

STUDY ON STRUCTURE AND CHEMICAL BONDING OF INORGANIC COMPOUNDS USING THEORETICAL METHODS

NGHIÊN CỨU CẤU TRÚC VÀ LIÊN KẾT CỦA MỘT SỐ HỢP CHẤT VÔ CƠ BẰNG PHƯƠNG PHÁP HÓA HỌC TÍNH TOÁN

Nguyễn Đức Minh, Nguyễn Đức Vượng
Trường Đại học Quảng Bình

ABSTRACT: This study introduces some methods of calculating molecular structure and chemical bonding in molecules of inorganic compounds. The study investigates some density functional theory methods such as B3LYP, B3PW91 and PBEPBE with various basic sets STO-3G, 3-21G, 6-311G and LANL2DZ for some inorganic substances and compare with available experimental data. The results show that the density functional theory method at B3LYP level with basic set 3-21G is the most suitable for inorganic substances such as CO, CO₂, SO₂, H₂O and NO₂. The atomic electron configurations, charges and bonding levels in inorganic compounds have been calculated and discussed in detail.

Keywords: Theoretical chemistry, density functional theory, structure, chemical bonding, inorganic compounds.

TÓM TẮT: Bài báo này giới thiệu về một số phương pháp tính toán cấu trúc phân tử và liên kết hóa học trong phân tử một số hợp chất vô cơ. Tiến hành khảo sát với một số phương pháp phiếm hàm mật độ như B3LYP, B3PW91, PBEPBE với các bộ hàm cơ sở như STO-3G, 3-21G, 6-311G, LANL2DZ cho một số chất vô cơ và so sánh với thực nghiệm. Kết quả cho thấy phương pháp phiếm hàm mật độ B3LYP với bộ hàm cơ sở 3-21G là phù hợp nhất với các chất vô cơ như CO, CO₂, SO₂, H₂O, NO₂. Các giá trị như cấu hình electron nguyên tử, điện tích và bậc liên kết trong các hợp chất vô cơ cũng đã được tính toán và thảo luận một cách chi tiết.

Từ khóa: Hóa học tính toán, phiếm hàm mật độ, cấu trúc, liên kết hóa học, hợp chất vô cơ.

1. GIỚI THIỆU

Ngày nay, việc áp dụng phương pháp hoá học tính toán để mô phỏng cấu trúc, bản chất liên kết hóa học và dự đoán khả năng phản ứng hóa học của các chất đang thu hút được sự quan tâm của nhiều nhà khoa học, bởi nó giúp chúng ta định hướng tốt cho nghiên cứu thực nghiệm [1 - 3]. Sự phát triển của các phương pháp tính toán cũng như các phần mềm tính toán cho phép dự đoán cấu trúc electron, cấu trúc hình học, khả năng phản ứng, cơ chế phản ứng, các thông số nhiệt động lực học... của các hợp chất vô cơ và hữu cơ, từ đơn giản đến phức tạp. Ngoài ra,

chúng ta còn có thể tính toán phổ hồng ngoại, phổ khối lượng, phổ UV-Vis của các hợp chất đã biết hoặc chưa biết, kể cả những hợp chất khó xác định trong thực nghiệm hoặc rất tốn kém để xác định [4, 5].

Các hợp chất vô cơ có vai trò hết sức quan trọng trong đời sống và sản xuất. Chúng được hình thành và tham gia vào nhiều quá trình trong đời sống hàng ngày có ảnh hưởng đến cuộc sống của con người [6, 7]. Trong đó, một số hợp chất vô cơ điển hình và thường gặp, đó là cacbon đioxit (CO₂), cacbon monoxit (CO), nước (H₂O), lưu huỳnh đioxit (SO₂), nitơ đioxit

(NO₂). Các chất vô cơ này gây ra hiệu ứng nhà kính, ô nhiễm môi trường, mưa axit ... Vì vậy, cần làm rõ hơn nữa bản chất hóa học của chúng nhằm đề xuất các biện pháp xử lý một cách hiệu quả nhất. Mặc dù, một số đặc điểm và tính chất của chúng đã được xác định nhưng khi tính toán về mặt lý thuyết sẽ giúp chúng ta đánh giá được sự phù hợp giữa lý thuyết với thực nghiệm. Từ đó, đề xuất phương pháp tính toán phù hợp với các hệ chất khác nhau.

