

Chương 3. LIÊN KẾT TRONG PHÂN TỬ. CẤU TẠO VÀ TÍNH CHẤT

3.1. Một số khái niệm

3.1.1. Khái niệm về phân tử

Phân tử là phần tử nhỏ nhất của một chất có khả năng tồn tại độc lập mà vẫn giữ nguyên tính chất của chất đó.

Theo quan điểm hiện đại thì: phân tử bao gồm một số giới hạn của hạt nhân và các electron tương tác với nhau và được phân bố một cách xác định trong không gian tạo thành một cấu trúc không gian bền vững.

Phân tử không chỉ là các phân tử trung hoà như H_2 , Cl_2 , CO_2 mà còn bao gồm các ion phân tử như H_2^+ , NO_3^- , ...

3.1.2. Độ âm điện

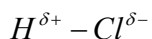
Độ âm điện (χ) của một nguyên tố là đại lượng đặc trưng cho khả năng của nguyên tử nguyên tố đó trong phân tử hút cặp electron liên kết về phía mình.

Như vậy χ càng lớn thì nguyên tố dễ thu electron.

* Một số quy luật:

- Độ âm điện của nguyên tố càng lớn thì khả năng hút cặp electron càng mạnh, tính phi kim của nguyên tố càng mạnh.

Ví dụ: Trong phân tử HCl, giữa hydro và clo có một cặp electron dùng chung, chúng bị lệch về phía nguyên tử clo vì clo có độ âm điện lớn hơn hydro nên trong phân tử HCl thì hydro mang điện dương và clo mang điện tích âm.



- Trong một chu kỳ, đi từ trái sang phải: độ âm điện của các nguyên tố tăng dần.
- Trong một nhóm, đi từ trên xuống: độ âm điện của các nguyên tố giảm dần.

Bảng 1. Độ âm điện của một số nguyên tố theo Pauling

I _A	II _A	III _A	IV _A	V _A	VI _A	VII _A
H 2,1						
Li 1,0	Be 1,6	B 2,0	C 2,6	N 3,0	O 3,4	F 4,0
Na 0,93	Mg 1,3	Al 1,6	Si 2,0	P 2,2	S 2,6	Cl 3,0
K	Ca	Ga	Ge	As	Se	Br

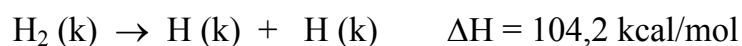
0,82	0,95	1,8	2,0	2,4	2,1	2,7
Rb	Sr	In	Sn	Sb	Te	I
0,82	0,95	1,8	2,0	2,4	2,1	2,7
Cs	Ba	Tl	Pb	Bi	Po	At
0,79	0,89	2,0	2,3	2,0	2,0	2,2

3.1.3. Một số đặc trưng của liên kết

a. Năng lượng liên kết

Năng lượng của một liên kết hoá học là năng lượng cần thiết để phá vỡ liên kết đó và thành nguyên tử ở thể khí.

Ví dụ: Năng lượng của liên kết (H-H) trong phân tử H_2 chính là hiệu ứng nhiệt của quá trình.

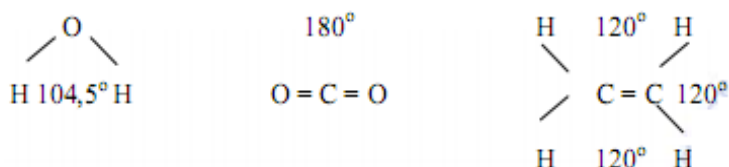


Năng lượng liên kết đặc trưng cho độ bền của liên kết, năng lượng liên kết càng lớn thì liên kết càng bền.

b. Góc liên kết

Góc liên kết là góc tạo bởi 2 nửa đường thẳng xuất phát từ hạt nhân của một nguyên tử và đi qua hạt nhân của 2 nguyên tử khác liên kết trực tiếp với nguyên tử trên.

Ví dụ: Góc liên kết trong các phân tử sau: H_2O , CO_2 , C_2H_4



c. Độ dài liên kết

Độ dài liên kết được xác định bởi khoảng cách giữa hai nhân của hai nguyên tử khi đã hình thành liên kết.

Nếu các nguyên tử tham gia liên kết như nhau, thì liên kết càng bền khi độ dài liên kết càng bé.

Bảng 2. Độ dài liên kết và năng lượng liên kết của một số liên kết

Liên kết	Phân tử	$r_0(A^0)$	E (Kcal/mol)
C – H	CH_4	1,09	98,7
C – Cl	$CHCl_3$	1,77	75,8
C – F	CH_3F	1,38	116,3
C – C	C_2H_6	1,54	79,3

C = C	C ₂ H ₄	1,34	140,5
H – H	H ₂	0,74	104,0
O = O	O ₂	1,21	118,2
O – H	H ₂ O	0,96	109,4

d. Mômen lưỡng cực của phân tử

Trong nguyên tử, các electron bao quanh hạt nhân được phân bố toàn toàn đối xứng khắp mọi phía nên trọng tâm của các điện tích trùng với tâm của hạt nhân (trọng tâm của điện tích dương).

Độ phân cực của liên kết được đánh giá qua mômen lưỡng cực μ (muy), có đơn vị đo là Debye (D).

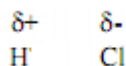
Trong phân tử, trọng tâm của các điện tích âm và dương có thể trùng nhau hoặc không trùng nhau.

- Nếu trọng tâm điện tích dương và trọng tâm điện tích âm trong phân tử trùng nhau ta có phân tử không phân cực.

Ví dụ: phân tử H₂, N₂, F₂ ...

- Nếu trọng tâm điện tích âm và dương không trùng nhau (xuất hiện ở 2 nguyên tử có sự chênh lệch về độ âm điện) thì ta có phân tử phân cực. Lúc này phân tử xuất hiện một mômen lưỡng cực.

Ví dụ: phân tử H-Cl



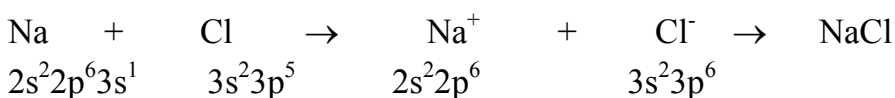
3.2. Liên kết ion theo Kossel

3.2.1. Khái quát

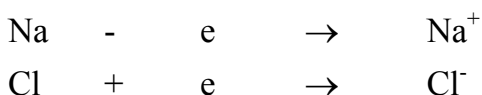
Liên kết ion là liên kết được hình thành do lực hút tĩnh điện giữa các ion mang điện tích trái dấu.

Liên kết ion là liên kết được hình thành từ hai nguyên tử của hai nguyên tố có độ âm điện rất khác nhau, một bên là kim loại điển hình có độ âm điện rất bé, một bên là phi kim điển hình có độ âm điện rất lớn, như trường hợp giữa các kim loại kiềm hoặc kim loại kiềm thổ và halogen hoặc oxi. Khi đó xảy ra sự chuyển dịch electron từ một nguyên tử có tính dương điện mạnh sang một nguyên tử có tính âm điện mạnh để tạo thành cation và anion, các ion ngược dấu hút nhau bằng lực hút tĩnh điện. *Vậy bản chất của liên kết ion là lực hút tĩnh điện giữa các ion trái dấu.*

Ví dụ: phân tử NaCl, electron được chuyển từ Na sang Cl để tạo thành Na⁺ và Cl⁻.



Khi đó các ion Na⁺ và Cl⁻ được hình thành bởi sơ đồ sau:



Như vậy, sự hình thành trong liên kết ion, là do sự phân bố lại các ion một cách đều đặn trên các nút mạng lưới tinh thể và giữa chúng tồn tại lực tương tác tĩnh điện về mọi phía.

3.2.2. Điều kiện tạo thành liên kết ion

Độ âm điện của 2 nguyên tử tham gia liên kết phải khác nhau nhiều (hiệu số độ âm điện ≥ 2).

3.2.3. Đặc điểm của liên kết ion

- Mỗi ion tạo ra điện trường xung quanh nó, nên liên kết ion xảy ra theo mọi hướng hay thường nói liên kết ion là liên kết không có hướng.
- Không bão hoà, nghĩa là mỗi ion có thể liên kết được nhiều ion xung quanh nó.
- Liên kết rất bền.

Do hai tính chất này mà các phân tử hợp chất ion có khuynh hướng tự kết hợp lại mạnh mẽ, các phân tử ion riêng lẻ chỉ tồn tại ở nhiệt độ cao. Còn ở nhiệt độ thường mọi hợp chất ion đều tồn tại ở trạng thái rắn, có cấu trúc tinh thể và toàn bộ tinh thể được xem như một phân tử khổng lồ.

3.2.4. Hoá trị của nguyên tố trong hợp chất ion

Hoá trị của một nguyên tố trong hợp chất ion được gọi là điện hoá trị hay hoá trị ion của nguyên tố đó.

