

LIÊN KẾT HÓA HỌC**(TÀI LIỆU BÀI GIẢNG)****Giáo viên: VŨ KHẮC NGỌC**

Đây là tài liệu tóm lược các kiến thức đi kèm với bài giảng “Liên kết hóa học (Phần 1)” thuộc Khóa học LTĐH KIT-1: Môn Hóa học (Thầy Vũ Khắc Ngọc) tại website Hocmai.vn. Để có thể nắm vững kiến thức phần “Liên kết hóa học”, Bạn cần kết hợp xem tài liệu cùng với bài giảng này.

I. VÌ SAO CÁC NGUYÊN TỬ LẠI LIÊN KẾT VỚI NHAU ? Người ta biết rằng trong tự nhiên các nguyên tử khí hiếm đều tồn tại ở trạng thái tự do còn nguyên tử của các nguyên tố khác như hydro, clo v.v... lại liên kết với nhau tạo thành phân tử. Sở dĩ như vậy vì các nguyên tử khí hiếm có lớp electron ngoài cùng bền vững (2 electron đối với heli, 8 electron đối với các khí hiếm khác). Nguyên tử hydro chỉ có 1 electron lớp ngoài cùng, cấu trúc này không bền bằng cấu trúc electron của heli là khí hiếm gần nó nhất. Nguyên tử clo có 7 electron ngoài cùng, không bền bằng cấu trúc electron của khí hiếm neon gần nó nhất. Vì vậy các nguyên tử liên kết với nhau để đạt tới cấu trúc electron của khí hiếm bền hơn cấu trúc electron của từng nguyên tử đứng riêng rẽ.

II. CÁC LOẠI LIÊN KẾT**1. Liên kết cộng hoá trị****a. Đặc điểm.**

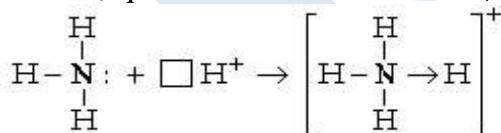
Liên kết cộng hoá trị được tạo thành do các nguyên tử có độ âm điện bằng nhau hoặc khác nhau không nhiều góp chung với nhau các e hoá trị tạo thành các cặp e liên kết chuyển động trong cùng 1 obitan (xung quanh cả 2 hạt nhân) gọi là obitan phân tử. Dựa vào vị trí của các cặp e liên kết trong phân tử, người ta chia thành : Liên kết cộng hoá trị không cực.

- Tạo thành từ 2 nguyên tử của cùng một nguyên tố. Ví dụ : $\text{H} : \text{H}$, $\text{Cl} : \text{Cl}$.
- Cặp e liên kết không bị lệch về phía nguyên tử nào.
- Hoá trị của các nguyên tố được tính bằng số cặp e dùng chung. Liên kết cộng hoá trị có cực.
- Tạo thành từ các nguyên tử có độ âm điện khác nhau không nhiều. Ví dụ : $\text{H} : \text{Cl}$.
- Cặp e liên kết bị lệch về phía nguyên tử có độ âm điện lớn hơn.
- Hoá trị của các nguyên tố trong liên kết cộng hoá trị có cực được tính bằng số cặp e dùng chung. Nguyên tố có độ âm điện lớn có hoá trị âm, nguyên tố kia hoá trị dương. Ví dụ, trong HCl , clo hoá trị 1-, hydro hoá trị 1+.

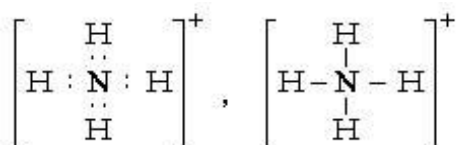
b. Liên kết cho - nhận (còn gọi là liên kết phối trí).

Đó là loại liên kết cộng hoá trị mà cặp e dùng chung chỉ do 1 nguyên tố cung cấp và được gọi là nguyên tố choe. Nguyên tố kia có obitan trống (obitan không có e) được gọi là nguyên tố nhận e. Liên kết cho - nhận được ký hiệu bằng mũi tên (\rightarrow) có chiều từ chất cho sang chất nhận.

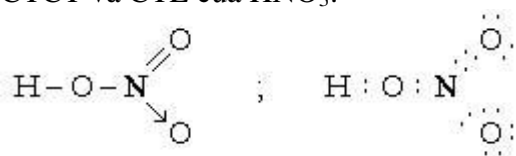
Ví dụ quá trình hình thành ion NH_4^+ (từ NH_3 và H^+) có bản chất liên kết cho - nhận.



