP ÁN LUYỆN TẬP VIẾT VÂN ĐẠO PHÂN TỬ

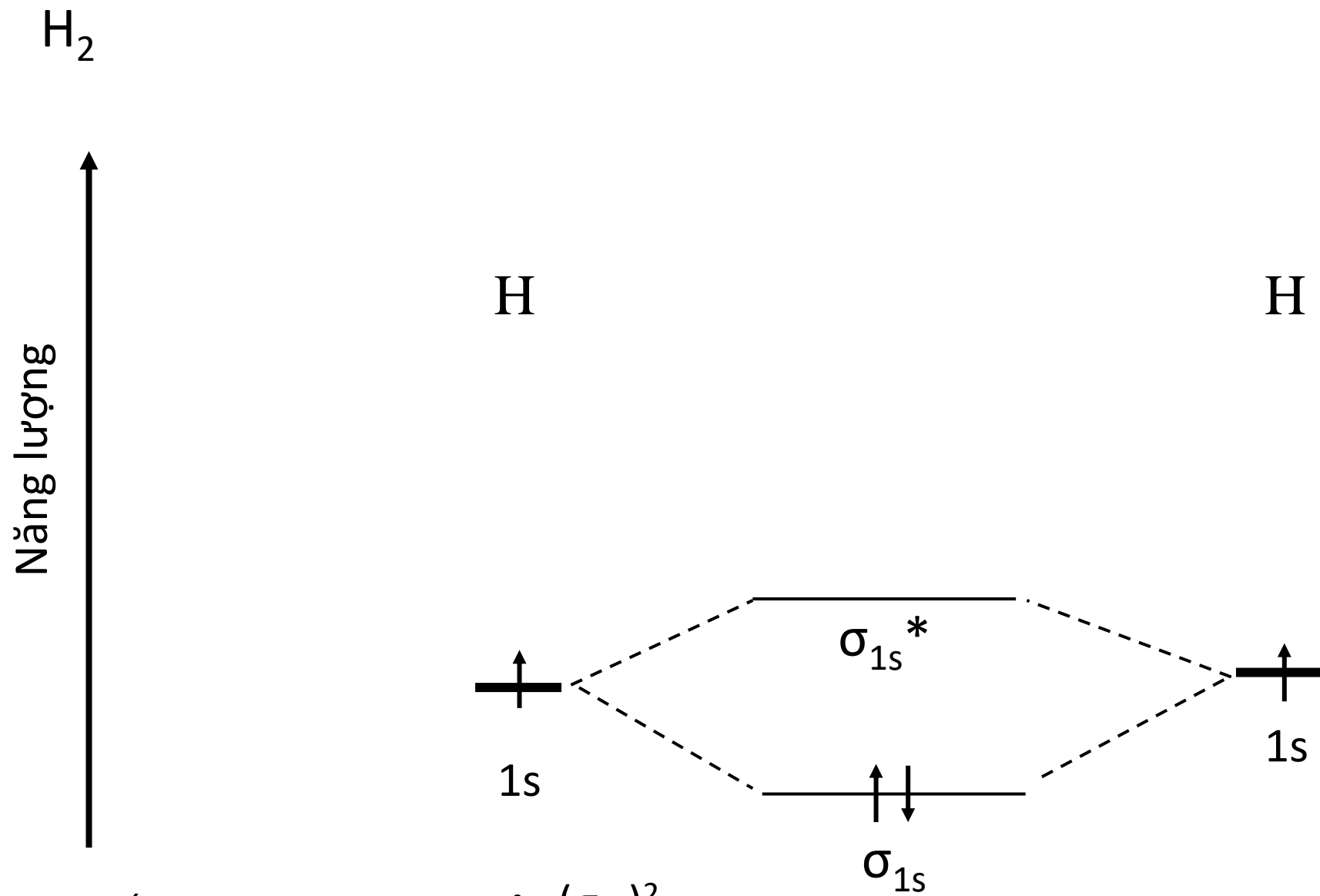
GV: Từ Thị Trâm Anh

tttanh@hcmus.edu.vn

Bộ môn Vật liệu Từ & Y sinh, khoa KH&CN Vật liệu, Trường ĐH KHTN

Năm học 2023-2024, HKI

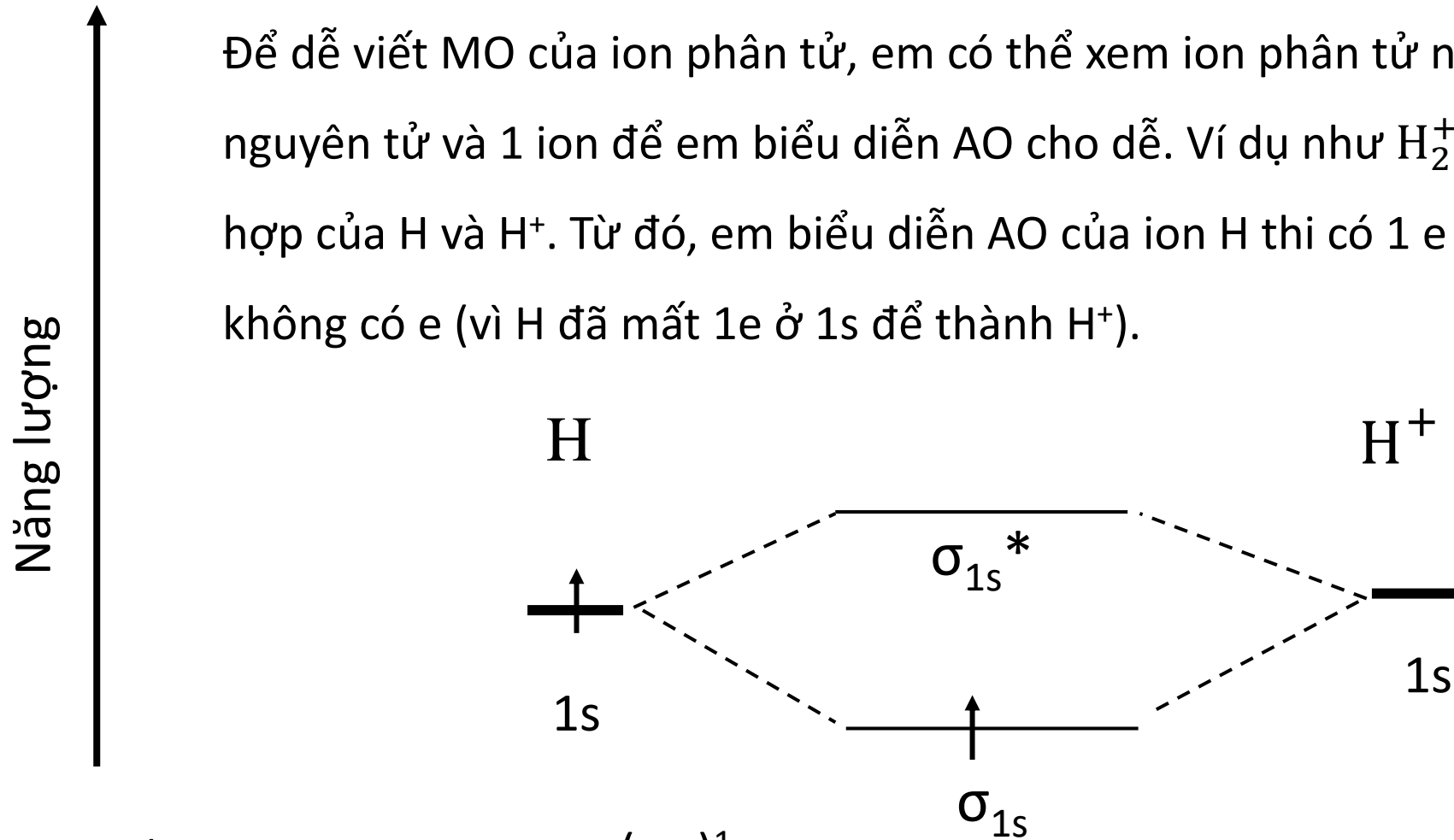
1. Vẽ giản đồ năng lượng và sự phân bố electron trong vân đạo phân tử.
2. Viết cấu hình electron phân tử
3. Xác định bậc liên kết. Ghi chú tiểu phân không tồn tại nếu có.
4. Xác định từ tính (thuận từ hay nghịch từ) của các tiểu phân sau:
5. So sánh độ dài liên kết, độ bền liên kết của các tiểu phân trong cùng một câu nhỏ (a, b, c...).



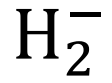
1. Cấu hình electron phân tử: $(\sigma_{1s})^2$
2. Bậc liên kết: 1
3. Từ tính (thuận từ hay nghịch từ): nghịch từ

H_2^+ H_2^+ , H_2^- , NF^+ , NF^- là dạng “ion phân tử”, nghĩa là những phân tử mang điện tích dương hoặc âm.

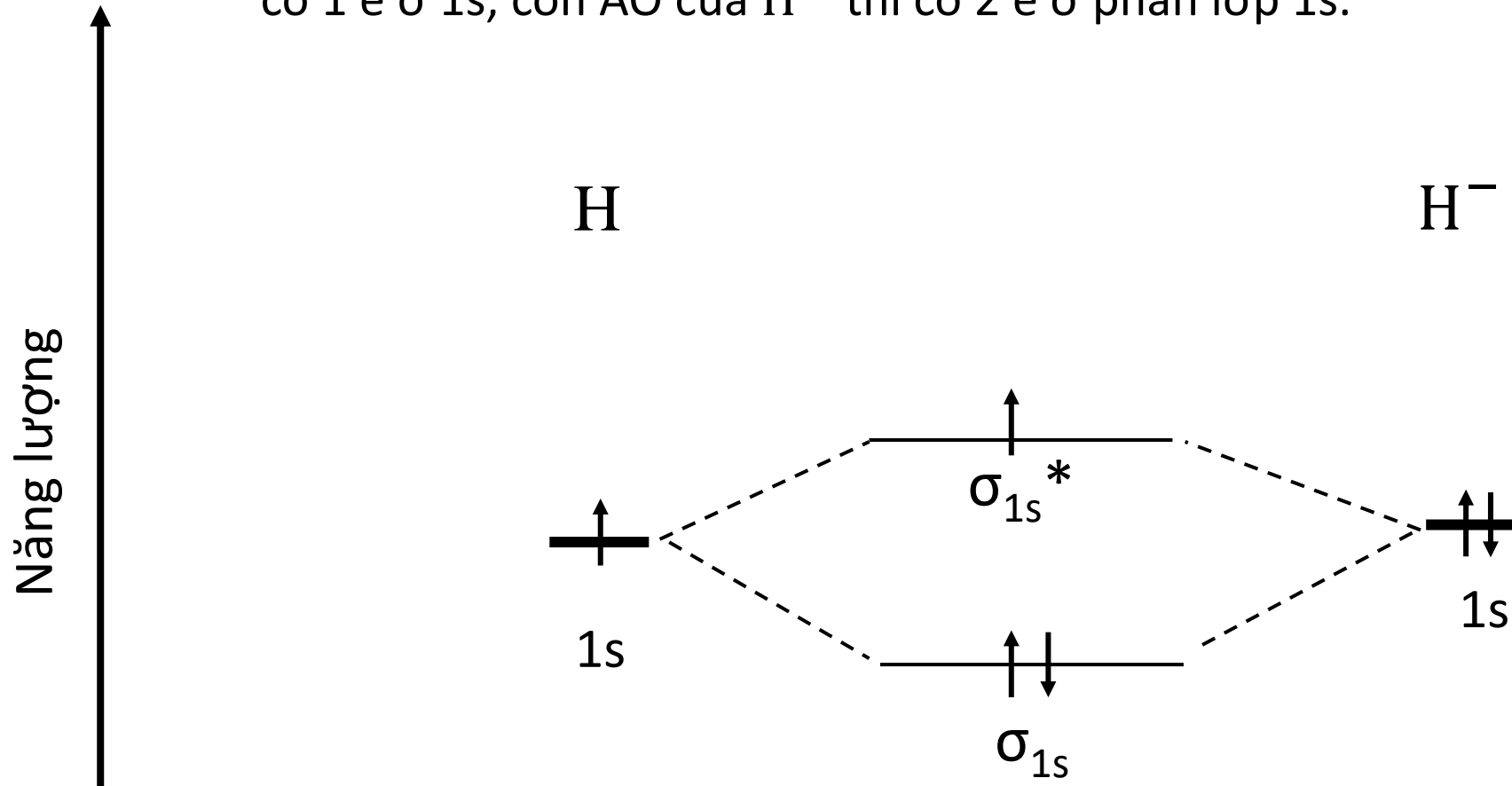
Để dễ viết MO của ion phân tử, em có thể xem ion phân tử như là sự kết hợp của 1 nguyên tử và 1 ion để em biểu diễn AO cho dễ. Ví dụ như H_2^+ em có thể xem như là kết hợp của H và H^+ . Từ đó, em biểu diễn AO của ion H thì có 1 e ở 1s, còn AO của H^+ thì không có e (vì H đã mất 1e ở 1s để thành H^+).



1. Cấu hình electron phân tử: $(\sigma_{1s})^1$
2. Bậc liên kết: 0.5
3. Từ tính (thuận từ hay nghịch từ): thuận từ



Em có thể xem H_2^- như là kết hợp của H và H^- . Từ đó, em biểu diễn AO của ion H có 1 e ở 1s, còn AO của H^- thì có 2 e ở phân lớp 1s.



1. Cấu hình electron phân tử: $(\sigma_{1s})^2 (\sigma_{1s}^*)^1$
2. Bậc liên kết: 0.5
3. Từ tính (thuận từ hay nghịch từ): thuận từ

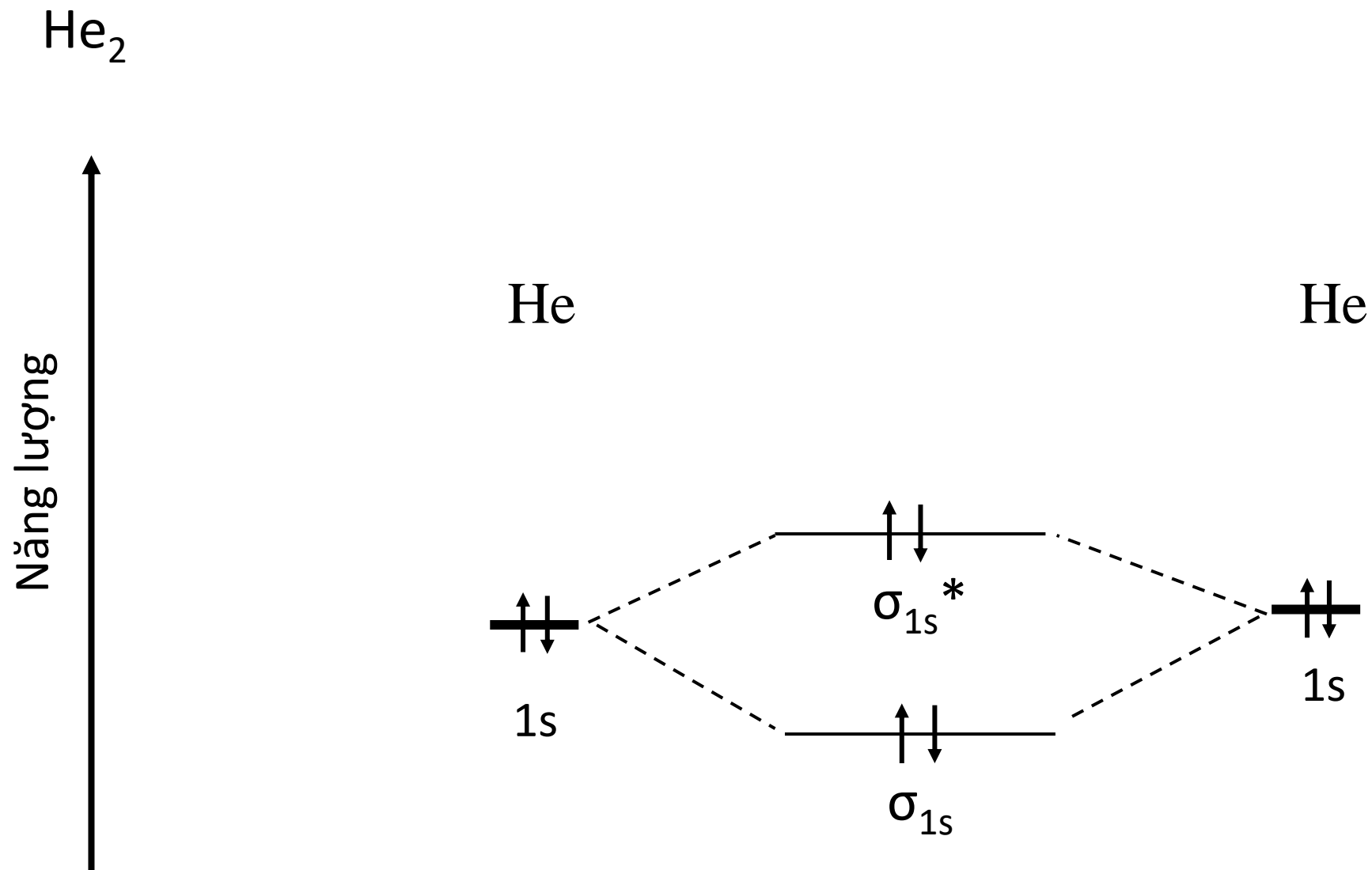
Bậc liên kết càng cao thì độ dài liên kết càng ngắn, và độ bền liên kết càng cao

a. H_2 , H_2^+ , H_2^-

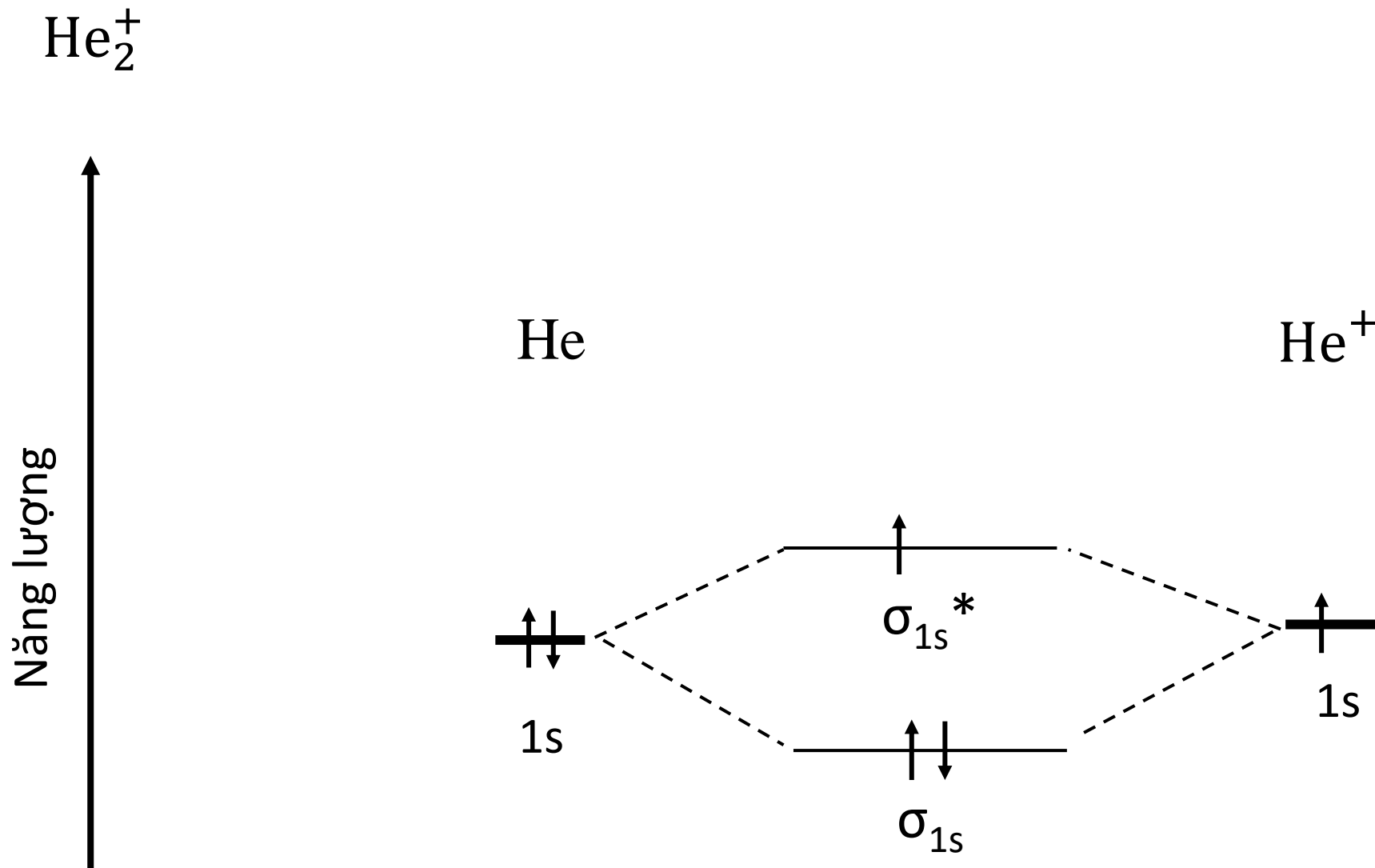
Bậc liên kết: $\text{H}_2 > \text{H}_2^+ = \text{H}_2^-$ ($1 > 0.5 = 0.5$)

Độ dài liên kết: $\text{H}_2 < \text{H}_2^+ = \text{H}_2^-$

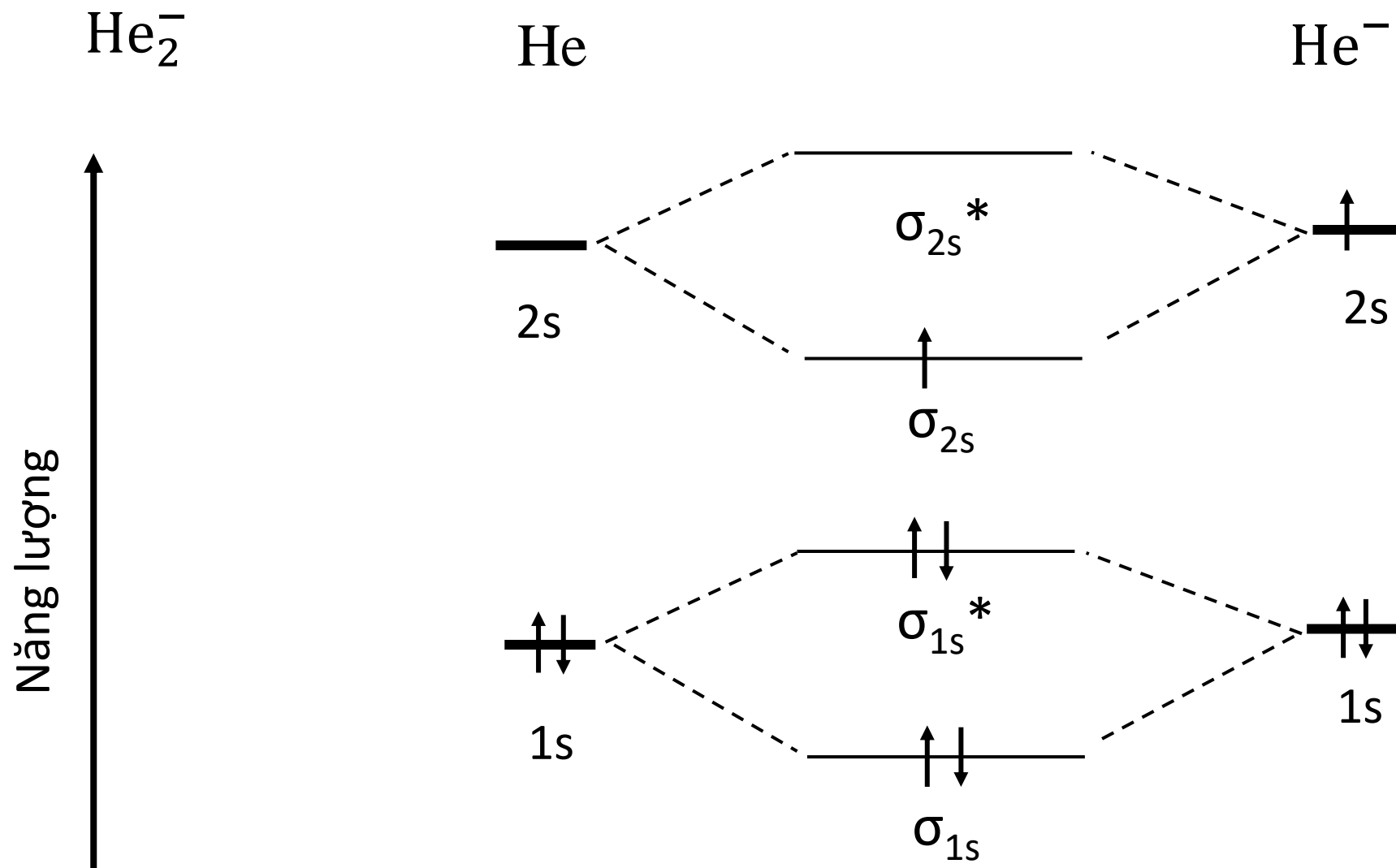
Độ bền liên kết: $\text{H}_2 > \text{H}_2^+ = \text{H}_2^-$