Do vậy, chúng tôi đã muốn nghiên cứu cấu trúc và liên kết hóa học của một số hợp chất vô cơ bằng phương pháp hóa học tính toán nhằm lựa chọn phương pháp nghiên cứu lý thuyết phù hợp nhất với một số hợp chất vô cơ và khám phá bản chất liên kết hóa học trong phân tử.

1. PHƯƠNG PHÁP TÍNH TOÁN

Phương pháp phiếm hàm mật độ (Density Function Theory - DFT) được sử dụng để dự đoán cấu trúc, độ bền và tính chất electron của các chất và cho kết quả gần đúng với thực nghiệm [1 - 3]. Chúng tôi chọn phương pháp phiếm hàm mật độ lai hóa B3LYP, B3PW91, PBEPBE kết hợp với các bộ hàm cơ sở như STO-3G, 3-21G, 6-311G và LANL2DZ để tối ưu hóa các cấu trúc của các hợp chất vô cơ: CO, CO₂, H₂O, SO₂ và NO₂ bởi chúng phù hợp với các hợp chất phi kim [9]. Trong đó, phương pháp B3LYP là sự kết hợp của phiếm hàm trao đổi của Becke và phiếm hàm tương quan của Lee, Yang và Parr, phương pháp B3PW91 là sự kết hợp của phiếm hàm trao đổi của Becke và phiếm hàm tương quan Perdew-Wang còn phương pháp PBEPBE là sự kết hợp của phiếm hàm trao đổi và phiếm hàm tương quan Perdew-Burke-Ernzerhof [10 - 12]. Bộ hàm cơ sở STO-3G là bộ hàm cơ sở cực tiểu được tổ hợp từ 3GTO (Gaussian Type Orbital) thành STO (Slater Type Orbital). Bộ hàm cơ sở 3-21G là bộ hàm cơ sở hóa trị tách đôi trong đó obitan lõi được tổ hợp từ

3GTO còn obitan vỏ hóa trị thứ nhất được biểu diễn bởi 2GTO và obitan vỏ thứ hai được biểu diễn bởi 1GTO [1]. Bộ hàm cơ sở 6-311G một bộ cơ sở hóa trị tách ba, sử dụng 6 hàm GTO để tạo thành bộ lõi. Bộ hàm cơ sở LANL2DZ là bộ hàm cơ sở tách đôi zeta với lõi thể (ECP) LANL được dùng để mô tả ảnh hưởng của lõi thể đối với electron vùng ngoài, khi đó toàn bộ electron lõi được mô tả bằng một hàm thể phù hợp còn các electron vùng ngoài được xét đầy đủ. Các tính toán hóa học lượng tử được thực hiện bằng phần mềm Gaussian 03 (E.01) [13]. Sự phân bố electron được tính theo phương pháp NBO trên phần mềm NBO 5G [14].

2. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

2.1. Khảo sát phương pháp tính toán cho hệ chất

Chúng tôi tiến hành khảo sát các phương pháp tính toán để lựa chọn phương pháp tính toán phù hợp nhất cho hệ gồm các chất vô cơ như CO, CO₂, SO₂, H₂O và NO₂. Các phương pháp được khảo sát bao gồm B3LYP, P3PW91, PBEPBE với các bộ hàm cơ sở là STO-3G, 3-21G, 6-311G, LANL2DZ. Kết quả tính toán được so sánh với kết quả thực nghiệm (độ dài liên kết và góc liên kết) của các phân tử và thể hiện trong Bảng 1.

Từ số liệu trong Bảng 1 cho thấy phương pháp B3LYP với bộ hàm cơ sở 3-21G cho kết quả phù hợp với thực nghiệm nhất. Cụ thể, đối với phân tử CO₂ thì độ dài liên kết CO là 1,186 Å xấp xỉ với thực nghiệm là 1,163 Å và góc liên kết là 180° còn phân tử CO thì độ dài liên kết CO là 1,150 Å rất gần với giá trị thực nghiệm là 1,128 Å. Phân tử H₂O có độ dài liên kết HO là 0,980 Å tương đương với thực nghiệm là 0,985 Å và góc liên kết <HOH bằng 103,9° so với thực nghiệm là 104,45°. Phân tử SO₂ có độ dài liên kết SO là 1,580 Å so với thực nghiệm là 1,431 Å và góc liên kết <OSO là 114,3° so với thực

thực nghiệm là 119° . Phân tử NO_2 có độ dài liên kết NO là 1,250 Å so với giá trị thực nghiệm là 1,197 Å và góc liên kết là $133,9^\circ$ so với thực

thực nghiệm là $134,3^\circ$. Như vậy, phương pháp B3LYP là phù hợp cho các nguyên tố phi kim hơn là các kim loại [9].

