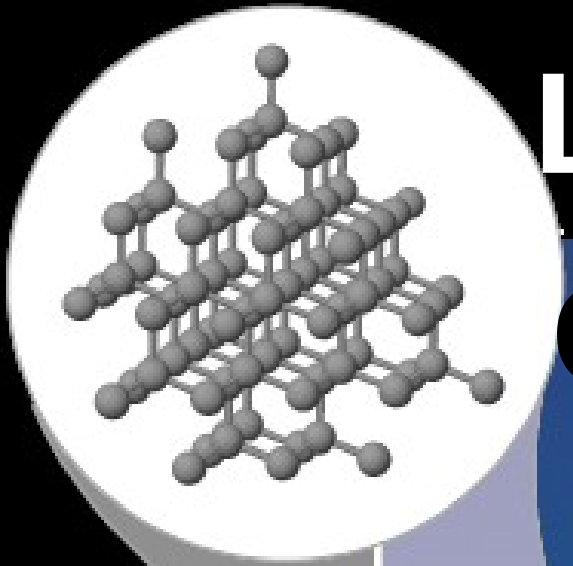
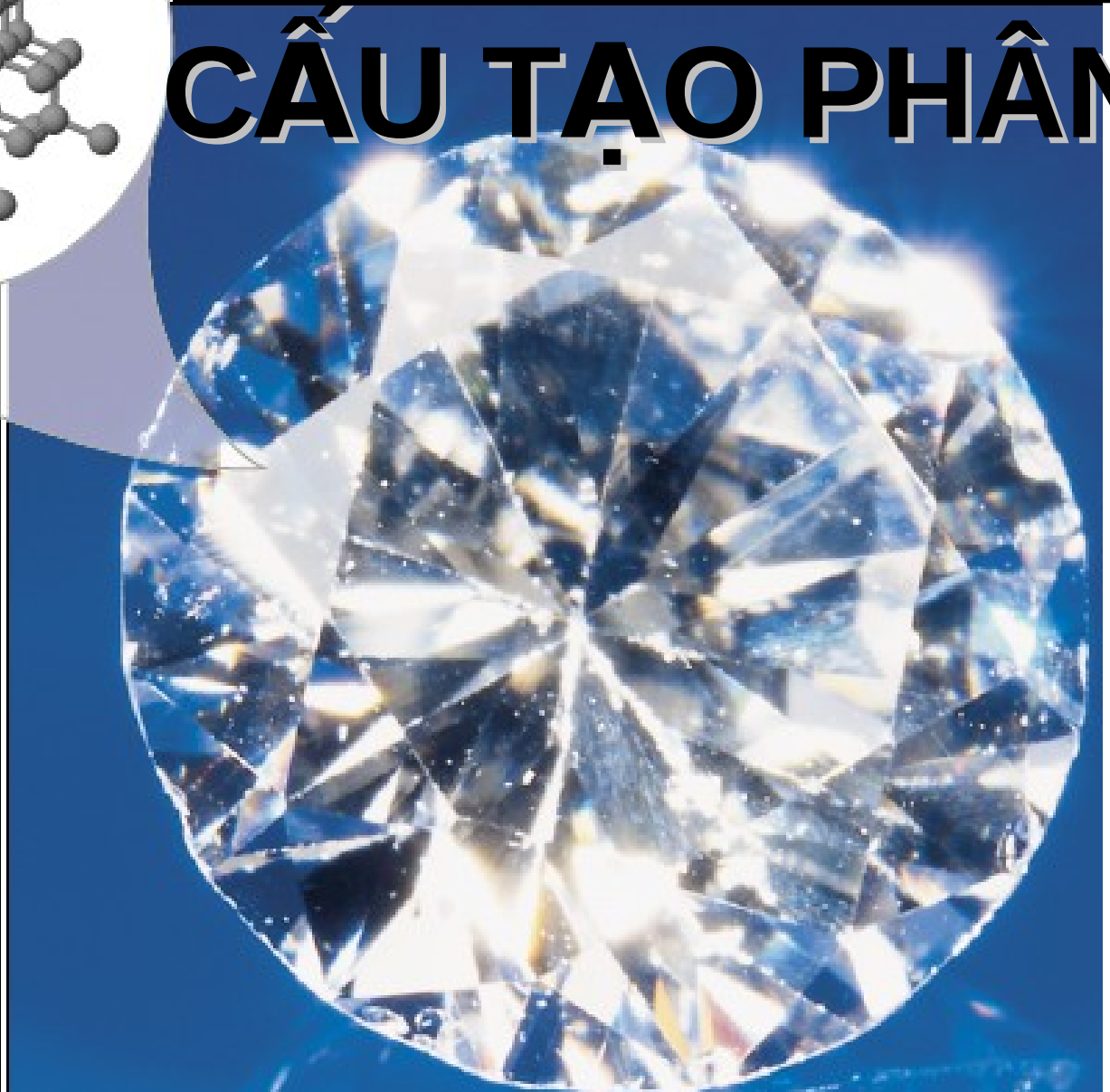


LIÊN KẾT HÓA HỌC

CẤU TẠO PHÂN TỬ



1. Năng lượng liên kết của e trong nguyên tử và ion

   1. Năng lượng ion hóa — I

   2. Ái lực với điện tử — A

2. Năng lượng liên kết trong phân tử, tinh thể và dung dịch

   1. Năng lượng mạng lưới ion — U_{ion}

   2. Năng lượng liên kết cộng hóa trị — E_{cht}

   3. Năng lượng liên kết kim loại — ΔH_a

   4. Năng lượng solvat hóa ion — ΔH_s

   5. Năng lượng liên kết yếu

      1. Năng lượng liên kết hydro — E_{hyd}

      2. Năng lượng tương tác Van der Waals — U

$$A(k) + B(k) \xrightarrow[E_{A-B}]{\Delta H^{o}_{298}} AB(k)$$

$$E_{A-B} = \Delta H^{o}_{298}$$

Phản ứng hóa học xảy ra do sự phá vỡ liên kết trong các chất tham gia phản ứng và tạo thành liên kết trong các sản phẩm phản ứng

$$2Na(r) + Cl_2(k) \xrightarrow{\Delta H} 2NaCl(r)$$

$$\Delta H = 2\Delta H_{a,Na} + E_{Cl-Cl} + 2I_{1,Na} + 2A_{Cl} + 2U_{NaCl}$$

Năng lượng ion hóa

$1\ eV = 1.6 \cdot 10^{-19}\ J$

Năng lượng ion hóa I_n [eV] là năng lượng cần *cung cấp* để tách 1 e ra khỏi nguyên tử ở *trạng thái cơ bản và ở thể khí*

$$I_n = f(Z, n, l, A\ldots)$$

Năng lượng ion hóa đặc trưng cho khả năng nhường e của kim loại (đo tính kim loại của nguyên tố). *I_n càng nhỏ* thì nguyên tử *càng dễ nhường e*

Ái lực với điện tử

Ái lực đối với electron E_n [ev] là năng lượng được *giải phóng* khi kết hợp 1 e vào nguyên tử ở *trạng thái cơ bản và ở thể khí*

ĐỘ ÂM ĐIỆN CỦA NGUYÊN TỐ ELECTRONEGATIVITY - EN χ

Đại lượng đặc trưng cho khả năng hút cặp e liên kết về phía mình

$$\left|\chi_A - \chi_B\right|^2 = 1,04 \cdot 10^{-2} \left(E_{P-AB} - \sqrt{E_{P-AA} E_{P-BB}} \right)$$

Thang Pauling:

- Xác định theo năng lượng liên kết
- Mang tính so sánh, chọn $\chi_F = 4$
- Không đơn vị

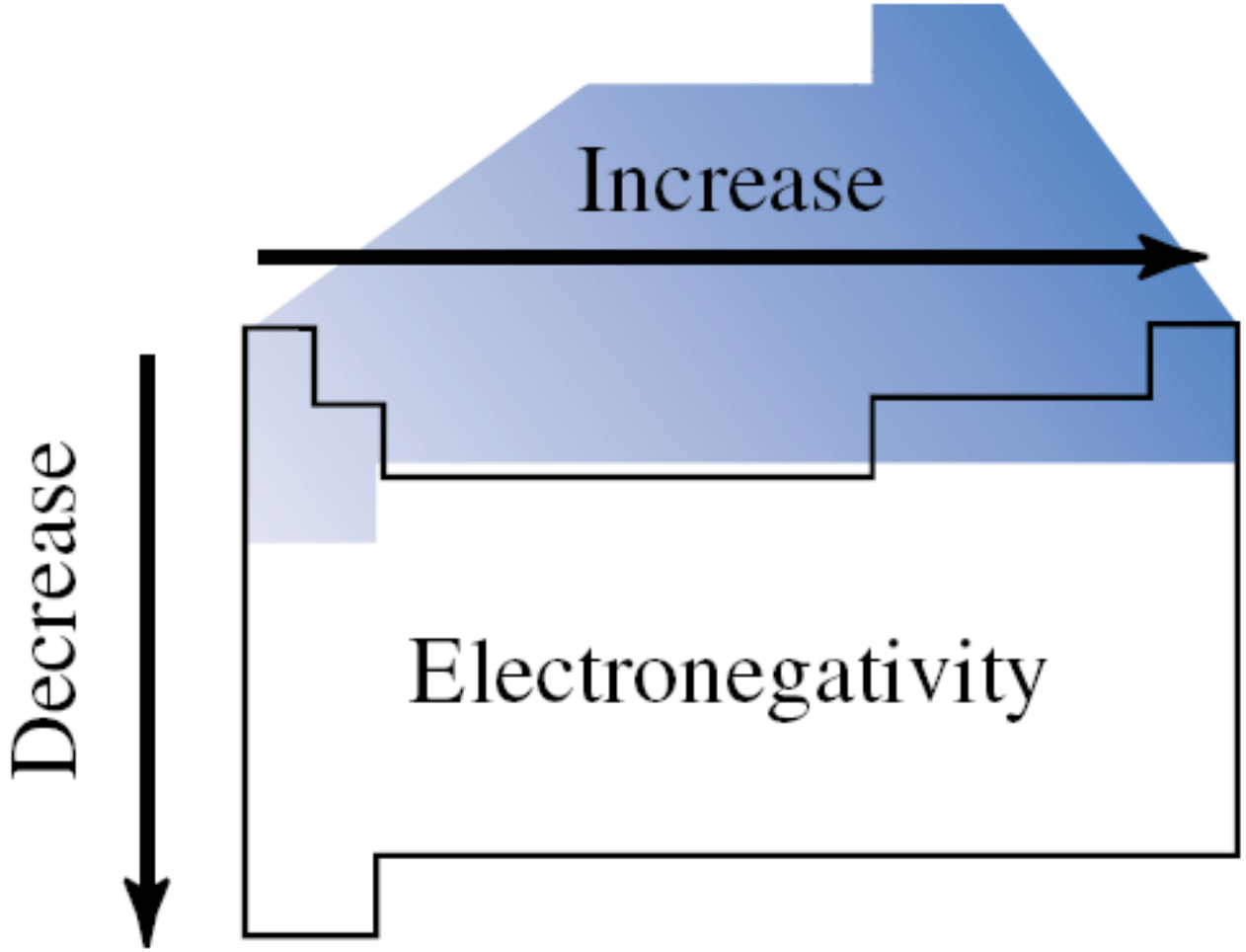
TABLE 6-3 *Electronegativity Values of the Elements*[a]

Metals
Nonmetals
Metalloids

	IA	IIA	IIIB	IVB	VB	VIB	VIIB	VIIIB			IB	IIB	IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	VIIIA
1	1 H 2.1																	2 He
2	3 Li 1.0	4 Be 1.5											5 B 2.0	6 C 2.5	7 N 3.0	8 O 3.5	9 F 4.0	10 Ne
3	11 Na 1.0	12 Mg 1.2											13 Al 1.5	14 Si 1.8	15 P 2.1	16 S 2.5	17 Cl 3.0	18 Ar
4	19 K 0.9	20 Ca 1.0	21 Sc 1.3	22 Ti 1.4	23 V 1.5	24 Cr 1.6	25 Mn 1.6	26 Fe 1.7	27 Co 1.7	28 Ni 1.8	29 Cu 1.8	30 Zn 1.6	31 Ga 1.7	32 Ge 1.9	33 As 2.1	34 Se 2.4	35 Br 2.8	36 Kr
5	37 Rb 0.9	38 Sr 1.0	39 Y 1.2	40 Zr 1.3	41 Nb 1.5	42 Mo 1.6	43 Tc 1.7	44 Ru 1.8	45 Rh 1.8	46 Pd 1.8	47 Ag 1.6	48 Cd 1.6	49 In 1.6	50 Sn 1.8	51 Sb 1.9	52 Te 2.1	53 I 2.5	54 Xe
6	55 Cs 0.8	56 Ba 1.0	57 La 1.1	*	72 Hf 1.3	73 Ta 1.4	74 W 1.5	75 Re 1.7	76 Os 1.9	77 Ir 1.9	78 Pt 1.8	79 Au 1.9	80 Hg 1.7	81 Tl 1.6	82 Pb 1.7	83 Bi 1.8	84 Po 1.9	85 At 2.1	86 Rn
7	87 Fr 0.8	88 Ra 1.0	89 Ac 1.1	†														

*	58 Ce 1.1	59 Pr 1.1	60 Nd 1.1	61 Pm 1.1	62 Sm 1.1	63 Eu 1.1	64 Gd 1.1	65 Tb 1.1	66 Dy 1.1	67 Ho 1.1	68 Er 1.1	69 Tm 1.1	70 Yb 1.0	71 Lu 1.2
†	90 Th 1.2	91 Pa 1.3	92 U 1.5	93 Np 1.3	94 Pu 1.3	95 Am 1.3	96 Cm 1.3	97 Bk 1.3	98 Cf 1.3	99 Es 1.3	100 Fm 1.3	101 Md 1.3	102 No 1.3	103 Lr 1.5

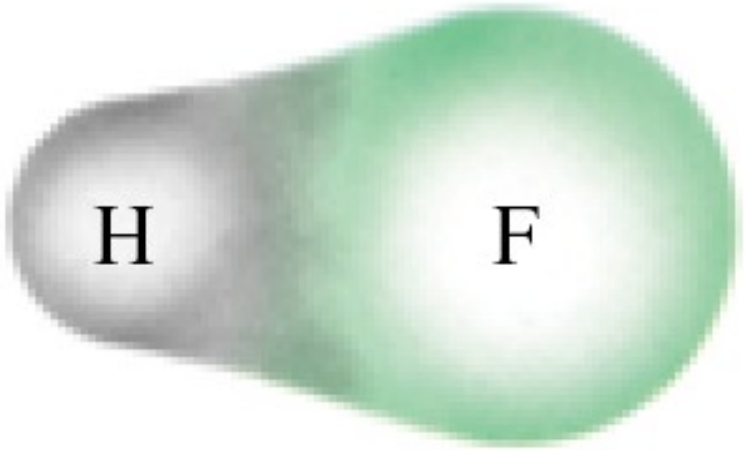
[a] *Electronegativity values are given at the bottoms of the boxes.*



General trends in electronegativities of A group elements with position in the periodic table.

Ứng dụng của độ âm điện

- Dự đoán liên kết: liên kết ion, liên kết cộng hóa trị không cực, liên kết cộng hóa trị có cực
- Ảnh hưởng đến độ phân cực liên kết, đặc tính ion của liên kết, góc liên kết



Ionic Compounds

1. They are solids with high melting points (typically >400°C).
2. Many are soluble in polar solvents such as water.
3. Most are insoluble in nonpolar solvents, such as hexane, C_6H_{14}, and carbon tetrachloride, CCl_4.
4. Molten compounds conduct electricity well because they contain mobile charged particles (ions).
5. Aqueous solutions conduct electricity well because they contain mobile charged particles (ions).
6. They are often formed between two elements with quite different electronegativities, usually a metal and a nonmetal.

Covalent Compounds

1. They are gases, liquids, or solids with low melting points (typically <300°C).
2. Many are insoluble in polar solvents.
3. Most are soluble in nonpolar solvents, such as hexane, C_6H_{14}, and carbon tetrachloride, CCl_4.
4. Liquid and molten compounds do not conduct electricity.
5. Aqueous solutions are *usually* poor conductors of electricity because most do not contain charged particles.
6. They are often formed between two elements with similar electronegativities, usually nonmetals.

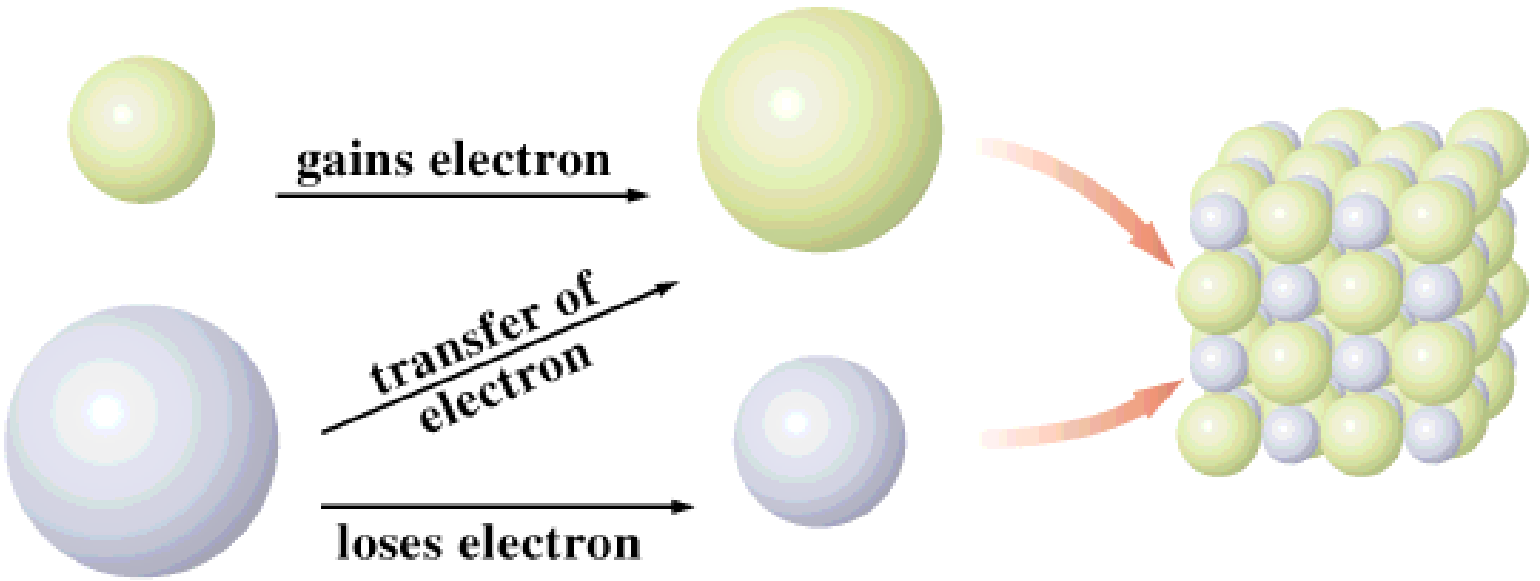
LIÊN KẾT ION

Ion formation

Chlorine atom (Cl)
$17e^-$
17p
18n

Chlorine ion (Cl^-)
$18e^-$
17p
18n

Sodium chloride (NaCl)
crystal lattice
containing Na^+
and Cl^- ions



Sodium atom (Na)
$11e^-$
11p
12n

Sodium ion (Na^+)
$10e^-$
11p
12n

Harcourt Brace & Company items and derived items copyright ©1998 by Harcourt Brace & Company

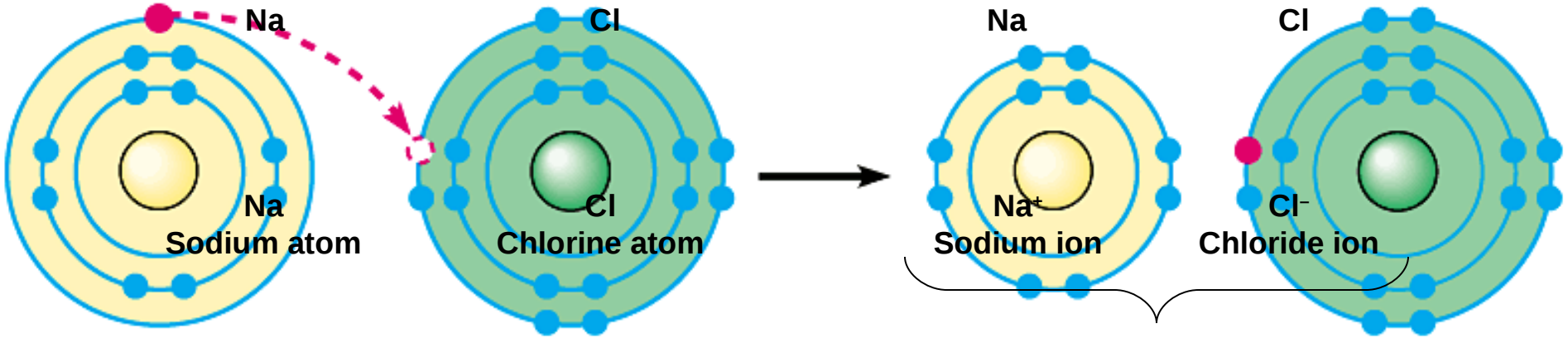
MR03_01.PIC

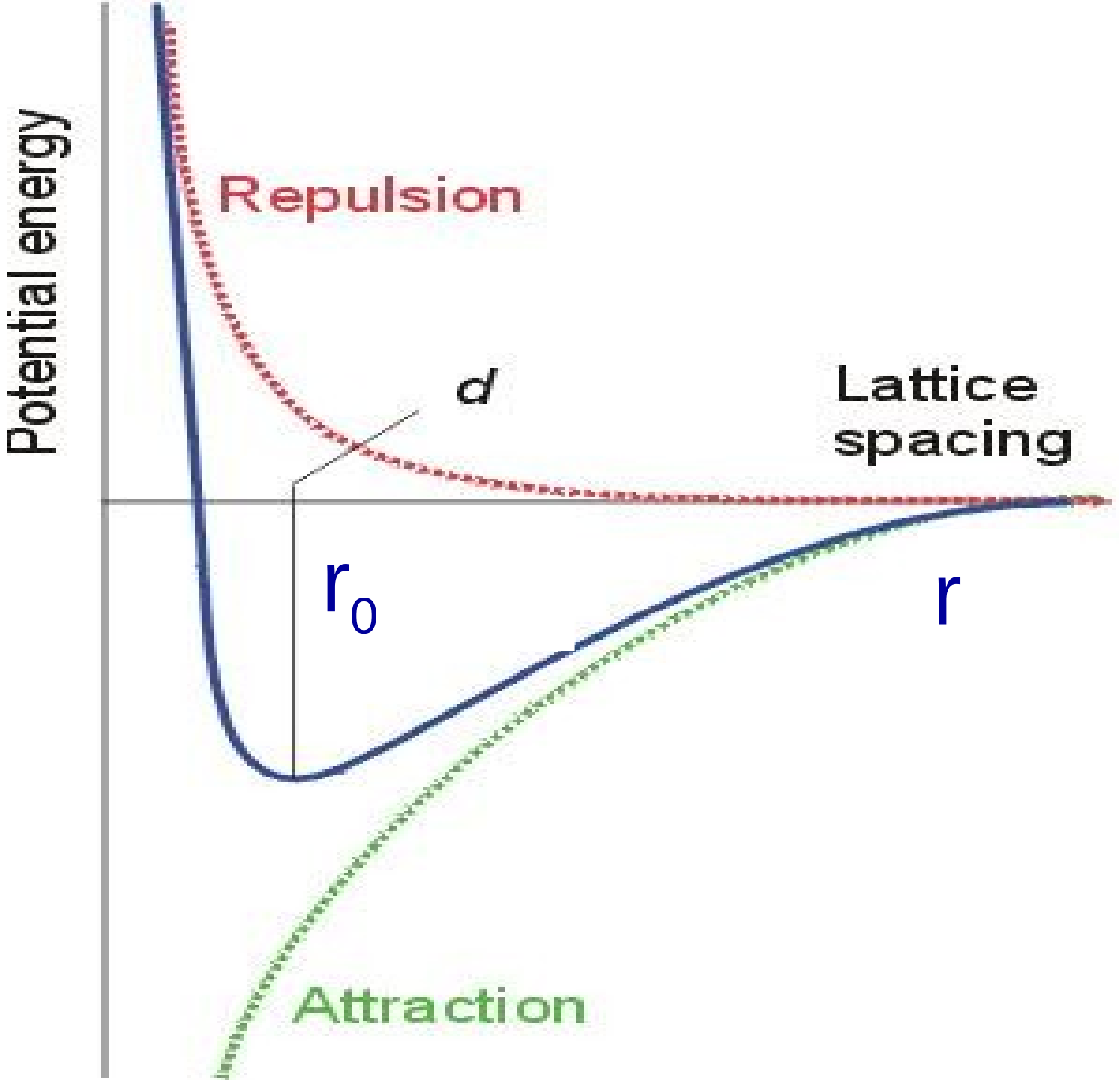
Ionic bond formation involves three steps

1. One atom loses electron(s) to become a ***cation.***

2. Another atom gains the electron(s) and becomes an ***anion.***

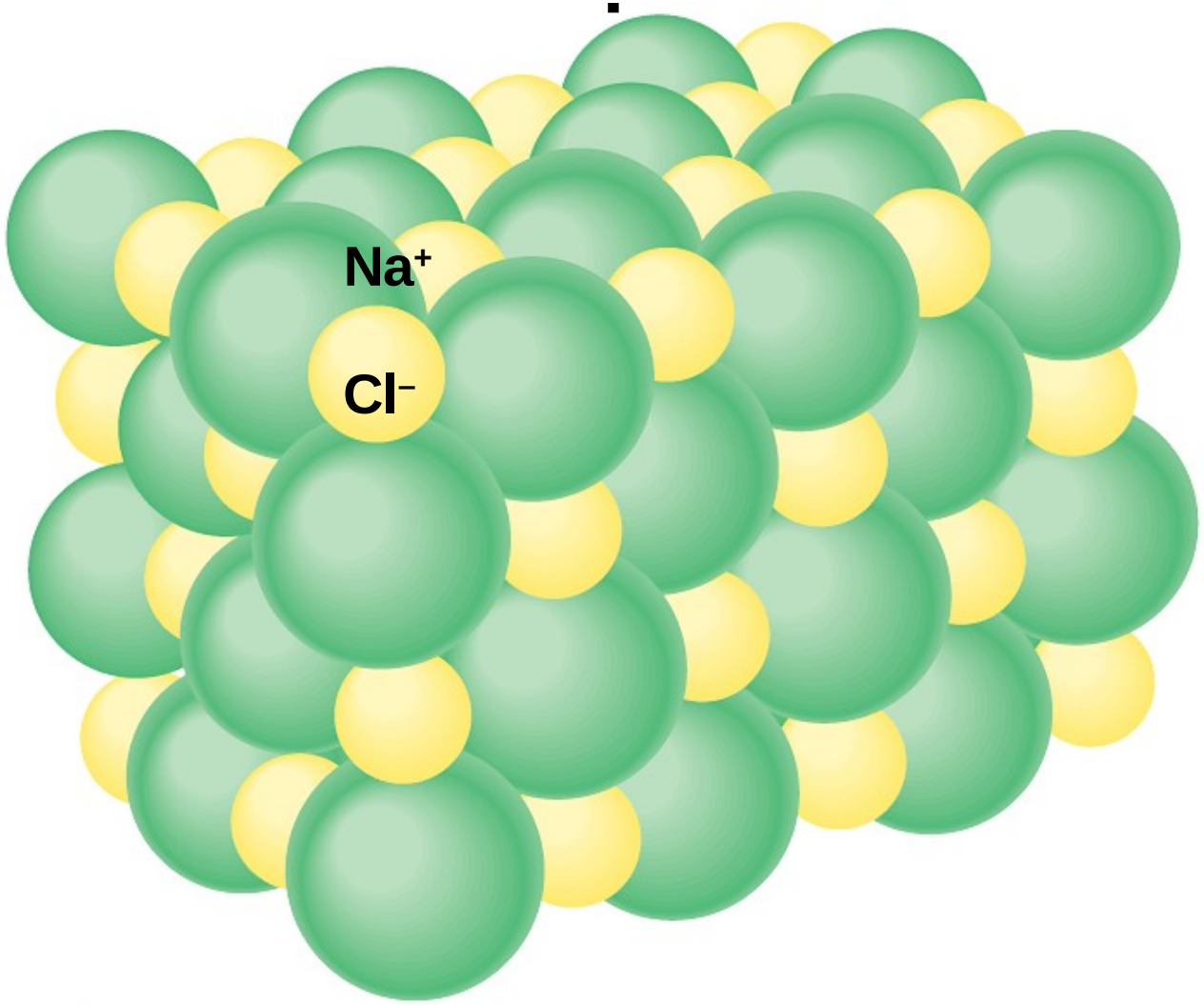
3. The opposite charges draw the two ions together like a magnet.




