

LIÊN KẾT HÓA HỌC & LỰC TƯƠNG TÁC

Liên kết ion
Liên kết cộng hóa trị (theo VB)
Sự phân cực liên kết
Lực Van der Waals & hydrogen

1

Liên kết ion – điều kiện hình thành

- Nguyên tố có năng lượng ion hóa nhỏ \rightarrow cation
- Nguyên tố có ái lực điện tử lớn \rightarrow anion

Kim loại (điển hình) + Phi kim (điển hình) \rightarrow liên kết ion

■ Table 7-2 Simple Binary Ionic Compounds

Metal		Nonmetal		General Formula	Ions Present	Example	mp (°C)
1A*	+	7A	\rightarrow	MX	(M ⁺ , X ⁻)	LiBr	547
2A	+	7A	\rightarrow	MX ₂	(M ²⁺ , 2X ⁻)	MgCl ₂	708
3A	+	7A	\rightarrow	MX ₃	(M ³⁺ , 3X ⁻)	GaF ₃	800 (subl)
1A*	+	6A	\rightarrow	M ₂ X	(2M ⁺ , X ²⁻)	Li ₂ O	>1700
2A	+	6A	\rightarrow	MX	(M ²⁺ , X ²⁻)	CaO	2580
2A	+	6A	\rightarrow	M ₂ X ₃	(2M ³⁺ , 3X ²⁻)	Al ₂ O ₃	2045
1A*	+	5A	\rightarrow	M ₃ X	(3M ⁺ , X ³⁻)	Li ₃ N	840
2A	+	5A	\rightarrow	M ₃ X ₂	(3M ²⁺ , 2X ³⁻)	Ca ₃ P ₂	1600
3A	+	5A	\rightarrow	MX	(M ³⁺ , X ³⁻)	AlP	

2

Một vài ion đa nguyên tử thông dụng

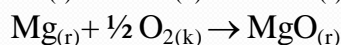
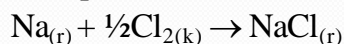
- Common Polyatomic Ions - Click on the table for a more complete list			
ion	name	ion	name
NH ₄ ⁺	ammonium	CO ₃ ²⁻	carbonate
NO ₂ ⁻	nitrite	HCO ₃ ⁻	hydrogen carbonate†
NO ₃ ⁻	nitrate	ClO ⁻	hypochlorite
SO ₃ ²⁻	sulfite	ClO ₂ ⁻	chlorite
SO ₄ ²⁻	sulfate	ClO ₃ ⁻	chlorate
HSO ₄ ⁻	hydrogen sulfate*	ClO ₄ ⁻	perchlorate
OH ⁻	hydroxide	C ₂ H ₃ O ₂ ⁻	acetate
CN ⁻	cyanide	MnO ₄ ⁻	permanganate
PO ₄ ³⁻	phosphate	Cr ₂ O ₇ ²⁻	dichromate
HPO ₄ ²⁻	hydrogen phosphate	CrO ₄ ²⁻	chromate
H ₂ PO ₄ ⁻	dihydrogen phosphate	O ₂ ²⁻	peroxide

*Bisulfate and †bicarbonate are widely used common names for hydrogen sulfate and hydrogen carbonate, respectively.

3

Liên kết ion – độ bền

- Nhiệt hình thành hợp chất ion** (ΔH_f^0): năng lượng ứng với quá trình hình thành 1 mol hợp chất ion từ các đơn chất bền



Độ bền của hợp chất ion so với đơn chất

- Năng lượng mạng tinh thể ion** (U): năng lượng cần thiết để phá vỡ 1 mol hợp chất ion thành các ion riêng rẽ ở thể khí



Độ mạnh của liên kết ion ở trạng thái rắn so với các ion cô lập ở thể khí

4

Liên kết ion – Năng lượng mạng

$$U = -\frac{AN_0 q^+ q^- e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \left(1 - \frac{1}{n}\right) = -k \frac{q^+ q^-}{r_0}$$

- A: hằng số Madelung, phụ thuộc vào cấu trúc mạng tinh thể
- N_0 : số Avogadro
- q^+ , q^- : điện tích của ion
- e: điện tích nguyên tố
- $r_0 = r_+ + r_-$
- n: hằng số đặc trưng cho cấu hình electron

