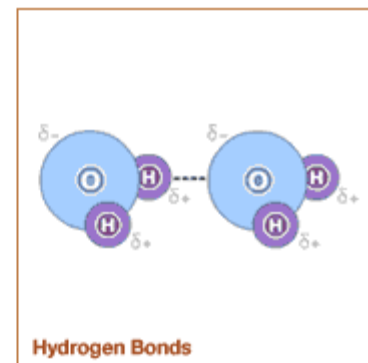
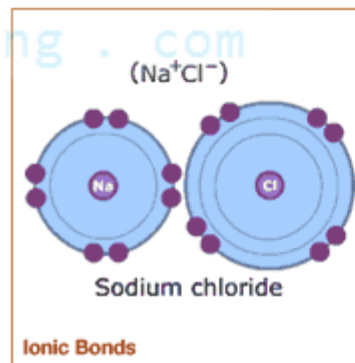
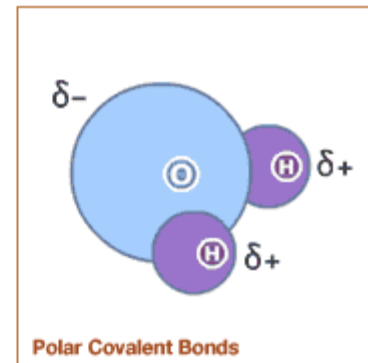
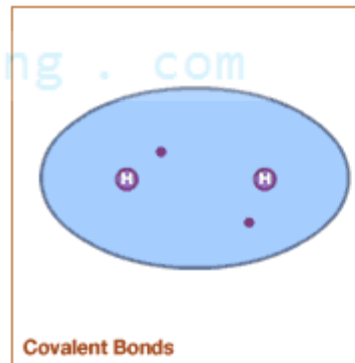


chương III

LIÊN KẾT HÓA HỌC VÀ CẤU TẠO PHÂN TỬ

cuu duong than cong . com

cuu duong than cong . com



I. NHỮNG KHÁI NIỆM CƠ
BẢN VỀ LIÊN KẾT HOÁ HỌC

II. LIÊN KẾT CỘNG HÓA TRỊ

III. LIÊN KẾT ION

IV. LIÊN KẾT KIM LOẠI

V. LIÊN KẾT VAN DER WAALS

VI. LIÊN KẾT HYDRO

I. Các khái niệm cơ bản của liên kết hóa học

1.1. Bản chất của liên kết hóa học (LKHH)

1.2. Hóa trị

1.3. Các đặc trưng cơ bản của liên kết hóa học

➤ Năng lượng liên kết

➤ Độ dài liên kết

➤ Góc hóa trị

➤ Độ bội liên kết

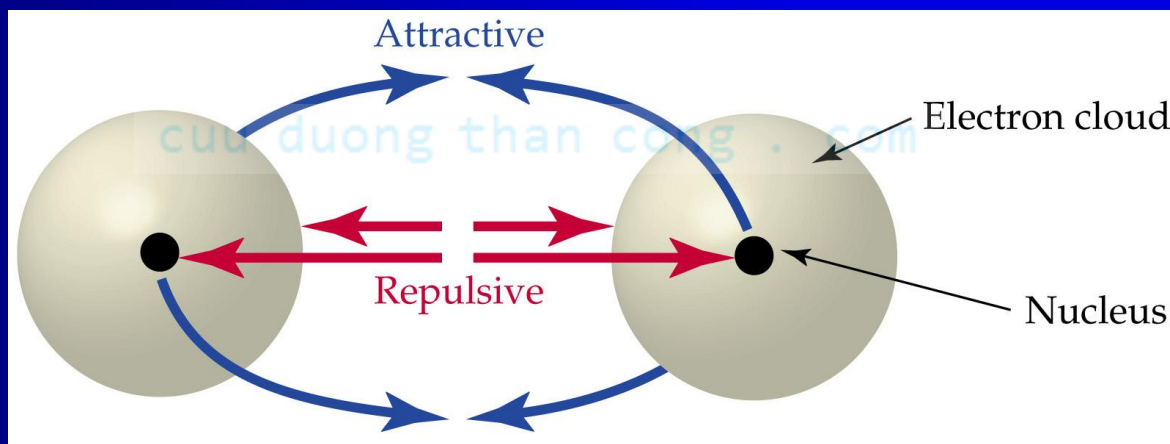
1.4. Thuyết Kossel – Lewis

I. Các khái niệm cơ bản của liên kết hóa học

1.1. Bản chất của liên kết hóa học (LKHH)

- Trong nguyên tử có chứa các hạt mang điện, và xuất hiện lực hút hạt nhân – nguyên tử
- Giữa các nguyên tử cũng sẽ xuất hiện lực đẩy và hút giữa hạt nhân – hạt nhân và hạt nhân – điện tử của nguyên tử kế cận.
- Nguyên tử có khuynh hướng cho, nhận điện tử tạo thành các ion dương và âm, các ion này cũng sẽ hút nhau

→ LKHH có bản chất điện



I. Các khái niệm cơ bản của liên kết hóa học

- Các điện tử ở những phân lớp ngoài cùng như ns, np, (n – 1)d, (n – 2)f gọi là các điện tử hóa trị, chúng có khả năng bứt ra khỏi nguyên tử.
- Các orbital nguyên tử lớp ngoài cùng gọi là orbital nguyên tử hóa trị, chúng có khả năng nhận điện tử.
- Các điện tử độc thân là các điện tử chuyển động một mình trong các orbital nguyên tử hóa trị.

V	$[\text{Ar}]3d^34s^2$		
Cr*	$[\text{Ar}]3d^54s^1$		
Mn	$[\text{Ar}]3d^54s^2$		
Fe	$[\text{Ar}]3d^64s^2$		

1.2. Hóa trị:

Hóa trị của một nguyên tố được định nghĩa là số nguyên tử hydro có thể hóa hợp với nguyên tố này

I. Các khái niệm cơ bản của liên kết hóa học

1.3. Các đặc trưng cơ bản của liên kết hóa học:

- Năng lượng liên kết: là năng lượng giải phóng ra khi hình thành mỗi liên kết hóa học từ những nguyên tử cô lập. Đơn vị tính: kJ/mol, kCal/mol.
- Độ dài liên kết: là khoảng cách tưởng tượng giữa 2 hạt nhân nguyên tử tạo nên liên kết. Đơn vị tính: Å⁰
- Góc hóa trị: Góc tạo thành bởi 2 đoạn thẳng tưởng tượng nối hạt nhân nguyên tử trung tâm với 2 hạt nhân nguyên tử liên kết
- Độ bội liên kết: Là số liên kết được hình thành giữa 2 nguyên tử

Thí dụ:	$\text{CH}_3 - \text{CH}_3$	$\text{CH}_2 = \text{CH}_2$	$\text{CH} \equiv \text{CH}$
Độ dài liên kết	1,54Å ⁰	1,34Å ⁰	1,2Å ⁰
Độ bội liên kết	(1)	(2)	(3)

Table A.4: Bond Energies and Lengths

Bond	Energy/ kJ mol^{-1}	Length/ pm
H-H	450	74
C-C	350	154
C=C	680	134
C $\equiv$ C	960	121
C-H	410	110
C-N	340	147
C=N	660	129
C $\equiv$ N	1000	116
C-O	380	142
C=O	730	121
C $\equiv$ O	1100	113
O-H	460	96
N-H	390	100



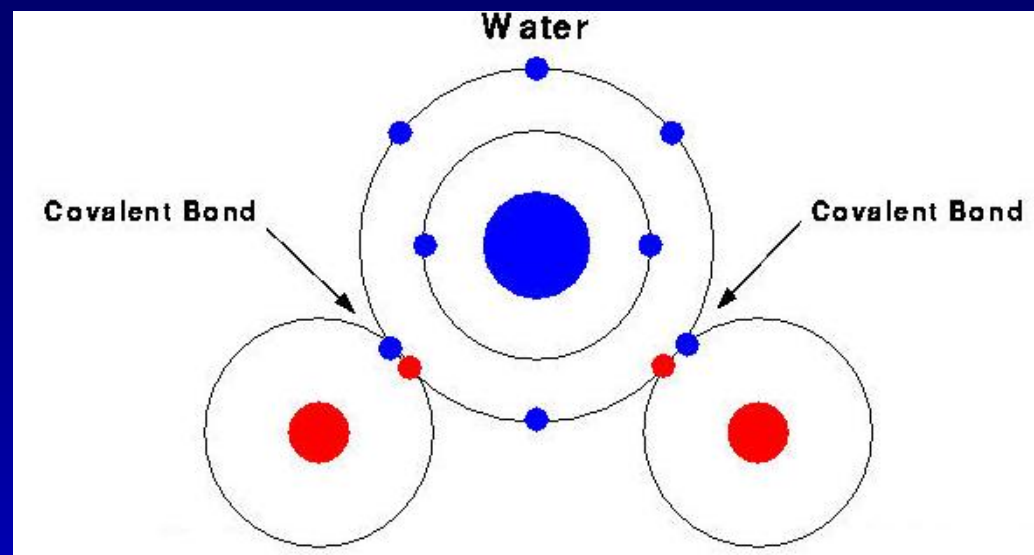
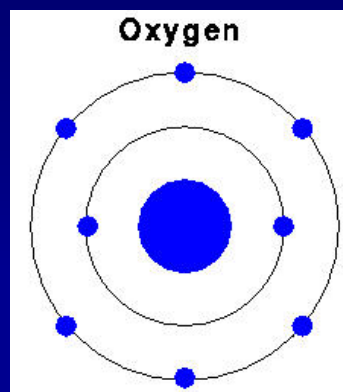
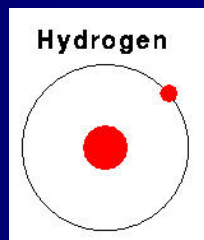
Gilbert Newton Lewis

(October 23, 1875-March 23, 1946)

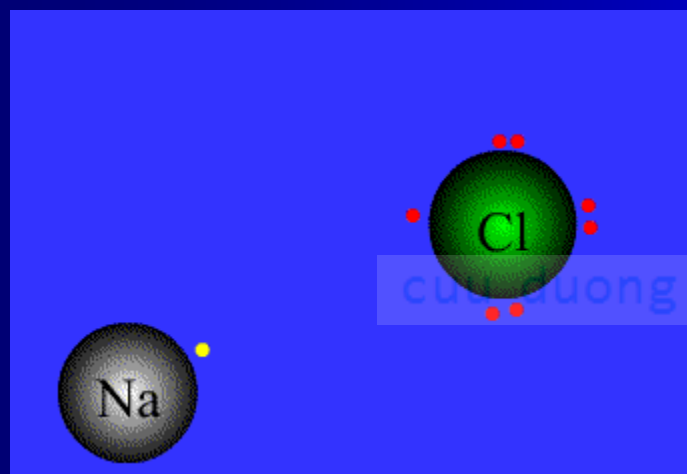
I. Các khái niệm cơ bản của liên kết hóa học

1.4. Thuyết Kossel – Lewis:

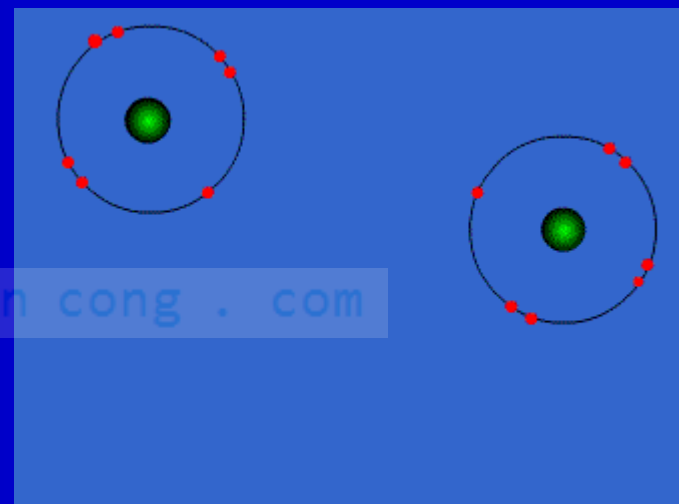
- Một nguyên tử bao giờ cũng cố đạt cấu hình điện tử bền khi tác dụng với các nguyên tử khác, đó là cấu hình bát bộ ns^2np^6 .
- Một nguyên tử có thể đạt cấu hình điện tử bền bằng cách chuyển giao hay tiếp nhận một vài điện tử từ nguyên tử này sang nguyên tử khác.
- Một nguyên tử cũng có thể đạt cấu hình bền bằng cách dùng chung một đôi điện tử với một nguyên tử khác.



cuu duong than cong . com



cuu duong than cong . com



II. Các dạng liên kết

2.1. Liên kết cộng hóa trị

2.1.1. Phương pháp liên kết hóa trị VB -Valence bond

a. Một số tiền đề cơ bản của phương pháp VB:

b. Các kiểu liên kết cộng hóa trị:

c. Tính bão hòa của liên kết cộng hóa trị:

Liên kết cộng hóa trị theo cơ chế góp chung:

Liên kết cộng hóa trị theo cơ chế cho nhận:

d. Tính có hướng của liên kết cộng hóa trị:

Thuyết lai hóa:

f. *Thuyết đẩy của các cặp điện tử lớp hóa trị (Valence Shell electron – pair Repulsion Theory –VSEPR)*

g. *Liên kết cộng hóa trị nhiều tâm liên kết π không định chỗ :*

h. *Bậc liên kết của liên kết cộng hóa trị:*

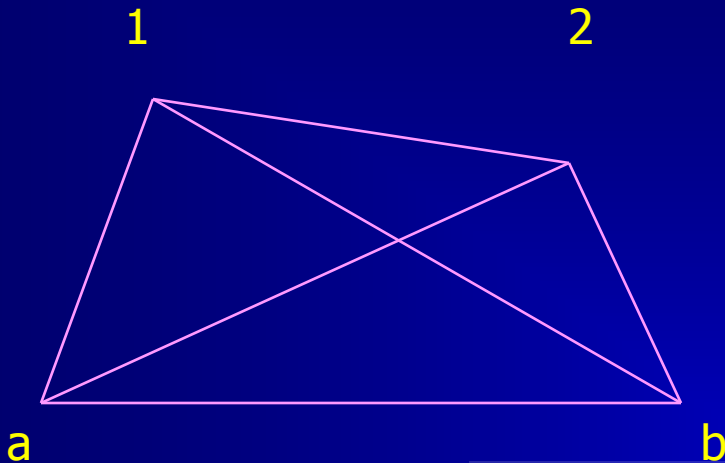
i. *Áp dụng phương pháp VB cho phân tử hay ion AB_n*

j *Ưu điểm của phương pháp VB*

k. *Nhược điểm của phương pháp VB:*

Ví dụ: xét phân tử H_2

Phương trình sóng Schrodinger:



$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - V) \Psi = 0$$

$$V = \frac{e^2}{r_{ab}} + \frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{r_{a1}} - \frac{e^2}{r_{a2}} - \frac{e^2}{r_{b1}} - \frac{e^2}{r_{b2}}$$

- Khi 2 ngử H ở xa nhau vô cùng: $\Psi_{a1} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r_{a1}}$ $\Psi_{b2} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r_{b2}}$

$$\Psi = \Psi_{a1} \Psi_{b2}$$

- Khi 2 ngử H tiến lại gần nhau:

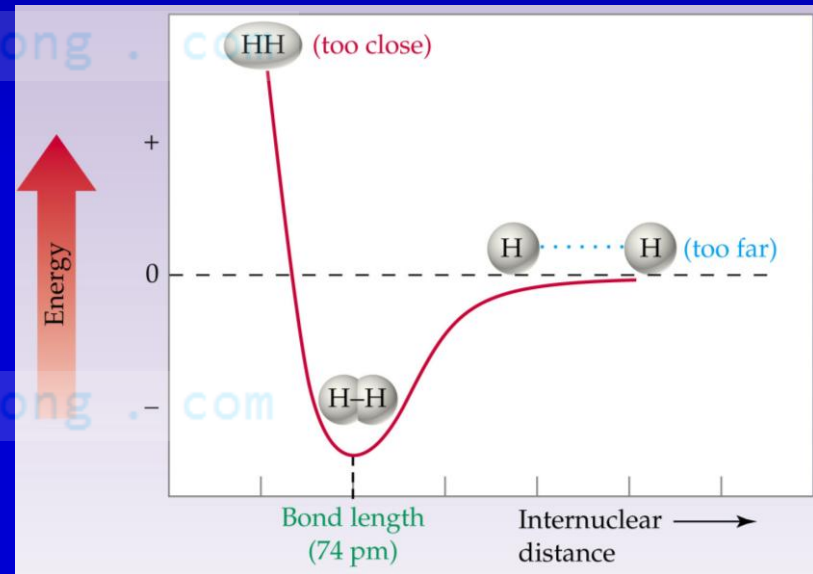
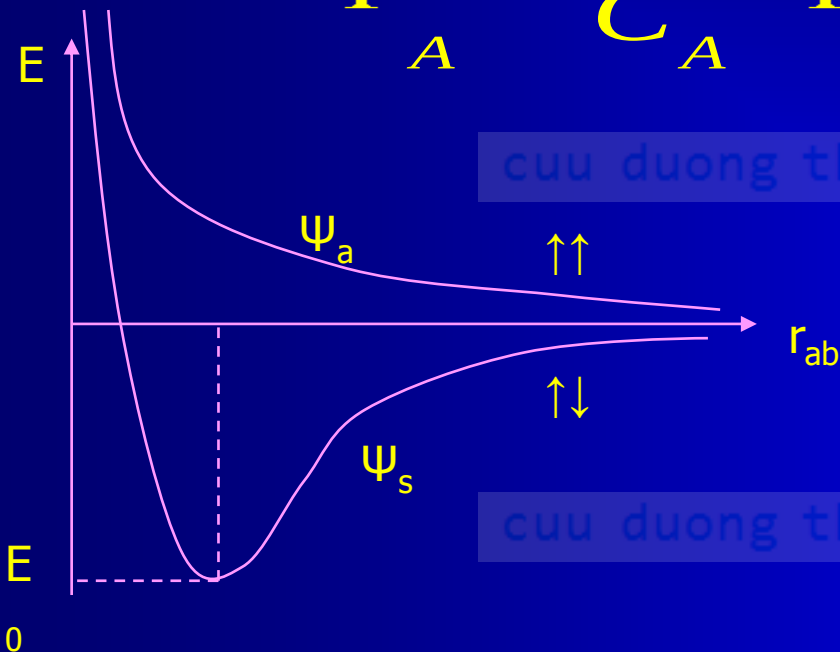
$$\Psi_{H_2} = c_1 \Psi_{a1} \Psi_{b2} + c_2 \Psi_{a2} \Psi_{b1}$$