1. Cấu hình electron phân tử: $(\sigma_{1s})^2 (\sigma_{1s}^*)^2$
2. Bậc liên kết: $0 \rightarrow$ phân tử không tồn tại
3. Từ tính (thuận từ hay nghịch từ):



1. Cấu hình electron phân tử: $(\sigma_{1s})^2 (\sigma_{1s}^*)^1$
2. Bậc liên kết: 0.5
3. Từ tính (thuận từ hay nghịch từ): Thuận từ



1. Cấu hình electron phân tử: $(\sigma_{1s})^2 (\sigma_{1s}^*)^2 (\sigma_{2s})^1$
2. Bậc liên kết: 0.5
3. Từ tính (thuận từ hay nghịch từ): thuận từ

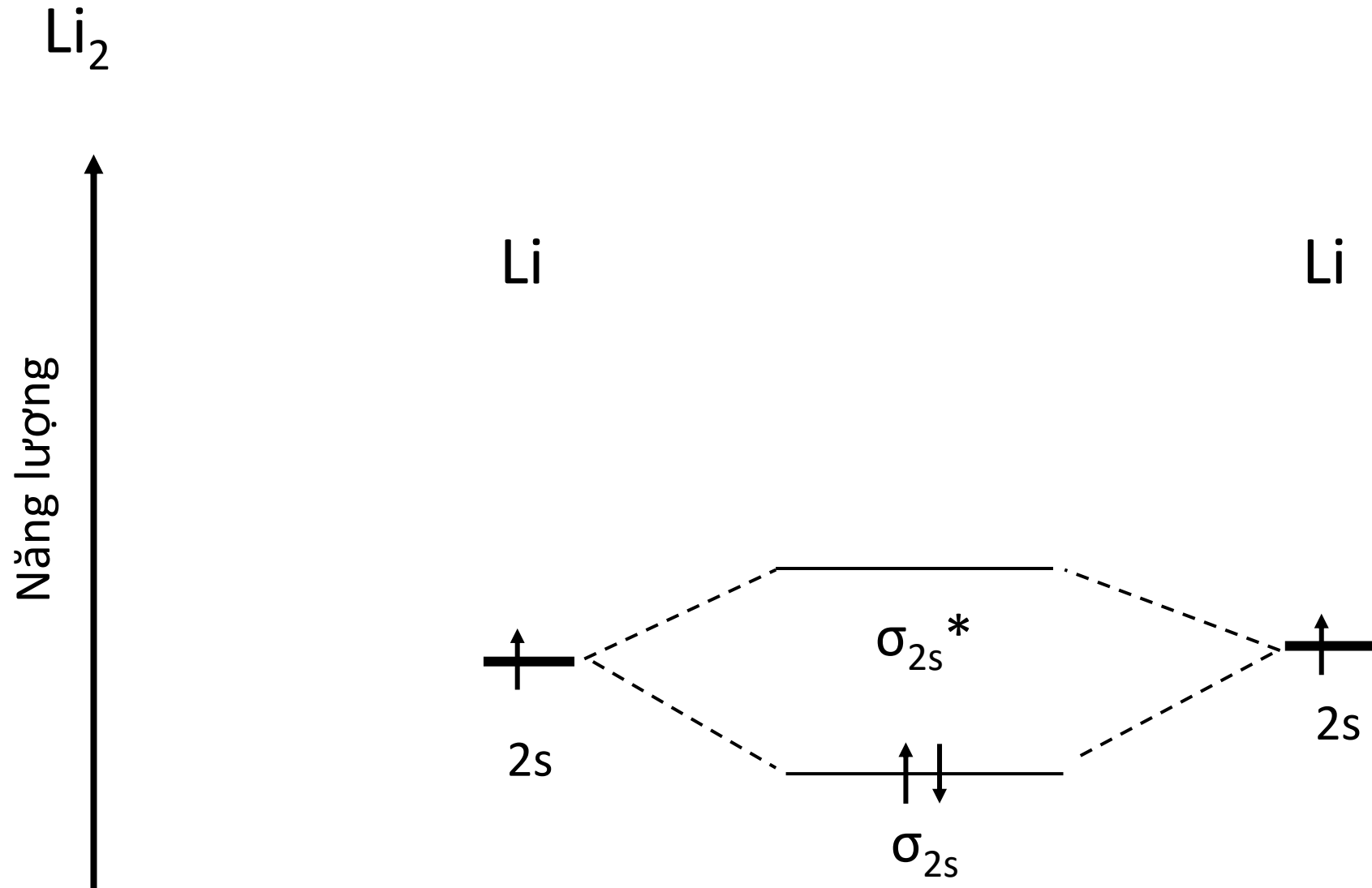
Bậc liên kết càng cao thì độ dài liên kết càng ngắn, và độ bền liên kết càng cao

b. He_2 , He_2^+ , He_2^-

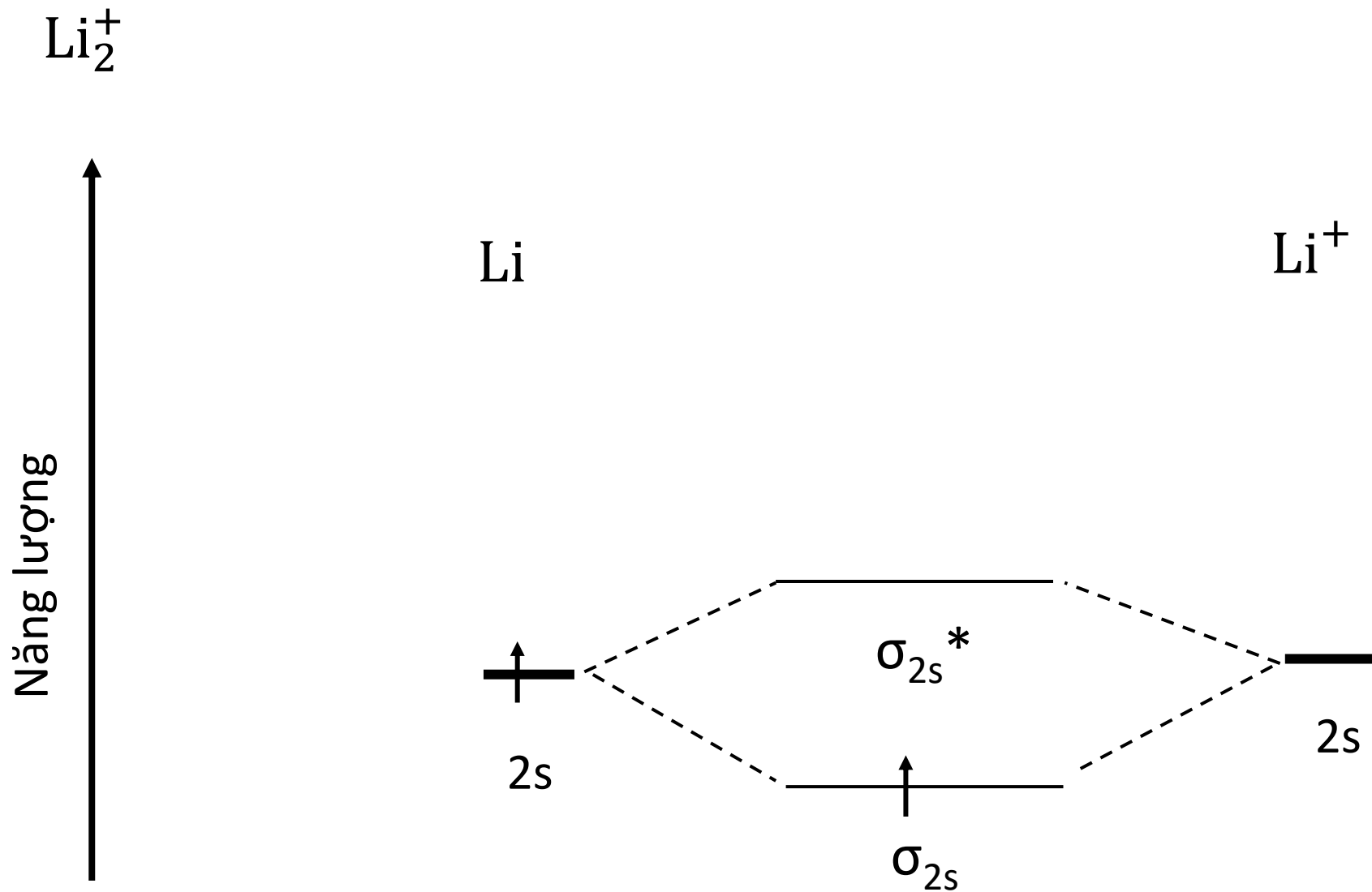
Bậc liên kết: $\text{He}_2 < \text{He}_2^+ = \text{He}_2^-$ ($0 < 0.5 = 0.5$)

Độ dài liên kết: $\text{He}_2^+ = \text{He}_2^-$

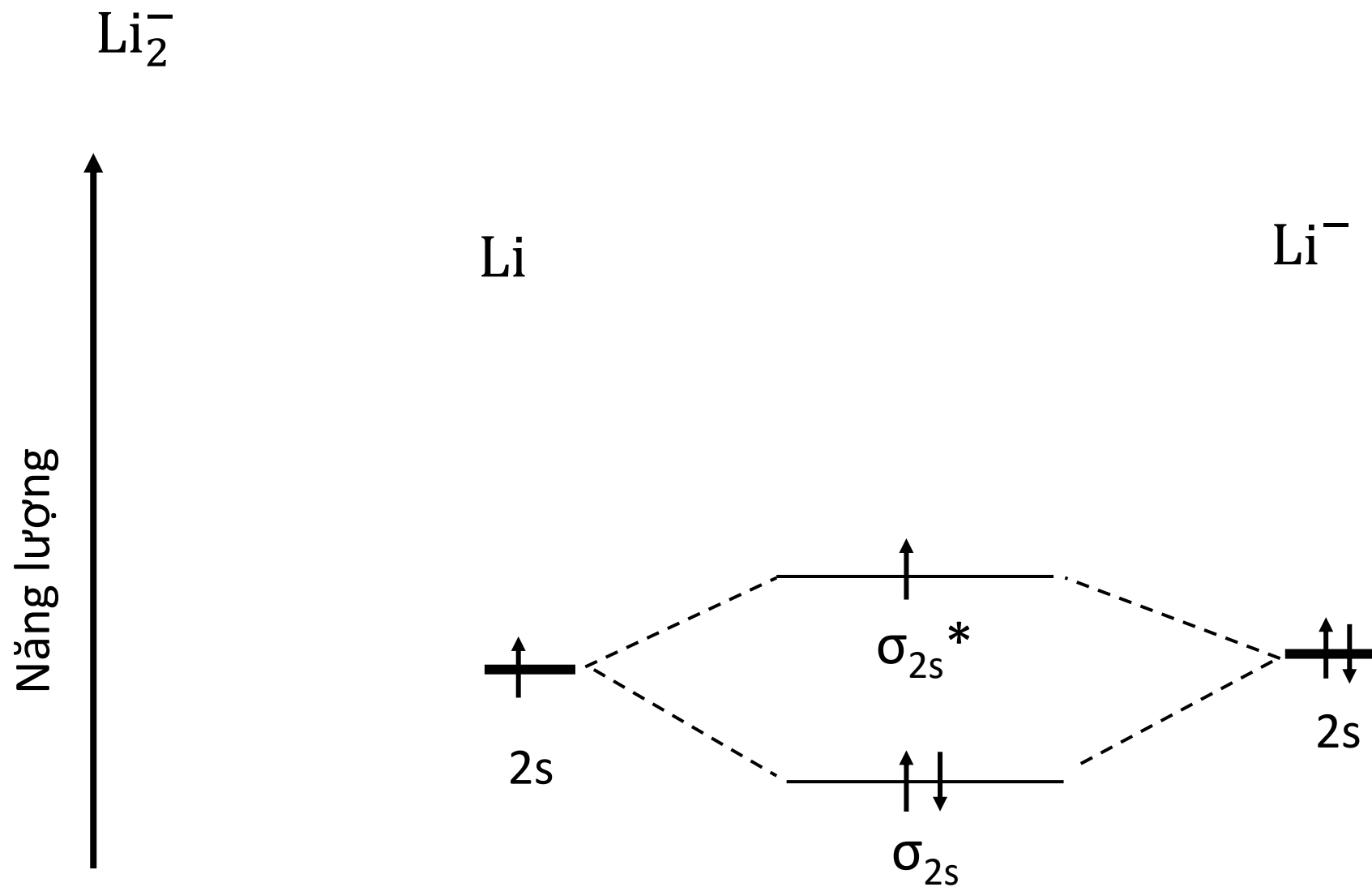
Độ bền liên kết: $\text{He}_2 < \text{He}_2^+ = \text{He}_2^-$



1. Cấu hình electron phân tử: $(\sigma_{1s})^2 (\sigma_{1s}^*)^2 (\sigma_{2s})^2$
2. Bậc liên kết: 1
3. Từ tính (thuận từ hay nghịch từ): Nghịch từ



1. Cấu hình electron phân tử: $(\sigma_{1s})^2 (\sigma_{1s}^*)^2 (\sigma_{2s})^1$
2. Bậc liên kết: 0.5
3. Từ tính (thuận từ hay nghịch từ): thuận từ



1. Cấu hình electron phân tử: $(\sigma_{1s})^2 (\sigma_{1s}^*)^2 (\sigma_{2s})^2 (\sigma_{2s}^*)^1$
2. Bậc liên kết: 0.5
3. Từ tính (thuận từ hay nghịch từ): thuận từ

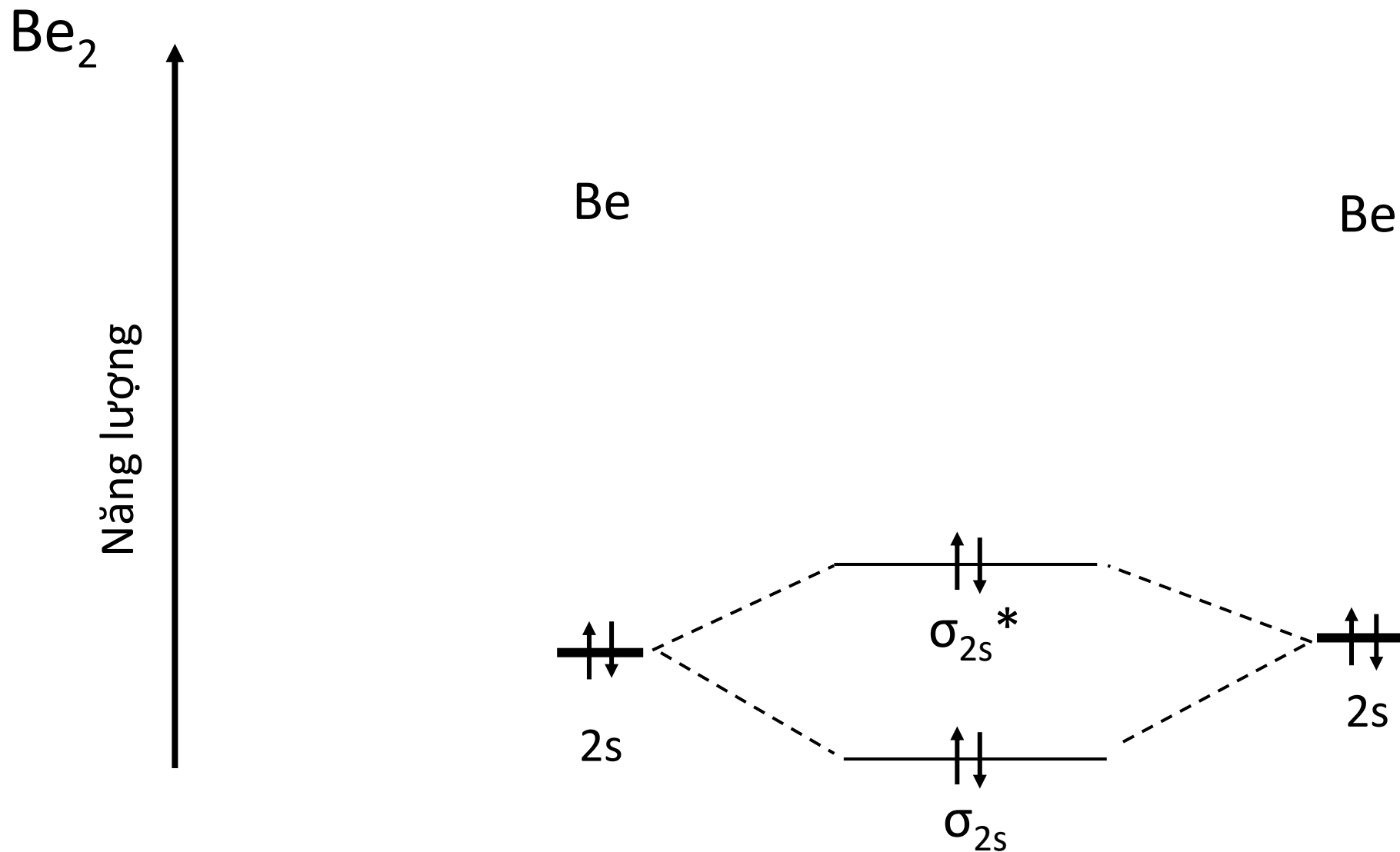
Bậc liên kết càng cao thì độ dài liên kết càng ngắn, và độ bền liên kết càng cao

c. Li_2 , Li_2^+ , Li_2^-

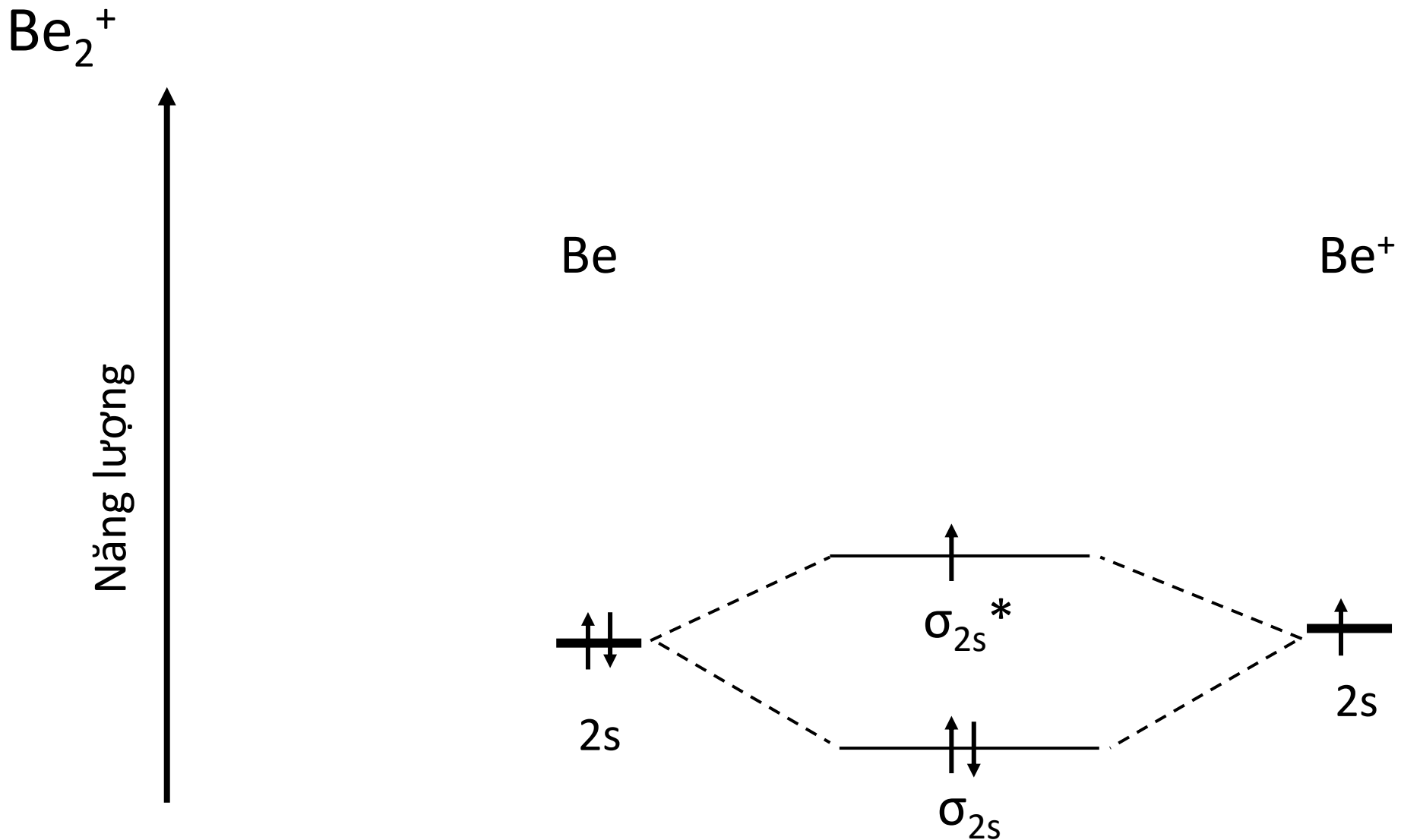
Bậc liên kết: $\text{Li}_2 > \text{Li}_2^+ = \text{Li}_2^-$ ($1 > 0.5 = 0.5$)

