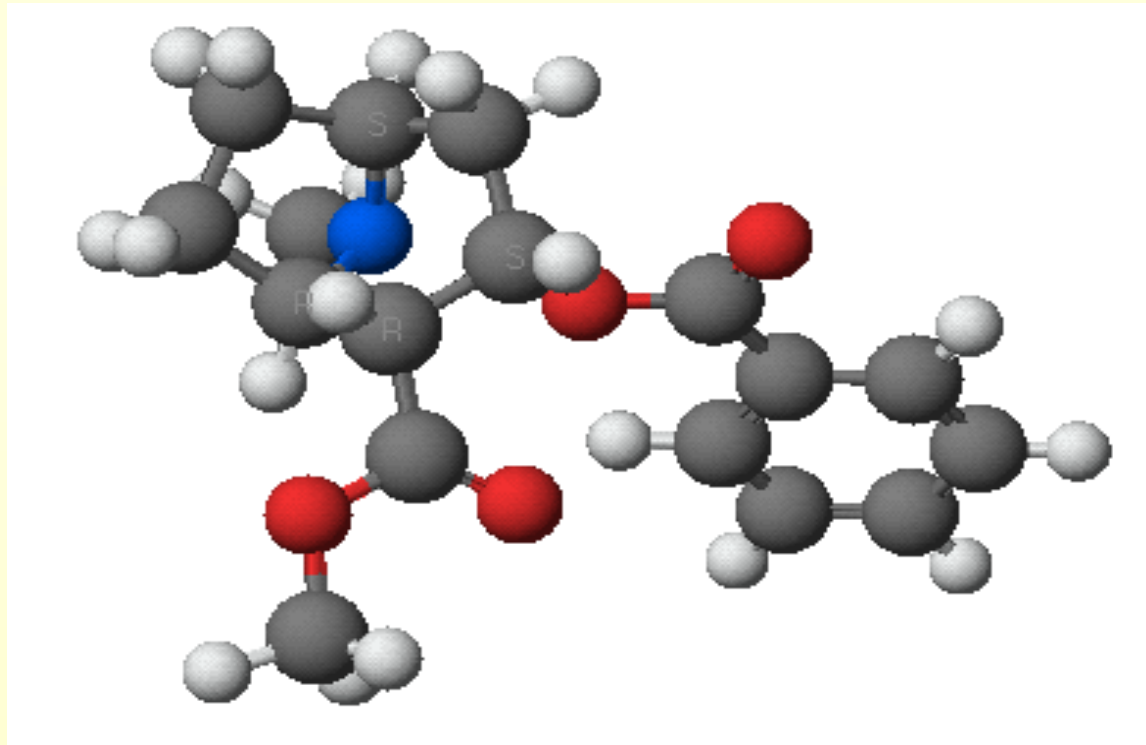


# BÀI 2:

---

## CẤU TẠO PHÂN TỬ - LKHH



# Mục tiêu:

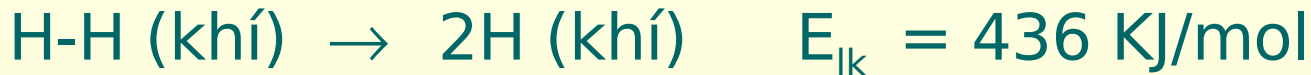
---

1. Biết các đại lượng đặc trưng của liên kết
2. Nêu được bản chất và cho ví dụ các thuyết cổ điển về liên kết
3. Trình bày được những luận điểm cơ bản của thuyết liên kết hoá trị (VB)
4. Biết các đặc điểm của các kiểu lai hoá và biểu diễn cấu trúc không gian phân tử
5. Trình bày được những luận điểm cơ bản của thuyết liên kết hoá trị (MO), cấu hình

# I. Những khái niệm về liên kết hoá học:

1. Năng lượng liên kết: năng lượng liên kết  $E_{lk}$

$E_{lk}$  là NL cần thiết để phá vỡ các lk trong 1 mol phân tử khí ở trạng thái cân bằng nhiệt độ của nguyên tử tự do cũng ở trạng thái khí



\* NL phá vỡ lk là NL cần cung cấp nên mang dấu +

\* NL tạo thành lk là NL giải phóng nên hình thành 1 mol lk từ các nguyên tử khí có thể mang dấu -

HNC-A

$E_{lk}$  càng lớn thì lk càng bền

---

**2. Nối dài liên kết**: là khoảng cách giữa tâm của 2 hạt nhân nguyên tử trong phân tử. Nối dài LK càng nhỏ LK sẽ càng bền

**3. Số phân cực liên kết**: là tổng cho số phân cực của phân tử LK bỏ phân cực khi nối âm nên của 2 nguyên tử khác biệt nhau

**4. Góc liên kết**:

1 phân tử LK nhiều nguyên tử thì là tổng quan tổng là góc LK

Góc LK là góc tạo bởi sợi caét nhau

của các trục nối tâm của nguyên tử trung tâm với tâm của tổng nguyên

# Caùc nguyêân töû lieân keát vôùi nhau nhö theá naøo?

---

- Do không thể quan sát trực tiếp caùc lieân keát hòu hoïc, ta döïa vaøo tính chaát cuûa caùc lieân keát ñeå xây döïng caùc mô hình (lyù thuyeát) ñeå bieåu dieãn lieân keát giöõa caùc nguyêân töû.
- Caùc lyù thuyeát ñöôïc söû duïng nhieàu nhaát laø:
  - Thuyeát Baùt töû cuûa Lewis
  - Thuyeát töông taùc caùc caëp electron (VSEPR)

# Phân loại liên kết hóa học

---

- Tùy theo bản chất, liên kết hóa học có thể phân thành 3 loại chính
  - Liên kết ion
  - Liên kết cộng hóa trị
  - Liên kết kim loại.

Bản chất và tính chất của mỗi loại liên kết trên có thể được giải thích bằng các thuyết về liên kết hóa học thích hợp.

# Liên kết ion

---

- Liên kết ion ñöôïc coi laø heä quaû cuûa söï thaønh caùc ion âm vaø döông thoâng qua vieäc cho nhaän electron giöõa caùc nguyên tử.
- Ñöôïc giaûi thích kháù toát qua lý thuyeát ñôn giaûn cuûa Lewis.

# Liên kết Coang Houa Trò

---

- *Liên kết coäng houa trò* cóu baùn chaát laø söi duøng chung electron giöõa caùc nguyêân töû.
- Thöông ñöôïc giaûi thích thoâng qua thuyeát liên kết houa trò hoaëc thuyeát vaân ñaïo phaân töû.



# Liên Kết Kim Loại

---

- Liên kết kim loại không thể giải thích thỏa nào bằng thuyết Lewis cũng như thuyết liên kết hóa trị do nó thông thuộc giải thích bằng thuyết **miền năng lượng**, thích nhất là thuyết vận hành phân tử áp dụng cho hệ số khoảng  $10^{23}$  nguyên tử.

- 
- **Các lý thuyết về Liên Kết Hóa Học**

# Thuyết Lewis

- \*Liên kết hóa học hình thành do các nguyên tử trao đổi hoặc sử dụng chung các electron hóa trị
- \*Electron hóa trị là các electron nằm trong các lớp vỏ ngoài cùng của các nguyên tử.
- \*Luật "Bát tử"
- Các nguyên tử có xu hướng cho, nhận, hay sử dụng chung electron để đạt tới cấu hình lớp vỏ ngoài cùng bền vững



G.N.Lewis  
1875-1946  
American Chemist

# Kyù hieäü Lewis

---

Moâ taû caùc electron hoüa trò cuüa caùc nguyean töü.

Hydro:  $\text{H}\cdot$

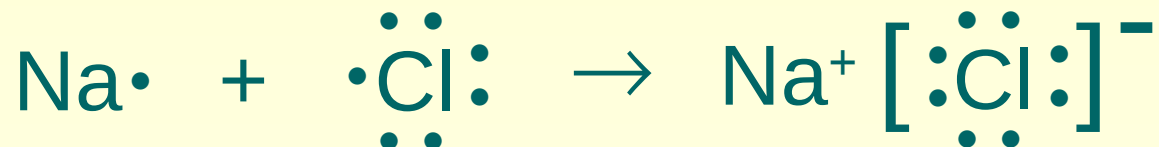
Natri:  $\text{Na}\cdot$

Clor:  $\cdot\ddot{\text{Cl}}\cdot$

# Sõĩ hình thaønh lieân keát

---

- Sõĩ hình thaønh NaCl:



Sõĩ hình thaønh HCl:



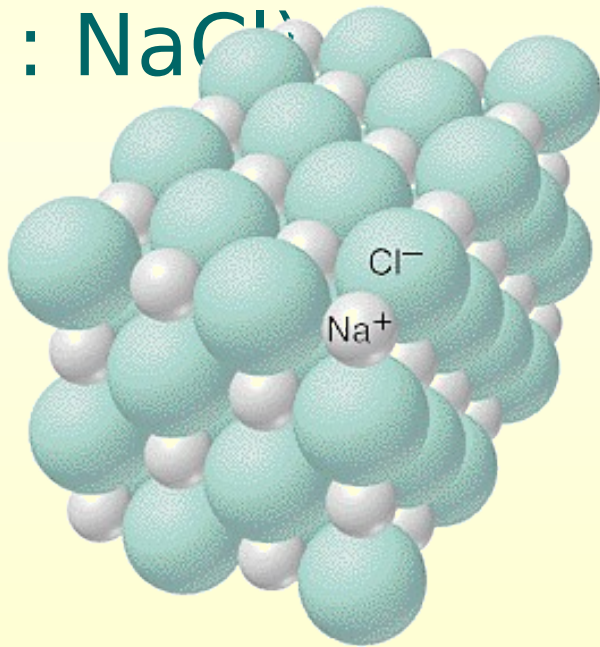
Kim loaïĩ nhõõøng electron cho phi kim ñeã taõ lieân keát ion.

Hai phi kim duøng chung electron ñeã taõ lieân keát Coãng Hoùa Trò.

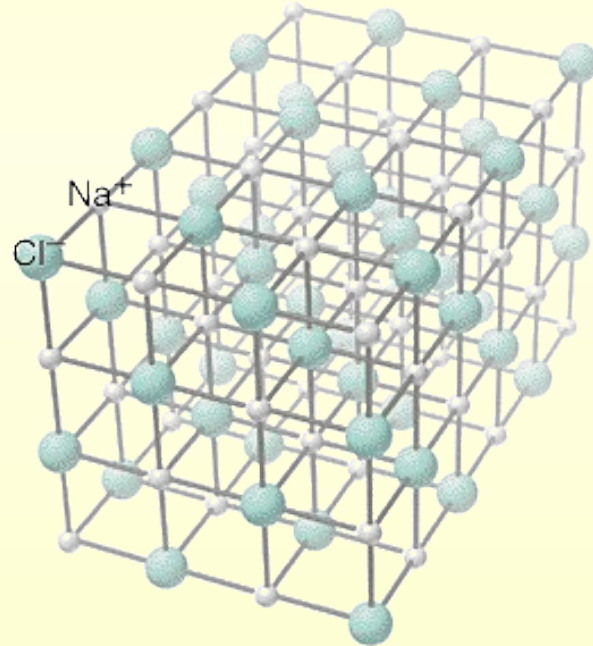
# Hôïp chaát ion

---

Trong caùc hôïp chaát ion, caùc ion döông vaø âm saép xeáp thaønh moät maïng löôuì tinh theå vöõng chaéc. (ví duï :  $\text{NaCl}$ )



(a)



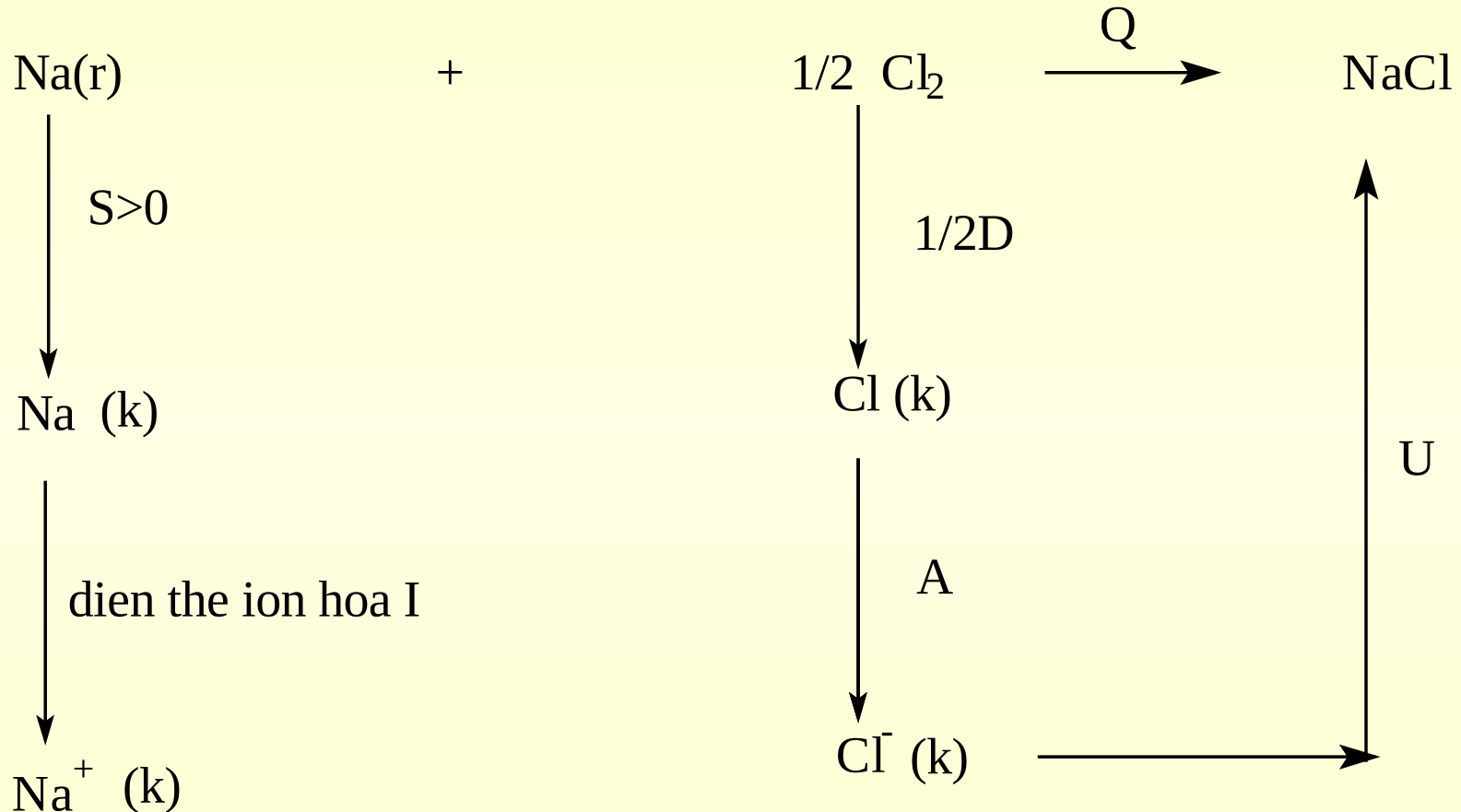
(b)

---

# NL MẠNG TINH THỂ

NL mạng tinh thể là NL phòùng thích ñeỏ ñoỏ ion (+), ion (-) ôu theỏ hỏi vaỏ vò trí thích hỏp trong tinh thể, vì ñây là NL phòùng thích neỏn NLMTT cò trỏ sốỏ âm. Trỏ sốỏ tuyeỏt ñoỏi củỏ NLMTT cỏng lỏn thì tinh thể cỏng beỏn

# Chu trình Born-Haber



HÑC-A

$$Q = S + 1/2D + \text{dien the ion hoa I} + A + U$$



---

S : Nhiệt thăng hoa (26 Kcal/mol)

D : NL noái (58 Kcal/mol)

A: AÙi löic ñieän töu (-86,5 kcal/mol)

U: NL maïng tinh theá

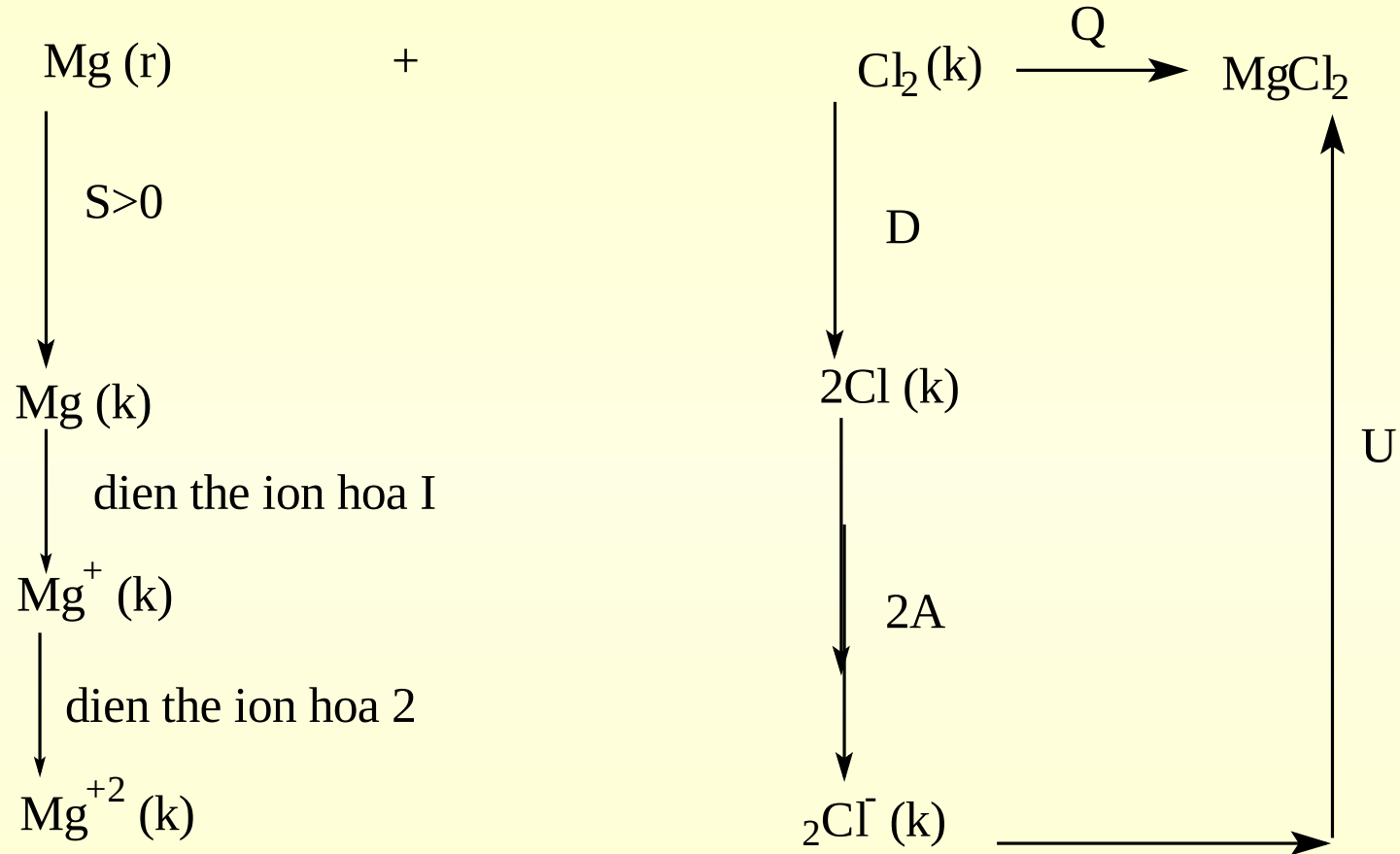
Q: Nhiệt phân òùng (-98,23 Kcal/mol)

Ñieän theá ion hoàu I : 118 Kcal/mol

Tính NL maïng tinh theá NaCl

$$U = Q - S - 1/2D - \text{Ñieän theá ion hoàu I} - A$$

# Chu trình Born-Haber



HÑC-A

$$Q = S + D + \text{dien the ion hoa I} + \text{dien the ion hoa 2} + 2A + U$$

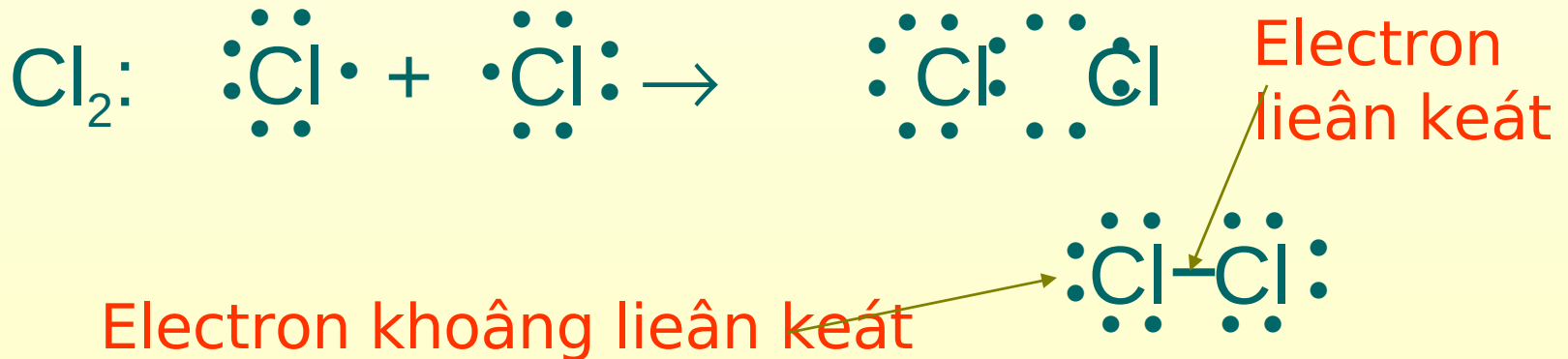
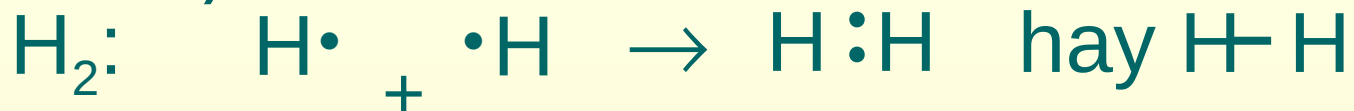
# Liên kết ion, CHT

---

- \*Trong liên kết ion, một nguyên tử nhường hoặc nhận electron (tạo ion dương) một nguyên tử khác nhận hoặc nhường electron (tạo ion âm).
- \*Khi hai nguyên tử tương tác nhau hình thành liên kết, khoảng nguyên tử nào đó có xu hướng nhường hoặc nhận electron.
- \*Trong liên kết CHT Chuỗi đơn chung cặp electron nên cấu trúc hình bền 8 electron.
- \*Mỗi cặp electron đơn chung tạo thành một liên kết.

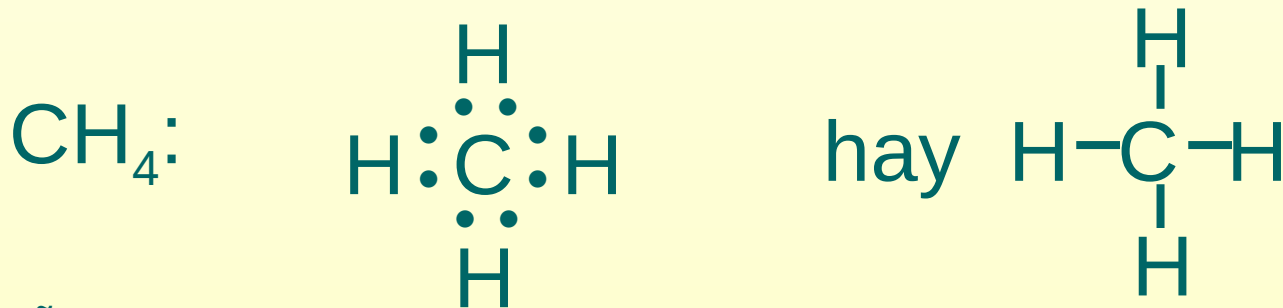
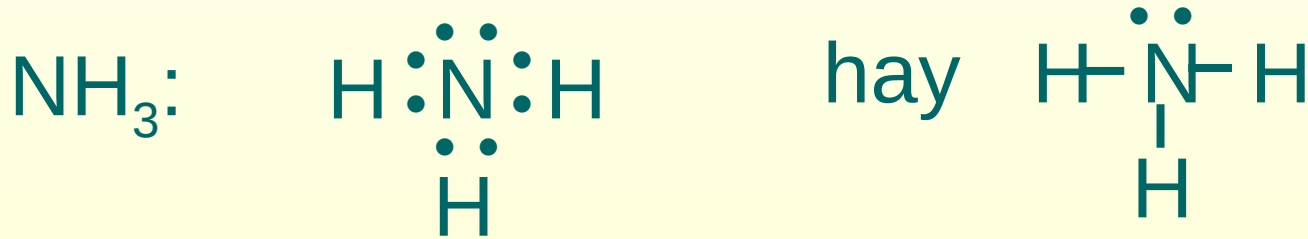
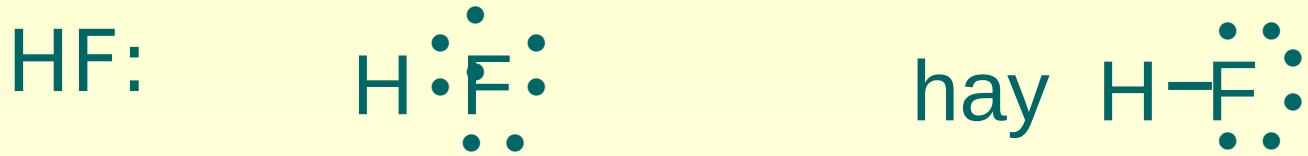
# Coâng thòuc Lewis

- Mô taû lieân keát trong caùc hôïp chaát coäng hoùa trò.
- Mỗi nguyeân töû phaûi coù 8 electron lôùp voû ngoaøi cuøng (trøø H coù 2 electron).



# Coâng thòuc Lewis

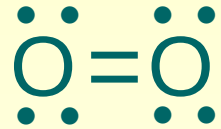
---



# Liên kết non, liên kết ba

---

O<sub>2</sub>:



N<sub>2</sub>:



- Số cặp electron dùng chung nhỏ
- gọi là **Ba liên kết** .