Ví dụ 1: Na^+ , Cl^- thì Na và Cl đều có hoá trị 1

Đối với ion đa nguyên tử: ta không nói đến hoá trị của từng nguyên tố mà nói đến hoá trị của cả ion.

Ví dụ 2: NH_4^+ , HSO_3^- , ClO_4^- có hoá trị 1

SO_4^{2-} , HPO_4^{2-} , có hoá trị 2

3.3. Liên kết cộng hoá trị

Trong 2 kiểu liên kết chính của phân tử, liên kết ion được giải thích bằng thuyết tĩnh điện của Kossel còn liên kết cộng hoá trị đã là đối tượng nghiên cứu của nhiều nhà khoa học suốt từ thế kỷ 19 đến nay. Trong số các thuyết này có thể kể đến 2 quan điểm chủ yếu là quan điểm của Lewis và quan điểm của cơ học lượng tử.

3.3.1. Thuyết Lewis về liên kết cộng hoá trị

a. Khái quát

Là loại liên kết bằng cặp electron chung hình thành giữa các nguyên tử giống nhau hay không khác nhau nhiều về độ âm điện. Chúng sử dụng các electron làm thành cặp electron dùng chung cho cả 2 nguyên tử, khi đó chúng cũng có được cấu hình bền vững của khí hiếm, liên kết này gọi là liên kết cộng hoá trị - mỗi cặp electron dùng chung tạo thành một liên kết. *Vậy liên kết cộng hoá trị là liên kết bằng cặp electron chung.*

Ví dụ: $\text{H} \cdot + \cdot \text{H} = \text{H} : \text{H}$ hay $\text{H} - \text{H}$

* Phân loại liên kết:

- Nếu hai nguyên tử có độ âm điện như nhau, cặp electron liên kết sẽ nằm ở giữa, ta có liên kết cộng hoá trị không cực.

Ví dụ $\text{Cl} : \text{Cl}$

- Nếu hai nguyên tử có độ âm điện khác nhau, cặp electron liên kết sẽ nằm lệch về phía nguyên tử có độ âm điện lớn hơn, ta có liên kết cộng hoá trị phân cực.

Ví dụ $\text{H} : \text{Cl}$

- Nếu cặp electron chung liên kết do một trong hai nguyên tử đưa ra còn nguyên tử kia được dùng chung: đó là hình thành liên kết phối trí. Mỗi cặp electron dùng chung được ký hiệu bằng một vạch ngang gọi là vạch hoá trị.

b. Điều kiện tạo thành liên kết

Độ âm điện của 2 nguyên tử tham gia liên kết phải khác nhau nhiều (hiệu số độ âm điện < 2).

c. Đặc điểm của liên kết

- Liên kết cộng hóa trị là liên kết có hướng.
- Có tính bảo hoà.
- Liên kết kém bền hơn liên kết ion.

d. Hoá trị của nguyên tố trong hợp chất cộng hoá trị

Là số liên kết hình thành giữa một nguyên tử của nguyên tố đó với các nguyên tử khác trong phân tử.

Ví dụ: Trong các hợp chất: CO_2 ; NH_3 ; HCl , thì clo và hydro có hoá trị 1, oxi có hoá trị 2, nitơ có hoá trị 3 và cacbon có hoá trị 4.

Thuyết Lewis đã giải thích khá đơn giản, dễ hiểu về sự tạo thành liên kết giữa các nguyên tử trong phân tử, giải thích được các trạng thái hoá trị của nguyên tố trong các hợp chất. Tuy nhiên thuyết này cũng gặp một số hạn chế và không giải thích được từ tính của một số chất.

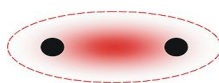
3.3.2. Thuyết liên kết hoá trị của VB (Valence Bond).

a. Liên kết σ , Liên kết δ , liên kết π .

Thuyết VB dùng sự xen phủ của các orbital nguyên tử (AO) để mô tả sự tạo thành các liên kết. Tuy theo tính đối xứng của vùng xen phủ giữa các AO tham gia liên kết đối với trục liên kết (trục với tâm 2 hạt nhân), người ta phân biệt liên kết xích ma (σ), liên kết (π), và liên kết (δ).

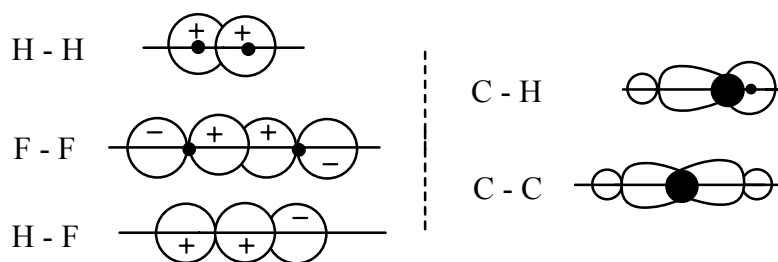
*** Liên kết σ**

Được hình thành khi các obitan nguyên tử (AO) tham gia liên kết xen phủ dọc theo trục liên kết (theo trục nối giữa hai hạt nhân nguyên tử).



Liên kết σ giữa hai nguyên tử

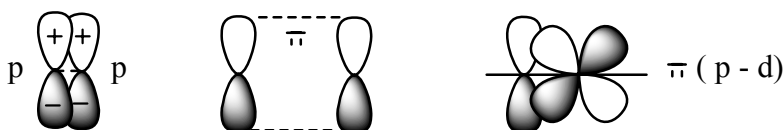
Liên kết σ có tính đối xứng trục và khá bền.



Hình 9. Liên kết σ

* Liên kết π

Được hình thành khi có sự xen phủ các AO hoá trị về hai phía của trục nối giữa hai hạt nhân nguyên tử tương tác.

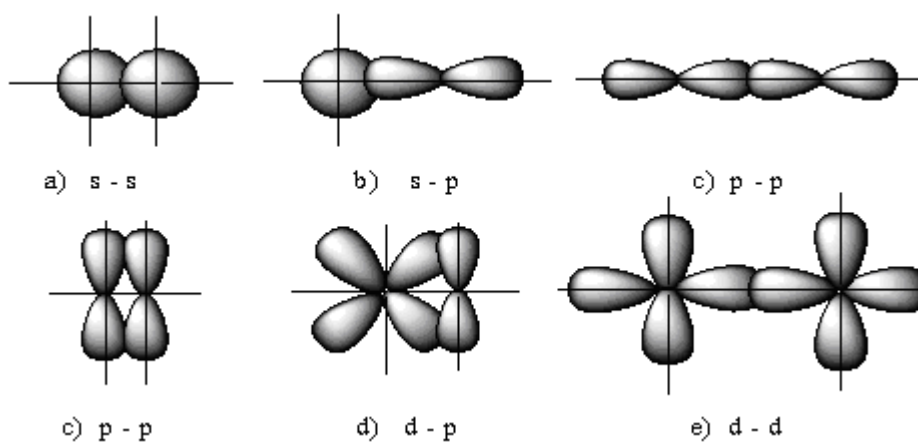


Hình 10. Liên kết π

Liên kết σ bền hơn liên kết π .

Liên kết π làm thành mặt phẳng đối xứng với trục liên kết.

Chú ý: Giữa 2 nguyên tử liên kết với nhau trong phân tử bao giờ cũng chỉ tồn tại một liên kết σ , còn số liên kết π có thể bằng 0, 1, 2.



Hình 11. Sự xen phủ xich ma và pi của các obitan nguyên tử

♦ Liên kết δ

Liên kết này ít gặp, đó là liên kết suất hiện do sự xen phủ của các orbital d.

b. Luận điểm cơ bản của thuyết VB

♦ Bài toán phân tử hydro.

Khi áp dụng cơ học lượng tử để giải quyết vấn đề bản chất của liên kết hoá học, năm 1927 hai nhà bác học W.Heiler và F. London đã giải bài toán tính năng lượng liên kết trong phân tử hydro H_2 .

Kết quả việc giải bài toán này cho thấy:

Liên kết giữa 2 nguyên tử hydro được hình thành khi 2 electron của 2 nguyên tử hydro có spin ngược chiều nhau ghép đôi với nhau.

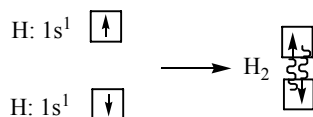
Khi đó năng lượng của phân tử hydro thấp hơn năng lượng của hai nguyên tử hydro cô lập và mức năng lượng của hai phân tử thấp nhất khi khoảng cách giữa 2 tâm của hai nguyên tử hydro là $0,74\text{\AA}$.

Khi hình thành liên kết mật độ mây electron ở khu vực không gian giữa hai hạt nhân tăng lên giống như hai đám mây xen phủ lên nhau, do đó mật độ điện tích âm của khu vực đó tăng lên, nên hút hai hạt nhân lại với nhau và liên kết chúng lại tức là xuất hiện liên kết giữa 2 nguyên tử hydro để tạo thành phân tử hydro (H_2).