Độ dài liên kết: $\text{Li}_2 < \text{Li}_2^+ = \text{Li}_2^-$

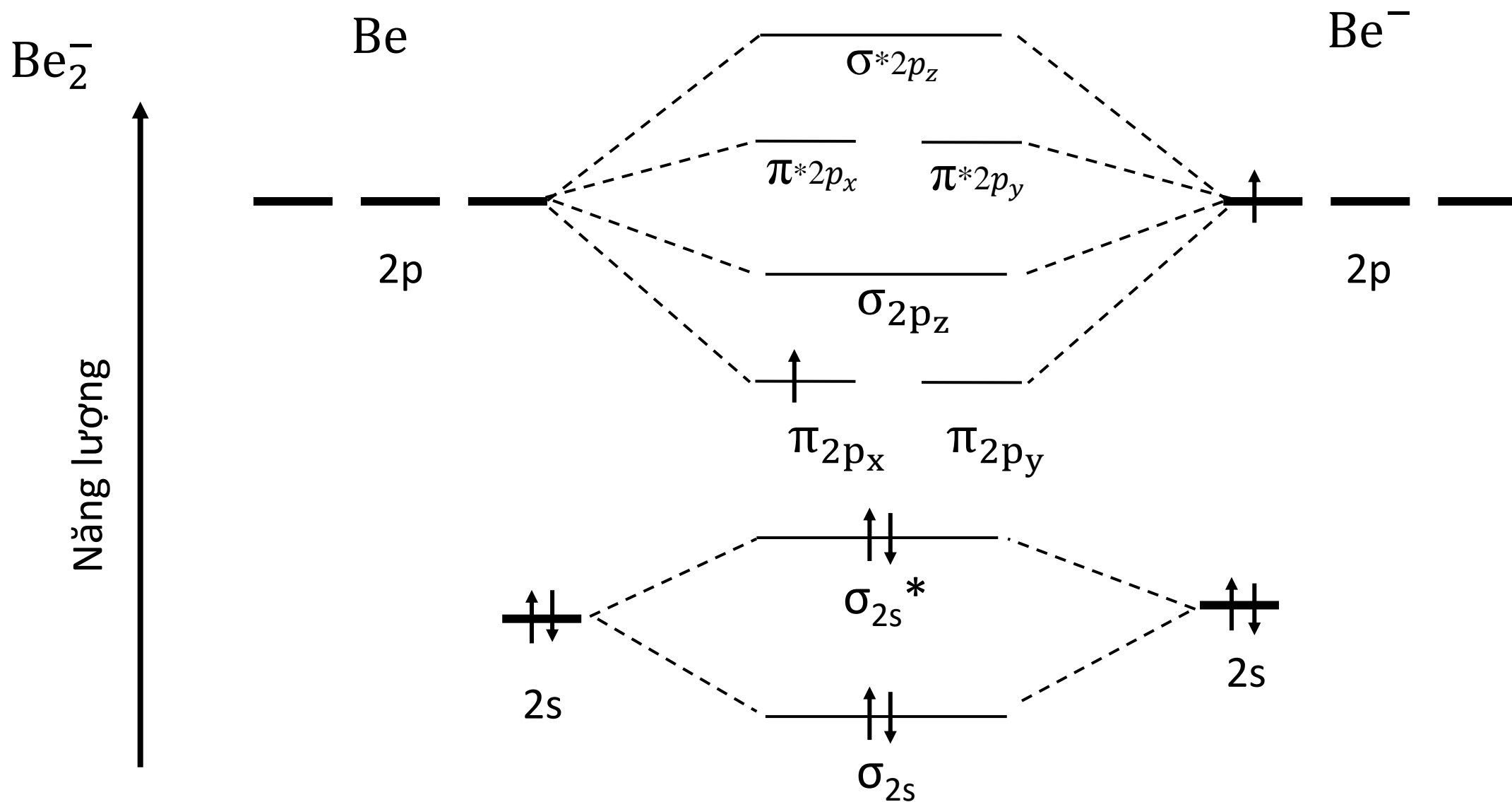
Độ bền liên kết: $\text{Li}_2 > \text{Li}_2^+ = \text{Li}_2^-$



1. Cấu hình electron phân tử: $(\sigma_{1s})^2 (\sigma_{1s}^*)^2 (\sigma_{2s})^2 (\sigma_{2s}^*)^2$
2. Bậc liên kết: 0 → Phân tử không tồn tại
3. Từ tính (thuận từ hay nghịch từ):



1. Cấu hình electron phân tử: $(\sigma_{1s})^2 (\sigma_{1s}^*)^2 (\sigma_{2s})^2 (\sigma_{2s}^*)^1$
2. Bậc liên kết: 0.5
3. Từ tính (thuận từ hay nghịch từ): thuận từ



1. Cấu hình electron phân tử: $(\sigma_{1s})^2 (\sigma_{1s}^*)^2 (\sigma_{2s})^2 (\sigma_{2s}^*)^1 (\pi_{2p})^1$
2. Bậc liên kết: 0.5
3. Từ tính (thuận từ hay nghịch từ): thuận từ

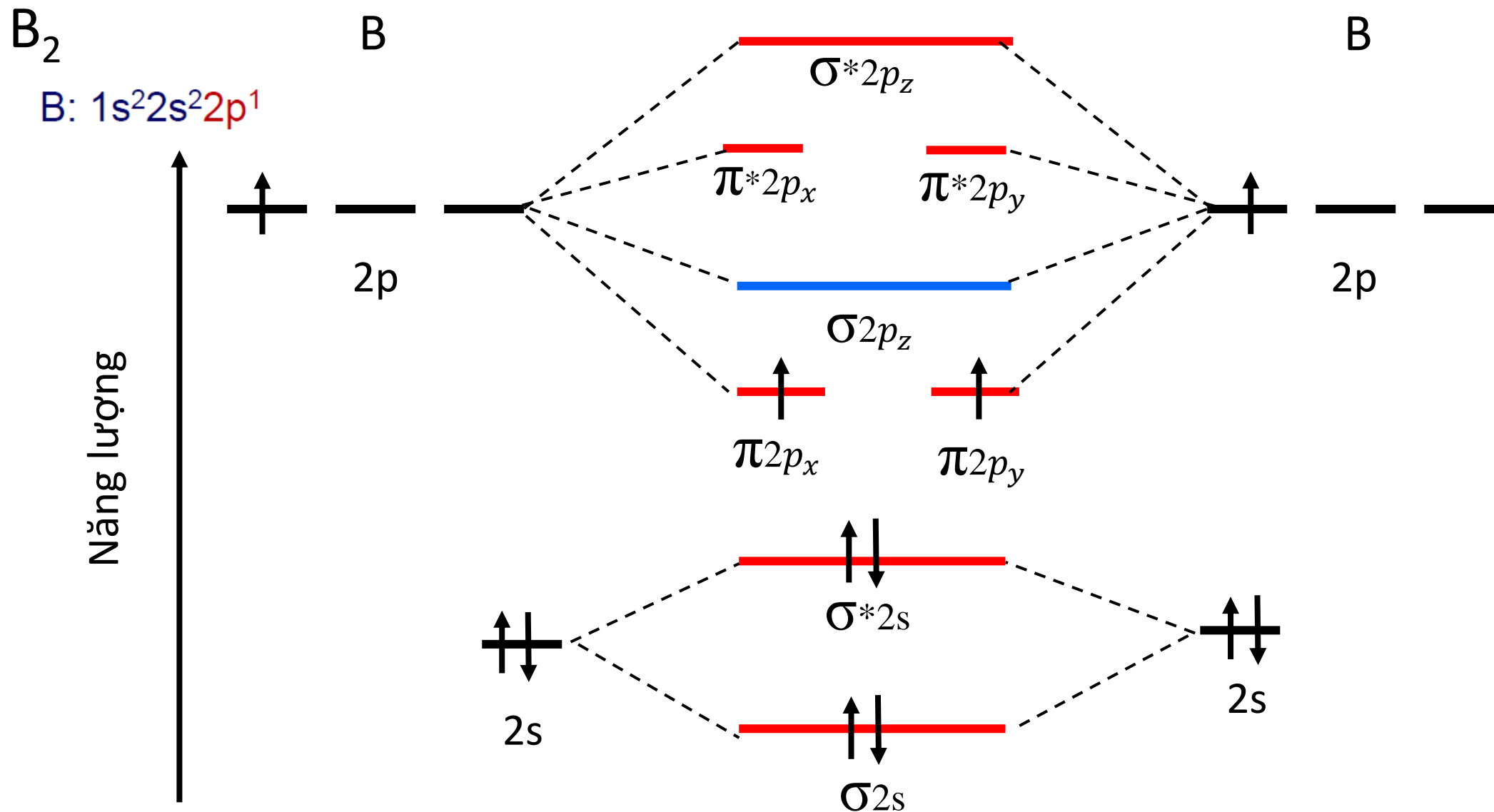
Bậc liên kết càng cao thì độ dài liên kết càng ngắn, và độ bền liên kết càng cao

d. Be_2 , Be_2^+ , Be_2^-

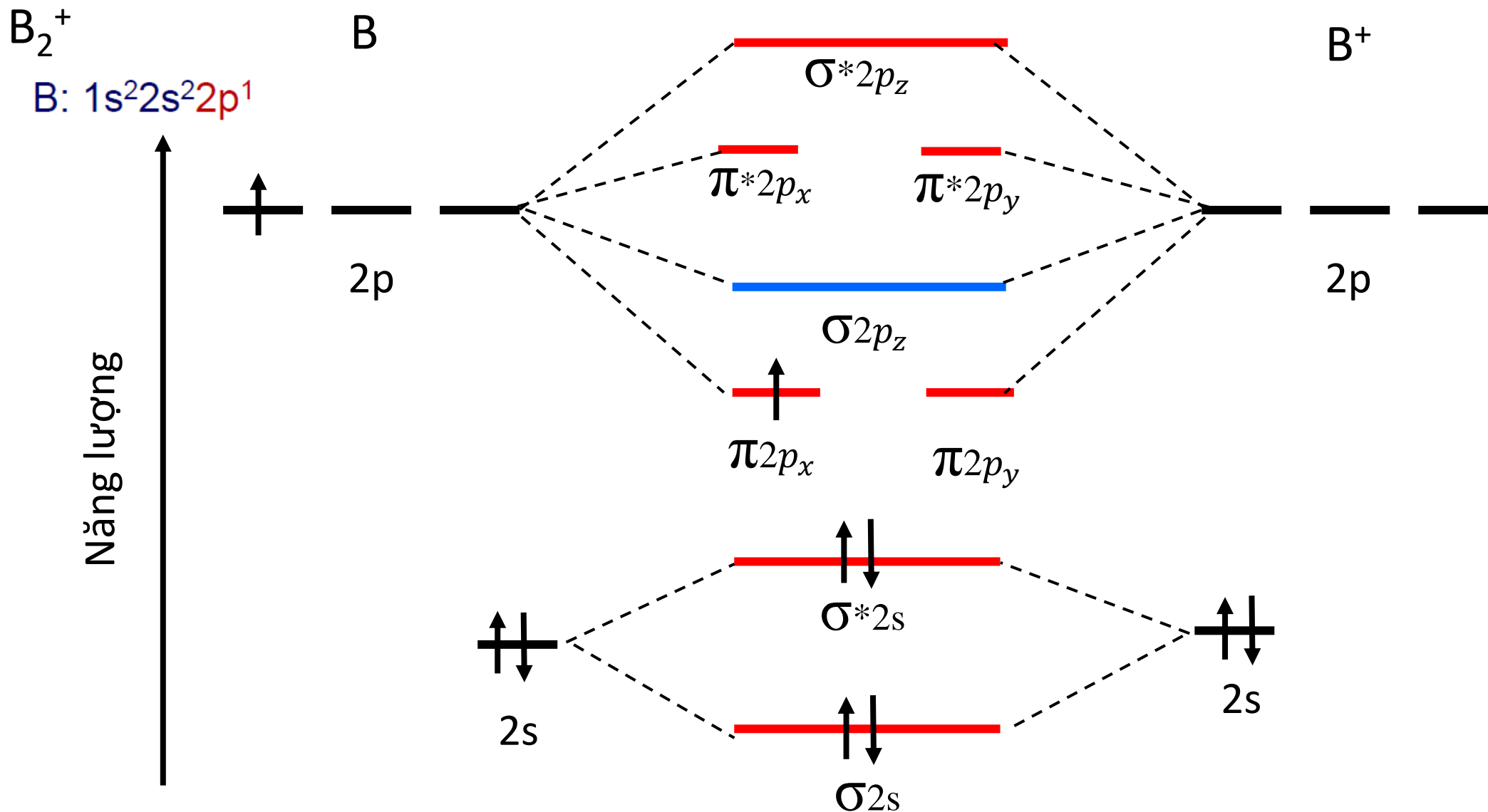
Bậc liên kết: $\text{Be}_2 < \text{Be}_2^+ = \text{Be}_2^-$ ($0 < 0.5 = 0.5$)

Độ dài liên kết: $\text{Be}_2^+ = \text{Be}_2^-$

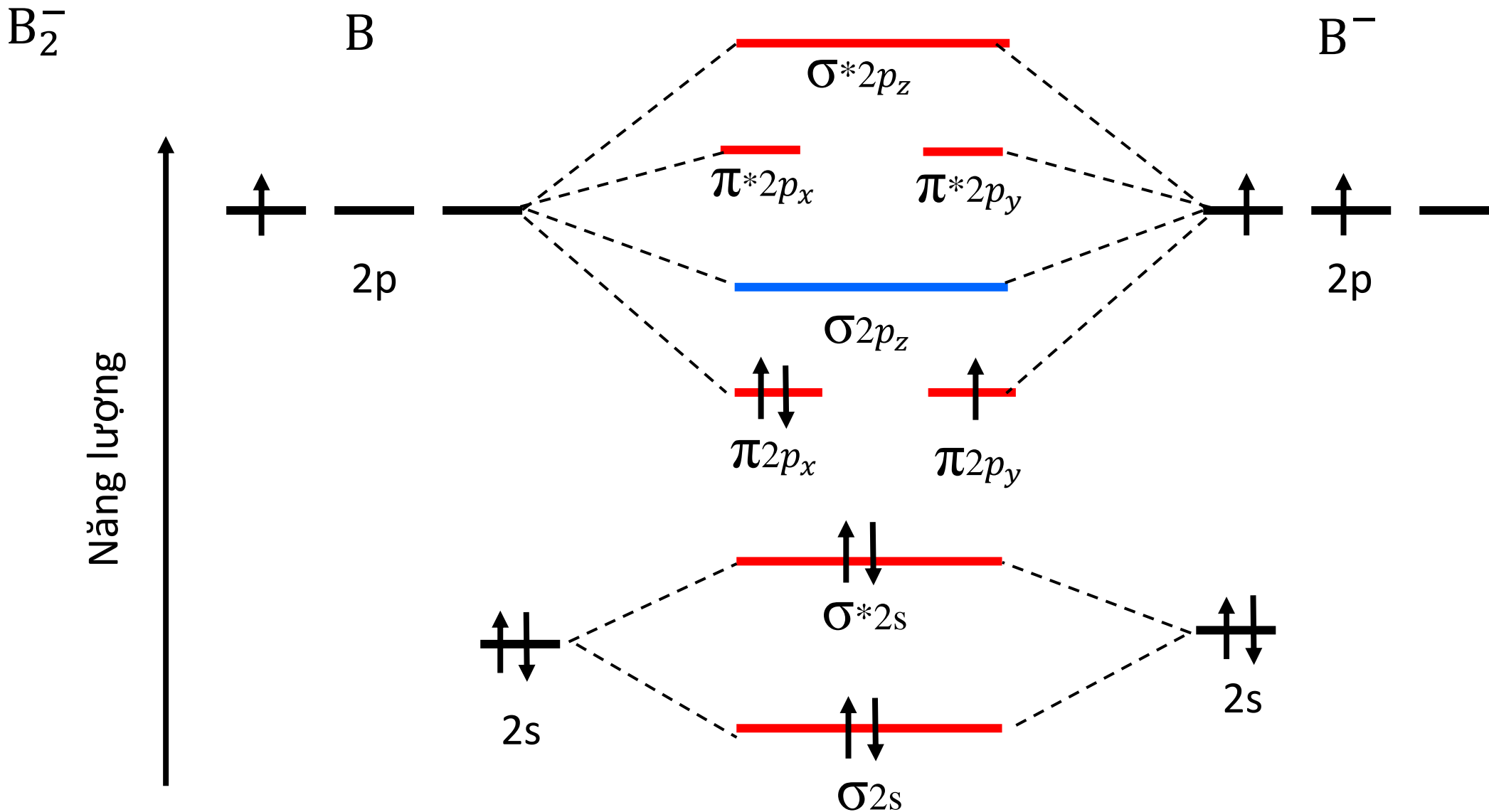
Độ bền liên kết: $\text{Be}_2 < \text{Be}_2^+ = \text{Be}_2^-$



1. Cấu hình electron phân tử: $(\sigma_{1s})^2 (\sigma^*_{1s})^2 (\sigma_{2s})^2 (\sigma^*_{2s})^1 (\pi_{2p}^1 \pi_{2p}^1)$
2. Bậc liên kết: 1
3. Từ tính (thuận từ hay nghịch từ): thuận từ



1. Cấu hình electron phân tử: $(\sigma_{1s})^2 (\sigma_{1s}^*)^2 (\sigma_{2s})^2 (\sigma_{2s}^*)^1 (\pi_{2p})^1$
2. Bậc liên kết: 0.5
3. Từ tính (thuận từ hay nghịch từ): thuận từ



1. Cấu hình electron phân tử: $(\sigma_{1s})^2 (\sigma^*_{1s})^2 (\sigma_{2s})^2 (\sigma^*_{2s})^1 (\pi_{2p}^2 \pi_{2p}^1)$
2. Bậc liên kết: 1.5
3. Từ tính (thuận từ hay nghịch từ): thuận từ

Bậc liên kết càng cao thì độ dài liên kết càng ngắn, và độ bền liên kết càng cao

e. B_2 , B_2^+ , B_2^-

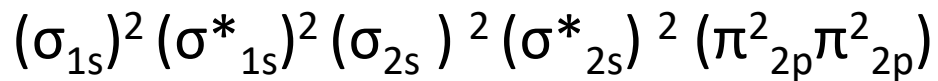
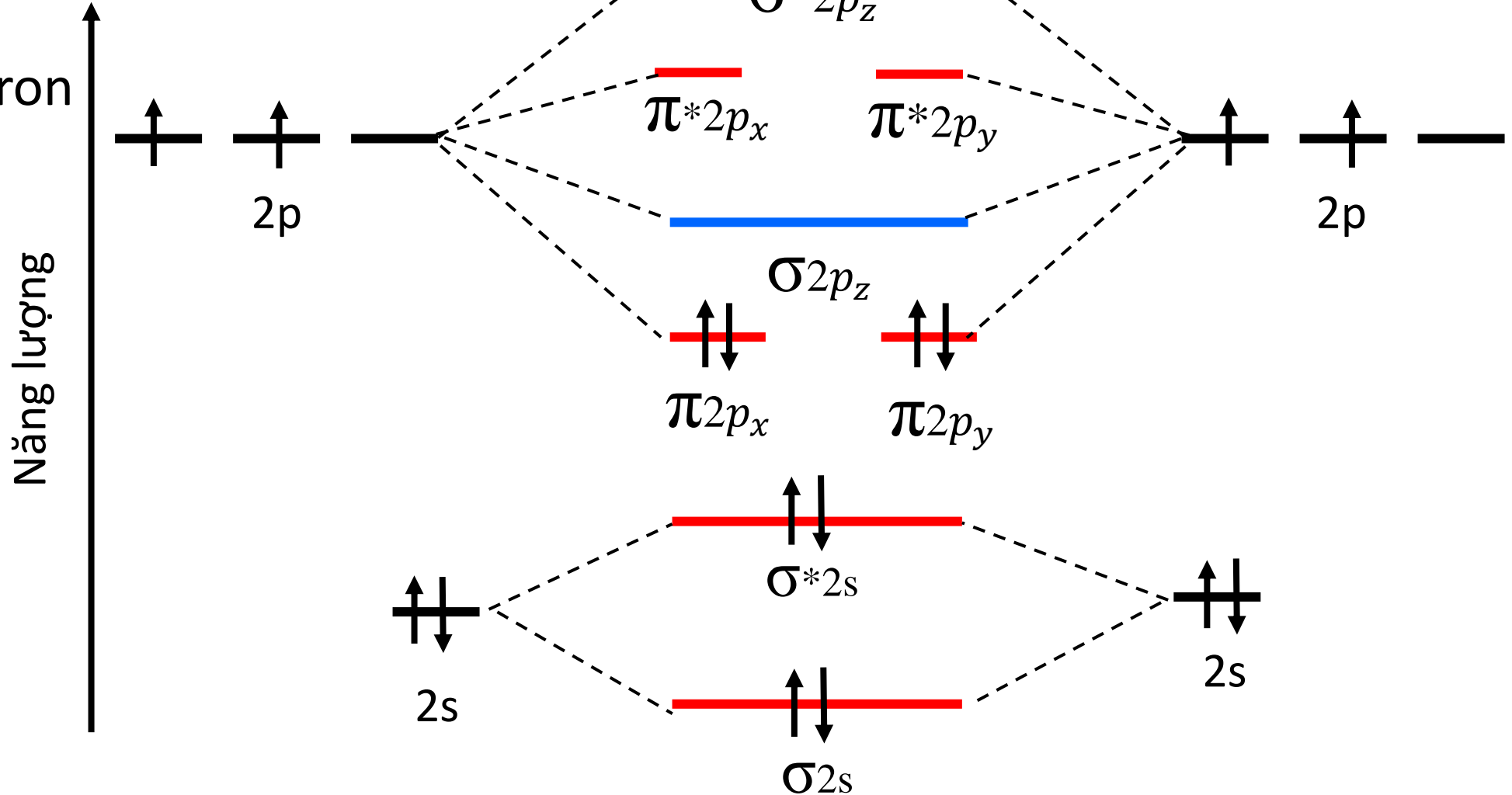
Bậc liên kết: $B_2^+ < B_2 < B_2^-$ ($0.5 < 1 < 1.5$)