Potential energy
Repulsion
d
Lattice spacing
r_0
r
Attraction

ĐẶC ĐIỂM LIÊN KẾT ION

- KHÔNG CÓ TÍNH BÃO HÒA
- KHÔNG CÓ TÍNH ĐỊNH HƯỚNG



-Các nguyên tử có xu hướng mất hoặc thu vài e để có cấu hình e bền của nguyên tử khí trơ ngay trước hoặc sau trong bảng tuần hoàn.

-Phân tử được tạo thành bởi sự chuyển e hóa trị từ nguyên tử này sang nguyên tử kia.

-Nguyên tử mất e biến thành ion dương – cation.

-Nguyên tử nhận e biến thành ion âm – anion.

-Các ion mang điện tích trái dấu sẽ hút nhau và đi lại gần nhau.

-Khi đến gần nhau, xuất hiện lực đẩy bởi tương tác của vỏ e của các ion.

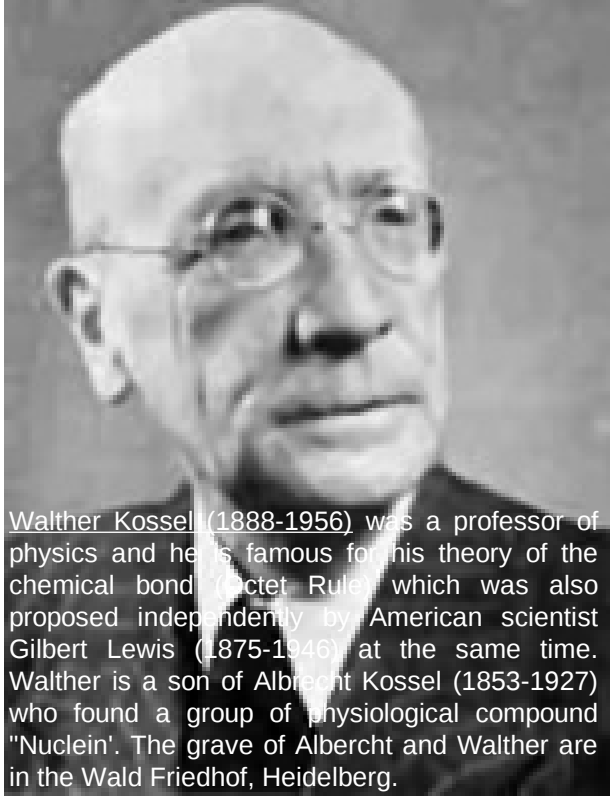
-Lực đẩy càng tăng khi các ion càng lại gần nhau và đến lúc cân bằng với lực hút thì các ion dừng lại ở khoảng cách nhất định.

-Tương tác giữa các ion trong phân tử là tương tác tĩnh điện

Năng lượng mạng lưới ion U_{ion}

1916 – Mô hình nguyên tử của Born được chấp nhận

Walther Kossel (1888-1956) nhà vật lý người Đức đã liên hệ vấn đề liên kết giữa các nguyên tử với cấu hình e của chúng → Hợp chất Ion → kiểu liên kết hóa học trong các hợp chất ion gọi là liên kết ion hay còn gọi là liên kết dị cực



Walther Kossel (1888-1956) was a professor of physics and he is famous for his theory of the chemical bond (Octet Rule) which was also proposed independently by American scientist Gilbert Lewis (1875-1946) at the same time. Walther is a son of Albrecht Kossel (1853-1927) who found a group of physiological compound "Nuclein'. The grave of Albercht and Walther are in the Wald Friedhof, Heidelberg.

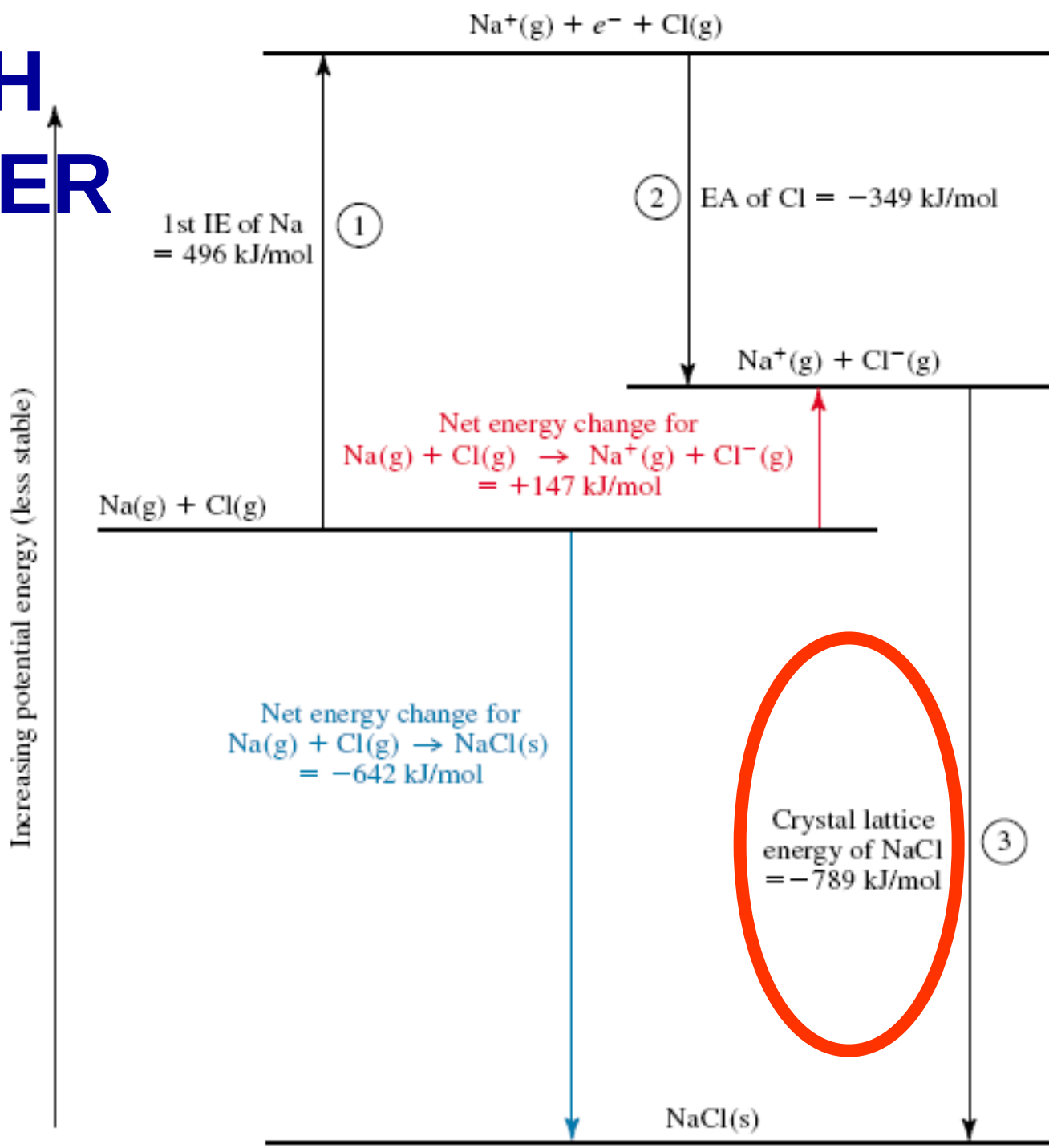
$$Na^{\cdot} + \cdot\ddot{\underset{\cdot\cdot}{Cl}}: \rightarrow Na^{+} + :\ddot{\underset{\cdot\cdot}{Cl}}:$$

$2s^2\,2p^6\,3s^1 \qquad 2s^2\,2p^6\,3s^2\,3p^5 \qquad 2s^2\,2p^6 \qquad 3s^2\,3p^6$

$$:\ddot{\underset{\cdot\cdot}{Cl}}^{\cdot} + {}^{\cdot}Mg^{\cdot} + {}^{\cdot}\ddot{\underset{\cdot\cdot}{Cl}}: \rightarrow :\ddot{\underset{\cdot\cdot}{Cl}}:^{-} + Mg^{2+} + :\ddot{\underset{\cdot\cdot}{Cl}}:^{-}$$

$3s^2\,3p^5 \qquad 2s^2\,2p^6\,3s^2 \qquad 3s^2\,3p^5 \qquad 3s^2\,3p^6 \qquad 2s^2\,2p^6 \qquad 3s^2\,3p^6$

CHU TRÌNH BORN-HABER



U_{ion} là năng lượng cần thiết *để tạo* 1 mol hợp chất ion ở thể rắn từ các ion tự do ở *trạng thái khí và cơ bản*

PHƯƠNG TRÌNH BORN-LANDÉ

$$U_{ion} = -\frac{Z_+ Z_- e^2}{4\pi\varepsilon_o R}\left(1 - \frac{1}{n_B}\right)\alpha N \quad \left[J/mol\right]$$

Z_+, Z_- – số điện tích của cation và anion mang

e – điện tích của electron, e = $-1.602 \cdot 10^{-19}$ [C]

R – khoảng cách ngắn nhất giữa cation và anion [m]

N – số Avogadro

α – hằng số Madelung có giá trị phụ thuộc cấu trúc tinh thể

α_{NaCl} (bcc) = 1.7475 α_{CsCl} (fcc) = 1.763

n_B – hệ số đẩy Born, giá trị phụ thuộc vào cấu hình e của ion

$n_{B\ -\ He, Ne, Ar, Kr, Xe}$ = 5, 7, 9, 10, 12

PHƯƠNG TRÌNH BORN-LANDÉ

$$U_{ion} = -\frac{Z_+ Z_- e^2}{4\pi\varepsilon_o R}\left(1 - \frac{1}{n_B}\right)\alpha N \quad \left[J/mol\right]$$

$$U_{ion} = -K\frac{Z_+ Z_- e^2}{R}\left(1 - \frac{1}{n_B}\right)\alpha N \quad \left[J/mol\right]$$

K = $9 \cdot 10^{-19}$

R = $r_+ + r_-$ [Å]

Phương trình Kapustinskii

$$U_{ion} = -K' \frac{Z_+ Z_- n}{R} \left(1 - \frac{0,345}{R} \right) \left[kJ / mol \right]$$

n – số ion trong một phân tử

K’ = 1202

Tinh thể	U_{ion} – Thực nghiệm [kJ/mol]		U_{ion} – Lý thuyết [kJ/mol]
NaCl	769		783
NaBr	736		745
NaI	690		673
KCl	702		688
KBr	674		658
KI	637		619
AgF	954		861
AgCl	904	Tồn tại 1 phần liên kết cộng hóa trị	729
AgBr	895	→ $R < r_+ + r_-$	696
AgI	883	→ $U_{ion\text{-}TN} > U_{ion\text{-}LT}$	652

QUAN HỆ PAULING

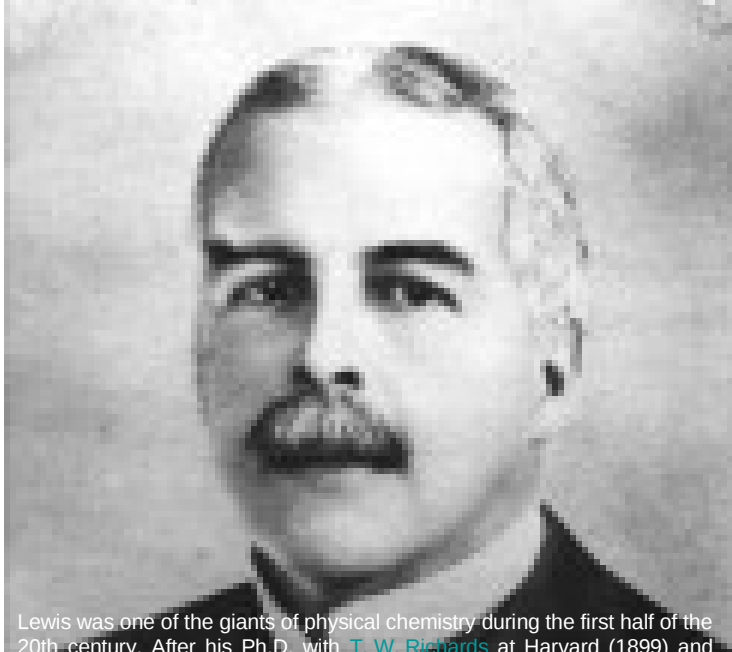
$\Delta\chi$	ĐẶC TÍNH ION
• 1,0	20%
• 1,5	40%
• 2,0	60%
• 2,5	80%

LIÊN KẾT CỘNG HÓA TRỊ

$$A(k) + B(k) \xrightarrow[E_{A-B}]{\Delta H^o_{298}} AB(k)$$

- Năng lượng liên kết
- Năng lượng liên kết trung bình
- E_{CHT} càng lớn thì liên kết càng bền
- Độ dài liên kết càng lớn thì liên kết càng kém bền
- Độ bội càng lớn thì LK càng bền

1916 **Gilbert Newton Lewis** (1875-1946) nhà hóa học người Mỹ xuất phát từ chỗ các nguyên tử có xu hướng đạt đến cấu hình e bền của khí trơ nhưng cho rằng liên kết được tạo thành bởi sự cho-nhận của e hóa trị của các nguyên tử tham gia liên kết để tạo thành các cặp e chung giữa hai nguyên tử.



Lewis was one of the giants of physical chemistry during the first half of the 20th century. After his Ph.D. with T. W. Richards at Harvard (1899) and brief periods on the faculty there and at MIT he went in 1912 to the University of California, Berkeley where he transformed the chemistry department from one which paid little attention to research to one of the pre-eminent departments in the country. He is most known for his research in thermodynamics (his 1923 book with Randall became the "bible" in the field), his proposal of the shared electron pair bond (summarized in his 1923 book "Valence and the Structure of Atoms and Molecules"), his description of acids and bases as electron-pair acceptors and donors, and for his researches on fluorescence, phosphorescence and theories of color in organic molecules. Lewis was always personally active in the laboratory, and it was while working there that he suddenly died.

→ Liên kết cộng hóa trị hay liên kết nguyên tử

→ Liên kết không cực: cặp e liên kết chung có mức độ như nhau với từng nguyên tử, Cl_2.

→ Liên kết có cực: cặp e liên kết chung bị dịch về một trong hai nguyên tử, HCl.

→Liên kết càng bền thì năng lượng liên kết càng lớn.

LEWIS STRUCTURE

- Giữa 2 nguyên tử trong phân tử có các gạch liên kết — mỗi gạch tương ứng với 1 cặp e tạo liên kết
- Xung quanh các nguyên tử có các điểm • mỗi điểm tương ứng với 1 e chưa liên kết
- Lớp e hóa trị có tối đa 8e (đạt cấu hình e của khí hiếm bền, riêng H có 2e)
- Với nguyên tố có AO-d và f, lớp e hóa trị có thể mở rộng vượt quá 8e, PF_5, SF_6, IF_7
- Nguyên tử trung tâm có cặp e liên kết **bp**-bonding pair, và cặp e chưa liên kết **lb**–lone pair

$$S = N - A$$

- S – tổng số e ghép đôi khi tạo liên kết
- N – tổng số e hóa trị cần để tất cả các nguyên tử trong liên có cấu hình khí hiếm bền
- A – tổng số e hóa trị của tất cả các nguyên tử trong liên kết

$$N = 2 \times 8 \text{ (for two F atoms)} = 16\ e^- \text{ needed}$$

$$A = 2 \times 7 \text{ (for two F atoms)} = 14\ e^- \text{ available}$$

$$S = N - A = 16 - 14 = 2\ e^- \text{ shared}$$

The Lewis formula for F_2 shows 14 valence electrons total, with 2 e^- shared in a single bond.

$$N = 2 \times 2 \text{ (for two H atoms)} + 1 \times 8 \text{ (for one O atom)} = 12\ e^- \text{ needed}$$

$$A = 2 \times 1 \text{ (for two H atoms)} + 1 \times 6 \text{ (for one O atom)} = 8\ e^- \text{ available}$$

$$S = N - A = 12 - 8 = 4\ e^- \text{ shared}$$

The Lewis formula for H_2O shows 8 valence electrons total, with a total of 4 e^- shared, 2 e^- in each single bond.

$$N = 1 \times 8 \text{ (for one C atom)} + 2 \times 8 \text{ (for two O atoms)} = 24\ e^- \text{ needed}$$

$$A = 1 \times 4 \text{ (for one C atom)} + 2 \times 6 \text{ (for two O atoms)} = 16\ e^- \text{ available}$$

$$S = N - A = 24 - 16 = 8\ e^- \text{ shared}$$

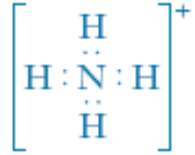
The Lewis formula for CO_2 shows 16 valence electrons total, with a total of 8 e^- shared, 4 e^- in each double bond.

The 1+ ionic charge is due to a *deficiency* of one e^- relative to the neutral atoms.

$$N = 1 \times 8 \text{ (for one N atom)} + 4 \times 2 \text{ (for four H atoms)} = 16\ e^- \text{ needed}$$

$$A = 1 \times 5 \text{ (for one N atom)} + 4 \times 1 \text{ (for four H atoms)} - 1 \text{ (for 1+ charge)} = 8\ e^- \text{ available}$$

$$S = N - A = 16 - 8 = 8\ e^- \text{ shared}$$

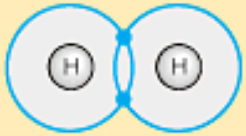
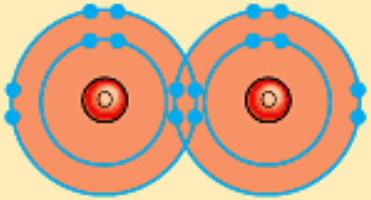
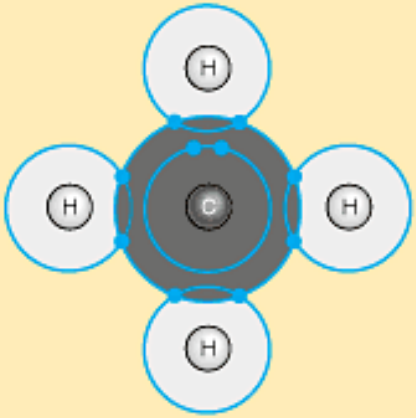
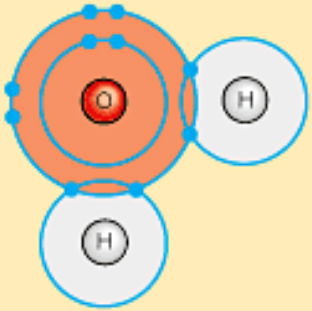


The Lewis formula for NH_4^+ shows 8 valence electrons total, with all 8 e^- shared, 2 e^- in each single bond.

The following general steps describe the use of the $S = N - A$ relationship in constructing dot formulas for molecules and polyatomic ions.

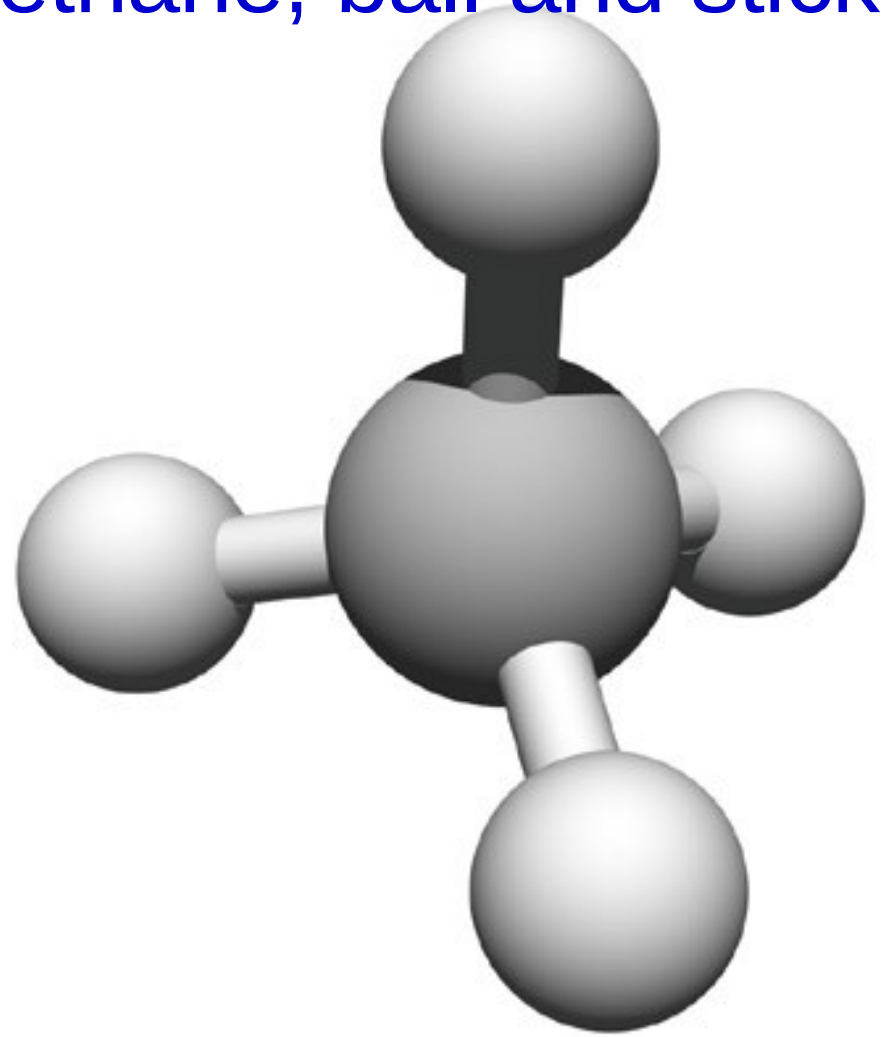
Covalent Bonds

ALTERNATIVE WAYS TO REPRESENT MOLECULES

Molecular Formula	Electron Configuration	Structural Formula
H_2		H—H Single bond
O_2		O═O Double bond
CH_4 Methane		H H—C—H H
H_2O Water		O—H H

Covalent Bonds

Methane, ball and stick model



Phân tử	E_{A-A} [kJ/mol]
Li_2	107
Na_2	71
K_2	50
Rb_2	46
Cs_2	43
F_2	159
Cl_2	242
Br_2	192
I_2	150
N_2	942
O_2	494
H_2	435
HF	560
HCl	426
HBr	364
HI	293
NO	627
CO	1070

1. Phân tử tương tự nhau có năng lượng liên kết khá gần nhau.
2. Phân tử kim loại kiềm: E_{cht} khá bé, giảm khi Z tăng.
3. Phân tử halogen: E_{cht} lớn hơn, giảm dần khi Z tăng.
4. E_{cht} của các nguyên tố đứng cạnh nhau trong chu kỳ chênh lệnh nhau nhiều (N_2, O_2, F_2) do độ bội liên kết khác nhau (p = 3, 2, 1)

$$C(k,cb)+4H(k,cb) \xrightarrow[?E_{C-H}]{\Delta H_{PU}=-1659kJ} CH_4(k,cb)$$

$$E_{C-H}=-\frac{1659}{4}=-414 \quad kJ/mol$$

E_{C-H} trên chỉ là năng lượng trung bình của mội liên kết C-H trong CH_4.

Thực tế E cần làm đứt lần lượt từng liên kết C-H trong CH_4 là ***426, 367, 517 và 334 kJ/mol***.

Khi làm đứt từng liên kết trong AB_n sẽ làm biến đổi cấu hình e và hạt nhân của hệ → làm biến đổi năng lượng tương tác của các nguyên tử trong phân tử.

CH_4 có góc liên kết HCH là $109^o28'$, khi tách 1 H thành CH_3 thì góc HCH là 120^o → cấu tạo tứ diện của phân tử CH_4 biến thành cấu tạo tam giác của nhóm CH_3

H_2O: năng lượng cần làm đứt liên kết O-H thứ nhất và thứ hai tương ứng là ***493 và 426 kJ/mol***, còn năng lượng liên kết O-H trung bình là ***460 kJ/mol***.

Khi tách H ra khỏi H_2O, lai hóa của O không biến đổi do ở trạng thái cơ bản, O có 2 e hóa trị độc thân và 2 e này được dùng để tạo 2 liên kết O-H trong H_2O → khi tách H thì trạng thái hóa trị của O biến đổi tương đối ít và quá trình tách này không đòi hỏi một năng lượng kích thích lớn.

$HgCl_2$: năng lượng làm đứt liên kết Hg-Cl lần lượt là ***338 và 104 kJ/mol***, năng lượng trung bình là ***221 kJ/mol***. Sự chênh lệch lớn về năng lượng của các liên kết Hg-Cl là do khi đứt liên kết đầu thì trạng thái hóa trị của nguyên tử Hg biến đổi ít, trong khi đứt liên kết Hg-Cl thứ hai đã biến Hg từ trạng thái ***sp → s^2*** giải phóng một năng lượng đáng kể bù cho năng lượng cần để làm đứt liên kết.

CO_2: năng lượng làm đứt lần lượt các liên kết là ***530 và 1070 kJ/mol***, trung bình là 802 kJ/mol. Do là khi tách 1 nguyên tử O ra khỏi CO_2 đã chuyển liên kết C-O còn lại trong phân tử từ ***1 liên kết đôi → 1 liên kết ba*** trong CO.

Năng lượng liên kết phụ thuộc vào bậc (độ bội) của liên kết và độ xen phủ của các orbital hóa trị.

Bậc liên kết càng lớn, độ xen phủ các orbital hóa trị càng lớn thì liên kết càng bền → năng lượng liên kết càng lớn.

Độ xen phủ của các orbital hóa trị lớn khi:

1. Miền xen phủ rộng và mật độ e ở miền xen phủ lớn.
2. Z’ đối với orbital hóa trị lớn.
3. Số lượng tử chính n nhỏ.
4. Hiệu năng lượng các orbital hóa trị trong nguyên tử và giữa các nguyên tử tham gia liên kết là nhỏ.
5. Số nút hàm xuyên tâm của của orbital hóa trị là ít (số nút = n – l -1).
6. Ở miền xen phủ có nhiều orbital hóa trị tham gia.

Bậc liên kết: yếu tố quyết định năng lượng liên kết.

Khi bậc liên kết bằng nhau nhưng E_{cht} khác nhau là do độ xen phủ các orbital hóa trị là khác nhau.