Sau khi liên kết cho - nhận hình thành thì 4 liên kết N - H hoàn toàn như nhau. Do đó, ta có thể viết CTCT và CTE của NH_4^+ như sau:



CTCT và CTE của HNO_3 :



Điều kiện để tạo thành liên kết cho - nhận giữa 2 nguyên tố A B là: nguyên tố A có đủ 8e lớp ngoài, trong đó có cặp e tự do(chưa tham gia liên kết) và nguyên tố B phải có obitan trống.

c. Liên kết σ và liên kết π .

Về bản chất chúng là những liên kết cộng hoá trị.

a) Liên kết σ .

Được hình thành do sự xen phủ 2 obitan (của 2e tham gia liên kết) dọc theo trục liên kết. Tùy theo loại obitan tham gia liên kết là obitan s hay p ta có các loại liên kết σ kiểu s-s, s-p, p-p: Obitan liên kết σ có tính đối xứng trục, với trục đối xứng là trục nối hai hạt nhân nguyên tử.

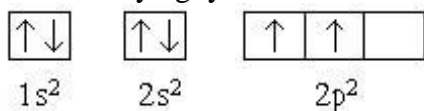
Nếu giữa 2 nguyên tử chỉ hình thành một mối liên kết đơn thì đó là liên kết σ . Khi đó, do tính đối xứng của obitan liên kết σ , hai nguyên tử có thể quay quanh trục liên kết.

b) Liên kết π .

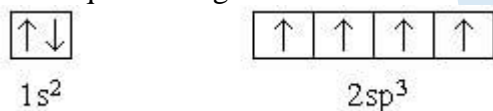
Được hình thành do sự xen phủ giữa các obitan p ở hai bên trục liên kết. Khi giữa 2 nguyên tử hình thành liên kết bội thì có 1 liên kết σ , còn lại là liên kết π . Ví dụ trong liên kết 3 sẽ gồm 1 liên kết σ (bền nhất) và 2 liên kết π (kém bền hơn). Liên kết π không có tính đối xứng trục nên 2 nguyên tử tham gia liên kết không có khả năng quay tự do quanh trục liên kết. Đó là nguyên nhân gây ra hiện tượng đồng phân cis-trans của các hợp chất hữu cơ có nối đôi.

d. Sự lai hoá các obitan.

- Khi giải thích khả năng hình thành nhiều loại hoá trị của một nguyên tố (như của Fe, Cl, C...) ta không thể căn cứ vào số e độc thân hoặc số e lớp ngoài cùng mà phải dùng khái niệm mới gọi là "sự lai hoá obitan". Lấy nguyên tử C làm ví dụ: Cấu hình e của C ($Z = 6$).



Nếu dựa vào số e độc thân: C có hoá trị II. Trong thực tế, C có hoá trị IV trong các hợp chất hữu cơ. Điều này được giải thích là do sự "lai hoá" obitan 2s với 3 obitan 2p tạo thành 4 obitan q mới (obitan lai hoá) có năng lượng đồng nhất. Khi đó 4e (2e của obitan 2s và 2e của obitan 2p) chuyển động trên 4 obitan lai hoá q và tham gia liên kết làm cho cacbon có hoá trị IV. Sau khi lai hoá, cấu hình e của C có dạng:



Các kiểu lai hoá thường gặp.

a) Lai hoá sp^3 .

Đó là kiểu lai hoá giữa 1 obitan s với 3 obitan p tạo thành 4 obitan lai hoá q định hướng từ tâm đến 4 đỉnh của tứ diện đều, các trục đối xứng của chúng tạo với nhau những góc bằng $109^\circ 28'$. Kiểu lai hoá sp^3 được gặp trong các nguyên tử O, N, C nằm trong phân tử H_2O , NH_3 , NH_4^+ , CH_4 ,...

b) Lai hoá sp^2 .

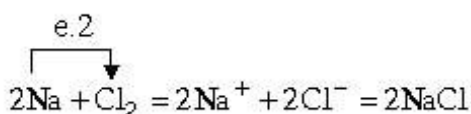
Đó là kiểu lai hoá giữa 1 obitan s và 2 obitan p tạo thành 3 obitan lai hoá q định hướng từ tâm đến 3 đỉnh của tam giác đều. Lai hoá sp^2 được gặp trong các phân tử BCl_3 , C_2H_4 ,...

c) Lai hoá sp.

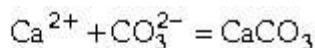
Đó là kiểu lai hoá giữa 1 obitan s và 1 obitan p tạo ra 2 obitan lai hoá q định hướng thẳng hàng với nhau. Lai hoá sp được gặp trong các phân tử BCl_2 , C_2H_2 ,...