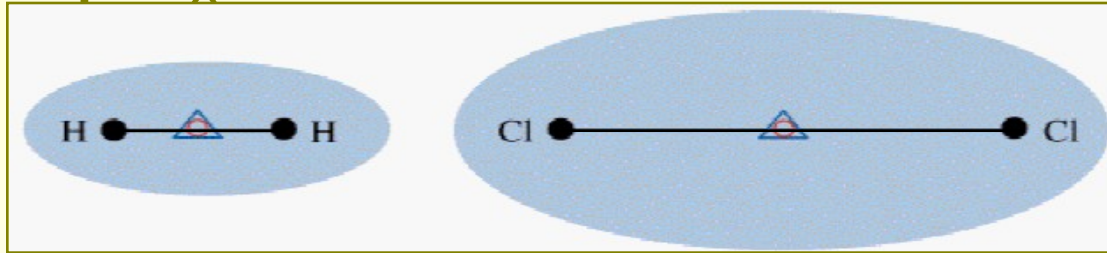
# Liên kết Cộng Hòa Trò Cờ

- Khi cặp electron nào phân bố đều giữa hai nguyên tử : liên kết

khoảng

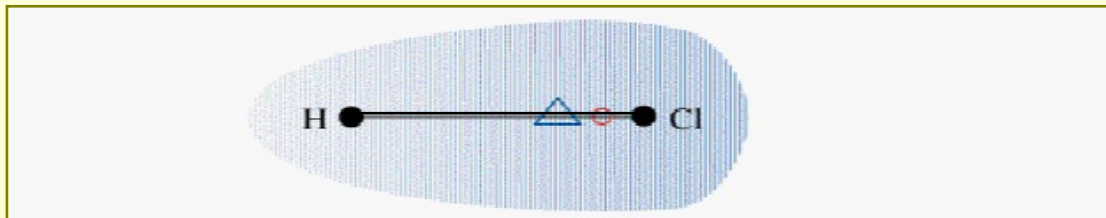
$H_2$ ,

$Cl_2$ :



Liên kết cộng hòa trò cờ phân bố đều khoảng nào:

$HCl$ :



---

- **THUYẾT HIỆN NÁI VÈ  
LIÊN KẾT PHÂN TỬ**

Thuyết Tông Tác Caç Caç  
Electron

Thuyết Liên Kết Hòa Trò

Thuyết Vañ ñáio Phân Tử



# **Thuyết t $\ddot{o}$ ng t $\ddot{a}$ c c $\ddot{a}$ c c $\ddot{a}$ p electron**

---

**Valence Shell Electron Pair Repulsion theory (VSEPR).**

**Ph $\ddot{o}$ ng ph $\ddot{a}$ p n $\ddot{o}$ n gi $\ddot{a}$ n nh $\ddot{o}$ ng hi $\ddot{e}$ u  
qua $\ddot{u}$  n $\ddot{e}$ a x $\ddot{a}$ c n $\ddot{o}$ nh h $\ddot{i}$ nh d $\ddot{a}$ ng ph $\ddot{a}$ n  
t $\ddot{o}$ u CHT.**

**Nguyên t $\ddot{a}$ c:**

**C $\ddot{a}$ c c $\ddot{a}$ p electron quanh nguyên t $\ddot{o}$ u  
s $\ddot{e}$  s $\ddot{a}$ p x $\ddot{e}$ p sao cho s $\ddot{o}$ i t $\ddot{o}$ ng t $\ddot{a}$ c l $\ddot{a}$   
nh $\ddot{o}$  nhất.**

# AÙp ðiing thuyeat VSEPR

---

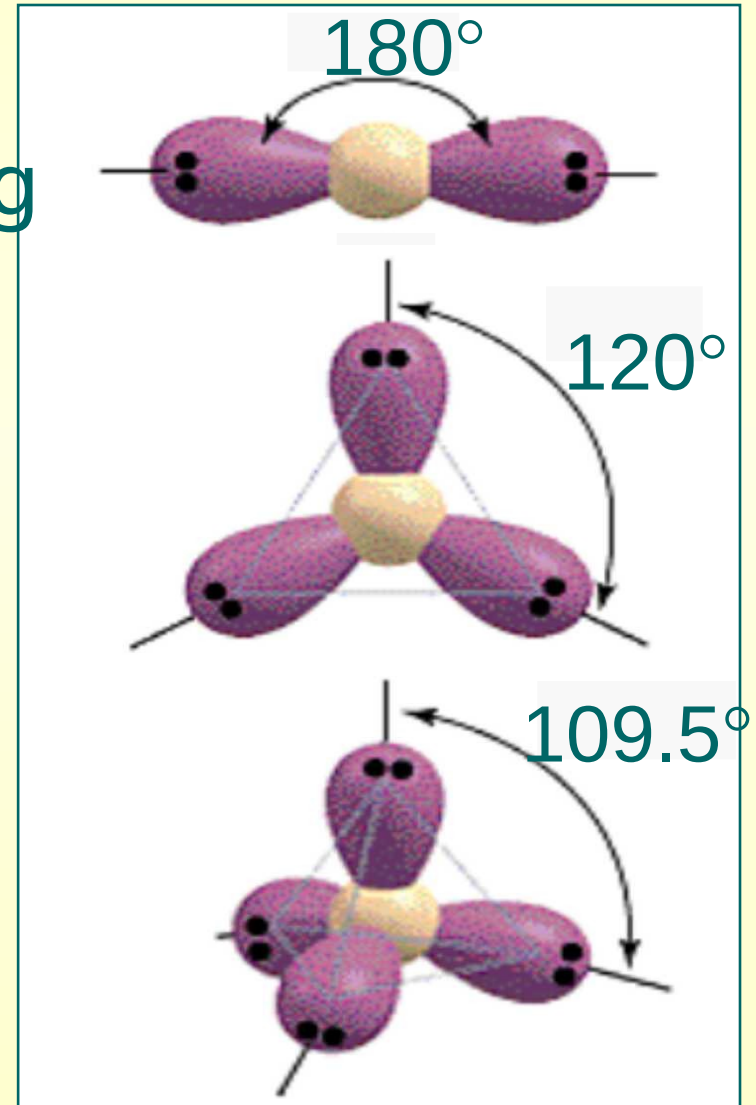
- Veõ công thöuc Lewis.
- Ñeám soá vò trí cöu electron quanh nguyên töu
  - Moät caëp electron không liên keát tính laø 1 vò trí
  - Moät liên keát (Ñôn, Ñôi hoaëc Ba) tính laø moät vò trí.
- Saép xeáp caùc vò trí cöu electron sao cho töông taùc laø nhỏ nhất

# Càùc càùch saép xeáp

Soá vò trí Càùch  
xeáp 2 Thaúng haøng

3 Tam Giaùc

4 Töù dieän

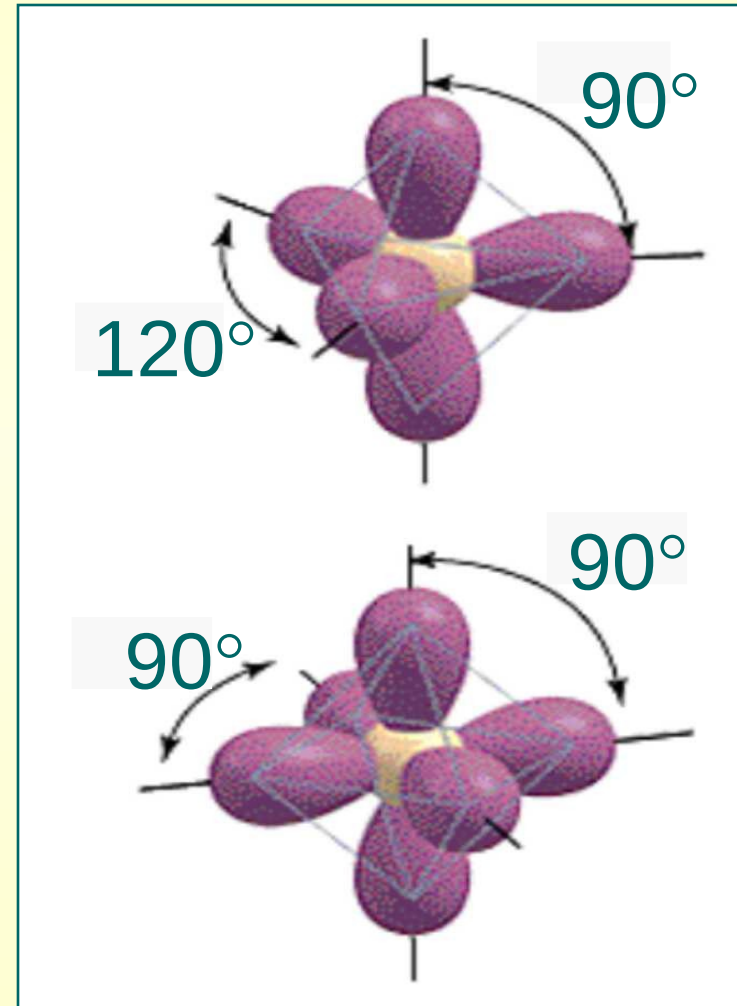


# Càùc càùch saép xeáp

Soá vò trí Càùch  
xeáp

5 Lööõng Thaùp  
Tam Giaùc

6 Baùt dieän



# Càùc ðàïng phaân töù

---

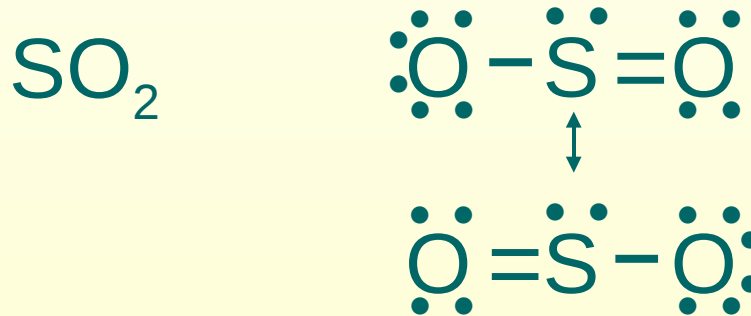
Phaân töù *CT Lewis* và tré – càùch xeáp  
gòùc .

*Liên kết*



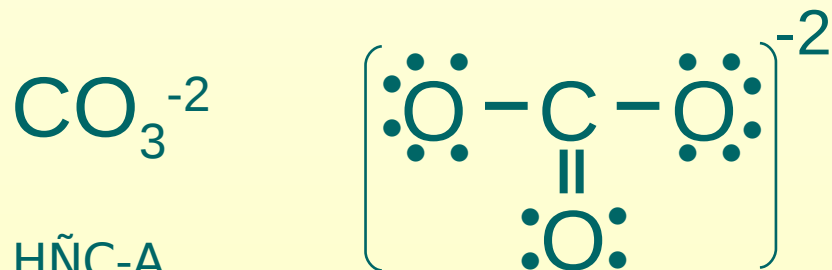
2 Tháúg hæng  $180^\circ$

---



3 - Tam Giàùc      $120^\circ$

---



3 - Tam Giàùc      $120^\circ$

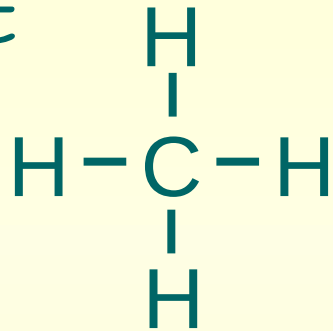
HÑC-A

# Càùc ðàïng phaân töû

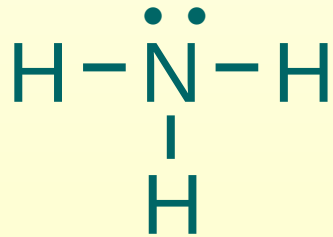
---

*Phaân töû CT Lewis và tríc – càùch xeáp gòùc*

*Liên keát*



4 Tòù ðieän 109.5°



4 Tòù ðieän 109.5°

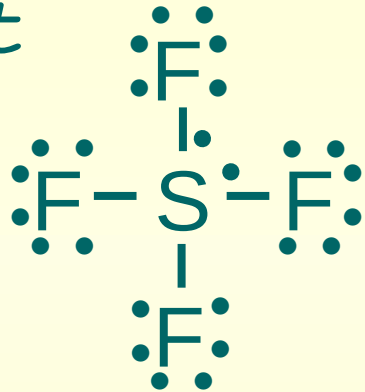
# Càùc ðàìng phaân tồu

---

Phaân tồu *CT Lewis* và tríc – càùch xeáp  
gòùc .

*Liên keát*

$\text{SF}_4$

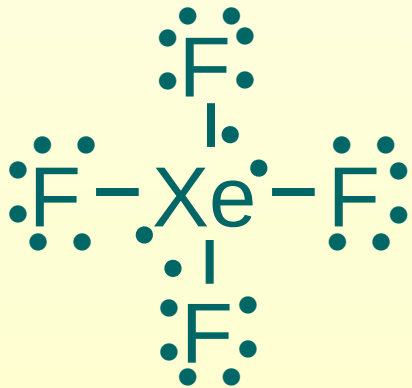


Lööõng thaùp  
5 Tam giaùc

$90^\circ$ ,  
 $120^\circ$

---

$\text{XeF}_4$

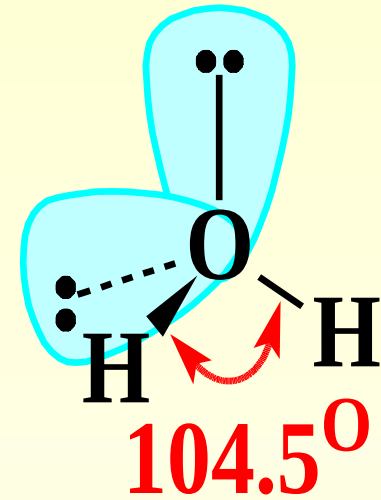
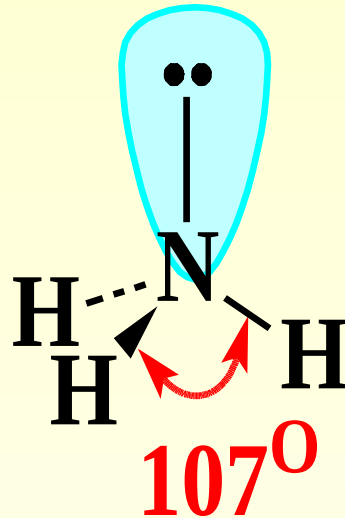
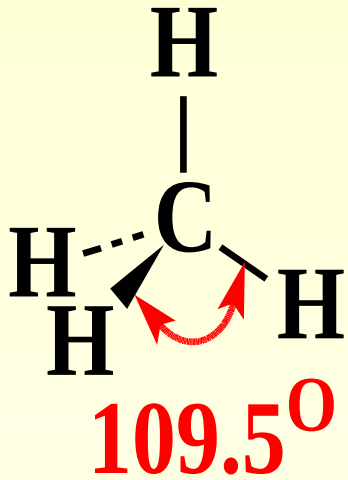


6 Bàùt dieän

$90^\circ$

# Càùc biếán đạìng

---

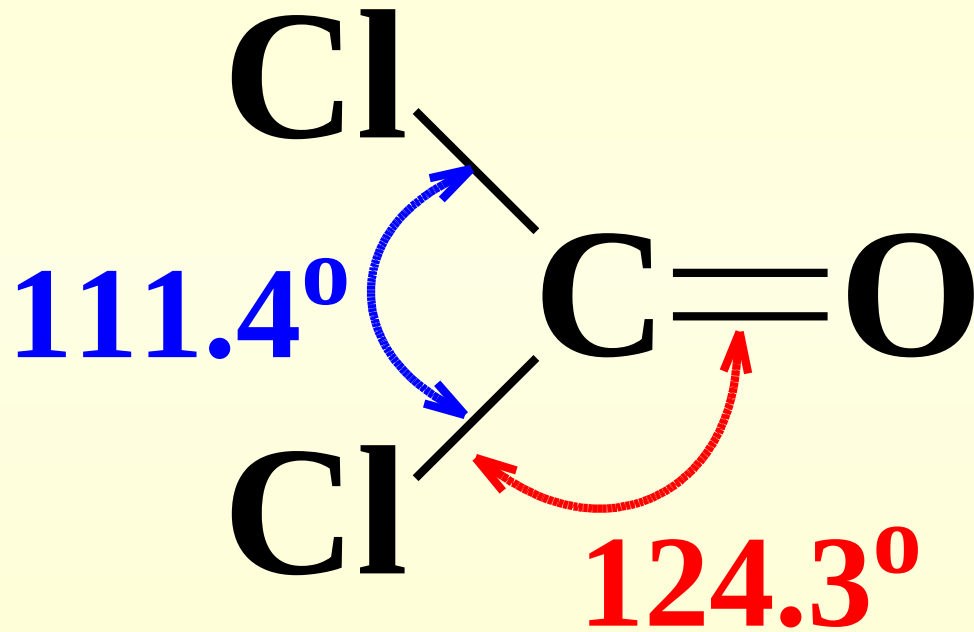


**Góc liên kết giảm khi số cặp điện tử không liên kết tăng,**



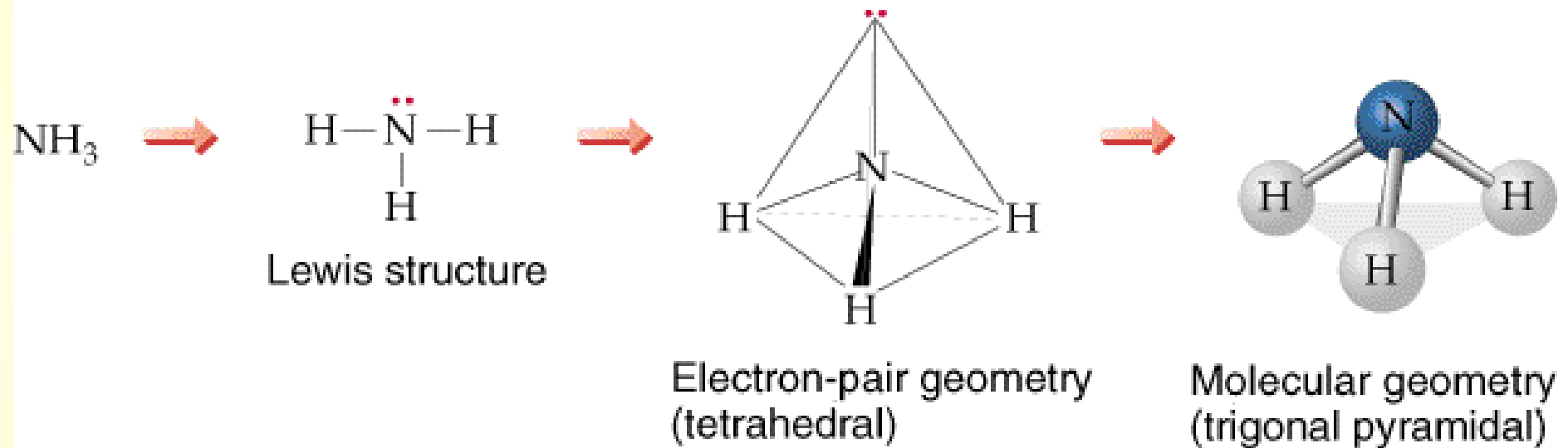
# Cấu trúc phân tử

---



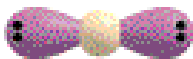

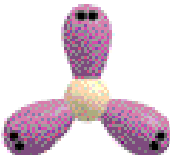
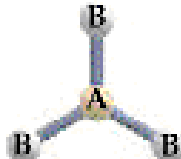
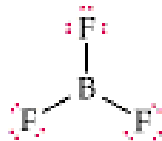

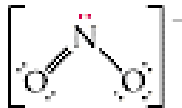
# Hình dạng phân tử

---



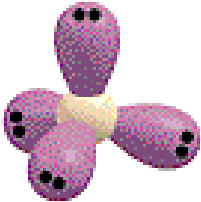
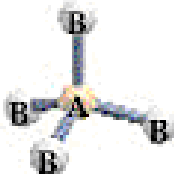
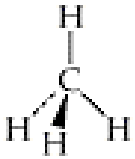
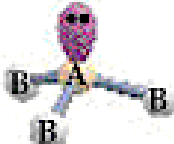

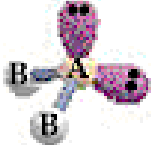

# Hình dạng phân tử

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

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


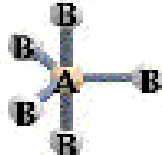
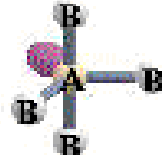
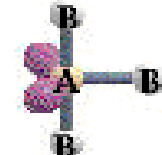
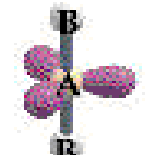
# Hình dạng phân tử

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

Total Electron Pairs	Electron-Pair Geometry	Bonding Pairs	Nonbonding Pairs	Molecular Geometry	Example
4 pairs	 Tetrahedral	4	0	 Tetrahedral	
		3	1	 Trigonal pyramid	
		2	2	 Bent	

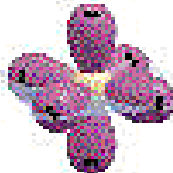
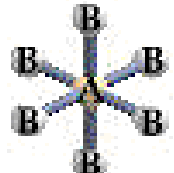
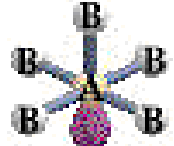

# Hình dạng phân tử

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

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

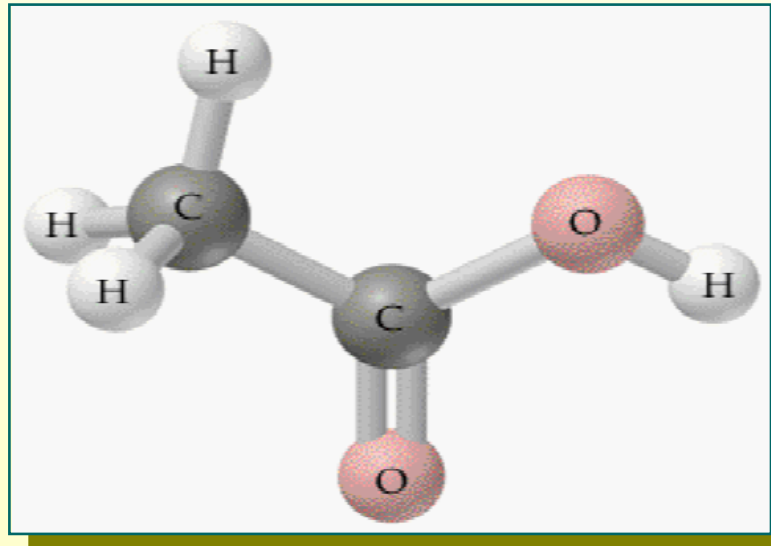
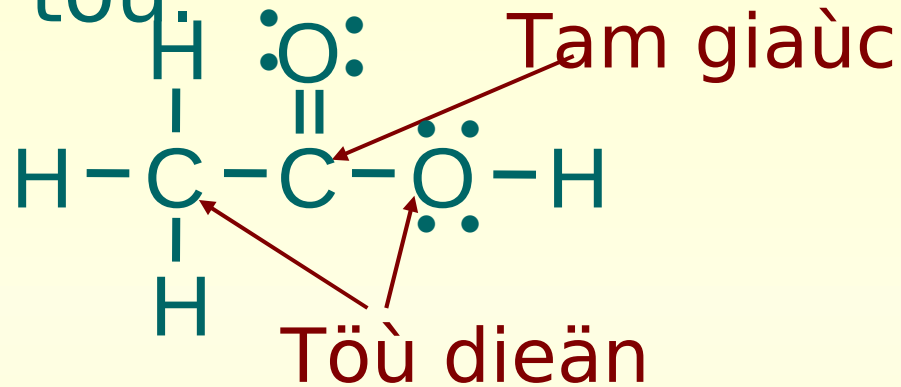
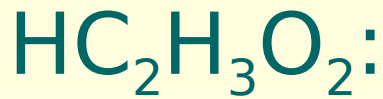
# Hình dạng phân tử

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

Number of Electron Pairs	Electron-Pair Geometry	Bonding Pairs	Nonbonding Pairs	Molecular Geometry	Example
6 pairs	 Octahedral	6	0	 Octahedral	$\text{SF}_6$
		5	1	 Square pyramidal	$\text{BrF}_5$
		4	2	 Square planar	$\text{XeF}_4$

# Phân tử nhiều trung tâm

Xác định số phân bố electron cho tổng nguyên tử



# M om ent böông cöic cuûa phaân töû

---

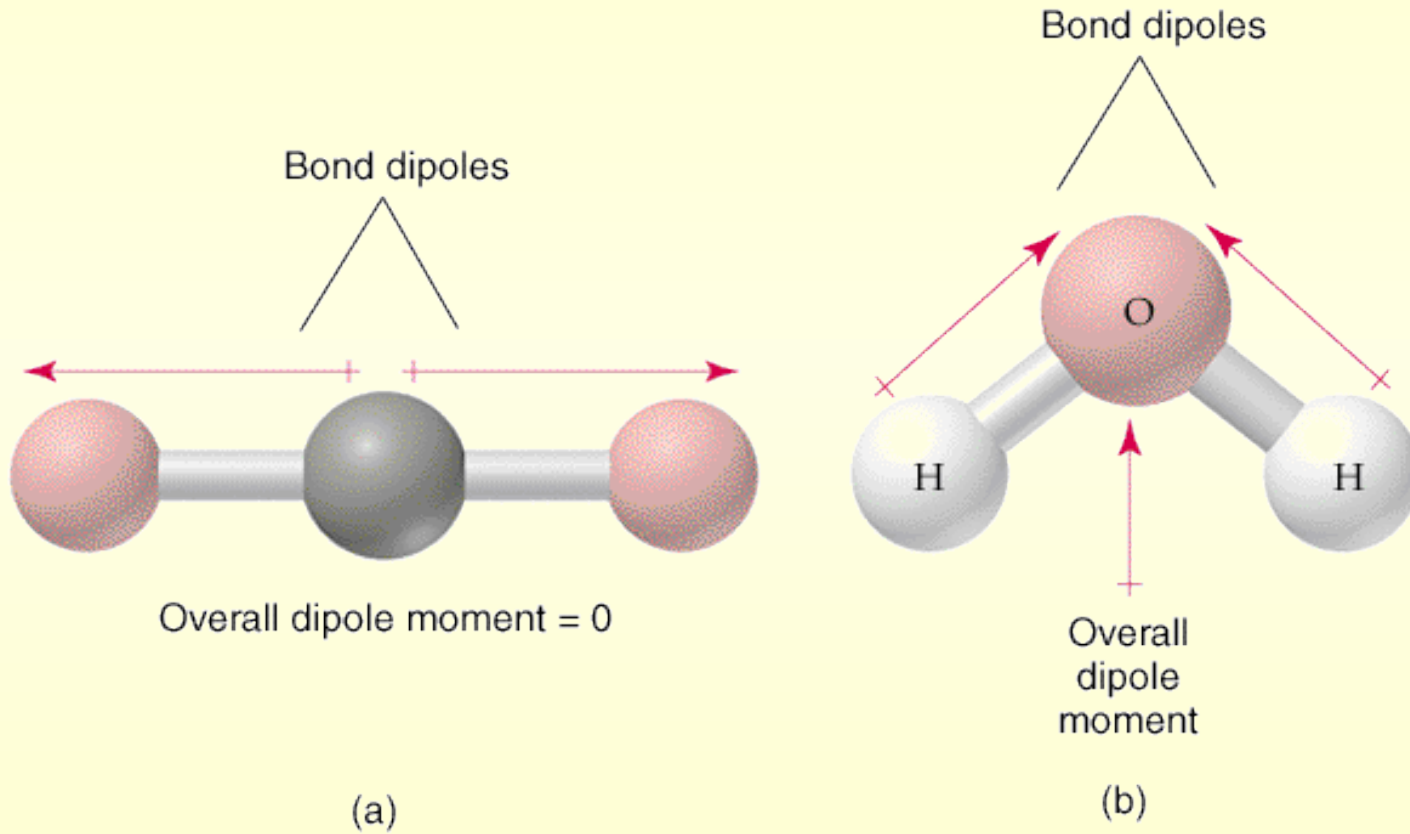
Khi hai nguyên töû có ñoã âm ñieän khác nhau, m aät ñoã ñieän tích âm seõ cao hơn ôû phía nguyên töû có ñoã âm ñieän cao hơn. Ta ñ ra m om ent böông cöic cuûa liên kết. (Qui öôùc chiều cuûa m om ent böông cöic höông veà phía nguyên töû âm ñieän hơn)