Trong 1 chu kỳ: từ trái → phải

- **Z'** của orbital hóa trị tăng dần → E_{cht} tăng dần.
- E_{np}-E_{ns} giảm dần → E_{cht} giảm dần

→ ΣE_{cht} là giá trị cạnh tranh giữa 2 xu hướng này.

Trong 1 phân nhóm A: từ trên xuống

- Năng lượng các orbital hóa trị cùng dạng tăng dần.
- n của orbital hóa trị tăng → số nút hàm xuyên tâm tăng

→ E_{cht} giảm dần

Phân tử	E_{A-A} [kJ/mol]	Độ dài LK [Å]
Li_2	105	2.67
Na_2	72	3.08
K_2	49	3.92
Rb_2	45	--
Cs_2	43	--
F_2	151	1.42
Cl_2	239	1.99
Br_2	190	2.28
I_2	149	2.67
At_2	--	--

F không có orbital hóa trị d

Từ Cl có orbital hóa trị d tham gia liên kết

Phân tử	Li_2	Be_2	B_2	C_2	N_2	O_2	F_2	Ne_2
p	1	0	1	2	3	2	1	0
E_{A-A} [kJ/mol]	105	0	289	628	941	494	151	0
l_{A-A} [Å]	2.67	--	1.59	1.31	1.10	1.21	1.42	--

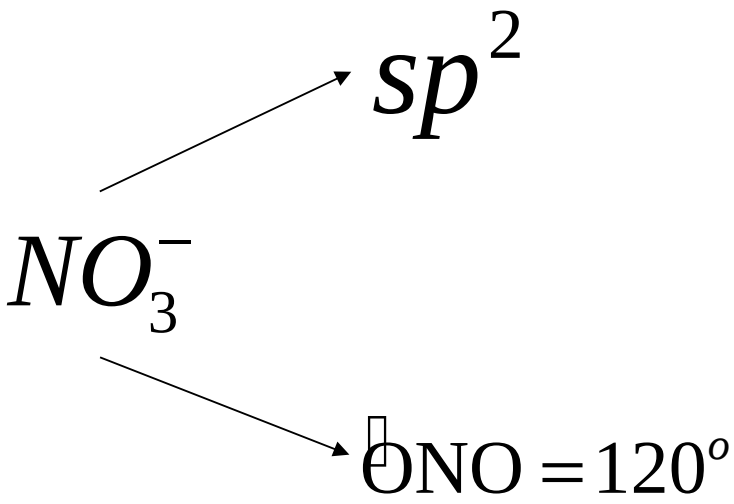
Z' đối với các orbital hóa trị tăng dần

E_{np}-E_{ns}, giảm dần

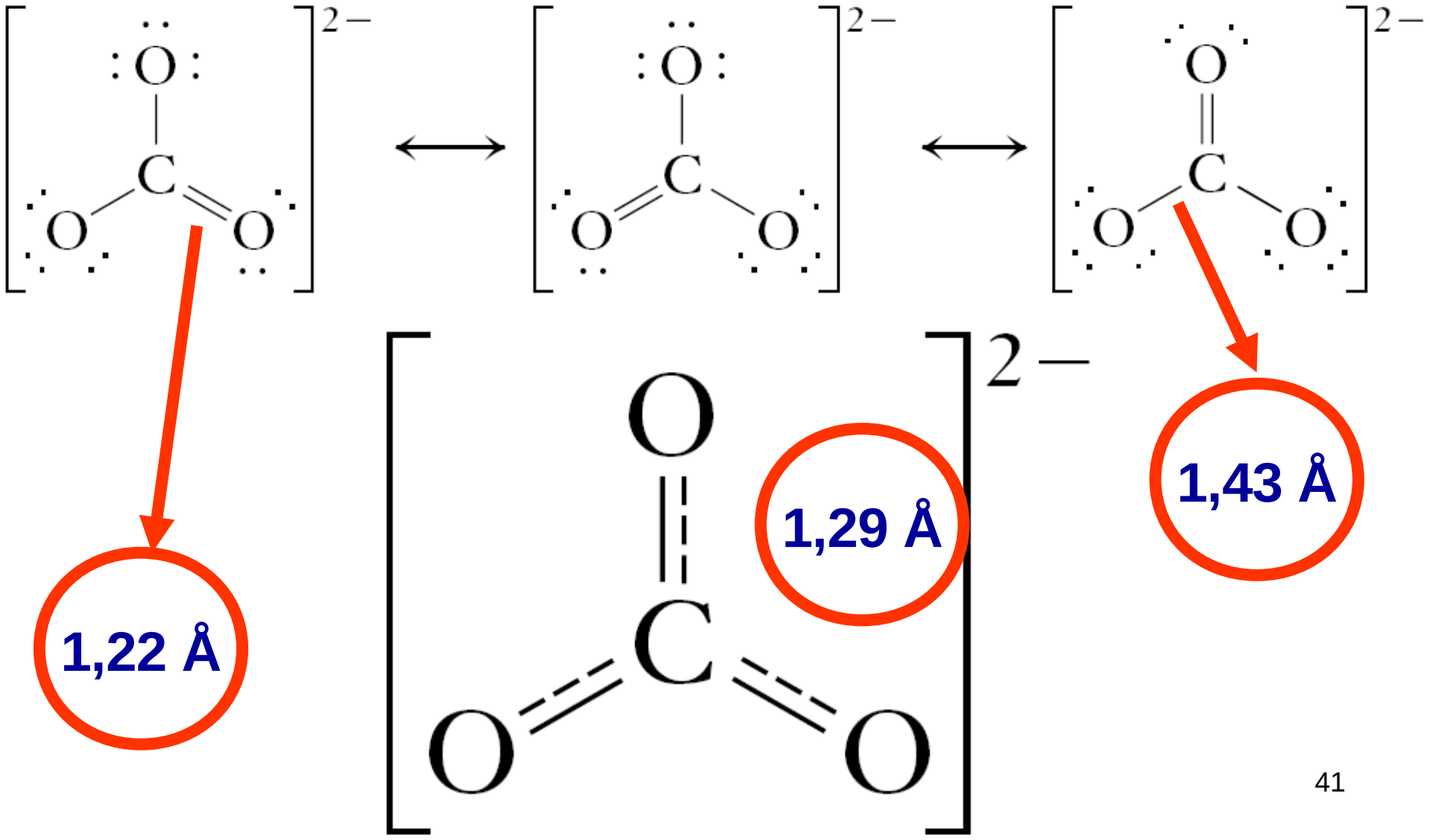
$$p = \frac{1}{2}\left(\blacklozenge e_{MO} - \blacklozenge e_{MO^*} \right)$$

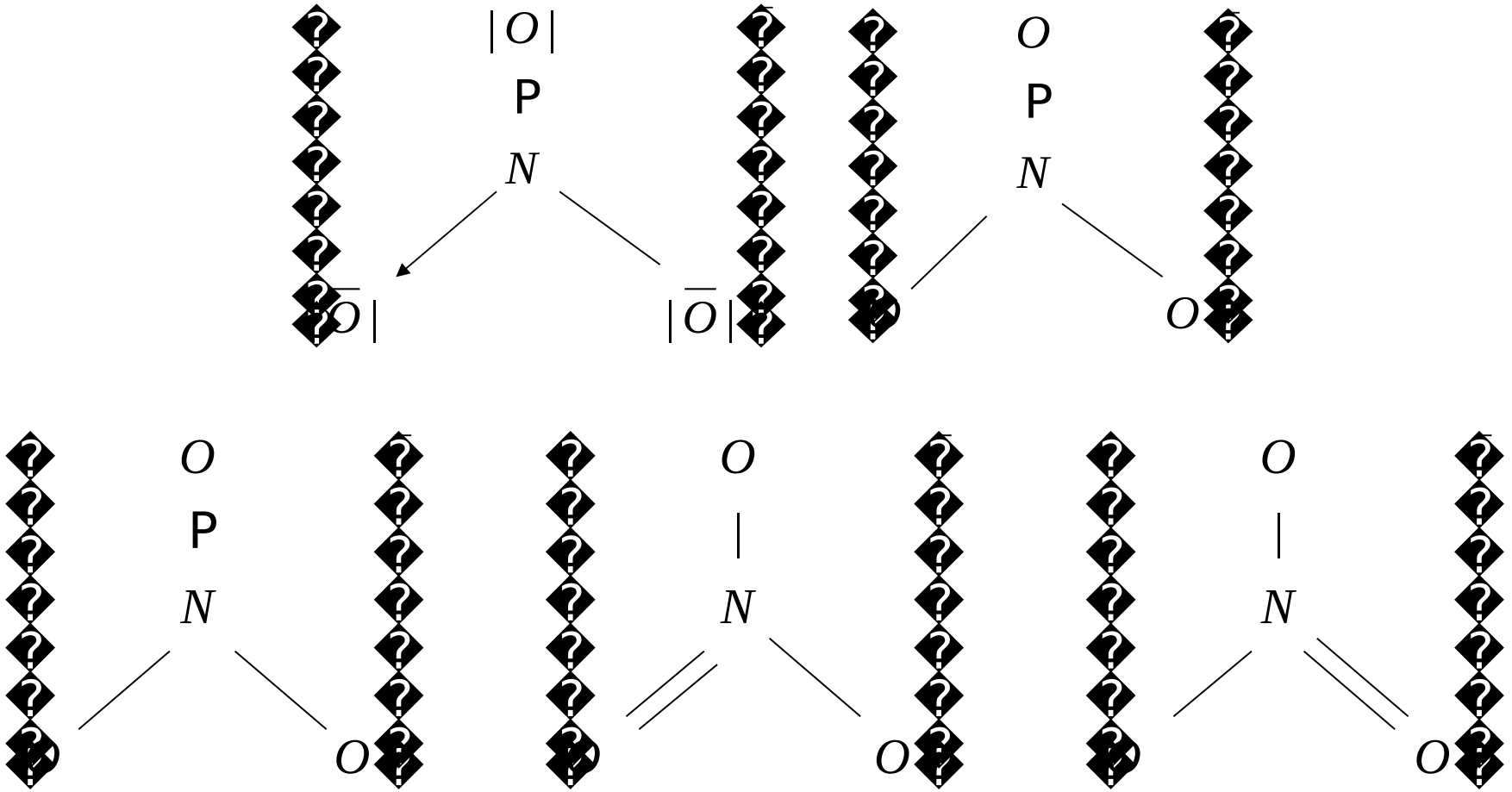
p tính theo phương pháp cặp electron liên kết
p = số cặp electron dùng chung để tạo liên kết giữa chúng

Tổng quát: p tính theo	phương pháp cặp e liên kết sự lai hóa sự cộng hưởng



CẤU TRÚC CỘNG HƯỞNG
RESONANCE STRUCTURE





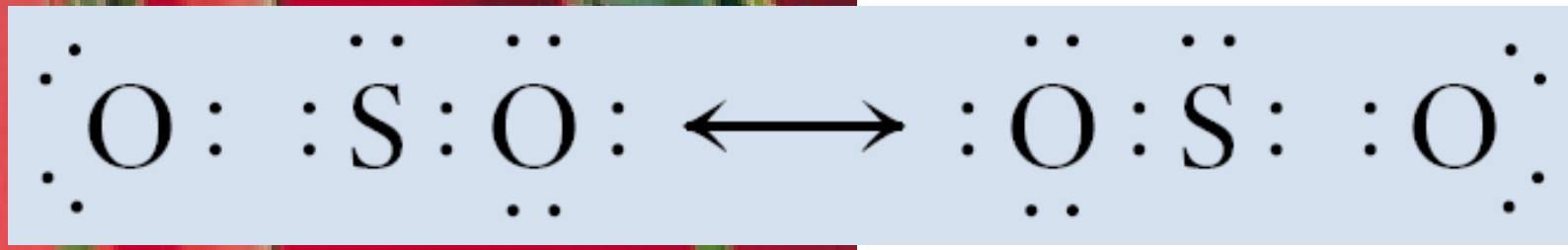
$$p_{N-O} = \frac{1+1+2}{3} = 1\frac{1}{3}$$

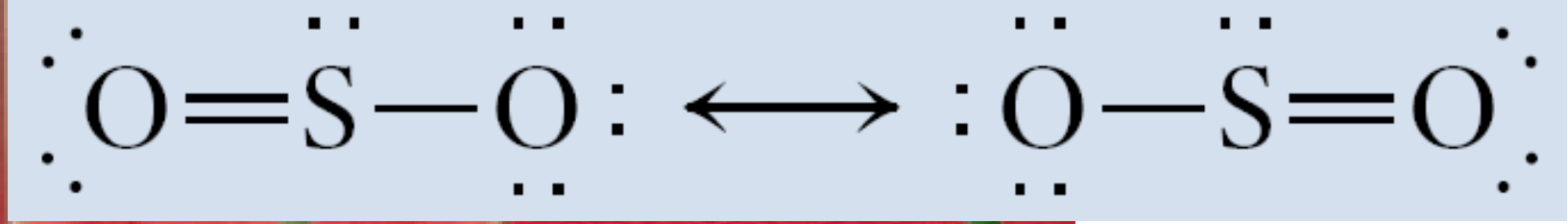
S O

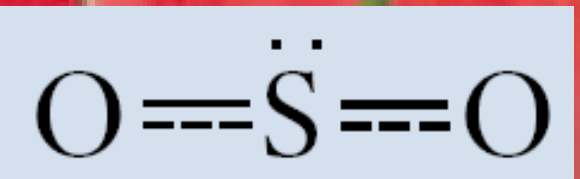
$N = 1(8) + 2(8) = 24\ e^-$

$A = 1(6) + 2(6) = 18\ e^-$

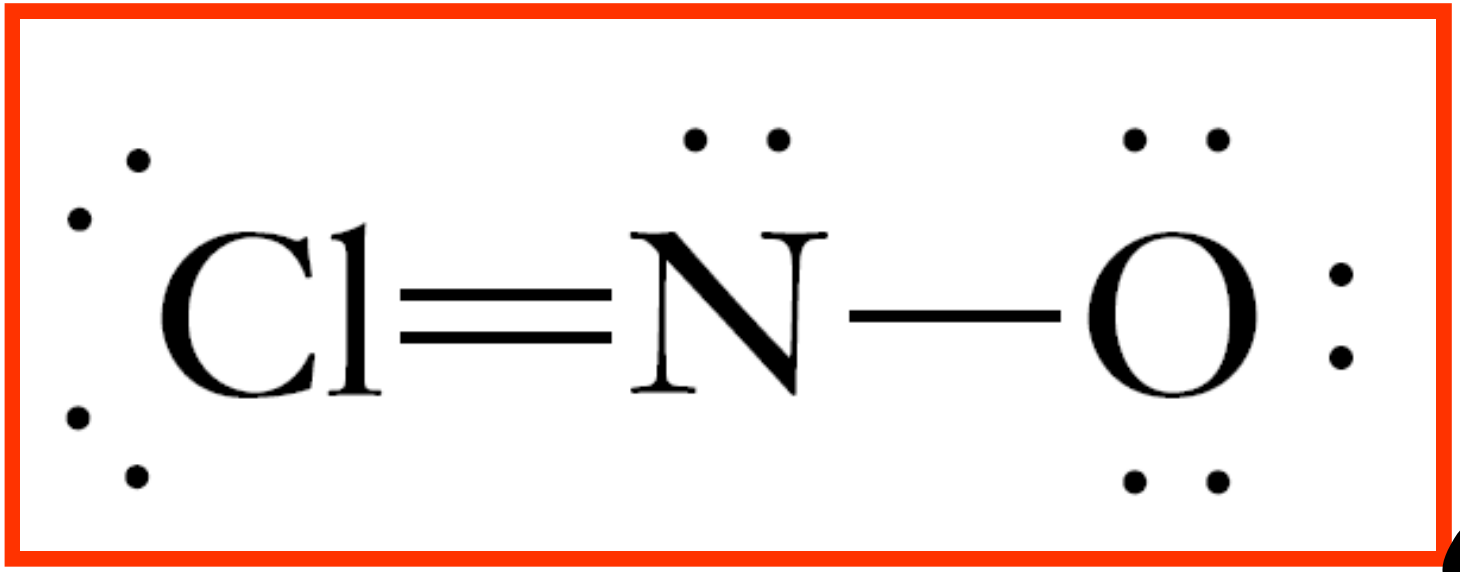
$S = N - A = 6\ e^-$ shared

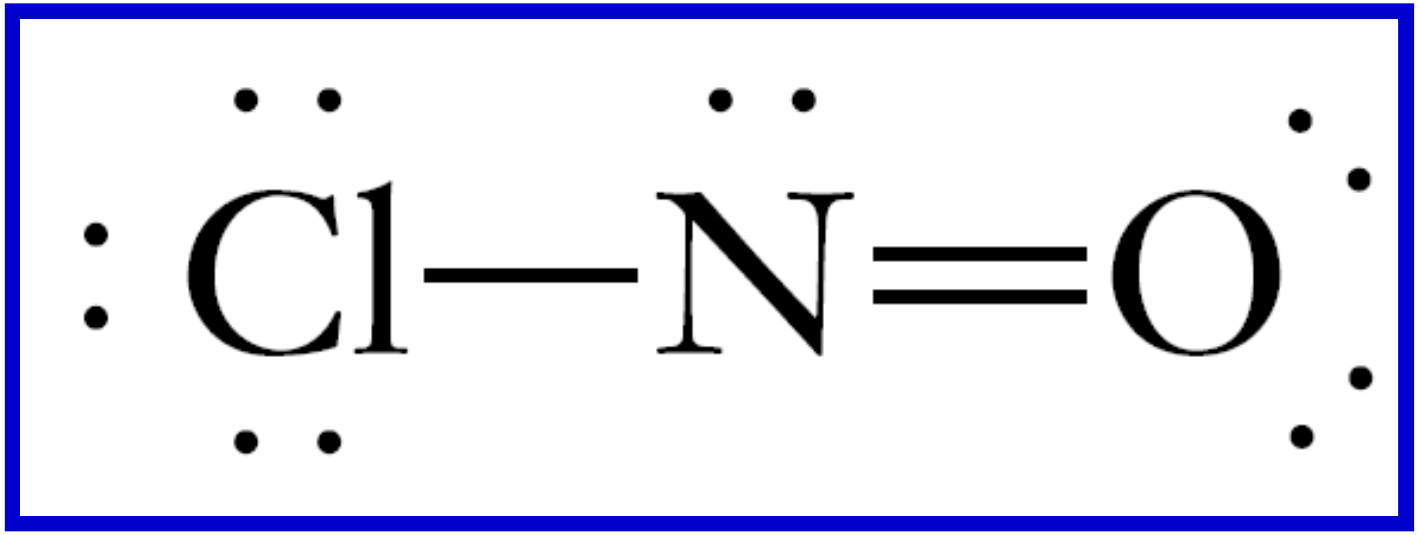






ĐIỆN TÍCH HÌNH THỨC
FORMAL CHARGES - FC





1. The formal charge, abbreviated FC, on an atom in a Lewis formula is given by the relationship

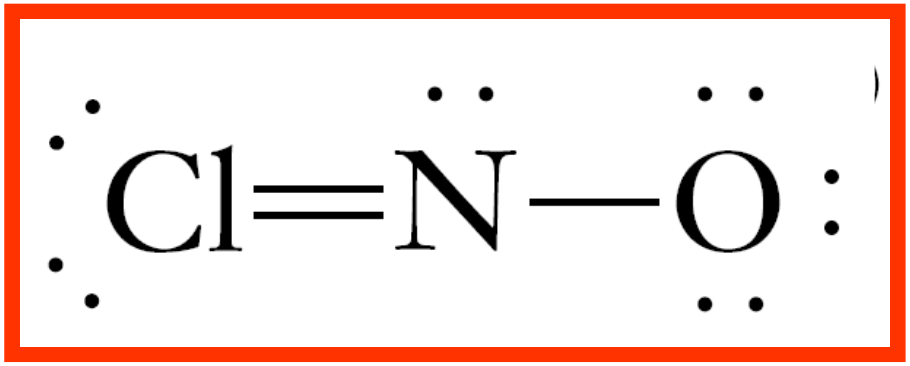
$$\text{FC} = (\text{group number}) - [(\text{number of bonds}) + (\text{number of unshared } e^-)]$$

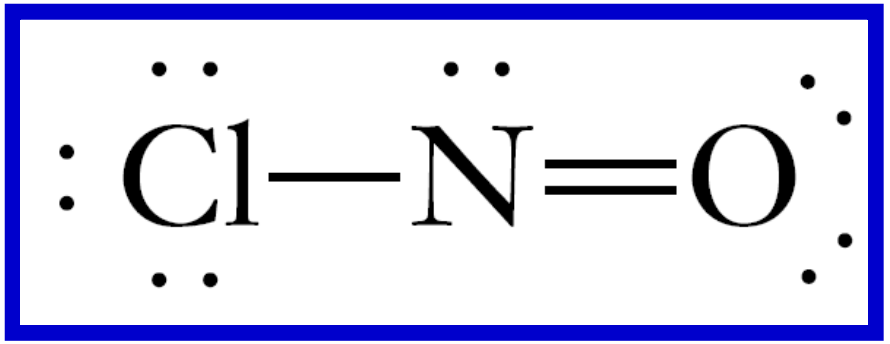
Formal charges are represented by $\oplus$ and $\ominus$ to distinguish them from real charges on ions.

2. In a Lewis formula, an atom that has the same number of bonds as its periodic group number has a formal charge of zero.

3. a. In a molecule, the sum of the formal charges is zero.
   b. In a polyatomic ion, the sum of the formal charges is equal to the charge.

$$FC = GN - [NB - NUE]$$



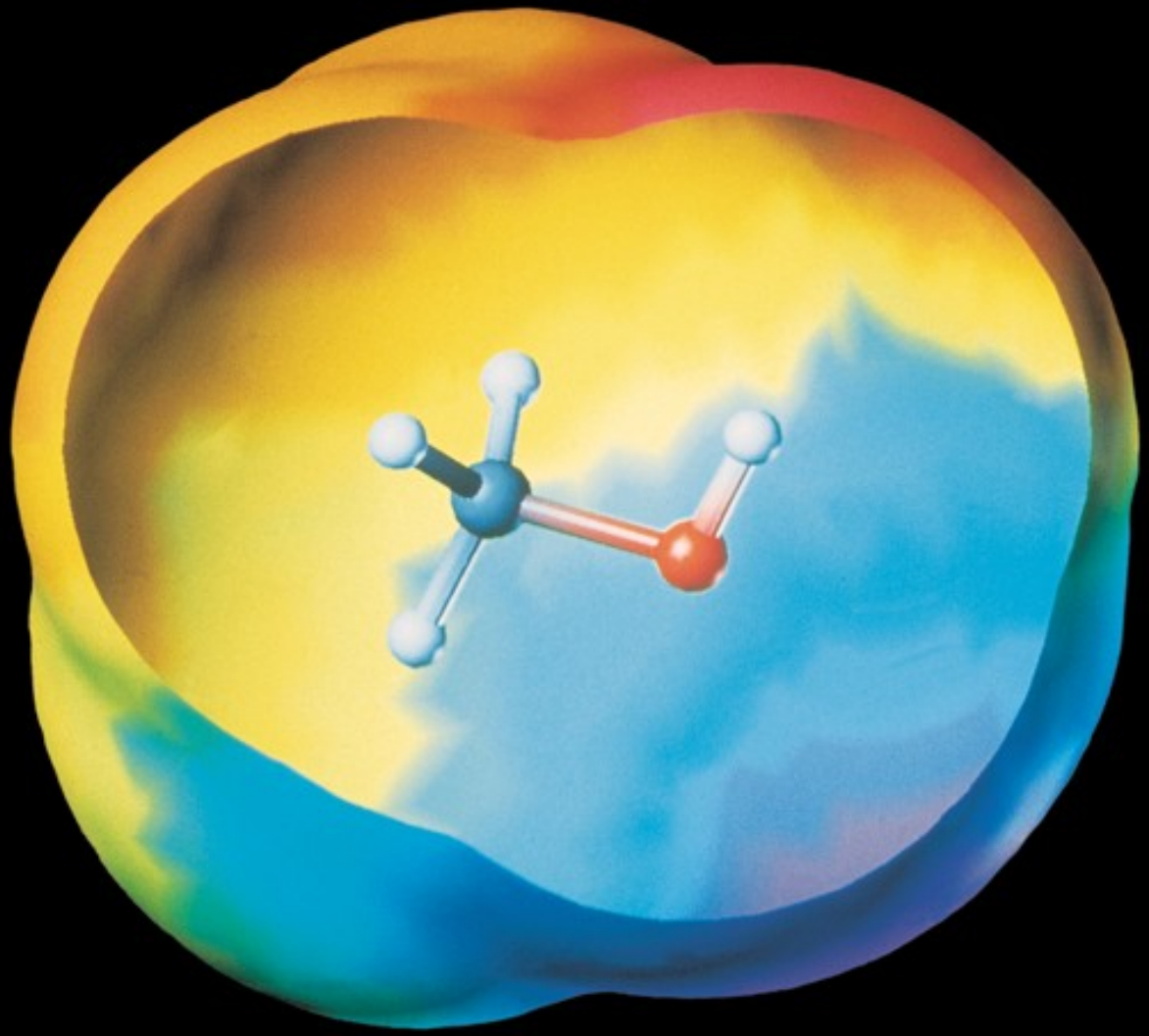


7	5	6		7	5	6
2	3	1	−	1	3	2
4	2	6	−	6	2	4
1	0	-1		0	0	0

Lưu ý khi dùng FC

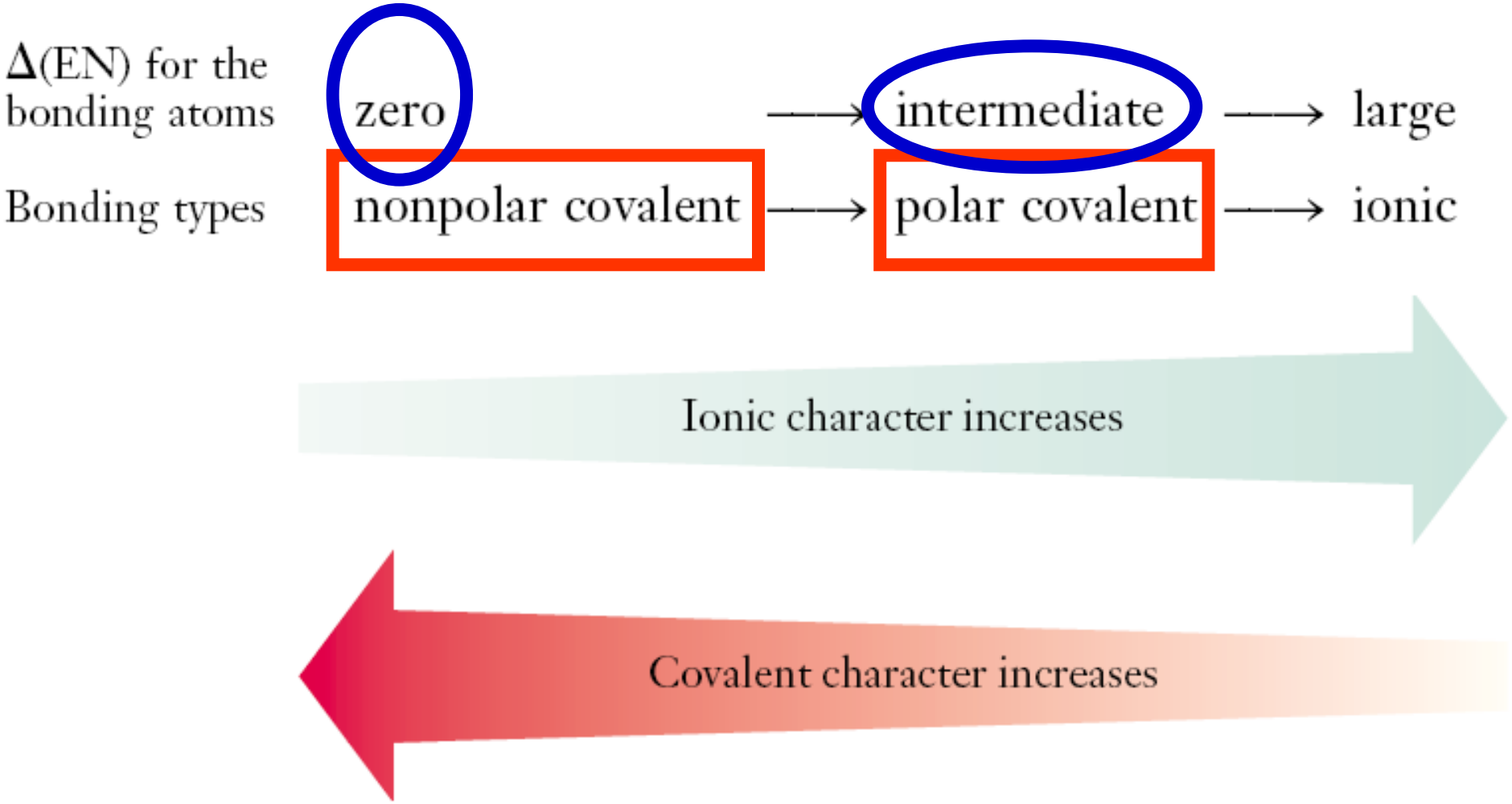
- FC chỉ là qui ước, là công cụ ước định cấu trúc Lewis, ***không phải điện tích thực*** tại trên nguyên tử
- FC cực tiểu (nguyên tố có độ âm điện lớn mang FC âm, sự phân chia điện tích nhỏ ...) là cấu trúc hợp lý nhất