- Giải pt được 2 nghiệm: $c_1 = c_2 = C_S$ $c_1 = -c_2 = C_A$

$$\Psi_S = C_S (\Psi_{a1} \Psi_{b2} + \Psi_{a2} \Psi_{b1})$$

$$\Psi_A = C_A (\Psi_{a1} \Psi_{b2} - \Psi_{a2} \Psi_{b1})$$



2.1. Liên kết cộng hóa trị

2.1.1. Phương pháp liên kết hóa trị VB -Valence bond

a. Một số tiền đề cơ bản của phương pháp VB:

1. Liên kết cộng hóa trị tạo thành do 2 electron độc thân có spin ngược chiều nhau.
2. Sự xen phủ của 2 orbital nguyên tử tham gia liên kết càng nhiều thì liên kết càng bền.
3. Liên kết được phân bố theo phương tại đó sự xen phủ lẫn nhau giữa các orbital nguyên tử tham gia liên kết là lớn nhất.

II. Các dạng liên kết

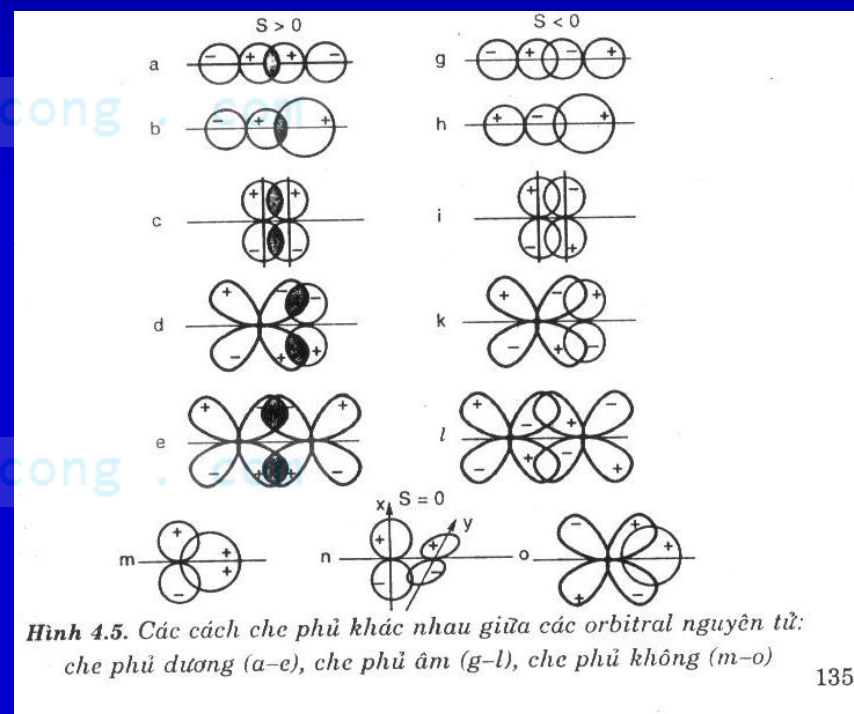
2.1. Liên kết cộng hóa trị

2.1.1. Phương pháp liên kết hóa trị VB -Valence bond

a. Một số tiên đề cơ bản của phương pháp VB:

✓Điều kiện tạo lk cht bền:

- Các AO có năng lượng xấp xỉ nhau
- Các AO có mật độ e đủ lớn
- Các AO có cùng tính định hướng



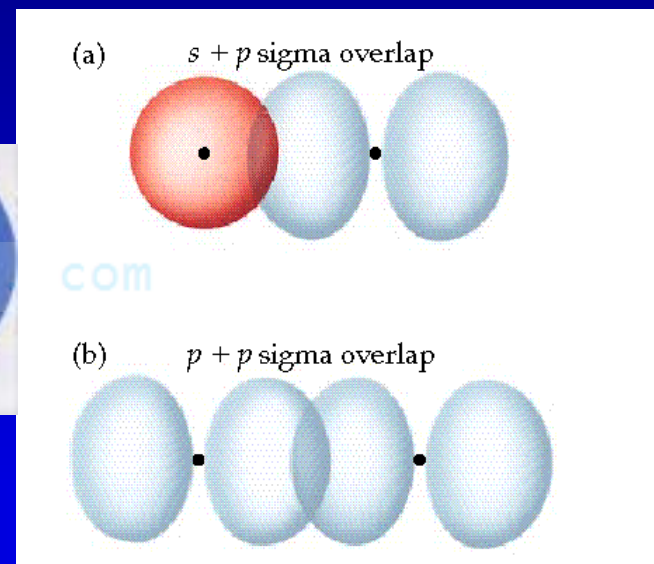
II. Các dạng liên kết

2.1. Liên kết cộng hóa trị

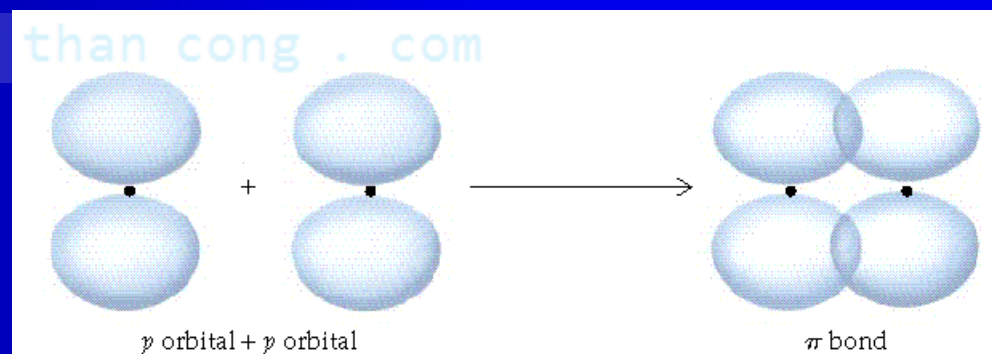
2.1.1. Phương pháp liên kết hóa trị VB -Valence bond

b. Các kiểu liên kết cộng hóa trị:

Liên kết σ : Mỗi xen phủ dọc trục nối 2 hạt nhân nguyên tử liên kết



Liên kết π : Mỗi xen phủ không nằm trên mà nằm đối xứng trục nối 2 hạt nhân nguyên tử liên kết



- Các kiểu liên kết:

✓ Kiểu σ

✓ Kiểu π

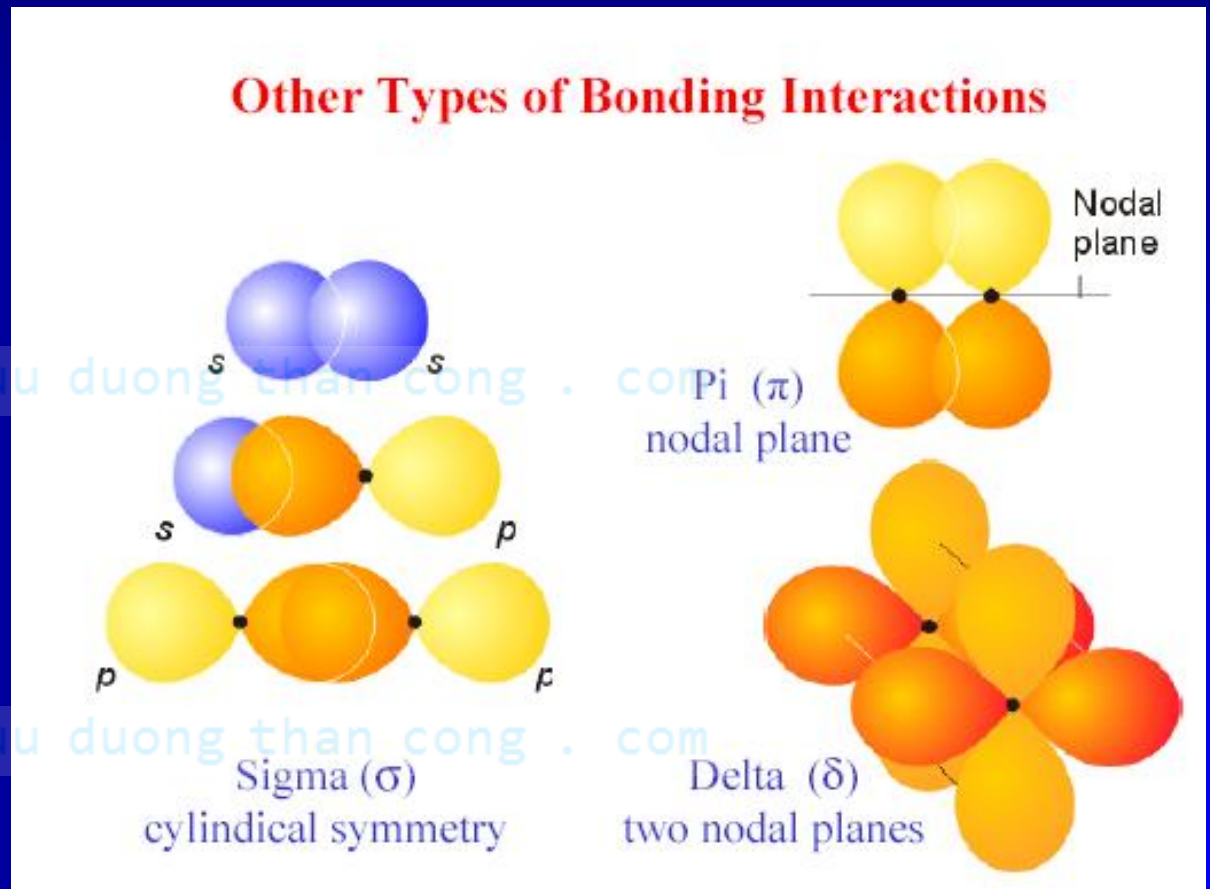
✓ Kiểu δ

- Bậc liên kết:

✓ Bậc 1

✓ Bậc 2

✓ Bậc 3



• Chú ý: các vùng xen phủ phải cùng dấu

II. Các dạng liên kết

2.1. Liên kết cộng hóa trị

2.1.1. Phương pháp liên kết hóa trị VB -Valence bond

c. Tính bão hòa của liên kết cộng hóa trị:

Từ tiên đề (1) (Liên kết cộng hóa trị tạo thành do 2 electron độc thân có spin ngược chiều nhau) ta thấy có 2 cơ chế sử dụng chung các cặp electron ghép đôi:

Liên kết cộng hóa trị theo cơ chế góp chung: do sự góp chung 2 electron hóa trị độc thân có spin ngược nhau của 2 nguyên tử tương tác mỗi nguyên tử đưa ra một electron.

- Nếu 2 nguyên tử có độ âm điện như nhau thì đám mây điện tử sẽ nằm giữa 2 nguyên tử, ta có liên kết cộng hóa trị không phân cực.
- Nếu 2 nguyên tử có độ âm điện khác nhau thì đám mây điện tử sẽ nằm gần nguyên tử nguyên tố có độ âm điện lớn hơn, ta có liên kết cộng hóa trị phân cực.

→ Số mỗi liên kết cộng hóa trị tối đa của một nguyên tử có thể tính bằng số điện tử chưa ghép đôi của nguyên tử ở trạng thái tự do

II. Các dạng liên kết

2.1. Liên kết cộng hóa trị

2.1.1. Phương pháp liên kết hóa trị VB -Valence bond

c. Tính bão hòa của liên kết cộng hóa trị:

Nguyên tố	Số electron độc thân ở trạng thái cơ bản	$X \quad \Delta E \quad X^*$ KJ/mol	Số electron độc thân ở trạng thái kích thích	Số mối LKCHT theo cơ chế ghép đôi tối đa
Li	1	—	—	1
Be	0	324	2	2
B	1	532	3	3
C	2	400	4	4
N	3	—	—	3
O	2	—	0	2
F	1	—	—	1
Ne	0	—	—	0

II. Các dạng liên kết

2.1. Liên kết cộng hóa trị

2.1.1. Phương pháp liên kết hóa trị VB -Valence bond

c. Tính bão hòa của liên kết cộng hóa trị:

Liên kết cộng hóa trị theo cơ chế cho nhận:

Khi 1 nguyên tử có orbital nguyên tử hóa trị trống, nó sẽ nhận cặp điện tử do 1 nguyên tử khác đưa ra để dùng chung tạo thành mối liên kết. Ta gọi đó là liên kết cộng hóa trị kiểu phối trí.

Thí dụ: NH_4

II. Các dạng liên kết

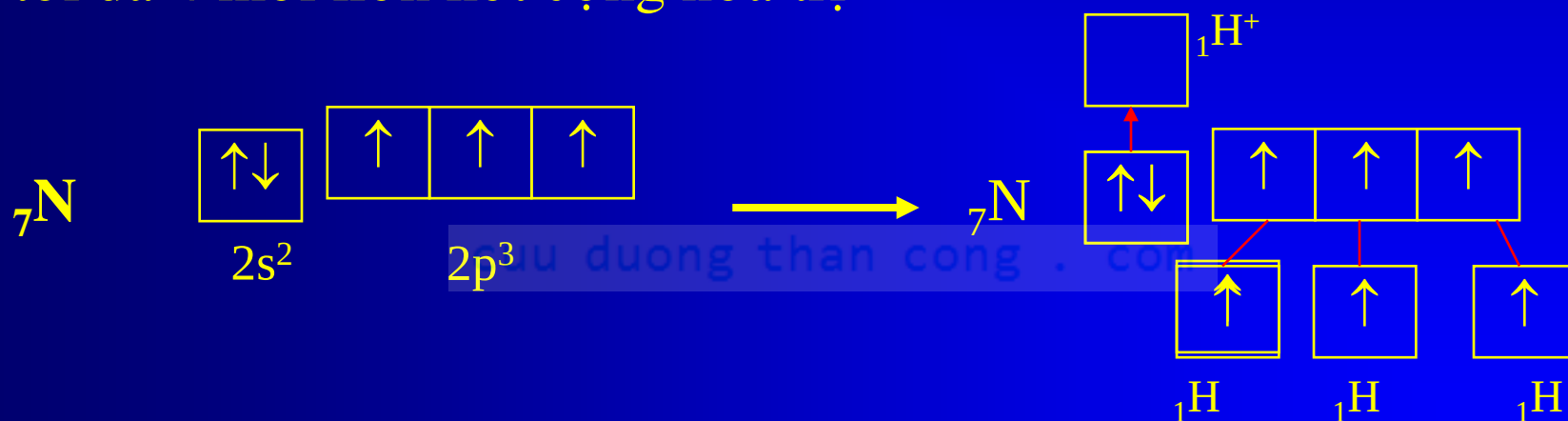
2.1. Liên kết cộng hóa trị

2.1.1. Phương pháp liên kết hóa trị VB -Valence bond

Từ 2 loại liên kết trên ta thấy rằng số mỗi liên kết cộng hóa trị tối đa mà 1 nguyên tử có thể tạo thành bằng số orbital nguyên tử hóa trị của nguyên tử đó

Thí dụ:

Các nguyên tố chu kỳ 2 có 4 orbital nguyên tử hoá trị → Tạo được tối đa 4 mỗi liên kết cộng hóa trị



Các nguyên tố chu kỳ 3 có 9 orbital nguyên tử hoá trị → Tạo được tối đa 9 mỗi liên kết cộng hóa trị

II. Các dạng liên kết

2.1. Liên kết cộng hóa trị

2.1.1. Phương pháp liên kết hóa trị VB -Valence bond

d. Tính có hướng của liên kết cộng hóa trị:

Từ tiên đề (2) và (3)

- (Sự xen phủ của 2 orbital nguyên tử tham gia liên kết càng nhiều thì liên kết càng bền.
- Liên kết được phân bố theo phương tại đó sự xen phủ lẫn nhau giữa các orbital nguyên tử tham gia liên kết là lớn nhất)
- ta thấy muốn tạo mỗi liên kết bền vững thì che phủ phải cực đại. Sự che phủ cực đại giữa 2 nguyên tử chỉ xảy ra theo một số hướng nhất định, chính vì vậy, liên kết cộng hóa trị có tính định hướng.

cuu duong than cong . com

II. Các dạng liên kết

2.1. Liên kết cộng hóa trị

2.1.1. Phương pháp liên kết hóa trị VB - Valence bond

d. Tính có hướng của liên kết cộng hóa trị:

❖ Thuyết lai hóa:



Để có thể tăng khả năng xen phủ, nguyên tử không dùng các orbital nguyên tử thuần túy s, p, d... mà “trộn lẫn” các orbital nguyên tử để tạo nên các orbital nguyên tử mới gọi là orbital nguyên tử lai hóa. Sau đó mới dùng các orbital nguyên tử lai hóa để xen phủ tạo liên kết với nguyên tử khác.