♦ Luận điểm cơ bản của thuyết VB:

- Trong phân tử các electron vẫn chuyển động trên các AO.
- Mỗi liên kết cộng hoá trị được tạo thành do sự ghép đôi 2 electron độc thân có spin trái dấu của 2 nguyên tử khác nhau tương tác với nhau, cặp electron này được xem như chung cho cả 2 nguyên tử.
- Khi đó xảy ra sự xen phủ giữa 2 đám mây electron liên kết, sự xen phủ càng mạnh thì liên kết càng bền.

Ví dụ: Sự hình thành liên kết trong phân tử H_2



Những đường lượn sóng trên sơ đồ biểu thị sự tạo thành liên kết cộng hoá trị.

- Liên kết được phân bố theo phương mà tại đó sự xen phủ lẫn nhau giữa các AO tham gia liên kết là lớn nhất, và như vậy sẽ có những phương được ưu tiên trong không gian phù hợp với cấu hình không gian của phân tử vì vậy liên kết cộng hoá trị có tính định hướng.

- Liên kết cộng hoá trị có tính bão hòa, nghĩa là mỗi liên kết chỉ đảm bảo bởi 2 electron và ở một nguyên tử tham gia liên kết chỉ có một số giới hạn các liên kết hoá trị.

Ví dụ: N kết hợp với H tạo NH_3 , không tạo ra các phân tử NH_4 , NH_5

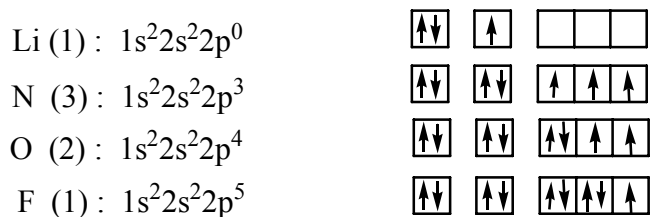
S liên kết với H tạo H_2S , không tạo ra các phân tử H_3S , H_4S

3.3.3. Các thuyết trong khuôn khổ thuyết VB

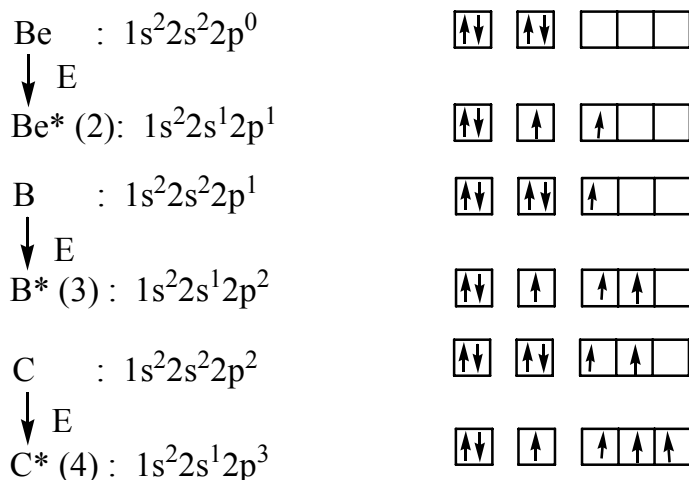
a. Hoá trị của các nguyên tố theo VB

Hoá trị có thể có của một nguyên tố được tính bằng số electron độc thân trong nguyên tử của nguyên tố đó (ở trạng thái cơ bản hay kích thích).

Ví dụ: Xét các nguyên tố ở chu kì 2:



Be, B, C nhận năng lượng, để chuyển sang trạng thái kích thích. Cặp electron 2s sẽ tách đôi và một electron chuyển lên obitan 2p còn trống. Sự tiêu tốn năng lượng này được bù lại thừa thãi khi nguyên tử tạo thành các liên kết hoá học.



Vì vậy hoá trị thông thường của Be(2), B(3), C(4).

Cần lưu ý rằng trạng thái kích thích của nguyên tử để tạo ra các hoá trị khác nhau chỉ xảy ra trên cùng một lớp. Ví dụ, trong trường hợp nguyên tử nitơ, lớp electron hoá trị của nó chỉ có hai phân lớp 2s và 2p, nên nitơ không thể có trạng thái hoá trị năm, vì sự tạo ra năm electron độc thân ở N phải chuyển một electron đã ghép đôi $2s^2$ từ lớp trong ra lớp ngoài đòi hỏi năng lượng quá lớn không được bù bằng sự tạo thành liên kết.

Phương pháp tìm hoá trị của nguyên tố như trên chỉ đúng với các nguyên tố nhóm A (trừ khí hiếm).

Nhận xét: Thuyết hoá trị spin giúp ta giải thích được hoá trị của nhiều nguyên tố. Tuy vậy nó cũng gặp hạn chế nhưng không giải thích được sự hình thành liên kết trong các ion phân tử và từ tính của một số chất, không giải thích được độ bền của các phân tử,...

b. Thuyết lai hoá orbital và dạng hình học của phân tử

* Khái niệm

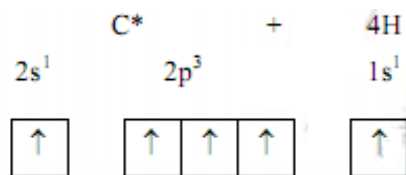
Thuyết lai hoá được Pauling đưa ra trong khuôn khổ thuyết VB để giải thích sự hình thành liên kết trong phân tử CH_4 , BeF_2 ... và các hợp chất tương tự.

Theo Pauling khi tham gia liên kết các AO hoá trị của các nguyên tử không tham gia đồng thời bằng cách trộn lẫn với nhau trước khi đi vào liên kết. Hay nói cách khác là các AO tổ hợp với nhau thành các tổ hợp tốt nhất để tạo liên kết bền nhất. Các tổ hợp đó là các hàm sóng tương đương nhau, có năng lượng và hình dạng giống nhau và được định hướng rõ rệt trong không gian.

Vậy “Sự lai hoá orbital là sự tổ hợp các AO trong một nguyên tử để tạo thành các AO lai hoá giống nhau về năng lượng, hình dạng và định hướng rõ rệt trong không gian”.

Ví dụ: Xét sự tạo liên kết trong phân tử CH_4 . Nguyên tử C ở trạng thái hóa trị 4 có 4e độc thân: $1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$. Bốn e này tạo thành 4 liên kết C – H, trong đó có 3 liên kết p-s, nghĩa là ba obitan 2p của C xen phủ với 3 obitan 1s của 3 nguyên tử H,

tạo thành ba góc liên kết $\text{HCH} = 90^\circ$. Liên kết thứ 4: C – H được tạo thành do sự xen phủ giữa obitan 2s của C và 1s của H không có hướng xác định trong không gian, vì độ xen phủ giữa các obitan s với nhau là như nhau theo mọi hướng.



Nếu coi rằng liên kết thứ 4 này phải cách đều 3 liên kết kia thì góc liên kết HCH thứ 4 phải bằng $120^\circ 14'$. Kết quả này dẫn đến độ bền của 1 liên kết C – H (do sự xen phủ s – s) khác với độ bền của 3 liên kết C – H còn lại (do sự xen phủ p – s).

Tuy nhiên thực nghiệm xác nhận rằng bốn góc liên kết HCH trong phân tử CH_4 đều bằng $109^\circ 28'$ (góc 4 mặt đều) và độ bền của 4 liên kết C – H đều như nhau.

Để giải quyết sự không phù hợp giữa suy luận với thực nghiệm, Pauling và Slater đã đề ra thuyết lai hoá. Theo đó, khi các nguyên tử tương tác với nhau có thể không dùng các AO “thuần khiết” s, p, d mà những AO này được tổ hợp thành những obitan mới có năng lượng, hình dạng, kích thước giống nhau, phân bố đối xứng trong không gian - gọi là các AO lai hóa.

Có bao nhiêu AO tham gia lai hoá thì có bấy nhiêu AO lai hoá được hình thành và chúng phân bố đối xứng trong không gian. Muốn lai hoá được với nhau các AO phải có mức năng lượng xấp xỉ nhau.

*** Điều kiện để các AO lai hoá bền là:**

- Năng lượng của các AO tham gia lai hoá phải xấp xỉ nhau
- Năng lượng của các AO tham gia lai hoá thấp
- Độ xen phủ các AO lai hoá với các AO của các nguyên tử khác tham gia liên kết phải lớn.

Nếu không đủ các điều kiện trên thì khả năng lai hoá giảm dần hoặc không có sự lai hoá, kết quả dẫn đến độ bền liên kết giảm dần.

Ví dụ: Từ trái sang phải trong chu kỳ 3, độ bền liên kết trong các ion SiO_4^{4-} , PO_4^{3-} , SO_4^{2-} giảm dần vì các obitan hoá trị của nguyên tử trung tâm đều có lai hoá sp^3 , nhưng vì từ trái sang phải trong chu kỳ hiệu năng lượng các obitan 3p và 3s tăng dần, dẫn đến năng lượng liên kết X – O giảm dần theo chiều trên.

