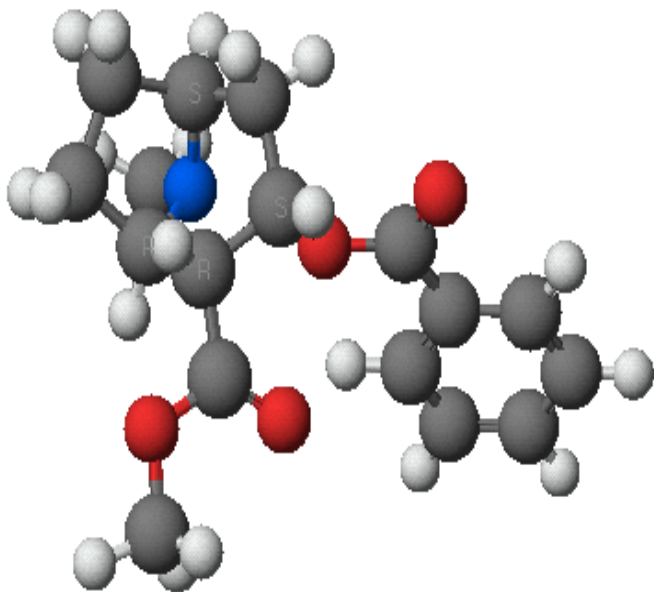
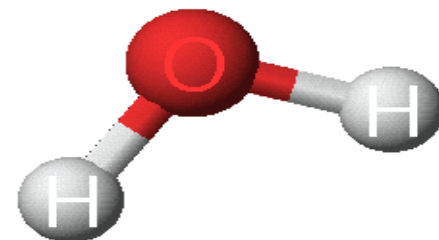




CHƯƠNG IV

CHEMICAL BONDING

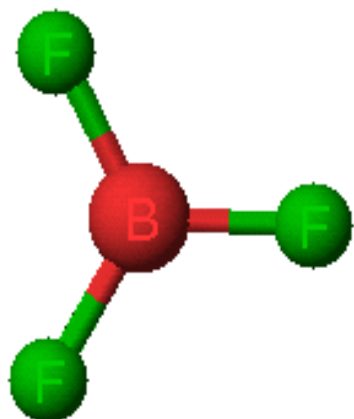


cuu duong than cong . com

LIÊN KẾT HÓA HỌC VÀ

cuu duong than cong . com

CẤU TẠO PHÂN TỬ



NHỮNG KHÁI NIỆM CƠ BẢN VỀ LIÊN KẾT HÓA HỌC.

LIÊN KẾT CỘNG HÓA TRỊ

LIÊN KẾT ION

cuu duong than cong . com

LIÊN KẾT KIM LOẠI

LIÊN KẾT VAN DER WAALS

cuu duong than cong . com

LIÊN KẾT HYDRO

NHỮNG KHÁI NIỆM CƠ BẢN VỀ LIÊN KẾT HÓA HỌC

- Bản chất của liên kết
- Một số đặc trưng liên kết
- Các loại liên kết

Bản chất của liên kết

***Electron hoá trị - $ns(s)$, $nsnp(p)$, $(n-1)dns(d)$,
 $(n-2)f(n-1)dns(f)$***

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

cuu duong than cong . com

Một số đặc trưng liên kết

Đường cong thế năng

Độ dài liên kết

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

Năng lượng liên kết

Bậc liên kết

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

Góc hóa trị

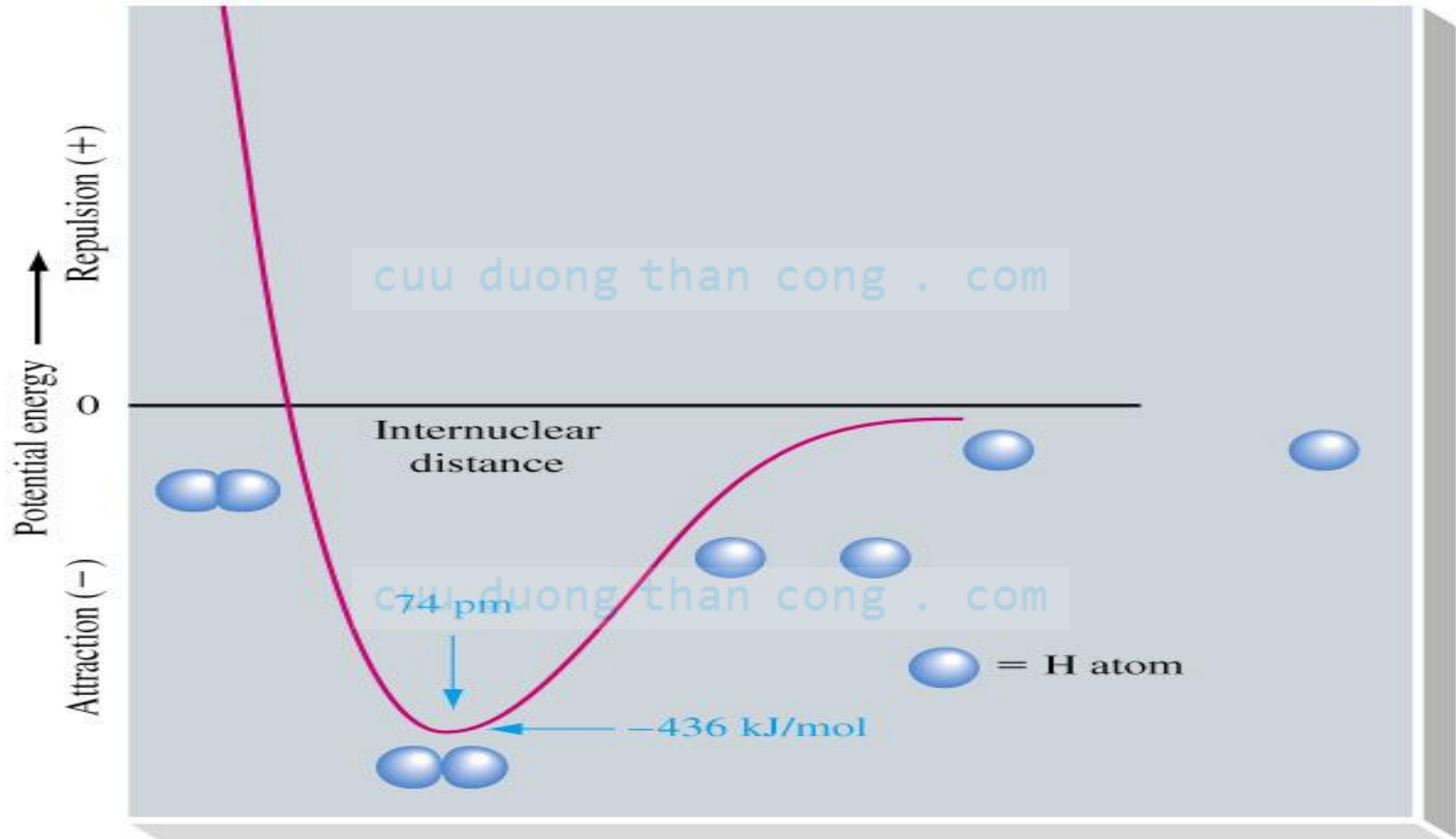
H₂ Bond Formation

cuu duong than cong . com

Đường cong thế năng

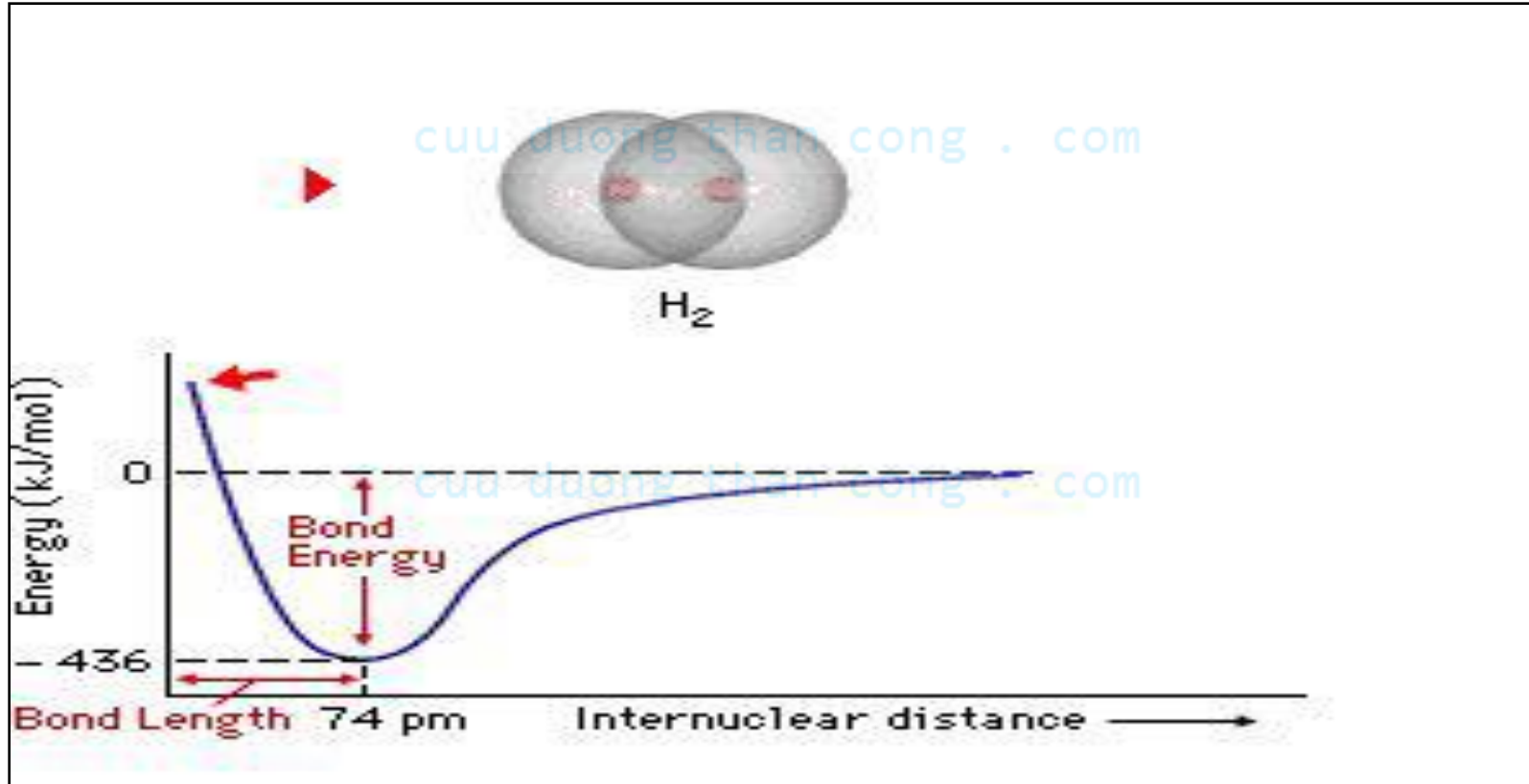
Độ bền liên kết $E_{lk}=436\text{kJ/mol}$

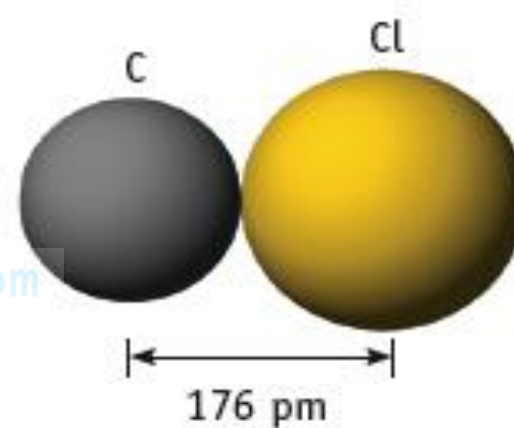
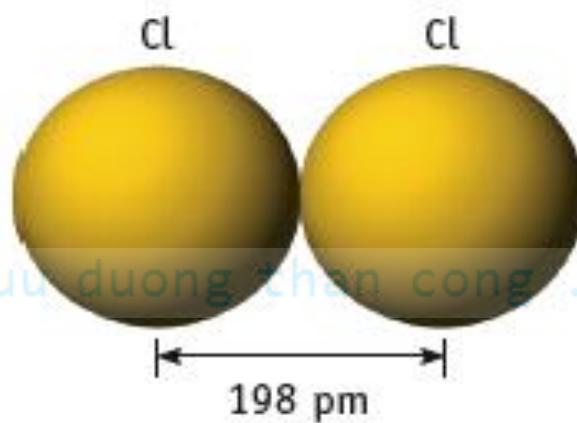
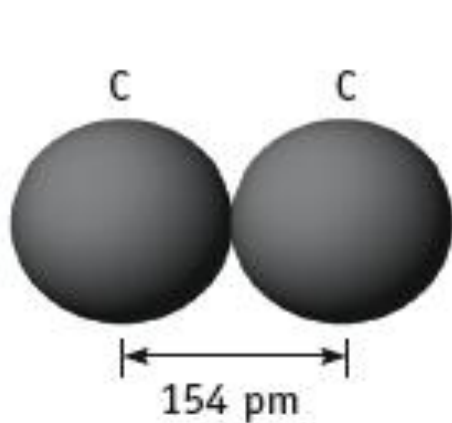
Chiều dài liên kết $d(\text{H}_2)= 74\text{pm}$



Độ dài liên kết (Bond Length)

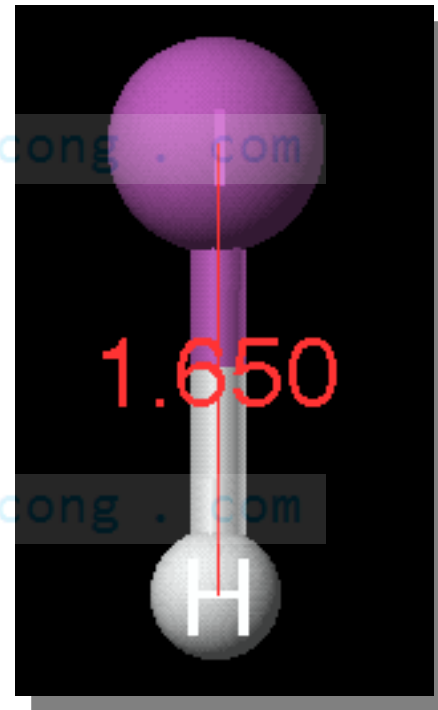
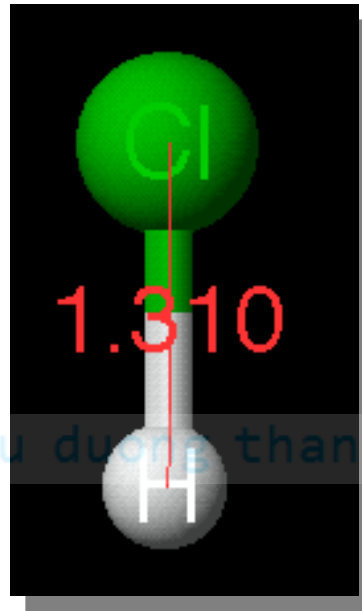
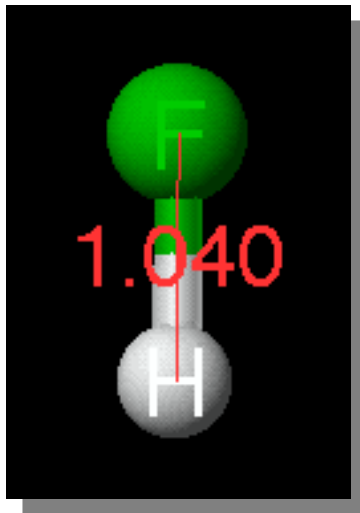
- Là khoảng cách giữa hai hạt nhân của hai nguyên tử tạo liên kết.***



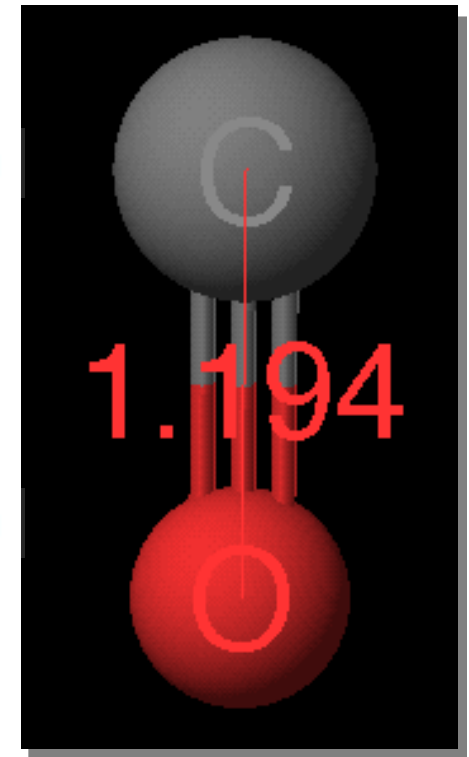
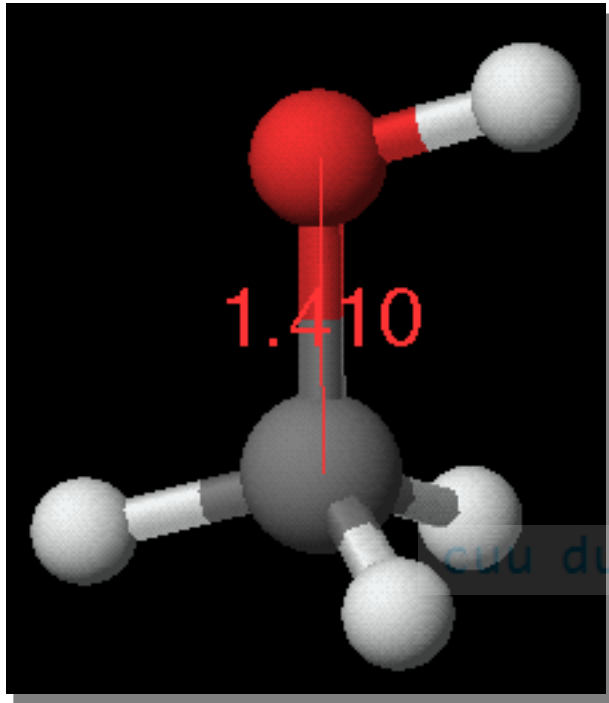


cuu duong than cong . com

Chiều dài liên kết
phụ thuộc vào
bán kính nguyên
tử tạo liên kết



Chiều dài liên kết phụ thuộc vào bậc liên kết



Năng lượng liên kết

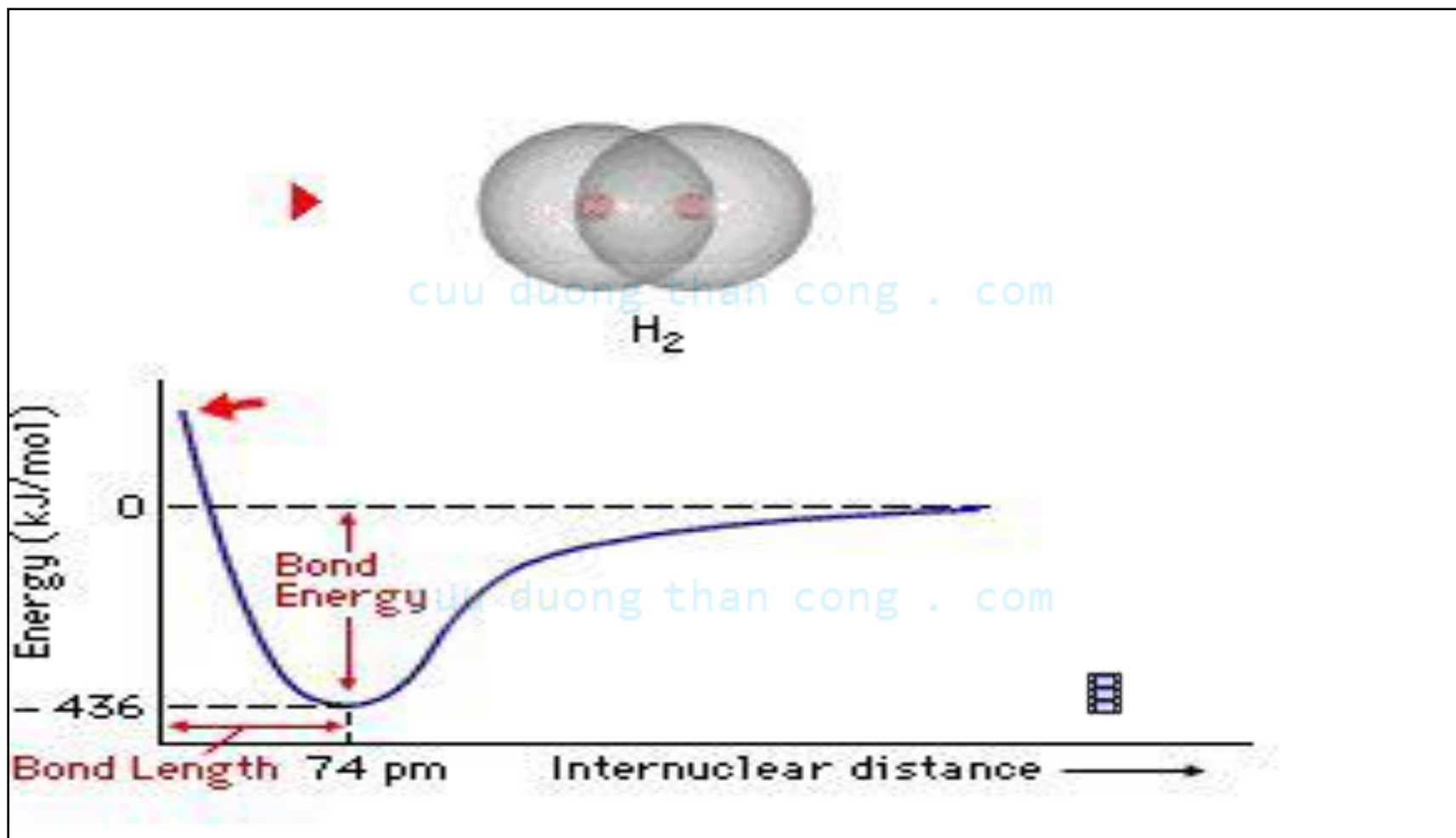


Table 9.10 Some Average Single- and Multiple-Bond Energies (kJ/mol)*

Single Bonds											
	H	C	N	O	F	Si	P	S	Cl	Br	I
H	436	413	391	463	565	328	322	347	432	366	299
C		346	305	358	485	—	—	272	339	285	213
N			163	201	283	—	—	—	192	—	—
O				146	—	452	335	—	218	201	201
F					155	565	490	284	253	249	278
Si						222	—	293	381	310	234
P							201	—	326	—	184
S								226	255	—	—
Cl									242	216	208
Br										193	175
I											151

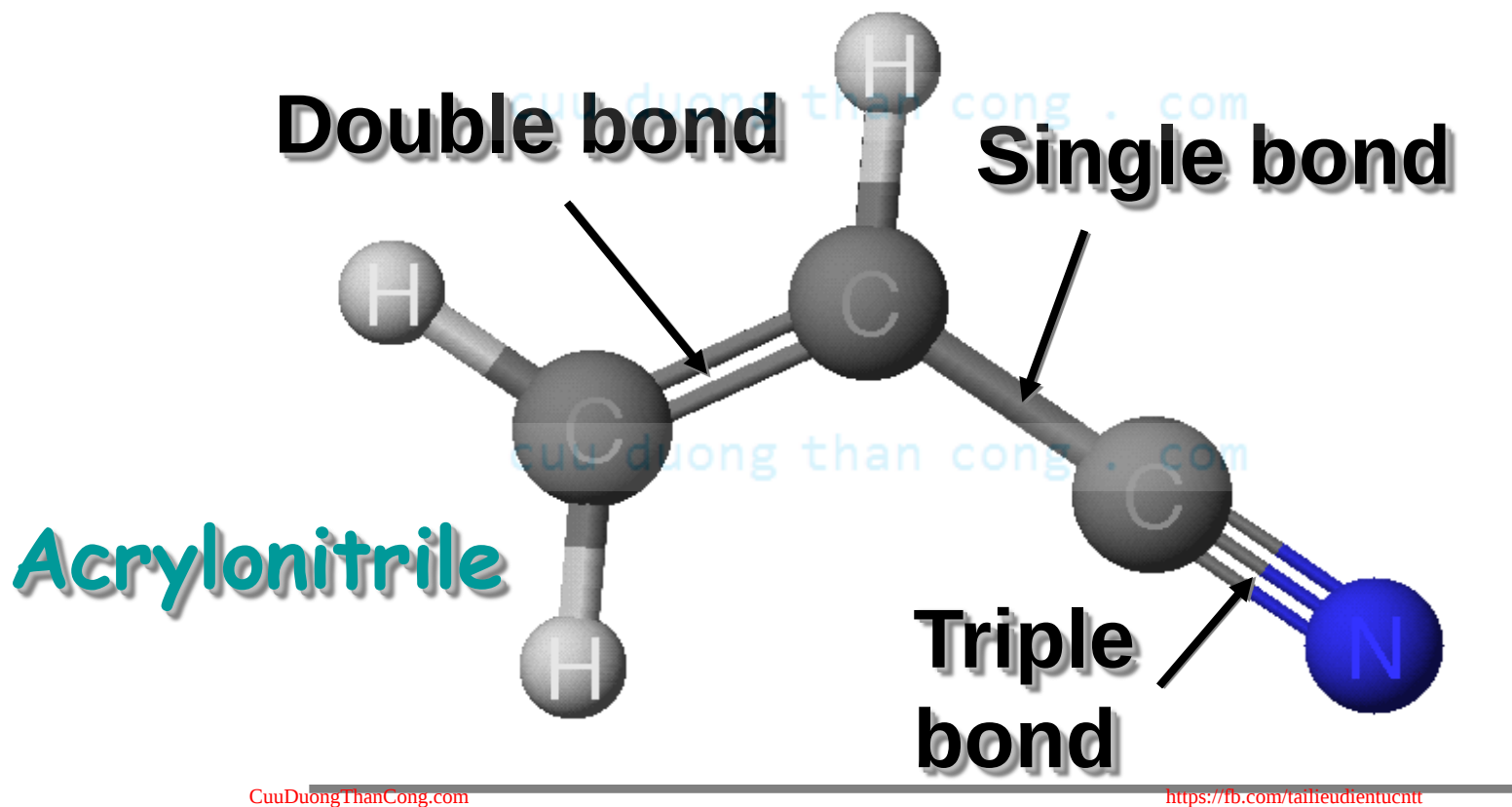
cuu duong than cong . com

Multiple Bonds

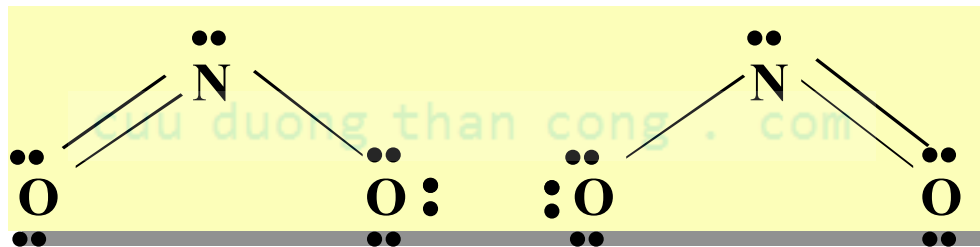
N = N	418	C = C	610
N ≡ N	945	C ≡ C	835
C = N	615	C = O	745
C ≡ N	887	C ≡ O	1046
O = O (in O ₂)	498		

Bậc liên kết

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



NO₂⁻ có 1 liên kết π không định chỗ



Bậc liên kết = 1.5

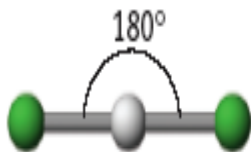
cuu duong than cong . com

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.

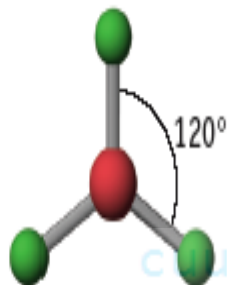
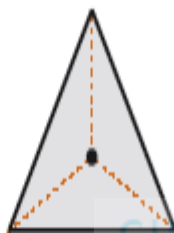
Góc hóa trị (AB_n $n \geq 2$)

Linear



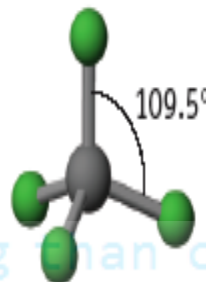
Example: BeF_2

Trigonal-planar



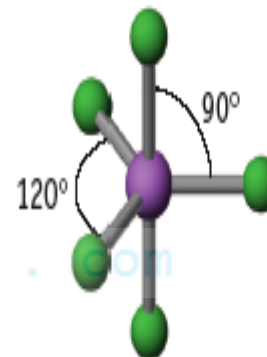
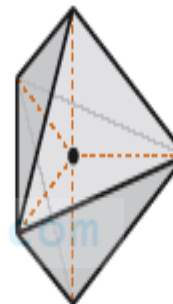
Example: BF_3

Tetrahedral



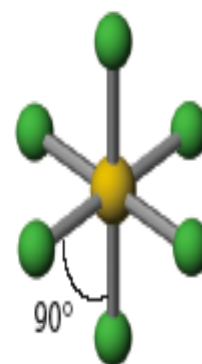
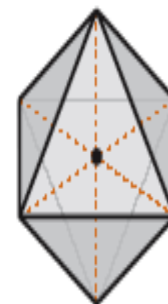
Example: CF_4

Trigonal-bipyramidal



Example: PF_5

Octahedral



Example: SF_6

Năng lượng liên kết

Liên kết	Bậc lk	Chiều dài lk	E_{lk}
----------	--------	--------------	----------



1

142 pm

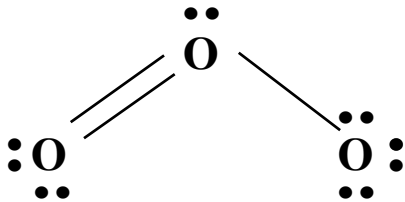
210 kJ/mol



2

121 pm

498 kJ/mol



1.5

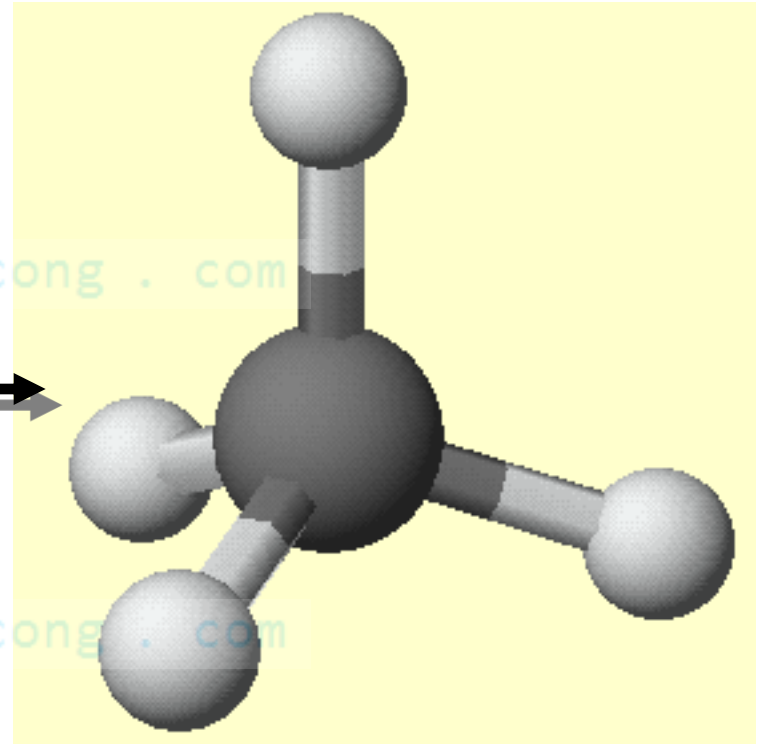
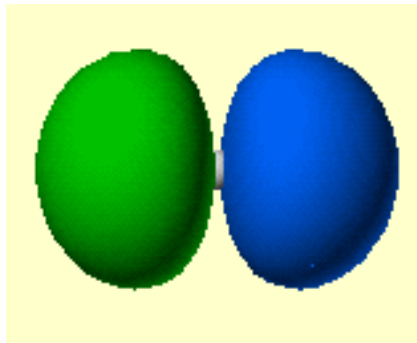
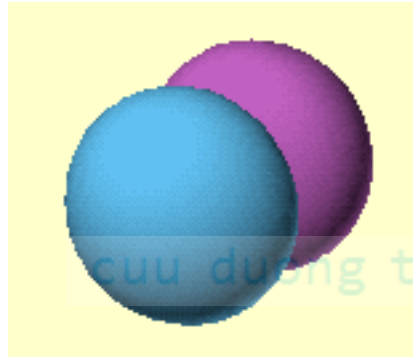
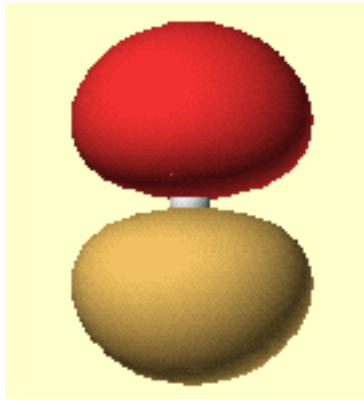
128 pm

?

Các loại liên kết

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

LIÊN KẾT CỘNG HÓA TRỊ THEO CƠ HỌC LƯỢNG TỬ



Atomic Orbitals

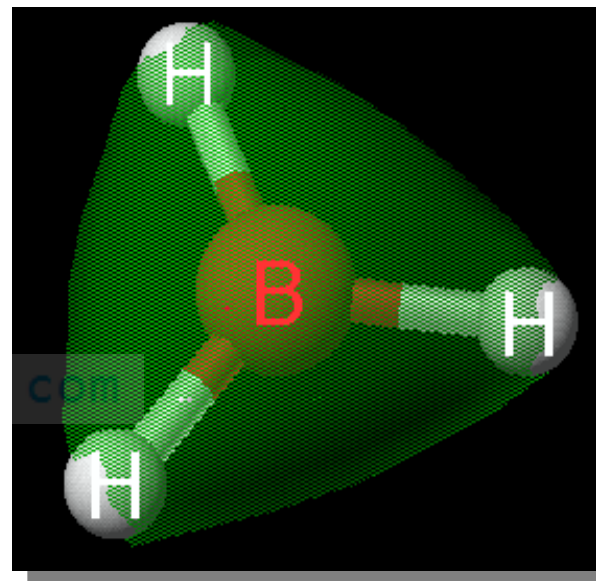
Molecules

Two Theories of Bonding

MOLECULAR ORBITAL

THEORY — Robert
Mullikan (1896-1986)

THUYẾT MO

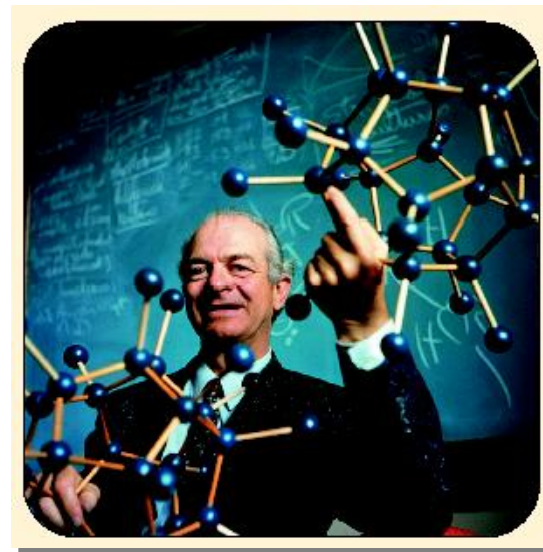


Phương pháp orbital phân tử (MO)

Two Theories of Bonding

- VALENCE BOND THEORY
— Linus Pauling

cuu_duong_than_cong . com
THUYẾT VB



Phương pháp liên kết hóa trị (VB)

Phương pháp liên kết hóa trị (VB)

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

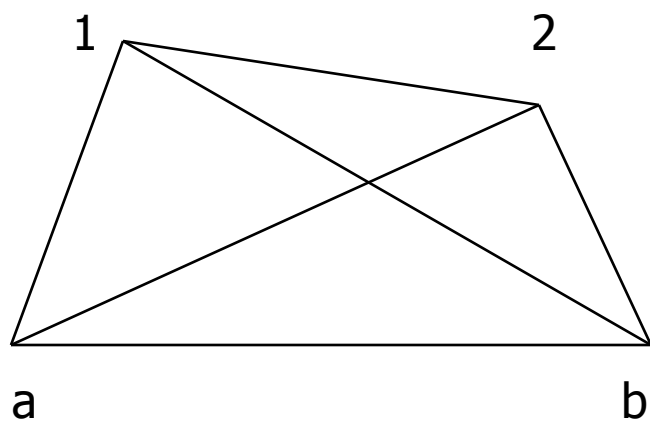
cuu duong than cong . com

Các loại liên kết cộng hóa trị và bậc liên kết

Các tính chất của liên kết cộng hóa trị

cuu duong than cong . com

Bài toán phân tử H_2 Phương trình sóng Schrodinger:



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

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

Khi 2 ngử H ở xa nhau đủ để cho sự tương tác chưa xảy ra

$$\Psi_{a1} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r_{a1}}$$

$$\Psi_{b2} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r_{b2}}$$

Hàm sóng mô tả chuyển động đồng thời của hai electron

$$\Psi_{H_2}^1 = \Psi_{a1} \cdot \Psi_{b2} \quad \Psi_{H_2}^2 = \Psi_{a2} \cdot \Psi_{b1}$$

Khi 2 ngử H tiến lại gần nhau, một cách gần đúng

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

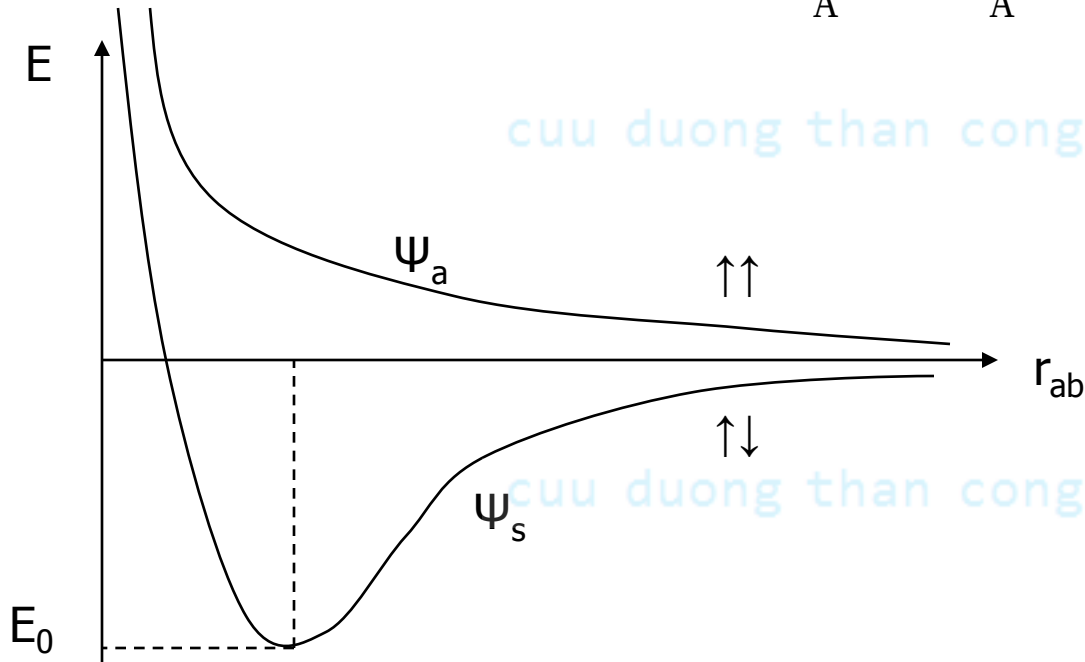
-Giải pt được 2 nghiệm: $c_1 = c_2 = C_S$ $c_1 = -c_2 = C_A$

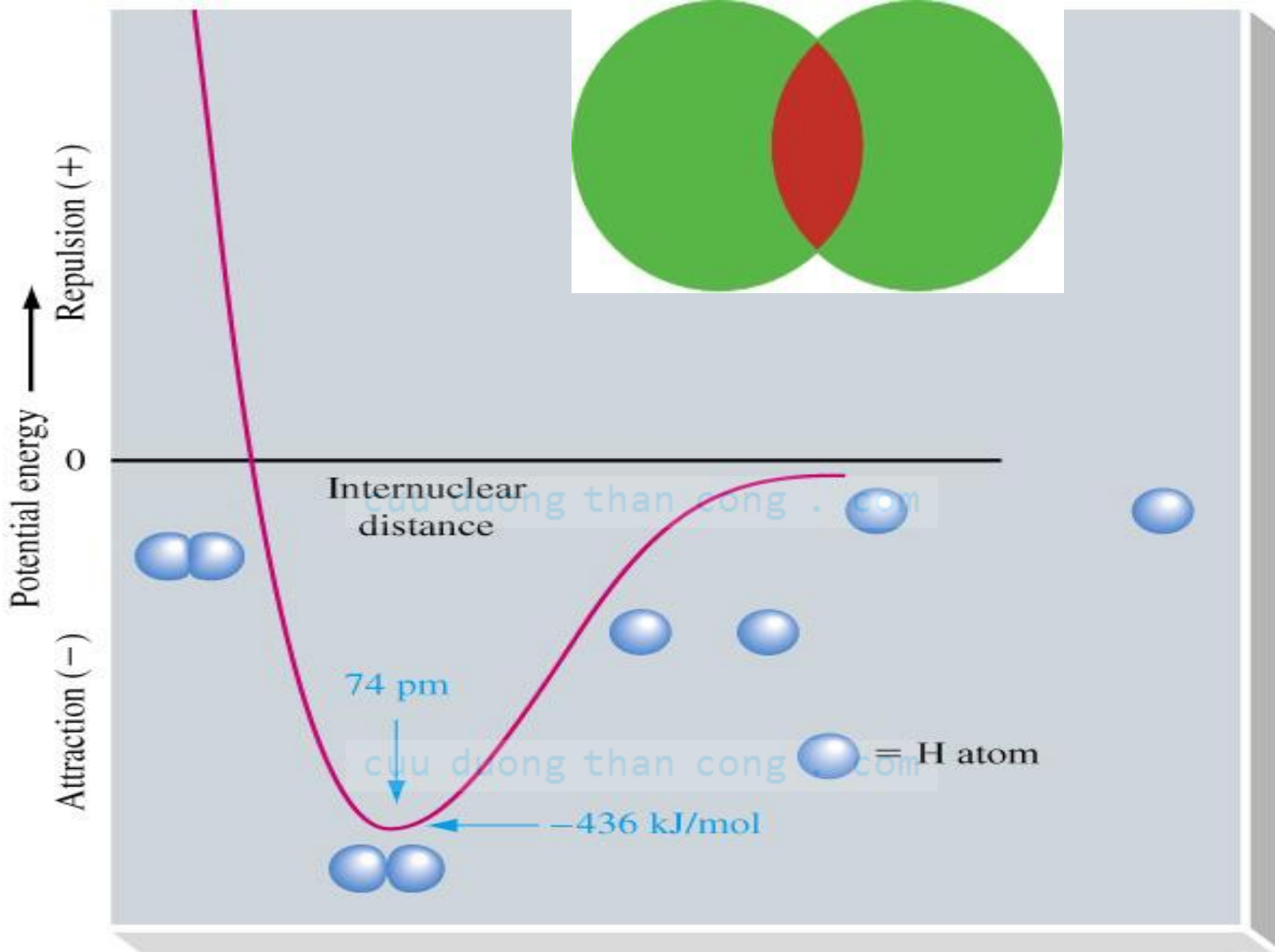
Hàm đối xứng ($\uparrow\downarrow$)

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

Hàm bất đối xứng ($\uparrow\uparrow$)

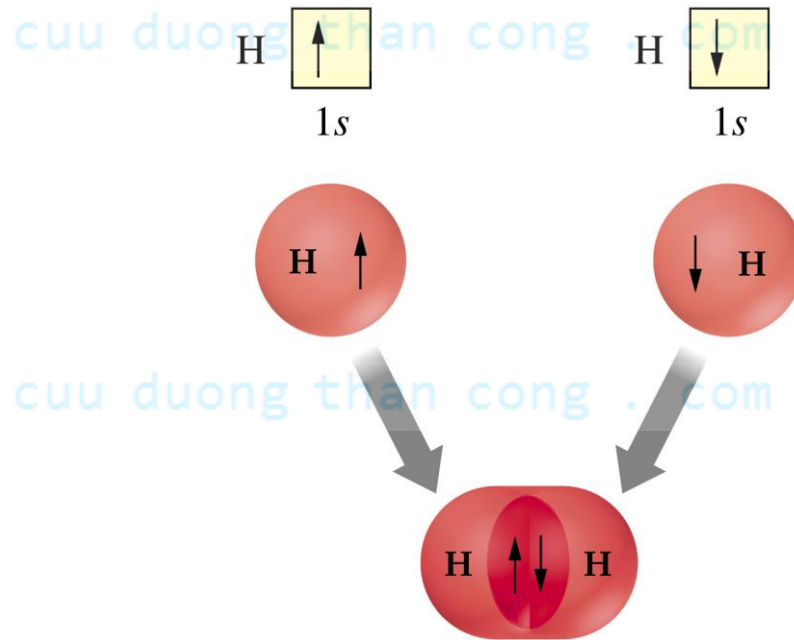
$$\Psi_A = C_A (\Psi_{a1} \Psi_{b2} - \Psi_{a2} \Psi_{b1})$$





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 thuyết 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 lk cht bền:

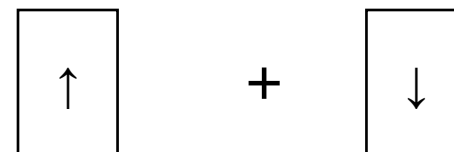
Các AO có năng lượng xấp xỉ nhau

Các AO có mật độ e đủ lớn

Các AO có cùng tính định hướng

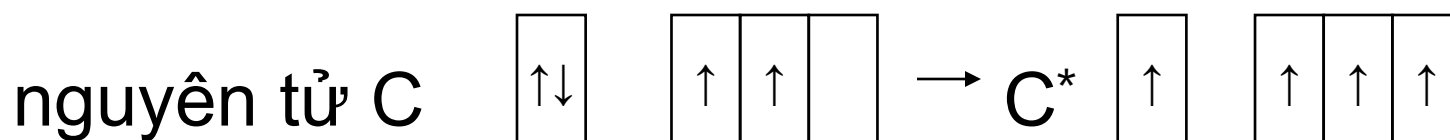
Cơ chế tạo liên kết cộng hóa trị

Cơ chế ghép đôi (góp chung):



→ Khả năng tạo lk được quyết định bởi số **AO hóa trị** chứa e độc thân $\boxed{\uparrow}$

•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

Cơ chế cho - nhận



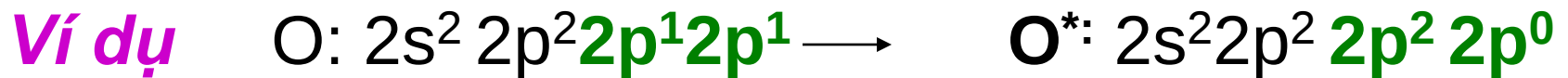
+



chất cho

chất nhận

- Khả năng tạo lk được quyết định bởi số $\boxed{\uparrow\downarrow}$ và số $\boxed{}$
- AO trống có thể có khi ng tử ở trạng thái kích thích



cuu duong than cong . com

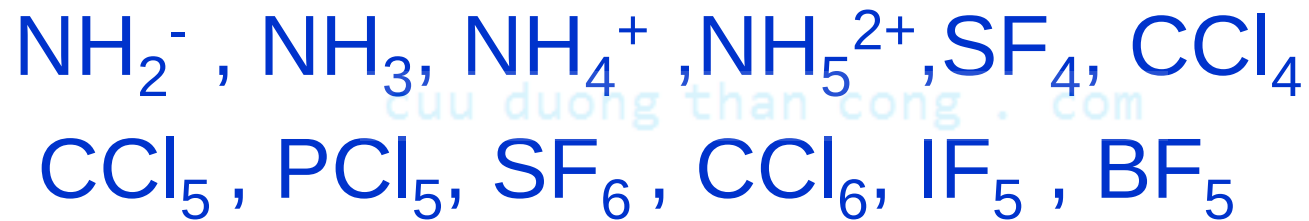
→ Khả năng tạo liên kết cht (theo cả hai cơ chế) được quyết định bởi **số AO hóa trị của nguyên tố**:

- 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**

Ví dụ

Hãy cho biết trong số các phân tử và ion sau cấu tử nào có khả năng tồn tại.



cuu duong than cong . com

Tính chất của liên kết cộng hóa trị

➤ Tính bão hòa

số liên kết CHT cực đại = số AO hóa trị của nguyên tố.

➤ 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

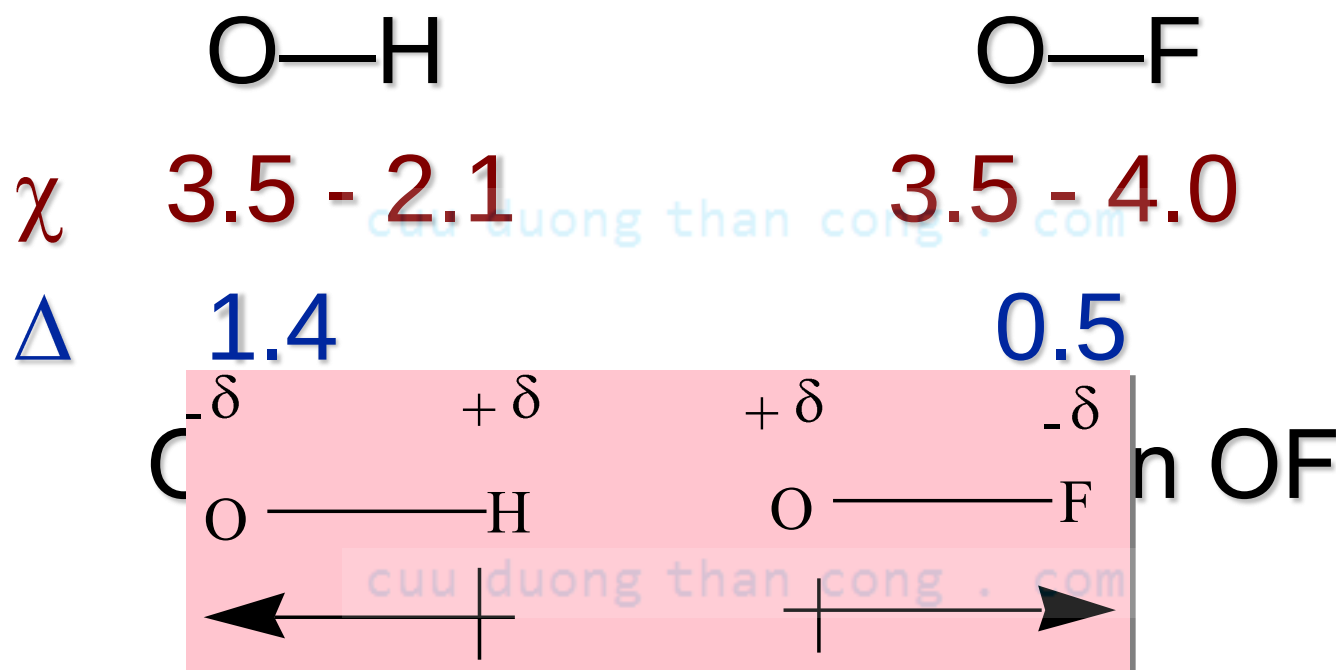


Cl bị phân cực âm

H bị phân cực dương

Sự phân cực của lk cộng hóa trị

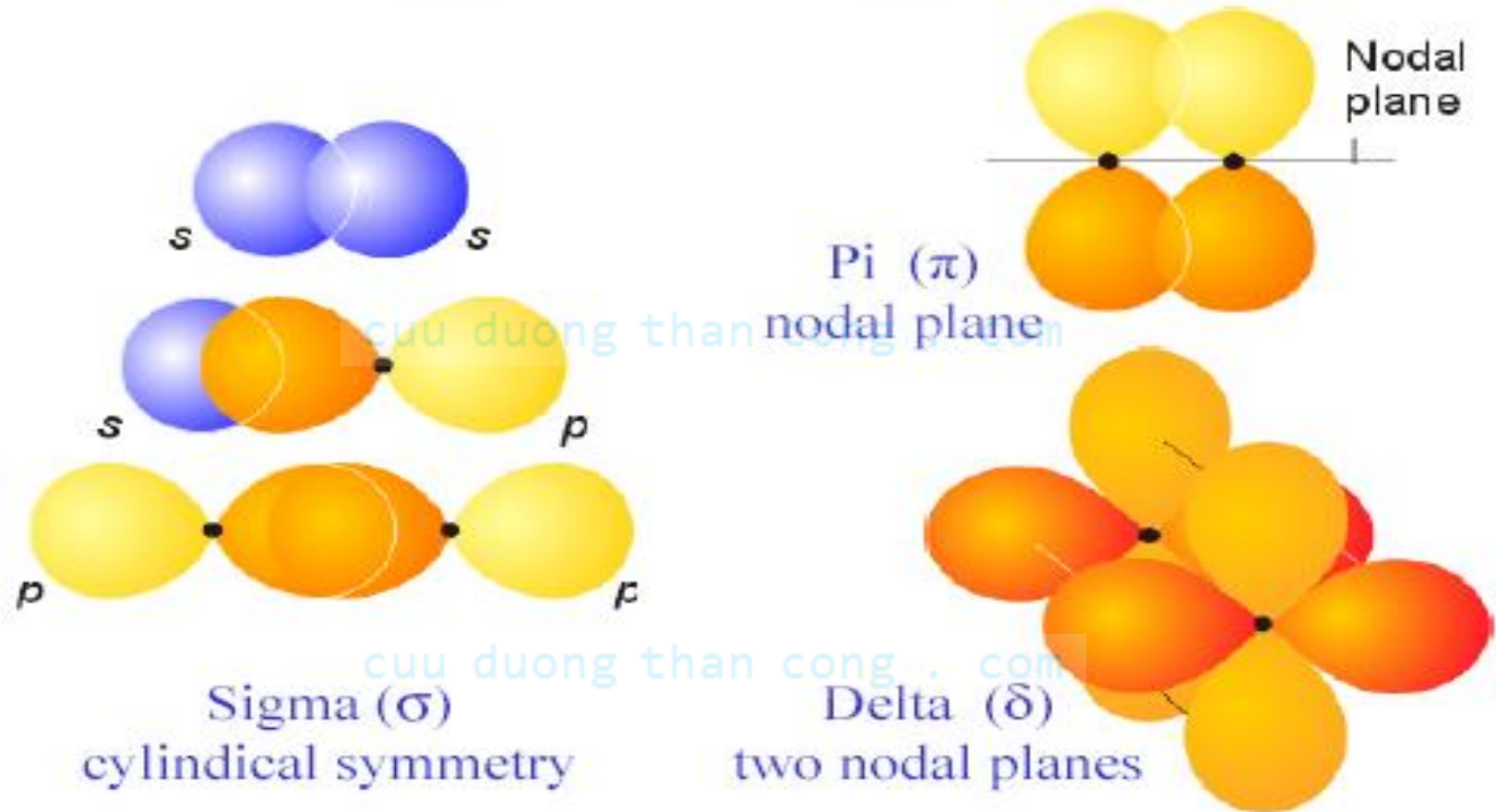
Liên kết nào phân cực mạnh hơn?



Sự phân cực ngược chiều

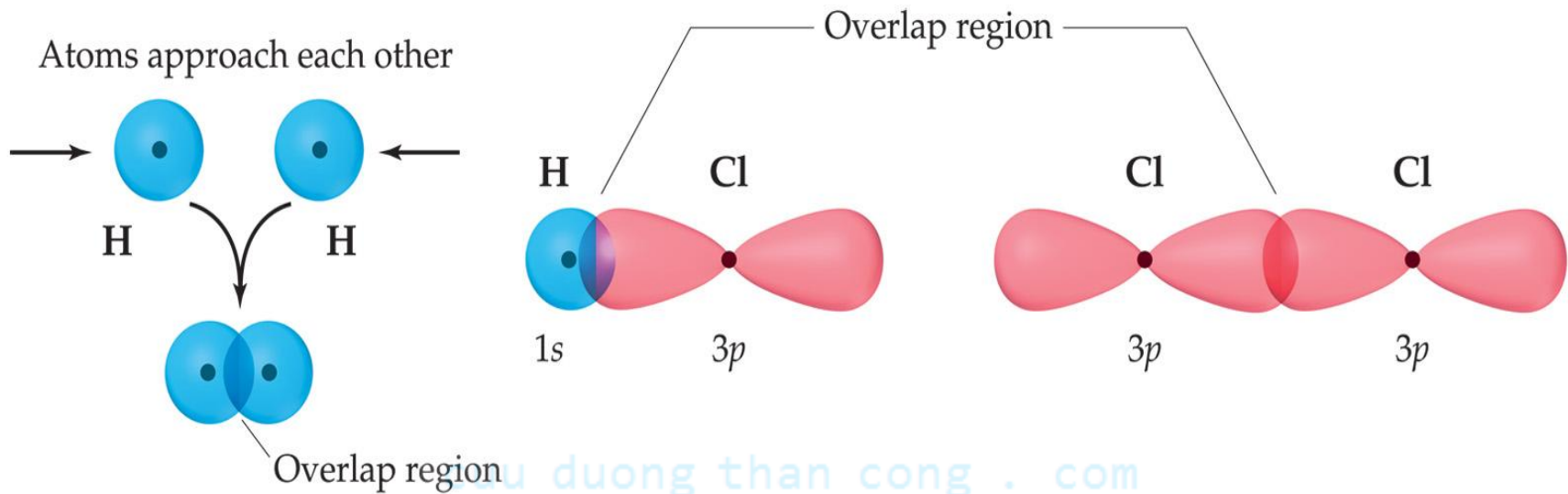
Các loại liên kết cộng hóa trị và bậc liên kết

Other Types of Bonding Interactions



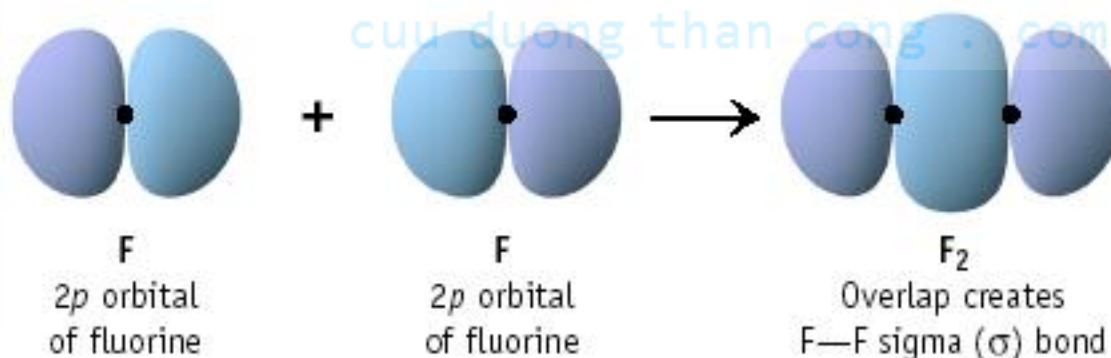
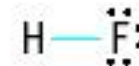
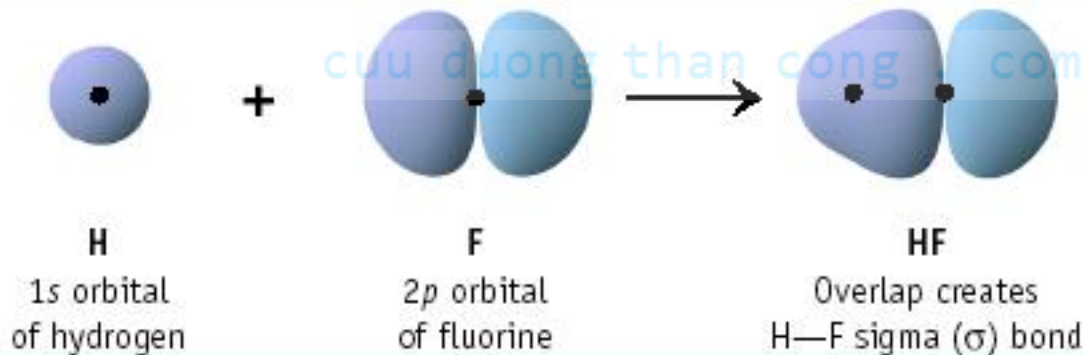
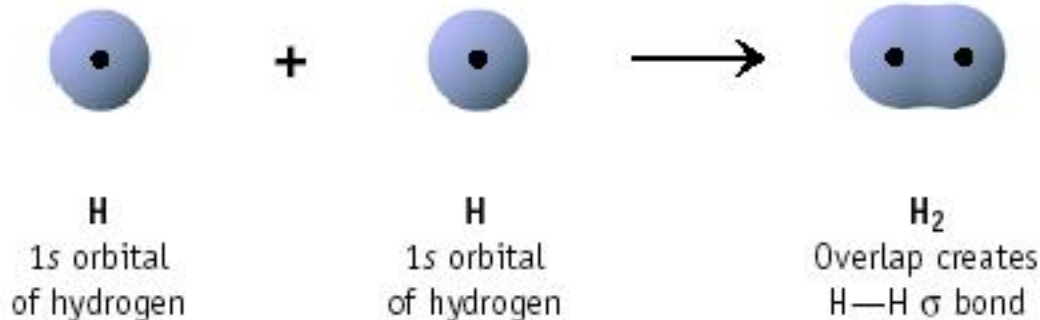
Chú ý: các vùng xen phủ phải cùng dấu

Liên kết Sigma (σ)



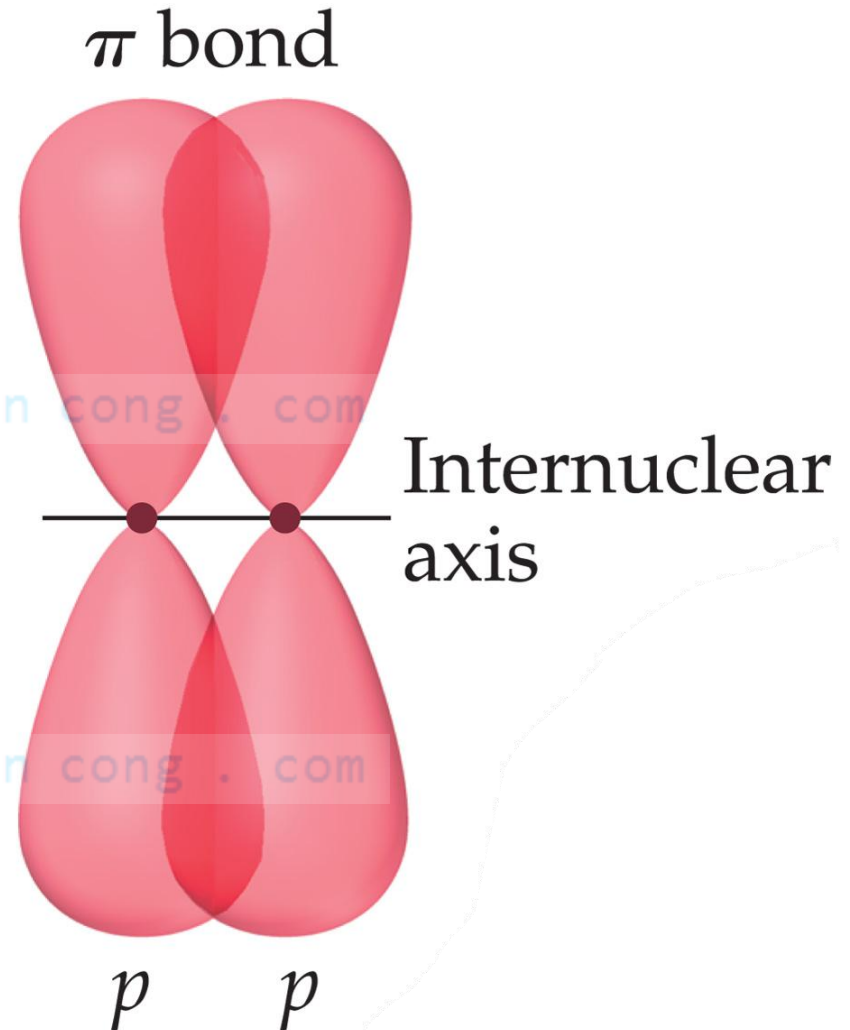
- Các AO che phủ dọc theo trục liên kết
- Nhận trục liên kết làm trục đối xứng.
- Liên kết σ không làm cản trở sự quay tự do của các nguyên tử quanh trục liên kết
- **Độ bền** $\sigma(ns-ns) < \sigma(ns-np) < \sigma(np-np)$

Sự hình thành liên kết σ



Liên kết Pi (π)

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

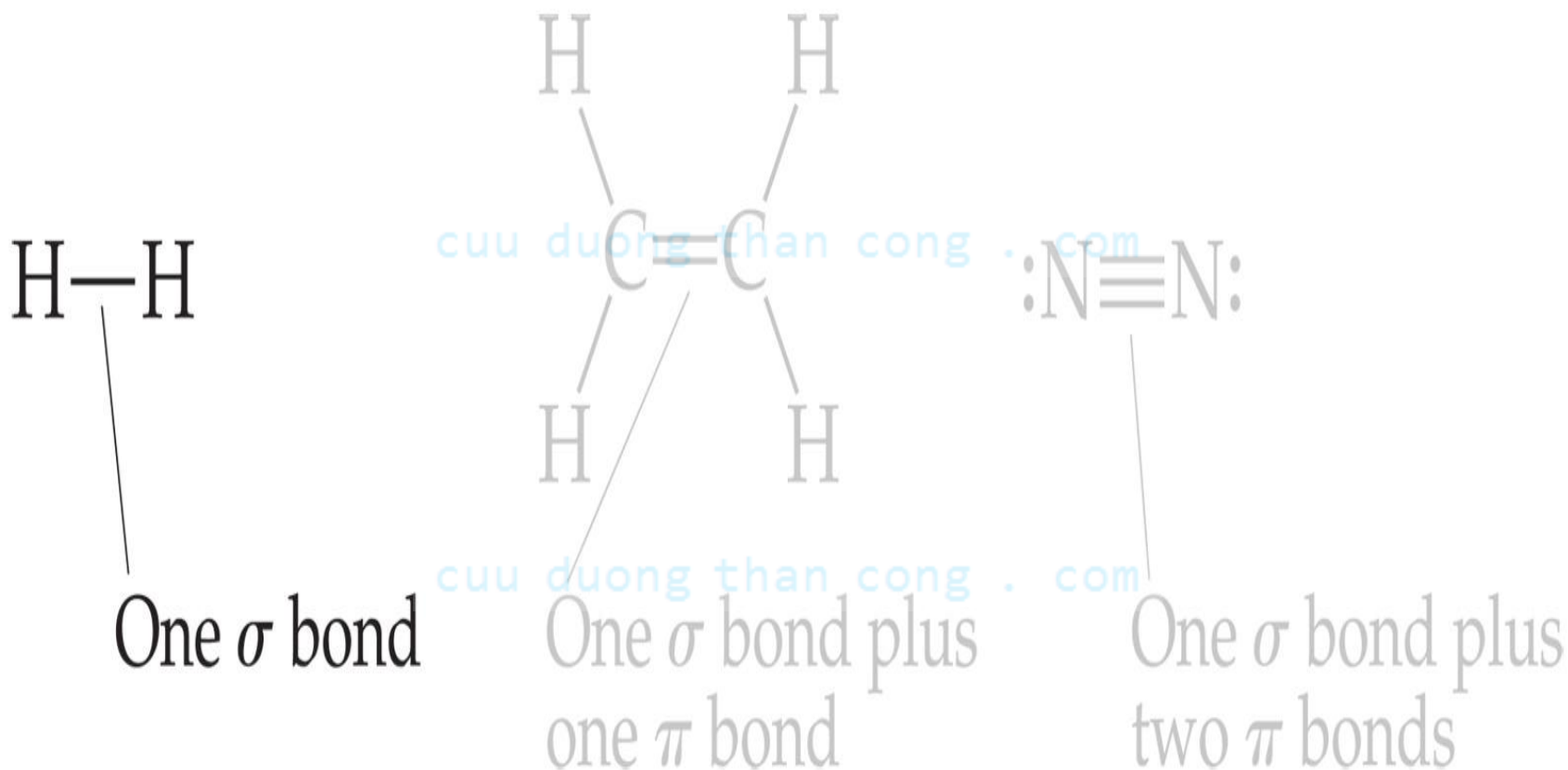


Liên kết π

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

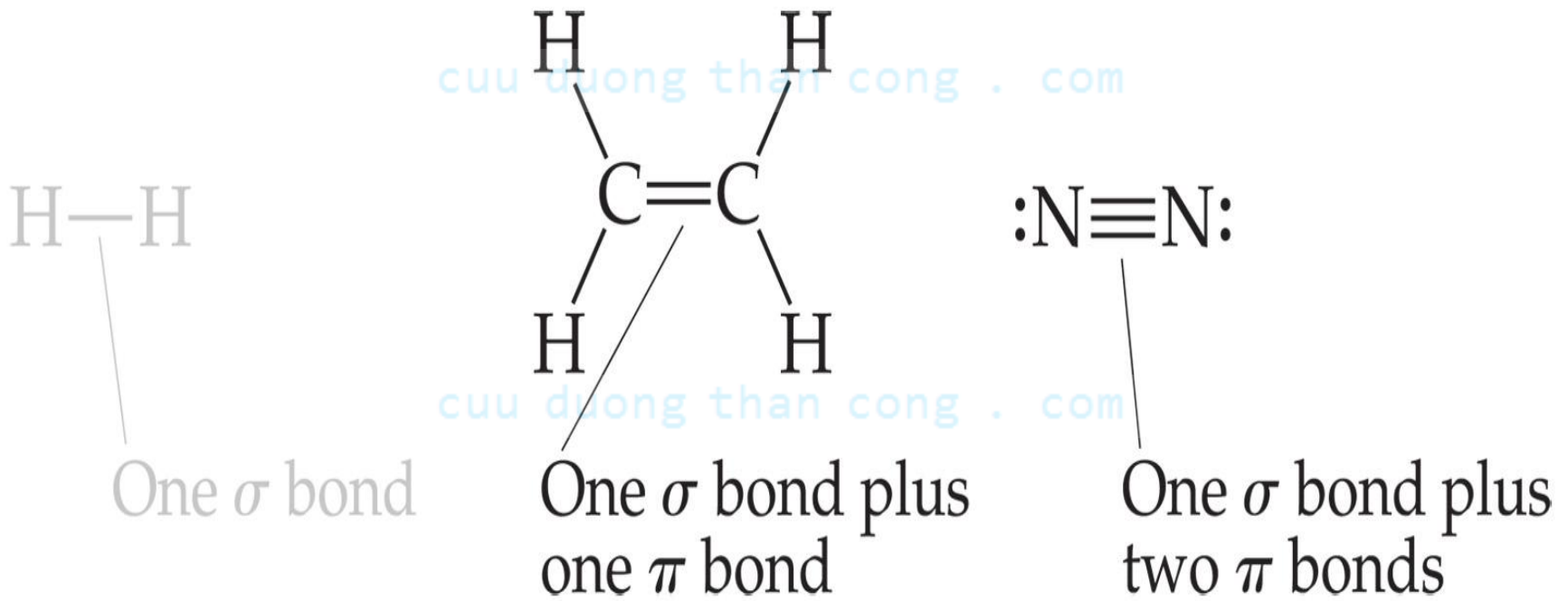
Liên kết đơn

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

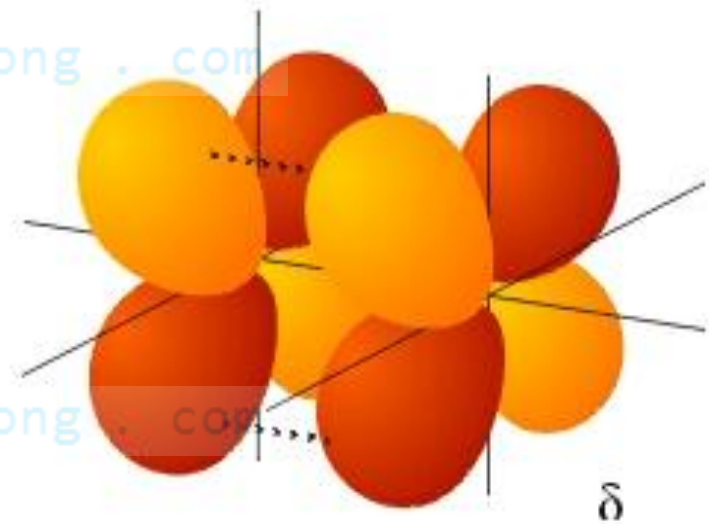
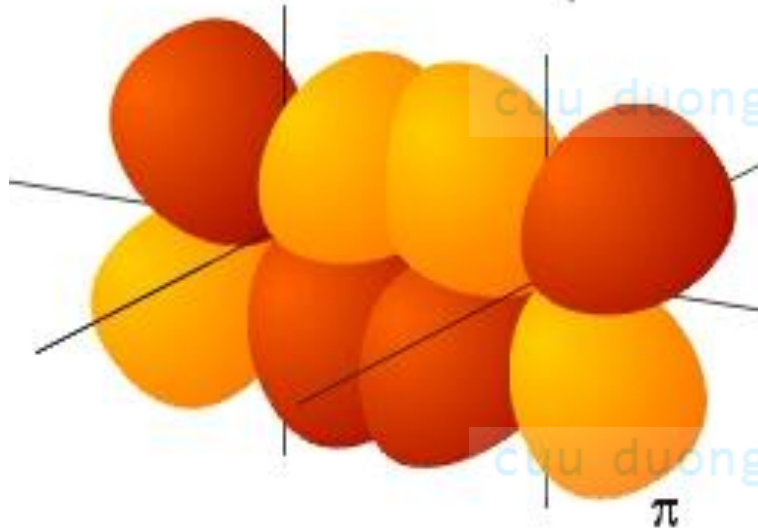
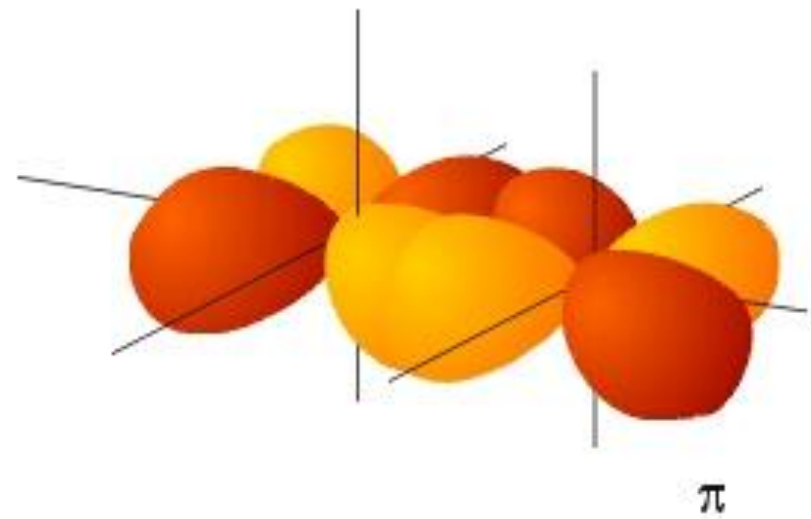
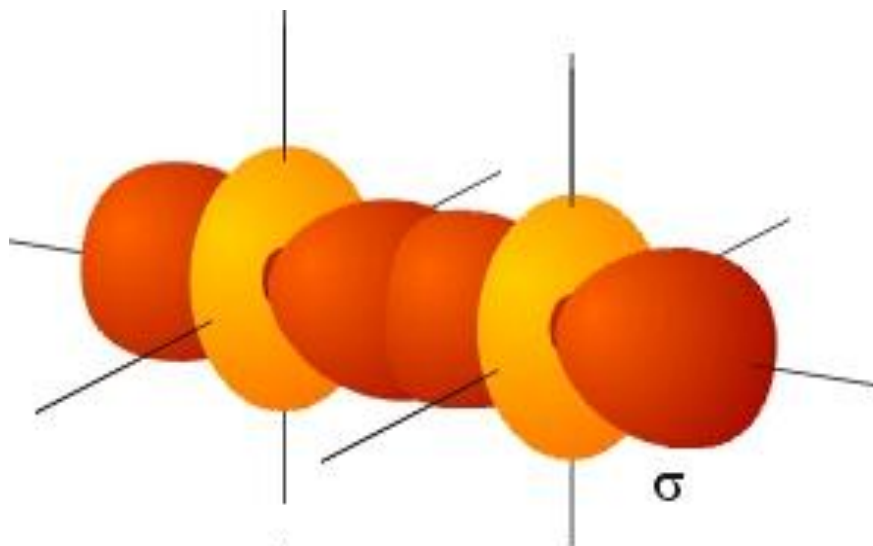
cặp electron liên kết không thuộc hẳn về một cặp nguyên tử nào cả mà phân bố đồng đều cho một số hạt nhân nguyên tử kế cận.

cuu duong than cong . com

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.



The d orbitals of the delta bond

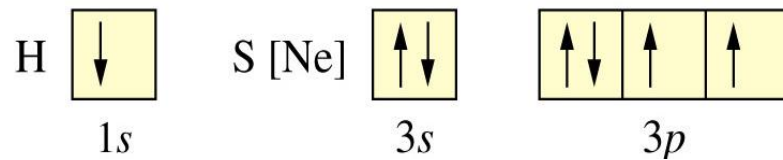
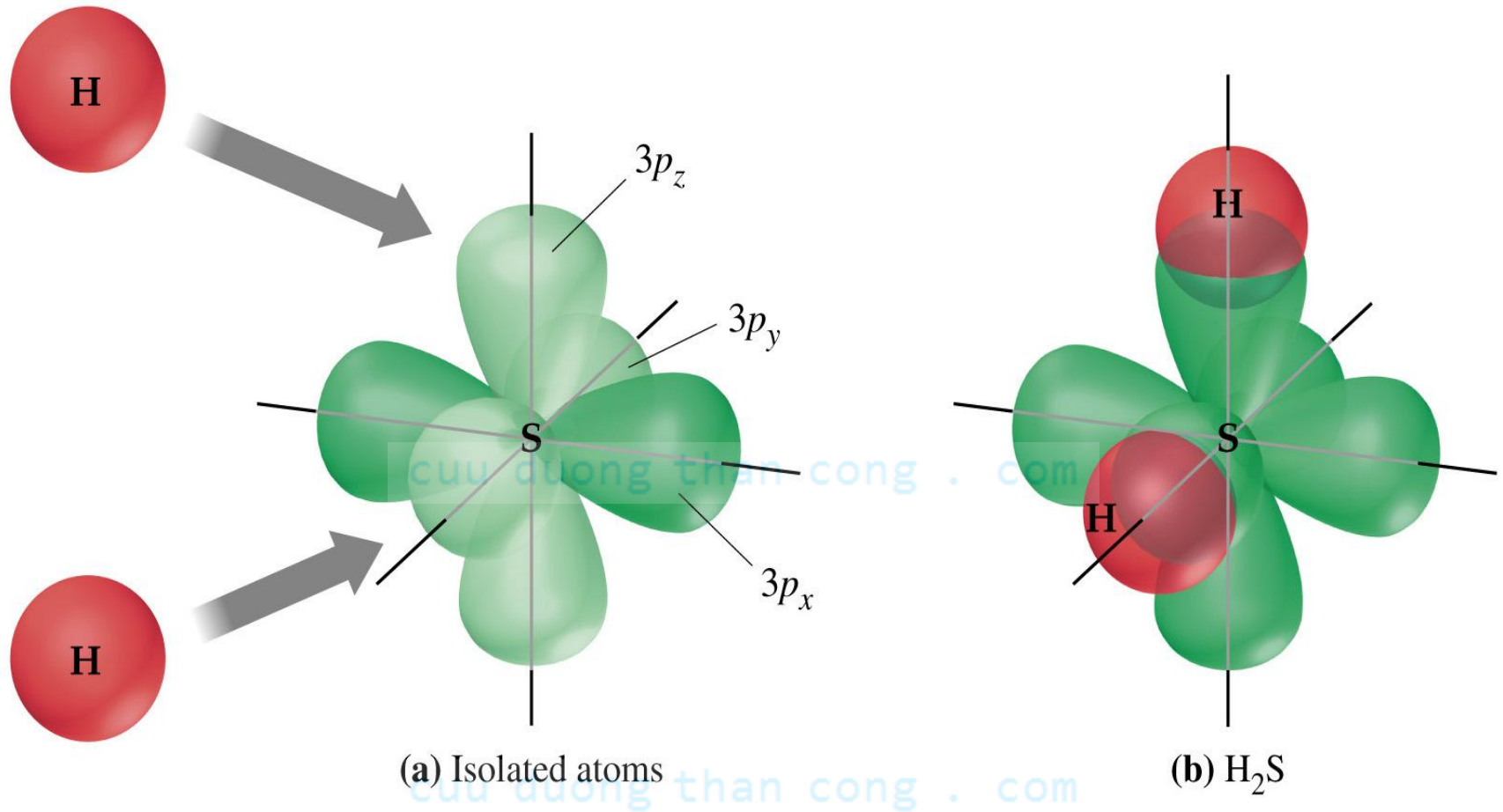
Bậc liên kết

$$\text{Bậc liên kết} = 1 + \frac{\text{số lk } \pi_{\text{dc}} + \text{số lk } \pi_{\text{kdc}}}{\text{số cặp ng tử}}$$

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

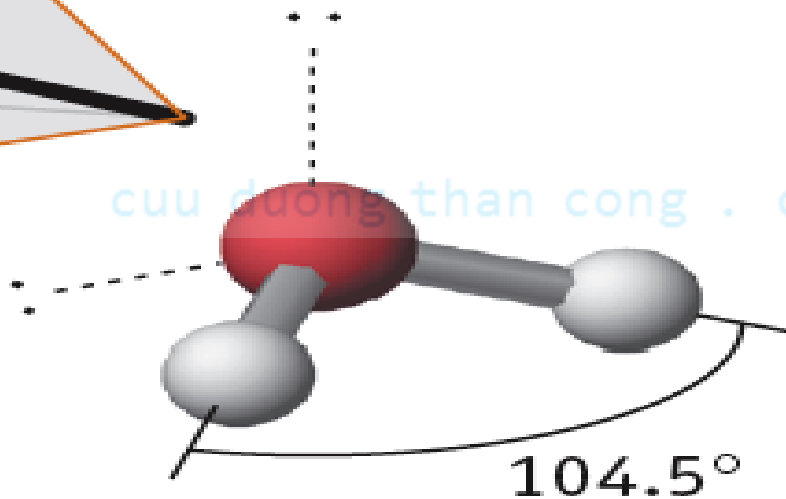
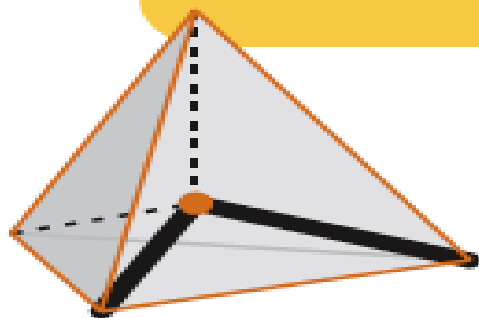
cuu duong than cong . com

Bonding in H₂S



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.

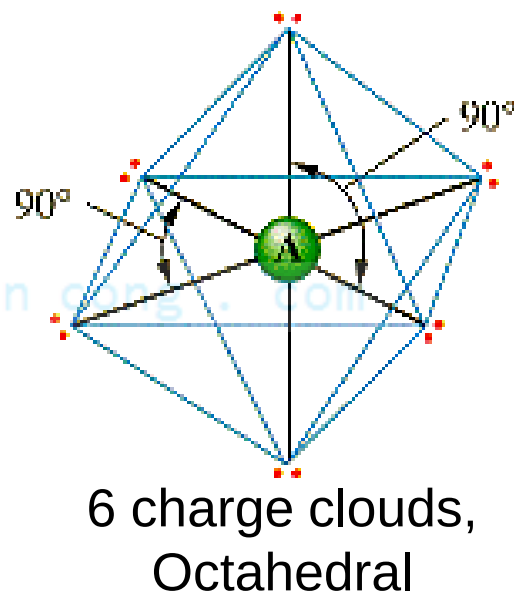
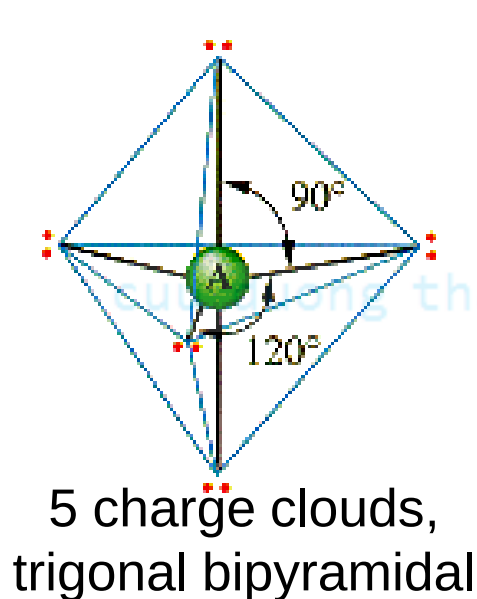
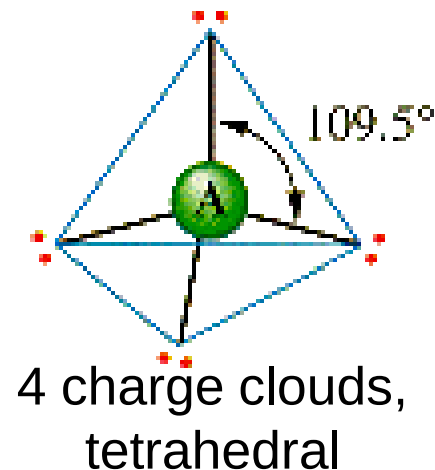
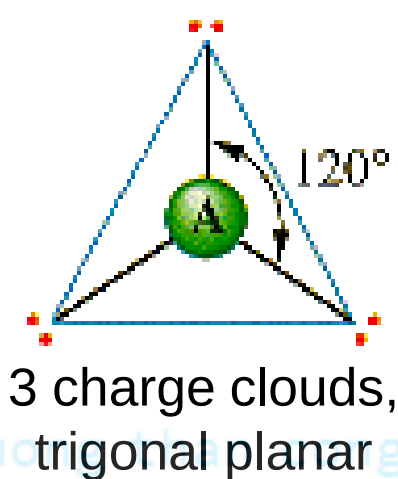
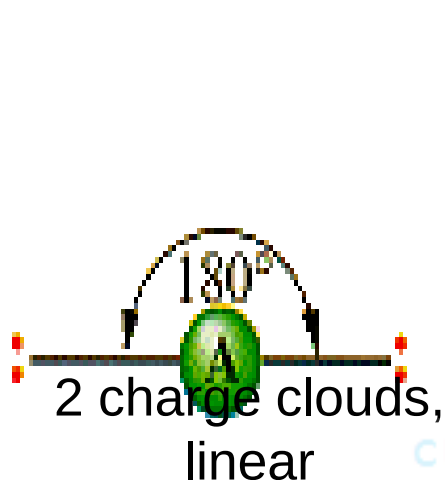
cuu duong than cong . com

VSEPR

cuu duong than cong . com

cuu duong than cong . com

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



➤ Số cặp e quanh A sẽ quyết định trạng thái lai hóa của nguyên tử trung tâm A .

cuu duong than cong . com

cuu duong than cong . com

Lai hóa là gì ?

➤ nguyên tử trung tâm A sử dụng các AO s,p,d,f..trong nội bộ nguyên tử đem pha trộn (tổ hợp tuyến tính) với nhau để tạo thành các **AO lai hóa**. Các **AO lai hóa** này sẽ tham gia tạo lkσ 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

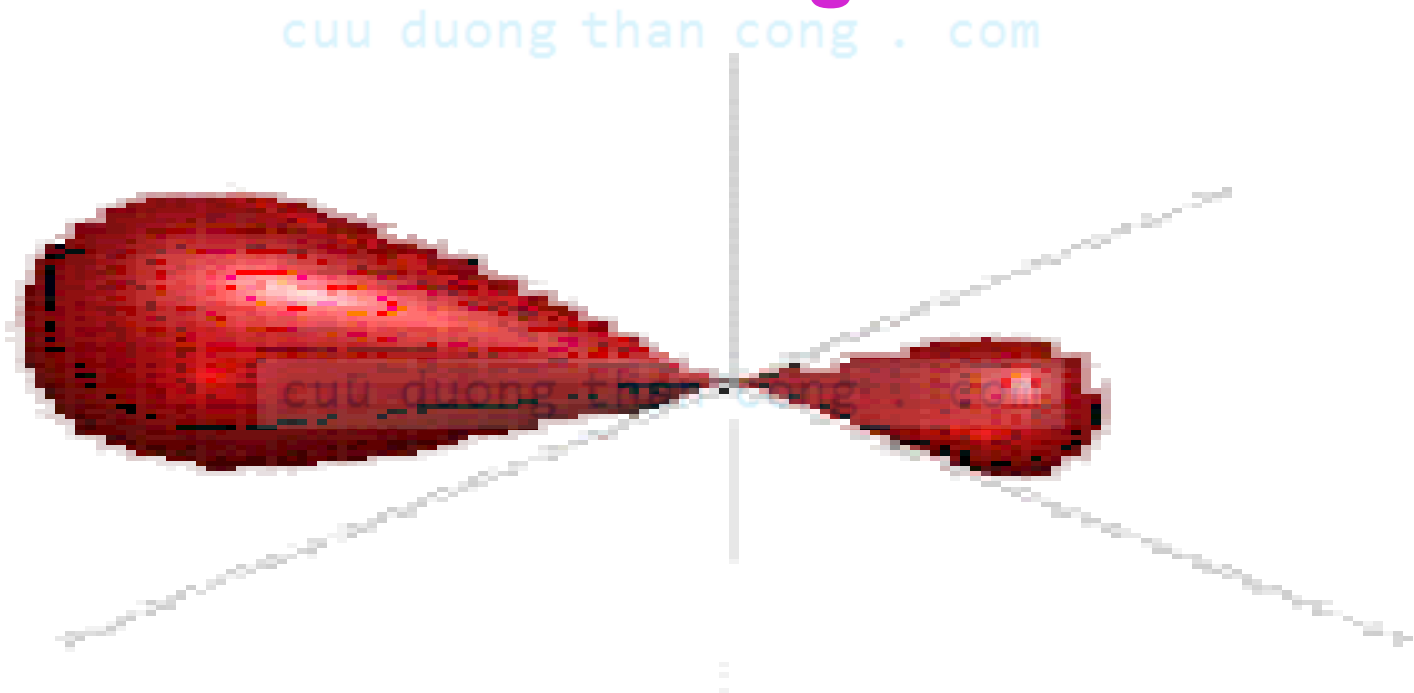
➤ Phân bố đối xứng với nhau trong không gian

➤ 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 $\downarrow$

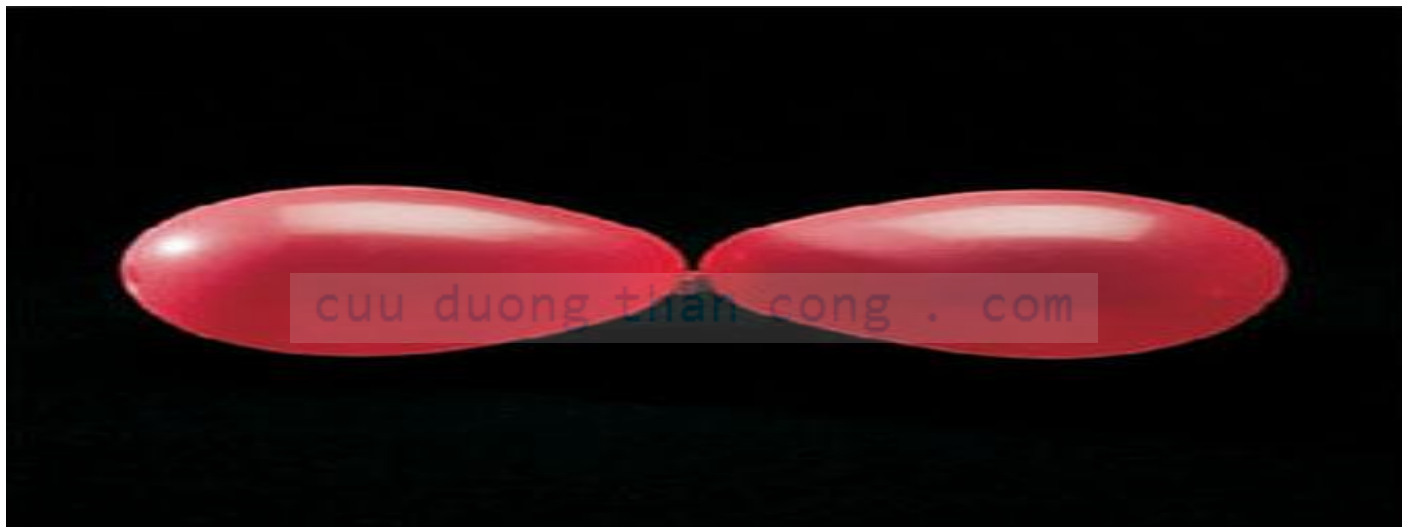
cuu duong than cong . com

Số cặp e quanh A = $\{ (\sum e_{ht}) AB_n - 8(2)n \} + n$
 $n \geq 2$ 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
= 3 $\rightarrow$ A: sp²
= 4 $\rightarrow$ A: sp³
= 5 $\rightarrow$ A: sp³d
= 6 $\rightarrow$ A: sp³d²

Lai hóa sp

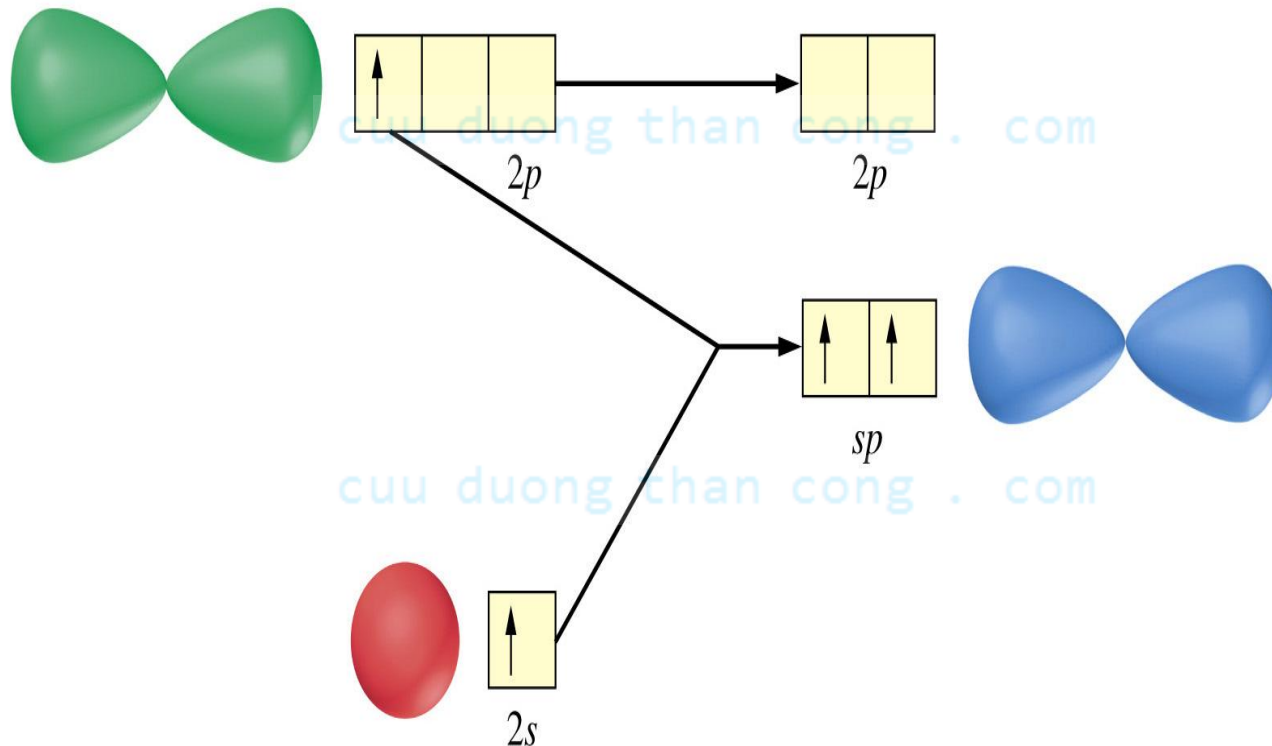
- Số cặp e quanh A = 2 $\rightarrow$ A ở trạng thái lai hóa SP
- AB_2 dạng thẳng góc lk 180°



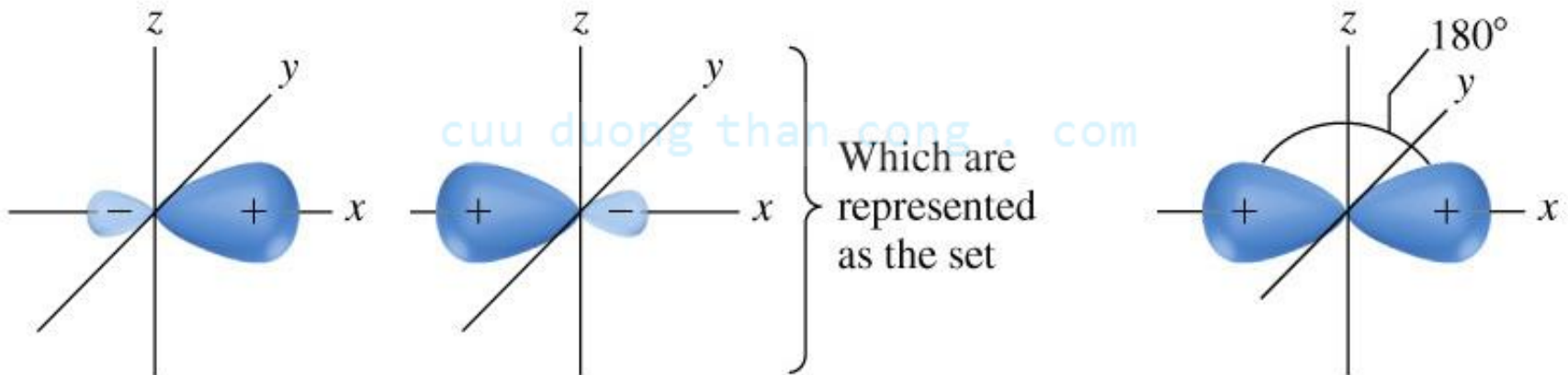
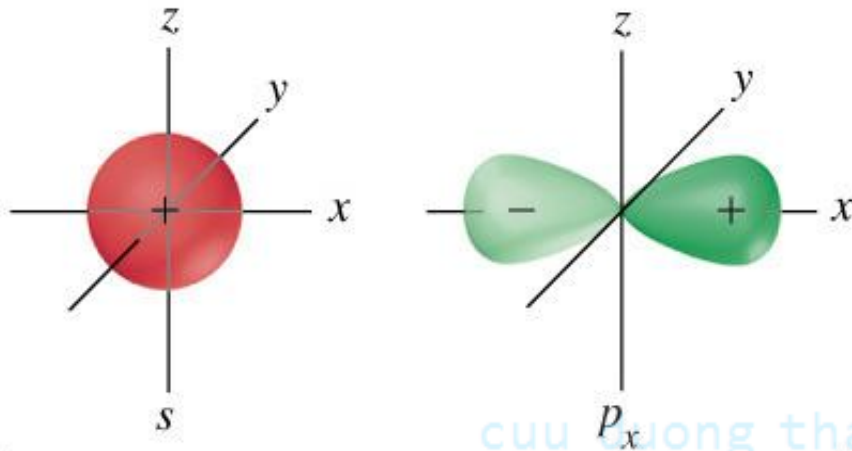
linear



LAI HOÁ SP

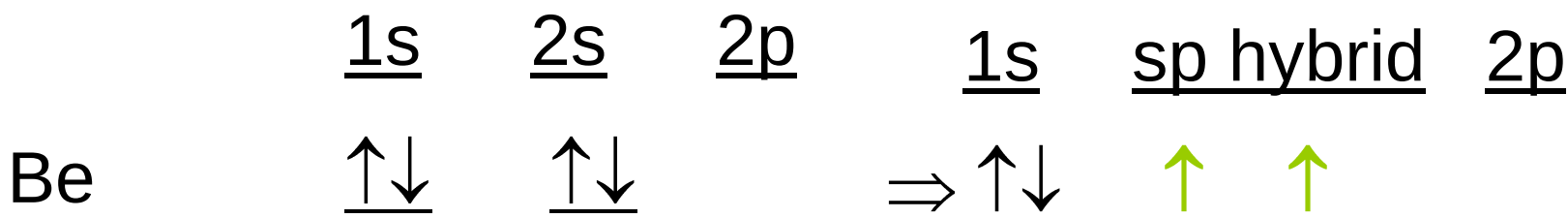


Lai hóa sp

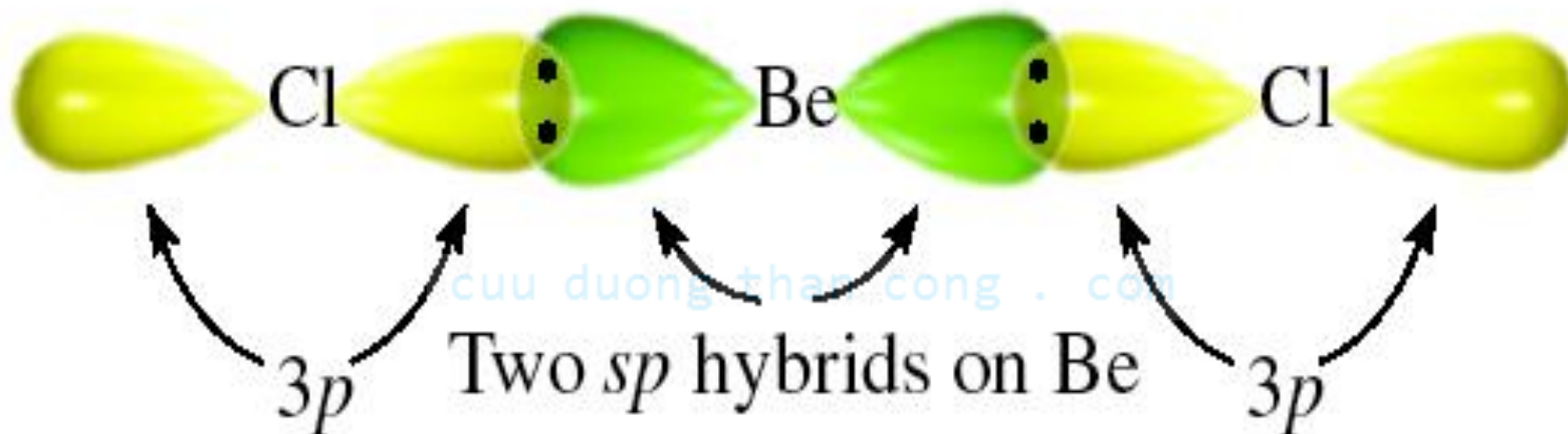


BeCl₂ (AB₂)

số cặp e quanh Be = $\frac{1}{2}(16 - 8 \cdot 2) + 2 = 0 + 2 = 2 \rightarrow sp$



cuu duong than cong . com



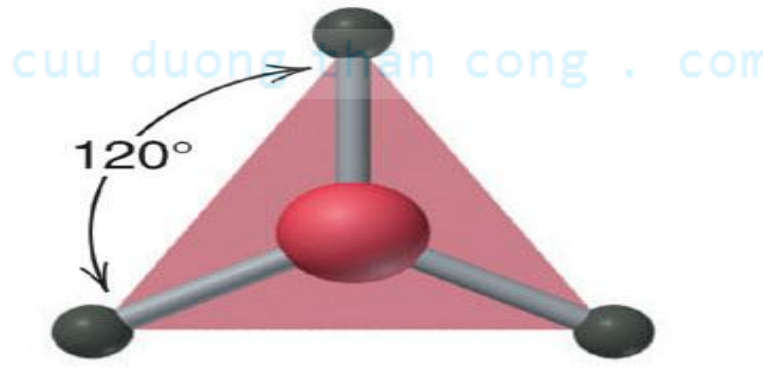
Lai hóa sp^2

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

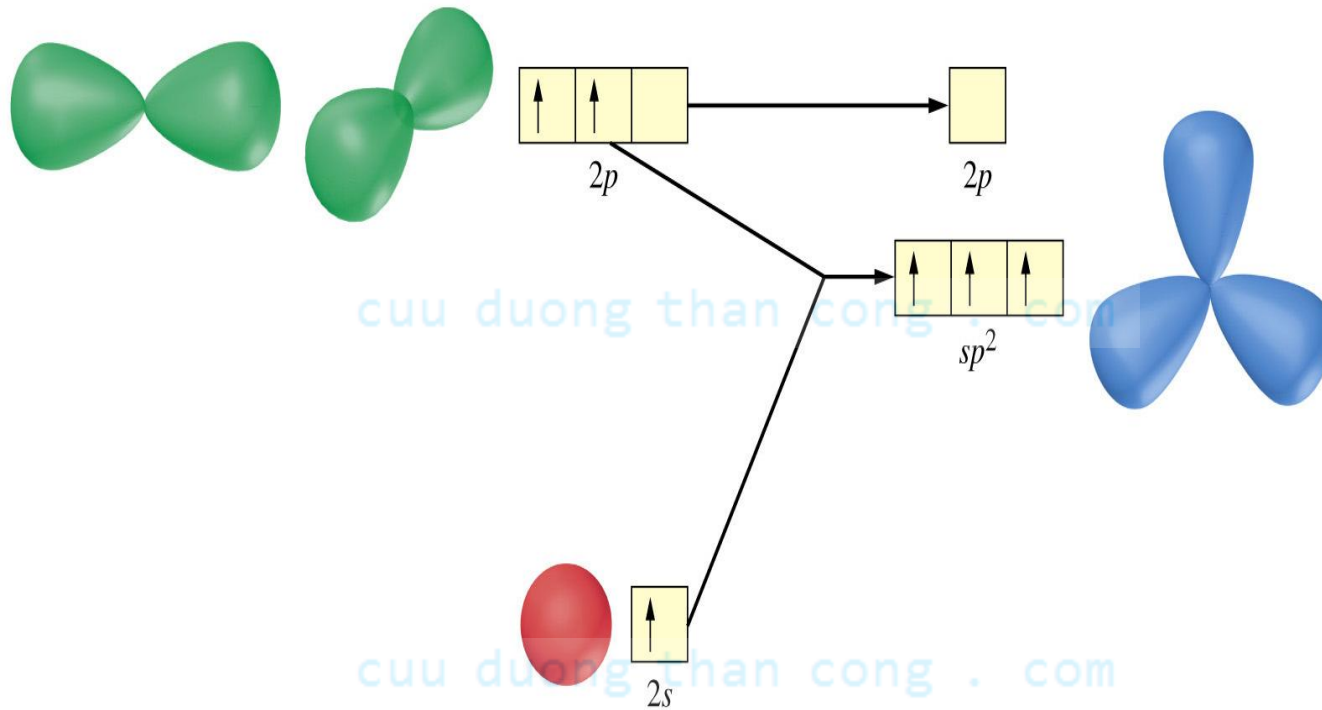
AB_3, AB_2E - góc hóa trị 120°



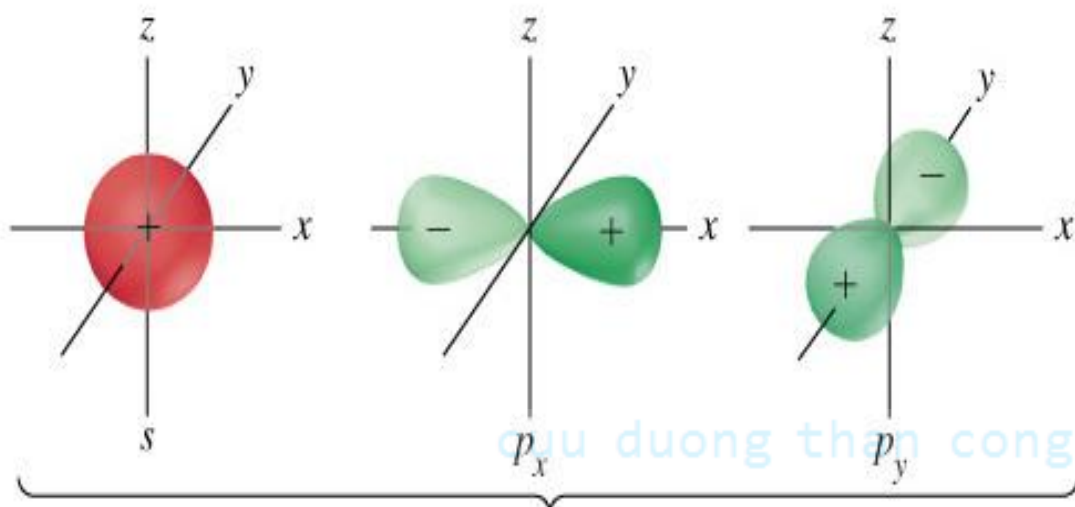
trigonal planar



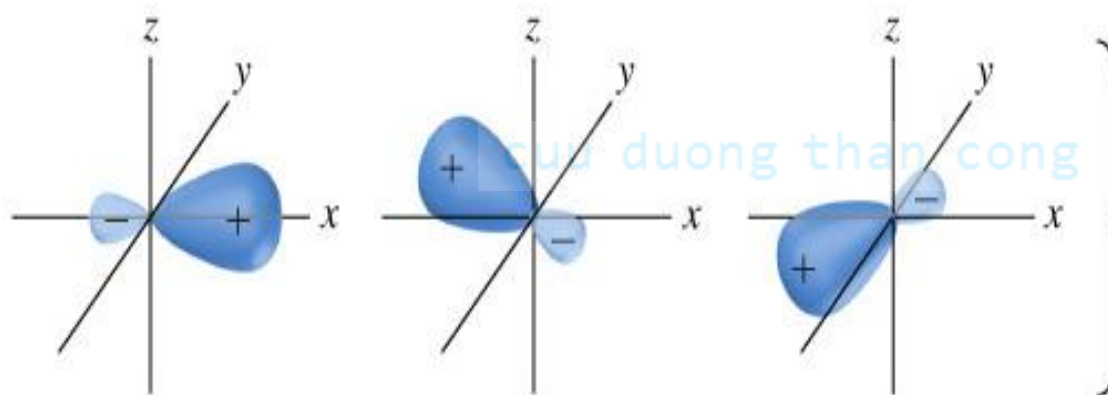
LAI HÓA sp^2



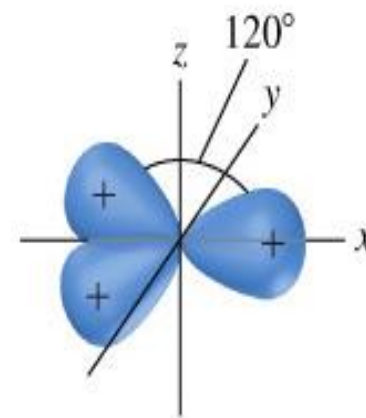
Lai hóa sp^2



Combine to generate
three sp^2 orbitals

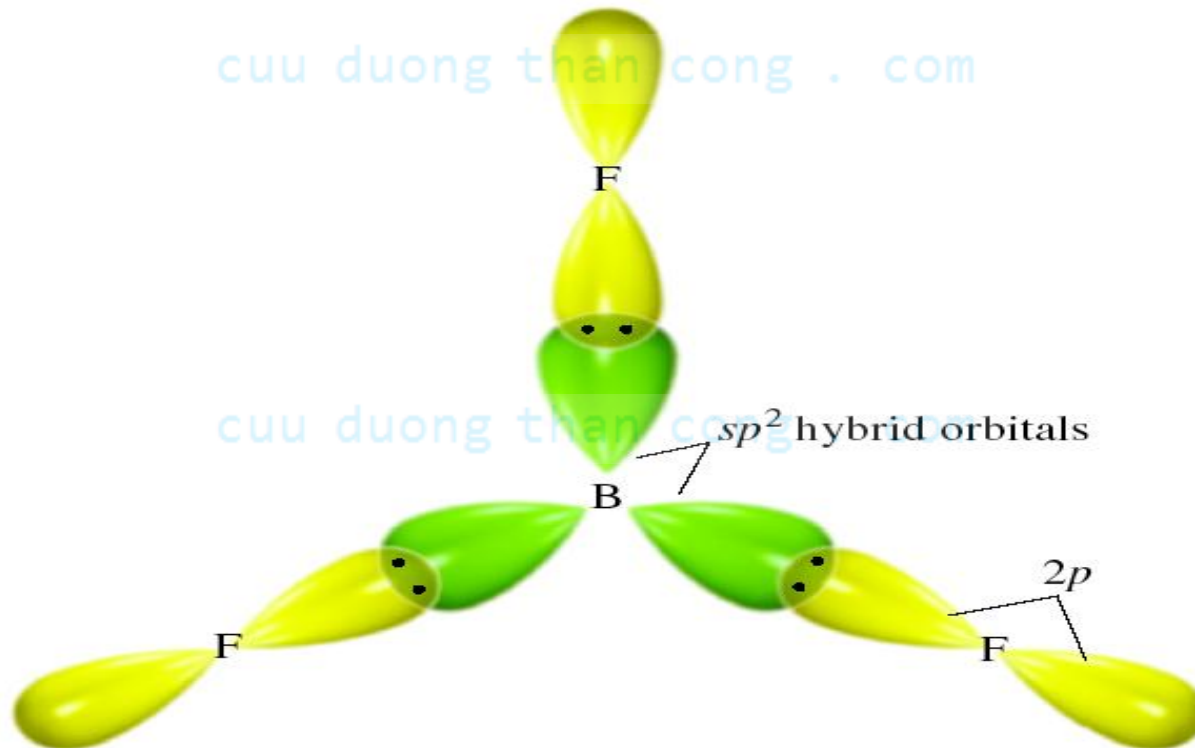
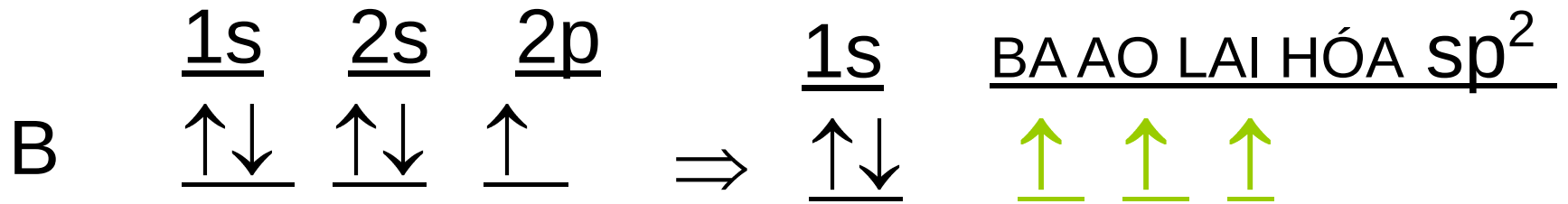


Which are
represented
as the set



BF₃ (AB₃)

số cặp e quanh B = $\frac{1}{2}(24 - 8 \cdot 3) + 3 = 0 + 3 = 3 \rightarrow sp^2$



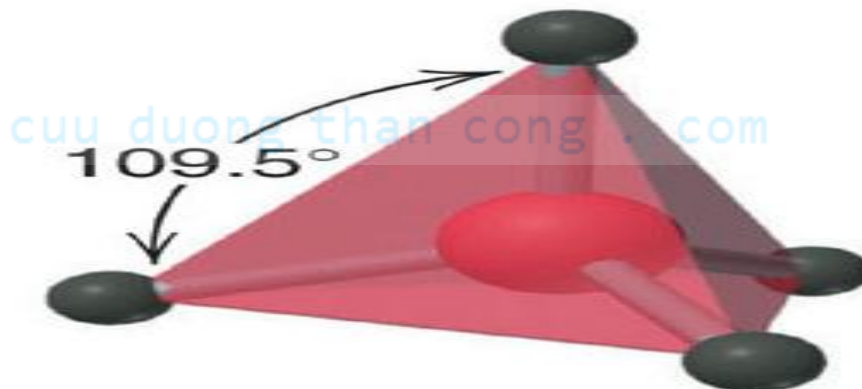
Lai hóa sp^3

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

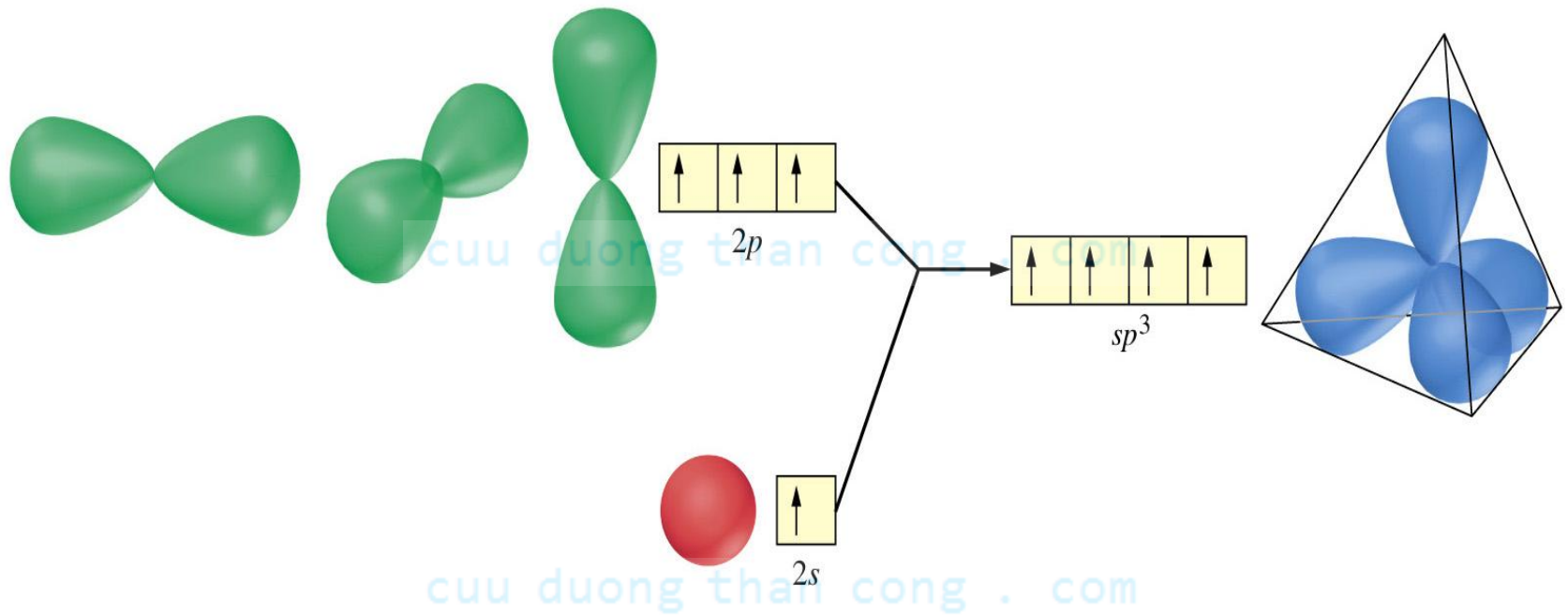
AB_4 , AB_3E , AB_2E_2 - góc hóa trị $109^\circ 28'$

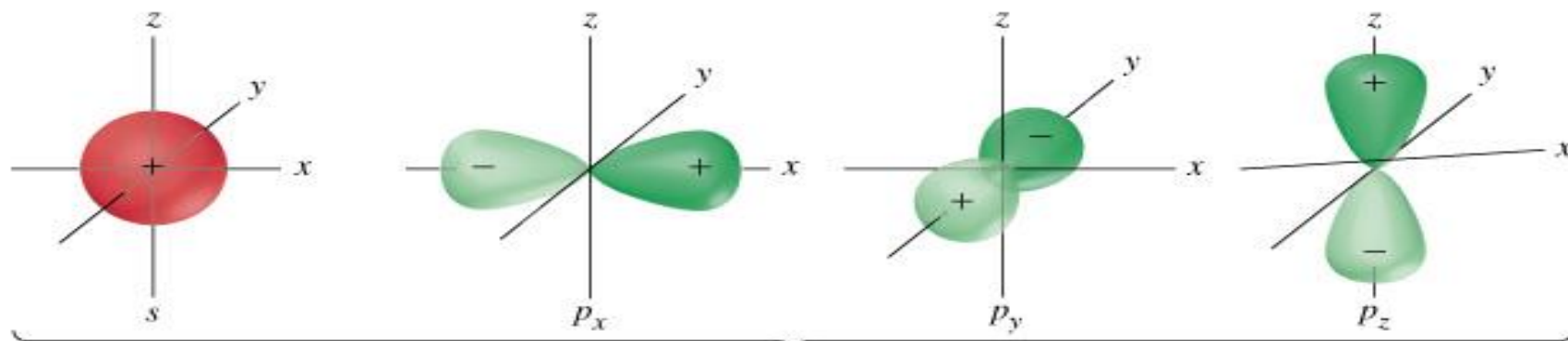


tetrahedral

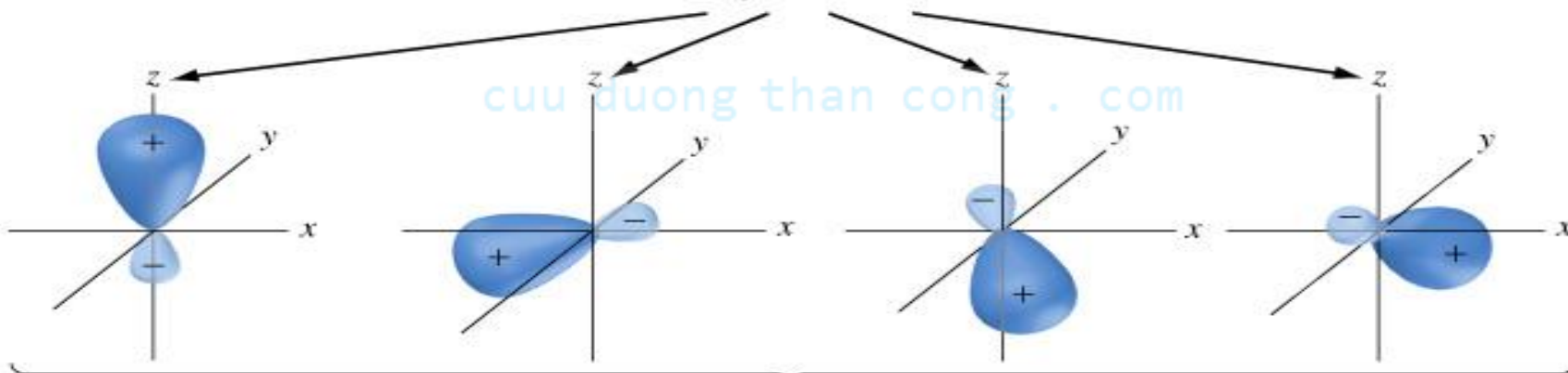


LAI HÓA sp^3

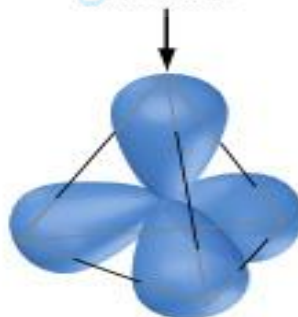




Combine to generate
four sp^3 orbitals

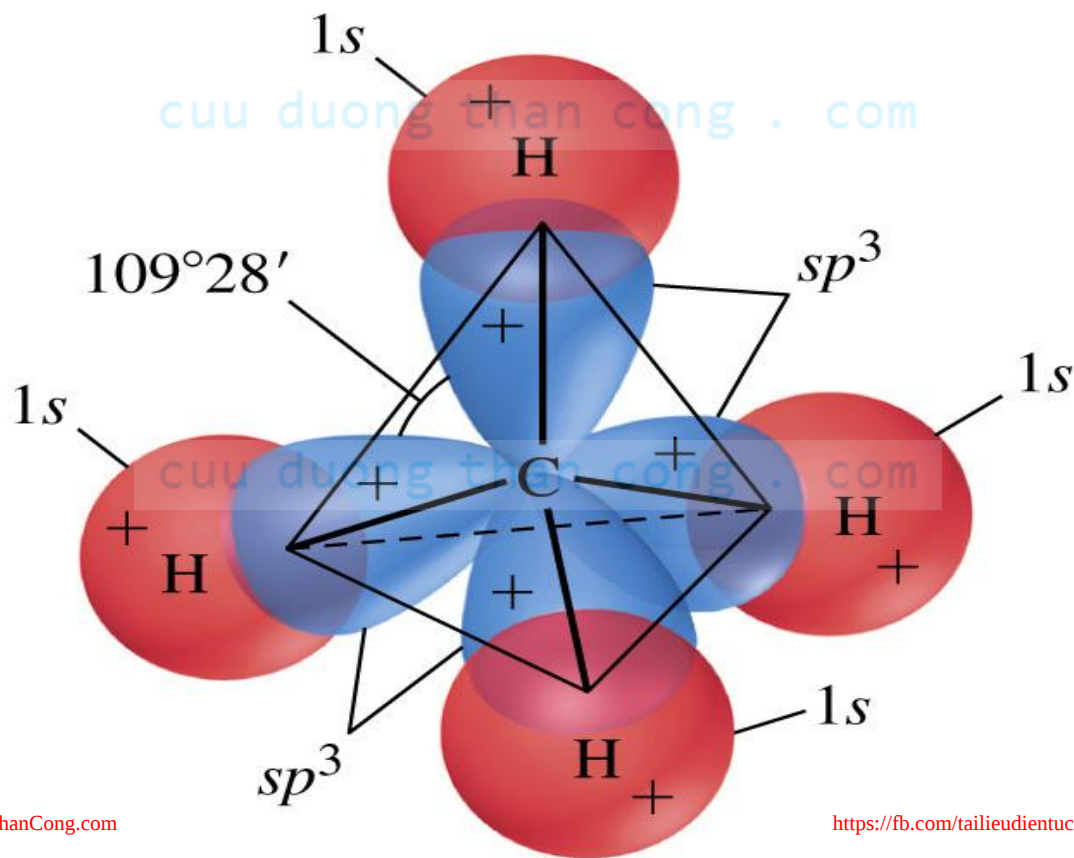
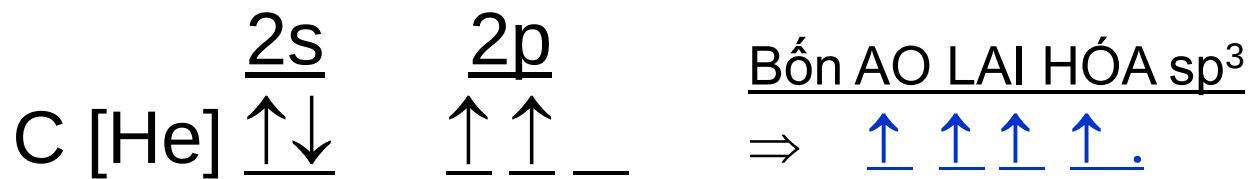


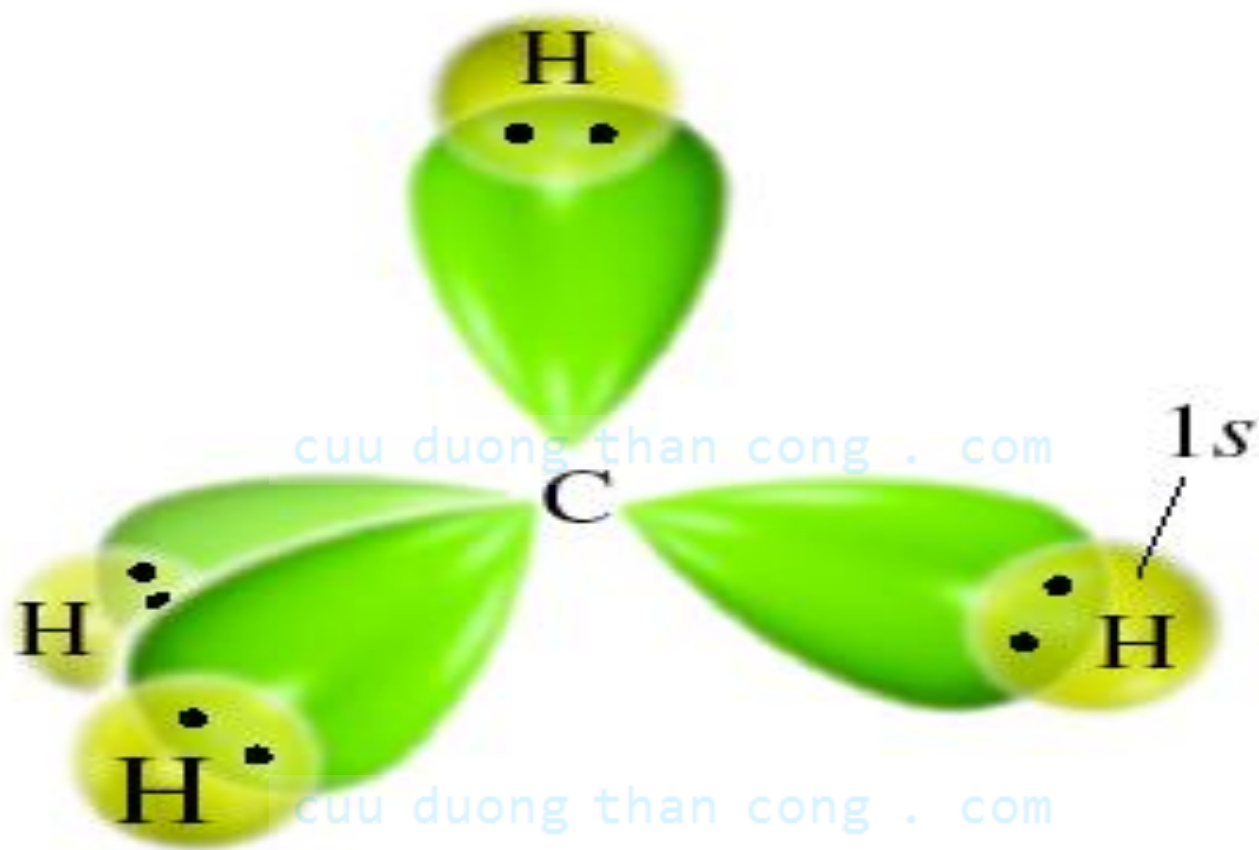
Which are represented
as the set



CH₄ (AB₄)

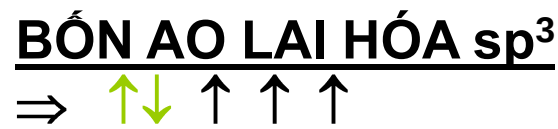
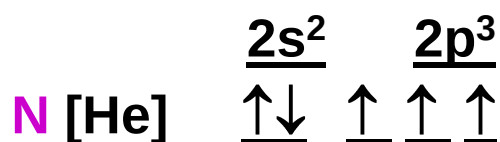
số cặp e quanh C = $\frac{1}{2}(8 - 2 \cdot 4) + 4 = 0 + 4 = 4 \rightarrow sp^3$





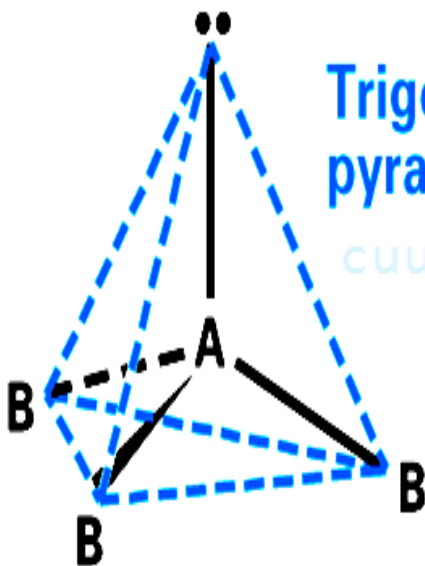


số cặp e quanh N = $1/2(8 - 2 \cdot 3) + 3 = 1 + 3 = 4 \rightarrow sp^3$



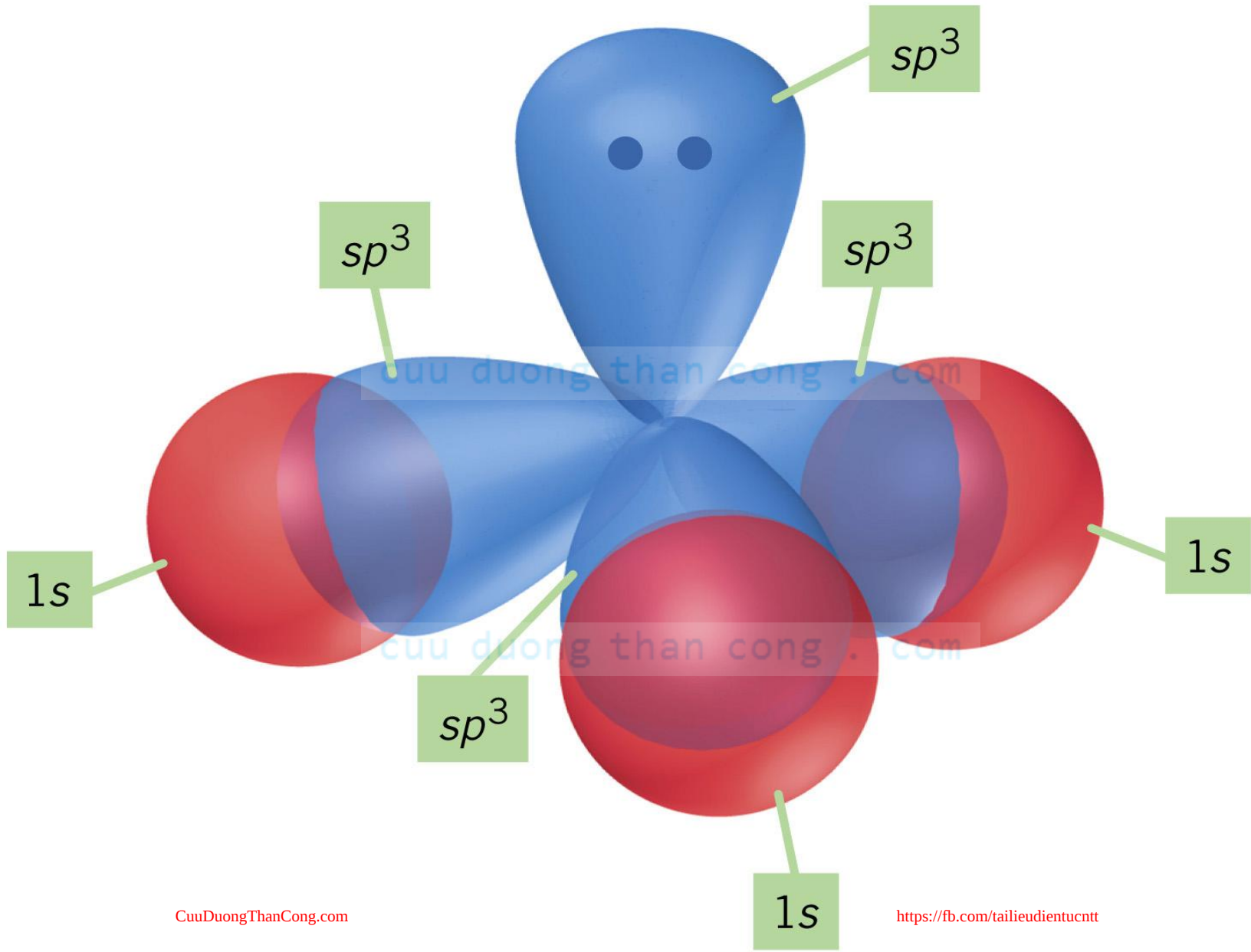
sp^3

1 unshared pair



Trigonal
pyramidal



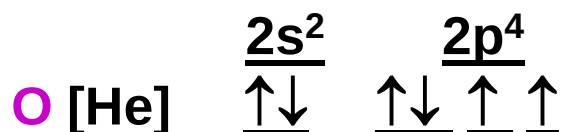


Hybridization

cuu duong than cong . com

H₂O (AB₂E₂)

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

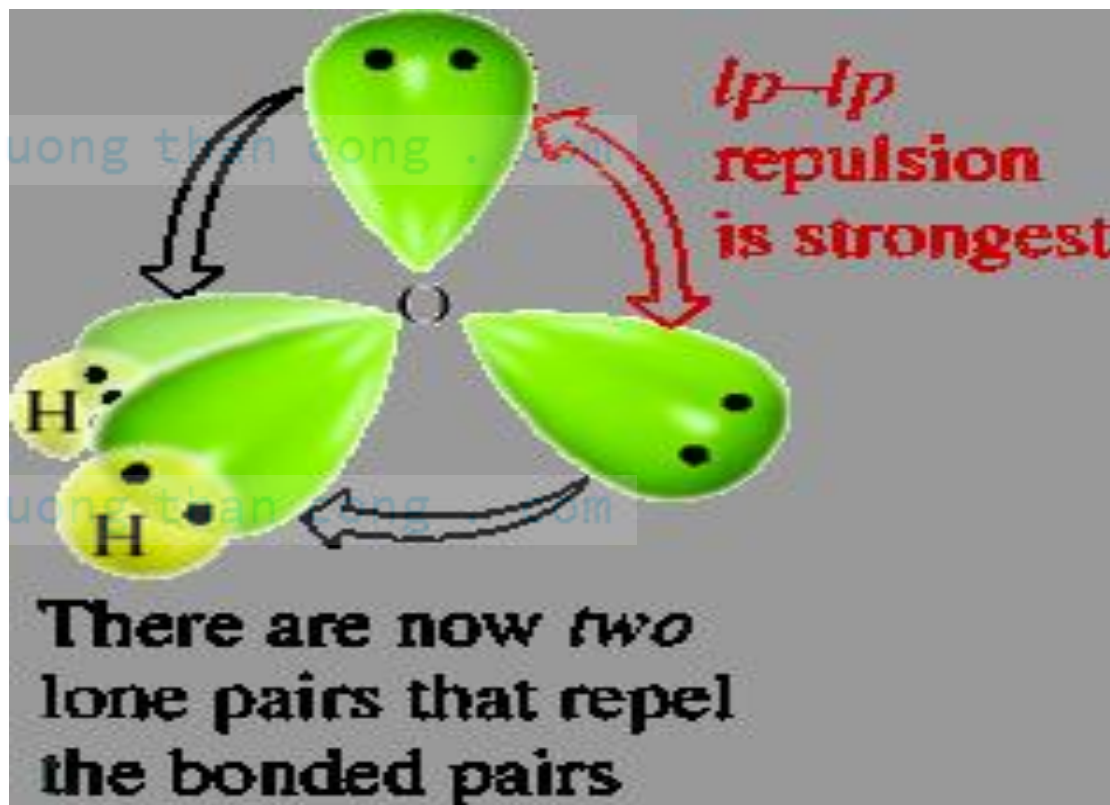
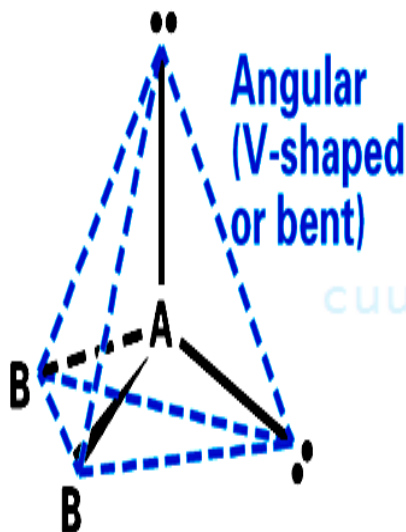


BỐN AO LẠI HÓA sp^3

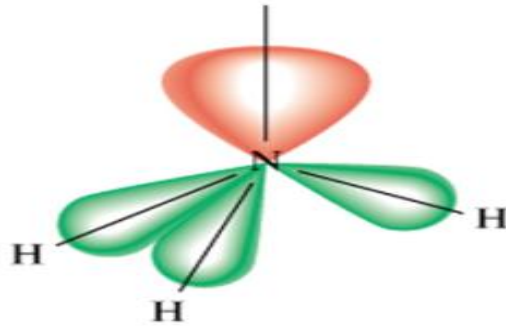
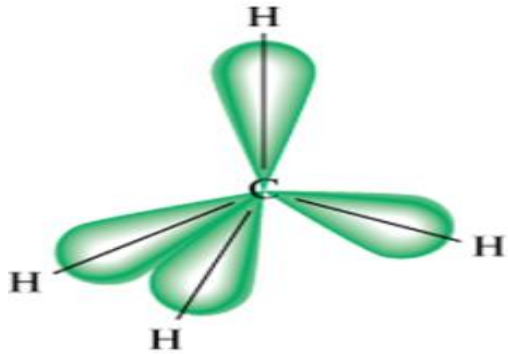


sp^3

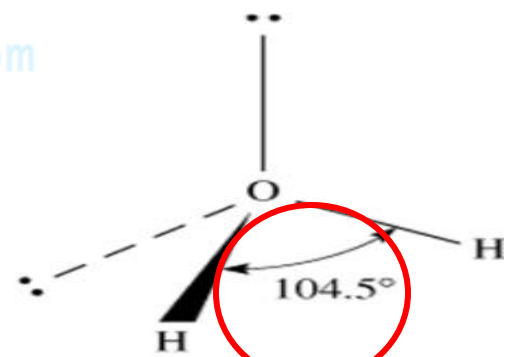
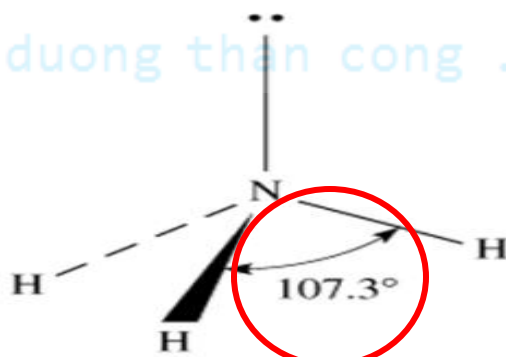
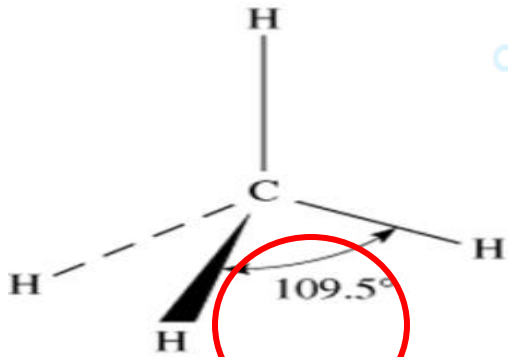
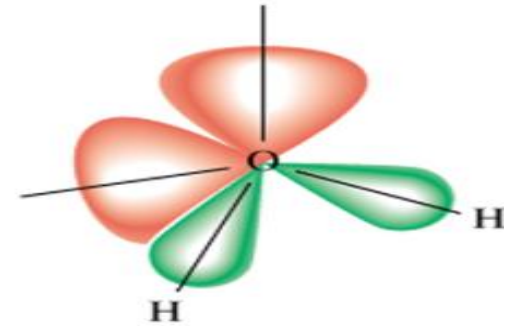
2 unshared pairs



Ảnh hưởng của cặp điện tử tự do



(a)



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

>

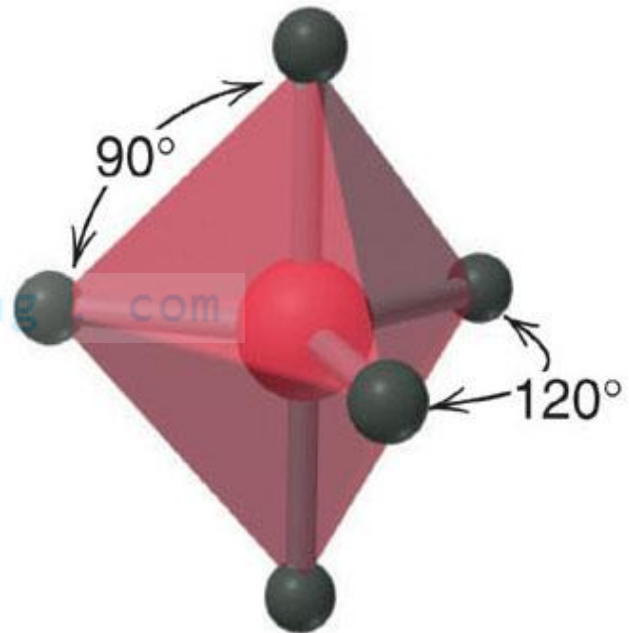
$2e_{td} \leftrightarrow 2e_{lk}$
Lực đẩy

>

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



trigonal bipyramidal

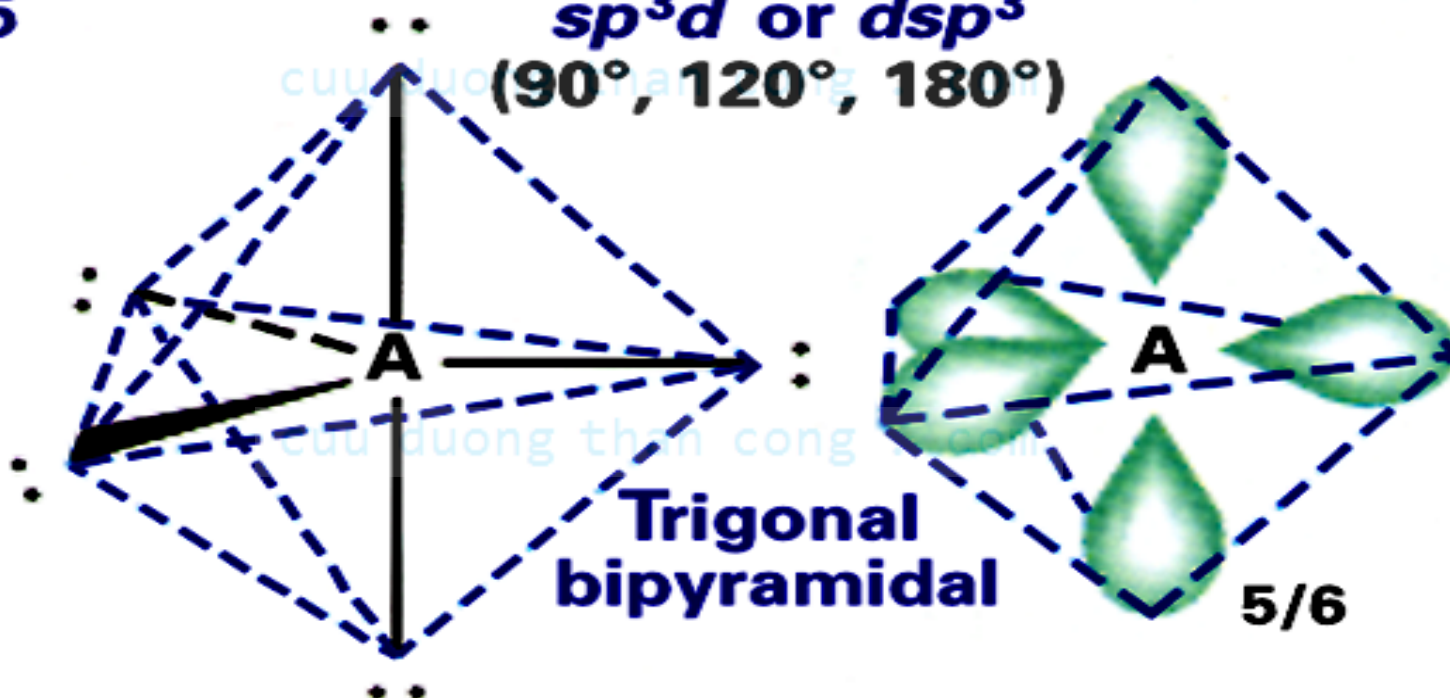


Lai hoá sp^3d

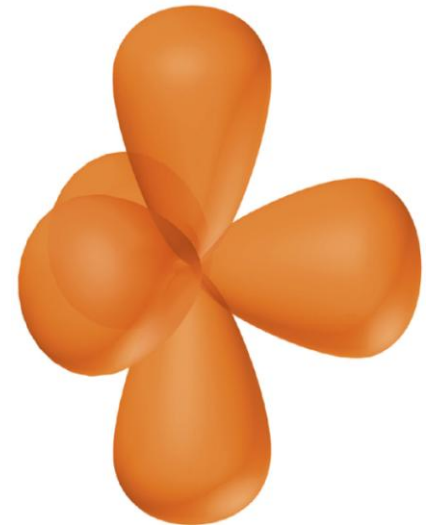
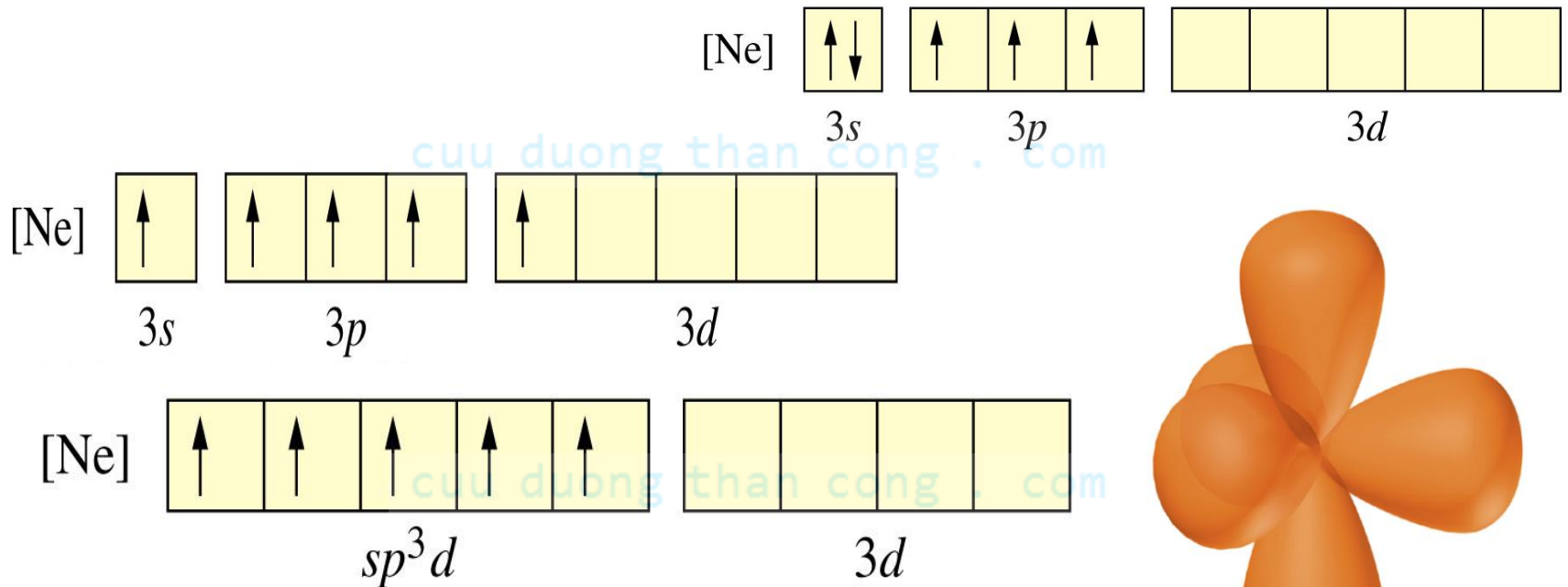
Regions of high electron density	Electronic geometry	Hybridization at central atom (angle)	Hybridized orbital orientation
----------------------------------	---------------------	---------------------------------------	--------------------------------

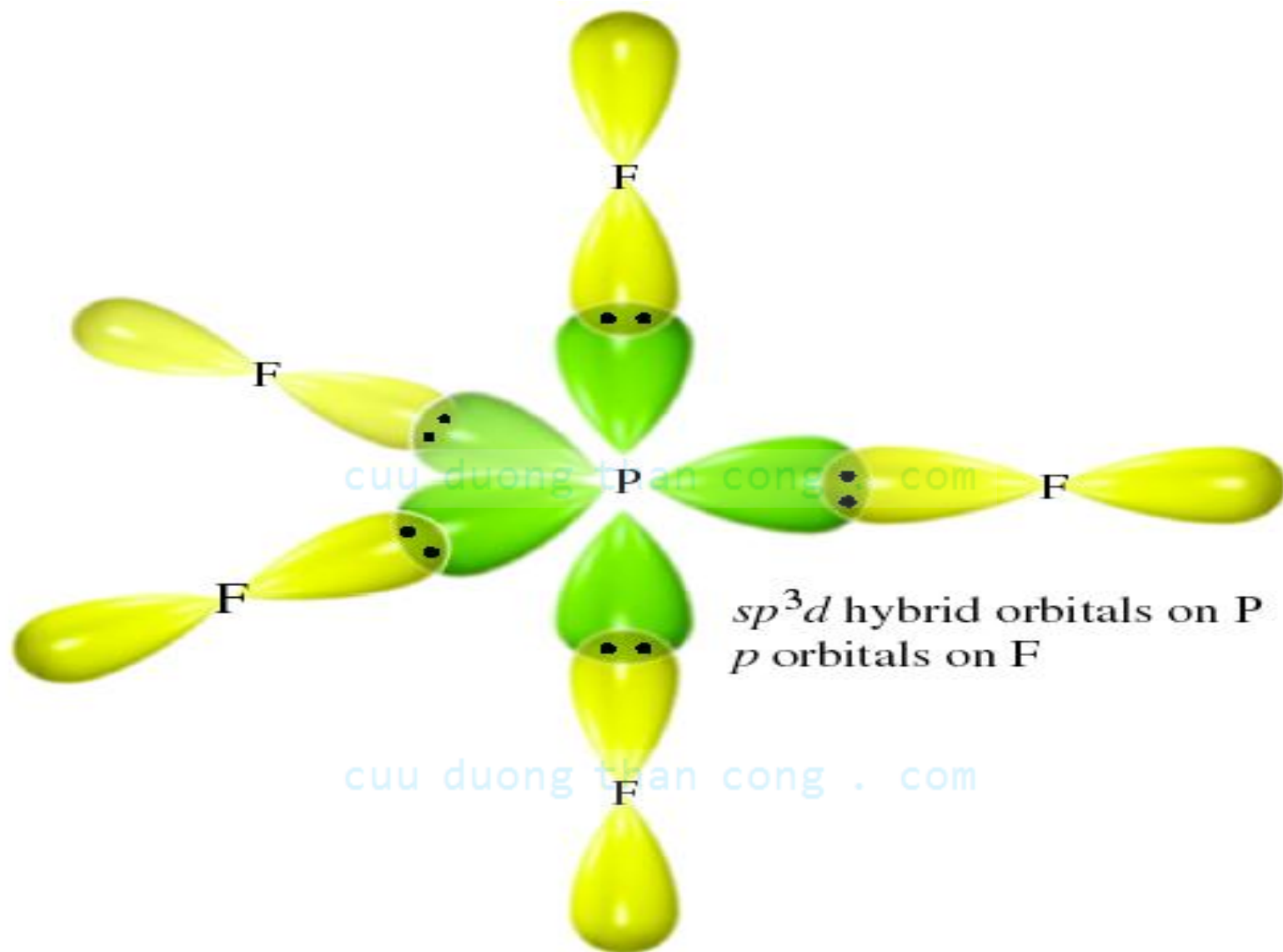
5

sp^3d or dsp^3
(90° , 120° , 180°)



Lai hoá sp^3d

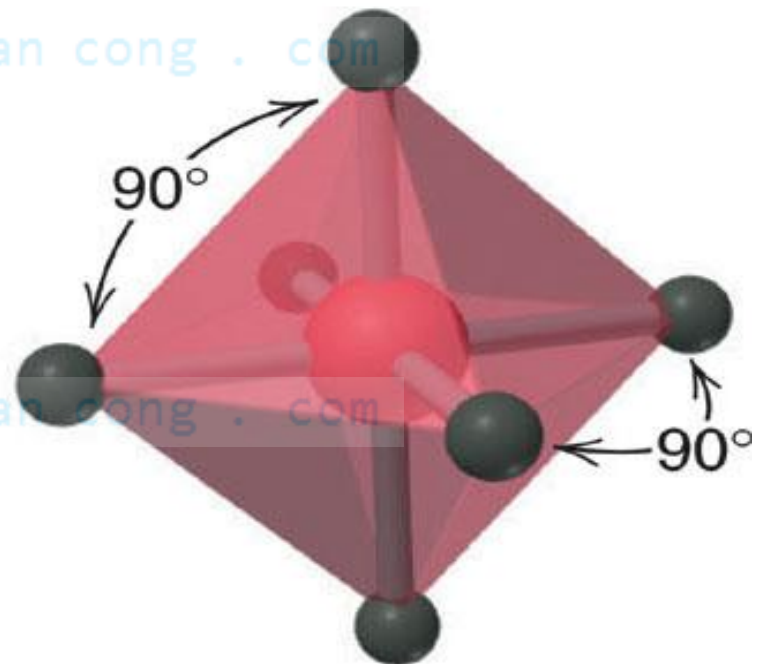




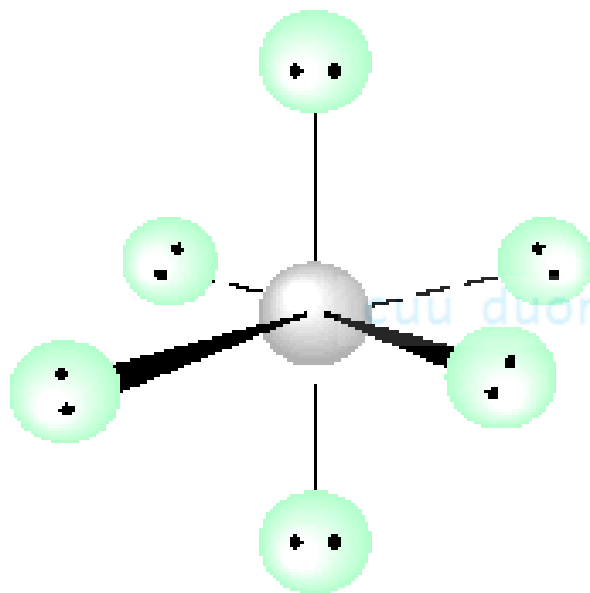
AB_6 Lai hóa sp^3d^2



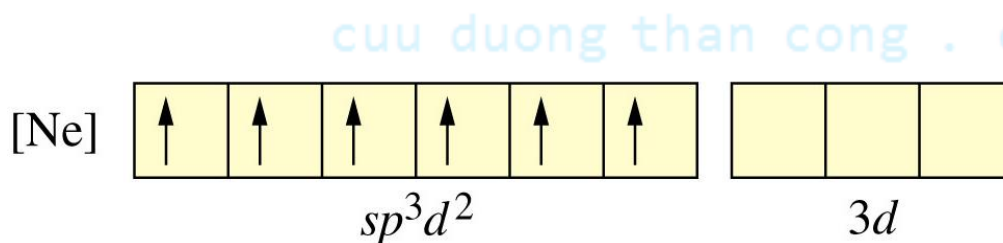
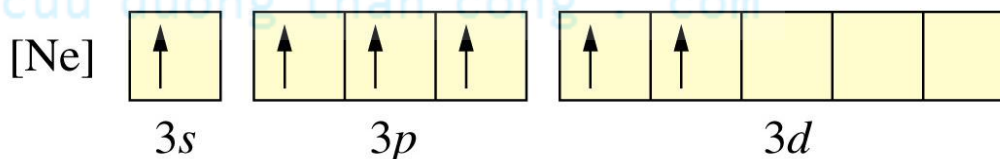
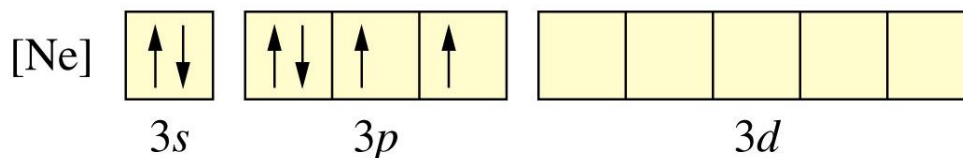
octahedral



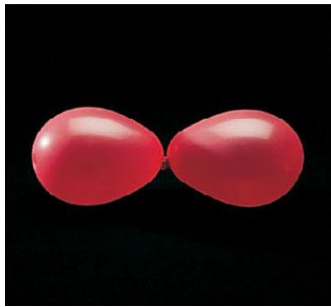
Lai hóa sp^3d^2



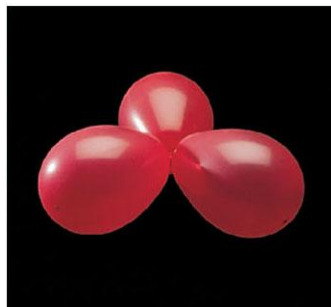
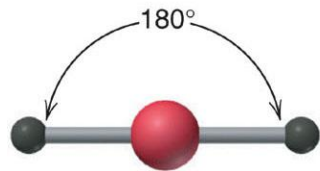
Lai hoá sp^3d^2



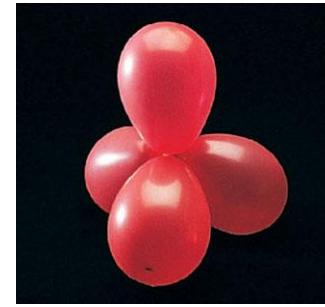
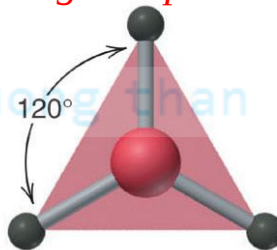
VSEPR



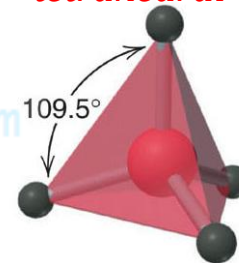
linear



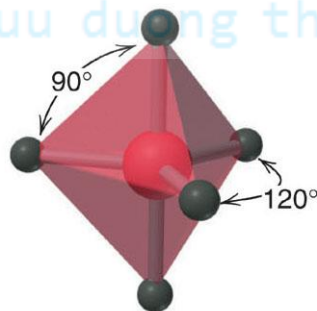
trigonal planar



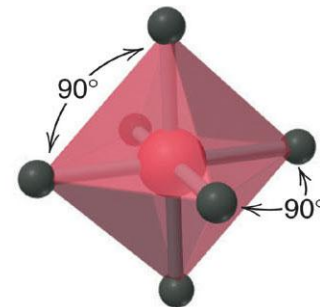
tetrahedral



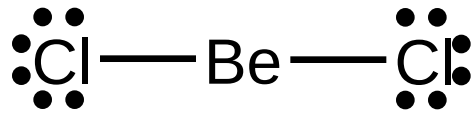
trigonal bipyramidal



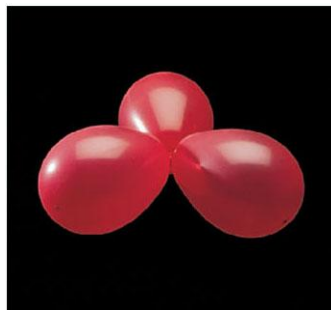
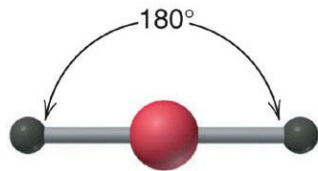
octahedral



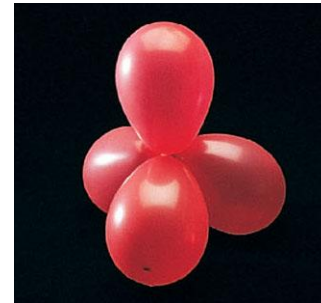
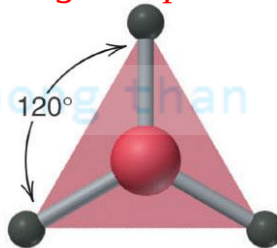
VSEPR



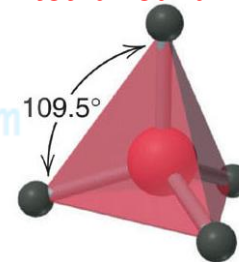
linear



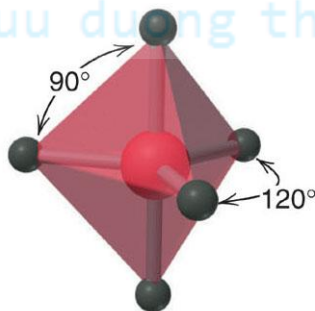
trigonal planar



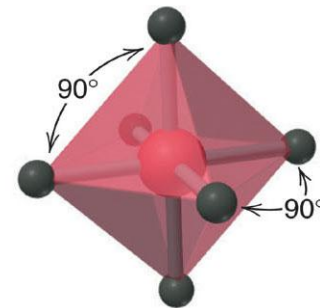
tetrahedral



trigonal bipyramidal

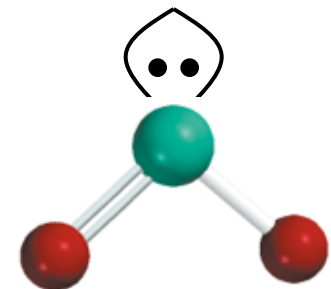
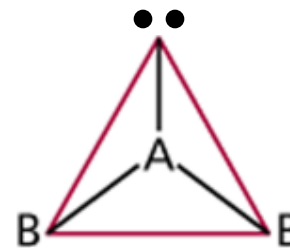


octahedral



VSEPR

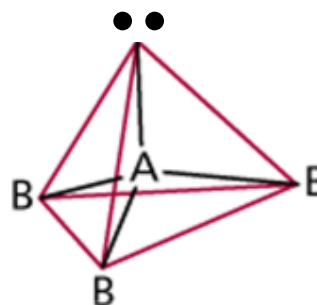
<u>Loại ptử</u>	<u>Số cặp e liên kết</u>	<u>Số cặp e tự do</u>	<u>Sự định hướng của cặp e</u>	<u>Hình học phân tử</u>
AB_3	3	0	Tam giác phẳng	Tam giác phẳng
AB_2E	2	1	Tam giác phẳng	góc



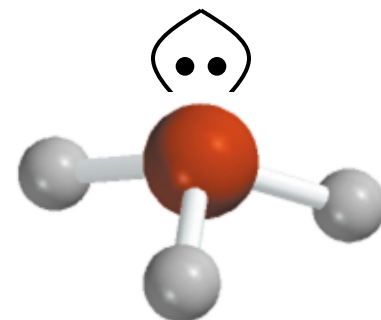
VSEPR

<u>Loại p tử</u>	<u>Số cặp Electron Liên kết</u>	<u>Số cặp Electron Tự do</u>	<u>Sự định hướng Các cặp e</u>	<u>Hình học Phân tử</u>
AB_4	4	0	Tứ diện	Tứ diện
AB_3E	3	1	Tứ diện	Tháp tam giác

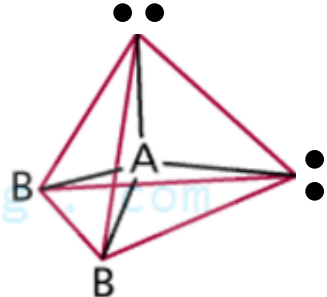
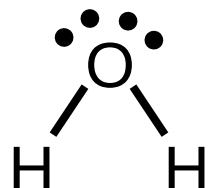
cuu duong than cong . com



cuu duong than cong . com

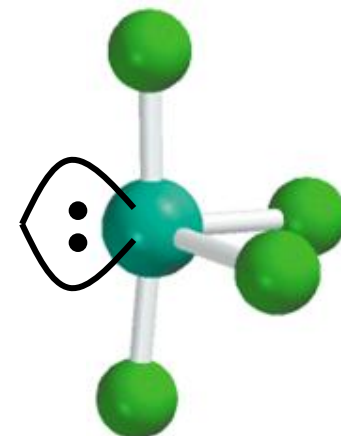
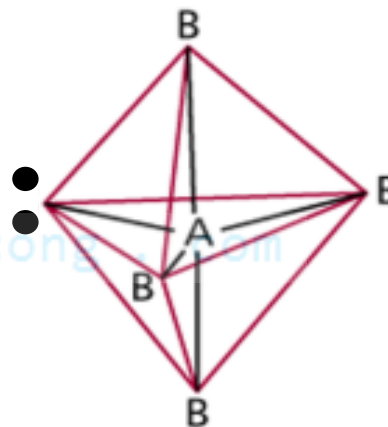


VSEPR

<u>Loại ptử</u>	<u>Số cặp Electron Liên kết</u>	<u>Số cặp Electron Tự do</u>	<u>Sự định hướng Các cặp e</u>	<u>Hình học Phân tử</u>
AB_4	4	0	Tứ diện	Tứ diện
AB_3E	3	1	Tứ diện	Tháp tam giác
AB_2E_2	2	2	Tứ diện 	Góc 

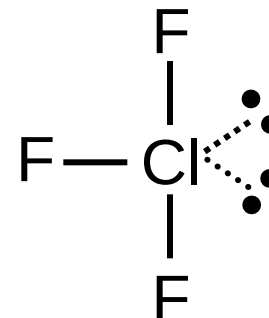
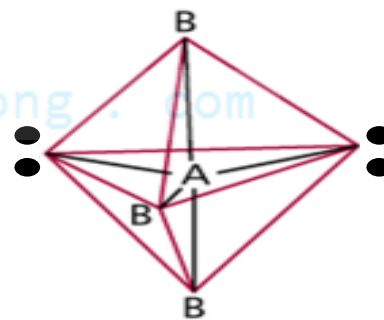
VSEPR

<u>Loại ptử</u>	<u>Số cặp Electron Liên kết</u>	<u>Số cặp Electron Tự do</u>	<u>Sự định hướng Các cặp e</u>	<u>Hình học Phân tử</u>
AB_5	5	0	Lưỡng tháp Tam giác	Lưỡng tháp Tam giác
AB_4E	4	1	Lưỡng tháp tam giác	Tứ diện Lệch



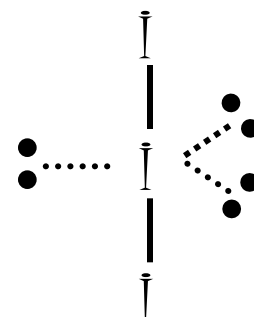
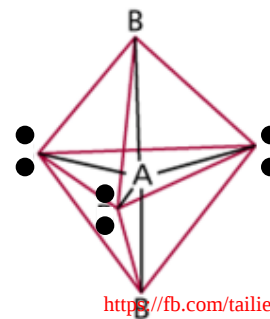
VSEPR

<u>Loại p tử</u>	<u>Số cặp Electron Liên kết</u>	<u>Số cặp Electron Tự do</u>	<u>Sự định hướng Các cặp e</u>	<u>Hình học Phân tử</u>
AB_5	5	0	Lưỡng tháp Tam giác	Lưỡng tháp Tam giác
AB_4E	4	1	Lưỡng tháp tam giác	Tứ diện Lẻch
AB_3E_2	3	2	Lưỡng tháp Tam giác	Chữ T



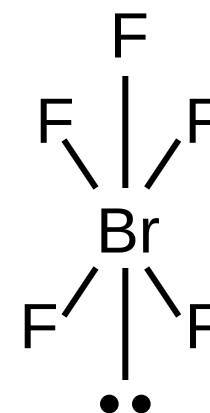
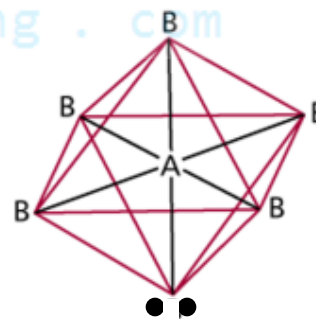
VSEPR

<u>Loại ph tử</u>	<u>Số cặp Electron Liên kết</u>	<u>Số cặp Electron Tự do</u>	<u>Sự định hướng Các cặp e</u>	<u>Hình học phân tử</u>
AB_5	5	0	Lưỡng tháp Tam giác	Lưỡng tháp Tam giác
AB_4E	4	1	Lưỡng tháp Tam giác	Tứ diện Lệch
AB_3E_2	3	2	Lưỡng tháp Tam giác	Chữ T
AB_2E_3	2	3	Lưỡng tháp Tam giác	Dạng thẳng



VSEPR

<u>Loại ph tử</u>	<u>Số cặp Electron Liên kết</u>	<u>Số cặp Electron Tự do</u>	<u>Sự định hướng Các cặp e</u>	<u>Hình học Phân tử</u>
AB_6	6	0	Bát diện	Bát diện
AB_5E	5	1	Bát diện	Tháp vuông



VSEPR

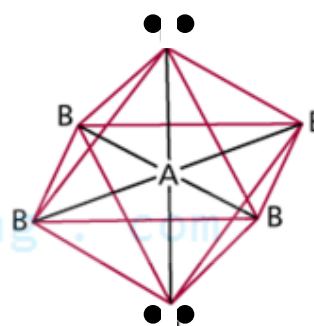
<u>Loại ph tử</u>	<u>Số cặp Electron Liên kết</u>	<u>Số cặp Electron Tự do</u>	<u>Sự định hướng Các cặp e</u>	<u>Hình học phân tử</u>
AB_6	6	0	Bát diện	Bát diện
AB_5E	5	1	Bát diện	Tháp vuông



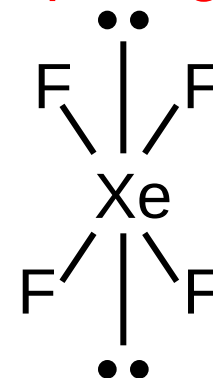
4

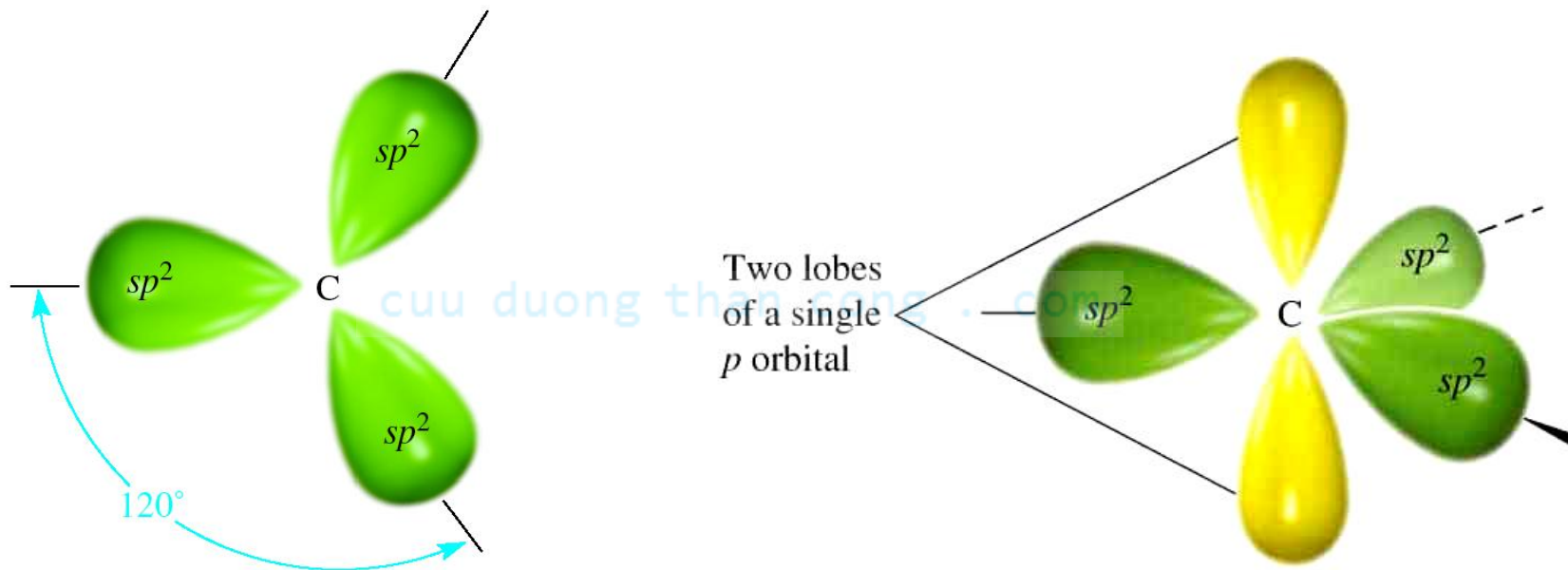
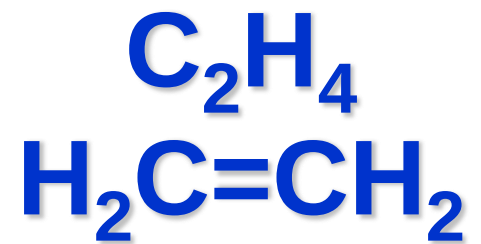
2

Bát diện

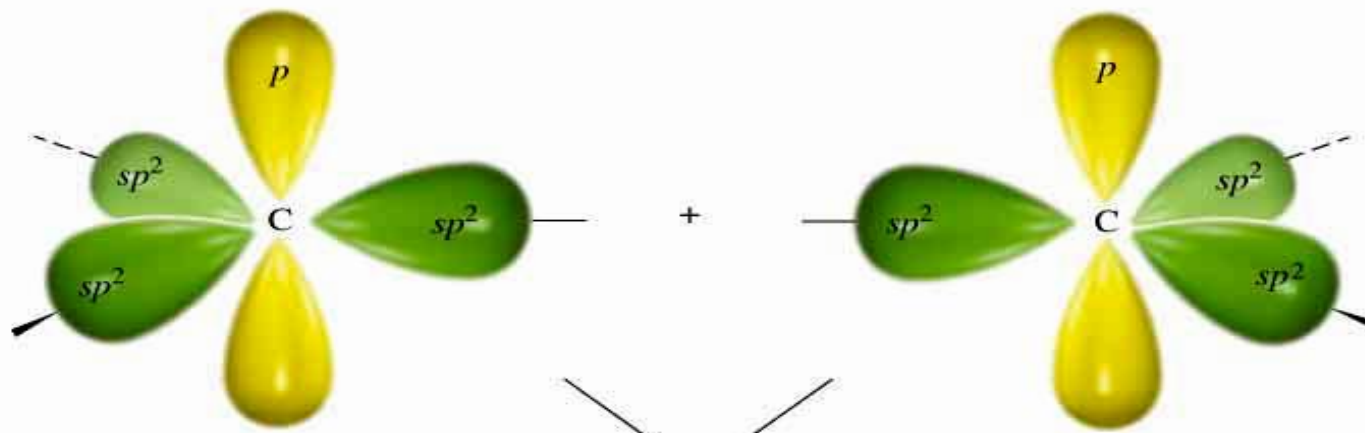


Vuông
phẳng



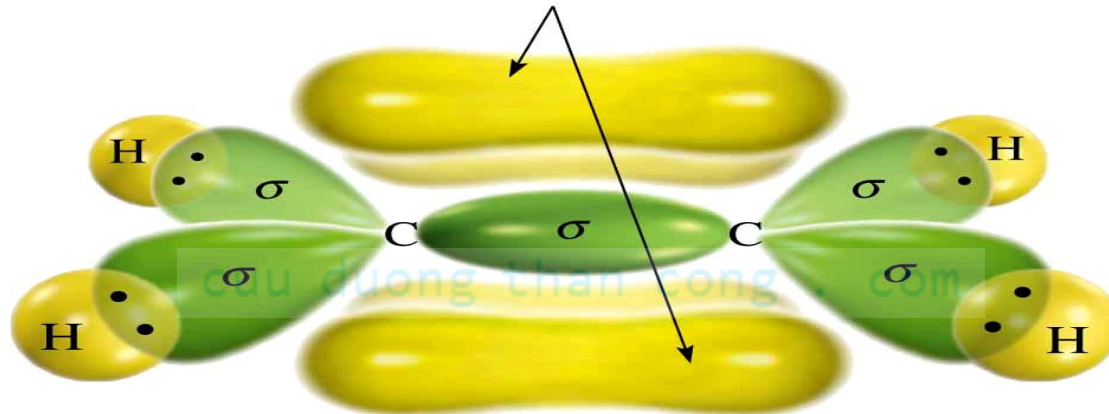


cuu duong than cong . com

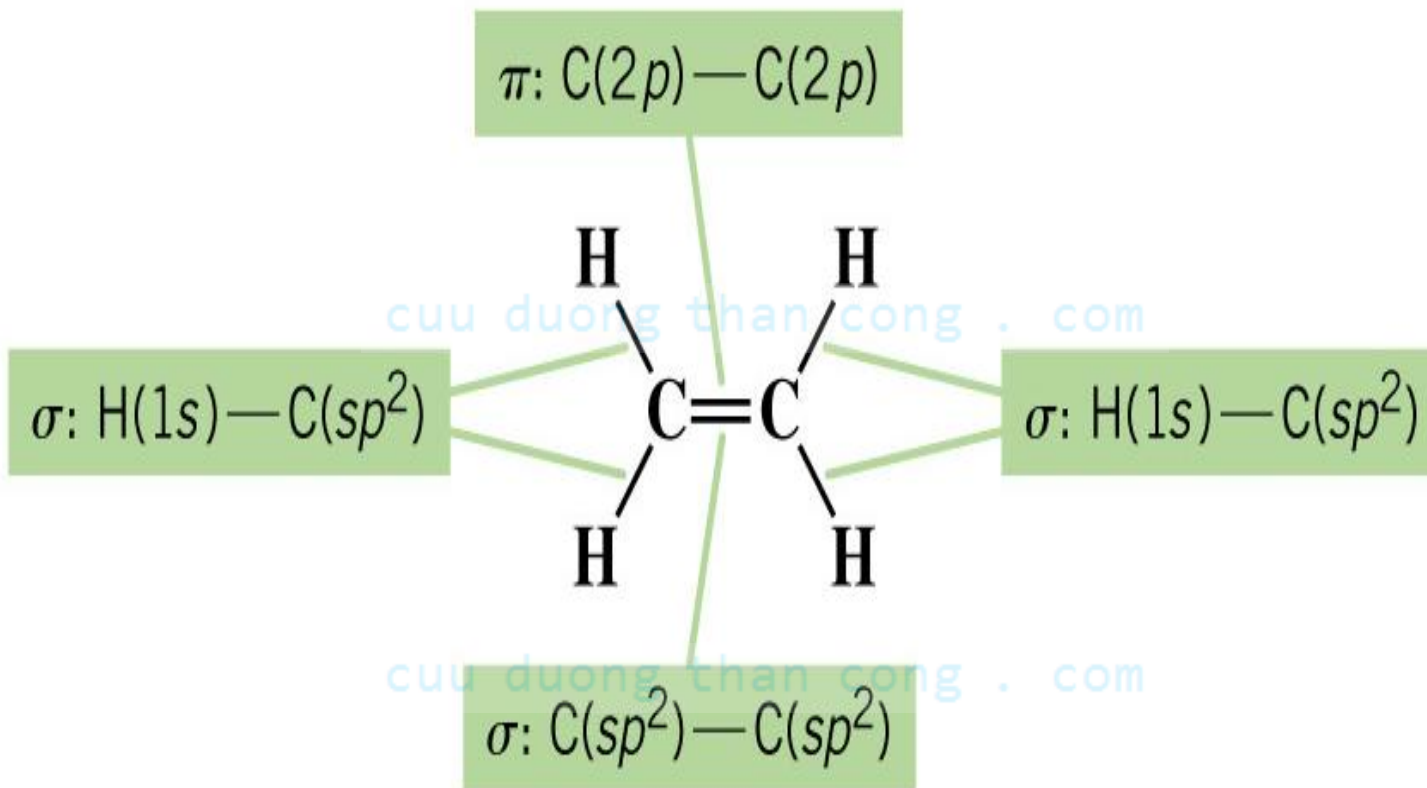


cuu duong than cong . com

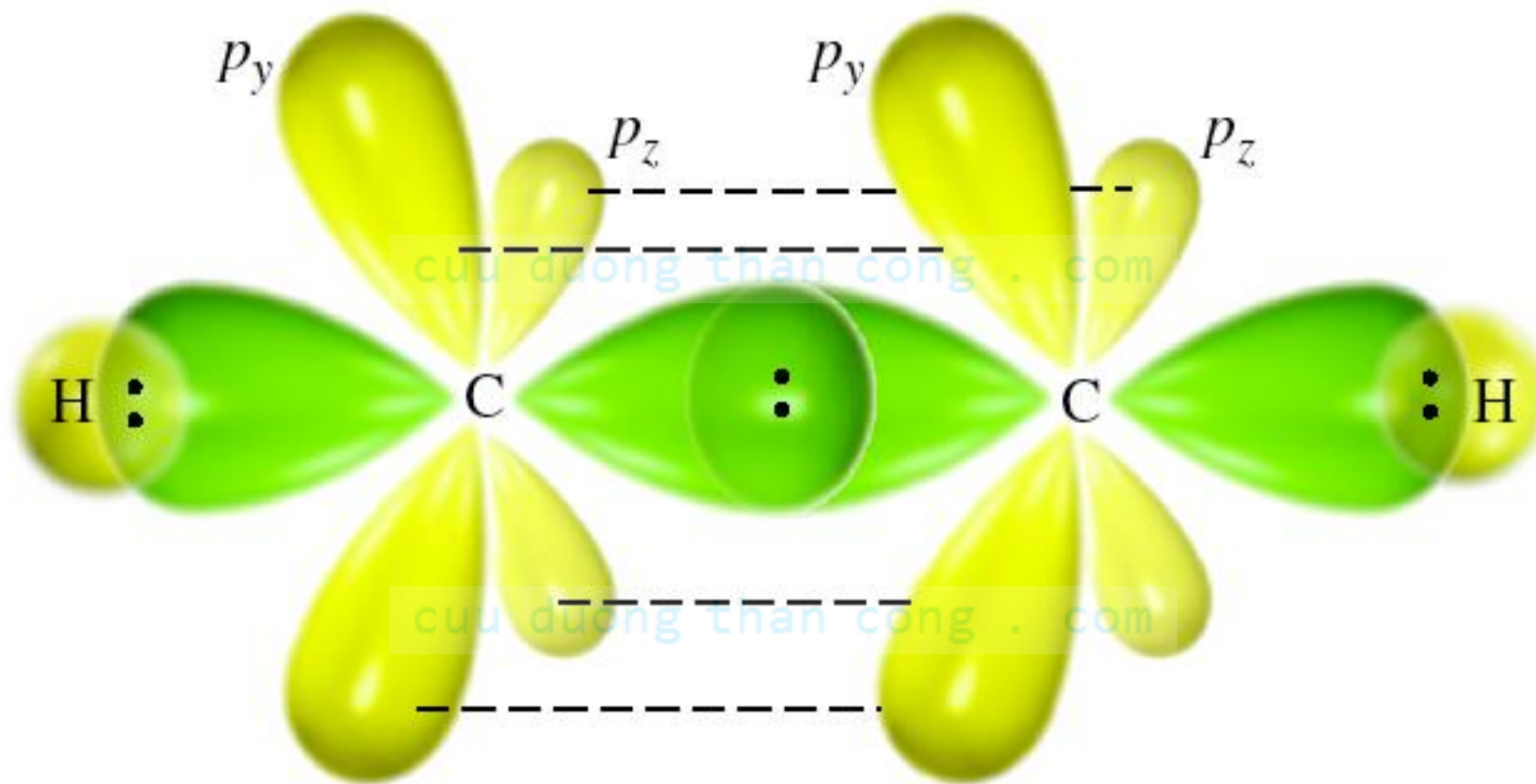
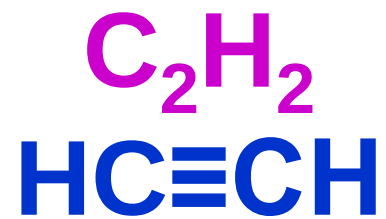
One π bond



© 2004 Thomson/Brooks Cole

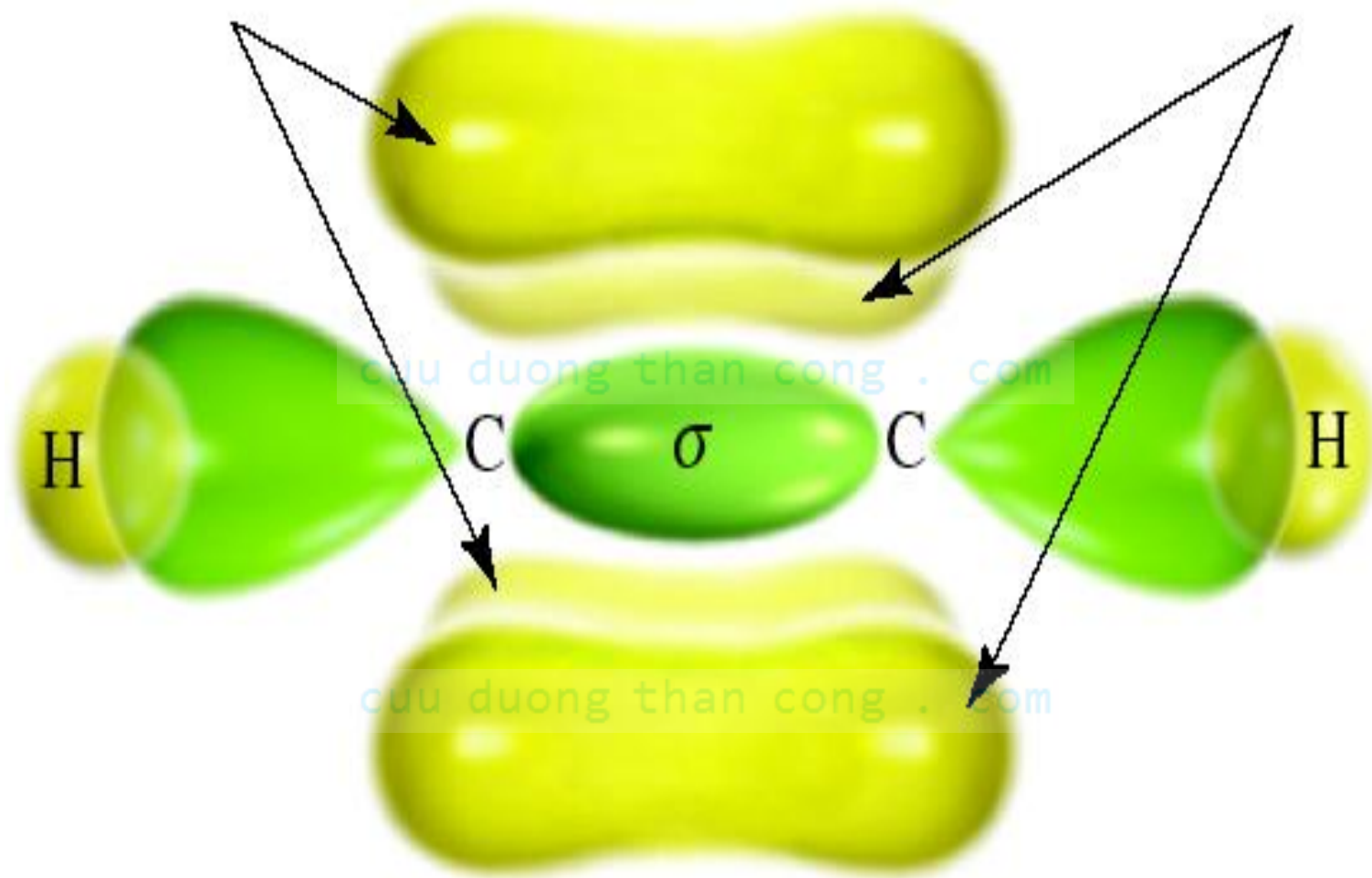


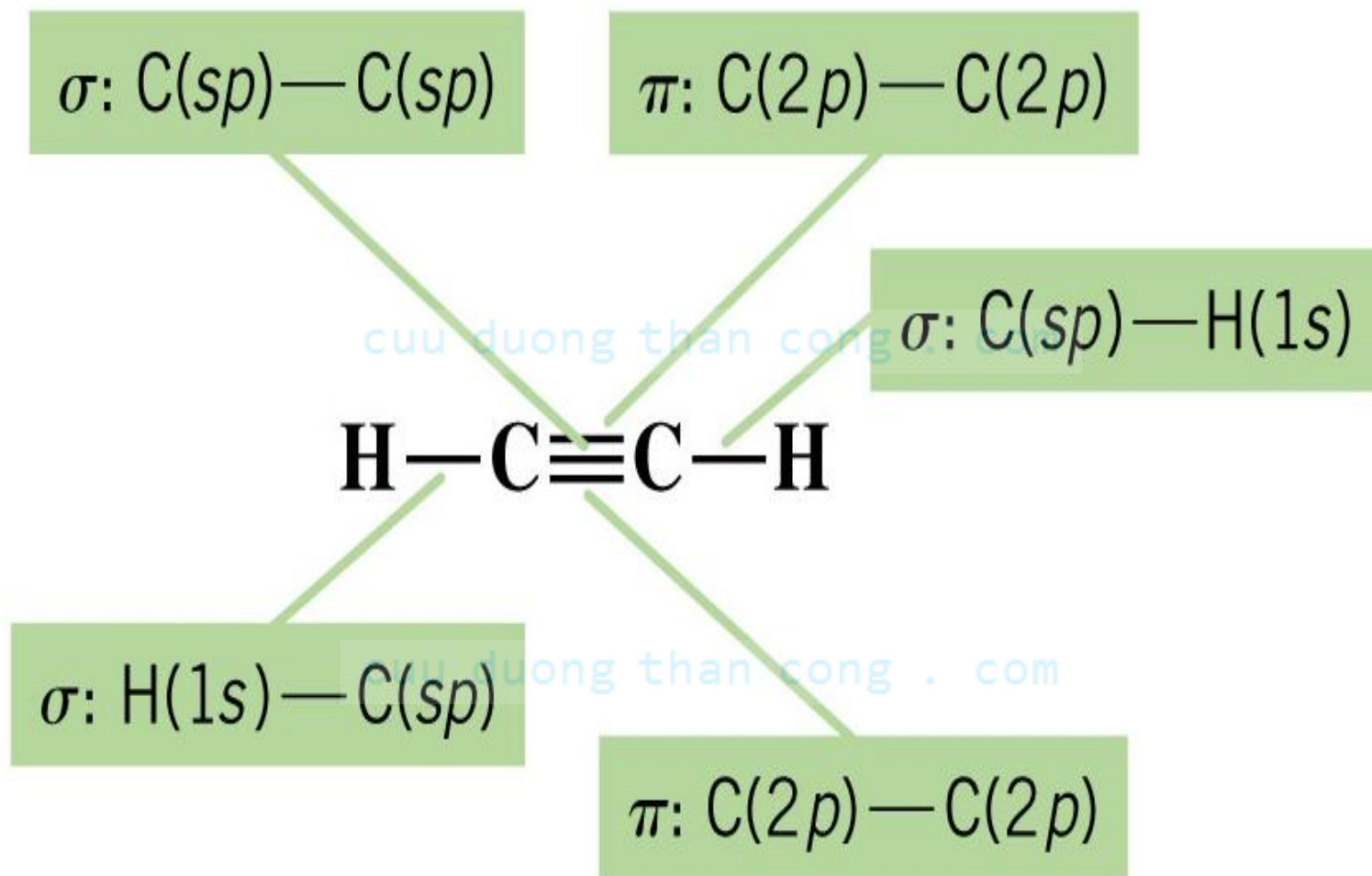
(c) Hybridization and bonding scheme



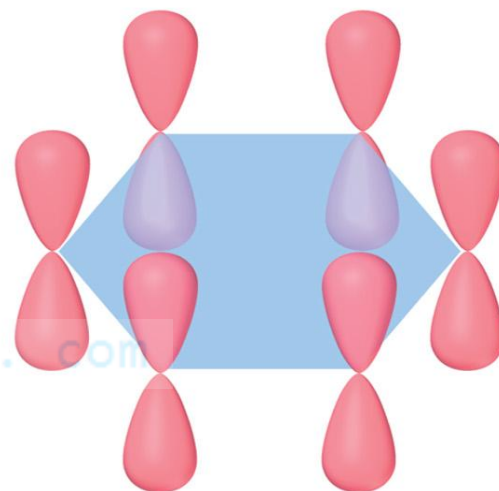
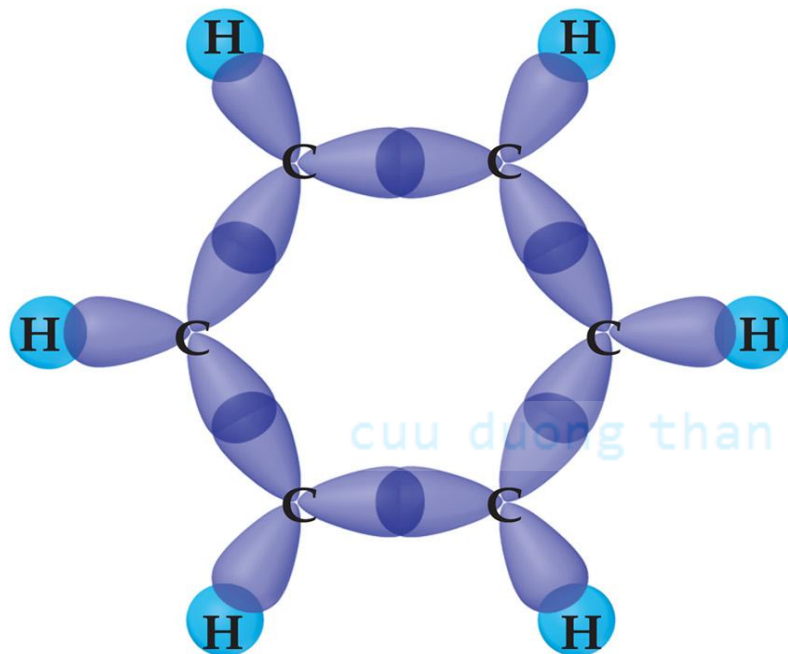
One π bond

A second π bond

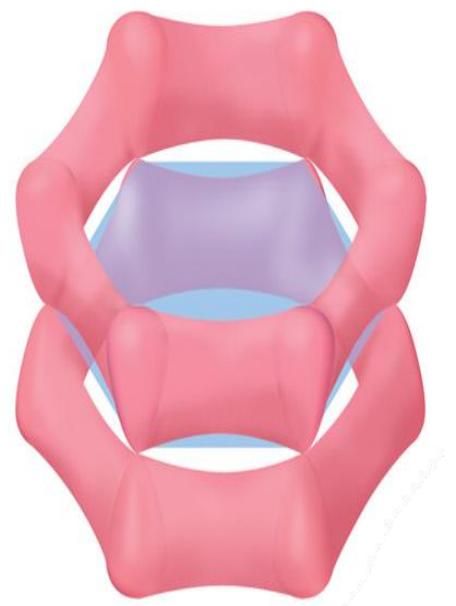
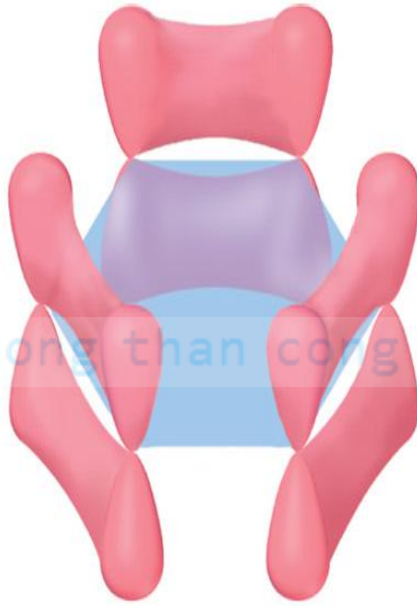
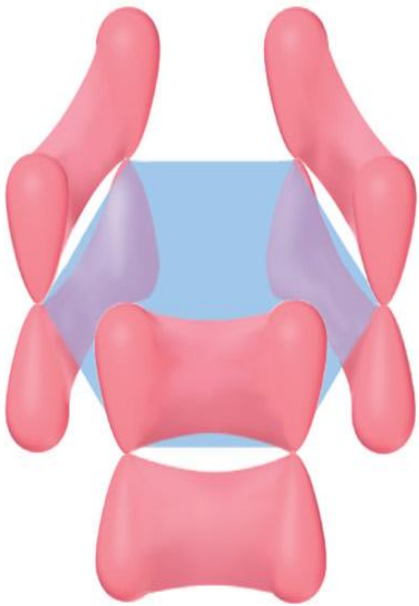




Liên kết π không định chỗ C_6H_6



Bậc liên kết C-C = $1 + 3/6 = 1,5$

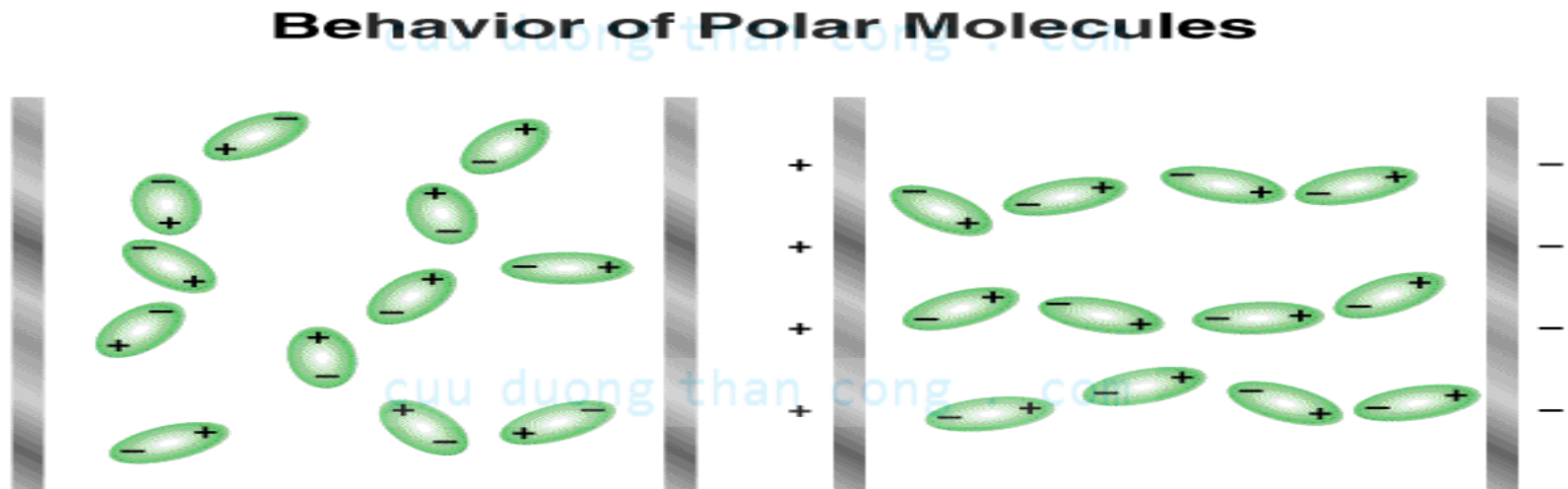


cuu duong than cong . com

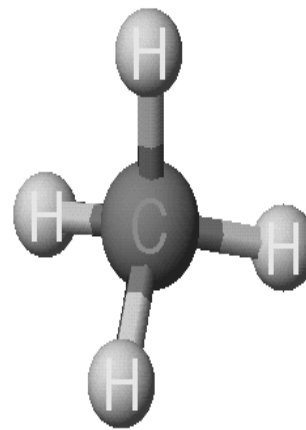
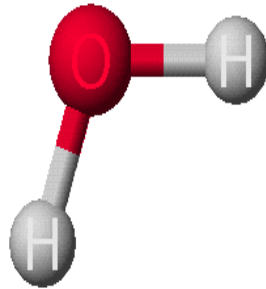
cuu duong than cong . com

Tính chất điện của phân tử

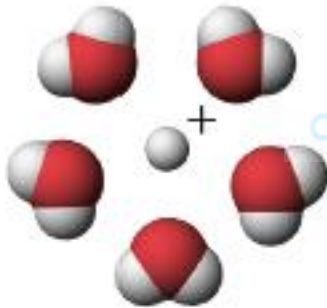
- Sự định hướng của các phân tử có cực trong điện trường



Water
Boiling point
= 100 °C



Methane
Boiling point
= -161 °C



Water surrounding
a cation



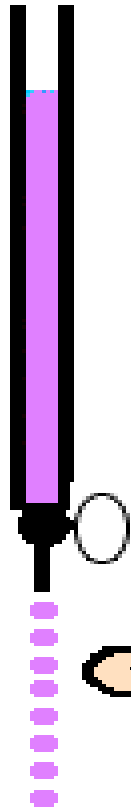
Water surrounding
an anion

**Tại sao nước và
metan có nhiệt độ
sôi rất khác biệt
nhau?**

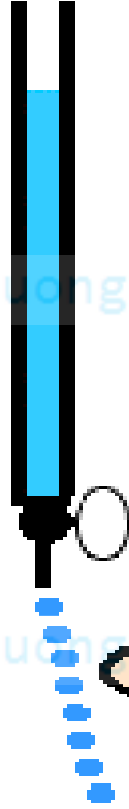
**Tại sao các hợp
chất ion tan được
trong nước?**

Phân tử chât có cực và không cực

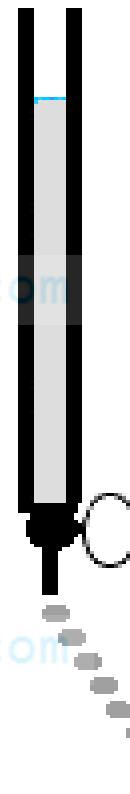
CCl_4



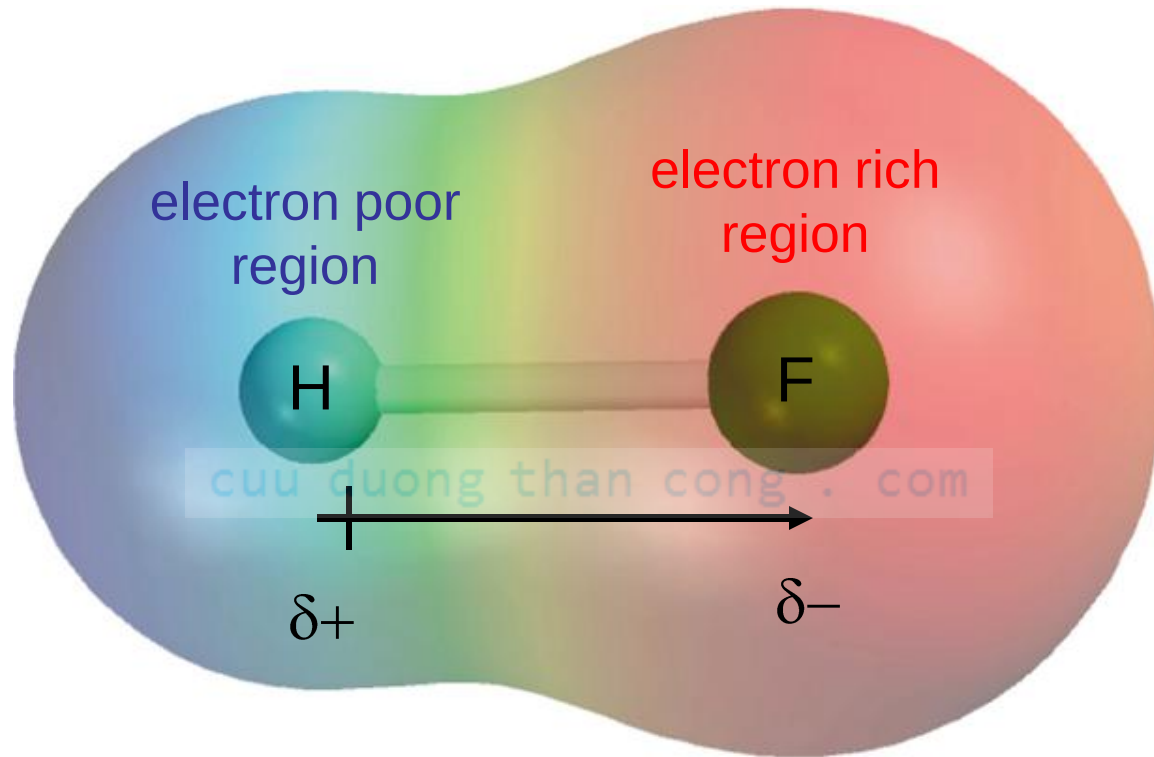
Acetone



H_2O



Momen lưỡng cực và phân tử chđt có cực



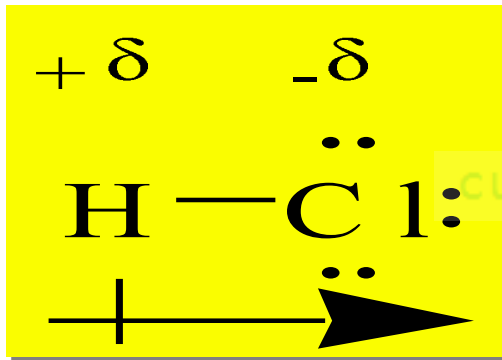
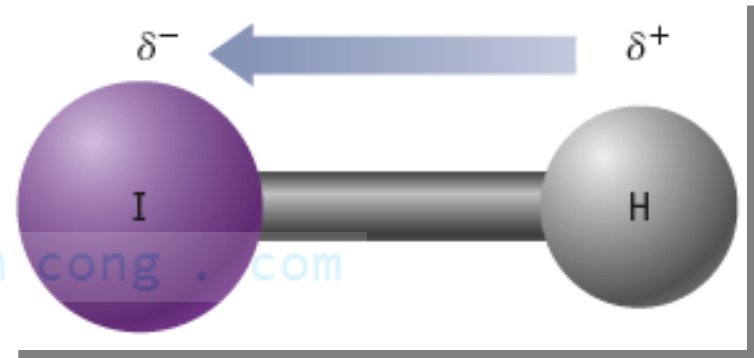
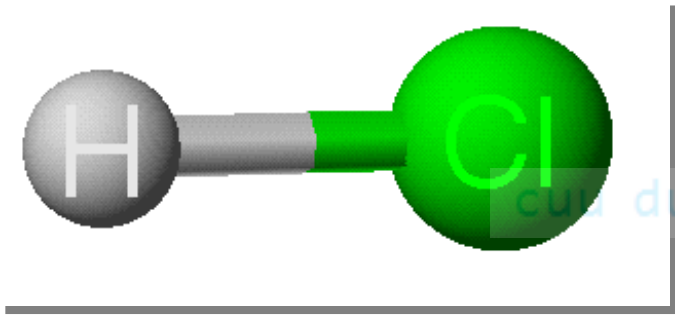
Momen lưỡng cực $\mu = \delta \times l$

δ Điện tích [đơn vị tĩnh điện]

l khoảng cách giữa hai điện tích[cm]

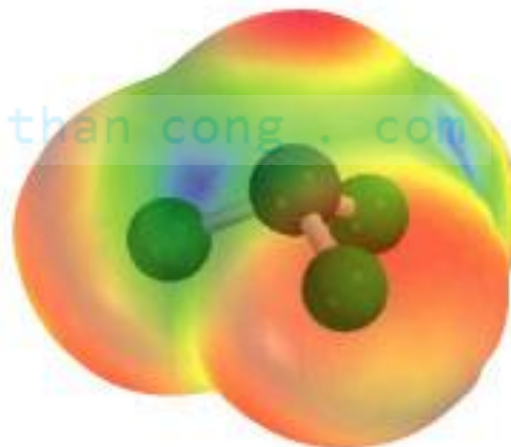
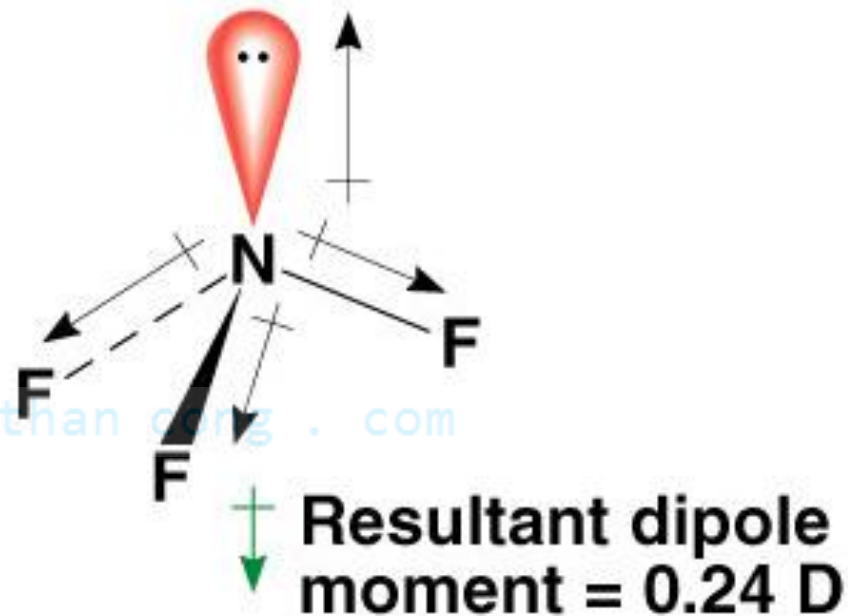
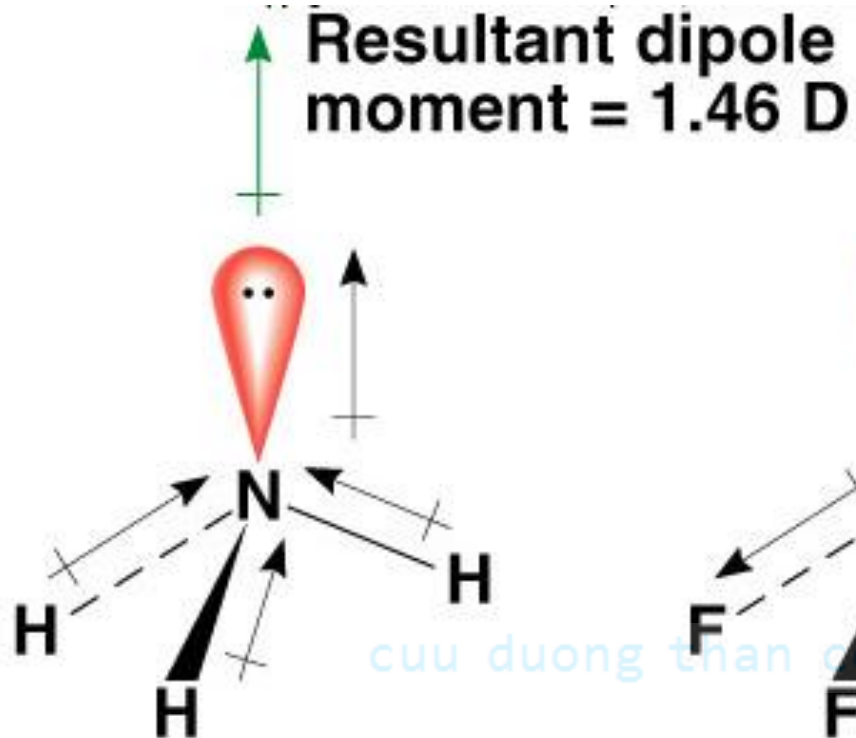
1 D = 3.36×10^{-30} C m = 10^{-18} đvtd.cm

Momen lưỡng cực phân tử

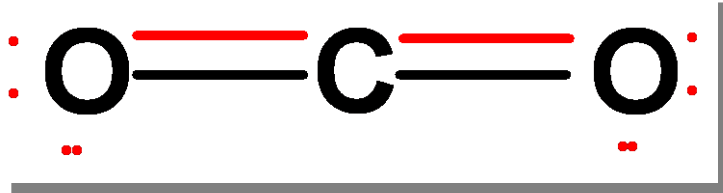


- **Momen lưỡng cực của phân tử là tổng vectơ momen lưỡng cực của các liên kết và cặp electron hoá trị tự do trong các AO lai hóa có trong phân tử.**

cuu duong than cong . com



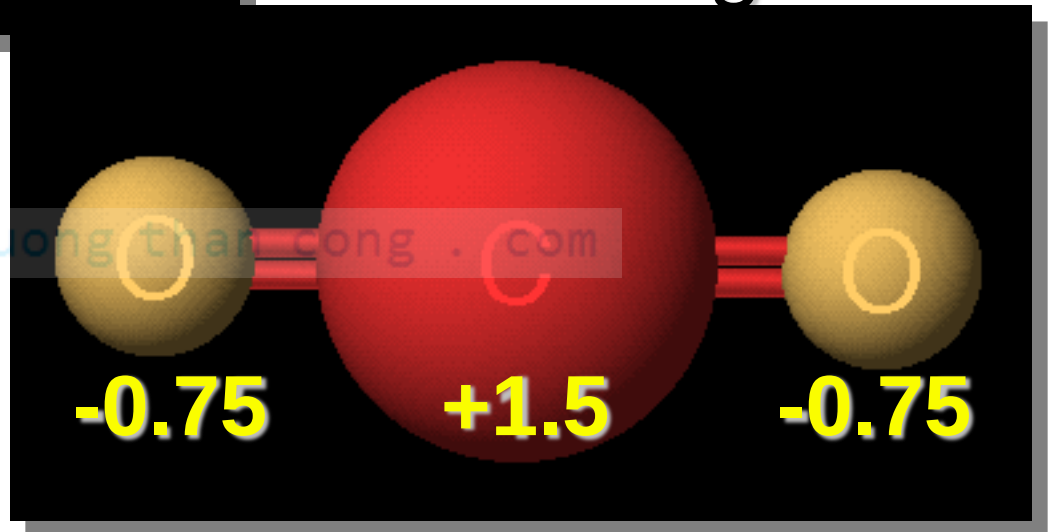
Carbon Dioxide



- Ptử CO_2 không cực mặc dù liên kết CO có cực.
- CO_2 có cấu tạo đối xứng.

Nguyên tử C trong ptử CO_2 bị phân cực dương nên pứ với H_2O tạo thành H_2CO_3

CuuDuongThanCong.com

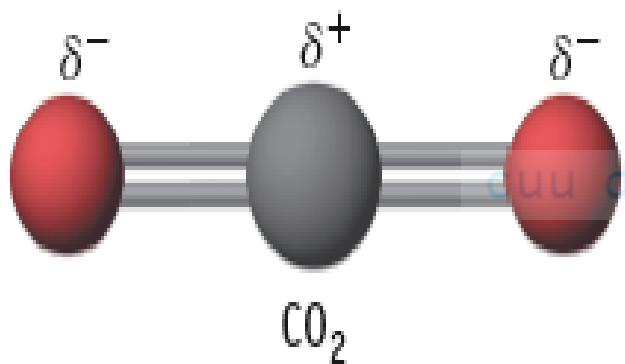


<https://fb.com/tailieudientucntt>

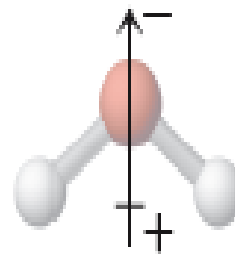
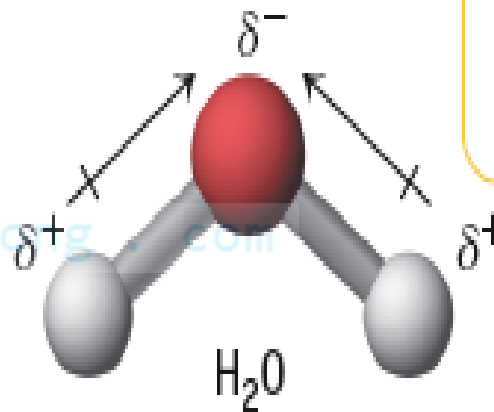
Phân tử nào có cực và không có cực?

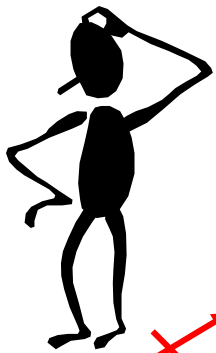
So sánh giữa CO_2 và H_2O , phân tử nào có cực ?

No net dipole moment



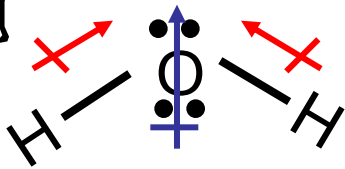
Net dipole
 $\mu = 1.85\text{D}$





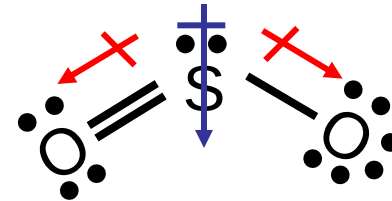
Trong số các phân tử sau đây, phân tử nào có momen lưỡng cực?

H_2O , CO_2 , SO_2 , và CH_4



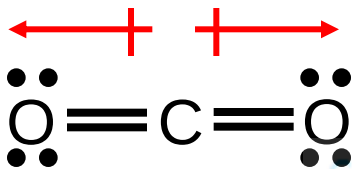
Có momen lưỡng cực

Phân tử có cực



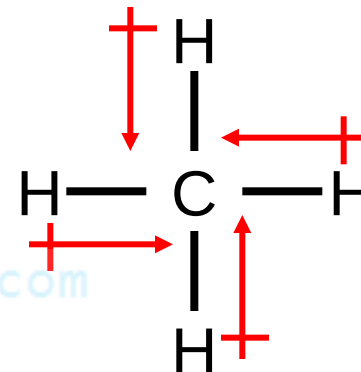
Có momen lưỡng cực

Phân tử có cực



Không có momen lưỡng cực

Phân tử không cực



Không có momen lưỡng cực

Phân tử không cực

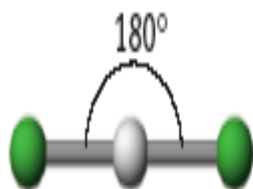
Một phân tử cộng hóa trị có cực khi

liên kết cộng hóa trị có cực
cấu tạo phân tử không đối xứng

cuu duong than cong . com

cuu duong than cong . com

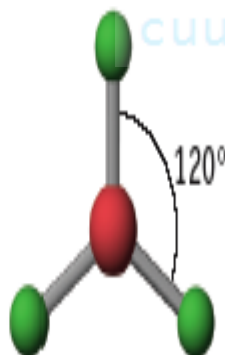
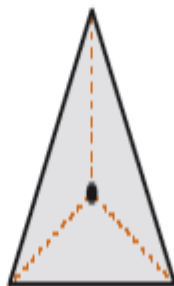
Linear



AX_2

Example: BeF_2

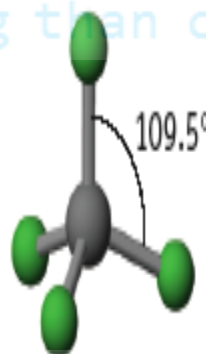
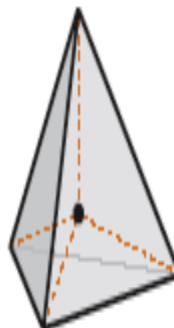
Trigonal-planar



AX_3

Example: BF_3

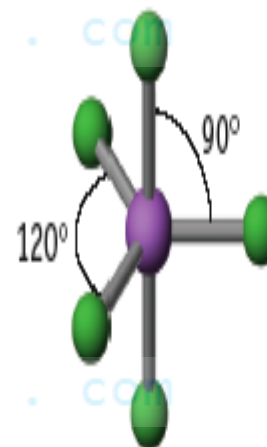
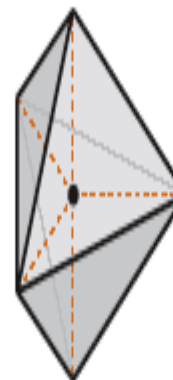
Tetrahedral



AX_4

Example: CF_4

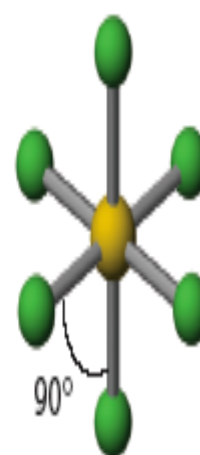
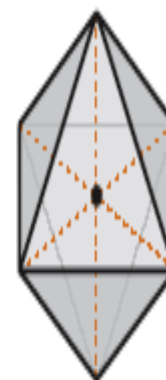
Trigonal-bipyramidal



AX_5

Example: PF_5

Octahedral



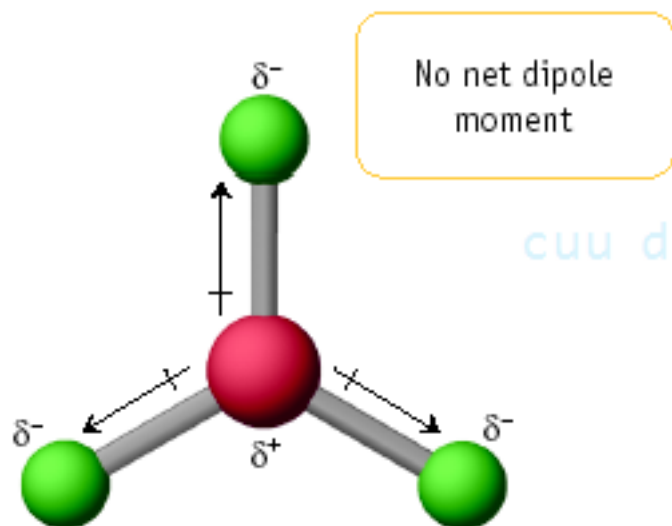
AX_6

Example: SF_6

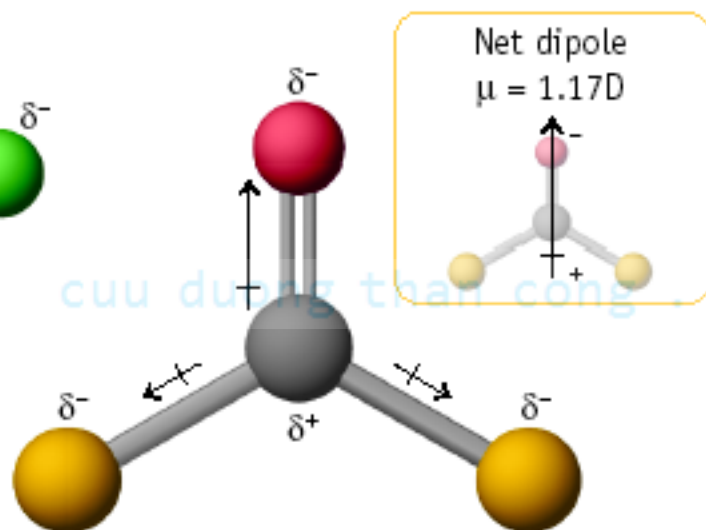
Tất cả các phân tử cht này đều không cực

Có cực hay không cực?

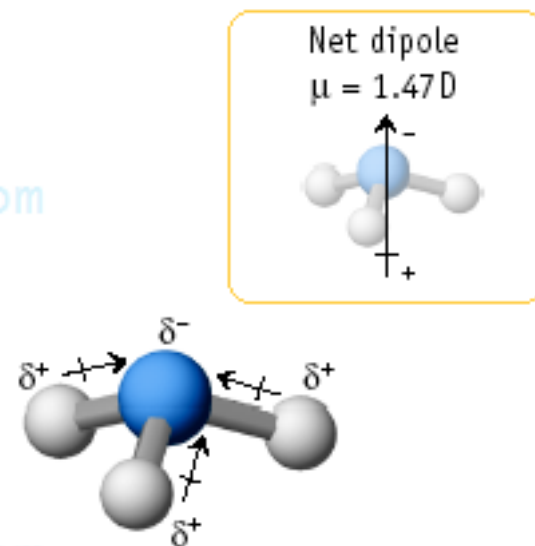
BF_3 , Cl_2CO , và NH_3 .



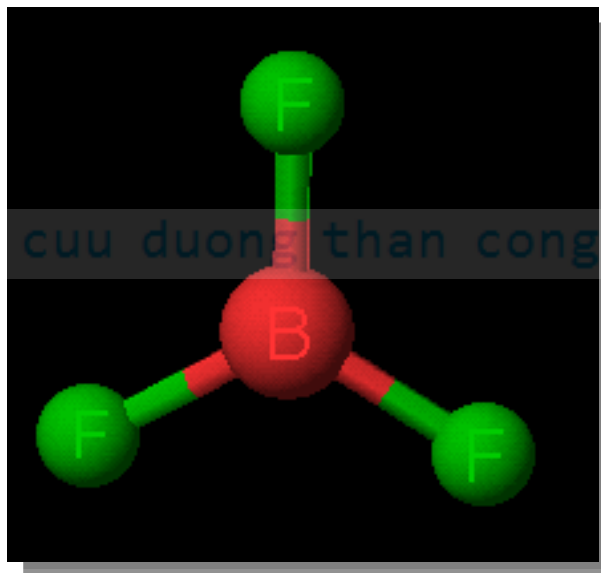
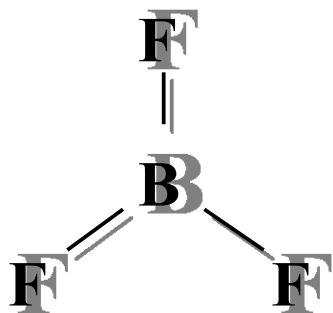
cuu duong than cong . com



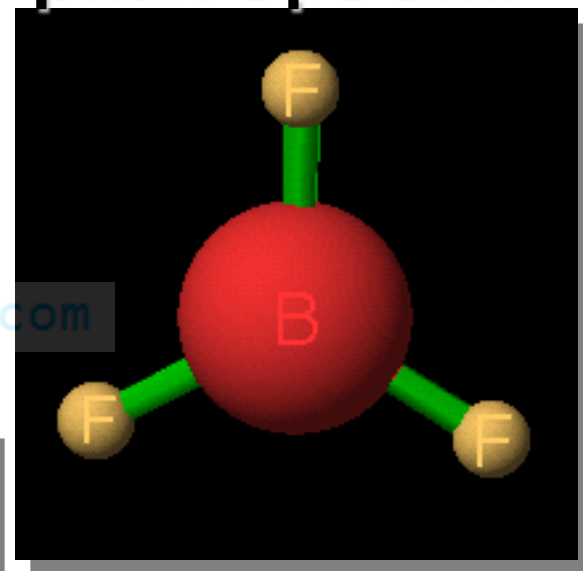
cuu duong than cong . com



Phân tử không cực, BF_3

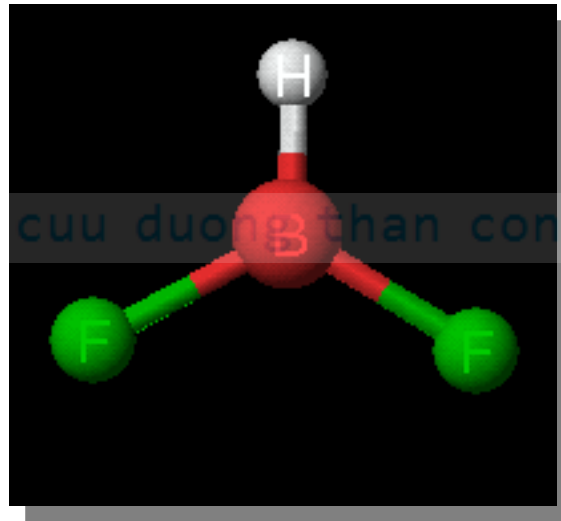
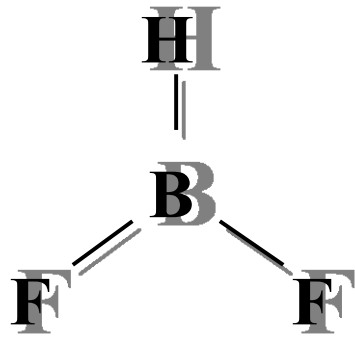


Nguyên tử B bị phân cực dương và nguyên tử F bị phân cực âm.



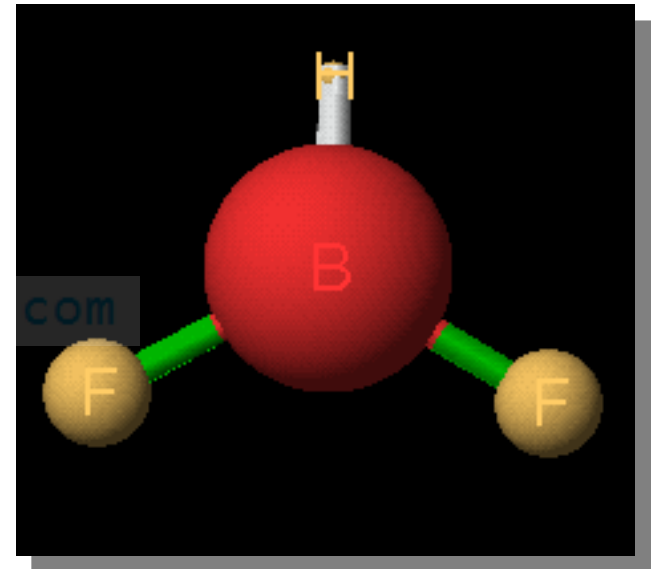
Liên kết B—F trong phân tử BF_3 là
Nhưng phân tử có cấu tạo đối xứng nên không cực.

Molecular Polarity, HBF_2



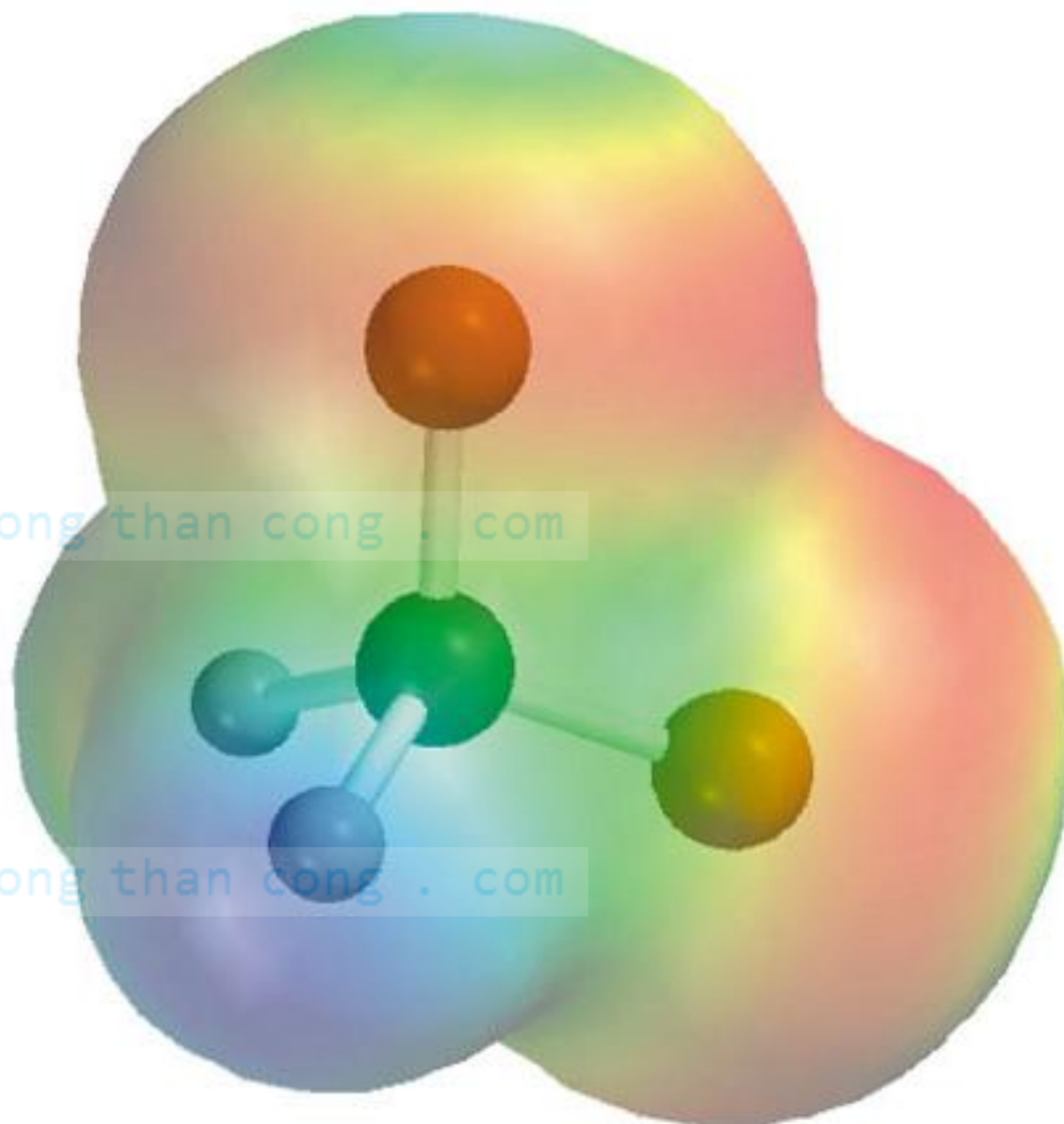
B bị phân cực dương nhưng H & F bị phân cực âm.

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



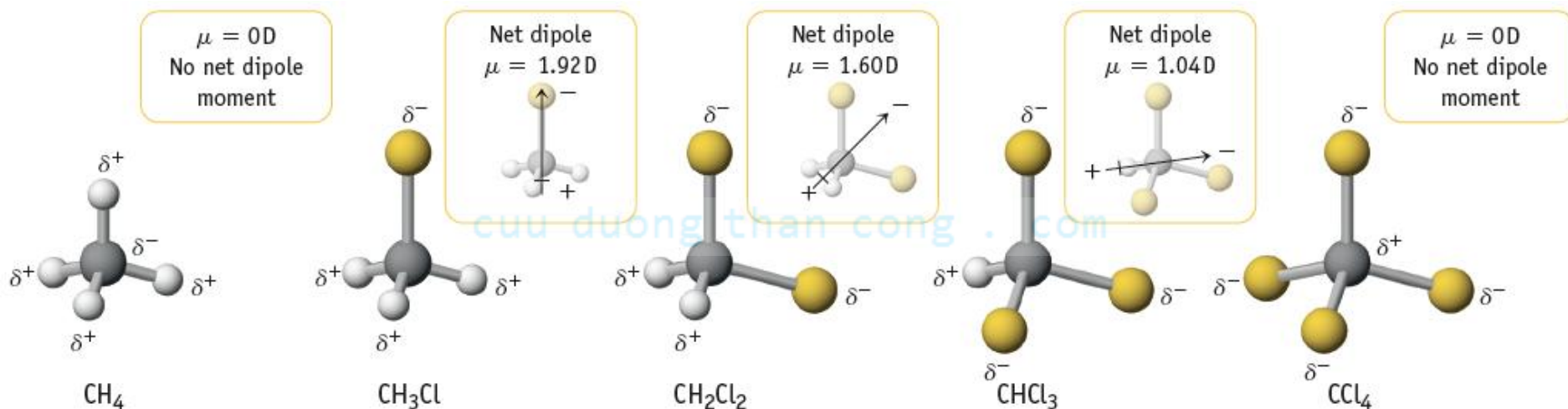


**CH_2Cl_2 có
momen
lượng cực
hay không ?**



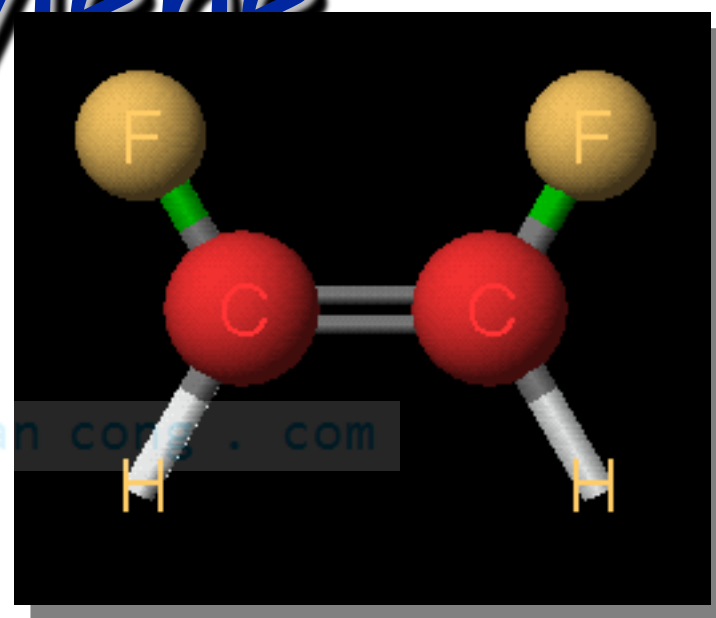
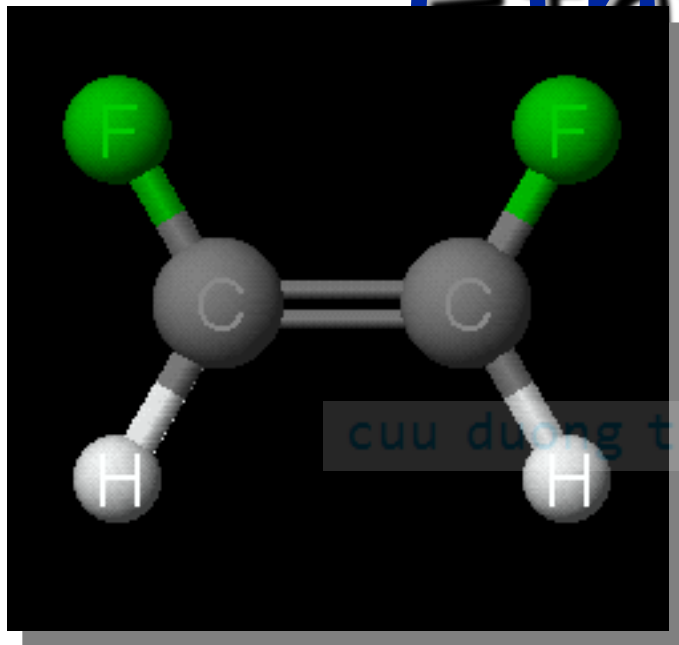
CH₄ ... CCl₄

Có cực hay không cực?



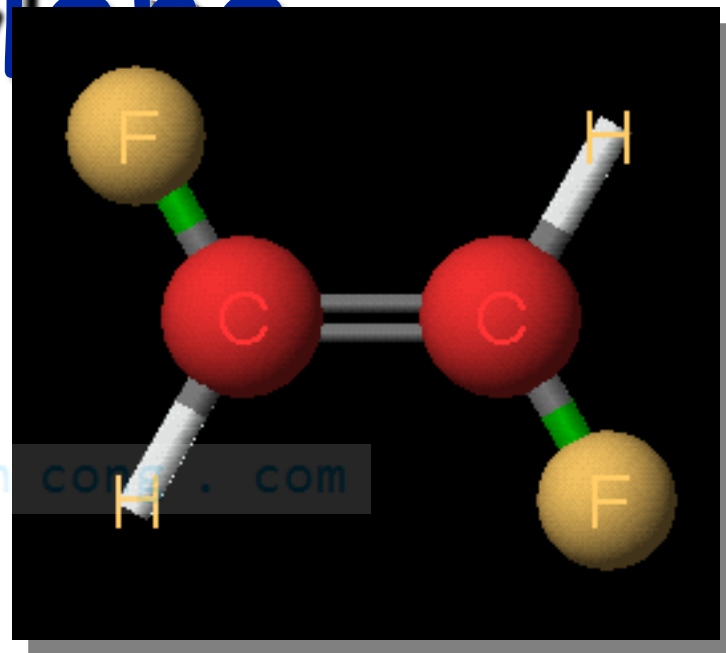
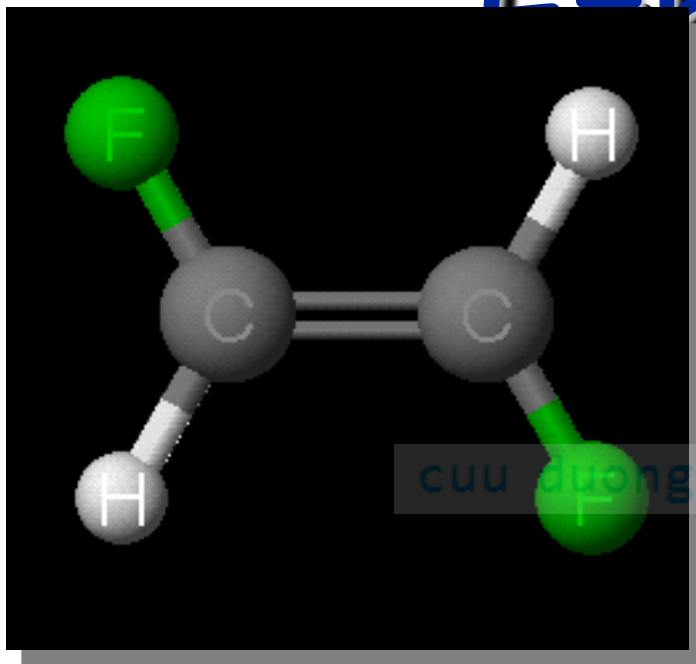
- Only CH₄ and CCl₄ are NOT polar. These are the only two molecules that are “symmetrical.”

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**

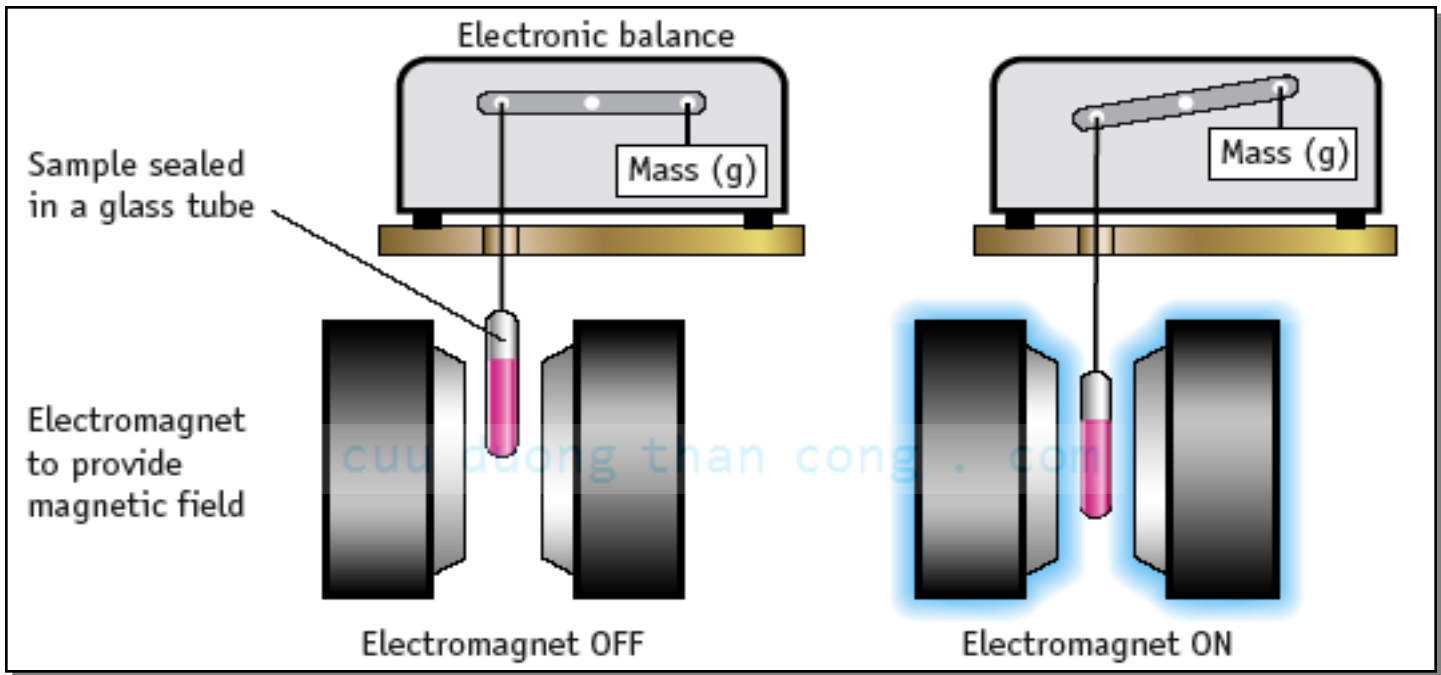
Dipole Moments

Momen lưỡng cực

Table 9.8 Dipole Moments of Selected Molecules

Molecule (AB)	Moment (μ , D)	Geometry	Molecule (AB ₂)	Moment (μ , D)	Geometry
HF	1.78	linear	H ₂ O	1.85	bent
HCl	1.07	linear	H ₂ S	0.95	bent
HBr	0.79	linear	SO ₂	1.62	bent
HI	0.38	linear	CO ₂	0	linear
H ₂	0	linear			
Molecule (AB ₃)	Moment (μ , D)	Geometry	Molecule (AB ₄)	Moment (μ , D)	Geometry
NH ₃	1.47	trigonal-pyramidal	CH ₄	0	tetrahedral
NF ₃	0.23	trigonal-pyramidal	CH ₃ Cl	1.92	tetrahedral
BF ₃	0	trigonal-planar	CH ₂ Cl ₂	1.60	tetrahedral
			CHCl ₃	1.04	tetrahedral
			CCl ₄	0	tetrahedral

Tính chất từ của phân tử



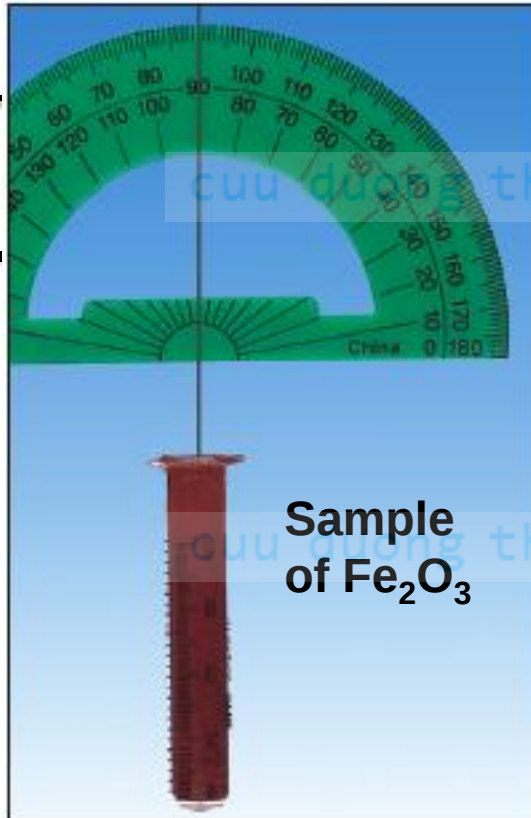
- **chất thuận từ (Paramagnetic)**: chất có electron độc thân. Chất này khi đặt trong từ trường sẽ bị nam châm hút.

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

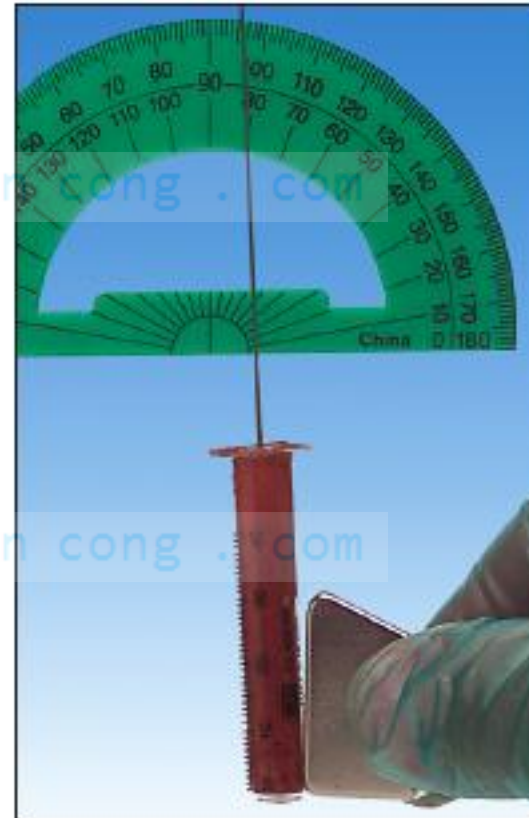
Ion Configurations

How do we know the configurations of ions?

Determine
ions.



Sample
of Fe_2O_3



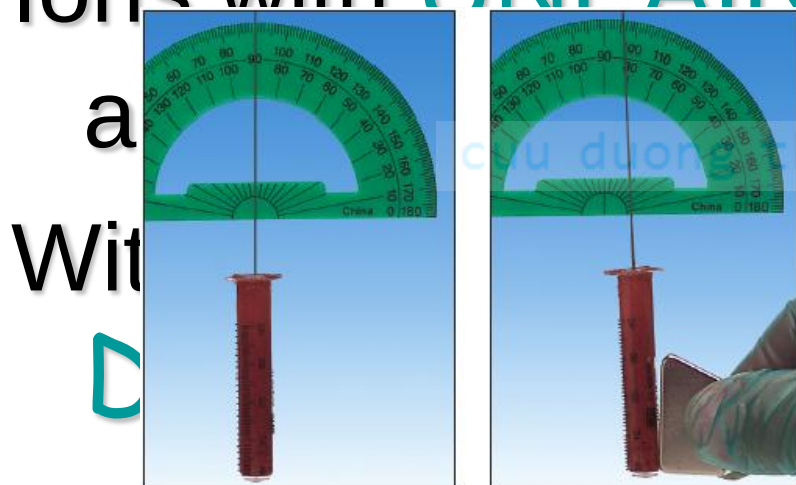
Sample
of Fe_2O_3
with
strong
magnet

Ion Configurations

How do we know the configurations of ions?

Determine the magnetic properties of ions.

Ions with **UNPAIRED ELECTRONS**



Fe^{3+} ions in Fe_2O_3 have 5 unpaired electrons and make the sample paramagnetic.

Tính thuận từ của O_2

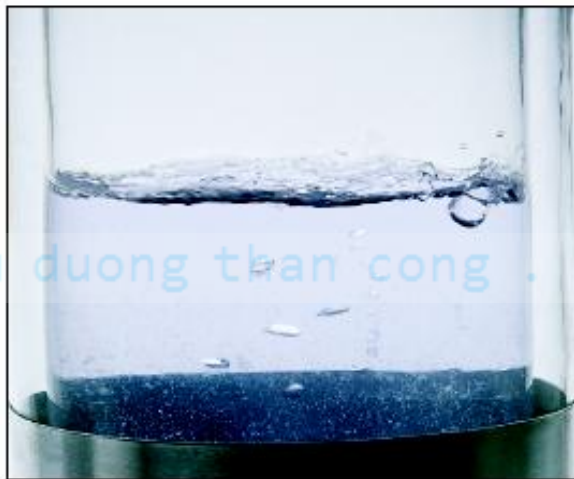


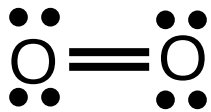
Figure 10.16 Liquid oxygen. Oxygen gas condenses to a liquid at $-183\text{ }^{\circ}\text{C}$ (*left*). Notice that liquid oxygen is very pale blue (*middle*). Oxygen in the liquid state is paramagnetic and clings to the poles of a magnet (*right*). (Charles D. Winters)



Figure 10.16 Liquid oxygen. Oxygen gas condenses to a liquid at $-183\text{ }^{\circ}\text{C}$ (left). Notice that liquid oxygen is very pale blue (middle). Oxygen in the liquid state is paramagnetic and clings to the poles of a magnet (right). (Charles D. Winters)

Bất lợi của thuyết VB

Thực nghiệm cho thấy O₂ thuận từ



Không có điện tử độc thân

Nghịch từ



Molecular orbital theory – bonds are formed from interaction of atomic orbitals to form **molecular** orbitals.