Độ dài liên kết: $B_2^+ > B_2 > B_2^-$

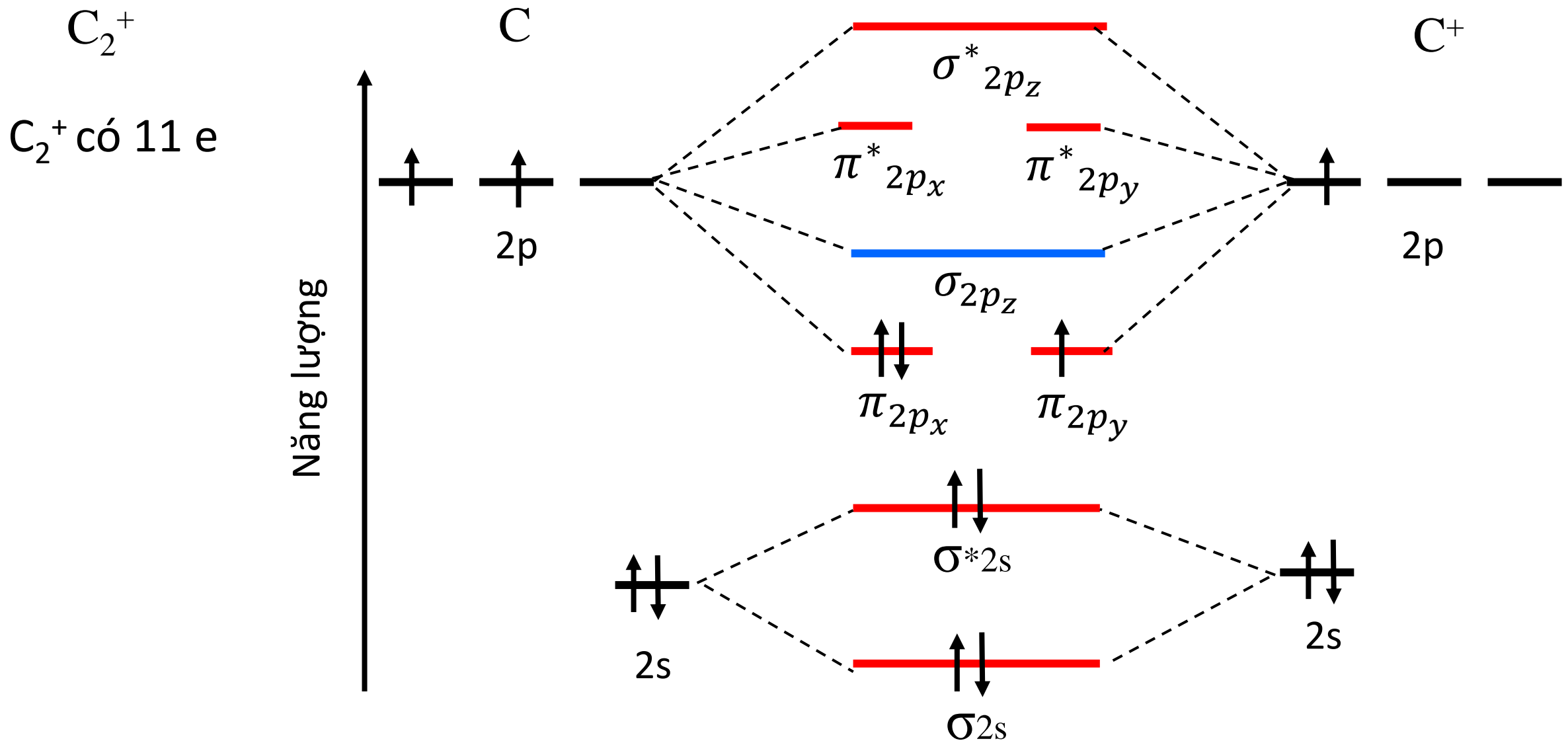
Độ bền liên kết: $B_2^+ < B_2 < B_2^-$

➤ Phân tử C_2

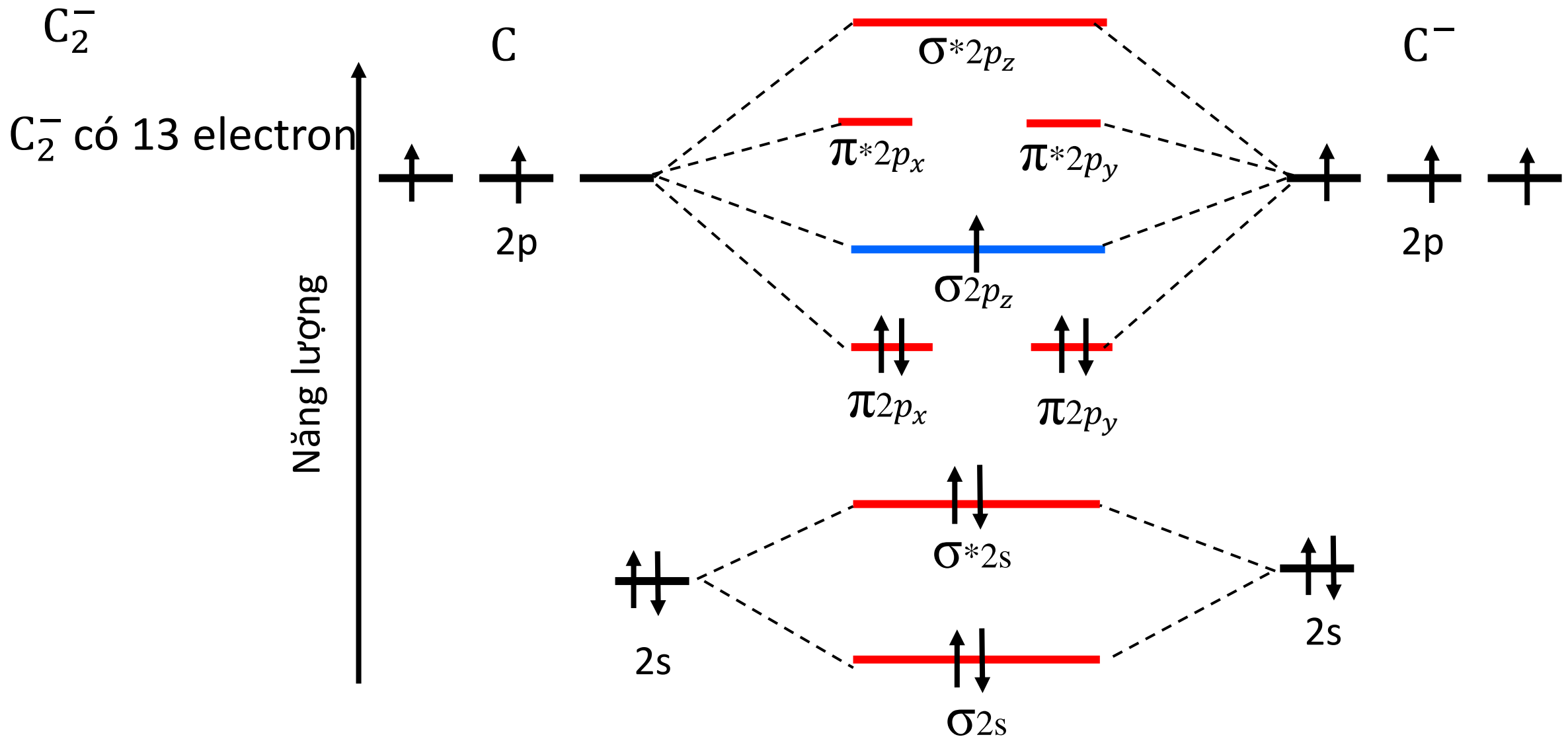
C: $1s^2 2s^2 2p^2$
 C_2 có 12 electron



1. Bậc liên kết: 2
2. Từ tính (thuận từ hay nghịch từ): nghịch từ



1. Cấu hình electron phân tử: $(\sigma_{1s})^2 (\sigma_{1s}^*)^2 (\sigma_{2s})^2 (\sigma_{2s}^*)^2 (\pi_{2p}^2 \pi_{2p}^1)$
2. Bậc liên kết: 1.5
3. Từ tính (thuận từ hay nghịch từ): thuận từ



1. Cấu hình electron phân tử: $\sigma_{1s}^2 \sigma_{1s}^{*2} \sigma_{2s}^2 \sigma_{2s}^{*2} (\pi_{2p}^2 \pi_{2p}^2) \sigma_{2p}^1$
2. Bậc liên kết: 2.5
3. Từ tính (thuận từ hay nghịch từ): thuận từ

Bậc liên kết càng cao thì độ dài liên kết càng ngắn, và độ bền liên kết càng cao

f. C_2 , C_2^+ , C_2^-

Bậc liên kết: $C_2^+ < C_2 < C_2^-$ ($1.5 < 2 < 2.5$)

Độ dài liên kết: $C_2^+ > C_2 > C_2^-$

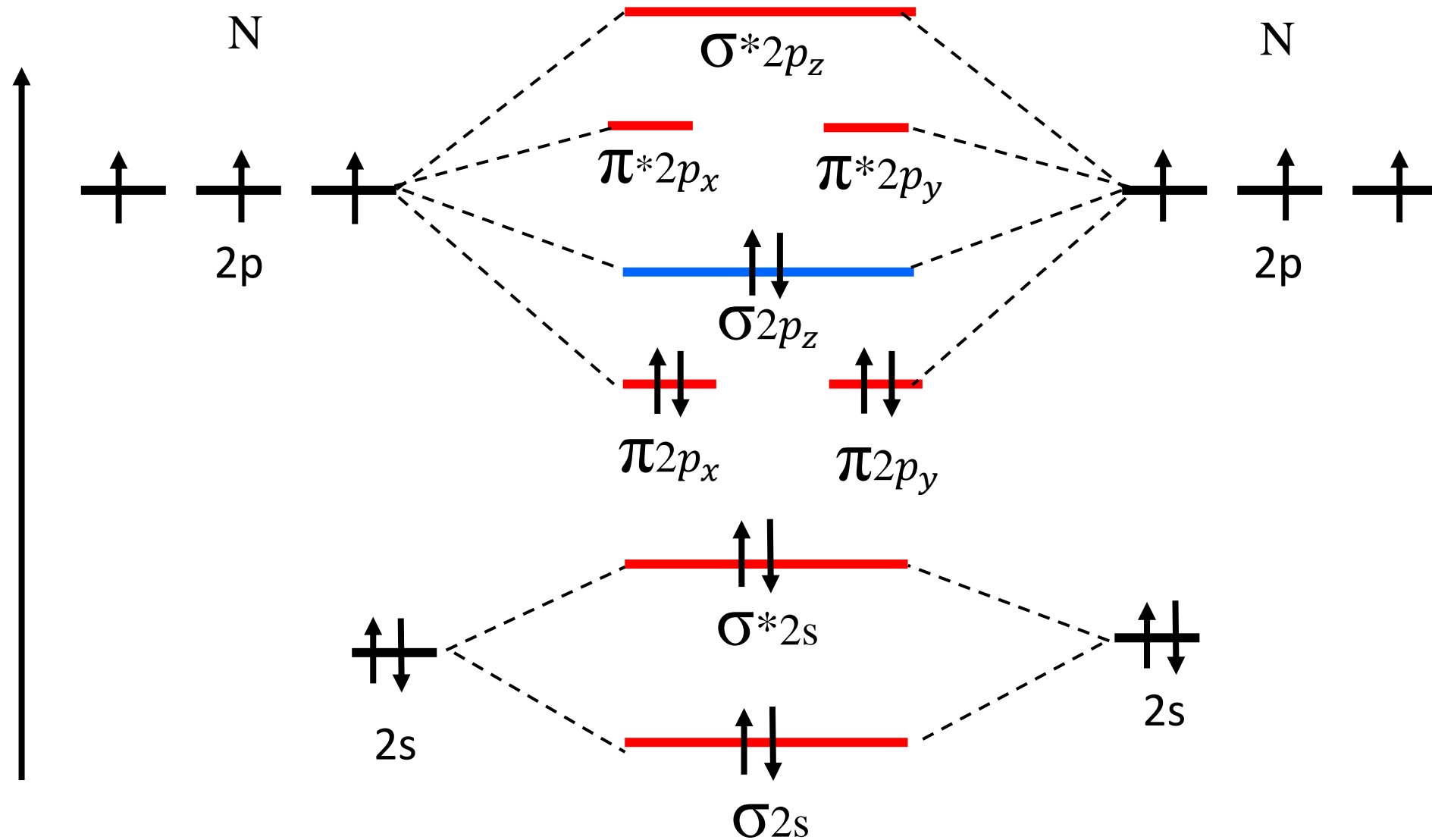
Độ bền liên kết: $C_2^+ < C_2 < C_2^-$

➤ Phân tử N_2

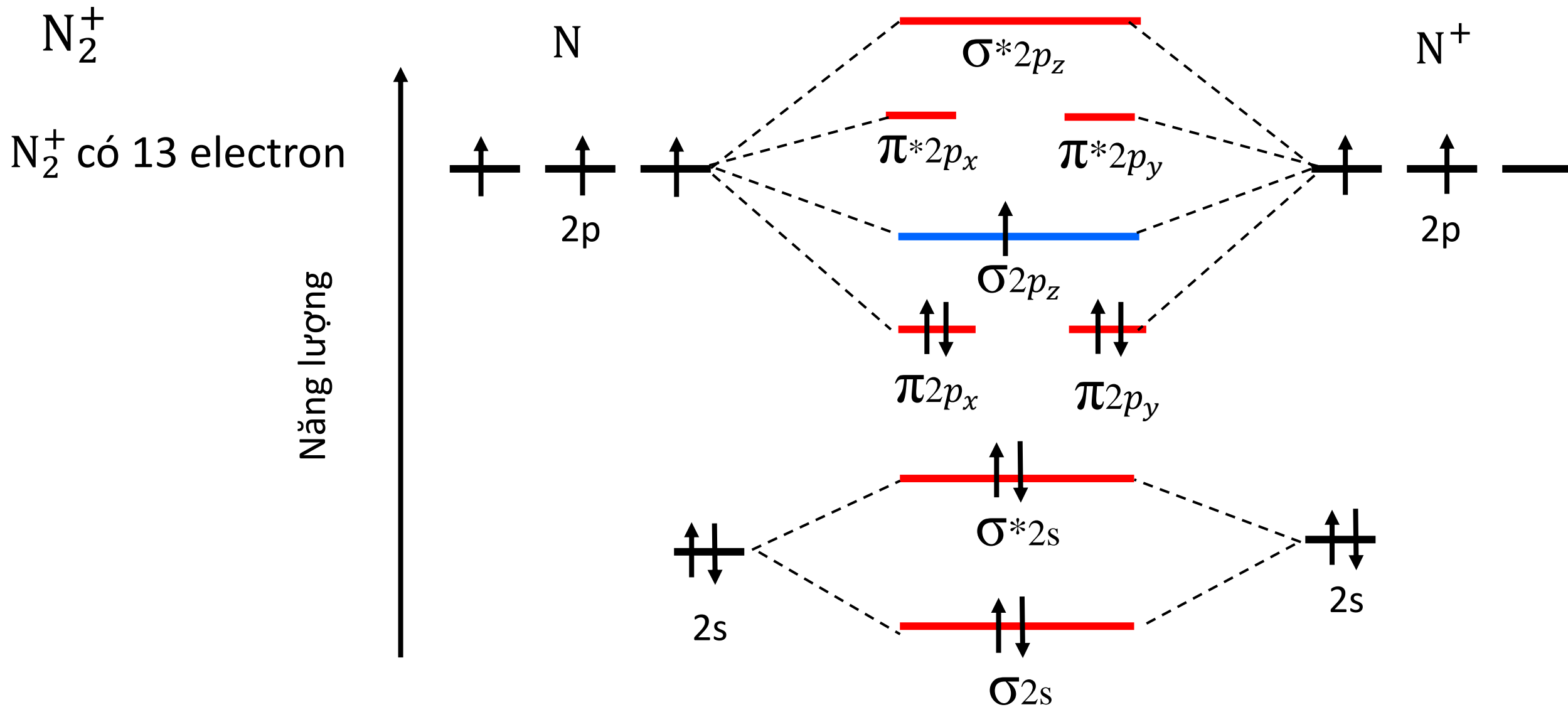
N: $1s^2 2s^2 2p^3$

N_2 có 14 electron

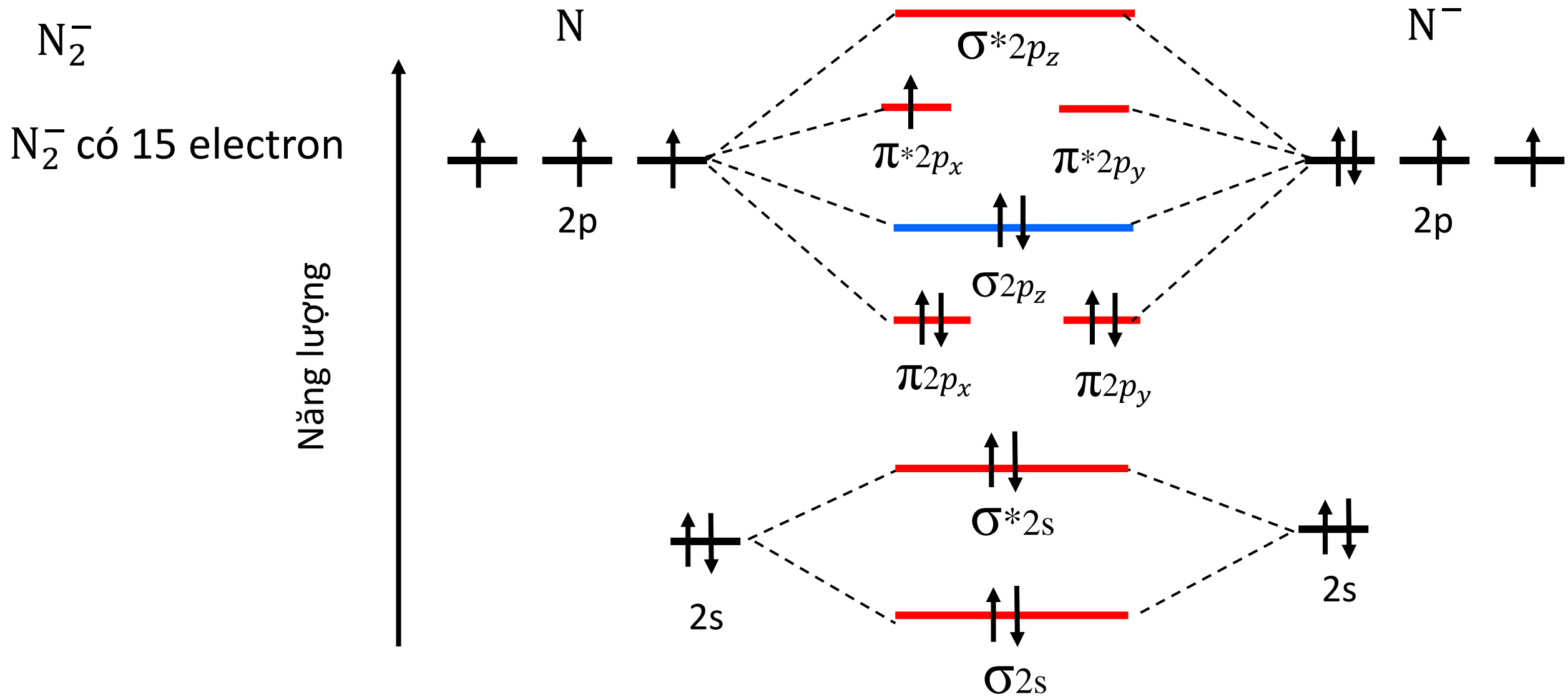
Năng lượng



1. Cấu hình electron phân tử: $\sigma_{2s}^2 \sigma_{2s}^{*2} (\pi_{2p}^2 \pi_{2p}^2) \sigma_{2p}^2$
2. Bậc liên kết: 3
3. Từ tính (thuận từ hay nghịch từ): Nghịch từ



1. Cấu hình electron phân tử: $\sigma_{2s}^2 \sigma_{2s}^{*2} (\pi_{2p}^2 \pi_{2p}^2) \sigma_{2p}^1$
2. Bậc liên kết: 2.5
3. Từ tính (thuận từ hay nghịch từ): Thuận từ



1. Cấu hình electron phân tử: $\sigma_{2s}^2 \sigma_{2s}^{*2} (\pi_{2p}^2 \pi_{2p}^2) \sigma_{2p}^2 (\pi_{2p}^*)^1$
2. Bậc liên kết: 2.5
3. Từ tính (thuận từ hay nghịch từ): Thuận từ

Bậc liên kết càng cao thì độ dài liên kết càng ngắn, và độ bền liên kết càng cao

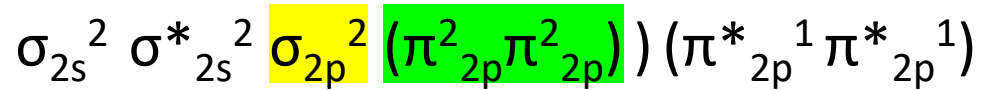
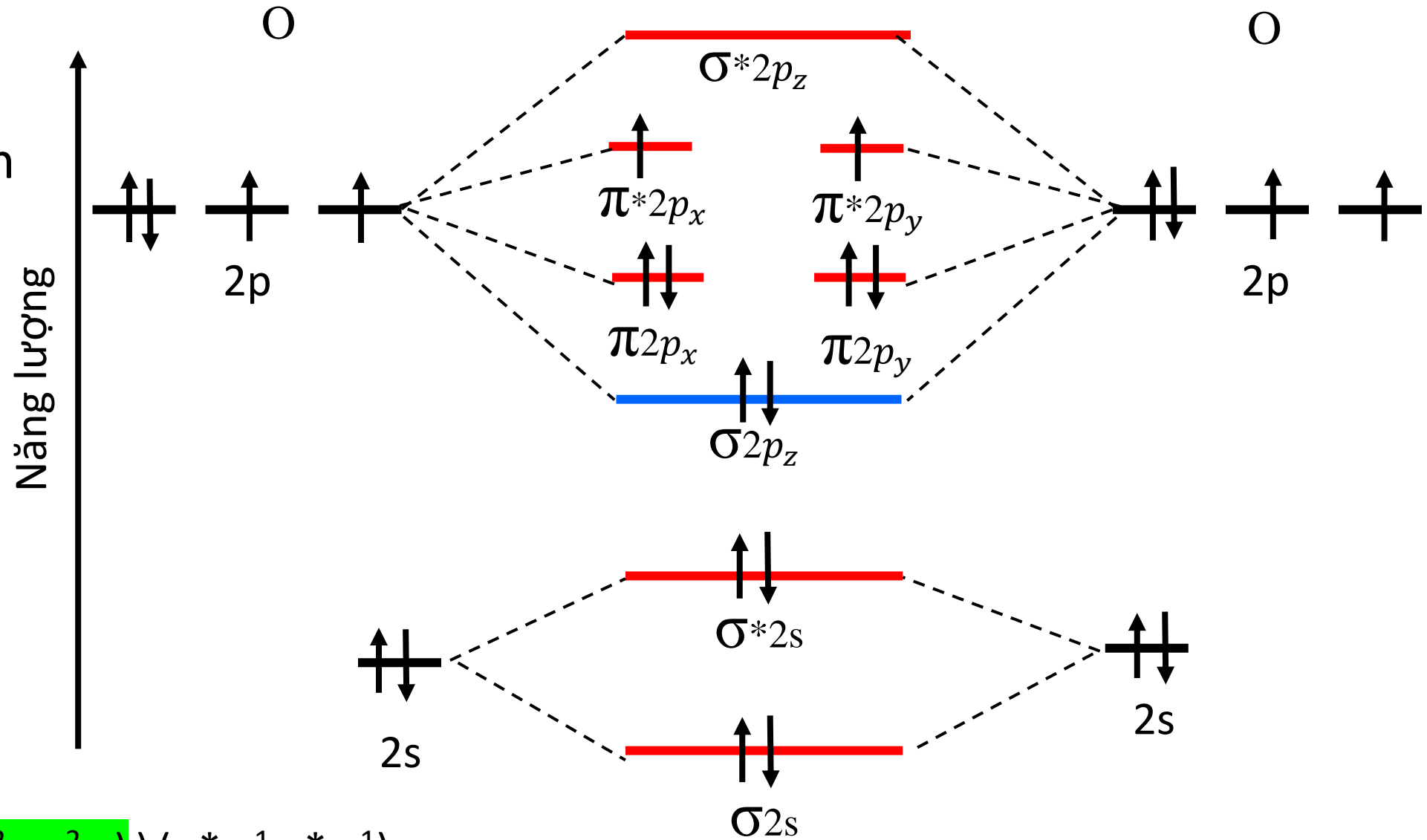
g. N_2 , N_2^+ , N_2^-

Bậc liên kết: $N_2 > N_2^+ = N_2^-$ ($3 > 2.5 = 2.5$)