Từ trên xuống trong nhóm VA độ bền liên kết và góc liên kết trong phân tử NH_3 , PH_3 , AsH_3 , SbH_3 giảm dần vì lai hoá bền sp^3 giảm, do năng lượng các obitan hoá trị tăng dần từ N đến Sb trong nhóm.

Phân tử	NH_3	PH_3	AsH_3	SbH_3
Năng lượng liên kết kj. mol^{-1}	380	323	281	256
Góc liên kết HXH	$107,3^\circ$	94°	92°	91°

Tương tự như vậy đối với các phân tử XH_2 trong nhóm VIA.

Phân tử	H ₂ O	H ₂ S	H ₂ Se	H ₂ Te
Năng lượng liên kết kj. mol ⁻¹	463	347	276	238
Góc liên kết HXH	104,5°	92°	91°	90°

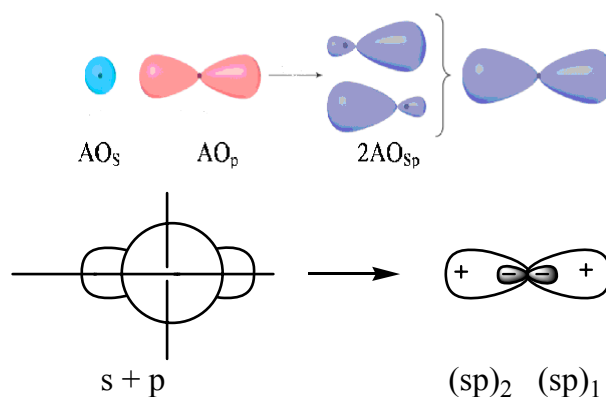
Lưu ý: Khi số nguyên tử liên kết với nguyên tử trung tâm A ít hơn số obitan lai hóa của A thì góc liên kết trong phân tử bị thu hẹp lại đôi chút so với góc giữa các obitan lai hóa, vì cặp e hóa trị trên obitan lai hóa chưa tham gia liên kết có tác dụng đẩy mạnh hơn so với cặp e trên obitan lai hóa đã tham gia liên kết.

Ví dụ, góc (OSO) trong SO₂ là 119,5° < 120° giữa các lai hóa sp²; Góc (HNH) trong NH₃ là 107,3° nhỏ hơn 109°28' giữa các obitan lai hóa sp³.

* Các kiểu lai hoá giữa các AO ns và np

- Lai hoá sp

Đó là sự tổ hợp giữa một AOs và một AOp thuộc cùng một lớp nguyên tử, tạo thành 2 orbital lai hoá có năng lượng tương đương và hình dạng giống nhau, trục đối xứng của 2 AO lai hoá này tạo với nhau một góc 180°.



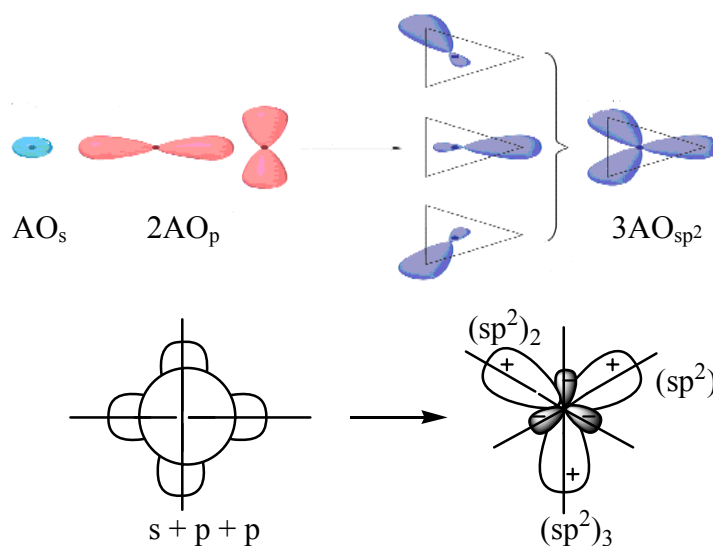
Hình 12. Giải đồ lai hóa Sp

Trường hợp lai hoá này thường xảy ra trong nguyên tử khi tạo thành các hợp chất có dạng đường thẳng như BeF₂, BeH₂, BeCl₂, CO₂, C₂H₂,...

Ví dụ: Phân tử BeCl₂ có góc hóa trị xác định bằng thực nghiệm Cl - Be - Cl là 180°. Trước khi tạo liên kết, hai obitan 2s và 2p của Be lai hoá với nhau cho 2 obitan sp tương đương có trục nằm trên cùng một đường thẳng và ngược chiều nhau. Hai electron hóa trị của beri được ráp vào 2 obitan lai hóa. Sự phủ của 2 obitan lai hoá này với 2 obitan 3p của hai nguyên tử clo để tạo thành 2 liên kết Be - Cl tương đương thẳng hàng.

- Lai hoá sp²

Là sự lai hoá giữa một AO s với 2 AO p tạo ra 3AO lai hoá sp² nằm trong cùng một mặt phẳng, trục đối xứng của chúng tạo với nhau một góc là 120° hướng về 3 đỉnh của một tam giác đều.



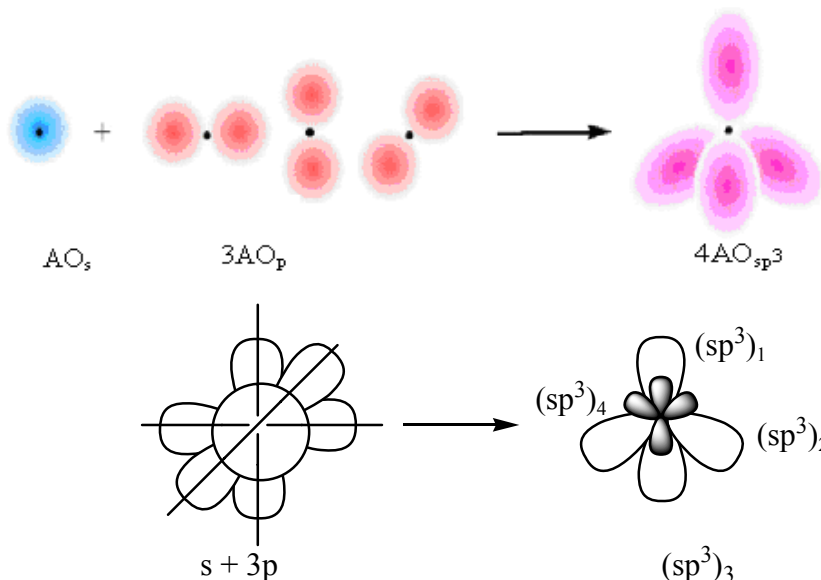
Hình 13. Giải đồ lai hóa Sp^2

Lai hoá sp^2 được dùng để giải thích cấu trúc hình học của các phân tử BH_3 , BF_3 , BCl_3 , SO_2 , SO_3 và giải thích liên kết đôi của các nguyên tử C trong các hợp chất hữu cơ.

Ví dụ: Phân tử BCl_3 có góc hóa trị xác định bằng thực nghiệm $Cl - B - Cl$ là 120° . Một obitan 2s và 2 obitan 2p của B đã lai hoá sp^2 . Ba electron hóa trị của B được ráp vào 3 obitan lai hóa này với 3 obitan p của 2 nguyên tử Cl cho 3 liên kết B – Cl với góc hóa trị 120° .

- Lai hoá sp^3

Một obitan ns và ba obitan np lai hoá với nhau tạo thành 4 obitan giống hệt nhau sp^3 hướng tới bốn đỉnh của tứ diện đều tạo thành góc giữa các obitan lai hoá bằng $109,28^\circ$ hoặc gần với góc đó.



Hình 14. Giải đồ lai hóa Sp^3

Ví dụ: Phân tử tứ diện đều CH_4 có góc hóa trị $H - C - H$ là $109^\circ 28'$. Khi tạo thành phân tử metan, một obitan 2s và 3 obitan 2p của C đã lai hoá cho 4 obitan. Sự xen phủ 4 obitan lai hóa này với 4 obitan 1s của 4 nguyên tử hydro cho 4 liên kết tương đương với góc hoá trị $109^\circ 28'$.



Hình 15. Cấu tạo phân tử CH_4

Khi hình thành NH_3 , nguyên tử nitơ không sử dụng 3 obitan 2p thuần khiết để xen phủ với 3 obitan 1s của hiđro. Nguyên tử N ở trạng thái lai hoá sp^3 , trong đó 5 electron hoá trị của N có 1 cặp được ráp vào 1 obitan lai (gọi là cặp electron không chia), 3 electron còn lại lần lượt được ráp vào 3 obitan lai hóa kia, sự xen phủ của 3 obitan lai hóa này với 3 obitan 1s của 3 nguyên tử H cho 3 liên kết N – H. Tương tác đẩy của cặp electron không chia với 3 cặp electron liên kết N – H làm cho góc hoá trị từ $129^\circ 28'$ giảm đi còn $127^\circ 1'$. Kết quả, phân tử NH_3 có cấu trúc hình tháp với góc hóa trị (HNH) bằng $107^\circ 3'$.



