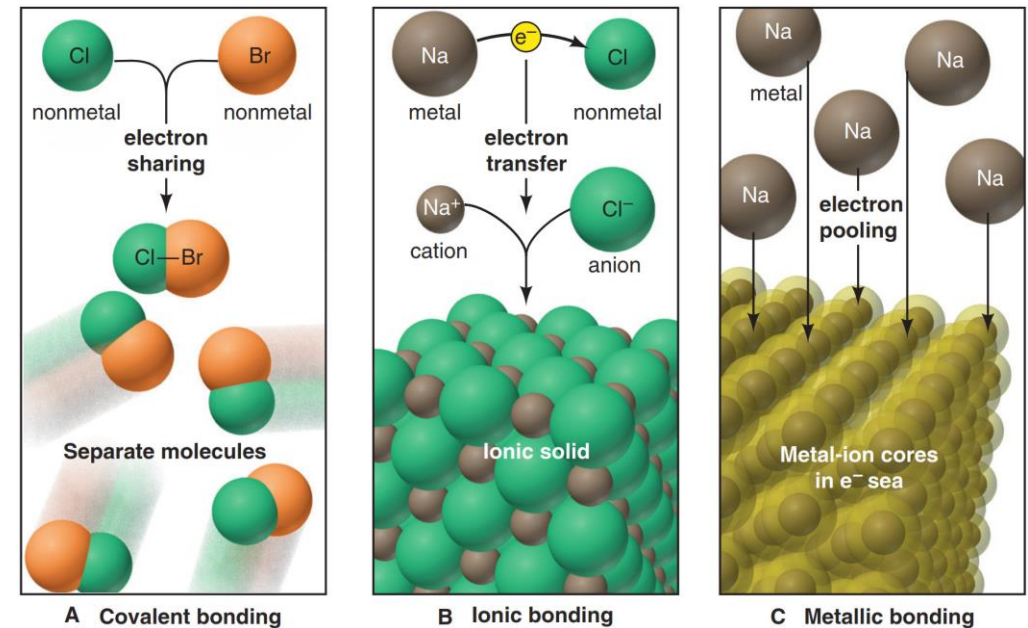


NỘI DUNG

1. Đại cương về liên kết hóa học
2. Liên kết cộng hóa trị
 - 2.1. Phương pháp liên kết hóa trị (phương pháp VB)
 - 2.2. Phương pháp orbital phân tử (phương pháp MO)
3. Liên kết ion
4. Liên kết kim loại
5. Liên kết hydrogen
6. Lực van der Waals

TÀI LIỆU

- [1] – Chương 4: trang 124 – 201
- [2] – Chapter 9: page 269 – 308
Chapter 10: page 309 – 348
Chapter 11: page 349 – 400



1. Đại cương về liên kết hóa học

1.1. Phân tử

Gồm một số giới hạn các hạt nhân nguyên tử và các electron tương tác với nhau, được phân bố một cách xác định trong không gian tạo thành một cấu trúc bền vững.

- Trong tinh thể, phân tử là toàn bộ tinh thể không thể tách riêng.
- Trong phân tử, các nguyên tử không còn tồn tại như cấu trúc ban đầu của nó.
- Năng lượng trong phân tử $<$ tổng năng lượng của các nguyên tử ban đầu \rightarrow hệ bền vững hơn.

1.2. Liên kết hóa học

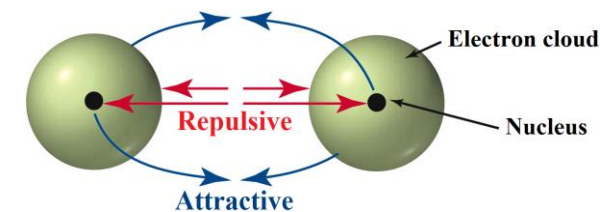
Liên kết hóa học là liên kết được hình thành giữa các nguyên tử trong phân tử hay trong tinh thể.

- Liên kết hóa học có bản chất điện.
- Các thông số đặc trưng của liên kết:

a. Độ dài liên kết (l , pm)

Là khoảng cách giữa 2 hạt nhân của các nguyên tử tương tác với nhau.

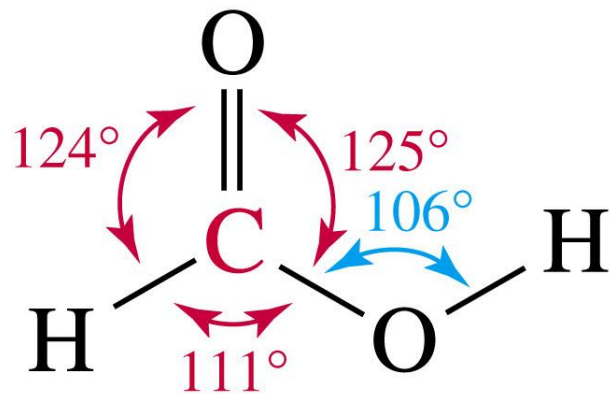
- l càng nhỏ \rightarrow liên kết càng bền.



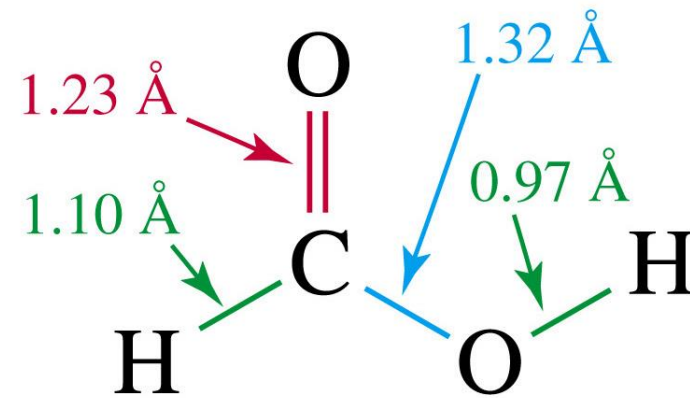
Internuclear distance (bond length)	Covalent radius
199 pm	100 pm
228 pm	114 pm
266 pm	133 pm

b. Góc liên kết

Là góc tạo thành bởi 2 đoạn thẳng tương đương nối hạt nhân nguyên tử trung tâm với 2 hạt nhân nguyên tử liên kết.



bond angles



bond lengths

Góc liên kết cho biết dạng hình học (cấu hình không gian) của phân tử.

c. Năng lượng liên kết (E_{lk} , kJ/mol)

Là năng lượng cần tiêu tốn để phá vỡ liên kết (E_{pl}) của một mol phân tử ở trạng thái khí.