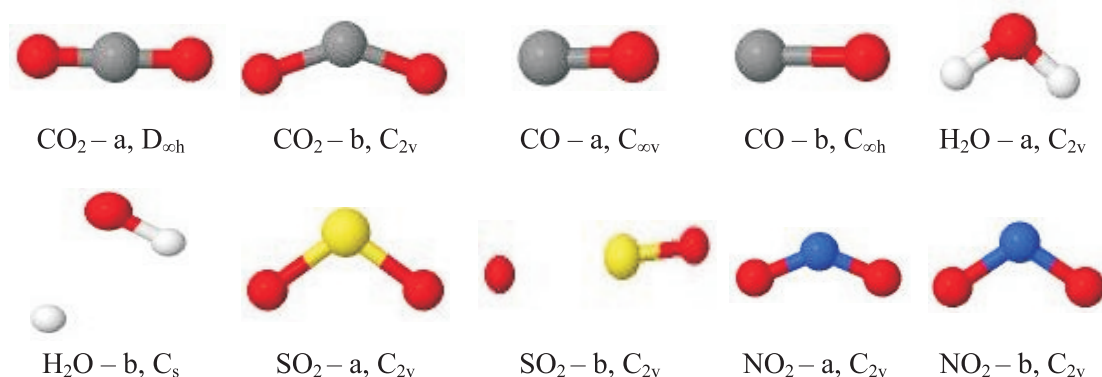
Bảng 1. Khảo sát các phương pháp tính toán cho hệ các chất vô cơ: CO , CO_2 , H_2O , SO_2 và NO_2

Phân tử	Spin	Đặc trung	B3LYP				B3PW91				BPEBPE				Thực nghiệm [6]
			STO- 3G	3-21G	6-311G	LANL 2DZ	STO- 3G	3-21G	6-311G	LANL 2DZ	STO- 3G	3-21G	6-311G	LANL 2DZ	
CO ₂	1	d _{C-O} (Å)	1,235	1,186	1,185	1,193	1,223	1,182	1,200	1,199	1,240	1,280	1,200	1,163	
		<OCO	180	180	180	180	180	180	180	179,9	180	176,5	180	180	
CO	1	d _{C-O} (Å)	1,190	1,150	1,470	1,670	1,190	1,130	1,150	1,160	1,120	1,170	1,160	1,128	
H ₂ O	1	d _{H-O} (Å)	1,030	0,980	0,970	0,970	1,020	0,990	0,970	0,970	1,040	1,010	0,960	0,990	0,985
		<HOH	97,1	103,9	109	110,1	97,2	104,4	109,4	110,1	96,1	102,6	103,9	108,8	104,45
SO ₂	1	d _{S-O} (Å)	1,620	1,580	1,600	1,610	1,610	1,580	1,600	1,610	1,640	1,600	1,630	1,630	1,431
		<OSO	106,7	114,3	108,7	112,8	106,9	115,1	114	112,7	107,7	114,9	114,7	113,4	119
NO ₂	1	d _{N-O} (Å)	1,300	1,250	1,230	1,250	1,300	1,240	1,230	1,240	1,320	1,270	1,250	1,260	1,197
		<ONO	128,5	133,9	134,4	133,9	128,8	134,1	134,5	134,1	128,4	133,4	115,5	113,5	134,3

1.1. Cấu trúc phân tử hợp chất vô cơ

Chúng tôi tiến hành tối ưu hóa cấu trúc phân tử các hợp chất vô cơ và xác định được

hơn 20 cấu trúc bền ở các trạng thái spin khác nhau nhưng chỉ đưa ra 2 cấu trúc bền nhất để thảo luận (Bảng 1).



Hình 1. Một số cấu trúc bền của các hợp chất vô cơ

3.2.1. Cacbon dioxit

Phân tử CO₂ bền nhất ở trạng thái spin singlet là CO₂-a, có nhóm điểm đối xứng là D_{∞h} có dạng thẳng chứa hai liên kết đôi, độ dài liên kết của nguyên tử cacbon với oxi là 1,186 Å và góc liên kết <OCO = 180°.

