

CHƯƠNG 2:

LIÊN KẾT HÓA HỌC & CẤU TẠO PHÂN TỬ

Nội dung

1. Những khái niệm cơ bản về liên kết hóa học
2. Liên kết cộng hóa trị
3. Liên kết ion
4. Liên kết hydro
5. Liên kết Van Der Vaal

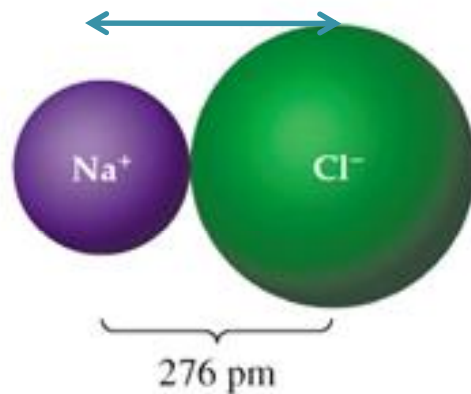
1. Những khái niệm cơ bản về liên kết hóa học

1.1 Bản chất của liên kết

- Các loại liên kết hoá học đều cùng có bản chất điện, do tương tác của hạt nhân nguyên tử và electron
- Chỉ có các electron hóa trị (electron lớp ngoài cùng tham gia vào liên kết hóa học)

1.2. Độ dài liên kết

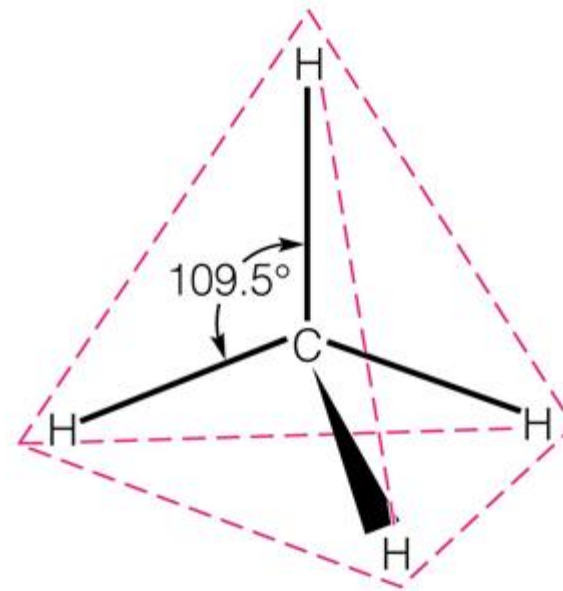
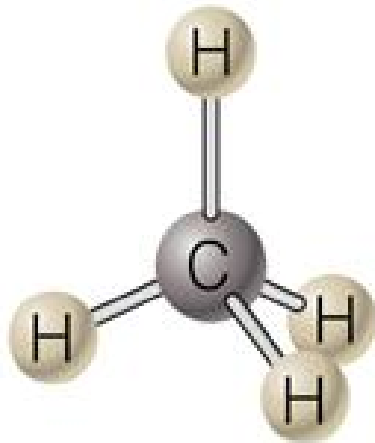
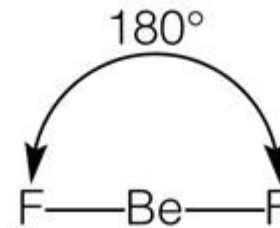
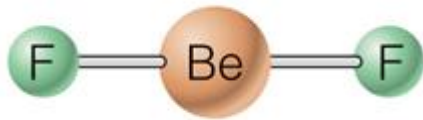
là khoảng cách giữa hai hạt nhân nguyên tử liên kết với nhau.