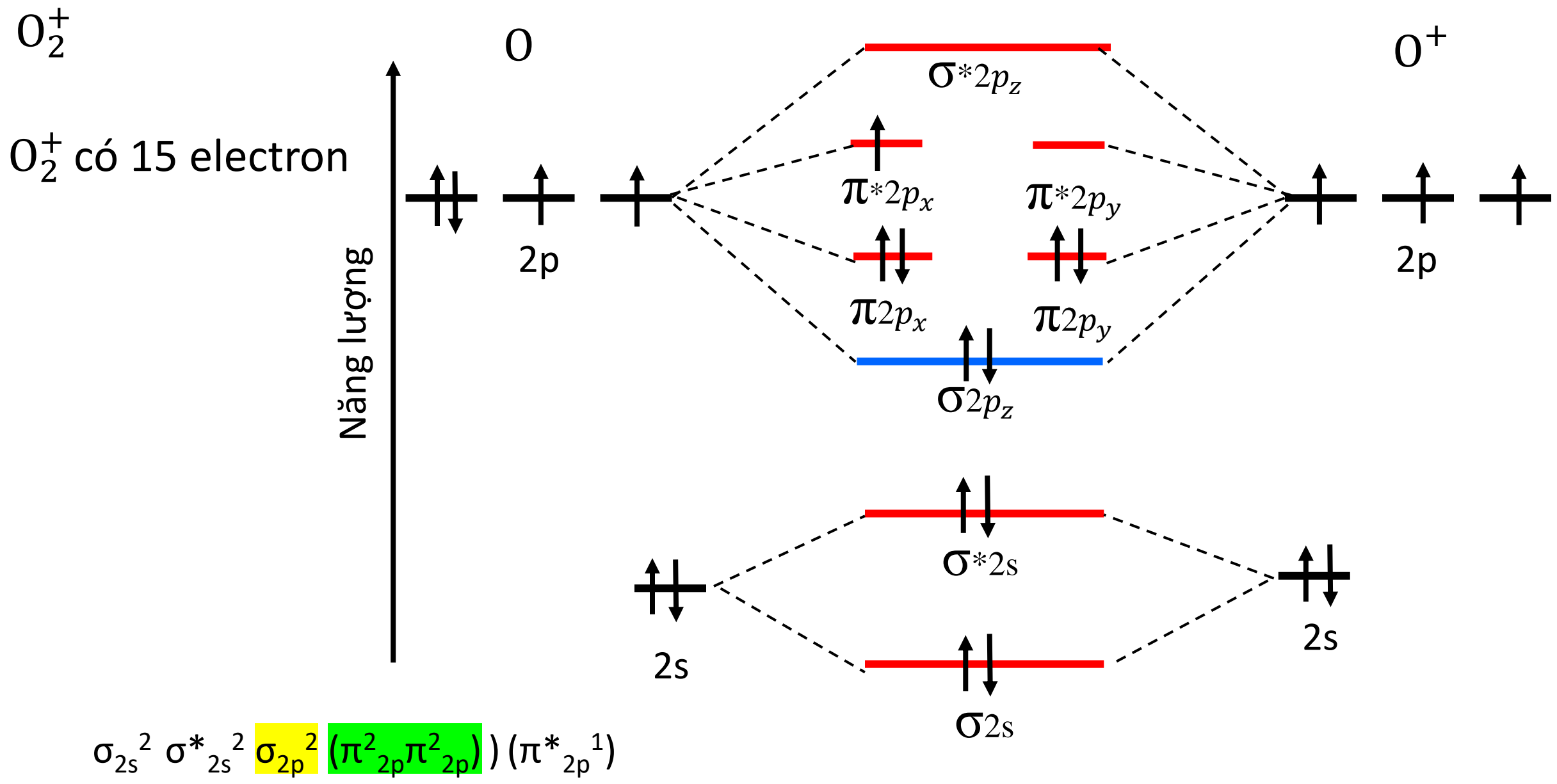
Độ dài liên kết: $N_2 < N_2^+ = N_2^-$

Độ bền liên kết: $N_2 > N_2^+ = N_2^-$

➤ Phân tử O_2
 $O: 1s^2 2s^2 2p^4$
 O_2 có 16 electron



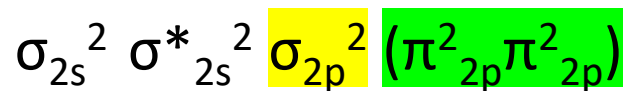
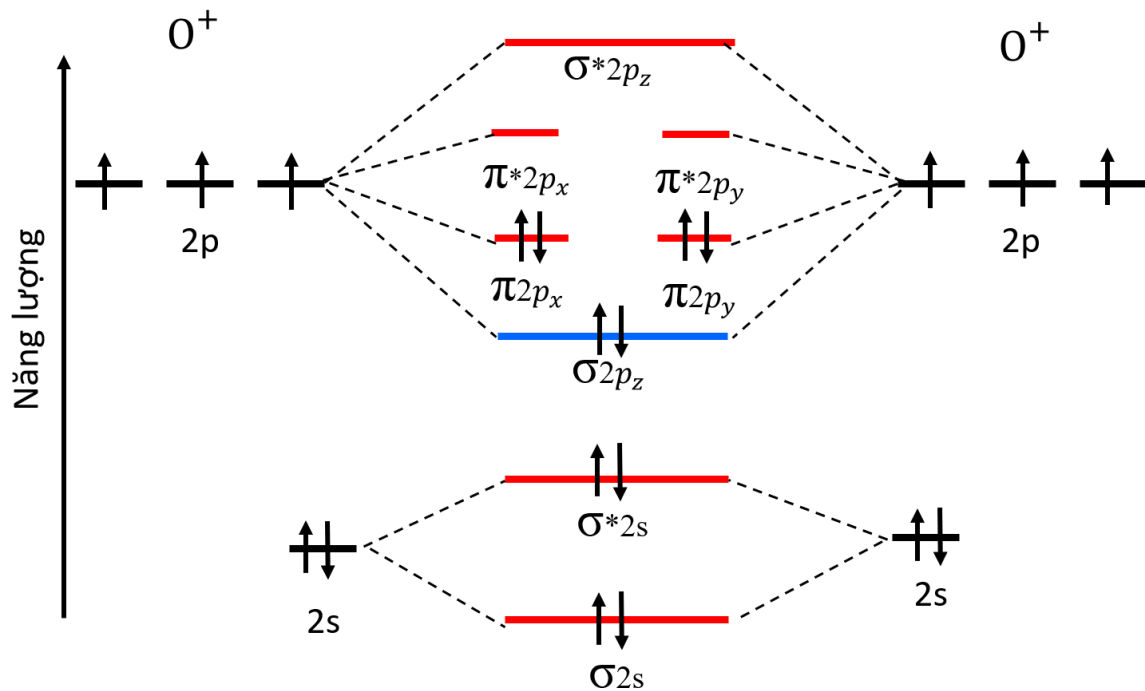
1. Bậc liên kết: 2
2. Từ tính (thuận từ hay nghịch từ): Thuận từ



1. Bậc liên kết: 2.5
2. Từ tính (thuận từ hay nghịch từ): Thuận từ

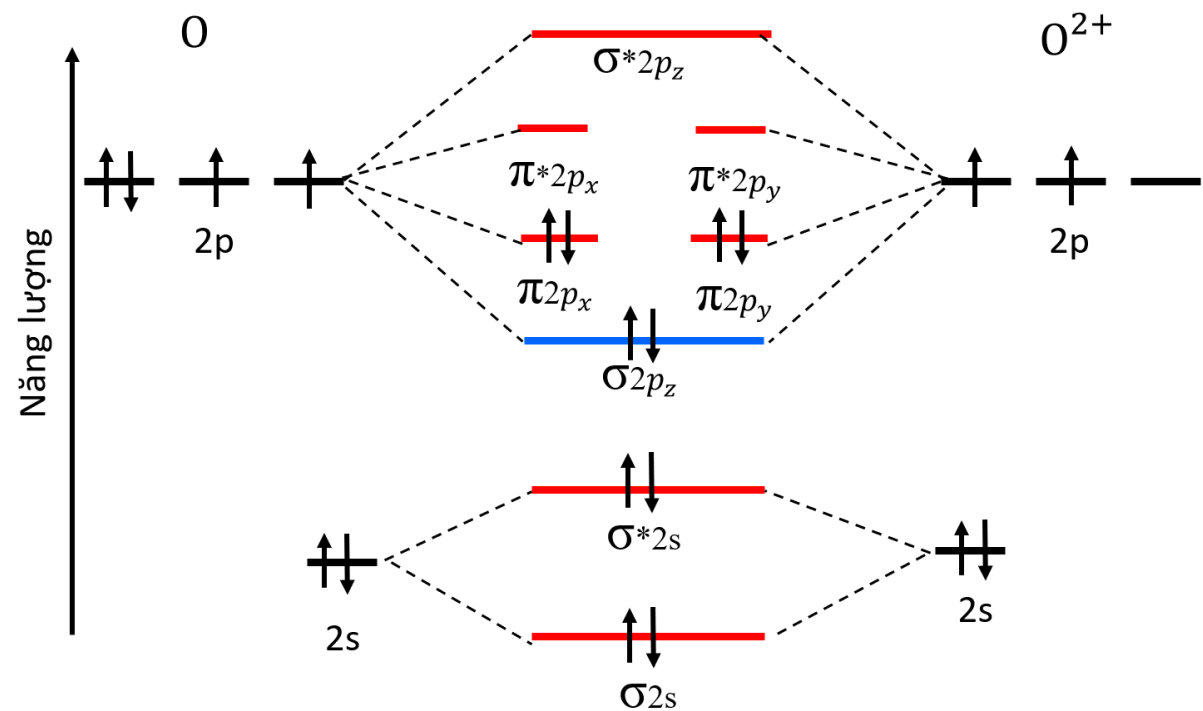
O_2^{2+} có 14 electron

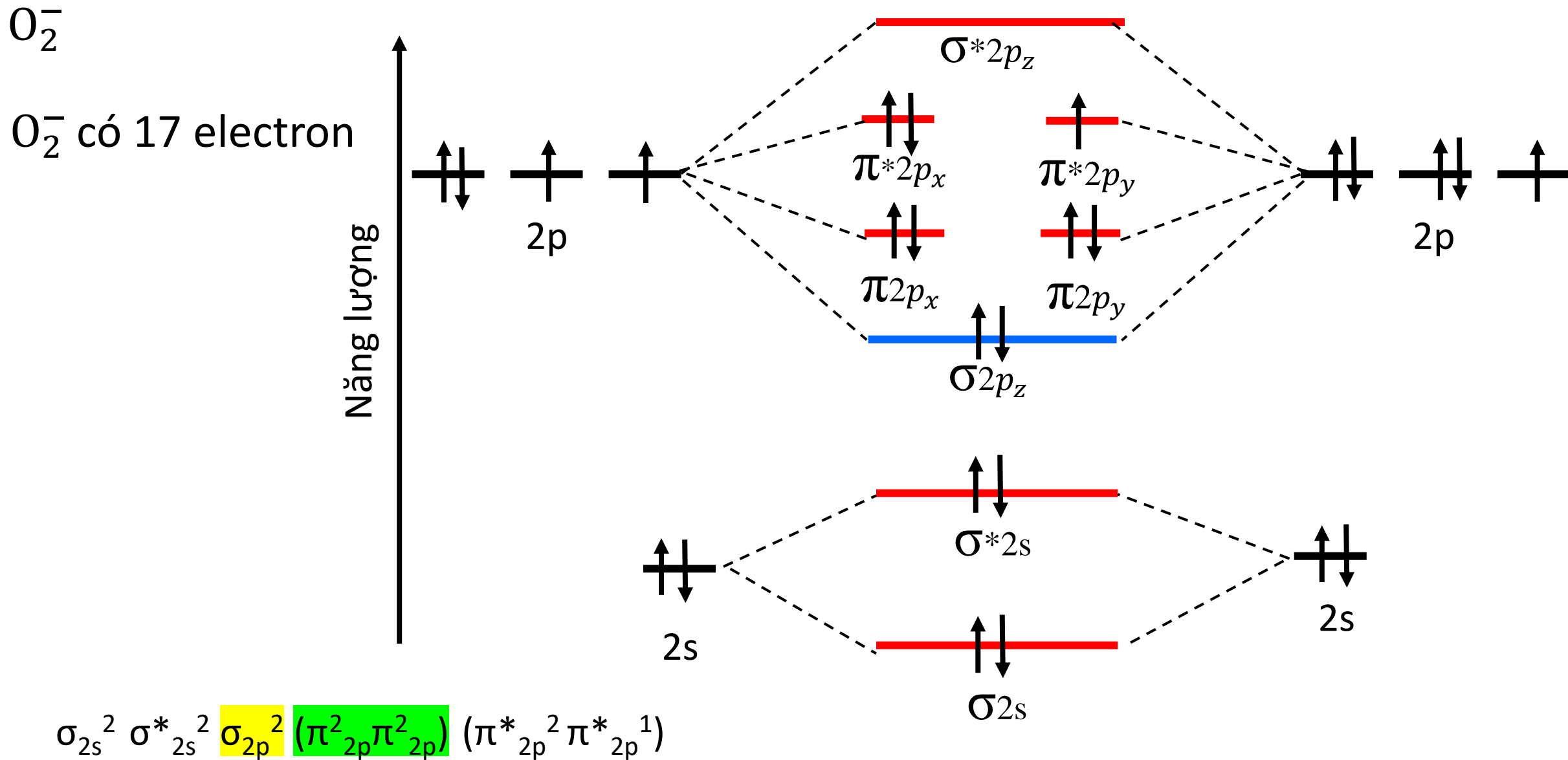
Em có thể xem O_2^{2+} như là kết hợp của O^+ và O^+ .
 Từ đó, em biểu diễn AO của 2 O^+ có 5 e là $2s^2 2p^3$
 (vì O có 6e hóa trị $2s^2 2p^4$ mất 1 thành O^+).



1. Bậc liên kết: 3
2. Từ tính (thuận từ hay nghịch từ): Nghịch từ

Em có thể xem O_2^{2+} như là kết hợp của O và O^{2+} cũng cho kết quả MO tương tự.
 Từ đó, em biểu diễn AO của O có 6e hóa trị $2s^2 2p^4$; và O^{2+} có 4 e là $2s^2 2p^2$.





1. Bậc liên kết: 1.5
2. Từ tính (thuận từ hay nghịch từ): Thuận từ

Bậc liên kết càng cao thì độ dài liên kết càng ngắn, và độ bền liên kết càng cao

h. O_2 , O_2^+ , O_2^{2+} , O_2^-

Bậc liên kết: $O_2^{2+} > O_2^+ > O_2 > O_2^-$ ($3 > 2.5 > 2 > 1.5$)

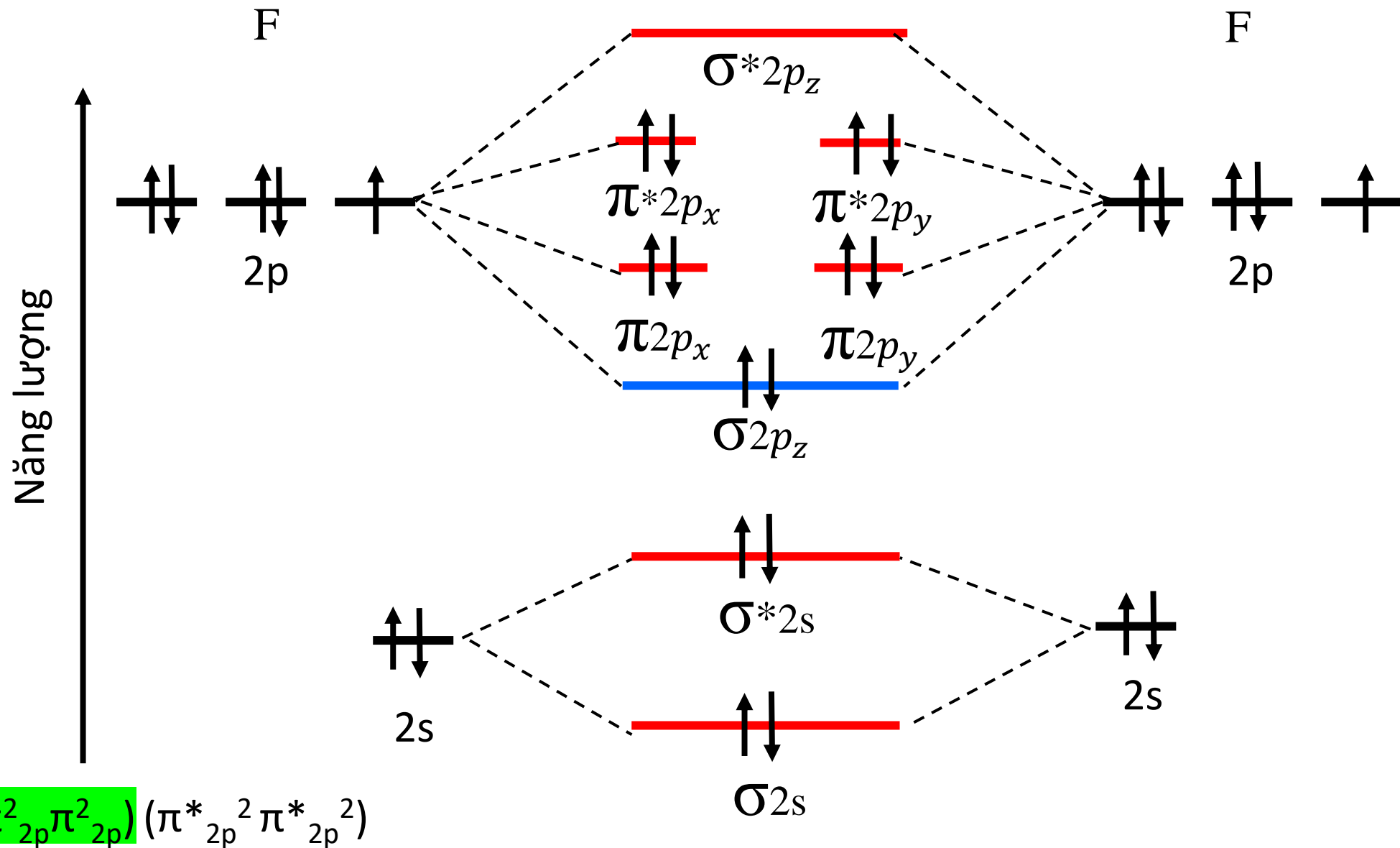
Độ dài liên kết: $O_2^{2+} < O_2^+ < O_2 < O_2^-$