CẤU TRÚC KHÔNG GIAN CỦA PHÂN TỬ



- **Sự phân cực của phân tử**
- **Valence Shell Electron Pair Repulsion Theory (VSEPR) – *Thuyết sự đẩy của các cặp e hóa trị***
- **Valence Bond Theory (VB) – *Thuyết cộng hóa trị***
- **Hình dạng và liên kết trong phân tử**

ĐỘ PHÂN CỰC PHÂN TỬ

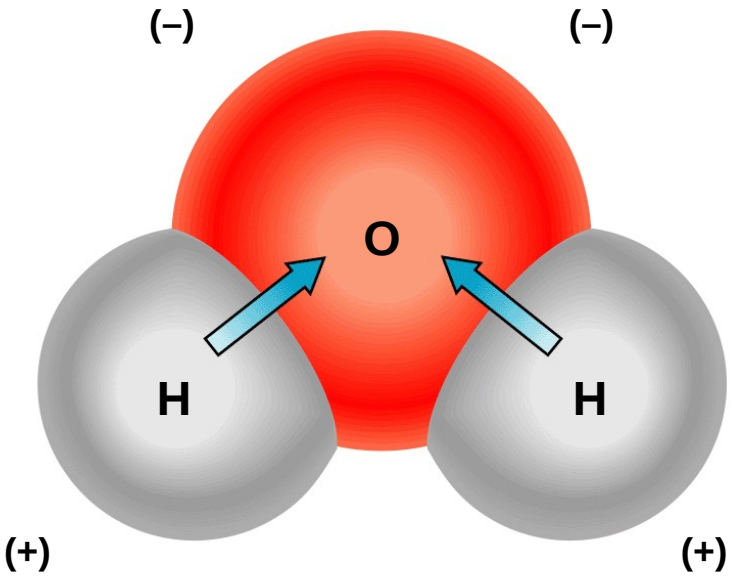


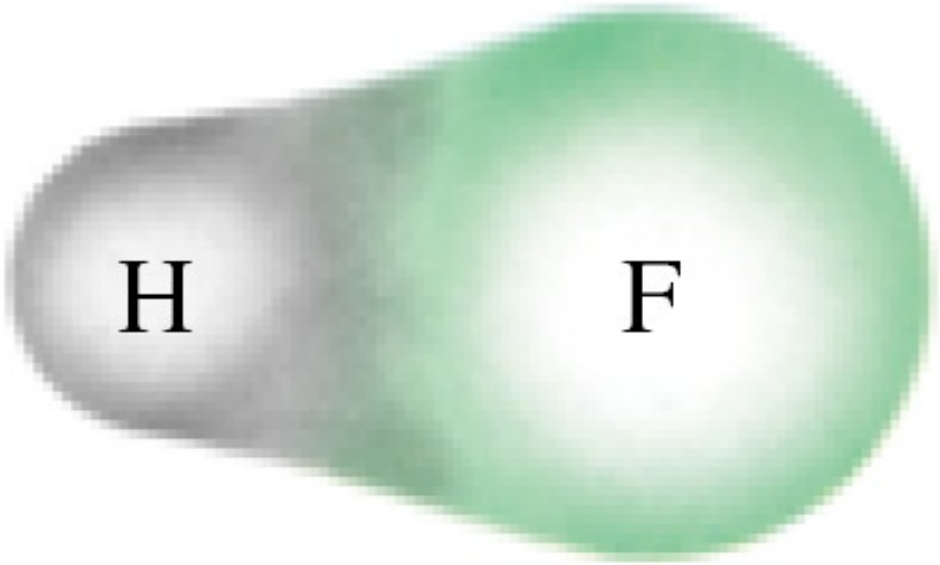
Cấu trúc không gian

Liên kết phân cực

$\delta^+ H\text{-}Cl^{\delta-}$

Cấu trúc bất đối xứng





$\delta+$ $\delta-$

H—F

or

$\longrightarrow$

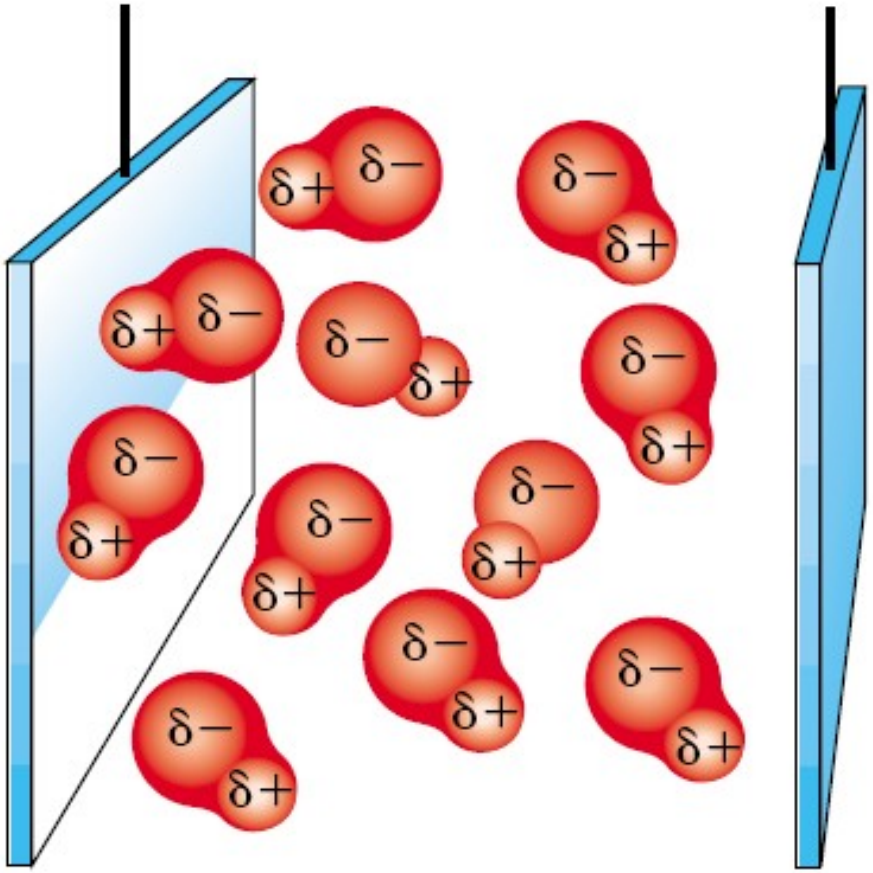
H—F

Most polar Least polar

	H—F	H—Cl	H—Br	H—I
EN:	2.1 4.0	2.1 3.0	2.1 2.8	2.1 2.5
Δ(EN)	1.9	0.9	0.7	0.4

	F—Br	F—Cl	Cl—I	Cl—Br	Cl—Cl	F—F
EN:	4.0 2.8	4.0 3.0	3.0 2.5	3.0 2.8	3.0 3.0	4.0 4.0
Δ(EN):	1.2	1.0	0.5	0.2	0	0

Substance	Δ(EN)	Dipole Moment (μ)*
HF	1.9	1.91 D
HCl	0.9	1.03 D
HBr	0.7	0.79 D
HI	0.4	0.38 D
H—H	0	0 D



Field off

$$\mu = q \; l$$

μ - mômen lưỡng cực

q – điện tích từng cực [C]

l – khoảng cách giữa các cực [m]

[Cm] → [Debye] = [D]

D = 1/3 · 10^{-29} Cm

A-B: 100% đặc tính ion

$$q = 1e$$

$$l = 1A$$

$$\mu = 1e \cdot 1A = 1,6 \cdot 10^{-10} \cdot 10^{-10}[Cm]$$

$$= 4,8[D]$$

A-B: < 100% đặc tính ion

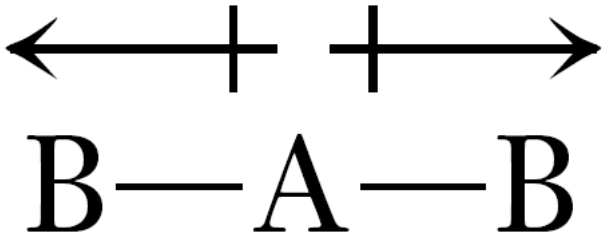
$$q < 1e \Rightarrow q = \delta e$$

$$l > 1A \Rightarrow l = lA$$

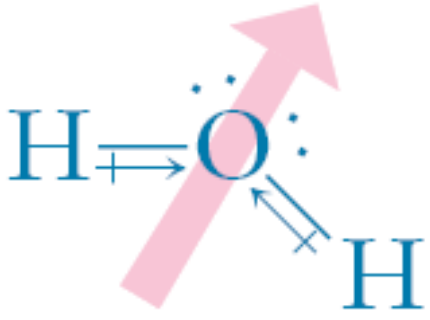
$$\mu = q \cdot l = \delta e \cdot lA[Cm]$$

$$= 4,8 \; l\delta[D]$$

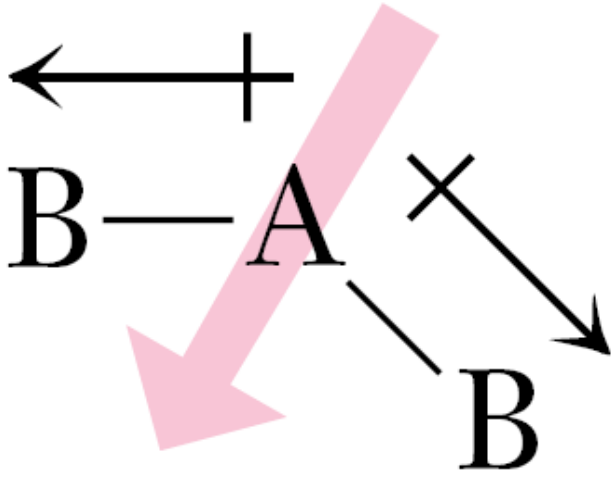
$$\delta = \frac{\mu}{4,8 \cdot l} = \frac{1,07[D]}{4,8 \cdot 4,27[A]} = 0,175$$



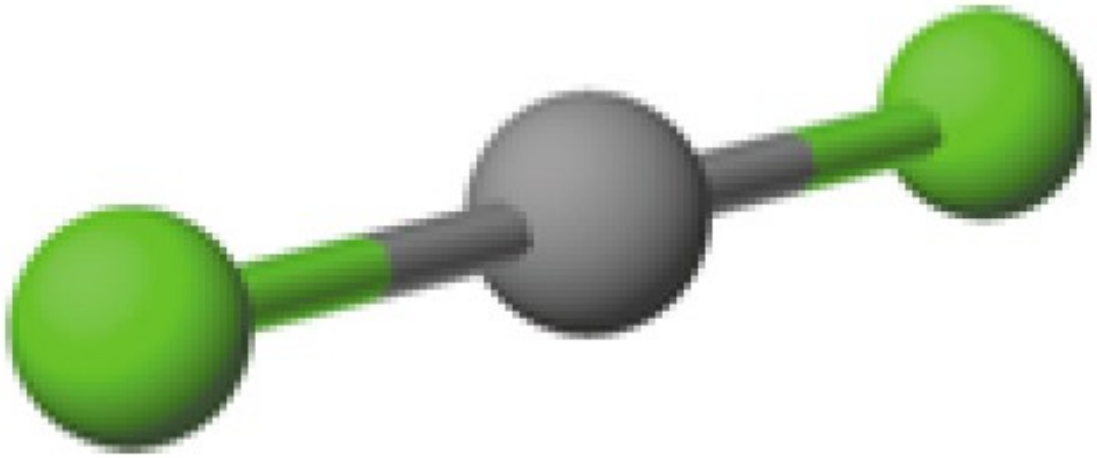
Net dipole = 0
(nonpolar molecule)

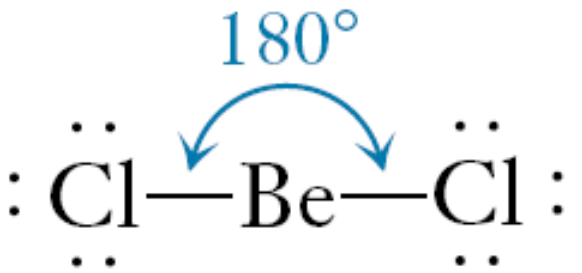


angular molecule;
bond dipoles do not cancel;
molecule is polar



Net dipole > 0
(polar molecule)



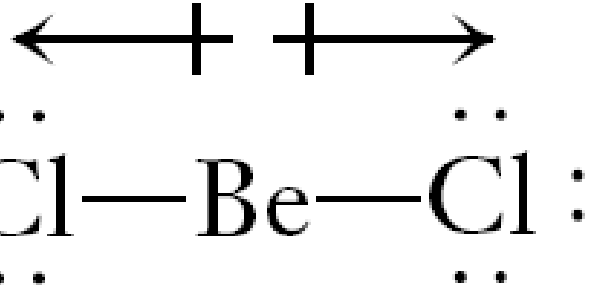


A model of $BeCl_2$, a linear AB_2 molecule.

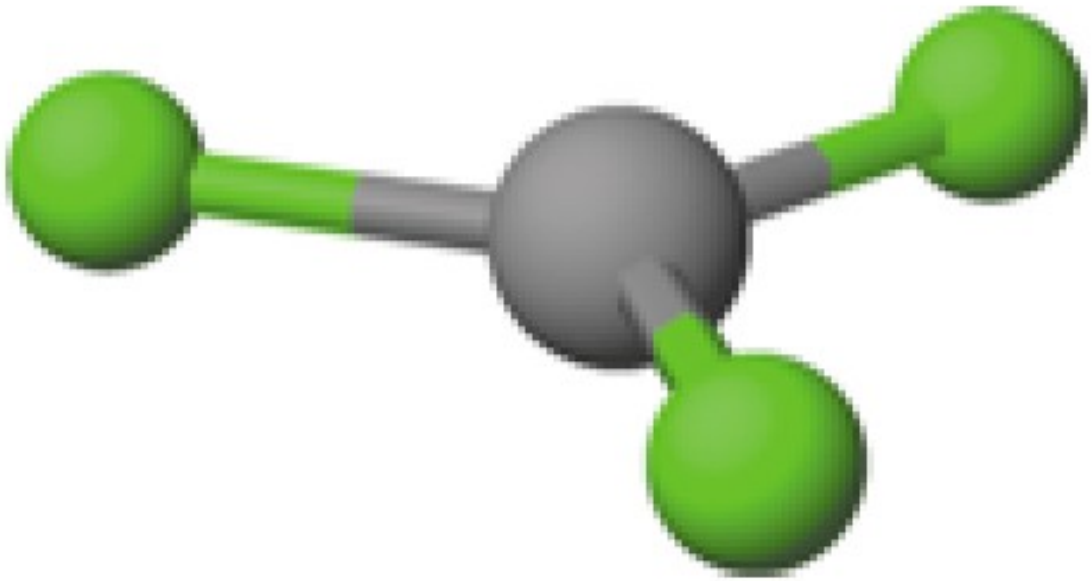
Cl—Be—Cl

EN = 3.0 1.5 3.0

Δ(EN) = 1.5 1.5



Net dipole = 0

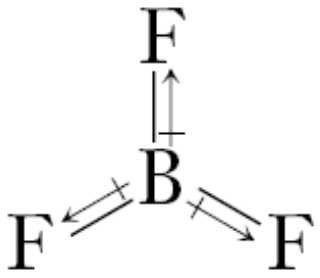


A model of BF_3, a trigonal planar AB_3 molecule.

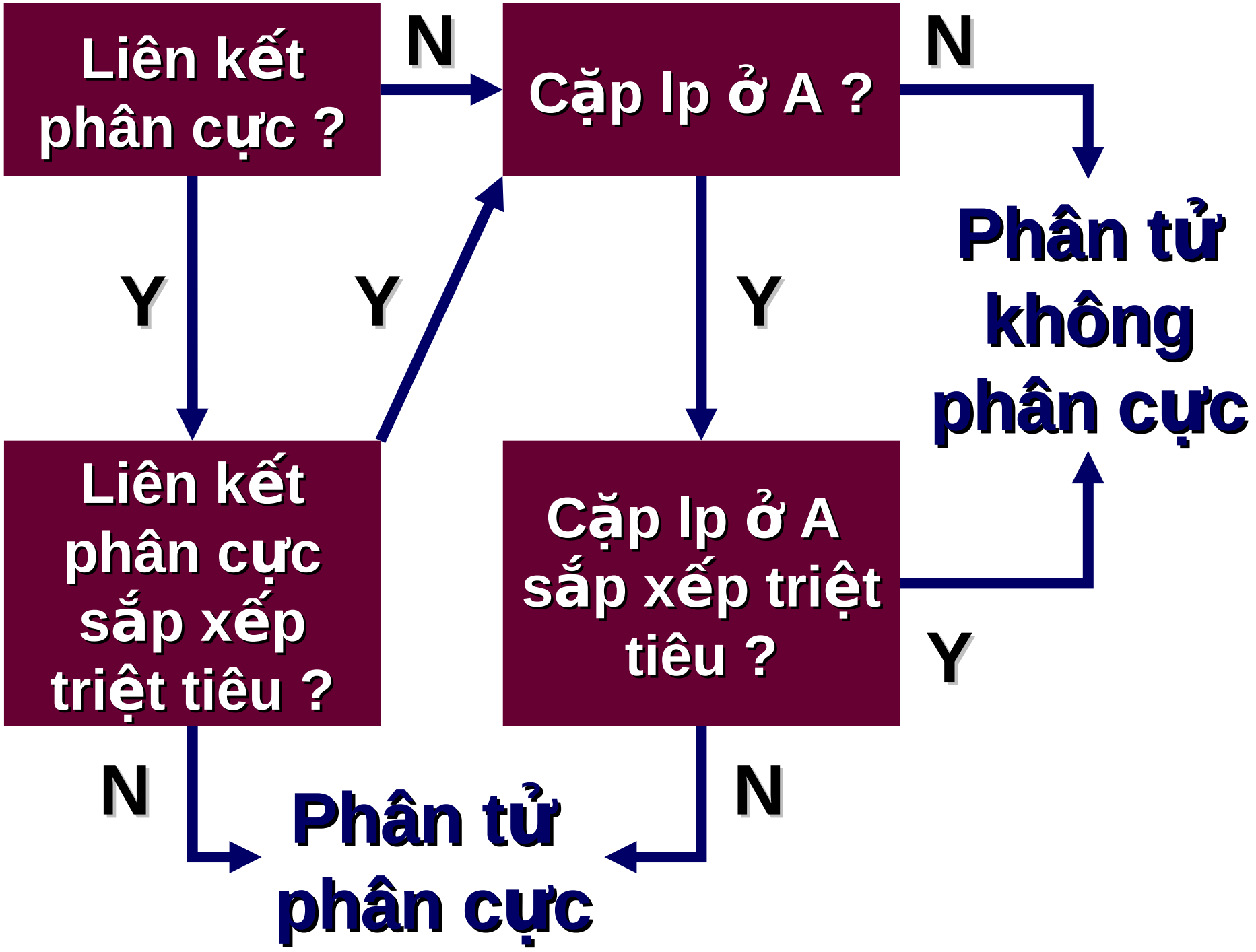
B—F

EN = 2.0 4.0

Δ(EN) = 2.0



Net molecular dipole = 0


Liên kết phân cực ?
N
Cặp lp ở A ?
N
Phân tử không phân cực
Y
Y
Y
Liên kết phân cực sắp xếp triệt tiêu ?
Cặp lp ở A sắp xếp triệt tiêu ?
Y
N
N
Phân tử phân cực

Valence Shell Electron Pair Repulsion Theory

VSEPR

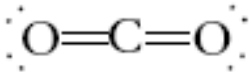
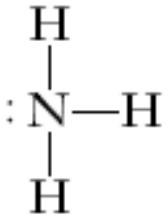
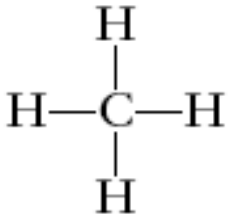
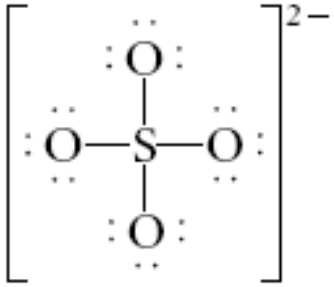
Thuyết sự đẩy của các cặp e hóa trị

VSEPR	VB
Hiểu và tiên đoán sự sắp xếp của nguyên tử trong phân tử/ion Không giải thích trực tiếp được là liên kết xảy ra như thế nào, xảy ra ở đâu và cặp e không chia ở đâu	Giải thích liên kết xảy ra như thế nào dựa vào khái niệm sự xen phủ các orbital nguyên tử. Các AO hóa trị khi tham gia liên kết sẽ lai hóa với nhau để tạo thành các AO hóa trị mới trong không gian

NỘI DUNG

- **Các điện tử hóa trị (*lp* và *bp*) của *nguyên tử trung tâm* do tích điện cùng dấu nên *đẩy nhau***
- **Các điện tử hóa trị của nguyên tử trung tâm (lb và bp) sẽ sắp xếp sao cho *lực đẩy* giữa chúng là *nhỏ nhất***

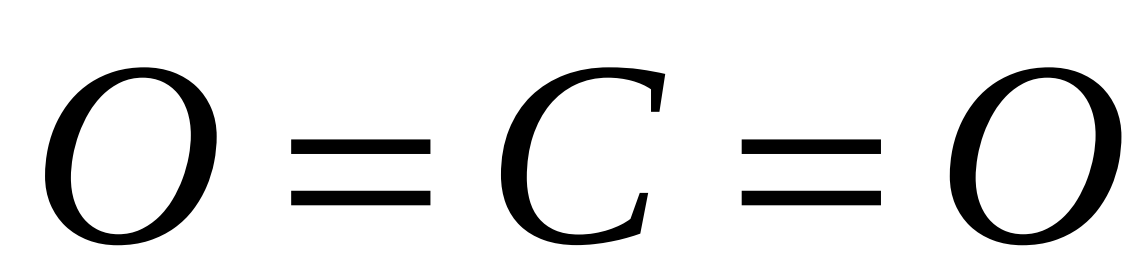
- ***Nguyên tử trung tâm*** là nguyên tử có liên kết với nhiều nguyên tử khác
- Phân tử có thể có nhiều nguyên tử trung tâm
- Quanh nguyên tử trung tâm có ***mật độ điện tử cao***
- Số vùng có mật độ e cao xung quanh nguyên tử trung tâm là:
  - Mỗi liên kết của nguyên tử là vùng có mật độ e cao, liên kết có thể là liên kết đơn, đôi và ba
  - Mỗi cặp e hóa trị lp của nguyên tử trung tâm

Formula:	CO_2	NH_3	CH_4	SO_4^{2-}
Lewis dot formula:				
Central atom:	C	N	C	S
Number of atoms bonded to *central atom:*	2	3	4	4
Number of unshared pairs on *central atom:*	0	1	0	0
Total number of regions of high electron density on *central atom:*	2	4	4	4

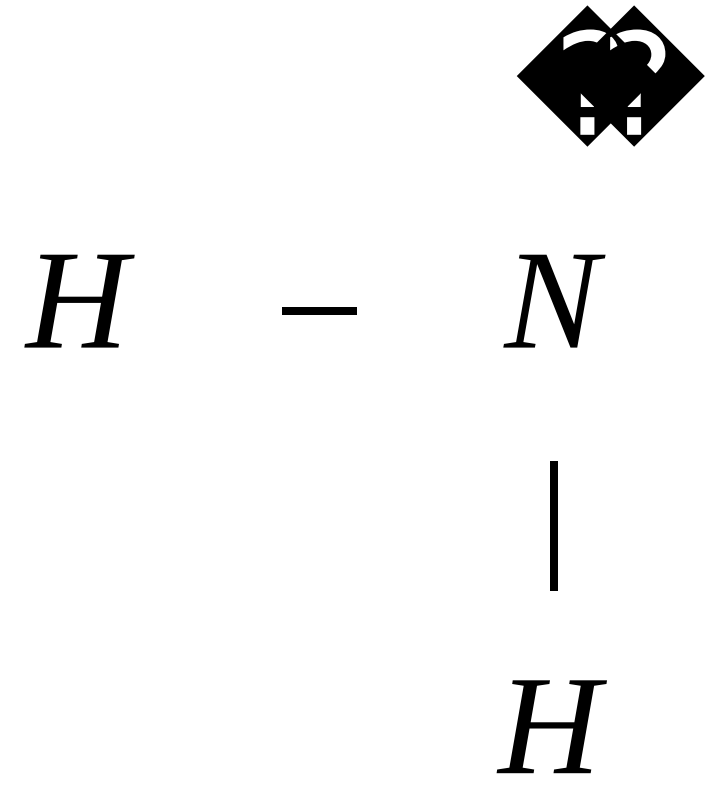
CÔNG THỨC TỔNG QUÁT
CÔNG THỨC GILLESPIC

AX_mE_n

- A – nguyên tử trung tâm
- X- nguyên tử hoặc nhóm nguyên tử phối trí quanh A
- E – ký hiệu của lp trên A
- q = m + n – số vị trí không gian được chiếm bởi nguyên tử hay lp quanh A



