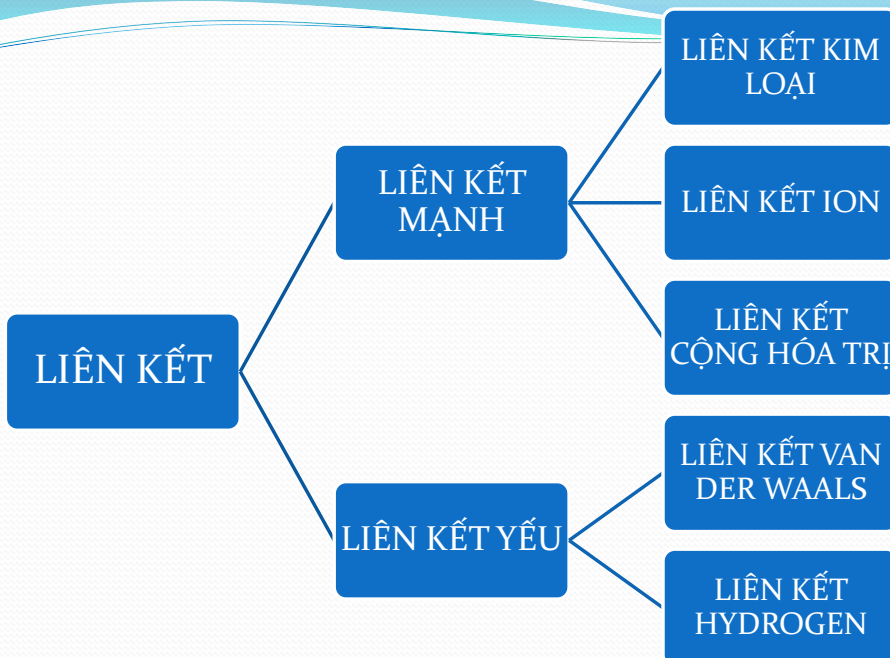


# LIÊN KẾT

1. Điều kiện hình thành liên kết và các yếu tố ảnh hưởng đến độ bền của liên kết
2. Sự không phân định ranh giới giữa các loại liên kết: Độ phân cực liên kết và hiện tượng cực hóa ion

1



2

# Liên kết ion – điều kiện hình thành

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

**Kim loại (điển hình) + Phi kim (điển hình) → liên kết ion**

■ Table 7-2 Simple Binary Ionic Compounds

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

3

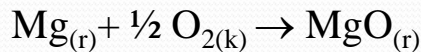
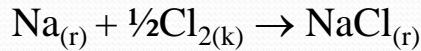
## Một vài ion đa nguyên tử thông dụng

- Common Polyatomic Ions - Click on the table for a more complete list			
ion	name	ion	name
NH <sub>4</sub> <sup>+</sup>	ammonium	CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup>	carbonate
NO <sub>2</sub> <sup>-</sup>	nitrite	HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	hydrogen carbonate†
NO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	nitrate	ClO <sup>-</sup>	hypochlorite
SO <sub>3</sub> <sup>2-</sup>	sulfite	ClO <sub>2</sub> <sup>-</sup>	chlorite
SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup>	sulfate	ClO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	chlorate
HSO <sub>4</sub> <sup>-</sup>	hydrogen sulfate*	ClO <sub>4</sub> <sup>-</sup>	perchlorate
OH <sup>-</sup>	hydroxide	C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> O <sub>2</sub> <sup>-</sup>	acetate
CN <sup>-</sup>	cyanide	MnO <sub>4</sub> <sup>-</sup>	permanganate
PO <sub>4</sub> <sup>3-</sup>	phosphate	Cr <sub>2</sub> O <sub>7</sub> <sup>2-</sup>	dichromate
HPO <sub>4</sub> <sup>2-</sup>	hydrogen phosphate	CrO <sub>4</sub> <sup>2-</sup>	chromate
H <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> <sup>-</sup>	dihydrogen phosphate	O <sub>2</sub> <sup>2-</sup>	peroxide
*Bisulfate and †bicarbonate are widely used common names for hydrogen sulfate and hydrogen carbonate, respectively.			