Các giả thuyết của thuyết lai hóa do Pauling và Slater đưa ra (1931) là:

- Nguyên tử trung tâm A dùng các orbital nguyên tử lai hóa để tạo liên kết chứ không dùng các orbital nguyên tử thuần túy.
- Số orbital lai hóa tạo thành bằng với số orbital nguyên tử dùng để lai hóa.



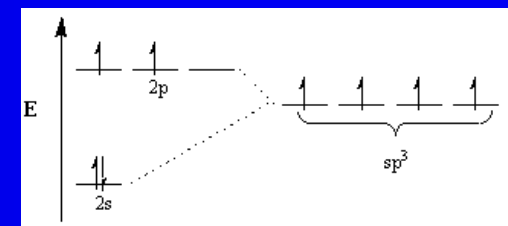
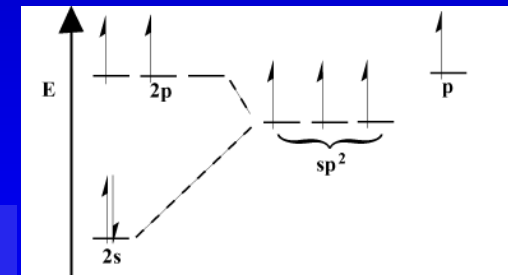
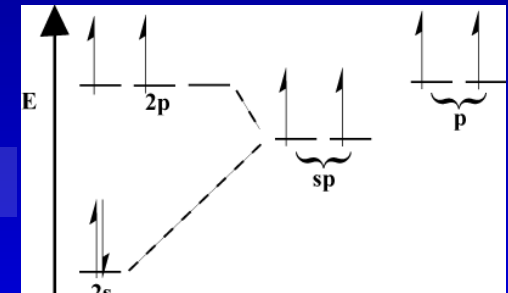
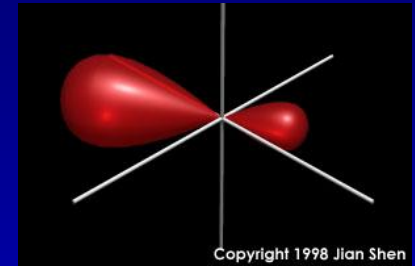
2.1. Liên kết cộng hóa trị 2.1.1. Phương pháp liên kết hóa trị VB

d. Tính có hướng của liên kết cộng hóa trị:

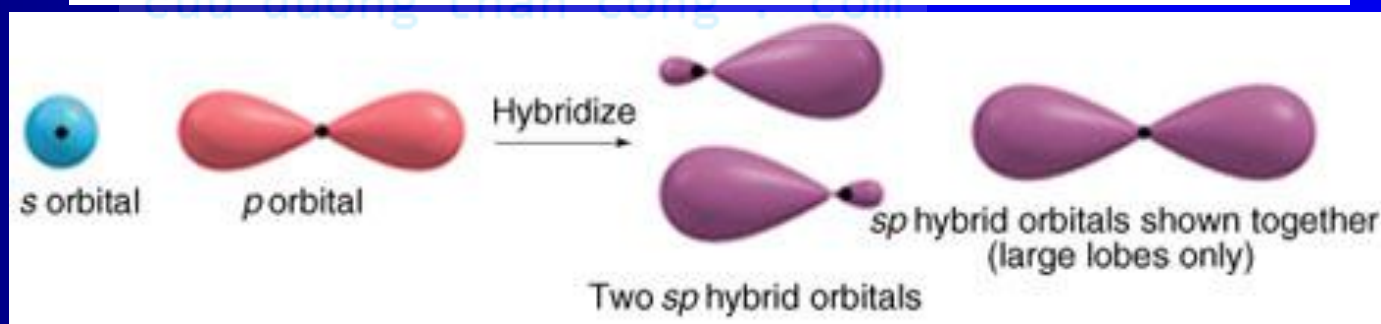
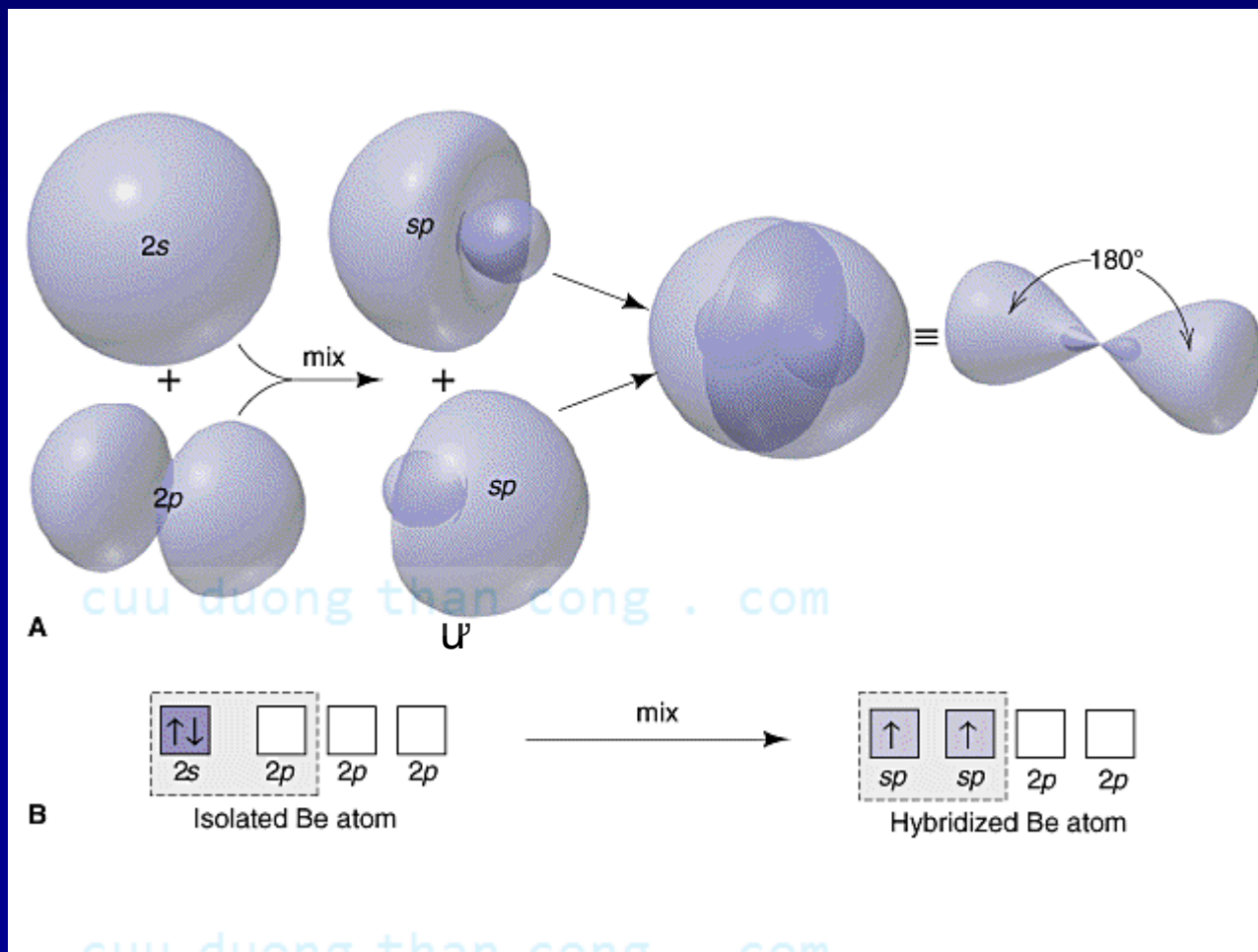
❖ Thuyết lai hóa:

- Hình dạng của các orbital lai hóa giống nhau và có dạng

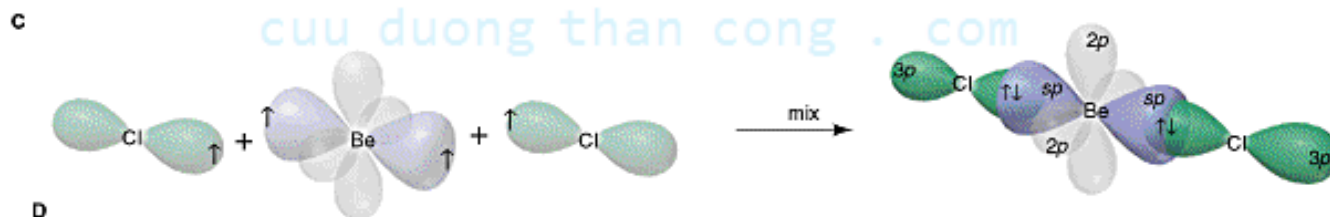
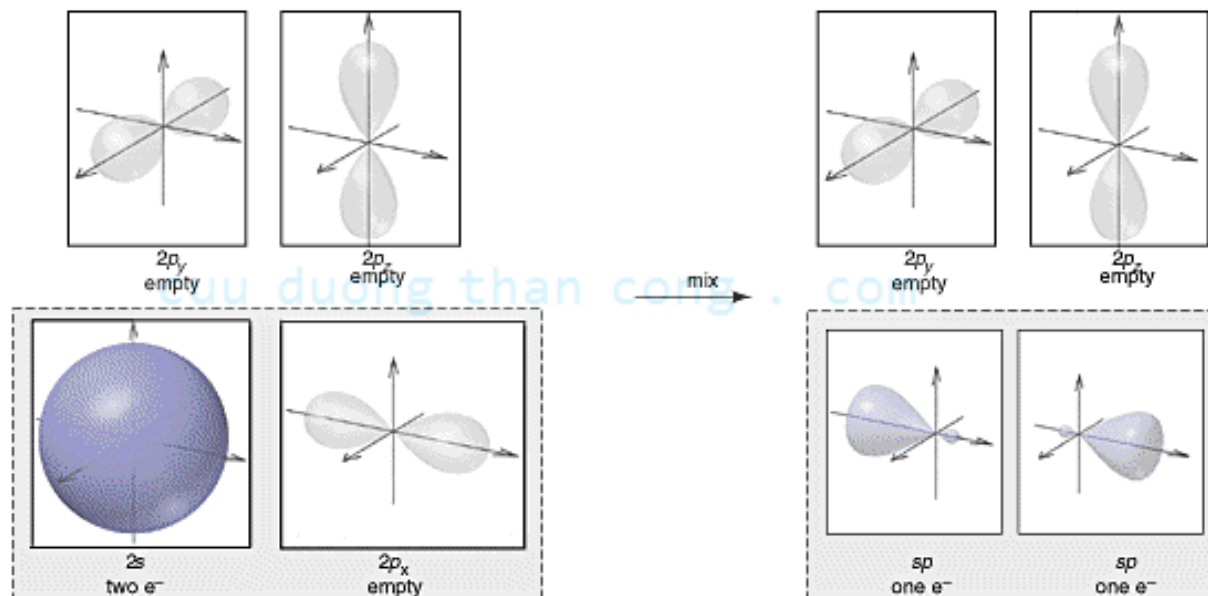
- Các orbital lai hóa có mức năng lượng bằng nhau và trung gian giữa các mức năng lượng của các orbital nguyên tử tham gia lai hóa.
- Các đôi điện tử hóa trị của nguyên tử đang xét và các điện tử dùng chung sắp xếp trên các orbital nguyên tử lai hóa này cũng tuân theo các quy tắc sắp xếp electron của nguyên tử.