Đồng phân CO₂-b có dạng chữ V ở trạng thái triplet, có năng lượng tương đối so với đồng phân CO₂-a là 0,09 eV với chiều dài của hai liên kết giữa nguyên tử cacbon với nguyên tử oxi là một liên kết C=O có chiều dài là 1,190 Å, còn liên kết C=O còn lại có chiều dài là 1,710 Å, góc liên kết <OCO = 139,6°.

Như vậy, khi tối ưu CO₂ bằng phương pháp B3LYP/3-21G thì cấu trúc ở dạng thẳng với trạng thái spin singlet là cấu trúc bền nhất.

3.2.2. Cacbon monoxit

Đồng phân bền nhất của phân tử CO là CO-a, ở trạng thái singlet có nhóm điểm đối xứng C_{∞v} với độ dài liên kết giữa nguyên tử cacbon với nguyên tử oxi là 1,150 Å.

Đồng phân CO-b ở trạng thái spin triplet cũng có nhóm điểm đối xứng C_{∞h}, nhưng kém bền so với CO-a, có độ dài liên kết giữa nguyên tử cacbon với nguyên tử oxi là 1,240 Å và có năng

lượng tương đối so với CO-a là 0,03 eV.

Như vậy, khi tối ưu CO bằng phương pháp B3LYP/3-21G thì trạng thái spin singlet cho cấu trúc bền nhất.

3.2.3. Nước

Đồng phân bền nhất của nước là H₂O-a, ở trạng thái spin singlet, có dạng chữ V với góc liên kết <HOH = 103,9° và độ dài liên kết O-H là 0,980 Å, nhóm điểm đối xứng của H₂O-a là C_{2v}.

Đồng phân H₂O-b ở trạng thái triplet có nhóm điểm đối xứng là C_s với độ dài liên kết giữa nguyên tử oxi và hidro là một liên kết O-H có chiều dài là 1,020 Å, còn liên kết O-H còn lại có chiều dài là 2,090 Å, góc liên kết là <OHO = 81,68°. Đồng phân H₂O-b có năng lượng tương đối so với đồng phân H₂O-a lần lượt là 0,25 eV.

Như vậy, khi tối ưu H₂O bằng phương pháp B3LYP/3-21G thì trạng thái spin singlet cho cấu trúc bền nhất.

3.2.4. Lưu huỳnh dioxit

Phân tử SO₂ bền nhất ở trạng thái spin singlet là SO₂-a, có nhóm điểm đối xứng là C_{2v} có dạng chữ V chứa hai liên kết đôi, độ dài liên kết S=O là 1,580 Å, góc liên kết <OSO = 117,9°.

Đồng phân SO_2 -b có cấu trúc tương tự như đồng phân SO_2 -a nhưng ở trạng thái spin triplet, có năng lượng tương đối so với đồng phân SO_2 -a là 0,04 eV với chiều dài của hai liên kết giữa nguyên tử lưu huỳnh với nguyên tử oxi không giống nhau, một liên kết $\text{S}=\text{O}$ có chiều dài là 1,800 Å, còn liên kết $\text{S}-\text{O}$ còn lại có chiều dài là 1,630 Å, góc liên kết là $\angle \text{OSO} = 106,9^\circ$.

Như vậy, khi tối ưu SO_2 bằng phương pháp B3LYP/3-21G thì đồng phân có dạng chữ V ở trạng thái spin singlet là đồng phân bền nhất.

1.1.1. Nitơ dioxit

Phân tử NO_2 bền nhất ở trạng thái spin singlet là NO_2 -a, có nhóm điểm đối xứng là C_{2v} có dạng chữ V chứa hai liên kết đôi, độ dài liên

kết $\text{N}=\text{O}$ là $1,250 \text{ \AA}$, góc liên kết $\angle \text{ONO} = 133,7^\circ$.

Tương tự như cấu trúc của NO_2 -a, đồng phân NO_2 -b ở trạng thái triplet, có năng lượng tương đối so với đồng phân NO_2 -a là 0,09 eV với góc liên kết là $\angle \text{ONO} = 110,58^\circ$ và chiều dài liên kết $\text{N}=\text{O}$ là $1,390 \text{ \AA}$.

Như vậy, khi tối ưu NO_2 bằng phương pháp B3LYP/3-21G thì trạng thái spin singlet cho cấu trúc bền nhất.