## **Trong phaân töû nhiều nguyên töû**

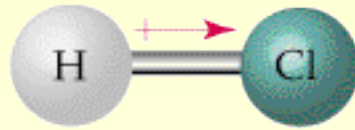
M om ent böông cöic cuûa phaân töû lạo toäng caùc m om ent böông cöic cuûa tất cả caùc liên kết



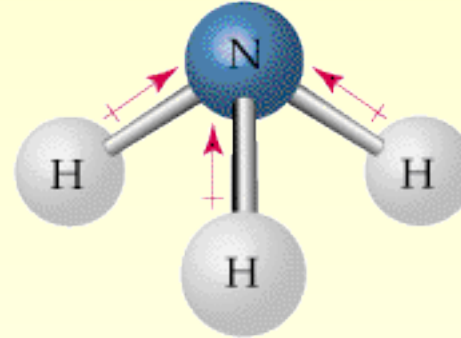
# Moment lưỡng cực của phân tử



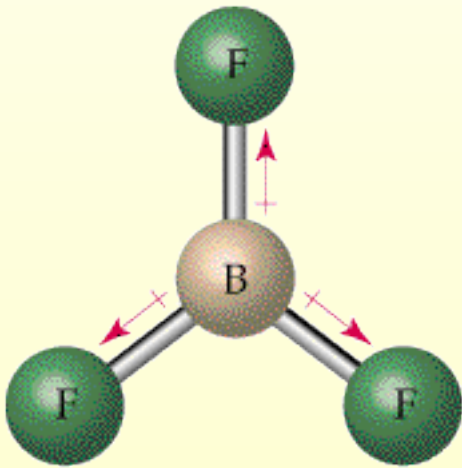
# Moment lưỡng cực của phân tử



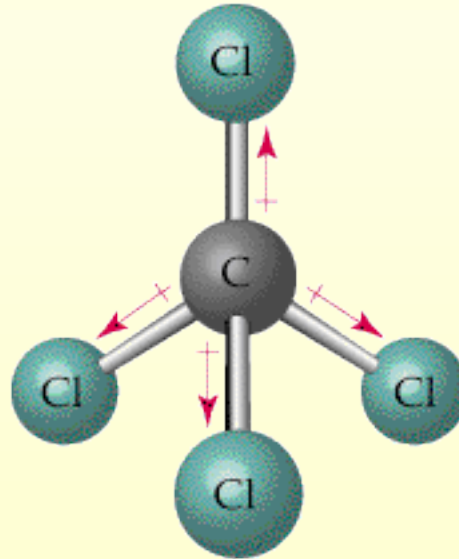
Polar



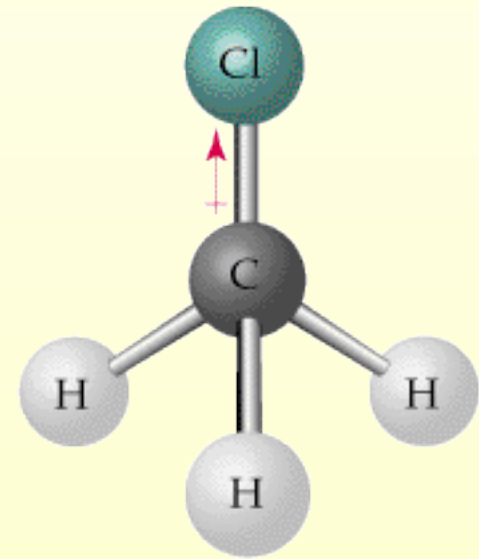
Polar



Nonpolar

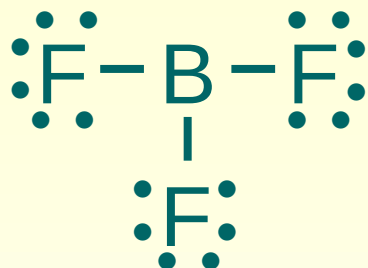


Nonpolar

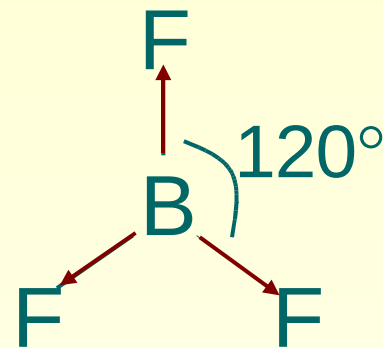


Polar

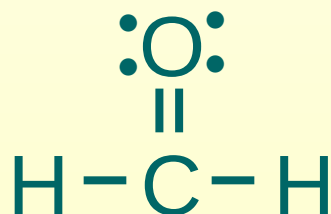
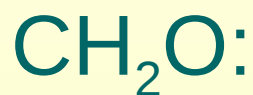
# Moment lưỡng cực của phân tử



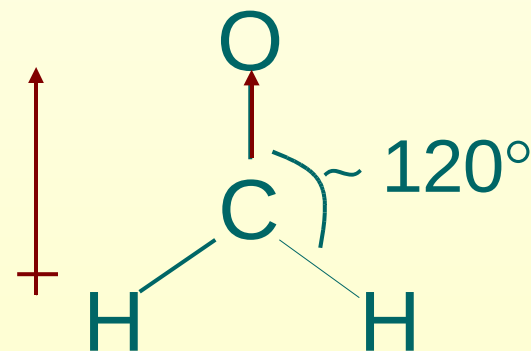
Tam giác



Khoảng phân  
cực

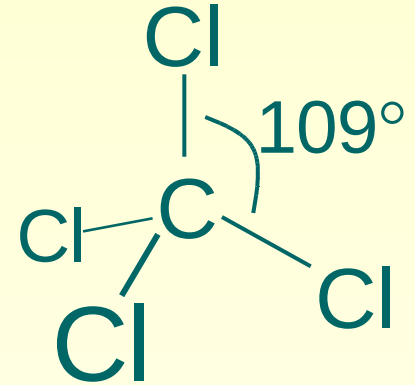
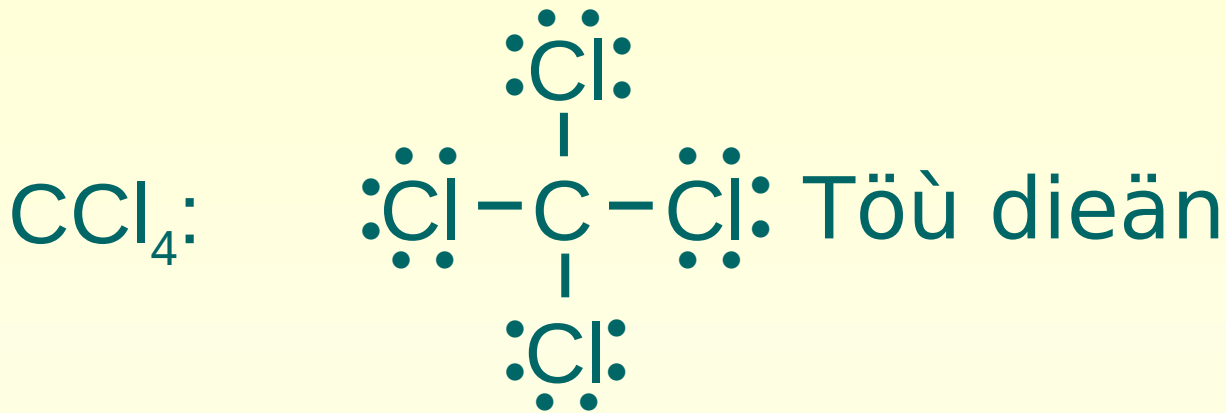


Tam giác

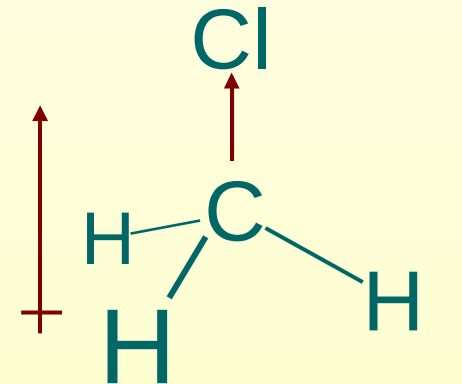
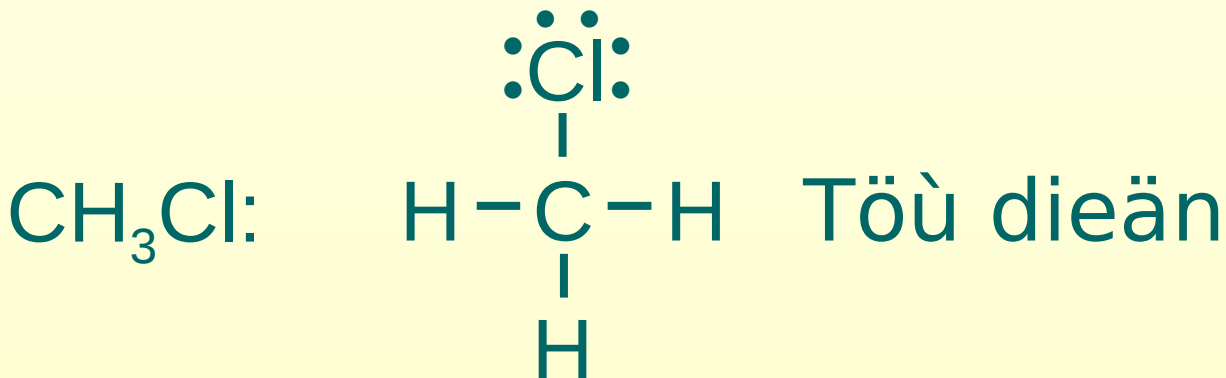


Phân cực

# Moment lưỡng cực của phân tử



Khoäng  
phaân cõic



Phaân cõic

---

# THUYẾT LIÊN KẾT HOÀ TRÒ

## Valence Bond Theory

# **Thuyết Liên kết hóa trị**

---

**Thuyết Lewis và VSEPR không giải thích  
những vấn đề của các liên kết cộng hóa  
trị.**

**Thuyết Liên kết hóa trị dựa trên kết  
quả của cơ học lượng tử để giải thích sự  
tạo thành liên kết.**

# Thuyết liên kết hóa trò

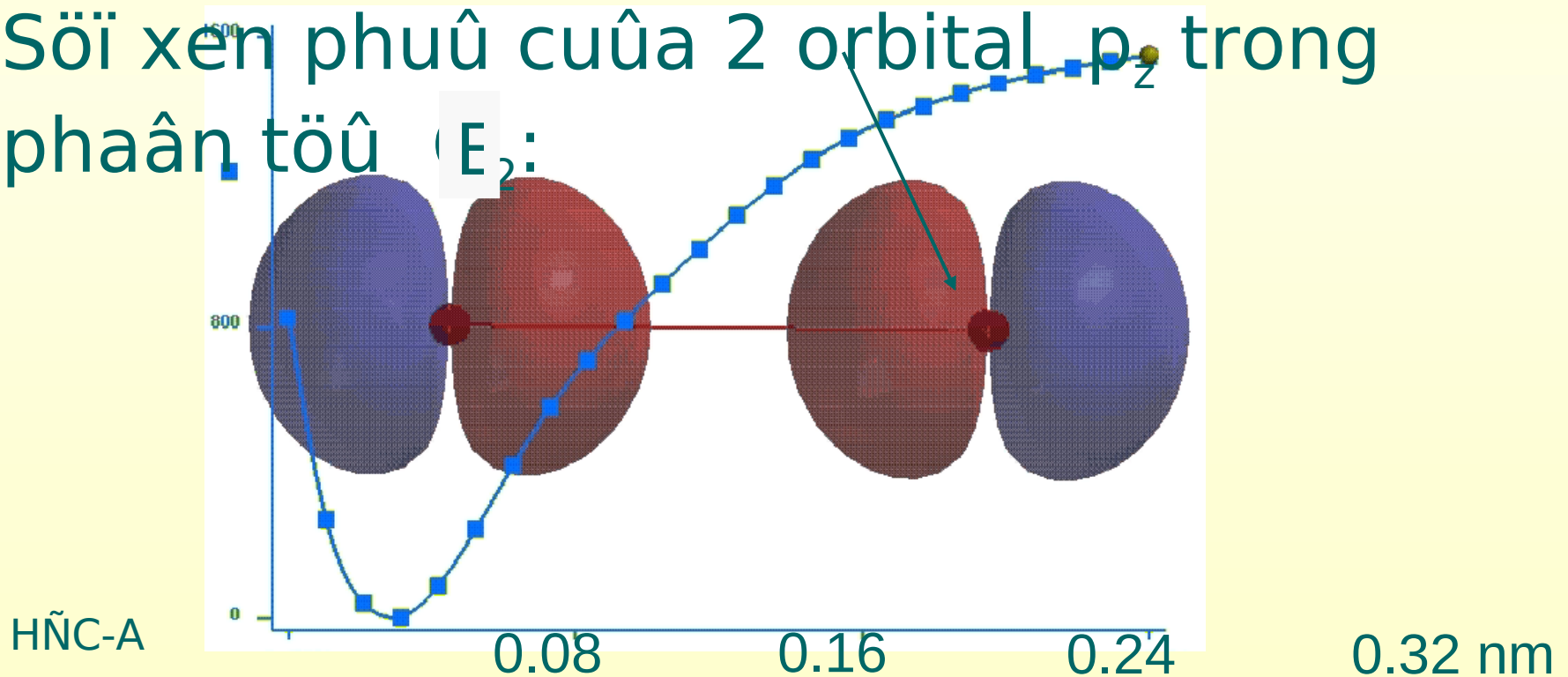
---

- Liên kết hóa học tạo thành do sự xen phủ của các orbital của các nguyên tử.
  - Các orbital chập xen phủ với nhau khi:
    - Hai orbital, mỗi orbital chứa 1 electron
    - Một orbital chứa 2 electron và 1 orbital trống (liên kết cho nhận hay liên kết phối trí)
- Có hai kiểu xen phủ tạo thành hai  
bài liên kết:  $\sigma$  và  $\pi$

# Liên kết $\sigma$

Liên kết  $\sigma$  (**sigma**) tạo thành do sự xen phủ ñối xứng theo trục của hai orbital.

Sự xen phủ của 2 orbital  $p_z$  trong phân tử ( $E_2$ ):



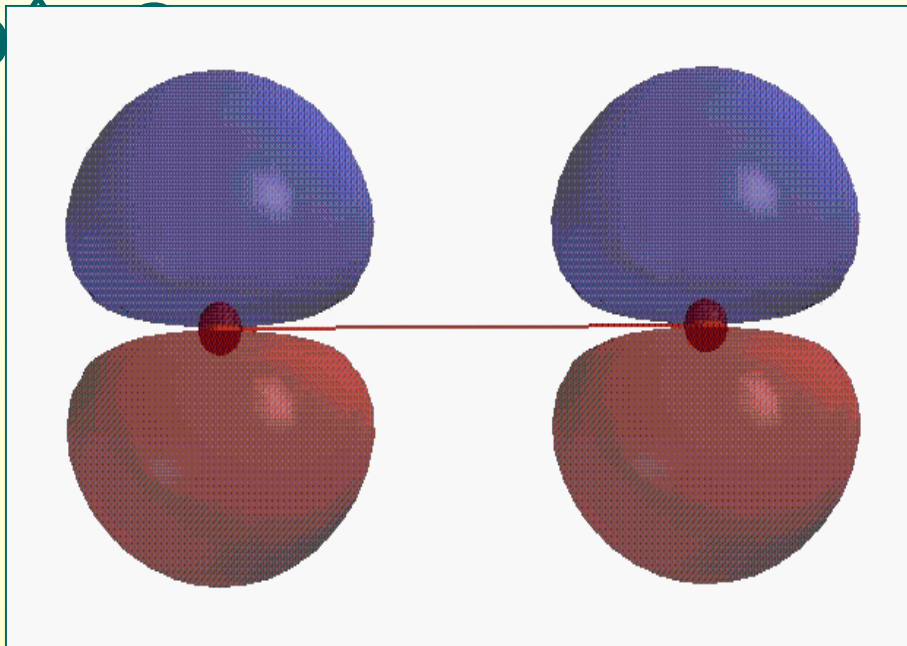


# Liên kết $\pi$

---

Liên kết  $\pi$  (pi) hình thành do sự xen phủ chéo cùng theo mặt phẳng

Sự xen phủ của 2 orbital  $p_y$  trong phân tử



# Ñoã beàn lieân keát

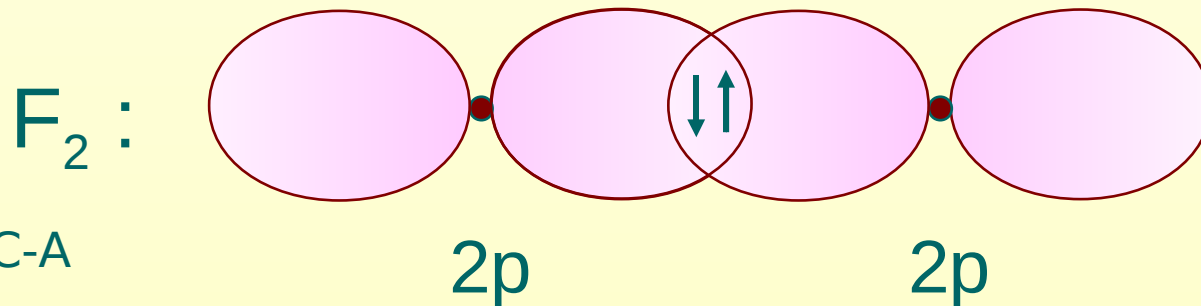
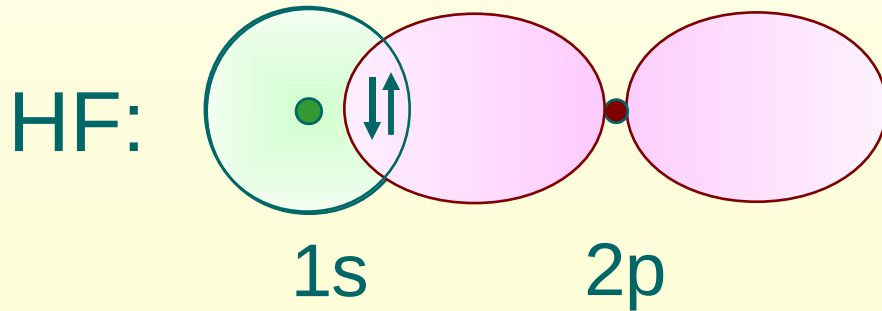
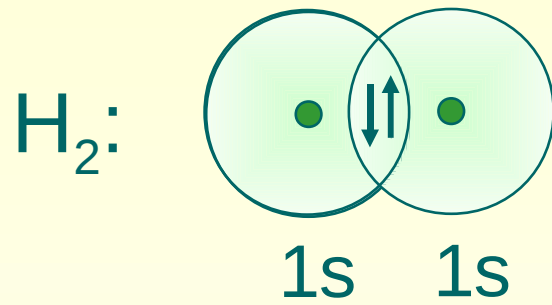
---

Lieân keát caøng beàn khi möüc ñoã xen phuû caùc Orbital caøng lòùn (maät ñoã nguyêân töû giöõa hai haät nhaân laø lòùn nhaát)

1. Möüc ñoã xen phuû phuï thuoäc vaø: hình daïng, kích thöôùc, naêng löôïng cuûa caùc orbital, höông xen phuû vaø kieåu xen phuû giöõa chuùng.
2. Caùc orbital coù naêng löôïng töông ñöông nhau seõ xen phuû toát
3. Xen phuû theo truïc höõu hieäu hôn xen phuû theo maät phaúng.

# Vídui

---

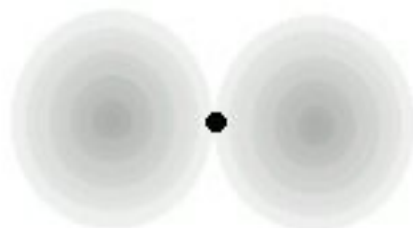


H



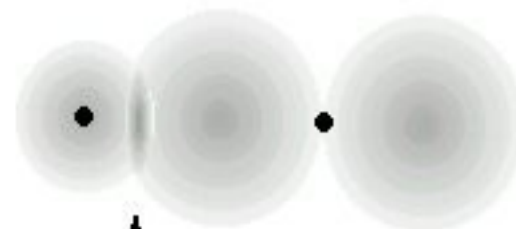
Hydrogen atom  
1s orbital  
( $1s^1$ )

Cl



Chlorine atom  
3p orbital  
( $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$ )

HCl



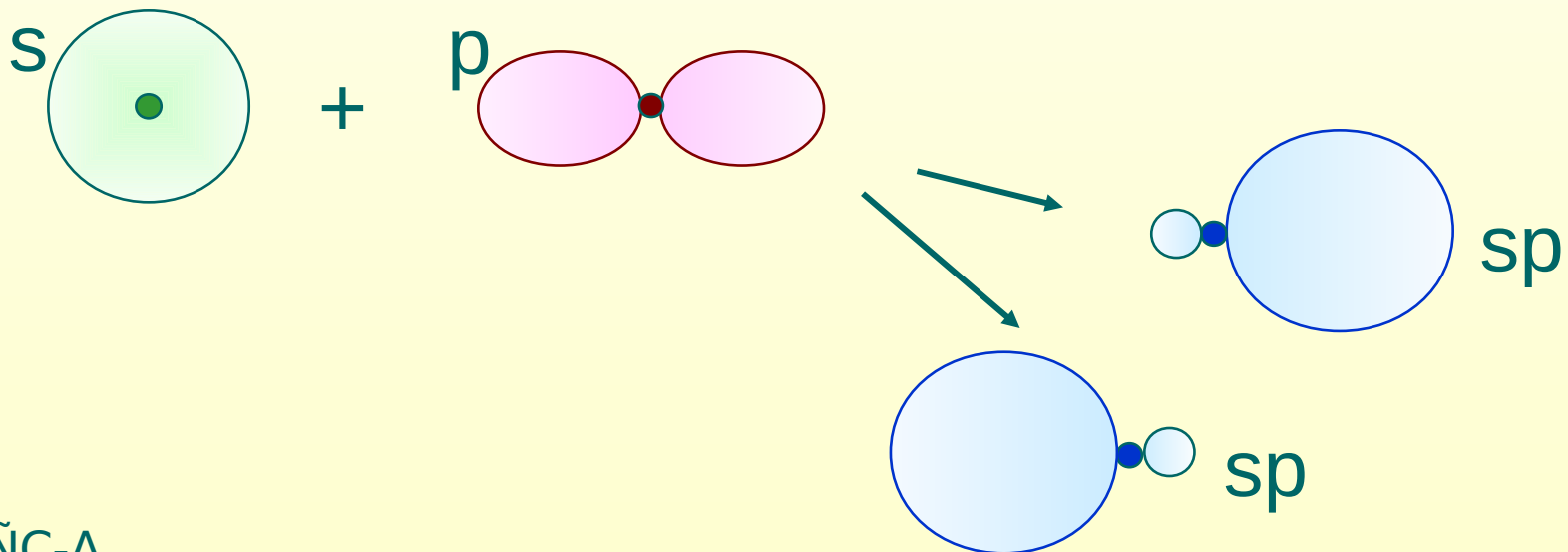
Overlap region  
of Hydrogen 1s  
and Chlorine 3p  
electron orbitals



# Söitaiþ chuûng orbital

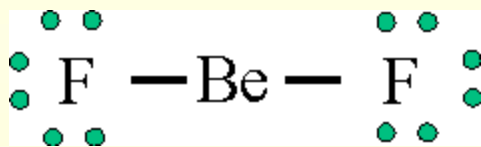
---

- Tröôuc khi taiö lieân keát, cauc orbital cuua nguyean töu seõ toã hôiþ vöui nhau taiö ra cauc orbital taiþ chuûng.
- Soá orbital taiþ chuûng hình thaønh ñuùng baèng soá orbital tham gia toã hôiþ.



---

Đối với phân tử nhiều nguyên tử, có thể dùng sự lai hoá orbital để giải thích sự tạo thành liên kết và cấu tạo lập thể của phân tử.

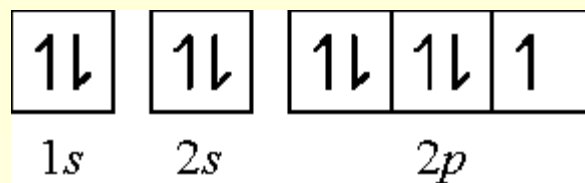
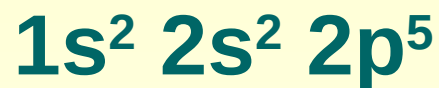


2

Cấu trúc Phân tử BeF theo Lewis

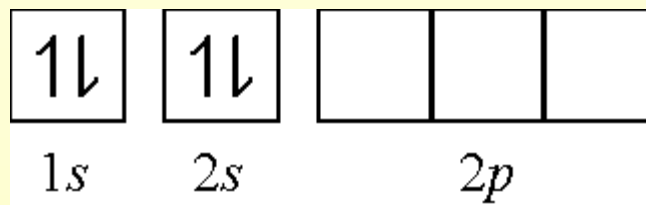
Dùng **Thuyết VB** để giải thích

- 
- **Cấu hình điện tử của nguyên tử Flourine:**



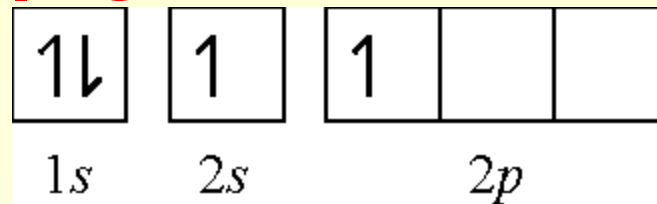
**Có 1 điện tử độc thân** trong orbital **2p** của nguyên tử F, có thể ghép đôi với điện tử độc thân của Be để tạo liên kết.