4

## Liên kết ion – độ bền

- **Nhiệt hình thành hợp chất ion** ( $\Delta H_f^0$ ): năng lượng ứng với quá trình hình thành 1mol 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 1mol 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*

5

## Liên kết ion – Năng lượng mạng

$$U = -\frac{AN_o q^+ q^- e^2}{4\pi\epsilon_o r_o} \left(1 - \frac{1}{n}\right) = -k \frac{q^+ q^-}{r_o}$$



**HỢP CHẤT  
ION CÀNG  
BỀN: |U|  
CÀNG LỚN**

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

6

**Increase in charge** →

	Compound	ΔH <sub>le</sub> /kJmol <sup>-1</sup>	Compound	ΔH <sub>le</sub> /kJmol <sup>-1</sup>	Compound	ΔH <sub>le</sub> /kJmol <sup>-1</sup>
<span style="color: red;">↑</span> Increase in size <span style="color: red;">↓</span>	Li <sub>2</sub> O	-2806	MgO	-3800	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	-15916
	Na <sub>2</sub> O	-2488	CaO	-3419		
	K <sub>2</sub> O	-2245	SrO	-3222		
	LiF	-1047	MgF <sub>2</sub>	-2961		
	NaF	-928	CaF <sub>2</sub>	-2634		
	KF	-826				

7

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)

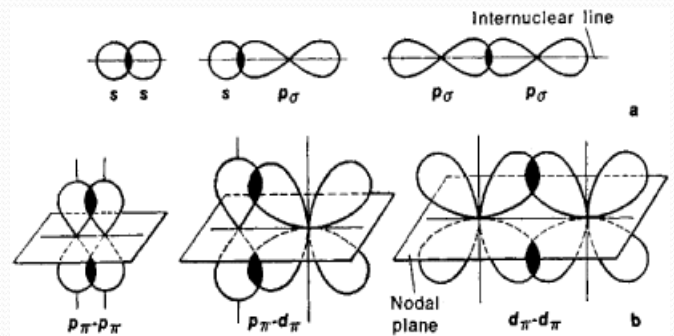
### □ Liên kết cộng hóa trị bền

- Các orbital xen phủ có mức năng lượng tương đương nhau (orbital hóa trị)
- Diện tích vùng orbital xen phủ lớn (nguyên lí xen phủ cực đại)
- **Mật độ electron ở vùng giữa 2 hạt nhân lớn**

10

□ **Liên kết sigma ( $\sigma$ ):** mật độ electron gia tăng trên đường nối liên nhân (xen phủ trực)

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



⇒ **Liên kết  $\sigma$  có độ bền lớn hơn liên kết  $\pi$**

11

## 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**

12

# 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.

13

## 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)
$sp^3d$ ( $dsp^3$ )	Lưỡng tháp tam giác (trigonal bipyramidal)
$sp^3d^2$ ( $d^2sp^3$ )	Bát diện (octahedral)

14

Steric No.	Basic geometry 0 lone pair	1 lone pair	2 lone pairs	3 lone pairs
2	 Linear ( $\text{CO}_2$ )			
3	 Trigonal planar ( $\text{BCl}_3$ )	 Bent ( $\text{SO}_2$ )		
4	 Tetrahedral ( $\text{CH}_4$ )	 Trigonal pyramidal ( $\text{NH}_3$ )	 Bent ( $\text{H}_2\text{O}$ )	
5	 Trigonal bipyramidal ( $\text{PCl}_5$ )	 Seesaw ( $\text{SF}_4$ )	 T-shaped ( $\text{ClF}_3$ )	 Linear ( $\text{I}_3^-$ )
6	 Octahedral ( $\text{SF}_6$ )	 Square pyramidal ( $\text{BrF}_5$ )	 Square planar ( $\text{XeF}_4$ )	

15

<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 Lewiss
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

16



## Bài tập

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

a. HCN	b. $\text{ICl}_2^-$	c. $\text{NO}_3^-$	d. $\text{SF}_4$
e. NOCl	f. $\text{NO}_2^+$	g. $\text{H}_2\text{O}$	h. $\text{SO}_2$

2. Xác định trạng thái lai hóa của nguyên tử C trong các trường hợp:

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

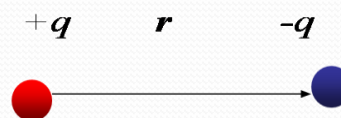
17

## 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** ( $\mu$ ) 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