Độ bền liên kết: $O_2^{2+} > O_2^+ > O_2 > O_2^-$

➤ Phân tử F_2

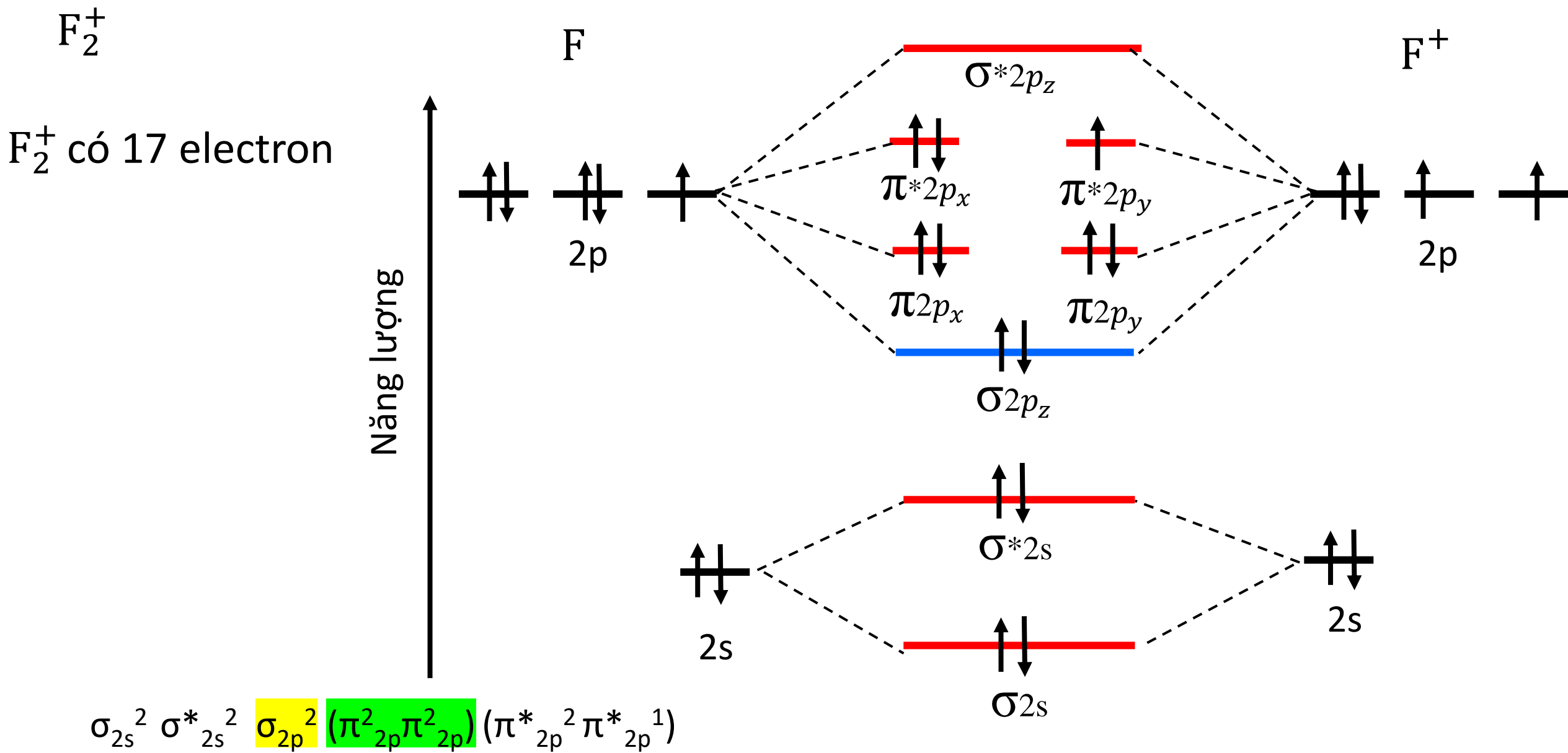
F: $1s^2 2s^2 2p^5$

F_2 có 18 electron

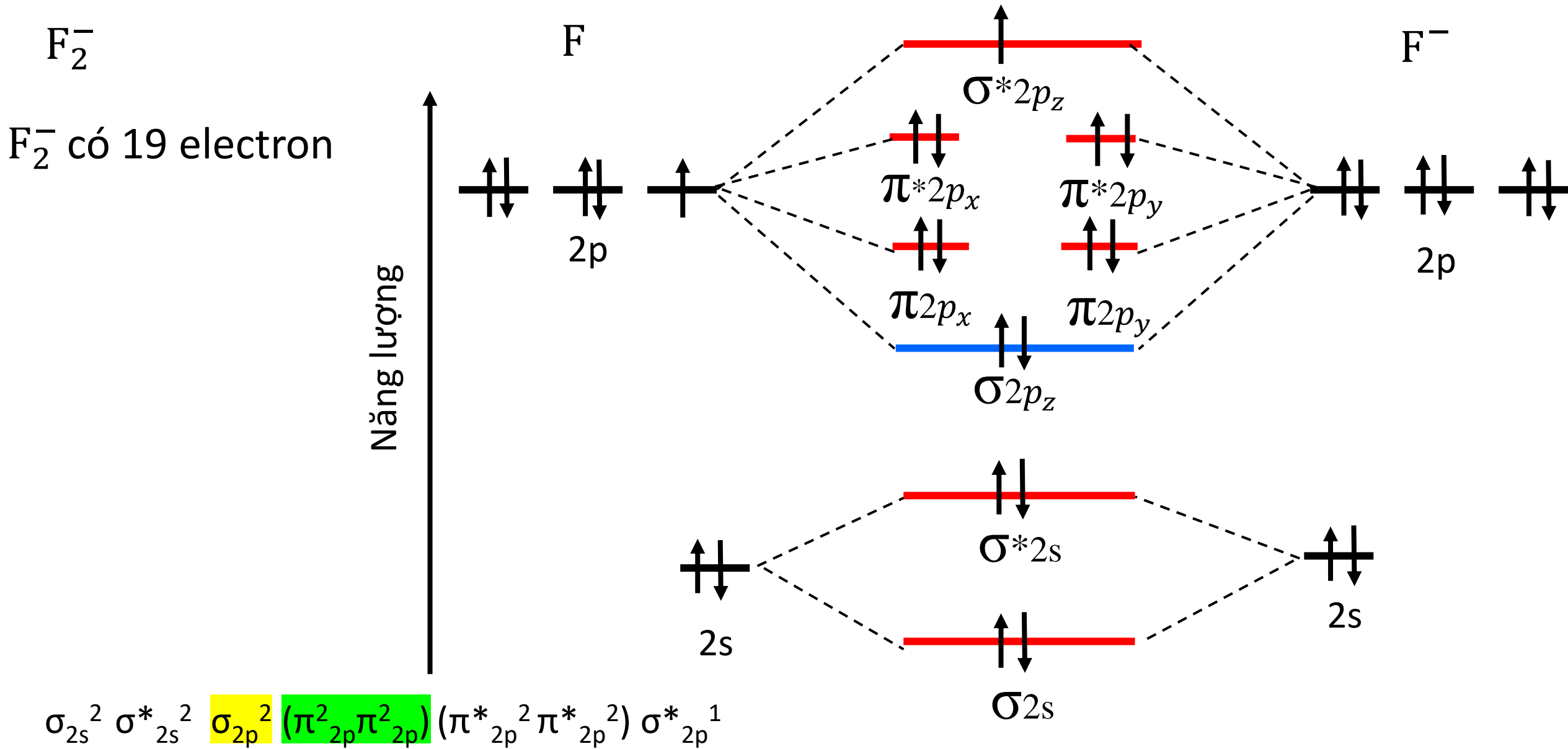


1. Bậc liên kết: 1

2. Từ tính (thuận từ hay nghịch từ): Nghịch từ



1. Bậc liên kết: 1.5
2. Từ tính (thuận từ hay nghịch từ): Thuận từ



1. Bậc liên kết: 1
2. Từ tính (thuận từ hay nghịch từ): Thuận từ

Bậc liên kết càng cao thì độ dài liên kết càng ngắn, và độ bền liên kết càng cao

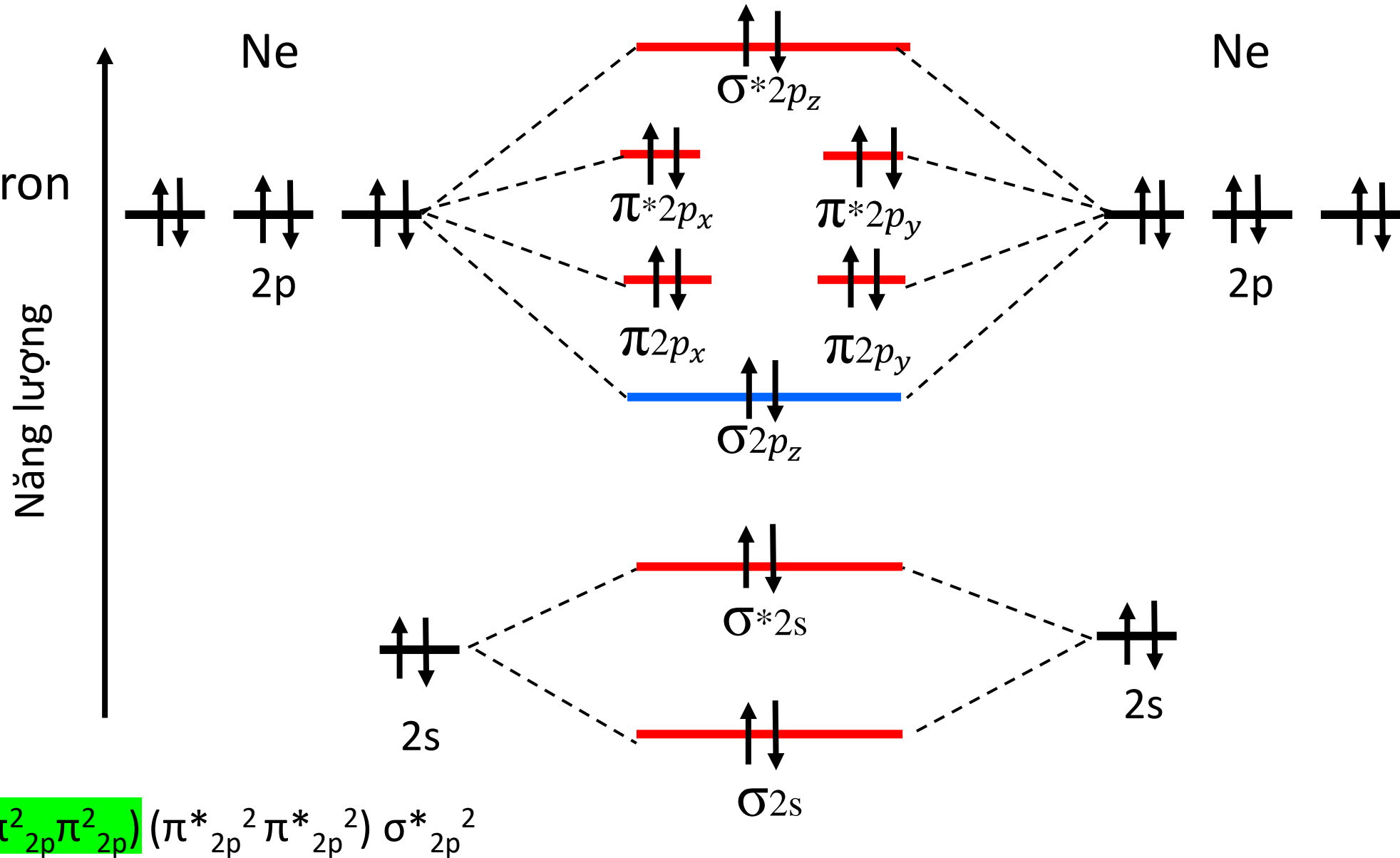
i. F_2, F_2^+, F_2^-

Bậc liên kết: $F_2^+ > F_2 = F_2^-$ ($1.5 > 1 = 1$)

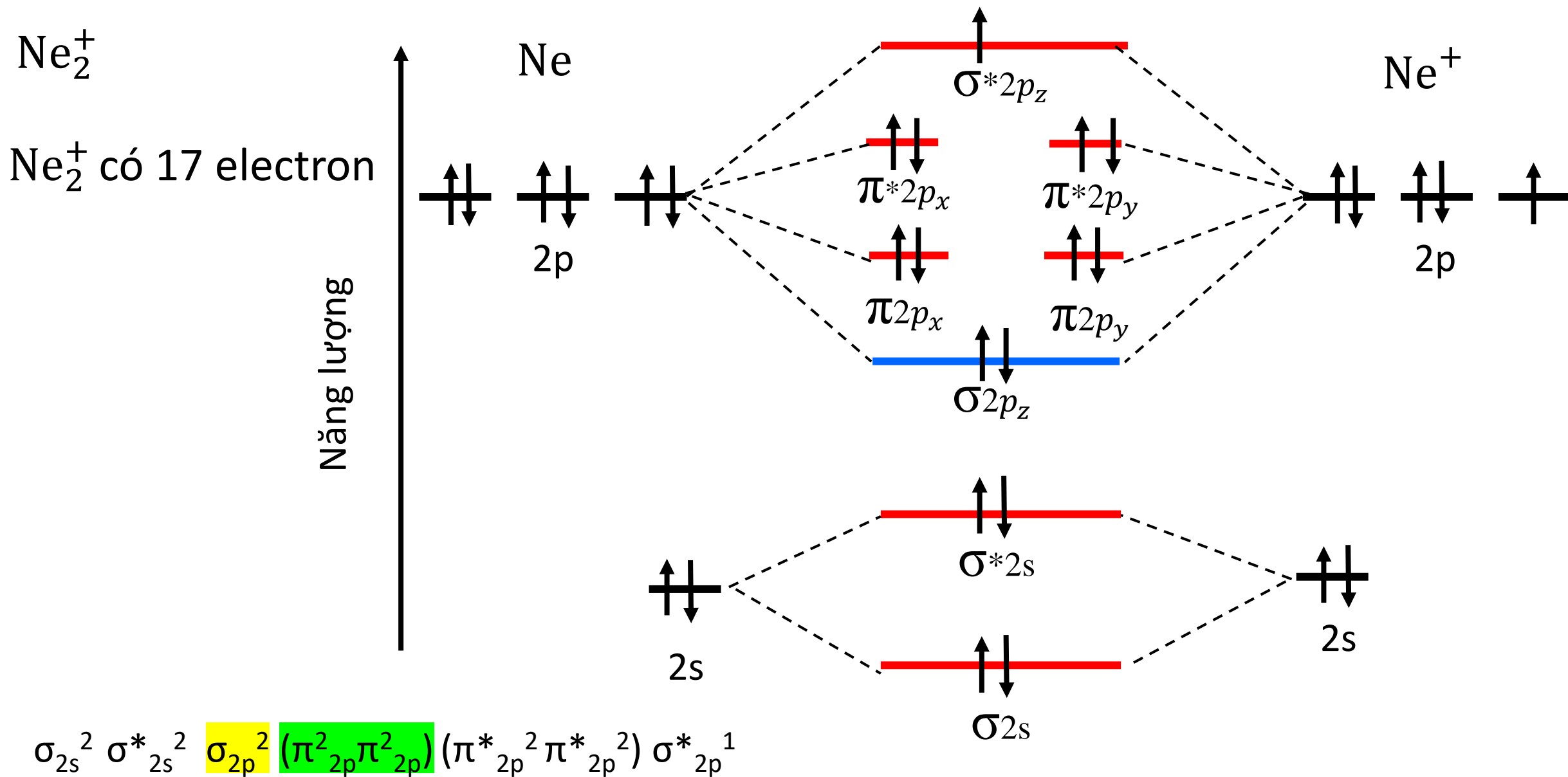
Độ dài liên kết: $F_2^+ < F_2 = F_2^-$

Độ bền liên kết: $F_2^+ > F_2 = F_2^-$

➤ Phân tử Ne_2
 $\text{Ne}: 1s^2 2s^2 2p^6$
 Ne_2 có 18 electron



1. Bậc liên kết: 0 \rightarrow Phân tử không tồn tại
2. Từ tính (thuận từ hay nghịch từ): Nghịch từ



1. Bậc liên kết: 0.5
2. Từ tính (thuận từ hay nghịch từ): Thuận từ

Bậc liên kết càng cao thì độ dài liên kết càng ngắn, và độ bền liên kết càng cao

j. Ne_2 , Ne_2^+

Bậc liên kết: $\text{Ne}_2^+ > \text{Ne}_2$ ($0.5 > 0$)

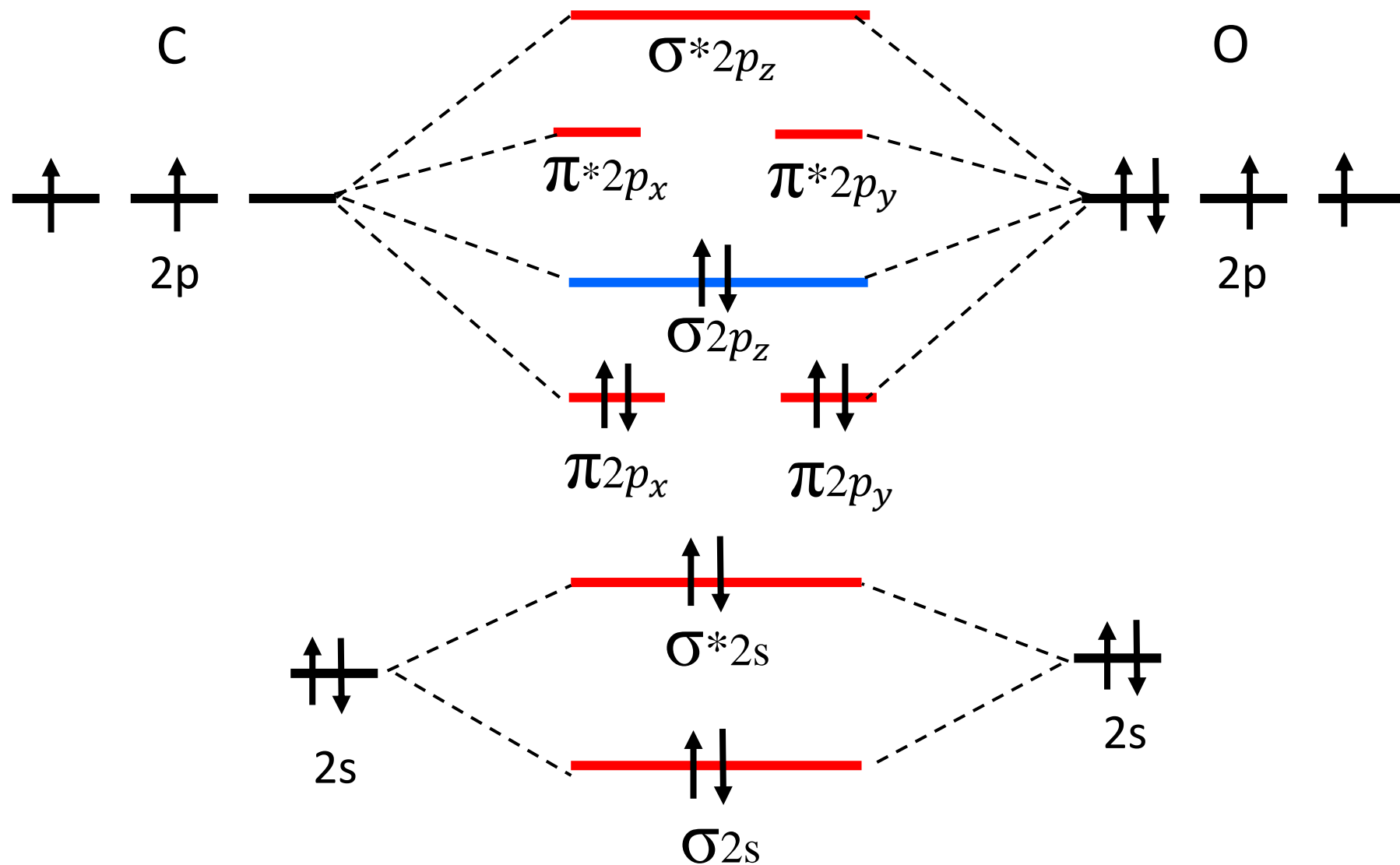
Độ dài liên kết:

Độ bền liên kết: $\text{Ne}_2^+ > \text{Ne}_2$

CO

CO có 10 e hóa trị

Năng lượng

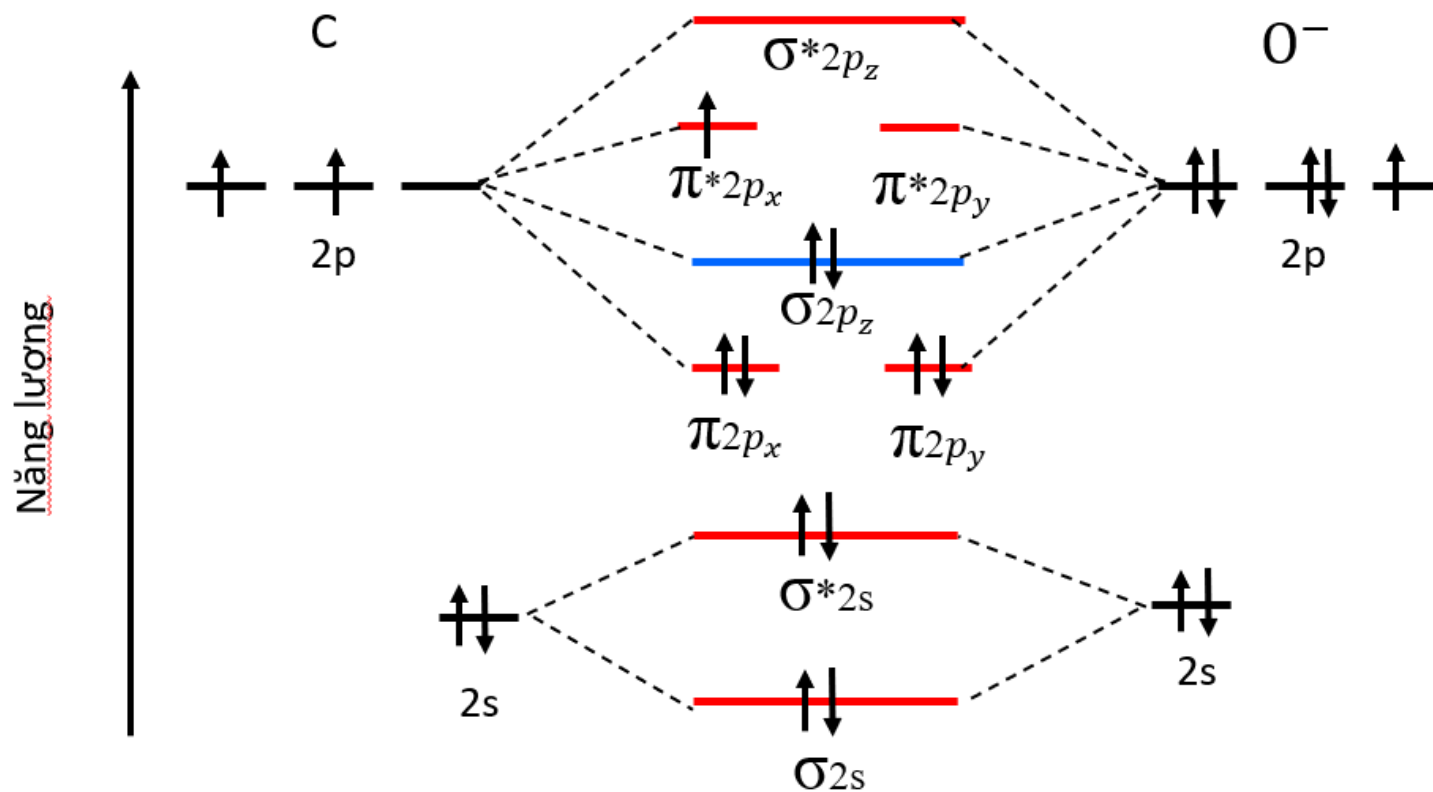


1. Cấu hình electron phân tử: $\sigma_{2s}^2 \sigma^*_{2s}^2 (\pi_{2p}^2 \pi_{2p}^2) \sigma_{2p}^2$
2. Bậc liên kết: 3
3. Từ tính (thuận từ hay nghịch từ): Nghịch từ

CO⁻

CO có 11
e hóa trị

Em có thể xem CO⁻ như là kết hợp của C và O⁻. Từ đó, em biểu diễn AO của C có 4 e hóa trị là 2s² 2p², còn AO của O⁻ thì có 7 e là 2s² 2p⁵ (vì O có 6e hóa trị 2s² 2p⁴ nhận thêm 1e thành O⁻).

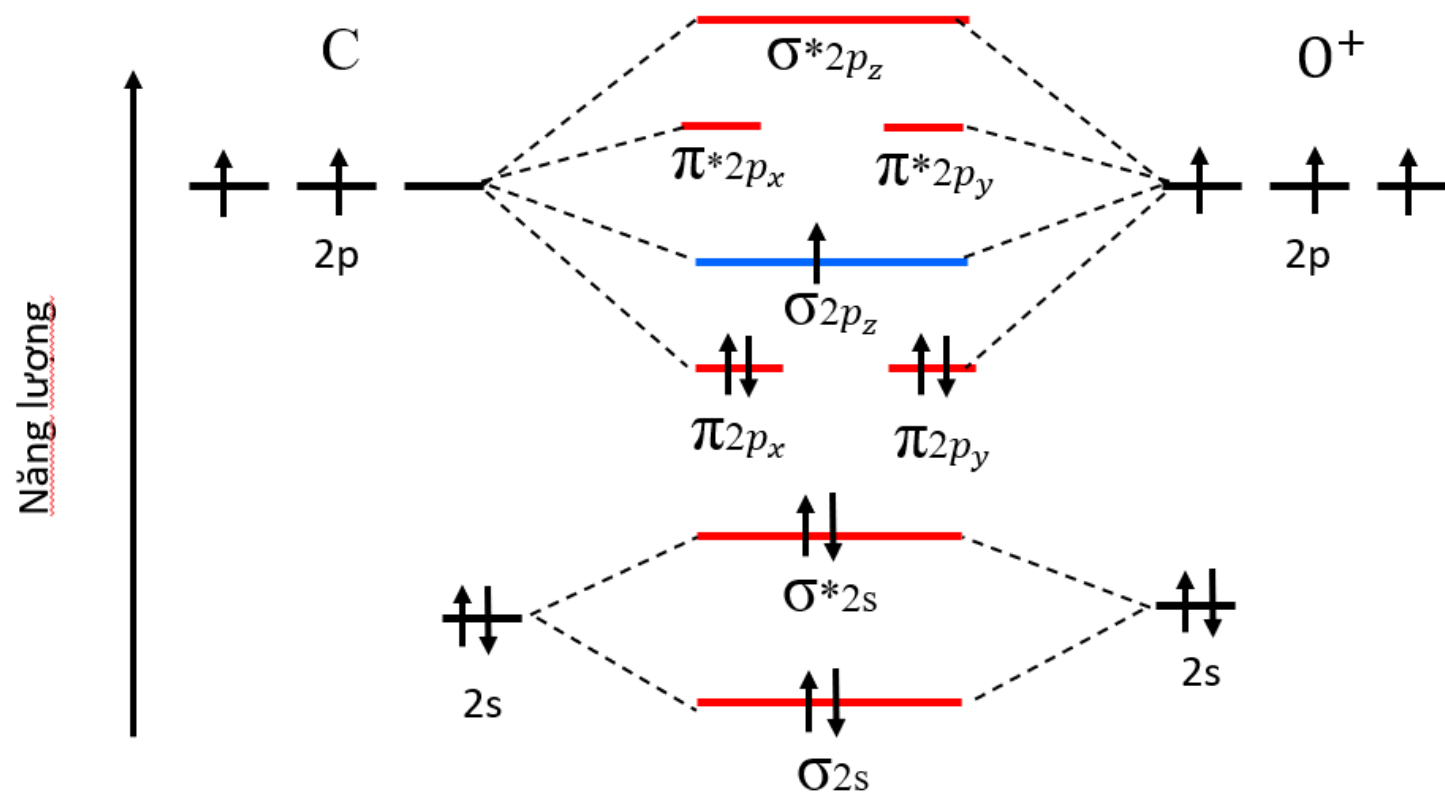


1. Cấu hình electron phân tử: $\sigma_{2s}^2 \sigma_{2s}^{*2} (\pi_{2p}^2 \pi_{2p}^2) \sigma_{2p}^2 (\pi_{2p}^{*1})$
2. Bậc liên kết: 2.5
3. Từ tính (thuận từ hay nghịch từ): Thuận từ



Em có thể xem CO^+ như là kết hợp của C và O^+ . Từ đó, em biểu diễn AO của C có 4 e hóa trị là $2s^2 2p^2$; còn AO của O^+ thì có 5 e là $2s^2 2p^3$ (vì O có 6e hóa trị $2s^2 2p^4$ mất 1 thành O^+).

