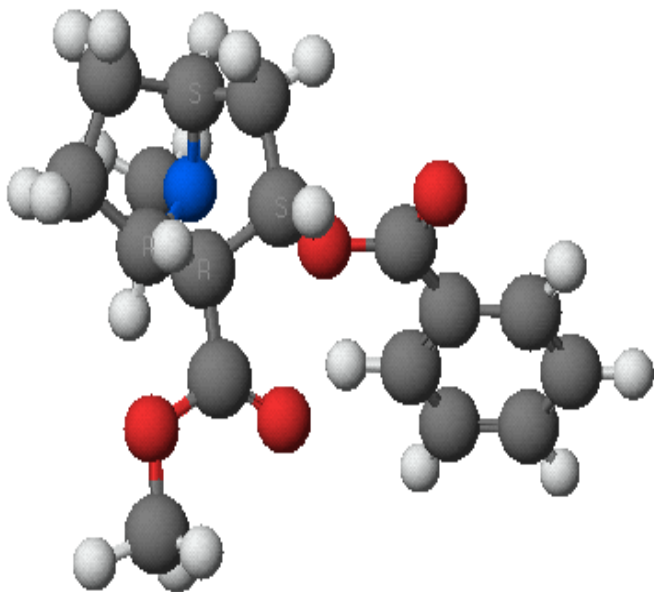
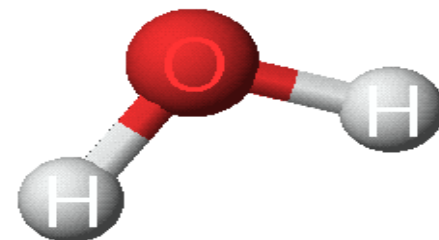




CHƯƠNG III

CHEMICAL BONDING

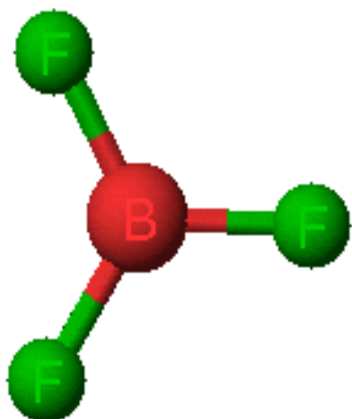


cuu duong than cong . com

LIÊN KẾT HÓA HỌC VÀ

cuu duong than cong . com

CẤU TẠO PHÂN TỬ



BẢN CHẤT CỦA LIÊN KẾT

Electron hoá trị - $ns(\textcolor{red}{s})$, $ns\ np(\textcolor{red}{p})$, $(n-1)d\ ns(\textcolor{red}{d})$,
 $(n-2)f\ (n-1)d\ ns(\textcolor{red}{f})$

Liên kết hoá học có bản chất điện (lực hút)

MỘT SỐ ĐẶC TRƯNG LIÊN KẾT

Đường cong thế năng

Độ dài liên kết

cuu duong than cong . com

Năng lượng liên kết

Bậc liên kết

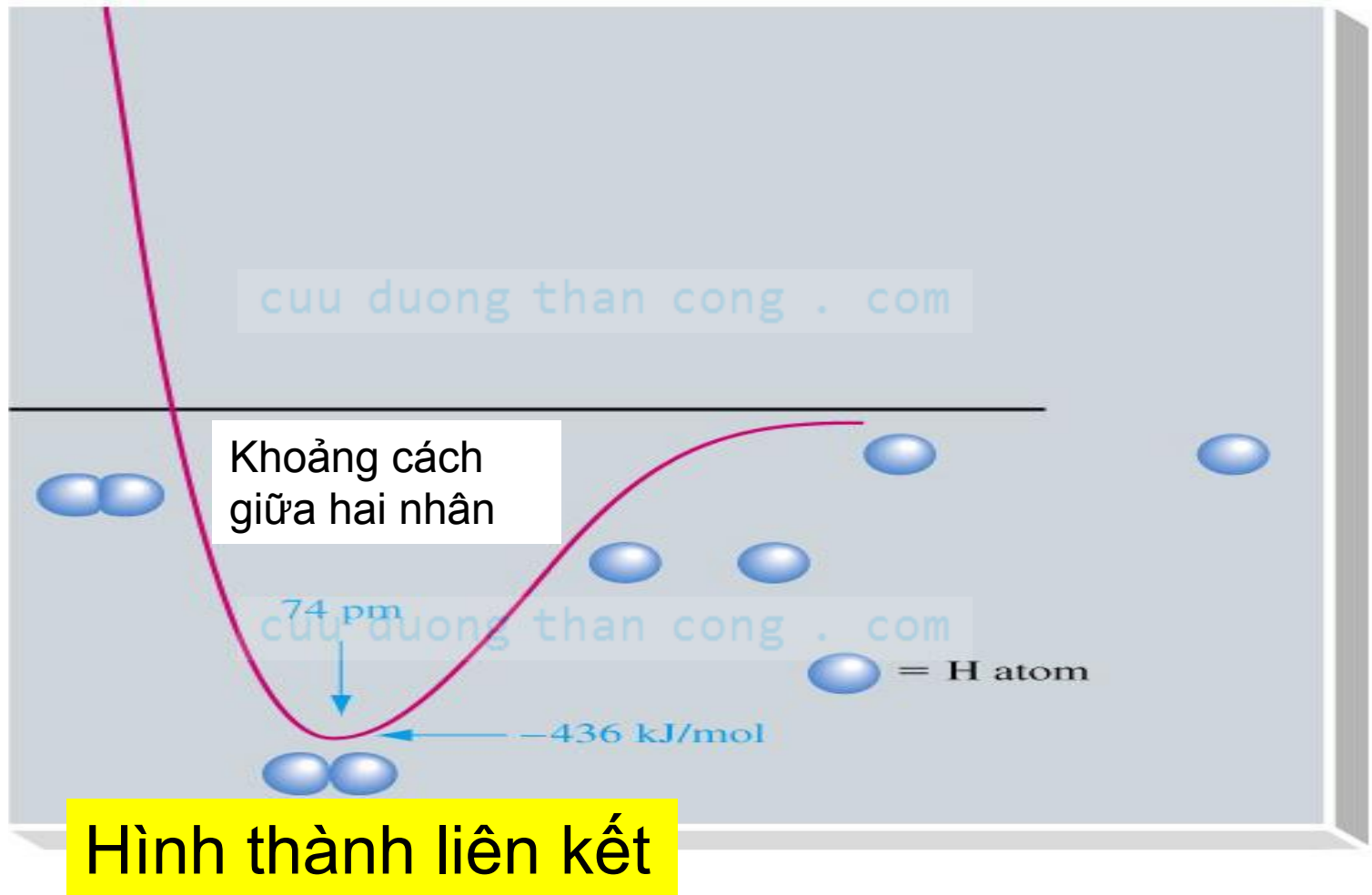
cuu duong than cong . com

Góc hóa trị

ĐƯỜNG CONG THỂ NĂNG CỦA H₂

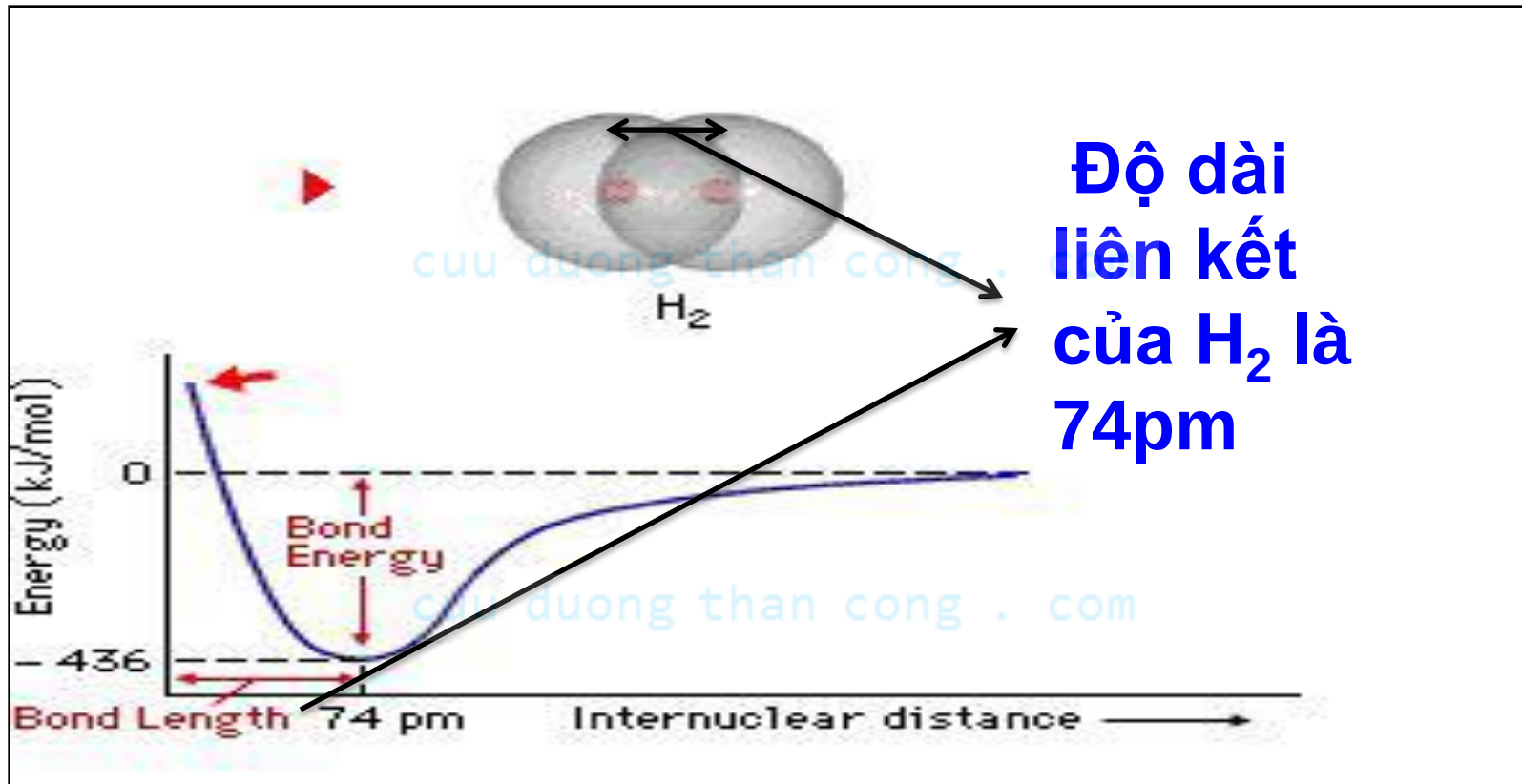
Thế
năng
Đẩy (+)

Hút (-)

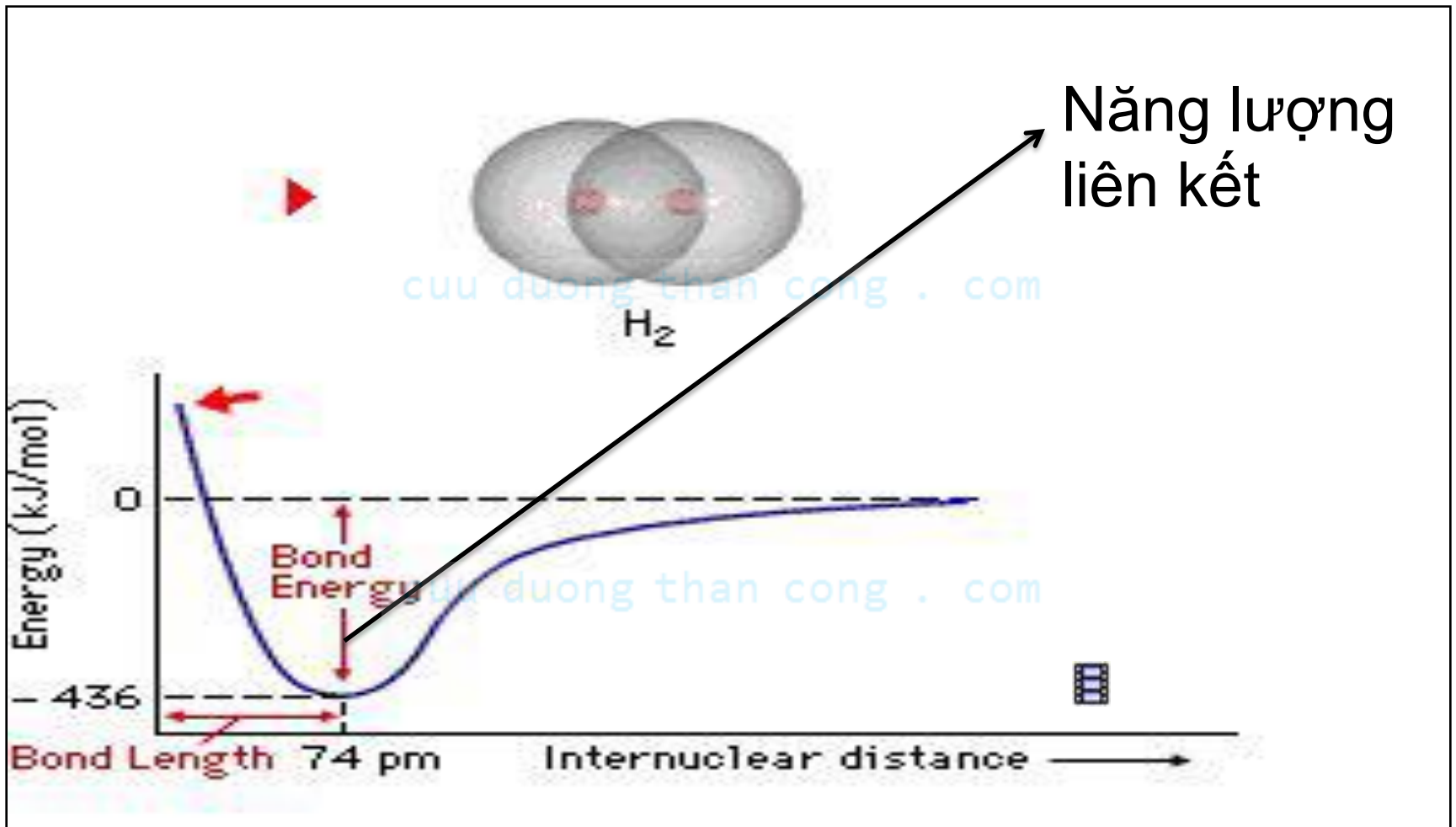
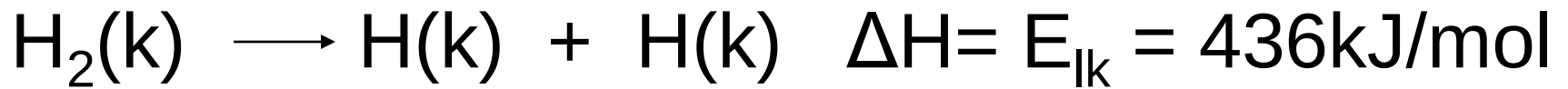


ĐỘ DÀI LIÊN KẾT

- Là khoảng cách giữa hai hạt nhân của hai nguyên tử tạo liên kết.*

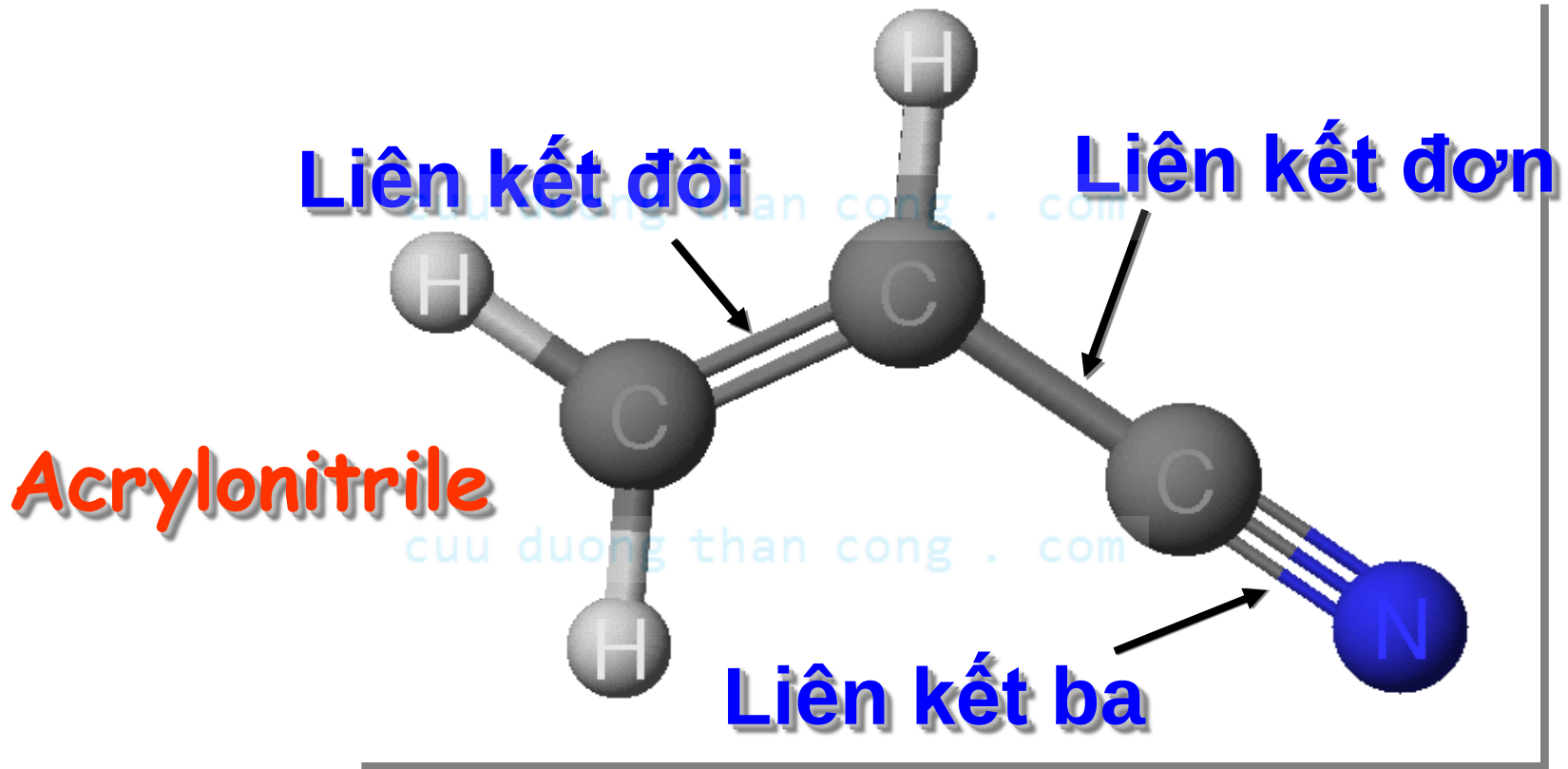


NĂNG LƯỢNG LIÊN KẾT



BẬC LIÊN KẾT

- Là số liên kết tạo thành giữa hai nguyên tử tham gia liên kết.



Liên kết	$d_{lk}(\text{pm})$	$E_{lk} \text{ (kJ/mol)}$
----------	---------------------	---------------------------

C - C	154	346
-------	-----	-----

C = C	134	610
-------	-----	-----

C $\equiv$ C	120	835
--------------	-----	-----

N - N	145	163
-------	-----	-----

N = N	123	418
-------	-----	-----

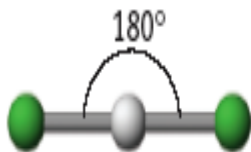
N $\equiv$ N	110	945
--------------	-----	-----

Bậc liên kết càng lớn thì liên kết càng bền và chiều dài liên kết càng ngắn.

GÓC HÓA TRỊ

(AB_n $n \geq 2$)

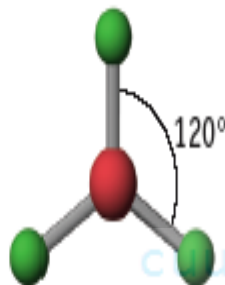
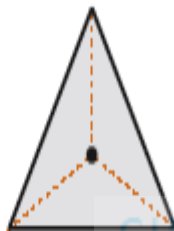
Linear



AX_2

Example: BeF_2

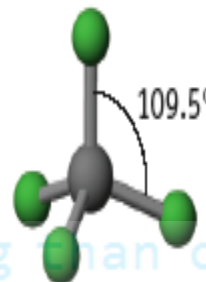
Trigonal-planar



AX_3

Example: BF_3

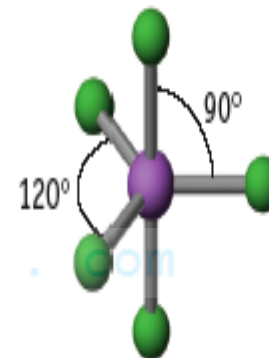
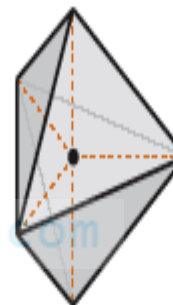
Tetrahedral



AX_4

Example: CF_4

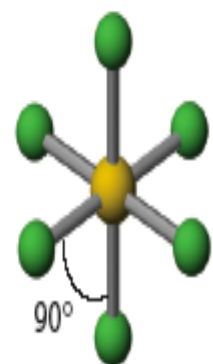
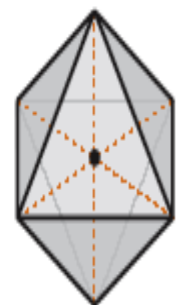
Trigonal-bipyramidal



AX_5

Example: PF_5

Octahedral



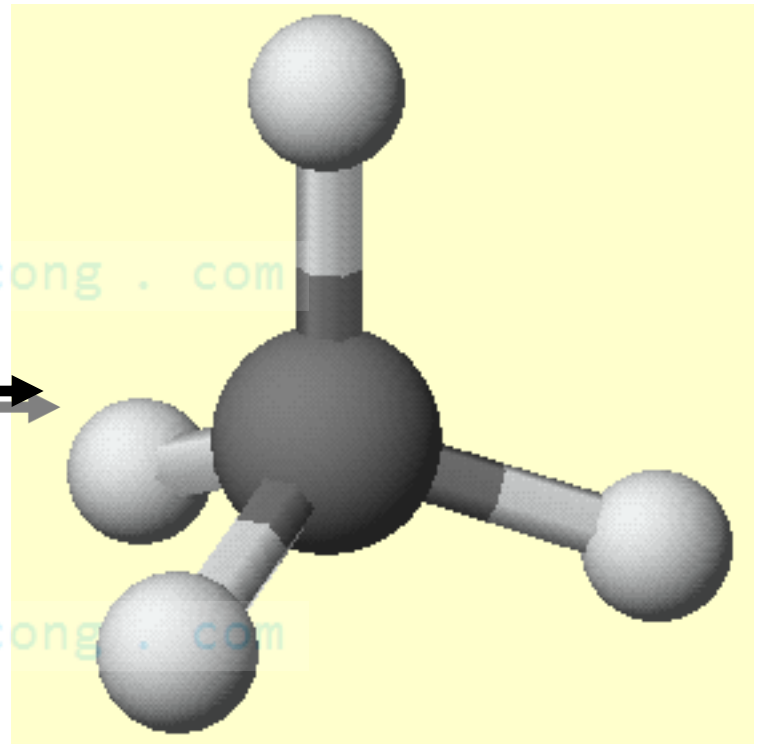
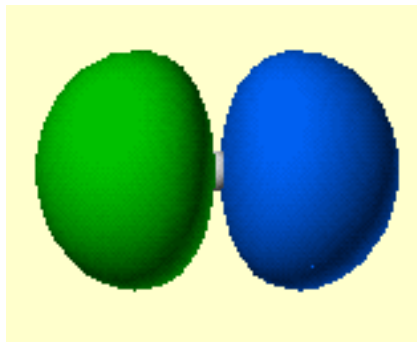
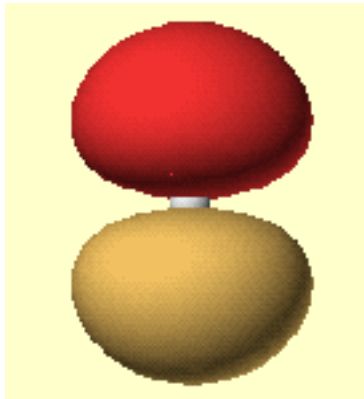
AX_6

Example: SF_6

CÁC LOẠI LIÊN KẾT

- Liên kết cộng hoá trị theo cơ học lượng tử
- Liên kết ion
- Liên kết kim loại
- Liên kết hydro
- Liên kết Vanderwaals

LIÊN KẾT CỘNG HÓA TRỊ THEO CƠ HỌC LƯỢNG TỬ

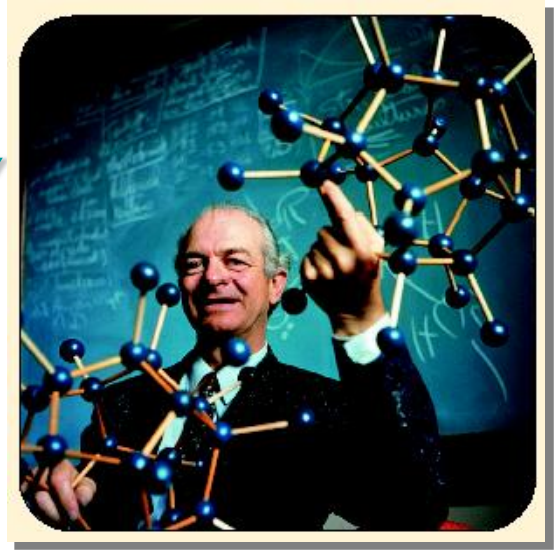


Atomic Orbitals

Molecules

1. VALENCE BOND THEORY

Linus Pauling

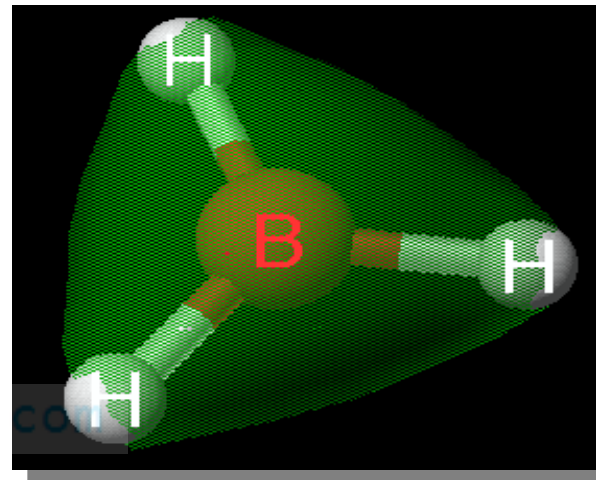


PHƯƠNG PHÁP LIÊN KẾT HÓA TRỊ (PHƯƠNG PHÁP VB)

→ Mang ý nghĩa định tính

2. MOLECULAR ORBITAL THEORY

Robert Mullikan (1896-1986)



cuu duong than cong . com

PHƯƠNG PHÁP ORBITAL PHÂN TỬ (PHƯƠNG PHÁP MO)

cuu duong than cong . com

→ Mang ý nghĩa định lượng

PHƯƠNG PHÁP LIÊN KẾT HÓA TRỊ (VB)

***Quan niệm về liên kết cộng hóa trị theo VB**

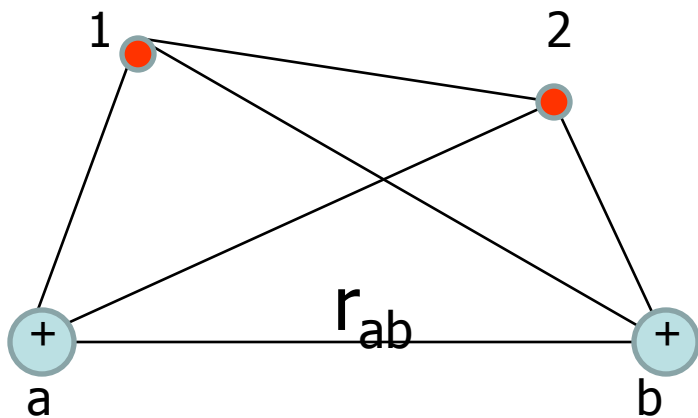
***Các loại liên kết cộng hóa trị và bậc liên kết**

cuu duong than cong . com

***Các tính chất của liên kết cộng hóa trị**

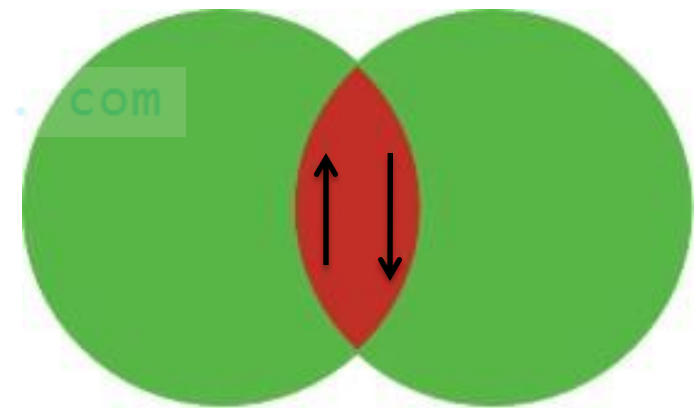
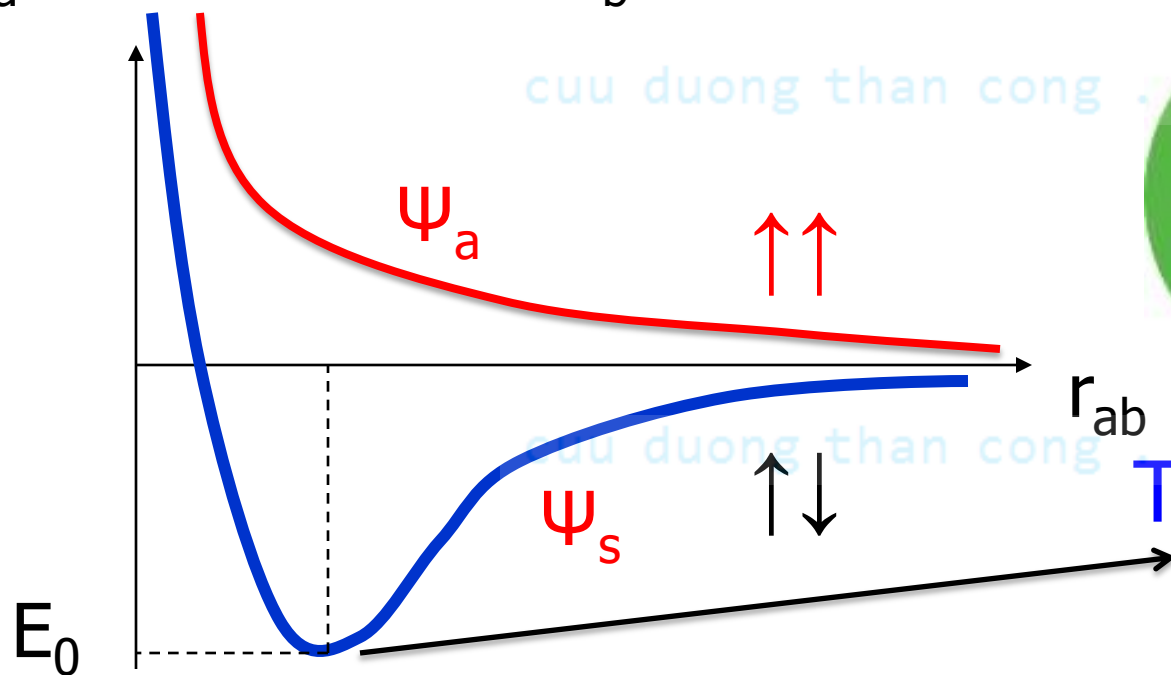
cuu duong than cong . com

Bài toán phân tử H_2 Phương trình sóng Schrodinger:



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

Hàm sóng mô tả chuyển động
đồng thời của hai electron

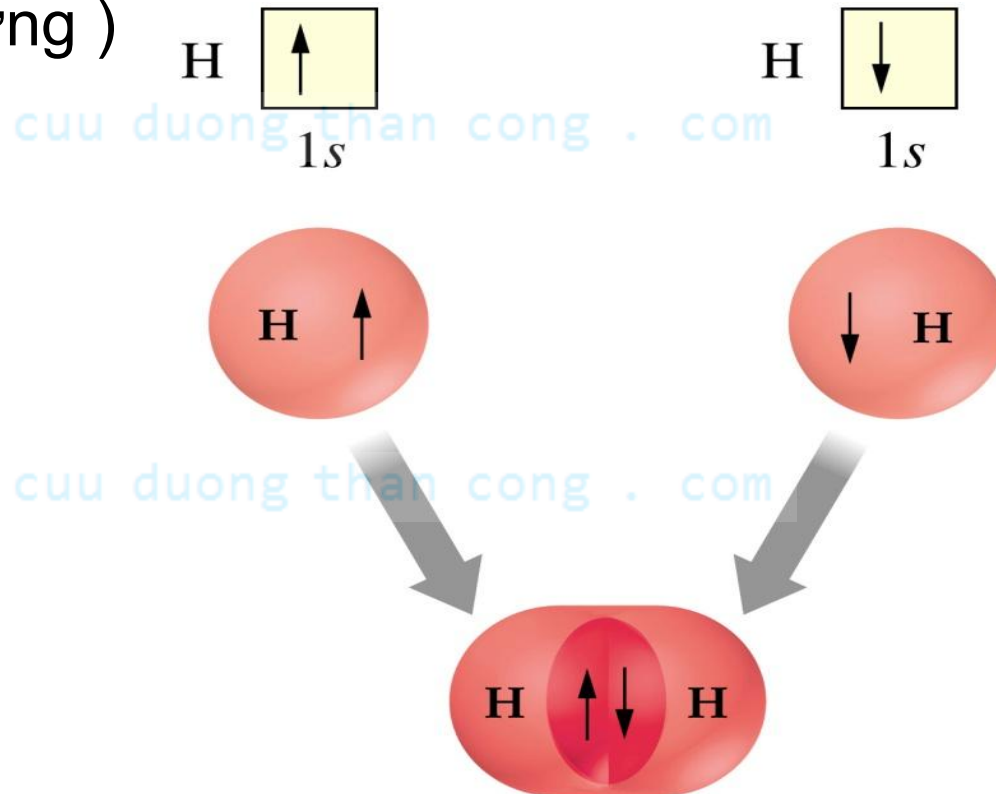


TẠO LIÊN KẾT

Đường cong thế năng theo lý thuyết VB

Luận điểm cơ bản của thuyết VB

- ✓ Lk cht cơ sở trên cặp e $\uparrow\downarrow$ (pp cặp e định chỗ - lk 2e 2tâm)
- ✓ Lk cht được hình thành do sự che phủ của các AO hóa trị
(che phủ dương)



LUẬN ĐIỂM CƠ BẢN CỦA PP- VB

- ✓ Biểu diễn lk cht như sau $H : H$ hoặc $H - H$
- ✓ Liên kết càng bền khi mật độ che phủ của các AO càng lớn

Điều kiện tạo liên kết cộng hóa trị bền:

Các AO có năng lượng xấp xỉ nhau

Các AO có mật độ e đủ lớn

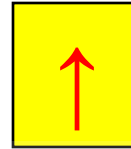
Các AO có cùng tính định hướng

CƠ CHẾ TẠO LIÊN KẾT CỘNG HÓA TRỊ

1. CƠ CHẾ GHÉP ĐÔI :

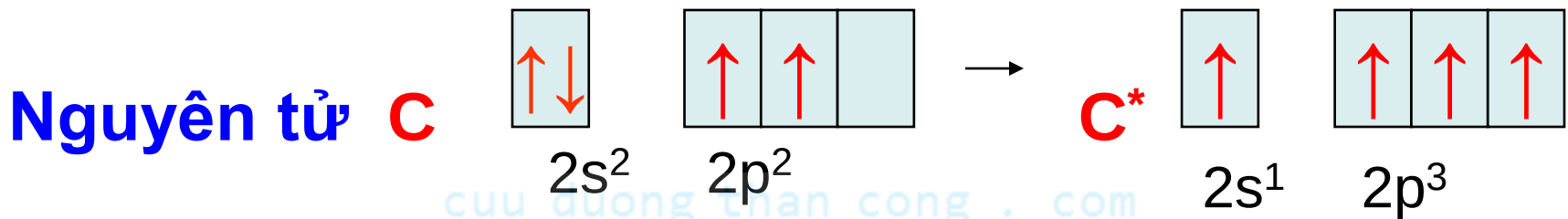


→ Khả năng tạo lk được quyết định bởi số AO
hóa trị chứa e độc thân



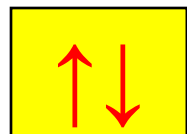
cuu duong than cong . com

• **Chú ý:** số e độc thân có thể tăng lên nhờ kích thích



Sự di chuyển điện tử trong quá trình kích thích
thường xảy ra trong cùng một lớp.

CƠ CHẾ CHO – NHẬN

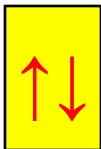
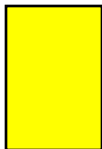


+

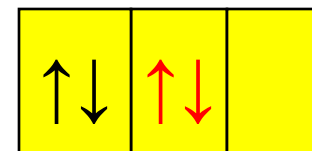
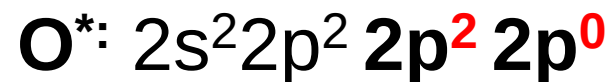
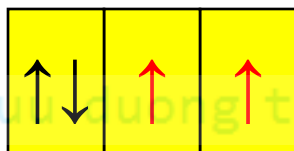
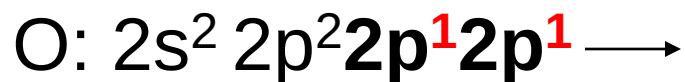


Chất cho

Chất nhận

- Khả năng tạo lk được quyết định bởi số  và số 
- AO trống có thể có khi ng tử ở trạng thái kích thích

Ví dụ



- Khả năng tạo liên kết cht (theo cả hai cơ chế)
được quyết định bởi **số AO hóa trị của nguyên tố**:
- Các nguyên tố chu kỳ I có 1 AO hóa trị → tạo tối đa 1 lk cht
 - Các nguyên tố chu kỳ II có 4 AO hóa trị → tạo tối đa 4 lk cht
 - Các nguyên tố chu kỳ III có 9 AO hóa trị → tạo tối đa 9 lk cht

➤ **Liên kết cộng hóa trị có tính bão hòa**

TÍNH CHẤT LIÊN KẾT CỘNG HÓA TRỊ

➤ Tính bão hòa

Số liên kết CHTcực đại = số AO hóa trị của nguyên tố.

cuu duong than cong . com

➤ Tính định hướng

➤ Tính có cực và không cực

Sự phân cực của liên kết cộng hoá trị



$$\chi_{\text{F}} = \chi_{\text{F}}$$

$$\chi_{\text{H}} < \chi_{\text{Cl}}$$

$$\chi_{\text{Na}} \ll \chi_{\text{Cl}}$$

Lk cht đồng cực

lk cht có cực

Lk ion

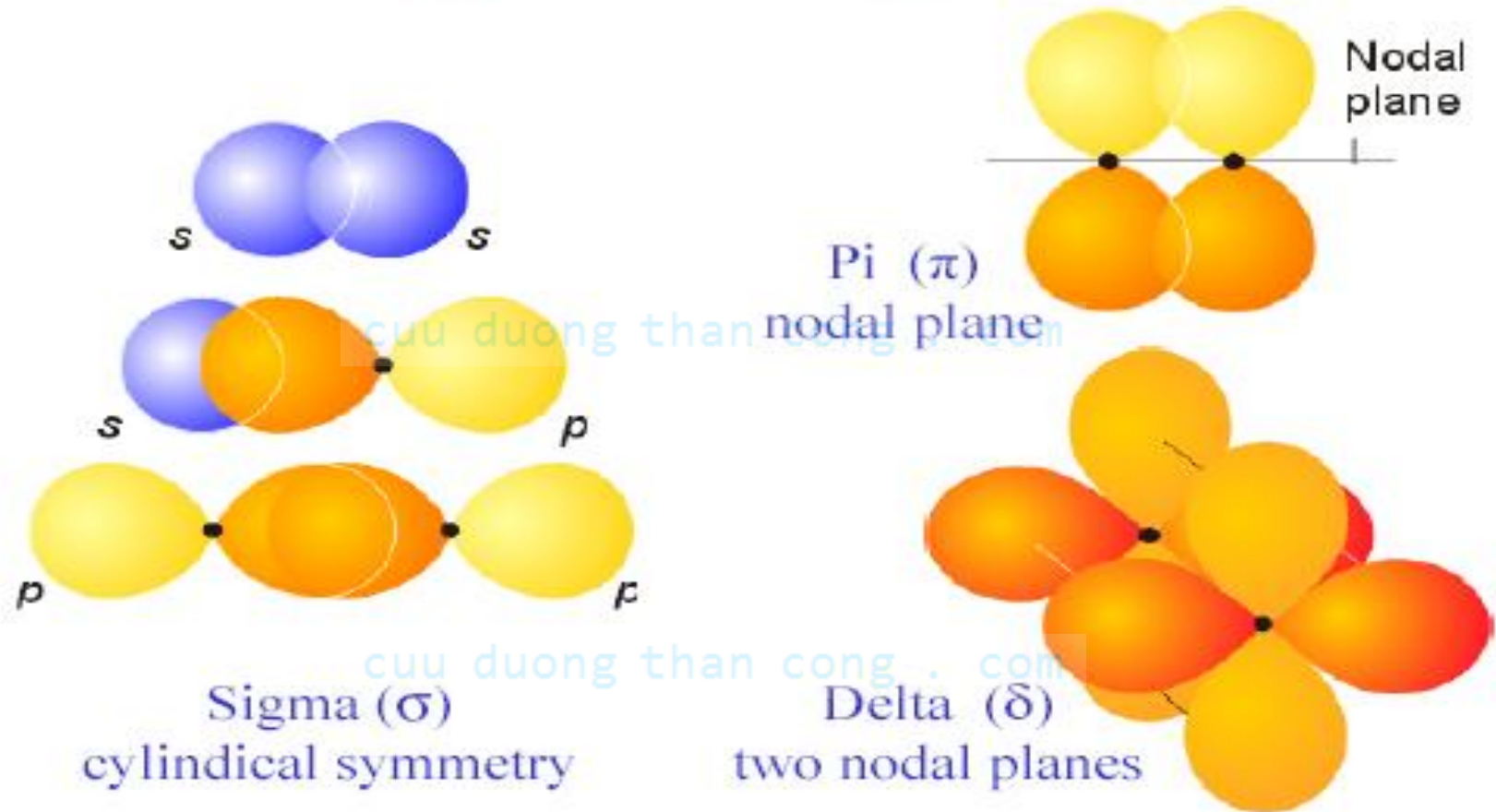


Cl bị phân cực âm

H bị phân cực dương

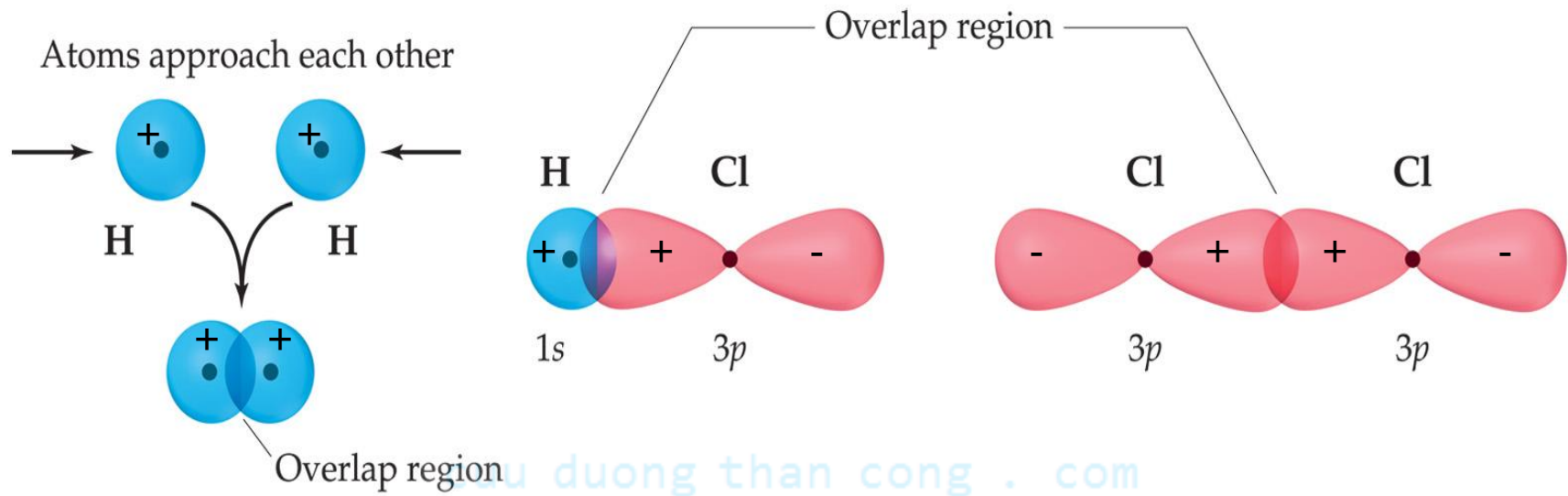
Các loại liên kết cộng hóa trị và bậc liên kết

Other Types of Bonding Interactions



Chú ý: các vùng xen phủ phải cùng dấu

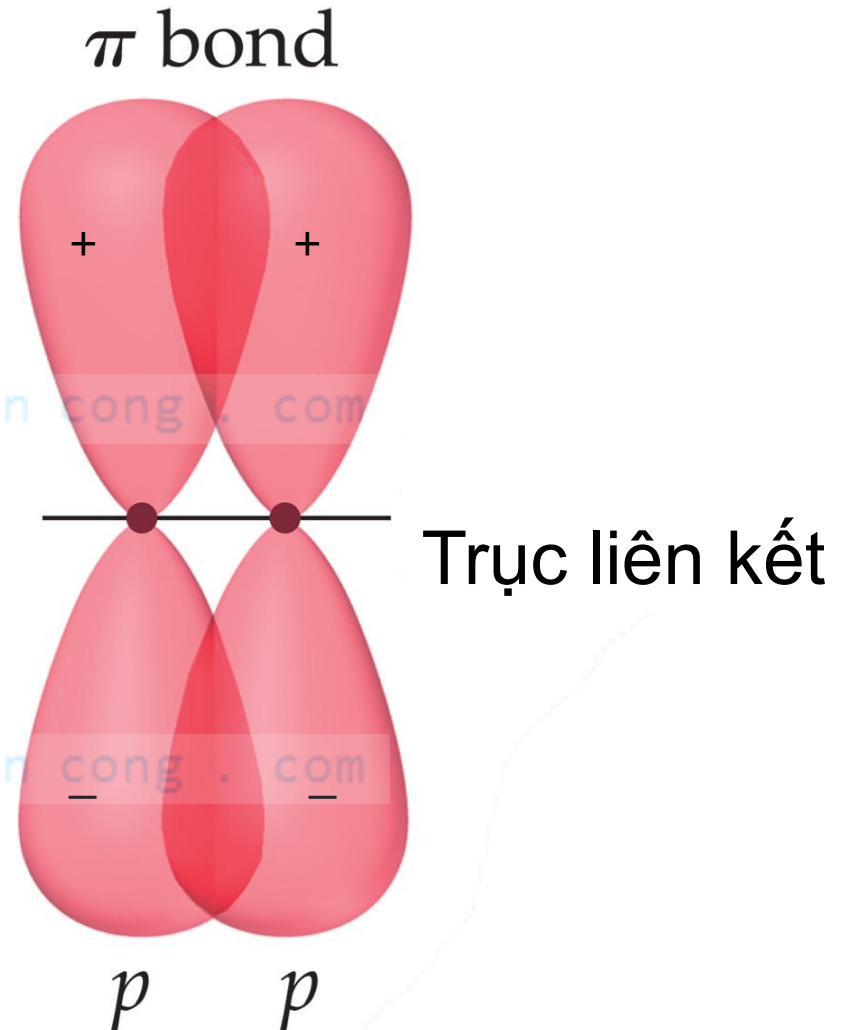
Liên kết Sigma (σ)



- Các AO che phủ dọc theo trục liên kết
- Nhận trục liên kết làm trục đối xứng.
- Liên kết σ không làm cản trở sự quay tự do của các nguyên tử quanh trục liên kết
- **Độ bền** $\sigma(ns-ns) < \sigma(ns-np) < \sigma(np-np)$

Liên kết Pi (π)

- Hai AO che phủ ở hai phía của trục liên kết.
- Có mặt phẳng phản xứng chứa trục liên kết.

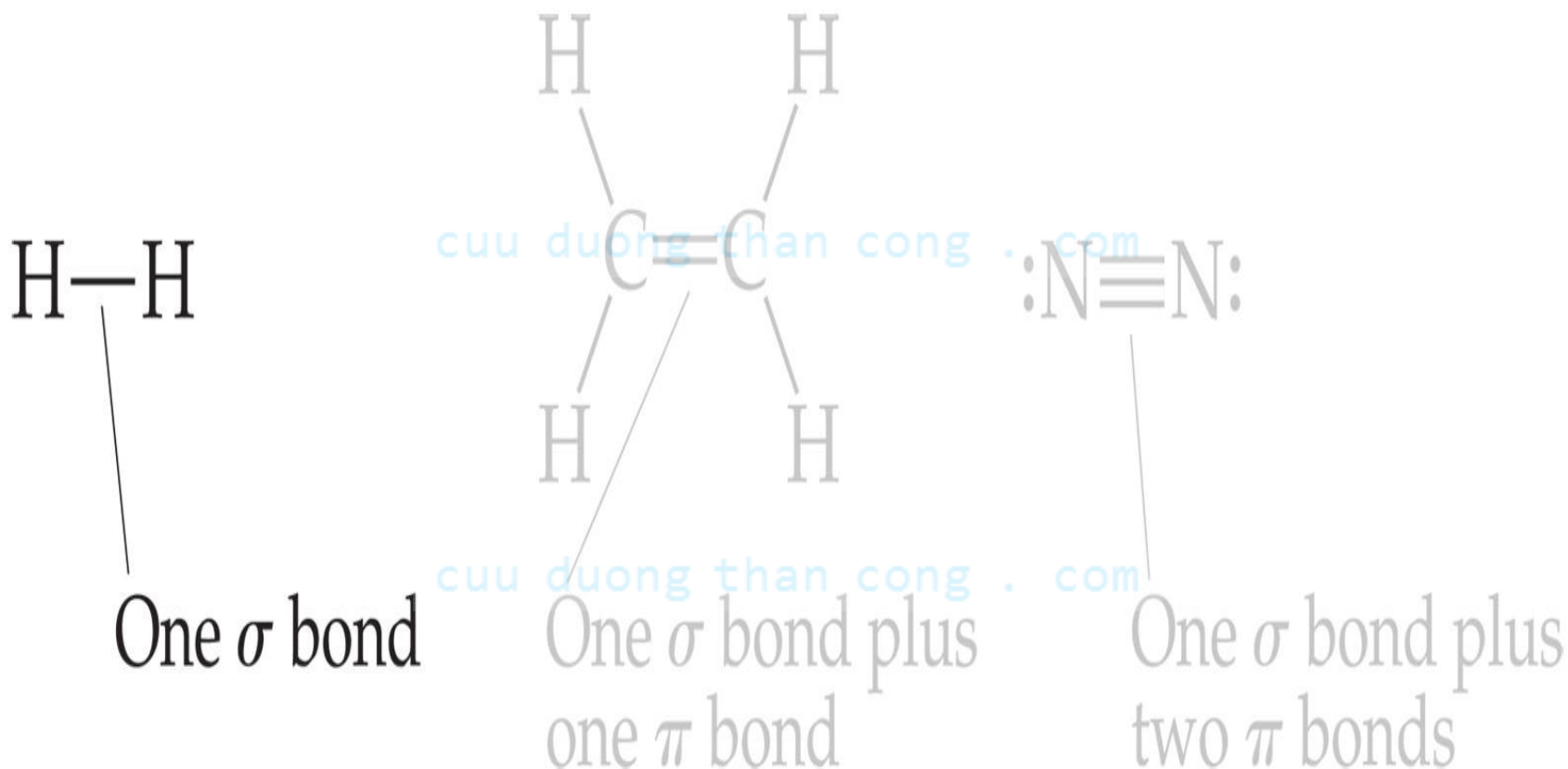


Liên kết π

- Các nguyên tử thuộc chu kỳ 2 có khả năng tạo lk π_{2p-2p} hoặc π_{2p-3p}
- Các nguyên tố thuộc chu kỳ 3 trở đi chỉ có khả năng hình thành liên kết π_{p-d} , π_{d-d}
- Số liên kết $\pi(\text{ghép đôi}) = (\text{số oxh})_{\text{nttt}} - \text{số lk}\sigma$

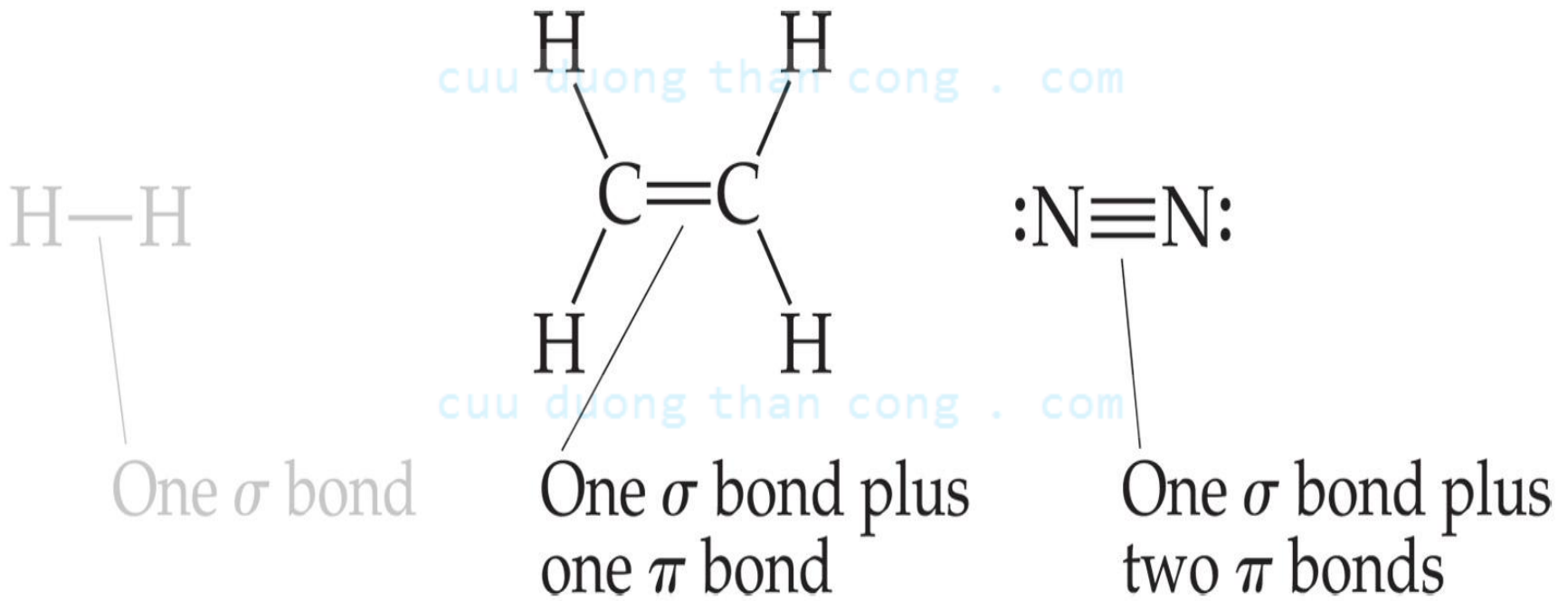
Liên kết đơn

Liên kết đơn luôn luôn là liên kết σ



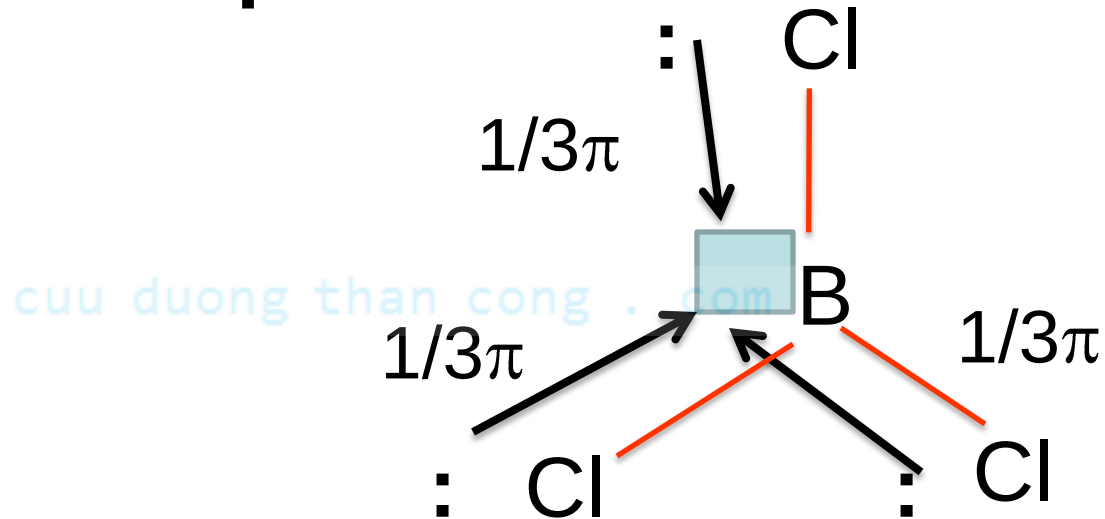
Liên kết bội

Trong liên kết bội thì sẽ có **1 liên kết σ** phần còn lại sẽ là **các liên kết π**



Liên kết π không định chỗ

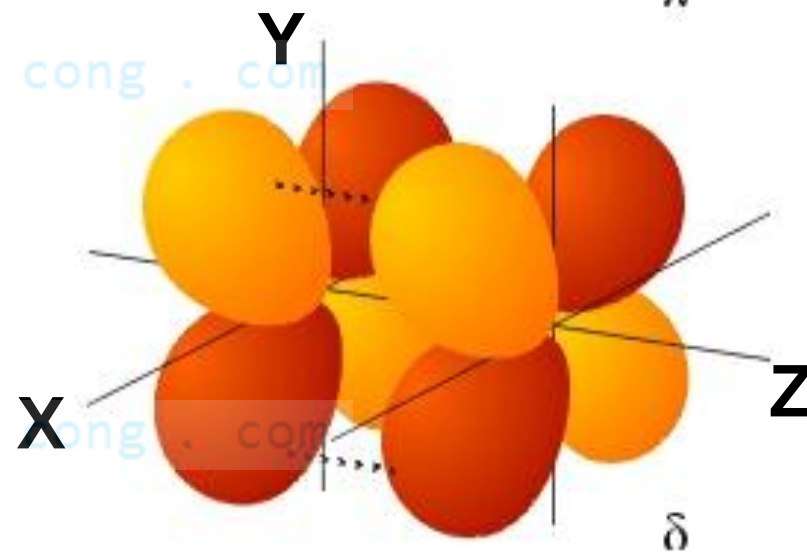
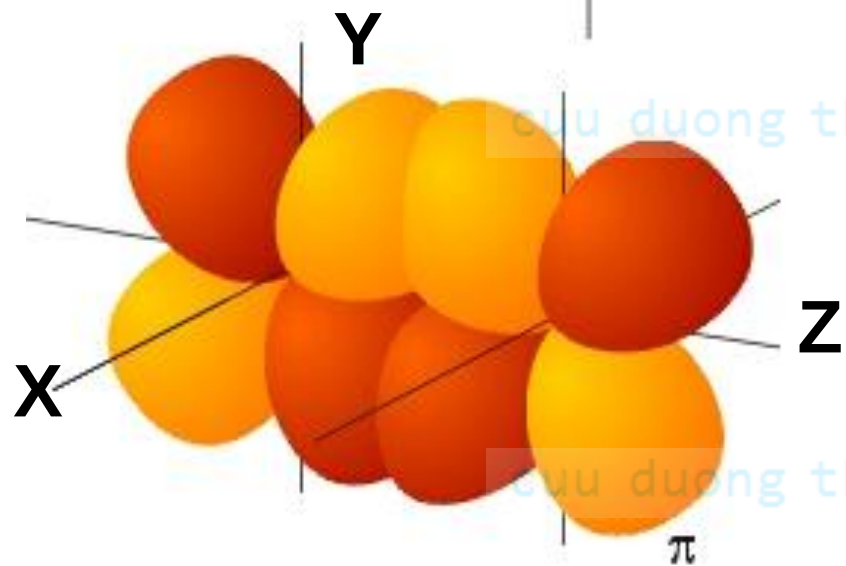
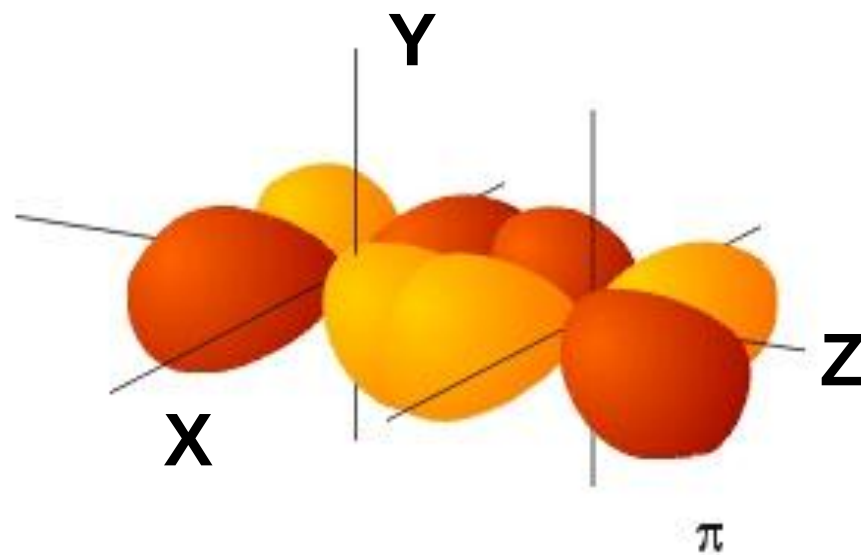
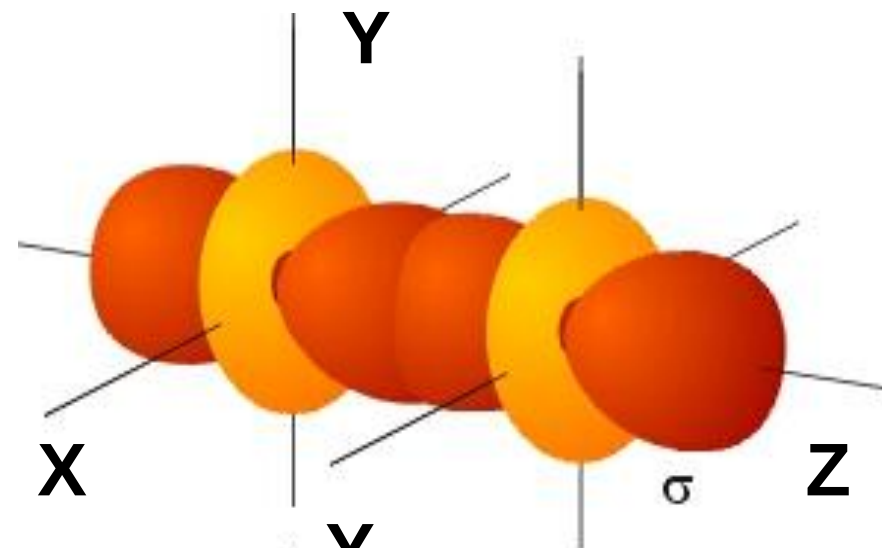
Cặp electron liên kết không thuộc hẳn về một cặp nguyên tử nào cả mà phân bố đồng đều cho một số hạt nhân nguyên tử kế cận.



Liên kết δ

Liên kết δ được tạo thành khi hai AOd che phủ bằng tất cả bốn cánh.

Liên kết δ thường gặp trong phức chất của kim loại chuyển tiếp hoặc một số hợp chất của các nguyên tố thuộc chu kỳ 3.



Liên kết δ của các AO d

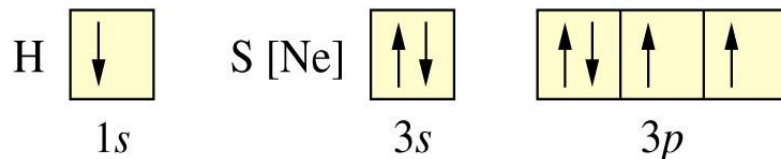
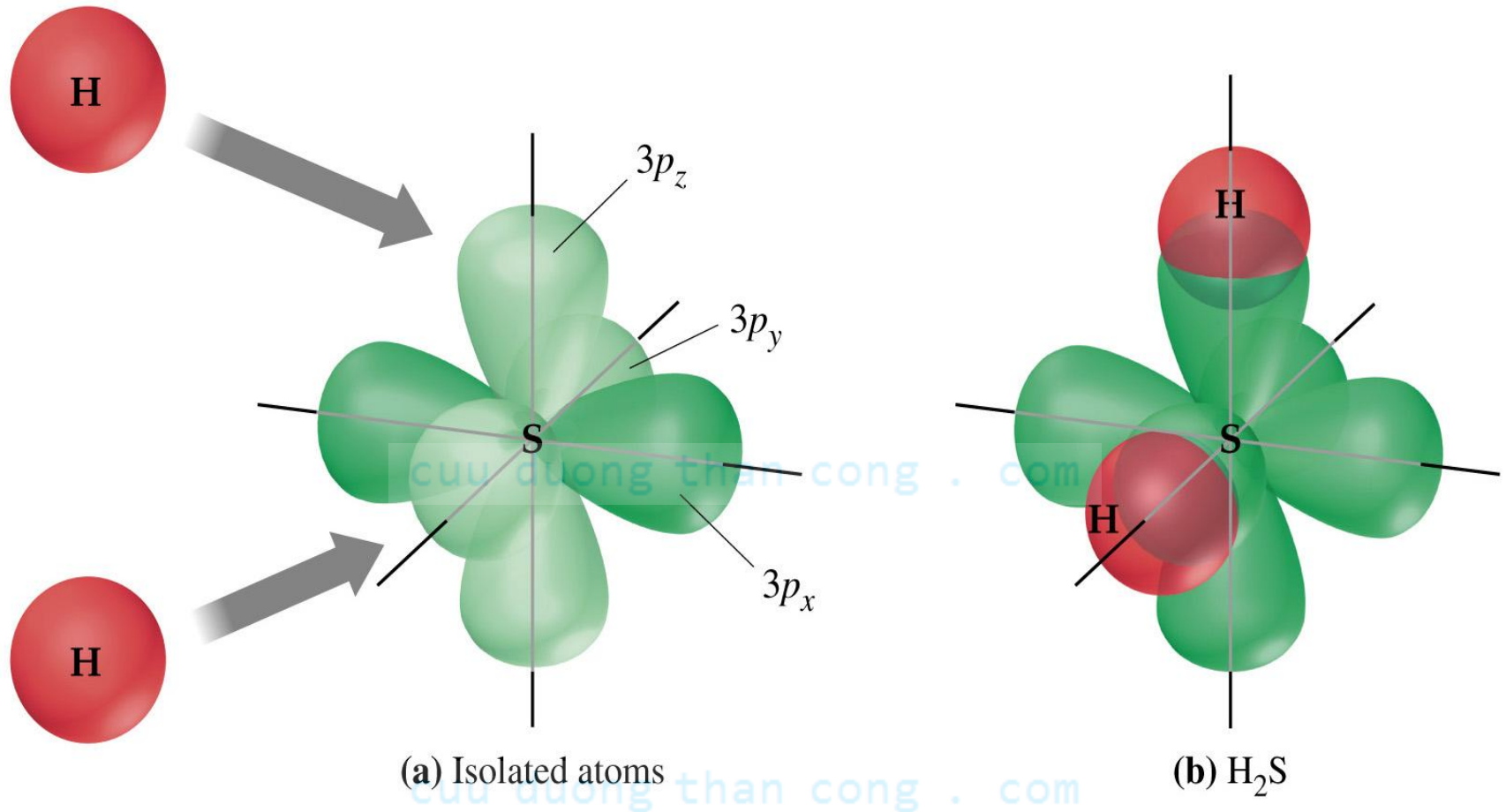
BẬC LIÊN KẾT

BẬC LK = 1(lk σ)+số lk $\pi_{đc}$ +số lk $\pi_{kđc}$ /số cặp ng tử

Bậc liên kết có thể là số lẻ khi có mặt liên kết π không định chỗ

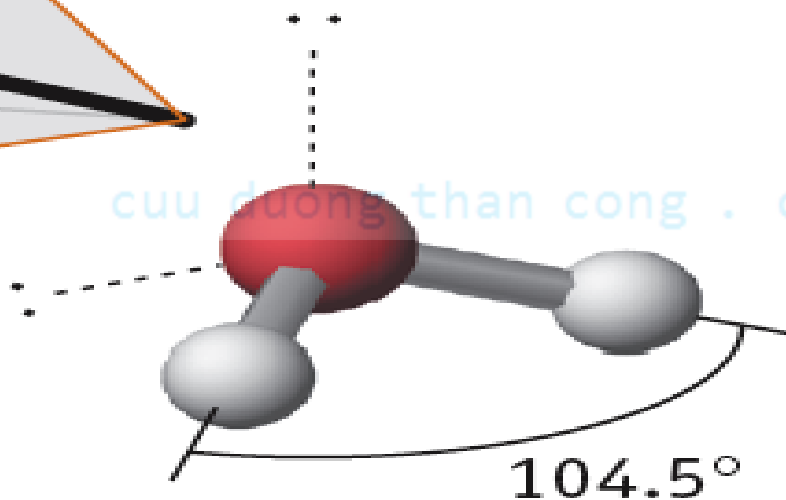
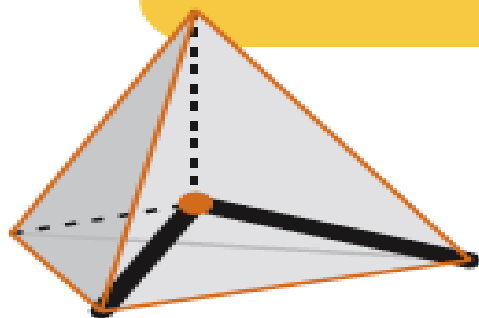
cuu duong than cong . com

LIÊN KẾT CỘNG HÓA TRỊ CỦA H_2S



Vì sao góc hóa trị không là 90° ?

Bent



Water, H_2O
2 bond pairs
2 lone pairs

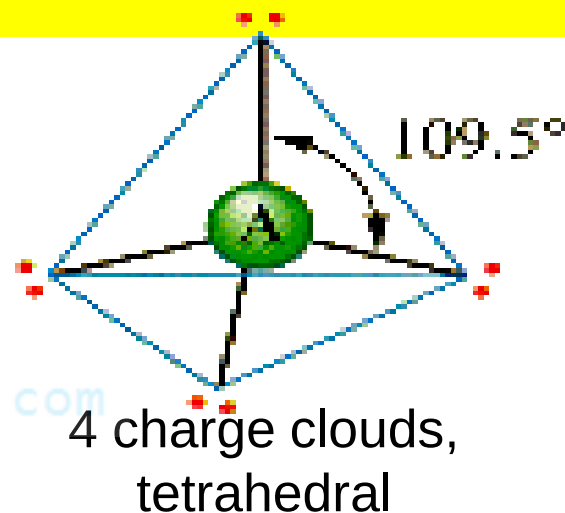
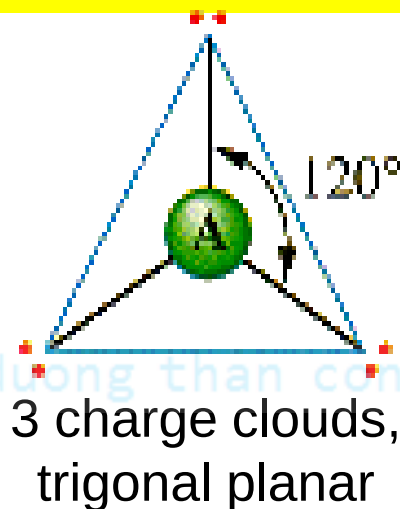
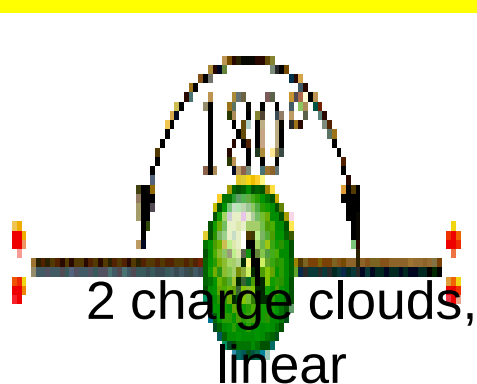


THUYẾT SỨC ĐẨY CẶP ĐIỆN TỬ HÓA TRỊ

Valence Shell Electron Pair Repulsion(VSEPR)

Trong phân tử cộng hoá trị AB_n các cặp điện tử hóa trị liên kết (σ) và cặp điện tử hoá trị tự do của A (nếu có) phải xa nhau ở mức tối đa sao cho lực đẩy giữa các cặp electron đó có giá trị nhỏ nhất.

Định hướng trong không gian của các cặp e liên kết(σ) hoặc e tự do quanh A



**Nguyên tử A phải ở trạng thái lai hóa.
Số cặp e quanh A sẽ quyết định trạng thái lai hóa của nguyên tử trung tâm A.**

Lai hóa là gì ?

Nguyên tử trung tâm A sử dụng các AO hóa trị: s,p,d,f..trong nội bộ nguyên tử đem pha trộn với nhau để tạo thành các **AO lai hóa**.
cuu duong than cong . com

Các **AO lai hóa** này sẽ **tham gia tạo lk** với B hoặc chứa điện tử tự do của A.

cuu duong than cong . com

Đặc điểm các AO lai hóa

➤ Số cặp e(td+lkσ)quanh A =Số AO tham gia lai hoá
= số AO lai hoá.

AB_2 , số cặp e quanh A = 2 $\rightarrow$ A lai hóa sp , 2AO lh sp

cuu duong than cong . com

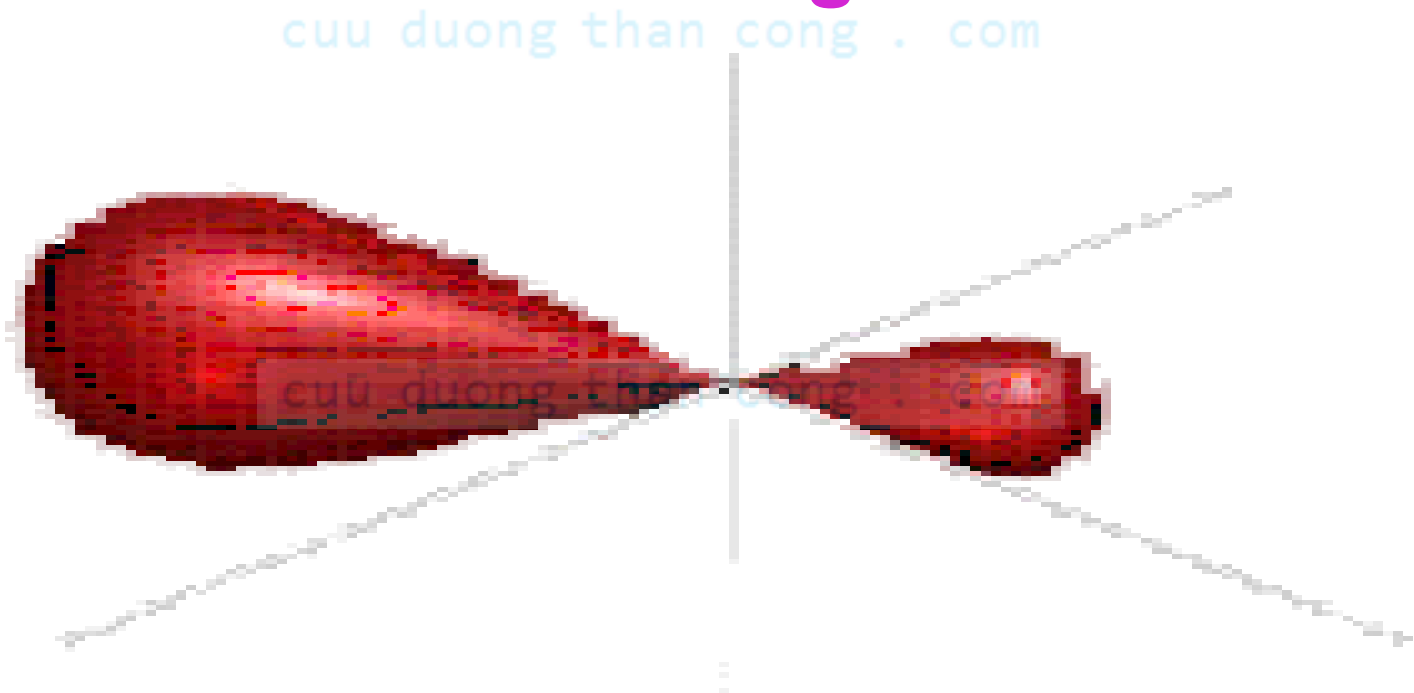
➤ Phân bố đối xứng với nhau trong không gian

➤ Các AO lai hoá có mức năng lượng bằng nhau

cuu duong than cong . com

Các AO lai hóa có kích thước hình dạng giống nhau, mật độ electron dồn về một phía.

→ Các AO lai hóa của A tạo lkσ với B bền hơn so với AO không lai hóa



▪ ***Điều kiện để lai hóa bền***

- ***Năng lượng của các AO tham gia lai hóa xấp xỉ nhau***
- ***Mật độ e của các AO tham gia lai hóa đủ lớn***
cuu duong than cong . com
- ***Mức độ che phủ của các AO phải cao***

cuu duong than cong . com

Trong một chu kỳ: $\Delta E_{ns - np} \uparrow$ nên khả năng Lai Hóa $\downarrow$

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

cuu duong than cong . com

Trong một phân nhóm chính: $r \uparrow \rightarrow$ khả năng LH $\downarrow$

cuu duong than cong . com

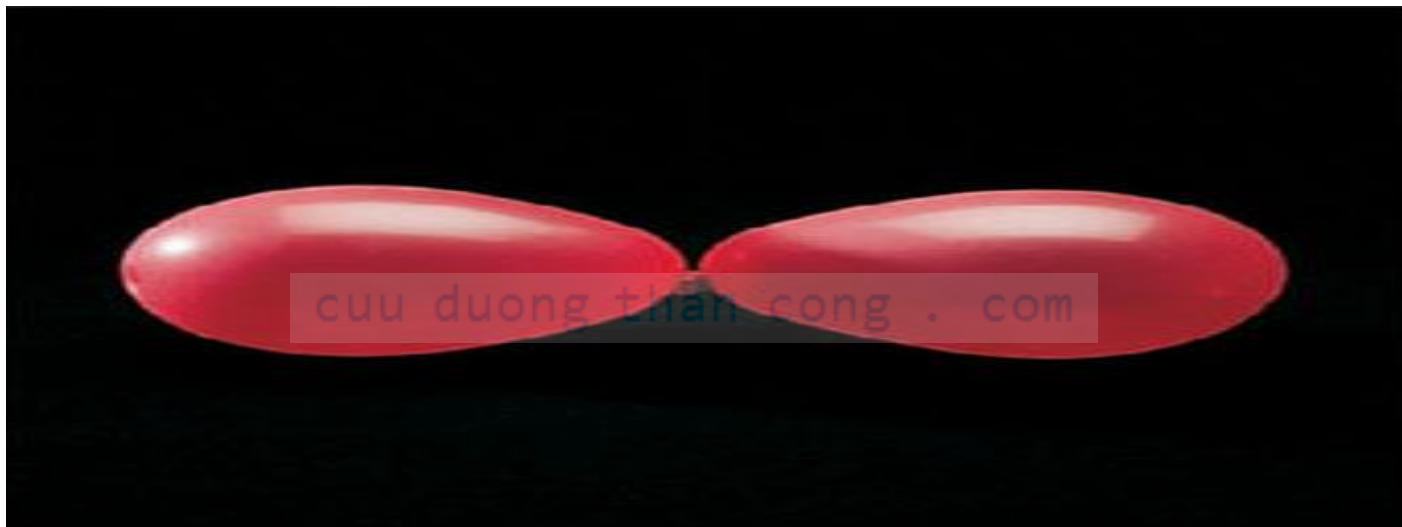
Số cặp e quanh A = $\frac{1}{2}\{(\sum e_{ht})AB_n - 8(2)n\} + n$
 $n \geq 2$ A không là các kl chuyển tiếp

Số cặp e quanh A = số cặp e_{td} + số cặp $e_{lk\sigma}$
= 2 $\rightarrow$ A:sp lai hóa thẳng
= 3 $\rightarrow$ A:sp² lai hóa tam giác
= 4 $\rightarrow$ A:sp³ lai hóa tứ diện

Ví dụ: BeCl₂ - số cặp e quanh Be = $\frac{1}{2}(16 - 8 \cdot 2) + 2 = 2$
Be $\rightarrow$ sp

Lai hóa sp

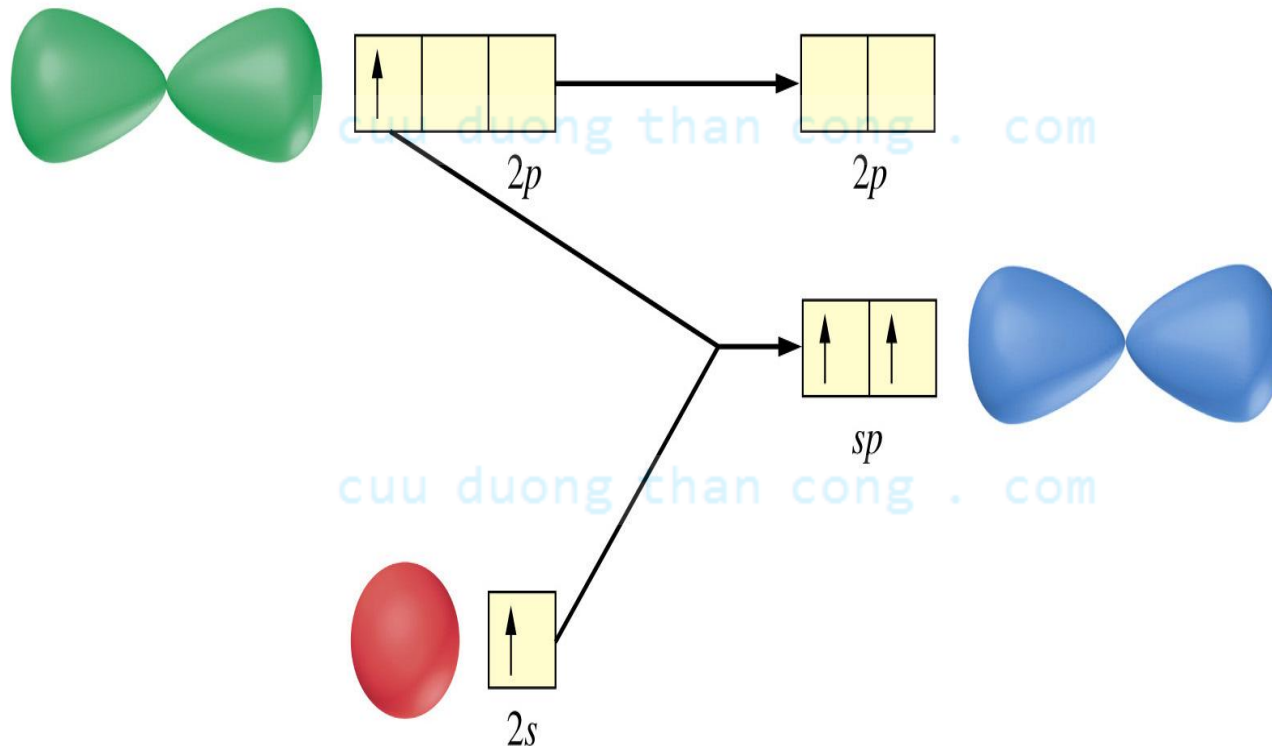
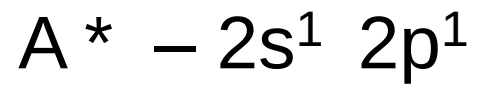
- Số cặp e quanh A = 2 $\rightarrow$ A ở trạng thái lai hóa SP
- AB_2 dạng thẳng góc lk 180°



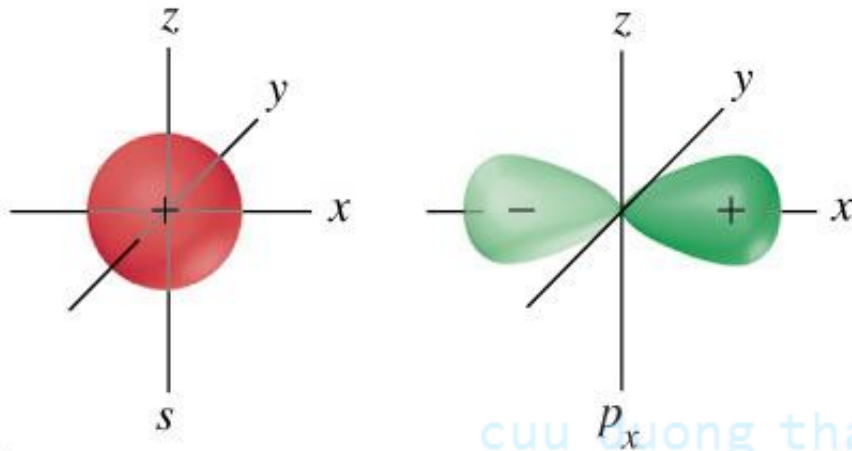
linear



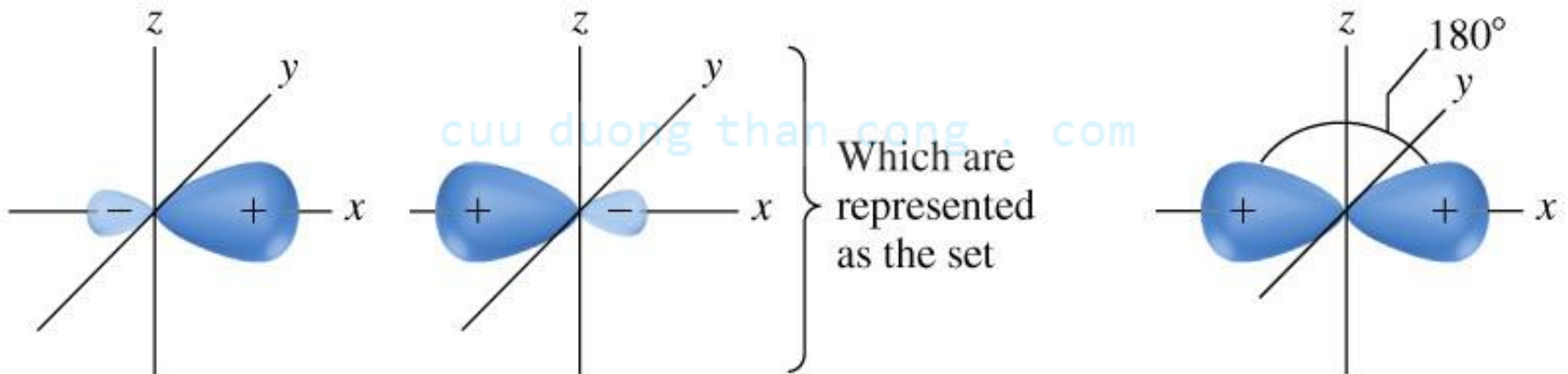
LAI HOÁ SP



Lai hóa sp



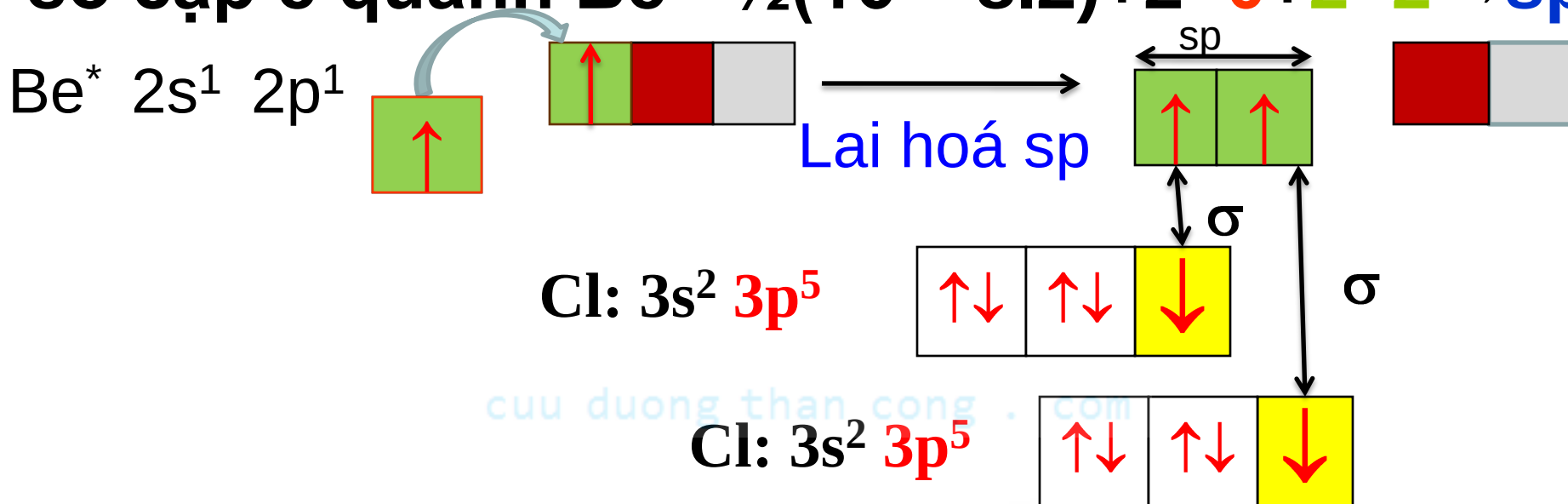
Combine to generate
two *sp* orbitals





BLK=1; 180⁰

số cặp e quanh Be = $\frac{1}{2}(16 - 8.2) + 2 = 0 + 2 = 2 \rightarrow sp$



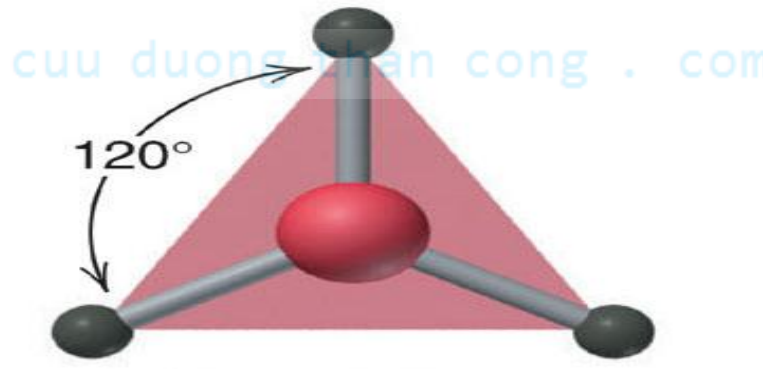
Lai hóa sp^2

Số cặp e quanh A = 3 $\rightarrow$ A ở trạng thái lai hóa SP^2

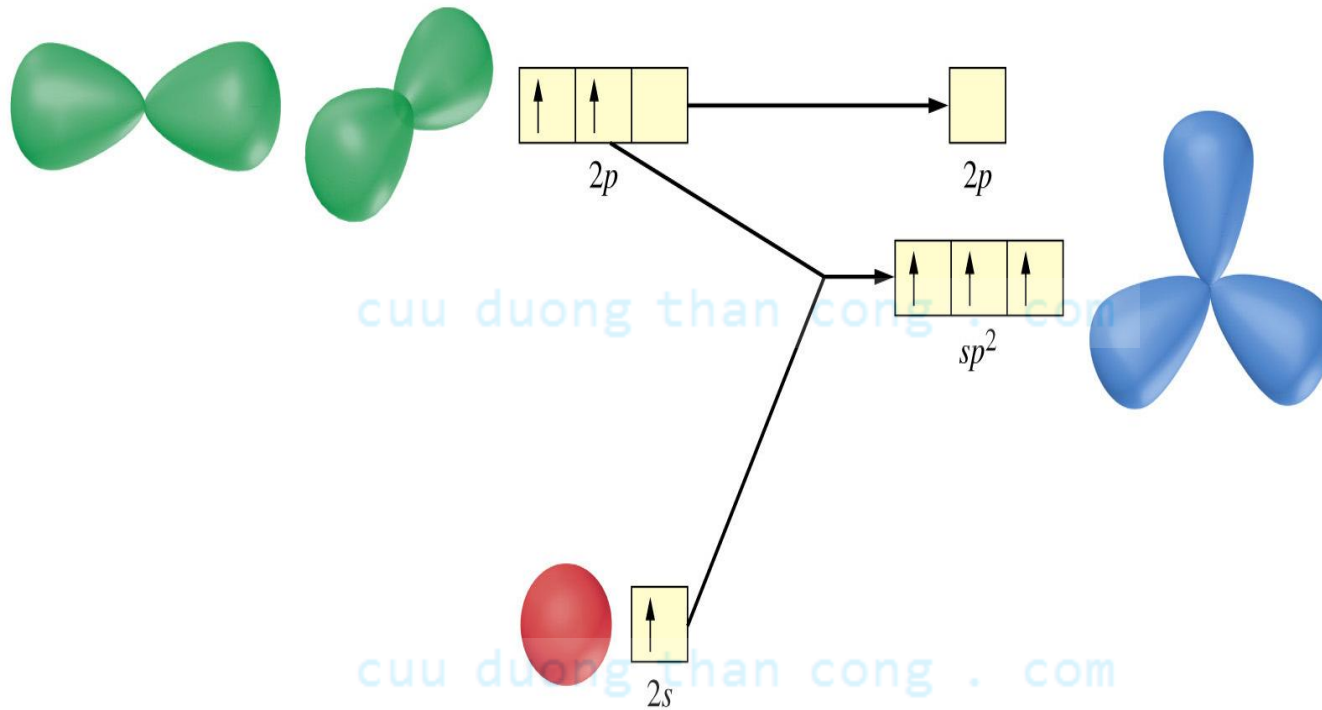
AB_3E_0 , AB_2E_1 - góc hóa trị 120°



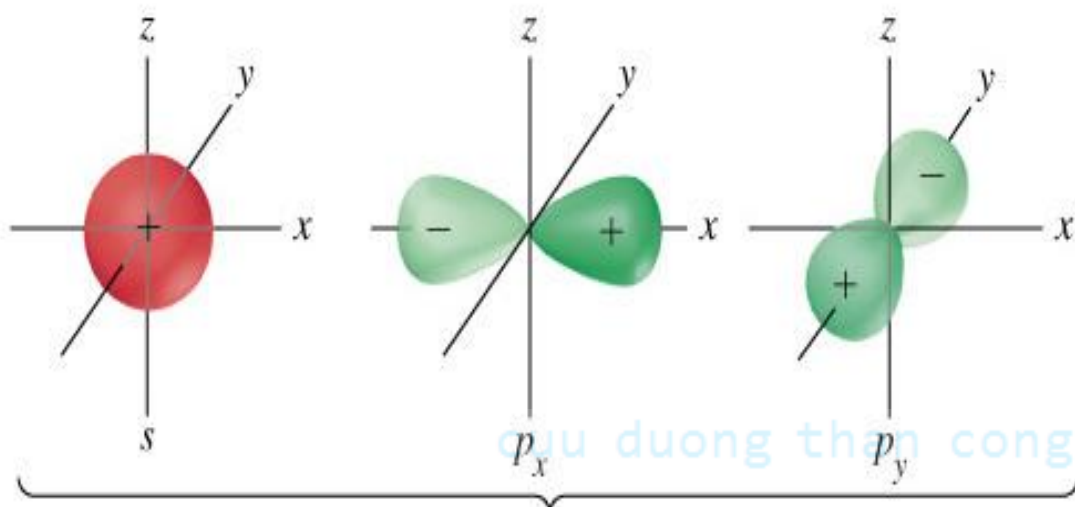
trigonal planar



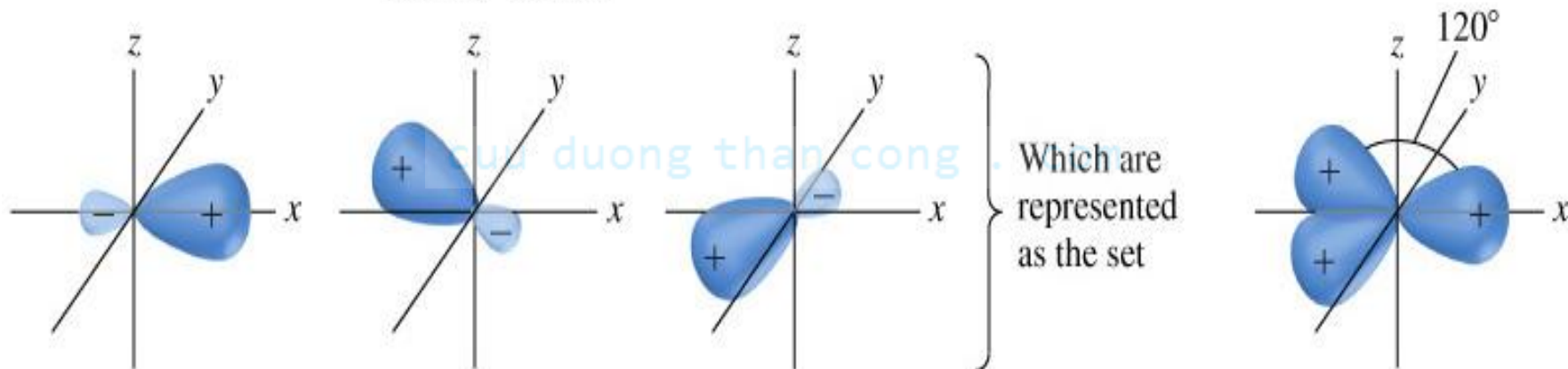
LAI HÓA SP²

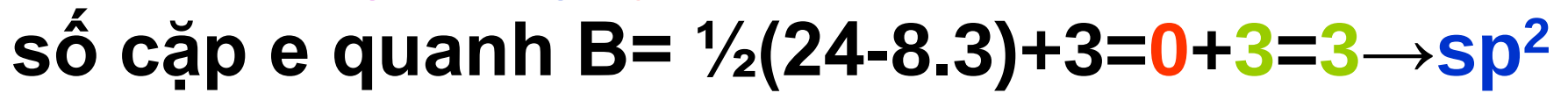


Lai hóa sp^2



Combine to generate
three sp^2 orbitals





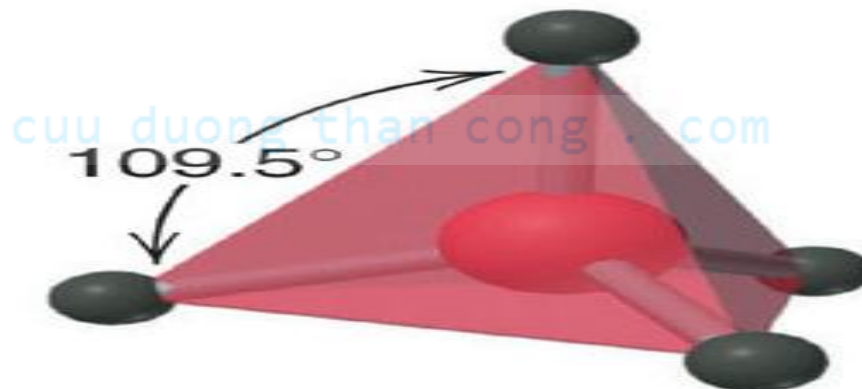
Lai hóa sp^3

Số cặp e quanh A = 4 $\rightarrow$ A ở trạng thái lai hóa SP^3

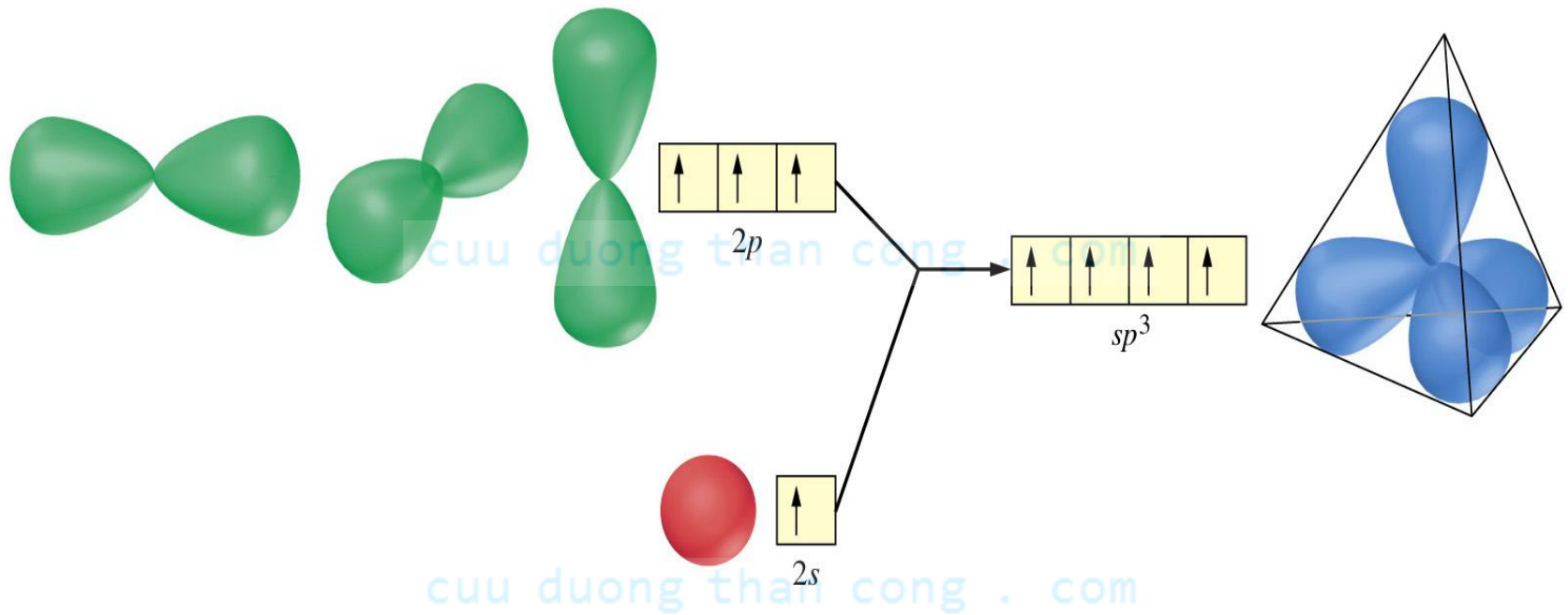
AB_4E_0 , AB_3E_1 , AB_2E_2 - góc hóa trị $109^\circ 28'$

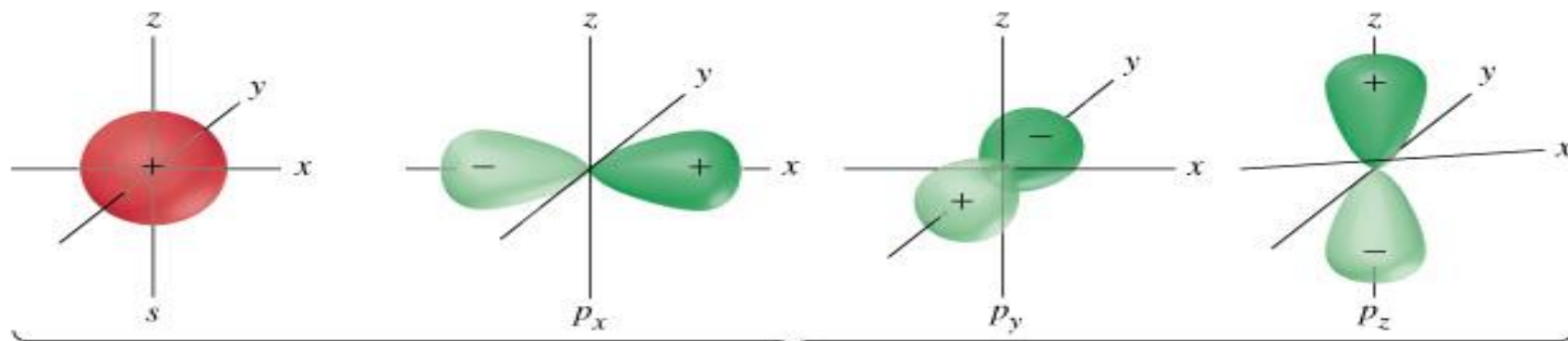


tetrahedral

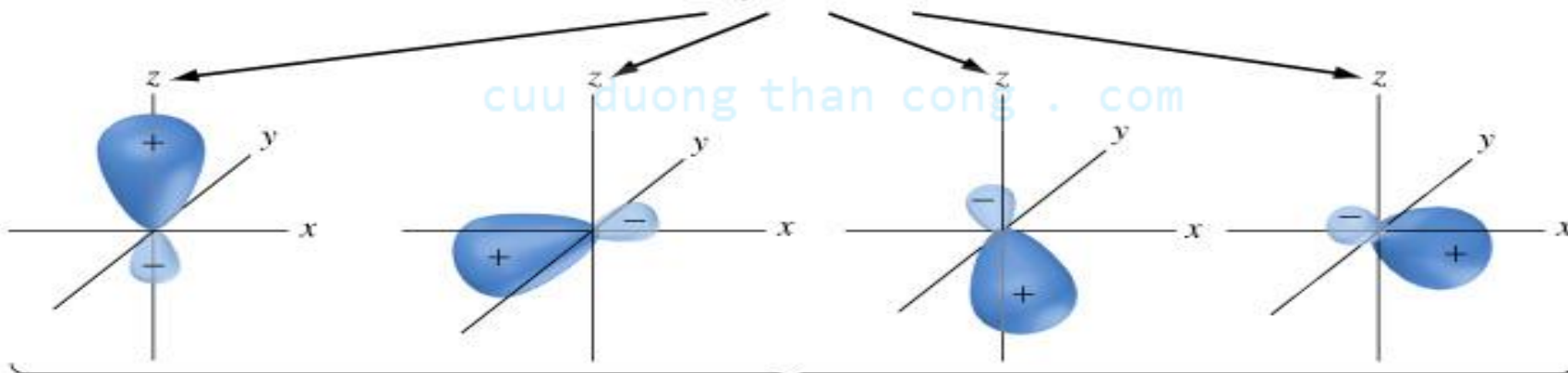


LAI HÓA sp^3

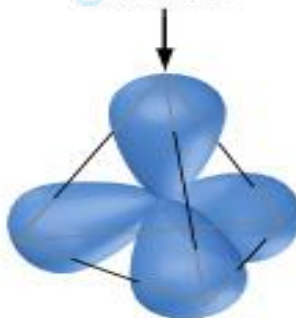




Combine to generate
four sp^3 orbitals

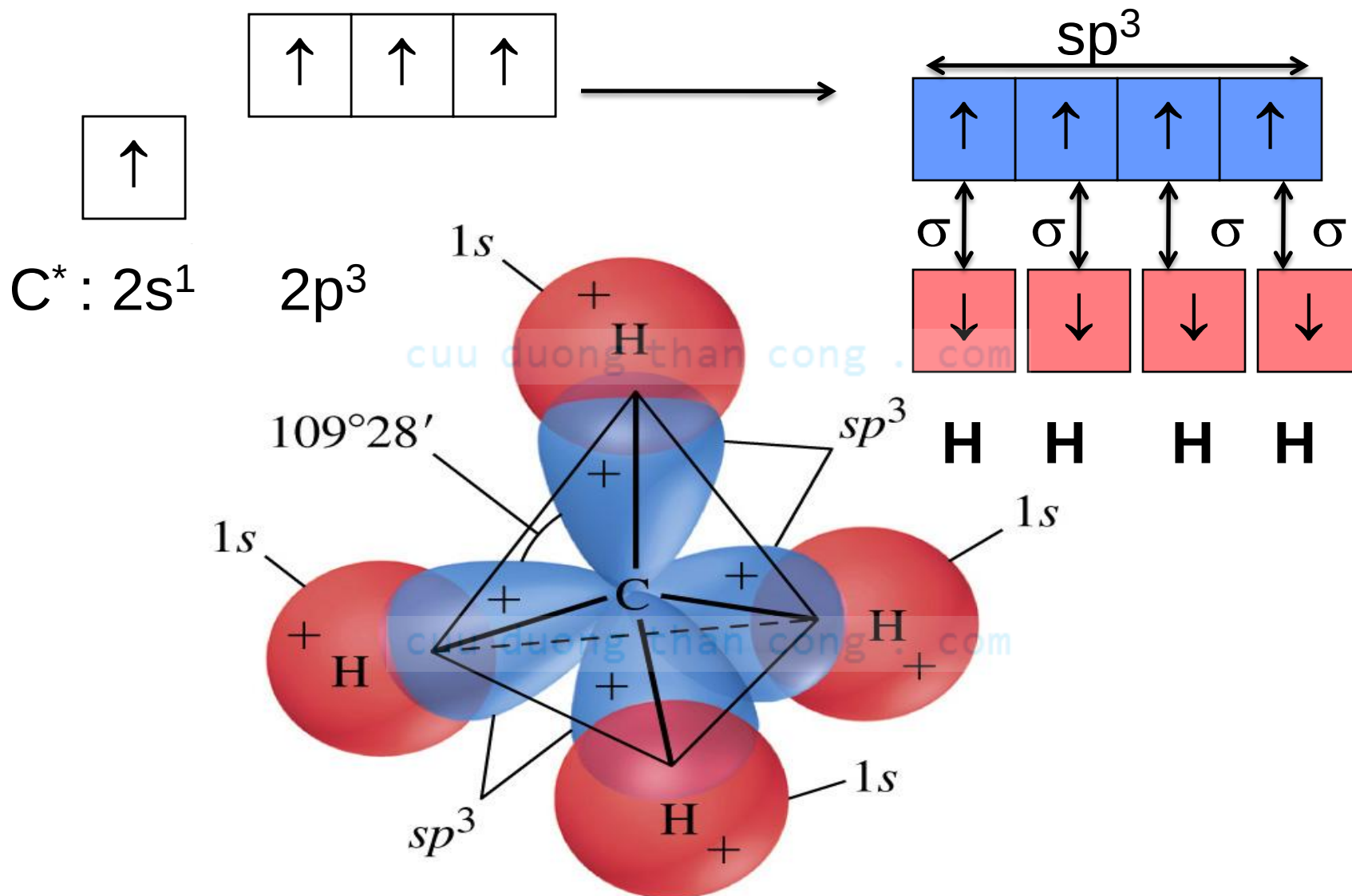


Which are represented
as the set

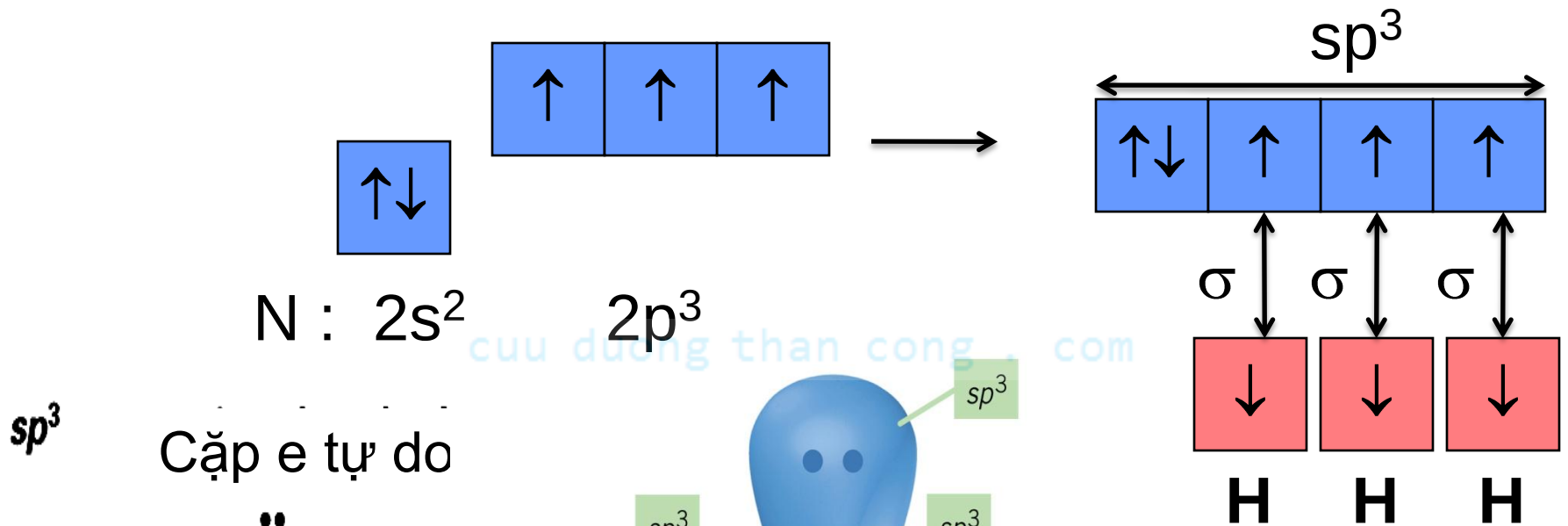


CH₄ (AB₄) blk=1 ; 109° 5

số cặp e quanh C = $\frac{1}{2}(8 - 2 \cdot 4) + 4 = 0 + 4 = 4 \rightarrow sp^3$

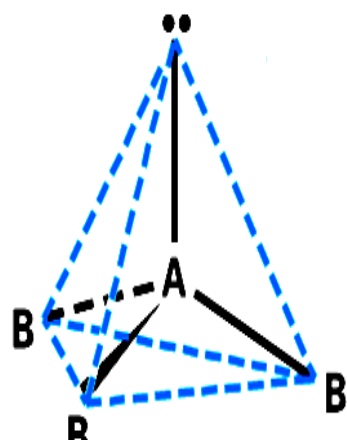


NH₃ (AB₃E₁) blk=1 ; $\widehat{\text{H-N-H}}=107^\circ 3$
 số cặp e quanh N = $1/2(8 - 2 \cdot 3) + 3 = 1 + 3 = 4 \rightarrow \text{sp}^3$

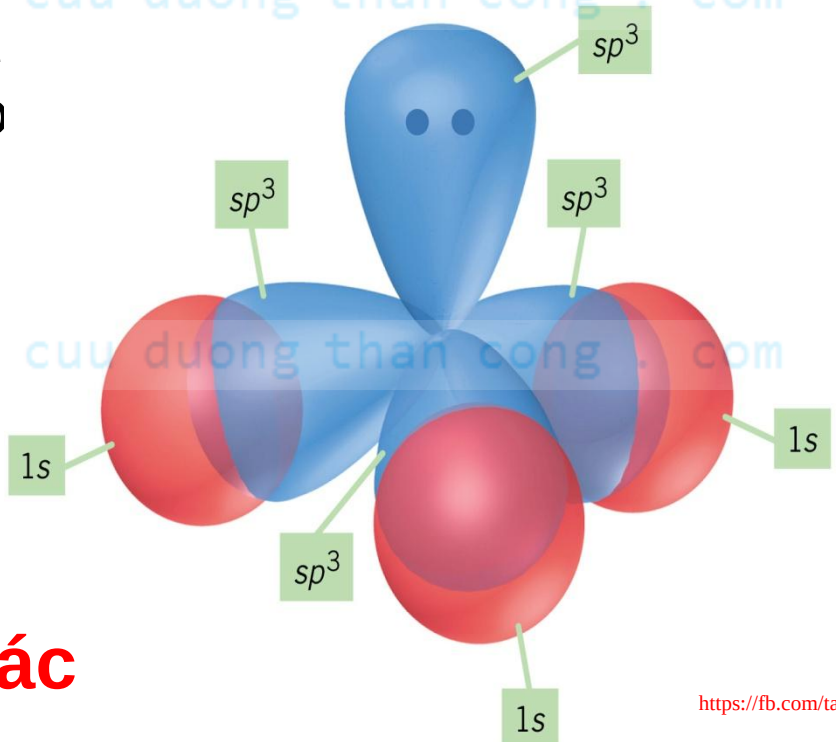


sp³

Cặp e tự do

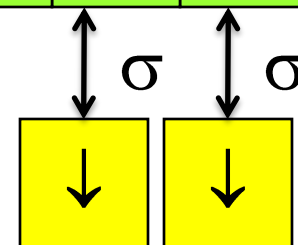
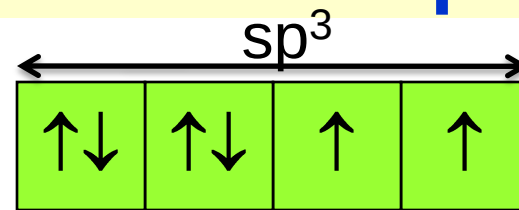
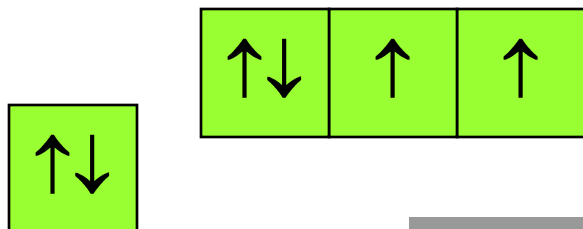


Tháp tam giác
 CuuDuongThanCong.com



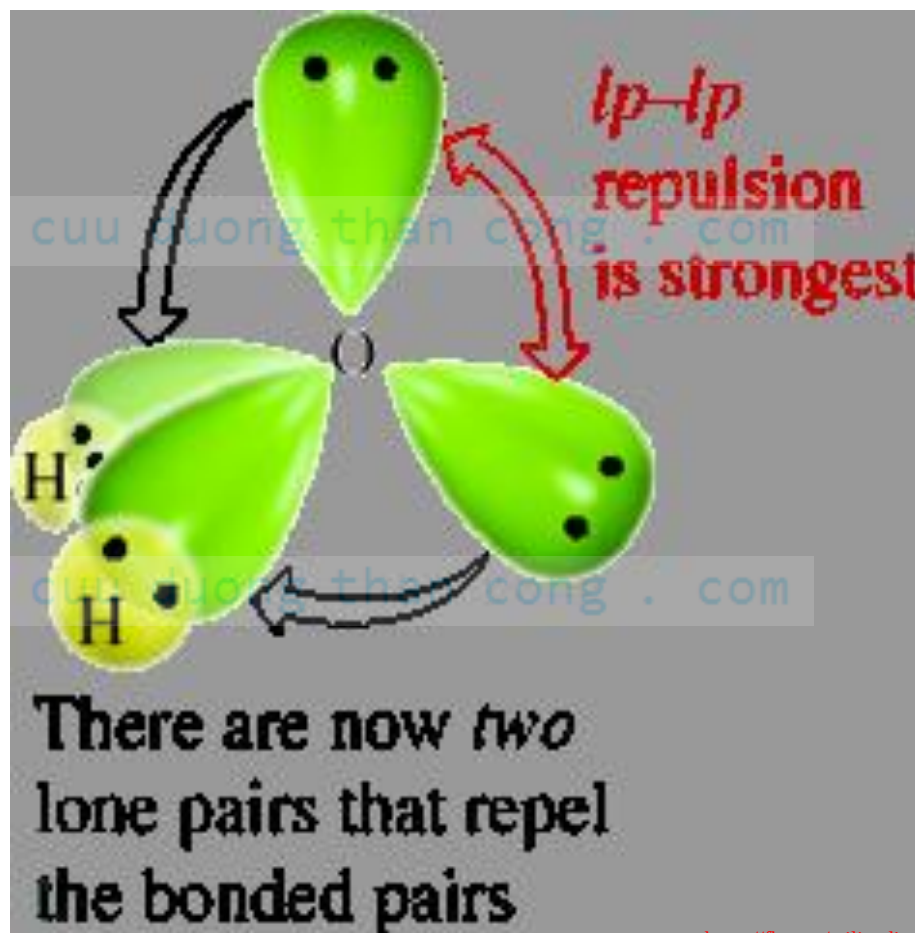
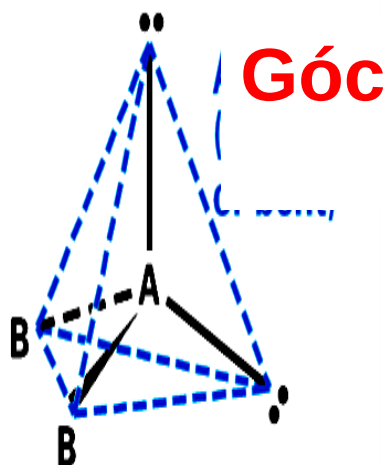
H₂O (AB₂E₂) **blk=1** ; **HOH= 104° 5**

số cặp e quanh **O** = $\frac{1}{2}(8-2 \cdot 2)+2=2+2=4 \rightarrow \mathbf{sp^3}$



sp^3

2 unshared pairs



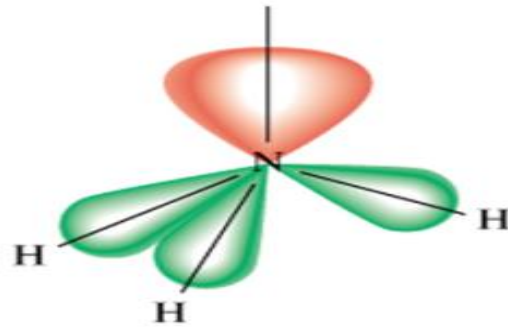
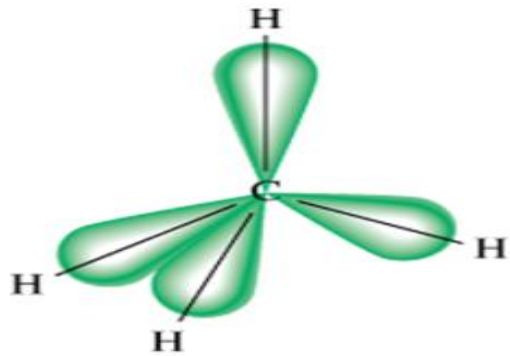
Ảnh hưởng của cặp điện tử tự do đến góc hóa trị



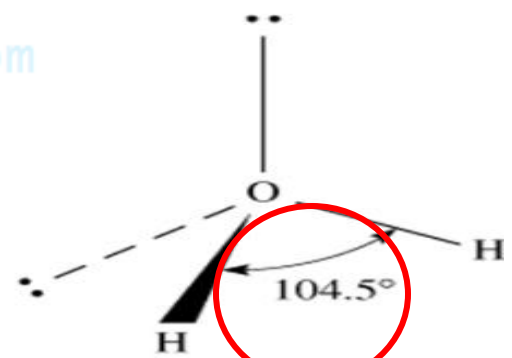
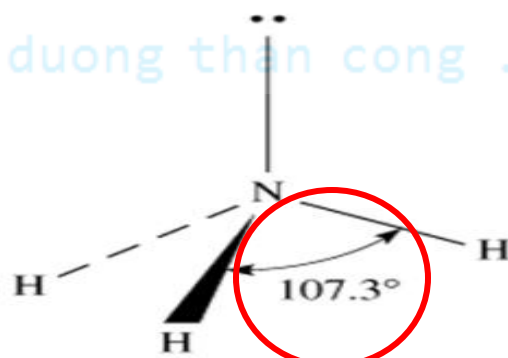
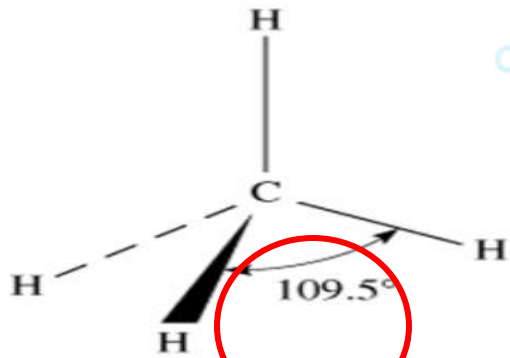
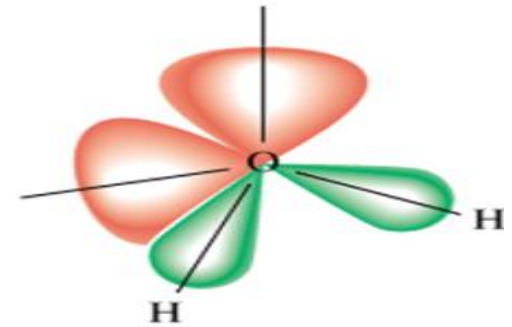
cuu duong than cong . com

cuu duong than cong . com

Ảnh hưởng của cặp điện tử tự do



(a)



$2e_{td} \leftrightarrow 2e_{td}$
Lực đẩy

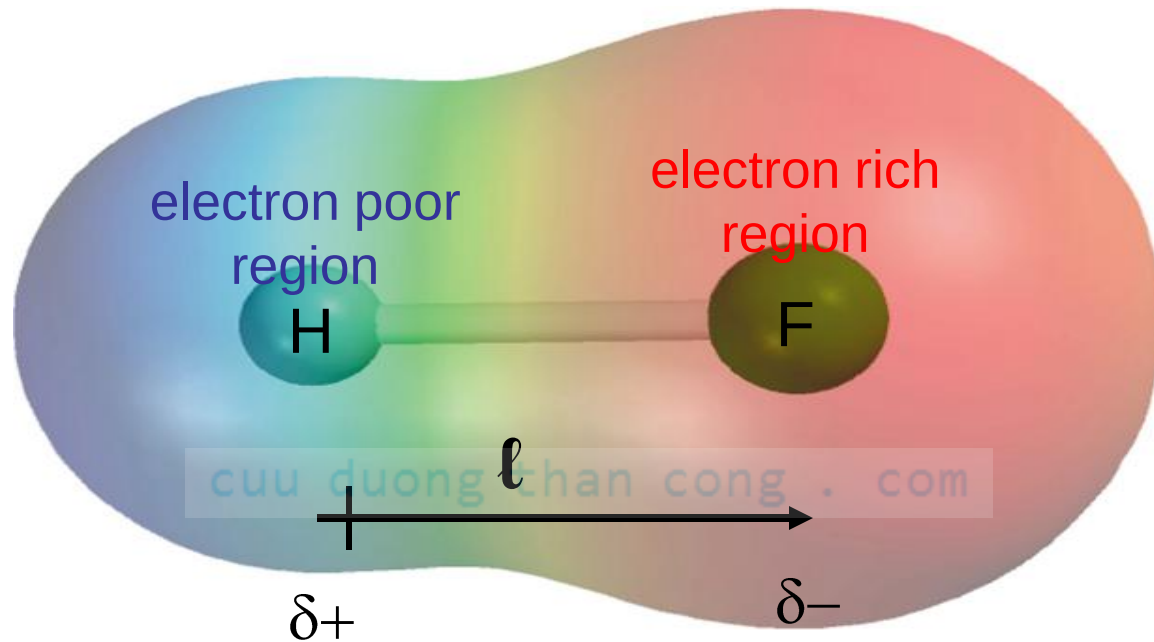
>

$2e_{td} \leftrightarrow 2e_{lk}$
Lực đẩy

>

$2e_{lk} \leftrightarrow 2e_{lk}$
Lực đẩy

Momen lưỡng cực và phân tử có cực



Momen lưỡng cực $\mu = \delta \times \ell$

δ : Điện tích [đơn vị tính điện] . com

ℓ : khoảng cách giữa hai điện tích [cm]

ĐIỀU KIỆN PHÂN TỬ CỘNG HÓA TRỊ CÓ CỰC

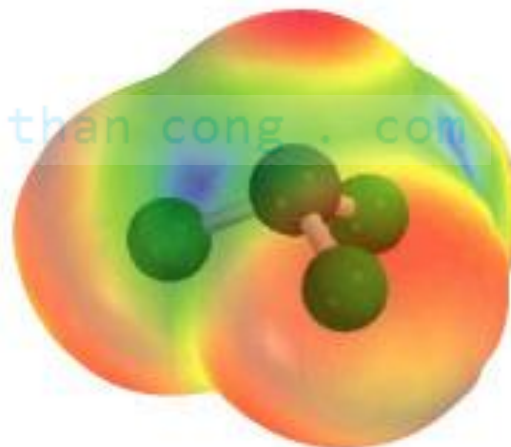
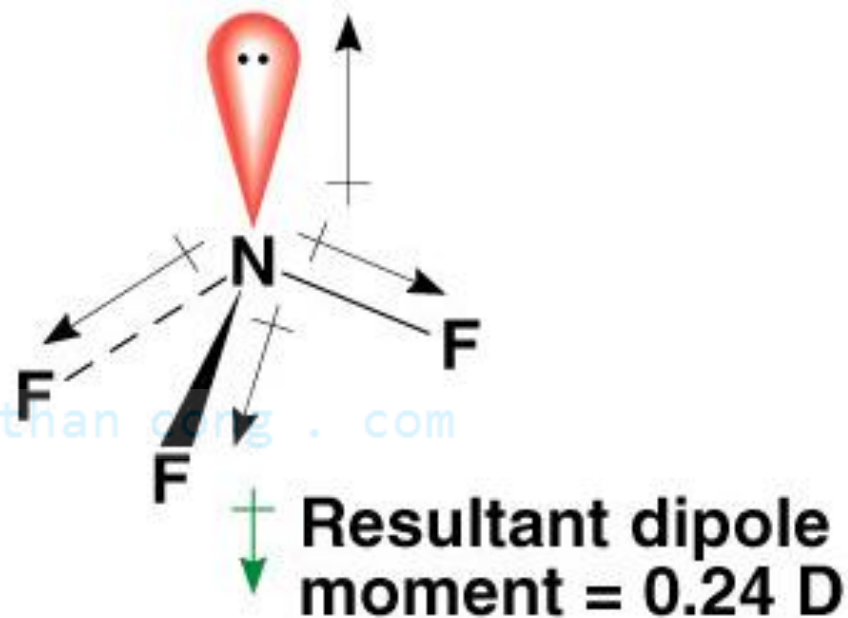
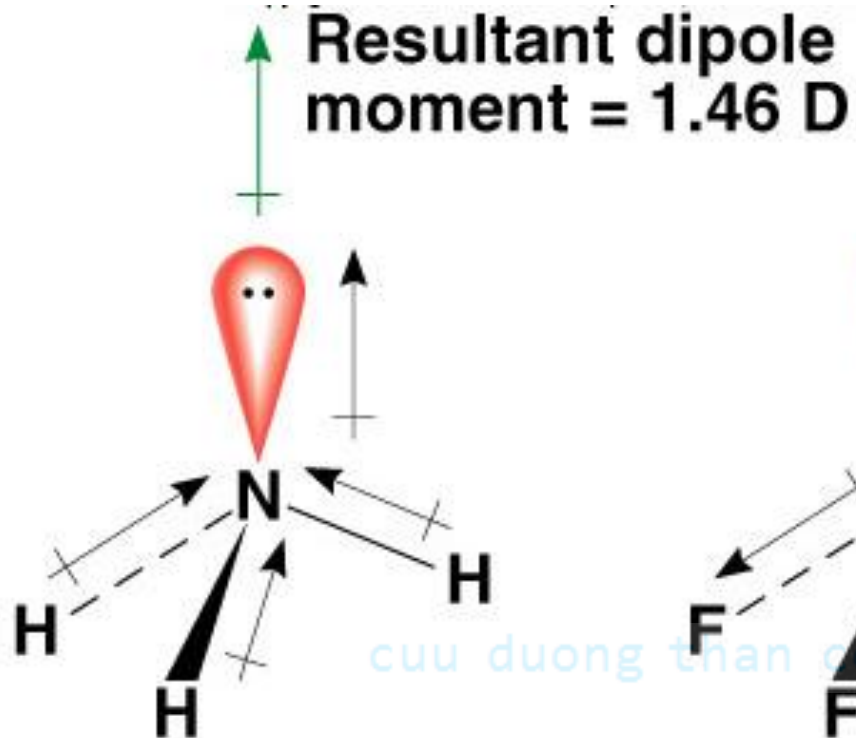
Liên kết cộng hóa trị có cực
Cấu tạo phân tử không đối xứng

[cuu duong than cong . com](http://cuuduongthancong.com)

[cuu duong than cong . com](http://cuuduongthancong.com)

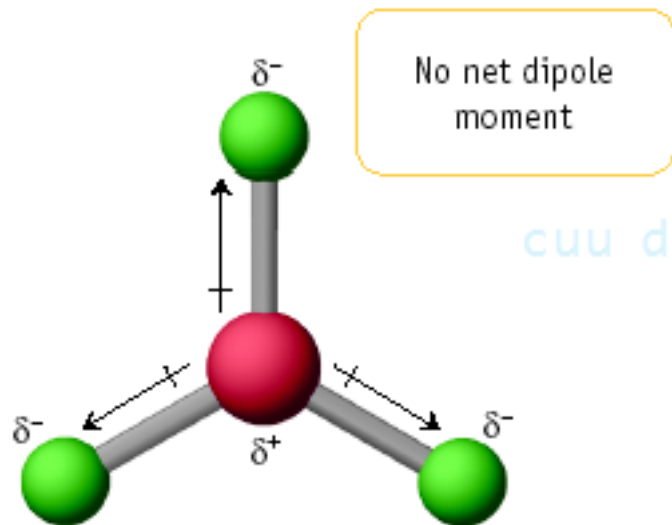
- **Momen lưỡng cực của phân tử là tổng vectơ momen lưỡng cực của các liên kết và cặp electron hoá trị tự do trong các AO lai hóa có trong phân tử.**

cuu duong than cong . com

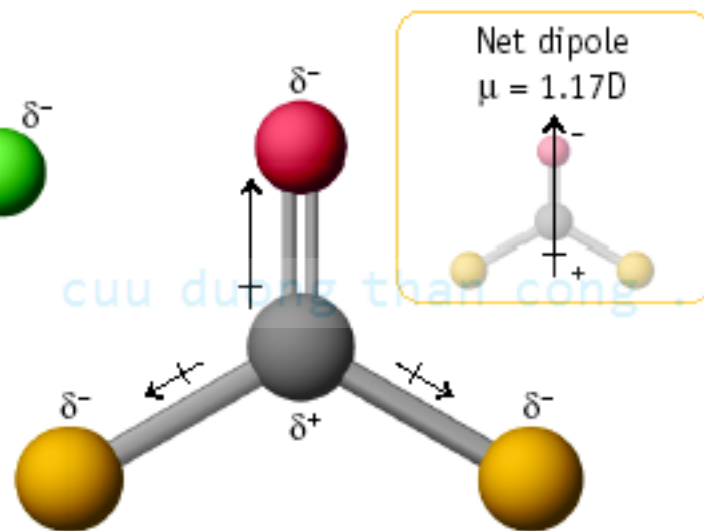


Có cực hay không cực?

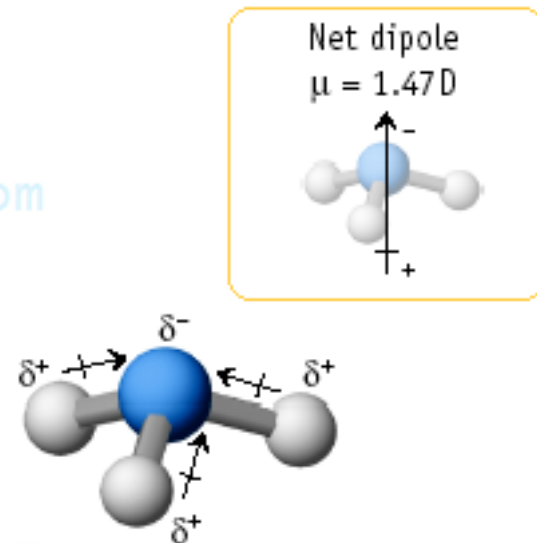
BF_3 , Cl_2CO , và NH_3 .



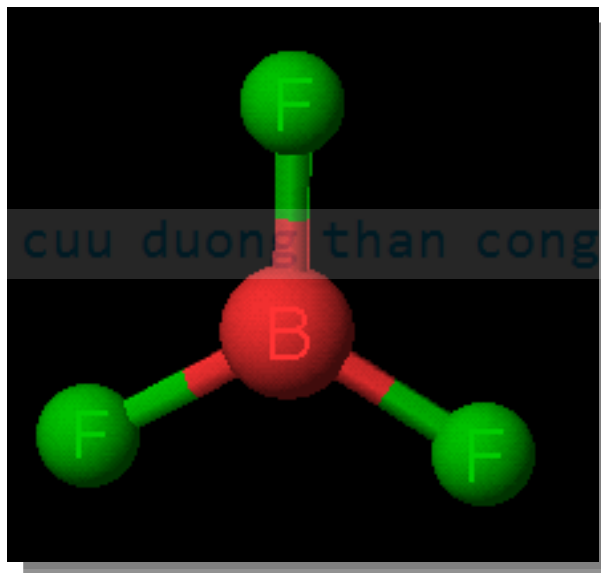
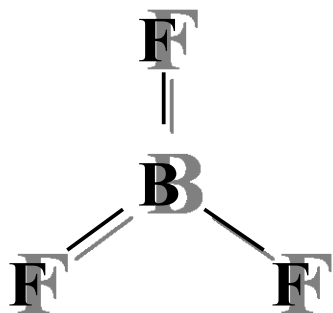
cuu duong than cong . com



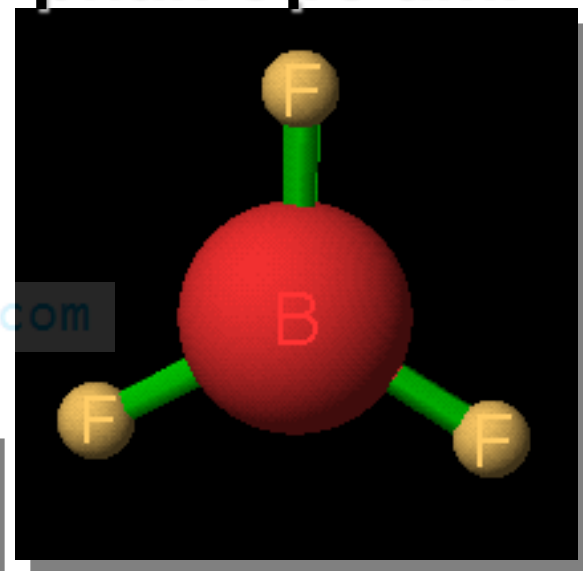
cuu duong than cong . com



Phân tử không cực, BF_3

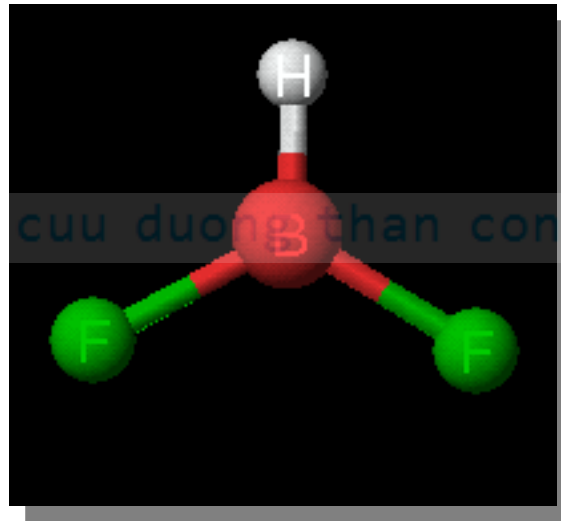
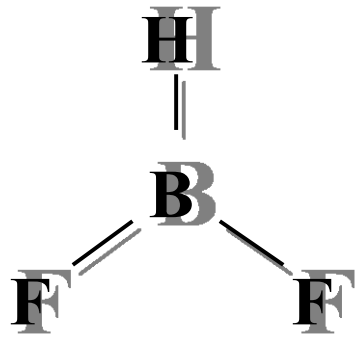


Nguyên tử B bị phân cực dương và nguyên tử F bị phân cực âm.



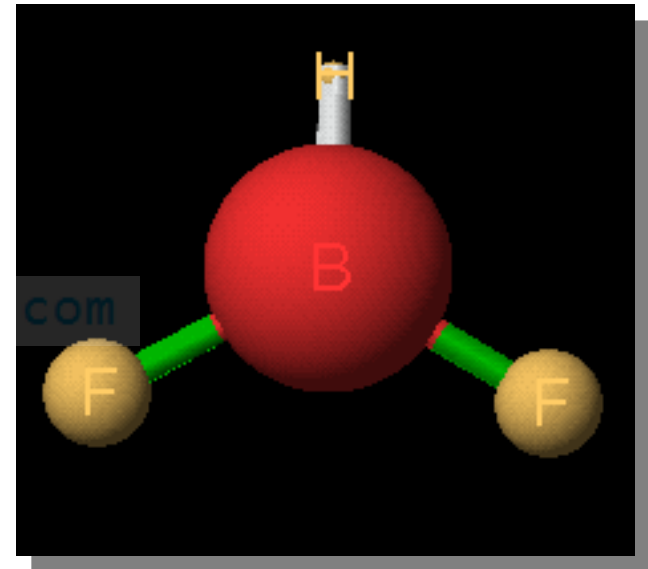
Liên kết B—F trong phân tử BF_3 là
Nhưng phân tử có cấu tạo đối
xứng nên không cực.

Molecular Polarity, HBF_2

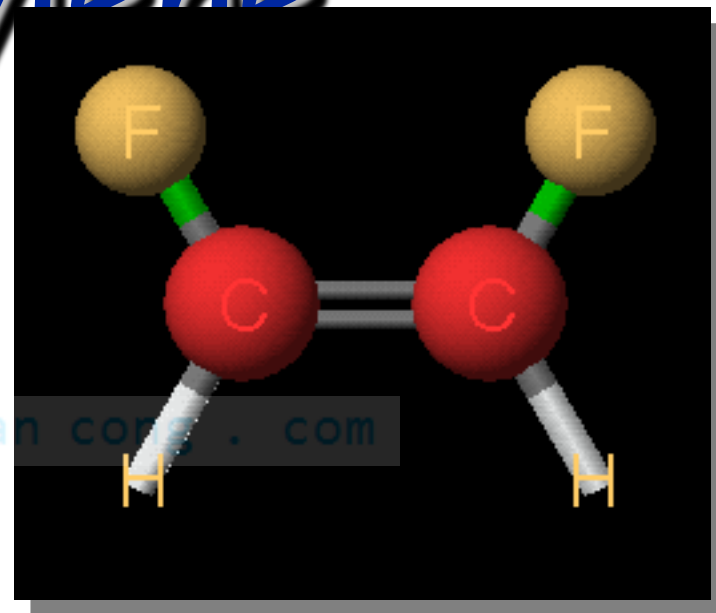
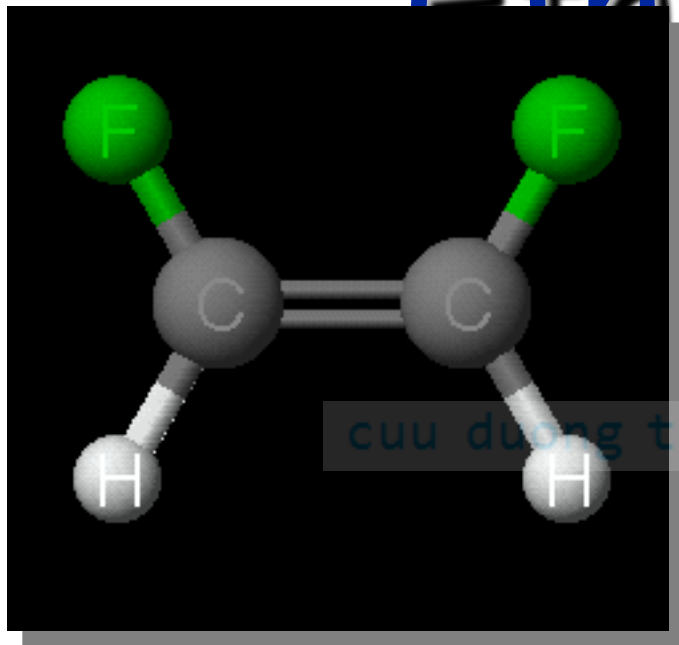


B bị phân cực dương nhưng H & F bị phân cực âm.

Liên kết B—F và B—H trong HBF_2 là có cực. Nhưng do ptử không đối xứng nên có cực.

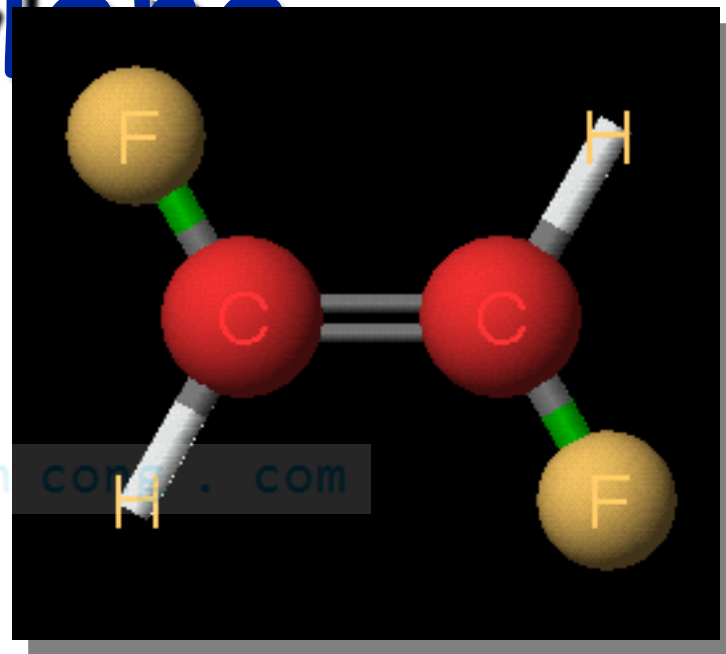
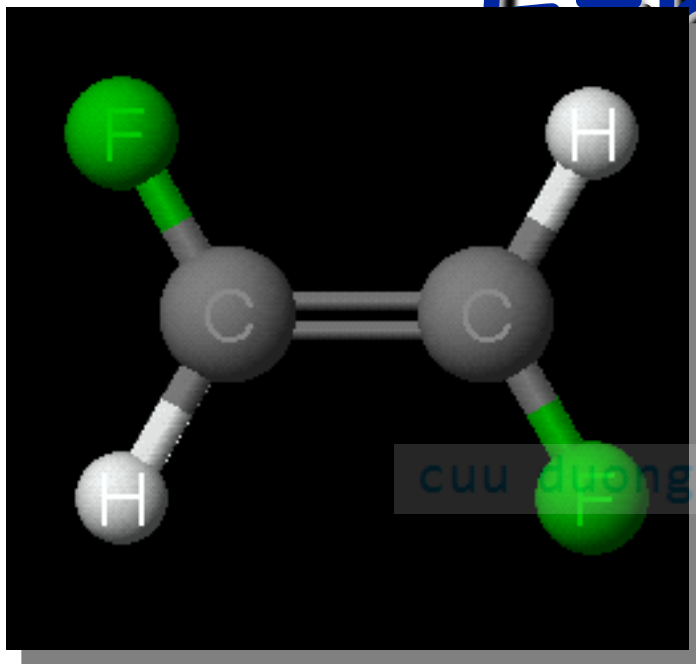


Substituted Ethylene



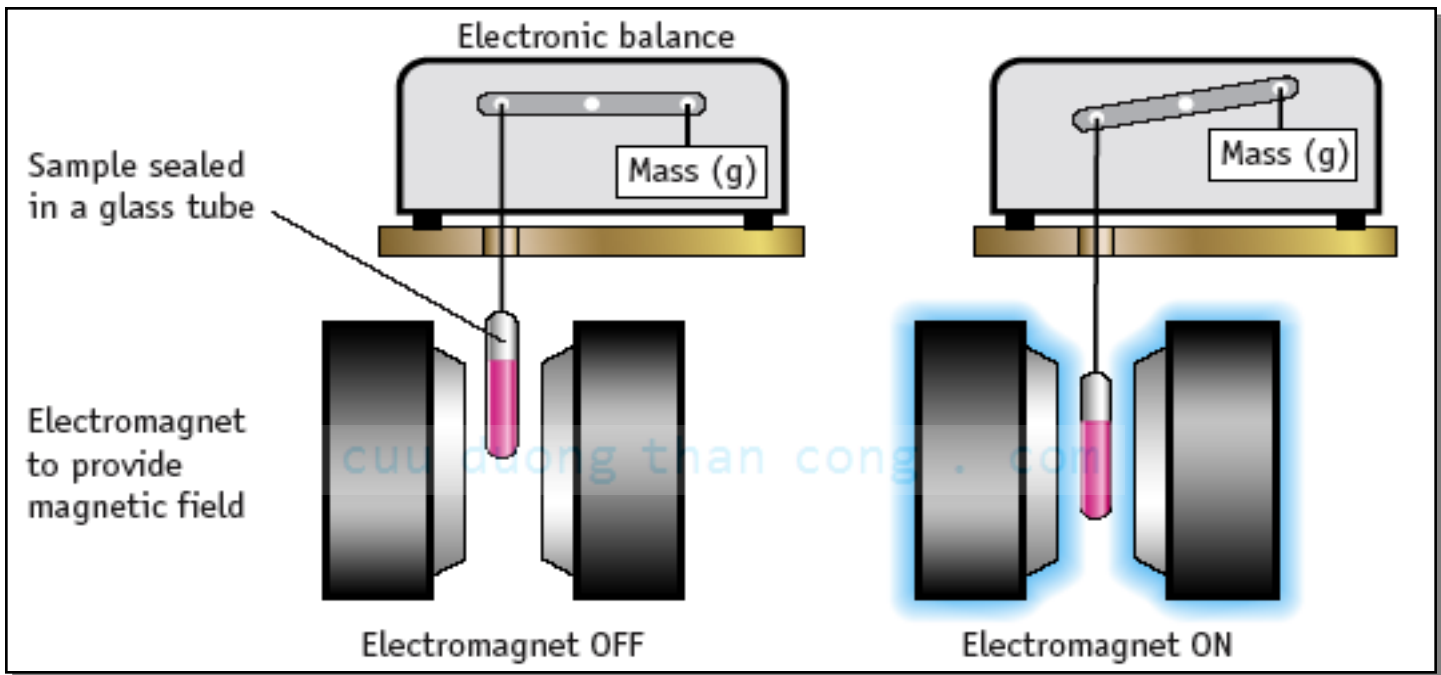
- Liên kết C—F phân cực mạnh hơn liên kết C—H.
- Do cả hai liên kết C—F ở cùng một phía, **phân tử có cực.**

Substituted Ethylene



- Liên kết C—F phân cực mạnh hơn liên kết C—H.
- Do cả hai liên kết C—F nằm ở hai phía đối nhau , **phân tử không phân cực**

Tính chất từ của phân tử



- **Chất thuận từ (Paramagnetic)**: chất có electron độc thân. Chất này khi đặt trong từ trường sẽ bị nam châm hút.
- **Chất nghịch từ (Diamagnetic)**: chất không có điện tử độc thân. Chất này khi đặt trong từ trường sẽ bị đẩy.