5

	Increase in charge →					
Increase in size ↓	Compound	ΔH_{le} /kJmol ⁻¹	Compound	ΔH_{le} /kJmol ⁻¹	Compound	ΔH_{le} /kJmol ⁻¹
	Li ₂ O	-2806	MgO	-3800	Al ₂ O ₃	-15916
	Na ₂ O	-2488	CaO	-3419		
	K ₂ O	-2245	SrO	-3222		
	LiF	-1047	MgF ₂	-2961		
	NaF	-928	CaF ₂	-2634		
	KF	-826				

6

Bài tập

1. Viết công thức hợp chất ion hình thành giữa:
 - a. Ca và Br_2
 - b. Sr và S
 - c. Na và Se
2. Hợp chất ion nào bền vững trong số các hợp chất sau: $\text{Al}(\text{OH})_3$, BaCl_2 , CsS , LiSe_2
3. Xác định điện tích và cấu hình electron của các ion trong các hợp chất bậc hai sau: K_2O , Ca_3P_2 , Bi_2O_3

7

Liên kết cộng hóa trị - Lý thuyết VB (valence bond – liên kết hóa trị)

Sự hình thành liên kết:

- Các orbital của 2 nguyên tử che phủ nhau (xen phủ)
 - Số electron tối đa trong 2 orbital xen phủ: 2 electron có spin trái dấu
 - Mật độ hiện diện electron gia tăng trên đường nối liên nhân
- ⇒ *lực hút tĩnh điện giữa hai hạt nhân với đám mây electron*

8

• Liên kết cộng hóa trị thực hiện giữa:

- Phi kim – phi kim
- Kim loại (số oxi hóa > 3) – phi kim

9

Liên kết cộng hóa trị - Lý thuyết VB (valence bond – liên kết hóa trị)

• Liên kết cộng hóa trị bền

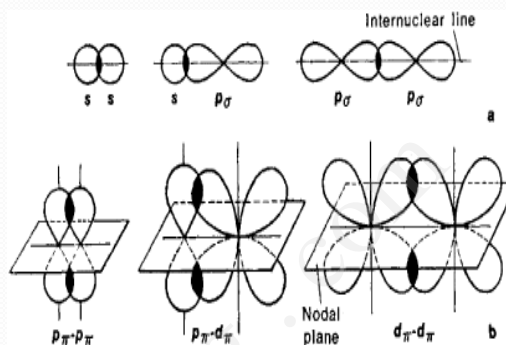
- Các orbital có mức năng lượng tương đương nhau (orbital hóa trị)
- Orbital định hướng để diện tích che phủ cực đại (nguyên lý xen phủ cực đại) \Rightarrow **tính định hướng của liên kết cộng hóa trị**
- **Mật độ electron ở vùng giữa 2 hạt nhân lớn**

10

- **Liên kết sigma (σ):** mật độ electron gia tăng trên đường nối liên nhân (xen phủ trục)

- **Liên kết pi (π):** mật độ electron gia tăng ở 2 phía của mặt phẳng liên nhân (xen phủ bên)

⇒ **Liên kết σ có độ bền lớn hơn liên kết π**



11

Bài tập

- Giải thích sự hình thành liên kết trong phân tử

a. HF

b. Br_2

12

Lý thuyết VB (valence bond – liên kết hóa trị)

- Hóa trị của các nguyên tố phụ thuộc số electron hóa trị & số orbital hóa trị
 - Chu kỳ 1: 1 orbital hóa trị → tối đa 1 liên kết cộng hóa trị
 - Chu kỳ 2: 4 orbital hóa trị → tối đa 4 liên kết cộng hóa trị
 - Chu kỳ 3, 4, 5: 9 orbital hóa trị → > 4 liên kết cộng hóa trị
- ⇒ *Liên kết cộng hóa trị có tính bão hòa*

13

Thuyết VSEPR (valence shell electron pair repulsion) & thuyết lai hóa orbital

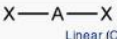

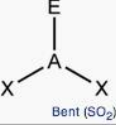

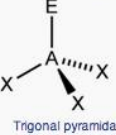
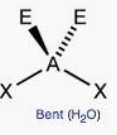