- Phân tử AB:

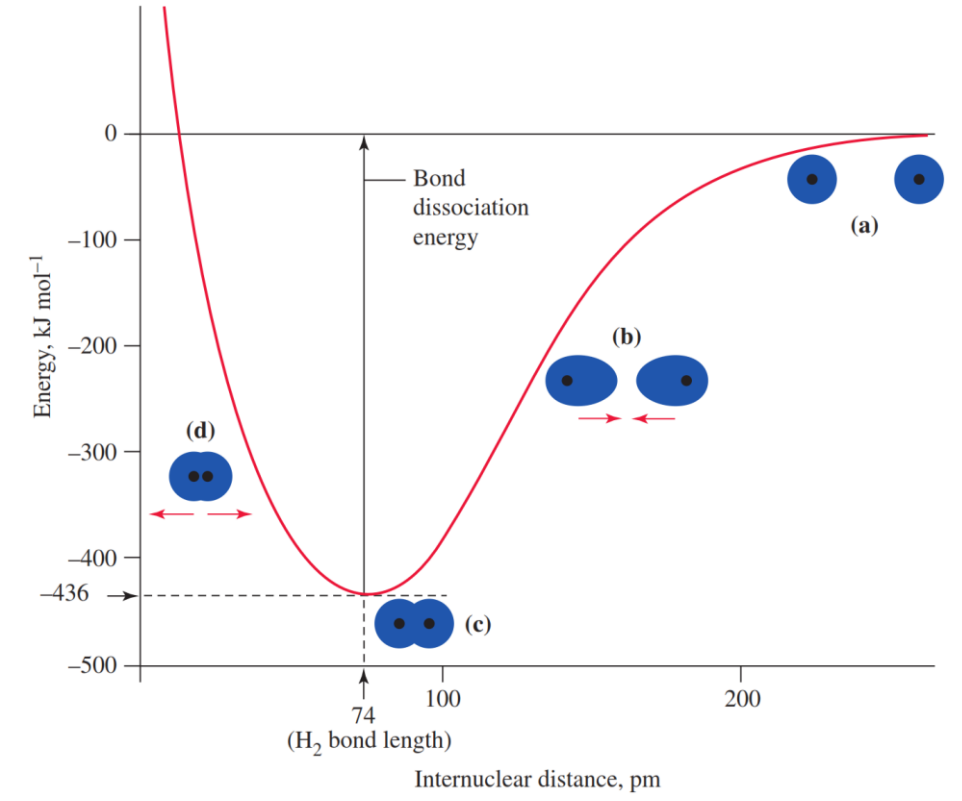
$$E_{lk} = E_{pl}$$

- Phân tử AB_n :

$$\bar{E}_{lk} = \frac{1}{n} E_{pl}$$

$E_{lk} \uparrow \Rightarrow$ liên kết càng bền.

E_{lk} liên quan đến độ dài, bậc, độ bền của liên kết.



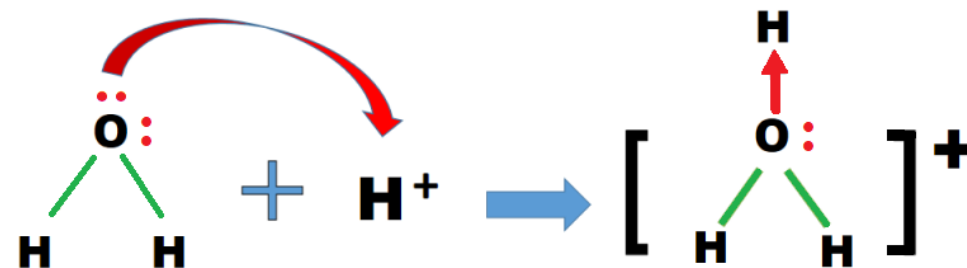
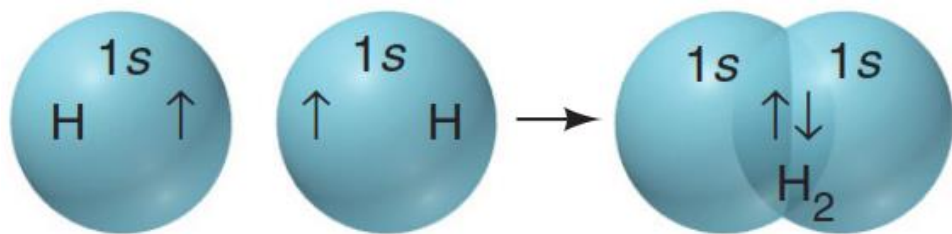
2. Liên kết cộng hóa trị (LKCHT)