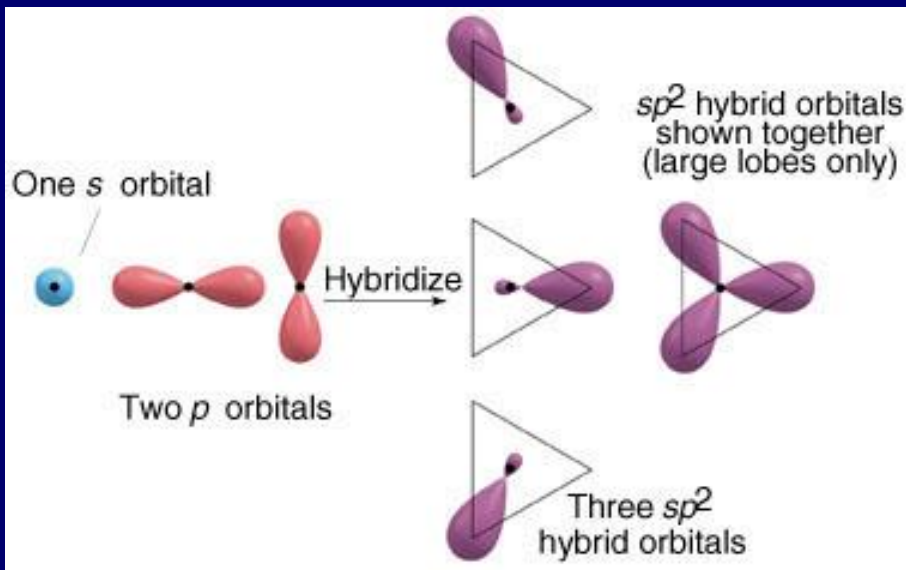


LAI HÓA sp



Phân tử BeCl_2

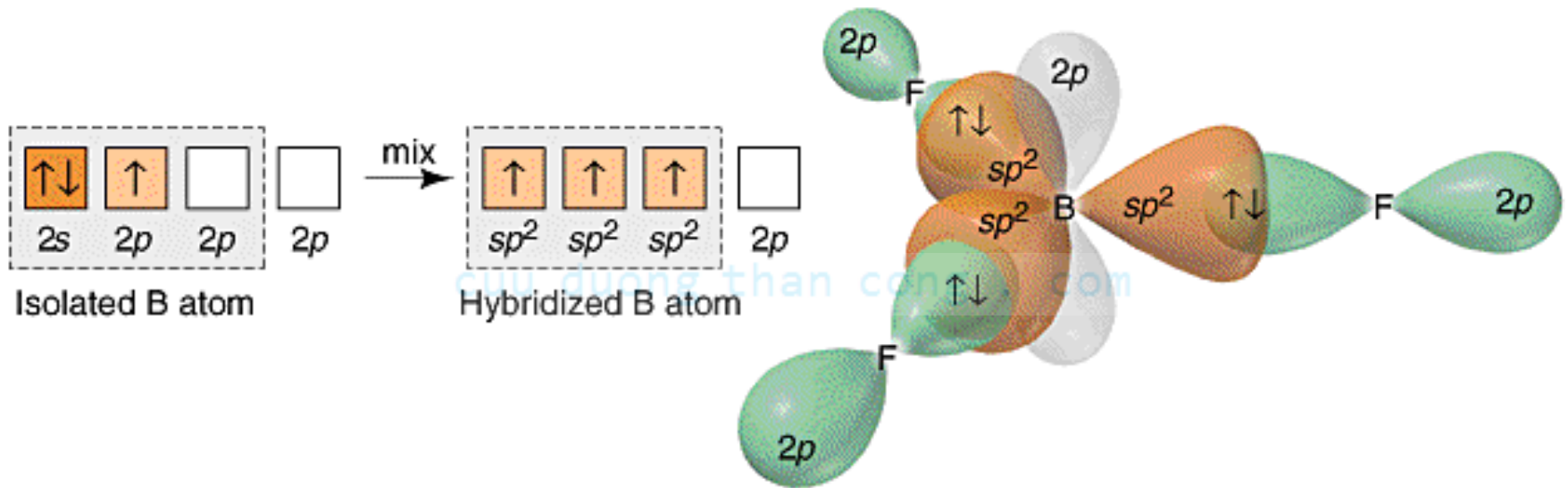




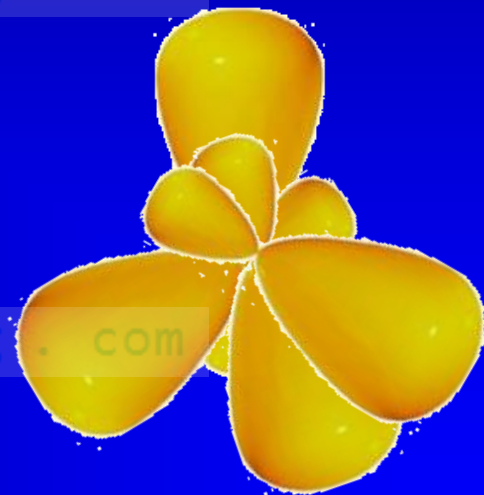
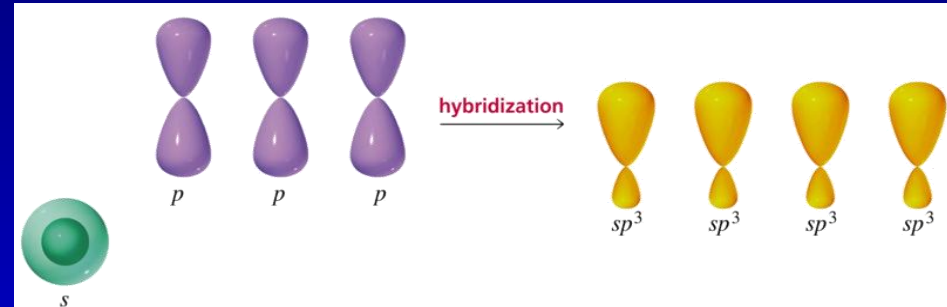
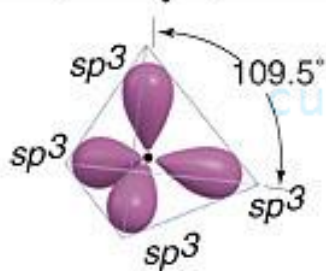
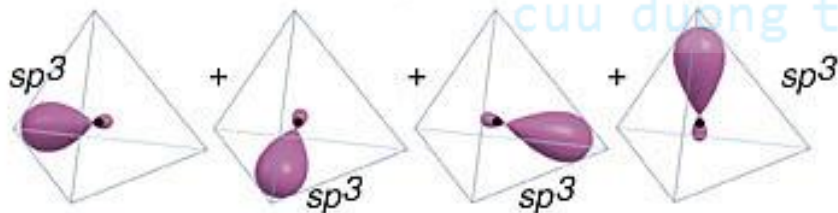
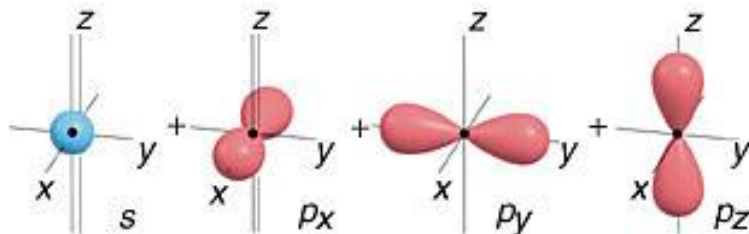
Lai hoá sp^2

Phân tử BCl_3

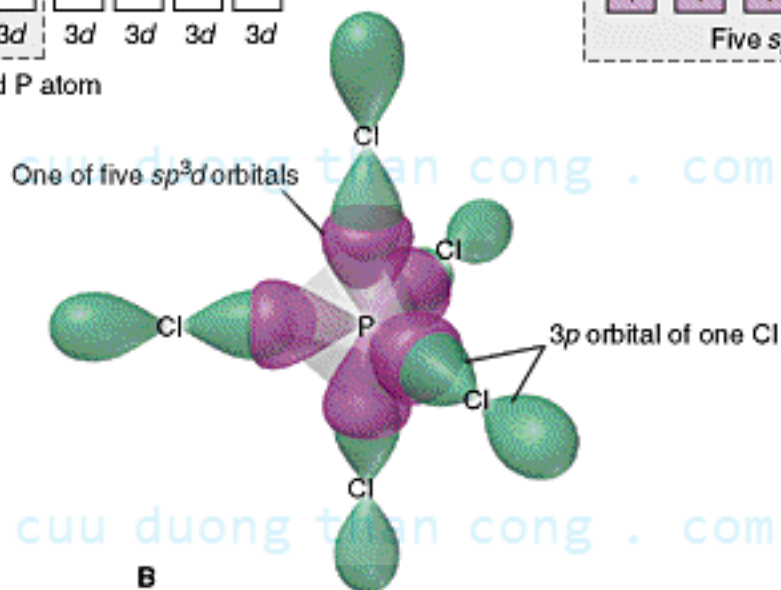
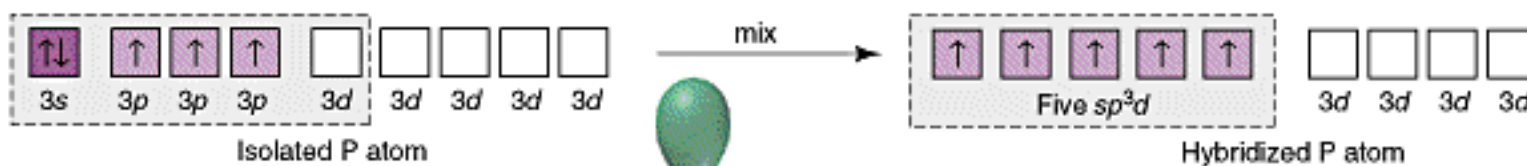
cuu duong than cong . com



Lai hoá sp^3



Lai hoá sp^3d



2.1. Liên kết cộng hóa trị 2.1.1. Phương pháp liên kết hóa trị VB

d. Tính có hướng của liên kết cộng hóa trị:

❖ Thuyết lai hóa:

Để trạng thái lai hóa bền thì phải thoả mãn các điều kiện sau:

- Các orbital nguyên tử tham gia tổ hợp phải có năng lượng xấp xỉ nhau
- Mật độ mây electron của các orbital nguyên tử tham gia lai hóa phải khá lớn
- Mức độ xen phủ của orbital nguyên tử lai hoá với các orbital của nguyên tử tham gia liên kết phải đủ lớn để liên kết hóa học hình thành đủ bền để tồn tại.

2.1. Liên kết cộng hóa trị 2.1.1. Phương pháp liên kết hóa trị VB

d. Tính có hướng của liên kết cộng hóa trị:

❖ Thuyết lai hóa:

Thí dụ:

- Trong một chu kỳ, từ trái qua phải: bán kính nguyên tử tăng, số electron lớp ngoài cùng tăng, chênh lệch năng lượng giữa n_s và n_p tăng $\rightarrow$ khả năng tham gia lai hóa giảm.

Nguyên tố	Li	Be	B	C	N	O	F	Ne
$\Delta E_{2s-2p}(\text{eV})$	1,9	2,8	5,7	8,1	11,4	18,9	22,6	26,8

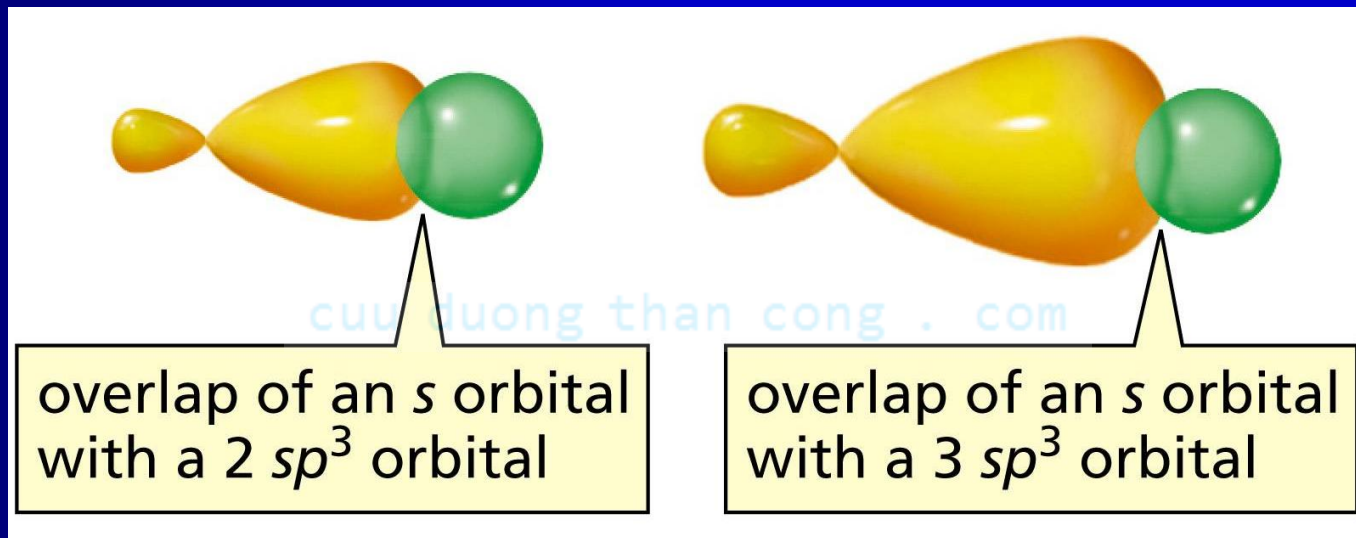
2.1. Liên kết cộng hóa trị 2.1.1. Phương pháp liên kết hóa trị VB

d. Tính có hướng của liên kết cộng hóa trị:

❖ Thuyết lai hóa:

- Trong một phân nhóm chính từ trên xuống dưới: bán kính nguyên tử tăng, số electron ngoài cùng không đổi → mật độ electron giảm → khả năng tham gia lai hóa giảm.

cuu duong than cong . com

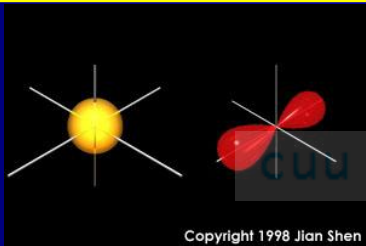
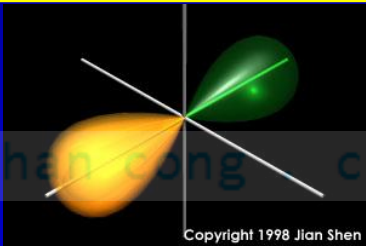
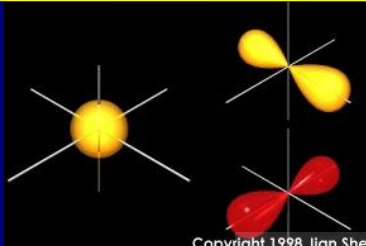
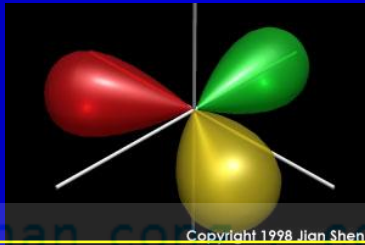
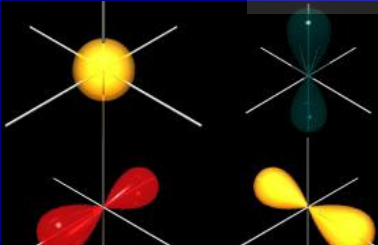


LIÊN KẾT HÓA HỌC VÀ CẤU TẠO PHÂN TỬ II. Các dạng liên kết

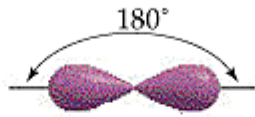
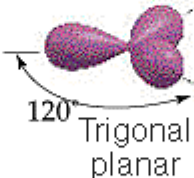
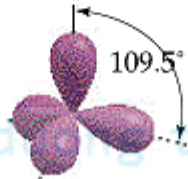
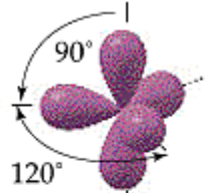
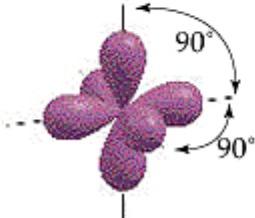
2.1. Liên kết cộng hóa trị 2.1.1. Phương pháp liên kết hóa trị VB

d. Tính có hướng của liên kết cộng hóa trị:

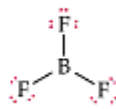
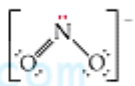
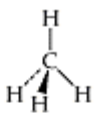
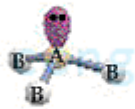
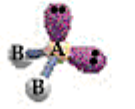
❖ Thuyết lai hóa:

Kiểu lai hóa	Các OA lai hóa	Góc hóa trị	Hình vẽ	Dạng phân tử	Thí dụ
sp	 Copyright 1998 Jian Shen	180	 Copyright 1998 Jian Shen	Đường thẳng	BeH ₂ , CO ₂
sp ²	 Copyright 1998 Jian Shen	120	 Copyright 1998 Jian Shen	Tam giác đều	BF ₃ , SO ₃ , CO ₃ ²⁻
				Góc	SO ₂ , O ₃ , NO ₂ ⁻
sp ³	 Copyright 1998 Jian Shen	109°28'	 Copyright 1998 Jian Shen	Tứ diện đều	CH ₄ , CCl ₄ , NH ₄ ⁺
				Tháp tam giác	NH ₃ , AsF ₃ , SO ₃ ²⁻
				Góc	H ₂ O, OF ₂ , ClO ₂ ⁻

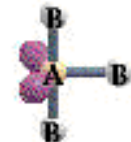
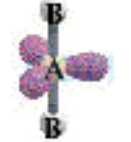
Geometrical Arrangements Characteristic of Hybrid Orbital Sets

Atomic Orbital Set	Hybrid Orbital Set	Geometry	Examples
sp	Two sp	 Linear	BeF_2 , HgCl_2
sp^2	Three sp^2	 Trigonal planar	BF_3 , SO_3
sp^3	Four sp^3	 Tetrahedral	CH_4 , NH_3 , H_2O , NH_4^+
sp^3d	Five sp^3d	 Trigonal bipyramidal	PF_5 , SF_4 , BrF_3 , SbCl_5^{2-}
sp^3d^2	Six sp^3d^2		SF_6 , ClF_5 , XeF_4 , PF_6^-

ELECTRON-PAIR GEOMETRIES AND MOLECULAR SHAPES FOR MOLECULES WITH TWO, THREE, AND FOUR ELECTRON PAIRS ABOUT THE CENTRAL ATOM

Total Electron Pairs	Electron-Pair Geometry	Bonding Pairs	Nonbonding Pairs	Molecular Geometry	Example
2 pairs		2	0	 Linear	$\ddot{\text{O}}=\text{C}=\ddot{\text{O}}$
3 pairs	Linear  Trigonal planar	3	0	  Bent	 
4 pairs	 Tetrahedral	4	0	 Tetrahedral	
		3	1	 Trigonal pyramid	
		2	2	 Bent	

ELECTRON-PAIR GEOMETRIES AND MOLECULAR SHAPES FOR MOLECULES WITH FIVE AND SIX ELECTRON PAIRS ABOUT THE CENTRAL ATOM

Number of Electron Pairs	Electron-Pair Geometry	Bonding Pairs	Nonbonding Pairs	Molecular Geometry	Example
5 pairs	 Trigonal bipyramidal	5	0	 Trigonal bipyramidal	PCl_5
		4	1	 Seesaw	SF_4
		3	2	 T-shaped	ClF_3
		2	3	 Linear	XeF_2

ELECTRON-PAIR GEOMETRIES AND MOLECULAR SHAPES FOR MOLECULES WITH FIVE AND SIX ELECTRON PAIRS ABOUT THE CENTRAL ATOM

Number of Electron Pairs	Electron-Pair Geometry	Bonding Pairs	Nonbonding Pairs	Molecular Geometry	Example
6 pairs	 Octahedral	6	0	 Octahedral	SF_6
		5	1	 Square pyramidal	BrF_5
		4	2	 Square planar	XeF_4

2.1. Liên kết cộng hóa trị 2.1.1. Phương pháp liên kết hóa trị VB

f. Thuyết đẩy của các cặp điện tử lớp hóa trị (Valence Shell electron – pair

Repulsion Theory – VSEPR): do Gillespie và Nyholm hệ thống hóa.

- Sự sắp xếp các liên kết ở xung quanh nguyên tử trung tâm tùy thuộc vào các cặp điện tử ở lớp ngoài cùng (lớp hóa trị) của nguyên tử. Các cặp điện tử này sẽ sắp xếp sao cho lực đẩy lẫn nhau là cực tiểu hay khi các đám mây điện tử cách xa nhau cực đại, nghĩa là chúng hướng về các hướng sao cho góc hóa trị giữa các hướng là lớn nhất.
- Các cặp điện tử này phân thành 2 loại: Các cặp điện tử của riêng nguyên tử trung tâm A gọi là các *cặp điện tử tự do* (Cặp điện tử không liên kết), và loại 2 là các cặp điện tử có tham gia tạo thành liên kết (cho – nhận hay ghép đôi) thuộc về cả 2 nguyên tử A và B gọi là các *cặp điện tử liên kết*. Nếu còn electron độc thân thì ta cũng có thể xem như 1 cặp electron. Lực đẩy của các cặp điện tử giảm theo thứ tự:

cặp tự do – cặp tự do > cặp tự do – cặp liên kết
> cặp liên kết – cặp liên kết > e độc thân

- Độ âm điện nguyên tử trung tâm nhỏ hơn các nguyên tử biên liên kết với nó: cặp điện tử liên kết gần nguyên tử biên hơn → vùng không gian gần nguyên tử trung tâm trống nhiều cặp electron tự do chiếm chỗ gần nguyên tử trung tâm → góc hóa trị giảm nhiều. Ngược lại độ âm điện nguyên tử trung tâm lớn hơn các nguyên tử biên liên kết với nó: cặp điện tử liên kết gần nguyên tử trung tâm hơn → vùng không gian gần nguyên tử trung tâm không nhiều chỗ cho cặp electron tự do “bành trướng” → góc hóa trị giảm ít hơn.