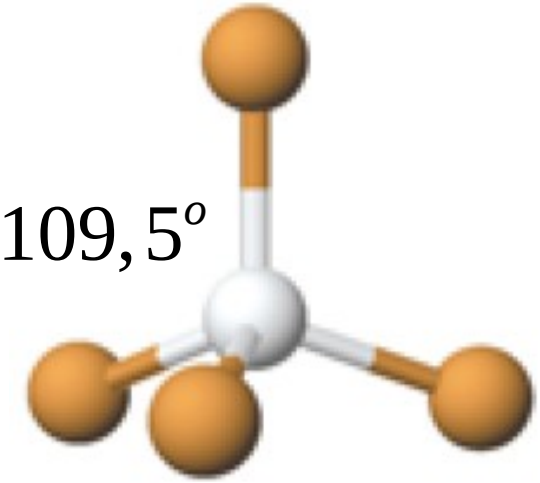
AX_2 AX_2E_0



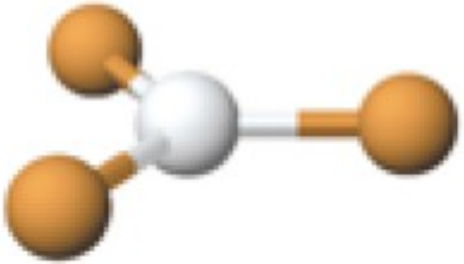
AX_3E_1

n = 0 → AX_m m = 2, 3, 4, 5, 6

BeH_2, CO_2

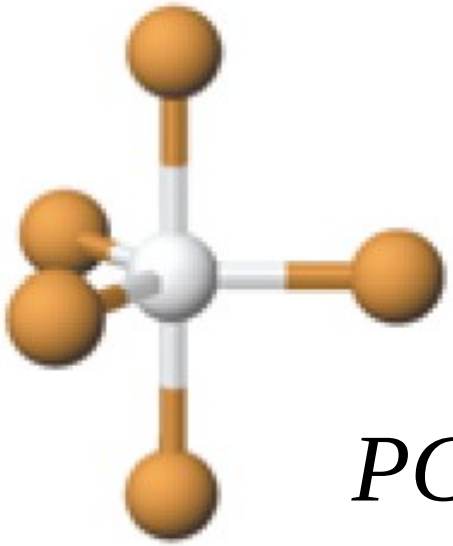


$109,5^o$

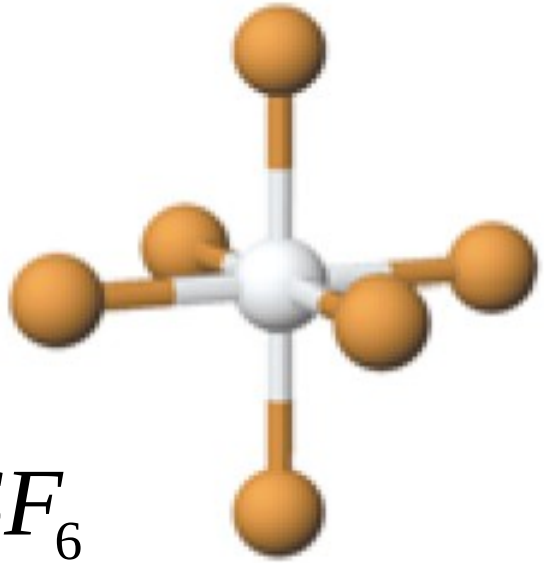


BF_3, CO_3^{2-}

CH_4, NH_4^+, SO_4^{2-}

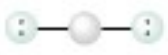
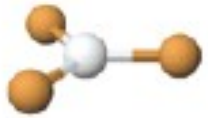
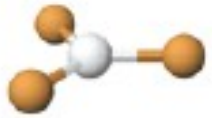
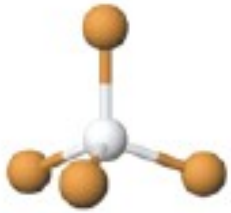
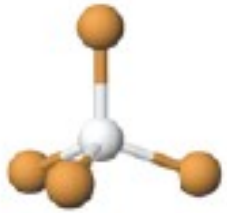
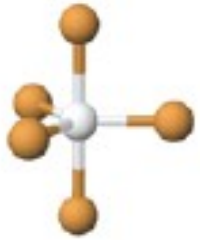
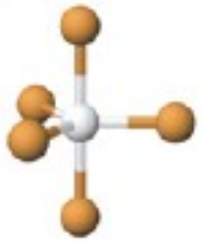
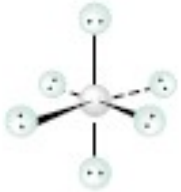
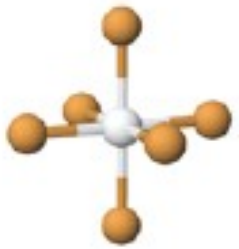
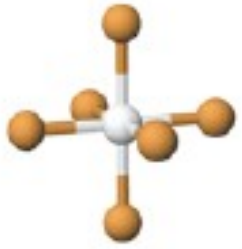


PCl_5



SF_6

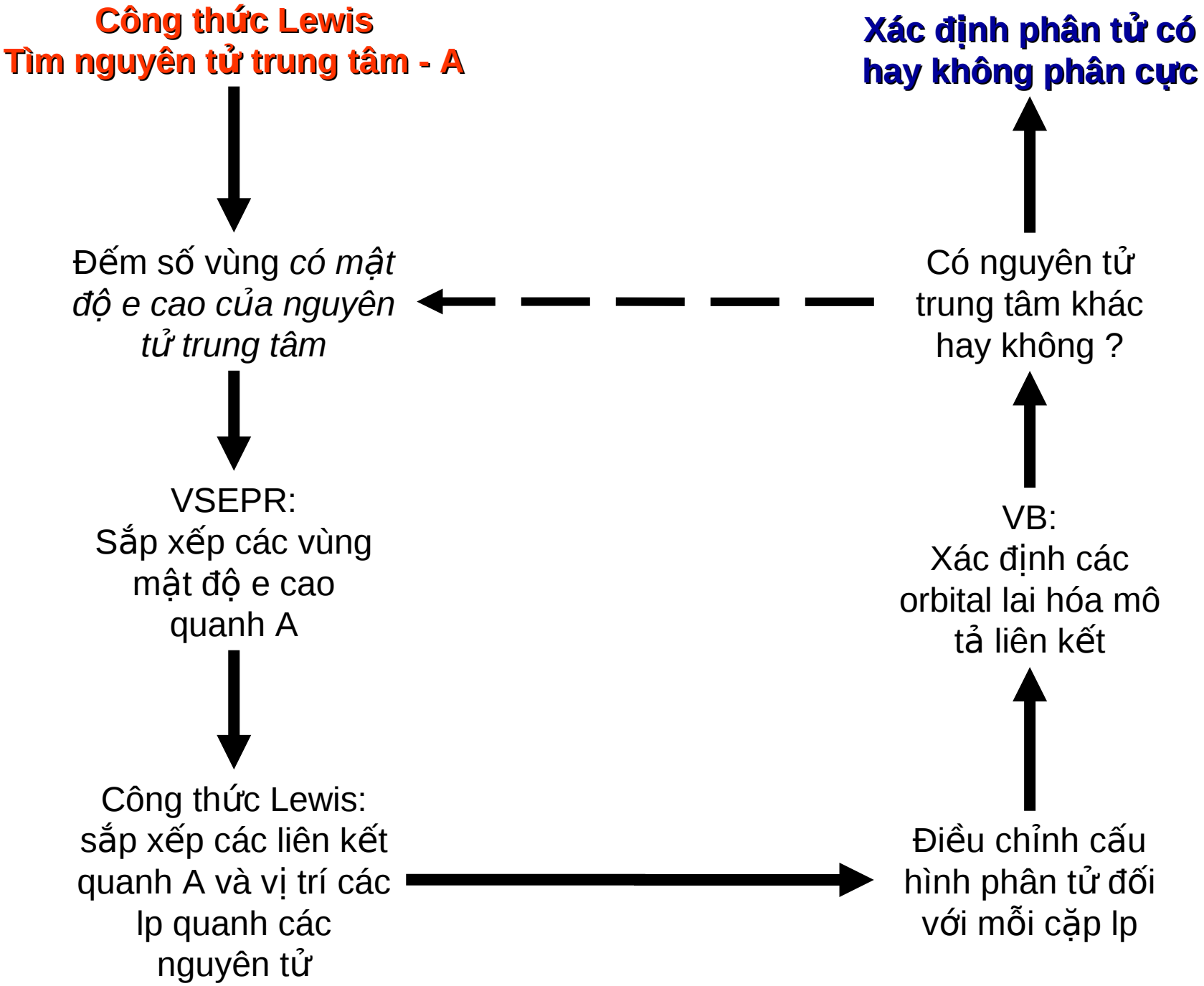
TABLE 8-1 *Number of Regions of High Electron Density About a Central Atom*

No. Regions of High Electron Density	Electronic Geometry*			
	Description; Angles†	*Line Drawing*‡	*Stereo View*§	
2	linear; 180°			
3	trigonal planar; 120°			
4	tetrahedral; 109.5°			
5	trigonal bipyramidal; 90°, 120°, 180°			
6	octahedral; 90°, 180°			

$n \neq 0 \rightarrow AX_mE_n$

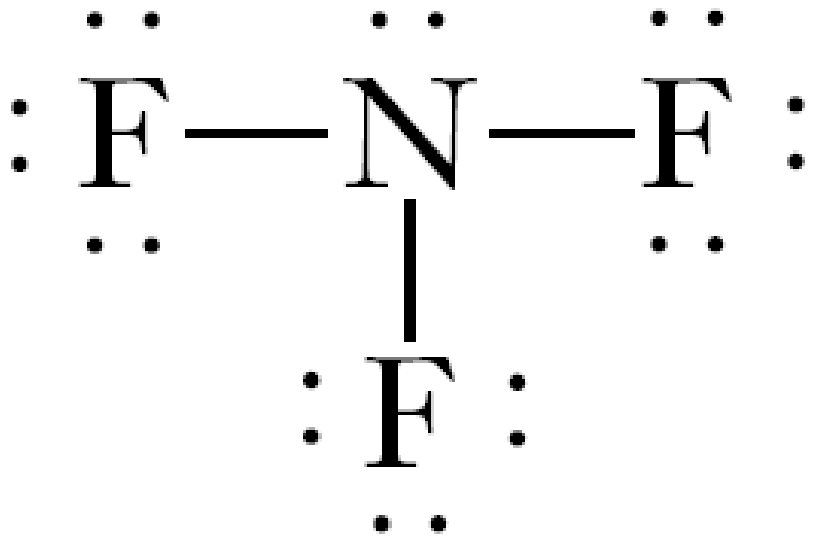
lp/lp >> lp/bp > bp/bp

- AX_3E_1 q = 4
- AX_2E_2 q = 4
- AX_5, AX_4E_1, AX_3E_2, AX_2E_2 q = 5

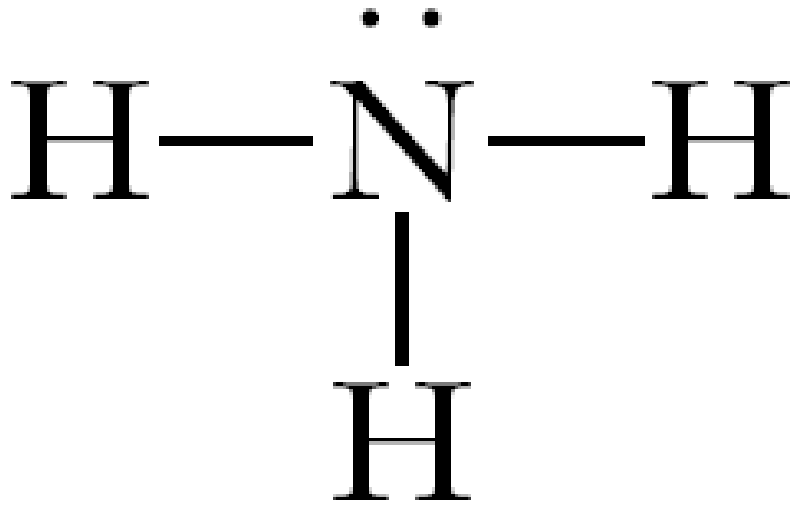

Công thức Lewis
Tìm nguyên tử trung tâm - A
Đếm số vùng *có mật độ e cao của nguyên tử trung tâm*
VSEPR:
Sắp xếp các vùng mật độ e cao quanh A
Công thức Lewis:
sắp xếp các liên kết quanh A và vị trí các lp quanh các nguyên tử
Điều chỉnh cấu hình phân tử đối với mỗi cặp lp
VB:
Xác định các orbital lai hóa mô tả liên kết
Có nguyên tử trung tâm khác hay không ?
Xác định phân tử có hay không phân cực