Hình 16. Cấu tạo phân tử NH_3

* Dự đoán kiểu lai hoá và dạng hình học của phân tử

Xuất phát từ ý tưởng các cặp electron hoá trị của một nguyên tử luôn đẩy lẫn nhau, R.J. Gillespie đã đưa ra quy tắc tiên đoán sự định hướng các liên kết xung quanh một nguyên tử trung tâm của phân tử hoặc ion gọi là thuyết sự đẩy các cặp electron hoá trị, viết tắt là VSEPR (từ tiếng anh: Valence Shell Electronic Pair Repulsions)

Luận điểm chính:

Mọi cặp electron liên kết và không liên kết (cặp electron tự do) của lớp ngoài cùng đều cư trú thông kê ở cùng một khoảng cách đến hạt nhân, trên bề mặt quả cầu mà hạt nhân nằm ở tâm. Các electron tương ứng sẽ ở vị trí xa nhau nhất để lực đẩy của chúng giảm đến cực tiểu.

Theo mô hình VSEPR: Xét phân tử AX_nE_m .

A: Nguyên tử trung tâm có các cặp electron hóa trị tạo liên kết σ ;

X: Cặp electron liên kết với nguyên tử trung tâm A;

n: số cặp electron tạo thành liên kết σ ; E: Cặp electron tự do;

m: Số lượng cặp electron tự do;

$n + m = q$ là tổng số cặp electron hóa trị bao quanh A.

$n + m = 2 \rightarrow$ Phân tử thẳng \rightarrow A lai hoá sp

$n + m = 3 \rightarrow$ Phân tử phẳng tam giác \rightarrow A lai hoá sp^2

$n + m = 4 \rightarrow$ Phân tử tứ diện \rightarrow A lai hoá sp^3

$n + m = 5 \rightarrow$ Phân tử tháp đôi đáy tam giác \rightarrow A lai hoá sp^3d

$n + m = 6 \rightarrow$ Phân tử tháp đôi đáy vuông (bát diện) \rightarrow A lai hoá sp^3d^2

Ví dụ: Trong BeH_2 có $m + n = 2 \rightarrow$ Be có lai hoá sp .

BH_3 có $m + n = 3 \rightarrow$ B có lai hoá sp^2 .

CH_4 có $m + n = 4 \rightarrow$ C có lai hoá sp^3 .

NH_3 có $m + n = 4 \rightarrow$ N có lai hoá sp^3 .

PCl_5 có $m + n = 5 \rightarrow$ P có lai hoá sp^3d .

Bảng 3. Dạng hình học một số phân tử AX_nE_m

$n + m$	Đa diện phối trí	Công thức cấu trúc	Dạng phân tử AX_m	Phân tử liên kết đơn	Phân tử liên kết bội
2	Đoạn thẳng	AX_2E_0	Thẳng	$BeH_2, HgCl_2$ $BeCl_2$	CO_2 HCN
3	Tam giác đều	AX_3E_0	Tam giác đều	BH_3, BF_3 $AlCl_3$	SO_3, NO_3^- $HClO_2$
		AX_2E_1	gấp khúc	$SnCl_2$	$SO_2, NO_2,$ $NOCl$
4	Tứ diện	AX_4E_0	tứ diện	CH_4 NH_4^+, BH_4^-	$SO_4^{2-}, POCl_3$
		AX_3E_1	Tháp đáy tam giác	NH_3 OH_3^+	$SOBr_2, ClO_3^-$
		AX_2E_2	gấp khúc	OF_2, SCl_2 NH_2^-, H_2S	ClO_2^-

3.3.4. Thuyết orbital phân tử MO (Molecular Orbital)

a. Luận điểm cơ bản

Theo cơ học lượng tử, phương pháp MO dựa trên sự mở rộng khái niệm hàm sóng một electron cho trường hợp phân tử.

Trong phương pháp MO, người ta xem phân tử như một khung mà ở đó các hạt nhân và electron cấu thành. Trong trường hợp này không thể nói đến từng trạng thái riêng lẻ của electron mà chỉ có thể nói đến hàm sóng ψ chính xác của hệ, song điều này không thể thực hiện được về mặt toán học. Để khắc phục tương tự như trường hợp

nguyên tử nhiều điện tử, người ta giả thiết là trong phân tử mỗi electron chuyển động trong một điện trường hiệu dụng trung bình nào đó gây ra bởi bộ khung của electron và hạt nhân còn lại.

Theo cách lập luận trên, người ta cho rằng trạng thái đó được mô tả bằng hàm sóng ψ gọi là MO. Nói cách khác, MO biểu thị trạng thái chuyển động của từng electron trong phân tử.

Nếu trong nguyên tử, các electron chuyển động trong trường hiệu dụng đối xứng xuyên tâm, thì trong phân tử các electron chuyển động trong trường hiệu dụng đối xứng xuyên tâm, có đối xứng phức tạp hơn tùy từng loại phân tử cụ thể.

Phương pháp MO hoàn toàn tôn trọng các nguyên lý và quy tắc áp dụng cho nguyên tử.

Đối với phân tử có 2 nguyên tử thì khi tổ hợp các AO sẽ được các MO định cư hai tâm. Còn đối với phân tử nhiều nguyên tử khác nhau, sự tổ hợp các AO sẽ dẫn đến các MO không định cư nhiều tâm.

b. Phương pháp tổ hợp tuyến tính (MO – LCAO)

(Molecular Orbital Linear Combination of Atomic Orbital)

Trong phân tử, khi một electron chuyển động gần một hạt nhân nguyên tử nào đó, thì lúc đó electron này sẽ chịu tác dụng chủ yếu của điện trường hạt nhân đó, còn tương tác giữa electron khảo sát đối với electron và hạt nhân còn lại là không đáng kể. Khi đó một cách gần đúng về mặt toán học, ta có:

$$\psi = C_1\phi_1 + C_2\phi_2 + C_3\phi_3 + \dots C_n\phi_n = \sum_{i=1}^n C_i\phi_i$$

ϕ_1, ϕ_2, \dots là hàm sóng AO mô tả trạng thái chuyển động của từng electron;

C_1, C_2, \dots là hệ số của hàm AO hay phần đóng góp của từng electron vào quá trình hình thành liên kết.

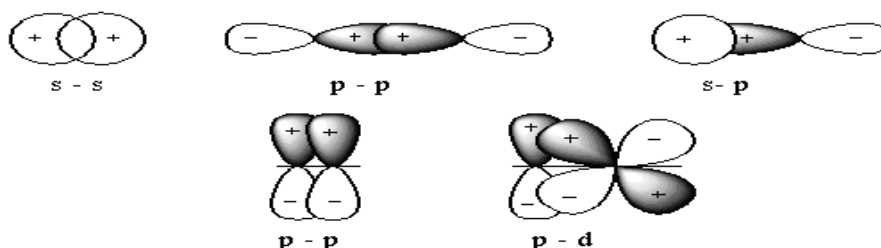
* Điều kiện tổ hợp có hiệu quả các AO.

- Các AO phải có cùng tính chất đối xứng.
- Năng lượng các AO phải xấp xỉ nhau.
- Các AO phải xen phủ nhau rõ rệt.

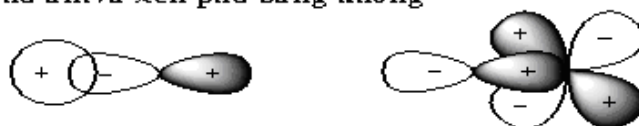
Về mặt định tính, để biết được các AO có cùng tính chất đối xứng hay không, có thể dựa vào sự xen phủ dương, âm hoặc bằng không của các AO (hình dưới).

⇒ Chỉ có sự xen phủ dương mới có thể tạo liên kết và trong trường hợp này các AO mới có cùng tính chất đối xứng, nghĩa là chúng mới tổ hợp được với nhau. Tuy nhiên việc tổ hợp có hiệu quả hay không còn phụ thuộc vào hai điều kiện còn lại.

Sự xen phủ dương



Sự xen phủ âm và xen phủ bằng không



Hình 17. Sự xen phủ của các obitan

*** Các đặc trưng của liên kết cộng hoá trị trong phương pháp MO:**

- Chỉ số liên kết hay độ bội liên kết (N).

$$N = \frac{1}{2}(n - n^*)$$

n - số electron nằm ở MO liên kết; n^* - số electron nằm ở MO phản liên kết.

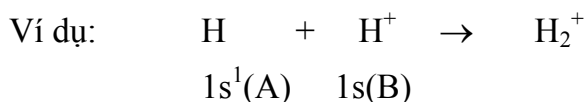
- Độ dài liên kết bằng khoảng cách giữa tâm của hai hạt nhân, độ dài liên kết càng nhỏ khi chỉ số liên kết càng lớn.