Ví dụ	Liên kết:	H-F	H-Cl	H-Br	H-I
	d ($\text{\AA}$)	0,92	1,28	1,42	1,62

1.3. Góc hóa trị

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



1.4. Bậc liên kết

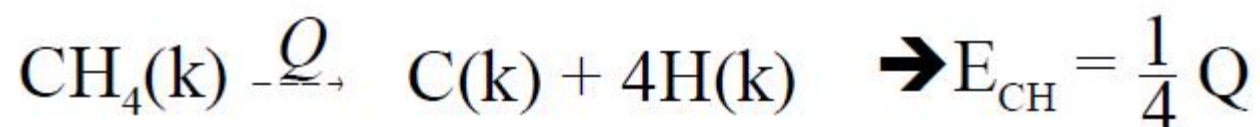
Bậc liên kết là số liên kết tạo thành giữa 2 nguyên tử tương tác trực tiếp với nhau

Etan	$\text{H}_3\text{C} - \text{CH}_3$	$\text{blk} = 1$
Eten	$\text{H}_2\text{C} = \text{CH}_2$	$\text{blk} = 2$
Etin	$\text{HC} \equiv \text{CH}$	$\text{blk} = 3$

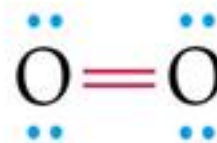
1.5. Năng lượng liên kết

Năng lượng cần tiêu tốn để phá hủy liên kết có trong 1 mol phân tử ở trạng thái khí

$$E_{\text{H-H}} = 431 \text{ kJ/mol}$$



- Năng lượng liên kết phụ thuộc vào độ dài liên kết, độ bội liên kết.
- Năng lượng liên kết càng lớn → liên kết càng bền



Bond length:

148 pm

121 pm

110 pm

Bond strength:

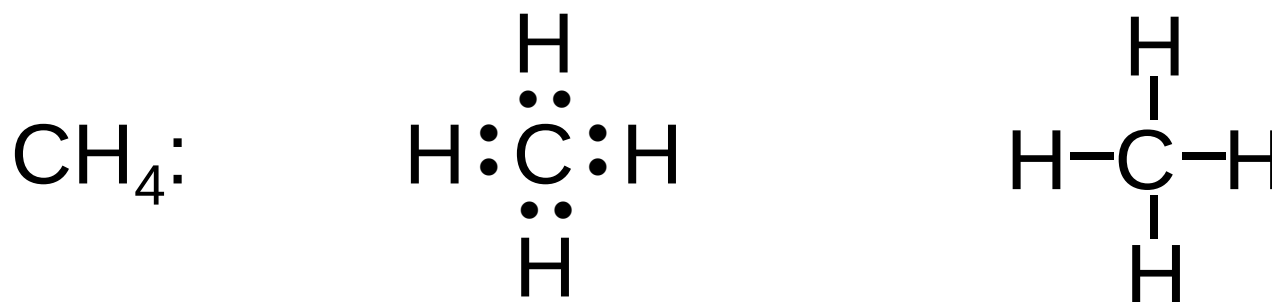
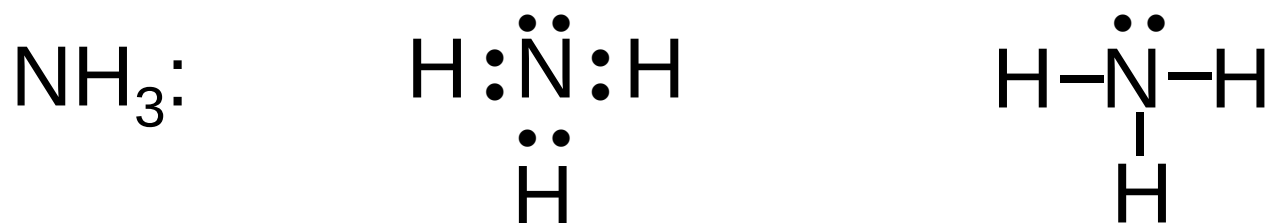
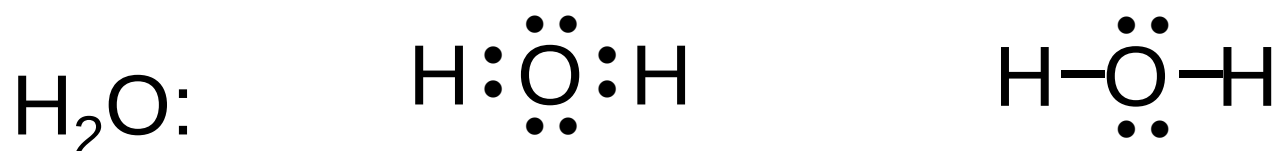
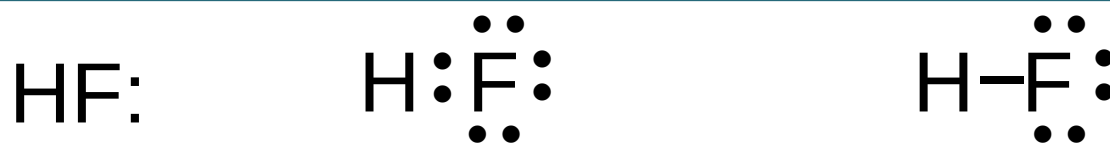
213 kJ/mol

