

## CHƯƠNG III

# LIÊN KẾT HÓA HỌC VÀ CẤU TẠO PHÂN TỬ



# **CHƯƠNG III. CẤU TẠO PHÂN TỬ**

## **I. NHỮNG KHÁI NIỆM CƠ BẢN**

**VỀ LIÊN KẾT HÓA HỌC**

## **II. LIÊN KẾT CỘNG HÓA TRI**

**III. LIÊN KẾT ION**

**IV. LIÊN KẾT KIM LOẠI**

**V. LIÊN KẾT VAN DER WAALS**

**VI. LIÊN KẾT HYDRO**

# I. NHỮNG KHÁI NIỆM CƠ BẢN VỀ LIÊN KẾT HÓA HỌC

- 1. Bản chất của liên kết**
- 2. Một số đặc trưng liên kết**
  - a. Độ dài liên kết**
  - b. Góc hóa trị**
  - c. Bậc liên kết**
  - d. Năng lượng liên kết**
- 3. Các loại liên kết**



## **II. LIÊN KẾT CỘNG HÓA TRỊ THEO CƠ HỌC LƯỢNG TỬ**

- 1. Phương pháp orbital phân tử (MO)**
- 2. Phương pháp liên kết hóa trị (VB)**
- 3. Các phân tử cộng hóa trị và lưỡng cực phân tử**

## **2. Phương pháp liên kết hóa trị (VB)**

**a. Quan niệm về liên kết cộng hóa trị**

**theo phương pháp VB**



**b. Các loại liên kết cộng hóa trị và bậc**

**liên kết**



**c. Các tính chất của liên kết cộng hóa trị**

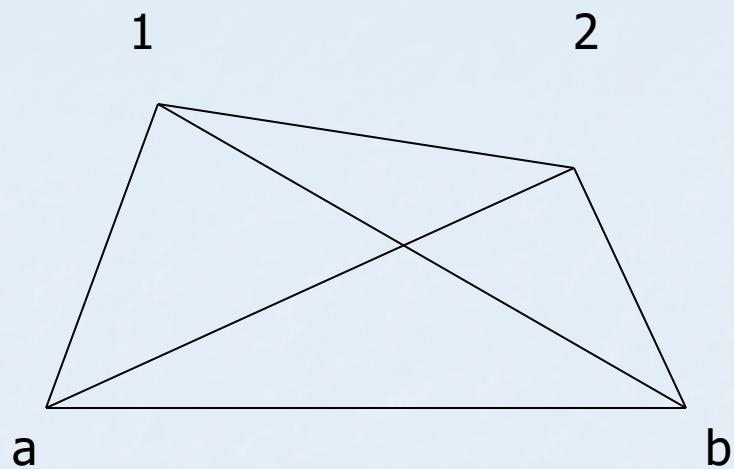


# a. Quan niệm về liên kết cộng hóa trị theo phương pháp VB

- Lk cht cơ sở trên cặp e ↑↓
- Lk cht được hình thành do sự xen phủ của các AO hóa trị
- Liên kết càng bền khi mật độ xen phủ của các AO càng lớn
- Biểu diễn lk cht:  $H : H$  hoặc  $H - H$
- Điều kiện tạo lk cht bền:
  - ✓ Các AO có năng lượng xấp xỉ nhau
  - ✓ Các AO có mật độ e đủ lớn
  - ✓ Các AO có cùng tính định hướng



# Ví dụ: xét phân tử H<sub>2</sub>



Phương trình sóng Schrodinger:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - V) \Psi = 0$$

$$V = \frac{e^2}{r_{ab}} + \frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{r_{a1}} - \frac{e^2}{r_{a2}} - \frac{e^2}{r_{b1}} - \frac{e^2}{r_{b2}}$$

- Khi 2 ngtử H ở xa nhau vô cùng:

$$\Psi = \Psi_{a1} \Psi_{b2}$$

$$\Psi_{a1} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r_{a1}}$$

$$\Psi_{b2} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r_{b2}}$$

- Khi 2 ngtử H tiến lại gần nhau:

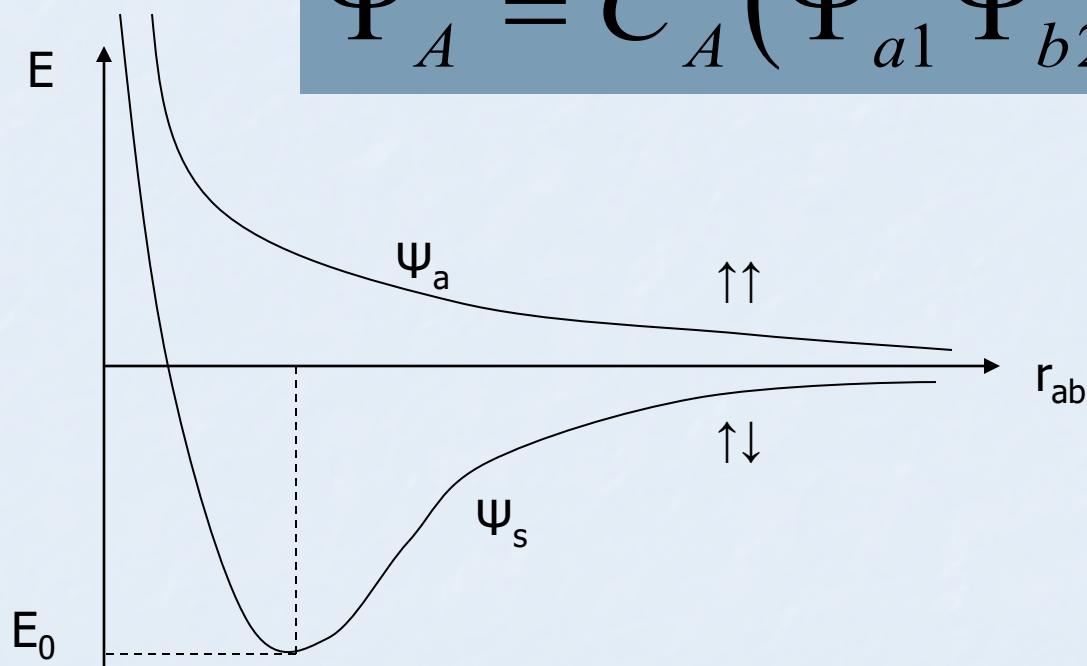
$$\Psi_{H_2} = c_1 \Psi_{a1} \Psi_{b2} + c_2 \Psi_{a2} \Psi_{b1}$$



- Giải pt được 2 nghiệm:  $c_1 = c_2 = C_S$        $c_1 = -c_2 = C_A$

$$\Psi_S = C_S (\Psi_{a1} \Psi_{b2} + \Psi_{a2} \Psi_{b1})$$

$$\Psi_A = C_A (\Psi_{a1} \Psi_{b2} - \Psi_{a2} \Psi_{b1})$$



# b. Các loại liên kết cộng hóa trị và bậc liên kết

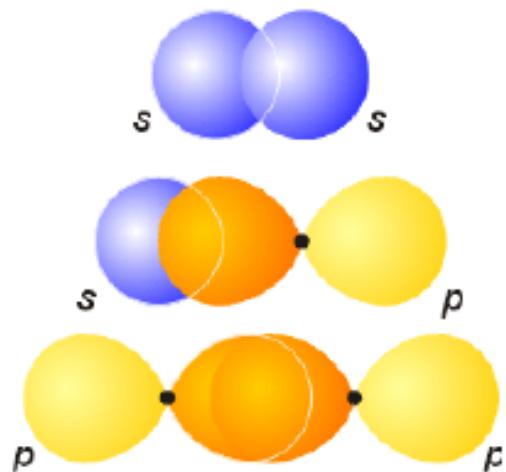
- Các liều liên kết:

- ✓ Kiểu  $\sigma$
- ✓ Kiểu  $\pi$
- ✓ Kiểu  $\delta$

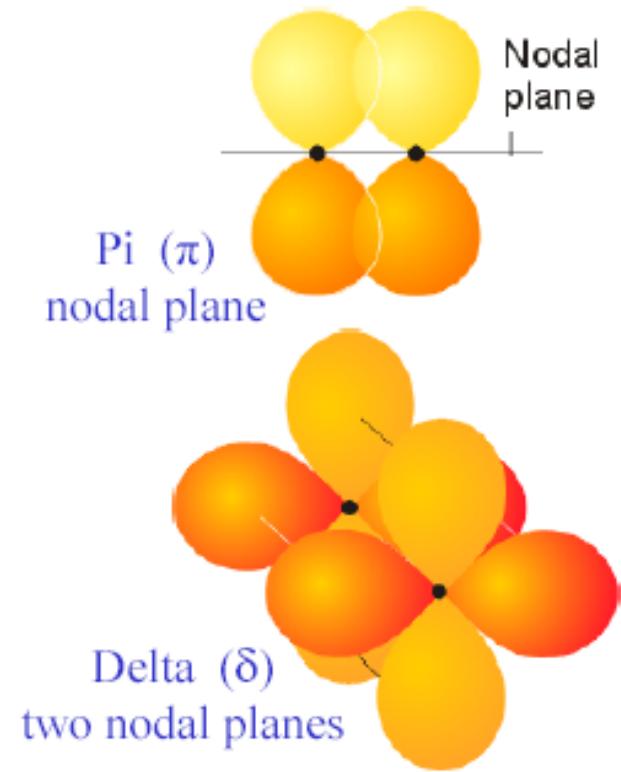
- Bậc liên kết:

- ✓ Bậc 1
- ✓ Bậc 2
- ✓ Bậc 3

## Other Types of Bonding Interactions



Sigma ( $\sigma$ )  
cylindrical symmetry



Pi ( $\pi$ )  
nodal plane

Delta ( $\delta$ )  
two nodal planes

• Chú ý: các vùng xen phủ phải cùng dấu



# c. Các tính chất của liên kết cộng hóa trị

- Tính bão hòa
- Tính định hướng
- Tính phân cực

➤ Khả năng tạo liên kết và tính bão hòa của liên kết cộng hóa trị

✓ Cơ chế ghép đôi (góp chung): ↑ + ↓

→ Khả năng tạo lk được quyết định bởi số AO hóa trị chứa e điện tử

- Chú ý: Số e độc thân có thể tăng lên nhờ kích thích:

Ví dụ: nguyên tử C:  $\begin{array}{|c|}\hline \uparrow\downarrow \\ \hline \end{array}$      $\begin{array}{|c|c|c|}\hline \uparrow & \uparrow & \quad \\ \hline \end{array}$      $\rightarrow$      $\begin{array}{|c|}\hline \uparrow \\ \hline \end{array}$      $\begin{array}{|c|c|c|}\hline \uparrow & \uparrow & \uparrow \\ \hline \end{array}$

## Cơ chế cho - nhận:

## chất cho chất nhận

→ Khả năng tạo lk được quyết định bởi số  và số 

→ Khả năng tạo liên kết cht (theo cả hai cơ chế) được quyết định bởi số AO hóa trị của nguyên tố:

- Các nguyên tố chu kỳ I có 1 AO hóa trị → tạo tối đa 1 lk cht
- Các nguyên tố chu kỳ II có 4 AO hóa trị → tạo tối đa 4 lk cht
- Các nguyên tố chu kỳ III có 9 AO hóa trị → tạo tối đa 9 lk cht

Tính bão hòa của lk cht: Mỗi nguyên tố hóa học chỉ có khả năng tạo số giới hạn liên kết cộng hóa trị và bằng với số AO hóa trị của nguyên tố.