- Năng lượng liên kết càng lớn khi liên kết càng bền.

c. Bài toán ion phân tử H_2^+

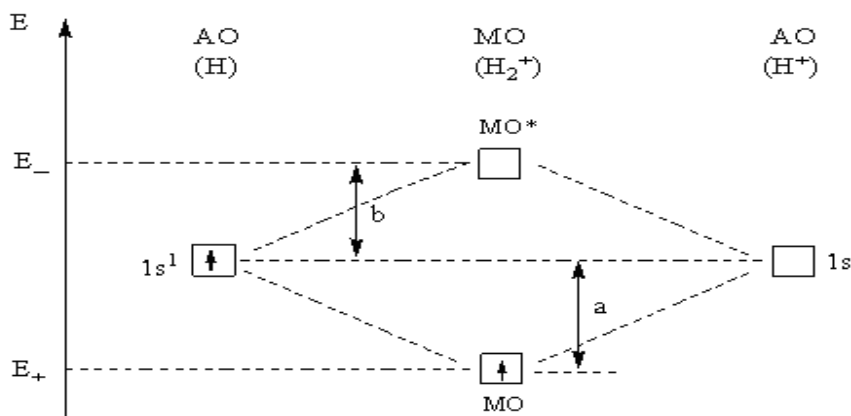
Vì hai nguyên tử trong phân tử giống nhau nên các AO hoá trị của chúng đều giống nhau, nghĩa là chúng có cùng tính chất đối xứng.

Trong trường hợp này sự tổ hợp n AO sẽ cho ta $\frac{n}{2}$ MO liên kết có năng lượng thấp hơn năng lượng AO đem tổ hợp và cho $\frac{n}{2}$ MO phản liên kết (kí hiệu MO^*) có năng lượng cao hơn các AO trong tổ hợp.



$\psi = C_1\psi_{1s(A)} + C_2\psi_{1s(B)}$; giải phương trình Schrodinger với hàm ψ ta thu được:

$$\psi = C_1\psi_{1s(A)} + C_2\psi_{1s(B)} \begin{cases} \Psi_- = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_{1s(A)} - \Psi_{1s(B)}) \\ (MO_{lk}, \text{ kí hiệu } \sigma_s, \text{ có năng lượng } E_-) \\ \Psi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_{1s(A)} + \Psi_{1s(B)}) \\ (MO^*, \text{ kí hiệu } \sigma_s^*, \text{ có năng lượng } E_+) \end{cases}$$



Hình 18. Giải đồ năng lượng các MO của ion H_2^+

Trong giản đồ trên:

σ_s là MO liên kết;

σ_s^* là MO liên kết dạng σ ;

σ là liên kết σ_{H-H^+} .

s là liên kết tạo thành từ AO_s .

Electron duy nhất của H_2^+ tất nhiên sẽ chiếm MO có năng lượng thấp, nên cấu hình electron của ion H_2^+ : σ_s^1 (có 1 electron trên MO liên kết σ_s).

Từ giản đồ trên ta thấy rằng khi tạo ion H_2^+ từ H và H^+ , năng lượng giảm xuống một giá trị a nghĩa là hệ H_2^+ bền hơn hệ H và H^+ riêng biệt. Phương pháp VB không giải thích được sự tồn tại của ion H_2^+ này.

Giản đồ năng lượng các MO của hệ H_2 , He_2^+ , He_2 , tương tự giản đồ trên.

- Phân tử H_2 có 2e, Cấu hình electron H_2 : σ_s^2

- Phân tử He_2^+ có 3e, Cấu hình electron He_2^+ : $\sigma_s^2 \sigma_s^{*1}$

- Phân tử He_2 có 4e, Cấu hình electron He_2 : $\sigma_s^2 \sigma_s^{*2}$

\Rightarrow Phân tử He_2 không tồn tại vì 2e chiếm σ_s làm năng lượng của hệ giảm xuống không bù cho năng lượng của hệ tăng lên do 2e chiếm MO phản liên kết tăng lên σ_s^* .

c. Thuyết MO cho phân tử hai nguyên tử đồng hạch thuộc chu kỳ 2

Bao gồm: Li_2 , Be_2 , B_2 , C_2 , N_2 , O_2 , F_2 , Ne_2 .

* Nguyên tắc chung

- MO được thiết lập là do sự tổ hợp tuyến tính các AO hoá trị (các electron phân lớp ngoài cùng). Sự tổ hợp của nAO sẽ tạo thành nMO.

- Các AO xen phủ lẫn nhau theo các điều kiện:

+ Có mức năng lượng xấp xỉ nhau;

+ Có khả năng xen phủ nhau ở một mức độ đáng kể;

+ Có cùng tính đối xứng với trục liên kết;

- Tùy theo hướng xen phủ các AO, ta sẽ có:

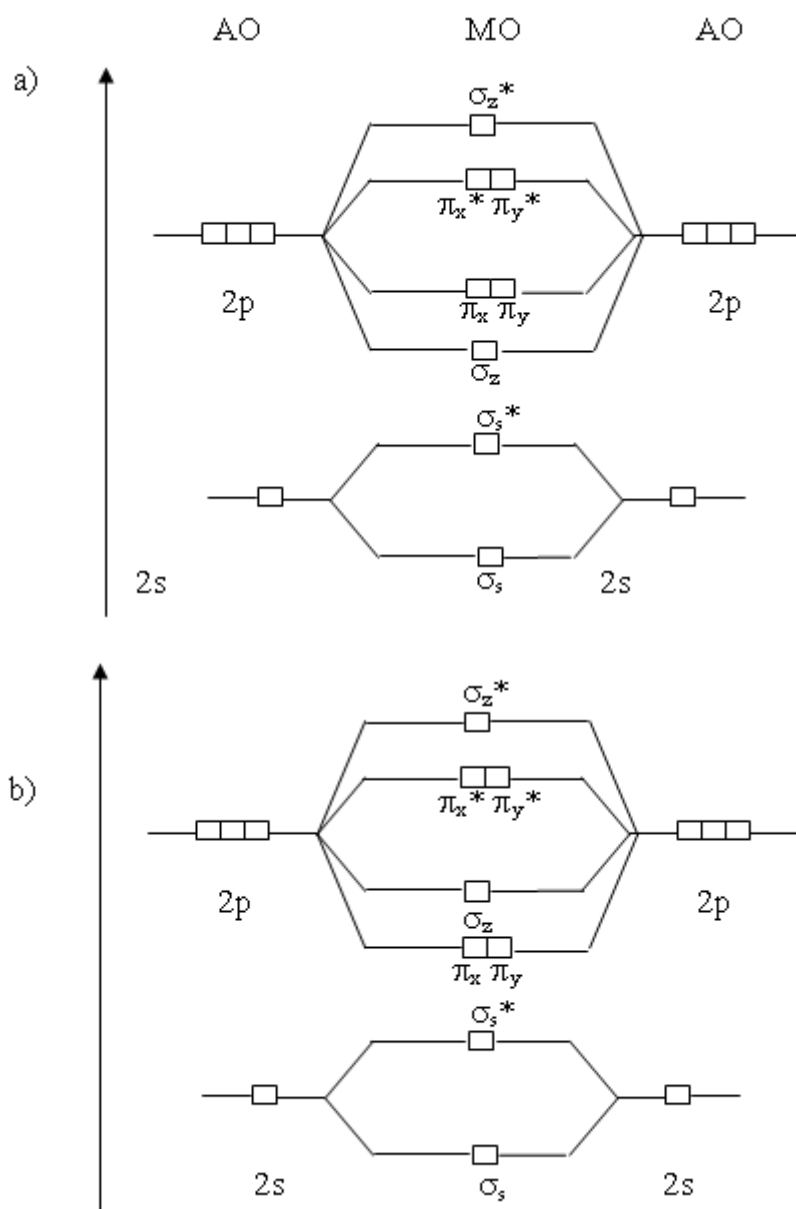
+ Nếu 2AO xen phủ dọc trục liên kết, ta có các MO- σ ;

+ Nếu 2AO xen phủ hai bên sườn liên kết, ta có các MO- π .

- Sự hình thành MO liên kết, MO phản liên kết phụ thuộc vào dấu của các AO tham gia tổ hợp tuyến tính.

* Giản đồ MO

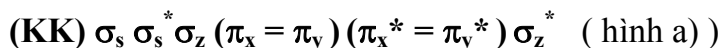
- Các nguyên tử ở chu kỳ 2 đều có 4 AO hoá trị khi tạo thành phân tử A_2 bằng các tổ hợp sau: (hình 19)



Hình 19. Hai giản đồ năng lượng MO của các phân tử A_2 thuộc chu kỳ 2

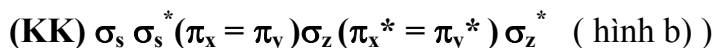
- Giản đồ a) là của các phân tử cuối chu kỳ : O_2 , F_2 và Ne_2 . Trong trường hợp này, hiệu ứng năng lượng $E_{np} - E_{ns}$ ở các nguyên tử lớn nên không có sự tương tác $\sigma_s - \sigma_z$.

