

CHƯƠNG II CẤU TẠO CHẤT

I- CẤU TẠO NGUYÊN TỬ

1- Một số mẫu nguyên tử cổ điển

1.1- Mẫu Rutherford (Rozof- Anh). 1911

1.2- Mô hình nguyên tử Bohr (Bo- Đan mạch). 1913

2- Những tiền đề của cơ học lượng tử

2.1- Thuyết lượng tử Planck (Plăng- Đức). 1900

2.2- Thuyết sóng- hạt của hạt vi mô

2.3- Nguyên lý bất định Heisenberg (Haixenbec-Đức). 1927

3- Khái niệm cơ bản về cơ học lượng tử

3.1- Hàm sóng - Phương trình sóng

3.2- Ý nghĩa các số lượng tử (Số lượng tử chính n ; Số lượng tử phụ l ; Số lượng tử từ m ; Số lượng tử Spin m_s)

3.3- Khái niệm về Orbitan nguyên tử

4- Quy luật phân bố các electron trong nguyên tử.

a - Nguyên lý loại trừ Pauli

b - Nguyên lý vững bền

c - Quy tắc Hund

d- Giới thiệu quy tắc bão hoà và bán bão hoà

biên soạn: Nguyễn Kiên

5. Quan hệ giữa cấu trúc lớp vỏ điện tử của nguyên tử với vị trí của các nguyên tố đó trong bảng HTTH

II – LIÊN KẾT HÓA HỌC VÀ CẤU TẠO PHÂN TỬ

1. CÁC ĐẶC TRƯNG CƠ BẢN CỦA LIÊN KẾT HOÁ HỌC

2. CÁC DẠNG LIÊN KẾT HOÁ HỌC (Liên kết ion; Liên kết cộng hoá trị; Liên kết kim loại; Liên kết hydro)

3. THUYẾT LIÊN KẾT HÓA TRỊ (VIẾT TẮT VB: Valence bond)

3.2- Những luận điểm cơ bản của thuyết VB

3.3- Sự định hướng liên kết. Liên kết σ (xích ma) và liên kết π (π)

4. SỰ LẠI HÓA CÁC ORBITAL LIÊN KẾT

4.1- Điều kiện ra đời thuyết lai hóa - Khái niệm lai hóa

4.2- Một số kiểu lai hóa

- Lai hóa sp

- Lai hóa sp^2

- Lai hóa sp^3 .

4.3- Dự đoán kiểu lai hóa và cấu trúc hình học của phân tử

biên soạn: Nguyễn Kiên

5. THUYẾT ORBITAL PHÂN TỬ (MO- MOLECULAR ORBITAL (Muliken, Hund – Đức). 1927

6. CẤU TẠO PHÂN TỬ

6.1. Đặc điểm phân tử

6.2. Phân tử phân cực và phân tử không phân cực

6.3. Mômen lưỡng cực

6.4. Lực tương tác giữa các phân tử

biên soạn: Nguyễn Kiên

I- CẤU TẠO NGUYÊN TỬ

- Khái niệm nguyên tử đã được các nhà triết học cổ Hy Lạp đưa ra cách đây hơn hai ngàn năm (mang tên Hy Lạp “ ατομος” nghĩa là không thể phân chia)

- Năm 1807 Dalton, trên cơ sở các định luật cơ bản của hóa học đã đưa ra giả thuyết về nguyên tử, thừa nhận nguyên tử là hạt nhỏ nhất cấu tạo nên các chất, không thể phân chia nhỏ hơn bằng phản ứng hóa học

- Năm 1811 Avôgađrô trên cơ sở thuyết nguyên tử của Dalton đã đưa ra giả thuyết về phân tử và thừa nhận phân tử được tạo thành từ các nguyên tử, là hạt nhỏ nhất của một chất, mang đầy đủ tính chất của chất đó

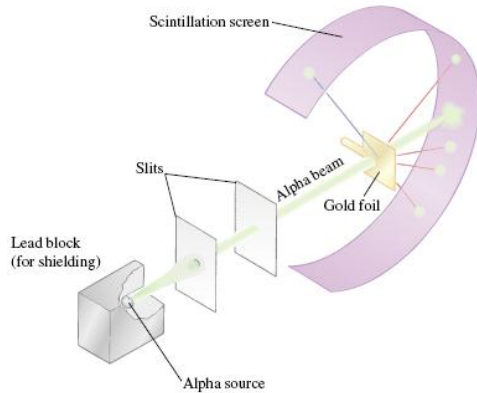
- Năm 1861 thuyết nguyên tử, phân tử chính thức được thừa nhận tại hội nghị hóa học thế giới họp ở Thụy Sĩ.

- Đến cuối thế kỉ 19 và đầu thế kỉ 20 với những thành tựu của vật lí, các thành phần của nguyên tử lần lượt được phát hiện

biên soạn: Nguyễn Kiên

1- Một số mẫu nguyên tử cổ điển

1.1- Mẫu Rutherford (Rozof- Anh). 1911



biên soạn: Nguyễn Kiên

Bằng thí nghiệm cho dòng α bắn qua lá vàng mỏng, năm 1911 nhà bác học Anh Rutherford đã đưa ra giả thuyết về ngử:

- Trong nguyên tử có một hạt nhân ở giữa và các electron quay xung quanh giống như các hành tinh quay xung quanh mặt trời.

- Hạt nhân mang điện tích dương, có kích thước rất nhỏ so với kích thước của ngử nhưng lại tập trung hầu như toàn bộ khối lượng ngử

Mẫu hành tinh ngử Rutherford đã giải thích được kết quả thí nghiệm trên và cho phép hình dung một cách đơn giản cấu tạo ngử. Tuy nhiên không giải thích được sự tồn tại của ngử và hiện tượng phát xạ quang phổ vạch của ngử.

biên soạn: Nguyễn Kiên

1.2- Mô hình nguyên tử Bohr (Bo- Đan mạch). 1913

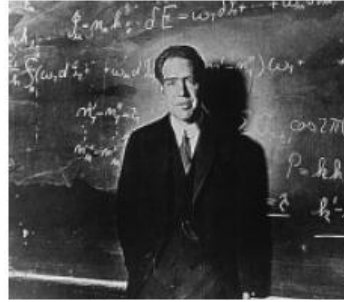
Dựa trên thuyết lượng tử của Planck (Plăng) Bohr đã đưa ra hai định đề:

- Trong nguyên tử các electron chỉ có thể chuyển động trên những quỹ đạo xác định gọi là quỹ đạo lượng tử. Ứng với mỗi quỹ đạo có mức năng lượng xác định.

Mô men động lượng của quỹ đạo lượng tử phải thỏa mãn điều kiện sau:

$$mvr = n \frac{h}{2\pi}$$

h – hằng số Planck ($6,62 \cdot 10^{-27} \text{ erg.s} = 6,62 \cdot 10^{-34} \text{ j.s}$)
 m – khối lượng electron
 v – vận tốc chuyển động của electron
 r – bán kính quỹ đạo
 n – số lượng tử. $n = 1, 2, 3, 4, 5, \dots$
 Tích mvr gọi là mômen động lượng



biên soạn: Nguyễn Kiên

- Khi electron chuyển động từ quỹ đạo này sang quỹ đạo khác thì xảy ra sự hấp thụ hay giải phóng năng lượng, năng lượng được hấp thụ hay giải phóng bằng hiệu giữa 2 mức năng lượng: $\varepsilon = h\nu = E_{n'} - E_n$

Thuyết Bohr cho phép giải thích được cấu tạo quang phổ vạch của nguyên tử hidro:

Năng lượng e trên quỹ đạo n được tính bằng công thức;

$$E_n = -\frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^2} \cdot \frac{1}{n^2} = -2,18 \cdot 10^{-18} \cdot \frac{1}{n^2} \text{ (J)}$$

m – Khối lượng hạt e; $m = 9,109 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$
 e – Điện tích hạt e; $e = -1,602 \cdot 10^{-19} \text{ C}$
 ε_0 – Hằng số điện môi của chân không; $\varepsilon_0 = 8,854 \cdot 10^{-12} \text{ S.I}$
 h – Hằng số Planck; $h = 6,625 \cdot 10^{-34} \text{ j.s}$

biên soạn: Nguyễn Kiên

Nếu tính theo đơn vị eV ($1\text{eV} = 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ J}$) thì năng lượng e:

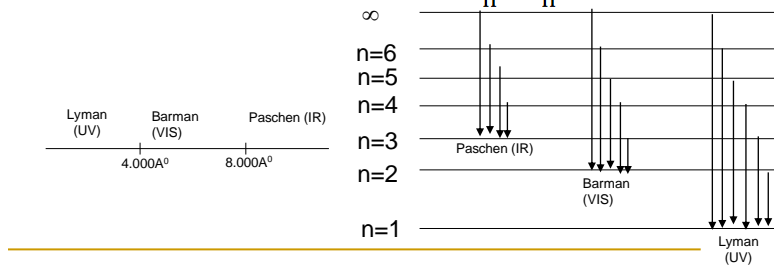
$$E_n = -13,6 \cdot \frac{1}{n^2} \text{ (eV)}$$

Đối với các ion 1 electron ($\text{He}^+ \text{Li}^{2+} \dots$) thì năng lượng e:

$$E_n = -13,6 \cdot \frac{Z^2}{n^2} \text{ eV} \quad Z - \text{số hạt proton}$$

Khi e nhảy từ trạng thái năng lượng $E_{n'}$ về trạng thái năng lượng E_n sẽ xảy ra phát xạ một tia sáng có tần số $\nu = \frac{c}{\lambda}$

$$E_{n'} - E_n = h\nu = 13,6 \cdot \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2} \right) \text{ (eV)}$$



biên soạn: Nguyễn Kiên

Tuy nhiên thuyết Bohr còn có nhiều hạn chế như:

- Không giải thích được cấu tạo của những nguyên tử phức tạp,
- Không giải thích được sự tách vạch quang phổ dưới tác dụng của điện trường, từ trường.