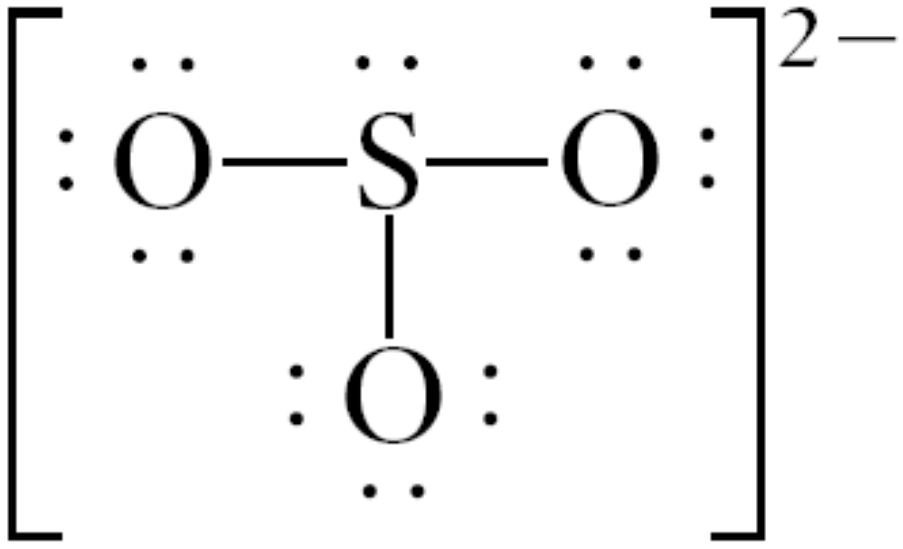
AX_3E_1

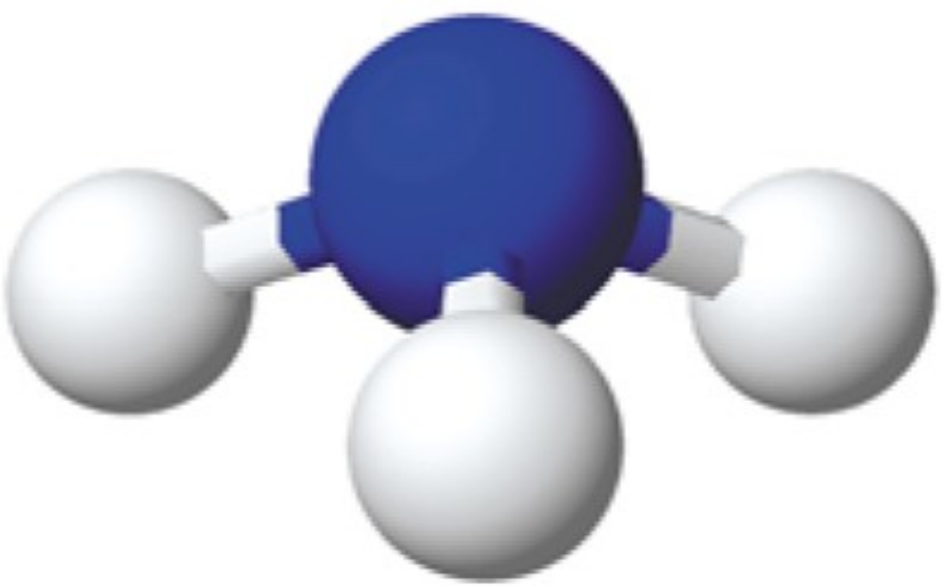
NH_3, NF_3, SO_3^{2-}

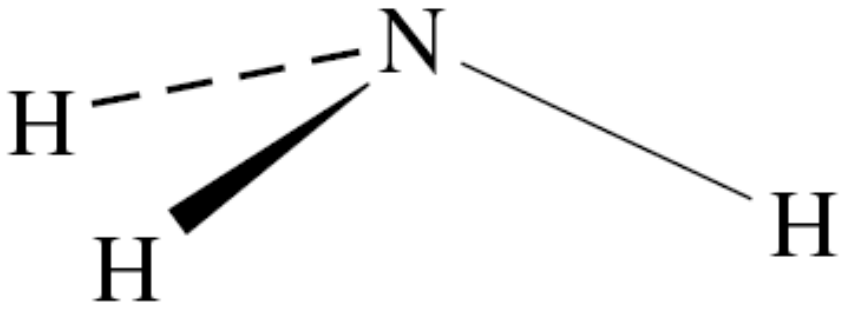


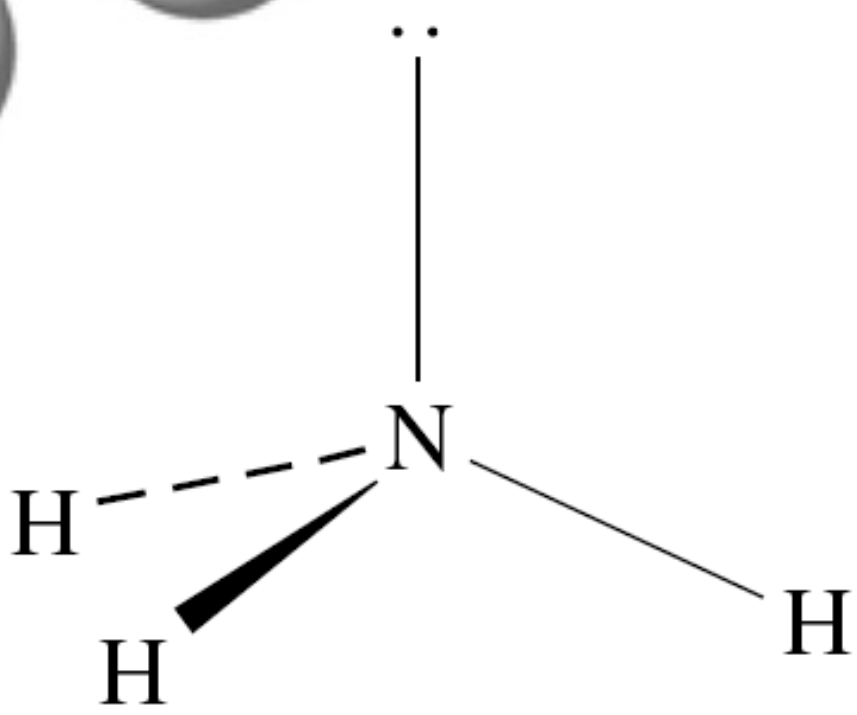
Công thức Lewis

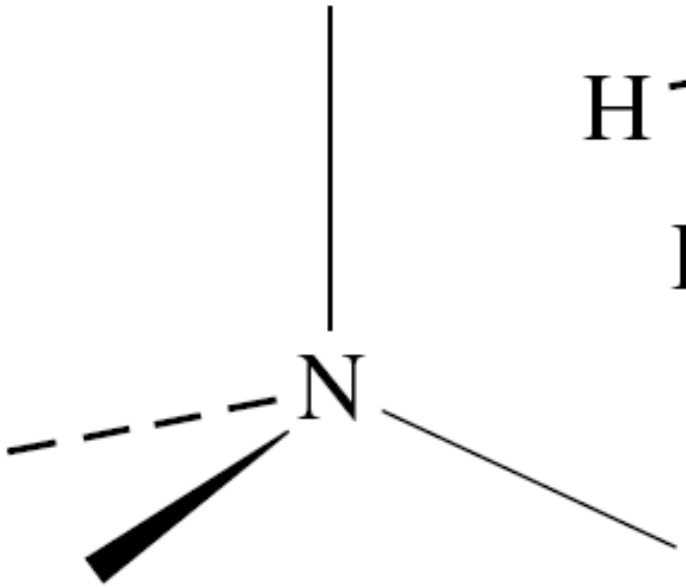


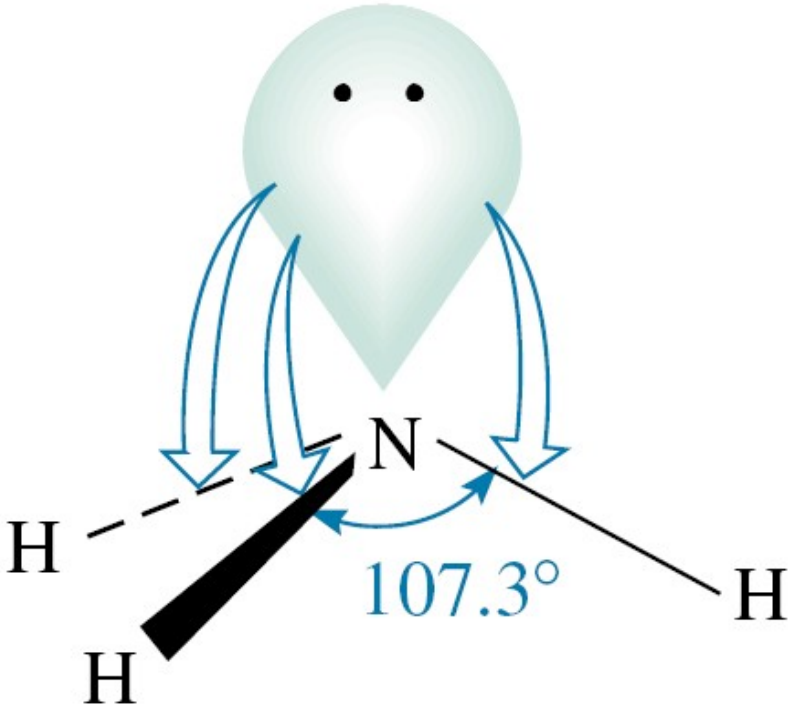


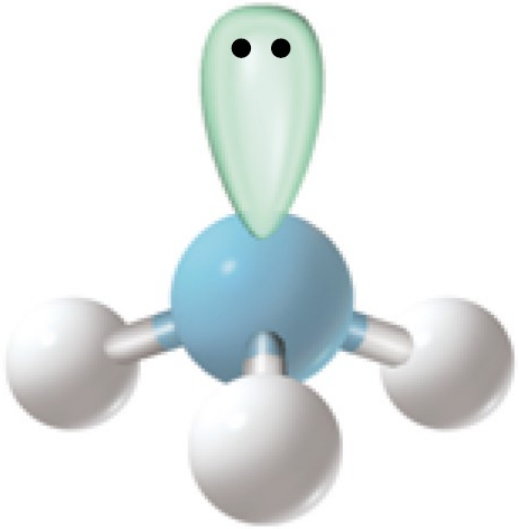



N
H
H
H

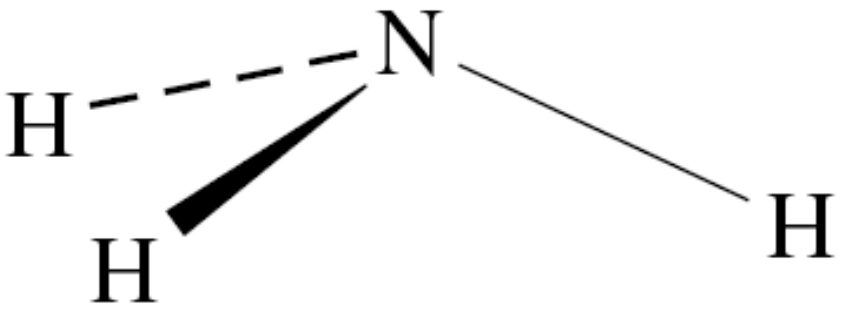

N
H
H
H

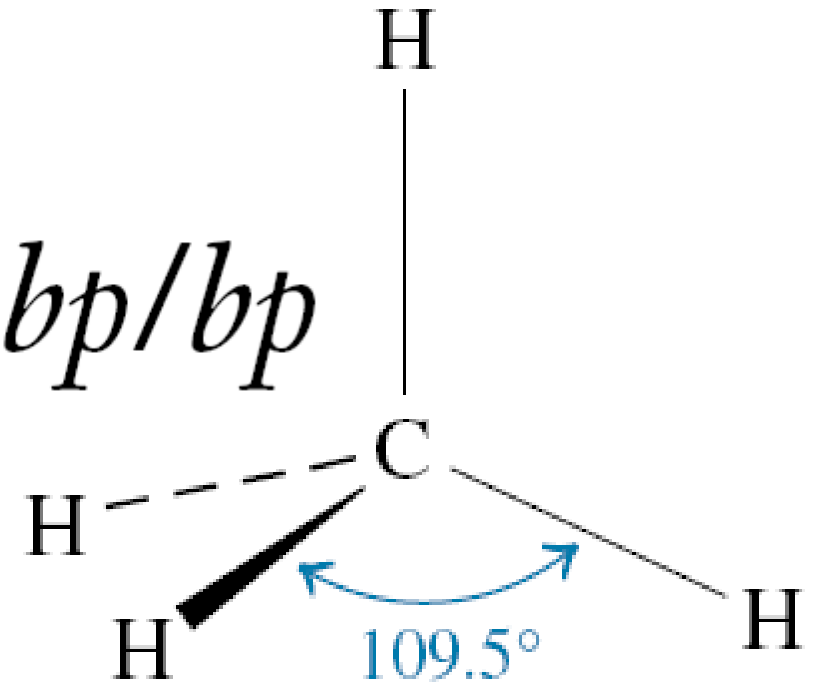

N



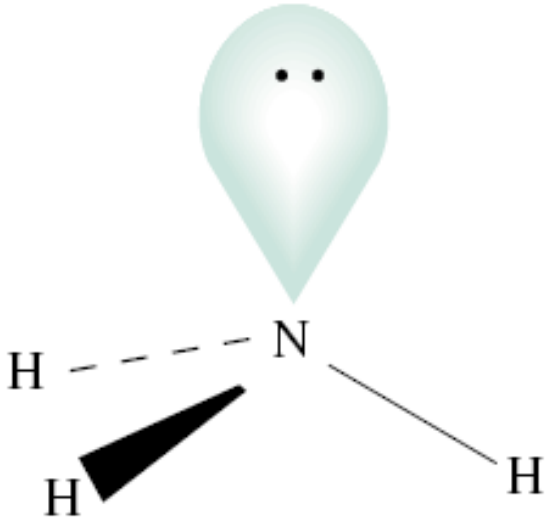


$$lp/lp \gg lp/bp > bp/bp$$





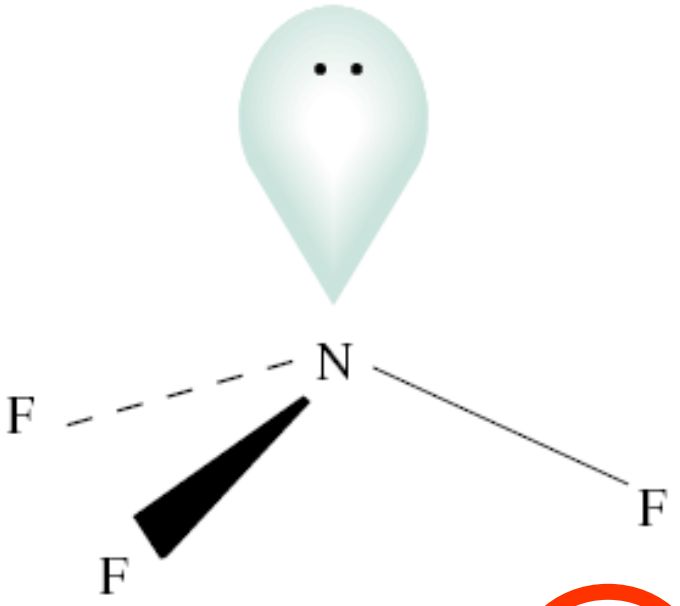
AX_4E_0



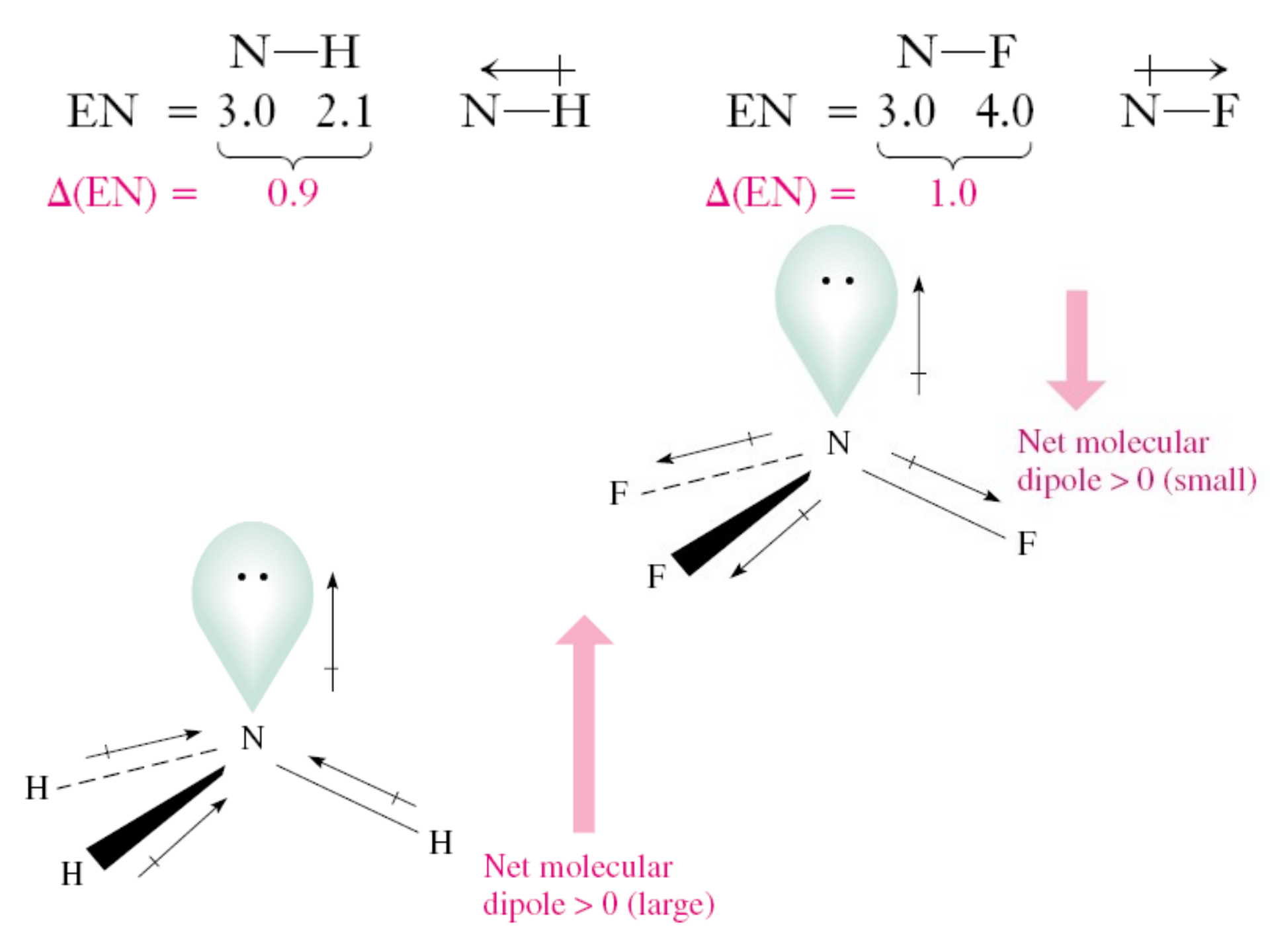
Tetrahedral
electronic geometry

Trigonal pyramidal
molecular geometry

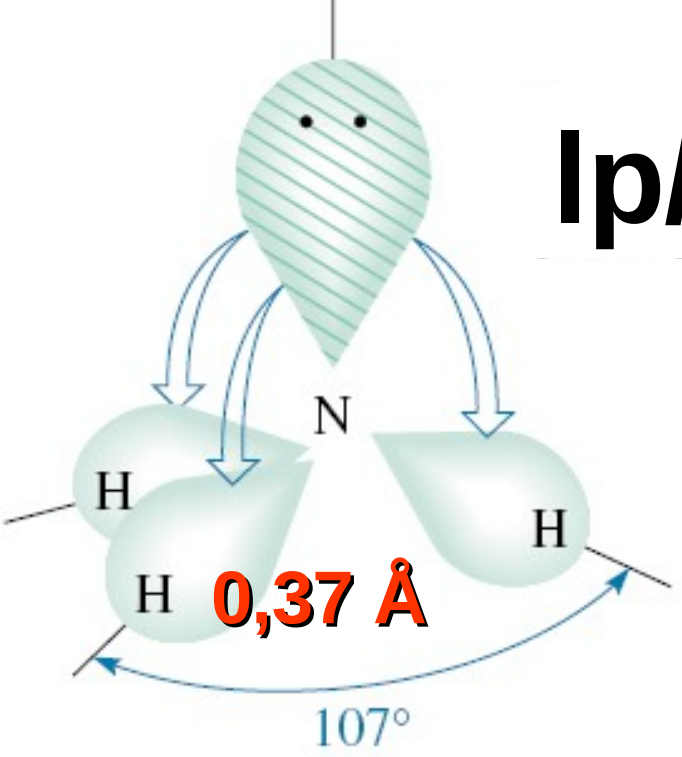
In NH_3, H–N–H angle = 107.3°

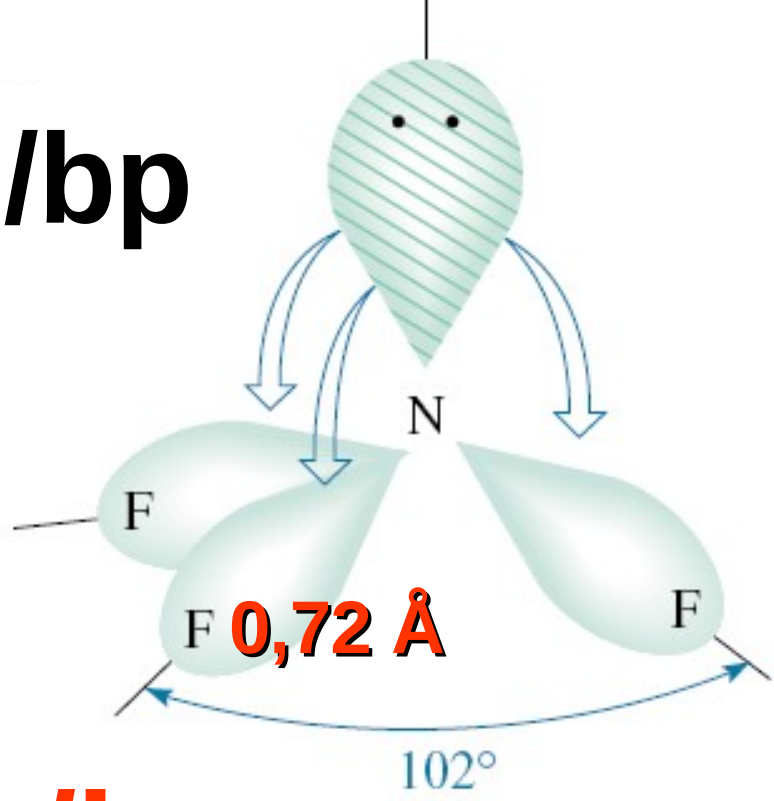


In NF_3, F–N–F angle = 102.1°

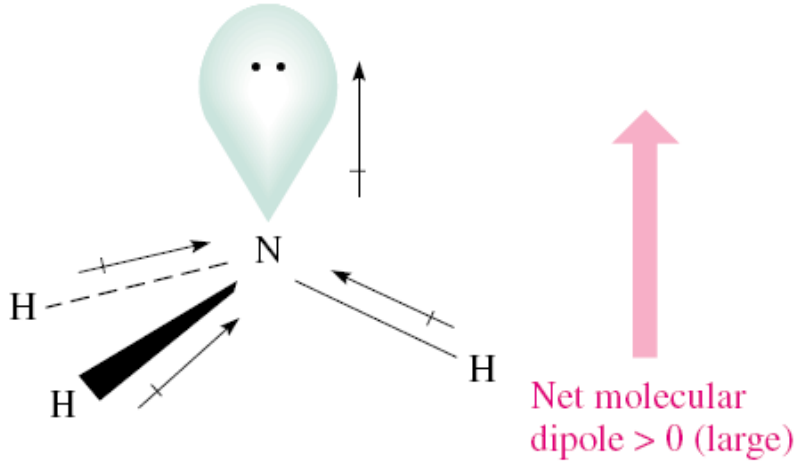

N—H
EN = 3.0 2.1
N—H
Δ(EN) = 0.9
N—F
EN = 3.0 4.0
N—F
Δ(EN) = 1.0
N
H
H
H
Net molecular dipole > 0 (large)
N
F
F
F
Net molecular dipole > 0 (small)

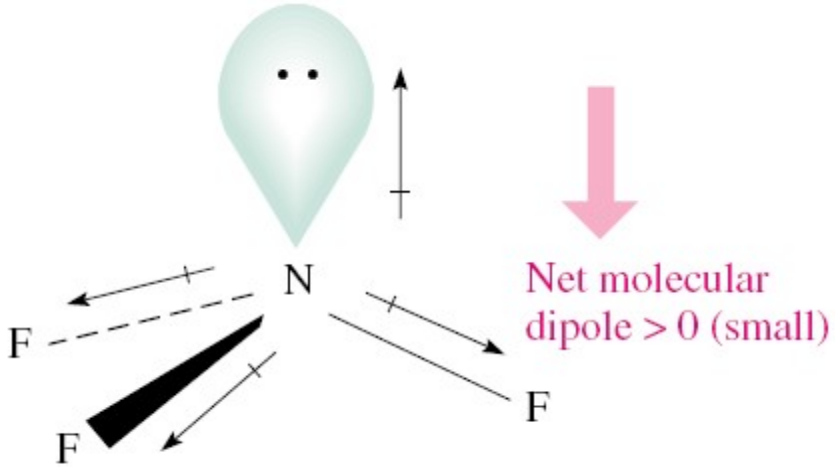
lp/bp > bp/bp

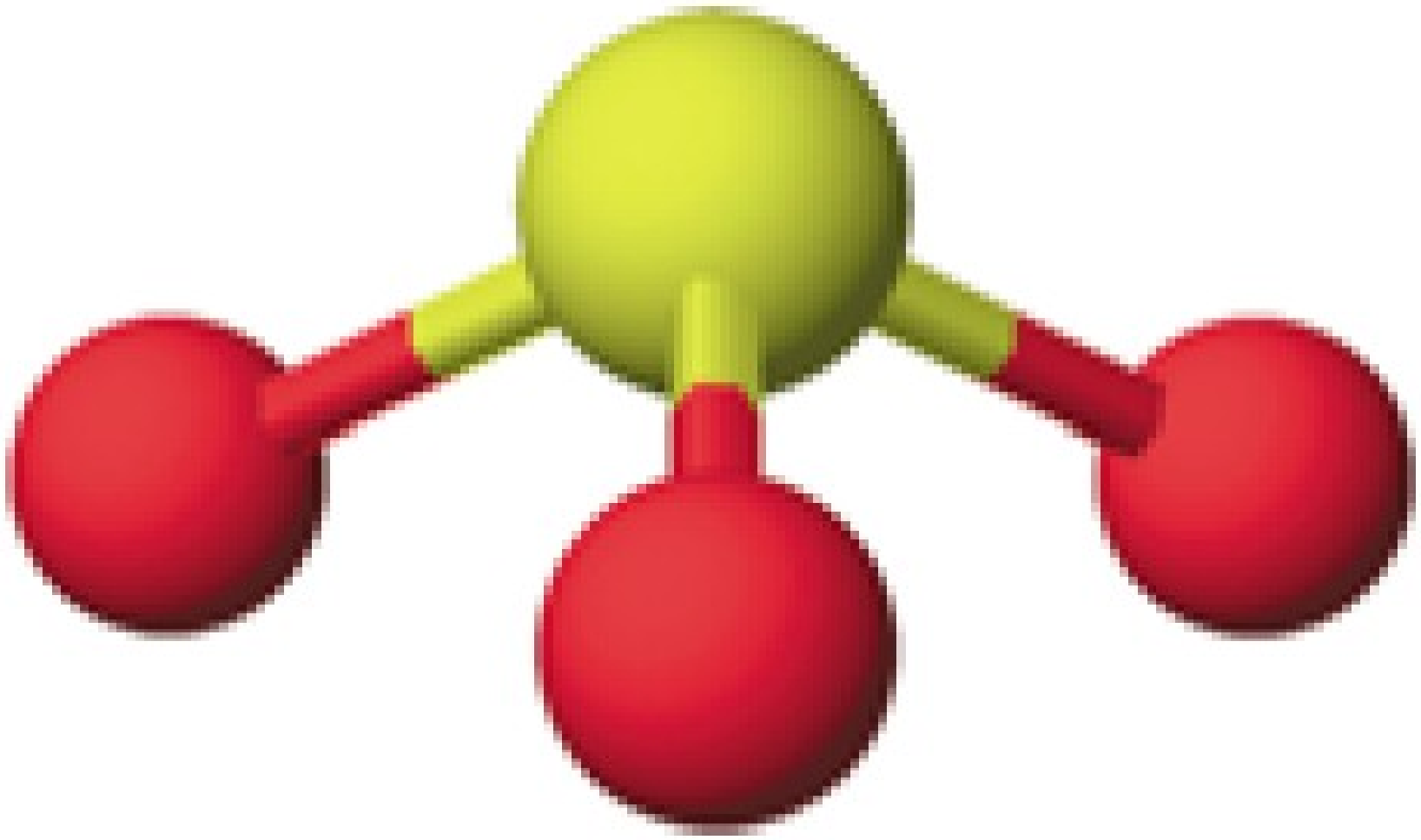




bp/bp > bp/bp







A model of sulfite ion, SO_3^{2-}.

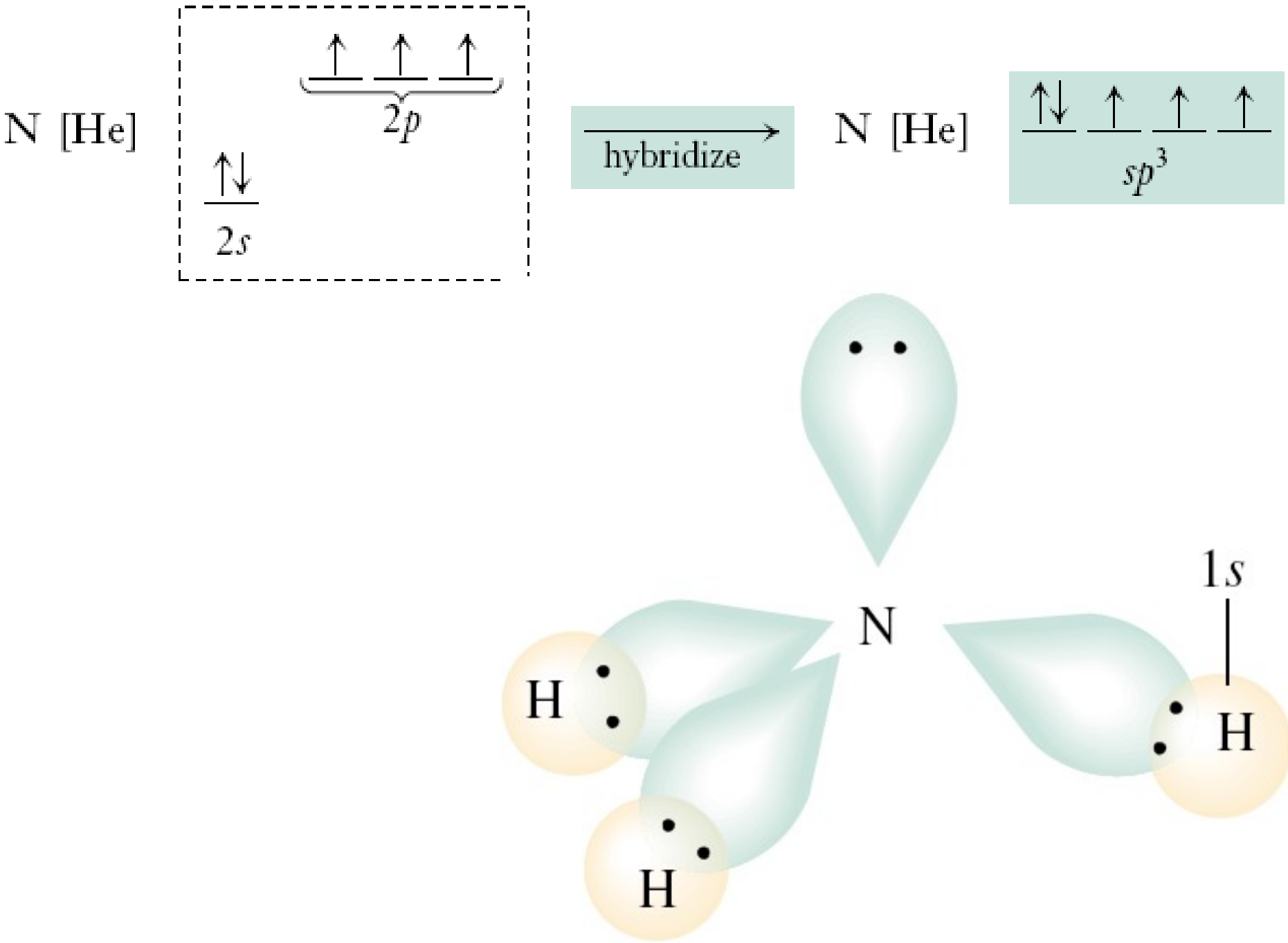
Valence Bond Theory

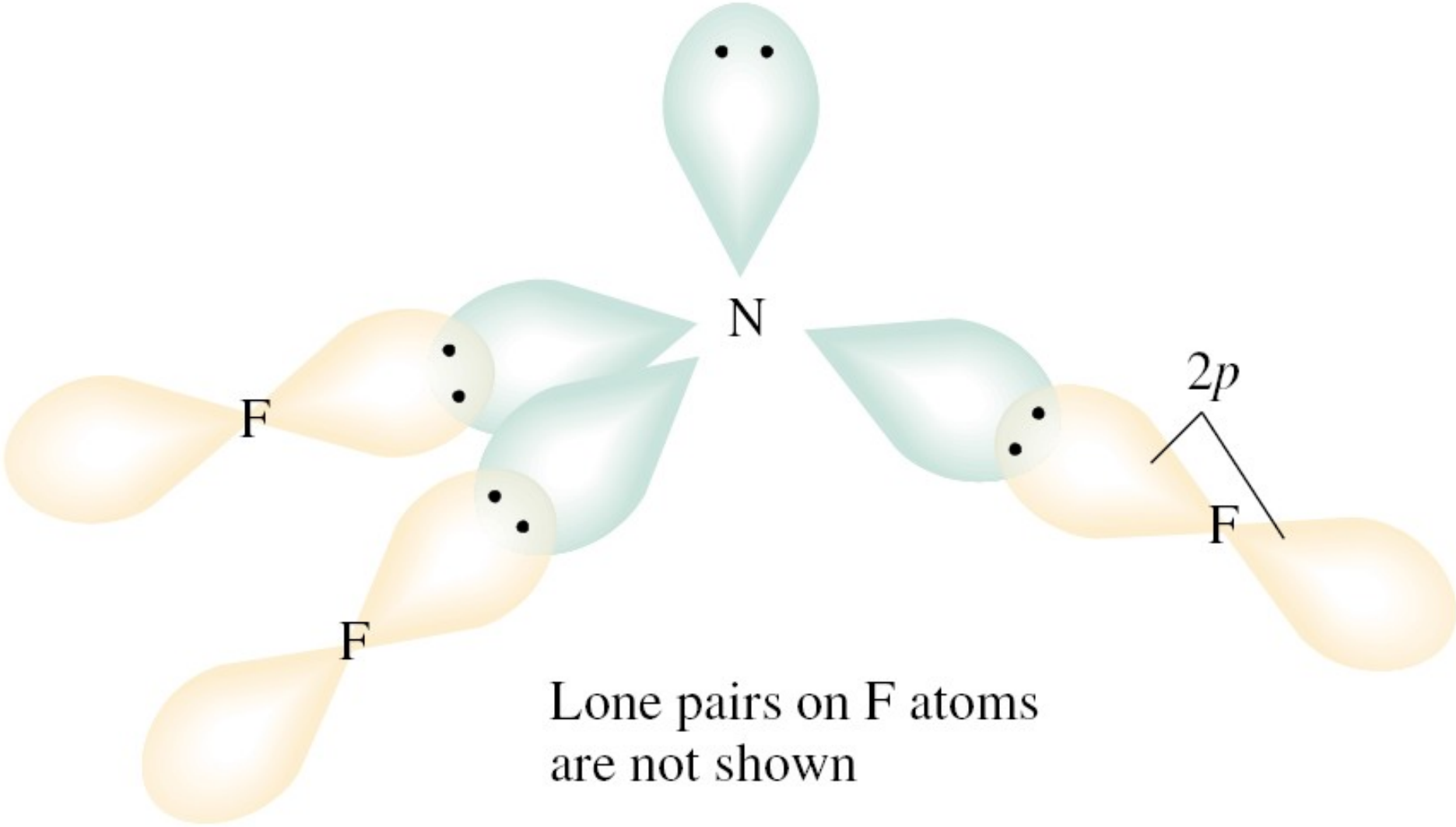
VB

Thuyết cộng hóa trị

TABLE 8-2 *Relation Between Electronic Geometries and Hybridization*

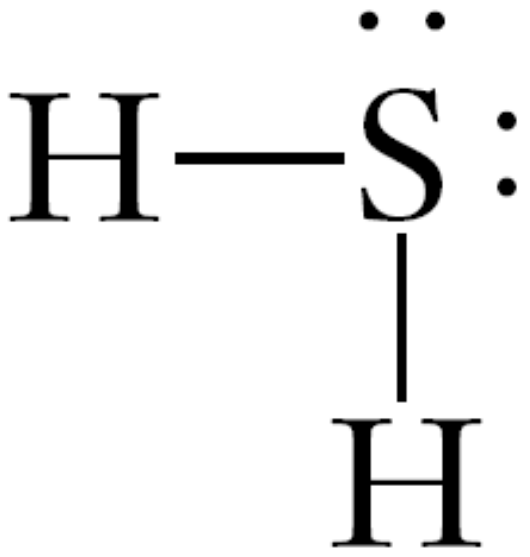
Regions of High Electron Density	Electronic Geometry	Atomic Orbitals Mixed from Valence Shell of Central Atom	Hybridization
2	linear	one *s*, one *p*	*sp*
3	trigonal planar	one *s*, two *p*'s	sp^2
4	tetrahedral	one *s*, three *p*'s	sp^3
5	trigonal bipyramidal	one *s*, three *p*'s, one *d*	sp^3d
6	octahedral	one *s*, three *p*'s, two *d*'s	sp^3d^2

