



Môn: **HÓA HỌC**

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

Ngày thi thứ nhất: **05/01/2024**

(Đề thi gồm 04 trang, có 06 câu)

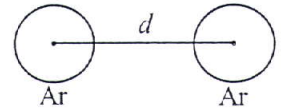
Cho: H = 1,0; Li = 6,9; B = 10,8; C = 12,0; N = 14,0; O = 16,0; F = 19,0; Na = 23,0; P = 31,0; S = 32,0; Ar = 39,9; Ca = 40,0; Mn = 54,9; Ni = 58,7; Co = 58,9; Y = 88,9; Cd = 112,4; Pb = 207,2; $Z_H = 1$; $Z_C = 6$; $Z_O = 8$; $Z_{Ar} = 18$; $Z_{Mn} = 25$; $e = 1,6 \times 10^{-19}$ C; $F = 96485$ C mol⁻¹; $R = 8,314$ J K⁻¹ mol⁻¹; $N_A = 6,022 \times 10^{23}$ mol⁻¹;

ở 298 K: $\frac{2,303RT}{F} = 0,0592$; 0 °C = 273 K; 1 pm = 10⁻¹² m.

Kí hiệu: r: rắn; l: lỏng; k: khí; aq: dung dịch nước.

Câu I (3,0 điểm)

1. Xét hệ gồm hai nguyên tử argon (Ar) ở trạng thái cơ bản, mỗi nguyên tử được coi là một khối cầu, khoảng cách (d) giữa hai nguyên tử bằng khoảng cách giữa tâm của hai khối cầu (xem Hình 1). Coi như không có tương tác bên ngoài nào tác dụng lên hệ.



Hình 1

Sự phụ thuộc của thế năng tương tác ($V(d)$) giữa hai nguyên tử khí hiếm vào khoảng cách d có thể được xác định theo phương trình Lennard – Jones như sau:

$$V(d) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{d} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{d} \right)^6 \right]$$

trong đó ε và σ là các thông số đặc trưng cho từng khí hiếm. Đối với Ar, $\varepsilon = 0,930$ kJ mol⁻¹ và $\sigma = 3,62$ Å. Nếu $V(d) < 0$, các nguyên tử có xu hướng tiến lại gần nhau; nếu $V(d) > 0$, các nguyên tử có xu hướng tiến ra xa nhau.

a) Tính thế năng tương tác giữa hai nguyên tử Ar ở các khoảng cách $d = 5,00$ Å và $3,50$ Å. Hãy cho biết ở những khoảng cách đó, các nguyên tử có xu hướng tiến lại gần hay tiến ra xa nhau.

b) Bán kính van der Waals (r_{vdw}) của Ar là một nửa khoảng cách nhỏ nhất mà hai nguyên tử Ar có thể tiến lại gần nhau. Dựa vào phương trình Lennard – Jones, xác định r_{vdw} (Å) của nguyên tử Ar.

c) Xác định khoảng cách mà tại đó hệ hai nguyên tử Ar là bền nhất. Tính giá trị thế năng tương tác (kJ mol⁻¹) tại khoảng cách đó.

2. Mặc dù được coi là trơ về mặt hóa học nhưng một số hợp chất của Ar đã được khám phá, trong đó có ArH⁺. Ion này được tìm thấy trong vũ trụ lần đầu tiên vào năm 2013.

a) Áp dụng thuyết orbital phân tử (MO), vẽ giản đồ MO và từ đó giải thích sự tồn tại của ion ArH⁺.

Cho biết: trục liên kết là trục Oz nối giữa hai hạt nhân nguyên tử; năng lượng ion hóa thứ nhất của H và Ar lần lượt là 13,6 eV và 15,8 eV.

b) Trong pha khí, ion ArH⁺ có thể tham gia phản ứng nhường H⁺ cho carbon monoxide tạo ra hai ion (đều có điện tích 1+) là đồng phân của nhau.

i) Viết phương trình phản ứng minh họa.

ii) Vẽ công thức Lewis của hai ion trên và dự đoán (có giải thích) đồng phân nào bền hơn?

Câu II (2,5 điểm)

1. Hemoglobin (Hb) là một protein trong máu người, có chức năng vận chuyển khí oxygen (O₂). Mỗi phân tử Hb có thể liên kết tối đa với 4 phân tử O₂. Để đánh giá khả năng liên kết của Hb với O₂, có thể sử dụng đại lượng “độ bão hòa oxygen của Hb”, kí hiệu là s . Đại lượng s được tính bằng tỉ lệ giữa lượng O₂ đã liên kết với Hb so với lượng O₂ tối đa mà Hb có thể liên kết.

a) Độ bão hòa oxygen của Hb trong máu phụ thuộc vào nhiều yếu tố như: pH, nhiệt độ, Từ thực nghiệm, có thể xây dựng đồ thị biểu diễn sự phụ thuộc của s vào áp suất riêng phần (P) của O₂(k) (xem Hình 2). Dựa vào đồ thị, tính lượng khí O₂ (mmol) giải phóng ở cơ bởi 100 mL máu đi từ phổi tới cơ (coi oxygen không bị mất trên đường vận chuyển).