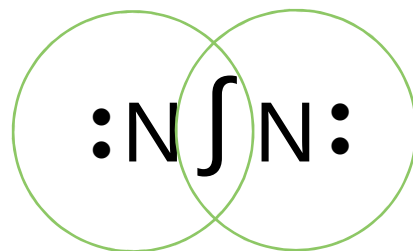
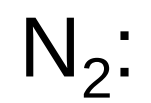
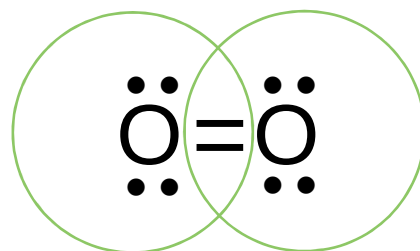
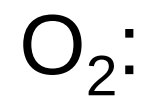
498 kJ/mol

945 kJ/mol

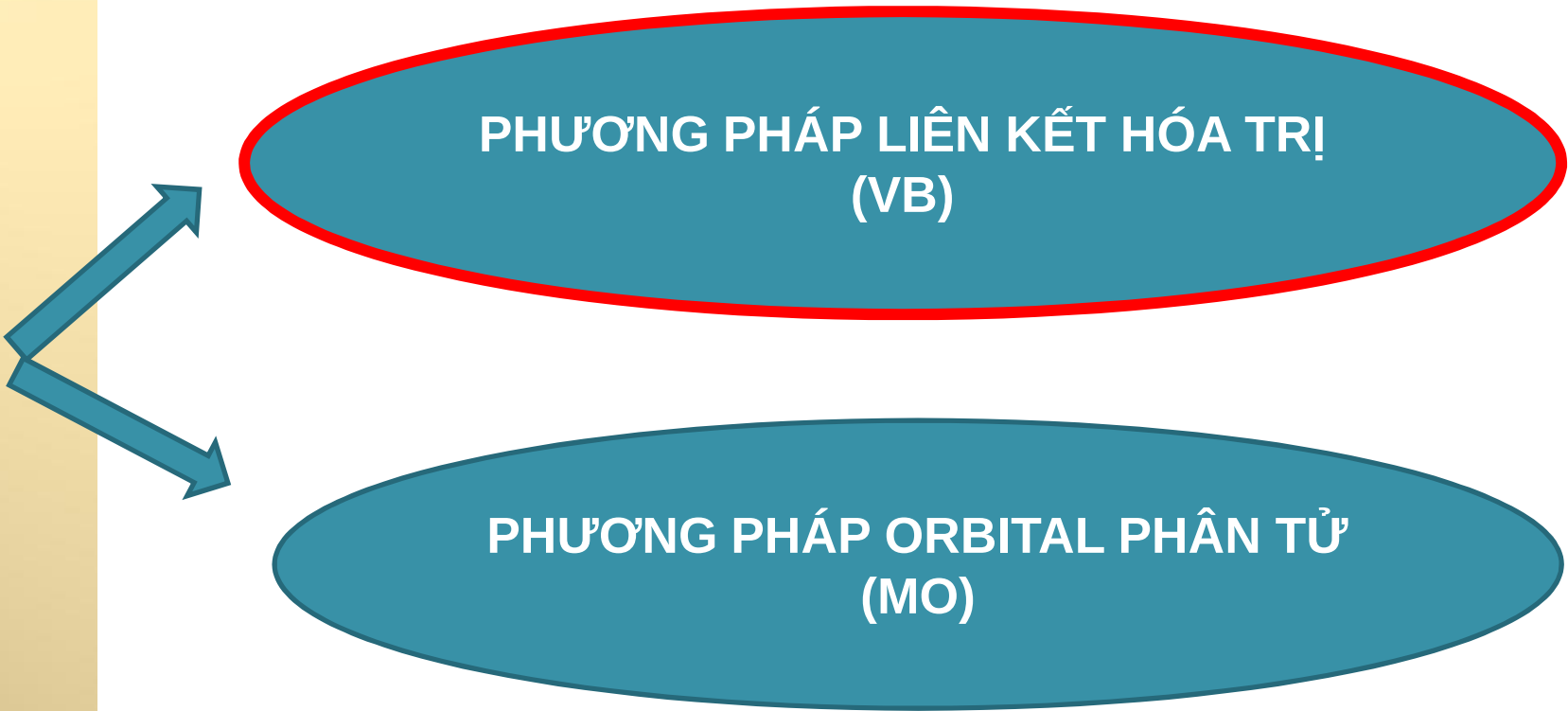
2. LIÊN KẾT CỘNG HÓA TRỊ

Liên kết cộng hoá trị theo Lewis (1916)





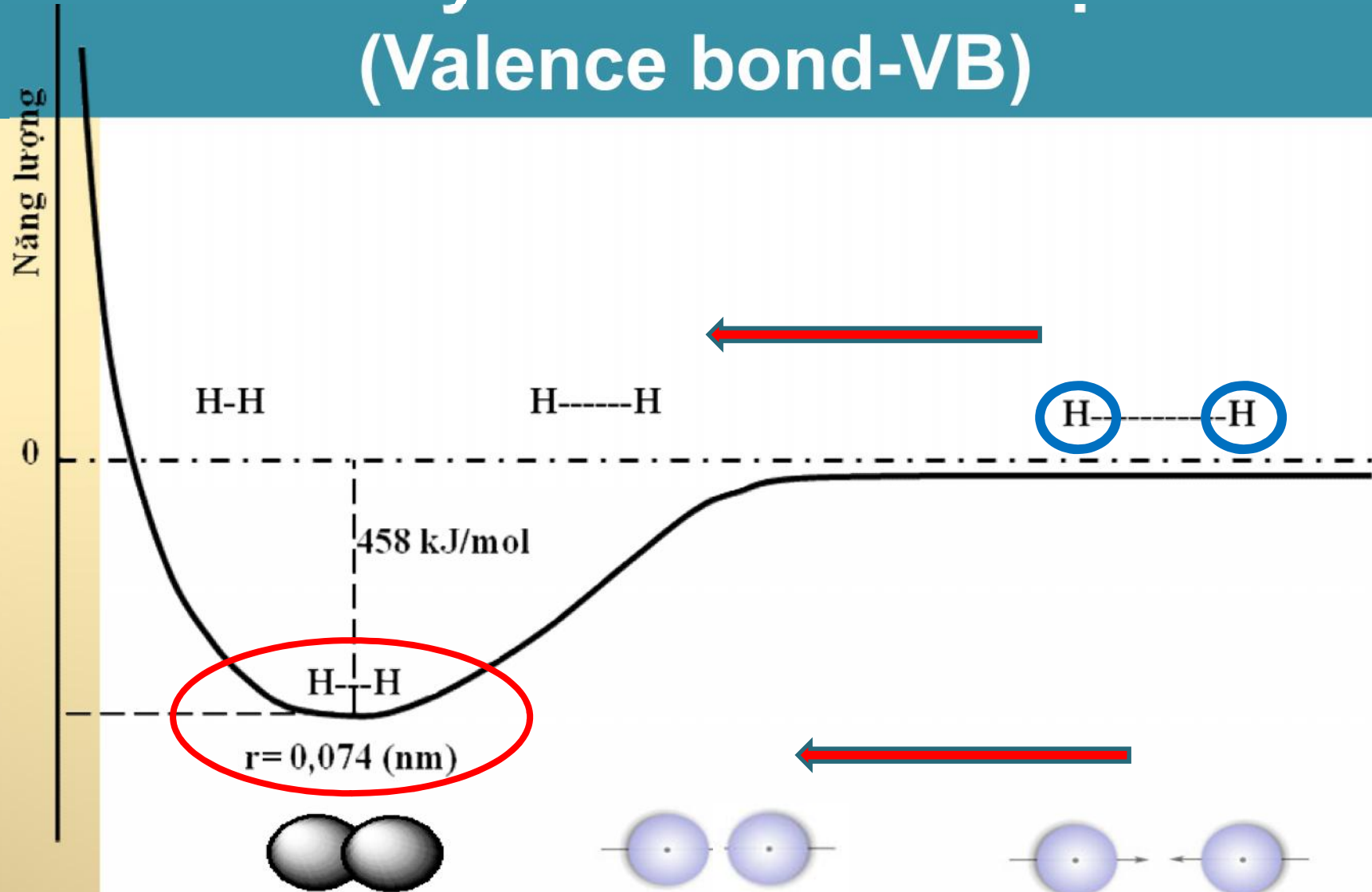
LIÊN KẾT CỘNG HÓA TRỊ THEO CƠ HỌC LƯỢNG TỬ