■ Ví dụ: $\text{FNF} = 102^\circ$, $\text{HNH} = 107^\circ$, $\text{FOF} = 103^\circ$, $\text{HOH} = 104^\circ$

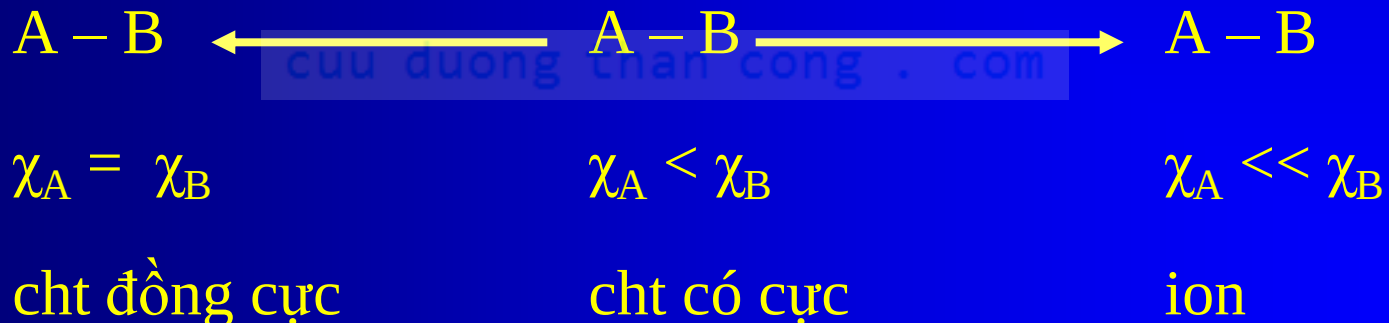
✓ Dự đoán cấu hình không gian của phân tử

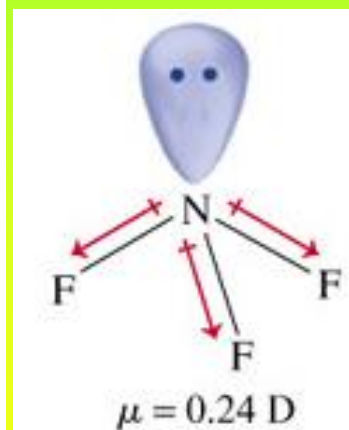
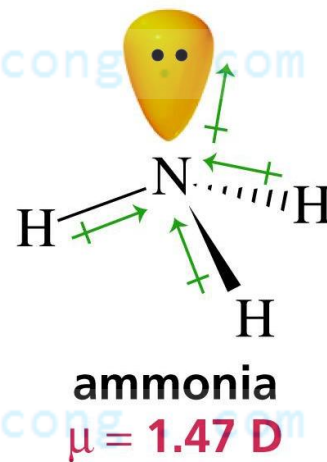
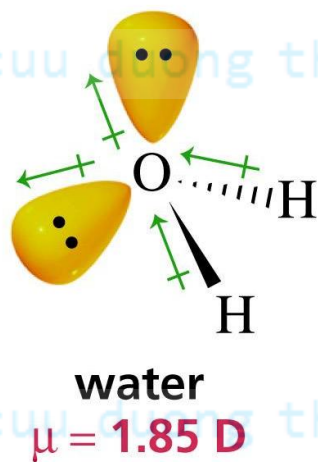
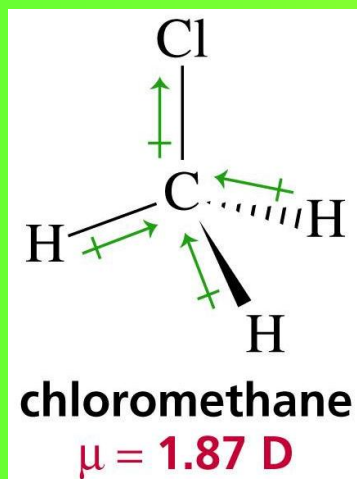
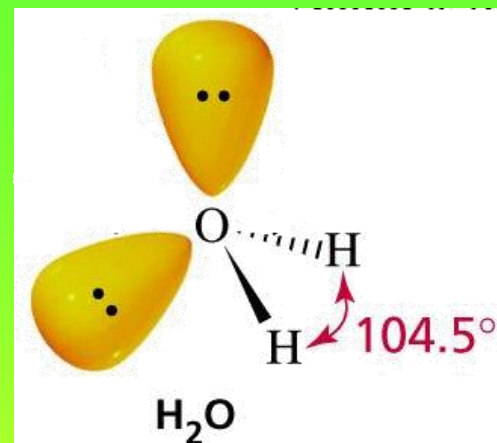
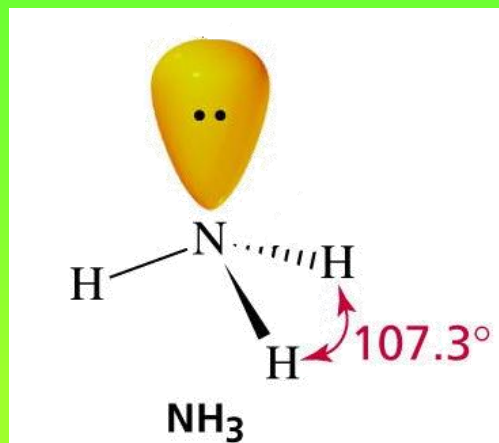
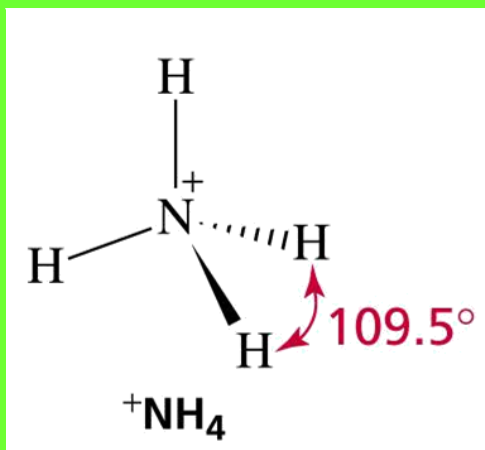
- Đối với các phân tử AB_n không có chứa AOLH tự do: Góc lk = góc LH
- Đối với các phân tử AB_n có AOLH tự do:
 - Hiệu ứng đẩy của $\uparrow\downarrow$ tự do $>$ của $\downarrow\uparrow$ LK $>$ của $\uparrow \rightarrow$ phân tử càng có nhiều $\downarrow\uparrow$ lk, góc lk càng bị thu hẹp
 - Nếu $\chi_A < \chi_B$: Đám mây e nằm lệch về phía B hơn $\rightarrow$ góc dễ bị thu hẹp hơn
 - Nếu $\chi_A > \chi_B$: Đám mây e nằm lệch về phía A hơn $\rightarrow$ góc khó bị thu hẹp hơn

➤ Tính phân cực của liên kết

Đám mây e liên kết phân bố giữa 2 hạt nhân nguyên tử:

- ✓ Khi 2 ngử tương tác giống nhau: liên kết không phân cực
- ✓ Khi 2 ngử tương tác khác nhau: liên kết phân cực.
 - Đám mây e lệch về phía nguyên tử có độ âm điện lớn hơn → nguyên tử phân cực âm
 - Nguyên tử kia sẽ phân cực dương

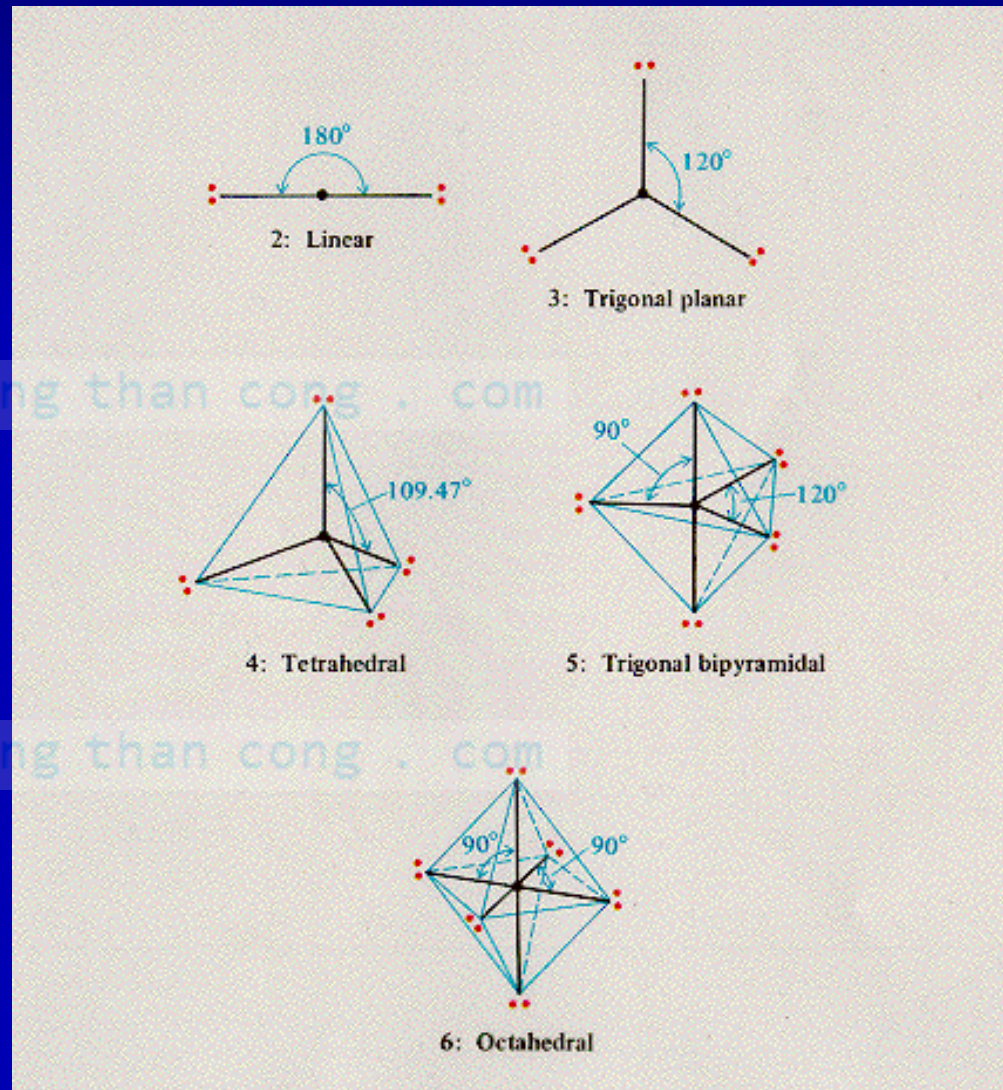




2.1. Liên kết cộng hóa trị 2.1.1. Phương pháp liên kết hóa trị VB

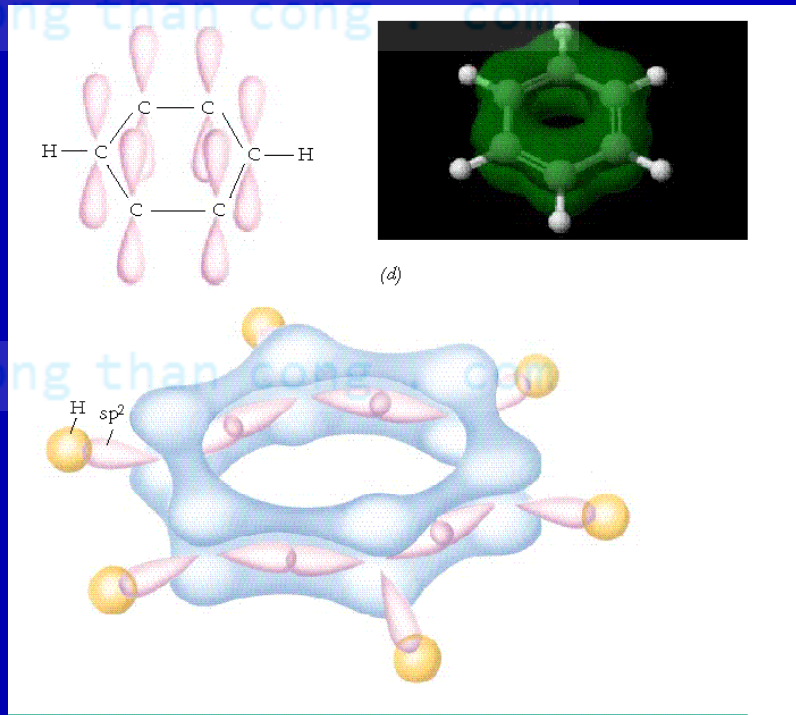
d. Tính có hướng của liên kết cộng hóa trị:

❖ Thuyết lai hóa:



2.1. Liên kết cộng hóa trị 2.1.1. Phương pháp liên kết hóa trị VB

g. *Liên kết cộng hóa trị nhiều tâm liên kết π không định chỗ :
Cặp e tham gia liên kết π không chỉ thuộc về 2 orbital
nguyên tử của 2 nguyên tử đang xét mà phân bố đều cho
mọi orbital nguyên tử cùng hướng của các nguyên tử khác
trong phân tử.*



2.1. Liên kết cộng hóa trị 2.1.1. Phương pháp liên kết hóa trị VB

h. Bậc liên kết của liên kết cộng hóa trị:

Có thể là các số nguyên và là các số lẻ.

Bậc liên kết = tổng số cặp electron liên kết/số mỗi liên kết σ

Dự đoán lai hóa của nguyên tử trung tâm.

Có 2 cách để dự đoán:

- Dựa vào góc hóa trị của phân tử: Nếu ta có thể xác định được góc BAB thì góc hóa trị gần với góc hoá trị của dạng lai hóa nào, nguyên tử A sẽ lai hóa theo dạng đó
- Dựa vào tổng số (T) các liên kết σ (liên kết chắc chắn phải có khi 2 nguyên tử liên kết với nhau) của nguyên tử trung tâm với các nguyên tử xung quanh và số cặp electron tự do ở nguyên tử trung tâm (áp dụng cho phân tử hay ion có dạng AB_n). Các bước tiến hành như sau:
 - ❖ Tính tổng số electron hóa trị của các nguyên tử trong phân tử (X)
 - ❖ Tính số electron tối đa mà các nguyên tử biên phải có để đạt cấu hình electron bền (Y) (8 electron cho mỗi nguyên tử biên nói chung và 2 electron khi nguyên tử biên là Hydro)
 - ❖ Tính số cặp electron hóa trị tự do của nguyên tử trung tâm không tham gia tạo liên kết $(X - Y)/2$
 - ❖ Tính số cặp electron hóa trị của nguyên tử trung tâm
$$T = \text{số liên kết } \sigma + (X - Y)/2$$
$$T = 2: \text{ lai hóa } sp, T = 3: \text{ lai hóa } sp^2, T = 4: \text{ lai hóa } sp^3$$

Bảng 4.1. Mối quan hệ giữa số liên kết σ , số cặp electron hóa trị tự do và kiểu lai hóa của nguyên tử trung tâm

Số liên kết σ	Số cặp electron hóa trị tự do	Tổng số T	Kiểu lai hóa	Ví dụ
2	0	2	sp	$\text{CO}_2, \text{BO}_2^-, \text{NO}_2^+$
3	0	3	sp ²	$\text{BF}_3, \text{SO}_3, \text{CO}_3^{2-}$
2	1	3		$\text{SO}_2, \text{O}_3, \text{NO}_2^-$
4	0	4	sp ³	$\text{CCl}_4, \text{NH}_4^+, \text{SO}_4^{2-}$
3	1	4		$\text{NH}_3, \text{AsF}_3, \text{SO}_3^{2-}$
2	2	4		$\text{H}_2\text{O}, \text{HOF}, \text{ClO}_2^-$
5	0	5	sp ^{3d}	$\text{AsF}_5, \text{PCl}_5$
4	1	5		$\text{SF}_4, \text{TeCl}_4$
3	2	5		$\text{ClF}_3, \text{XeOF}_2$
2	3	5		$\text{XeF}_2, [\text{IBr}_2]^-$
6	0	6	sp ^{3d²}	$\text{SF}_6, [\text{AsF}_6]^-$
5	1	6		$\text{BrF}_5, [\text{SbF}_5]^{2-}$
4	2	6		$\text{XeF}_4, [\text{ICl}_4]^-$

Bảng 4.2. Kết quả tính toán số cặp electron hóa trị tự do của nguyên tử trung tâm trong một số phân tử và ion