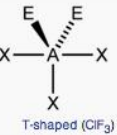




- *Dự đoán góc liên kết, dạng hình học của phân tử hay ion đa nguyên tử.*

14

Các dạng lai hóa thường gặp của nguyên tử trung tâm (NTTT)

Trạng thái lai hóa của NTTT	Dạng hình học của phân tử
sp	Thẳng hàng (linear)
sp^2	Tam giác phẳng (trigonal planar)
sp^3	Tứ diện (tetrahedral)
$sp^3 d$ (dsp^3)	Lưỡng tháp tam giác (trigonal bipyramidal)
$sp^3 d^2$ (d^2sp^3)	Bát diện (octahedral)

15

Steric No.	Basic geometry 0 lone pair	1 lone pair	2 lone pairs	3 lone pairs
2	 Linear (CO_2)			
3	 Trigonal planar (BCl_3)	 Bent (SO_2)		
4	 Tetrahedral (CH_4)	 Trigonal pyramidal (NH_3)	 Bent (H_2O)	
5	 Trigonal bipyramidal (PCl_5)	 Seesaw (SF_4)	 T-shaped (ClF_3)	 Linear (I_3^-)
6	 Octahedral (SF_6)	 Square pyramidal (BrF_5)	 Square planar (XeF_4)	

16

<https://www.boundless.com/chemistry/advanced-concepts-of-chemical-bonding/molecular-geometry/linear-geometry/>

Dự đoán dạng hình học của phân tử (ion đa nguyên tử)

1. Vẽ công thức Lewis
2. Xác định số vùng điện tử quanh NTĐT \Rightarrow trạng thái lai hóa của NTĐT (tổng số vùng điện tử = số orbital lai hóa)
3. Sự sắp xếp của các vùng điện tử liên kết & không liên kết \Rightarrow dạng hình học theo thuyết VSEPR

17

Bài tập

1. Xác định trạng thái lai hóa của nguyên tử trung tâm, dạng hình học của phân tử (ion).

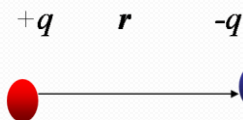
a. HCN	b. ICl_2^-	c. NO_3^-	d. SF_4
e. NOCl	f. NO_2^+	g. H_2O	h. SO_2
2. Xác định trạng thái lai hóa của nguyên tử C trong các trường hợp:

a. HCHO	b. CH_3COOH	c. $\text{CH}_3\text{COC}_2\text{H}_5$
---------	-----------------------------	--

18

Hình học phân tử & Moment lưỡng cực phân tử

- **Độ phân cực của liên kết:** sự lệch của đám mây điện tử liên kết về nguyên tố có độ âm điện lớn hơn \Rightarrow **moment lưỡng cực** (μ) liên kết
- **Moment lưỡng cực phân tử:** moment lưỡng cực liên kết & hình dạng phân tử
 - Moment lưỡng cực phân tử = 0 \Rightarrow phân tử không phân cực
 - Moment lưỡng cực phân tử $\neq 0$ \Rightarrow phân tử phân cực



$$\mu = q \cdot r$$

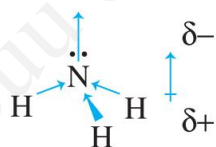
q : điện tích (C)

r : khoảng cách (m)

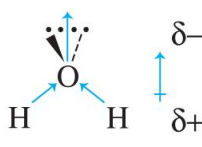
μ : C.m hay D (debye)

19

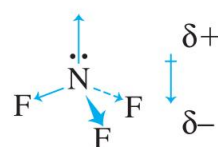
Hình học phân tử & Moment lưỡng cực phân tử



Net dipole, 1.47 D

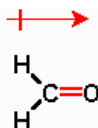


Net dipole, 1.85 D

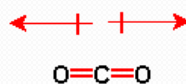


Net dipole, 0.23 D

© 2011 Pearson Education, Inc.