$$\mu = q \cdot r$$

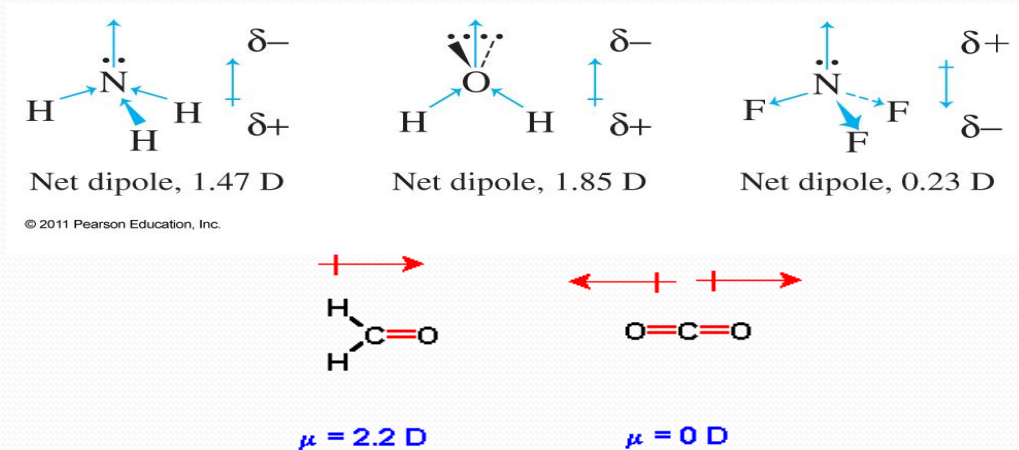
$q$ : điện tích (C)

$r$ : khoảng cách (m)

$\mu$ : C.m hay D (debye)

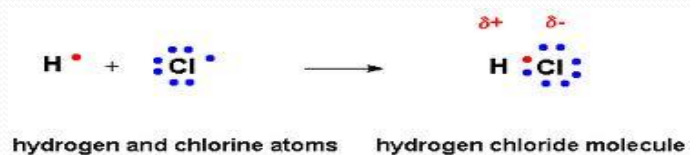
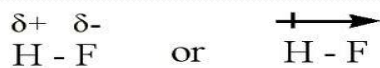
18

# Hình học phân tử & Moment lưỡng cực phân tử



19

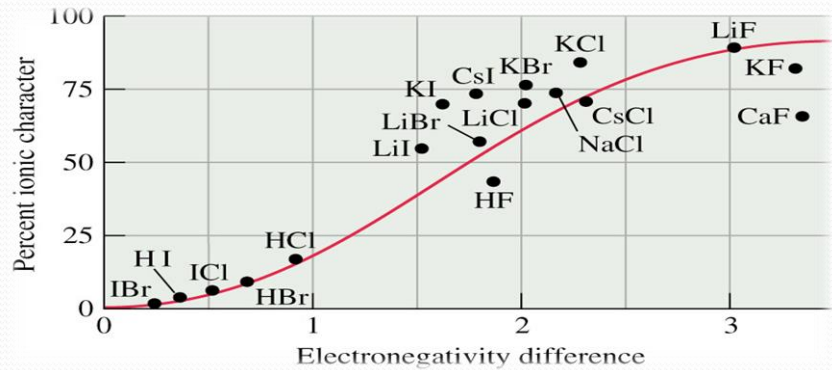
## Mối liên hệ giữa liên kết hóa học & độ âm điện của nguyên tố



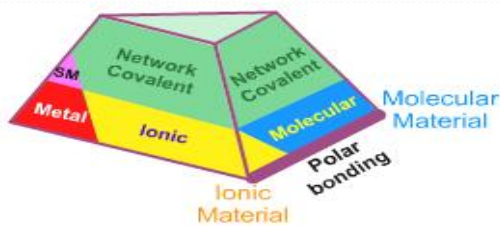
- **Độ phân cực của liên kết:** Điện tử liên kết lệch về phía nguyên tử có độ âm điện lớn hơn  $\rightarrow$  tích điện khác nhau trên các nguyên tử
- Độ phân cực của liên kết gia tăng theo chiều tăng sự chênh lệch độ âm điện

20

- 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/medialib/media\\_portfolio/text\\_images/FG11\\_07.JPG](http://cwx.prenhall.com/petrucci/medialib/media_portfolio/text_images/FG11_07.JPG)



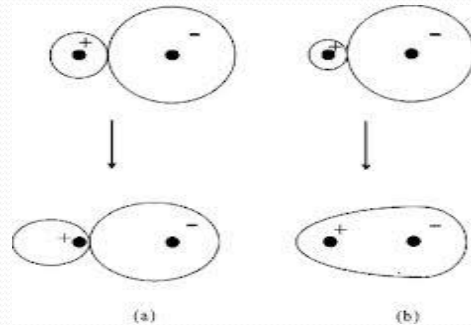
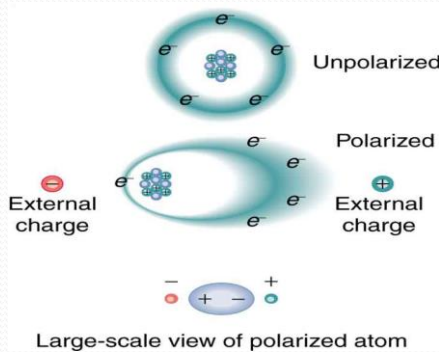
Ionic		Polar bonding			Molecular	
LiF	BeF <sub>2</sub>	BF <sub>3</sub>	CF <sub>4</sub>	NF <sub>3</sub>	OF <sub>2</sub>	F <sub>2</sub>
80%	59%	44%	30%	18%	10%	0%
% Ionic Character						