2.1. Phương pháp liên kết hóa trị (Valence bond)

Nội dung cơ bản của phương pháp VB

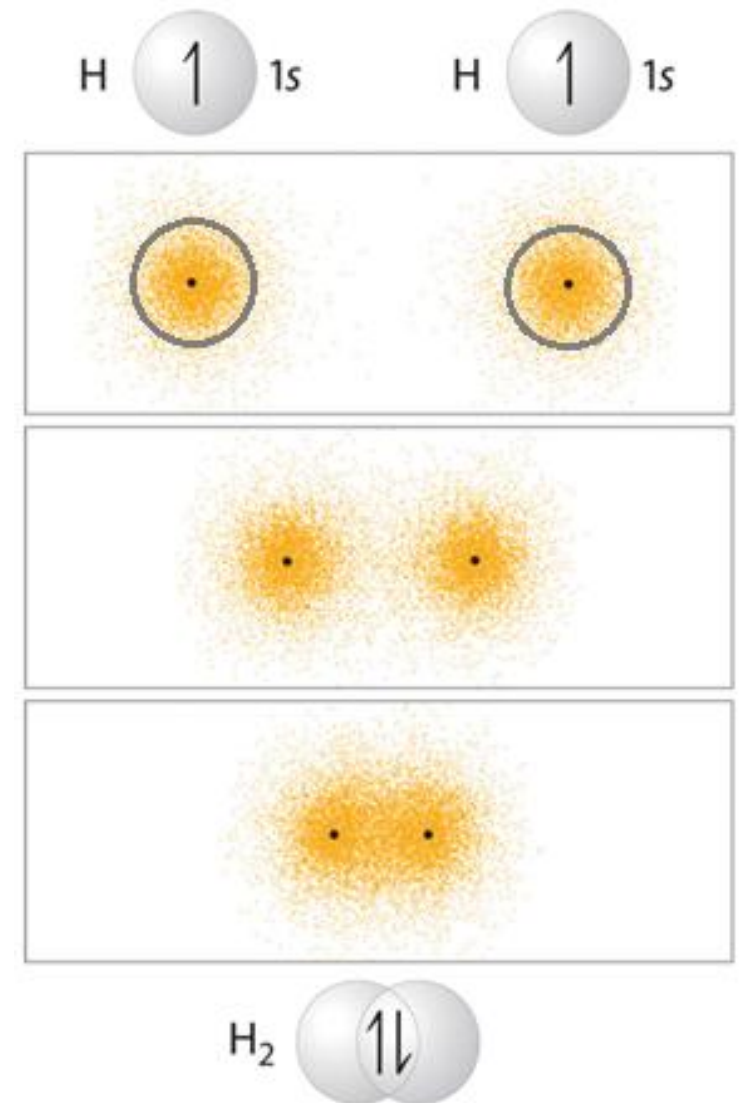
2.1.1. Khái niệm về LKCHT

- LKCHT dựa trên cặp e ghép đôi có spin ngược nhau và thuộc về cả 2 nguyên tử tương tác (2 e – 2 tâm).*

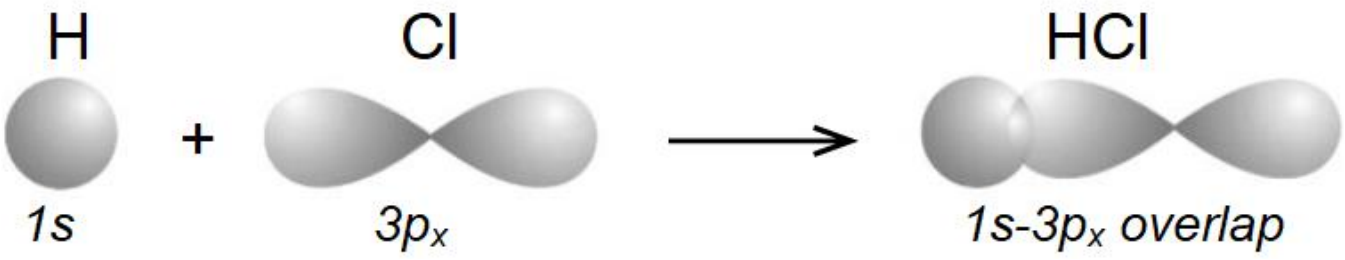
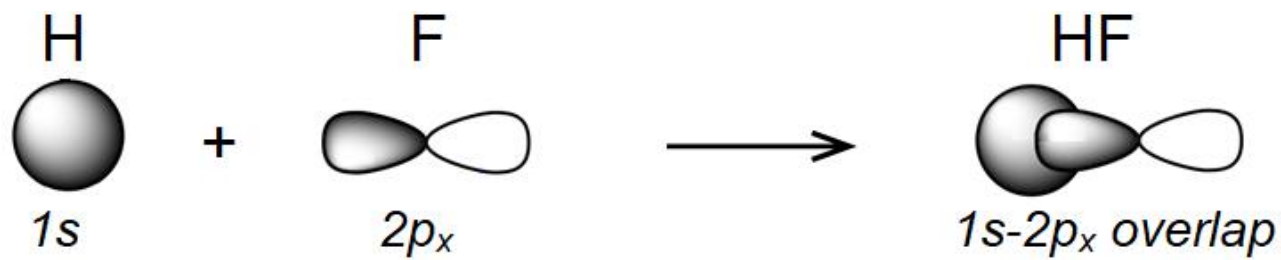


CHƯƠNG 2: LIÊN KẾT HÓA HỌC VÀ CẤU TẠO PHÂN TỬ

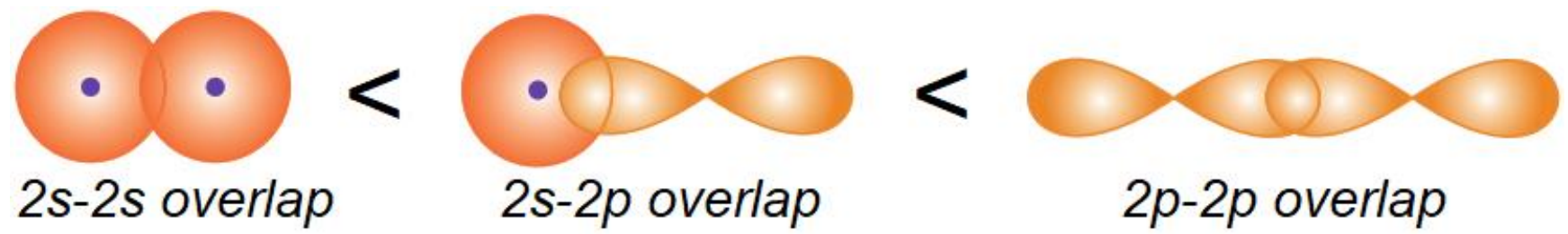
- LKCHT được hình thành do sự che phủ lẫn nhau giữa các AO chứa các e độc thân của các nguyên tử tham gia tạo liên kết.
- Độ bền của LKCHT phụ thuộc vào độ che phủ các AO. Độ che phủ các AO phụ thuộc vào kích thước, hình dạng của AO và hướng che phủ.
- *Độ che phủ càng lớn thì liên kết càng bền và liên kết được tạo thành khi độ che phủ đạt cực đại.*



