

1. LIÊN KẾT CỘNG HÓA TRỊ THEO PHƯƠNG PHÁP MO

- a. Quan niệm của phương pháp MO**
- b. Nội dung của phương pháp MO**
- c. Áp dụng phương pháp MO cho các
phân tử bậc hai**

a. Quan niệm của phương pháp MO

- MO nghiên cứu dựa trên việc tính toán năng lượng của hệ: Hệ sẽ tồn tại ở trạng thái có năng lượng cực tiểu
- Mô tả sự chuyển động của từng e riêng biệt
- MO: phân tử = ngtử đa nhân. Các e chuyển động quanh các nhạt nhân. 

b. Nội dung của phương pháp MO

- Phân tử - hạt thống nhất, gồm các hạt nhân và các electron của các nguyên tử tương tác
- Trạng thái của e được xác định bằng các MO. Mỗi MO được xác định bằng tổ hợp các số lượng tử n , ℓ ,

m_ℓ

ℓ	0	1	2	3
AO trong ngtử	s	p	d	f
MO trong ptử	σ	π	δ	φ

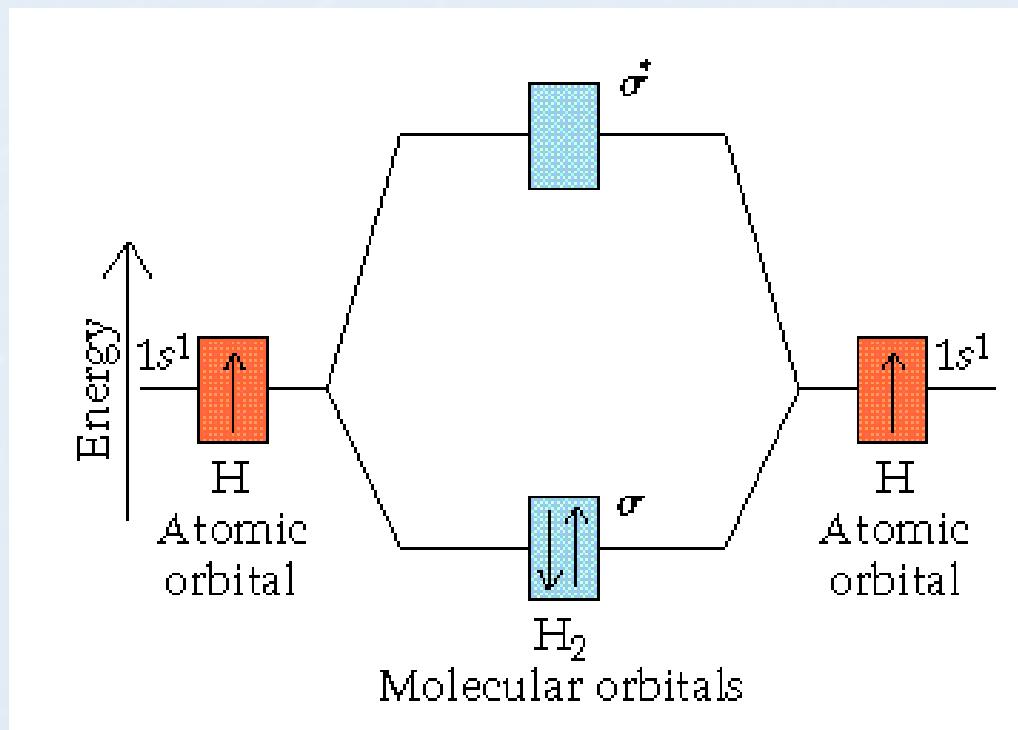
b. Nội dung của phương pháp MO

- Các MO được hình thành do sự tổ hợp tuyến tính các AO
 - ✓ AO + AO → MO liên kết ($\sigma, \pi\dots$), $E_{MO} < E_{AO}$
 - ✓ AO - AO → MO phản liên kết ($\sigma^*, \pi^* \dots$), $E_{MO^*} > E_{AO}$
 - ✓ AO → MO không liên kết ($\sigma^0, \pi^0 \dots$), $E_{MO^0} = E_{AO}$
- Sự tạo thành các MO được biểu diễn bằng giản đồ E
- Số MO tạo thành bằng tổng số AO tham gia tổ hợp
- Điều kiện tổ hợp: các AO tham gia tổ hợp phải:
 - ✓ Gần nhau về năng lượng
 - ✓ Có mức độ xen phủ đáng kể
 - ✓ Cùng tính đối xứng đối với trực nối hạt nhân

b. Nội dung của phương pháp MO

➤ Sự phân bố e trên các MO tuân theo

- ✓ Nguyên lý ngoại trừ Paouli
- ✓ Nguyên lý vững bền của Paouli
- ✓ Quy tắc Hund



➤ Các đặc trưng liên kết:

- lk được quyết định bởi các e lk mà không bị triệt tiêu.
- Cứ một cặp e phản lk sẽ triệt tiêu một cặp e lk tương ứng
- Một bậc lk ứng với một cặp e lk không bị triệt tiêu
- Cho lk 2 tâm: $\text{Bậc lk} = \frac{\sum e_{lk} - \sum e^*}{2}$
- Tên của lk được gọi bằng tên của cặp e lk không bị triệt tiêu
- Bậc lk tăng thì năng lượng lk tăng còn độ dài lk giảm

- Tóm lại: việc mô tả cấu trúc phân tử gồm các bước:
 - ✓ Bước 1: Xét sự tạo thành MO từ các AO
 - ✓ Bước 2: Sắp xếp các MO theo thứ tự năng lượng tăng dần
 - ✓ Bước 3: Xếp các e vào các MO
 - ✓ Bước 4: Xét các đặc trưng liên kết