Liên kết ion      Liên kết cộng hóa trị phân cực      Liên kết cộng hóa trị

→

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

# Hiện tượng cực hóa ion



*Sự cực hóa ion: sự biến dạng đám mây điện tử của ion*  
*Sự cực hóa ion tăng → tính cộng hóa trị của liên kết tăng*

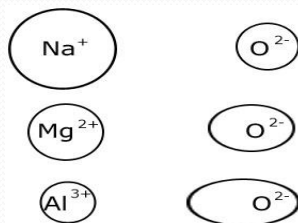
23

# Hiện tượng cực hóa ion

- Cation:  $q^+$  lớn,  $r^+$  nhỏ → tác dụng phân cực tăng
- Anion:  $q^-$  lớn,  $r^-$  lớn → tác dụng bị phân cực (khả năng bị biến dạng) 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

Tính ion của liên kết M – O tăng dần:  
 $\text{Al}_2\text{O}_3 < \text{MgO} < \text{Na}_2\text{O}$

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

## 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,  $\text{MnCl}_2$
  - b. SnO và  $\text{SnO}_2$

25

## 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)

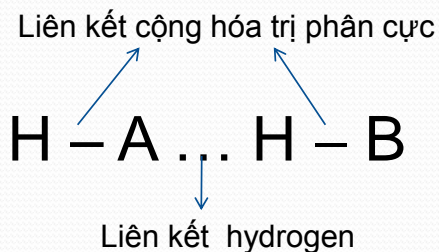
- ☐ Tồn tại giữa mọi loại phân tử
- ☐ Độ mạnh: phụ thuộc kích thước phân tử - kích thước phân tử càng lớn, tương tác khuếch tán càng mạnh

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

26

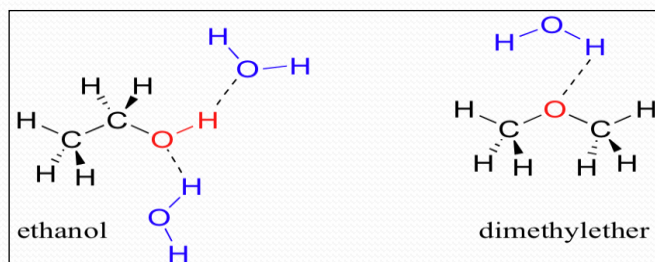
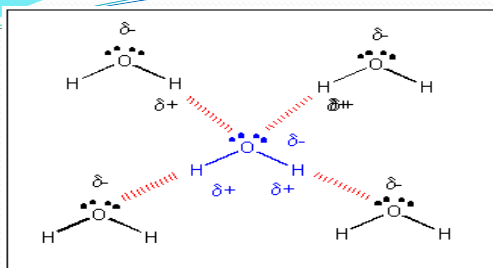
# Liên kết hydrogen

- / 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 tăng: nguyên tố có độ âm điện càng lớn, bán kính càng nhỏ

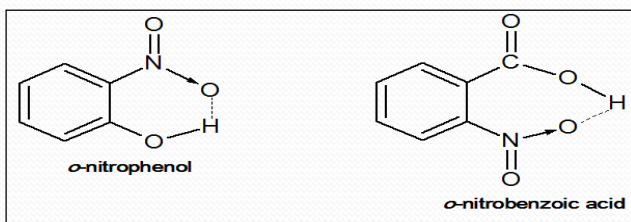


A, B: nguyên tố có độ âm điện lớn, bán kính nhỏ  
A, B: có thể giống nhau hay khác nhau