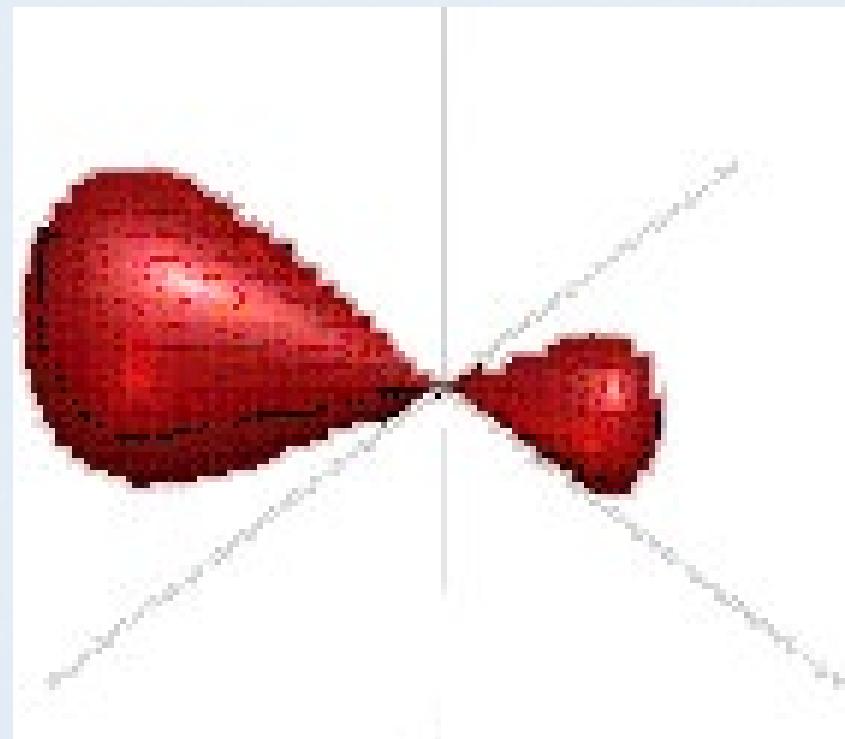


# ✓ Thuyết lai hóa các AO

- Để tăng mật độ xen phủ, khi tạo liên kết, nguyên tử dùng các AO lai hóa thay thế cho các AO thuần túy s, p, d, f
- Các AOLH tạo thành do sự xen phủ của các AO trong nội bộ nguyên tử.
- Đặc điểm của các AOLH:
- Điều kiện để lai hóa bền
- Các kiểu lai hóa thường gặp: sp, sp<sup>2</sup>, sp<sup>3</sup>

## ▪ Đặc điểm của các AOLH:

- Số AOLH = số AO tham gia LH