\Rightarrow Cấu hình electron của các phân tử O_2 , F_2 , Ne_2 có dạng:



- Giản đồ b) là của các phân tử đầu chu kỳ : Li_2 , Be_2 , B_2 , C_2 , N_2 . Trong trường hợp này, hiệu ứng năng lượng $E_{np} - E_{ns}$ tương đối nhỏ nên khi tạo thành phân tử A_2 có sự tương tác $\sigma_s - \sigma_z$ làm cho mức năng lượng các MO σ_z và π_x , π_y thay đổi so với giản đồ a).

\Rightarrow Cấu hình electron của các phân tử Li_2 , Be_2 , B_2 , C_2 , N_2 có dạng:



- Kí hiệu (KK) ở đây chỉ rằng có $4e (1s^2)$ của hai nguyên tử của lớp K không tham gia tạo thành MO.

Ví dụ:

- Phân tử Li_2 có 6e, Cấu hình electron Li_2 : σ_s^2

$$N = 1$$

$$l = 2,67 \text{ A}^0$$

$$E = 105 \text{ kJ/mol}$$

- Phân tử Be_2 có 8e, Cấu hình electron Be_2 : $\sigma_s^2 \sigma_s^{*2}$

($N = 0$, nên phân tử không tồn tại).

- Phân tử B_2 có 10e, Cấu hình electron B_2 : $\sigma_s^2 \sigma_s^{*2} \pi_x^1 = \pi_y^1$

$N = 1$, nên phân tử bền.

$$l = 1,59 \text{ A}^0;$$

$$E = -287 \text{ kJ/mol}$$

Phân tử có 2e độc thân nên có tính chất thuận từ.

- Phân tử N_2 có 14e, Cấu hình electron N_2 : $\sigma_s^2 \sigma_s^{*2} \pi_x^2 = \pi_y^2 \sigma_z^2$

$N = 3$, liên kết 3: $N \equiv N$

$$l = 1,10 \text{ A}^0;$$

$$E = -942 \text{ kJ/mol}$$

- Phân tử O_2 có 16e, Cấu hình electron O_2 : $\sigma_s^2 \sigma_s^{*2} \sigma_z^2 \pi_x^2 = \pi_y^2 \pi_x^{*1} = \pi_y^{*1}$

$$N = 2$$

$$l = 1,21 \text{ A}^0; E = -494 \text{ kJ/mol}$$

Phân tử có 2e độc thân nên có tính chất thuận từ.

- Phân tử F_2 có 18e, Cấu hình electron F_2 : $\sigma_s^2 \sigma_s^{*2} \sigma_z^2 \pi_x^2 = \pi_y^2 \pi_x^{*2} = \pi_y^{*2}$

$$N = 1,$$

$$l = 1,42 \text{ A}^0; E = -155 \text{ kJ/mol}$$

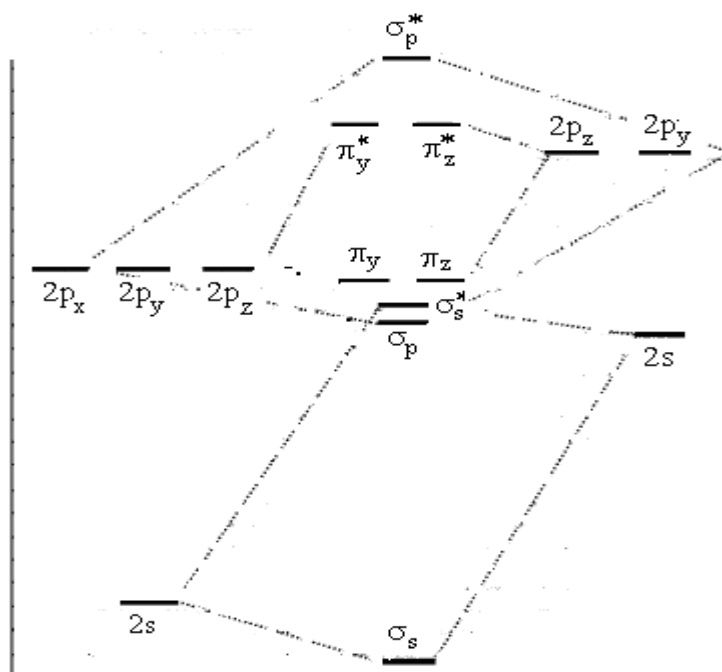
- Phân tử Ne_2 : không tồn tại.

d. Thuyết MO cho phân tử có hai hạt nhân khác nhau AB

Về nguyên tắc các xây dựng các MO đối với các phân tử dạng AB hoàn toàn giống với phân tử dạng A_2 .

Do trong phân tử AB, các AO có tính đối xứng khác nhau, nên phân xen phủ tạo thành MO khác nhau. Vì vậy chỉ có các AO có cùng tính đối xứng mới tham gia tạo tính liên kết.

Trong hai nguyên tử A và B, nguyên tử nào có độ âm điện lớn hơn sẽ có mức năng lượng AO bền hơn và được biểu diễn thấp hơn trên bản đồ năng lượng (hình 20):



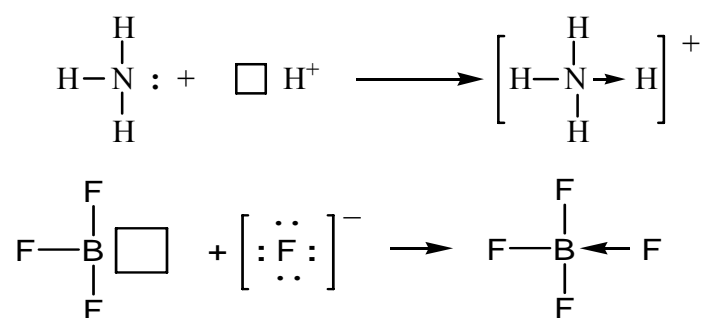
Hình 20. Giảm đồ năng lượng MO của các phân tử AB

3.4. Liên kết phối trí

Là liên kết cộng hoá trị mà cặp electron dùng chung chỉ do một nguyên tử đưa ra, nguyên tử này gọi là nguyên tử cho. Ở đây có sự chuyển cặp electron tự do của nguyên tử cho và orbital trống của nguyên tử nhận. Liên kết phối trí được ký hiệu bằng một mũi tên hướng từ nguyên tử cho sang nguyên tử nhận.

Để có thể tạo liên kết cho - nhận, một nguyên tử (hay ion) phải có cặp electron hoá trị chưa tham gia liên kết, còn nguyên tử (hay ion) kia còn orbital hoá trị trống.

Ví dụ:



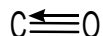
Trong thực tế, không thể phân biệt liên kết phối trí và liên kết cộng hoá trị thông thường. Ví dụ: trong NH_4^+ , bốn liên kết của N với H hoàn toàn giống nhau về độ dài liên kết và năng lượng liên kết. Liên kết phối trí thường gặp trong các phức chất.

Liên kết cho – nhận được biểu diễn bằng mũi tên hướng từ nguyên tử “cho” cặp e sang nguyên tử “nhận” cặp e đó.

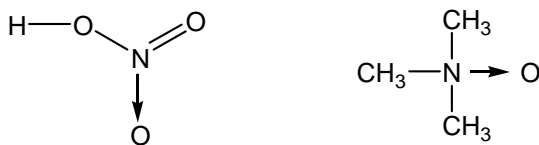
Liên kết cho – nhận trong NH_4^+ và BF_4^- có giá trị tương đương với 3 liên kết còn lại trong chúng, vì các liên kết này đều có cùng bản chất chung cặp e.

Trong phân tử CO, liên kết giữa C và O là liên kết 3, trong đó 2 LK được tạo thành do sự góp chung 2e độc thân của 2 nguyên tử, còn LK thứ 3 là liên kết cho – nhận được tạo thành bằng cặp e hóa trị chưa tham gia liên kết của O và orbital hóa trị

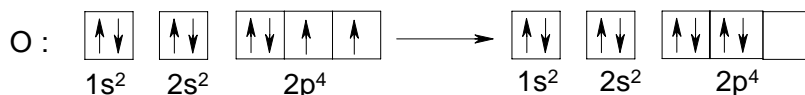
trống 2p của C:



Liên kết cho – nhận được tạo thành đôi khi do sự sắp xếp lại e hóa trị của phân tử nhận để tạo ra orbital hóa trị trống. Ví dụ:



Ở đây, trong nguyên tử O có sự sắp xếp lại các e hóa trị để tạo ra một orbital hóa trị trống tạo điều kiện cho việc “nhận” cặp e liên kết:



Năng lượng cần cho sự sắp xếp lại này được bù bằng năng lượng của phản ứng hóa học.

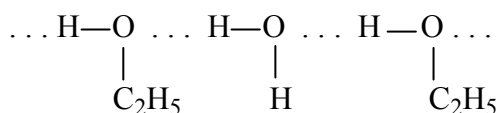
3.5. Tương tác giữa các phân tử

Ngoài các liên kết chính đã xét như liên kết ion, liên kết cộng hoá trị còn có các tương tác giữa các phân tử như liên kết hydro, lực Vanderwaals.