$\mu = 2.2 \text{ D}$



$\mu = 0 \text{ D}$

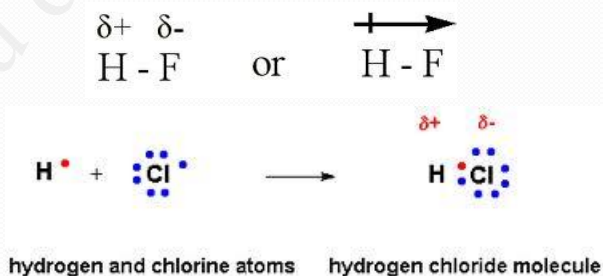
20

Bài tập

1. Các phân tử sau có moment lưỡng cực hay không?
 - a. CF_4
 - b. CO_2
 - c. H_2O
 - d. BF_3
2. Hợp chất nào có moment lưỡng cực lớn nhất? NH_3 , CO_2 , NF_3 , CH_4

21

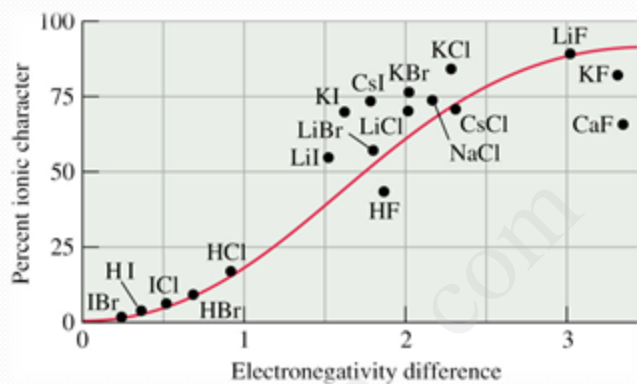
Mối liên hệ giữa liên kết hóa học & độ âm điện của nguyên tố



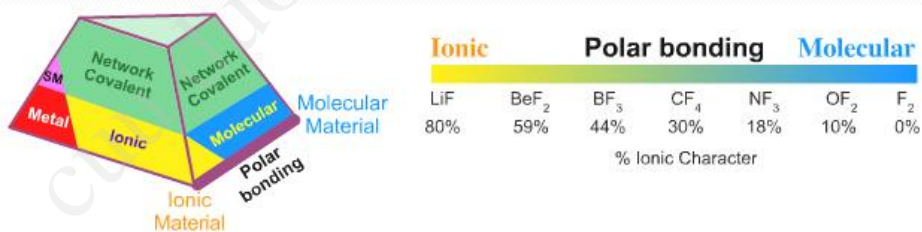
- Sự phân cực liên kết: Điện tử liên kết lệch về phía nguyên tử có độ âm điện lớn hơn → tích điện khác nhau trên các nguyên tử
- Gia tăng theo chiều tăng sự chênh lệch độ âm điện

22

- Hợp chất ion: chênh lệch độ âm điện lớn
- Hợp chất, phân tử cộng hóa trị: chênh lệch độ âm điện nhỏ



http://cwx.prenhall.com/petrucci/media_portfolio/text_images/FG11_07.jpg



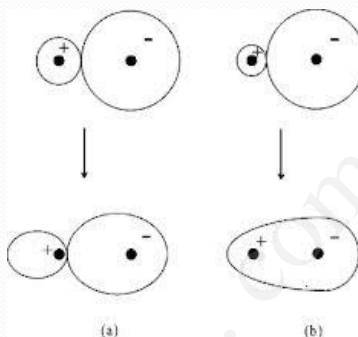
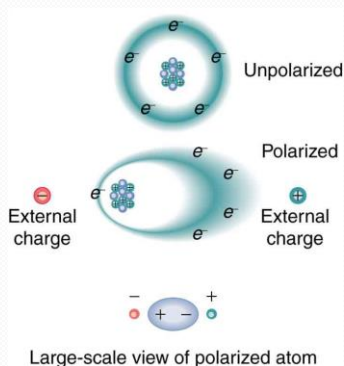
Liên kết ion