- Phân bố đối xứng trong không gian
- Hình dạng: giống nhau
- Năng lượng: bằng nhau
- Kích thước: bằng nhau



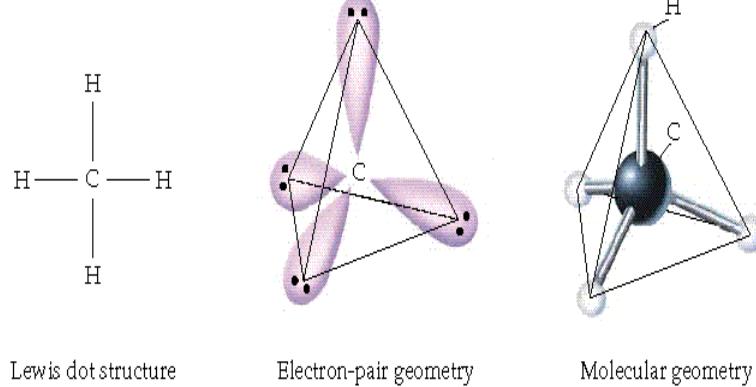
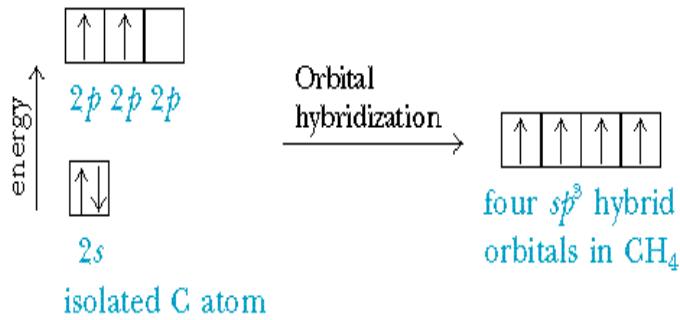
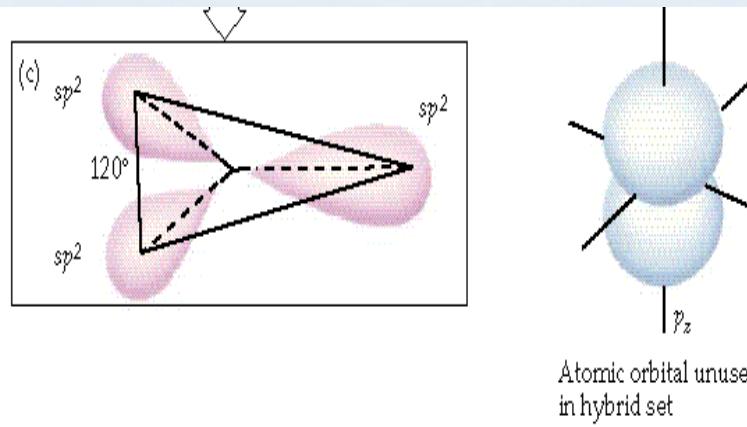
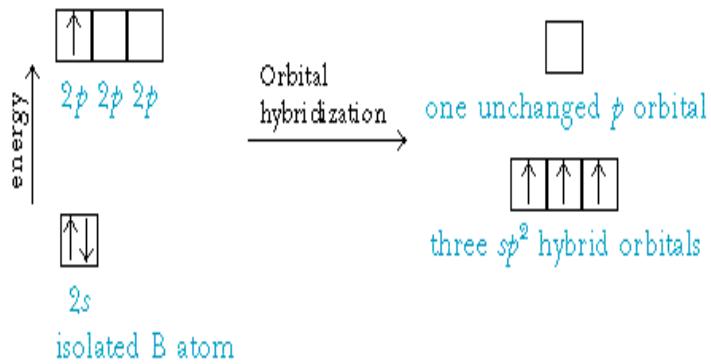
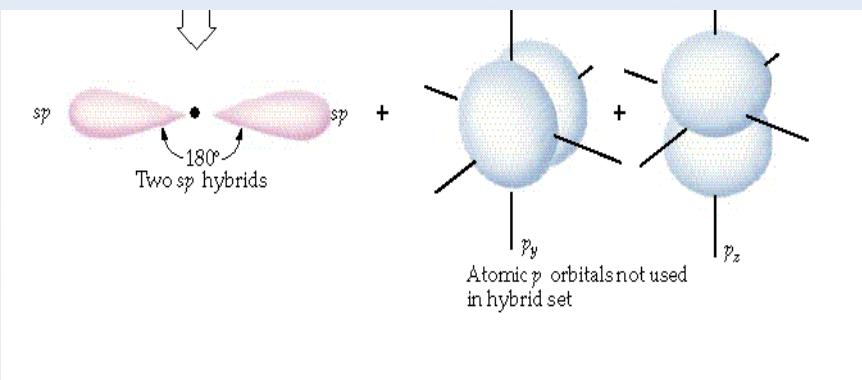
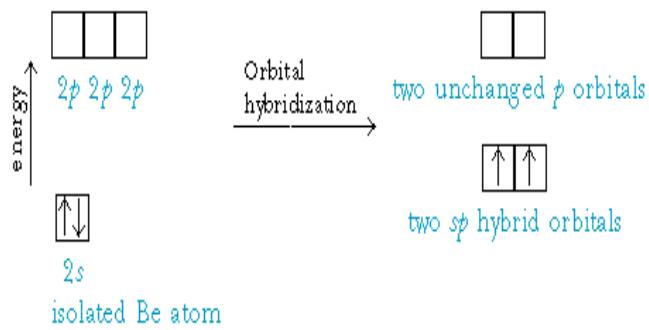
## ▪ Điều kiện để lai hóa bền