27



*Liên kết hydrogen liên phân tử*



*Liên kết hydrogen nội phân tử*

28

## Ảnh hưởng của liên kết yếu đến nhiệt độ chuyển pha của **phân tử cộng hóa trị**

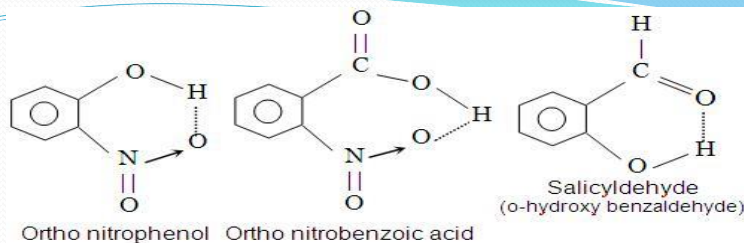
- Liên kết VDW
- Liên kết hydrogen

Năng lượng liên kết càng lớn

Nhiệt độ chuyển pha càng cao

- Nhiệt độ nóng chảy
- Nhiệt độ sôi

29

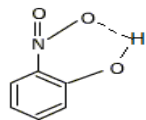


$T_{nc}$  (°C)

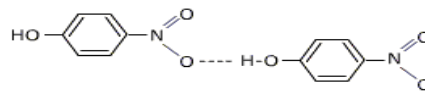
45

141 - 148  
237 (p-)

- 7  
112 - 116 (p-)



o - nitrophenol  
Lk hydrogen nội phân tử



p - nitrophenol  
Lk hydrogen liên phân tử

$T_{nc}$  (°C)

45

114

30

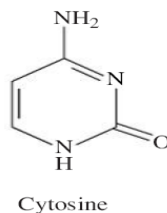
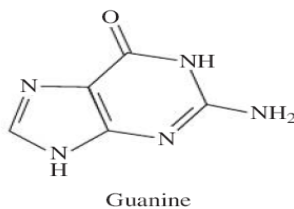
## Bài tập

1. Hợp chất nào tồn tại liên kết hydrogen liên phân tử?  
Giải thích?  $\text{PH}_3$ ,  $\text{CH}_4$ ,  $\text{H}_2\text{S}$ ,  $\text{HF}$ ,  $\text{HCl}$ ,  $\text{SiH}_4$ ,  $\text{NH}_3$
2. Giải thích tại sao  $\text{SiH}_4$  có nhiệt độ nóng chảy ( $-185^\circ\text{C}$ ) và nhiệt độ sôi ( $-112^\circ\text{C}$ ) thấp hơn  $\text{PH}_3$  (nhiệt độ nóng chảy và sôi lần lượt là  $-133^\circ\text{C}$  và  $-88^\circ\text{C}$ ) 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 ( $-246^\circ\text{C}$ ,  $-186^\circ\text{C}$ ,  $-152^\circ\text{C}$ )
  - b.  $\text{H}_2$ ,  $\text{HCl}$ ,  $\text{Cl}_2$  ( $-35^\circ\text{C}$ ,  $-259^\circ\text{C}$ ,  $-85^\circ\text{C}$ )

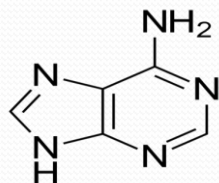
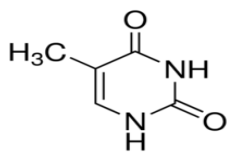
31

4. Xác định vị trí hình thành liên kết hydrogen giữa các phân tử trong các trường hợp

a.



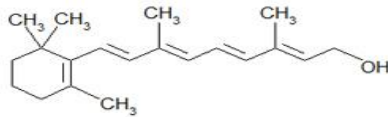
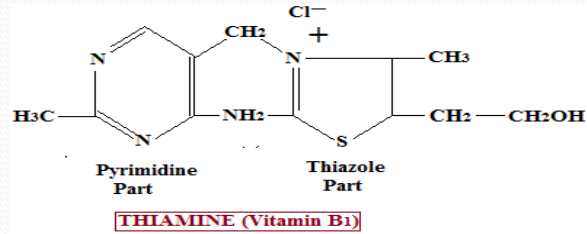
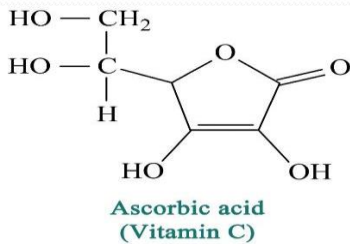
b.



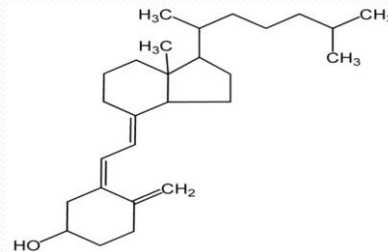
32



5. Xác định vitamin nào dễ tan trong nước? Vitamin nào dễ tan trong dầu? Giải thích?



Vitamin A (retinol)



Vitamin D

33

6. Liên kết peptide thuộc loại liên kết gì? Nhận xét về độ bền của liên kết peptide?

34