Phân tử ion	Nguyên tử trung tâm	X	Y	X - Y	Số cặp electron hóa trị tự do
CO ₂	C	4 + (2 × 6)	2 × 8	0	0
NO ₂ ⁺	N	5 + (2 × 6) - 1	2 × 8	0	0
BF ₃	B	3 + (3 × 7)	3 × 8	0	0
CO ₃ ²⁻	C	4 + (3 × 6) + 2	3 × 8	0	0
CCl ₄	C	4 + (4 × 7)	4 × 8	0	0
NH ₄ ⁺	N	5 + (4 × 1) - 1	4 × 2	0	0
PCl ₅	P	5 + (5 × 7)	5 × 8	0	0
[AsF ₆] ⁻	As	5 + (6 × 7) + 1	6 × 8	0	0
SO ₂	S	3 × 6	2 × 8	2	1
NO ₂ ⁻	N	5 + (2 × 6) + 1	2 × 8	2	1
SOCl ₂	S	(2 × 6) + (2 × 7)	3 × 8	2	1
SO ₃ ²⁻	S	(4 × 6) + 2	3 × 8	2	1
SF ₄	S	6 + (4 × 7)	4 × 8	2	1
TeCl ₄	Te	6 + (4 × 7)	4 × 8	2	1
BrF ₅	Br	6 × 7	5 × 8	2	1
[SbF ₅] ²⁻	Sb	5 + (5 × 7) + 2	5 × 8	2	1
H ₂ O	O	2 + 6	2 × 2	4	2
ClF ₃	Cl	4 × 7	3 × 8	4	2
XeOF ₂	Xe	8 + 6 + (2 × 7)	3 × 8	4	2
XeF ₄	Xe	8 + (4 × 7)	4 × 8	4	2
[ICl ₄] ⁻	I	(5 × 7) + 1	4 × 8	4	2
XeF ₂	Xe	8 + (2 × 7)	2 × 8	6	3
[IBr ₂] ⁻	I	(3 × 7) + 1	2 × 8	6	3

2.1. Liên kết cộng hóa trị

2.1.1. Phương pháp liên kết hóa trị VB -Valence bond

j. Ưu điểm của phương pháp VB:

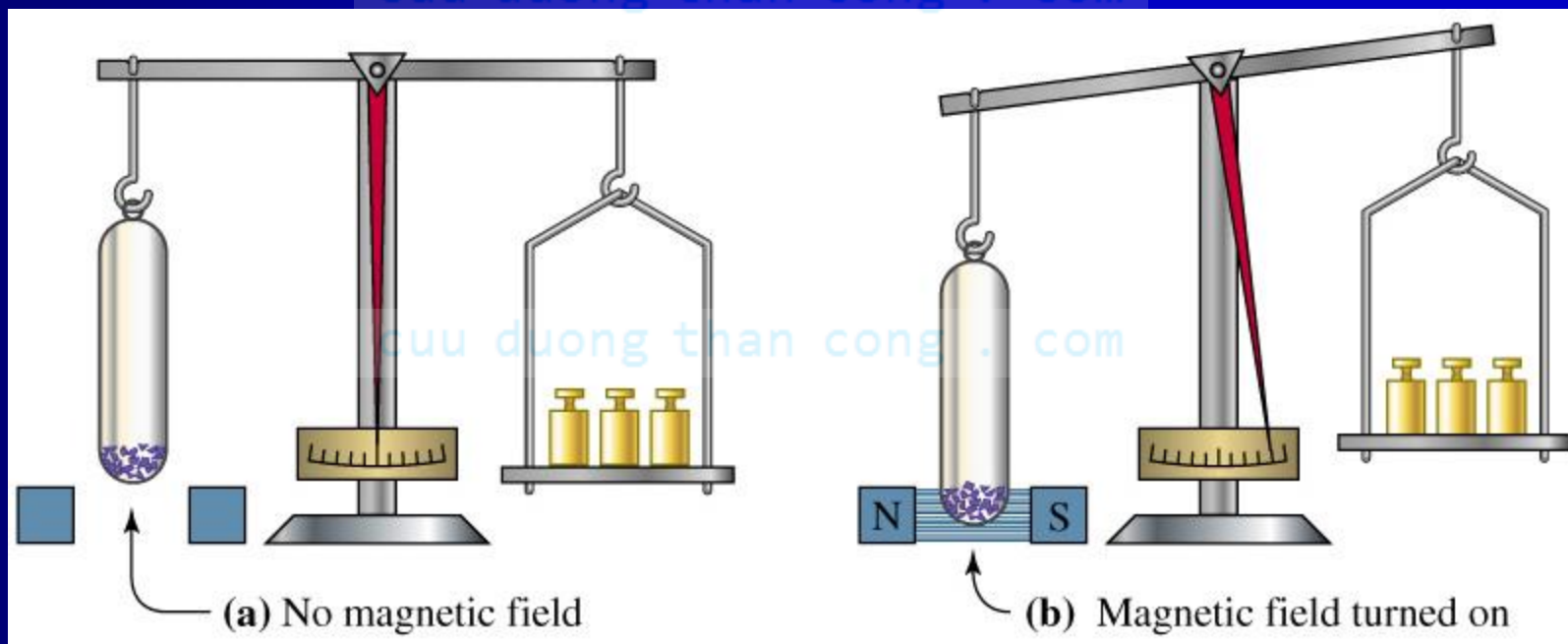
Giải quyết được một số vấn đề của liên kết cộng hóa trị như:

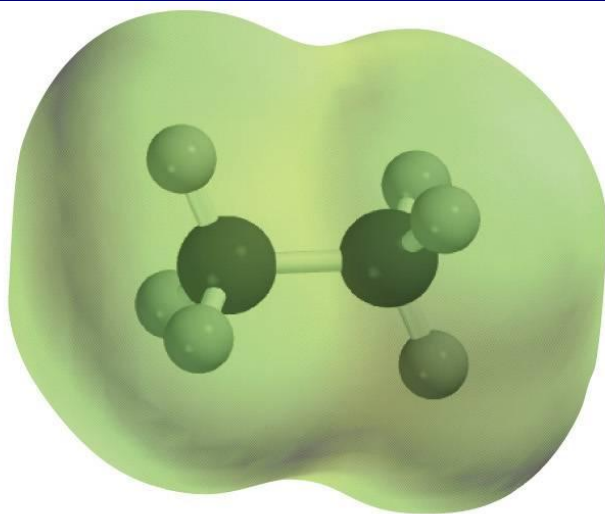
- **Khả năng tạo liên kết**
- **Các đặc trưng của liên kết.**
- **Giải thích được cấu trúc và tính chất của nhiều phân tử.**
- **Dễ hình dung**

cuu duong than cong . com

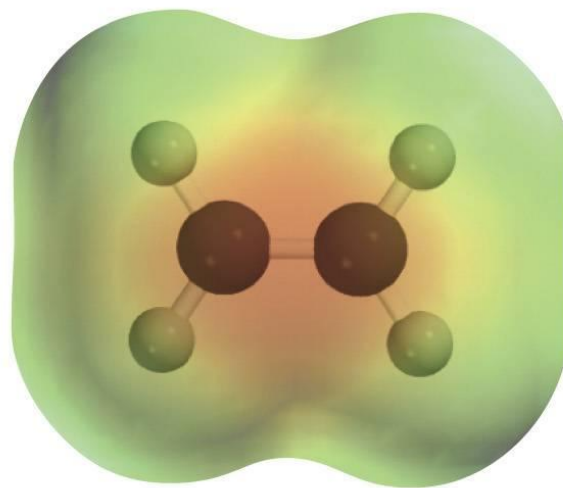
2.1. Liên kết cộng hóa trị2.1.1. Phương pháp liên kết hóa trị VB -Valence bond*k. Nhược điểm của phương pháp VB:*

Chưa được tổng quát, có những hiện tượng thực nghiệm không thể giải thích được bằng phương pháp này như tính thuận từ của một số phân tử, sự tồn tại khá bền của ion phân tử H_2^+ , vấn đề về màu sắc của một số chất...

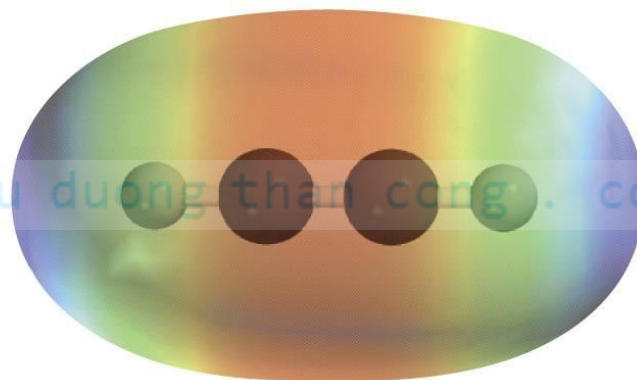




Ethane



Ethene

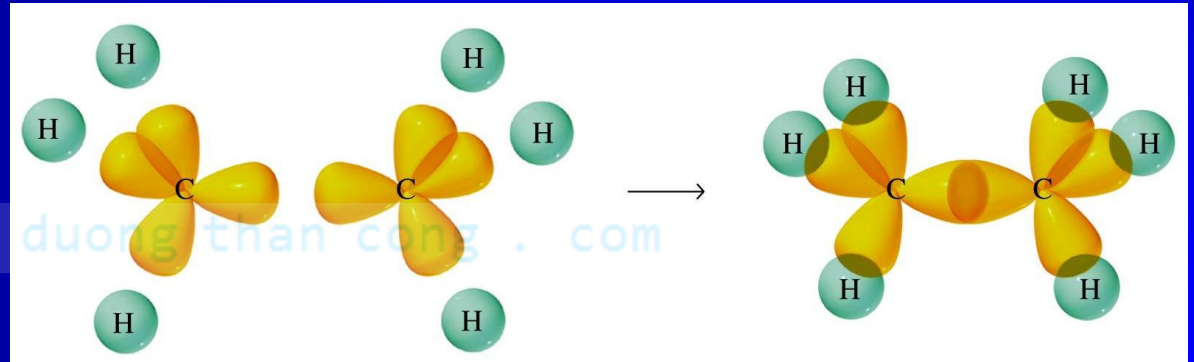
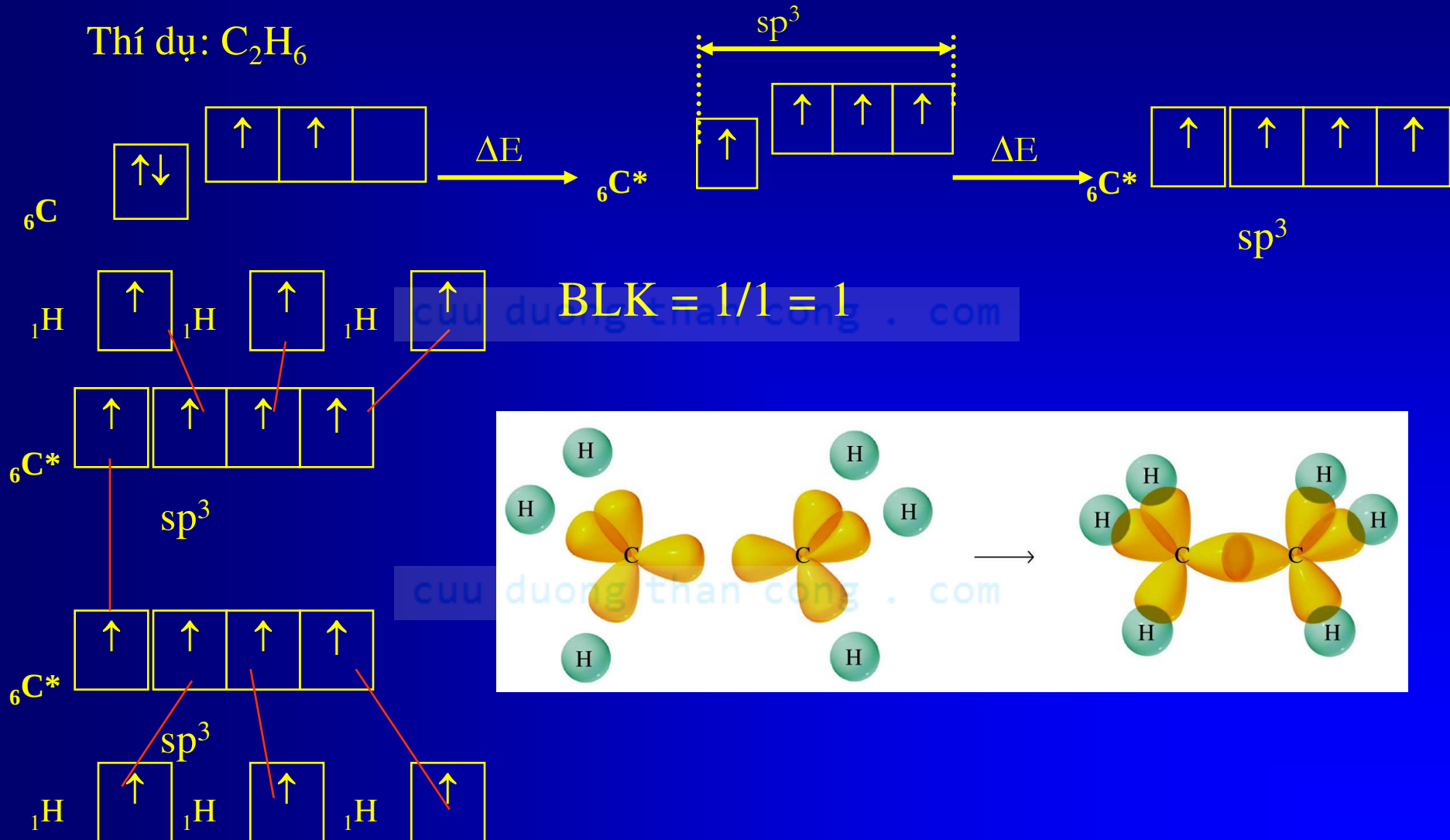


Ethyne

2.1. Liên kết cộng hóa trị

2.1.1. Phương pháp liên kết hóa trị VB -Valence bond

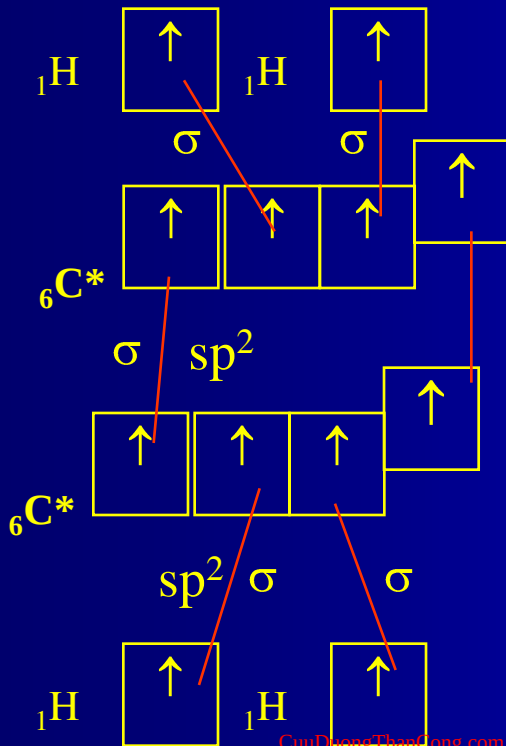
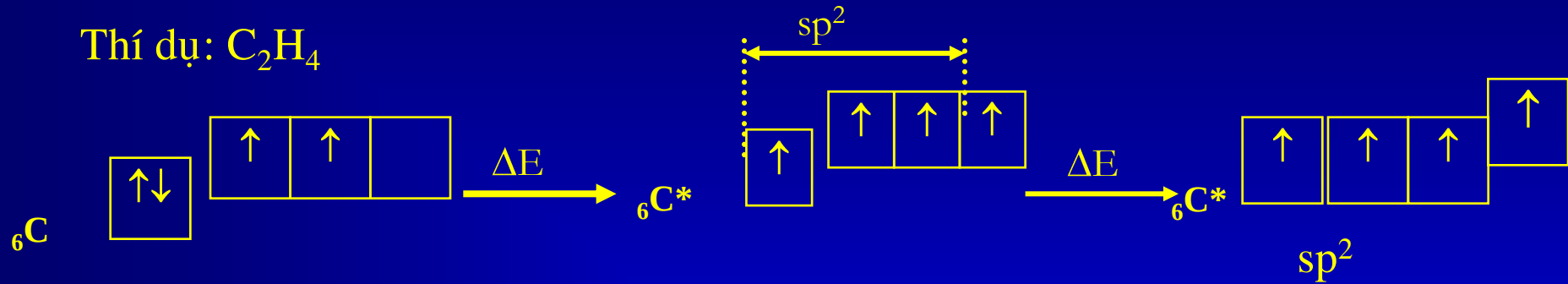
Thí dụ: C_2H_6