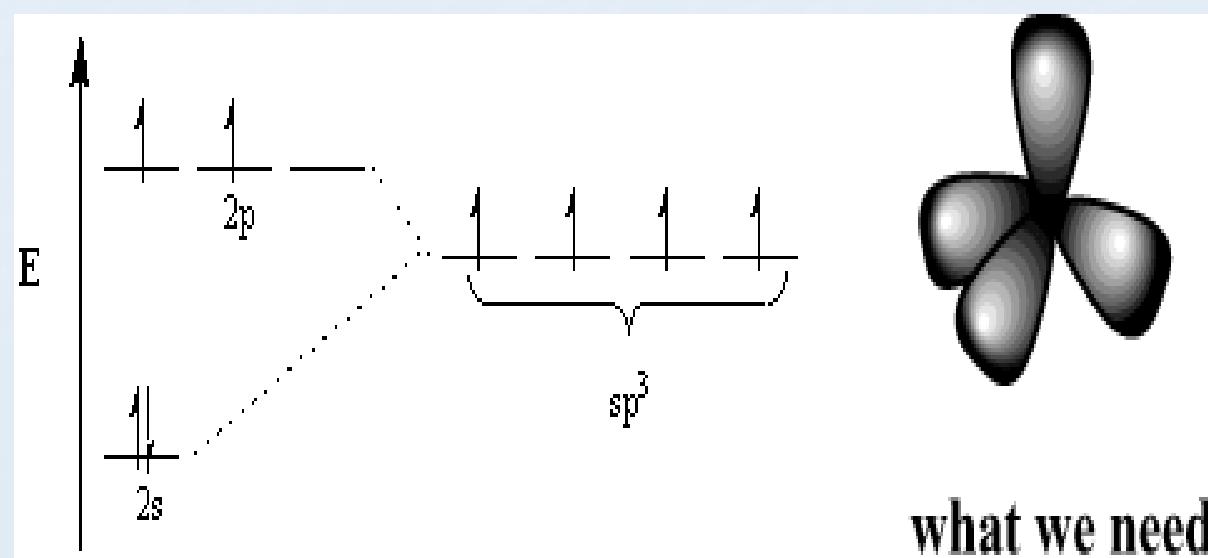
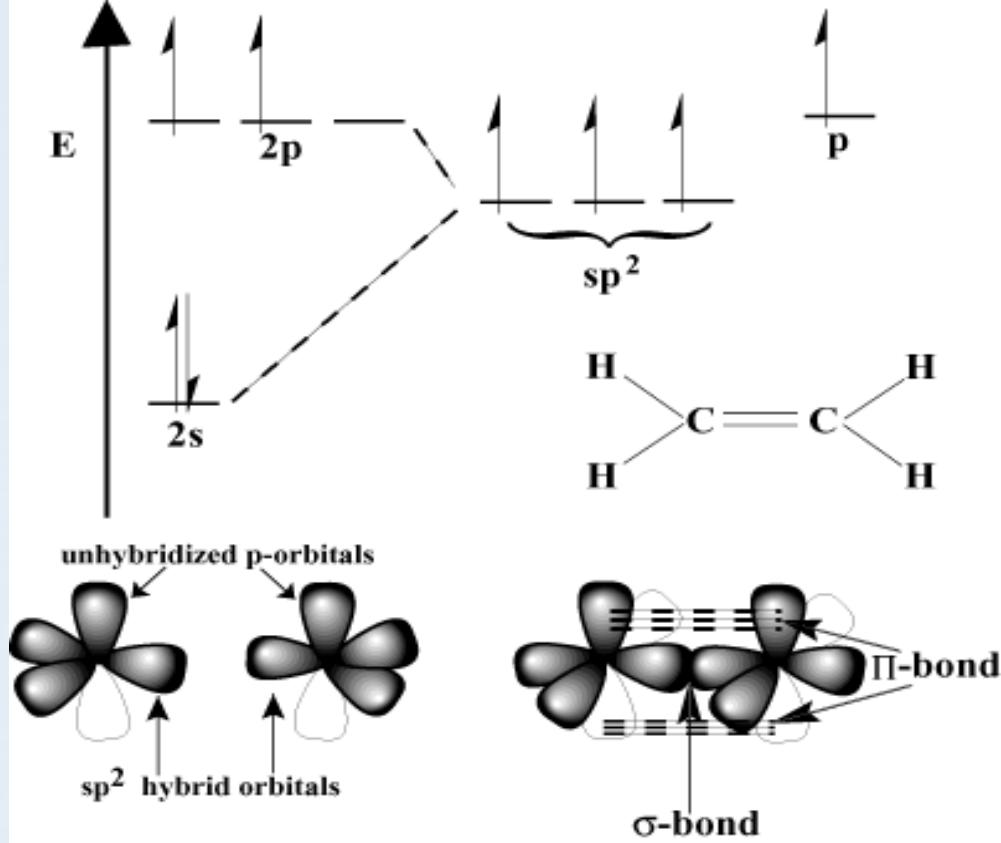
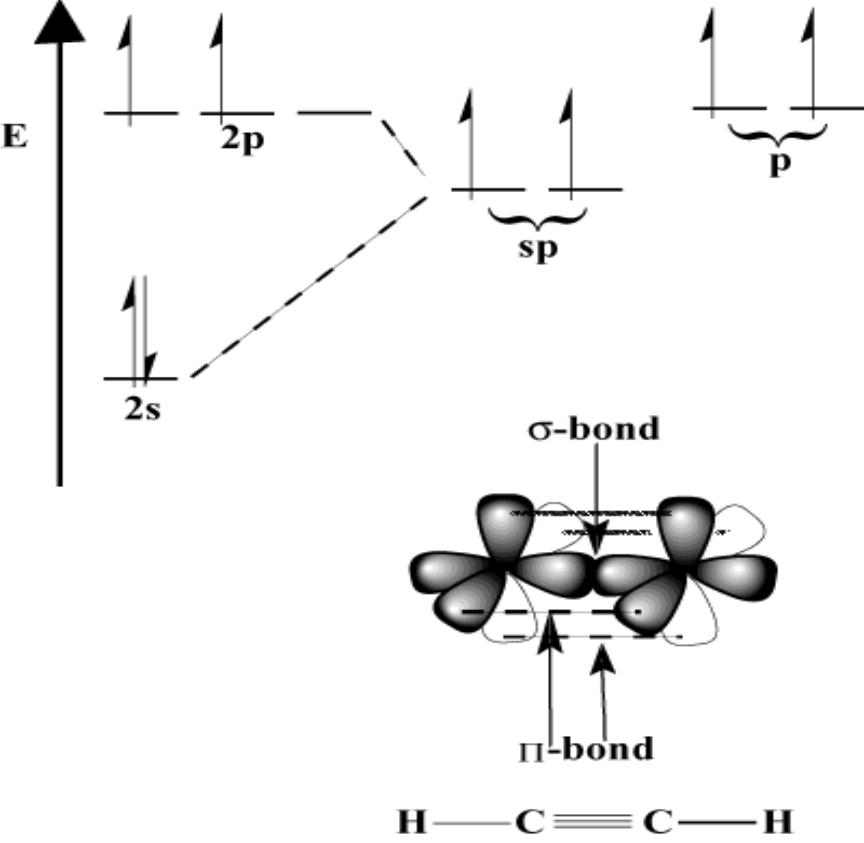
- Năng lượng của các AO tham gia lai hóa xấp xỉ nhau
- Mật độ e của các AO tham gia lai hóa đủ lớn
- Liên kết tạo thành đủ bền
  - ❖ Trong một chu kỳ:  $\Delta E_{s-p} \uparrow$ : khả năng LH  $\downarrow$