**Cấu hình điện tử của nguyên tử Be:  $1s^2 2s^2$**

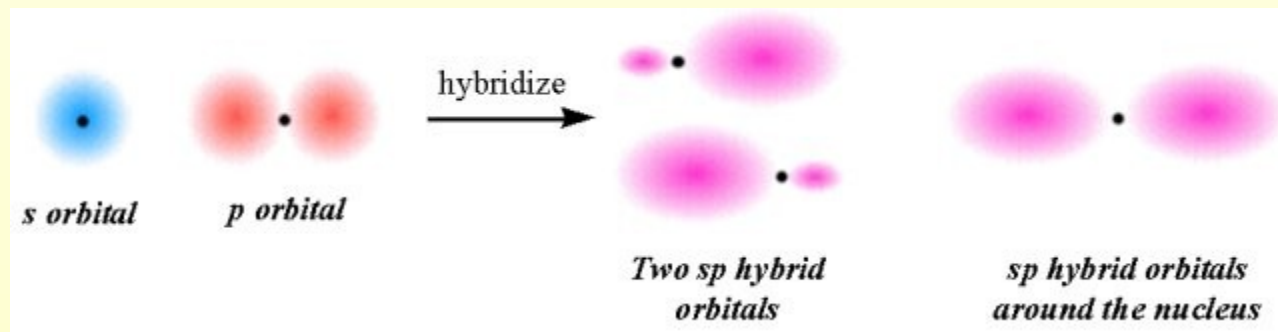




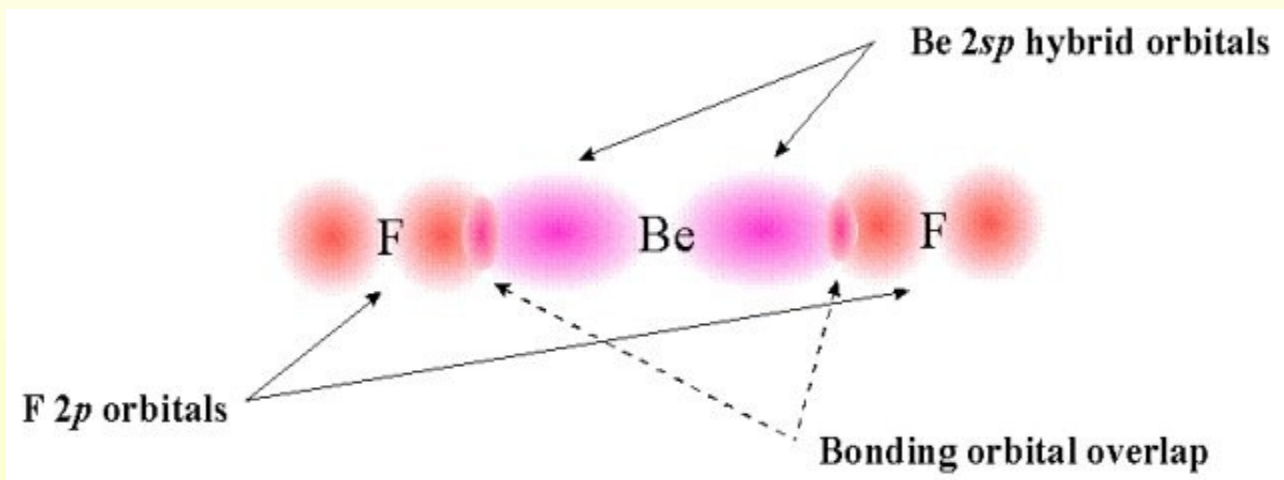
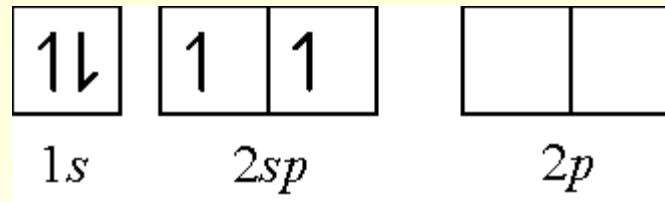
- Cấu hình điện tử ở trạng thái kích thích của Be:  $1s^2 2s^1 2p^1$



vậy hai điện tử hoá trị trên  $2s$  và  $2p$  phải có tính chất như nhau, điều này là kết quả của sự lai hoá  $sp$ ..

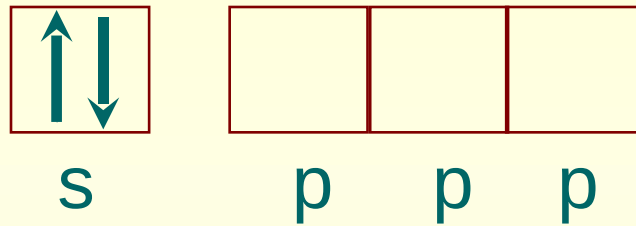


- 
- Cấu hình điện tử ở trạng thái lai hoá của Be:  $1s^2 2(sp)^2$

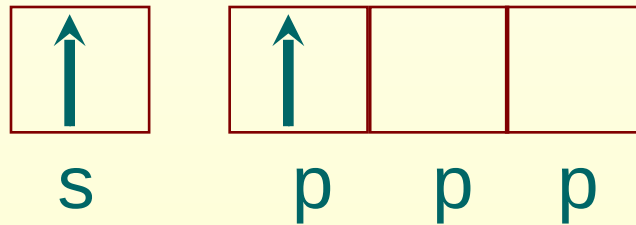


# Tại chuông $sp$ :BeF<sub>2</sub>

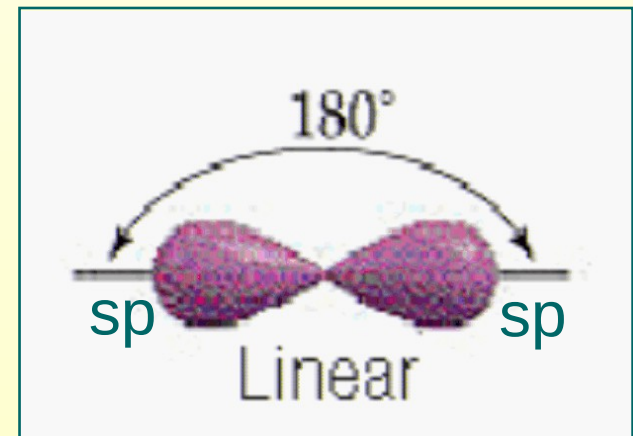
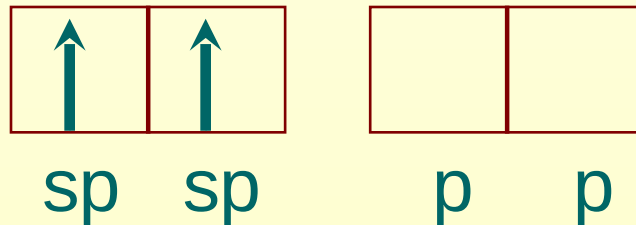
Be :



Kích thích:

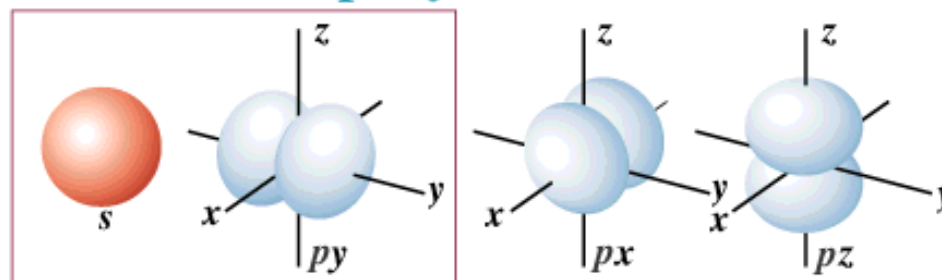


Tại chuông:

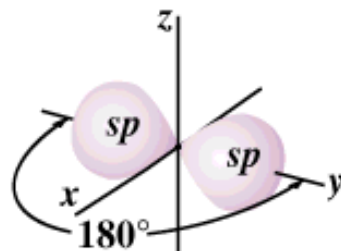


# Tại sao chúng $sp$

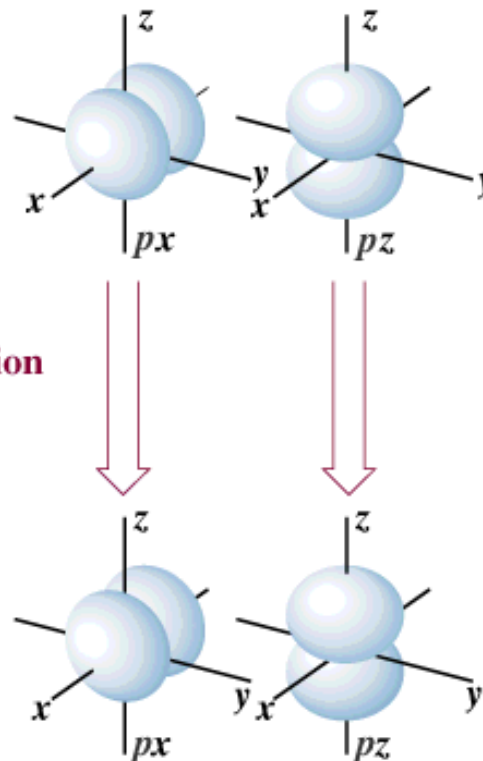
## Formation of two $sp$ hybrid orbitals



Hybridization



Two  $sp$  hybrids

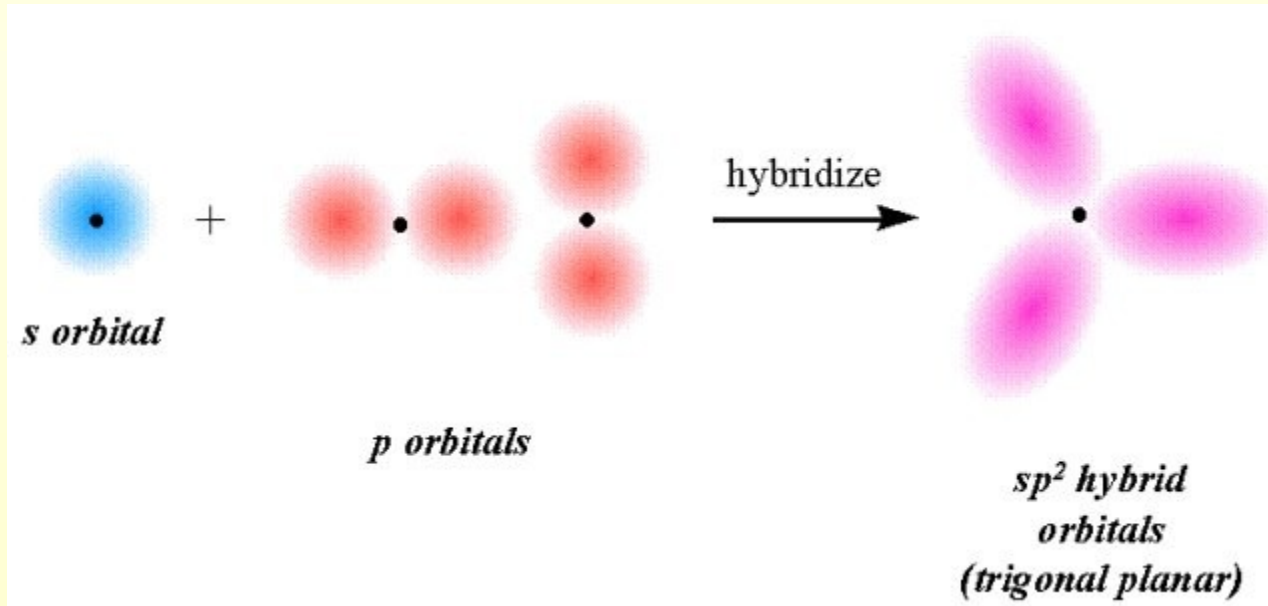
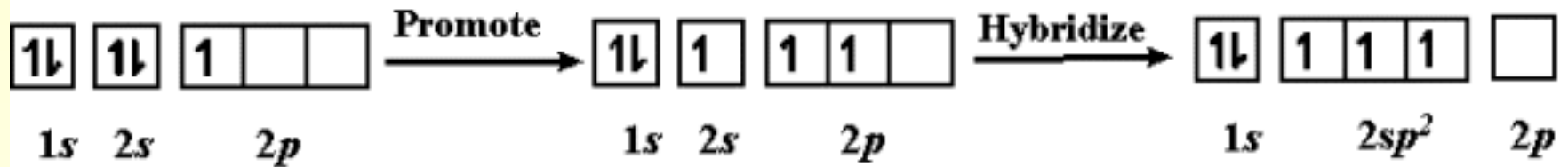


Atomic  $p$  orbitals not used  
in hybrid set

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

MR10\_10.PIC

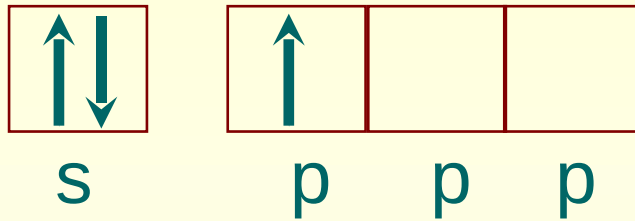
# • Cấu hình ãn tử của Boron trong BF<sub>3</sub>



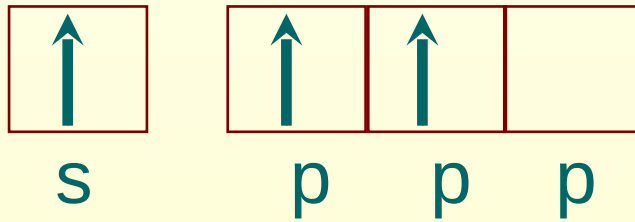
# Tại chuông $sp^2$ : $BF_3$

---

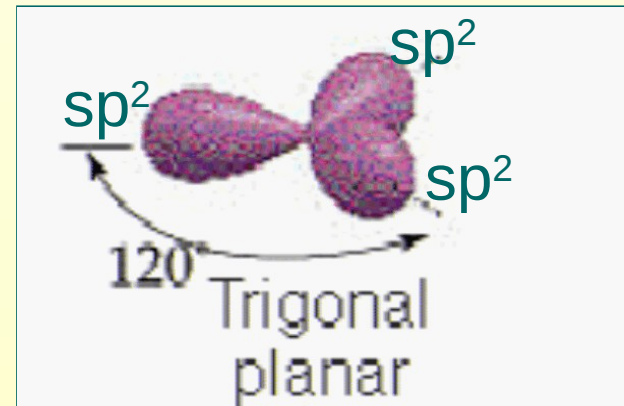
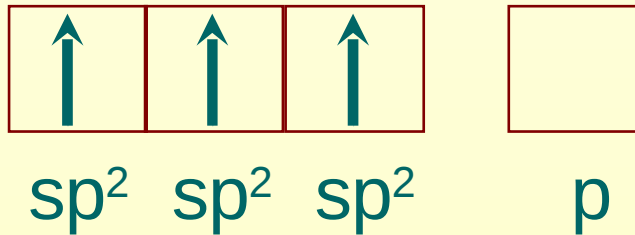
B :



Kích thích:

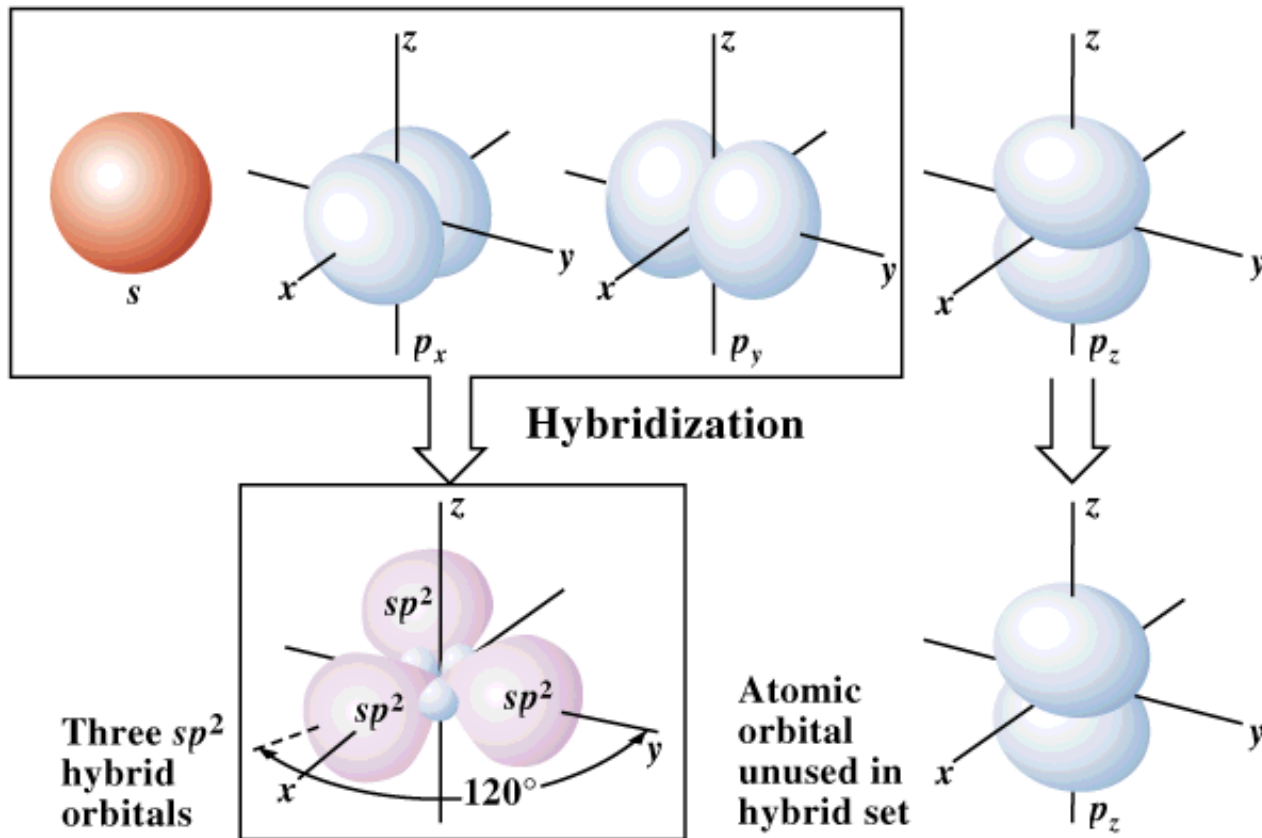


Tại chuông:



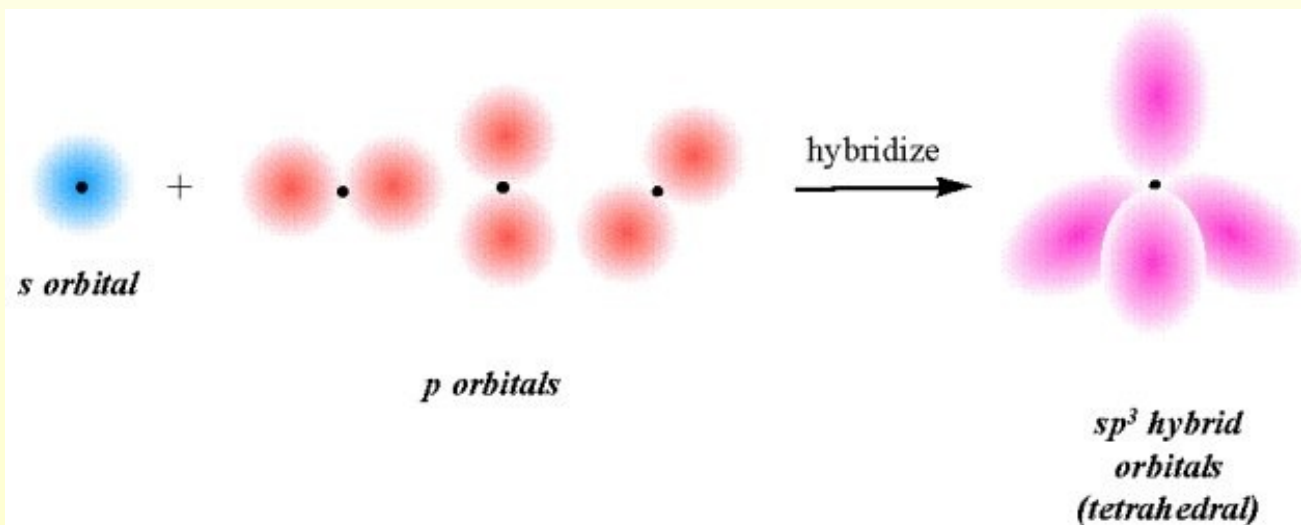
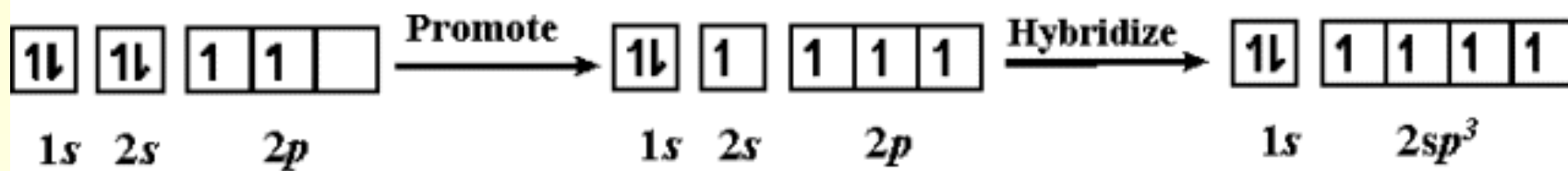
# Tại sao chúng $sp^2$

## Formation of three $sp^2$ hybrid orbitals



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

MR10\_11.PIC

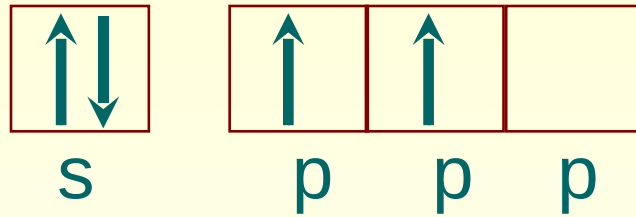




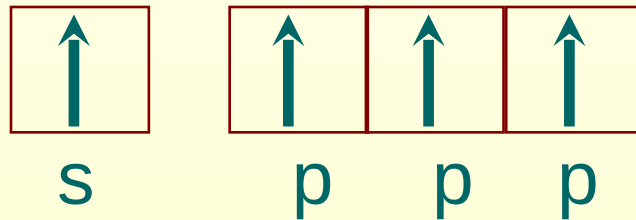
# Tại chuông $sp^3$ $CH_4$

---

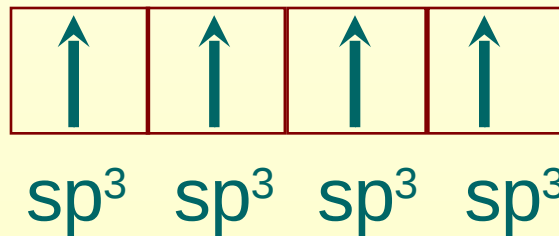
C :



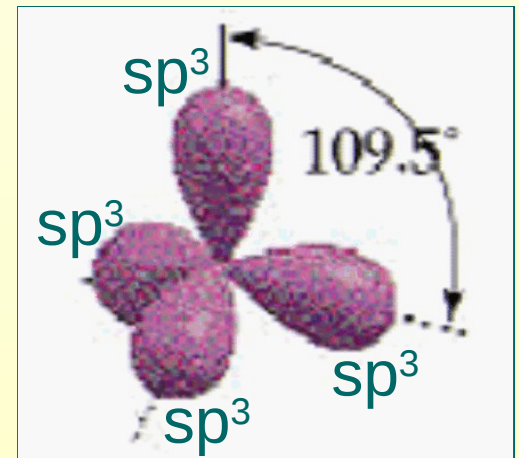
Kích thích:



Tại chuông:

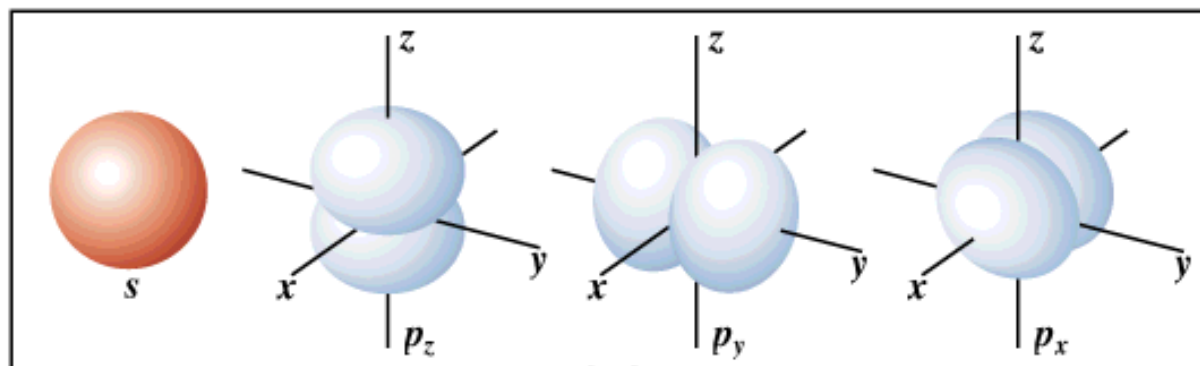


HÑC-A



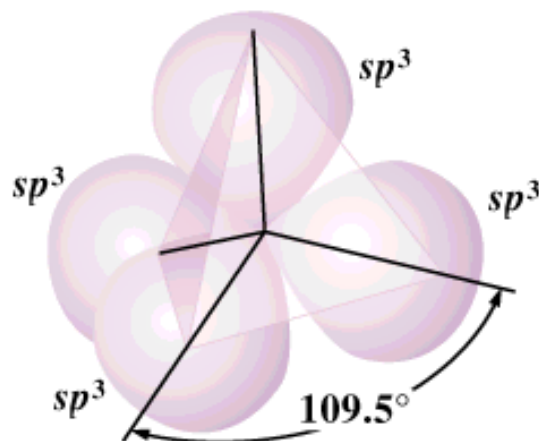
# Tại sao chúng $sp^3$

## Formation of four $sp^3$ hybrid orbitals



Hybridization

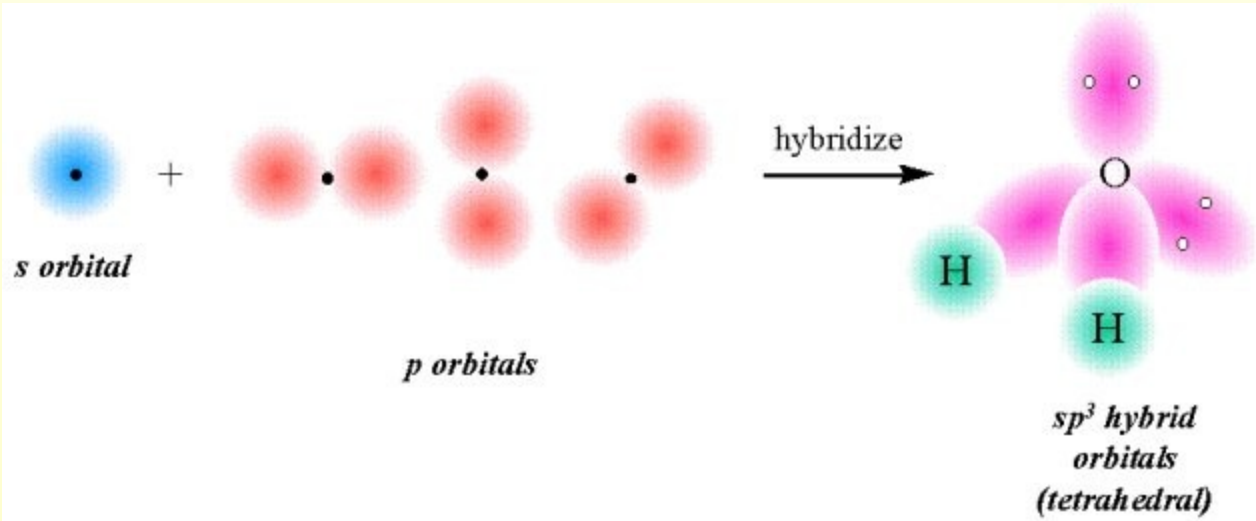
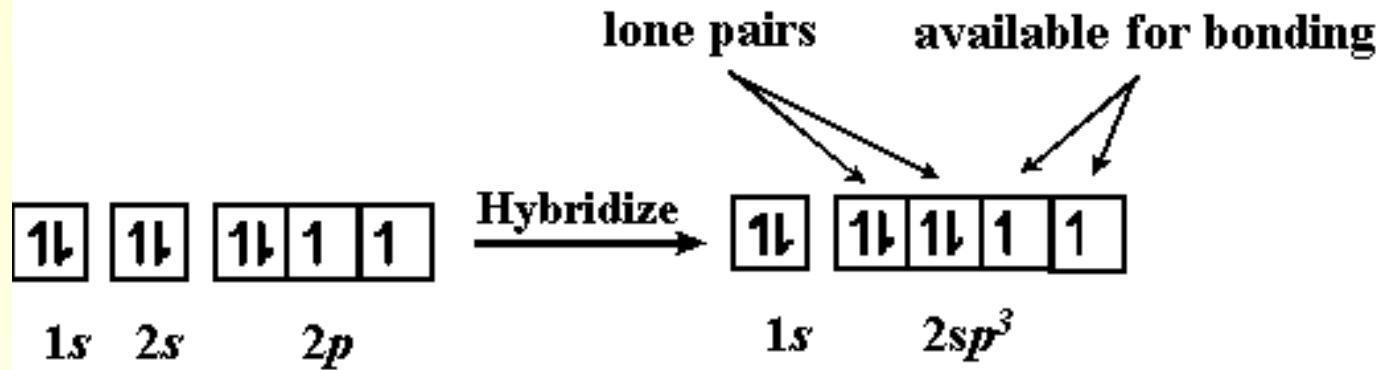
Four  $sp^3$   
hybrid orbitals

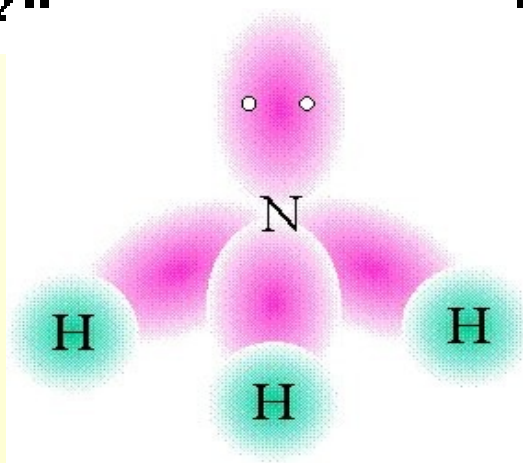
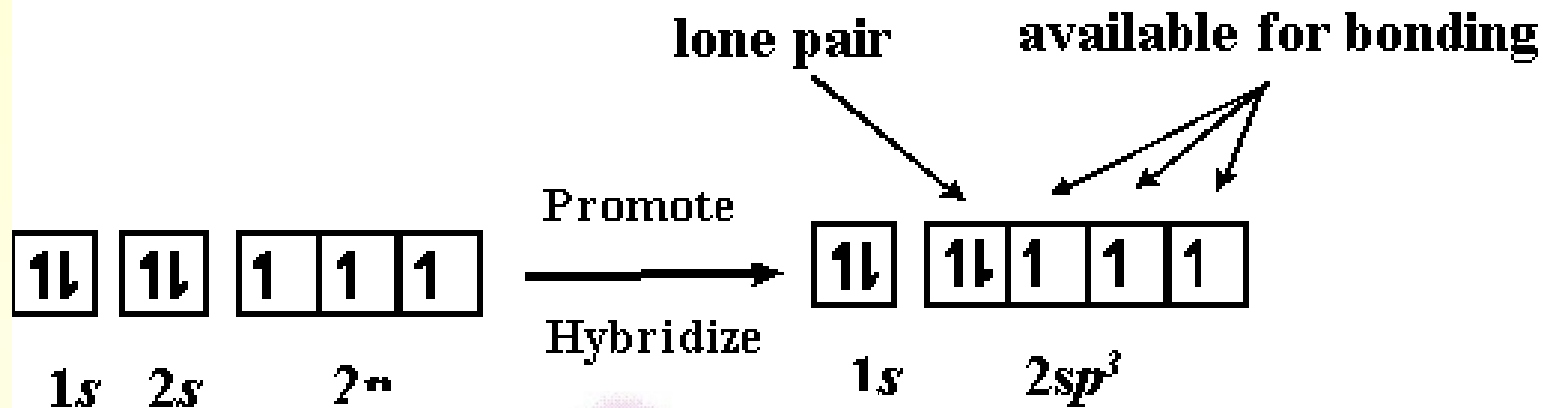


Harcourt Brace & Company items and derived items copyright ©1998 by Harcourt Brace & Company

MR10\_12.PIC

# • Cấu hình ãn tử của Oxy

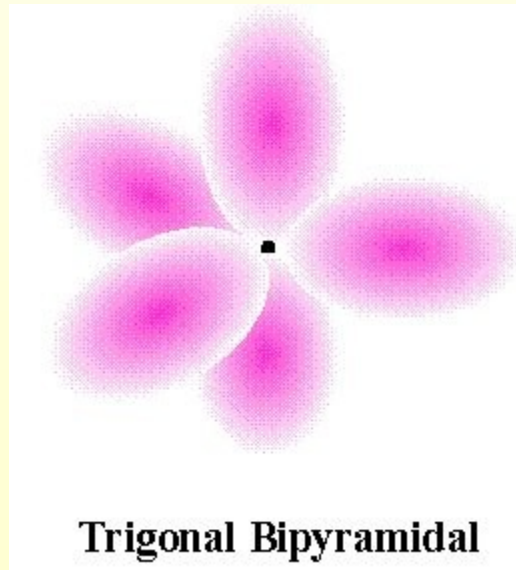
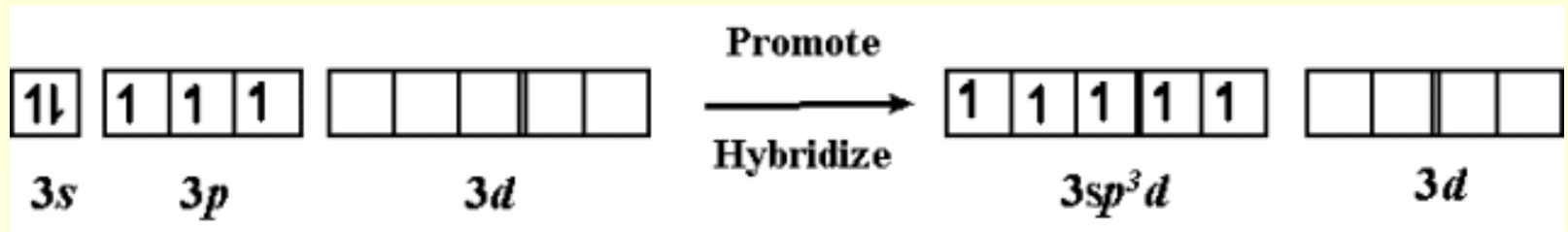




*sp<sup>3</sup> hybrid orbitals (tetrahedral)*

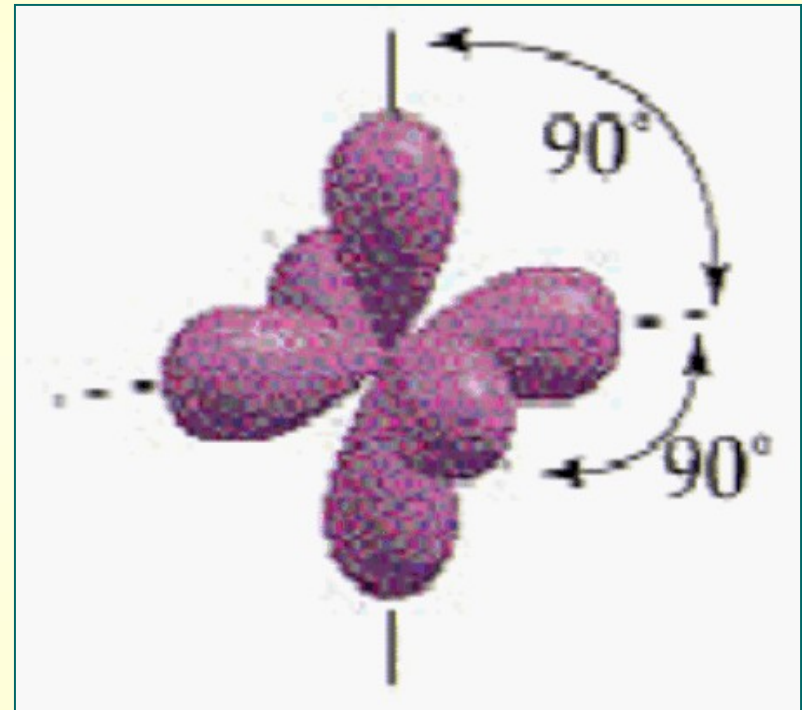
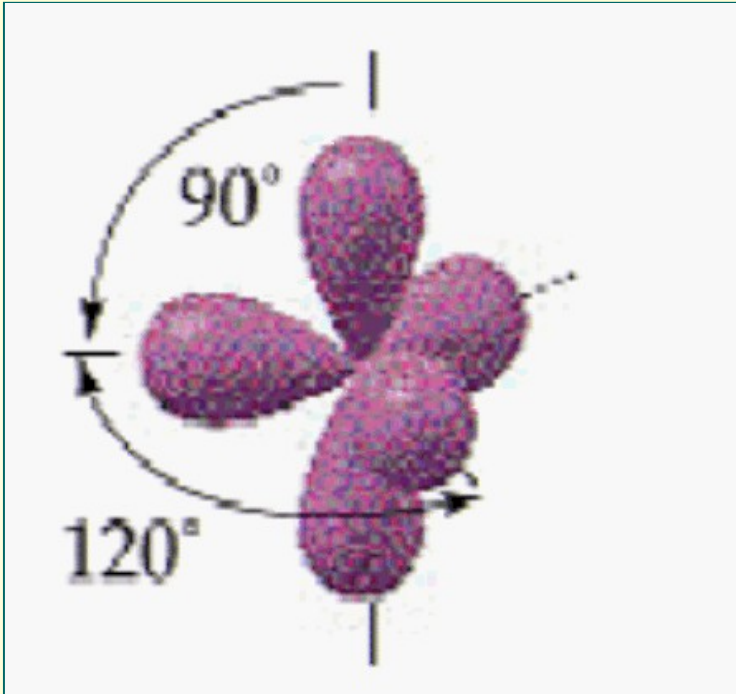
---

- Cấu hình ãn tử của Phospho trong



# Tại chuông $sp^3d$ và $sp^3d^2$

---



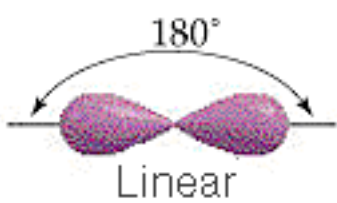
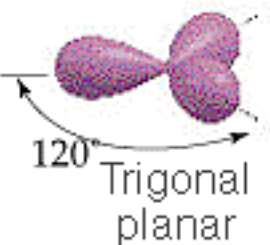
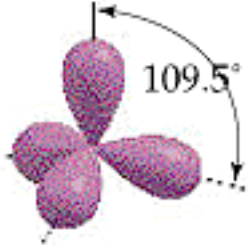
# Cấu trúc lai hóa

---

Valence Electron Pair Geometry	Number of Orbitals	Hybrid Orbitals
Linear	2	$sp$
Trigonal Planar	3	$sp^2$
Tetrahedral	4	$sp^3$
Trigonal Bipyramidal	5	$sp^3d$
Octahedral	6	$sp^3d^2$
H <sub>2</sub> C-A		$sp^3d$

# Càuc dàing tại chũng

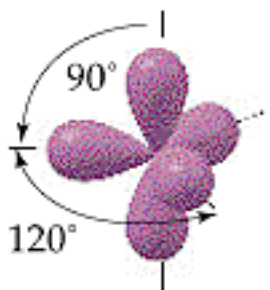
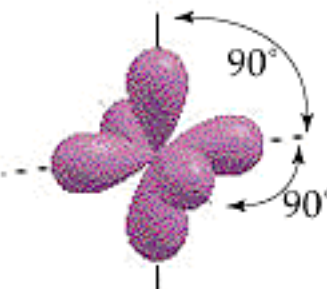
## Geometrical Arrangements Characteristic of Hybrid Orbital Sets

Atomic Orbital Set	Hybrid Orbital Set	Geometry	Examples
$sp$	Two $sp$	 <p>Linear</p>	$\text{BeF}_2$ , $\text{HgCl}_2$
$sp^2$	Three $sp^2$	 <p>Trigonal planar</p>	$\text{BF}_3$ , $\text{SO}_3$
$sp^3$	Four $sp^3$	 <p>Tetrahedral</p>	$\text{CH}_4$ , $\text{NH}_3$ , $\text{H}_2\text{O}$ , $\text{NH}_4^+$

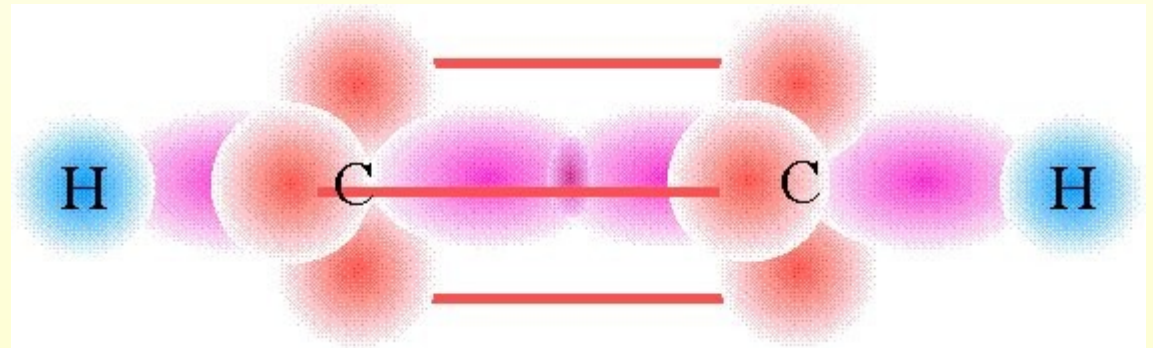
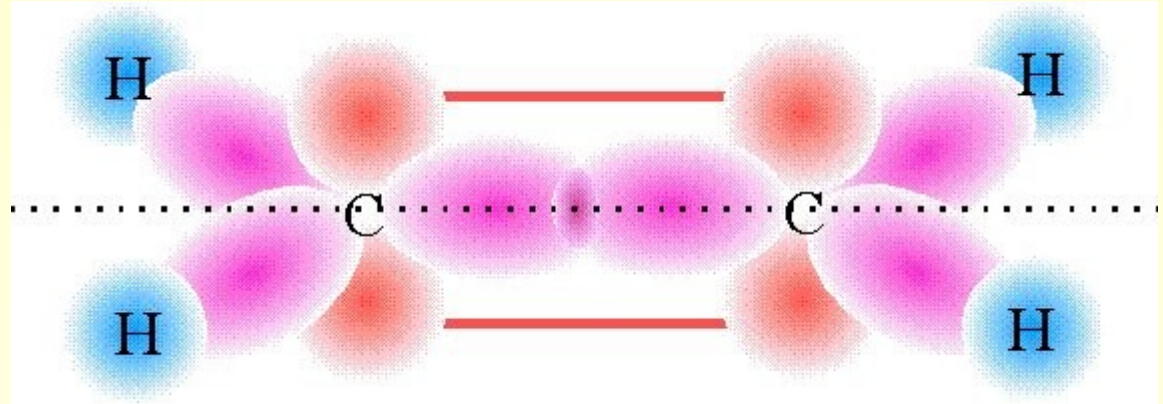
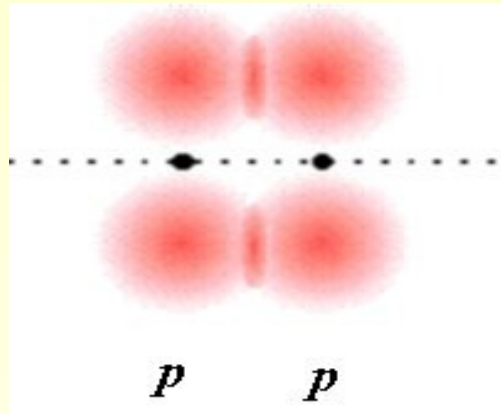


# Càuc daing tại chuông

## Geometrical Arrangements Characteristic of Hybrid Orbital Sets

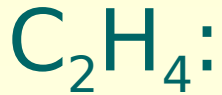
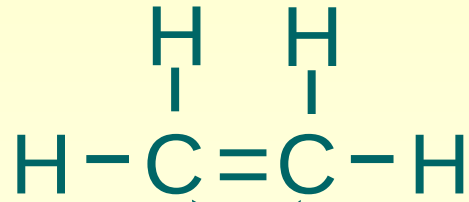
Atomic Orbital Set	Hybrid Orbital Set	Geometry	Examples
$sp^3d$	Five $sp^3d$	 <p>Trigonal bipyramidal</p>	$PF_5, SF_4, BrF_3, SbCl_5^{2-}$
$sp^3d, d$	Six $sp^3d^2$		$SF_6, ClF_5, XeF_4, PF_6^-$

# Các kiểu liên kết C-C

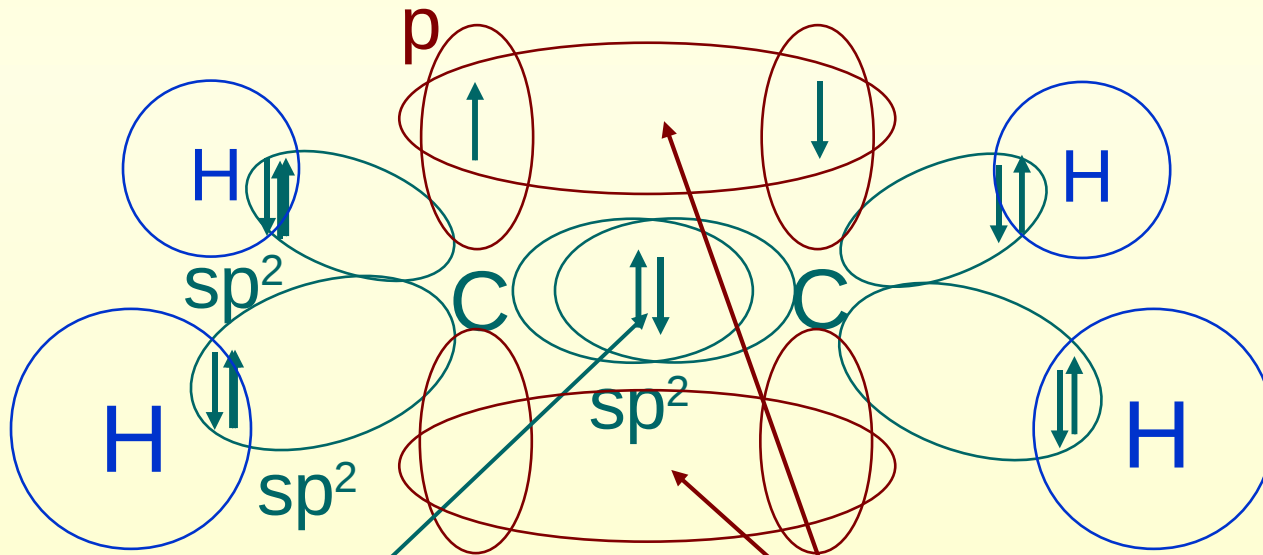


# Ví dụ

Coâng thöùc Lewis

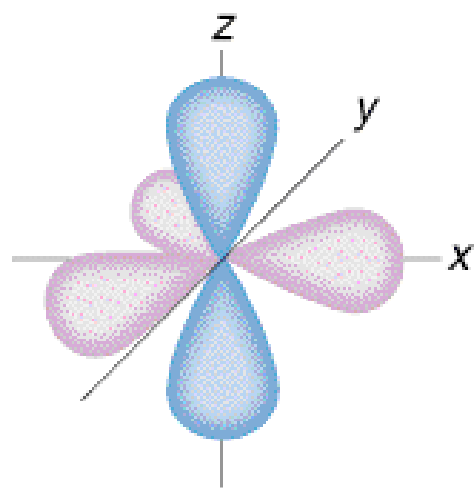


Tam giaùc -  $sp^2$

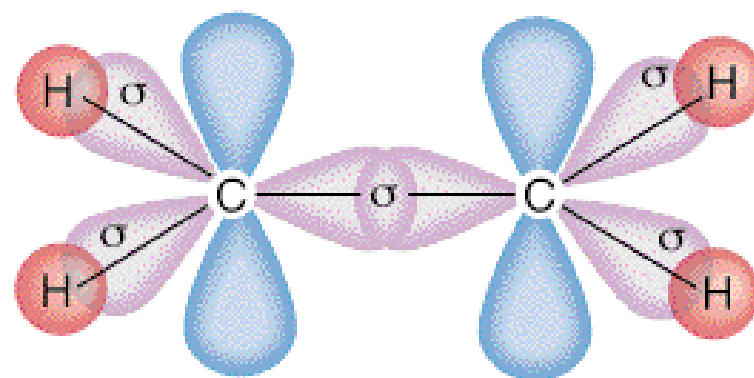


Lieân keát  $\sigma$

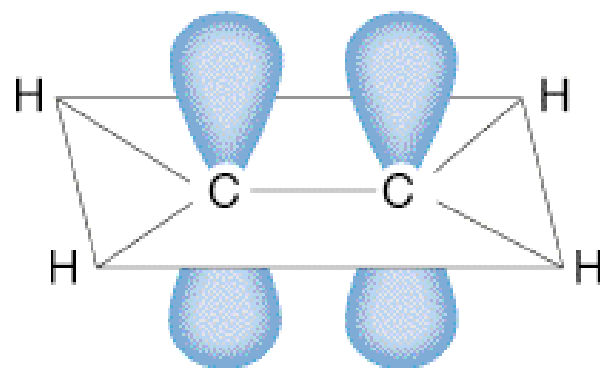
Lieân keát  $\pi$



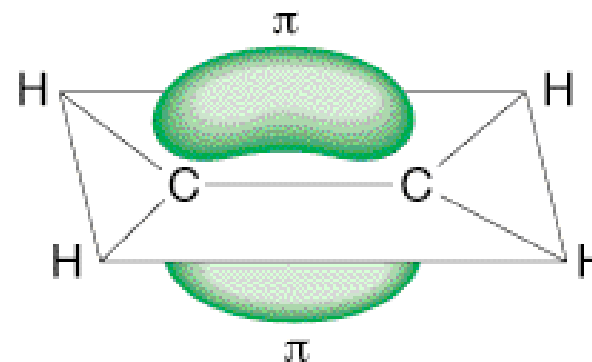
the set of orbitals  $sp^2 + p$



sigma ( $\sigma$ ) bonds



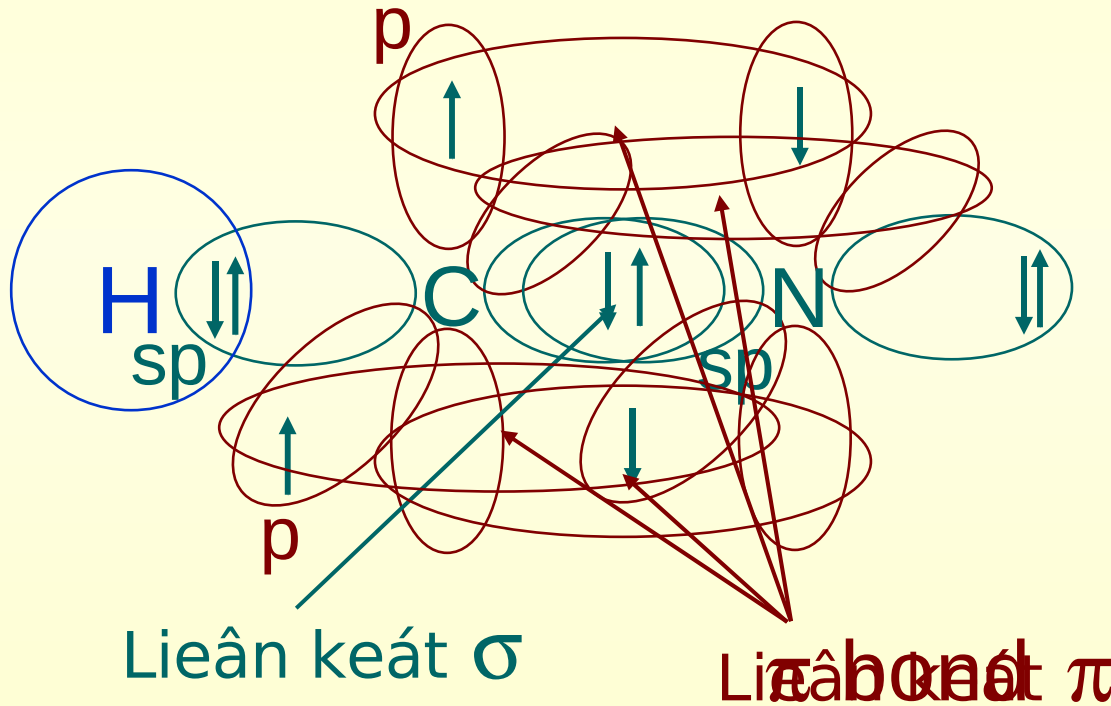
overlap of  $p$  orbitals leading to pi ( $\pi$ ) bond