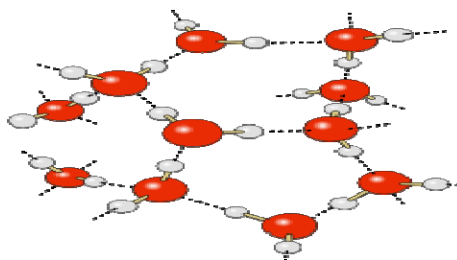
3.5.1. Liên kết hydro

Nguyên tử hydro ngoài khả năng tham gia liên kết cộng hoá trị thông thường, còn có khả năng tạo một mối liên kết thứ hai với một nguyên tử khác có độ âm điện lớn và kích thước nhỏ. Mối liên kết thứ hai này kém bền hơn nhiều so với liên kết cộng hoá trị thông thường và được gọi là liên kết hydro.

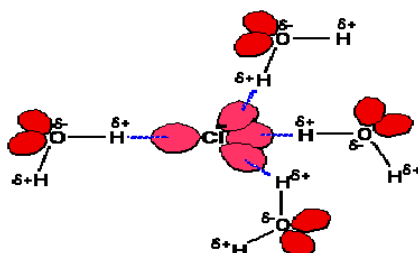
Ví dụ: - Liên kết hydro liên phân tử:



- Sự hình thành liên kết hydro trong nước:



- Sự hình thành liên kết hydro của ClO_4^- với nước:



Các phân tử nước tương tác lẫn nhau thông qua liên kết hiđrô và nhờ vậy có lực hút phân tử lớn. Đây không phải là một liên kết bền vững. Liên kết của các phân tử nước thông qua liên kết hiđrô chỉ tồn tại trong một phần nhỏ của một giây, sau đó các phân tử nước tách ra khỏi liên kết này và liên kết với các phân tử nước khác.

Trong phân tử HF, nguyên tử H sau khi liên kết với nguyên tử F bằng một liên kết cộng hoá trị còn hình thành một liên kết thứ hai (liên kết hiđrô) với nguyên tử F của phân tử HF khác tạo nên phân tử liên hợp (HF)_n.

- Liên kết hydro nội phân tử.

* Nguyên nhân xuất hiện liên kết hydro

Do đặc điểm cấu tạo nguyên tử của hydro là chỉ có một electron duy nhất nên khi nguyên tử hydro liên kết cộng hoá trị với một nguyên tử của nguyên tố có độ âm điện lớn thì mây electron của hydro bị hút lệch mạnh về phía nguyên tử đó và làm nguyên tử hydro bị biến thành hạt tích điện dương mặc khác còn do kích thước của hydro rất nhỏ nên ion hydro dễ dàng tiến gần đến các nguyên tử hay ion khác, thậm chí thâm nhập vào lớp vỏ electron của các nguyên tử hay ion khác để hình thành nên một liên kết hydro.

Năng lượng của liên kết hydro rất bé (khoảng 2 - 10 kcal/mol) nên liên kết hydro kém bền hơn liên kết hoá học thông thường (khoảng hằng trăm kcal/mol).

* Ảnh hưởng của liên kết hydro đến tính chất của các chất

- Làm tăng nhiệt độ nóng chảy, nhiệt độ sôi của các chất do liên kết hydro tạo nên lực hút giữa các phân tử, gây nên sự trùng hợp phân tử làm phân tử lượng trung bình của các chất tăng nên nhiệt độ nóng chảy và nhiệt độ sôi của các chất tăng.

Ví dụ:

Chất	M	T ⁰ _{nc} (°C)	T ⁰ _s (°C)
HF	20	-83	19,5
HCl	36,5	-112	-84,9

- Làm giảm độ điện li, giảm tính axit của các chất.

Ví dụ 1: Trong dãy HX các axit HCl, HBr, HI là các axit mạnh nhưng do trong các phân tử HF có liên kết hydro liên phân tử nên HF là chất điện li yếu và có tính axit trung bình.

- Làm tăng độ tan của các chất: liên kết hydro giữa các phân tử chất tan và dung môi làm độ tan của các chất tăng do dễ hình thành solvat.

Ví dụ 2: Giữa rượu và nước có liên kết hydro nên rượu tan vô hạn trong nước, trong khi ête (ROR) không tan trong nước do giữa ête và nước không có liên kết hiđro. Sự hình thành liên kết hydro liên phân tử cho phép giải thích tính dễ hoà tan của các hợp chất có nhóm phân cực trong những dung môi phân cực như nước, rượu ...

Ngoài ra liên kết hydro liên phân tử còn làm giảm tính bazơ của các chất và gây nên sự biến đổi bất thường về khối lượng riêng.

* Liên kết hydro môi phân tử làm thu gọn các phân tử lại đồng thời làm giảm khả năng tạo liên kết hydro giữa chất với dung môi do đó làm giảm nhiệt độ nóng

chảy, nhiệt độ sôi và độ tan của các chất, liên kết này còn làm giảm tính axit của các chất.

3.5.2. Lực Vanderwaals

Là lực tương tác giữa các phân tử, nó có bản chất tĩnh điện. Lực Vanderwaals càng lớn thì mômen lưỡng cực của phân tử, kích thước và khối lượng của phân tử càng lớn. Lực vanderwaals bé hơn với năng lượng của liên kết ion và liên kết cộng hoá trị nên nó chỉ có ảnh hưởng chủ yếu đến một số tính chất lý học của các chất.

Ví dụ:

Theo dãy F_2 , Cl_2 , Br_2 , I_2 thì kích thước và khối lượng tăng từ đầu đến cuối dãy nên lực vanderwaals tăng dần do đó nhiệt độ sôi và nhiệt độ nóng chảy của các chất này tăng dần.

Lực Vardenwaals bao gồm các thành phần sau:

- * Lực định hướng: khi các phân tử phân cực ở gần nhau chúng tương tác với nhau bằng lực tĩnh điện làm cho các phân tử xoay hướng để sắp xếp một cách có trật tự nhằm làm giảm năng lượng của hệ.

- * Lực cảm ứng: các phân tử phân cực tương tác với các phân tử không phân cực làm xuất hiện lưỡng cực giữa chúng.

- * Lực khuếch tán: các phân tử không phân cực ở gần nhau do chuyển động của các electron làm cho mật độ electron luôn luôn biến đổi nên làm dịch chuyển trọng tâm điện tích dương và âm nên làm xuất hiện các lưỡng cực tạm thời và chúng hút nhau bằng lực hút tĩnh điện.

Lực Vanderwaals gồm $E = E_1 + E_2 + E_3$

Lực Vanderwaals tuy nhỏ nhưng cũng làm cho các phân tử này buộc nhau nên thường ảnh hưởng đến tính chất vật lý của các chất như nhau, nhiệt độ nóng chảy, nhiệt độ sôi...

Câu hỏi và bài tập

1. Theo quy tắc bát tử, hãy biểu diễn liên kết trong các phân tử và ion sau đây: H_2O , NH_3 , NH_4^+ , SO_2 , SO_3 , N_2O_5 , HNO_2 , HNO_3 , H_3PO_3 , H_3PO_4 .
2. Sự phân loại các liên kết dựa vào độ âm điện. Cho ví dụ, nêu các điều kiện và giải thích quá trình hình thành liên kết ion, liên kết cộng hóa trị, liên kết cho nhận.
3. Hãy nêu những luận điểm cơ bản của thuyết liên kết hóa trị (VB).
4. Hãy giải thích hóa trị của các nguyên tố sau: N ($Z = 7$); O ($Z = 8$); F ($Z = 9$); S ($Z = 16$); Cl ($Z = 17$).
5. Cho ví dụ, giải thích đặc điểm của liên kết π và liên kết σ . So sánh, giải thích sự hình thành và độ bền của 2 loại liên kết này.
6. Khái niệm về lai hóa. Đặc điểm của các đám mây lai hóa sp , sp^2 , sp^3 . Cho các ví dụ giải thích về những nguyên tử có sự lai hoá này.
7. Dạng hình học phân tử của các đám mây electron trong các phân tử: H_2 , O_2 , N_2 , BeH_2 , CH_4 , SO_2 , H_2O ? Trong các phân tử đó thì Be, C, S, O có kiểu lai hóa gì.
8. Vẽ giản đồ năng lượng của các phân tử H_2 , H_2^+ , A_2 (thuộc chu kỳ 2)? Viết cấu hình electron dạng MO.
9. Giải thích độ bền liên kết của một số chất sau đây:
 - a. HF, HCl, HBr, HI.
 - b. BeH_2 , MgH_2 .
 - c. NH_3 , PH_3 , AsH_3 .
10. Cho ví dụ về sự hình thành liên kết hiđro. Ứng dụng của liên kết hiđro trong việc giải thích tính tan, nhiệt độ sôi của một số hợp chất.