CO có 9 e
hóa trị



1. Cấu hình electron phân tử: $\sigma_{2s}^2 \sigma_{2s}^*^2 (\pi_{2p}^2 \pi_{2p}^2) \sigma_{2p}^1$
2. Bậc liên kết: 2.5
3. Từ tính (thuận từ hay nghịch từ): Thuận từ

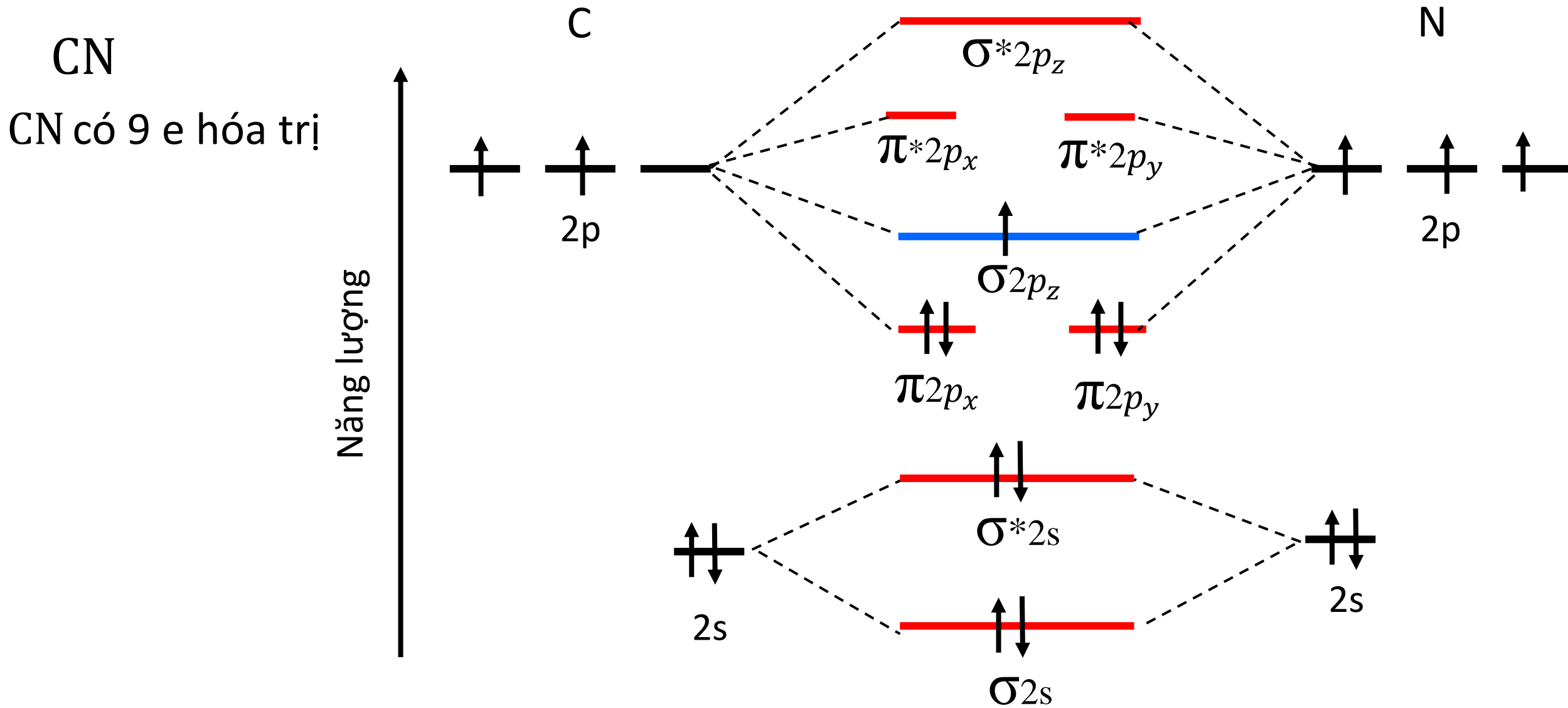
Bậc liên kết càng cao thì độ dài liên kết càng ngắn, và độ bền liên kết càng cao

k. CO, CO⁺, CO⁻

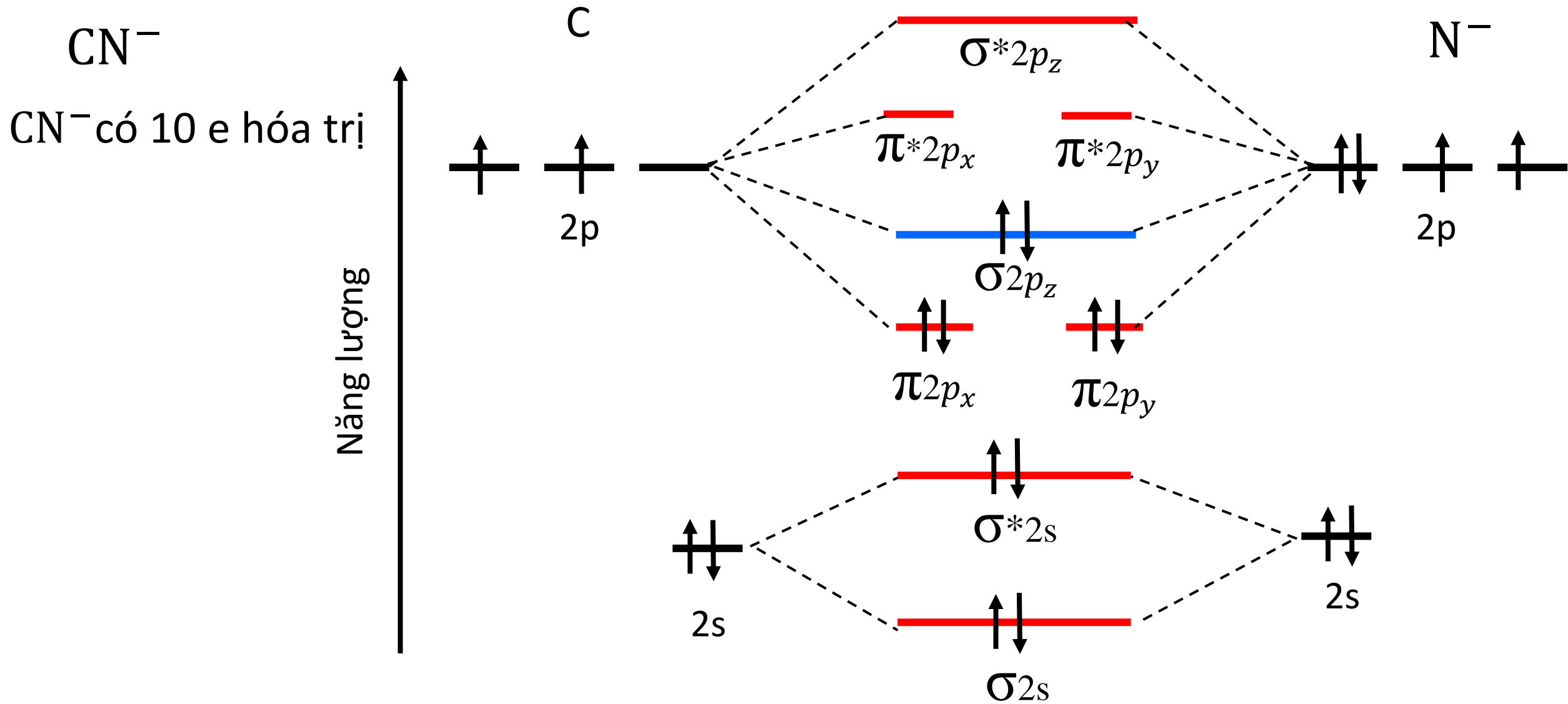
Bậc liên kết: CO > CO⁺ = CO⁻ (3 > 2.5 > 2.5)

Độ dài liên kết: CO < CO⁺ = CO⁻

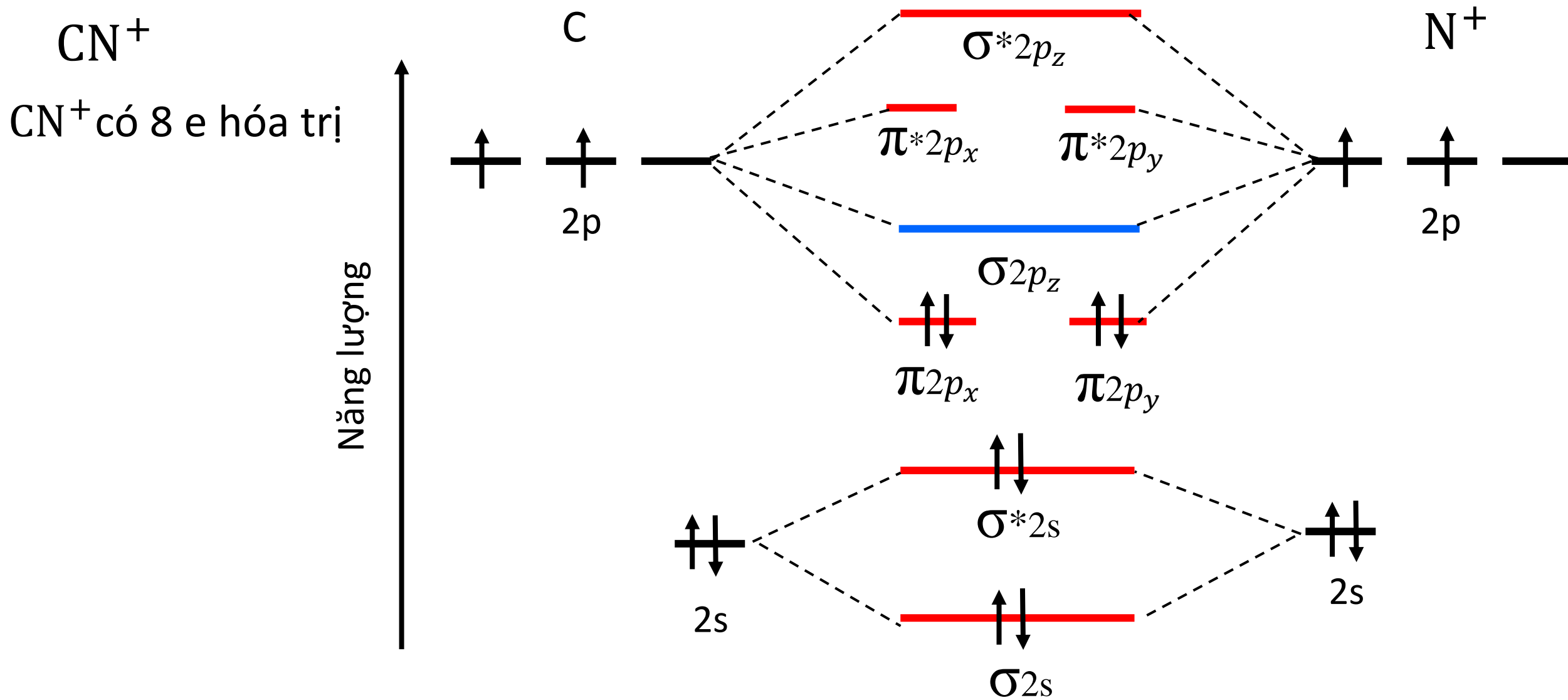
Độ bền liên kết: CO > CO⁺ = CO⁻



1. Cấu hình electron phân tử: $\sigma_{2s}^2 \sigma^*_{2s}^2 (\pi_{2p}^2 \pi_{2p}^2) \sigma_{2p}^1$
2. Bậc liên kết: 2.5
3. Từ tính (thuận từ hay nghịch từ): Thuận từ



1. Cấu hình electron phân tử: $\sigma_{2s}^2 \sigma^*_{2s}^2 (\pi_{2p}^2 \pi_{2p}^2) \sigma_{2p}^2$
2. Bậc liên kết: 3
3. Từ tính (thuận từ hay nghịch từ): Nghịch từ



1. Cấu hình electron phân tử: $\sigma_{2s}^2 \sigma^*_{2s}^2 (\pi_{2p_x}^2 \pi_{2p_y}^2)$
2. Bậc liên kết: 2
3. Từ tính (thuận từ hay nghịch từ): Nghịch từ

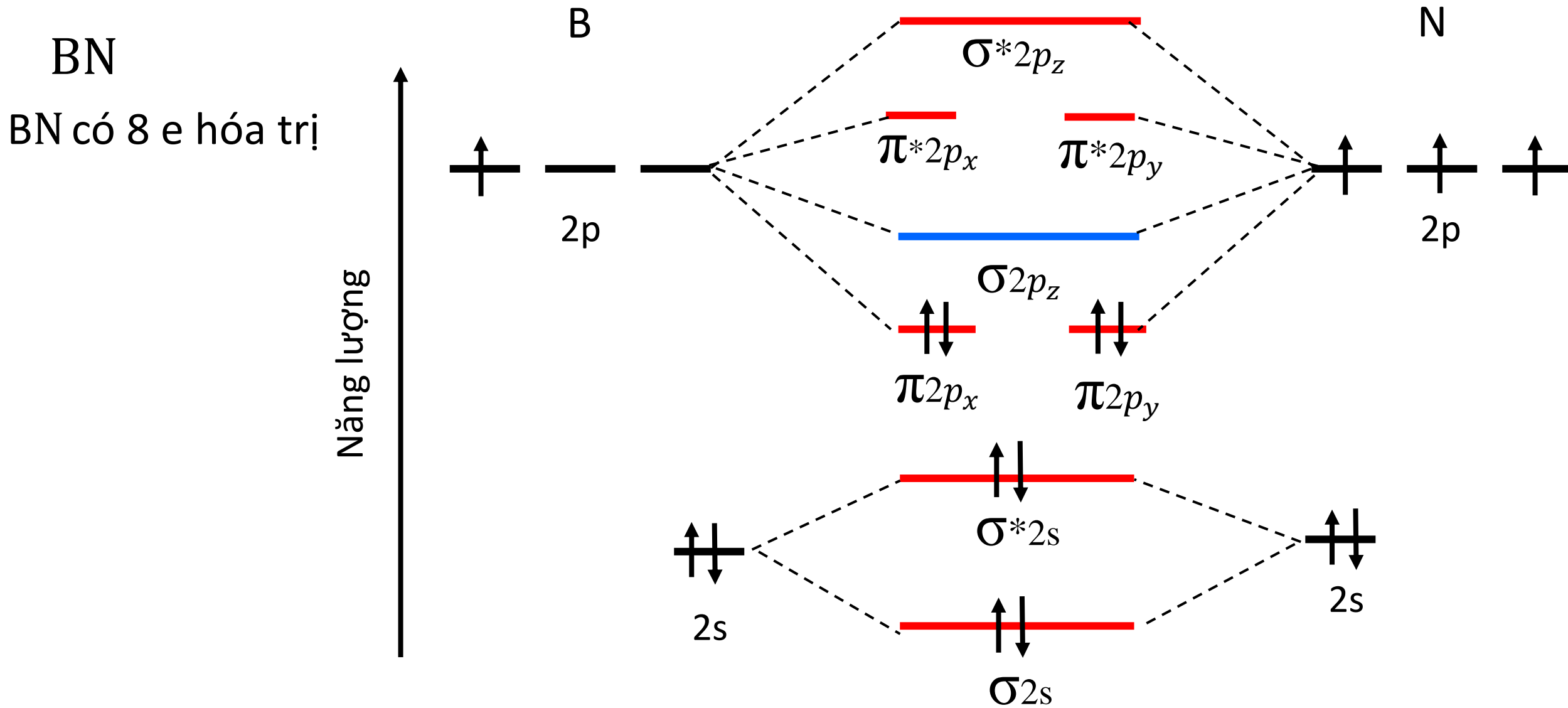
Bậc liên kết càng cao thì độ dài liên kết càng ngắn, và độ bền liên kết càng cao

I. CN, CN⁺, CN⁻

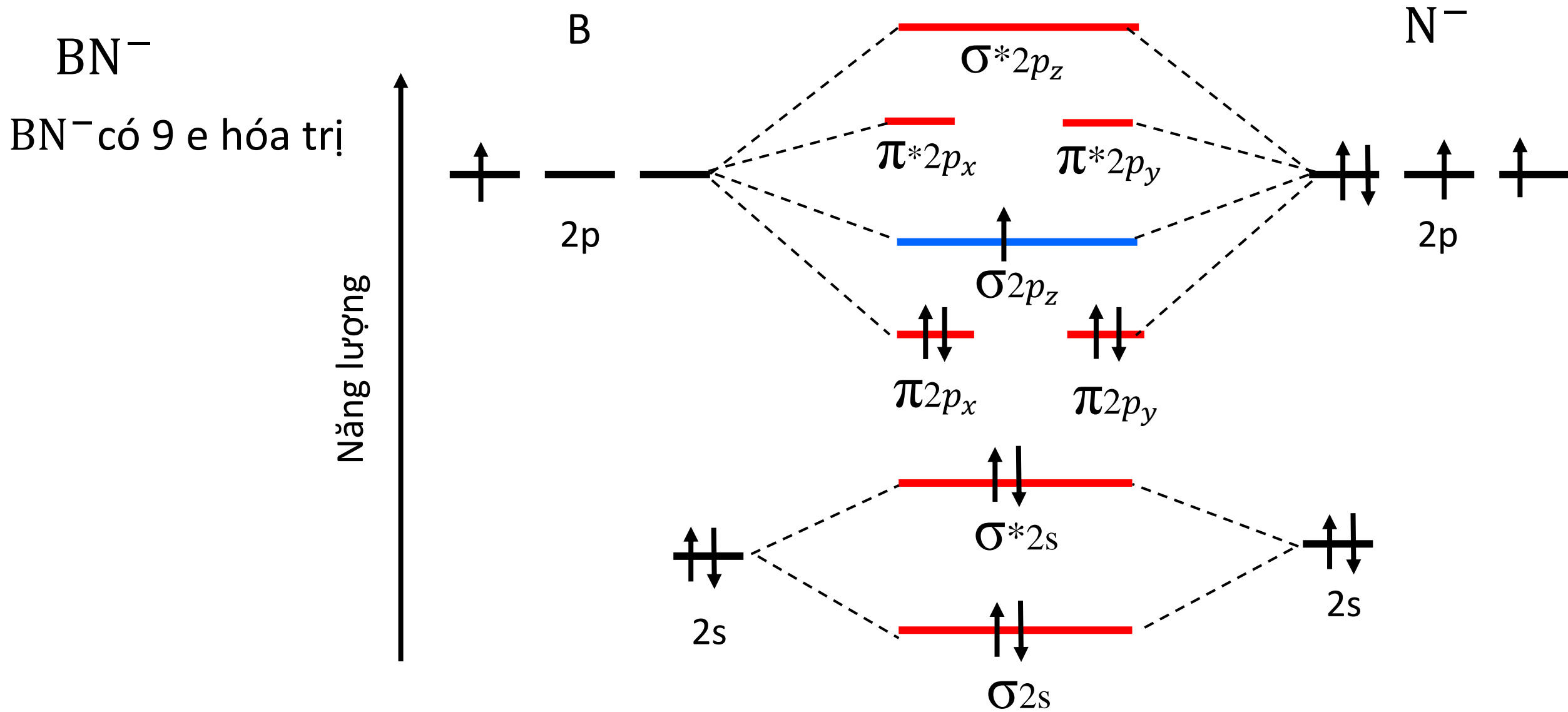
Bậc liên kết: $\text{CN}^- > \text{CN} > \text{CN}^+ (3 > 2.5 > 2)$

Độ dài liên kết: $\text{CN}^- < \text{CN} < \text{CN}^+$

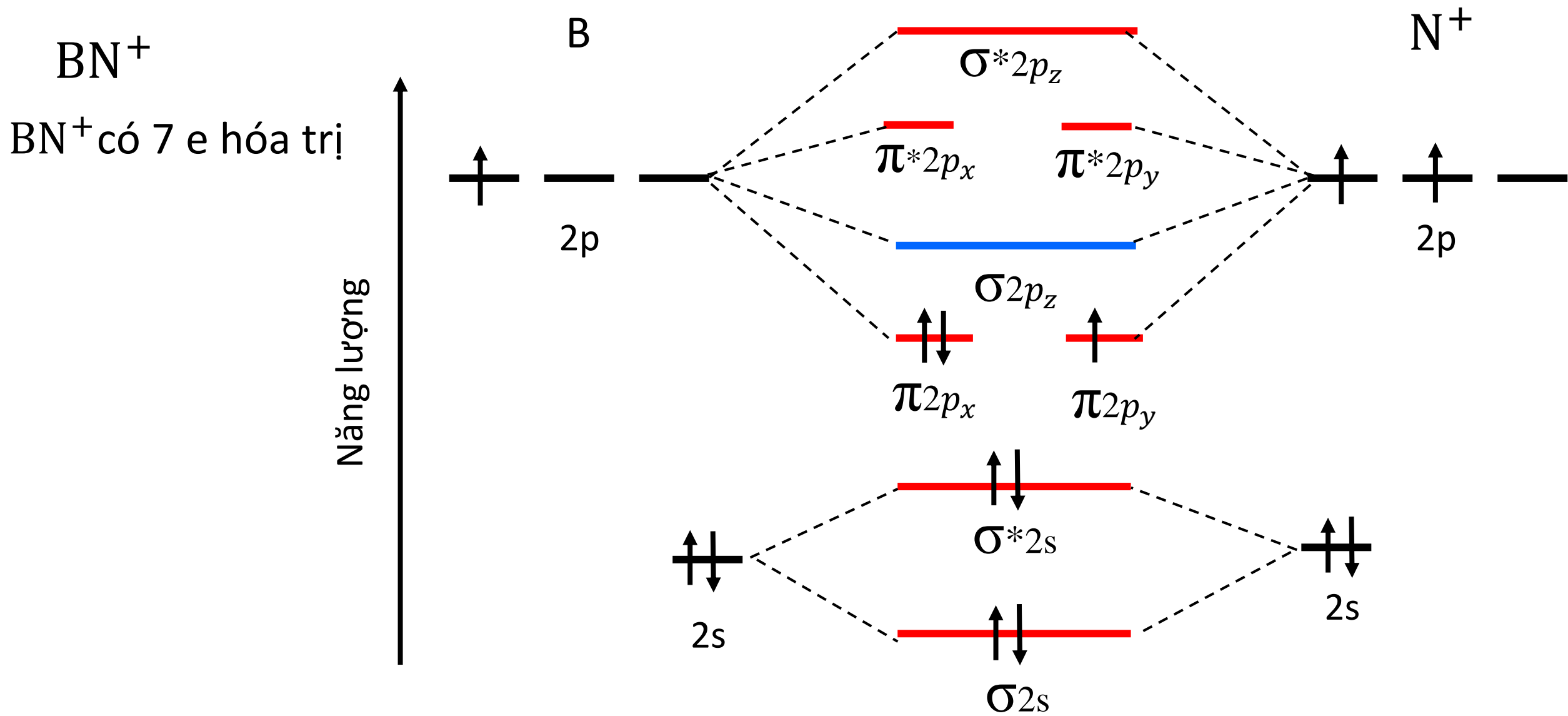
Độ bền liên kết: $\text{CN}^- > \text{CN} > \text{CN}^+$



1. Cấu hình electron phân tử: $\sigma_{2s}^2 \sigma_{2s}^{*2} (\pi_{2p}^2 \pi_{2p}^2)$
2. Bậc liên kết: 2
3. Từ tính (thuận từ hay nghịch từ): Nghịch từ



1. Cấu hình electron phân tử: $\sigma_{2s}^2 \sigma^*_{2s}^2 (\pi_{2p}^2 \pi_{2p}^2) \sigma_{2p}^1$
2. Bậc liên kết: 2.5
3. Từ tính (thuận từ hay nghịch từ): Thuận từ