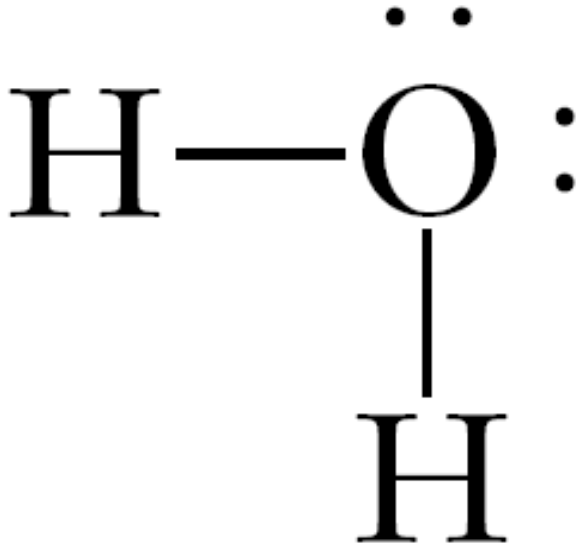

N [He]
2p
2s
hybridize
N [He]
sp3
N
H
H
H
1s

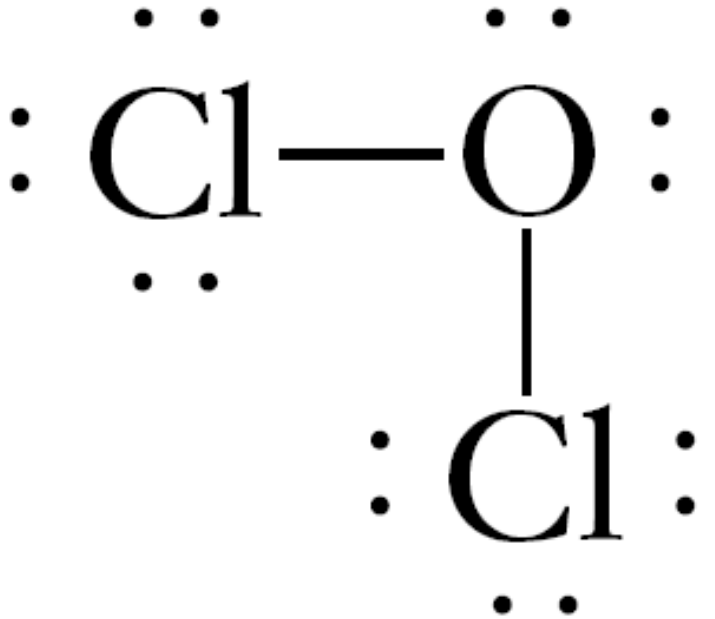

N
F
F
F
2p
Lone pairs on F atoms
are not shown

AX_2E_2

H_2O, H_2S, Cl_2O



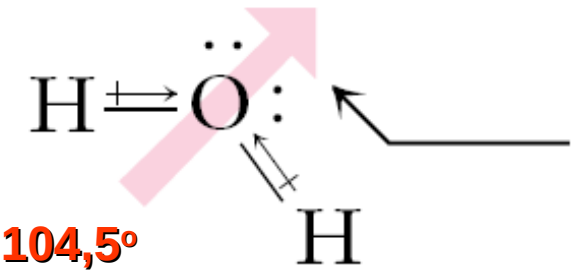




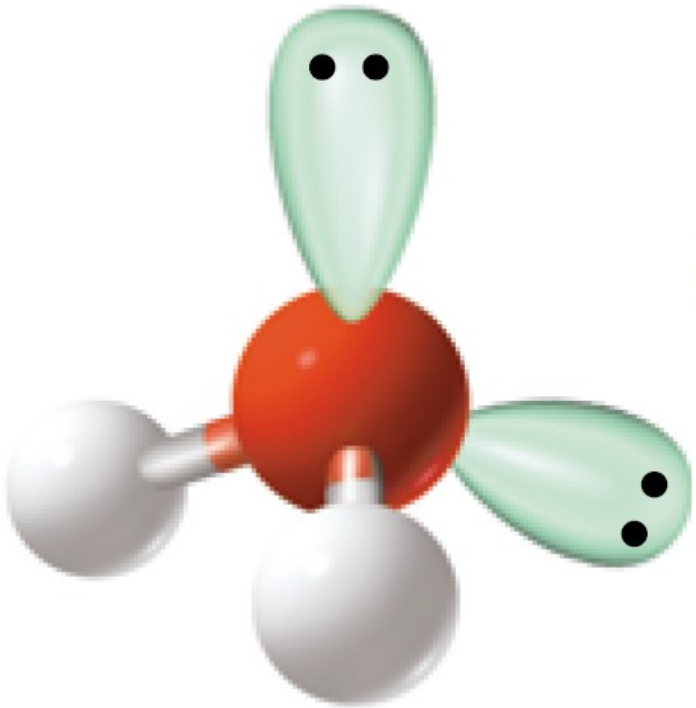
O—H

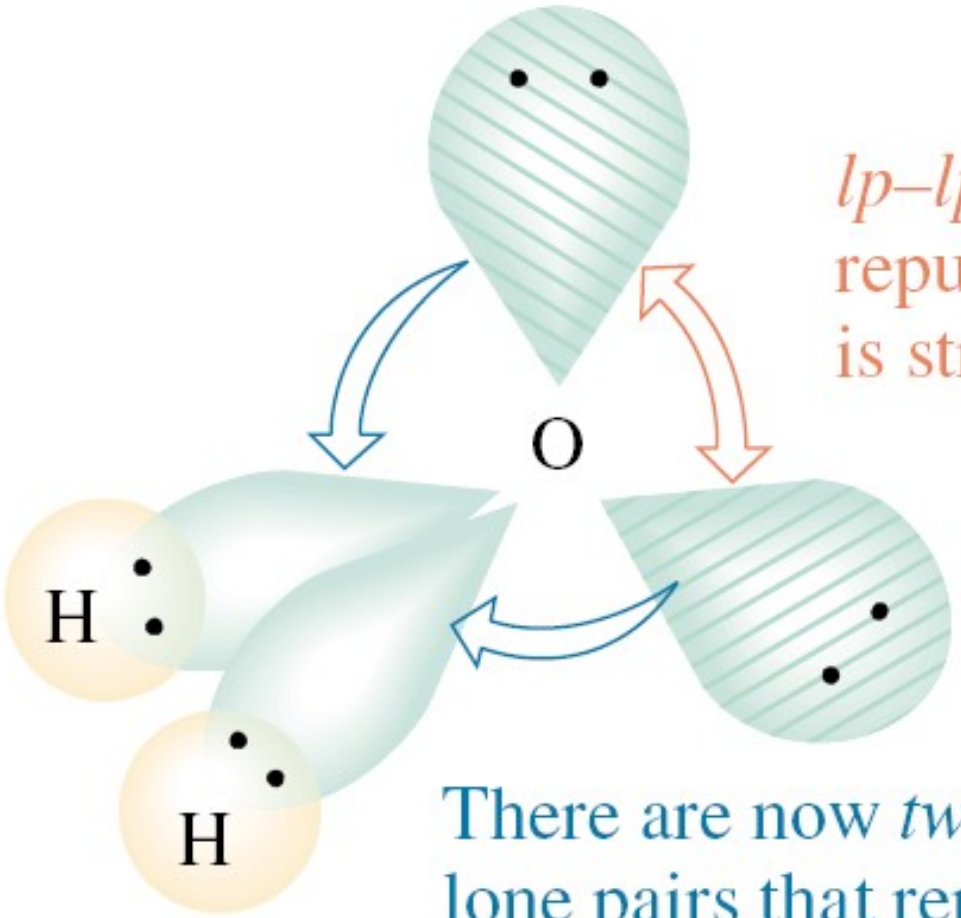
EN = 3.5 2.1

Δ(EN) = 1.4



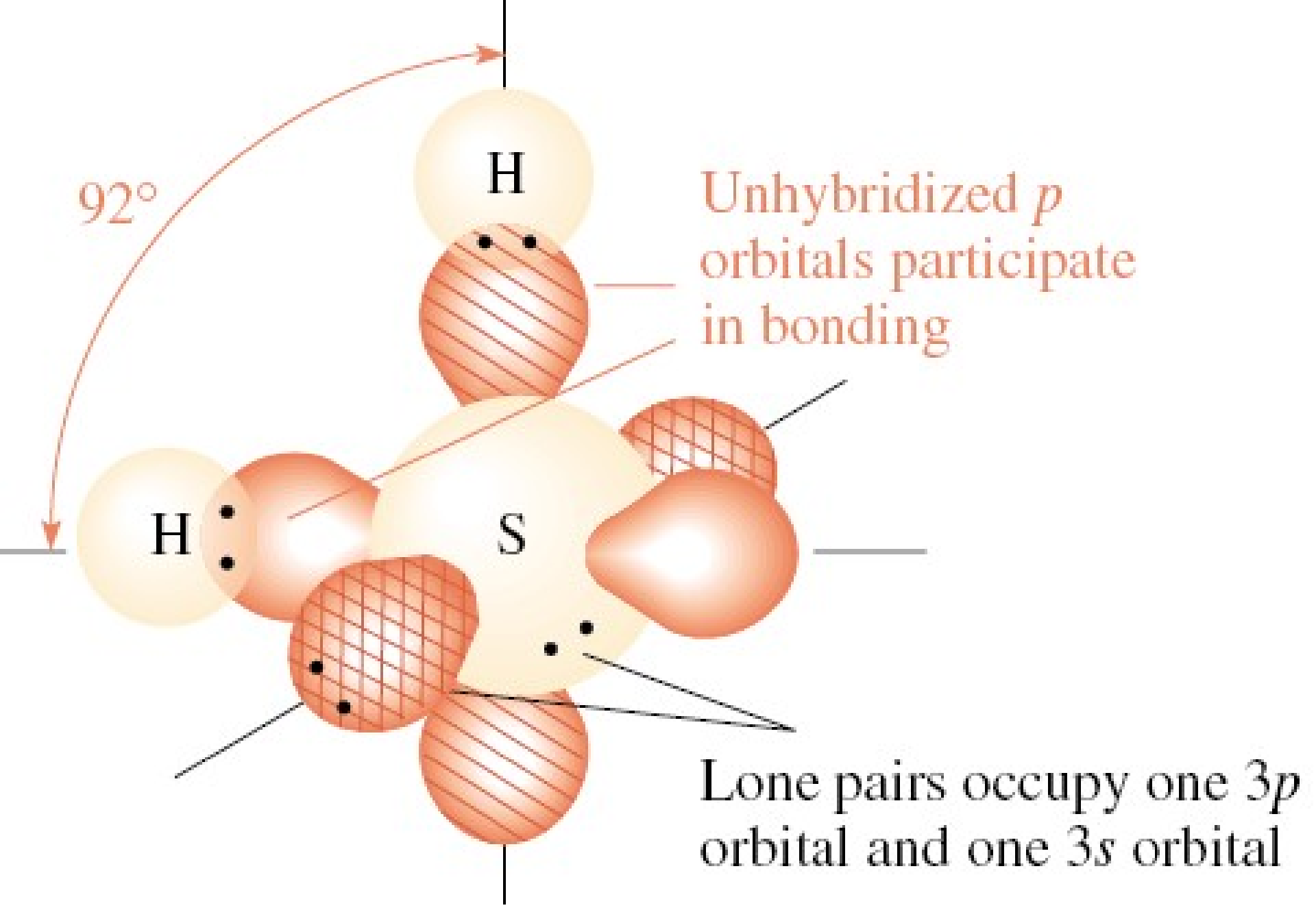
Molecular dipole; includes effect of two unshared electron pairs.





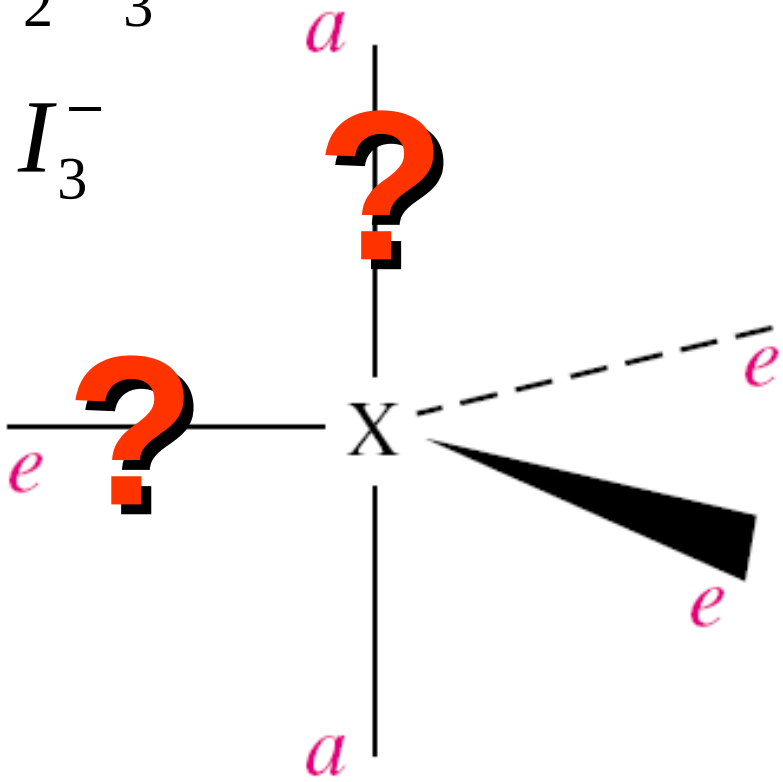
lp–lp repulsion is strongest

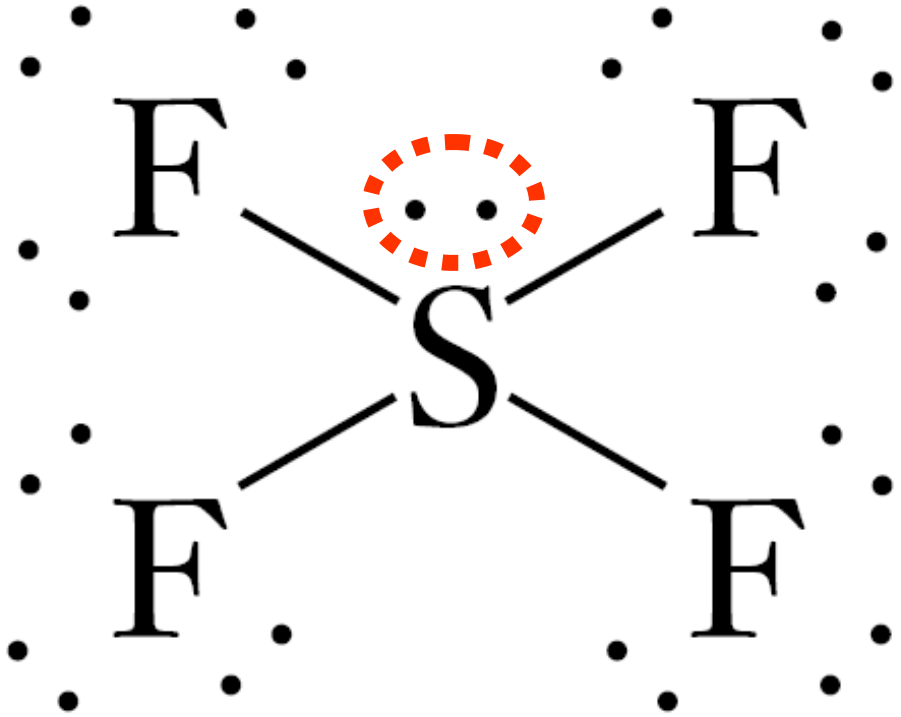
There are now *two* lone pairs that repel the bonded pairs


92°
H
H
S
Unhybridized p orbitals participate in bonding
Lone pairs occupy one 3p orbital and one 3s orbital

$AX_5E_0, AX_4E_1, AX_3E_2, AX_2E_3$

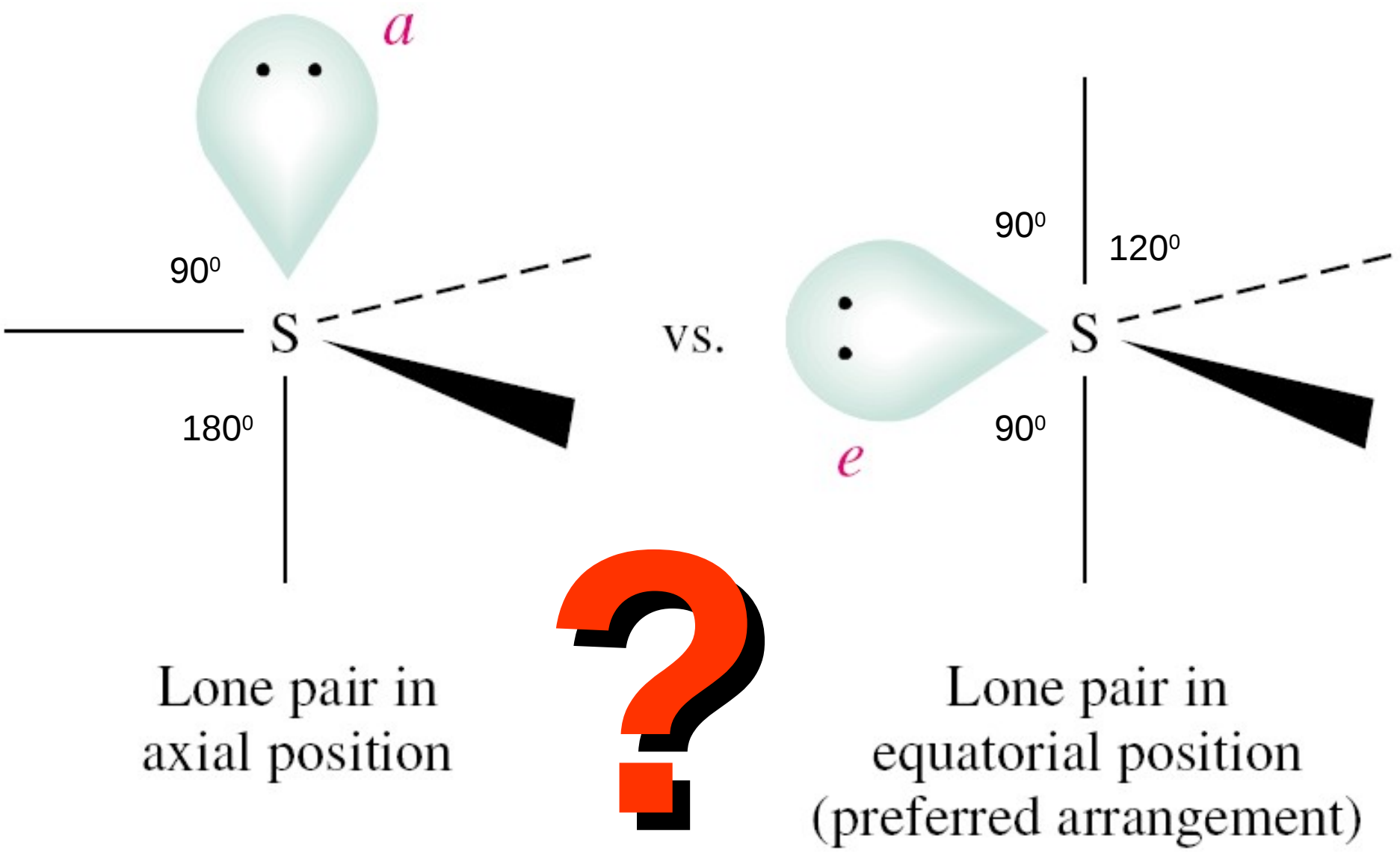
$PF_5, SF_4, ClF_3, BrF_3; XeF_2, I_3^-$





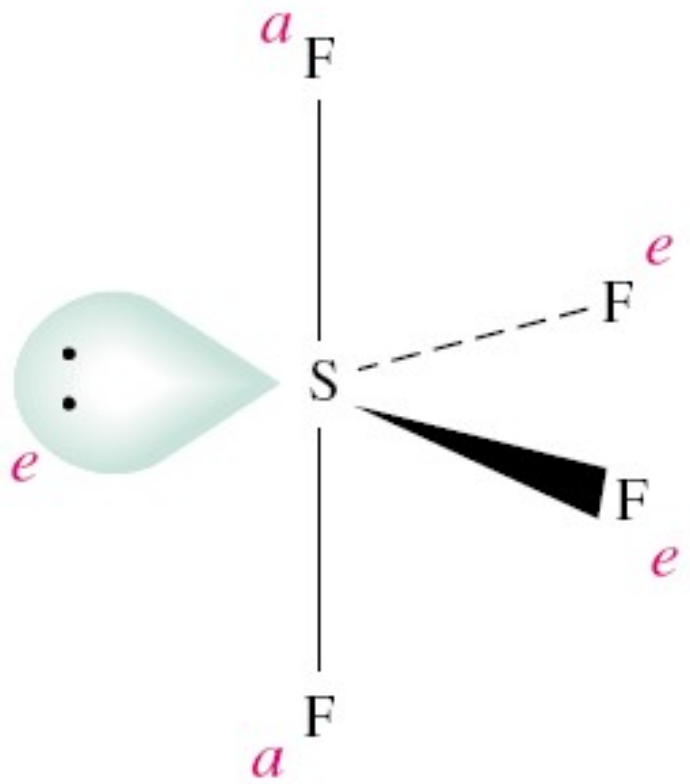
Tháp đôi tam giác

sp^3d

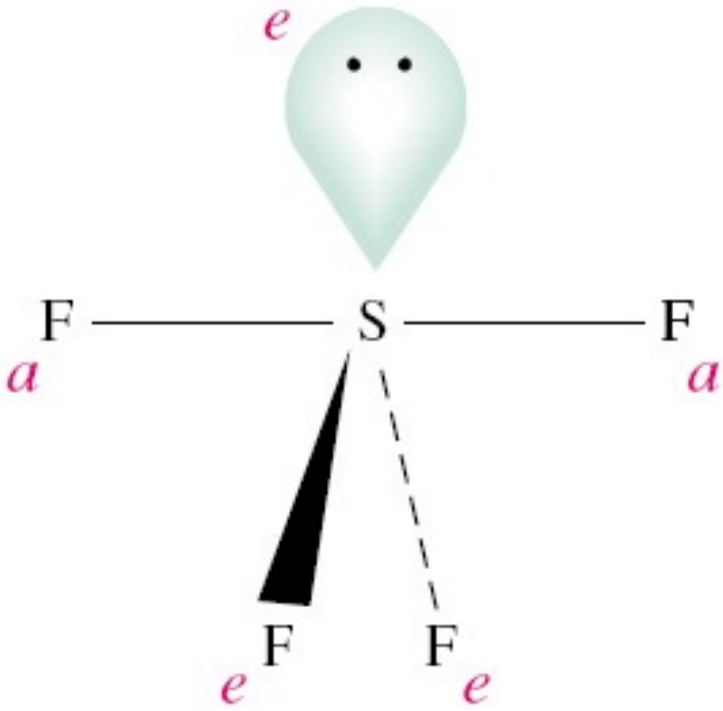


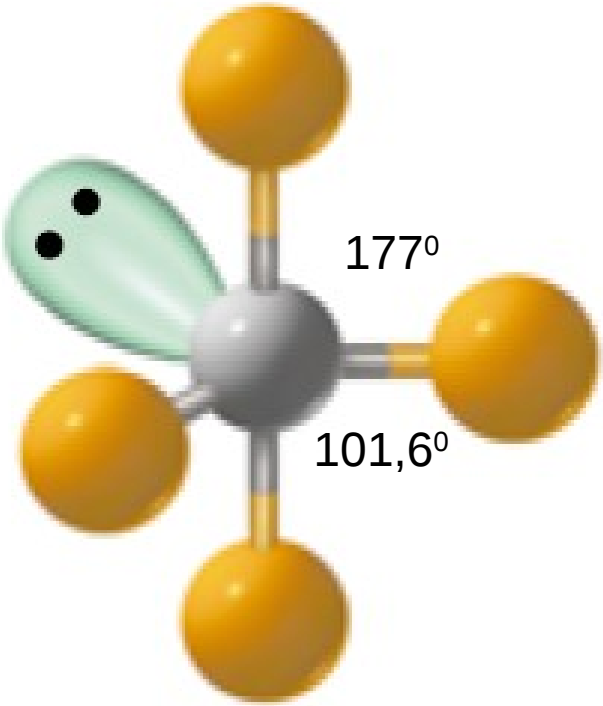
Lone pair in axial position

Lone pair in equatorial position (preferred arrangement)



or





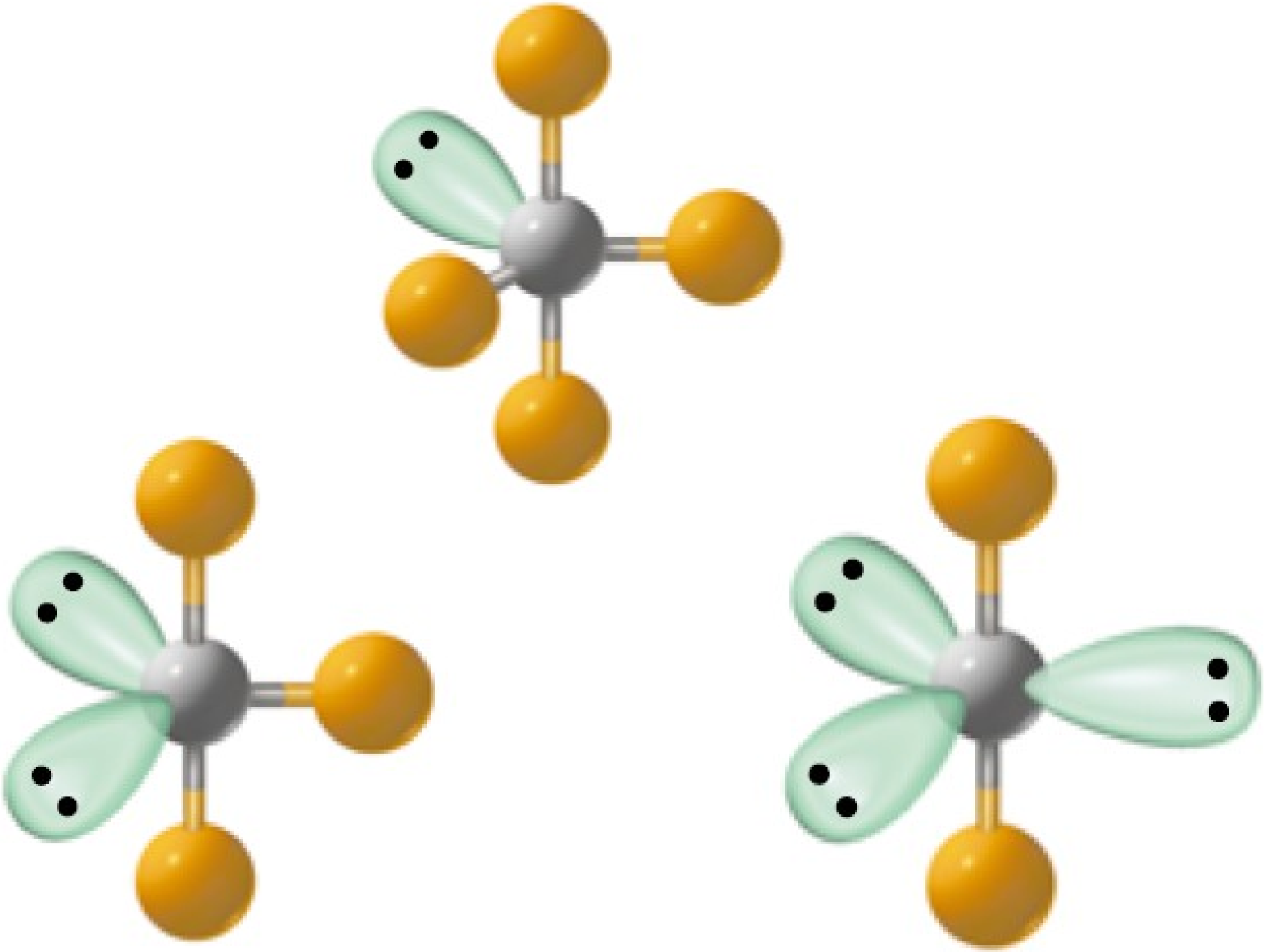


TABLE 8-3 *Molecular Geometry of Species with Lone Pairs (U) on the Central Atom*

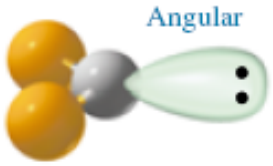
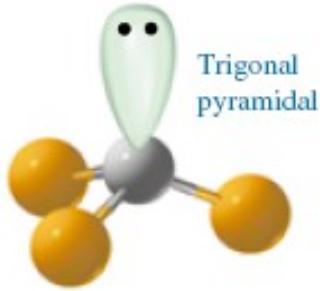
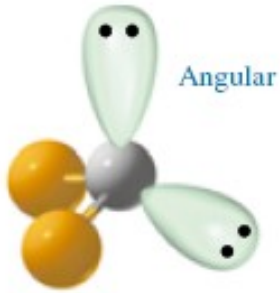
General Formula	Regions of High Electron Density	Electronic Geometry	Hybridization at Central Atom	Lone Pairs	Molecular Geometry	Examples
AB_2U	3	trigonal planar	sp^2	1		O_3, NO_2^-, SO_2
AB_3U	4	tetrahedral	sp^3	1		NH_3, SO_3^{2-}
AB_2U_2	4	tetrahedral	sp^3	2		H_2O, NH_2^-

TABLE 8-3 *(continued)*

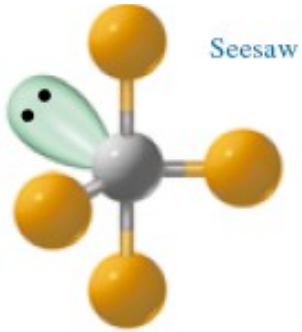
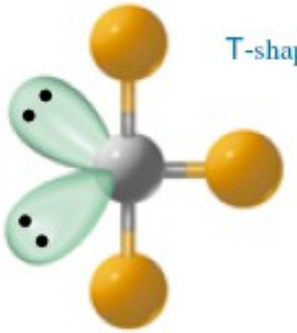
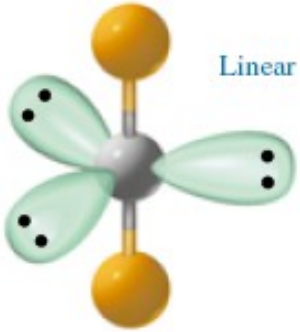
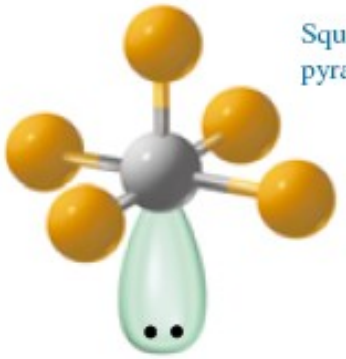
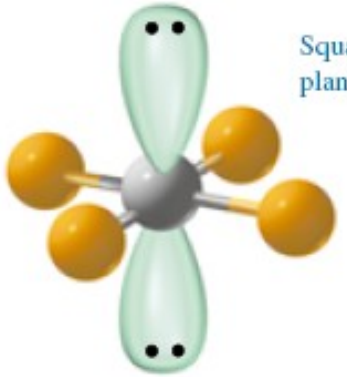
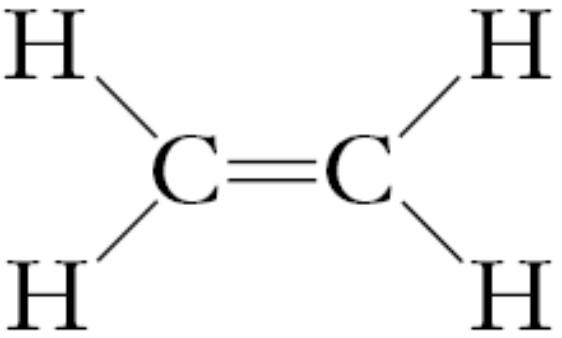
General Formula	Regions of High Electron Density	Electronic Geometry	Hybridization at Central Atom	Lone Pairs	Molecular Geometry	Examples
AB_4U	5	trigonal bipyramidal	sp^3d	1		SF_4
AB_3U_2	5	trigonal bipyramidal	sp^3d	2		ICl_3, ClF_3
AB_2U_3	5	trigonal bipyramidal	sp^3d	3		XeF_2, I_3^-