# Ví dụ

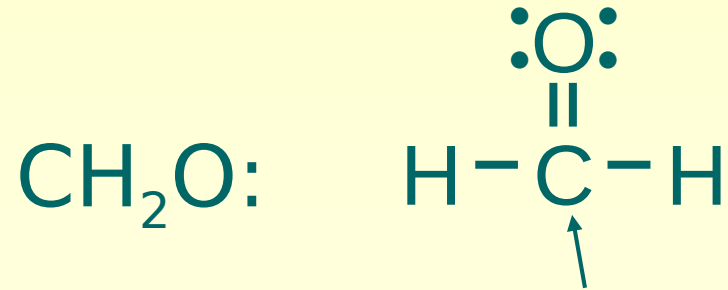


Thấu hướng  $sp$

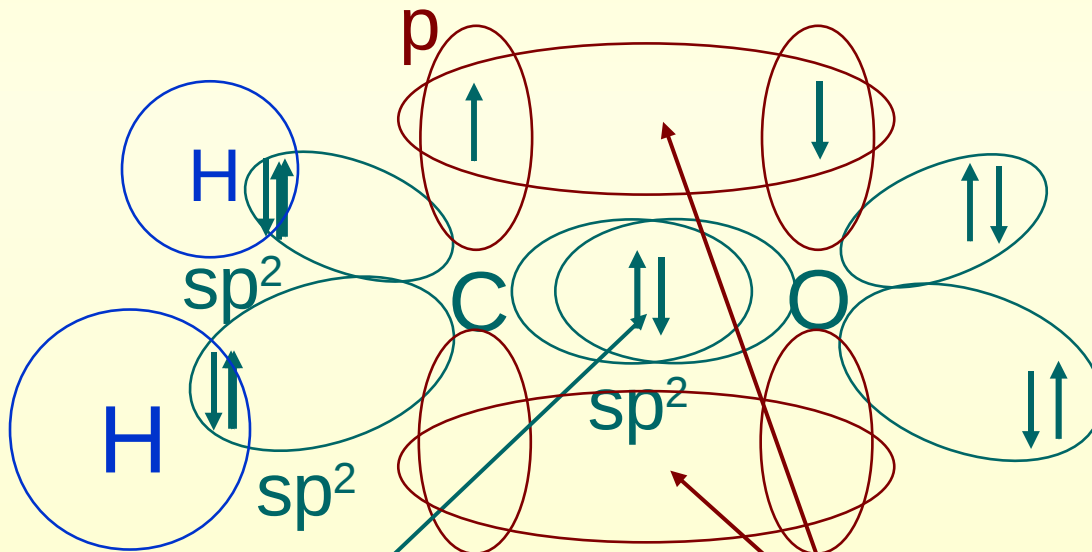


Liên kết Ba gồm 1  $\sigma$  và 2  $\pi$

# Ví dụ



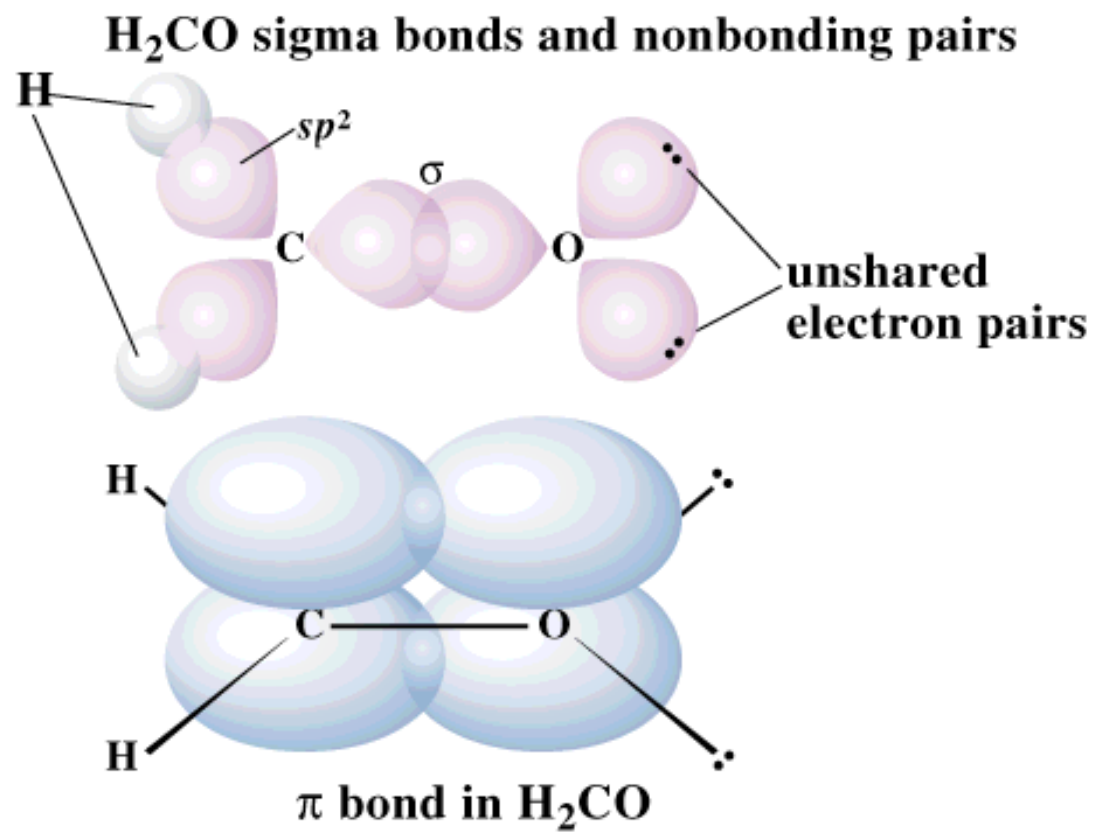
Tam giác - sp<sup>2</sup>



Liên kết  $\sigma$

Liên kết  $\pi$

## Sigma and pi bonding in formaldehyde



# KHẸM KHUYẾT CỦA THUYẾT VB

---

- **Sõi toàn tài của  $H_2^+$**
- VB:
  - Không thể toàn tài  $H_2^+$  do mỗi liên kết chæ ñöôic thõic hieãn baêng 1 electron duy nhaát
- **Thõic teá:**
  - $H_2^+$  toàn tài vaø khaù beàn vöõng
  - (naêng löõing liên kết trong  $H_2^+$  laø 255 kJ/mol)



# KHẺÁM KHUYẾÁT CUÛA THUYẾÁT VB

---

- **Lieân kéát trong  $F_2^+$  beân hôn trong  $F_2$**
- VB:
  - lieân kéát caøng beân khi maät ñoã electron giöõa hai nguyêân töû caøng lòùn. Khi heã  $F_2$  bò maät ñi 1 electron thì maät ñoã electron seõ giaûm ñi laøm cho lieân kéát trôû neân keùm beân hôn.
- **Thöïc teá:**
  - lieân kéát trong  $F_2^+$  (320 kJ/mol) beân hôn
  - lieân kéát trong  $F_2$  (155 kJ/mol).

# KHẸM KHUYẾT CỦA THUYẾT VB

---

- $O_2$  thuần tở (toàn tai electron ñoặc thaân trong phaân tở  $O_2$ )
- VB:
  - Trong phaân tở  $O_2$  không cở electron ñoặc thaân. Do ñó  $O_2$  sẽ cở tính nghòch tở (không bò nam chaâm huét. )
- Thöic teá
  - $O_2$  cở tính thuần tở tởc laø bò nam chaâm huét. Ñieàu ñó chöng tở raèng trong phaân tở  $O_2$  vaãn cở cở electron ñoặc thaân chöa gheùp caèp.

# KHẸM KHUYẾT CỬA THUYẾT VB

---

- Không giới thích nội hiện  
tổng quang phổ cửa các  
phân tử công hòa trò.

# THUYẾT VAÂN ÑAÏ PHAÂN TÖÛ

---

## MOLECULAR ORBITALS

môû roäng khai nieäm  
høm söng cho heä phaân  
töû

# Luaän ñieãm

---

1. Trong phaân töû, caùc electron cuõng toản taïi ôû nhöõng traïng thaùi rieâng gioáng nhö trong nguyeân töû
2. Traïng thaùi cuûa caùc electron ñöôïc bieäu dieãn bôûi caùc haøm soùng  $\varphi_{MO}$  goïi laø caùc orbital phaân töû.
3. Caùc electron trong phaân töû cuõng chieám caùc orbital phaân töû tuaân theo caùc nguyeân lý beàn vöõng, nguyeân lý Pauli, quy taéc Hund.
4. Vieäc xaùc ñònh caùc haøm soùng phaân töû ( $\varphi_{MO}$ ) ñöôïc thöïc hieän baèng caùch giaûi phöông trình soùng Schrodinger cho

---

Do tauc dung tong hoa goa  
cau hainhan vaø electron trong  
heä phaân töu, vieäc giaûiphöông  
trình Schrodinger laø raátphöüc  
taïp.

Ñeã ñôn giaûn hoùa vieäc giaûinaøy ta  
chaáp nhaän cauc giaû thuyeátgaàn ñuùng

# caùc giãu thuyếat gaàn ñhùng

1. Caùc orbital phaân töû ñhõic hình thaønh töø söi toả hõip tuyeán tính cuõa caùc orbital nguyêân töû.
2. Caùc orbital nguyêân töû tham gia toả hõip phaûi thoaû ñieän kieän:
  - Coù naêng löõing gaàn nhau
  - Coù tính ñoái xõùng gioáng nhau
3. Chæ coù caùc orbital hoùa trò môùi ñhõng goùp vaøo söi hình thaønh orbital phaân töû. Caùc orbital nguyêân töû ôû lòup voû beân trong khoâng hò thay ñoái

# caùc giãu thuyeat gaàn ñuùng

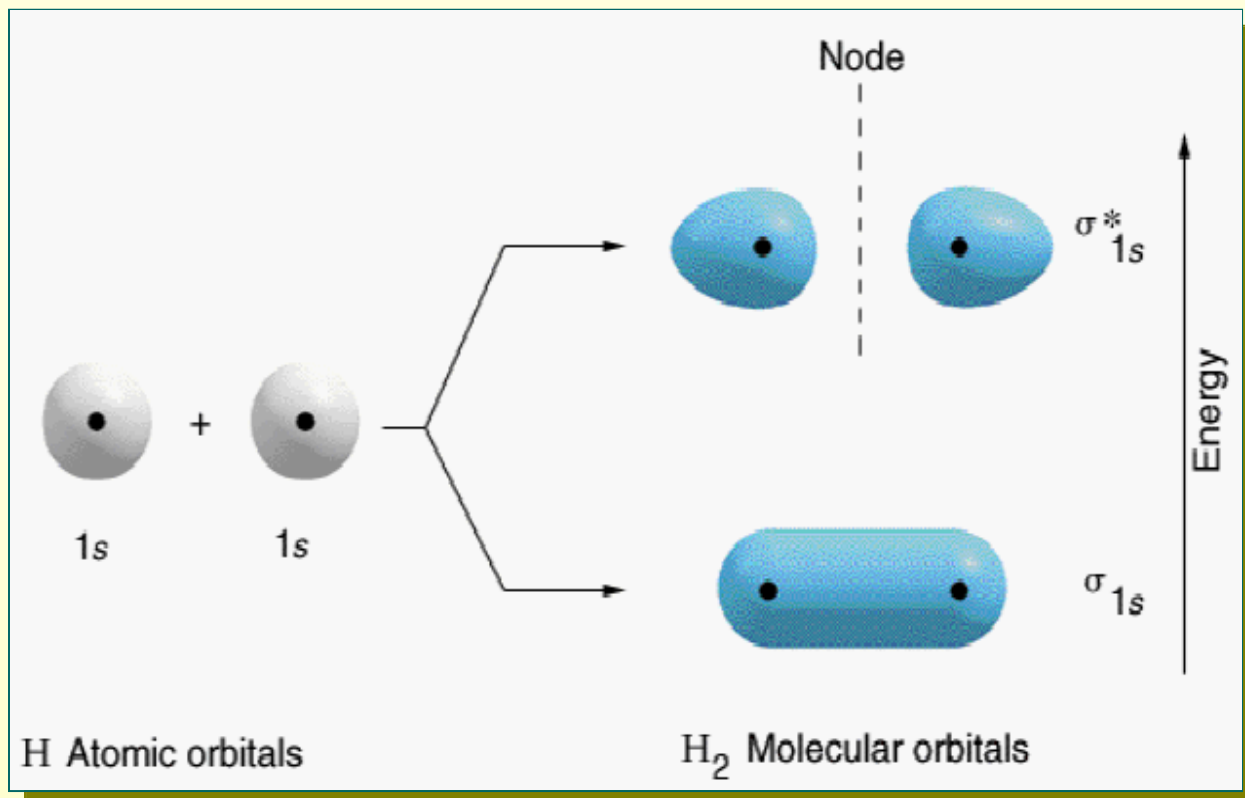
---

- 4. Tuøy theo kieâu toả hõip maø seõ taïo thaønh caùc orbital phaân töû coù tính ñoái xöùng vaø naêng löông khaùc nhau nhõ sau:
  - Toả hõip ñoái xöùng qua truïc seõ taïo thaønh caùc orbital phaân töû  $\sigma$
  - Toả hõip ñoái xöùng qua maët phaúng taïo thaønh caùc orbital phaân töû  $\pi$
  - Toả hõip döông taïo thaønh caùc orbital phaân töû coù naêng löông thaáp goïi laø caùc orbital lieân keát (kyù hieäu laø  $\sigma$ , hoaëc  $\pi$ )
  - Toả hõip âm taïo thaønh caùc orbital phaân töû coù naêng löông cao goïi laø



# Phân tử $H_2$

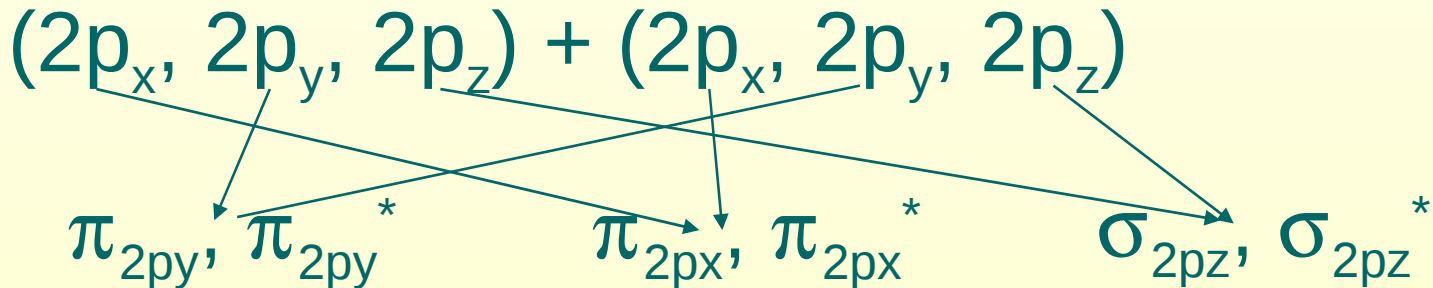
$H_2$  chứa orbital liên kết  $\sigma_{1s}$  và orbital phân liên kết  $\sigma^*_{1s}$



# Phân tử ( $X_2$ ) với $X$ là nguyên tố chu kỳ 2

---

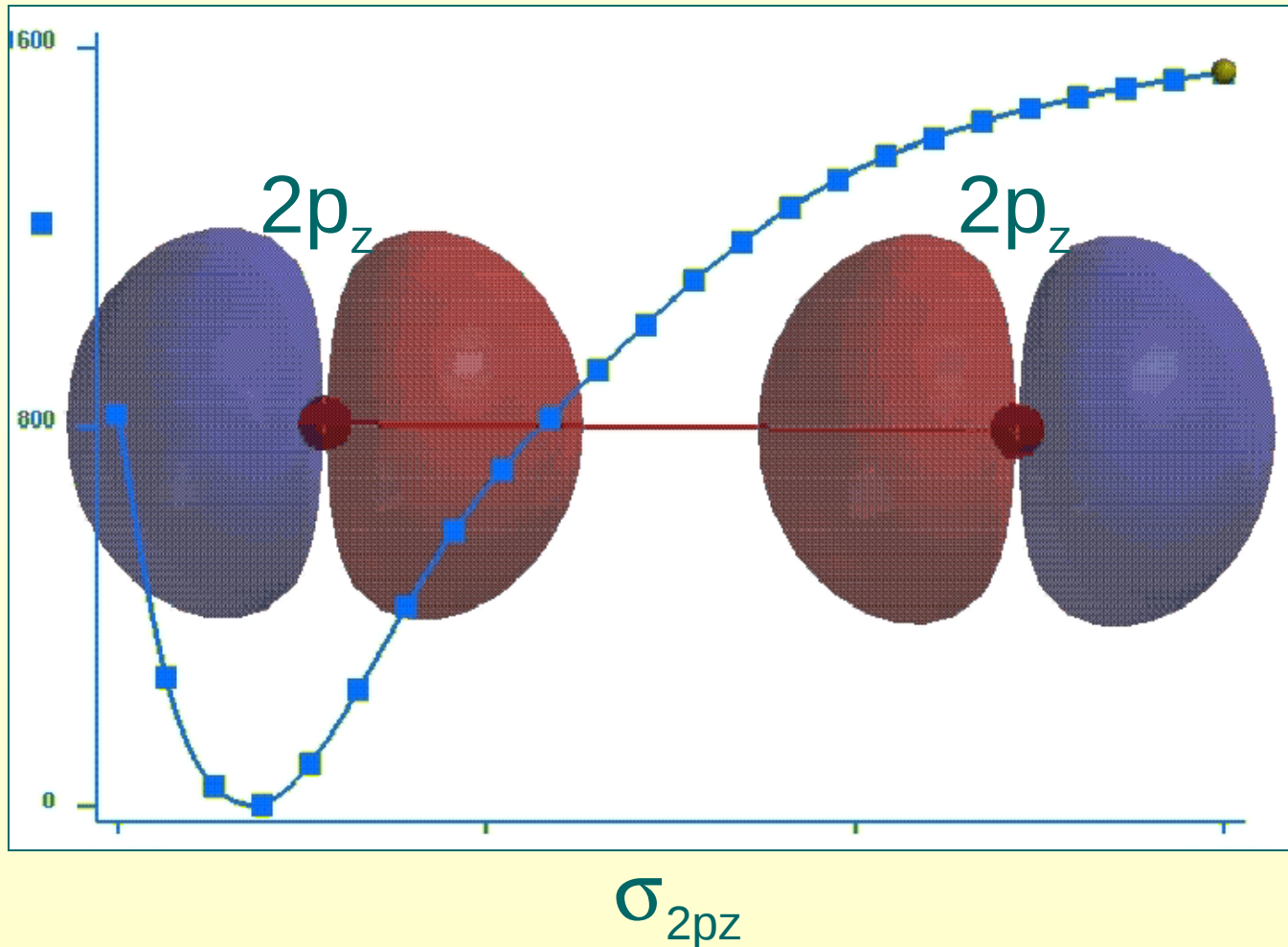
Sơ đồ hình của các orbital nguyên tử thành các orbital phân tử



Giaù sơ đồ trục Z trong với trục liên kết

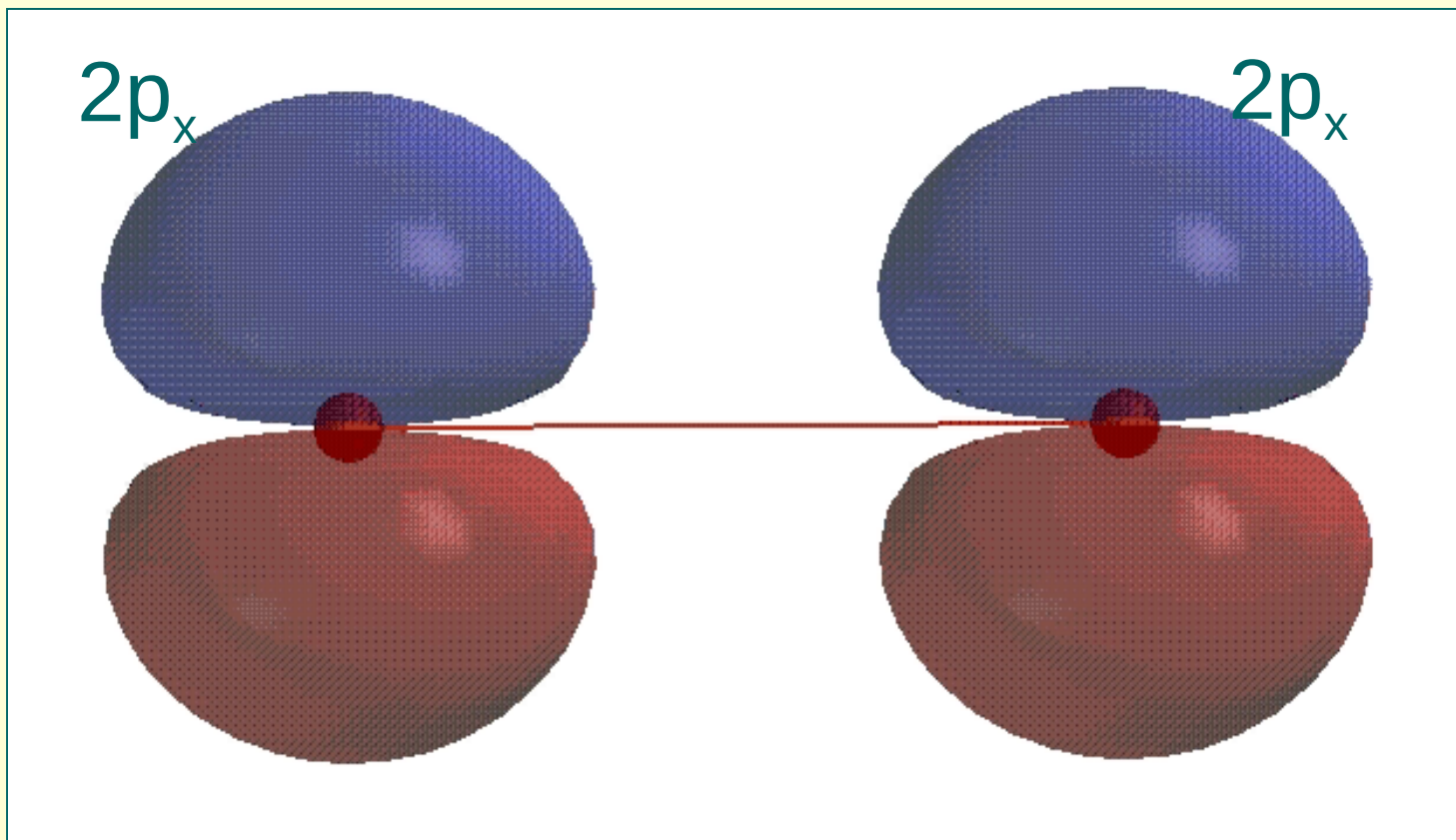
# Phân tử $O_2$

Sơ hình thành  $\sigma_{2p_z}$  MO:



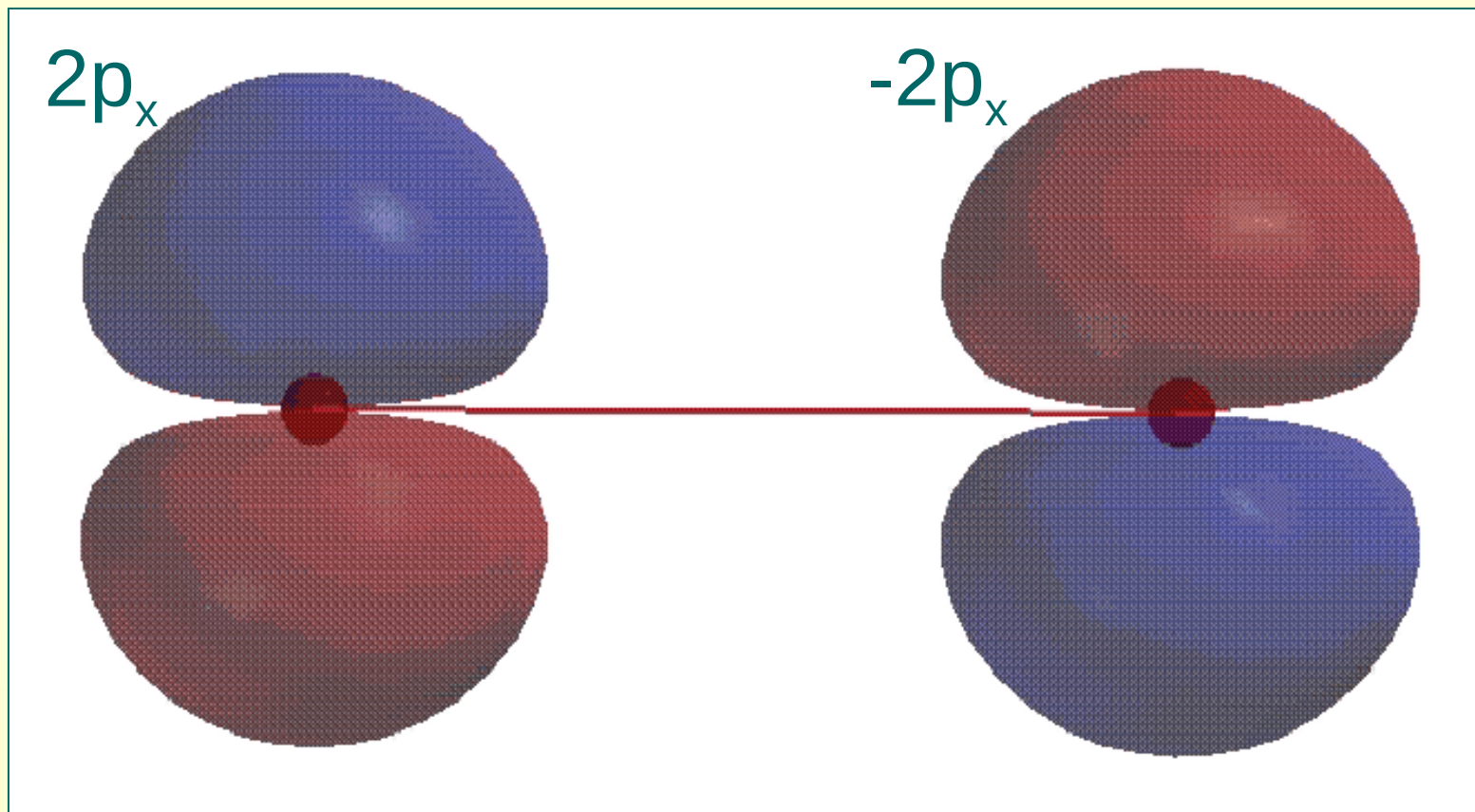
# Phân tử $O_2$

Sơ hình thành  $\pi_{2p_x}$  MO:



# Phân tử $O_2$

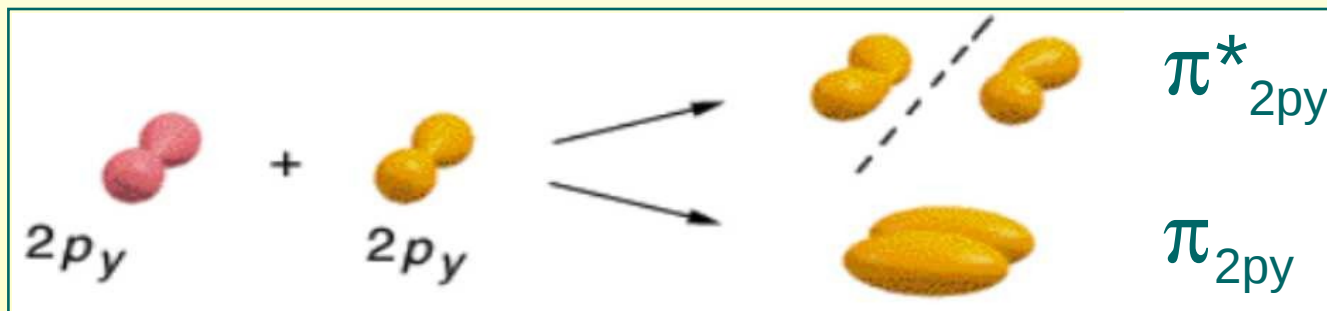
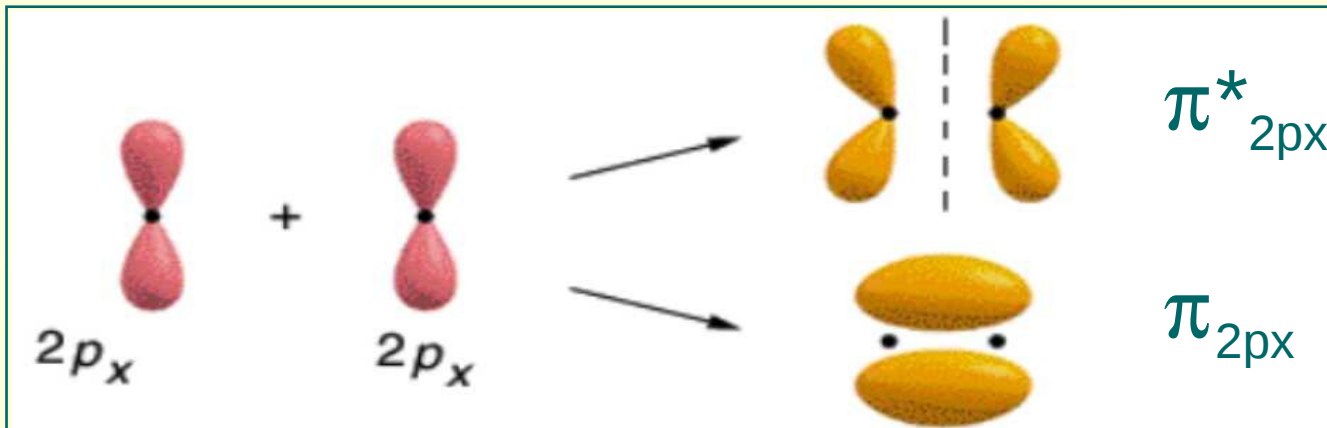
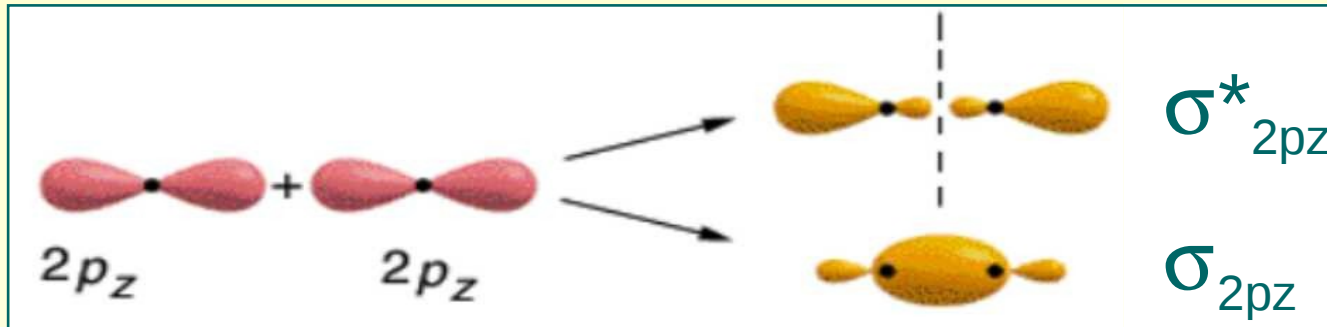
Sơ hình thành  $\pi^*_{2px}$  MO:



HNC-A

$\pi^*_{2px}$

# $\sigma_{2p}$ $\text{na}\emptyset$ $\pi_{2p}$



# Cách sắp xếp năm tử trong M O

---

các hình năm tử của 2 phân tử  
giao nhau không có tổng tác dụng  
(năng lượng s và p cách xa nhau)  
VD: Phân tử O<sub>2</sub>, F<sub>2</sub>, Ne

# Cách sắp xếp mức năng lượng trong MO

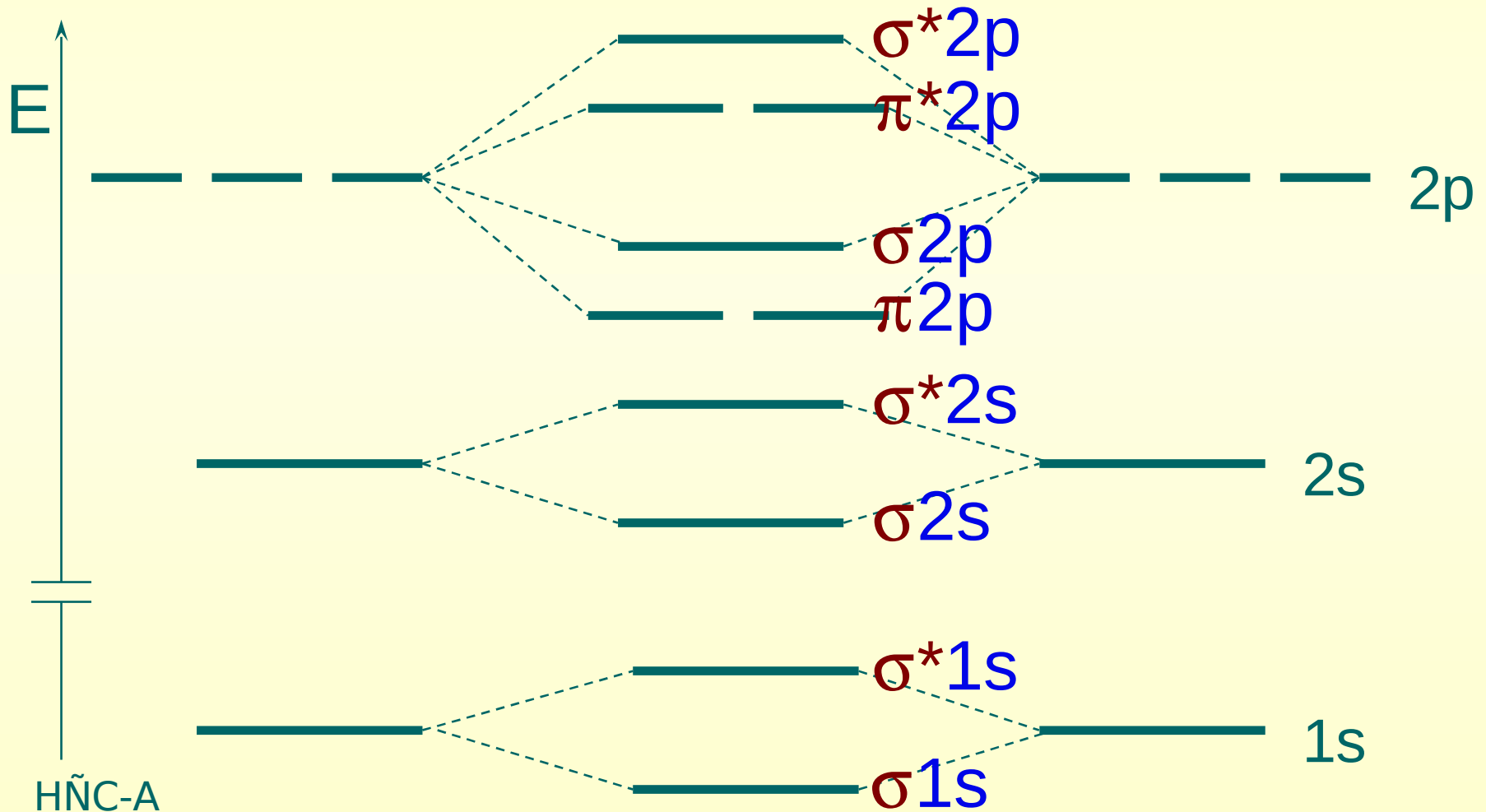
---

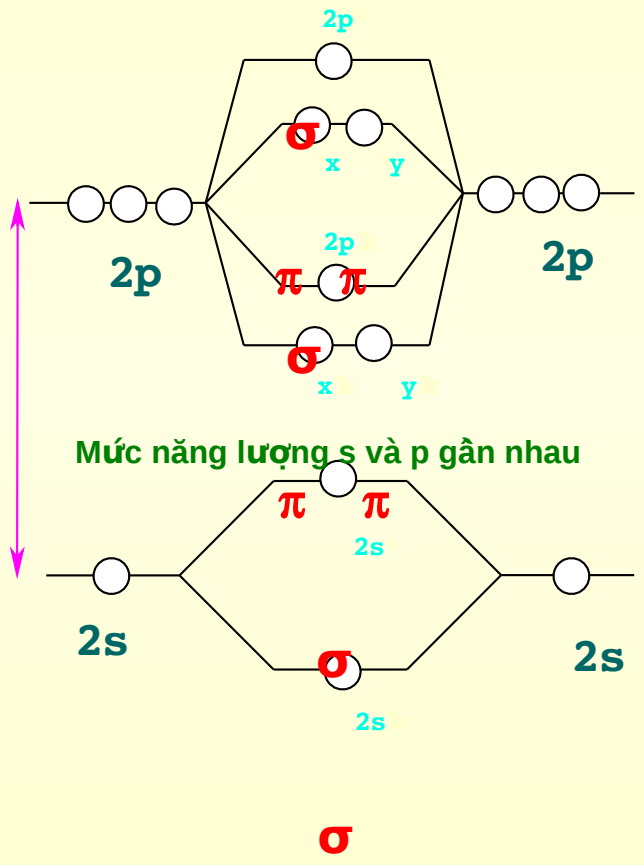
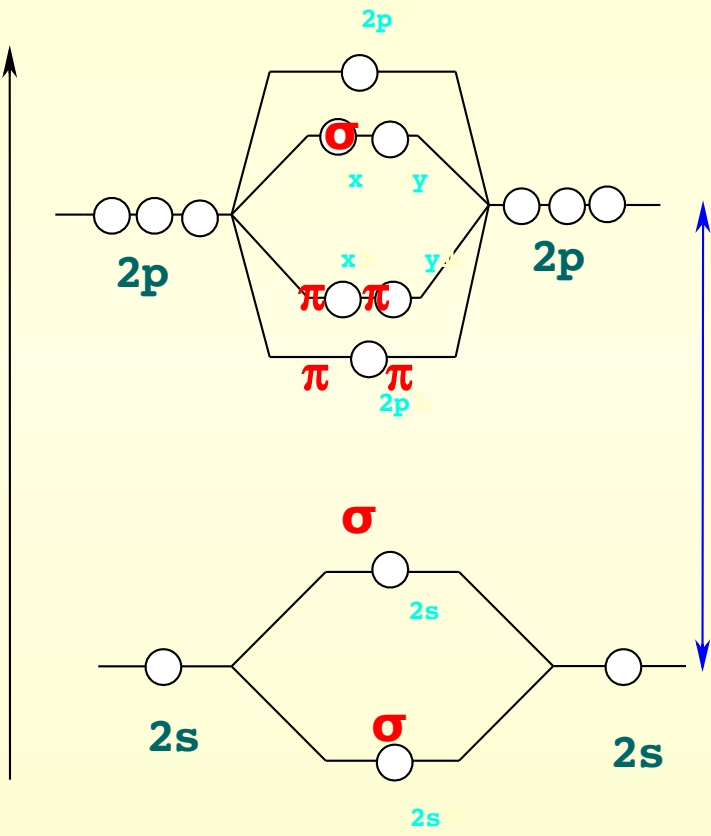
cấu hình mức năng lượng của 2 phân tử giống nhau có tổng các sp (năng lượng s và p gần nhau. VD : phân tử He<sub>2</sub>; N<sub>2</sub>

$$(\sigma_{1s}^{\text{lk}}) < (\sigma_{1s}) < (\sigma_{2s}^{\text{lk}}) < (\sigma_{2s}) <$$



# Số ão ã orbitalphaân tũu cũu tũũng tũũc sp





HÑC-A

$\sigma$

$\sigma$

# CAÙCH SAÉP XEÁP ELECTRON

---

1. Toång soá electron cuûa caùc orbital phaân töû baèng toång soá electron hoùa trò ñòùng gòp bôûi caùc nguyêân töû
2. Caùc electron saép xeáp vaøo caùc orbital phaân töû theo traät töï naêng löôïng töø thaáp ñeán cao (nguyêân lý beàn vöõng)
3. Moãi orbital phaân töû chöùa toái ña 2 electron, hai electron naøy phaûi coù spin ngöôïc nhau (nguyêân lý loãïi tröø Pauli)
4. Khi saép xeáp vaøo caùc orbital coù naêng löôïng baèng nhau caùc electron saép sao cho toång soá spin laø cöïc ñaïi (quy taéc Hund)

# Bậc liên kết

---

- ❖ Số bậc liên kết trong phân tử xác định thông qua giá trị **BAÛC LIEÂN KEÁT**
- ❖ **BAÛC LIEÂN KEÁT =  $\frac{1}{2}$  (Tổng số electron trên orbital liên kết - Tổng số electron trên orbital phân liên kết)**
- ❖ Bậc liên kết cộng lớn thì liên kết trong phân tử càng bền.
- ❖ Khi bậc liên kết = 0 hay  $< 0$  thì liên kết không tồn tại.

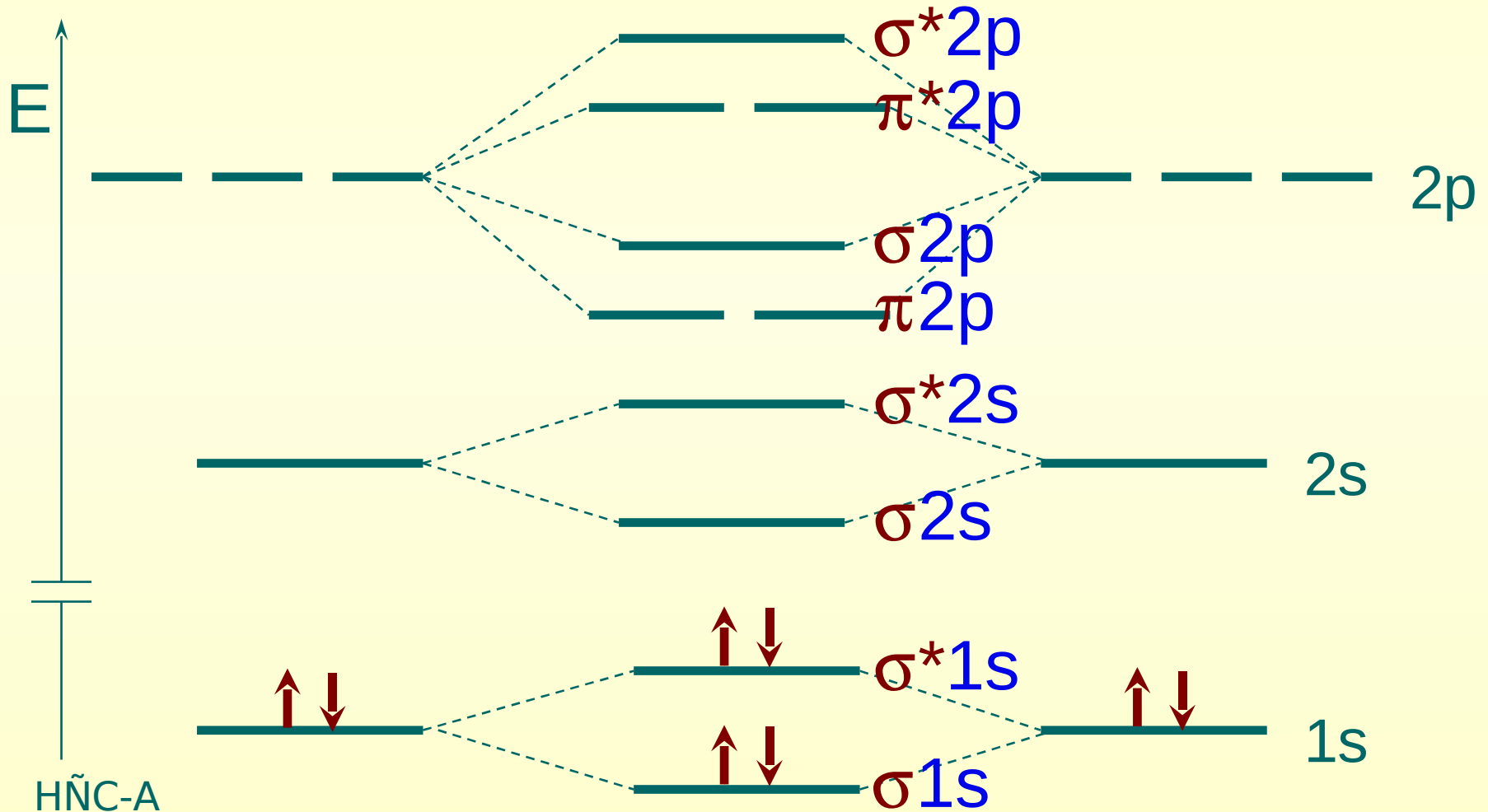
# Cấu hình điện tử của một số phân tử đơn chất còn tổng tài c sp