Hình các AO

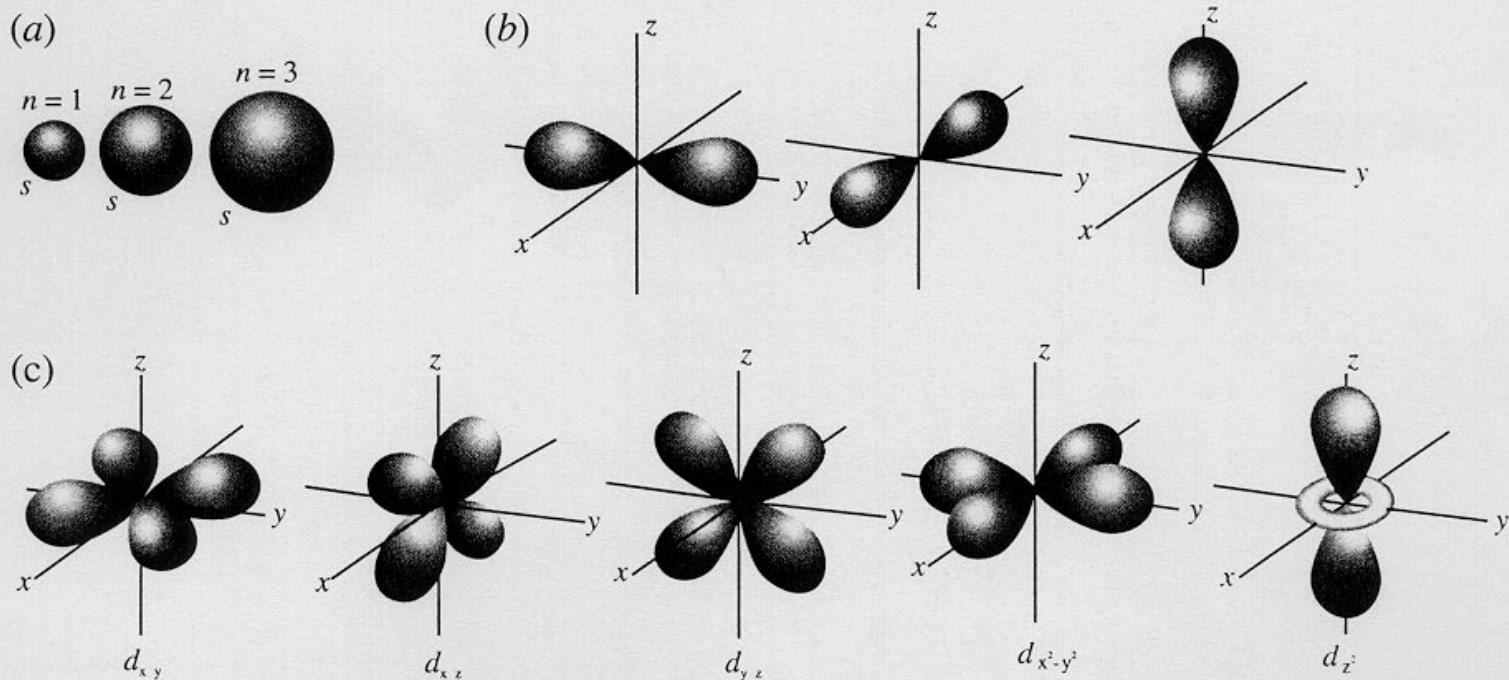
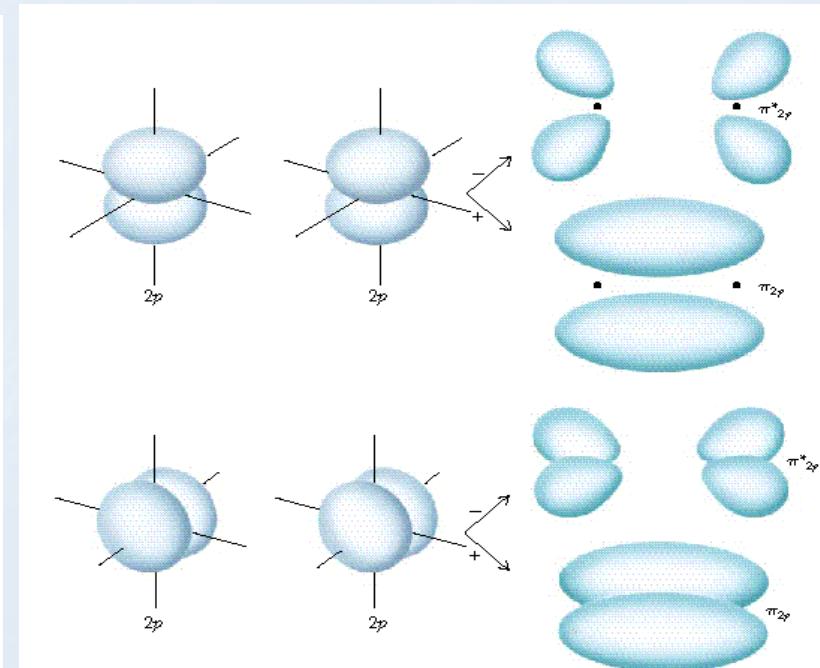
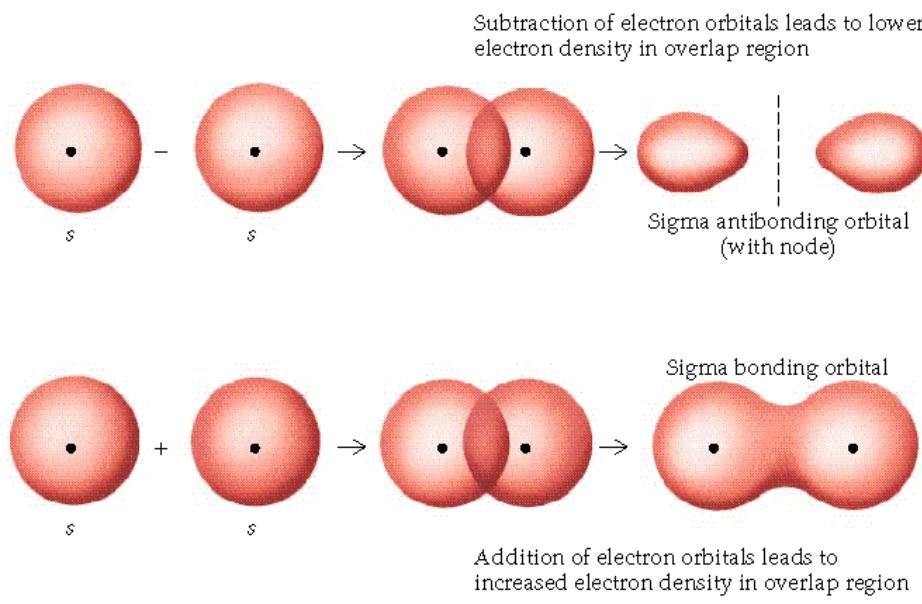
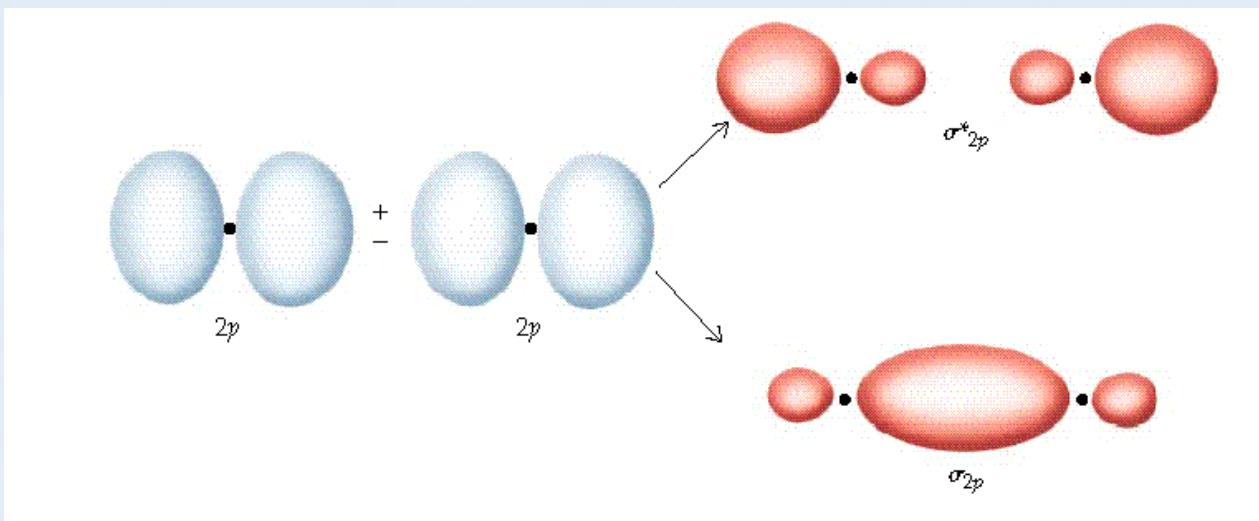