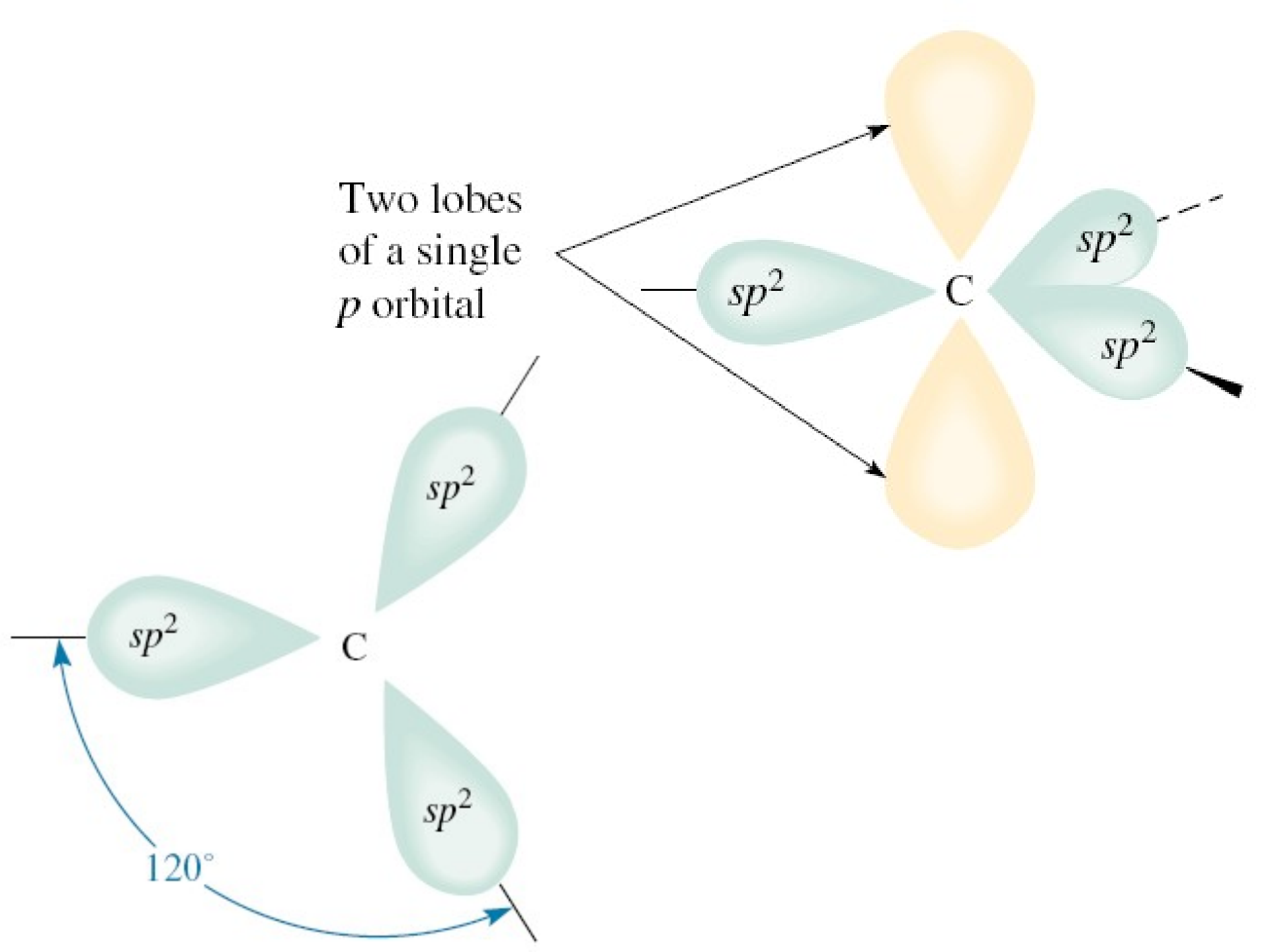
TABLE 8-3 *(continued)*

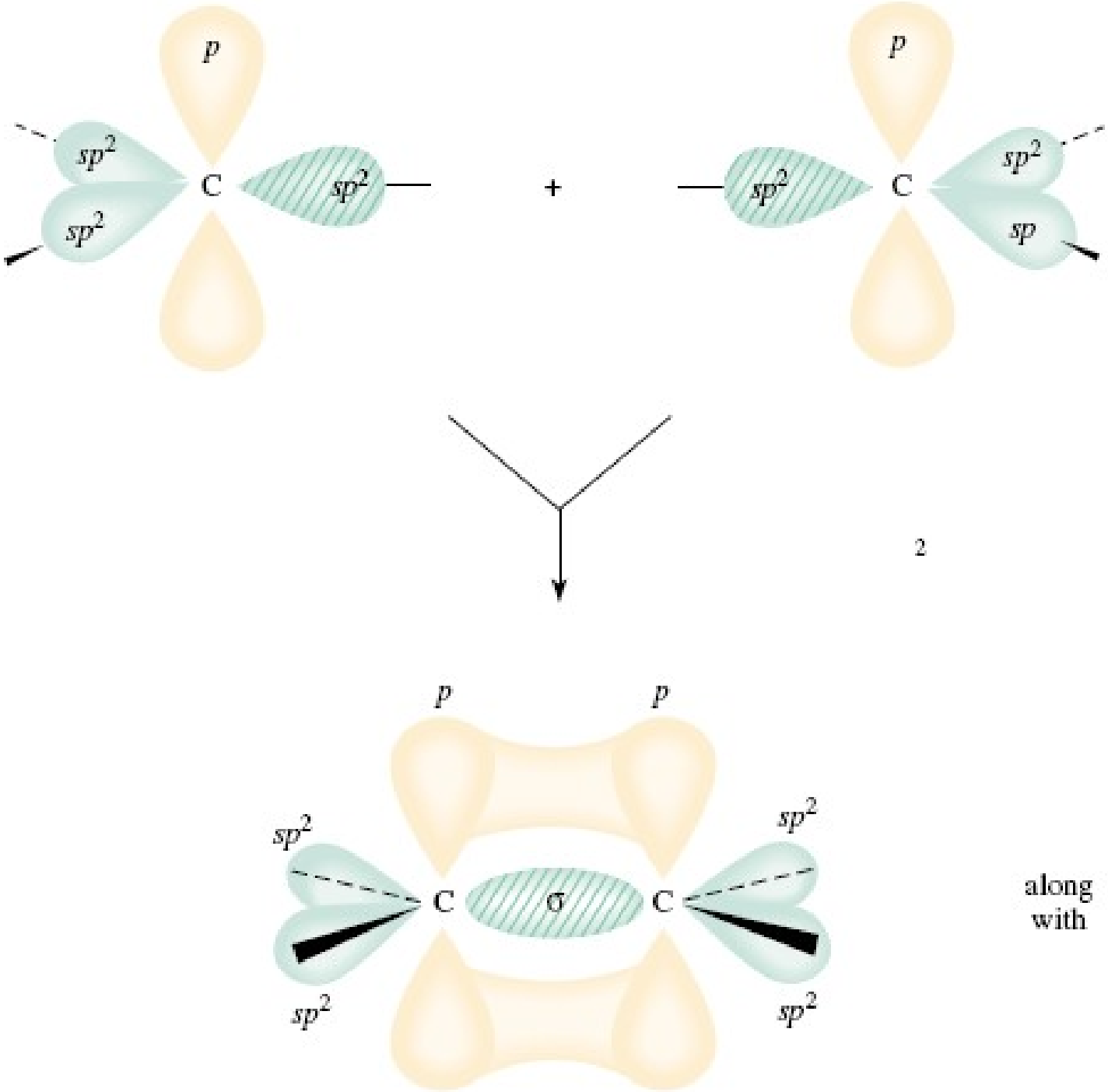
General Formula	Regions of High Electron Density	Electronic Geometry	Hybridization at Central Atom	Lone Pairs	Molecular Geometry	Examples
AB_5U	6	octahedral	sp^3d^2	1	 Square pyramidal	IF_5, BrF_5
AB_4U_2	6	octahedral	sp^3d^2	2	 Square planar	XeF_4, IF_4^-

HỢP CHẤT CHỨA LIÊN KẾT ĐÔI

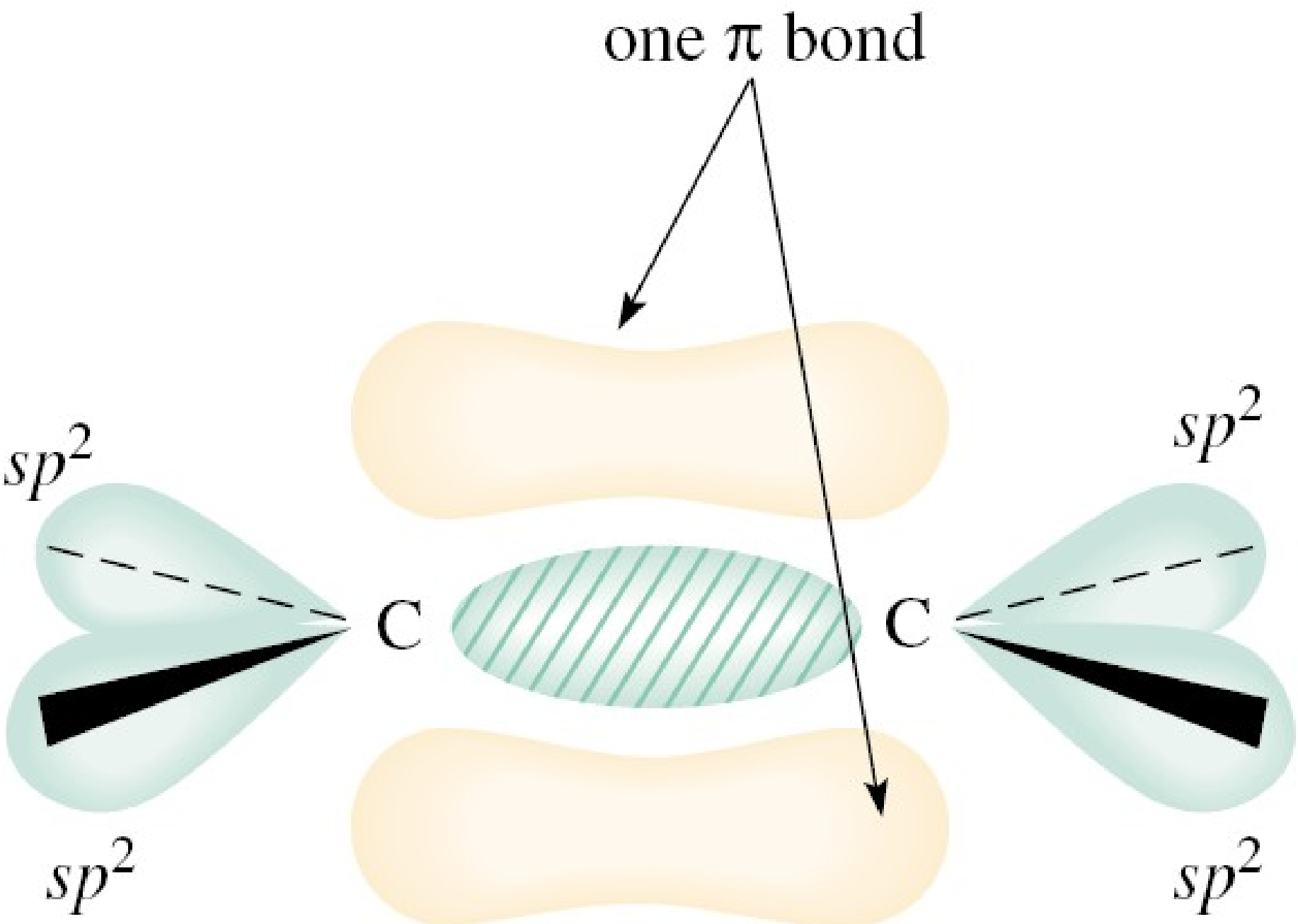
$$S = N - A$$
$$= 24 - 12 = 12e^{-} \text{ shared}$$

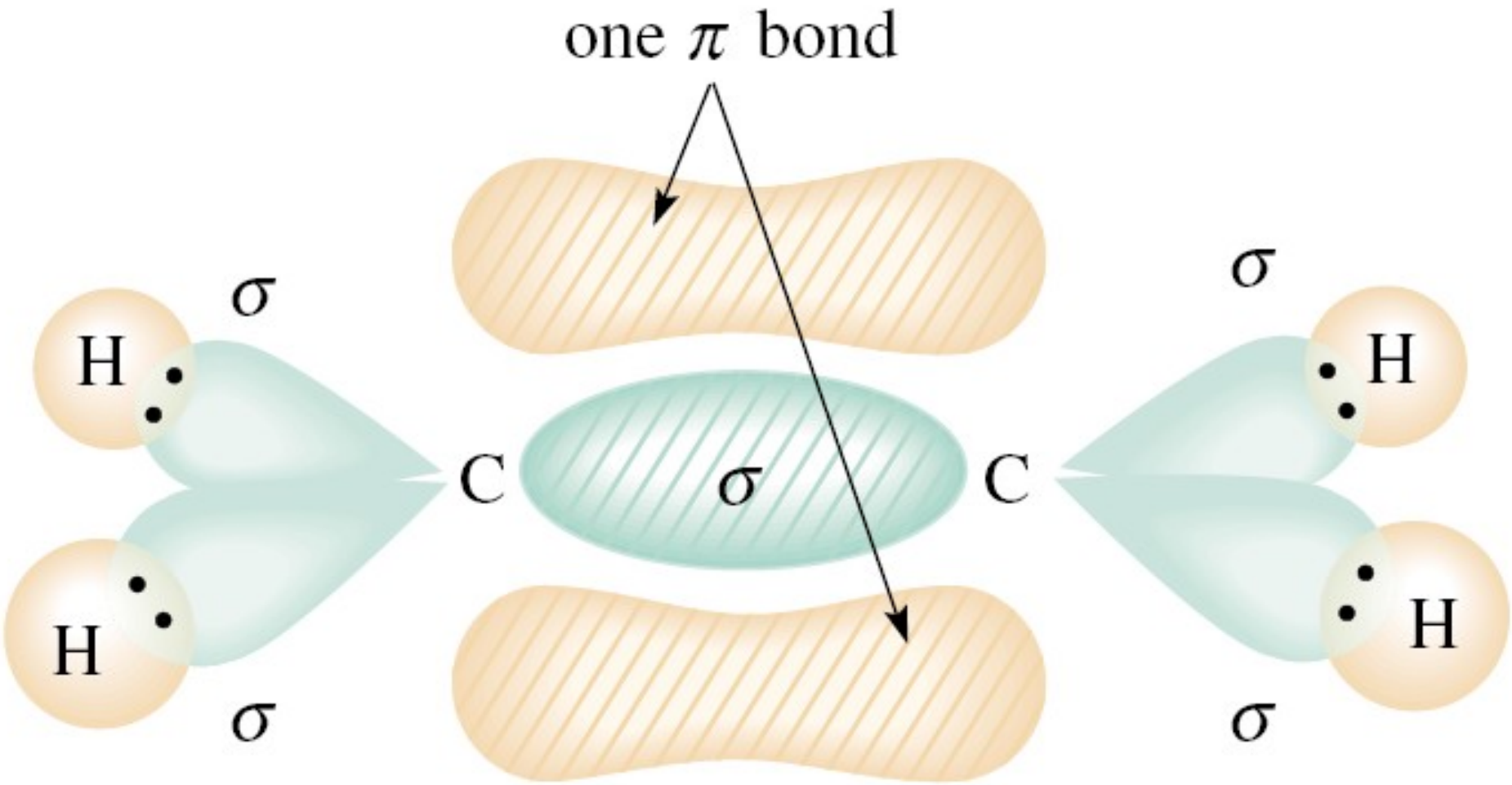



Two lobes
of a single
p orbital
sp2
sp2
sp2
C
sp2
sp2
sp2
C
120°



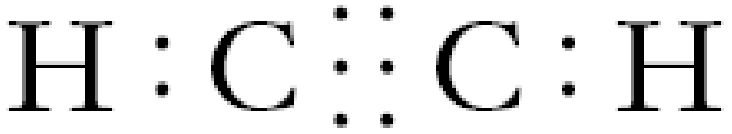
along with

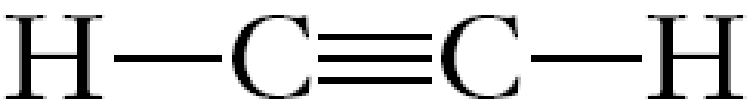

one π bond
sp2
sp2
C
C
sp2
sp2

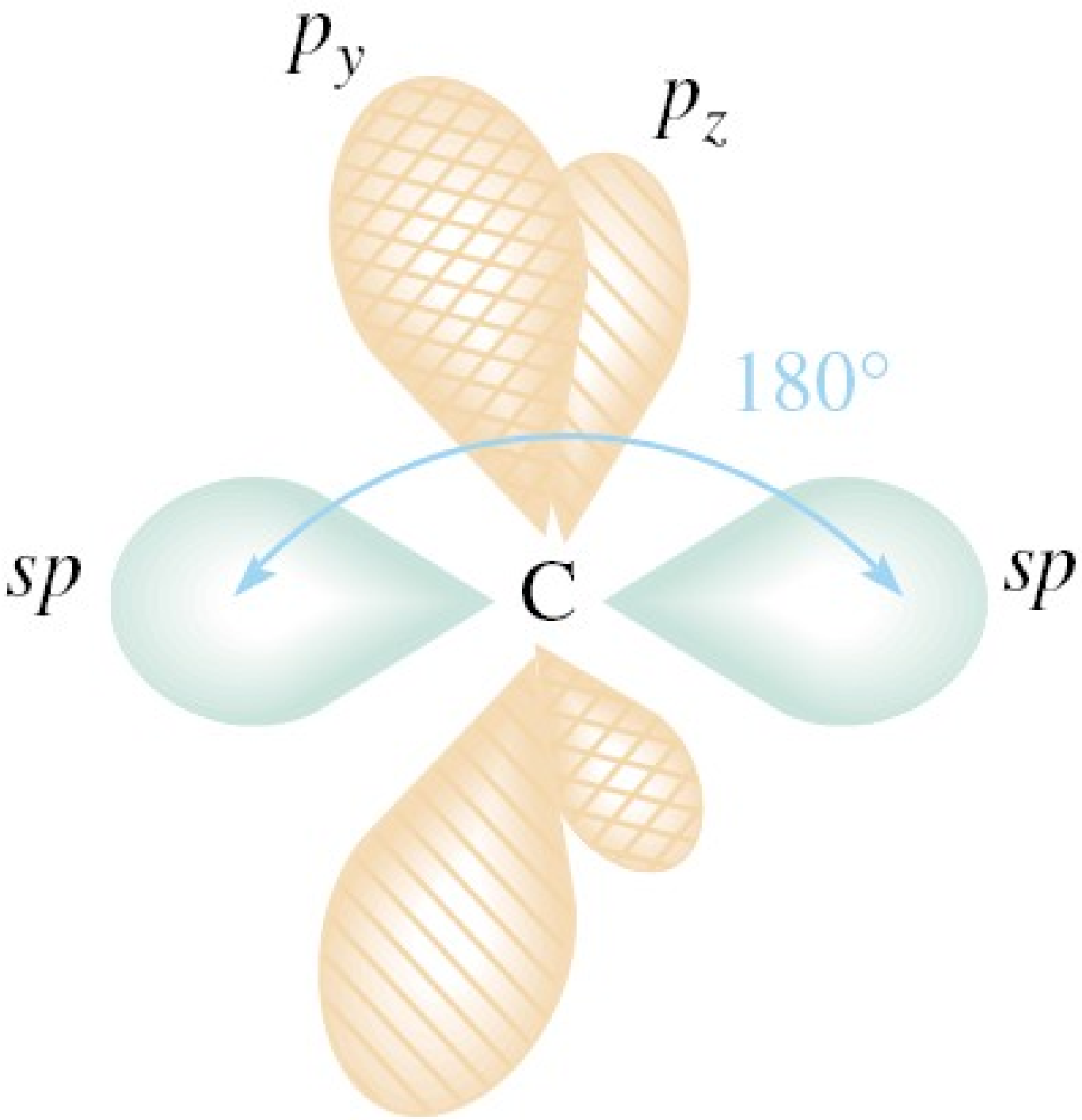

one π bond
σ
H
H
σ
C
σ
C
σ
H
H
σ

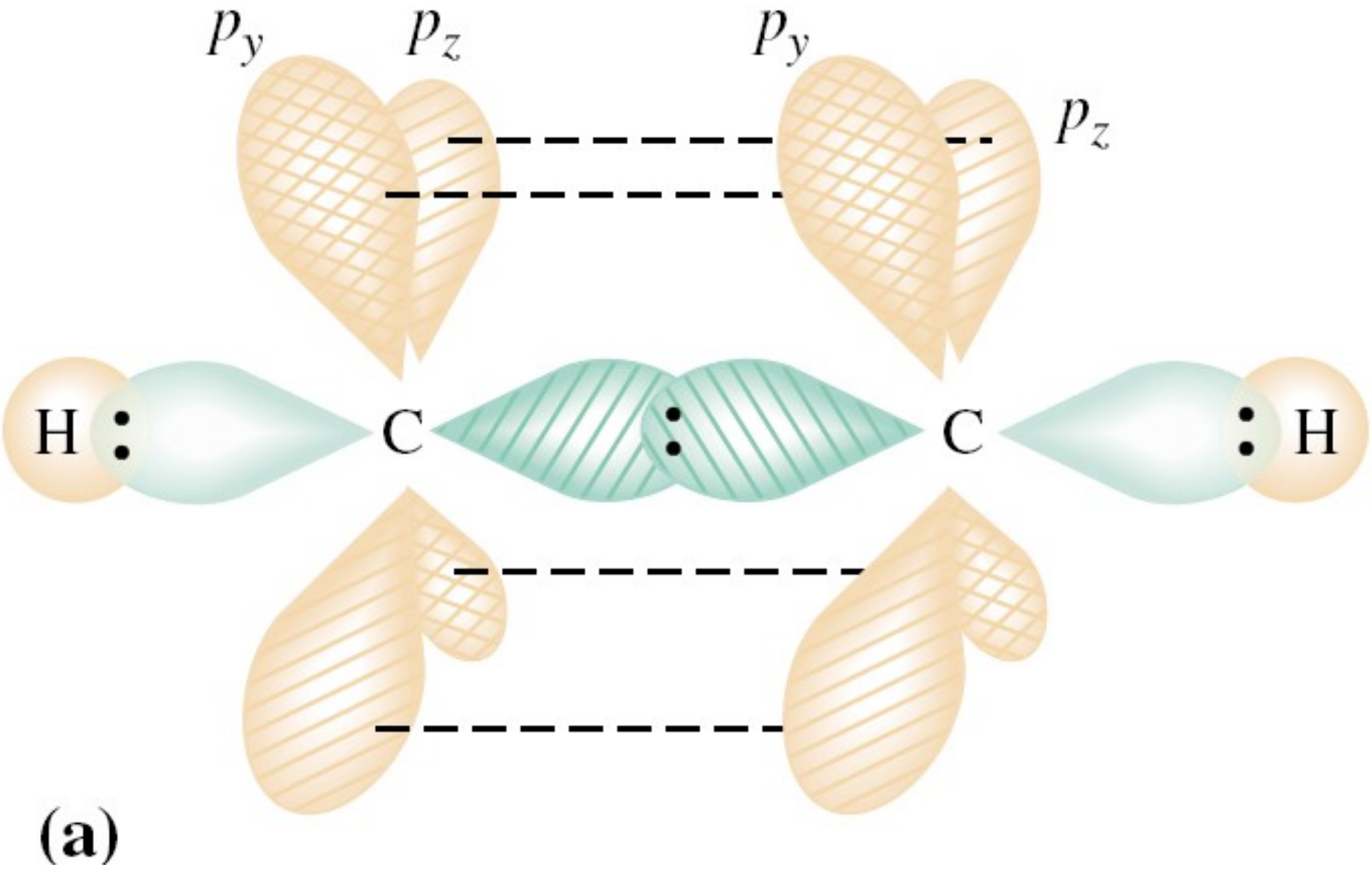
HỢP CHẤT CHỨA LIÊN KẾT BA

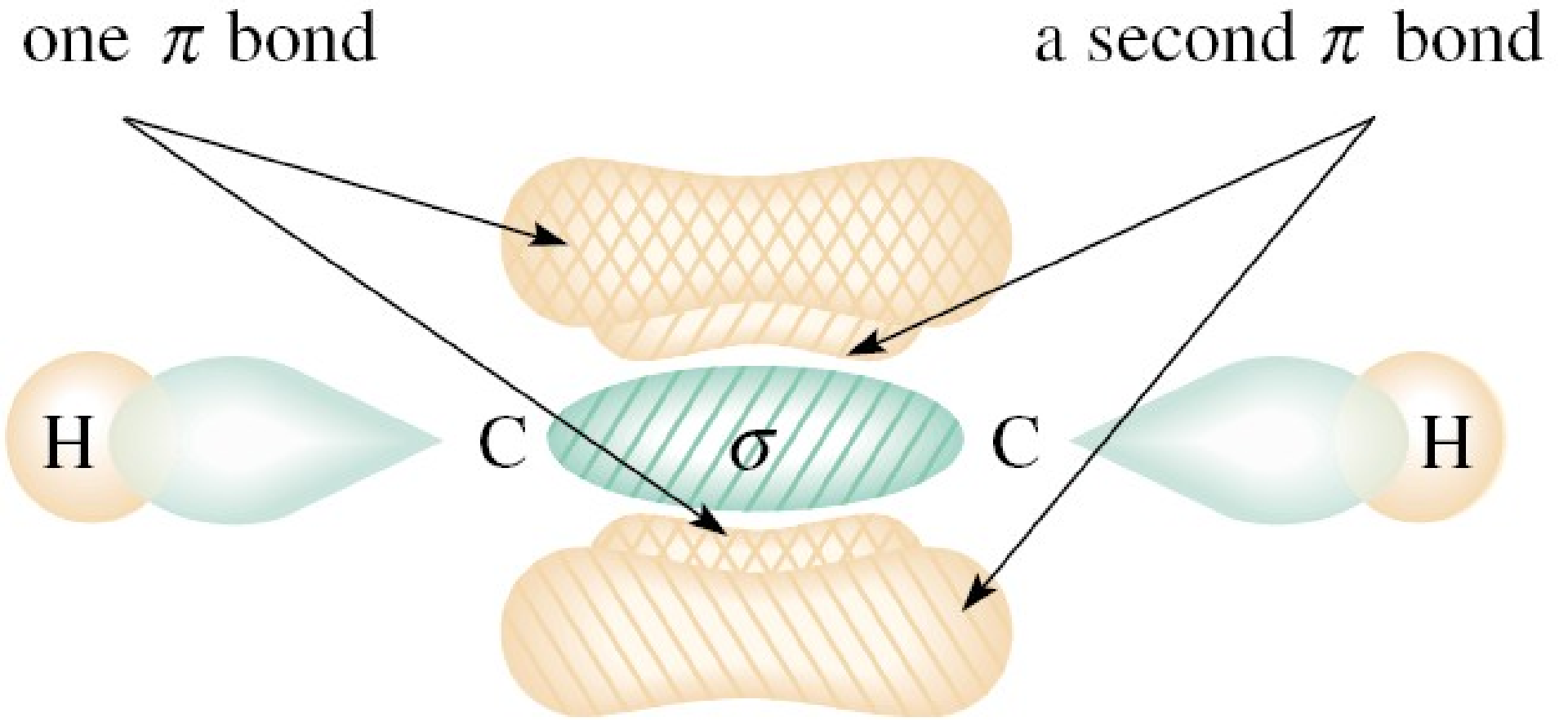
$$S = N - A$$
$$= 20 - 10 = \underline{10e^- \text{ shared}}$$






p_y
p_z
180°
sp
C
sp


p_y
p_z
p_y
p_z
H
C
C
H
(a)


one π bond
a second π bond
H
C
σ
C
H