2.1. Liên kết cộng hóa trị

2.1.1. Phương pháp liên kết hóa trị VB -Valence bond

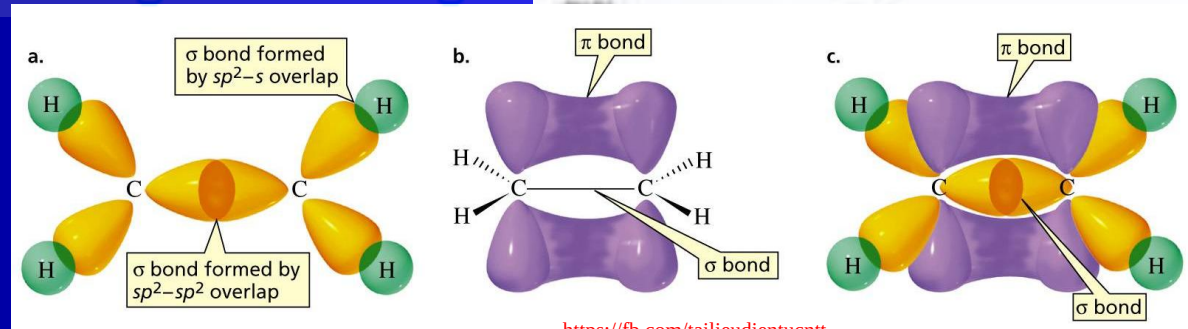
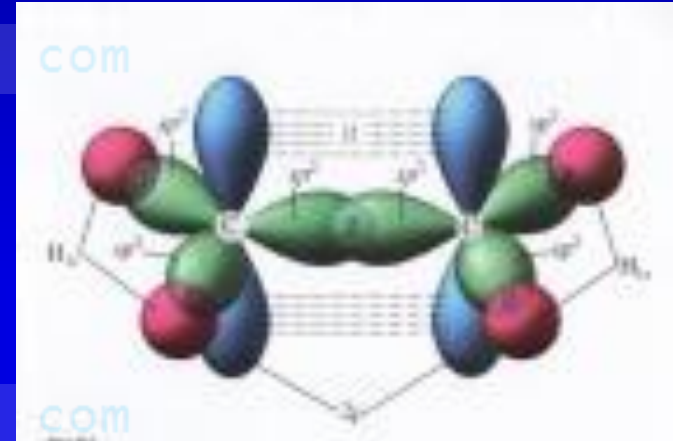
Thí dụ: C_2H_4



cuu duong than cong . com

$$BLK = 2/1 = 2$$

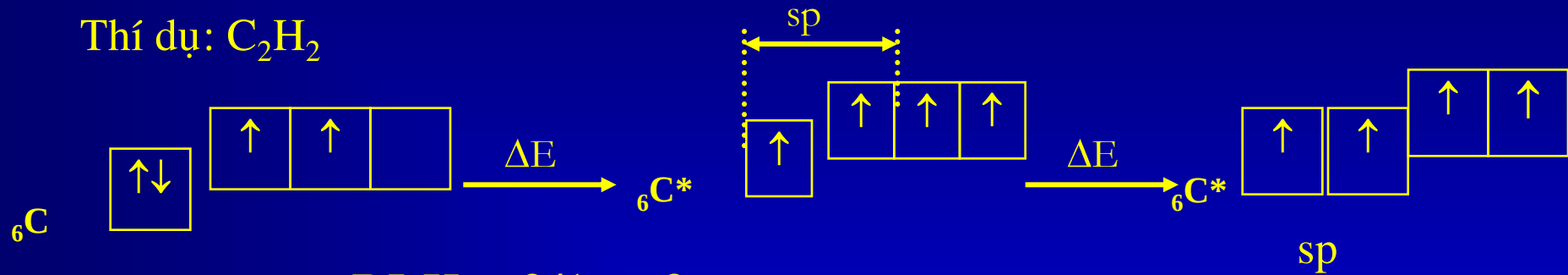
cuu duong than cong . com



2.1. Liên kết cộng hóa trị

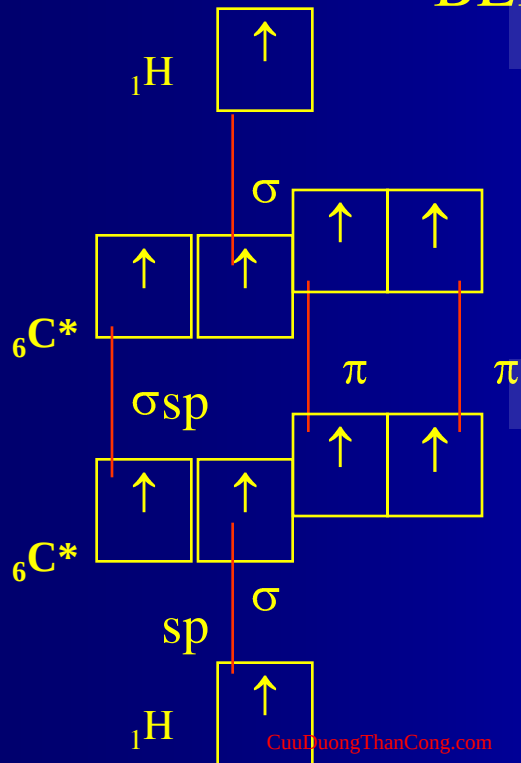
2.1.1. Phương pháp liên kết hóa trị VB - Valence bond

Thí dụ: C_2H_2

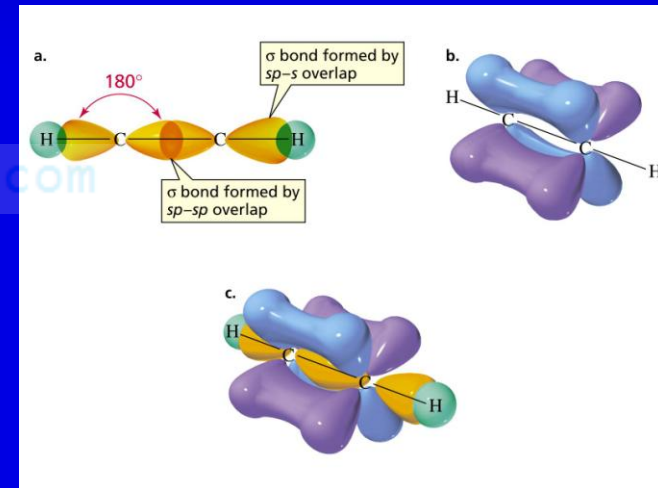


$$BLK = 3/1 = 3$$

cuu duong than cong . com



CuuDuongThanCong.com

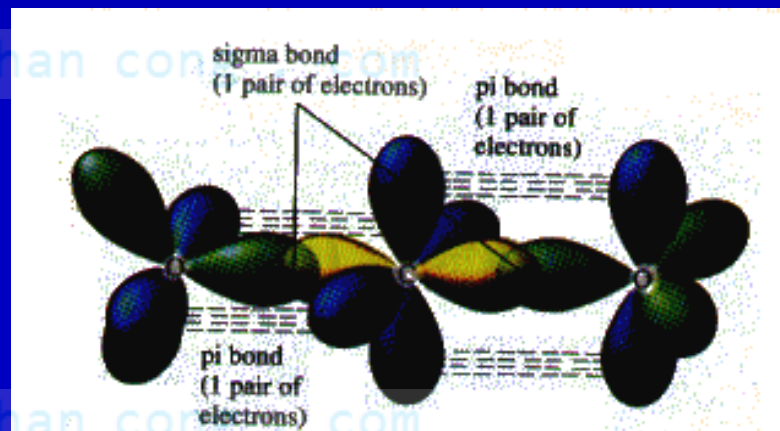
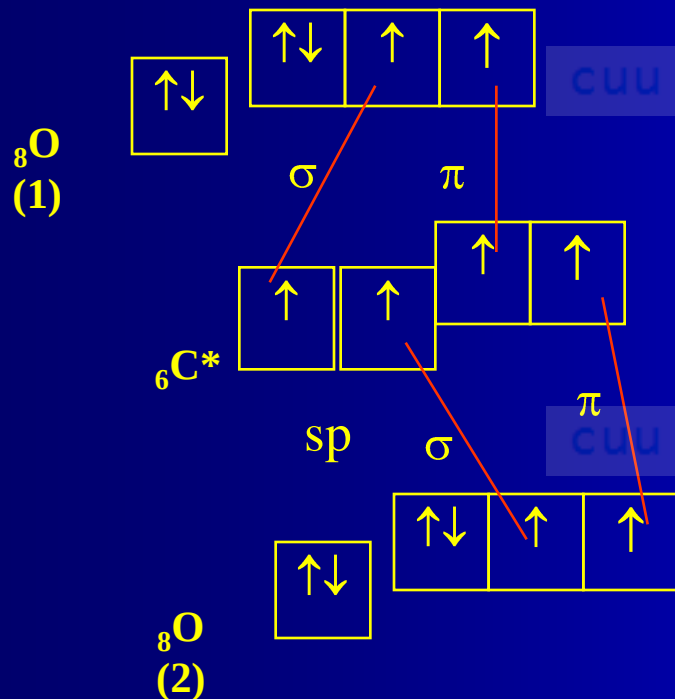
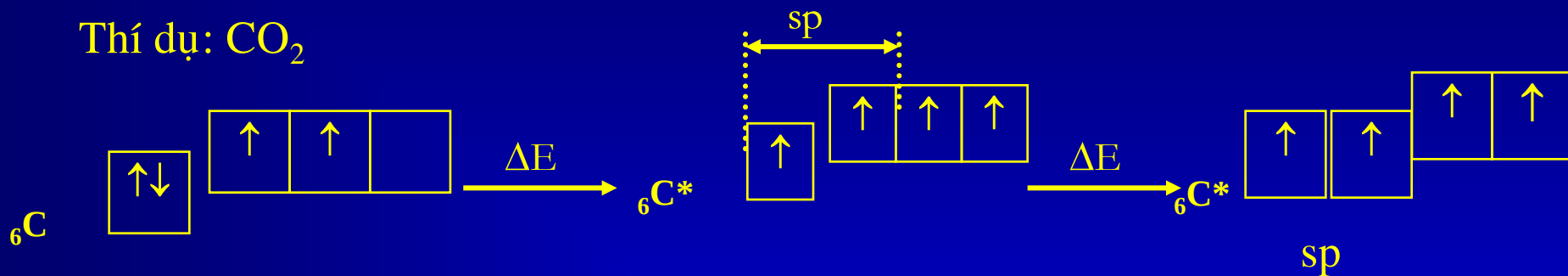


<https://fb.com/tailieudientucntt>

2.1. Liên kết cộng hóa trị

2.1.1. Phương pháp liên kết hóa trị VB - Valence bond

Thí dụ: CO₂

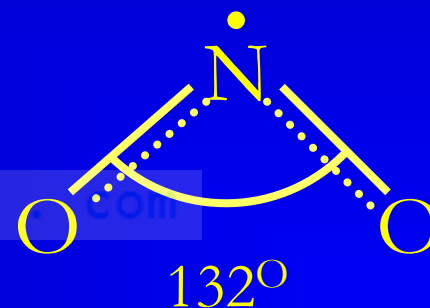
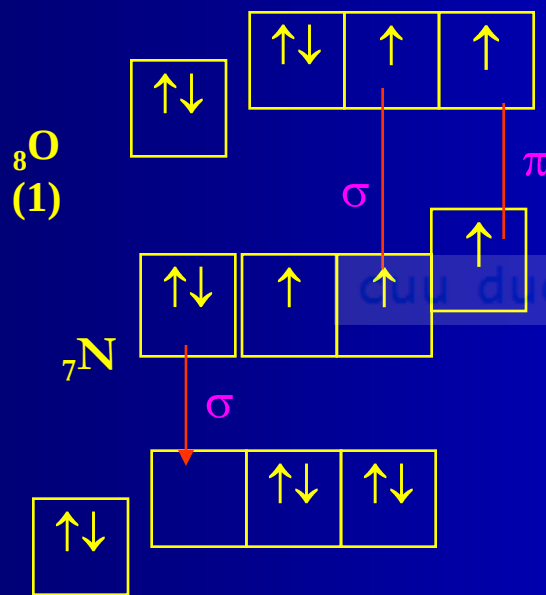
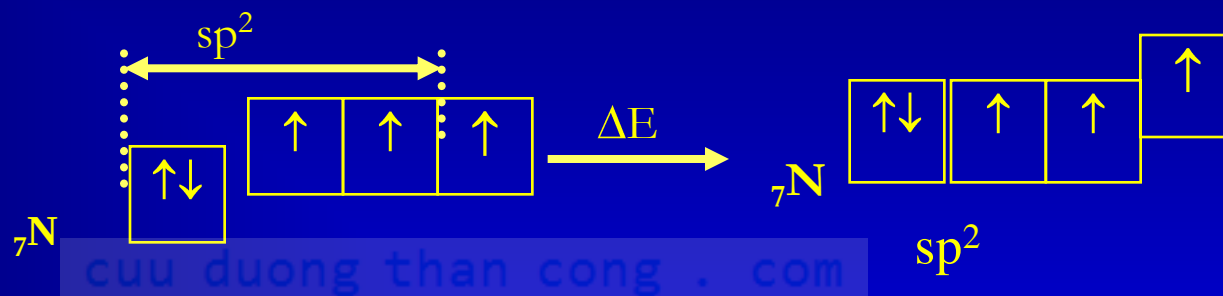


$$BLK = 2/1 = 2$$

2.1. Liên kết cộng hóa trị

2.1.1. Phương pháp liên kết hóa trị VB -Valence bond

Thí dụ: NO_2

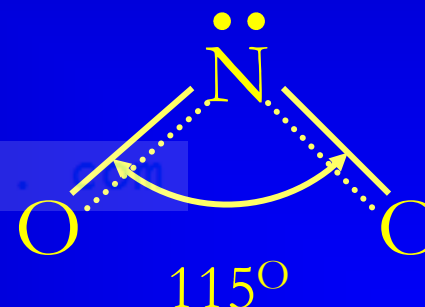
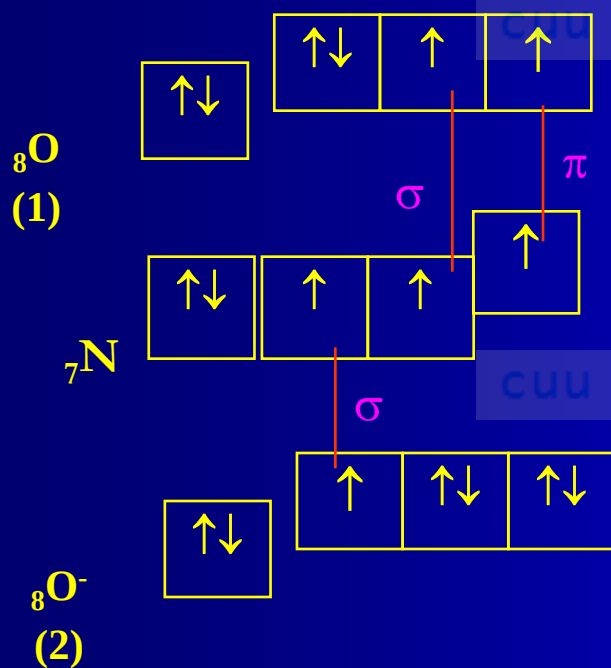
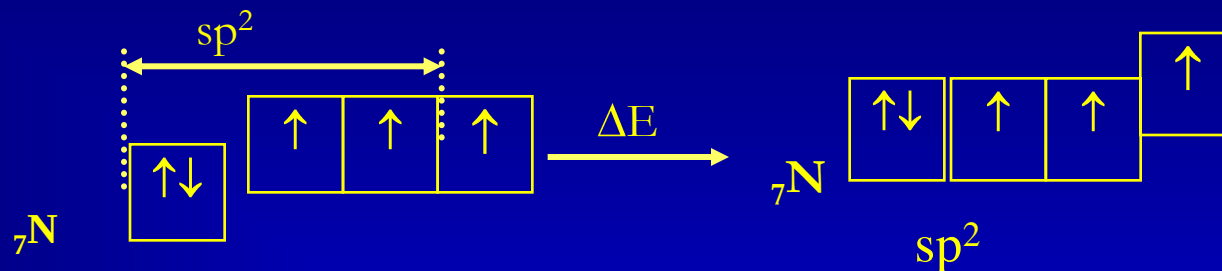


$$\text{BLK} = 3/2 = 1,5$$

2.1. Liên kết cộng hóa trị

2.1.1. Phương pháp liên kết hóa trị VB -Valence bond

Thí dụ: NO_2^-

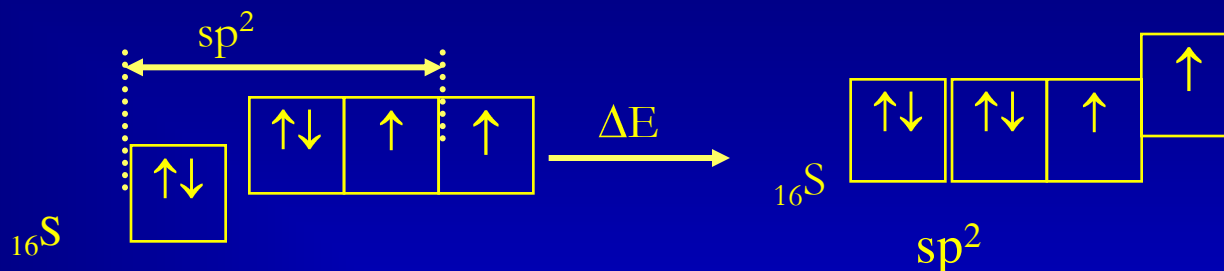


$$\text{BLK} = 3/2 = 1,5$$

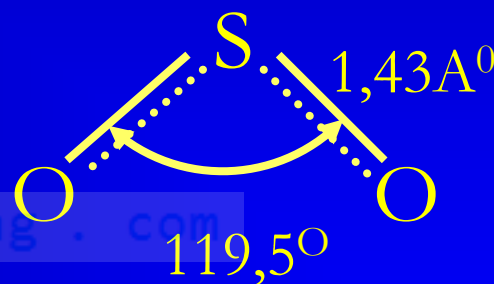
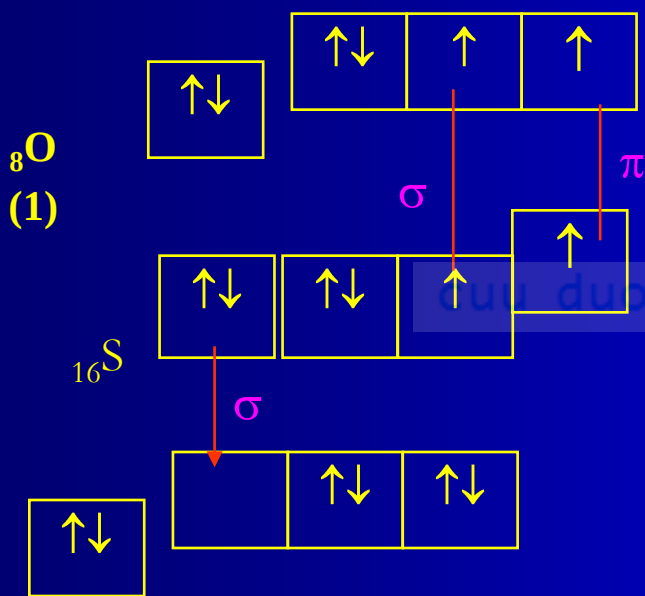
2.1. Liên kết cộng hóa trị

2.1.1. Phương pháp liên kết hóa trị VB - Valence bond

Thí dụ: SO_2



cuu duong than cong . com

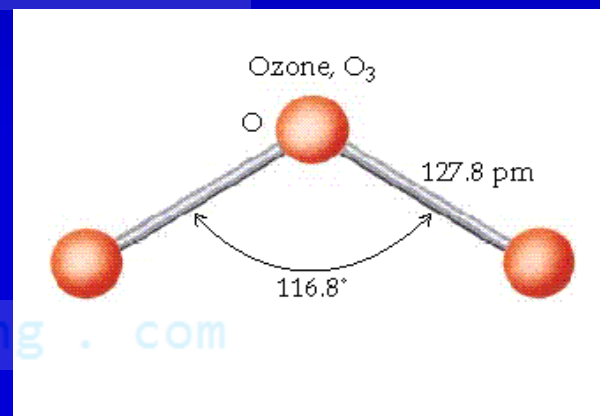
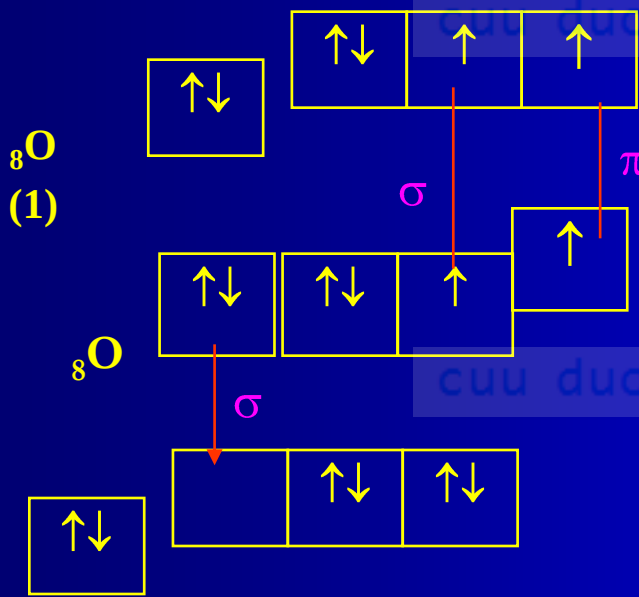
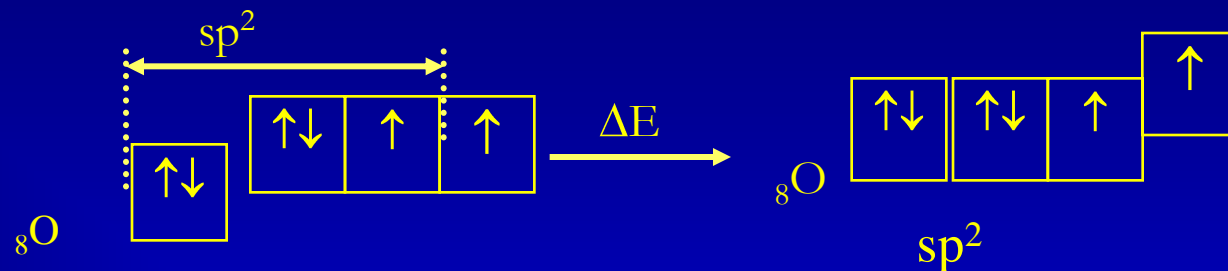


$$\text{BLK} = 3/2 = 1,5$$

2.1. Liên kết cộng hóa trị

2.1.1. Phương pháp liên kết hóa trị VB -Valence bond

Thí dụ: SO_2

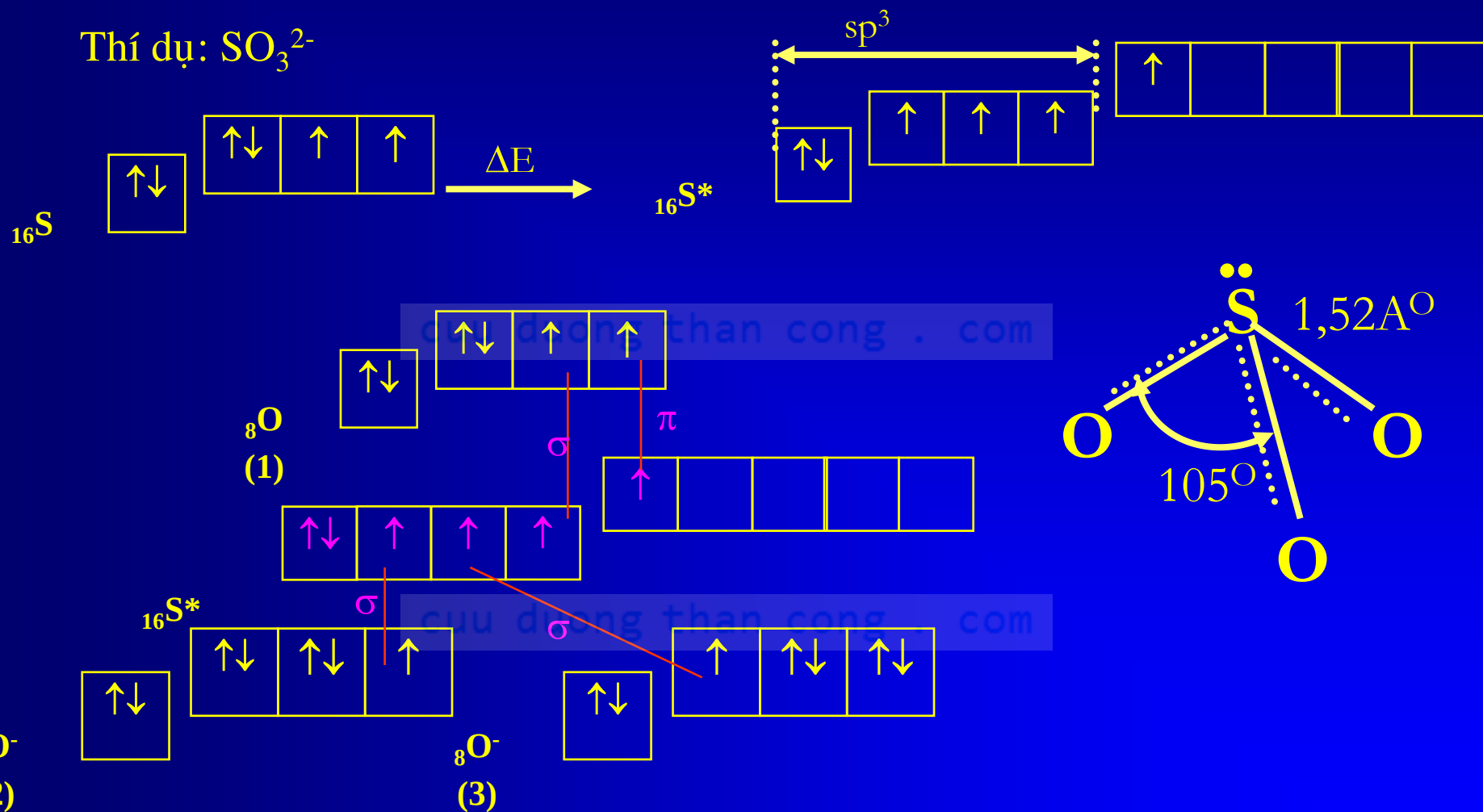


$$\text{BLK} = 3/2 = 1,5$$

2.1. Liên kết cộng hóa trị

2.1.1. Phương pháp liên kết hóa trị VB - Valence bond

Thí dụ: SO_3^{2-}

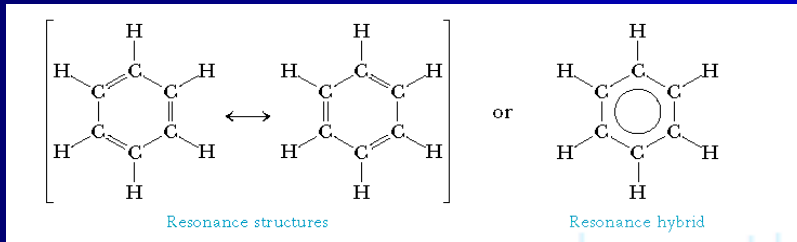
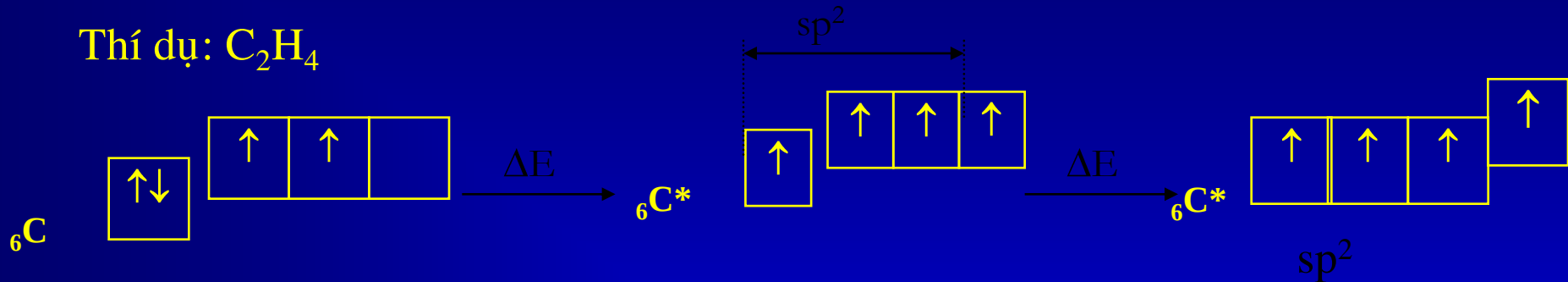


$$\text{BLK} = 4/3 = 1,33$$

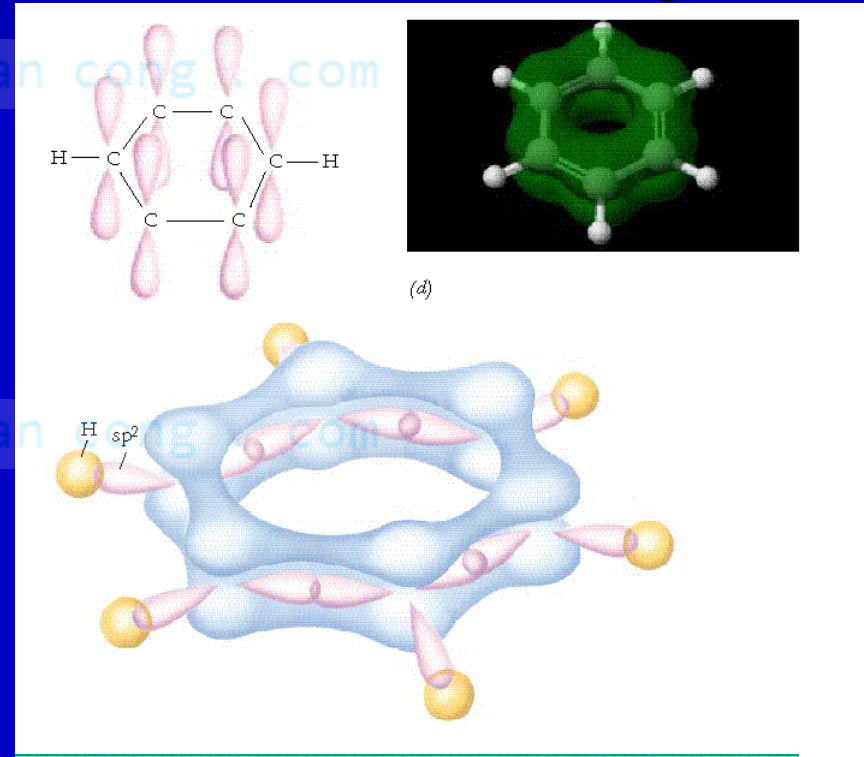
2.1. Liên kết cộng hóa trị

2.1.1. Phương pháp liên kết hóa trị VB - Valence bond

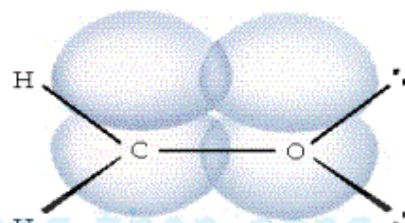
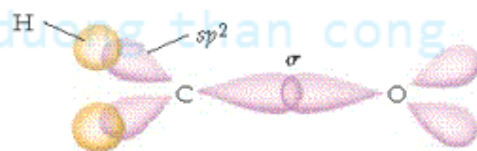
Thí dụ: C_2H_4



$$BLK = 9/6 = 1,5$$

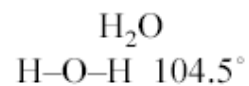
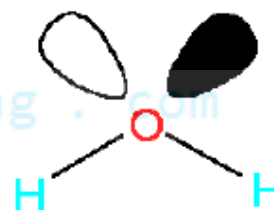
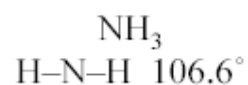
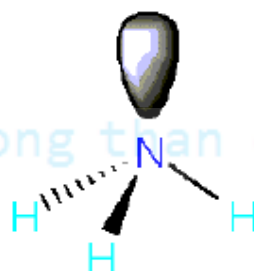
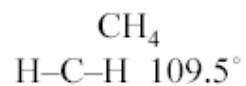


H₂CO sigma bonds and nonbonding pairs

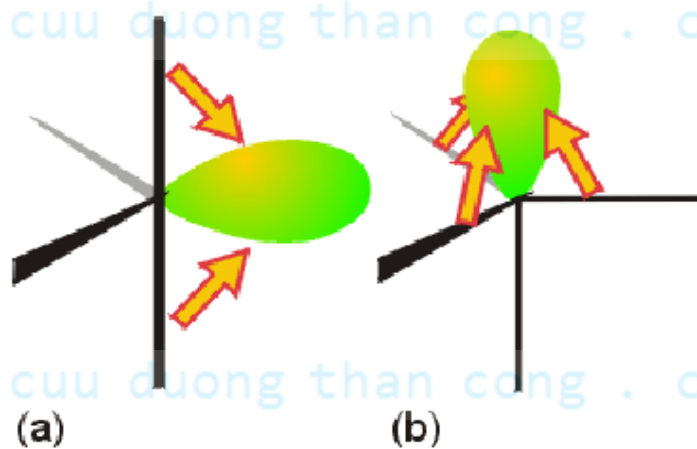


π bond in H₂CO

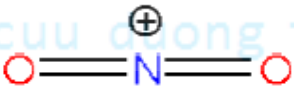
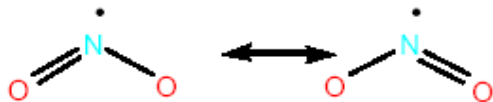
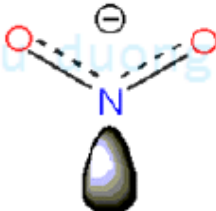
Effect of Lone Pairs on H-E-H Angles



LP – BP Repulsions in *tbp* Structure



Effect of Non-Bonding Electrons

	<u>O-N-O Angle</u>
	180
	134
	115