2. Liên kết ion

Liên kết ion được hình thành giữa các nguyên tử có độ âm điện khác nhau nhiều ($\Delta\chi \geq 1,7$). Khi đó nguyên tố có độ âm điện lớn (các phi kim điển hình) thu e của nguyên tử có độ âm điện nhỏ (các kim loại điển hình) tạo thành các ion ngược dấu. Các ion này hút nhau bằng lực hút tĩnh điện tạo thành phân tử. Ví dụ:



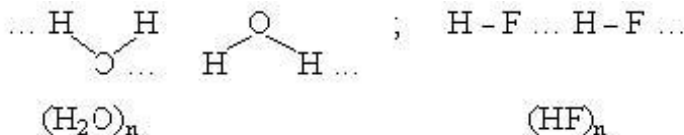
Liên kết ion có đặc điểm: Không bão hoà, không định hướng, do đó hợp chất ion tạo thành những mạng lưới ion. Liên kết ion còn tạo thành trong phản ứng trao đổi ion. Ví dụ, khi trộn dung dịch $CaCl_2$ với dung dịch Na_2CO_3 tạo ra kết tủa $CaCO_3$:



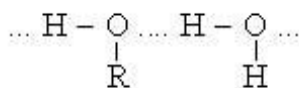
Như vậy, liên kết giữa Ca^{2+} và CO_3^{2-} thuộc loại liên kết ion.

3. Liên kết hidro

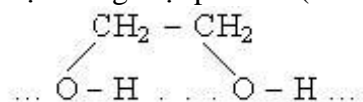
Liên kết hidro là mỗi liên kết phụ (hay mỗi liên kết thứ 2) của nguyên tử H với nguyên tử có độ âm điện lớn (như F, O, N...). Tức là nguyên tử hidro linh động bị hút bởi cặp e chưa liên kết của nguyên tử có độ âm điện lớn hơn. Liên kết hidro được ký hiệu bằng 3 dấu chấm (...) và không tính hoá trị cũng như số oxi hoá. Liên kết hidro được hình thành giữa các phân tử cùng loại. Ví dụ: Giữa các phân tử H_2O , HF, rượu, axit...



hoặc giữa các phân tử khác loại. Ví dụ: Giữa các phân tử rượu hay axit với H_2O :



hoặc trong một phân tử (liên kết hidro nội phân tử). Ví dụ :



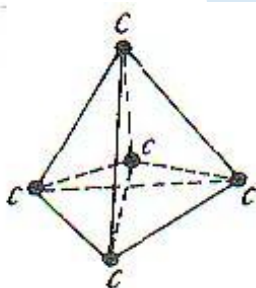
Do có liên kết hidro tạo thành trong dung dịch nên:

- + Tính axit của HF giảm đi nhiều (so với HBr, HCl).
- + Nhiệt độ sôi và độ tan trong nước của rượu và axit hữu cơ tăng lên rõ rệt so với các hợp chất có KLPT tương đương.

III. CÁC LOẠI TINH THỂ

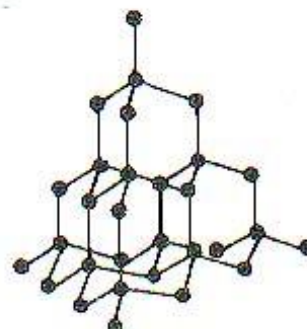
1. Tinh thể nguyên tử

Ta lấy tinh thể kim cương làm ví dụ : Nguyên tử cacbon có electron ngoài cùng. Trong tinh thể kim cương, mỗi nguyên tử cacbon liên kết với 4 nguyên tử cacbon lân cận gần nhất bằng 4 cặp electron chung. Các nguyên tử cacbon này nằm trên 4 đỉnh của một tứ diện đều. Mỗi nguyên tử cacbon ở đỉnh lại liên kết với 4 nguyên tử cacbon khác.



1 Nguyên tử C ở tâm và 4 nguyên tử C khác ở 4 đỉnh của hình tứ diện đều

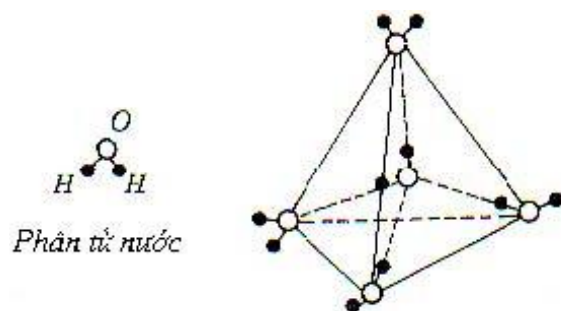
Lực liên kết cộng hoá trị rất lớn, vì vậy các tinh thể nguyên tử đều bền vững, khá cứng, khó nóng chảy, khó bay hơi. Kim cương, thạch anh... là những tinh thể nguyên tử. Kim cương cứng nhất trong các chất.