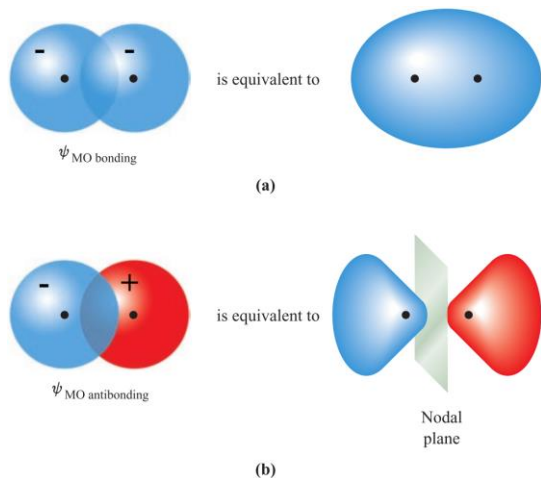
✓ Ảnh hưởng của kích thước orbital



✓ Ảnh hưởng của hình dạng orbital

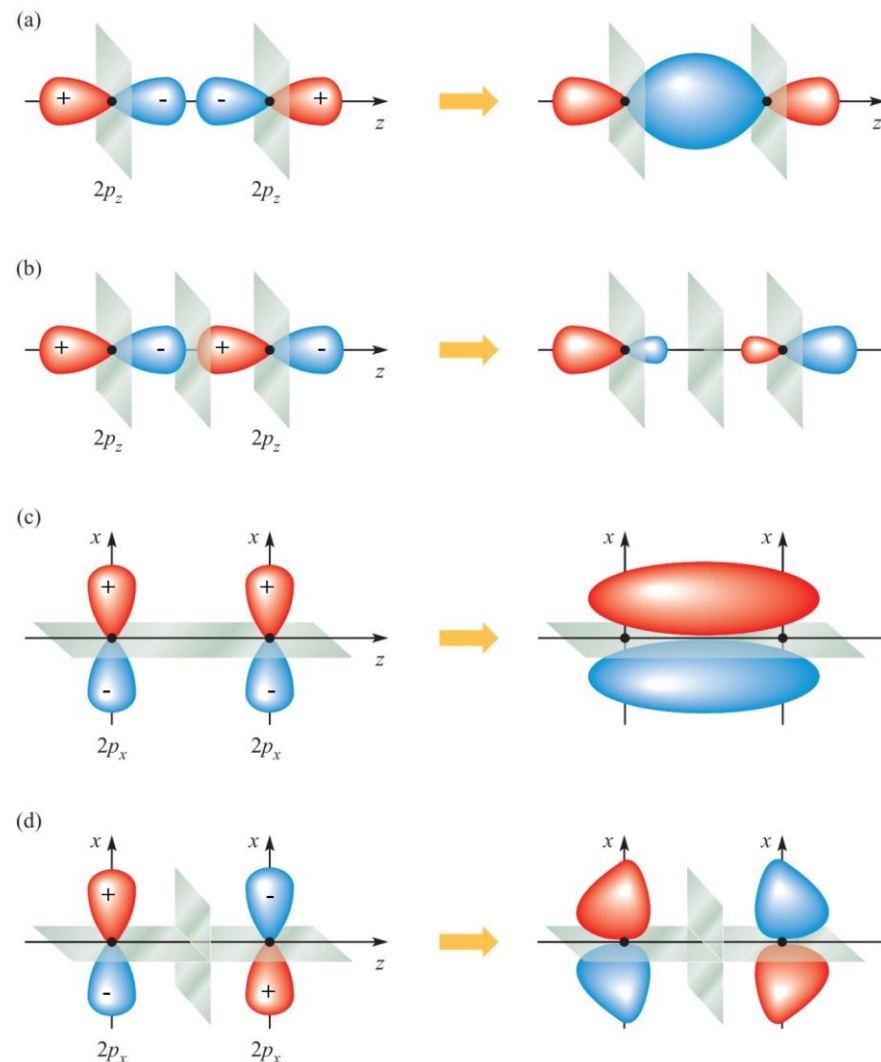


✓ Ảnh hưởng của hướng che phủ orbital

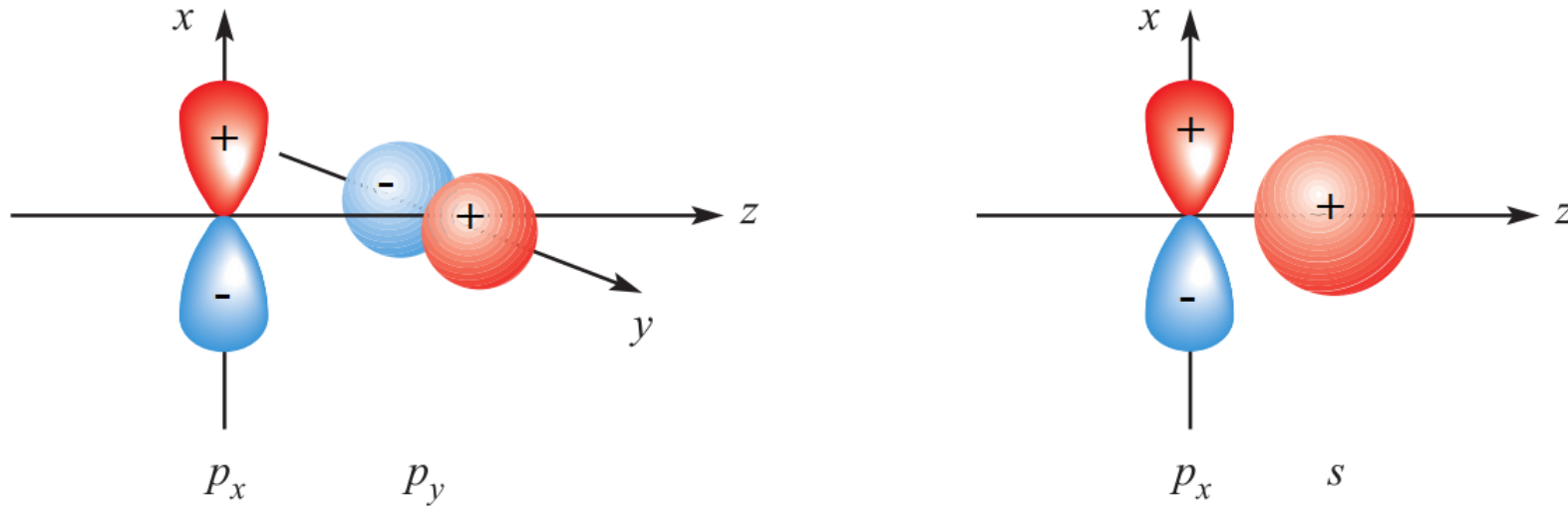


(a), (c): che phủ các hàm sóng cùng dấu \rightarrow tạo liên kết.