	Li	Be	B	C	N	O	F	Ne
$\Delta E_{2s-2p}$	1,9	2,8	5,7	8,1	11,4	18,9	22,6	26,8

- ❖ Trong một phân nhóm:  $r \uparrow \rightarrow$  khả năng LH  $\downarrow$







# Dự đoán trạng thái lai hóa của A trong phân tử $AB_n$

$$y = \frac{x}{2} + n$$

$y = 2 \rightarrow$  A ở trạng thái LH sp  $\rightarrow$  góc LH  $180^0$

$y = 3 \rightarrow$  A ở trạng thái LH sp<sup>2</sup>  $\rightarrow$  góc LH  $120^0$

$y = 4 \rightarrow$  A ở trạng thái LH sp<sup>3</sup>  $\rightarrow$  góc LH

$109^028'$



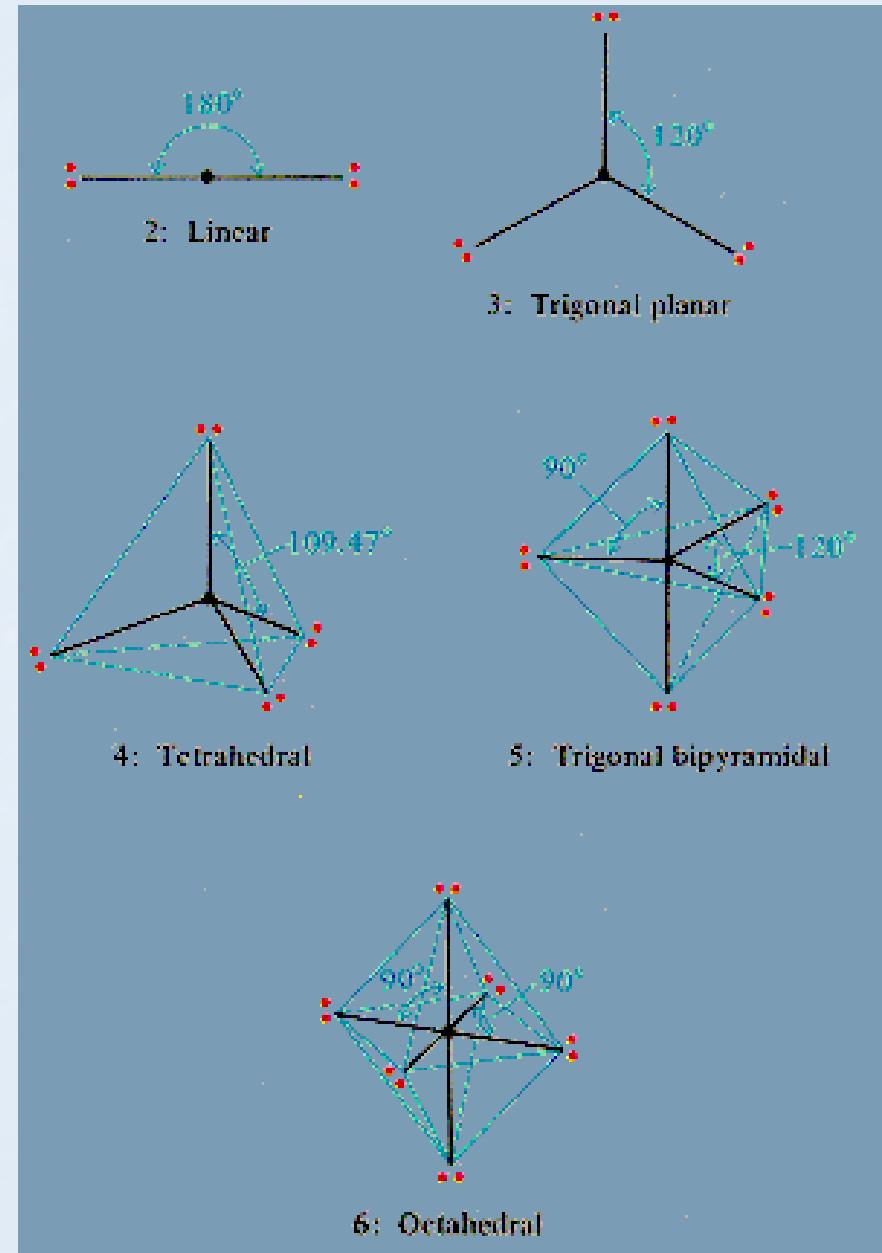
- Cách tính bậc liên kết theo phương pháp VB