1.2. Liên kết hóa học trong hợp chất vô cơ

Để xác định bản chất liên kết hóa học trong các phân tử hợp chất vô cơ trên, chúng tôi sử dụng chương trình NBO 5.0 và chạy cùng mức lý thuyết B3LYP/3-21G. Kết quả được thể hiện trong Bảng 2.

Bảng 2. Cấu hình electron, điện tích và bậc liên kết của các nguyên tử

Phân tử	Nguyên tử	Cấu hình electron	Điện tích (eV)	Bậc liên kết
CO_2	C	$1s^2 2s^1 2p^{2,3}$	+0,987	4
	O	$1s^2 2s^2 2p^{4,74}$	-0,489	2
CO	C	$1s^2 2s^{1,68} 2p^{1,77}$	+0,508	3
	O	$1s^2 2s^{1,76} 2p^{4,74}$	-0,508	3
H_2O	H	$1s^2 2s^{1,79} 2p^{5,19}$	+0,496	1
	O	$1s^{0,5}$	-0,992	2
SO_2	S	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^{1,73} 3p^{2,93}$	+1,28	2,86
	O	$1s^2 2s^{1,91} 2p^{4,72}$	-0,64	1,43
NO_2	N	$1s^2 2s^{1,33} 2p^{3,19}$	+0,436	1,98
	O	$1s^2 2s^{1,81} 2p^{4,39}$	-0,218	0,99

3.3.1. Cacbon đioxit

Cấu trúc bền nhất của cacbon đioxit được mô tả ở Hình 2.



Hình 2. Cấu trúc bền nhất của CO_2

Ở cấu trúc này, cấu hình electron của cacbon trong phân tử CO_2 là $1s^2 2s^1 2p^{2,3}$ và oxi là $1s^2 2s^2 2p^{4,74}$. Từ cấu hình electron trên, có thể thấy sự hình thành liên kết trong phân tử CO_2 là do sự xen phủ obitan 2s và obitan 2p của nguyên tử cacbon và obitan 2p của nguyên tử oxi. Trong phân tử CO_2 , cacbon có bậc liên kết là 4 còn oxi có bậc liên kết là 2 ($\text{O}=\text{C}$).

Trong phân tử CO_2 , cacbon có điện tích là +0,987, oxi có điện tích là -0,489. Như vậy, electron dịch chuyển từ nguyên tử cacbon sang nguyên tử oxi. Điều này xảy ra là do nguyên tử Oxi có độ âm điện lớn hơn nên kéo electron liên kết về phía mình. Nhưng do cấu trúc CO_2 dạng thẳng (đối xứng $D_{\infty h}$) nên sự phân cực triệt tiêu nhau làm cho phân tử CO_2 không phân cực.

Từ kết quả phân tích NBO cho thấy phân tử CO_2 ở dạng liên kết ion chiếm 44,47% là còn ở dạng liên kết cộng hóa trị là 55,53%. Như vậy, phân tử CO_2 dường như có $\frac{1}{2}$ liên kết cộng hóa trị và $\frac{1}{2}$ liên kết ion.

3.3.2. Cacbon monoxit

Cấu trúc bền nhất của cacbon đioxit được mô tả ở Hình 3.



Hình 3. Cấu trúc bền nhất của CO

Ở phân tử CO này, cấu hình electron của cacbon là $1s^2 2s^{1.68} 2p^{1.77}$, oxi là $1s^2 2s^{1.76} 2p^{4.74}$. Từ cấu hình electron trên cho thấy sự hình thành liên kết trong phân tử CO là do sự xen phủ obitan 2s và obitan 2p của nguyên tử cacbon với obitan 2s, obitan 2p của nguyên tử oxi. Trong phân tử CO, cacbon có bậc liên kết là 3, oxi cũng có bậc liên kết là 3.

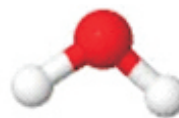
Trong phân tử CO, cacbon có điện tích là +0,508, oxi có điện tích là -0,508. Như vậy, electron dịch chuyển từ nguyên tử cacbon sang nguyên tử oxi do nguyên tử Oxi có độ âm điện lớn hơn nên kéo electron liên kết về phía mình.