(b), (d): che phủ các hàm sóng khác dấu \rightarrow phản liên kết.

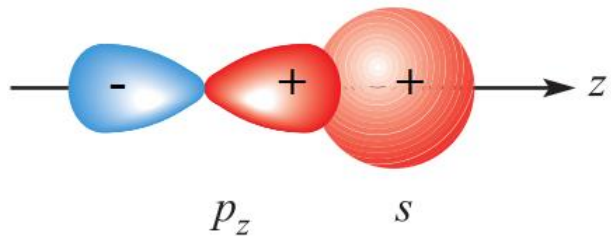


CHƯƠNG 2: LIÊN KẾT HÓA HỌC VÀ CẤU TẠO PHÂN TỬ

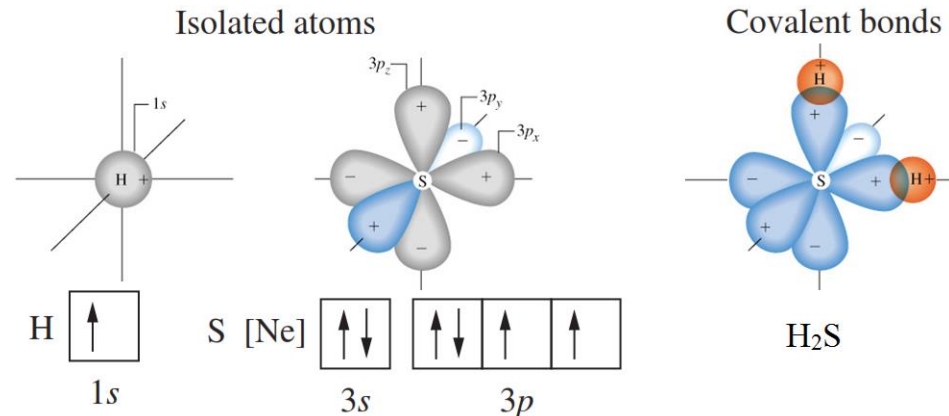


che phủ không đối xứng \rightarrow không tạo liên kết.

\Rightarrow LKCHT có tính *định hướng, bão hòa và có cực*.



che phủ các hàm sóng cùng dấu \rightarrow tạo liên kết.

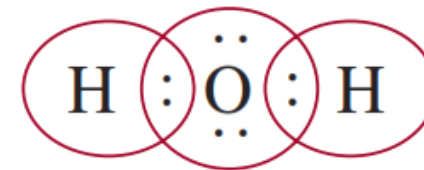
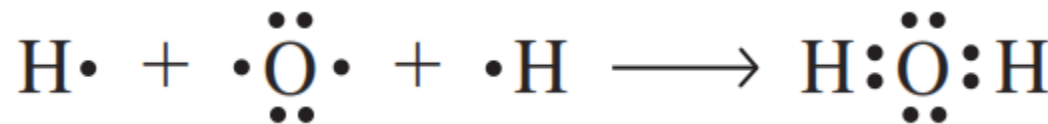


2.1.2. Khả năng tạo LKCHT của nguyên tố và tính bão hòa của LKCHT

a. Cơ chế và khả năng tạo LKCHT của nguyên tố

- Cơ chế góp chung:** Liên kết được hình thành do sự *góp chung* 2 *e* hóa trị độc thân của 2 nguyên tử tương tác.

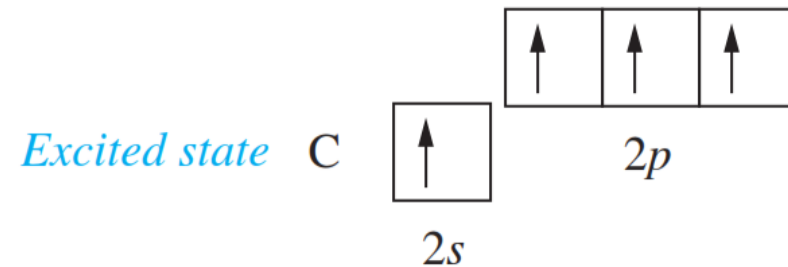
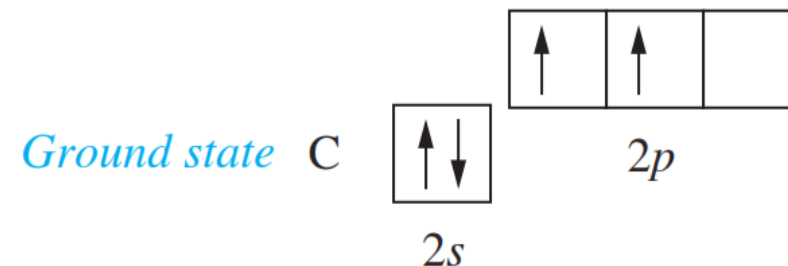
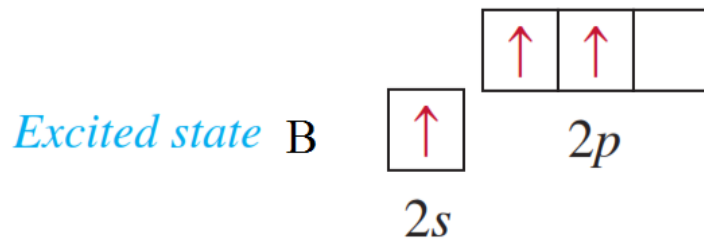
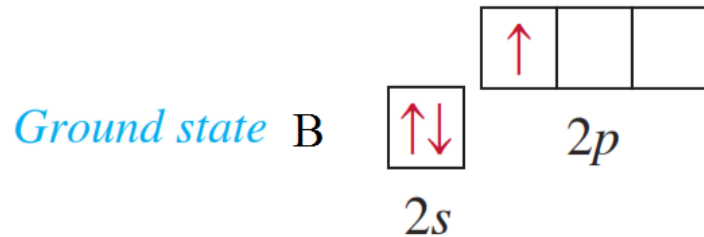
Ví dụ:



CHƯƠNG 2: LIÊN KẾT HÓA HỌC VÀ CẤU TẠO PHÂN TỬ

Khả năng tạo LKCHT được quyết định bởi số e hóa trị độ thân của nguyên tử nguyên tố.