Việc giải thích cấu tạo nguyên tử một cách nhất quán phải nhờ đến thuyết cơ học lượng tử.

biên soạn: Nguyễn Kiên

2- Những tiền đề của cơ học lượng tử

2.1- Thuyết lượng tử Planck (Plang- Đức). 1900

- Ánh sáng hay các bức xạ nói chung không phải liên tục mà gồm những lượng nhỏ riêng biệt gọi là những lượng tử
- Mỗi lượng tử mang một năng lượng tính bằng biểu thức:

$$E = h\nu \quad \nu - \text{Là tần số bức xạ} \quad (2.2)$$

2.2- Thuyết sóng- hạt của hạt vi mô

Năm 1924 nhà vật lý học Pháp L.de Broglie (Đơ Broi) trên cơ sở của thuyết sóng hạt của ánh sáng đã đề ra giả thuyết:

mọi hạt vật chất chuyển động đều có thể coi như là một quá trình sóng đặc trưng bằng bước sóng λ tính theo hệ thức:

$$\lambda = \frac{h}{mv} \quad (2.3) \quad \left\{ \begin{array}{l} m: \text{Khối lượng hạt} \\ v: \text{tốc độ chuyển động của hạt} \\ h: \text{hằng số Planck } (6,62 \cdot 10^{-27} \text{ erg.s} = 6,62 \cdot 10^{-34} \text{ j.s}) \end{array} \right.$$

biên soạn: Nguyễn Kiên

Năm 1924 người ta đã xác định được khối lượng của electron, nghĩa là thừa nhận electron có bản chất hạt

Năm 1927 Davisson và Germer đã thực nghiệm cho thấy hiện tượng nhiễu xạ chùm electron. Như vậy bản chất sóng của electron cũng được thừa nhận.

Như vậy: ***electron vừa có bản chất sóng vừa có bản chất hạt***

Đối với những vật thể vĩ mô (m có giá trị rất lớn) nên bước sóng λ có giá trị rất nhỏ nên ta có thể bỏ qua bản chất sóng

biên soạn: Nguyễn Kiên

ví dụ 1: Electron khối lượng $9,1.10^{-28}g$ chuyển động với vận tốc xấp xỉ $10^8m/s$ sẽ sinh ra một sóng tính theo biểu thức (2.3)

$$\lambda = \frac{6,62.10^{-27}}{9,1.10^{-28}.10^8} \approx 7.10^{-8} \text{ m}$$

ví dụ 2: Một ô tô khối lượng $1000kg$ chuyển động với vận tốc $72km/h$ sẽ sinh ra một sóng tính theo biểu thức (2.3)

$$\lambda = \frac{6,62.10^{-27}}{10^6.2.10^3} \approx 3,3.10^{-36} \text{ m}$$

biên soạn: Nguyễn Kiên

2.3- Nguyên lí bất định Heisenberg (Haixenbec-Đức).1927

Đối với một hạt vi mô không thể xác định chính xác đồng thời cả tốc độ và vị trí

$$\Delta x . \Delta v \geq \frac{h}{2\pi m}$$

(2.4)

$\left\{ \begin{array}{l} \Delta x: \text{độ bất định về vị trí} \\ \Delta v: \text{độ bất định về tốc độ} \\ m: \text{khối lượng hạt} \end{array} \right.$

Theo hệ thức này thì việc xác định tọa độ càng chính xác bao nhiêu thì việc xác định tốc độ càng kém chính xác bấy nhiêu.

ví dụ: Nếu lấy độ bất định của phép đo vị trí electron trong ngườ Δx là $10^{-10}m$ (ngườ có đường kính cỡ $10^{-8}m$) thì độ bất định của phép đo tốc độ sẽ là:

$$\Delta v = \frac{6,62.10^{-27}}{6,28.9,1.10^{-28}.10^{-10}} \approx 10^{10} \text{ m/s}$$

Nghĩa là mắc phải sai số xấp xỉ bằng vận tốc ánh sáng

biên soạn: Nguyễn Kiên

3- Khái niệm cơ bản về cơ học lượng tử

3.1- Hàm sóng – phương trình sóng Schrodinger

Trạng thái của hệ vĩ mô sẽ hoàn toàn được xác định nếu biết quỹ đạo và vận tốc chuyển động của nó. Trong khi đó đối với những hệ vi mô, do bản chất **sóng – hạt** và **nguyên lý bất định**, khái niệm quỹ đạo không còn ý nghĩa nữa.

Trong cơ học lượng tử trạng thái của electron quanh nhân nguyên tử được mô tả bằng một hàm xác định gọi là **hàm sóng** hay **hàm trạng thái $\psi(x,y,z)$** (đọc là: Poxi).

Hàm sóng ψ nhận được khi giải phương trình sóng Schrodinger (*Là phương trình mô tả trạng thái chuyển động của hạt vi mô trong không gian. Đó là phương trình sóng do nhà bác học Áo Schrodinger đưa ra năm 1926*).

Phương trình có dạng như sau:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - U) \Psi = 0 \quad (2.5)$$

U : Thế năng của hạt
 E : Năng lượng toàn phần của hạt
 m : Khối lượng của hạt

biên soạn: Nguyễn Kiên

Giải phương trình sóng Schrodinger trên tọa độ cầu ta được **các hàm $\psi(r,\theta,\varphi)$** , từ đó ta thấy hàm ψ phụ thuộc vào các đại lượng:

- Năng lượng toàn phần E ;
- Mô men động lượng M ,
- Hình chiếu mô men động lượng M_z của electron.

Trong các biểu thức tính các đại lượng này xuất hiện những con số nguyên tương ứng gọi là **những số lượng tử**

biên soạn: Nguyễn Kiên

3.2 - Ý nghĩa các số lượng tử

Như đã nói ở trên các số lượng tử xuất hiện trong quá trình giải phương trình Schrodinger để tìm một số đại lượng đặc trưng cho một hàm sóng ψ .

Từ đó ta rút ra: mỗi hàm sóng ψ được đặc trưng bởi 4 tham số: **n, l, m, và m_s** gọi là các số lượng tử.

a- Số lượng tử chính n.

- Số lượng tử chính n xác định năng lượng của electron trong ngử theo biểu thức:

$$E_n = -\frac{2\pi^2 mZ^2 e^4}{n^2 h^2} \text{ (erg)}$$

Trong đó:
 - m là khối lượng của điện tử, $m = 9,108.10^{-28}$ (g).
 - e là điện tích của điện tử bằng , $e = -1,6.10^{-19}$ C
 - h là hằng số Planck, $h = 6,62.10^{-27}$ erg.s.

biên soạn: Nguyễn Kiên

Nếu năng lượng được tính ra jun (J) thì có dạng:

$$E_n = -\frac{2\pi^2 Z^2 m e^4}{n^2 h^2} k^2$$

k-hằng số cân bằng điện tích
 $k=9.10^9 \text{ J.m/c}^2$

Nếu năng lượng được tính ra electron vol (eV) và với nguyên tử 1e (Z=1), thì biểu thức được viết gọn dưới dạng đơn giản:

$$E_n = -\frac{13,6}{n^2} \text{ [ev]} \quad (1\text{eV} = 1,6.10^{-19} \text{ J}).$$

Như vậy, năng lượng của electron chỉ phụ thuộc vào số lượng tử chính n.

- Số lượng tử chính n nhận các giá trị từ 1,2,3,...,n.

- Các ψ có cùng n sẽ có cùng mức năng lượng.

n	1	2	3	4	5.....	n
Kí hiệu lớp	K	L	M	N	O.....	
Mức năng lượng	E_1	E_2	E_3	E_4	$E_5.....$	E_n

biên soạn: Nguyễn Kiên

Giá trị n càng lớn thì năng lượng càng cao nên lelectron ở lớp năng lượng này càng xa hạt nhân (càng kém bền).

Như vậy:

- Đối với ngử hiđro hay ion 1 electron: n đặc trưng cho mức năng lượng E của electron của ngử hay ion.

- Đối với ngử nhiều electron, ngoài sự tương tác các electron với hạt nhân còn sự tương tác với các electron với nhau, nên năng lượng của electron lúc này phụ thuộc vào 2 số lượng tử là số lượng tử chính n và số lượng tử phụ l . Vì vậy, trong trường hợp này giá trị n chỉ đặc trưng cho mức năng lượng trung bình của các electron trong 1 lớp.

biên soạn: Nguyễn Kiên

b- Số lượng tử phụ l .

Số lượng tử phụ l xác định mômen động lượng của electron trong biểu thức:

$$M = \sqrt{l(l+1)} \cdot \frac{h}{2\pi} \quad (2.10)$$

Như vậy:

- l xác định momen động lượng obital của electron. Chính là hình dạng của các obitan nguyên tử.
- số lượng tử phụ l nhận giá trị $0, 1, 2, \dots, n-1$. Do vậy, số lượng tử phụ l còn xác định phân mức năng lượng của phân lớp điện tử trong lớp n .

Để tiện sử dụng người ta dùng các chữ cái thường để kí hiệu các phân lớp e trong nguyên tử.

Thí dụ: Khi $l = 0$ ký hiệu phân lớp $e : s$

Khi $l = 1$ ký hiệu phân lớp $e : p$

Khi $l = 2$ ký hiệu phân lớp $e : d$

Khi $l = 3$ ký hiệu phân lớp $e : f$

Để phân biệt các phân lớp cùng tên trong các lớp khác nhau, người ta đặt trước các chữ đó bằng số lượng tử chính.

biên soạn: Nguyễn Kiên

Thí dụ:

Giá trị n	Giá trị l (từ 0 → n-1)	Tên phân lớp
1	l=0	1s
2	l=0	2s
	l=1	2p
3	l=0	3s
	l=1	3 p
	l=2	3 d

Các AO có cùng 1 số lượng tử phụ l sẽ có hình dạng giống nhau, không kể thuộc 1 lớp nào. Các AO thuộc phân lớp s (l=0) có dạng hình cầu; thuộc phân lớp p (l=1) có dạng hình số 8 nổi hay hình quả tạ; phân lớp d và f có hình dạng phức tạp hơn.

biên soạn: Nguyễn Kiên

c- Số lượng tử m.

- m nhận giá trị từ -l đến +l kể cả 0. Như vậy, ứng với một giá trị của l có (2l+1) giá trị của m
- Số lượng tử m xác định hình chiếu của mômen động lượng M_z của electron trên một phương z của trường ngoài trong biểu thức

$$M_z = m \cdot \frac{h}{2\pi}$$

Như vậy, các AO có M_z khác nhau (có m khác nhau) sẽ định hướng khác nhau trong không gian. m quyết định hướng của AO hay hướng của mây.

Phân lớp s: l=0; m=0 chỉ có một cách định hướng

Phân lớp p: l=1; m=-1,0,+1 Có 3 cách định hướng tương ứng:

p_x, p_y, p_z

Phân lớp d: l=2; m= -2,-1,0,+1,+2 Có 5 cách định hướng tương ứng:

$d_{xy}, d_{yz}, d_{z^2}, d_{x^2-y^2}, d_{zx}$

biên soạn: Nguyễn Kiên

d- Số lượng tử Spin m_s

Nghiên cứu quang phổ của các ngót người ta thấy rằng, electron ngoài chuyển động quanh nhân còn tự quay quanh trục riêng của nó. Chuyển động này gọi là chuyển động Spin.

Số lượng tử đặc trưng cho chuyển động Spin được gọi là số lượng tử Spin (m_s).

Số lượng tử Spin nhận 2 giá trị là $+1/2$ và $-1/2$

Như vậy, trạng thái của mỗi electron trong ngút được đặc trưng bởi 4 số lượng tử n, l, m, m_s .

Hàm $\Psi_{n l m}$ được gọi obitan nguyên tử (AO-Atomic Orbital).

biên soạn: Nguyễn Kiên

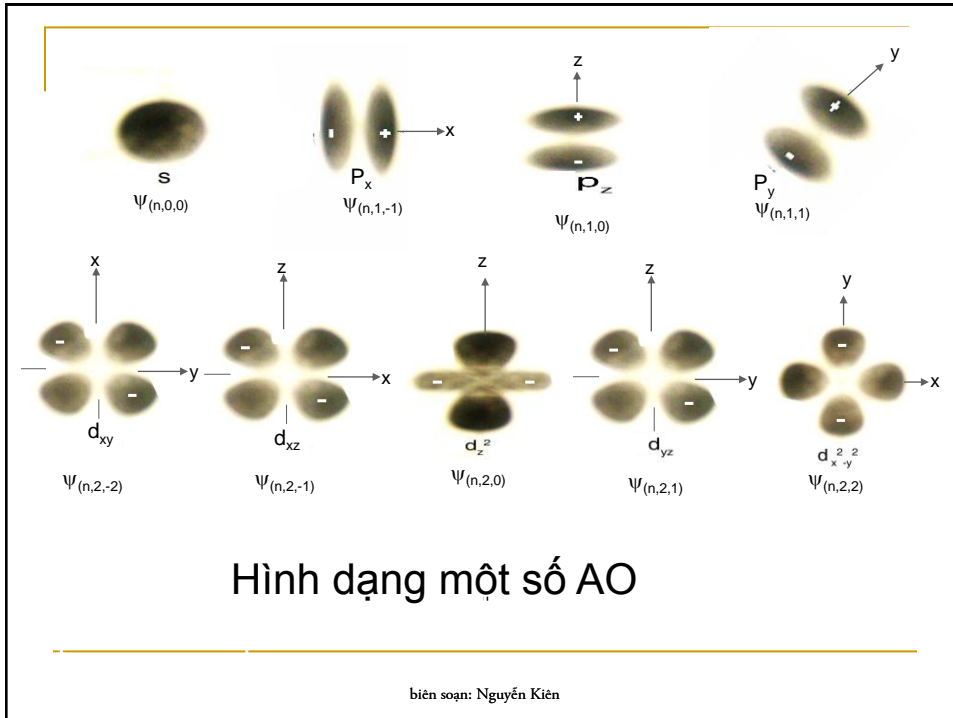
3.3- Orbital nguyên tử

Mỗi hàm sóng $\psi(n, l, m)$ của electron trong nguyên tử là kết quả của việc giải phương trình sóng và được gọi là orbital nguyên tử (atomic orbital), viết tắt là AO. Như vậy:

Orbital ngút là những hàm sóng mô tả các trạng thái của electron trong ngút.

Mỗi AO thường biểu diễn bằng 1 ô vuông

biên soạn: Nguyễn Kiên



4. Quy luật phân bố các electron trong nguyên tử nhiều electron.

Sự phân bố các e trong nguyên tử ở trạng thái cơ bản tuân theo nguyên lý loại trừ Pauli, nguyên lý vững bền và qẮc Hund

a - Nguyên lý loại trừ Pauli.

Qua thực nghiệm, Pauli đã nêu lên nguyên lý:

“ Trong một ngử, không thể có 2 electron có cùng 4 số lượng tử”.

Từ nguyên lý cho thấy trong 1 orbital, chỉ có thể chứa được tối đa 2 e có Spin ngược nhau, không thể có thêm 1 e thứ 3.

Thí dụ: Sự sắp xếp e trong 1 AO, chỉ có 2 trường hợp:



Electron
độc thân

biên soạn: Nguyễn Kiên

➤ Tính số electron tối đa có trong các phân lớp và trong một lớp

Từ nguyên lý ngoại trừ Pauli giúp ta tính được số e tối đa có trong 1 phân lớp e.

- Trong mỗi orbital có chung 3 số lượng tử n, l, m giống nhau sẽ có tối đa là 2 e.
- Trong mỗi phân lớp ứng với số lượng tử phụ l có (2l+1) orbital nên có tối đa là 2(2l+1)e.

Chẳng hạn ở phân lớp s, (l = 0) có 1 AO → số e = 2

Phân lớp p (l = 1) số e tối đa là 6 (có 3 AO lượng tử)

Phân lớp d (l = 2) số e tối đa là 10 (có 5 AO lượng tử)

- Trong một lớp n có n phân lớp với l nhận các giá trị: 0, 1, 2, 3, ..., (n-1). Vậy số e tối đa S có trong 1 lớp thứ n là:

$$S = \sum_{l=0}^{l=(n-1)} 2(2l+1) = 2n^2 \quad (2.12)$$

biên soạn: Nguyễn Kiên

b - Nguyên lý vững bền

“Trong một ngữ, các e phân bố theo những mức năng lượng từ thấp đến cao”

Bằng phương pháp quang phổ và tính toán lí thuyết người ta đã xác định được thứ tự tăng dần năng lượng của các AO theo dãy sau:

1s 2s 2p 3s 3p 4s ≅ 3d 4p 5s ≅ 4d 5p 6s ≅ 4f ≅ 5d 6p 7s 5f ≅ 6d 7p..

c - Quy tắc Hund

“Trong một phân lớp, các điện tử có khuynh hướng phân bố đều vào các AO sao cho tổng số Spin của chúng là cực đại (tức là số electron độc thân là nhiều nhất) “

d- Giới thiệu quy tắc bão hoà và bán bão hoà

Nếu nguyên tố có cấu trúc $ns^2(n-1)d^4$ thì chúng chuyển sang dạng bán bão hoà $ns^1(n-1)d^5$ và $ns^2(n-1)d^9 \rightarrow ns^1(n-1)d^{10}$.

biên soạn: Nguyễn Kiên

5- Quan hệ giữa cấu trúc lớp vỏ điện tử của nguyên tử với vị trí của các nguyên tố đó trong bảng HTTH (SGK).

biên soạn: Nguyễn Kiên

II – LIÊN KẾT HÓA HỌC VÀ CẤU TẠO PHÂN TỬ

1. CÁC ĐẶC TRƯNG CƠ BẢN CỦA LIÊN KẾT HOÁ HỌC

1.1- Năng lượng liên kết

Năng lượng liên kết là năng lượng cần thiết để phá vỡ liên kết tạo ra các nguyên tử ở thể khí.

Năng lượng liên kết thường kí hiệu là E (Kcal/mol hoặc KJ/mol).
(1cal=4,18J)

Ví dụ: Năng lượng liên kết H-H trong phân tử H₂: E_{H-H}=104Kcal/mol

Năng lượng liên kết càng lớn, liên kết càng bền.

Đối với các phân tử có số liên kết giống nhau > 2, người ta dùng đại lượng năng lượng trung bình của liên kết.

Ví dụ: Trong phân tử H₂O có 2 liên kết O-H

E_{O-H} thứ nhất bằng 118Kcal/mol

E_{O-H} thứ hai bằng 102Kcal/mol.

Vì vậy, năng lượng trung bình của liên kết O-H là: E_{O-H}=110Kcal/mol

Năng lượng liên kết của liên kết bội cao hơn năng lượng liên kết đơn

Ví dụ: E_{C-C}=83kcal/mol; E_{C=C} = 143kcal/mol; E_{C≡C} = 194kcal/mol

biên soạn: Nguyễn Kiên

TABLE 13.6 Average Bond Energies (kJ/mol)

Single Bonds				Multiple Bonds			
H—H	432	N—H	391	I—I	149	C=C	614
H—F	565	N—N	160	I—Cl	208	C≡C	839
H—Cl	427	N—F	272	I—Br	175	O=O	495
H—Br	363	N—Cl	200			C=O*	745
H—I	295	N—Br	243	S—H	347	C≡O	1072
		N—O	201	S—F	327	N=O	607
C—H	413	O—H	467	S—Cl	253	N=N	418
C—C	347	O—O	146	S—Br	218	N≡N	941
C—N	305	O—F	190	S—S	266	C=N	615
C—O	358	O—Cl	203			C≡N	891
C—F	485	O—I	234	Si—Si	340		
C—Cl	339			Si—H	393		
C—Br	276	F—F	154	Si—C	360		
C—I	240	F—Cl	253	Si—O	452		
C—S	259	F—Br	237				
		Cl—Cl	239				
		Cl—Br	218				
		Br—Br	193				

*C=O (CO₂) = 799

biên soạn: Nguyễn Kiên

1.2- Độ dài liên kết

Độ dài liên kết là khoảng cách giữa 2 hạt nhân nguyên tử khi hình thành liên kết.

Độ dài liên kết càng lớn thì liên kết càng kém bền.

Độ dài liên kết phụ thuộc vào bản chất của các nguyên tử tham gia liên kết và bản chất mỗi liên kết.

VD: Độ dài một số mỗi liên kết sau:

H – H : 0,74A°

H – O : 0,96A°

C = C : ~1,34 A°

C ≡ C : ~1,20A°

biên soạn: Nguyễn Kiên

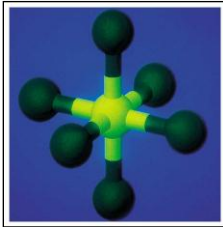
1.3- Góc hoá trị (góc liên kết)

Góc liên kết là góc tạo bởi hai mối liên kết giữa một nguyên tử với một nguyên tử khác.

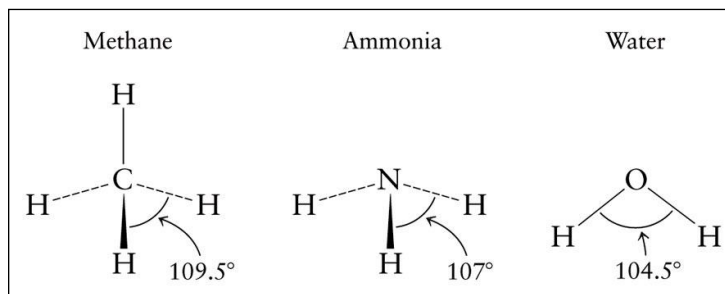
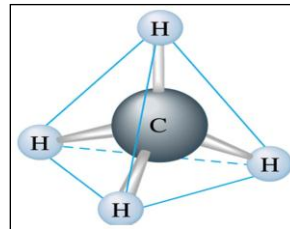
Khi một nguyên tử đồng thời liên kết với nhiều nguyên tử khác để tạo thành nhiều mối liên kết thì các mối liên kết này tạo thành các góc khác nhau.

Biết được độ dài liên kết và góc hoá trị ta sẽ xác định được hình dạng của phân tử.

biên soạn: Nguyễn Kiên



sulfur hexafluoride SF_6



biên soạn: Nguyễn Kiên

2. CÁC DẠNG LIÊN KẾT HOÁ HỌC (SGK)

1. **Liên kết ion.**
2. **Liên kết cộng hoá trị**
3. **Liên kết kim loại**
4. **Liên kết hydro**

biên soạn: Nguyễn Kiên

3. THUYẾT LIÊN KẾT HÓA TRỊ (VIẾT TẮT VB: Valence bond)

Thuyết VB do Heiler, London (Haile, London- Đức) đề xướng năm 1927. Tiếp theo là Pauling, Sleiter (polinh, Sleiter – Mĩ) phát triển.

3.1- Sự hình thành liên kết trong phân tử H₂

Thuyết VB được đề ra dựa trên cơ sở nghiên cứu sự hình thành ng tử H₂.

Lượng điểm chủ yếu của thuyết này là khi tạo liên kết, các ng tử vẫn giữ nguyên cấu trúc mà chỉ tương tác (xen phủ) với nhau theo từng cặp e hóa trị.

Mỗi ng tử H có một e ở trạng thái cơ bản 1s. Khi 2 ng tử tiến lại gần nhau sẽ có hai khả năng xảy ra:

- Nếu 2 e có số lượng tử spin cùng dấu, khi khoảng cách r giữa 2 ng tử giảm thì năng lượng của hệ tăng liên tục (do 2 e đẩy nhau). Đó là trạng thái không bền, không tạo liên kết.

- Nếu 2 e có số lượng tử spin ngược dấu, khi khoảng cách r giữa 2 ng tử giảm thì năng lượng của hệ giảm theo (do 2 e hút nhau). Khi khoảng cách đạt $r_0=0,74\text{Å}$ thì năng lượng của hệ có giá trị cực tiểu, khi đó hệ đạt trạng thái bền và hình thành liên kết.

biên soạn: Nguyễn Kiên

Nhân xét

AO-1s có bán kính $0,53A^0$. Khi hình thành liên kết trong phân tử H_2 , nếu 2 ngử bắt đầu tiếp xúc nhau thì khoảng cách giữa 2 hạt nhân ngử phải là $1,06A^0$. Trong khi đó khoảng cách hình thành liên kết trong phân tử H_2 như đã nói ở trên là $0,74A^0$.

Điều đó chứng tỏ, khi hình thành liên kết, hai AO-1s đã xen phủ vào nhau, làm tăng xác suất có mặt e ở vùng giữa 2 hạt nhân, mật độ điện tích âm tăng lên gây ra sự hút 2 hạt nhân và liên kết chúng với nhau.

Như vậy, lực liên kết hóa học cũng có bản chất tĩnh điện

biên soạn: Nguyễn Kiên

3.2- Những luận điểm cơ bản của thuyết VB

Từ nghiên cứu của Hailer và London về phân tử H_2 , Pauling và Sleiter đã phát triển thành thuyết cộng hóa trị:

- Liên kết CHT được hình thành do sự ghép đôi hai e độc thân có Spin ngược dấu của 2 ngử liên kết, khi đó có sự xen phủ AO.

- Mức độ xen phủ của các AO càng lớn thì LK càng bền, LK được hình thành theo phương tại đó sự xen phủ là lớn nhất.

Thuyết VB cho biết: Hóa trị của một ngử bằng số e độc thân của ngử ở trạng thái cơ bản hay trạng thái kích thích.

biên soạn: Nguyễn Kiên

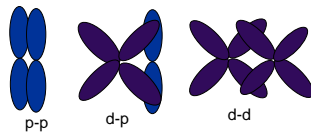
3.3- Sự định hướng liên kết. Liên kết σ (xích ma) và liên kết π (pi)

Tùy theo cách thức xen phủ các AO, Người ta phân biệt: LK σ và LK π
- Liên kết σ : Là liên kết cộng hoá trị được hình thành do sự xen phủ lẫn nhau của các orbital dọc theo trục nối tâm các nguyên tử.



Một số dạng liên kết σ

- Liên kết π : Là liên kết cộng hoá trị được hình thành do sự xen phủ của các orbital dọc theo phương vuông góc với trục nối tâm các nguyên tử tham gia liên kết.



Một số dạng liên kết π .

biên soạn: Nguyễn Kiên

4. SỰ LẠI HÓA CÁC ORBITAL LIÊN KẾT

4.1- Điều kiện ra đời thuyết lai hóa - Khái niệm lai hóa

Khi nghiên cứu sự tạo thành các liên kết trong phân tử CH_4 , các nhà hóa học Sleiter và Pauling (Mỹ) đã đưa ra thuyết lai hoá.

Ta biết rằng trong phân tử CH_4 có 4 liên kết C-H được tạo thành bởi các orbital hoá trị của cacbon là $2s^1, 2p^3$ với 4 orbital 1s của 4 nguyên tử H. Như vậy trong phân tử CH_4 phải có 1 lk s-s và 3 lk s-p. Nhưng thực nghiệm cho thấy rằng cả 4 lk trong CH_4 đều giống nhau và được định hướng theo hình tứ diện đều (tâm là nguyên tử C, 4 đỉnh là 4 nguyên tử H).

Thuyết lai hoá cho rằng khi tham gia liên kết, 1 orbital 2s và 3 orbital 2p của C tổ hợp với nhau để tạo ra 4 orbital q lai hoá giống hệt nhau về hình dáng và bằng nhau về năng lượng. Thuyết lai hoá có thể phát biểu như sau:

"Sự tổ hợp các orbital khác nhau để tạo thành các orbital đồng nhất về hình dáng và năng lượng khi tham gia liên kết gọi là sự lai hoá các orbital liên kết".

biên soạn: Nguyễn Kiên

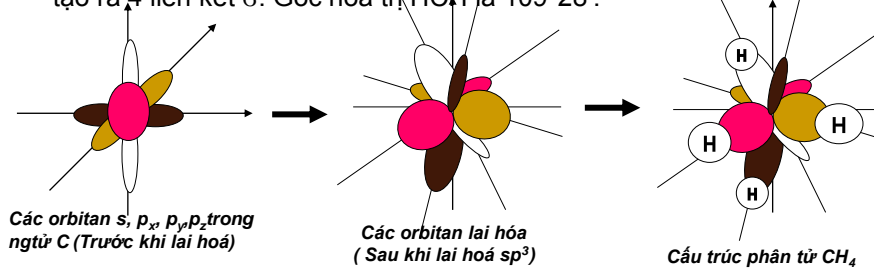
4.2-Một số kiểu lai hoá

- a. **Lai hoá sp^3** Một AO-s tổ hợp với 3 AO- p để tạo thành 4 AO lai hoá có hình dạng, kích thước và năng lượng hoàn toàn giống nhau định hướng từ tâm tới 4 đỉnh tứ diện đều gọi là lai hoá sp^3 (lai hóa tứ diện)

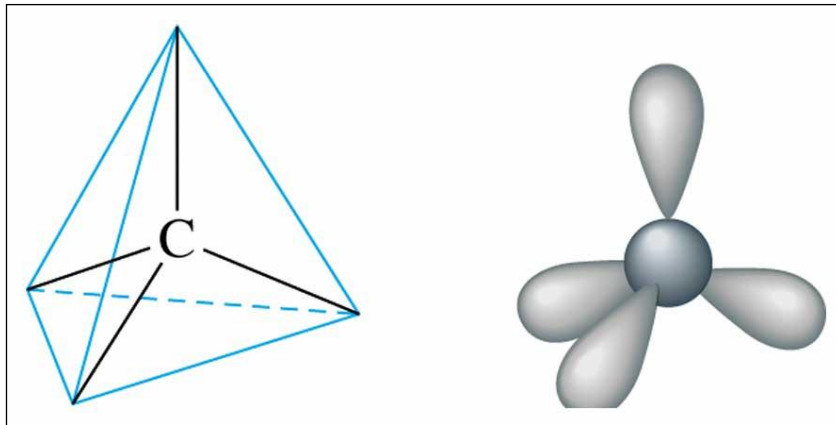
Trục các AO-q tạo với nhau 1 góc $109^{\circ}28'$.

Trong Thí dụ về CH_4 ta vừa xét ở trên chính là lai hoá sp^3 .

Nguyên tử C trong CH_4 có 4 orbital lai hoá q giống hệt nhau liên kết với 4 nguyên tử H ở 4 đỉnh của tứ diện đều (tâm tứ diện là nguyên tử C), tạo ra 4 liên kết σ . Góc hoá trị HCH là $109^{\circ}28'$.



biên soạn: Nguyễn Kiên



biên soạn: Nguyễn Kiên

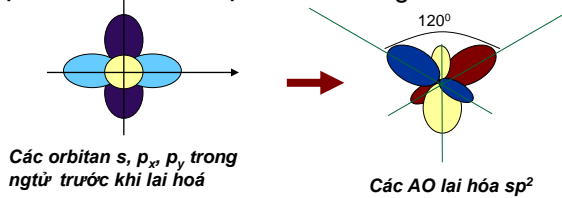
Các orbital lai hoá chỉ tham gia tạo liên kết σ , thường gặp trong các nguyên tử O, N, C của các phân tử H_2O ; NH_3 ; NH_4^+ ; CH_4 và các ankan ($\text{C}_n\text{H}_{2n+2}$) hoặc nguyên tử các bon có 4 liên kết đơn

biên soạn: Nguyễn Kiên

b. Lai hoá sp^2

Một AO-s tổ hợp với 2 AO- p để tạo thành 3 AO lai hoá có hình dạng, kích thước và năng lượng hoàn toàn giống nhau định hướng từ tâm tới 3 đỉnh tam giác đều gọi là lai hoá sp^2 (lai hóa tam giác)

Trực các AO lai hóa tạo với nhau 1 góc 120° .

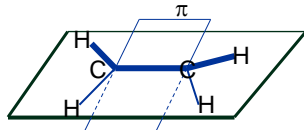
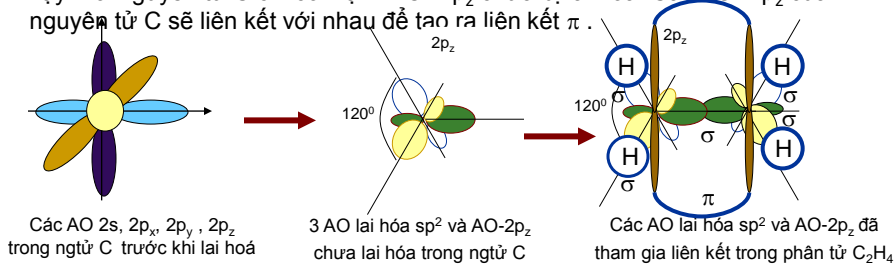


Sự lai hoá Sp^2 thường gặp trong các hợp chất hydro các bon có 1 nối đôi dạng C_nH_{2n} : C_2H_4 , C_3H_6 , ..., BH_3 , BF_3

biên soạn: Nguyễn Kiên

Chẳng hạn: Trong C_2H_4 (êtilen), mỗi nguyên tử C đều có lai hoá Sp^2 tạo ra 3 AO lai hóa : Mỗi nguyên tử C liên kết với nhau bằng một AO lai hóa hình thành nên 1 liên kết σ .

Hai AO lai hóa còn lại, liên kết với 2 AO-1s của 2 nguyên tử hiđrô. Như vậy mỗi nguyên tử C chỉ còn lại 1 AO- $2p_z$ chưa bị lai hóa. Các AO- $2p_z$ của 2 nguyên tử C sẽ liên kết với nhau để tạo ra liên kết π .



Sơ đồ cấu trúc phân tử C_2H_4

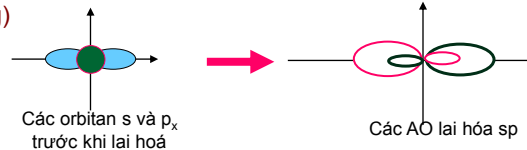
Như vậy toàn bộ phân tử C_2H_4 có 5 liên kết σ và 1 liên kết π .

biên soạn: Nguyễn Kiên

c. Lai hoá sp

Một AO-s tổ hợp với 1AO-p, tạo ra 2 AO lai hoá có hình dạng, kích thước và năng lượng hoàn toàn giống nhau gọi là sự lai hoá sp .

Trục của 2 AO lai hóa tạo với nhau một góc 180° (nhiều khi lai hóa sp gọi là lai hóa đường thẳng)



Sự lai hoá sp thường gặp ở các nguyên tử C có LK 3 hoặc liên kết đôi liên hợp. Như trong phân tử C_2H_2, CO_2, \dots

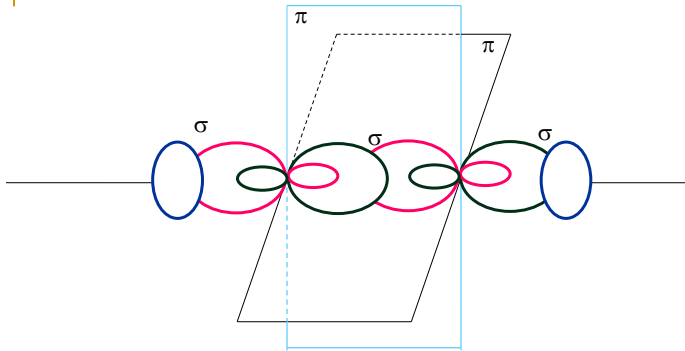
Chẳng hạn trong phân tử C_2H_2 : Mỗi nguyên tử C có sự lai hoá sp . Giữa 2 nguyên tử C có 1 liên kết σ được tạo bởi 2 AO lai hóa.

Orbital lai hóa còn lại sẽ liên kết với AO-1s của nguyên tử Hiđrô tạo lk σ .

Mỗi nguyên tử C còn 2 AO $2p_y$ và $2p_z$. Trục của chúng vuông góc với nhau và vuông góc với trục của các AO lai hóa và sẽ xen phủ với nhau tạo lk π .

Như vậy trong phân tử C_2H_2 có 3 liên kết σ và 2 liên kết π .

biên soạn: Nguyễn Kiên

Sơ đồ cấu trúc phân tử C_2H_2

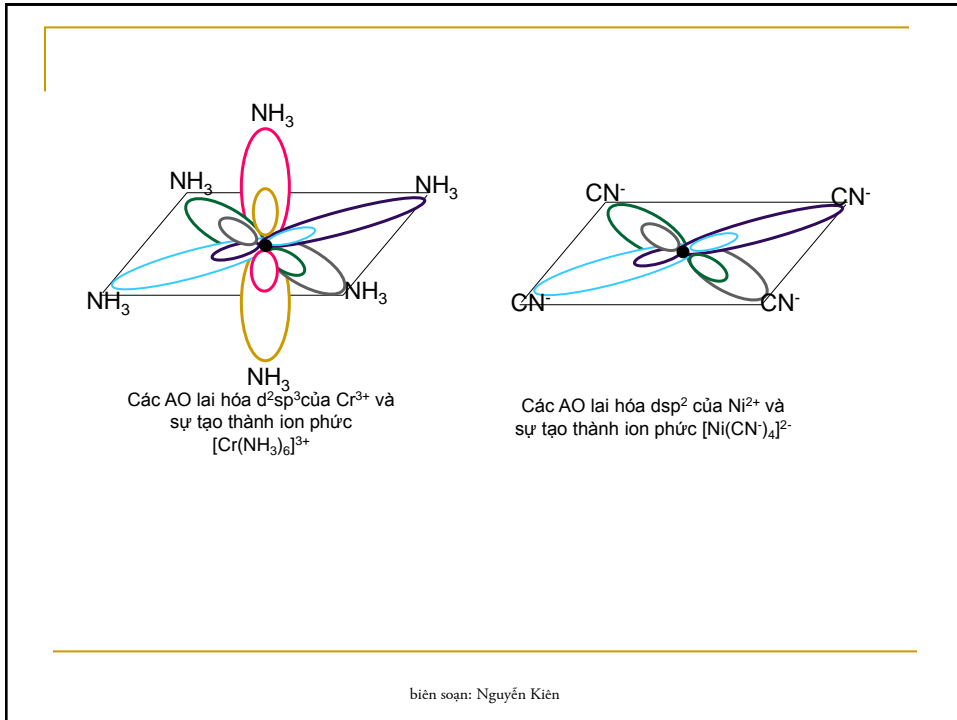
biên soạn: Nguyễn Kiên

Ngoài các kiểu lai hoá trên còn có các kiểu lai hoá liên quan đến các AO-d, hay gặp ở các kim loại bộ d trong phức chất nêu ở bảng sau:

Bảng: Các kiểu lai hoá và hình dạng phân tử

Kiểu phân tử	Kiểu lai hoá ở A	Hình dáng phân tử	Góc hoá trị	Thí dụ
AB_2	sp	đường thẳng	180°	$ZnCl_2$, CO_2 , $BeCl_2$
AB_3	sp^2	tam giác	120°	SO_2 , BF_3 , $AlCl_3$
AB_4	sp^3	tứ diện	$109^\circ 28'$	NH_4^+ , CH_4 , CCl_4
AB_4	dsp^2	vuông	90°	$[PtCl_4]^{2-}$, $[Cu(NH_3)_4]^{2+}$
AB_5	sp^3d	lưỡng chóp	90° và 120°	PCl_5
AB_6	sp^3d^2	bát diện	90°	SF_6 , SF_6^{2-}

biên soạn: Nguyễn Kiên



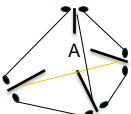


4.3- Dự đoán kiểu lai hoá và cấu trúc hình học của phân tử

Dựa vào mô hình đẩy các cặp e hóa trị:

“ các cặp e hóa trị liên kết và không liên kết phân bố xung quanh nguyên tử A trong phân tử sao cho lực đẩy giữa chúng là nhỏ nhất ”

Như vậy, nếu kí hiệu số cặp e hóa trị lk và không lk quanh A trong phân tử là n (ta hạn chế chỉ xét số cặp e $n = 2, 3, 4$), ta có:

n	Hình học của n cặp e	
2		Cấu trúc thẳng
3		Cấu trúc tam giác đều
4		Cấu trúc tứ diện đều

biên soạn: Nguyễn Kiên

Trường hợp có lk đôi, lk ba đều được coi là lk đơn để tính giá trị n
 Trường hợp chỉ còn 1 e chưa tham gia lk vẫn được coi giống như
 còn 1 cặp e chưa lk.

Dựa vào mô hình này ta có thể dự đoán được kiểu lai hóa các AO
 hóa trị của ngử A bất kỳ trong phân tử bằng cách tính tổng số n
 như sau:

$n = \text{tổng số ngử lk trực tiếp với ngử A} + \text{Số cặp e (đôi khi chỉ 1 e) hóa trị A chưa tham gia lk}$

Nếu:

$n = 4$: có lai hóa sp^3

$n = 3$: có lai hóa sp^2

$n = 2$: có lai hóa sp

Ví dụ: BeH_2 có lai hóa sp , cấu trúc thẳng
 BF_3 có lai hóa sp^2 , cấu trúc tam giác đều
 SO_2 có lai hóa sp^2 , cấu trúc tam giác đều
 NH_3, H_2O có lai hóa sp^3 , cấu trúc tứ diện đều

biên soạn: Nguyễn Kiên

5. THUYẾT ORBITAL PHÂN TỬ (MO- MOLECULAR ORBITAL) (Mulliken, Hund – Đức). 1927

5.1 – Luận điểm cơ bản của thuyết MO.

- Phân tử được coi như là một hạt thống nhất, trong đó e liên kết chuyển động (tương tự như ở nguyên tử), trong một điện trường gây ra bởi các hạt nhân và các e còn lại.
- Trong phân tử, trạng thái của e được mô tả bằng các MO. (trong ngử, trạng thái của e được mô tả bằng các AO).
- Khi ngử đi vào liên kết, các AO của chúng tổ hợp (xen phủ) với nhau tạo ra các MO. Cứ tổ hợp 2 AO thì được 2 MO.
 Điều kiện để có sự tổ hợp là:
 - + Năng lượng các AO xấp xỉ nhau
 - + Các AO có sự đối xứng giống nhau so với trục liên kết
 - + Sự xen phủ phải đạt được mức độ rõ rệt
- Trong phân tử các e được phân bố dần vào các MO: ($\sigma, \sigma^*, \pi, \pi^*, \delta, \varphi$) cũng theo một số quy tắc nhất định: ngлі Pauli, ngлі vững bền, quy tắc Hund giống như trong ngử.

biên soạn: Nguyễn Kiên

5.2 – Khái niệm MO liên kết và MO phản liên kết

Các MO là tổ hợp tuyến tính các AO:

$$\Psi_{MO} = C_1 \Psi_A + C_2 \Psi_B + \dots$$

Thí dụ: Đối với phân tử H_2 các Ψ_{MO} được tổ hợp từ hai AO Ψ_A và Ψ_B của hai nguyên tử hydro là H_a và H_b

$$\Psi_{MO} = C_1 \Psi_A + C_2 \Psi_B$$

C_1, C_2 là những hệ số cho biết sự đóng góp của các AO vào MO.

Trong trường hợp các phân tử đồng hạch (các phân tử tạo từ những nguyên tử của cùng một nguyên tố), như phân tử H_2 thì $C_1^2 = C_2^2 \Rightarrow C_1 = \pm C_2$.

Như vậy, khi tổ hợp 2 AO Ψ_A và Ψ_B của 2 nguyên tử H ta thu được 2 MO:

$$\Psi_+ = C_1 \Psi_A + C_2 \Psi_B$$

$$\Psi_- = C_1 \Psi_A - C_2 \Psi_B$$

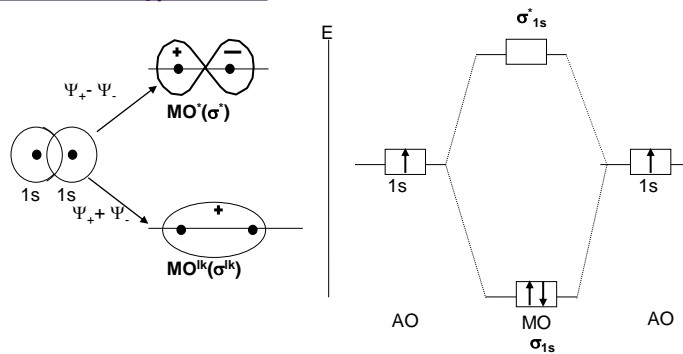
Khi trạng thái e trong phân tử được mô tả bằng Ψ_+ thì xác suất có mặt e tập trung ở vùng giữa 2 hạt nhân nguyên tử lớn, tạo ra sự hút hai hạt nhân với nhau và lk được hình thành. MO được mô tả bằng hàm Ψ_+ gọi là MO liên kết (MO^k).

Ngược lại, đối với hàm Ψ_- thì xác suất có mặt e giữa 2 hạt nhân bằng 0, lk không được hình thành. Vì vậy MO được mô tả bằng hàm Ψ_- được gọi là MO phản liên kết (MO^*).

biên soạn: Nguyễn Kiên

5.3 – Cấu hình electron trong phân tử.

a- Các MO khi tổ hợp từ AO-s



Các MO liên kết, phản liên kết và giản đồ năng lượng phân tử khi tổ hợp 2 AO-1s

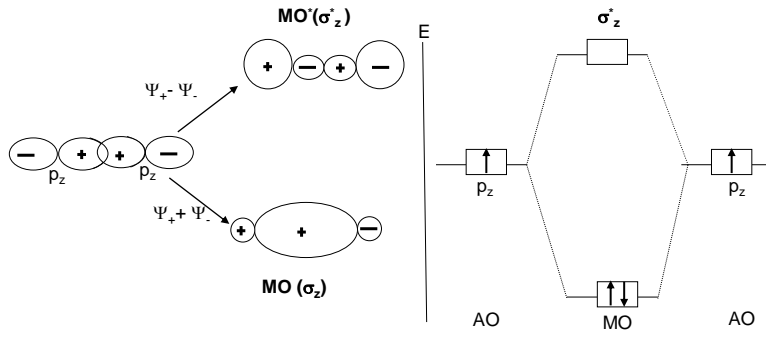
Về mặt năng lượng các MO thì $\sigma_{1s} < \sigma^*_{1s}$

Chú ý: Khi tổ hợp các AO-2s; 3s... ta cũng thu được $\sigma_{2s} < \sigma^*_{2s} \dots$

Như vậy, về mặt năng lượng ta có: $\sigma_{1s} < \sigma^*_{1s} < \sigma_{2s} < \sigma^*_{2s} \dots$

biên soạn: Nguyễn Kiên

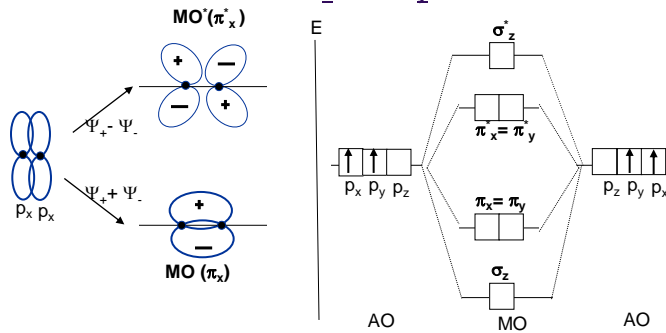
b- Các MO khi tổ hợp từ AO- p_z



Các MO liên kết, phản liên kết và giản đồ năng lượng phân tử khi tổ hợp 2 AO- p_z

biên soạn: Nguyễn Kiên

c- Các MO khi tổ hợp từ AO- p_x hay p_y



Các MO liên kết, phản liên kết và giản đồ năng lượng phân tử khi tổ hợp 2 AO- p_x hoặc p_y

Dựa vào giản đồ năng lượng, ta có thể biết được trật tự năng lượng

Đối với các phân tử tạo thành từ 2 nguyên tử cuối chu kì 2 như O_2 , F_2 ...

Trật tự năng lượng như sau: $\sigma_{1s} < \sigma_{1s}^* < \sigma_{2s} < \sigma_{2s}^* < \sigma_z < \pi_x = \pi_y < \pi_x^* = \pi_y^* < \sigma_z^*$

Đối với các phân tử tạo thành từ 2 nguyên tử đầu chu kì 2 như N_2

Trật tự năng lượng như sau: $\sigma_{1s} < \sigma_{1s}^* < \sigma_{2s} < \sigma_{2s}^* < \pi_x = \pi_y < \sigma_z < \pi_x^* = \pi_y^* < \sigma_z^*$

biên soạn: Nguyễn Kiên

6. CẤU TẠO PHÂN TỬ

6.1. Đặc điểm phân tử

Trong phân tử, các hạt nhân nguyên tử mang điện tích dương, còn các electron mang điện tích âm. Giữa các hạt điện tích dương và âm có một điểm gọi là trọng tâm điện tích dương và âm.

Nếu 2 trọng tâm điện tích trái dấu này trùng nhau ta có phân tử không phân cực. Trong trường hợp ngược lại, 2 trọng tâm điện tích dương và âm không trùng nhau ta có phân tử phân cực

(Phân tử không phân cực)



(Phân tử phân cực)



(Phân tử ion)



biên soạn: Nguyễn Kiên

6.2. Mômen lưỡng cực.

Khoảng cách giữa 2 trọng tâm điện tích dương và âm trong phân tử gọi là độ dài lưỡng cực (ký hiệu: l). Tích số giữa l và điện tích q của e gọi là Mô men lưỡng cực (μ)

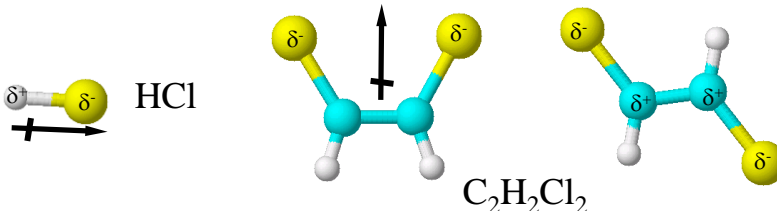
$$\vec{\mu} = q \cdot \vec{l}$$

Đơn vị của μ là Debye (D). $1D = 3,33 \cdot 10^{-30} C \cdot m$

Như vậy đối với phân tử không phân cực thì $\vec{\mu} = 0$ (vì $\vec{l} = 0$)

Phân tử phân cực thì $\vec{\mu} \neq 0$. $\vec{\mu}$ càng lớn thì phân tử càng phân cực

Mômen lưỡng cực liên quan chặt chẽ đến cấu trúc hình học của các nguyên tử trong phân tử



biên soạn: Nguyễn Kiên

TABLE 13.3 The Dipole Moments of Some Diatomic Molecules (gas phase)

Molecule	Dipole Moment (D)
CO	0.112
HF	1.83
HCl	1.11
HBr	0.78
HI	0.38
NaCl	9.00
LiF	6.33
KF	8.60
KBr	10.41

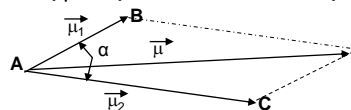
biên soạn: Nguyễn Kiên

- **Đối với phân tử 2 nguyên tử (AB):** ví dụ như HCl, HBr, HI....

Mômen lưỡng cực μ của các phân tử này bằng đúng *mômen liên kết* của liên kết giữa 2 nguyên tử AB

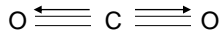
- **Đối với phân tử 3 nguyên tử (ABC):** ví dụ như H₂O....

Giá trị μ được tính theo sơ đồ cộng vector



$$\vec{\mu}^2 = \vec{\mu}_1^2 + \vec{\mu}_2^2 + 2\vec{\mu}_1 \cdot \vec{\mu}_2 \cos\alpha$$

Như vậy, đối với phân tử có cấu trúc thẳng có $\mu = 0$ như CO₂.....



Còn đối với phân tử có cấu trúc không thẳng thì $\mu \neq 0$ như H₂O...

Nhờ các giá trị μ tính toán được so sánh với giá trị μ xác định bằng thực nghiệm cho phép ta thiết lập được cấu trúc hình học của phân tử.

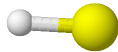
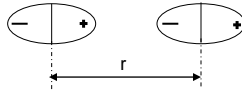
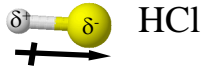
biên soạn: Nguyễn Kiên

6. 3. Lực tương tác giữa các phân tử

6.3.1. Lực tương tác Van der Waals

a- Lực định hướng (U_{dh}). (2 kJ/mol)

Là lực phát sinh giữa các phân tử phân cực với nhau.



Giá trị của lực định hướng được tính theo công thức

$$U_{dh} = -\frac{2\mu^4}{3r^6kT}$$

Trong đó: r- là khoảng cách giữa 2 tâm phân tử

μ - mômen lưỡng cực

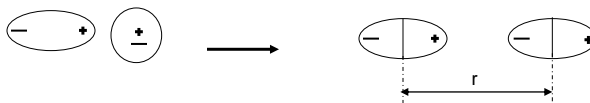
T - Nhiệt độ tuyệt đối

k- hằng số Boltzmann ($1,3805 \cdot 10^{-23} \text{ J.K}^{-1}$)

biên soạn: Nguyễn Kiên

b. Lực cảm ứng (U_c). (2 kJ/mol)

Đó là lực tương tác giữa phân tử phân cực với phân tử không phân cực. Khi phân tử không phân cực tiếp xúc với phân tử phân cực. Do hiện tượng cảm ứng ở phân tử không phân cực sẽ xuất hiện lưỡng cực cảm ứng tức thời và trở thành 1 phân tử phân cực.



$$U_c = -\frac{2\alpha \cdot \mu^2}{r^6}$$

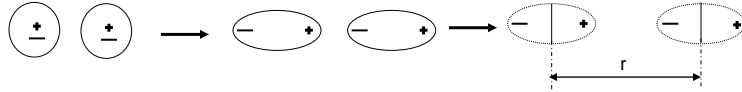
α : hệ số phân cực hóa

biên soạn: Nguyễn Kiên

c. Lực khuếch tán (U_{kt}): (2 kJ/mol)

Do sự chuyển động của các e trên các orbital gây ra sự thăng giáng mật độ điện tích âm quanh hạt nhân nguyên tử.

Mặt khác, hạt nhân nguyên tử cũng dao động quanh vị trí cân bằng của chúng. Do đó, chúng cũng xuất hiện những mô men lưỡng cực nhất thời.



$$U_{kt} = -\frac{3}{2} \frac{h}{r^6} \alpha_1 \alpha_2 \frac{v_1 v_2}{v_1 + v_2}$$

h là hằng số Planck.

α_1, α_2 là độ phân cực của các phân tử.

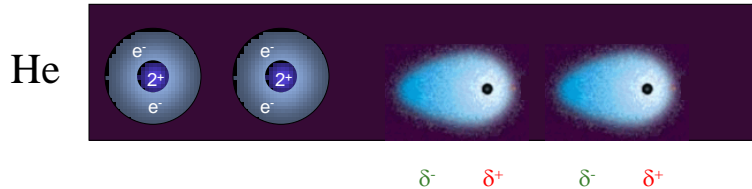
v_1, v_2 là tần số dao động của các dao động trong phân tử.

Nếu 2 phân tử cùng loại $\alpha_1 = \alpha_2, v_1 = v_2$ thì:

$$U_{kt} = -\frac{3}{4} \frac{h v}{r^6} \alpha^2$$

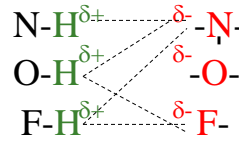
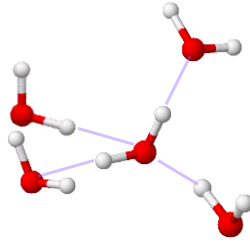
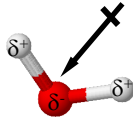
biên soạn: Nguyễn Kiên

Ví dụ: sự tương tác giữa các nguyên tử He



biên soạn: Nguyễn Kiên

6.3.2. Lực liên kết hidro (20 kJ/mol)



biên soạn: Nguyễn Kiên

Liên kết hidro giải thích được:

- Điểm sôi bất thường của các hợp chất như H_2O , NH_3 , HF

Hợp chất	M	T_s (°C)	Hợp chất	M	T_s (°C)	Hợp chất	M	T_s (°C)
NH_3	17	-32,5	H_2O	18	100	HF	20	10,5
PH_3	34	-87,0	H_2S	34	-60	HCl	36,5	-84,0
AsH_3	78	-54,5	H_2Se	81	-42,5	HBr	81	-66,0
SbH_3	131	-17,0	H_2Te	130	-2,5	HI	128	-35,0

- Liên kết hidro có tính định hướng: vì vậy, nó làm ảnh hưởng đến quá trình kết tinh và cấu trúc kết tinh. Ví dụ sự hình thành tinh thể nước đá. Nguyên tử oxy được bao quanh bởi 4 nguyên tử hidro làm cho cấu trúc của nước đá xốp, trong suốt

- Liên kết hidro ảnh hưởng khá lớn đến quá trình hòa tan lẫn nhau giữa các chất lỏng: Ví dụ, rượu etylic và nước hòa tan vào nhau theo bất kỳ tỷ lệ nào

biên soạn: Nguyễn Kiên

BÀI TẬP (cấu tạo chất).

B.soạn: TKiên

- Bài 1.** Phát biểu 2 định đề của Bohr. Hãy nêu những ưu điểm và hạn chế của thuyết Bohr về cấu tạo ngử.
- Bài 2.** Nội dung và biểu thức của nguyên lí bất định Heisenberg. Áp dụng biểu thức Heisenberg hãy tính Δx hoặc Δv trong các trường hợp sau và đưa ra những nhận xét.
- Quả bóng bàn bay, biết $m=10g$, $\Delta x = 0,01mm$.
 - Electron trong ngử, biết $\Delta v = 10^6m/s$
- Bài 3.** Nội dung của thuyết sóng vật chất và hệ thức De broglie. Tính bước sóng λ sinh ra của:
- Chuyển động của một ô tô, khối lượng $m = 1$ tấn, tốc độ $v=100km/h$
 - Chuyển động của electron trong ngử với tốc độ $v = 10^6m/s$
- Bài 4.** Tại sao người ta nói phương trình Schrodinger là phương trình cơ bản của cơ học lượng tử. Hãy cho biết khái niệm về hàm sóng ψ và ý nghĩa vật lí của ψ^2 .
- Bài 5.** Viết phương trình Schrodinger đối với ngử hiđrô. Giải thích các kí tự trong phương trình. Orbital nguyên tử là gì?
- Bài 6.** Viết biểu thức toán học của hàm sóng mô tả trạng thái cơ bản của electron trong ngử hiđrô.
 Từ hàm đó suy ra sự phân bố mật độ xác suất có mặt của electron như thế nào?. Thế nào là mây electron?

biên soạn: Nguyễn Kiên

- Bài 7.** Hãy viết biểu thức tính năng lượng, mômen động lượng, hình chiếu mômen động lượng của electron trong ngử hydro và cho biết ý nghĩa các số lượng tử.
- Bài 8.** Tính năng lượng mà ngử hydro hấp thụ khi electron chuyển từ trạng thái $n=1$ đến trạng thái $n=2$.
- Bài 9.** Cho các orbital nguyên tử $1s$; $2s$; $2p_x$; $2p_y$; $2p_z$. Hãy viết các kí hiệu orbital tương ứng với các số lượng tử $\psi_{n,l,m}$.
- Bài 10.** Xét các AO sau đây trong ngử hiđrô: $\psi_{1,0,0}$; $\psi_{2,1,1}$; $\psi_{3,2,0}$. Hãy vẽ hình dạng các AO đó.
- Bài 11.** Tính số electron tối đa có trong một phân lớp có $l=1$; $l=3$ và trong một lớp thứ 3; 4; 5.
- Bài 12.** a. Tính độ dài liên kết của phân tử HCl. Biết mômen lưỡng cực của nó là $3,43 \cdot 10^{-30}C.m$; $e=1,6 \cdot 10^{-19}C$.
- Phân tử nước có độ dài lưỡng cực là $0,38 \cdot 10^{-10}m$. Hãy tính mômen lưỡng cực của phân tử ra đơn vị đơbai (D). Biết $1D=3,3 \cdot 10^{-30} C.m$.

biên soạn: Nguyễn Kiên