Kết quả phân tích NBO cho thấy phân tử CO ở dạng liên kết ion chiếm 49,46% và ở dạng liên kết cộng hóa trị chiếm 50,54%. Như vậy, phân tử CO dường như có $\frac{1}{2}$ liên kết cộng hóa trị và $\frac{1}{2}$ liên kết ion.

3.3.3. Nước

Cấu trúc bền nhất của phân tử được mô tả

ở Hình 4.



Hình 4. Cấu trúc bền nhất của H_2O

Ở cấu trúc này, H_2O có cấu hình điện tử tự nhiên của oxi là $1s^2 2s^{1.79} 2p^{5.19}$, hidro là $1s^{0.5}$. Từ cấu hình electron trên, có thể thấy rằng sự hình thành liên kết trong phân tử H_2O là do sự xen phủ obitan 2p của nguyên tử oxi và obitan 1s của nguyên tử hidro. Oxi có bậc liên kết là 2, hidro có bậc liên kết là 1.

Trong phân tử H_2O , oxi có điện tích là -0,992, hidro có điện tích là +0,496. Do nguyên tử Oxi có độ âm điện lớn hơn nên oxi sẽ kéo electron liên kết về phía mình. Phân tích NBO của phân tử H_2O , dạng liên kết ion chiếm 49,63% là còn ở dạng liên kết cộng hóa trị là 50,37%. Nên phân tử H_2O dường như có $\frac{1}{2}$ liên kết cộng hóa trị và $\frac{1}{2}$ liên kết ion.

3.3.4. Lưu huỳnh đioxit

Cấu trúc bền nhất của phân tử được mô tả ở Hình 5



Hình 5. Cấu trúc bền nhất của SO_2

Ở cấu trúc này, cấu hình electron của lưu huỳnh là $1s^2 2s^2 2p^6 3s^{1.73} 3p^{2.93}$ và oxi là $1s^2 2s^{1.91} 2p^{4.72}$. Từ cấu hình electron trên, có thể thấy sự hình thành liên kết trong phân tử SO_2 là do sự xen phủ obitan 3s và obitan 3p của nguyên tử lưu huỳnh và obitan 2p của nguyên tử oxi. Lưu huỳnh khi liên kết với oxi thứ nhất sẽ có bậc liên kết là 1,43 và bậc liên kết với oxi thứ hai cũng là 1,43.

Trong phân tử SO_2 , điện tích của lưu huỳnh là +1,28 còn oxi là -0,64. Như vậy, khi dịch chuyển các electron sẽ dịch chuyển từ

nguyên tử lưu huỳnh sang phía nguyên tử oxi do nguyên tử oxi có độ âm điện lớn hơn. Bên cạnh đó, kết quả phân tích NBO cho thấy phân tử SO_2 ở dạng liên kết ion chiếm 34,41% là còn ở dạng liên kết cộng hóa trị là 65,59%. Do đó, phân tử SO_2 chủ yếu là liên kết cộng hóa trị.

3.3.5. Nitơ đioxit

Cấu trúc bền nhất của phân tử được biểu diễn trong Hình 6.



Hình 6. Cấu trúc bền nhất của NO_2

Ở cấu trúc này, cấu hình electron của nitơ là $1s^2 2s^{1.33} 2p^{3.19}$ và oxi là $1s^2 2s^{1.81} 2p^{4.39}$. Từ cấu hình electron trên cho thấy sự hình thành liên kết trong phân tử NO_2 là do sự xen phủ orbital 2s và orbital 2p của nguyên tử nitơ với orbital 2p của nguyên tử oxi. Bậc của hai liên kết N-O bằng nhau và xấp xỉ với 1 (~0,99).

Trong phân tử NO_2 , nitơ có điện tích là +0,436, oxi có điện tích là -0,218 do nguyên tử oxi có độ âm điện lớn hơn nitơ. Mặt khác, kết quả phân tích NBO cho thấy phân tử NO_2 ở dạng liên kết ion chiếm 27,74% là còn ở dạng liên kết cộng hóa trị là 72,26%. Như vậy, liên

kết trong phân tử NO_2 chủ yếu là liên kết cộng hóa trị.

4. KẾT LUẬN

Sau khi nghiên cứu cấu trúc và liên kết hóa học trong các hợp chất vô cơ bằng phương pháp hóa học tính toán, chúng tôi thu được một số kết quả như sau:

- Xác định được phương pháp tối ưu để tính toán cho hệ các chất vô cơ CO_2 , CO , NO_2 , SO_2 , H_2O là phương pháp B3LYP với bộ hàm cơ sở 3-21G.