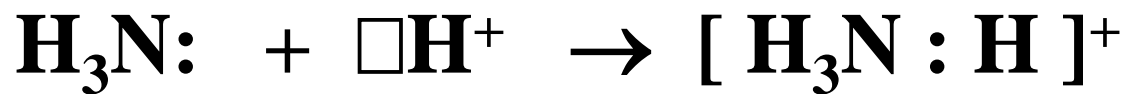
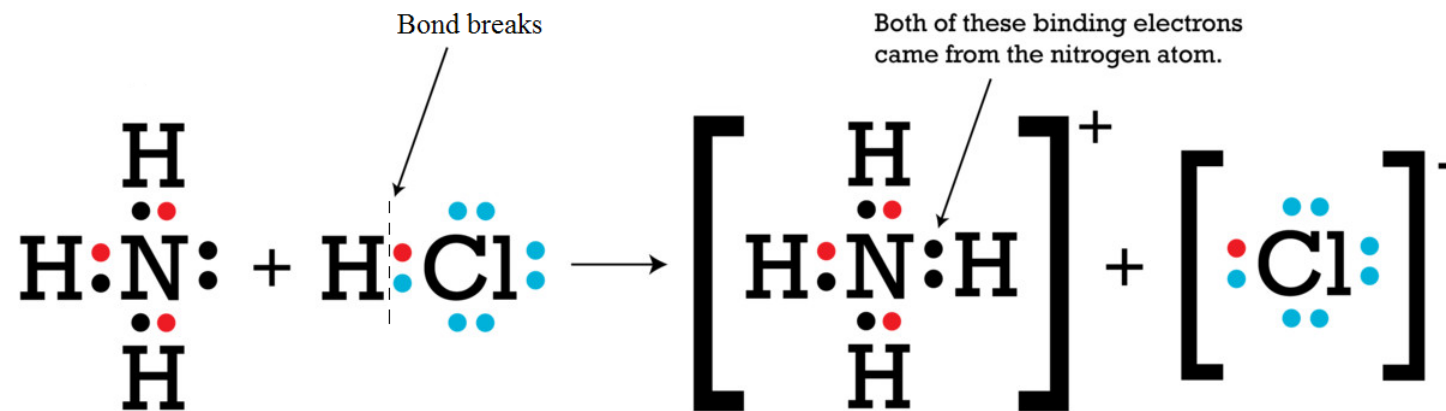
Tuy nhiên, số e hóa trị độ thân của nguyên tử nguyên tố có thể thay đổi (tăng lên hay giảm xuống do sự kích thích).



CHƯƠNG 2: LIÊN KẾT HÓA HỌC VÀ CẤU TẠO PHÂN TỬ

- Cơ chế cho – nhận:** Sự hình thành cặp e góp chung của LKCHT chỉ do 1 trong 2 nguyên tử tương tác đưa ra, còn nguyên tử kia nhận lấy.

Ví dụ:



Cặp e hóa trị tự do

Orbital hóa trị tự do

b. Tính bão hòa của LKCHT:

Số LKCHT cực đại của nguyên tố bằng số AO hóa trị của nó.
→ phân tử có thành phần xác định.

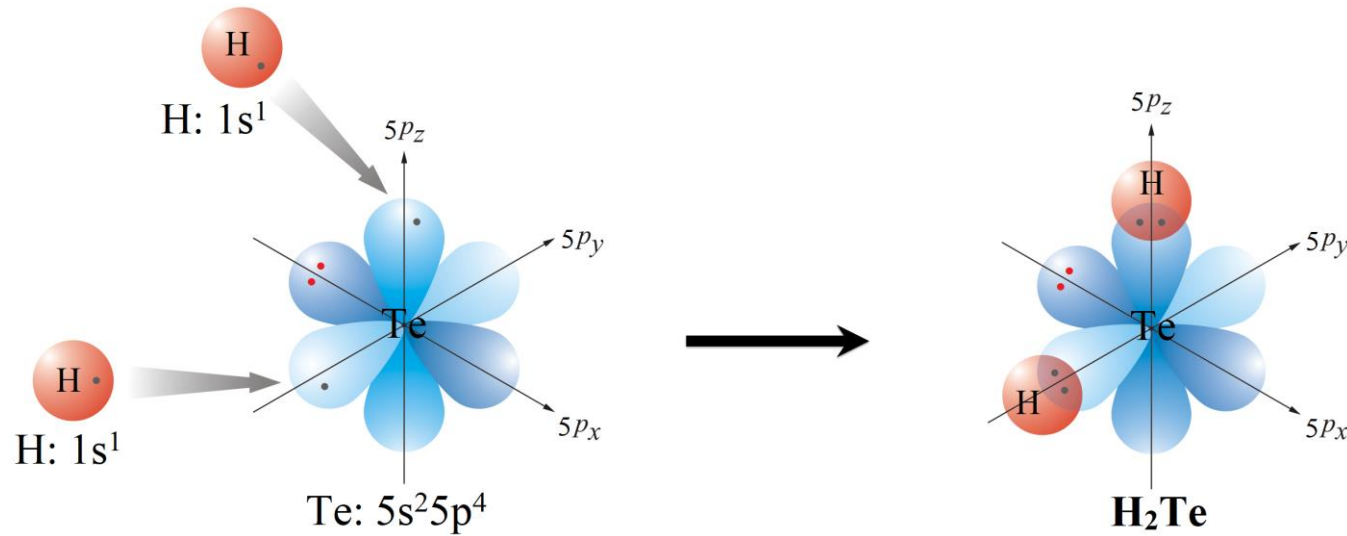
Ví dụ: các nguyên tố chu kỳ II có 4 AO hóa trị; chu kỳ III có 9 AO hóa trị.