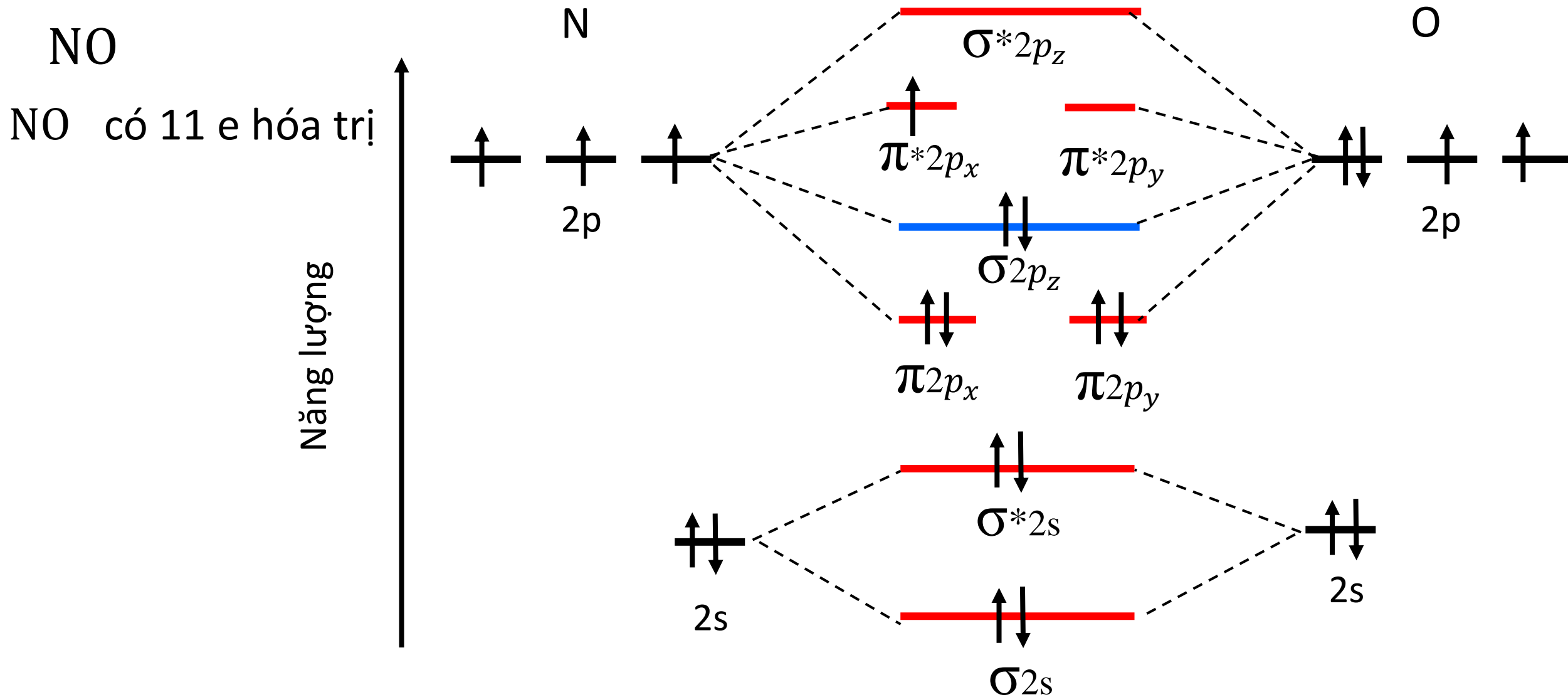
1. Cấu hình electron phân tử: $\sigma_{2s}^2 \sigma_{2s}^{*2} (\pi_{2p}^2 \pi_{2p}^1)$
2. Bậc liên kết: 1.5
3. Từ tính (thuận từ hay nghịch từ): Thuận từ

Bậc liên kết càng cao thì độ dài liên kết càng ngắn, và độ bền liên kết càng cao
m. BN , BN^+ , BN^-

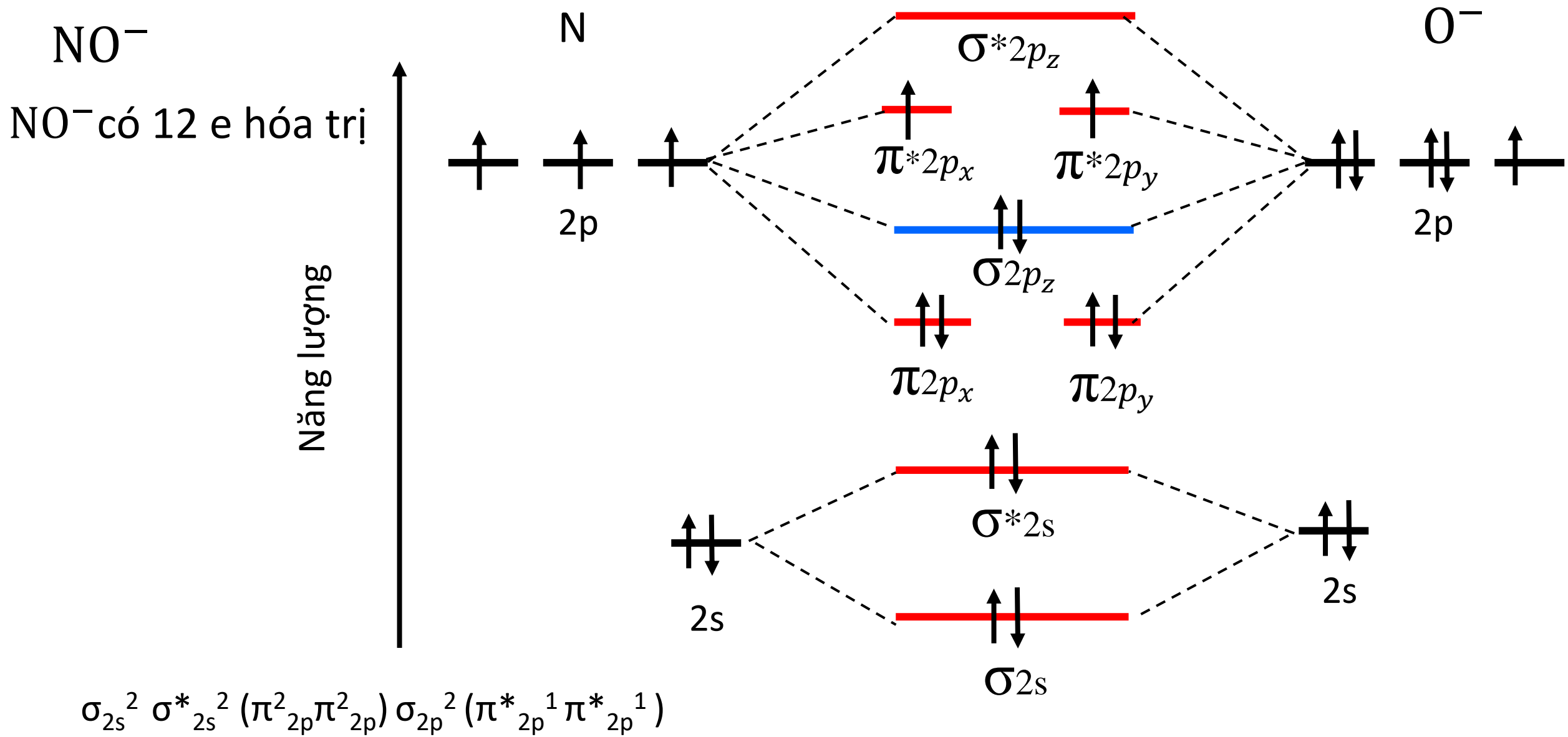
Bậc liên kết: $\text{BN}^- > \text{BN} > \text{BN}^+ (2.5 > 2 > 1.5)$

Độ dài liên kết: $\text{BN}^- < \text{BN} < \text{BN}^+$

Độ bền liên kết: $\text{BN}^- > \text{BN} > \text{BN}^+$



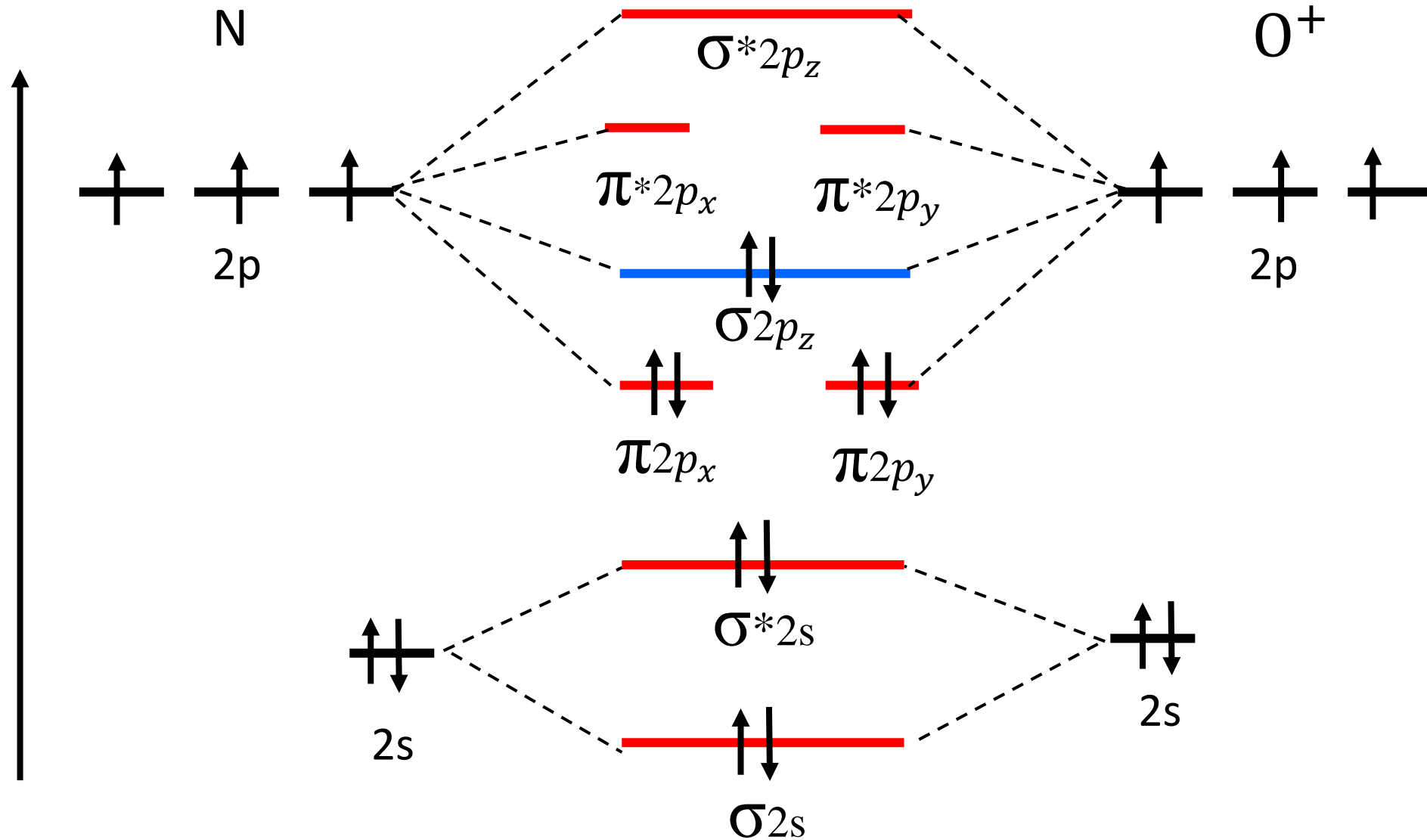
1. Cấu hình electron phân tử: $\sigma_{2s}^2 \sigma_{2s}^{*2} (\pi_{2p}^2 \pi_{2p}^2) \sigma_{2p}^2 (\pi_{2p}^{*1})$
2. Bậc liên kết: 2.5
3. Từ tính (thuận từ hay nghịch từ): Thuận từ



1. Bậc liên kết: 2
2. Từ tính (thuận từ hay nghịch từ): Thuận từ

NO^+
 NO^+ có 10 e hóa trị

Năng lượng



1. Cấu hình electron phân tử: $\sigma_{2s}^2 \sigma^*_{2s}^2 (\pi_{2p_x}^2 \pi_{2p_y}^2) \sigma_{2p_z}^2$
2. Bậc liên kết: 3
3. Từ tính (thuận từ hay nghịch từ): Nghịch từ

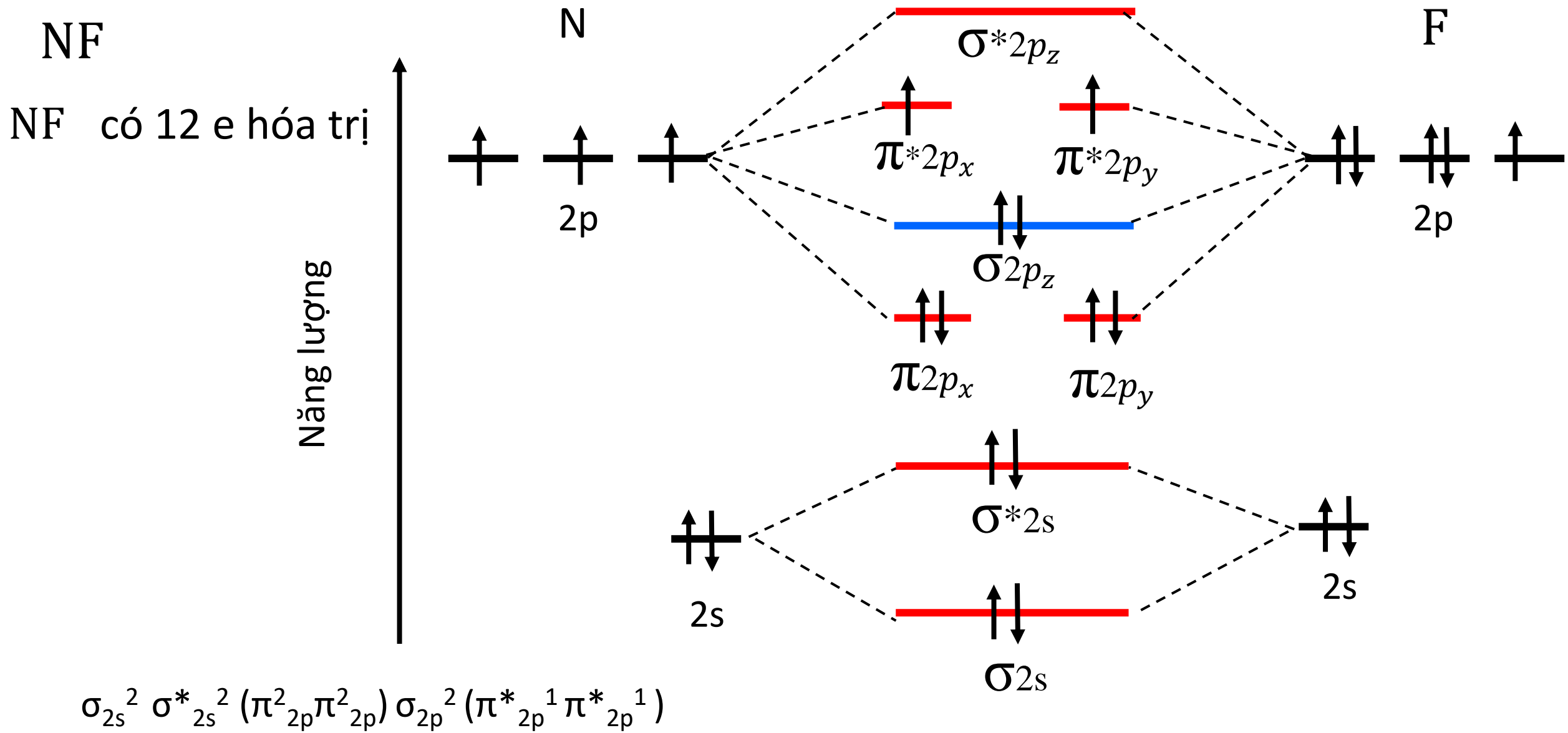
Bậc liên kết càng cao thì độ dài liên kết càng ngắn, và độ bền liên kết càng cao

n. NO , NO^+ , NO^-

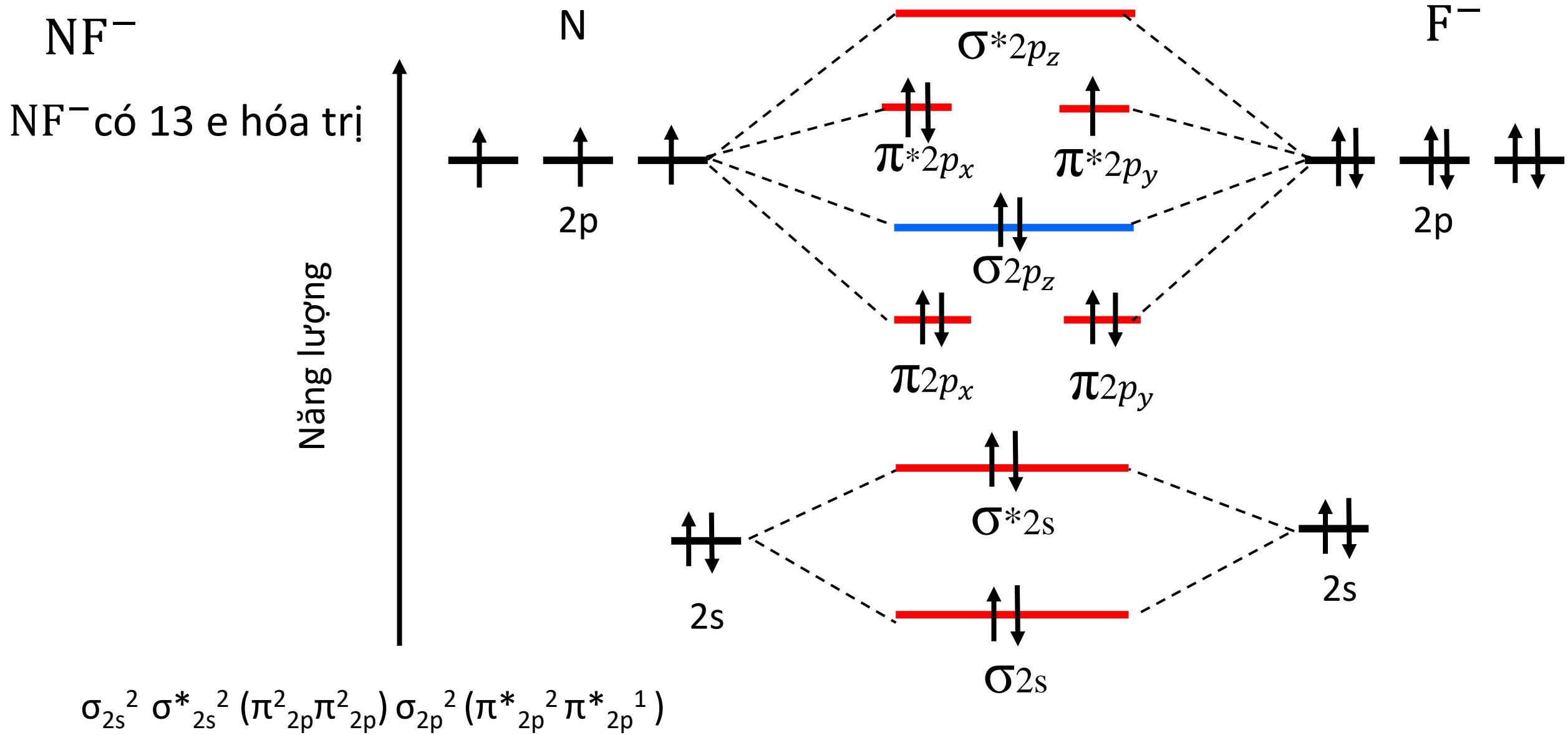
Bậc liên kết: $\text{NO}^+ > \text{NO} > \text{NO}^-$ ($3 > 2.5 > 2$)

Độ dài liên kết: $\text{NO}^+ < \text{NO} < \text{NO}^-$

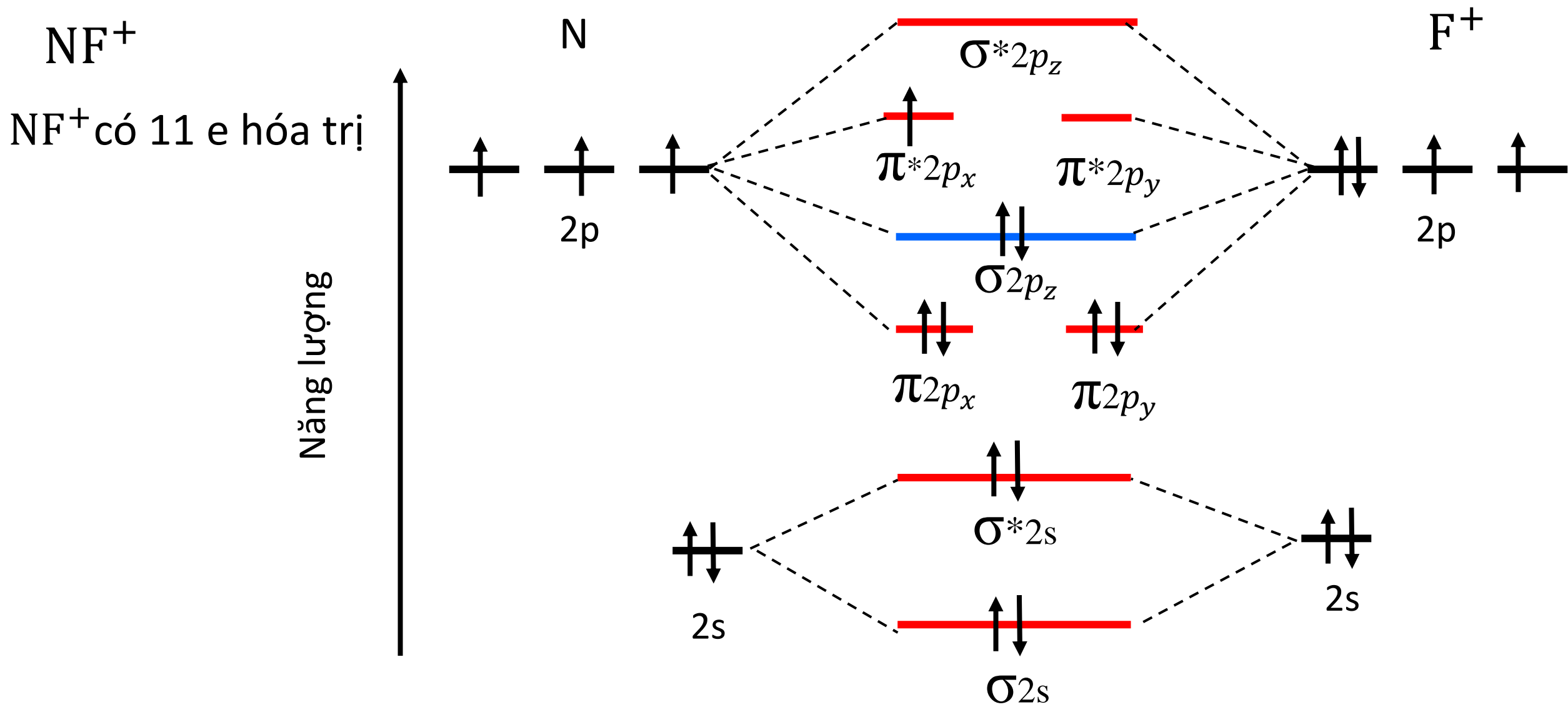
Độ bền liên kết: $\text{NO}^+ > \text{NO} > \text{NO}^-$



1. Bậc liên kết: 2
2. Từ tính (thuận từ hay nghịch từ): Thuận từ



1. Bậc liên kết: 1.5
2. Từ tính (thuận từ hay nghịch từ): Thuận từ



1. Cấu hình electron phân tử: $\sigma_{2s}^2 \sigma^*_{2s}^2 (\pi_{2p}^2 \pi_{2p}^2) \sigma_{2p}^2 (\pi^*_{2p})^1$
2. Bậc liên kết: 2.5
3. Từ tính (thuận từ hay nghịch từ): Thuận từ

Bậc liên kết càng cao thì độ dài liên kết càng ngắn, và độ bền liên kết càng cao

o. NF , NF^+ , NF^-

Bậc liên kết: $\text{NF}^+ > \text{NF} > \text{NF}^-$ ($2.5 > 2 > 1.5$)

Độ dài liên kết: $\text{NF}^+ < \text{NF} < \text{NF}^-$

Độ bền liên kết: $\text{NF}^+ > \text{NF} > \text{NF}^-$