---

Phân tử  $H_2$   $(\sigma 1s^{lk})^2 (\sigma 1s^*)^0$

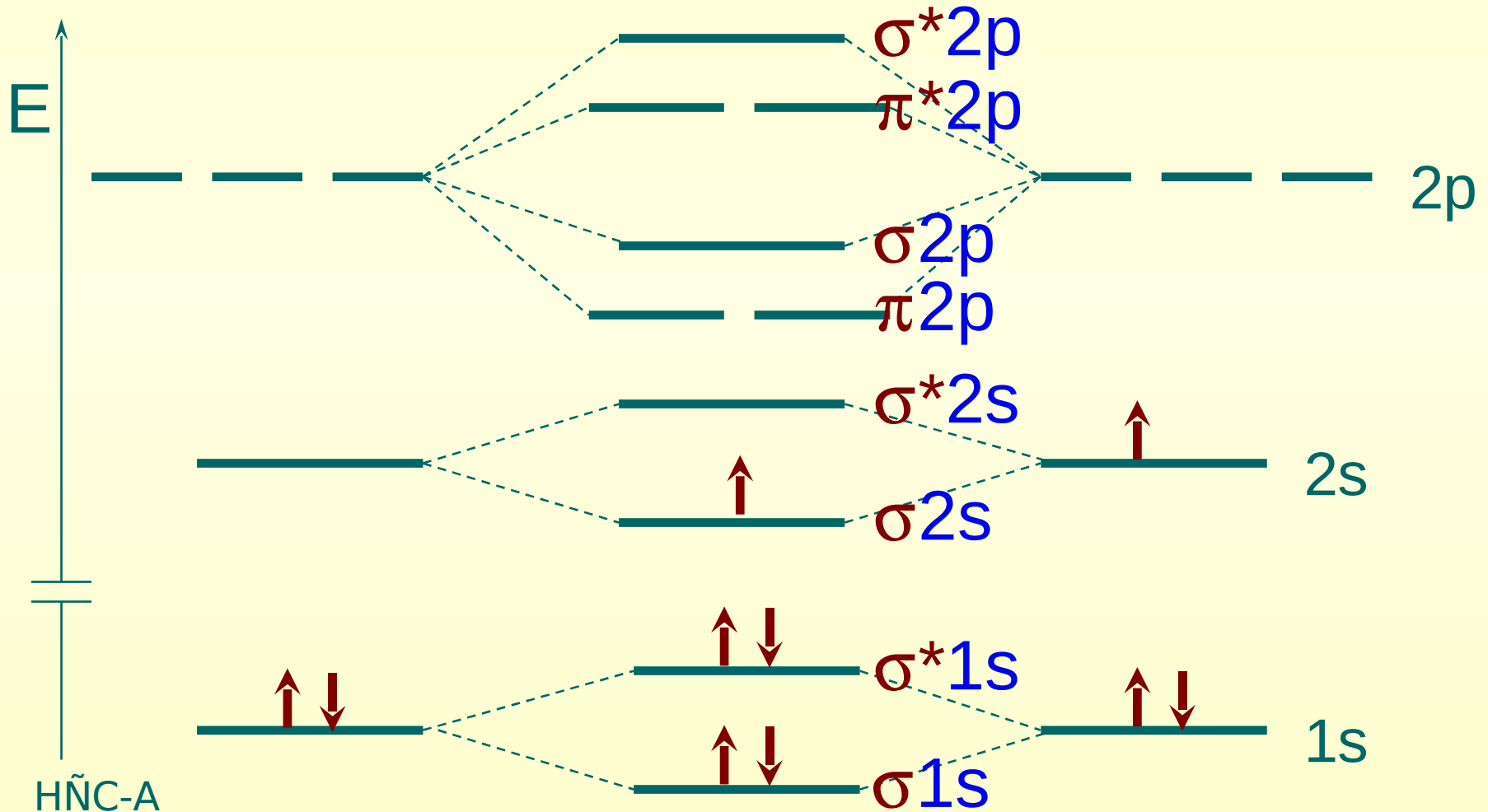
# Ví dụ

$\text{He}_2$  bậc LK =  $\frac{1}{2}(2 - 2) = 0$  phân tử không tồn tại



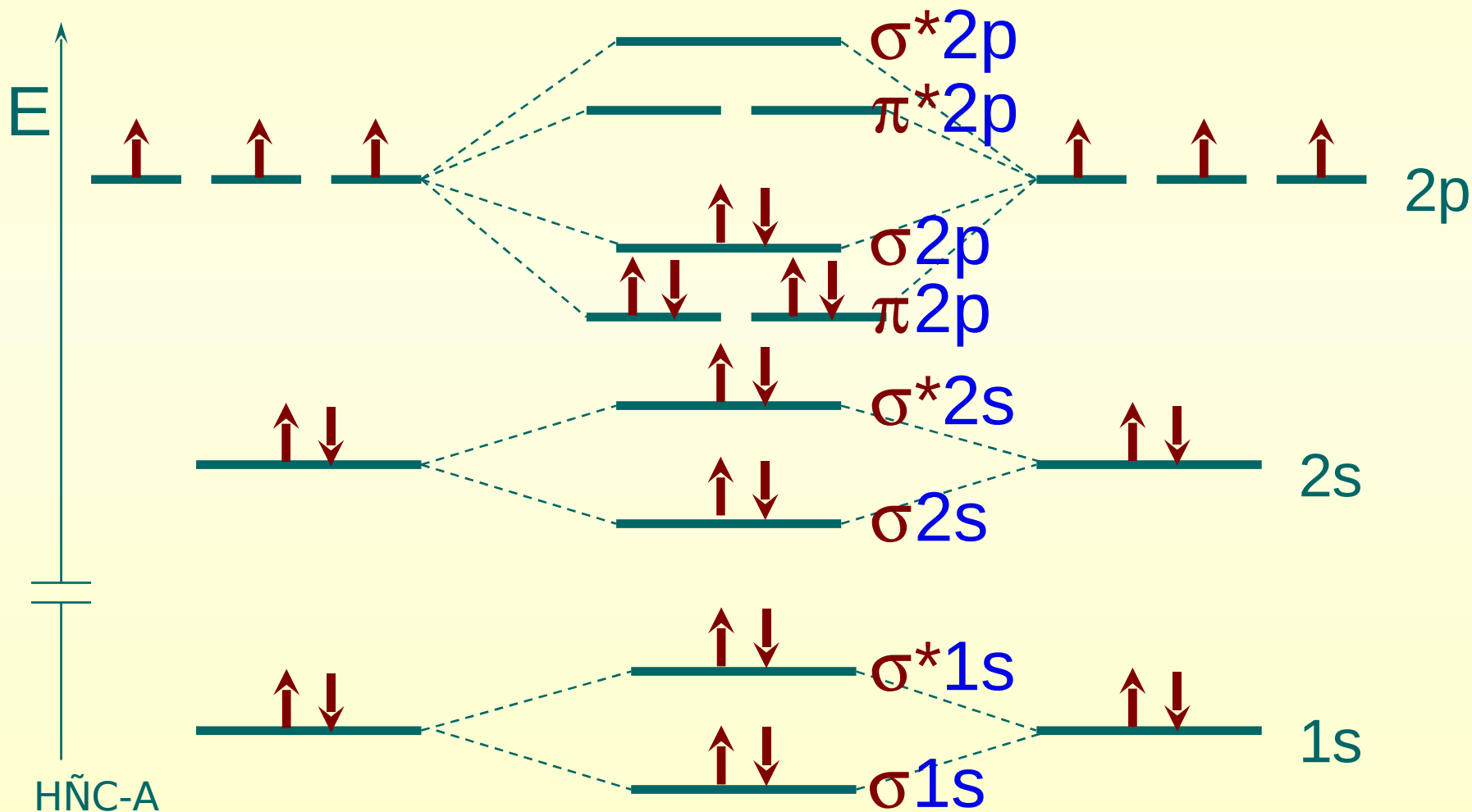
# Vídui

He<sub>2</sub><sup>+</sup>: Baäc LK =  $\frac{1}{2}(3 - 2) = \frac{1}{2}$



# Vídui

$N_2$ : Baäc LK =  $\frac{1}{2}(10 - 4) = 3$





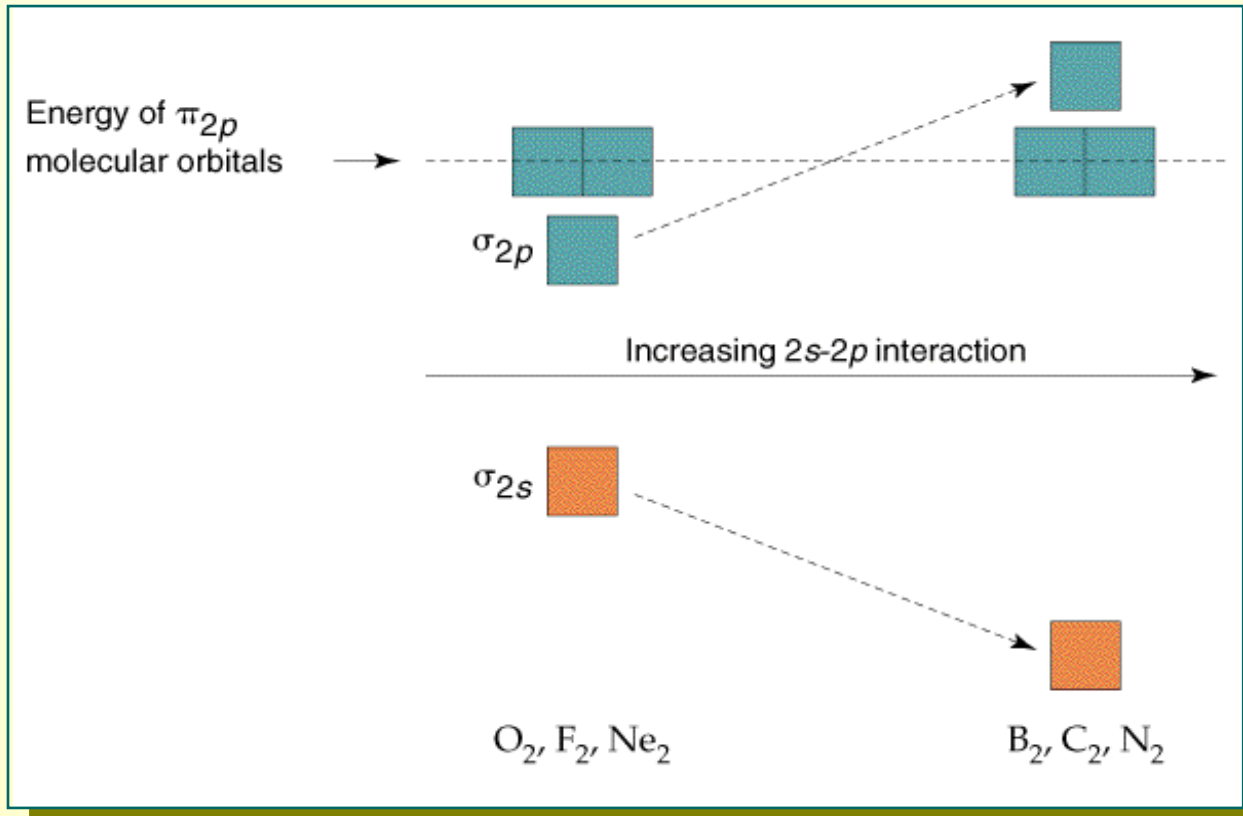
# Söitöông taùc 2s – 2p

---

- Khi naêng lööïng cuûa orbital 2s vaø 2p caùch xa nhau (caùc nguyêân toá cuoái chu kyø nhö O, F), söi töông taùc giöõa 2s vaø 2p khoâng ñaùng keã do ñoù caùc orbital  $\pi_x$ , vaø  $\pi_y$  coù naêng lööïng cao hôn orbital  $\sigma_{2p}$
- Khi naêng lööïng cuûa orbital 2s vaø 2p khaù gaàn nhau (caùc nguyêân toá ñaàu chu kyø nhö B, C, N), söi töông taùc giöõa 2s vaø 2p laø ñaùng keã do ñoù caùc orbital  $\pi_x$ , vaø  $\pi_y$  coù naêng

# Söitöông taùc 2s - 2p

Vòu phaân töü  $O_2$  vaø  $F_2$  orbital  $\sigma_{2p}$  còu naêng lööing thaáp hôn orbital  $\pi_{2p}$ .

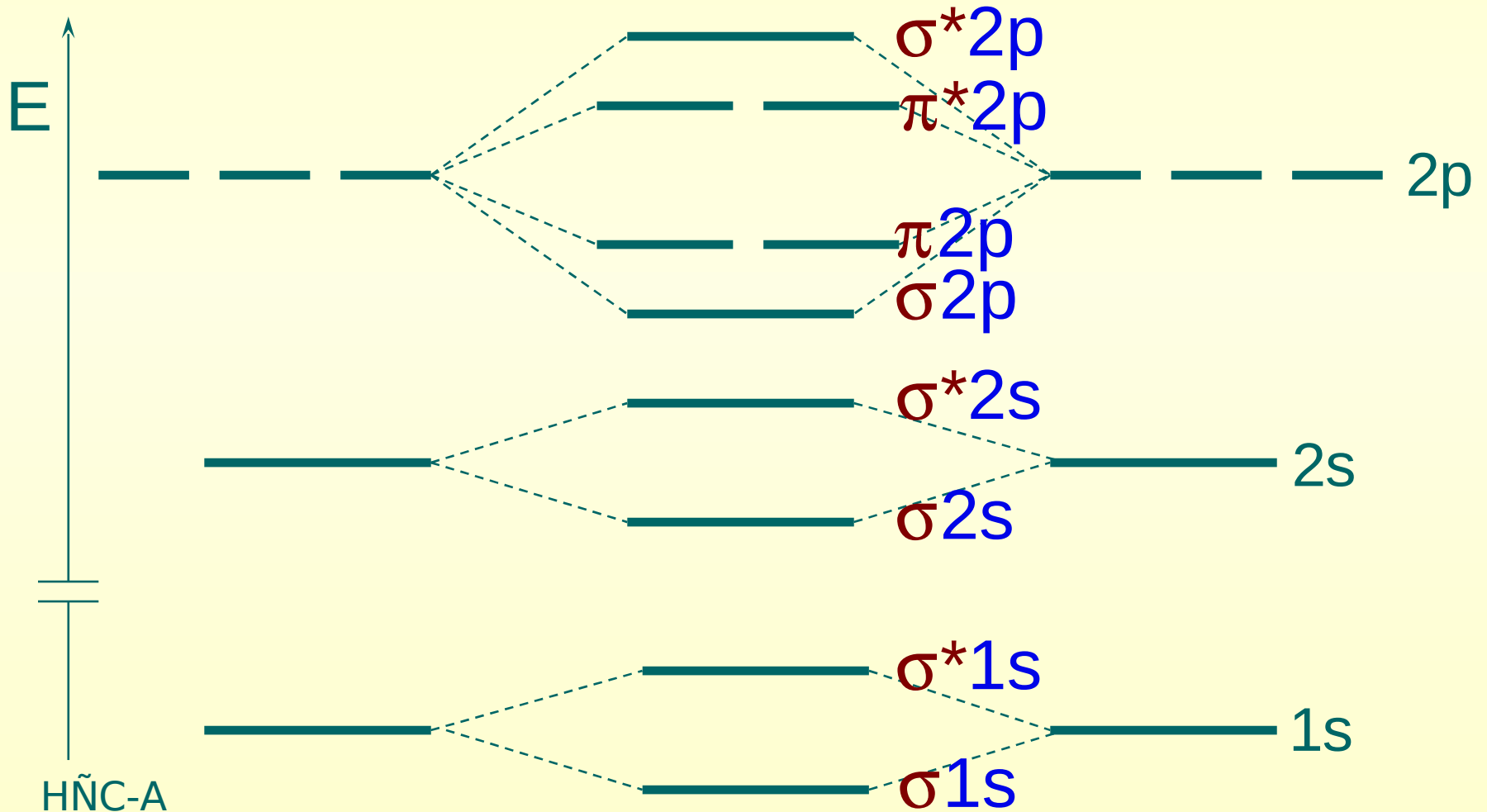


# Cấu hình điện tử của một số phân tử đơn chất không có tổng tác dụng

---

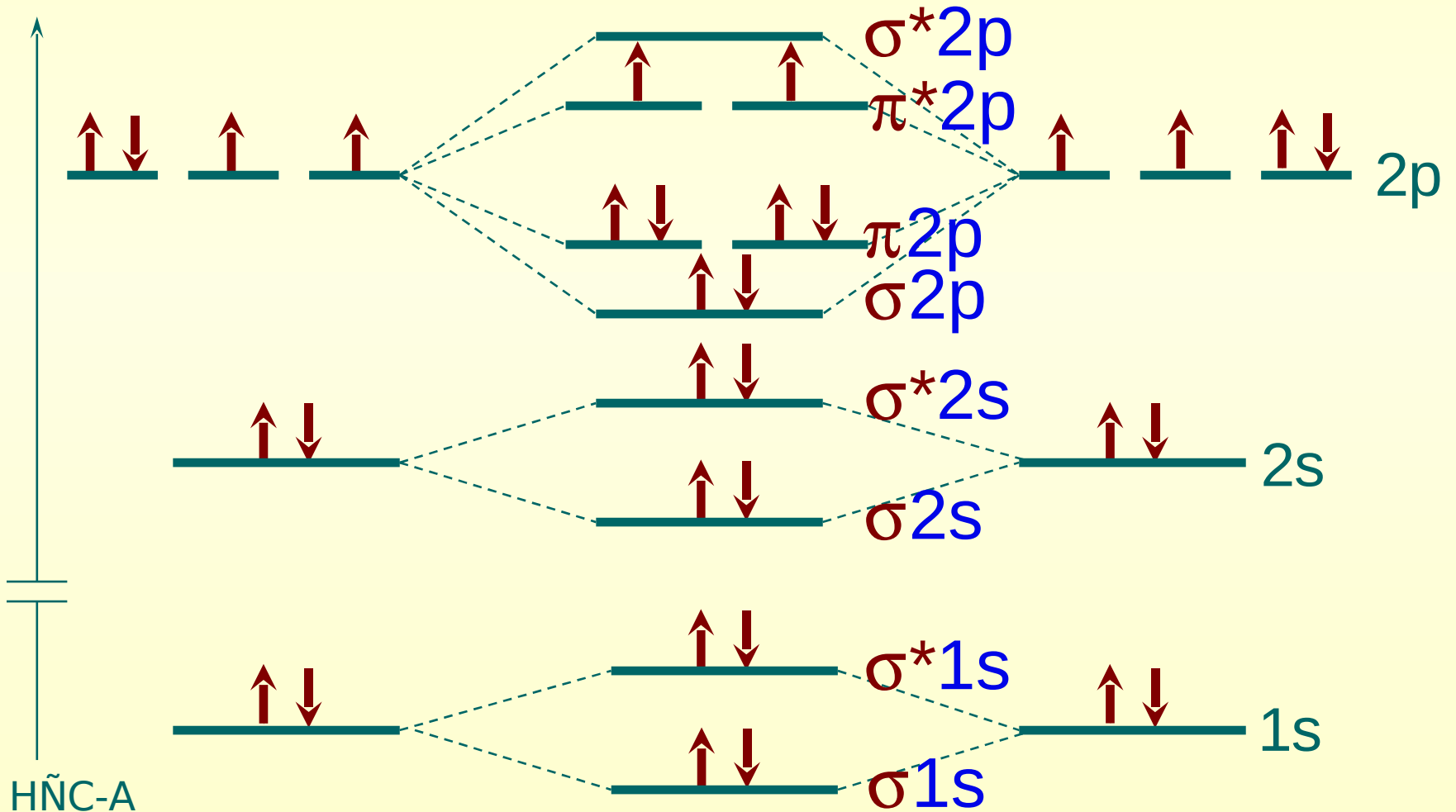
# Ví dụ

Phân tử  $O_2$ ,  $F_2$ ,  $Ne_2$ :

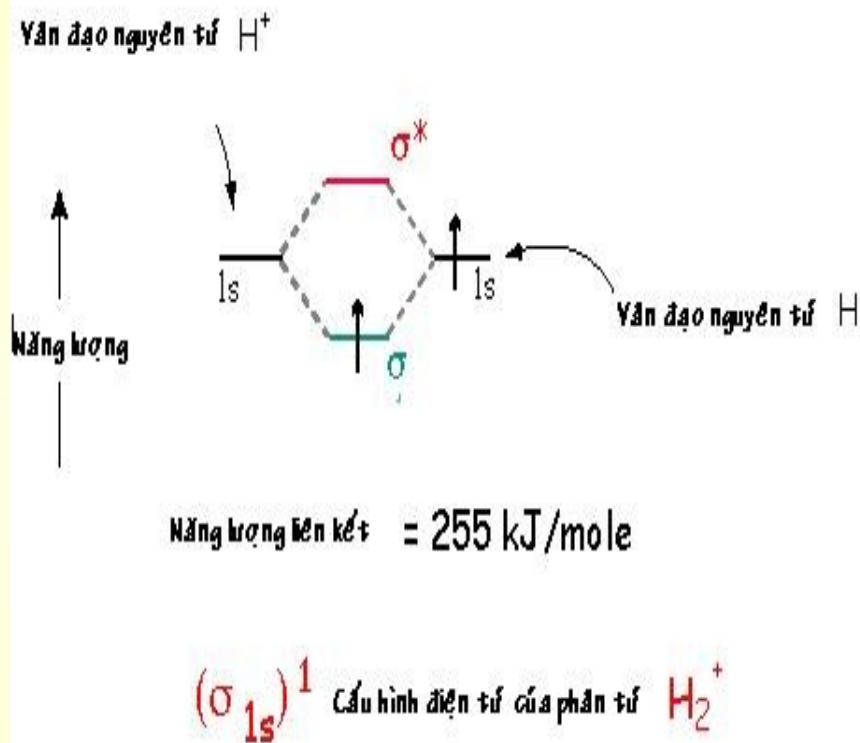
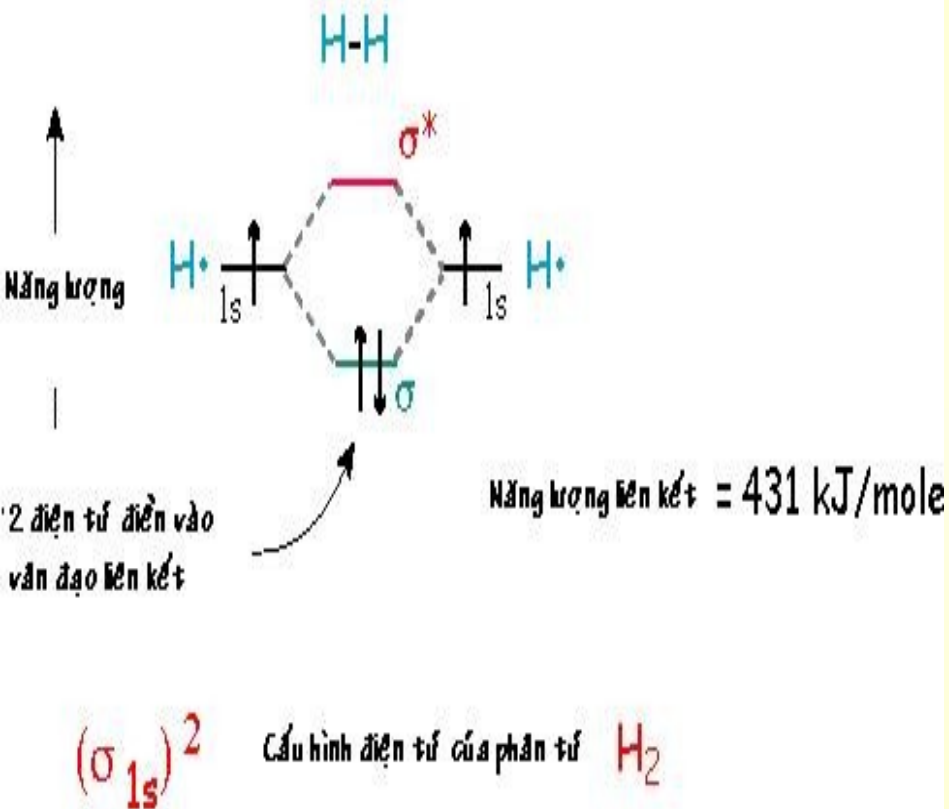


# Vídui

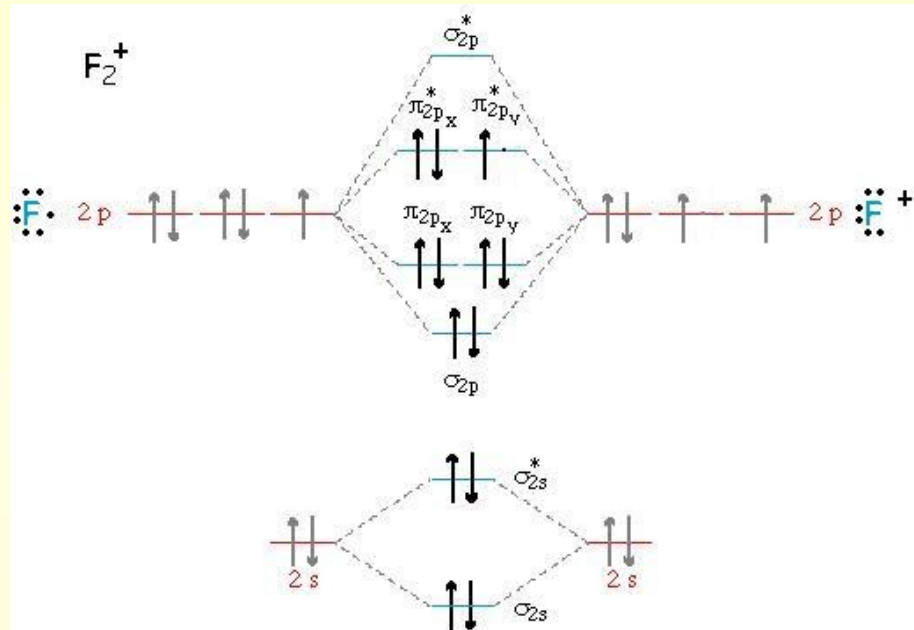
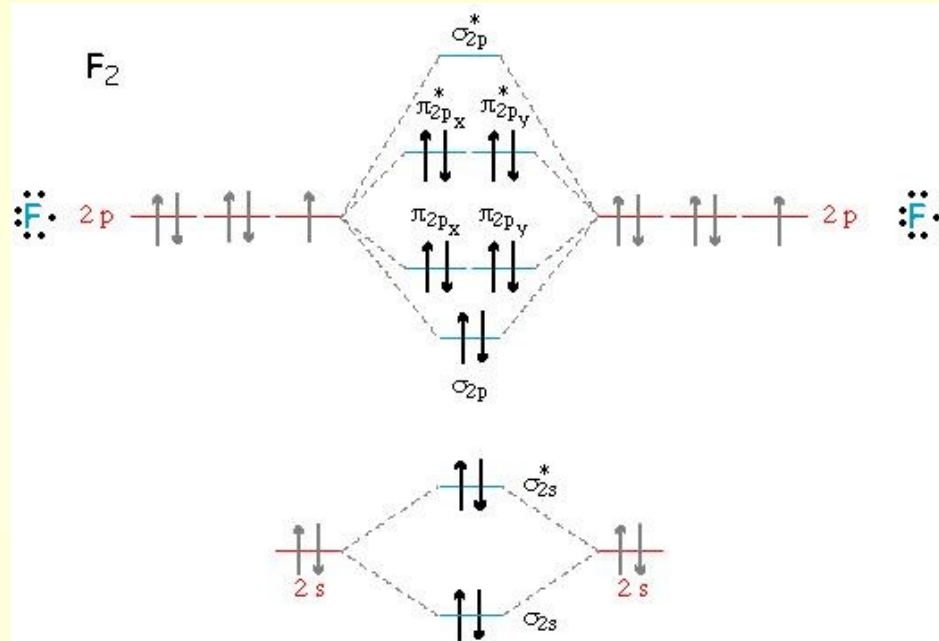
O<sub>2</sub> Baäc LK =  $\frac{1}{2}(10 - 6) = 2$  thuaän töø



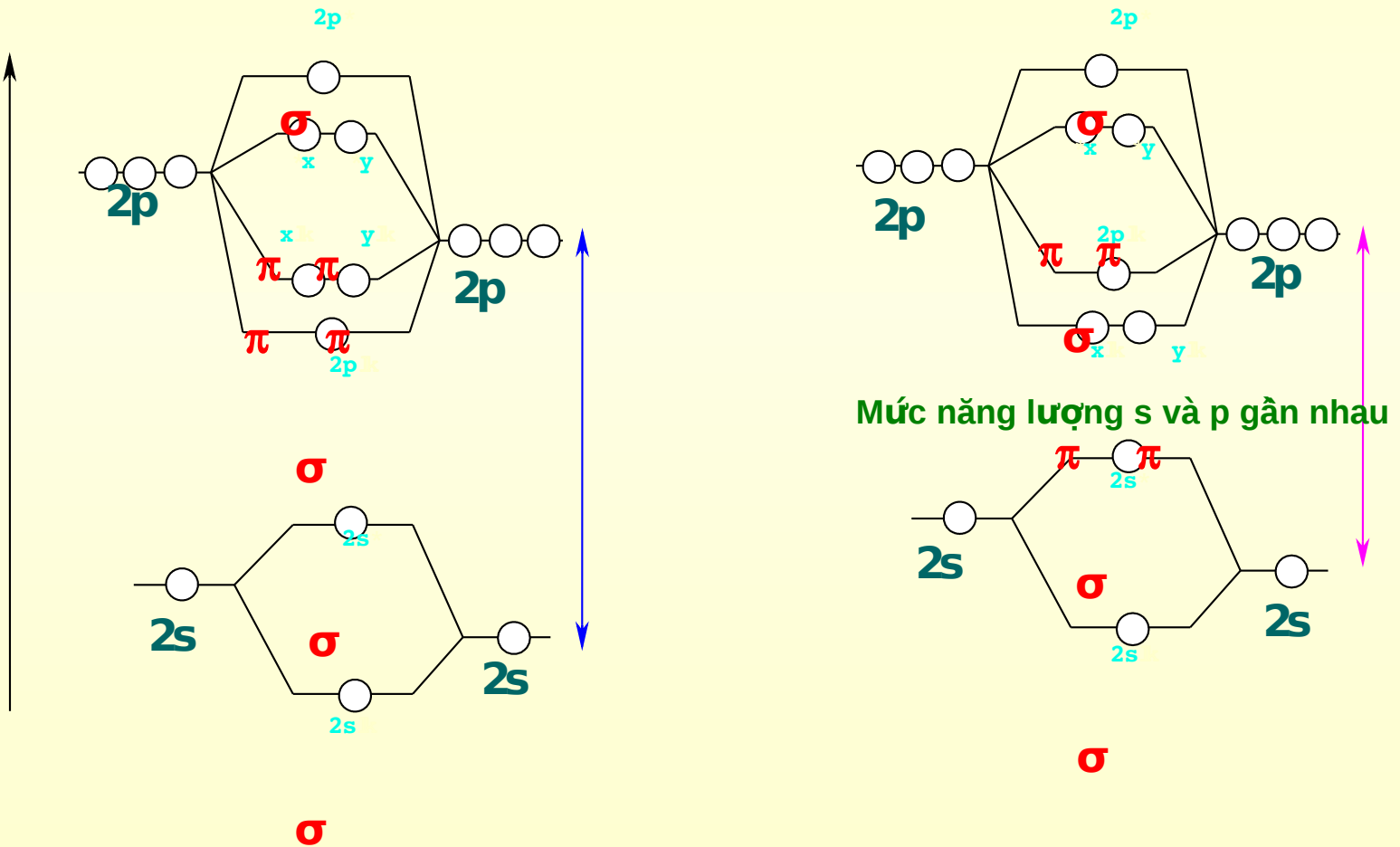
# Söitöàn taiicuûa $H_2^+$



# liên kết trong $F_2^+$ beàn hôn liên kết trong $F_2$



# Cấu hình điện tử của một số phân tử hợp chất (các nguyên tử khác điện tích hạt nhân)





# Ví dụ

---

Caáu hình ñieän töû cuûa phaân töû coù  
2 nguyêän töû khaùc nhau

NO : N:  $1s^2 2s^2 2p^3$  coù 5 ñieän töû hoùa  
trò

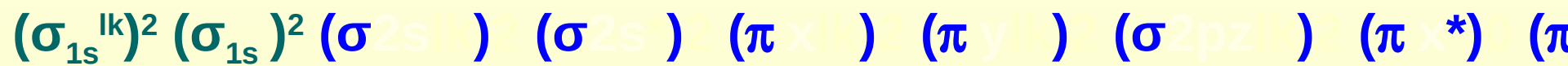
O :  $1s^2 2s^2 2p^4$  coù 6 ñieän töû hoùa  
trò

NO coù 11 ñieän töû hoùa trò ôû lôùp 2

$(\sigma_{1s})^2 (\sigma_{1s}^*)^2 (\sigma_{2s})^2 (\sigma_{2s}^*)^2 (\pi_x)^2 (\pi_y)^2 (\sigma_{2p_z})^2 (\pi_x^*)^2 (\pi_y^*)^2$

- 
- CO : C:  $1s^2 2s^2 2p^2$  có 4 ñieän töû hoùa trò
  - O :  $1s^2 2s^2 2p^4$  có 6 ñieän töû hoùa trò
  - NO có 10 ñieän töû hoùa trò ôû lôùp 2

Phân tử CO



# Cấu hình điện tử của một số phân tử hợp chất (các nguyên tử khác điện tích hạt nhân)