2.1.3. Tính định hướng của LKCHT và sự lai hóa các AO

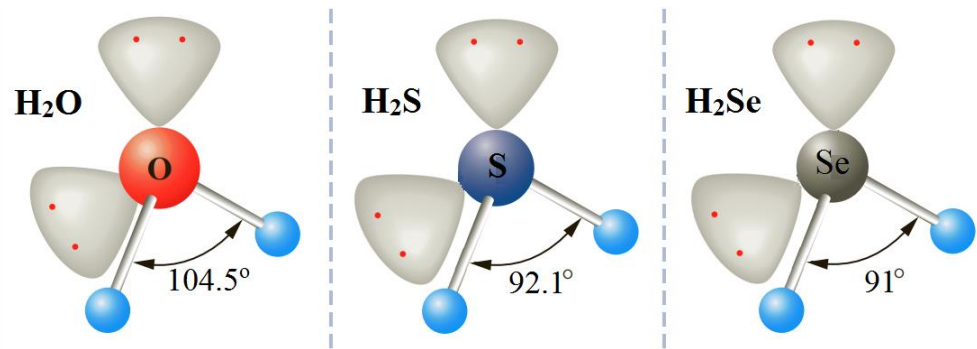
Vì liên kết được tạo thành theo những hướng nhất định nên phân tử tạo thành có cấu hình không gian xác định.

CHƯƠNG 2: LIÊN KẾT HÓA HỌC VÀ CẤU TẠO PHÂN TỬ

Ví dụ: Phân tử H_2Te có cấu hình không gian dạng góc, với góc liên kết $\text{HTeH} = 90^\circ$.



Nhưng:



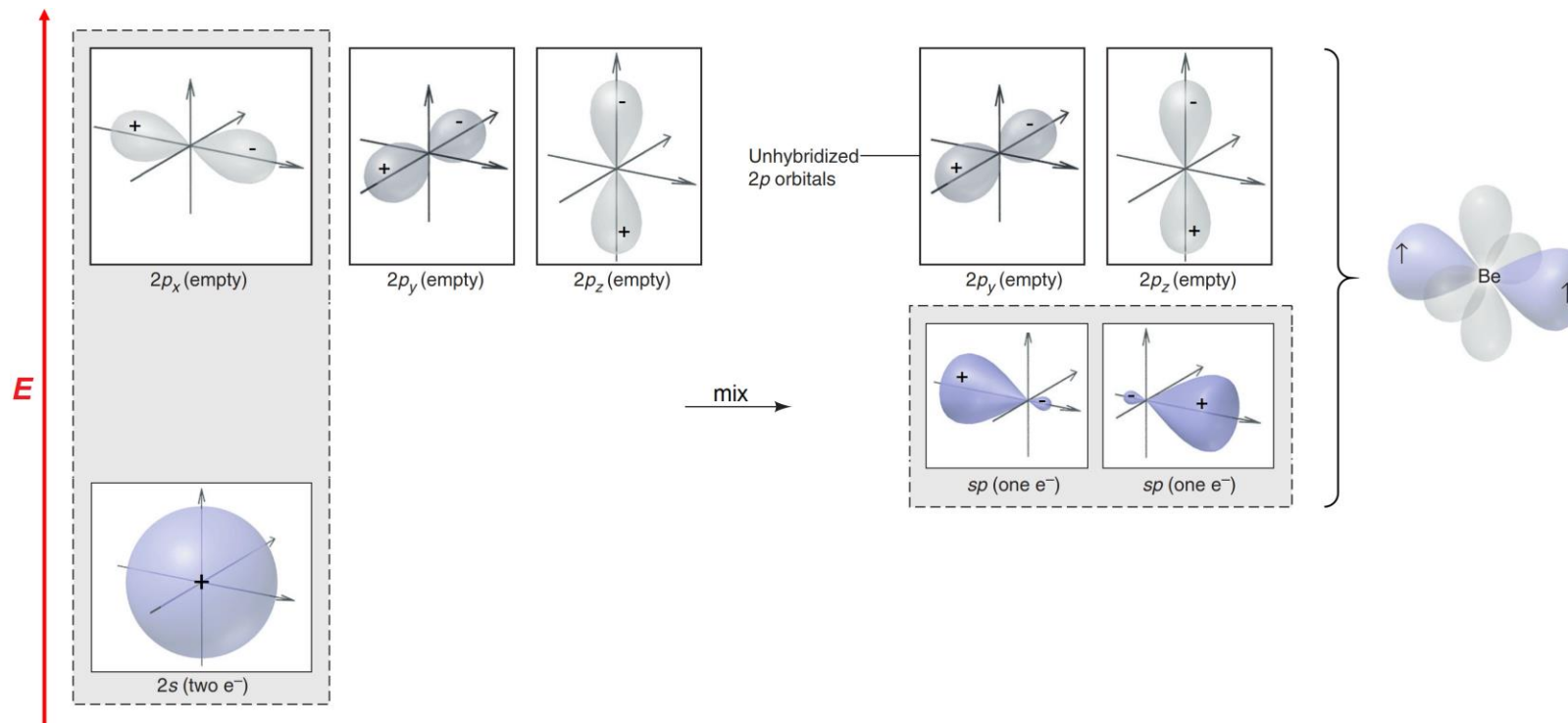
a. Sự lai hóa các AO và cấu hình không gian phân tử

Lai hóa là quá trình tổ hợp (trộn lẫn) của các AO trong 1 nguyên tử với nhau để tạo thành orbital lai hóa.

Sự lai hóa có các đặc điểm:

- ✓ Orbital lai hóa tạo thành có hình dạng, năng lượng hoàn toàn giống nhau, nhưng khác với các AO tham gia tạo lai hóa.
- ✓ Số orbital lai hóa tạo thành bằng tổng số AO tham gia tạo lai hóa và phân bố đối xứng trong không gian.
- ✓ Có nhiều kiểu lai hóa: sp , sp^2 , sp^3 , sp^3d , dsp^3 ...