$$\text{Bậc liên kết} = \frac{\sum \sigma + \sum \pi}{\sum \sigma}$$

Số lk  $\pi$  = số oxy hóa - số lk  $\sigma$  = số OXH<sub>A</sub> – n

# ✓ Dự đoán cấu hình không gian của phân tử

Kiểu lai hóa của A	Phân tử dạng	Cấu hình không gian của phân tử
sp	$AB_2$	Đường thẳng
$sp^2$	$AB_2$	Góc ( $\sim 120^\circ$ )
	$AB_3$	Tam giác đều
$sp^3$	$AB_2$	Góc ( $\sim 109^\circ 28'$ )
	$AB_3$	Tháp tam giác
	$AB_4$	Tứ diện đều



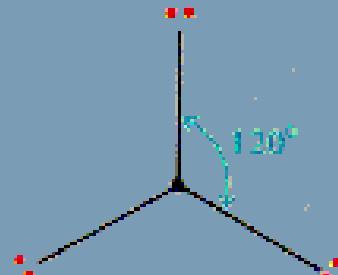
## ✓ Dự đoán cấu hình không gian của phân tử

- Đối với các phân tử  $AB_n$  không có chứa AOLH tự do:  
Góc lk = góc LH
- Đối với các phân tử  $AB_n$  có AOLH tự do:
  - Hiệu ứng đẩy của  $\uparrow\downarrow$  tự do > của  $\downarrow\uparrow$  LK > của  $\uparrow$   
 $\rightarrow$  phân tử càng có nhiều  $\downarrow\uparrow$  lk, góc lk càng bị thu hẹp
  - Nếu  $x_A < x_B$ : Đám mây e nằm lệch về phía B hơn  
 $\rightarrow$  góc dễ bị thu hẹp hơn
  - Nếu  $x_A > x_B$ : Đám mây e nằm lệch về phía A hơn  
 $\rightarrow$  góc khó bị thu hẹp hơn

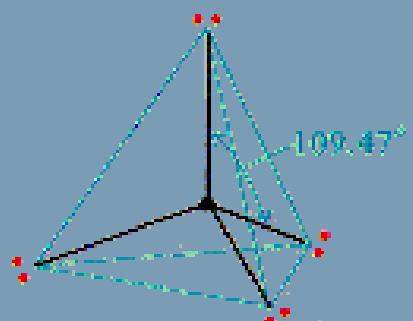




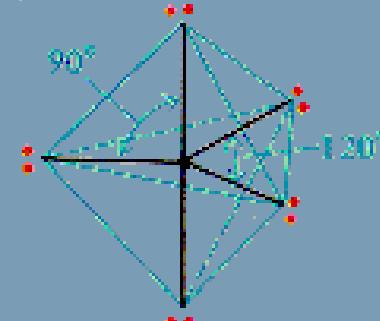
2: Linear



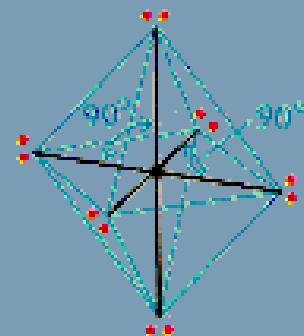
3: Trigonal planar



4: Tetrahedral



5: Trigonal bipyramidal



6: Octahedral



## ➤ Tính phân cực của liên kết

Đám mây e liên kết phân bố giữa 2 hạt nhân ngtử:

- Khi 2 ngtử tương tác giống nhau: liên kết không phân cực
- Khi 2 ngtử tương tác khác nhau: liên kết phân cực.
  - Đám mây e lệch về phía nguyên tử có độ âm điện lớn hơn → nguyên tử phân cực âm
  - Nguyên tử kia sẽ phân cực dương



$$X_A = X_B$$

cht đồng cực

$$X_A < X_B$$

cht có cực

$$X_A \ll X_B$$

ion