Mạng tinh thể kim cương (mỗi nguyên tử cacbon có 4 nguyên tử lân cận gần nhất)

2. Tinh thể phân tử

Ta lấy tinh thể nước đá làm ví dụ : Trong tinh thể nước đá, mỗi phân tử nước có 4 phân tử nước lân cận gần nhất nằm trên 4 đỉnh của một tứ diện đều. Mỗi phân tử nước ở đỉnh lại có 4 phân tử lân cận nằm ở 4 đỉnh của một tứ diện đều khác và cứ tiếp tục như vậy.



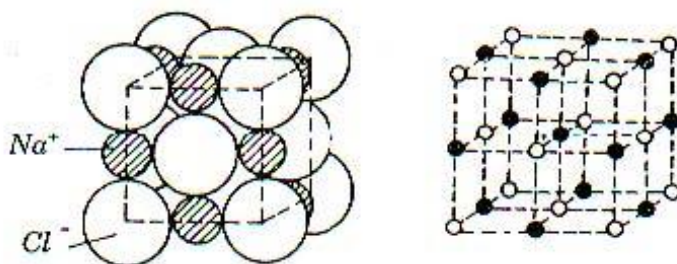
Tinh thể nước đá. Trong tinh thể nước đá, mỗi phân tử nước là 1 đơn vị cấu trúc

Trong tinh thể nước đá, các phân tử liên kết với nhau bằng liên kết giữa các phân tử. Vì lực hút giữa các phân tử yếu hơn nhiều so với lực liên kết cộng hoá trị và lực hút tĩnh điện giữa các ion nên nước đá dễ nóng chảy, dễ bay hơi. Ở 0°C nước đá đã bị phân huỷ một phần. Các phân tử nước dịch chuyển lại gần nhau làm cho tỉ khối của nước (lỏng) lớn hơn nước đá, vì vậy nước đá nổi lên mặt nước lỏng. Đây là đặc điểm cấu tạo tinh thể nước đá.

Các tinh thể naphthalen (băng phiến), iot, tuyết cacbonic CO_2 v.v... là những tinh thể phân tử, chúng cũng dễ nóng chảy, bay hơi. Ngay ở nhiệt độ thường, một phần tinh thể naphthalen và iot đã bị phân huỷ. Các phân tử tách rời khỏi mạng tinh thể và khuếch tán vào không khí làm cho ta dễ nhận ra mùi của chúng. Trong tinh thể phân tử, các phân tử vẫn tồn tại như những đơn vị độc lập.

3. Tinh thể ion

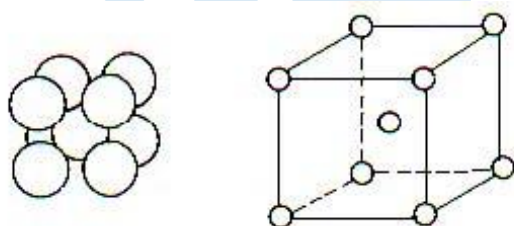
Ta lấy tinh thể NaCl làm ví dụ



Tinh thể natri clorua NaCl Trong tinh thể NaCl , các ion Na^+ và Cl^- được phân bố luân phiên đều đặn trên các đỉnh của một hình lập phương. Xung quanh mỗi ion đều có 6 ion ngược dấu gần nhất. Vì lực hút tĩnh điện giữa các ion ngược dấu lớn nên tinh thể ion rất bền vững. Các hợp chất ion đều khá rắn, khó bay hơi, khó nóng chảy. Ví dụ nhiệt độ nóng chảy của muối ăn NaCl là 800°C . Dung dịch các hợp chất ion hoá tan trong nước và các hợp chất ion nóng chảy đều dẫn điện vì các ion (là những phần tử mang điện) khi đó có thể chuyển động tự do.

4. Tinh thể kim loại

Trong số 109 nguyên tố đã biết thì có hơn 80 nguyên tố là kim loại.



Tinh thể sắt. Mỗi nguyên tử ở tâm (lập phương) có 8 nguyên tử lân cận gần nhất ở 8 đỉnh của hình lập phương Trừ thủy ngân, tất cả các kim loại đều là chất rắn ở nhiệt độ thường và đều có cấu tạo tinh thể như hình trên. Liên kết giữa các nguyên tử kim loại trong tinh thể là liên kết kim loại (sẽ học trong chương trình hoá học lớp 12). Những tính chất đặc trưng của kim loại như tính dẫn điện, dẫn nhiệt, dễ dát mỏng, kéo dài v.v... là do liên kết kim loại quyết định. Liên kết kim loại khá vững chắc nên các kim loại đều khó nóng chảy, khó bay hơi.

Giáo viên: Vũ Khắc Ngọc

Nguồn: [Hocmai.vn](https://hocmai.vn)