- Đã tìm ra 5 cấu trúc bền nhất của các chất vô cơ CO_2 , CO , H_2O , SO_2 , NO_2 . Cụ thể, CO_2 có cấu trúc bền nhất là dạng thẳng chứa hai liên kết đôi, CO có cấu trúc bền nhất ở dạng thẳng, H_2O cấu trúc bền nhất có dạng góc với góc liên kết $\angle \text{HOH} = 103,9^\circ$, cấu trúc bền nhất của SO_2 có dạng góc với góc liên kết là $\angle \text{OSO} = 117,9^\circ$, cấu trúc bền nhất của NO_2 có dạng góc với góc liên kết $\angle \text{ONO} = 133,7^\circ$. Các cấu trúc bền nhất đều tồn tại ở trạng thái spin thấp là singlet.

- Phân tích bản chất liên kết hóa học của các chất vô cơ CO_2 , CO , H_2O , SO_2 , NO_2 cho thấy, trong các phân tử CO_2 , CO , H_2O có chứa $\frac{1}{2}$ liên kết ion và $\frac{1}{2}$ liên kết cộng hóa trị còn trong phân tử SO_2 , NO_2 thì phân tử chủ yếu mang bản chất là liên kết cộng hóa trị.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] Nguyễn Đức Minh, et al (2017), “Cấu trúc và tính chất của cluster gecmani pha tạp crom ở dạng cation và anion $\text{Ge}_n\text{Cr}^{z+}$ ($n=6-10$)”, Tạp chí Khoa học Đại học Huế: Khoa học tự nhiên, 126(1D), 113 - 124.
- [2] Jaiswal, S., and Vijay Kumar. (2016), “Growth behavior and electronic structure of neutral and anion ZrGe_n ($n=1-21$) clusters”, *Comput. Theor. Chem.*, 1075, 87-97.
- [3] Shi, Shun-Ping, et al. (2017), “Density functional theory study of the geometrical and electronic structures of $\text{Ge}_n\text{V}^{(0,z+1)}$ ($n=1-9$) clusters”, *Int. J. Mod. Phys. B*, 31(5), 1750022
- [4] Lâm Ngọc Thiềm (2007), Nhập môn hóa học lượng tử, Nhà xuất bản Đại học quốc gia Hà Nội.
- [5] Nguyễn Đình Huệ, Nguyễn Đức Chuy (2003), Thuyết lượng tử về nguyên tử và phân tử (Tái bản lần thứ nhất), Tập (1, 2), Nhà xuất bản Giáo dục.
- [6] Hoàng Nhâm (2006), Hóa học vô cơ (Tái bản lần thứ 7), tập (2), Nhà xuất bản Giáo dục.
- [7] Nguyễn Đức Vận (2006), Hóa học vô cơ, tập

- (1), Nhà xuất bản khoa học và kỹ thuật Hà Nội
- [8] Chattaraj. P. K. (2009), *Chemical Reactivity Theory: A Density Functional View*, Taylor & Francis Group, USA.
- [9] Paier, J.; Marsman, M.; Kresse, G. (2007), *Why does the B3LYP hybrid functional fail for metals?*, *J. Chem. Phys.*, 127, 024103.
- [10] Kohn W, Sham L, J, (1965), “*Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects*”, *Phys. Rev*, 140, pp, 1133-1138.
- [11] Levine I, N, (2000), *Quantum Chemistry (Fifth Edition)*, Prentice-Hall, Inc, New Jersey, USA.
- [12] Koch W, Holthausen M, C, (2001), *A Chemist's Guide to Density Functional Theory (Second Edition)*, Wiley-VCH, Germany.
- [13] J. Frisch et al. (2008), Gaussian 03 (Revision E.01), Gaussian, Inc., Wall.
- [14] E. D. Glendening, et al. (2004), *NBO 5.G*, Theoretical Chemistry Institute, University of Wisconsin, Madison, WI.

Liên hệ:**ThS. Nguyễn Đức Minh**

Khoa Khoa học cơ bản, Trường Đại học Quảng Bình

Địa chỉ: 312 Lý Thường Kiệt, Đồng Hới, Quảng Bình

Email: nguyenducminh1070@gmail.com

Ngày nhận bài:

Ngày gửi phản biện:

Ngày duyệt đăng: