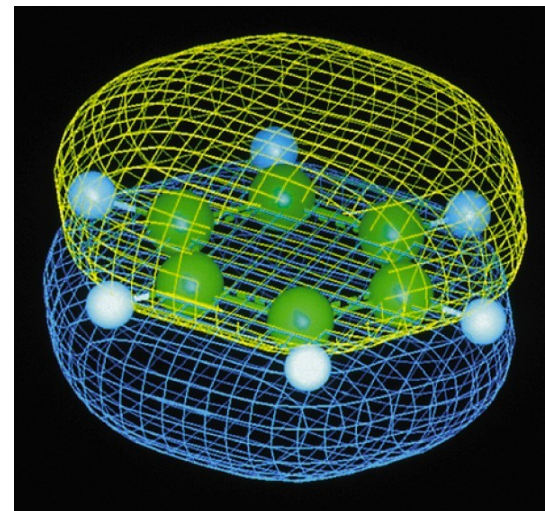


General Chemistry



Chương 4 Liên kết hóa học và cấu tạo phân tử

Nội dung

4.1. Những khái niệm cơ bản về liên kết hóa học

4.2. Liên kết ion

4.3. Liên kết cộng hóa trị

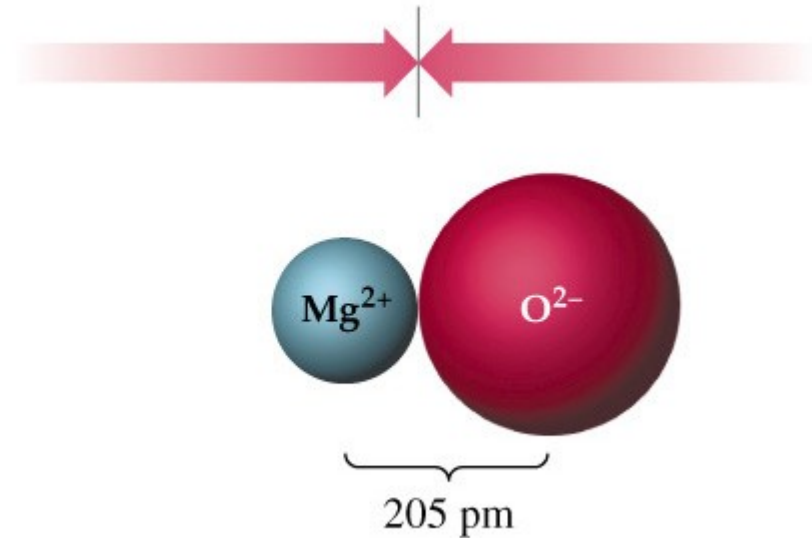
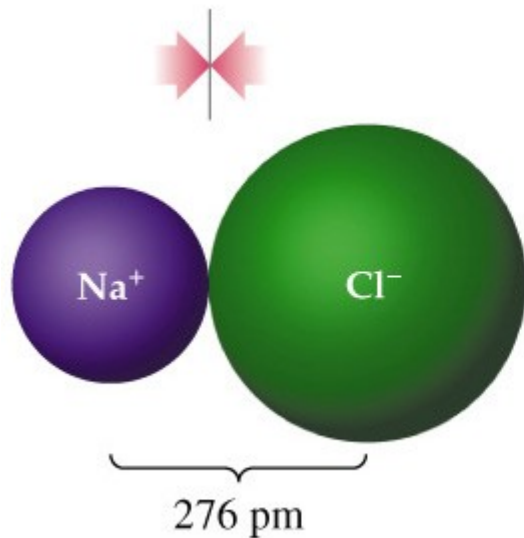
4.4. Liên kết kim loại

4.5. Liên kết phân tử

4.1.2. Một số đặc trưng của liên kết

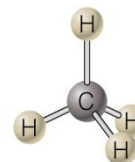
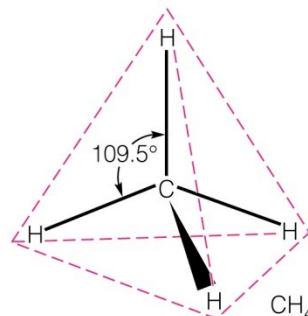
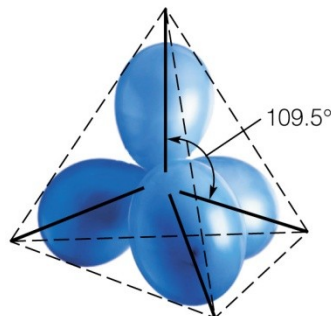
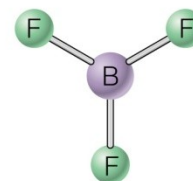
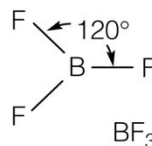
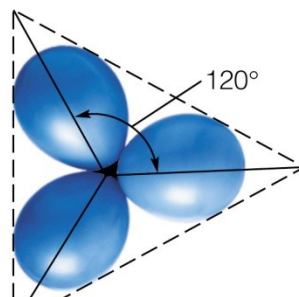
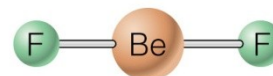
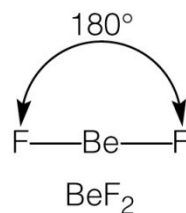
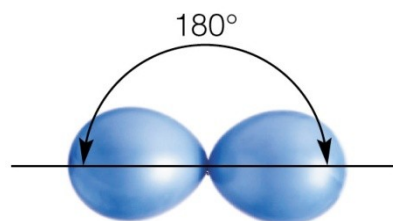
▪ Độ dài liên kết

• **Khái niệm** : khoảng cách giữa 2 hạt nhân của các nguyên tử tương tác với nhau



4.1.2. Một số đặc trưng của liên kết

- Góc hoá trị**: góc tạo thành bởi 2 đoạn thẳng nối hạt nhân nguyên tử trung tâm với 2 hạt nhân nguyên tử liên kết.

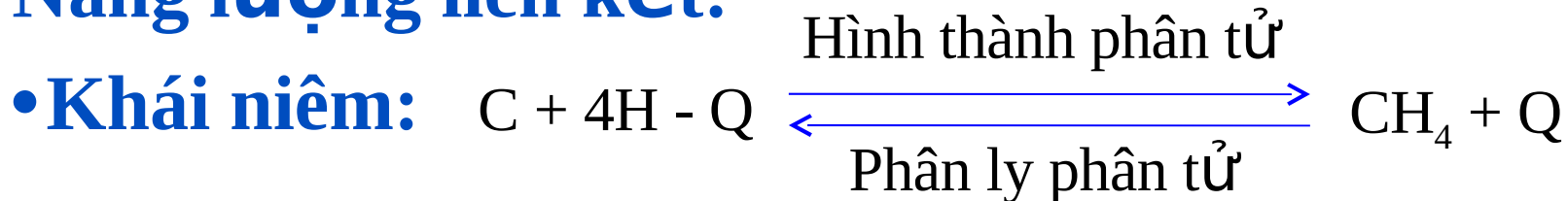


4.1.2. Một số đặc trưng của liên kết

Phân tử	Hình dạng	Góc liên kết
AX_2	Thẳng	180°
AX_3	Tam giác	120°
AX_4	Tứ diện	109.5°
AX_5	Lục diện	$90^\circ / 120^\circ$
AX_6	Bát diện	90°

4.1.2. Một số đặc trưng của liên kết

■ Năng lượng liên kết:



Năng lượng được giải phóng ra khi tạo thành liên kết đó từ các nguyên tử

• **Trị số** $|-E_{lk}| = |+E_{ph}|$

-Phân tử 2 nguyên tử AB $|-E_{A-B}| = |+E_{AB}|$

-Phân tử nhiều nguyên tử AB_n $|-E_{A-B}| = \frac{1}{n} |+E_{AB_n}|$

4.1.2. Một số đặc trưng của liên kết

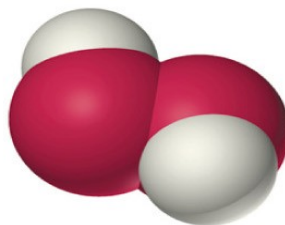
■ **Bậc liên kết**

- **Khái niệm:** số liên kết tạo thành giữa 2 nguyên tử tương tác trực tiếp nhau
- **Quy luật:** \uparrow Bậc liên kết $\rightarrow \downarrow d$ & $\uparrow E_{lk}$



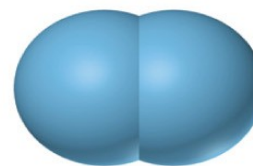
Độ dài LK 121 pm

Độ mạnh LK 498 kJ/mol



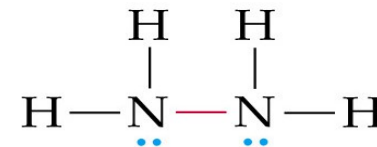
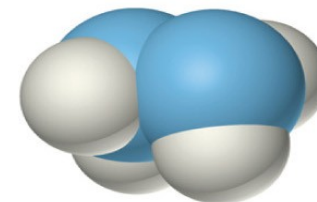
148 pm

213 kJ/mol



110 pm

945 kJ/mol



145 pm

275 kJ/mol

Các học thuyết về liên kết hoá học

■ Thuyết điện hoá

-Nội dung :

Ng.tử = cực “+” + cực “-”

2 ng.tử A & B : A có cực “+” chiếm ưu thế

B có cực “-” chiếm ưu thế

⇒ Hút nhau → Hợp chất hoá học

-**Hạn chế** : Ng.tử giống nhau → O_2 , H_2 , Cl_2 ?

Các học thuyết về liên kết hoá học

■ Thuyết cấu tạo

-Nội dung :

+Các ng.tử trong phân tử kết hợp với nhau theo một trật tự xác định tương ứng với hoá trị của chúng

+T/c hoá học của các chất = f(thành phần & cách sắp xếp ng.tử) hay **f(cấu trúc hoá học)**

-Hạn chế : bản chất thật sự của liên kết hoá học ?

Các học thuyết về liên kết hoá học

▪ Thuyết electron

-Nội dung

2 ng.tử tiếp xúc → Lợp vỏ “e” ngoài cùng thay đổi → Đạt 8 e (Cấu hình bền vững của khí trơ) ⇒
Cặp “e” dùng chung tạo thành Liên kết hoá học

2 loại liên kết:

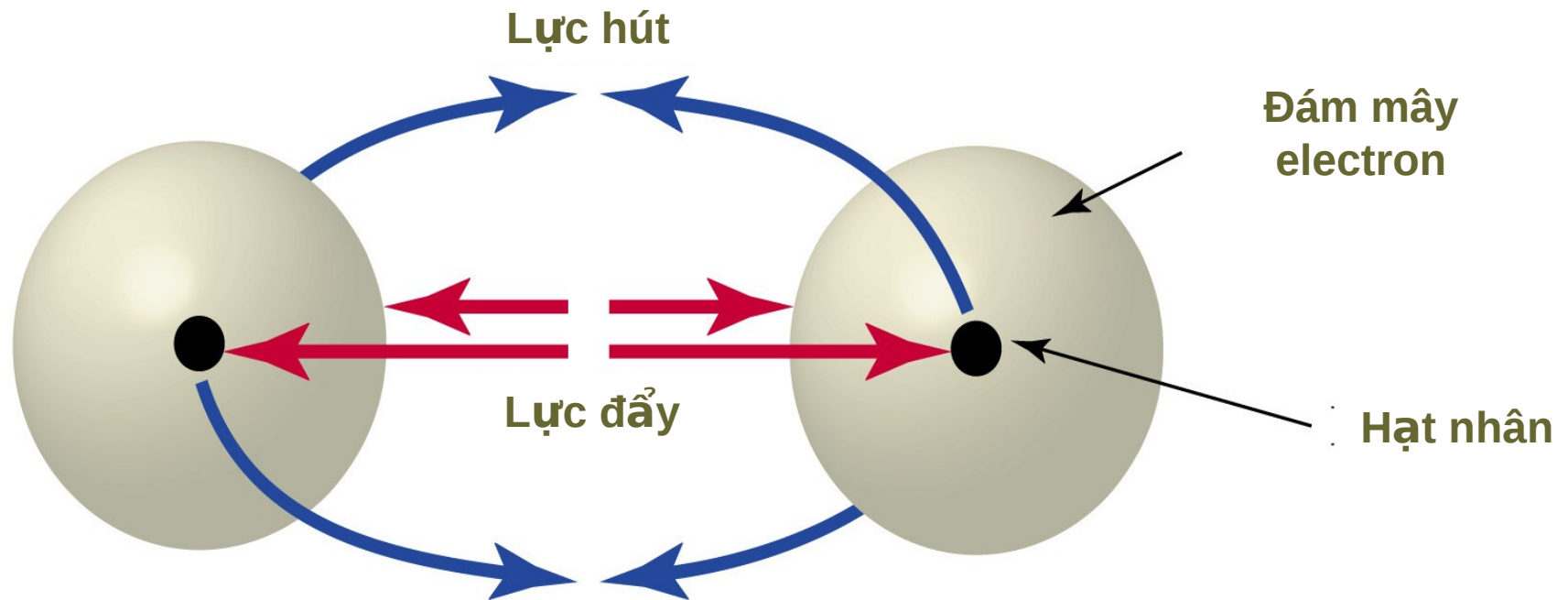
Cặp “e” thuộc về 2 ng.tử → **Liên kết cộng hoá trị**

Cặp “e” thuộc về 1 ng.tử → **Liên kết ion**

-Hạn chế : bản chất thật sự của liên kết hoá học ?

Các học thuyết về liên kết hoá học

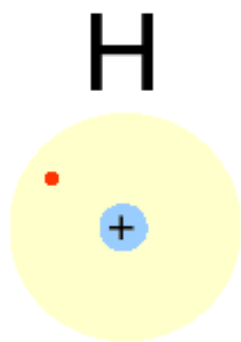
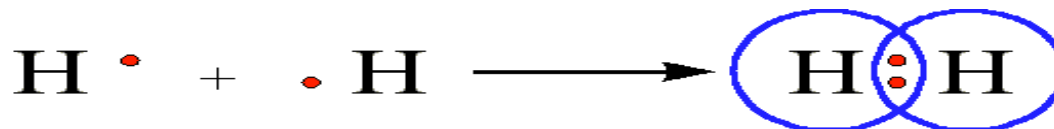
Thuyết cơ lượng tử



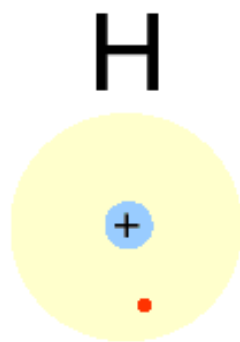
4.1.3. Lý thuyết lượng tử về liên kết hoá học

Thuyết cơ lượng tử

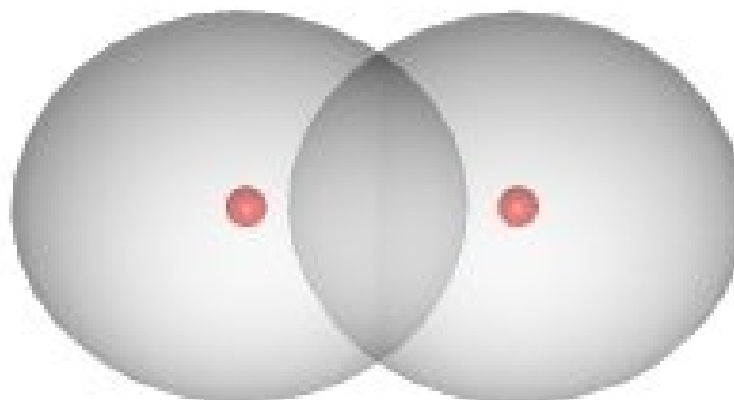
Ví dụ



H atom



H atom



4.2. Liên kết ion.

4.2.1. Cơ chế

4.2.2. Điều kiện

4.2.3. Tính chất đặc trưng của liên kết ion

4.2.1. Cơ chế tạo thành liên kết ion

- **Thuyết tĩnh điện về liên kết ion của Kossel (Kossel 1888-1967, người Đức).**

- Chuyển electron hoá trị từ nguyên tử này sang nguyên tử khác.

Nguyên tử mất “e” → Ion “+” : cation

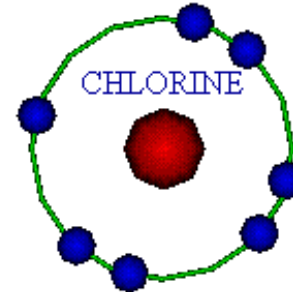
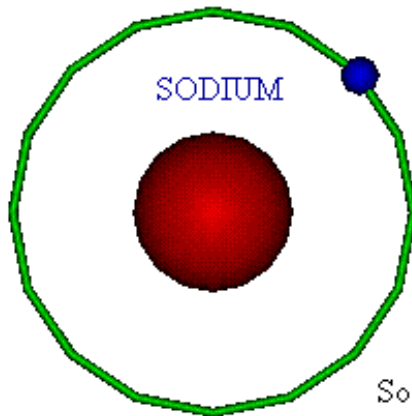
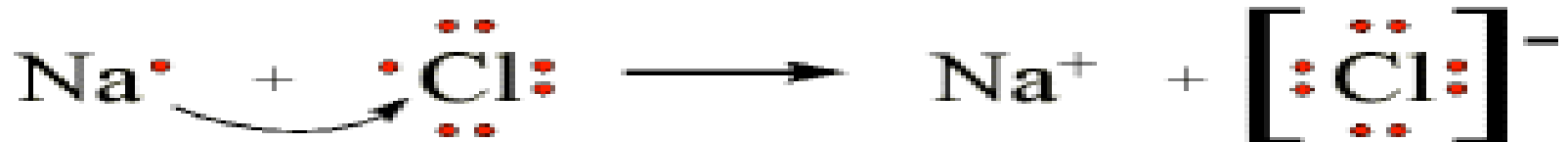
Nguyên tử nhận “e” → Ion “-” : anion.

- Ion ngược dấu → **Hút tĩnh điện** → Ion gần nhau

Ion gần nhau → **Vỏ “e” đẩy nhau**

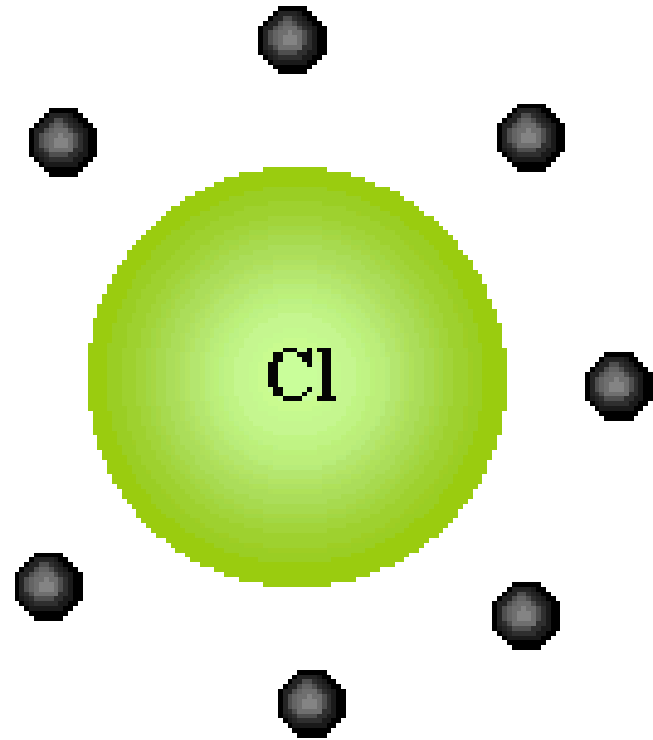
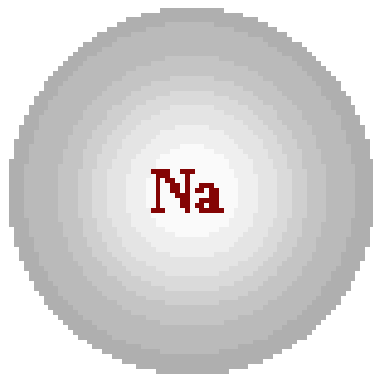
⇒ Lực đẩy = Lực hút → **Phân tử ion**

4.2.1. Cơ chế tạo thành liên kết ion



Sodium has 2 full orbits, but its outer orbit has only 1 electron. Chlorine has 7 electrons in its outer orbit, so it needs one to make it stable. When they react chlorine takes the extra electron and leaves Sodium with full orbits too.

This way both atoms are satisfied.



4.2.2. Điều kiện tạo thành liên kết ion

- Điều kiện : $\Delta\chi \geq 2$

Ng/tử có χ lớn : nhận “e” \rightarrow Anion “-”
Gắn với Ái lực electron (F)

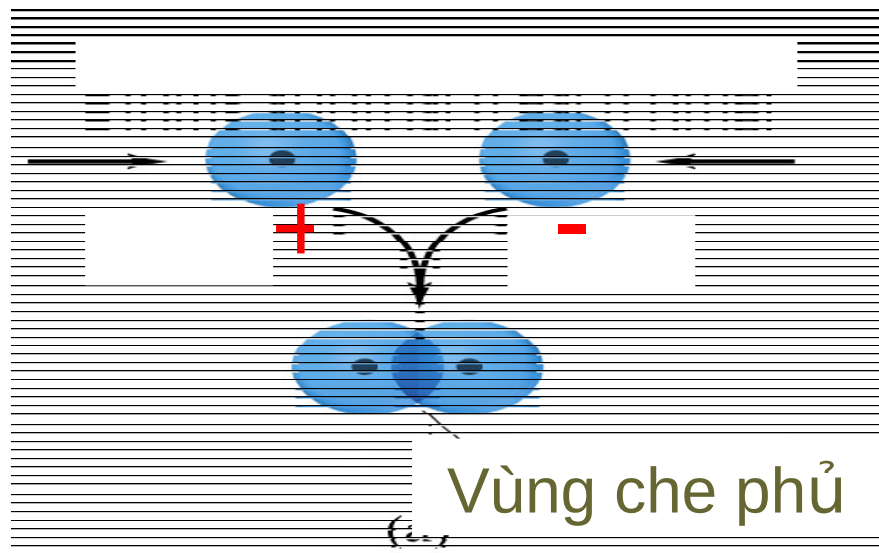
Ng/tử có χ nhỏ : nhường “e” \rightarrow Cation “+”
Gắn với Năng lượng ion hoá (I)

4.2.3. Tính chất đặc trưng của l. kết ion.

- **Tính không định hướng:** hút ion trái dấu theo bất kỳ hướng nào.
- **Tính không bão hòa:** hút các ion trái dấu với lượng không xác định.
- **Lực liên kết :**
 $E = 35 - 85 \text{ kJ/mol} \rightarrow$ Liên kết bền vững

4.2.3. Tính chất đặc trưng của I. kết ion.

- **Sự phân cực**
- Cation “+” : hút đám mây “e” của anion → Che phủ
→ Xuất hiện liên kết cộng hoá trị →
- Anion “-” : đẩy đám mây “e” ⇒ **Biến dạng ion**



4.3 Liên kết cộng hoá trị

4.3.1. Thuyết điện tử (Thuyết Lewis)

3.3.1.1. Cơ chế

3.3.1.2. Điều kiện

3.2.1.3. Tính chất đặc trưng

4.3.2. Thuyết cơ học lượng tử

4.3.2.1. Thuyết liên kết hoá trị (VB-valence bond)

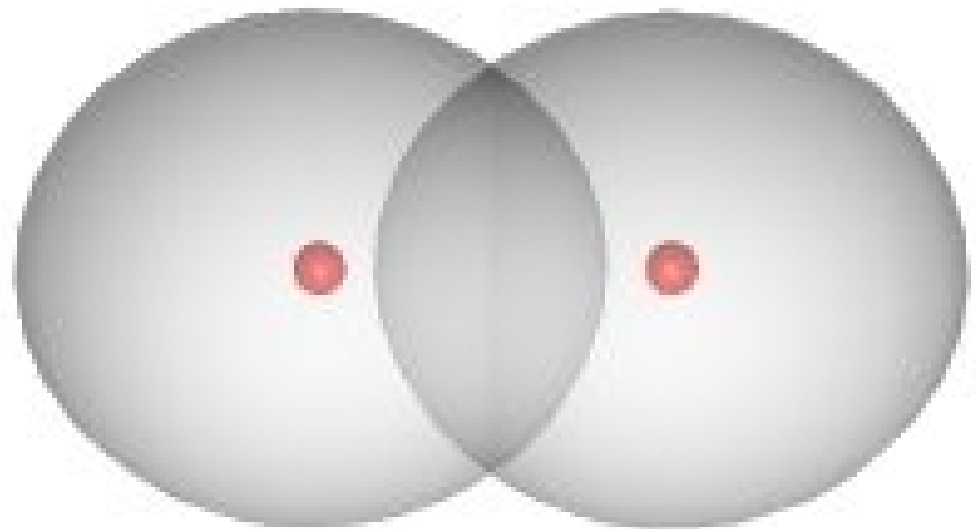
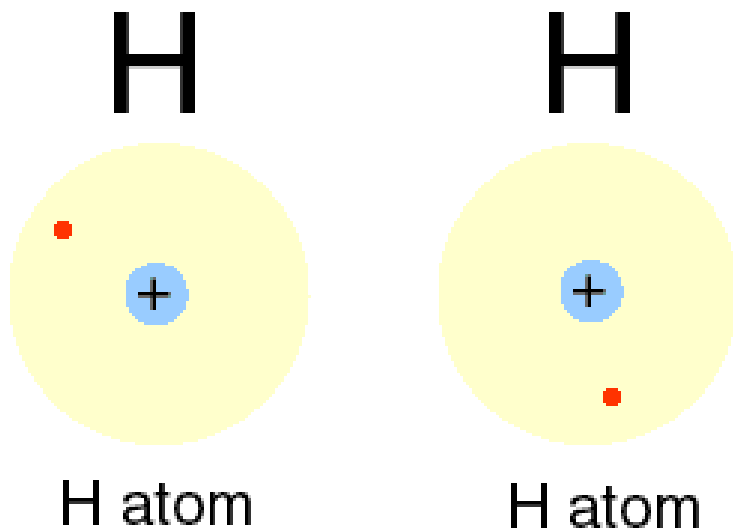
Thuyết hoá trị spin (Thuyết Pauling)

Thuyết lai hoá (Thuyết Pauling-Slater)

4.3.2.2. Thuyết orbital phân tử (MO-molecular orbital)

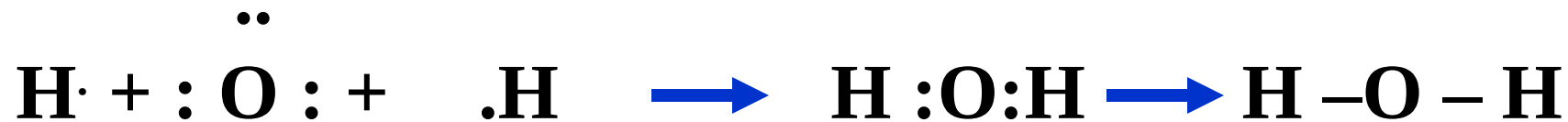
3.3.1.1. Cơ chế (Thuyết Lewis)

• Ví dụ 1: $\text{H-H} \Rightarrow \text{H}_2$



4.3.1.1. Cơ chế (Thuyết Lewis)

- Ví dụ 2 : H₂O



4.2.1. Liên kết cộng hoá trị (Lewis)

▪ Nội dung cơ bản:

• Sự hình thành liên kết

Nguyên tử tương tác góp chung một số “e” → Cặp “e” chung cho 2 nguyên tử

• Cấu hình :

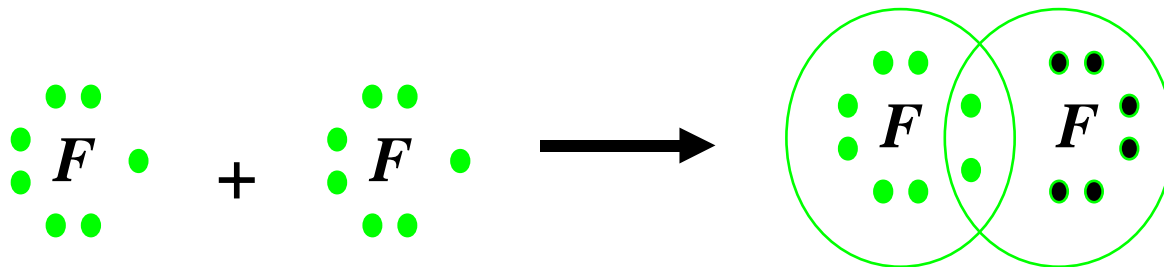
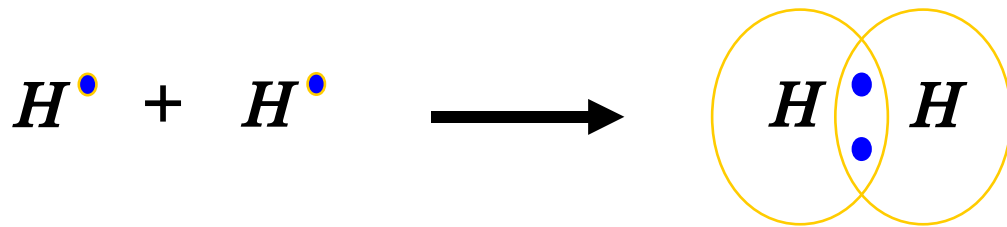
Cấu hình “e” vững bền của các khí trơ

- Vỏ điện tử : 2e như H_2 → Khí Heli (He)

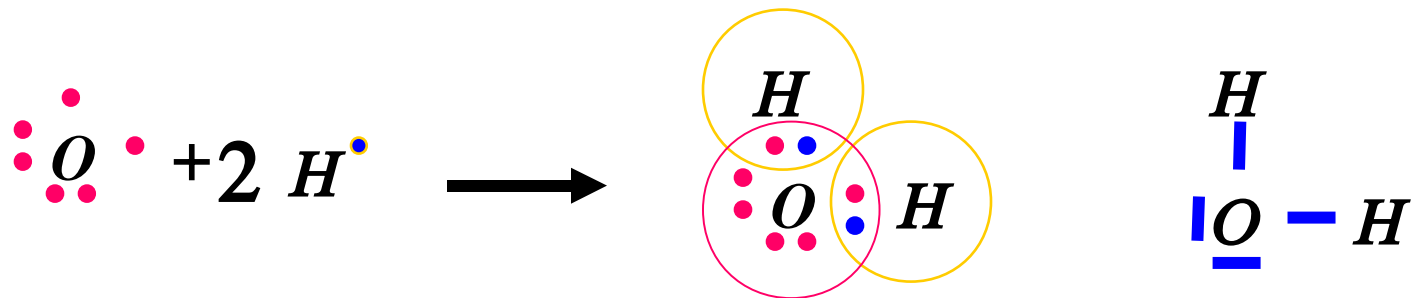
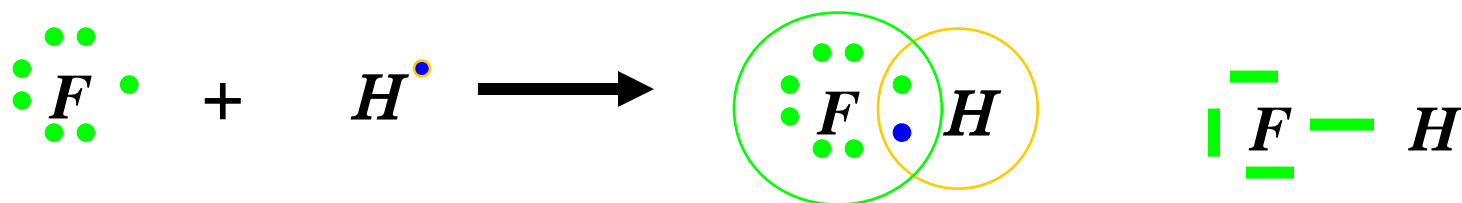
- Vỏ điện tử : 8e như H_2O → Khí Neon (Ne)

▪ Công thức cấu tạo

- 2 nguyên tử cùng loại

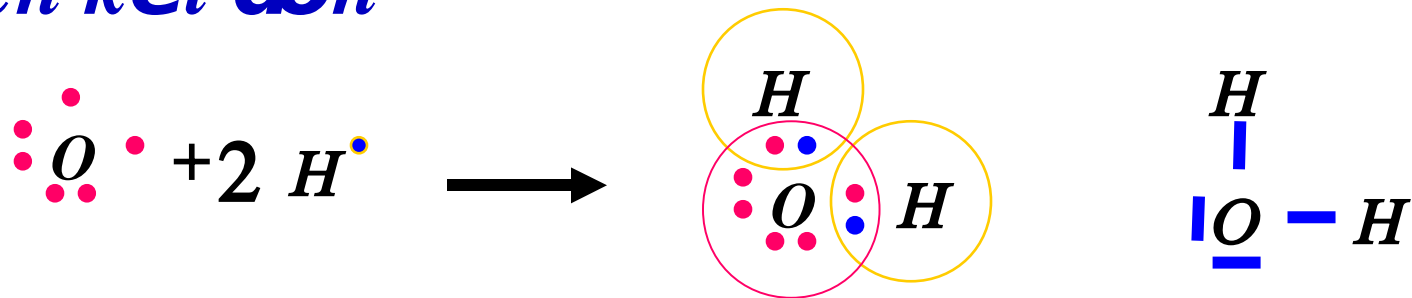


• Qui tắc bát tử



▪ Các loại liên kết

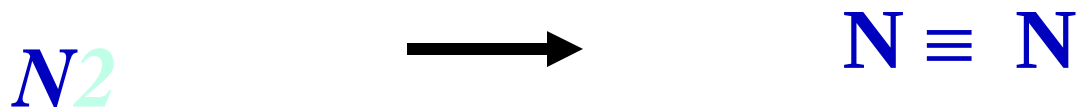
• Liên kết đơn



• Liên kết đôi



• Liên kết ba



•Liên kết cho-nhận



Ví dụ : NH_4^+



4.3.1.2. Điều kiện liên kết cộng hoá trị

- **Điều kiện:** Độ âm điện $\Delta \chi \leq 2$

$\Delta \chi \leq 2 \rightarrow$ **Cộng hoá trị phân cực**

$\Delta \chi = 0 \rightarrow$ **Cộng hoá trị thuần túy**

4.3.1.3. Tính chất đặc trưng liên kết cộng hoá trị

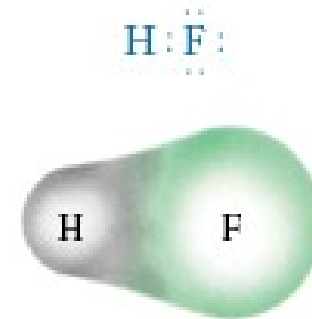
- Tính có hướng
- Tính bão hoà : không rõ
- Năng lượng liên kết
 $E = 20 - 72 \text{ kJ/mol} \Rightarrow$ Liên kết khá bền vững

4.3.1.3. Tính chất đặc trưng liên kết cộng hoá trị

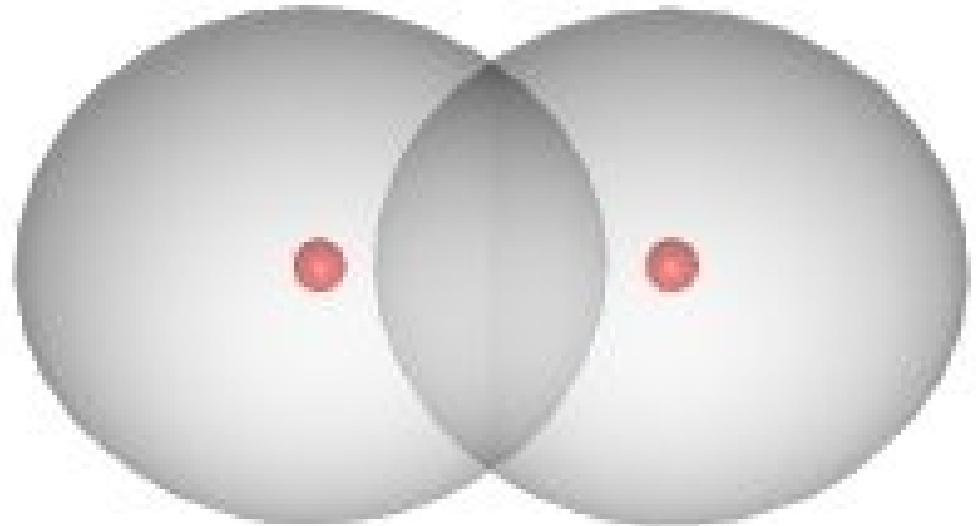
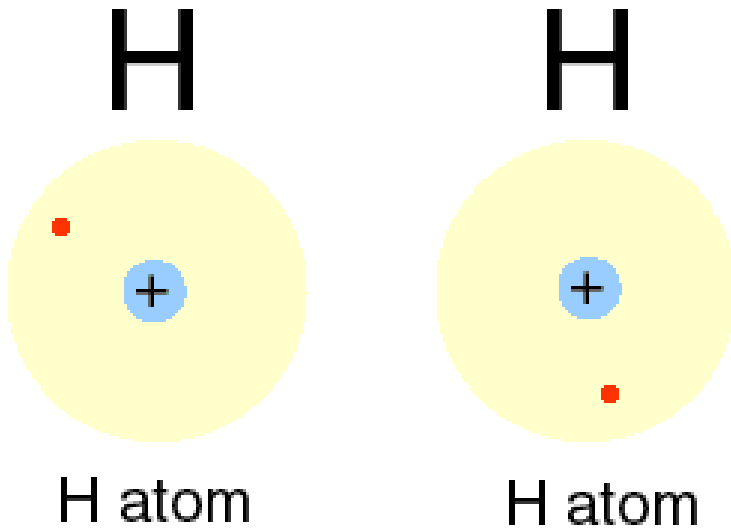
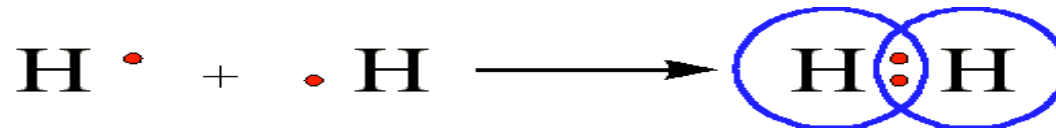
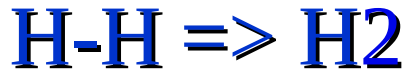
▪ Sự phân cực

$\Delta \chi = 0$ (ng.tử cùng loại) \rightarrow không phân cực

$\Delta \chi < 2$ (ng.tử khác loại) \rightarrow
Phân cực

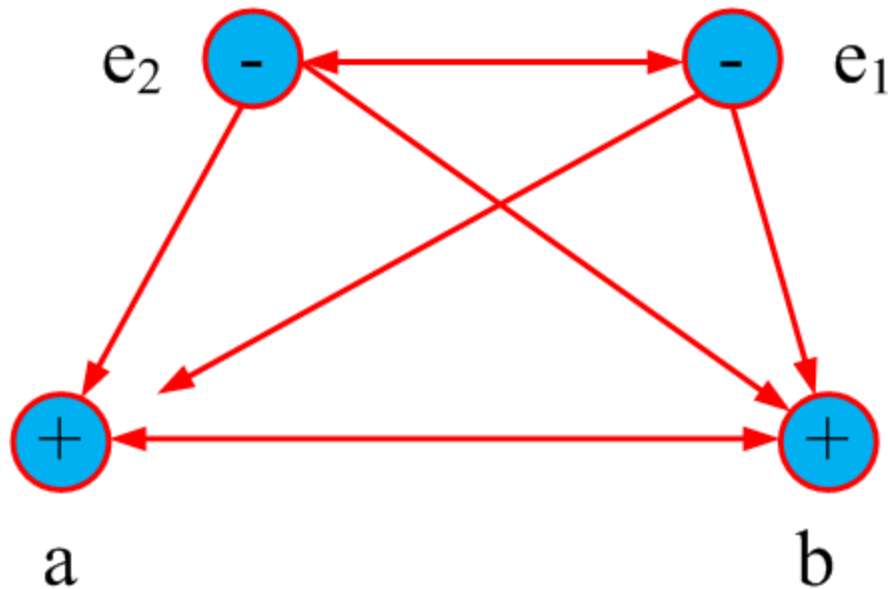


Thuyết CHLT : Sự hình thành H₂



Thuyết CHLT : Sự hình thành H₂

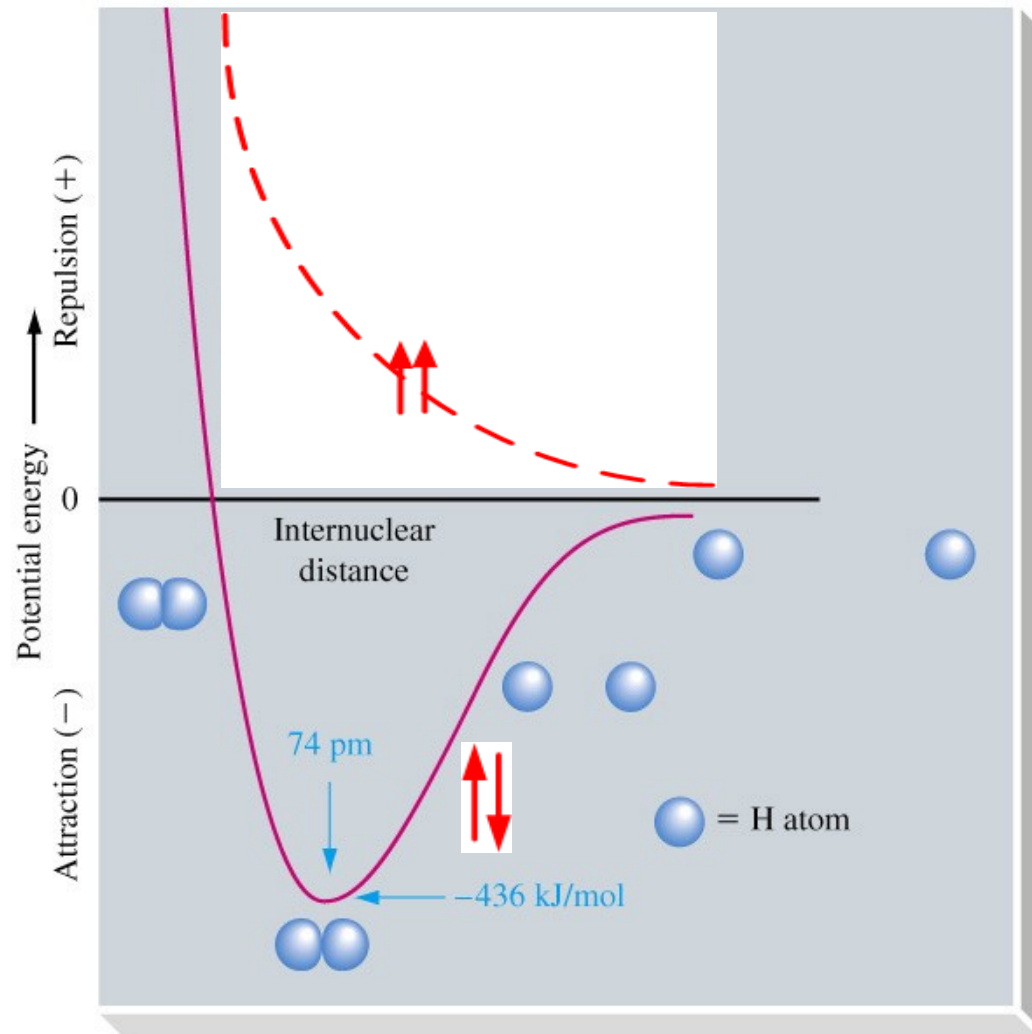
- Lực tương tác giữa 2 ng.tử hydro
- Lực hút
- Lực đẩy



Thuyết CHLT : Sự hình thành H₂

- **Trường hợp 2 ng.tử có spin ngược chiều**
 - Khi tiến gần : Lực hút > Lực đẩy → ↓ Năng lượng
 - Khi cách nhau r₀ : mây “e” che phủ lên nhau → Liên kết cộng hoá trị → ↓ Lực hút hạt nhân → ↓ Năng lượng = min → **H₂ hình thành**
 - Tiếp tục tiến gần : Lực đẩy > Lực hút → ↑ Năng lượng
- **Trường hợp 2 ng.tử có spin cùng chiều**
 - Khi tiến gần : Lực đẩy > Lực hút → ↑ Năng lượng → **H₂ không hình thành**
- **Kết luận : LKCHT hình thành do cặp “e” có spin**

Năng lượng theo VB của phân tử H₂



4.3.2.1. Thuyết hoá trị spin-Pauling

1- Liên kết hình thành do sự ghép đôi của 2e độc thân có spin trái dấu

2-Sự xen phủ

Khi tạo liên kết xảy ra sự xen phủ các orbitalan hoá trị của 2 ng.tử tham gia liên kết.

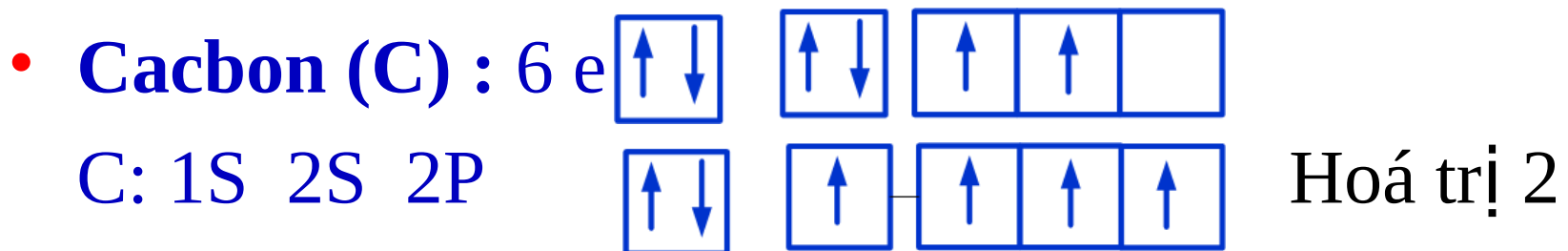
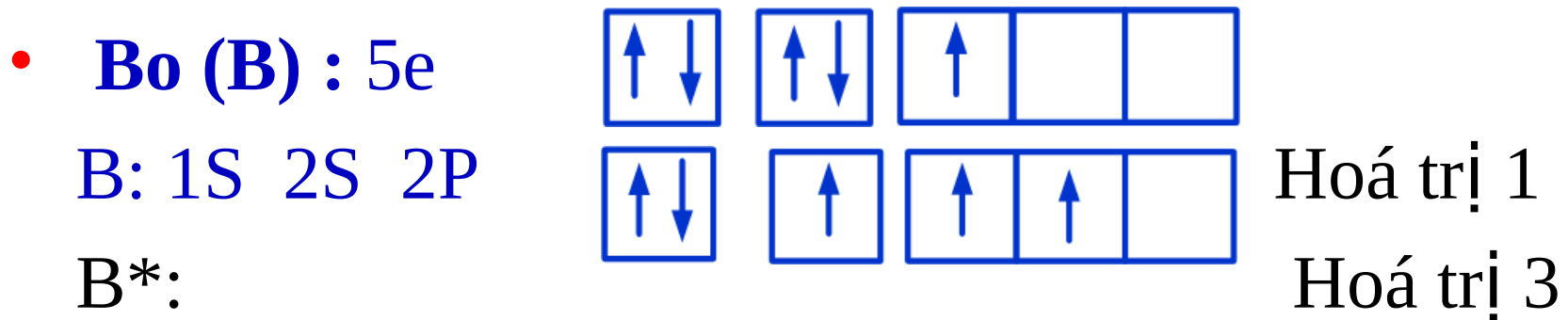
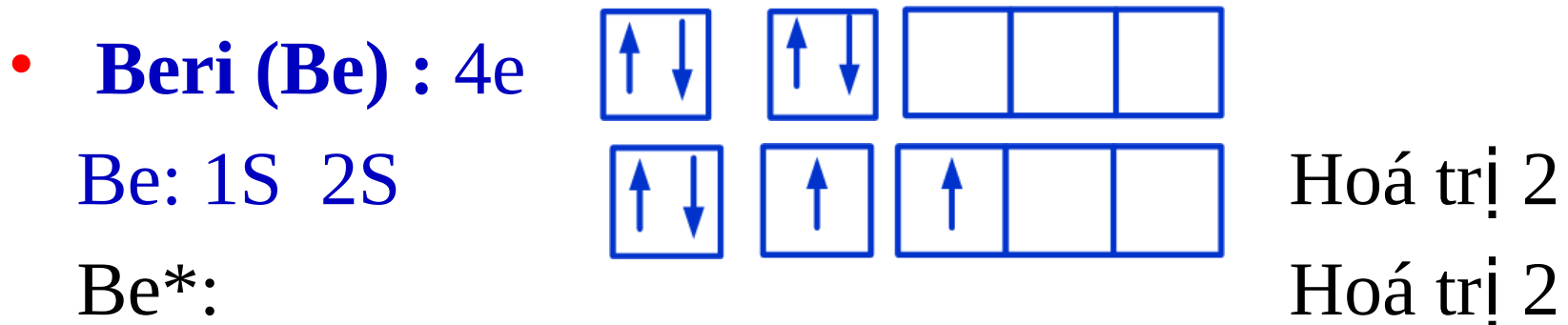
Sự xen phủ càng lớn thì liên kết càng bền

3-Liên kết có hướng

Hướng của liên kết là hướng có độ xen phủ lớn nhất của các orbitalan hóa trị.

Tính bão hoà của liên kết cộng hoá trị

- **Chu kỳ 2** : chuyển “e” thực hiện được trong cùng lớp



Tính bão hoà của liên kết cộng hoá trị

P: 3S 3P



Hoá trị 3

P*:



Hoá trị 5

• Lưu huỳnh (S) : 16e

S: 3S 3P



Hoá trị

2



S*:

Hoá trị

4



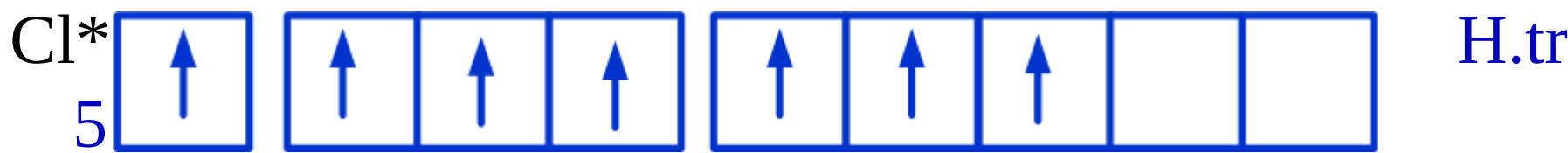
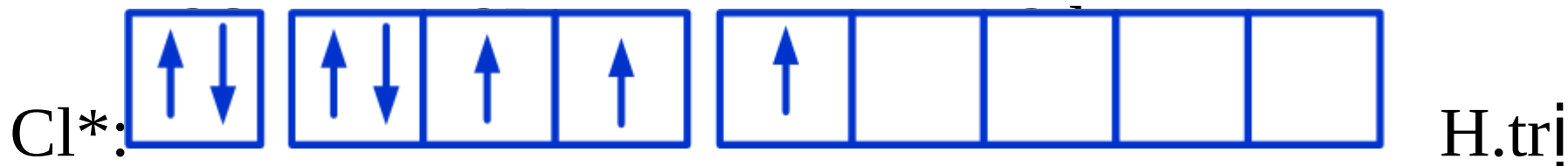
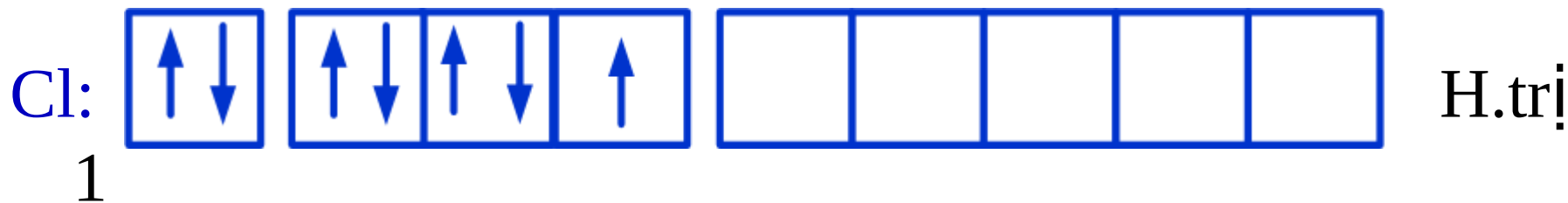
S*:

Hoá trị

6

Tính bão hoà của liên kết cộng hoá trị

• ClO (Cl) . 17e 1s 2s 2p 3s 3p

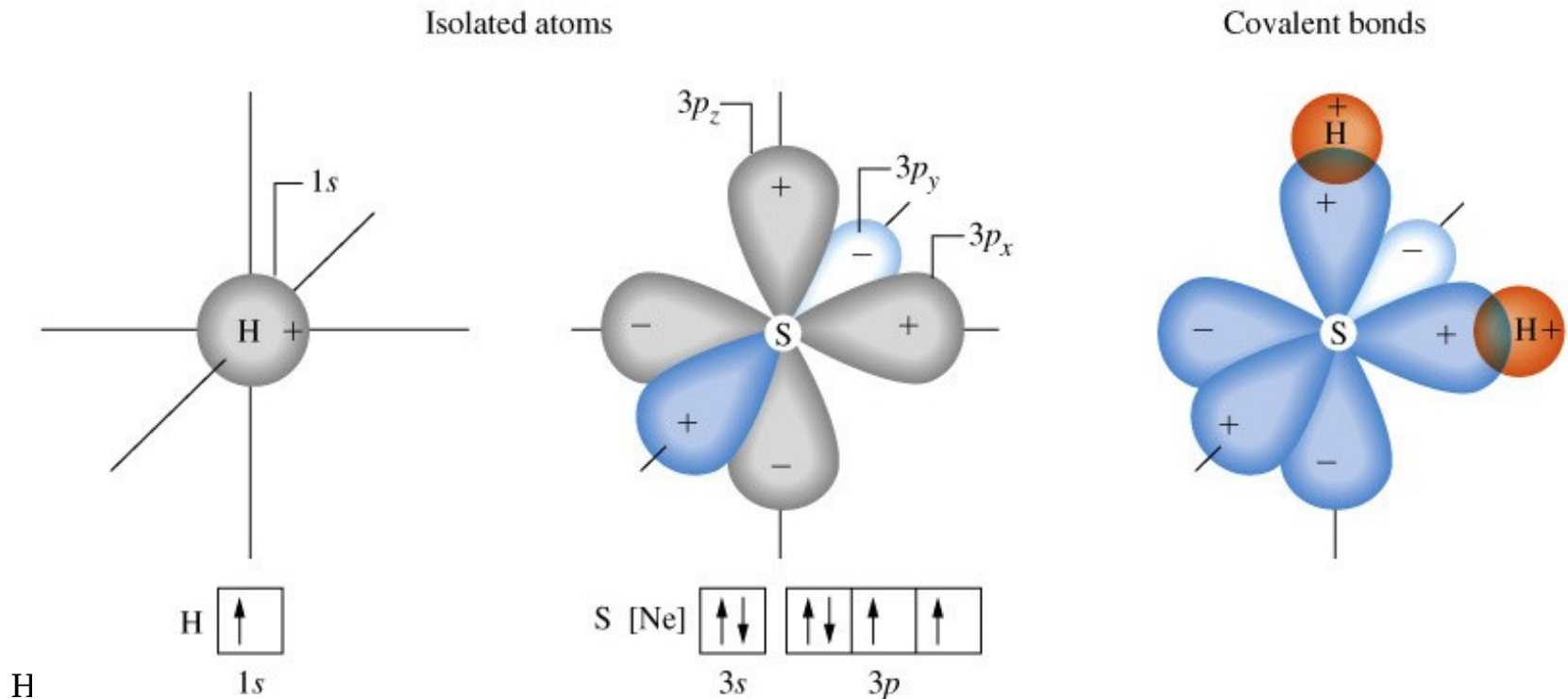


Tính có hướng của liên kết cộng hoá

trị

- Sự che phủ max theo những hướng nhất định → Liên kết tạo thành theo những hướng nhất định

- Ví dụ : $H_2 + S = H_2S \rightarrow H$ nằm trên trục orbital P

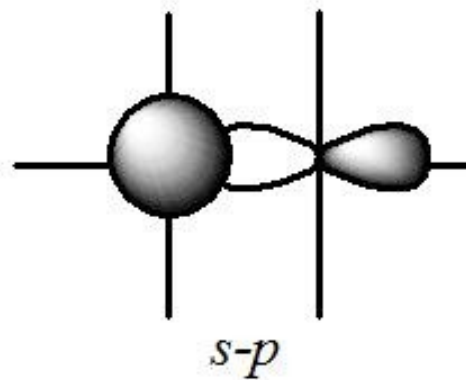


Tính có hướng của liên kết cộng hoá

trị

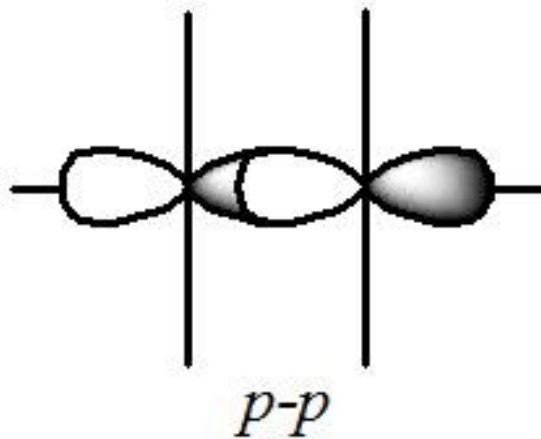
- Sự che phủ max theo những hướng nhất định → Liên kết tạo thành theo những hướng nhất định
- Ví dụ : Liên kết HCl

Tâm ng.tử H phải nằm trên trục của orbital P



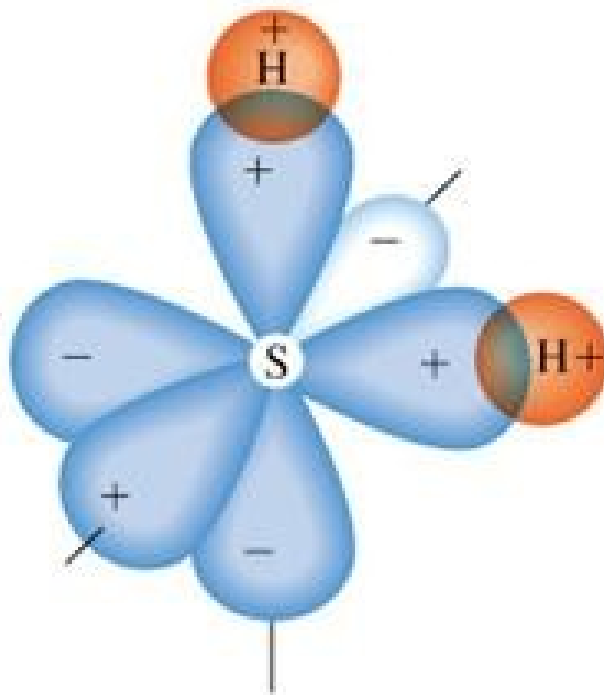
- **Ví dụ** : Liên kết Cl_2

Trục của 2 orbital P_z phải trùng nhau



- **Ví dụ : Liên kết H₂S**

2 hạt nhân ng.tử Hydro (H) phải nằm trên trục của orbital P của ng.tử lưu huỳnh (S)



Tính phân cực của liên kết cộng hoá trị

- **Liên kết cộng hoá trị có cực**

$\Delta\chi < 2 \rightarrow$ Mây che phủ phân bố không đều

Ng.tử có χ nhỏ \rightarrow Phân cực dương

Ng.tử có χ lớn \rightarrow Phân cực âm

- **Liên kết cộng hoá trị không có cực**

$\Delta\chi = 0 \rightarrow$ Mây che phủ phân bố đều

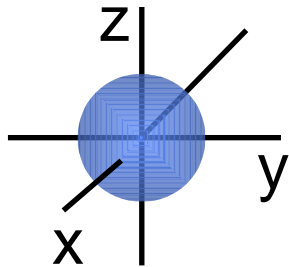
4.3.2.1 .Thuyết lai hoá (Pauling +Slater)

- **Nội dung** : trộn 2 hay nhiều Orbttan ng.tử (AO) để tạo thành các orbital mới (Orbital lai hóa)
- Trộn ít nhất 2 AO có mức năng lượng khác nhau (ví dụ S & P)→Các orbital lai hoá: có hình dạng, kích thước, năng lượng giống nhau
- Liên kết hoá học được hình thành nhờ :
 - Sự che phủ đám mây điện tử của orbital lai hoá & các AO
 - Sự che phủ đám mây điện tử của orbital lai hoá & các orbital lai hóa khác
- Số orbital lai hoá = Số orbital tham gia lai hoá

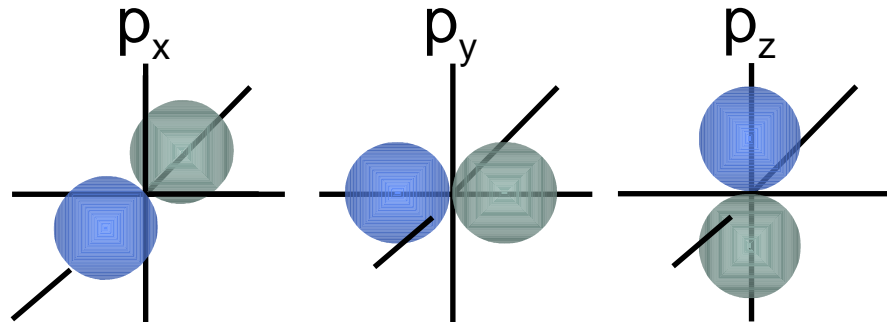
4.3.2.1 .1 huyet lai hoa (Pauling +Slater)

Orbital nguyên tử

an s-orbital

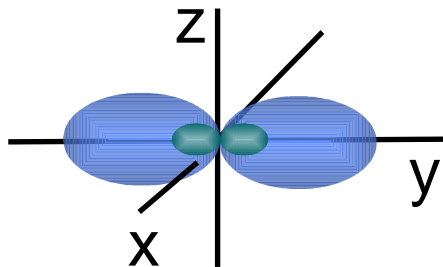


the three p orbitals

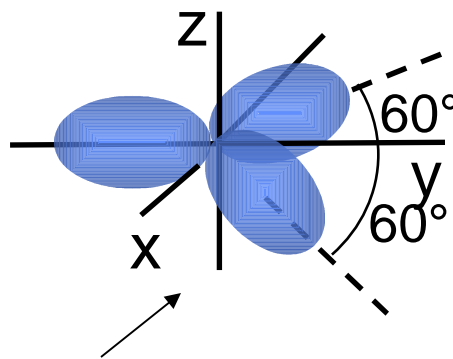


Lai hóa

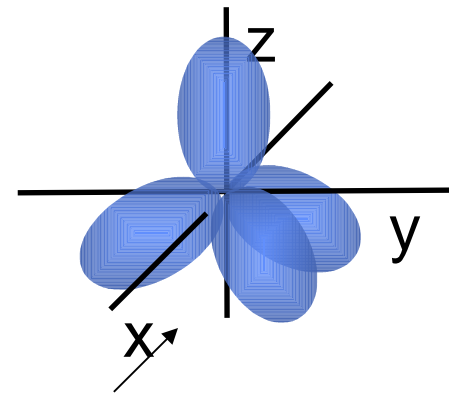
1 x s + 1 x p = sp-orbitals



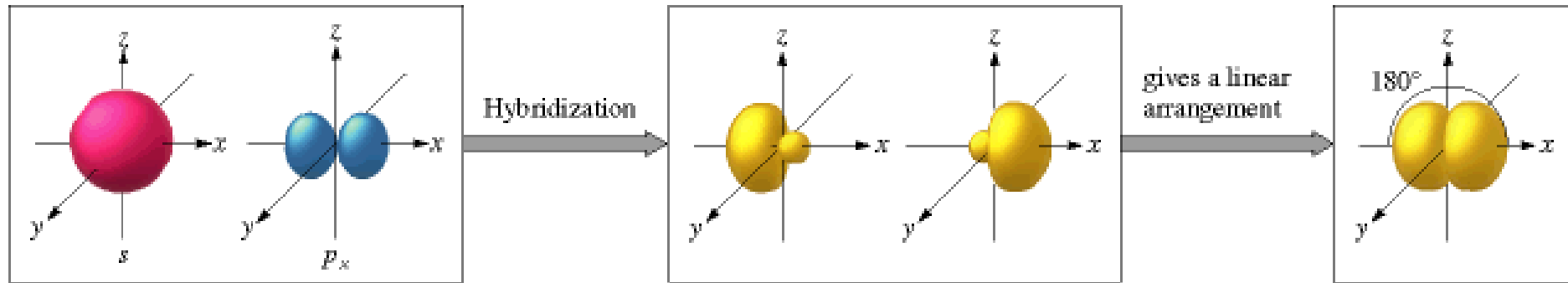
1 x s + 2 x p = sp^2 -orbitals



1 x s + 3 x p = sp^3 -orbitals

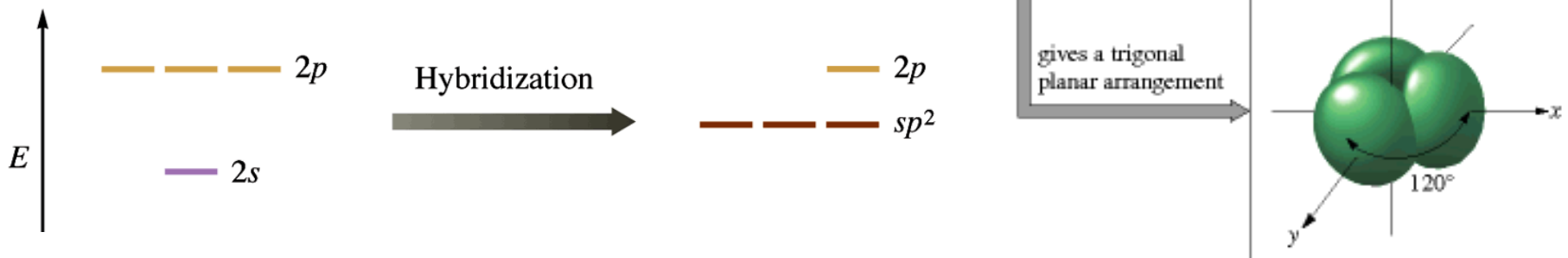
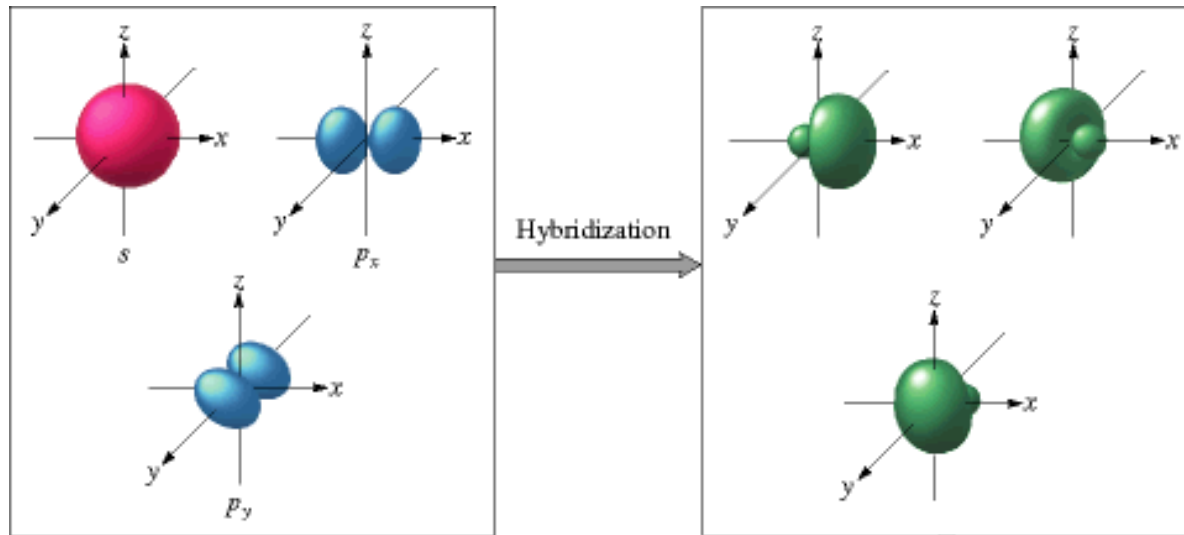


1xS +1x P 1SP-orbitals



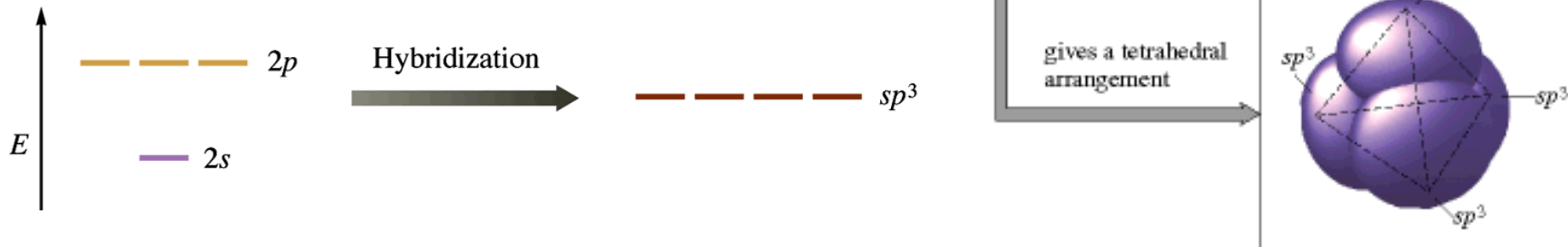
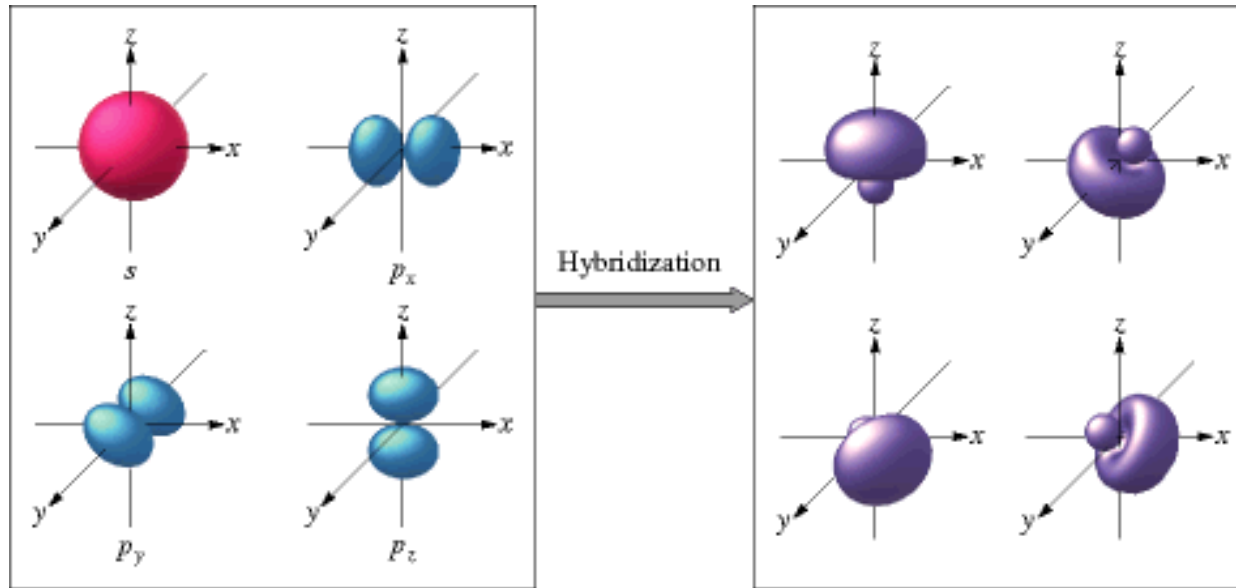
Kiểu lai hóa	Số lai hóa	Cấu hình
SP	2	Đường thẳng Góc liên kết : 180°

1xS + 2xP 1SP²-orbitals



Kiểu lai hóa	Số lai hóa	Cấu hình
SP ²	3	Tam giác đều Góc liên kết : 120°

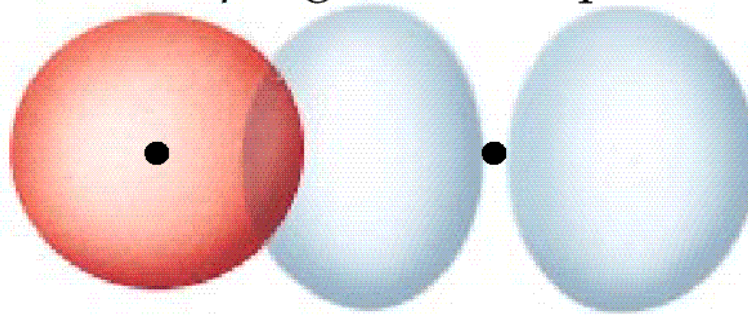
1xS + 3xP 1SP³-orbitals



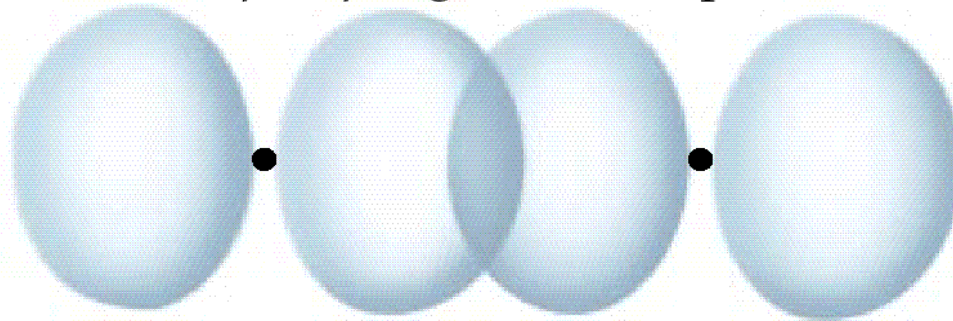
Kiểu lai hóa	Số lai hóa	Cấu hình
SP ³	4	Tứ diện tam giác đều Góc liên kết : 109°5

Liên kết sigma (σ)

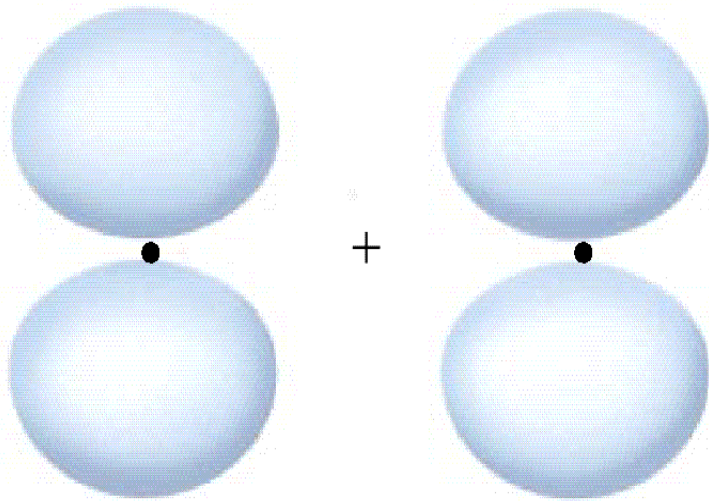
(a) $s + p$ sigma overlap



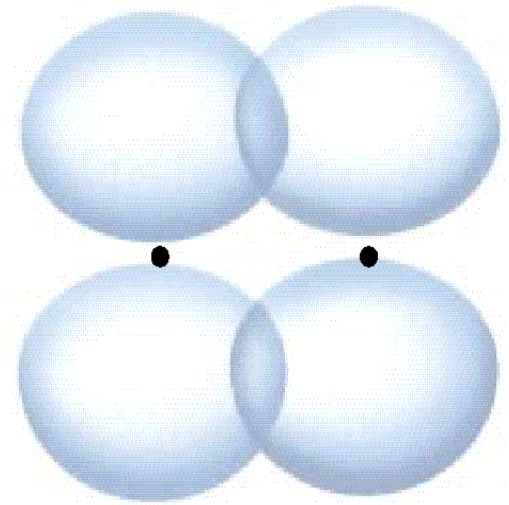
(b) $p + p$ sigma overlap



Liên kết pi (π)



p orbital + p orbital



π bond

Dự đoán kiểu lai hoá

▪ **Tổng số** $T = \sigma + \frac{X - Y}{2}$

T-Tổng số orbital lai hóa

σ -Số liên kết σ

X-Tổng số “e” hoá trị của các ng.tử trong phân tử

Y-Tổng số “e” hoá trị đã liên kết

$(X - Y) / 2$ - số cặp e hoá trị tự do

$T = 2$: Ng.tử trung tâm có lai hoá SP

$T = 3$: Ng.tử trung tâm có lai hoá SP^2

$T = 4$: Ng.tử trung tâm có lai hoá SP^3

▪ Dự đoán kiểu lai hoá

▪ Cách tính

- σ : theo công thức Lewis của phân tử

- **Tính số cặp e tự do :**

1. Tính X

- Nếu có a điện tích +; tổng e hóa trị $X - a$

- Nếu có b điện tích -; tổng e hóa trị $X + b$

2. Tính Y

8e cho mỗi nguyên tử biên nói chung

2e cho mỗi ng.tử biên là hydro)

3. Số cặp e hóa trị :

$$\frac{X - Y}{2}$$

▪ Dự đoán kiểu lai hoá

Phân tử	Ng.tử Tr. tâm	X	Y	$\frac{X - Y}{2}$	T	Lai hoá
CO ₂	C	4 + (6x2)	8 x 2	0	2 + 0 = 2	SP
NO ₂ ⁺	N	5 + (6 x 2) -1	8 x 2	0	2 + 0 = 2	SP
NH ₄ ⁺	N	5 + (1 x 4) -1	2 x 4	0	4 + 0 = 4	SP ³
CO ₃ ²⁻	C	4 + (6 x 3) + 2	8 x 3	0	3 + 0 = 3	SP ²
SO ₂	S	6 + (6x2)	8 x 2	1	2 + 1 = 3	SP ²
H ₂ O	O	6 + (1x2)	2 x 2	2	2 + 2 = 4	SP ³

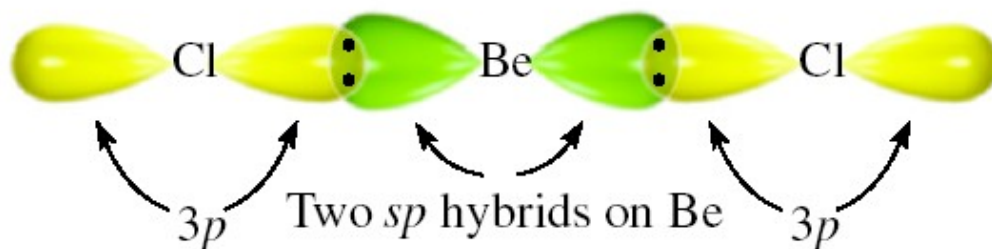
★ Dự đoán kiểu lai hóa & Cấu hình

Lai hoà

Ví dụ 1: phân tử BeCl_2

• Tạo orbital lai hóa

Be ($Z = 4$) $1s^2 2s^2$



• Liên kết với 2Cl :

Cl ($Z = 17$): $3s^2 3p^5$

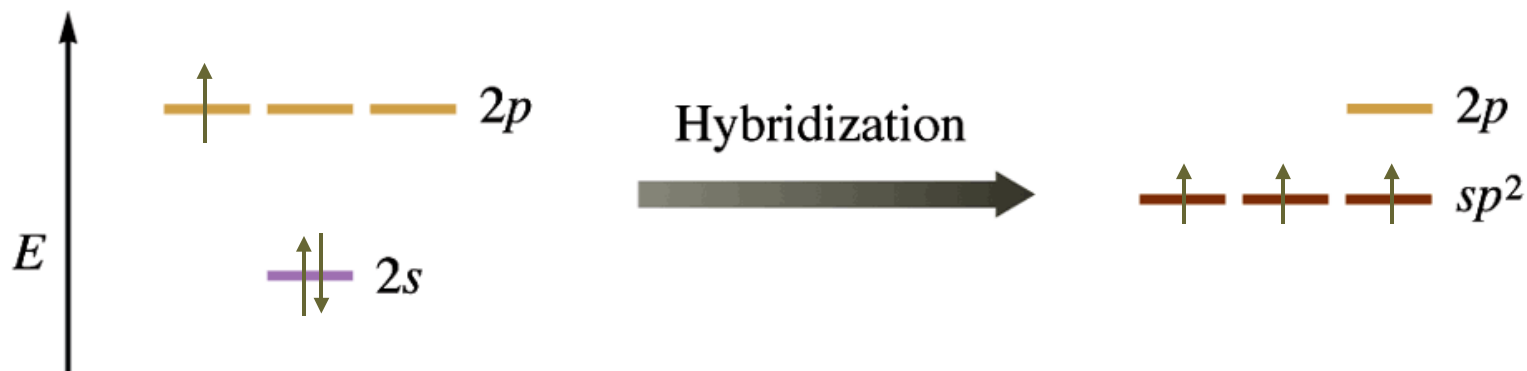
Lai hòu

Ví dụ 2: Phân tử BF_3 .

• Tạo orbital lai hóa

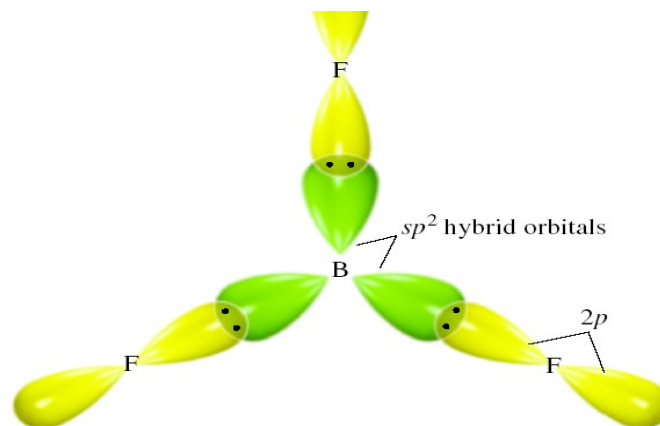
sp

B ($Z = 5$): $2s^2 2p^1$



• Liên kết với 3 F

F ($Z = 9$): $2s^2 2p^5$

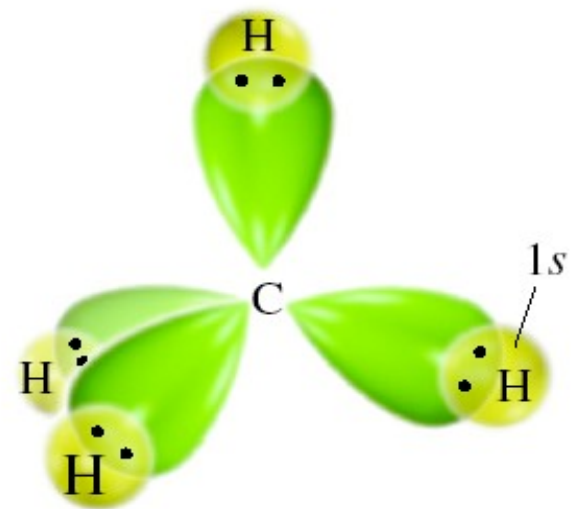
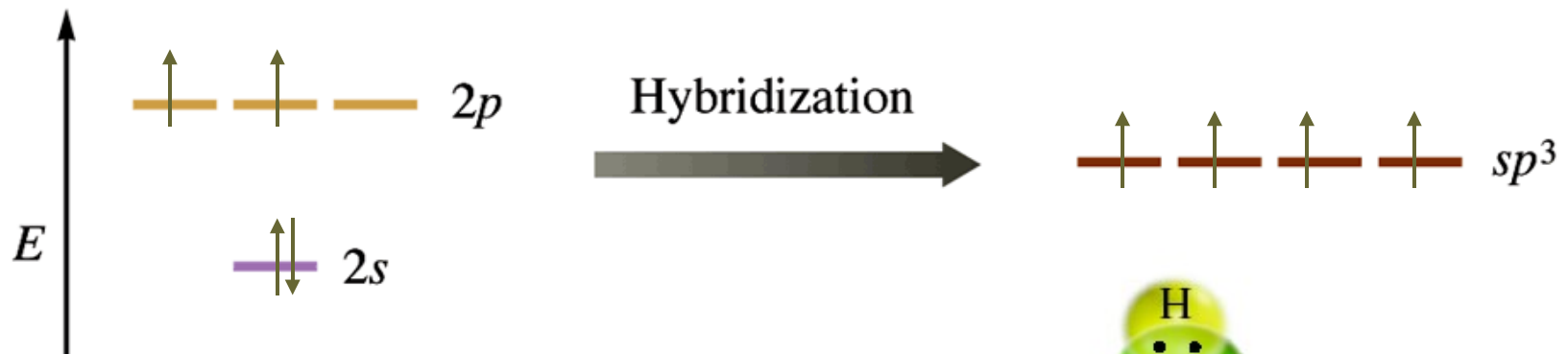




Ví dụ 3: Phân tử CH₄ Lai hóa sp³

• Tạo orbital lai hóa

C (Z = 6): 2s¹ 2p³



CH₄

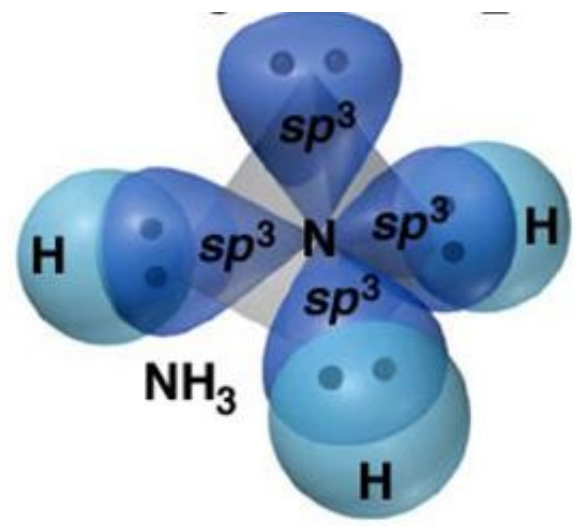
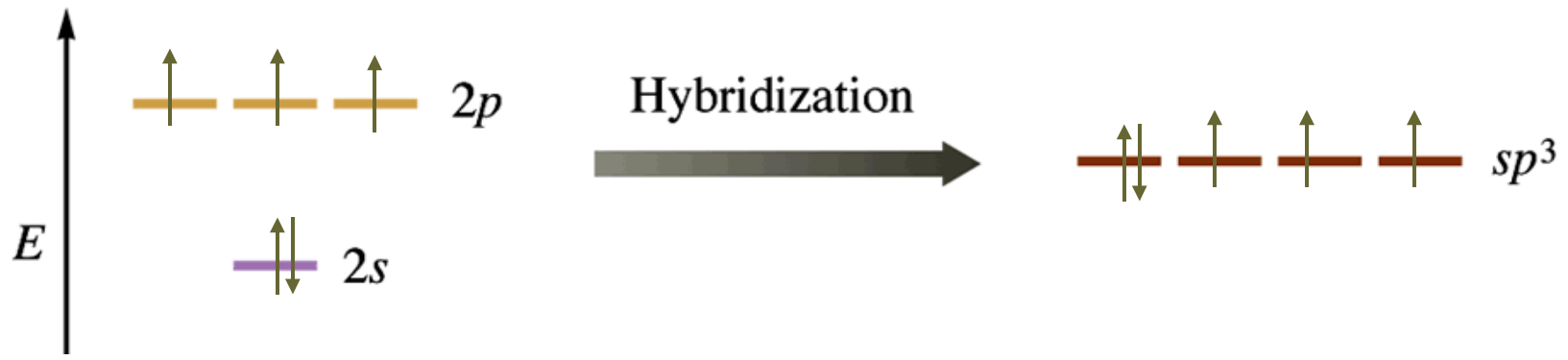
• Liên kết với 4 H : 1s



Ví dụ 4: Phân tử NH₃ Lai hóa sp³

• Tạo orbital lai hóa

N (Z = 7): 2s² 2p³



• Liên kết với 3 H : 1s

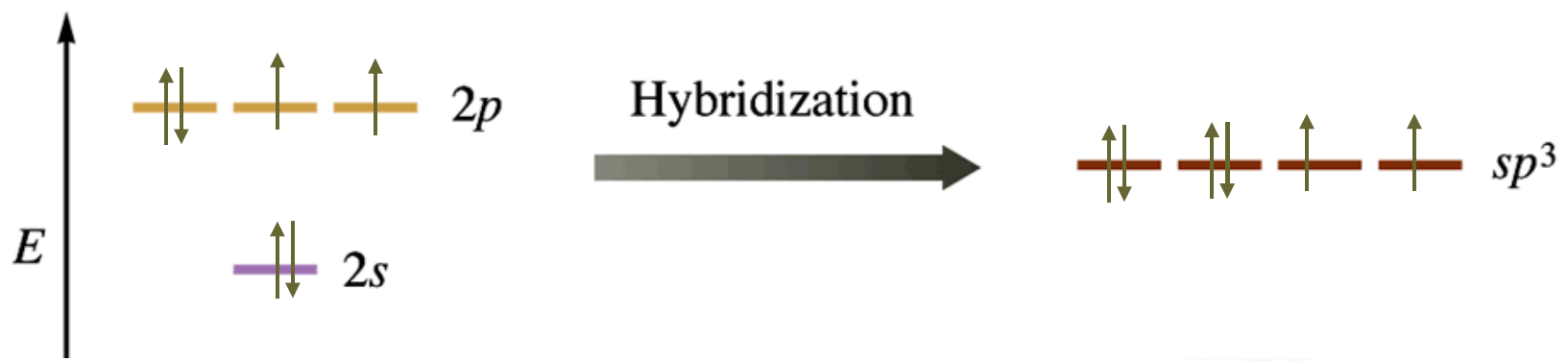


Ví dụ 5: Phân tử H₂O

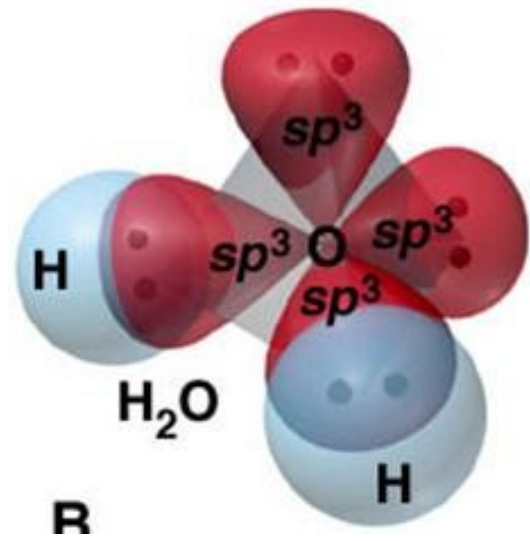
Lai hóa sp³

• Tạo orbital lai hóa

O (Z = 8): 2s² 2p⁴



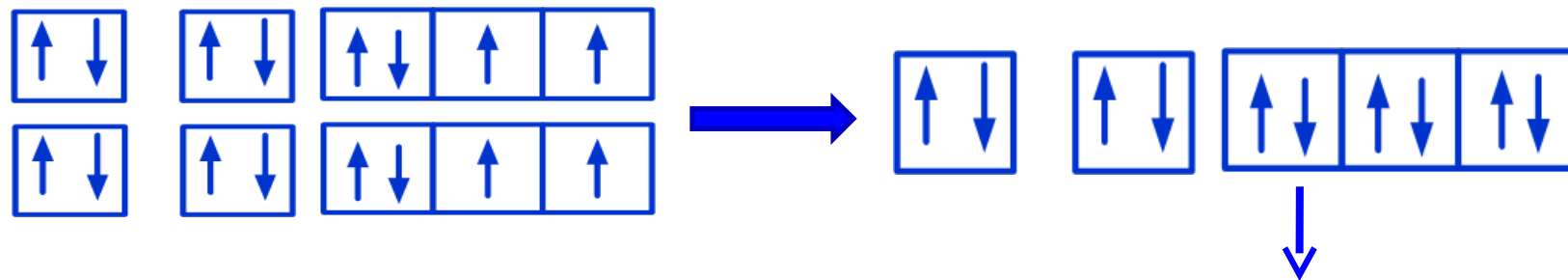
• Liên kết với 2H : 1s



Hạn chế :Thuyết hoá trị spin

- **H₂** : liên kết H-H⁺ bằng 1e
Thuyết hoá trị spin : liên kết bằng cặp e } ?

- **Oxy** : O (8) : 1S 2S 2P



**Thực tế : chất thuận từ \neq Chất
nghịch từ**

4.3.2.2. Thuyết orbital phân tử (MO)

- **Phân tử là nguyên tử đa nhân:** Các hạt nhân & Các electron
- **Phương pháp gần đúng : MO-LCAO**

(PP orbital phân tử-Tổ hợp tuyến tính các orbital ng.tử)

(Molecular Orbitals-Linear Combination of Atomic Orbitals)

- **Hạt nhân :** đứng yên

Điện tử : xoay quanh hạt nhân

Điện tử hóa trị liên kết → Phân tử

- **Hàm sóng ψ**

Ng.tử 1 : hàm sóng ψ_1

Ng.tử 2 : hàm sóng ψ_2

$$\left. \begin{array}{l} \text{Ng.tử 1 : hàm sóng } \psi_1 \\ \text{Ng.tử 2 : hàm sóng } \psi_2 \end{array} \right\} \longrightarrow \psi_{MO} = C_1\psi_1 + C_2\psi_2$$

P.trình Schrodinger

$$H\psi = E\psi$$

→ ψ & E

- **Tổ hợp nAO**

→ nMO

4.3.2.2. Thuyết orbital phân tử (MO)

- Điều kiện tổ hợp các orbital nguyên tử

- Các AO phải có cùng tính chất đối xứng

- Năng lượng các AO phải xấp xỉ nhau

- Các AO phải xen phủ rõ rệt

- Cấu trúc “e” của phân tử

Tuân theo N.lý bền vững + N.lý Pauly + Q.tắc Hund

4.3.2.2. Thuyết orbital phân tử (MO)

▪ Đại lượng đặc trưng

• **Bậc liên kết**
$$N = \frac{n - n^*}{2}$$

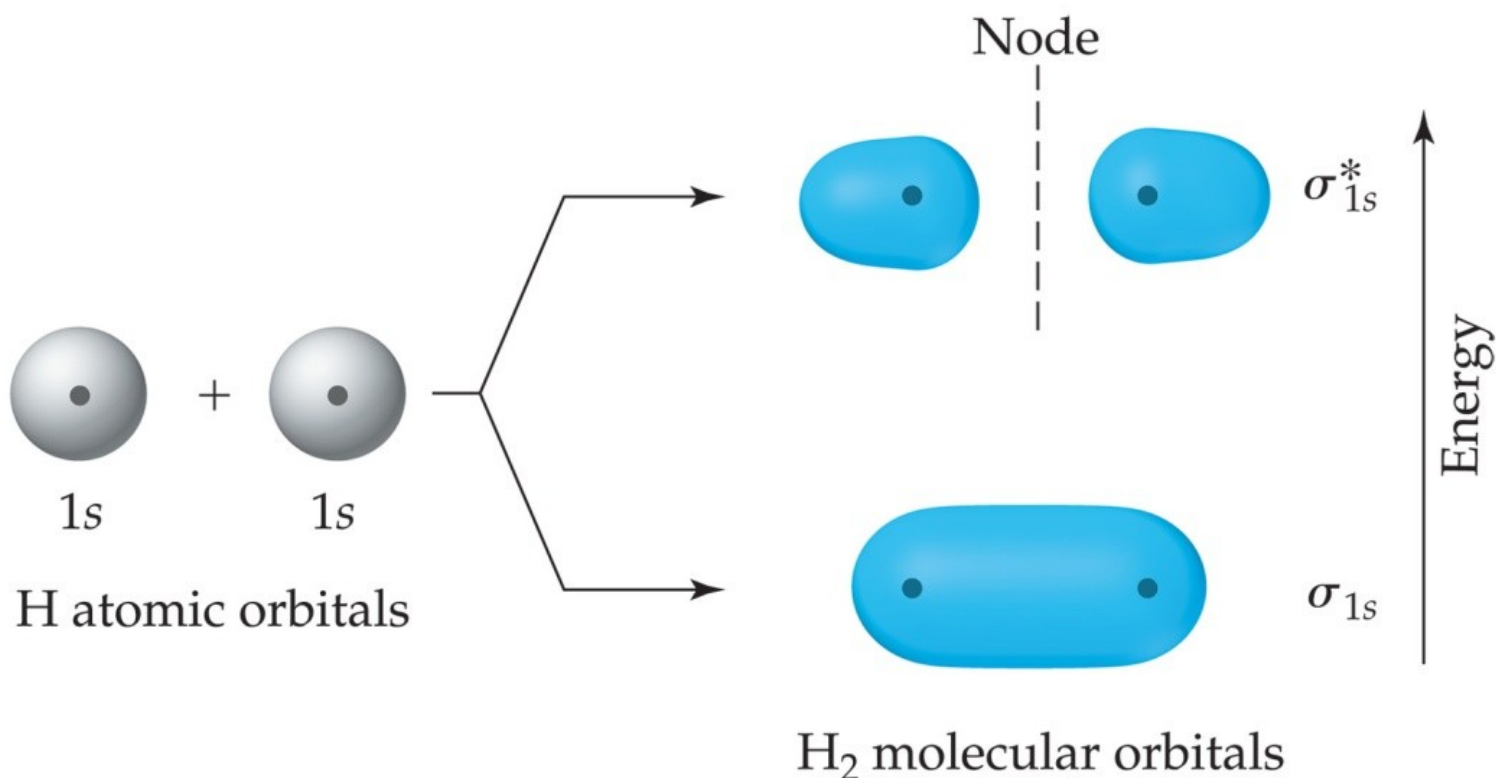
n-số “e” liên kết

n* -số “e” phản liên kết

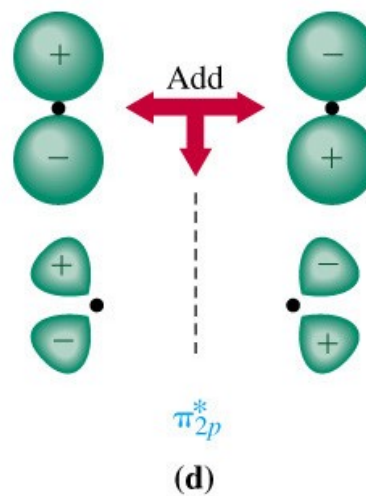
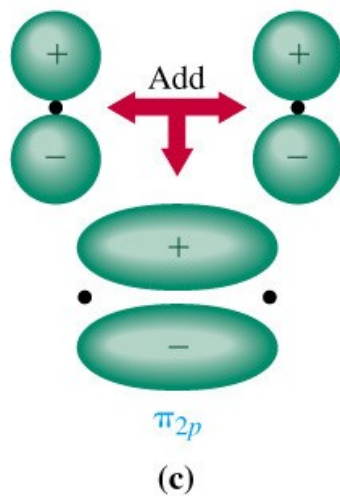
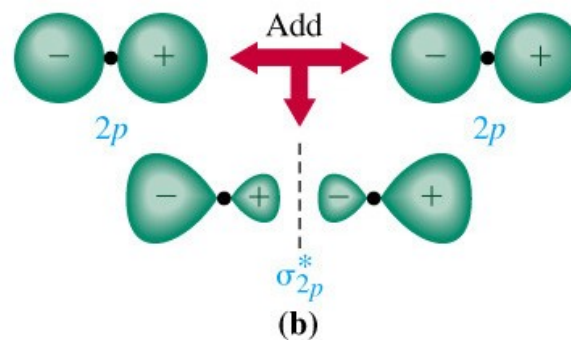
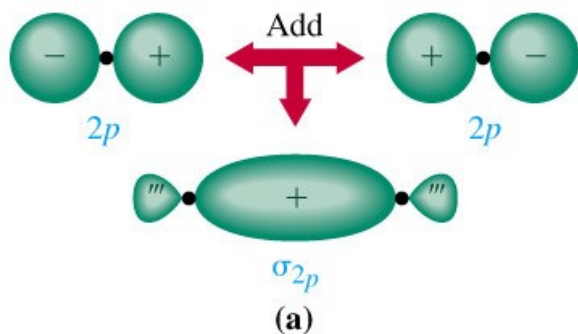
• **Năng lượng liên kết (E)**

• **Độ dài liên kết (d)**

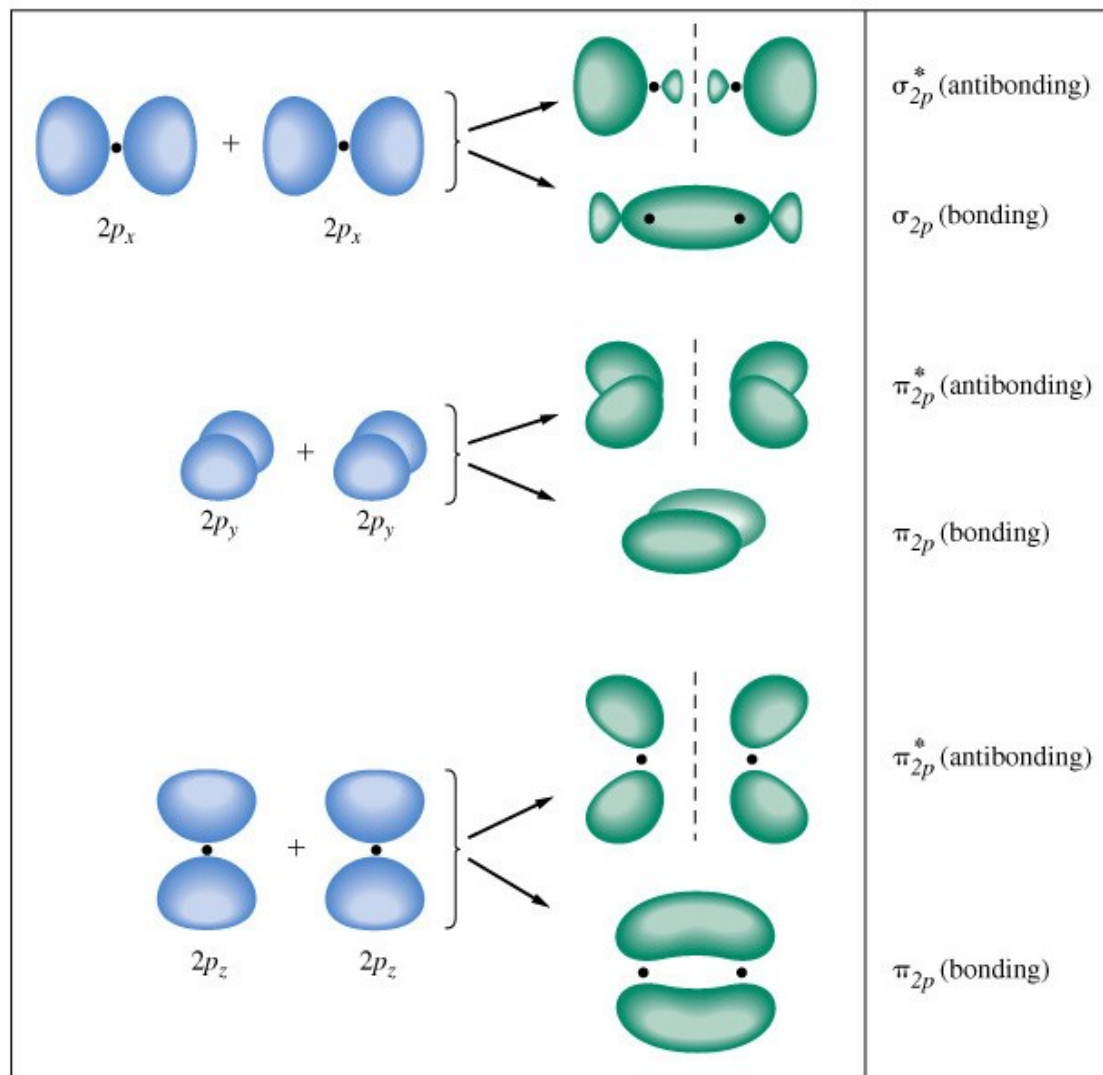
Hình dạng MO liên kết & MO phản liên kết



Hình dạng MO liên kết & MO phản liên kết



Combining p orbitals



Sự hình thành MO từ 2 ng.tử cùng loại (A2) (Chu kỳ 1 : H₂⁺, H₂, He₂⁺, He₂)

Ví dụ 1: H + H → H₂

▪ **Lập các MO**

Mỗi ng.tử có 1 orbital hóa trị : 1S

$$\psi_{1S} = C_1\psi_{s_1} + C_2\psi_{s_2}$$

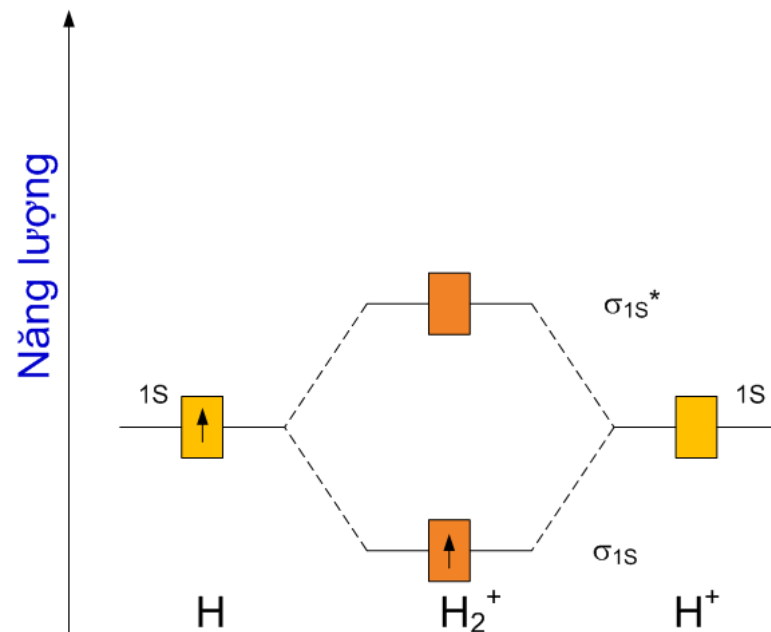
$$\sigma_{1S} \quad \psi_+ = 0.5(\psi_{s_1} + \psi_{s_2})$$

$$\sigma_{1S}^* \quad \psi_- = 0.5(\psi_{s_1} - \psi_{s_2})$$

▪ **Giải đồ năng lượng**

▪ **Cấu hình “e”** : σ_{1S}^1

▪ **Bậc liên kết** : $N = \frac{1-0}{2} = 0.5$



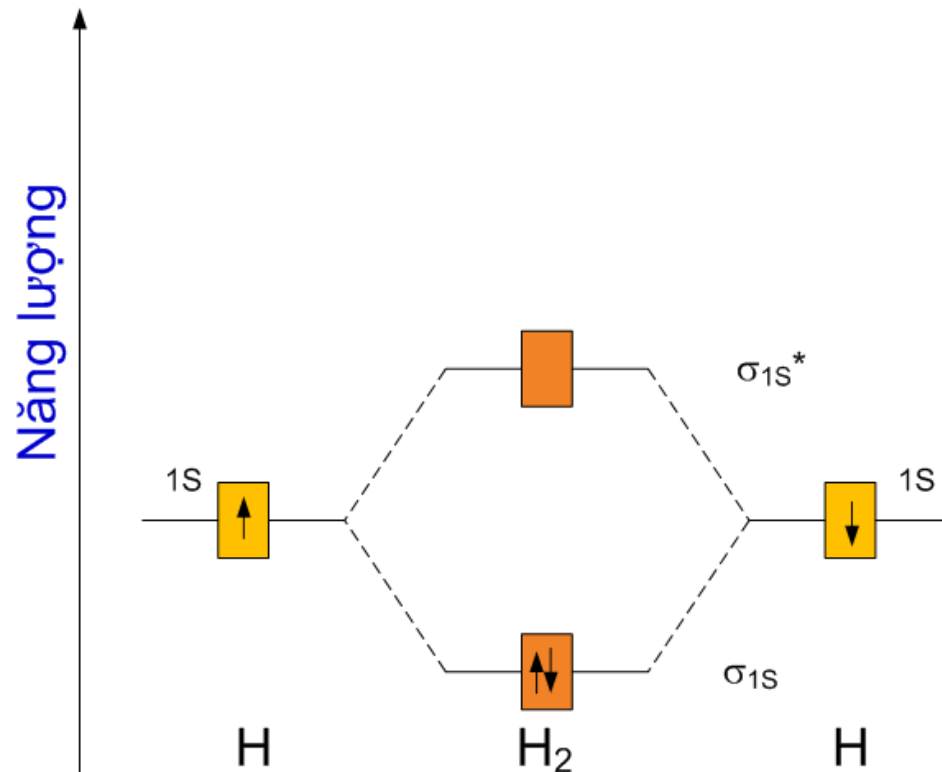
Sự hình thành MO từ 2 ng.tử cùng loại (A2) (Chu kỳ 1 : H₂⁺, H₂, He₂⁺, He₂)

Ví dụ 2: H₂ (2e)

■ AO : 1S

MO : σ_{1s}

■ **Cấu hình:** $(\sigma_{1s})^2$



■ **Bậc liên kết**

$$N = \frac{2 - 0}{2} = 1$$

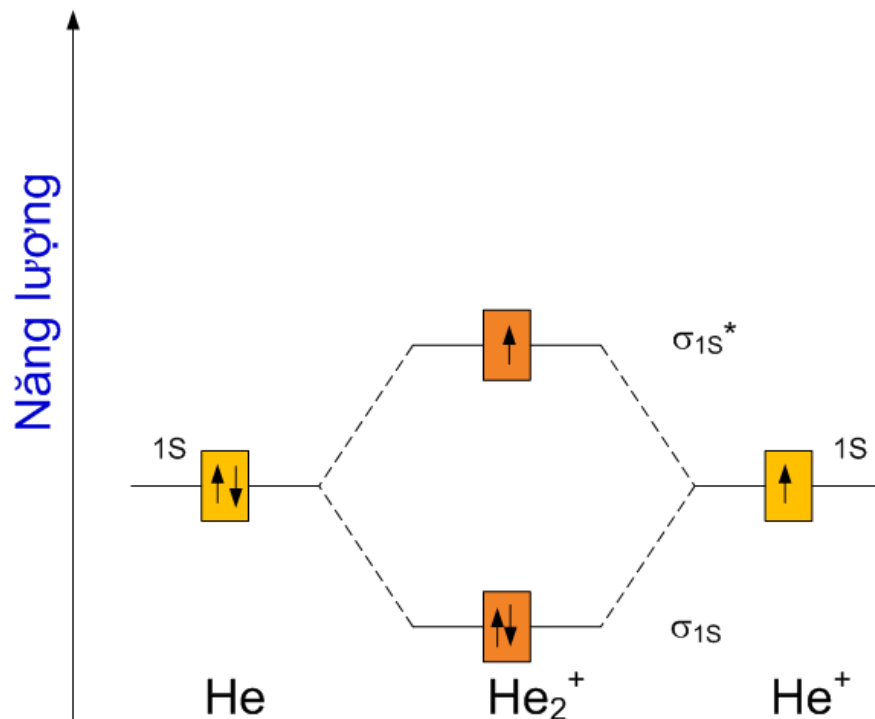
Sự hình thành MO từ 2 ng.tử cùng loại (A2) (Chu kỳ 1 : H₂⁺, H₂, He₂⁺, He₂)

Ví dụ 3: He₂ (3e)

■ AO : 1S
MO : σ_{1s}

■ Cấu hình “e”
(σ_{1s}) (σ_{1s})

■ **Bậc liên kết** $N = \frac{2-1}{2} = 0.5$



Sự hình thành MO từ 2 ng.tử cùng loại (A2) (Chu kỳ 1 : H₂⁺, H₂, He₂⁺, He₂)

Ví dụ 4: He₂ (4e)

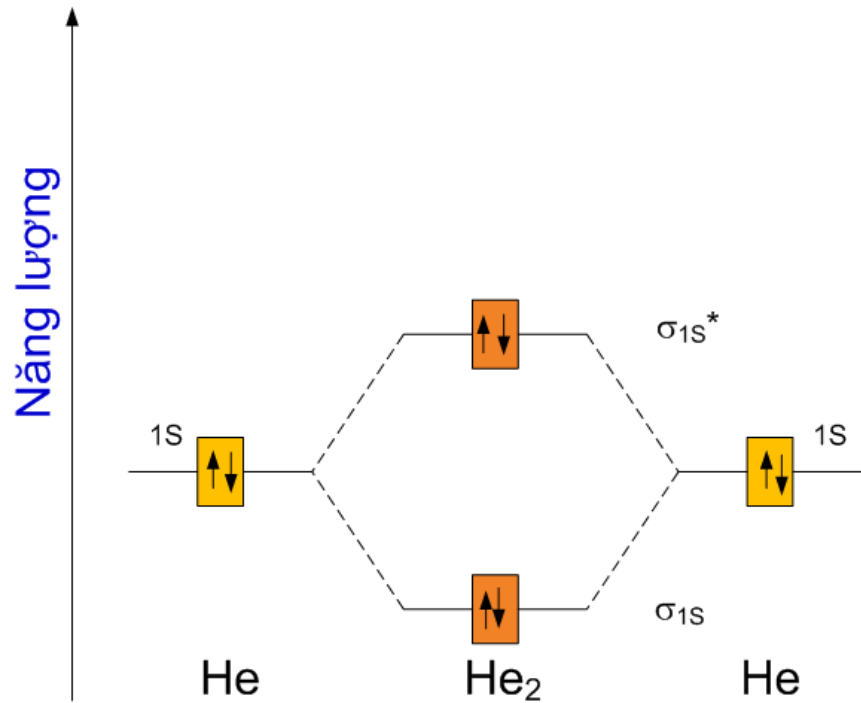
▪ AO : 1S

MO : σ_{1s}

▪ **Cấu hình :**
(σ_{1s}) (σ_{1s})

▪ **Bậc liên kết** $N = \frac{2-2}{2} = 0$

⇒ He₂ không tồn tại





Sự hình thành MO từ 2 ng.tử cùng loại (A2) (Chu kỳ 1 : H₂⁺, H₂, He₂⁺, He₂)

MO	H ₂	H ₂	He ₂	He ₂
σ_{1s}			↑	↑↓
σ_{1s}	↑	↑↓	↑↓	↑↓
Bậc liên kết	0,5	1	0,5	0
d _{lk} nm	0.106	0.074	0.108	-
E _{lk} (kJ/mol)	256	432	251	0

Sự hình thành MO từ 2 ng.tử cùng loại (A2)

(Chu kỳ 2 : Li , Be , B , C , N , O , F, Ne)

▪ Lập các MO

- Mỗi ng.tử có 4 orbital hóa trị : 1 orbital 2s + 3 orbital 2p.

-**Tổ hợp thứ 1:** 2 AO 2S của 2 ng.tử

$$\psi_s = C_1\psi_{s_1} + C_2\psi_{s_2} \begin{cases} \rightarrow \psi_- = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{s_1} - \psi_{s_2}) & \sigma_s^* \\ \rightarrow \psi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{s_1} + \psi_{s_2}) & \sigma_s \end{cases}$$

-**Tổ hợp thứ 2:** 2 AO 2P_z của 2 ng.tử

$$\psi_z = C_3\psi_{z_1} + C_4\psi_{z_2} \begin{cases} \rightarrow \psi_- = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{z_1} - \psi_{z_2}) & \sigma_z^* \\ \rightarrow \psi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{z_1} + \psi_{z_2}) & \sigma_z \end{cases}$$

▪ Lập các MO

-**Tổ hợp thứ 3:** 2 AO $2P_x$ của 2 ng.tử

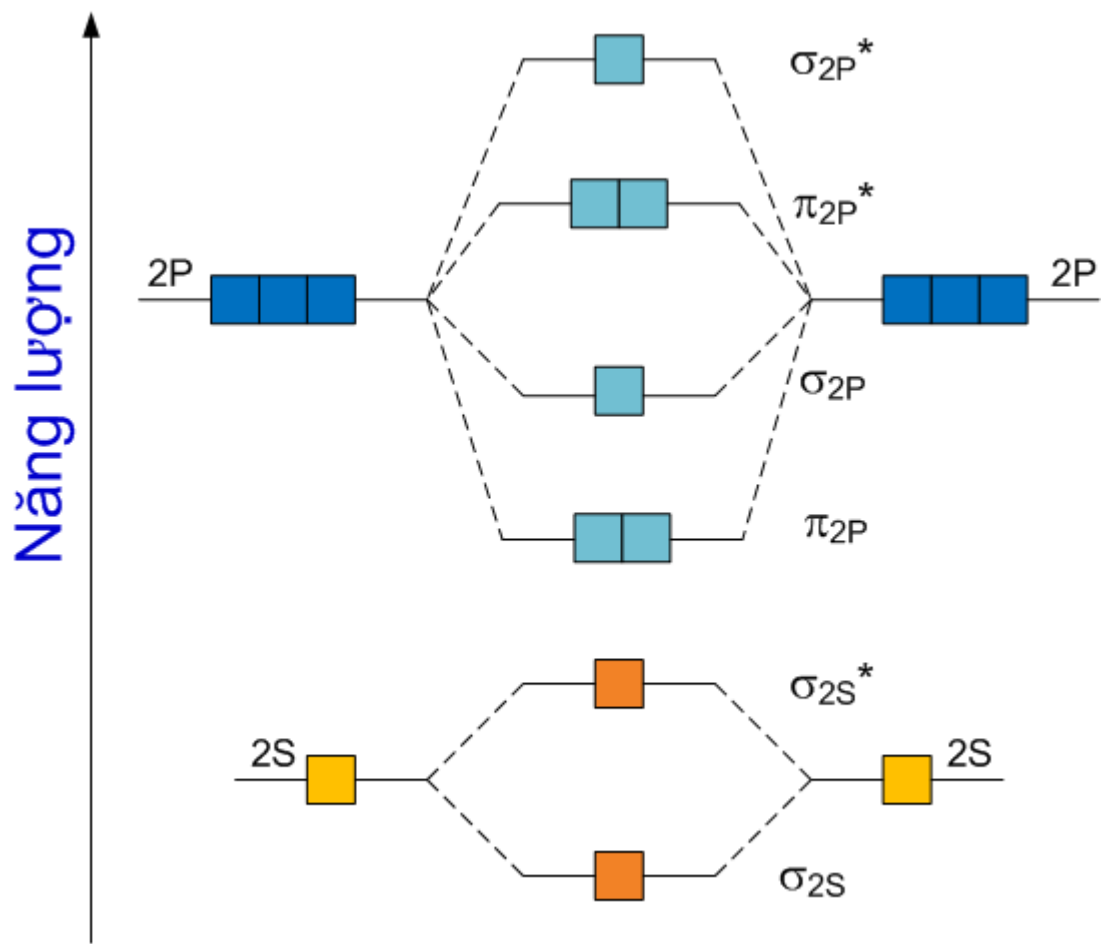
$$\psi_x = C_5\psi_{x_1} + C_6\psi_{x_2} \begin{cases} \rightarrow \psi_- = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{x_1} - \psi_{x_2}) & \pi_x^* \\ \rightarrow \psi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{x_1} + \psi_{x_2}) & \pi_x \end{cases}$$

-**Tổ hợp thứ 4:** 2 AO $2P_y$ của 2 ng.tử

$$\psi_y = C_7\psi_{y_1} + C_8\psi_{y_2} \begin{cases} \rightarrow \psi_- = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{y_1} - \psi_{y_2}) & \pi_y^* \\ \rightarrow \psi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{y_1} + \psi_{y_2}) & \pi_y \end{cases}$$



■ Giải đồ năng lượng



$$\sigma_{1s} < \sigma_{1s}^* < \sigma_{2s} < \sigma_{2s}^* < \pi_{2px} = \pi_{2py} < \sigma_{2pz} < \pi_{2px}^* = \pi_{2py}^* < \sigma_{2pz}^*$$

$E_{2s} \approx E_{2p}$: Ng.tử đầu chu kỳ (Li, Be, B, C, N)



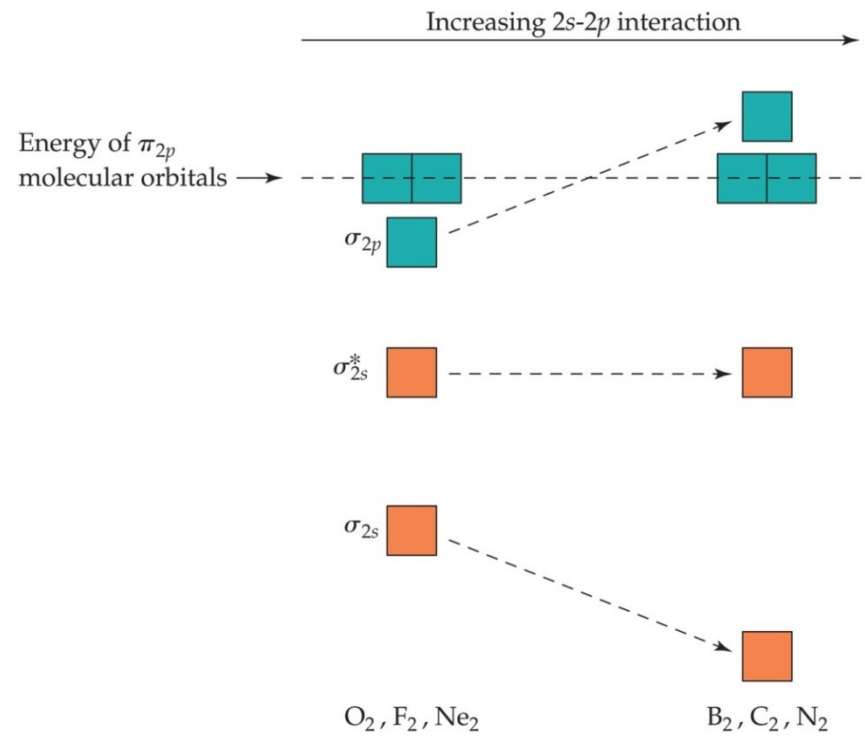
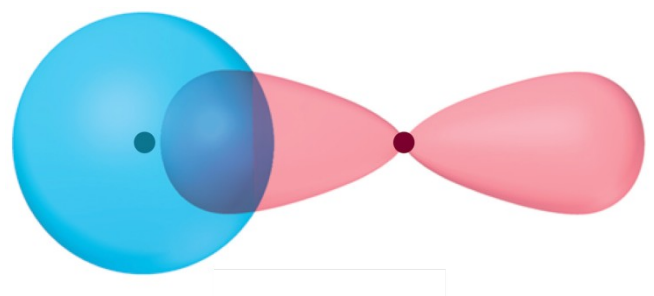
■ Ghi chú

• Đầu chu kỳ : Li₂ , B₂ , B₂ , C₂ , N₂

$\Delta E = E_{2P} - E_{2S} = \text{min}$ → Tương tác đẩy σ_s & σ_z : lớn

• Cuối chu kỳ : O₂ , F₂ , Ne₂

$\Delta E = E_{2P} - E_{2S} = \text{max}$ → Tương tác đẩy σ_s & σ_z :
không



Sự hình thành MO từ 2 ng.tử cùng loại (A2)

(Chu kỳ 2 : Li , Be , B , C , N , O , F, Ne)

Ví dụ 1: Li₂ (3e)

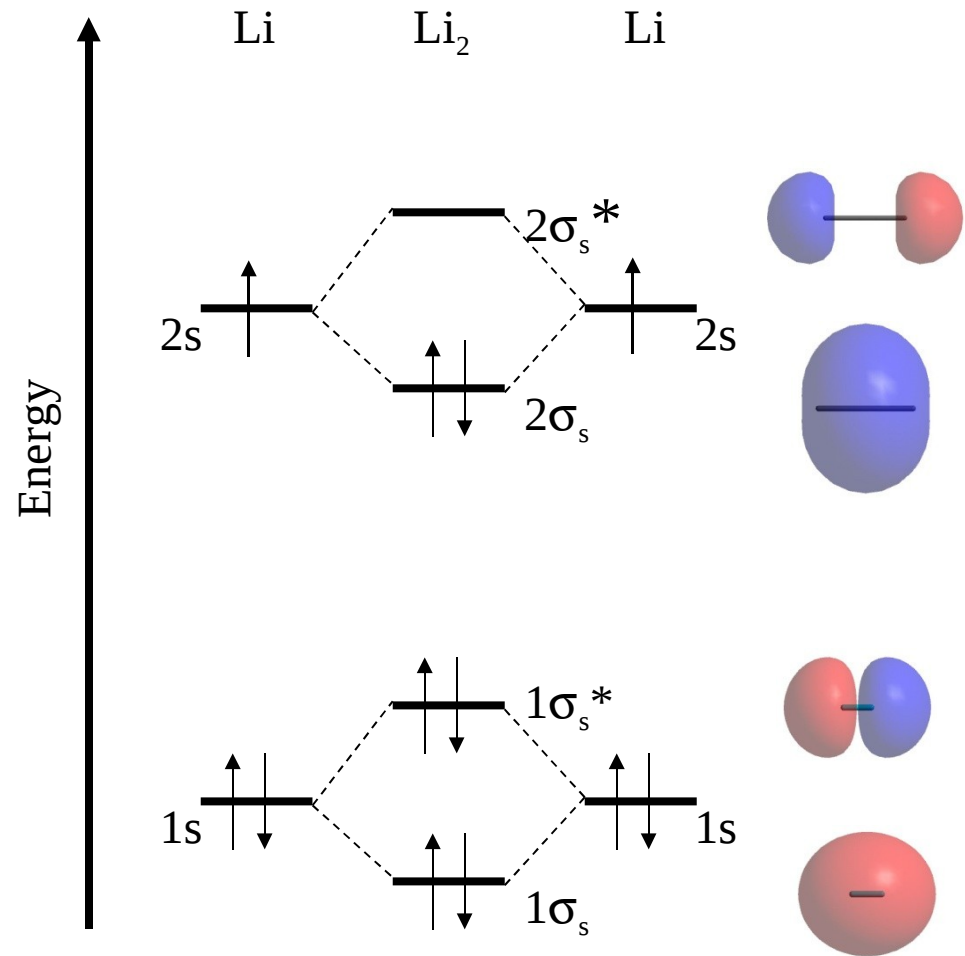
■ AO : $1s^2 2s^1$

MO : σ_{2s}

■ Cấu hình : σ_s^2

■ Bậc liên kết

$$N = \frac{2 - 0}{2} = 1$$



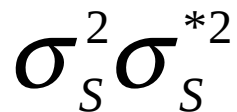
Sự hình thành MO từ 2 ng.tử cùng loại (A2)

(Chu kỳ 2 : Li , Be , B , C , N , O , F, Ne)

Ví dụ 2: Be₂ (4e)

■ AO : $1s^2 2s^2$
MO : σ_{2s}

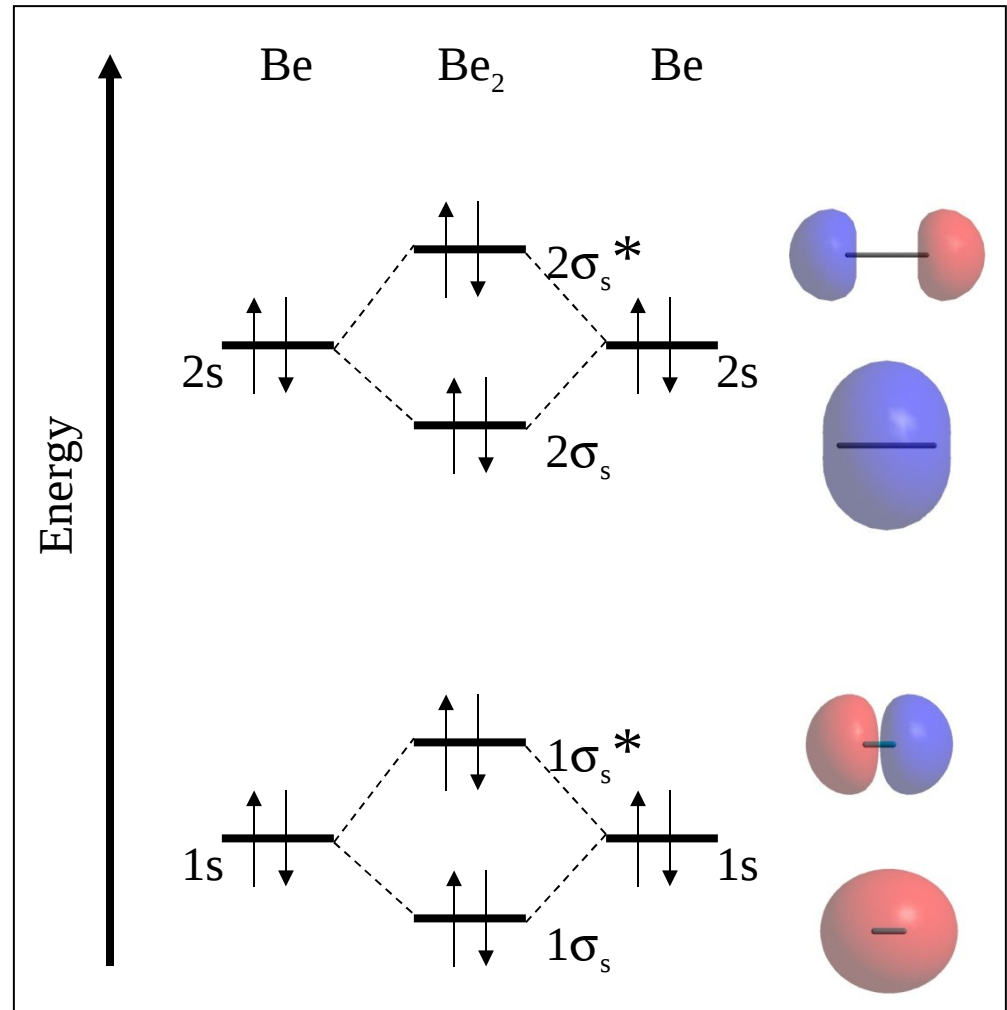
■ **Cấu hình :**



■ **Bậc liên kết**

$$N = \frac{2-2}{2} = 0$$

→ **Không tồn tại**



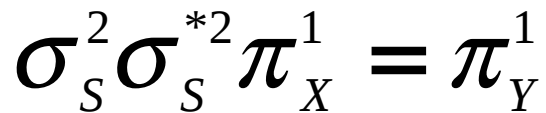
Sự hình thành MO từ 2 ng.tử cùng loại (A2)

(Chu kỳ 2 : Li , Be , B , C , N , O , F, Ne)

Ví dụ 3: B₂ (5e)

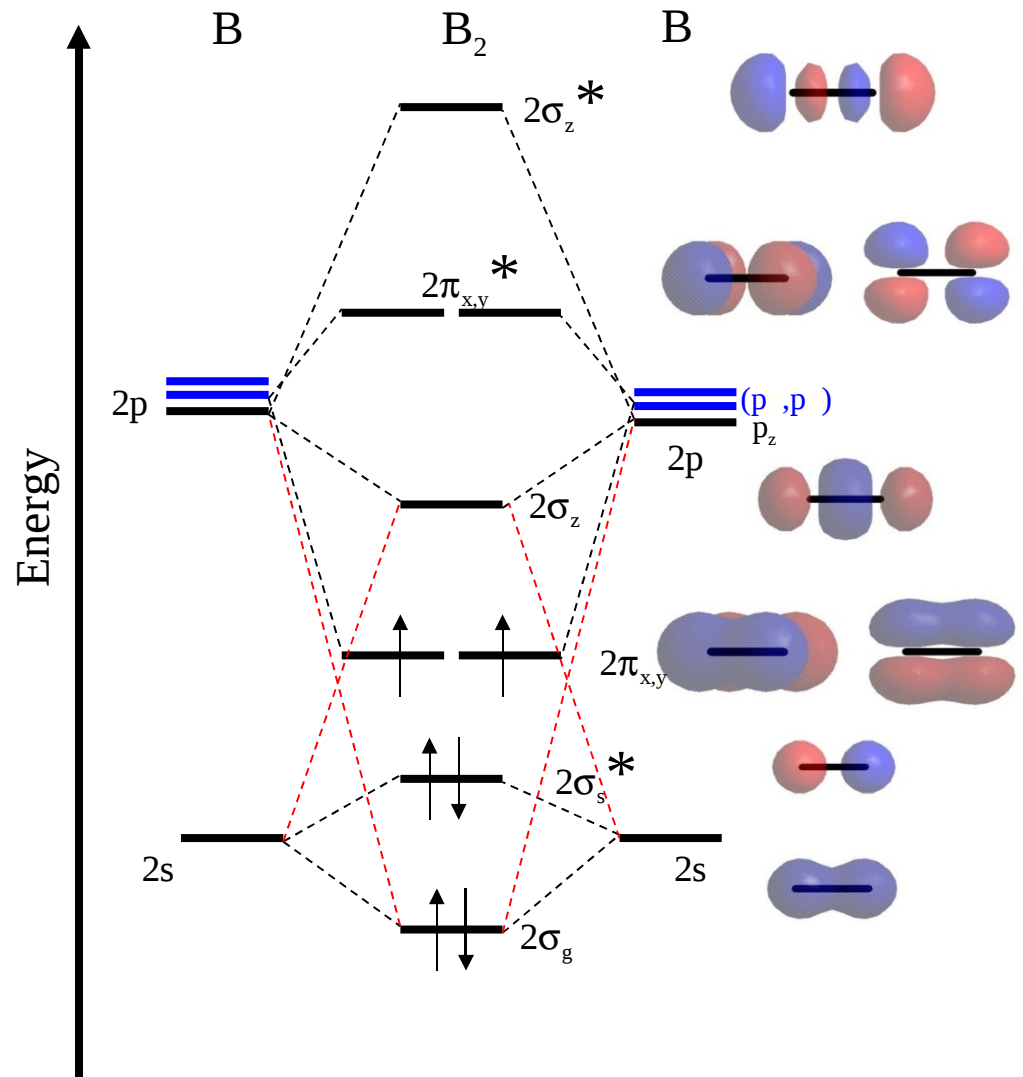
■ AO : $1S^2 2S^2 2P^1$

■ Cấu hình :



■ Bậc liên kết

$$N = \frac{4-2}{2} = 1$$



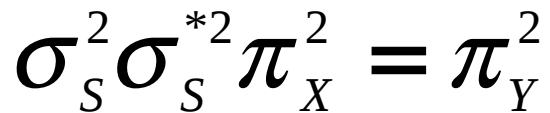
Sự hình thành MO từ 2 ng.tử cùng loại (A2)

(Chu kỳ 2 : Li , Be , B , C , N , O , F, Ne)

Ví dụ 4: C2 (6e)

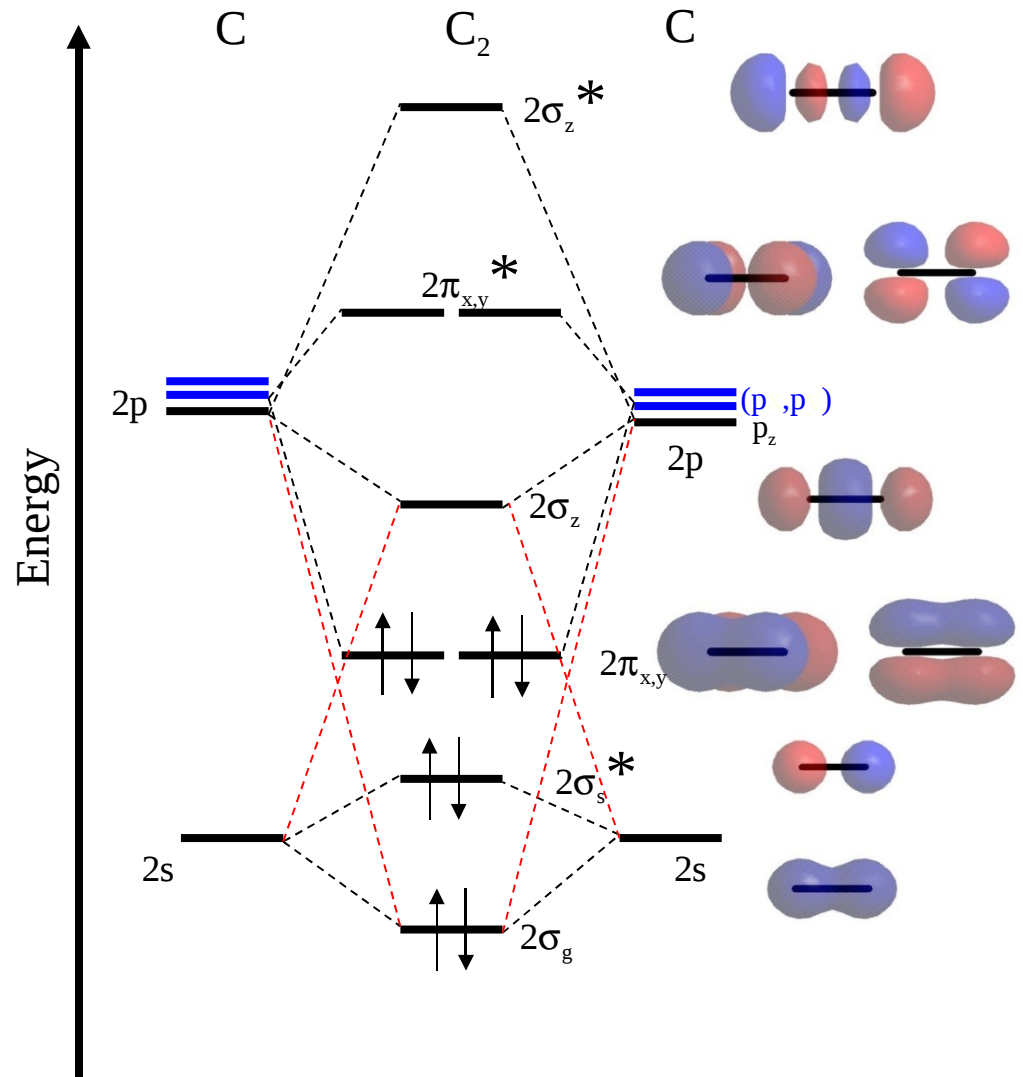
■ AO : $1S^2 2S^2 2P^2$

■ Cấu hình :



■ **Bậc liên kết**

$$N = \frac{6 - 2}{2} = 2$$



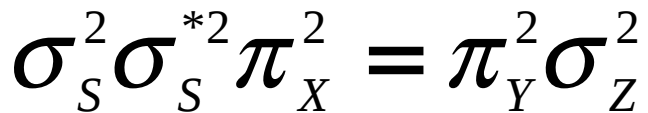
Sự hình thành MO từ 2 ng.tử cùng loại (A2)

(Chu kỳ 2 : Li , Be , B , C , N , O , F, Ne)

Ví dụ 5: N₂ (7e)

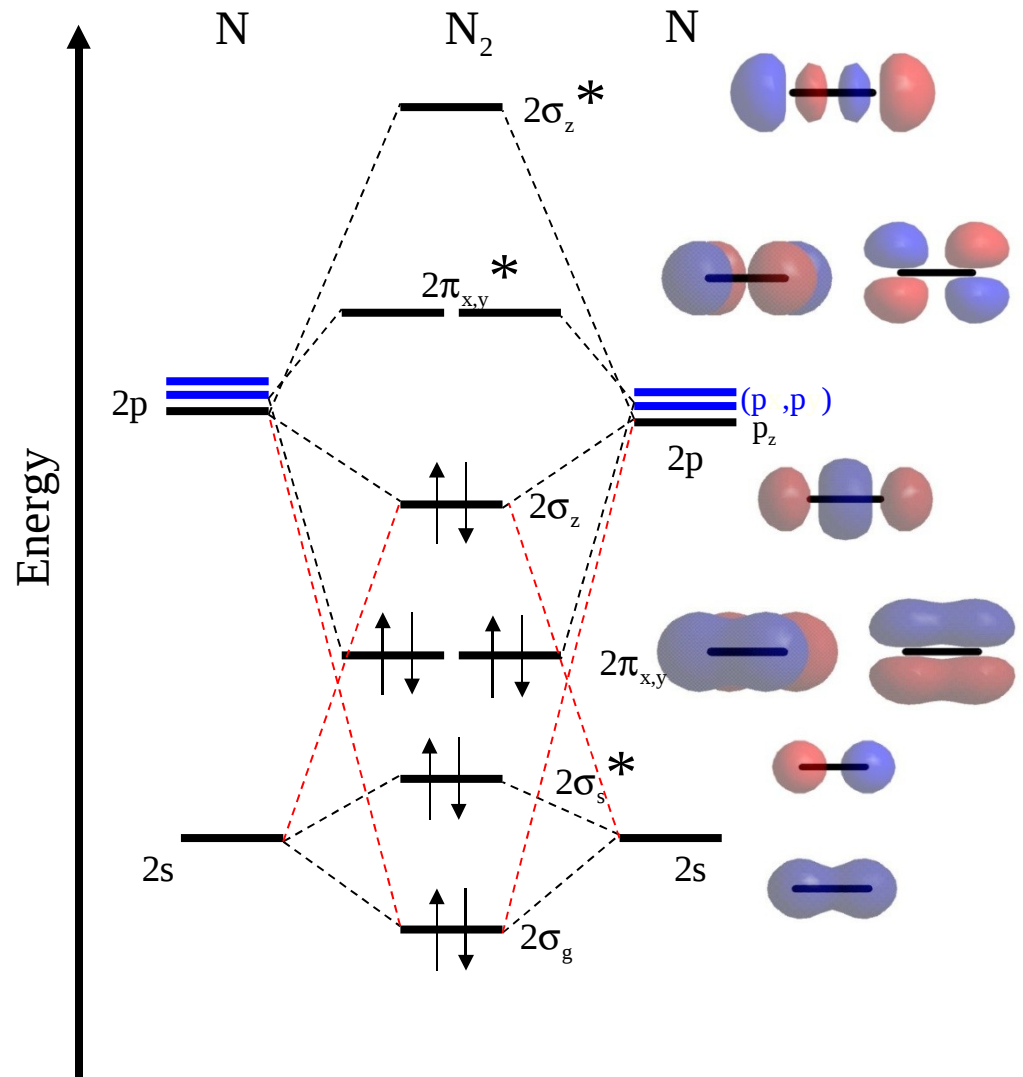
■ **AO :** $1S^2 2S^2 2P^3$

■ **Cấu hình :**



■ **Bậc liên kết**

$$N = \frac{8 - 2}{2} = 3$$

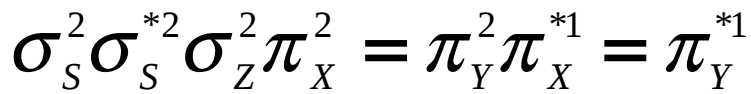


Sự hình thành MO từ 2 ng.tử cùng loại (A2) (Chu kỳ 2 : Li , Be , B , C , N , O , F, Ne)

Ví dụ 6: O₂ (8e)

▪ **AO** : $1S^2 2S^2 2P^5$

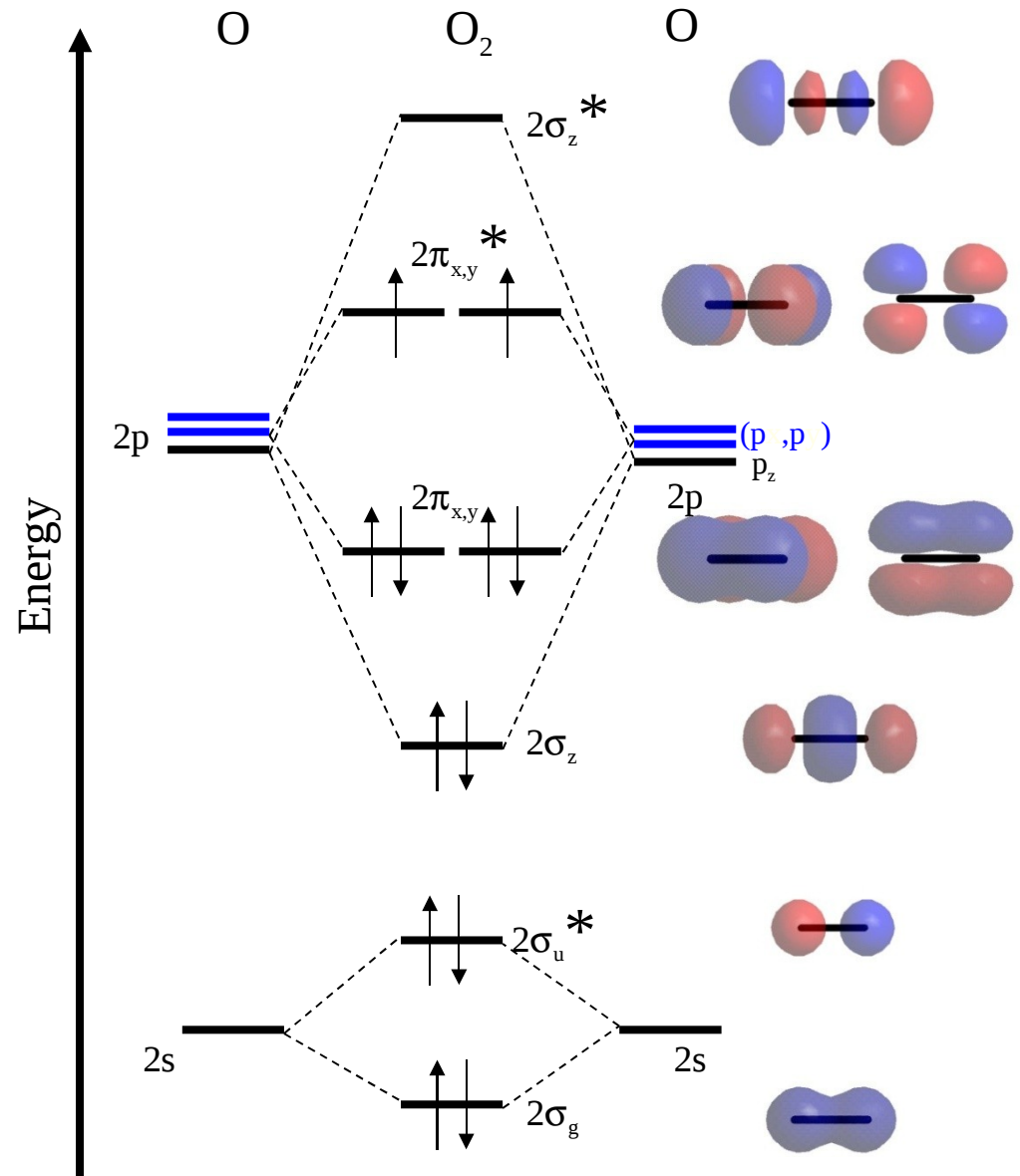
▪ **Cấu hình :**



→ **Thuận từ**

▪ **Bậc liên kết**

$$N = \frac{8 - 4}{2} = 2$$



Sự hình thành MO từ 2 ng.tử cùng loại (A2)

(Chu kỳ 2 : Li , Be , B , C , N , O , F, Ne)

Ví dụ 7 : F2 (9e)

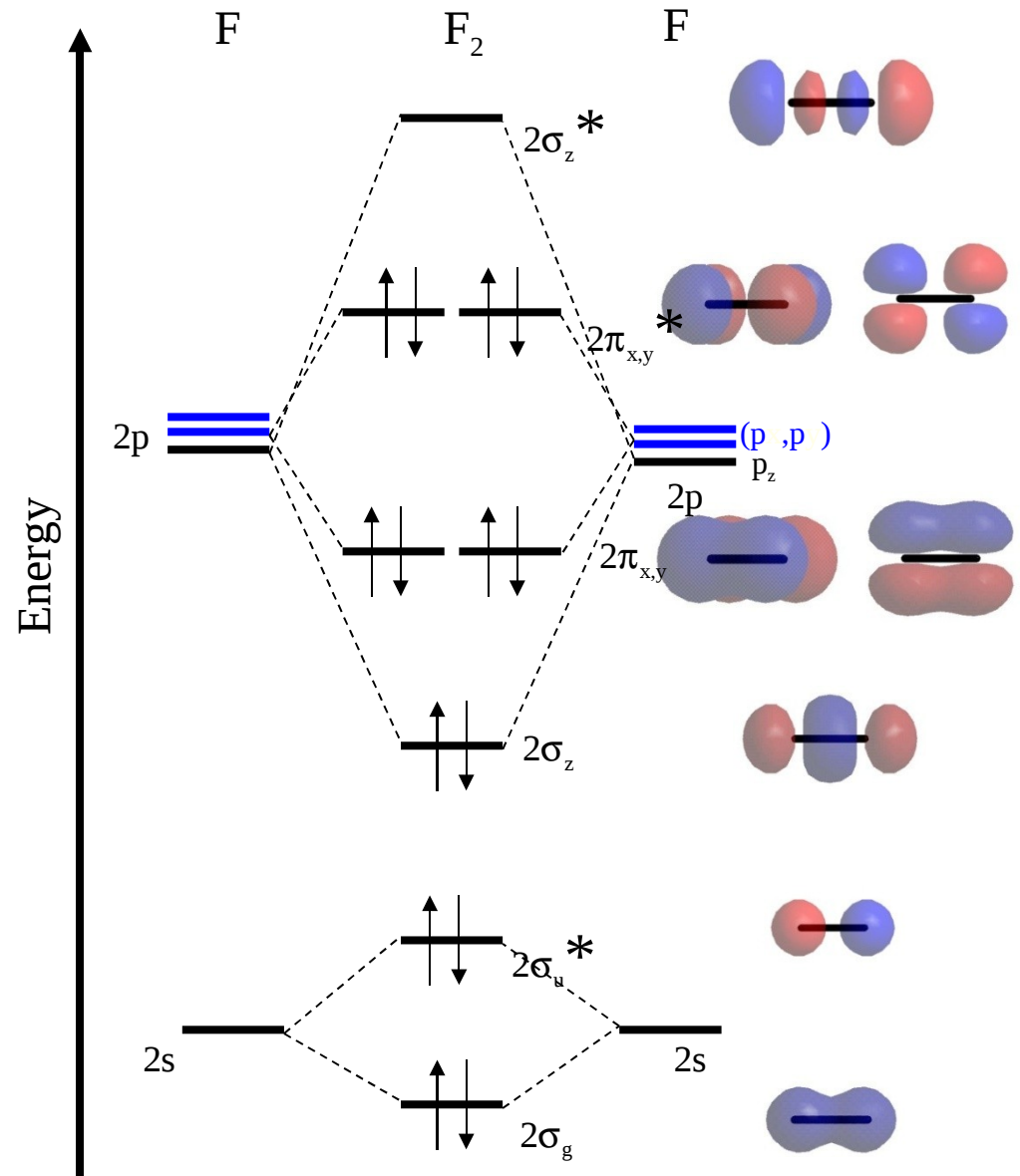
■ **AO** : $1S^2 2S^2 2P^5$

■ **Cấu hình :**

$$\sigma_S^2 \sigma_S^{*2} \sigma_Z^2 \pi_X^2 = \pi_Y^2 \pi_X^{*2} = \pi_Y^{*2}$$

■ **Bậc liên kết**

$$N = \frac{8 - 6}{2} = 1$$



Sự hình thành MO từ 2 ng.tử cùng loại (A2) (Chu kỳ 2 : Li , Be , B , C , N , O , F, Ne)

Ví dụ 8 : Ne₂ (10e)

■ **AO** : $1S^2 2S^2 2P^6$

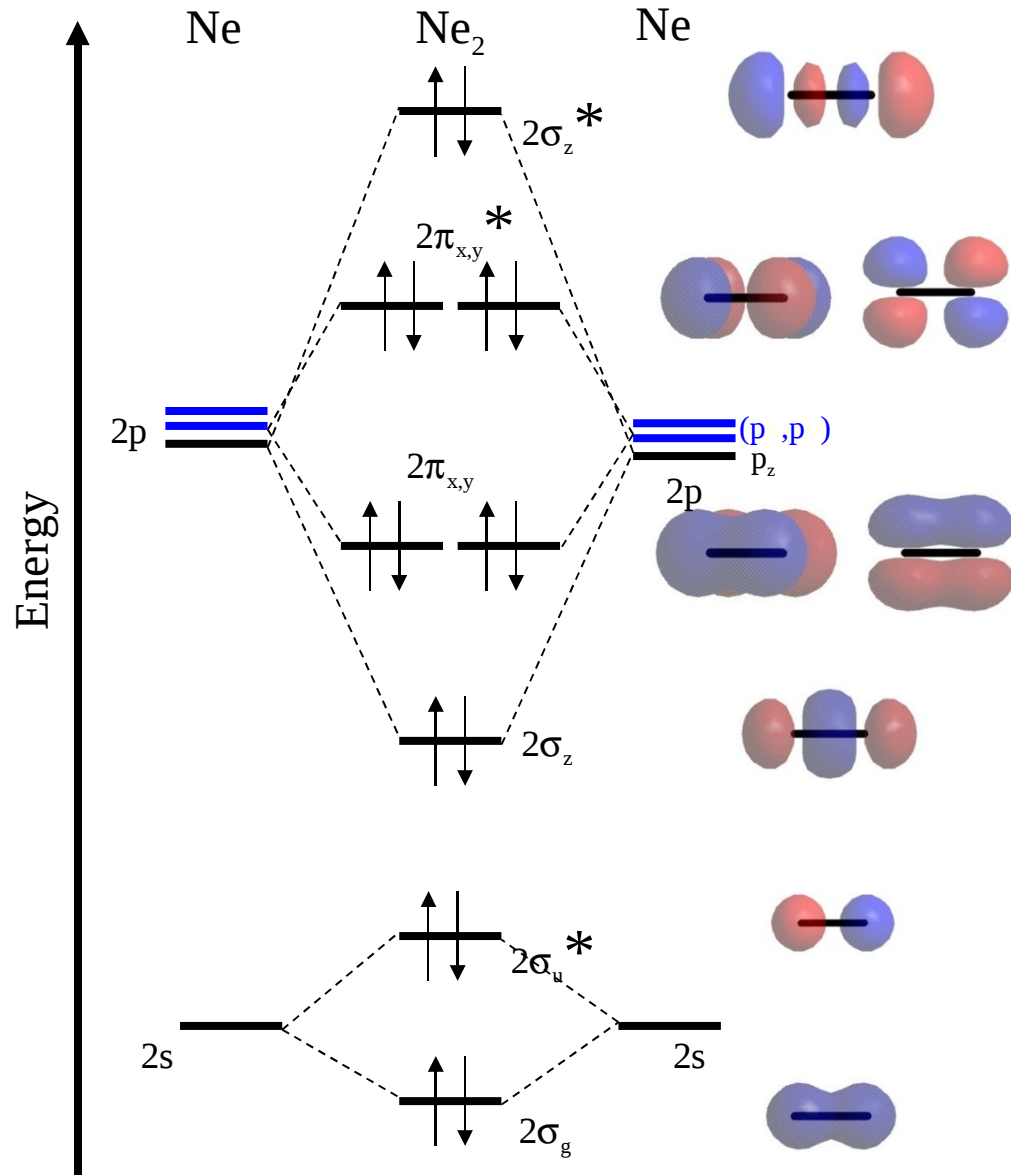
■ **Cấu hình** :

$$\sigma_S^2 \sigma_S^{*2} \sigma_Z^2 \pi_X^2 = \pi_Y^2 \pi_X^{*2} = \pi_Y^{*2} \sigma_Z^{*2}$$

■ **Bậc liên kết**

$$N = \frac{8-8}{2} = 0$$

→ **Không tồn tại**



Sự hình thành MO từ 2 ng.tử cùng loại (A2)

(Chu kỳ 2 : Li , Be , B , C , N , O , F, Ne)

MO	2	2	2	2	2
	Li	B	C	N	N
$\sigma 2pz$					
$\pi 2px =$ $\pi 2py$					
$\sigma 2pz$				\uparrow	$\uparrow\downarrow$
$\pi 2px =$ $\pi 2py$		$\uparrow \quad \uparrow$	$\uparrow\downarrow \quad \uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow \quad \uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow \quad \uparrow\downarrow$
$\sigma 2s$		$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$
$\sigma 2s$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$
HUB © 2006 Bk	1	General Chemistry: 1	2	2,5	Slide 84 of 3
U (A)	2.67	1.50	1.24	1.10	1.1

Sự hình thành MO từ 2 ng.tử cùng loại (A2)

(Chu kỳ 2 : Li , Be , B , C , N , O , F, Ne)

MO	2	2	2	2	2
	O	O	O	F	Ne
$\sigma 2pz$					$\uparrow\downarrow$
$\pi 2px =$ $\pi 2py$	\uparrow	\uparrow \uparrow	$\uparrow\downarrow$ \uparrow	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$
$\pi 2px =$ $\pi 2py$	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$
$\sigma 2pz$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$
$\sigma 2s$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$
$\sigma 2s$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$
Blk 2006	2,5	2	1,5	1	0
General Chemistry:					
Slide 85 of 48					

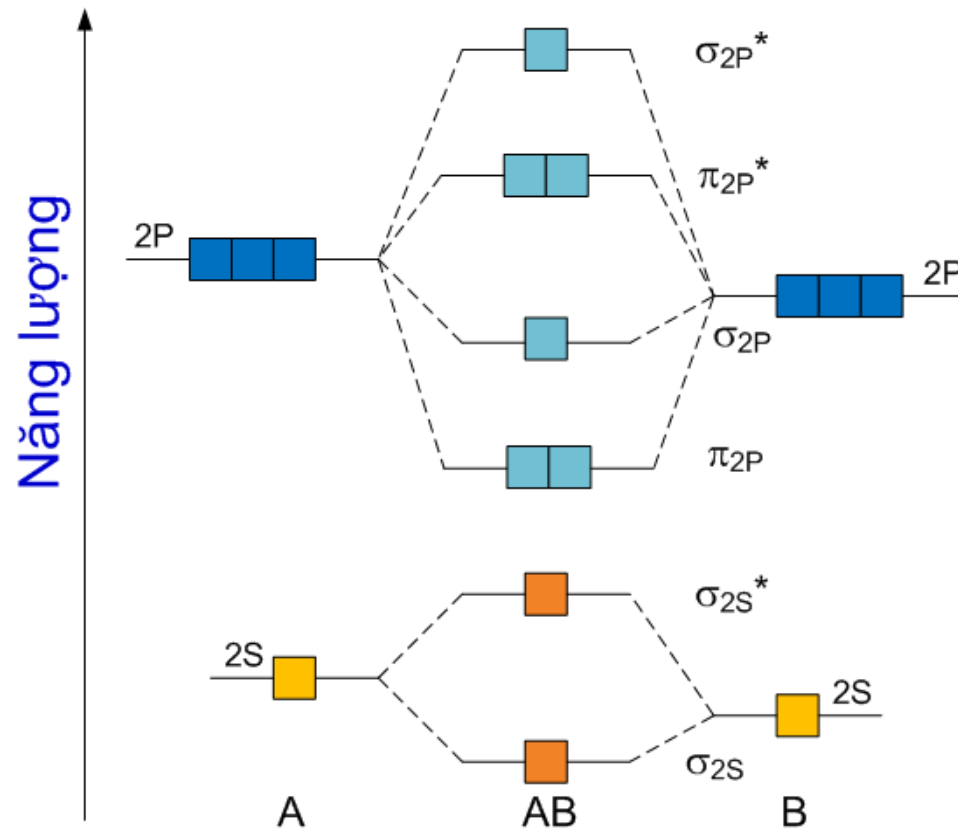
Sự hình thành MO (AB) từ 2 ng.tử khác loại (A & B)



$$\chi_A < \chi_B$$



$$E_A > E_B$$





Sự hình thành MO (AB) từ 2 ng.tử khác loại thuộc chu kỳ 2

Ví dụ 1: BN

▪ AO

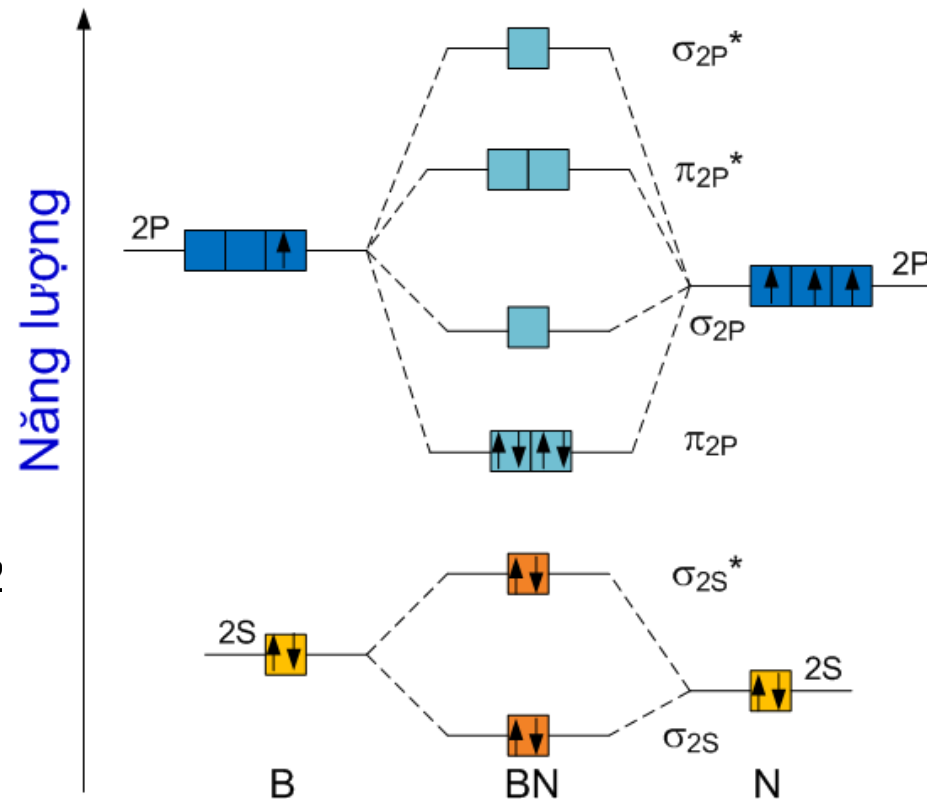
• **B** : $1S^2 2S^2 2P^1$

• **N** : $1S^2 2S^2 2P^3$

▪ Cấu hình



$$N = \frac{6 - 2}{2} = 2$$



Sự hình thành MO (AB) từ 2 ng.tử khác loại thuộc chu kỳ 2

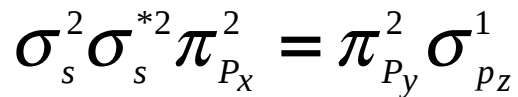
Ví dụ 2: CN

▪ AO

• C : $1S^2 2S^2 2P^2$

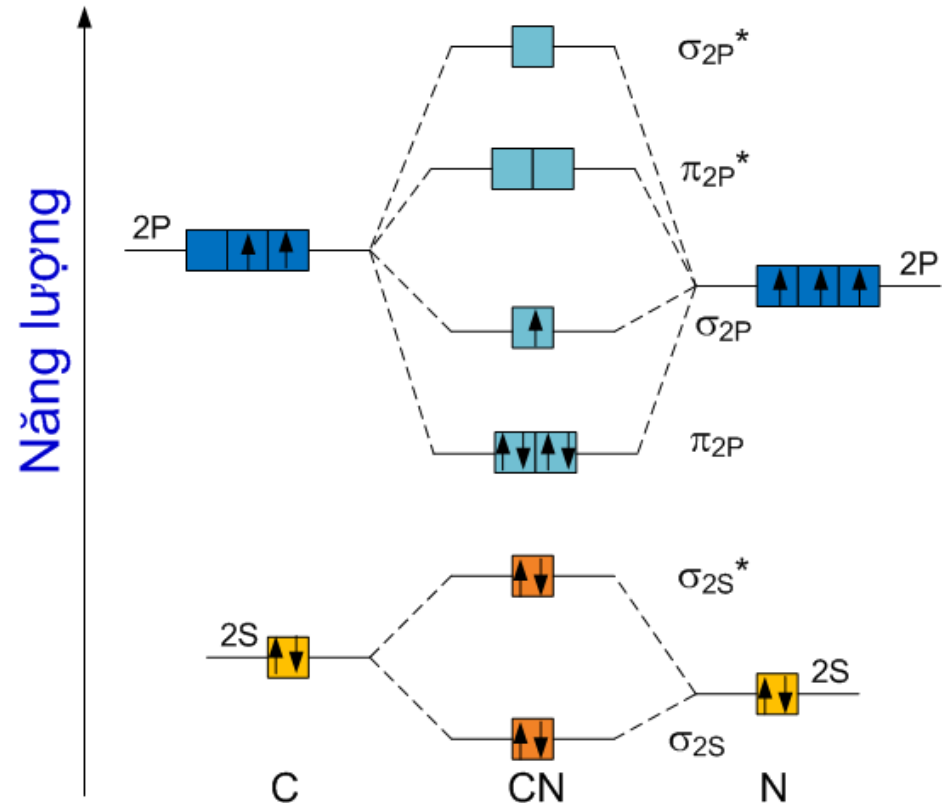
• N : $1S^2 2S^2 2P^3$

▪ Cấu hình



▪ Bậc liên kết

$$N = \frac{7 - 2}{2} = 2.5$$



Sự hình thành MO (AB) từ 2 ng.tử khác loại thuộc chu kỳ 2

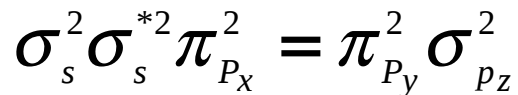
Ví dụ 3: CO

▪ AO

• C : $1S^2 2S^2 2P^2$

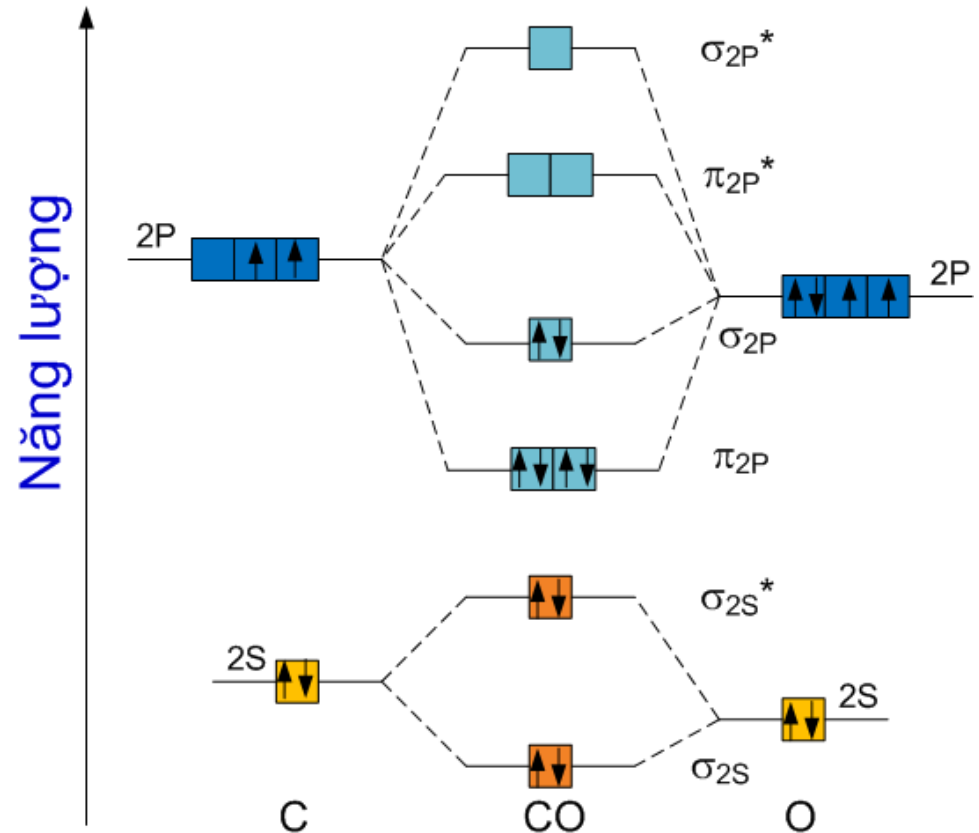
• O : $1S^2 2S^2 2P^4$

▪ Cấu hình



▪ Bậc liên kết

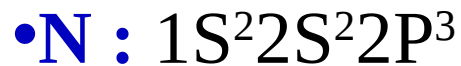
$$N = \frac{8 - 2}{2} = 3$$



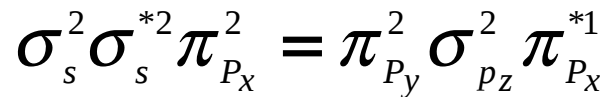
Sự hình thành MO (AB) từ 2 ng.tử khác loại thuộc chu kỳ 2

Ví dụ 4: NO

▪ AO

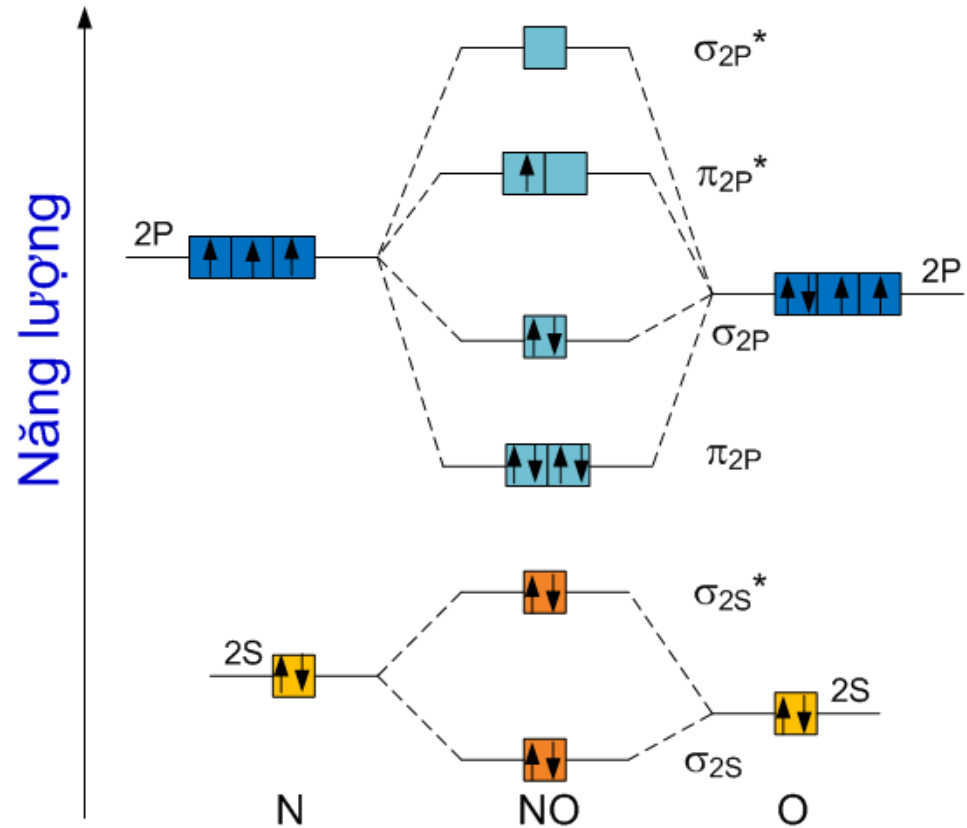


▪ Cấu hình



▪ Bậc liên kết

$$N = \frac{8-3}{2} = 2.5$$



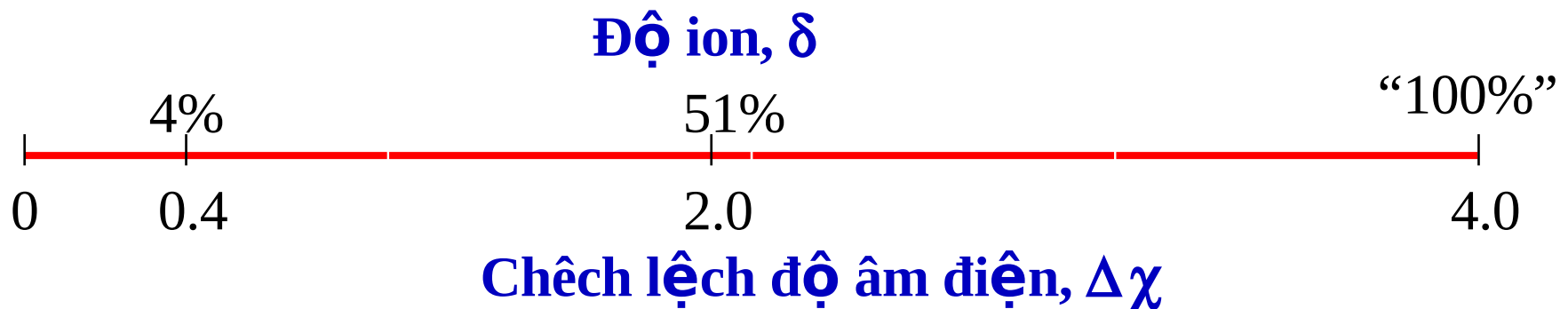


Sự hình thành MO (AB) từ 2 ng.tử khác loại thuộc chu kỳ 2

MO	BN	BO	CO	CO	NO	NO
$\pi 2pz$						
$\pi 2px =$ $\pi 2py$						\uparrow
$\sigma 2pz$		\uparrow	\uparrow	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$
$\pi 2px =$ $\pi 2py$	$\uparrow\downarrow \quad \uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow \quad \uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow \quad \uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow \quad \uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow \quad \uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow \quad \uparrow\downarrow$
$\sigma 2s$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$
$\sigma 2s$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$
Blk	2	2,5	2,5	3	3	2,5

4.4. Phân tử phân cực & Phân tử không phân cực

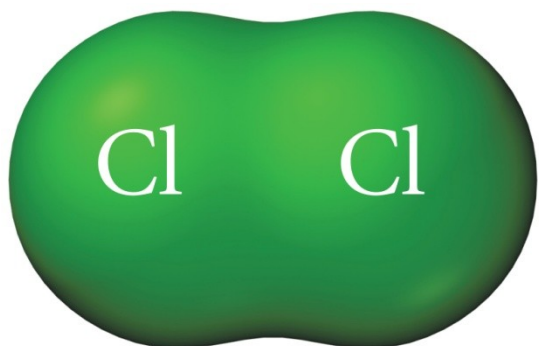
■ Phân cực liên kết & Độ âm điện



- • $\Delta\chi = 0 - 0.4$: l.kết cộng hóa trị không cực
- • $\Delta\chi = 0.4 - 1.9$: l.kết cộng hóa trị có cực
- • $\Delta\chi = 2 - 4$: l.kết ion

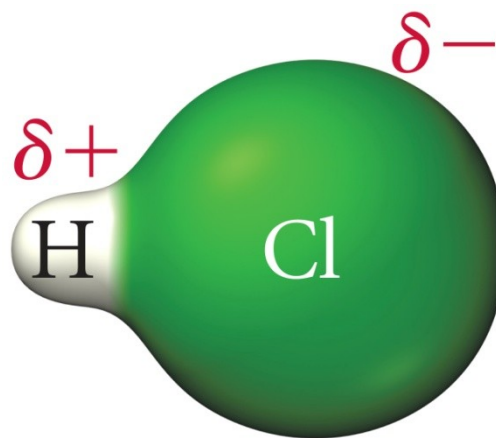


4.3. Phân tử phân cực & Phân tử không phân cực



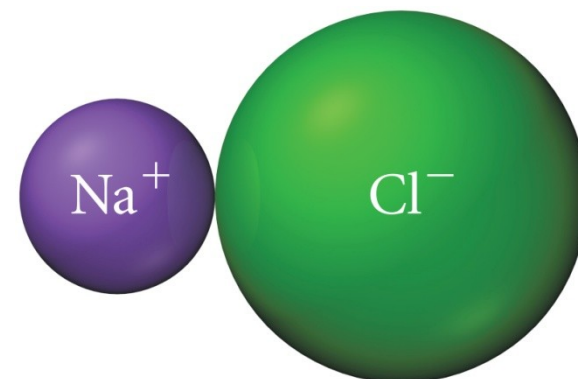
$$\chi_{\text{Cl}} = 3.0$$
$$\Delta\chi_{\text{Cl}} = 3.0 - 3.0 = 0$$

Pure Covalent



$$\chi_{\text{Cl}} = 3.0$$
$$\chi_{\text{H}} = 2.1$$
$$\Delta\chi = 3.0 - 2.1 = 0.9$$

Polar Covalent



$$\chi_{\text{Cl}} = 3.0$$
$$\chi_{\text{Na}} = 1.0$$
$$\Delta\chi = 3.0 - 0.9 = 2.1$$

Ionic

4.3. Phân tử phân cực & Phân tử không phân cực

▪ Moment lưỡng cực

- Công thức $\vec{\mu} = qd$

q-giá trị tuyệt đối của điện tích, C

d-độ dài liên kết, m

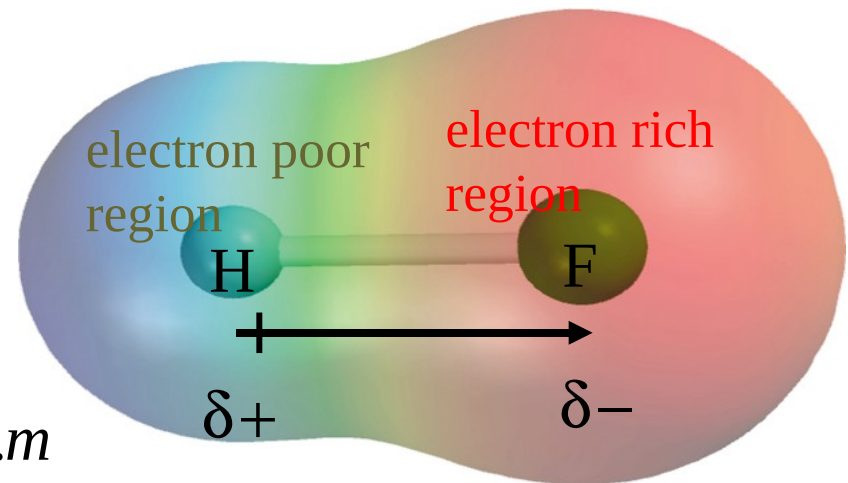
- Đơn vị đo

Coulomb x mét (C.m)

Debye (D)

$$1D = \frac{1}{3} 10^{-29} C.m = 3.33 \times 10^{-30} C.m$$

- Hướng vectơ : từ cực dương đến cực âm



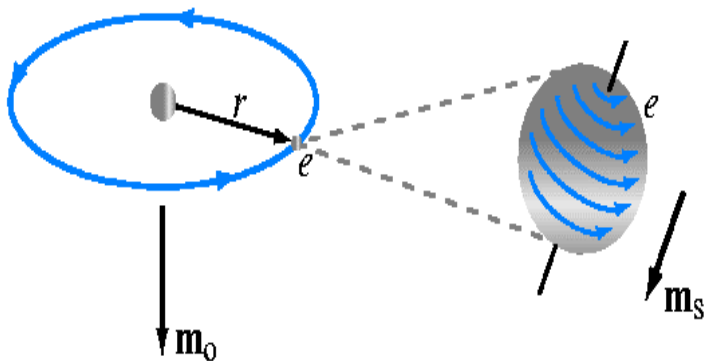
4.3. Phân tử phân cực & Phân tử không phân cực

- Phân tử phân cực (có cực)
 - • Trọng tâm điện tích dương của các hạt nhân & trọng tâm điện tích âm của các electron *không* trùng nhau
 - • Cấu trúc phân tử : không đối xứng
- Phân tử không phân cực (không cực)
 - • Trọng tâm điện tích dương của các hạt nhân & trọng tâm điện tích âm của các electron *có* trùng nhau
 - • Cấu trúc phân tử : đối xứng

Tính chất từ

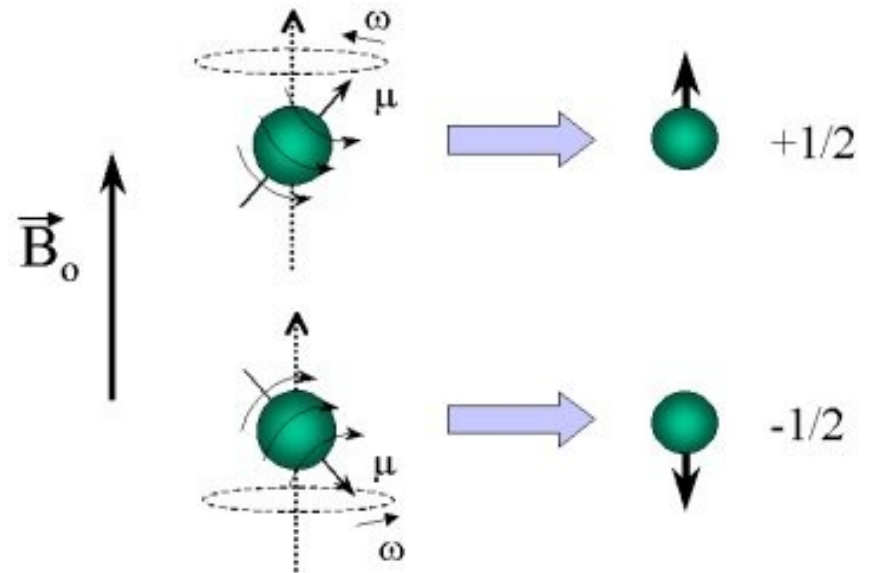
- **Mỗi điện tử “e”** chuyển động => dòng điện nhỏ
=> **Từ trường yếu** => **Momen từ**

$$\mu = \mu_o + \mu_s \quad \mu_o \approx 0$$



(a) Orbiting electron

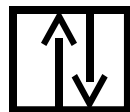
(b) Spinning electron



Tính chất từ

■ Chất nghịch từ

- Lớp ngoài : “e” :



$$\mu_s = 0 \Rightarrow \mu = 0$$

- Đặt trong từ trường H

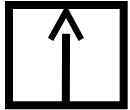
\xrightarrow{H} Vật liệu bị từ hóa : “e” thay đổi tốc độ góc

$$\Rightarrow \mu \neq 0 \Rightarrow \vec{\mu} \text{ định hướng } \vec{H}$$

\Rightarrow Làm yếu từ trường ngoài \Rightarrow

Tính chất từ

■ Chất thuận từ

- Lớp ngoài: “e” :  $ms \neq 0 \Rightarrow M \neq 0$

• Đặt trong từ trường H

Vật liệu bị từ hóa : “e” quay theo từ trường ngoài

\Rightarrow  định hướng 

\Rightarrow Làm tăng từ trường ngoài

=

4.4. Liên kết kim loại

■ Mô hình “khí electron”

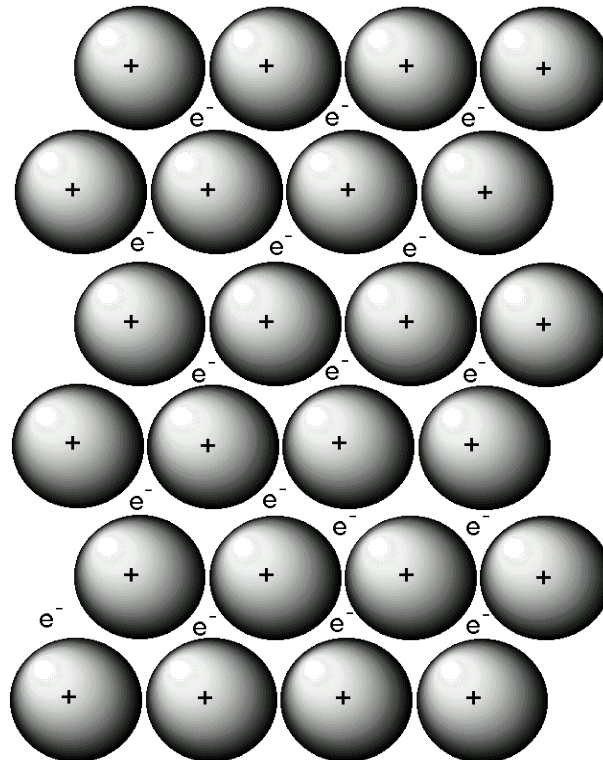
• Cơ chế

- Các đ.tử hóa trị liên kết yếu với hạt nhân Bứt khỏi lớp ngoài cùng \Rightarrow →
Hạt nhân: thừa điện tích dương → Ion (+)
(e) mang điện (-) ch.động tự do “Mây e”
- Lực hút tĩnh điện: Ion (+) hút \Leftrightarrow điện tử (-)
- Lực đẩy: Ion (+) đẩy \Leftrightarrow Ion (+)
 \Rightarrow Lực hút = Lực đẩy \Rightarrow Liên kết kim

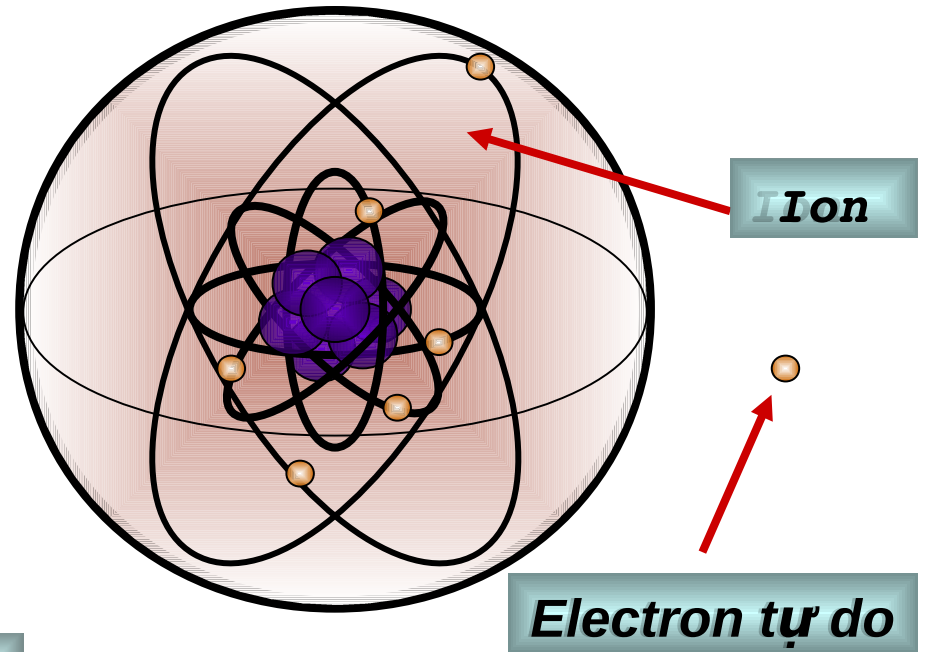
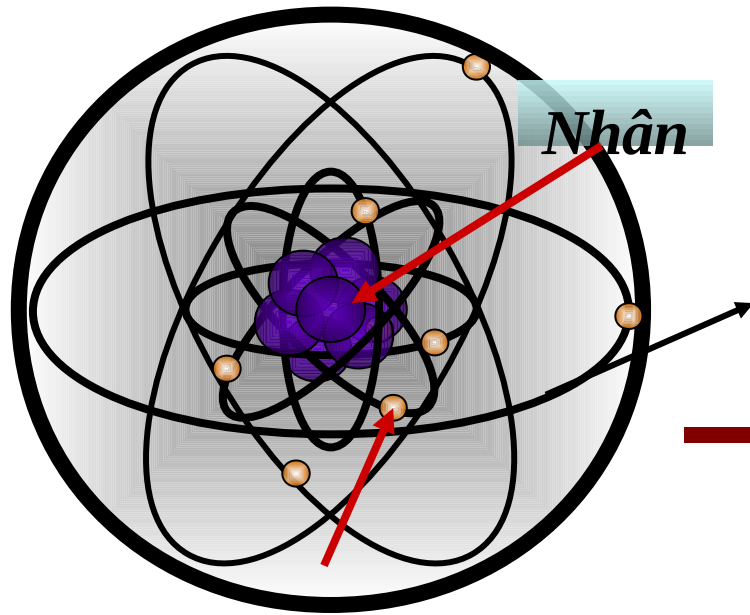
4.4. Liên kết kim loại

• Liên kết kim loại :

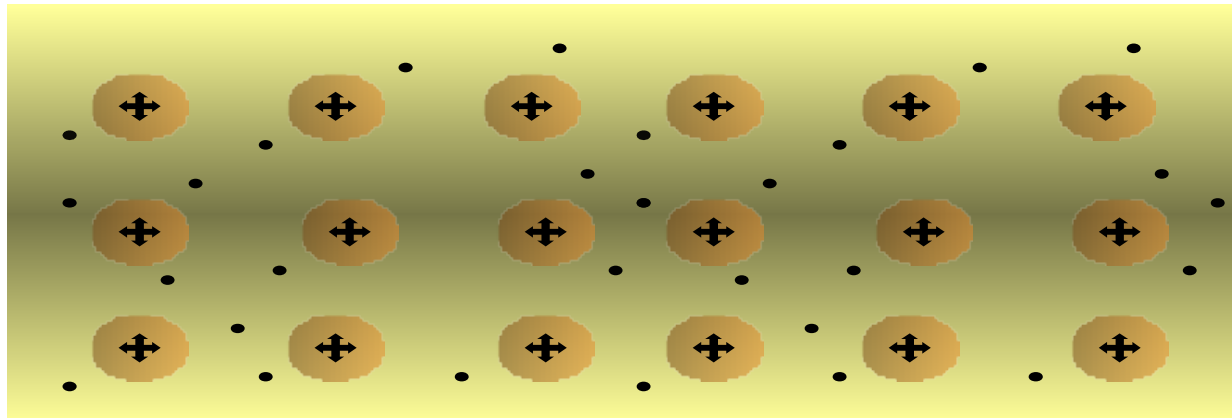
Liên kết nhiều tâm vì các khí “e” đồng thời thuộc về toàn bộ các nguyên tử



Nguyên tử tại nút mạng tinh thể



Electron trong nguyên tử



4.4. Liên kết kim loại

■ Đặc điểm:

➤ $E = 6-50 \text{ kJ/mol}$ (nhỏ) \Rightarrow Liên kết bền vững

➤ Tính không có hướng:

Ion (+) \approx quả cầu mang điện \rightarrow

Điện trường như nhau theo mọi phương :

-Hút các điện tử (**e**) tự do

-Đẩy các ion (+) xung quanh

➤ Tính không bão hòa: không hạn định số lượng

\Rightarrow Tập hợp các Ion (+) trong biển (**e**) tự do

\Rightarrow **Tinh thể kim loại**

4.4. Liên kết kim loại

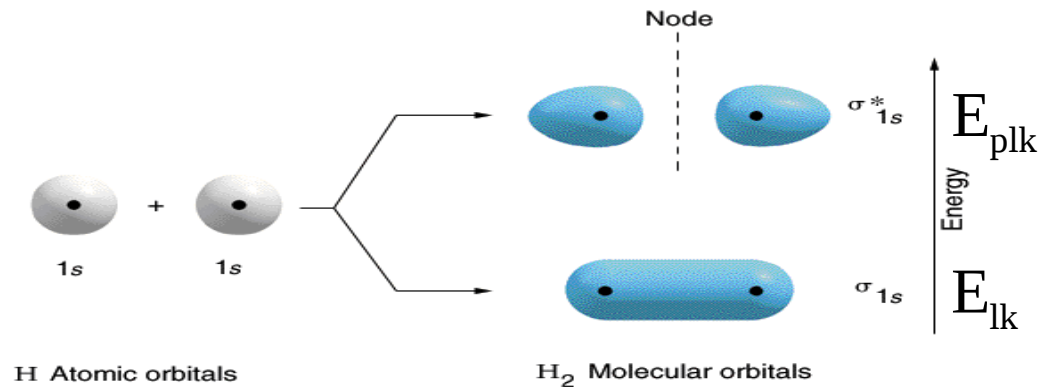
■ Mô hình dải năng lượng (Thuyết MO)

◆ 2 Ng.tử cùng loại gần nhau:: T/tác với nhau ở

1 MO liên kết có $E_{(lk)}$ thấp

1 MO phản liên kết có $E_{(plk)}$ cao

$\Delta E = E_{(plk)} - E_{(lk)}$ Miền cấm (hố năng lượng)



4.4. Liên kết kim loại

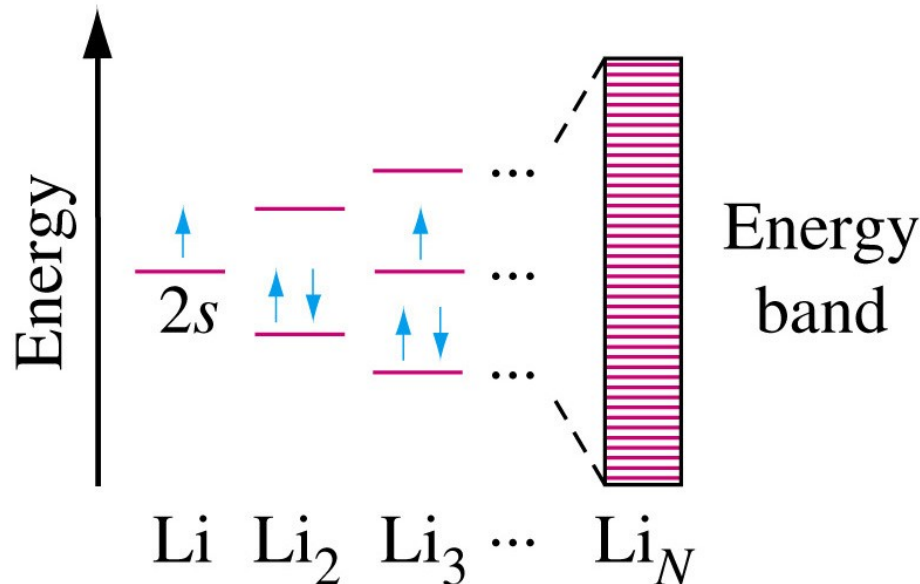
◆ **Hệ nhiều ngử** : 3, 4, 5...N ngửử Tương tác σ

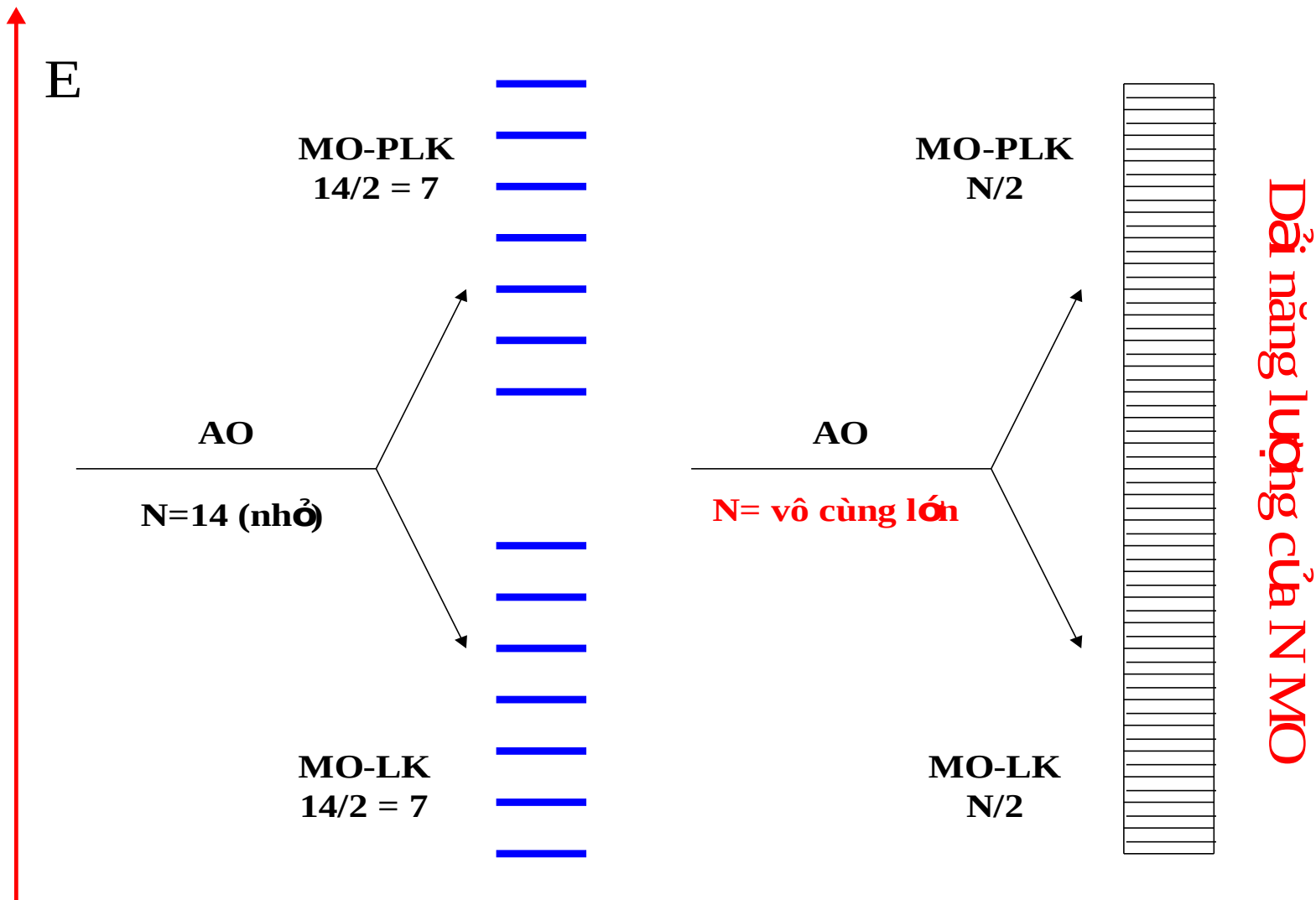
N/2 MO liên kết

N/2 MO phản liên kết

E : N mức liên tục ΔE : min **Dải năng**

lượng





Dải năng lượng của N MO

Dải năng lượng của các MO

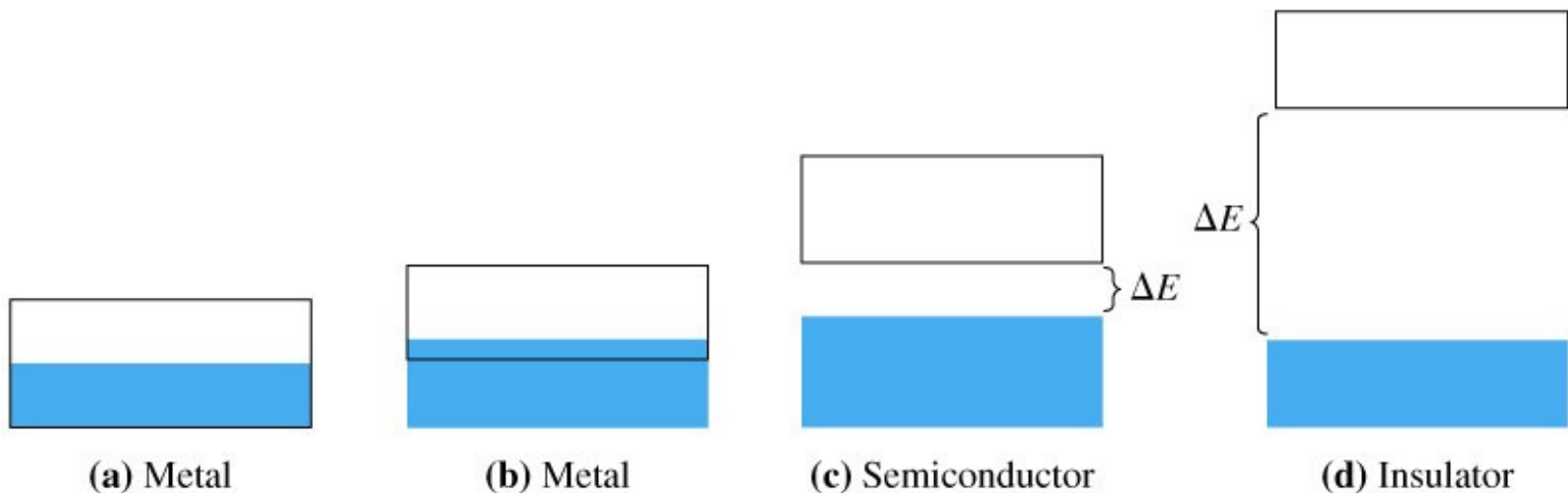
4.4. Liên kết kim loại

♦ Miền cấm ΔE :

Kim loại : ΔE rất nhỏ hay $\Delta E = 0$ eV

Chất bán dẫn: $\Delta E = 0.1 - 3$ eV

Chất cách điện : $\Delta E > 3$ eV



4.4. Liên kết kim loại

■ Tính chất:

➤ Lý tính :

Dẫn điện

Dẫn nhiệt

➤ Cơ tính

Tính đàn hồi

Tính dẻo

Tính chất khác :

Nhiệt dung ?

Ánh kim ?

4.5. Liên kết Hydro

■ Cơ chế:

- $\chi_{\text{H}} = 2.1 < \chi_{\text{F}} = 4 \rightarrow$

Mây điện tử H bị hút về phía F \rightarrow

H^+ & $\text{F}^- \rightarrow$ Liên kết cho-nhận

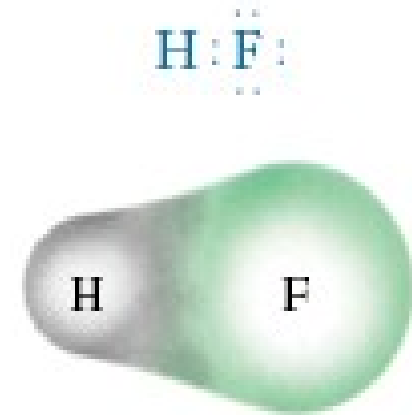
\Leftrightarrow Liên kết cộng hoá trị

- H : kích thước nhỏ \rightarrow

Chui vào vỏ F^- của $\text{HF} \neq$

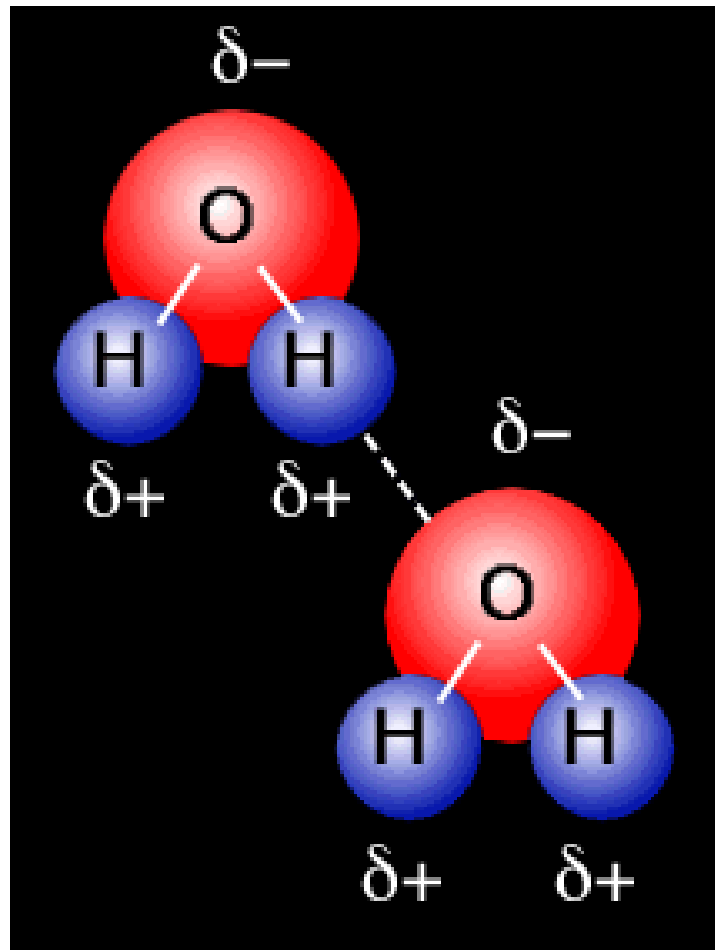
\Rightarrow Liên kết phụ (Liên kết bậc 2,

\Leftrightarrow Liên kết Hydro



4.5. Liên kết Hydro

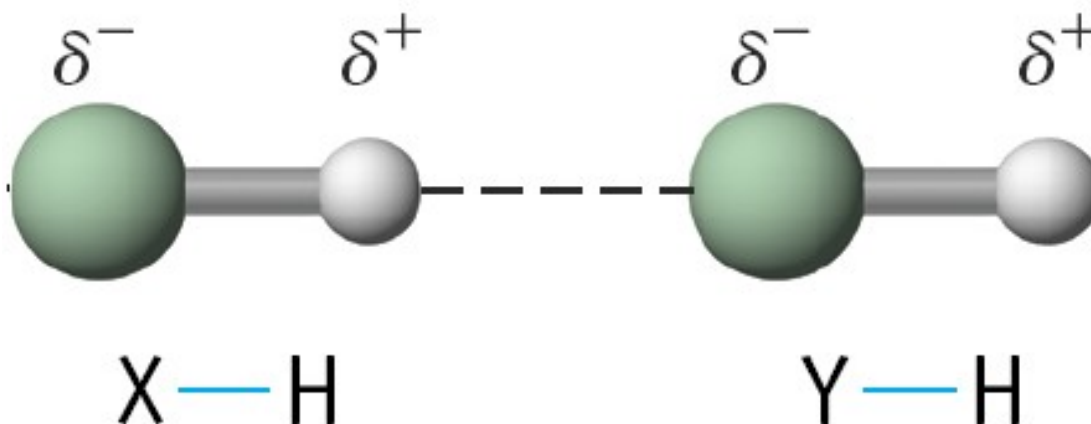
■ Ví dụ: liên kết hydro trong nước



4.5. Liên kết Hydro

▪ Điều kiện

- **X-H** : χ_x lớn ; X : F, O , N
- **Y-H**: Y có cặp “e” chưa sử dụng ; Y : F, O , N



“e” của H dịch chuyển về $X \rightarrow H^+$
H chui vào vỏ Y (anion) của phân tử Y-H

4.5. Liên kết Hydro

■ Phân loại

- **Liên kết hydro liên phân tử**

Tạo thành giữa các phân tử

- **Liên kết hydro nội phân tử**

Tạo thành trong 1 phân tử

4.5. Liên kết Hydro

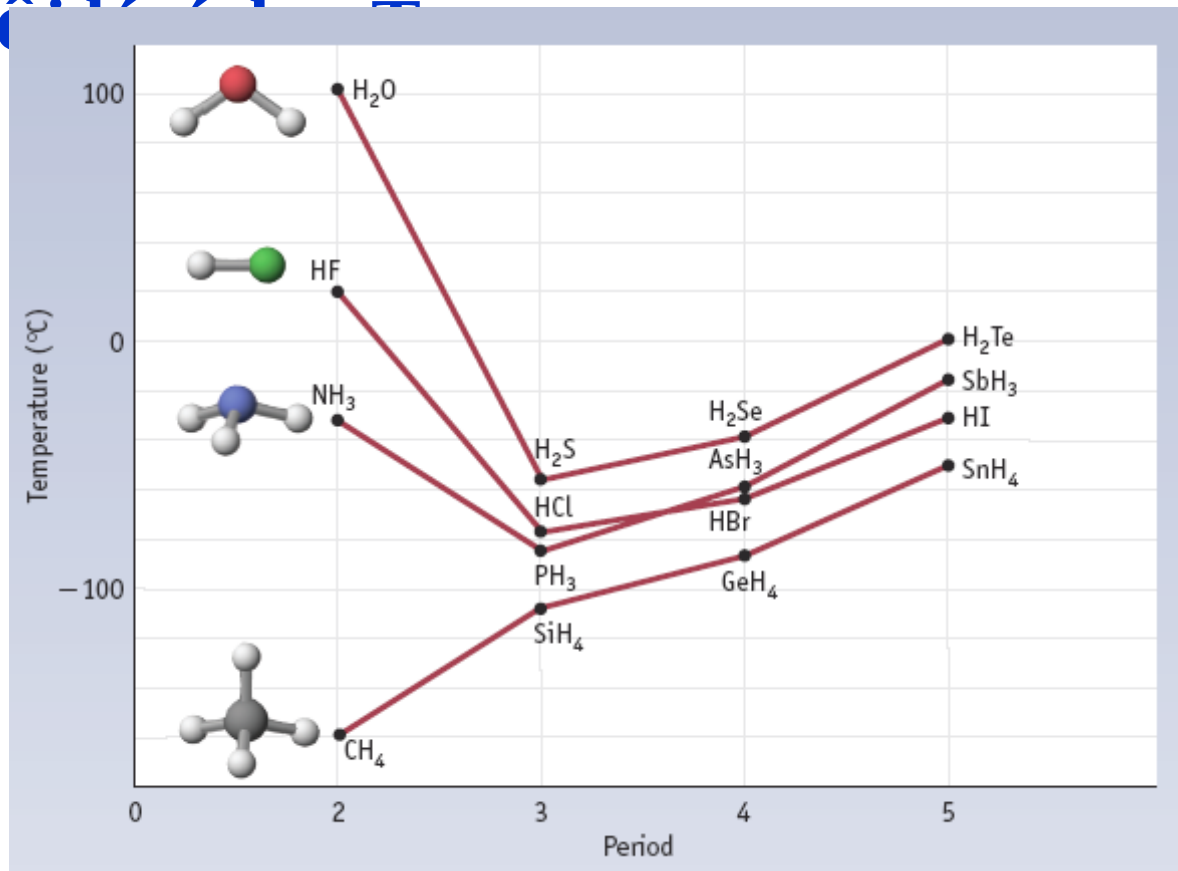
■ Đặc điểm:

➤ $E = 8-40 \text{ kJ/mol} < E_{\text{cộng}} \Rightarrow$ Liên kết yếu

➤ ➤ T Liên kết bị phá vỡ

4.5. Liên kết Hydro

- Ảnh hưởng liên kết hydro đến tính chất của các chất
- Biến đổi tính chất của các chất



4.5. Liên kết Hydro

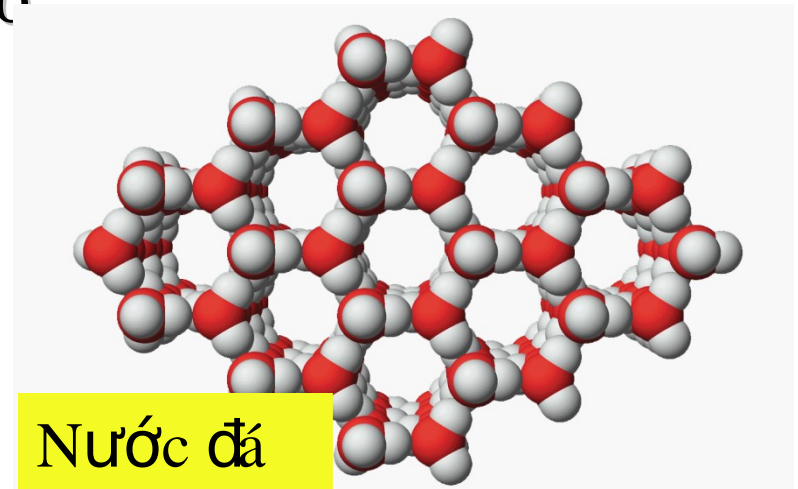
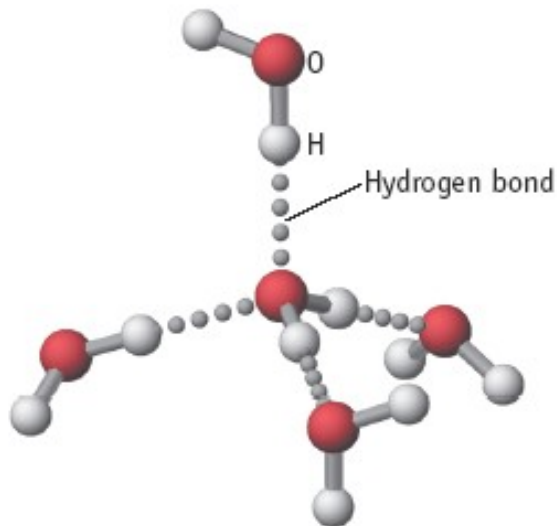
- **Thay đổi khối lượng riêng**

Nước : kết tinh : $d_R < d_L \rightarrow$ Đá nổi ?

Khi đá tan : $\uparrow V$???

Cấu trúc của H₂O : O liên kết 4 H

- 2H liên kết O \rightarrow Liên kết Cộng h. trị
- 2H liên kết O \rightarrow Liên kết hydro



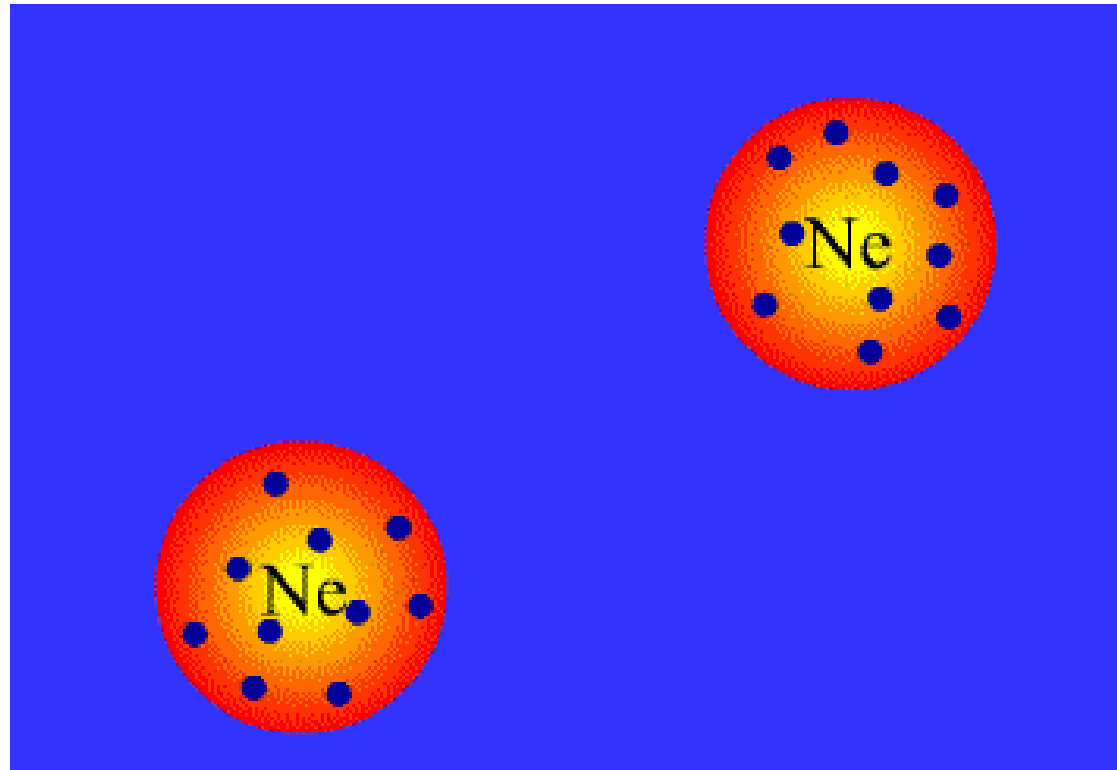
4.5. Liên kết Hydro

- **Ảnh hưởng liên kết hydro đến tính chất của các chất**
- **Biến đổi hoá tính**
 - Độ phân ly của axit : giảm**

 - Độ tan : tăng**
Ví dụ : Rượu + Nước : hoà tan vô hạn

4.6. Liên kết Van der Waals

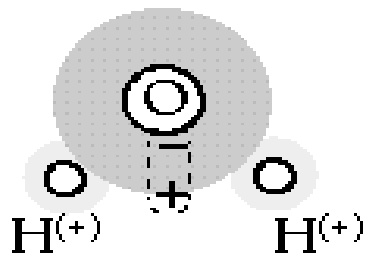
- **Khái niệm:** lực tương tác giữa các phân tử U_L lực Van der Waals



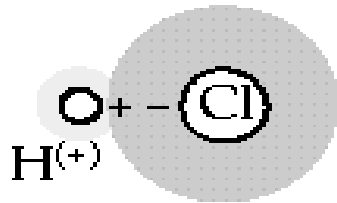
4.6. Liên kết Vandevan

■ **Cơ chế:** lực tương tác giữa các phân tử **U** lực Vandevan

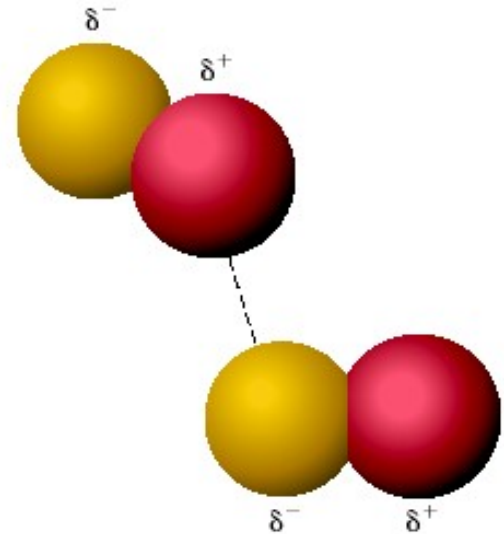
Ví dụ : H₂O , HCl



H₂O



HCl



4.6. Liên kết Vandevan

■ Các loại lực hút

● Lực định hướng

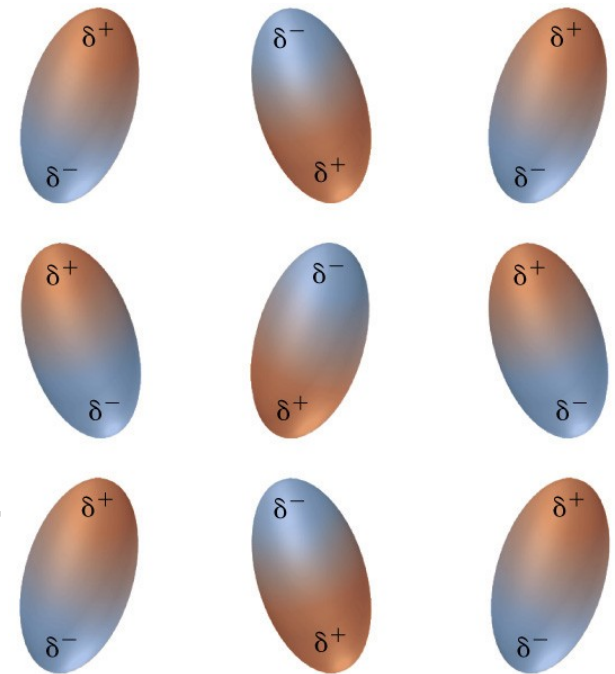
Tương tác giữa các phân tử có cực

$$E_{đh} = \frac{2\mu_1\mu_2}{r^3}$$

μ_1 – Momen lưỡng cực của phân tử 1

μ_2 – Momen lưỡng cực của phân tử 2

r- Khoảng cách giữa 2 phân tử



4.6. Liên kết Vandevan

● Lực cảm ứng

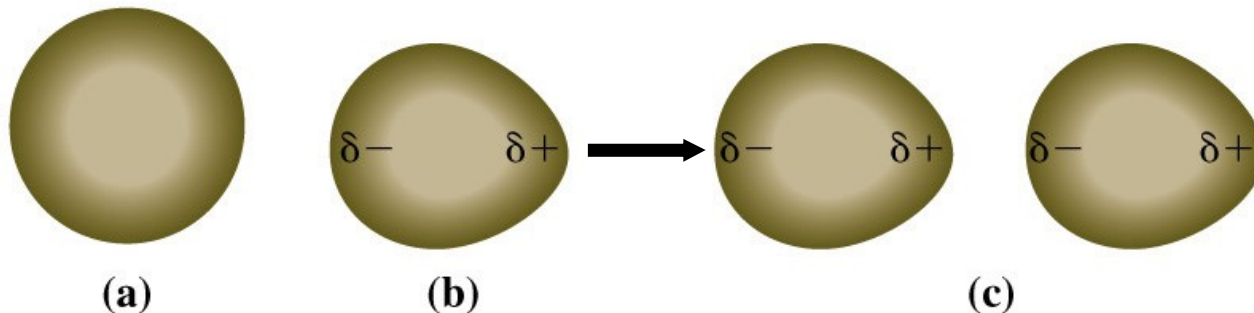
Tương tác giữa phân tử có cực & phân tử không cực

$$E_{cu} = \frac{2\alpha\mu^2}{r^6}$$

α – Độ phân cực của phân tử

μ – Momen lưỡng cực của phân tử có cực

r – Khoảng cách giữa 2 phân tử



4.6. Liên kết Vandevan

- Lực khuếch tán:**

Phân tử: không cực Chuyển động “e” Điện tích lệch khỏi vị trí cân bằng Lượng cực tạm thời

$$E_{kt} = \frac{3hv_o\alpha^2}{4r^6}$$

α – Độ phân cực của phân tử

v_o – Tần số dao động của lượng cực tạm thời

h – Hằng số Plank



4.6. Liên kết VandeVan

■ Lực đẩy:

Phân tử : gần nhau Mây điện tử : xen phủ nhau Phân tử đẩy nhau

$$E_d = \frac{m}{r^{12}}$$

m-Hằng số đẩy

4.6. Liên kết Vandevan

■ Đặc điểm:

➤ Năng lượng liên kết

$E = H_h + E_d < 40 \text{ kJ/mol}$ (nhỏ) < E_{hydro} => Liên kết yếu

Vì xuất hiện trên những khoảng cách lớn

➤ Tính không bão hoà