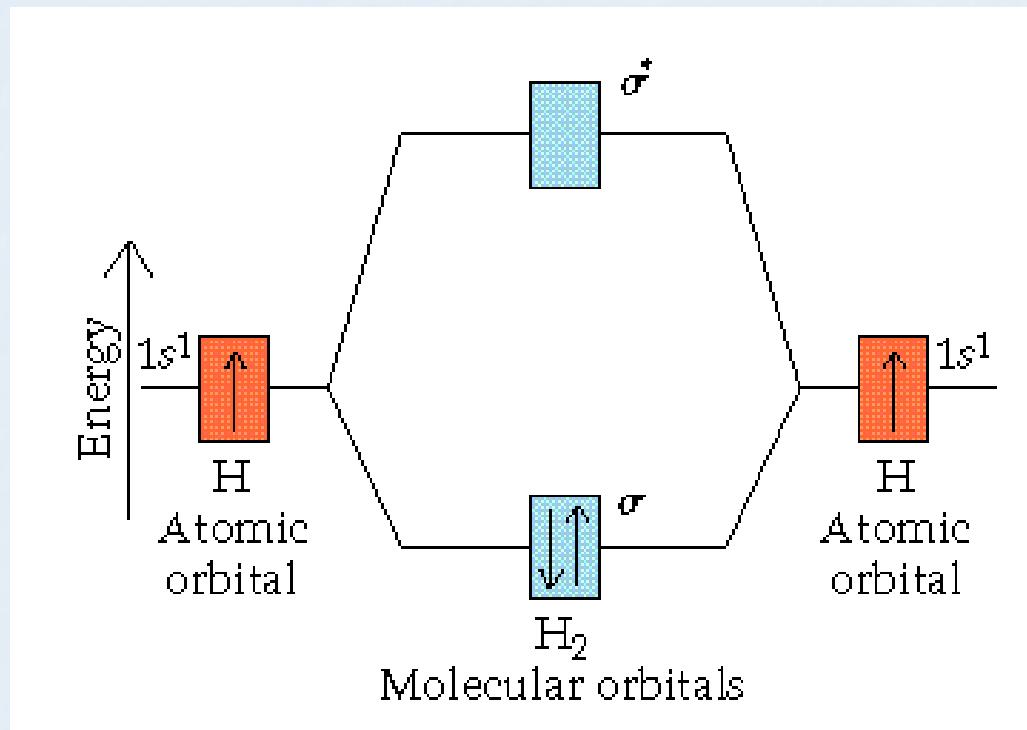
Figure 3.1 Geometry of orbitals in the s , p , and d subshells. Orbitals represent the volume of space around a nucleus in which an electron is most probably located. (a) Orbitals in the s subshells are spherical in all shells. (b) The p subshell contains three different bilobate orbitals oriented along orthogonal x , y , and z axes. (c) The d subshell contains five orbitals. The d_{xy} , d_{xz} , and d_{yz} orbitals are quadralobate and lie in the xy , xz , and yz planes, respectively, so as to bisect the angles between the orthogonal axes. The $d_{x^2-y^2}$ orbital forms a quadralobate shape with lobes aligned along the x and y axes. The d_{z^2} orbital forms a torus with a bilobate shape aligned along the z axis.



Hình: Sự tạo thành các MO từ các AO

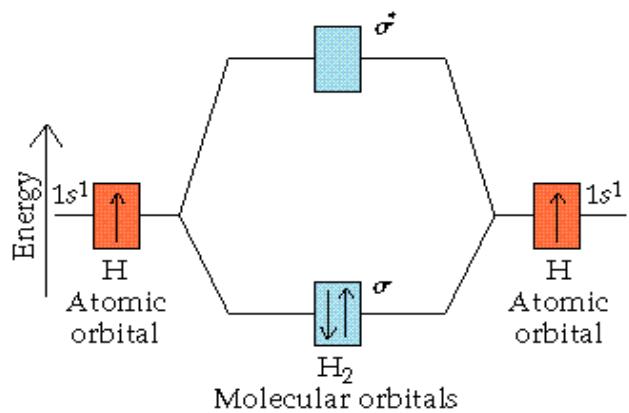


Hình: Giản đồ năng lượng của phân tử H₂

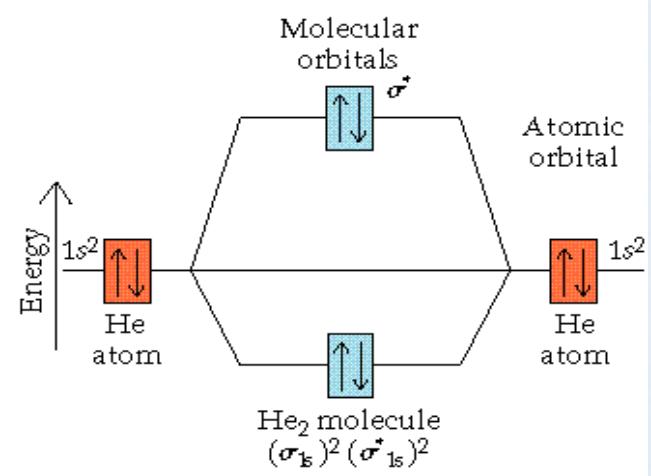


H₂: σ²

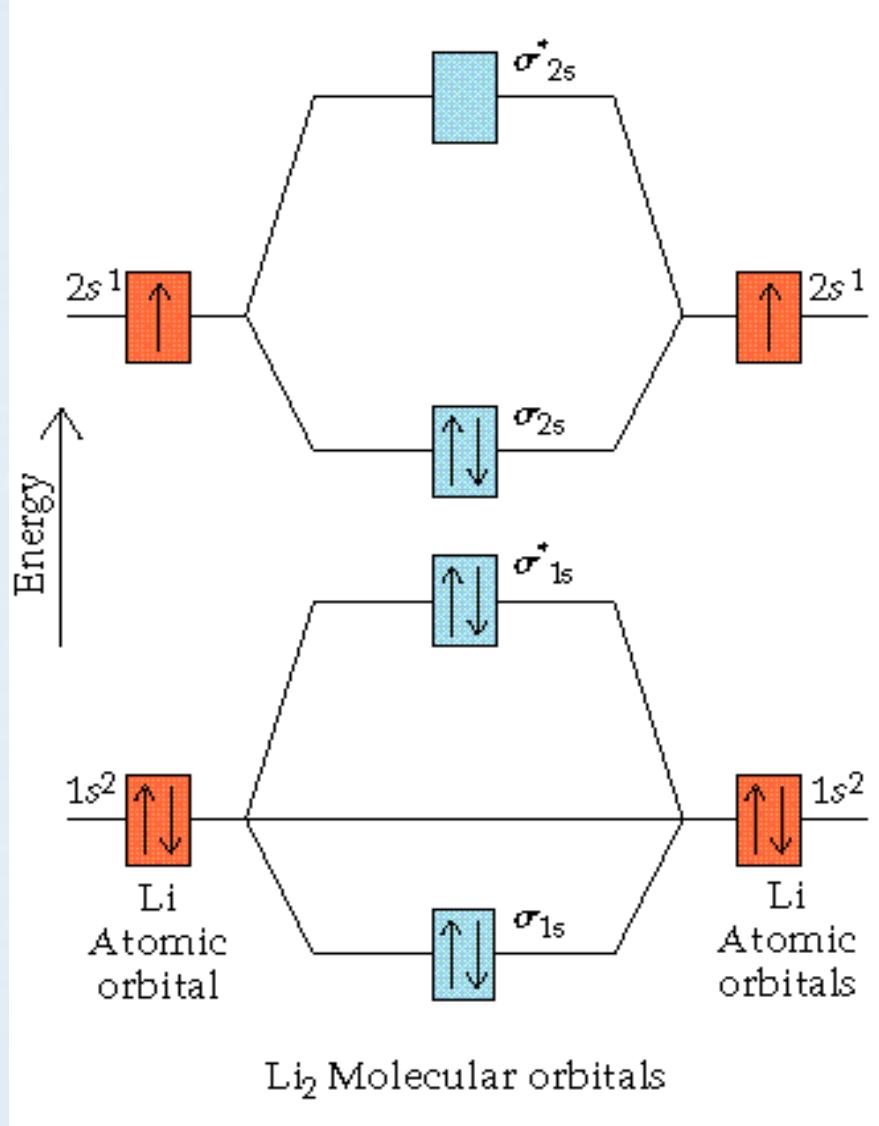




$\text{H}_2: \sigma^2. \text{Bậc lk} = 1$



$\text{He}_2: \sigma^2\sigma^{*2}. \text{Bậc lk} = 0$



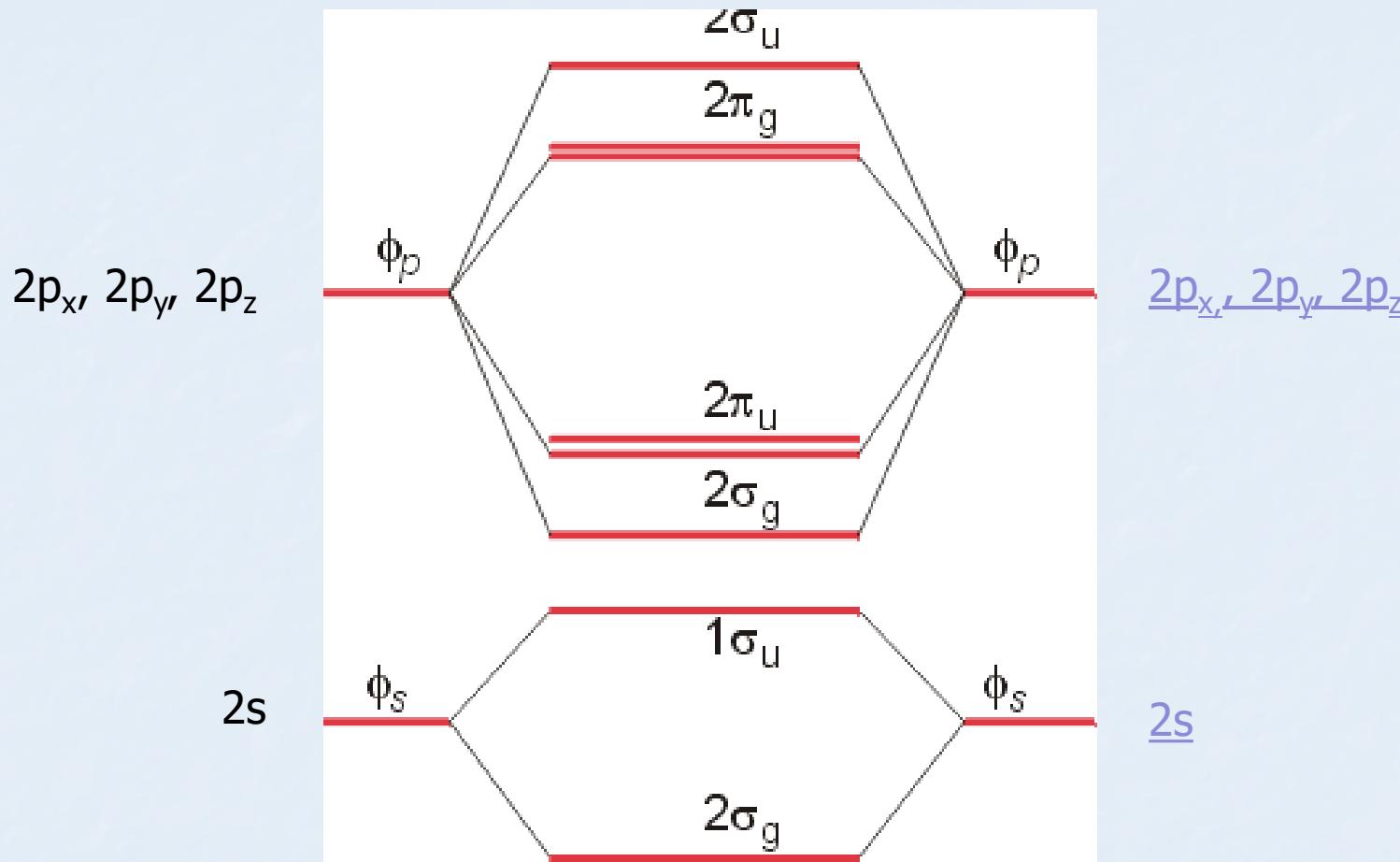
$\text{Li}_2: \sigma_1^2\sigma_1^{*2}\sigma_s^2. \text{Bậc lk} = 1$



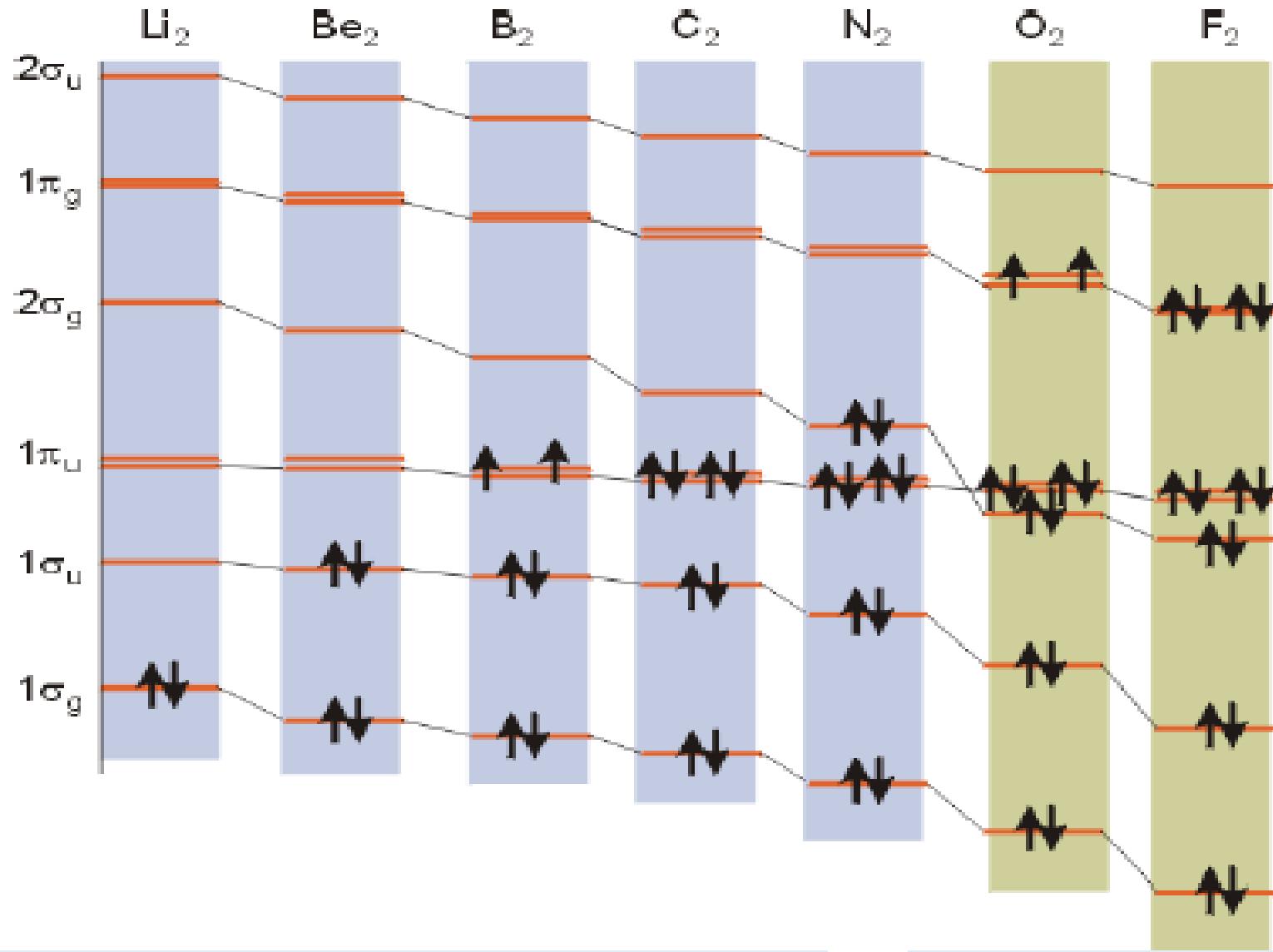
c. Áp dụng phương pháp MO cho các phân tử bậc hai

- Các phân tử hai nguyên tử của các nguyên tố cuối chu kỳ II (O, F, Ne)
- Các phân tử hai nguyên tử cùng loại của những nguyên tố đầu chu kỳ II (Li, Be, B, C, N)
- Các phân tử hai nguyên tử khác loại của những nguyên tố chu kỳ II

Hình: Giải đồ cuối chu kỳ



Period 2 – Homonuclear Diatomics



➤ Các pt^u hai ngt^u của các ngt^o đầu chu kỳ II

MO	Li_2	Be_2	B_2	C_2	N_2	N_2^+
Tổng số e	6	8	10	12	14	13
σ_{2px}^*	—	—	—	—	—	—
π_{2py}^*, π_{2pz}^*	—	—	—	—	—	—
σ_{2px}	—	—	—	—	$\uparrow\downarrow$	\uparrow
π_{2py}, π_{2pz}	—	—	$\uparrow\uparrow$	$\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$
σ_{2s}^*	—	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$
σ_{2s}	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$
σ_{1s}^*	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$
σ_{1s}	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$
Bậc liên kết	1	0	1	2	3	2,5
Chiều dài lk (\AA^0)	2,67	—	1,59	1,24	1,10	1,12
NL liên kết (kJ/mol)	105	—	289	599	940	828
Tính thuận từ	nghịch	—	thuận	nghịch	nghịch	thuận



➤ Các ptử hai ngtử cùng loại của những ngtő cuối ckỳ II

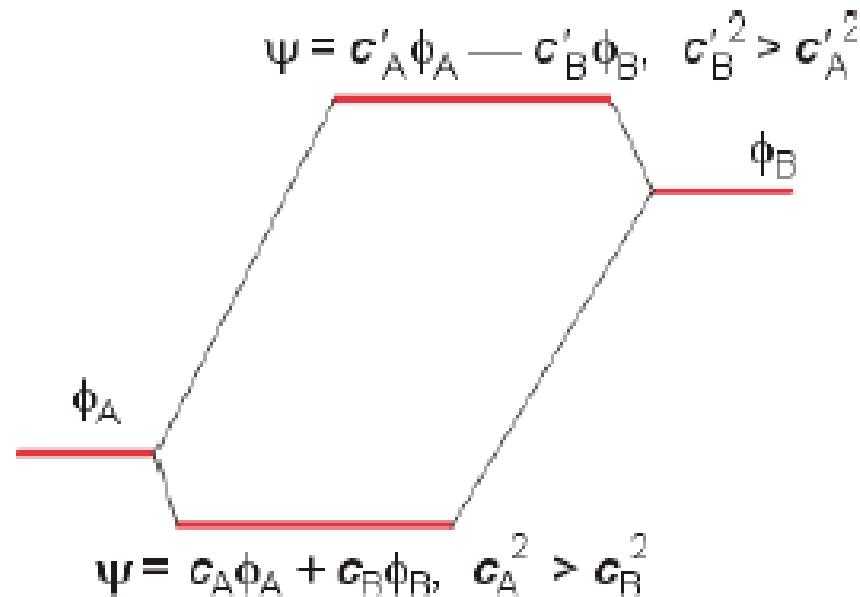
MO	O_2^+	O_2	O_2^-	F_2	F_2^-	Ne_2
Tổng số e	15	16	17	18	19	20
σ_{2px}^*	—	—	—	—	↑	↑↓
π_{2py}^*, π_{2pz}^*	↑ —	↑ ↑	↑↓ ↑	↑↓ ↑↓	↑↓ ↑↓	↑↓ ↑↓
π_{2py}, π_{2pz}	↑↓ ↑↓	↑↓ ↑↓	↑↓ ↑↓	↑↓ ↑↓	↑↓ ↑↓	↑↓ ↑↓
σ_{2px}	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓
σ_{2s}^*	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓
σ_{2s}	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓
σ_{1s}^*	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓
σ_{1s}	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓
Bậc liên kết	2,5	2	1,5	1	0,5	0
Chiều dài lk (A^0)	1,12	1,21	1,26	1,41	—	—
NL liên kết (kJ/mol)	629	494	328	154	—	—
Tính thuận từ	thuận	Thuận	thuận	nghịch	thuận	—



➤ Các phân tử hai nguyên tử khác loại của những nguyên tố chu kỳ II

- ✓ Do 2 ngtử của 2 nguyên tố khác nhau về độ âm điện nên:
 - ❖ AO của nguyên tố dương điện hơn sẽ góp chủ yếu vào MO phản liên kết
 - ❖ AO của ngtổ âm điện hơn sẽ góp chủ yếu vào MO lk.
- ✓ Các MO tạo thành sẽ giống như
 - ❖ 2 ngtử cùng loại cuối CK 2 nếu cả 2 ngtổ đều là cuối CK
 - ❖ 2 ngtử cùng loại đầu CK trong các trường hợp còn lại

Heteronuclear Diatomics



Bonding orbital has more A character while antibonding orbital has more B character.

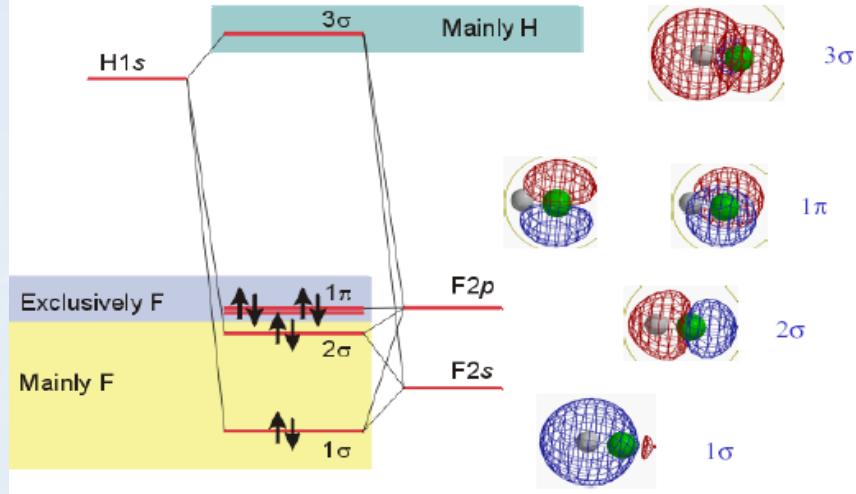


➤ Các pt^u hai ngt^u kh^{ac} loại c^ua nh^ung ngt^o chu k^y II

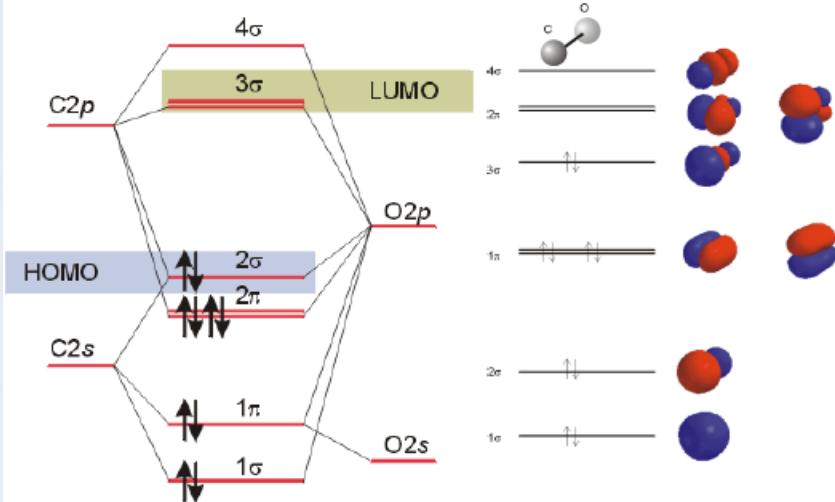
MO	N ₂	<u>CO</u>	CN ⁻	NO ⁺
Tổng số e hóa trị	10	10	10	10
σ_{2px}^*	—	—	—	—
π_{2py}^*, π_{2pz}^*	— —	— —	— —	— —
σ_{2px}	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓
π_{2py}, π_{2pz}	↑↓↑↓	↑↓↑↓	↑↓↑↓	↑↓↑↓
σ_{2s}^*	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓
Bậc liên kết	3	3	3	3
Chiều dài liên kết (A ⁰)	1,10	1,13	1,14	1,06
NL liên kết (kJ/mol)	940	1076	1004	1051
Tính thuận từ	nghịch	nghịch	nghịch	nghịch