Liên kết cộng
hóa trị phân cực

Liên kết cộng
hóa trị

Chênh lệch độ âm điện tăng
Độ phân cực của liên kết tăng

Hiện tượng cực hóa ion



Sự cực hóa ion: sự biến dạng đám mây điện tử của ion

Sự cực hóa ion tăng \rightarrow tính cộng hóa trị của liên kết tăng

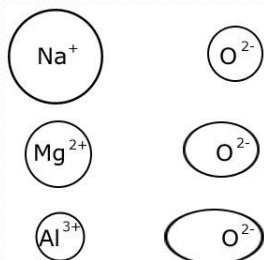
25

Hiện tượng cực hóa ion

- Cation: q^+ lớn, r^+ nhỏ \rightarrow hiện tượng cực hóa tăng
- Anion: q^- lớn, r^- lớn \rightarrow hiện tượng cực hóa tăng
- Cấu hình electron của ion: $d^{10} > d^{1-9} > d^0$ (khí trơ)

Liên kết có:

% tính cộng hóa trị tăng, % tính ion giảm



© scienceaid.co.uk

<http://scienceaid.co.uk/chemistry/fundamental/bonding.html>

26

Bài tập

1. Liên kết nào có đặc tính ion nhiều hơn? Giải thích?
 - a. Na – Cl và Mg – Cl
 - b. Ca – S và Fe – S
 - c. Al – Br và O – Br
2. Liên kết nào phân cực hơn? Giải thích?
 - a. C – O và C – N
 - b. P – S và P – N
 - c. B – H và B – I
3. So sánh đặc tính liên kết trong các trường hợp sau?
 - a. HCl, NaCl, MnCl_2
 - b. SnO và SnO_2

27

Lực Van der Waals

☐ Tương tác lưỡng cực – lưỡng cực

- ☐ Giữa những *phân tử cộng hóa trị phân cực* (có moment lưỡng cực $\neq 0$)
- ☐ Độ mạnh: tỉ lệ với moment lưỡng cực của phân tử

☐ Tương tác cảm ứng

☐ Tương tác khuếch tán (quan trọng)

- ☐ Tồn tại giữa mọi loại phân tử
- ☐ Độ mạnh: phụ thuộc kích thước phân tử - kích thước phân tử càng lớn, tương tác khuếch tán càng mạnh

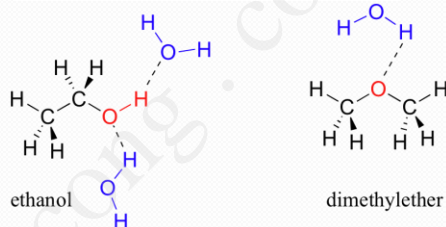
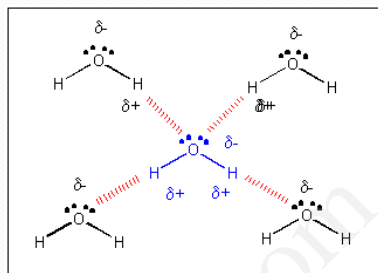
Khối lượng phân tử tương đương: tương tác lưỡng cực – lưỡng cực chiếm ưu thế hơn tương tác khuếch tán

28

Liên kết hydrogen

□ Liên kết hydrogen

- Dạng đặc biệt của tương tác lưỡng cực – lưỡng cực
- Giữa những phân tử cộng hóa trị phân cực có chứa H và một trong các nguyên tố có độ âm điện lớn, bán kính nhỏ (F, O, N)
- Độ mạnh: phụ thuộc vào nguyên tố có độ âm điện lớn



29

Bài tập

1. Hợp chất nào tồn tại liên kết hydrogen liên phân tử?
PH₃, CH₄, H₂S, HF, HCl, SiH₄, NH₃
2. Giải thích tại sao SiH₄ có nhiệt độ nóng chảy (- 185°C) và nhiệt độ sôi (- 112°C) thấp hơn PH₃ (nhiệt độ nóng chảy và sôi lần lượt là - 133°C và - 88°C) mặc dù cả hai hợp chất có khối lượng mol tương đương.
3. Dựa vào lực liên phân tử, sắp xếp nhiệt độ sôi tương ứng cho từng chất sau?
 - a. Ne, Ar, Kr (- 246°C, - 186°C, - 152°C)
 - b. H₂, HCl, Cl₂ (- 35°C, - 259°C, - 85°C)

30