Ví dụ: Sự lai hóa sp của nguyên tử Be: $1s^2 2s^2$



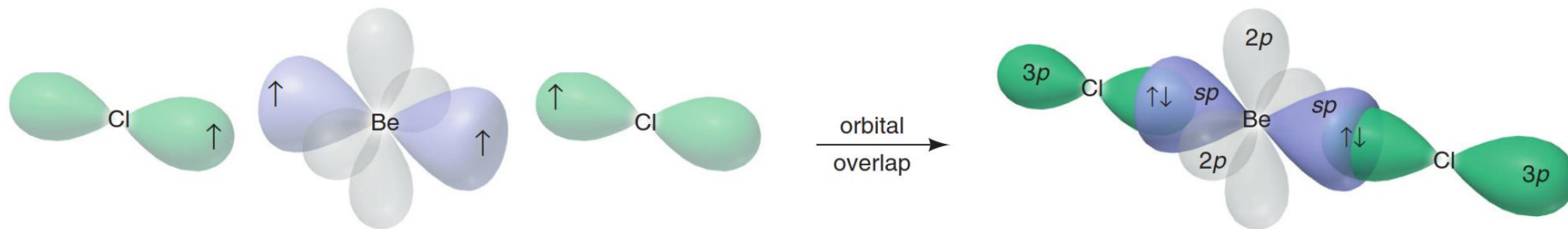
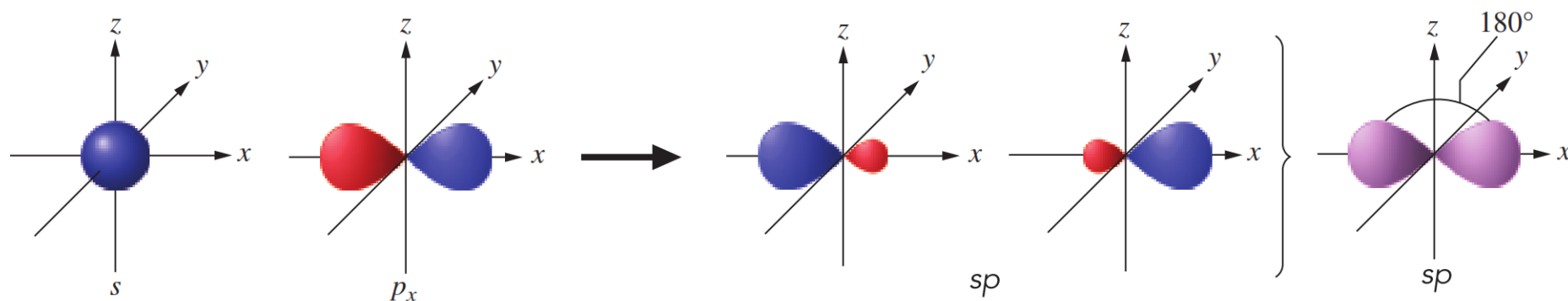
Điều kiện để các AO tham gia lai hóa:

Các AO tham gia lai hóa phải có: năng lượng gần bằng nhau; mật độ e lớn; mức độ che phủ lớn.

b. Một số kiểu lai hóa

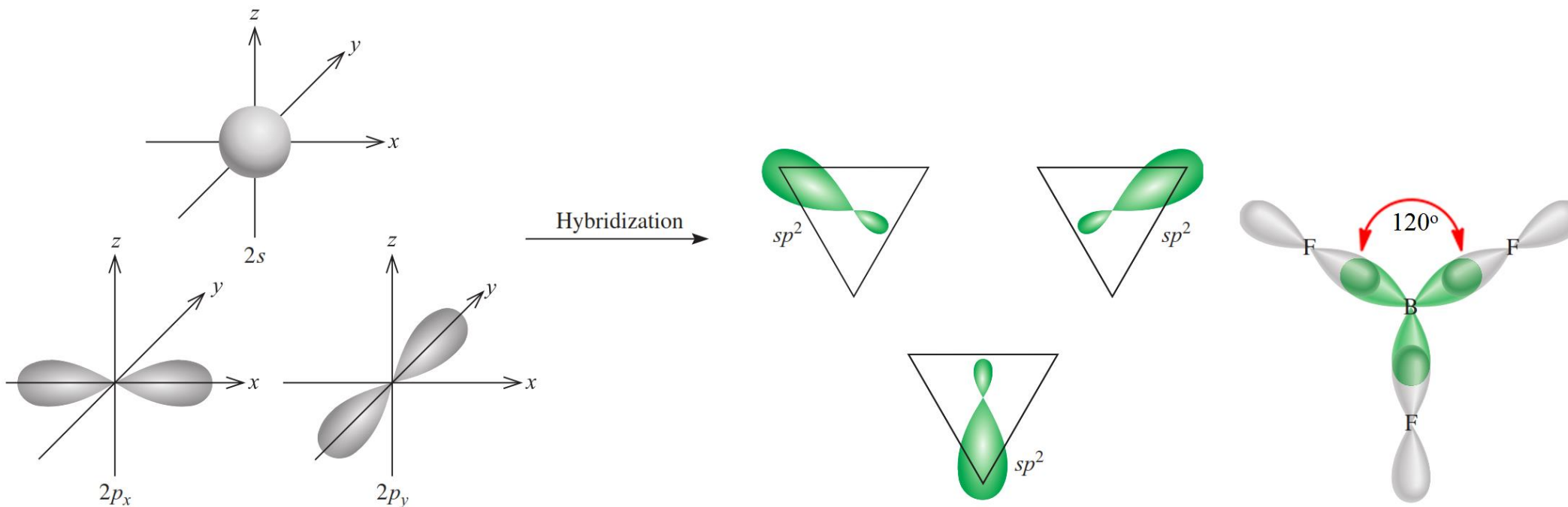
i. Lai hóa sp

1 orbital s tổ hợp với 1 orbital p (của cùng 1 nguyên tử) tạo thành 2 orbital lai hóa sp phân bố đối xứng trên một đường thẳng, tạo thành một góc 180° .



ii. Lai hóa sp^2

1 orbital s tổ hợp với 2 orbital p (của cùng 1 nguyên tử) tạo thành 3 orbital lai hóa sp^2 phân bố đối xứng trên một mặt phẳng hướng đến 3 đỉnh của tam giác đều, tạo thành một góc 120° .



CHƯƠNG 2: LIÊN KẾT HÓA HỌC VÀ CẤU TẠO PHÂN TỬ