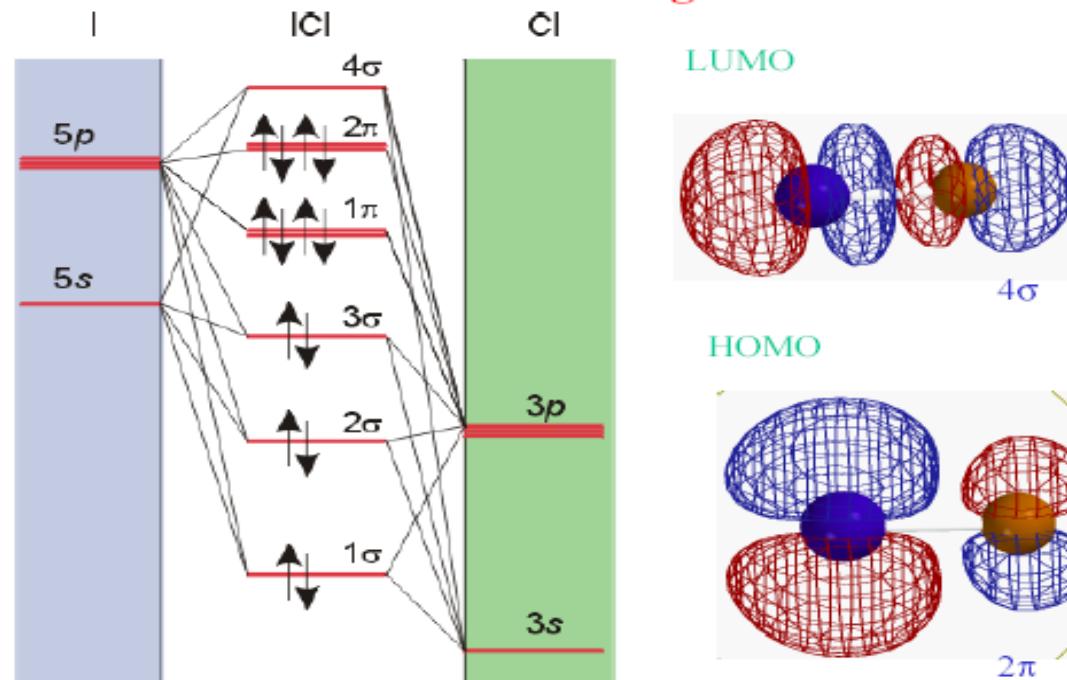
Molecular Orbital Diagram for HF



Molecular Orbital Diagram for CO



Molecular Orbital Diagram for ICl



3. Các phân tử cộng hóa trị và lưỡng cực

a. Phân tử cộng hóa trị có cực và không cực

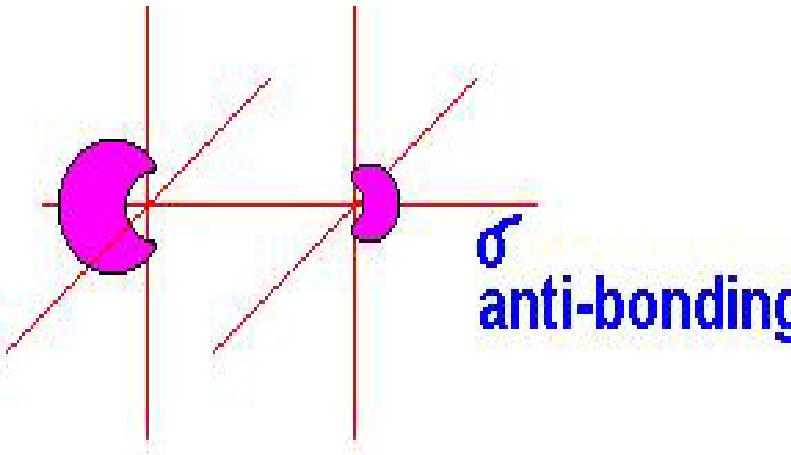


b. Lưỡng cực và moment lưỡng cực

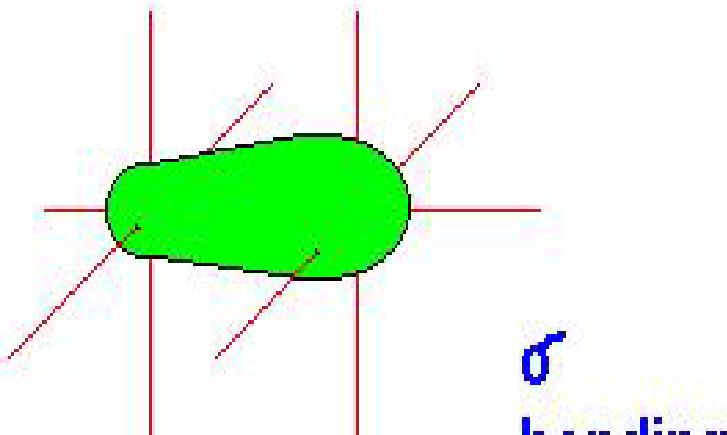


a. Phân tử cộng hóa trị có cực và không cực

- Phân tử cộng hóa trị có cực là do sự phân bố mật độ e trong phân tử gần với nguyên tử âm điện hơn làm cho nguyên tử có độ âm điện lớn hơn sẽ phân cực âm và nguyên tử kia phân cực dương.
- Phân tử cộng hóa trị không cực là phân tử tạo thành từ các nguyên tử cùng loại (N_2 , H_2 , O_2 ...) hoặc phân tử có tính đối xứng trong không gian (CO_2 , CH_4 , C_6H_6 ...)



σ
anti-bonding



σ
bonding



b. Lưỡng cực và moment lưỡng cực

- Ptử có cực : xuất hiện lưỡng cực điện gồm hai tâm có điện tích bằng nhau nhưng trái dấu ($\delta+$ $\delta-$) , nằm cách nhau một khoảng / gọi là độ dài lưỡng cực
- Moment lưỡng cực: là đại lượng vectơ có chiều quy ước từ cực dương đến cực âm
- Moment lưỡng cực của ptử bằng tổng vectơ moment lưỡng cực của các liên kết và các cặp e tự do
- $\mu = q/ = \delta e/$ Thực tế μ thường được đo bằng đơn vị debye(D)
- Ptử cht: $\mu = 0 \div 4 D.$ μ càng lớn ptử càng phân cực mạnh



Pure covalent