PHƯƠNG PHÁP LIÊN KẾT HÓA TRỊ
(VB)

PHƯƠNG PHÁP ORBITAL PHÂN TỬ
(MO)

Thuyết liên kết hoá trị (Valence bond-VB)



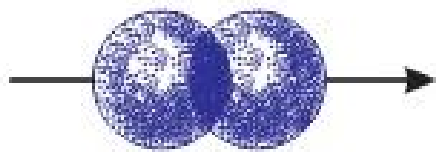
Liên kết cộng hóa trị hình thành do **sự xen phủ** của hai orbital, trong đó có 2 electron có spin trái dấu

Liên kết cộng hóa trị **càng bền** khi **độ che phủ** của các orbital nguyên tử **càng lớn**

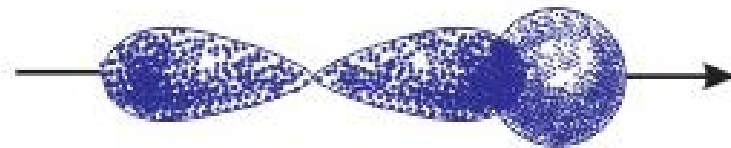
Các kiểu xen phủ

❖ Xen phủ trực liên nhân

Liên kết sigma σ



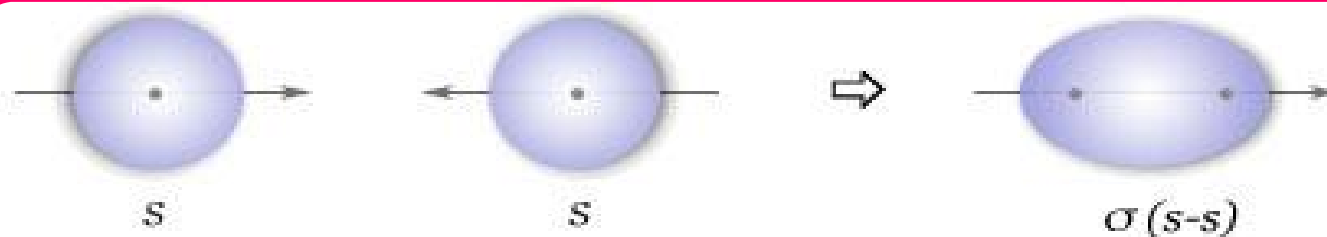
s-s



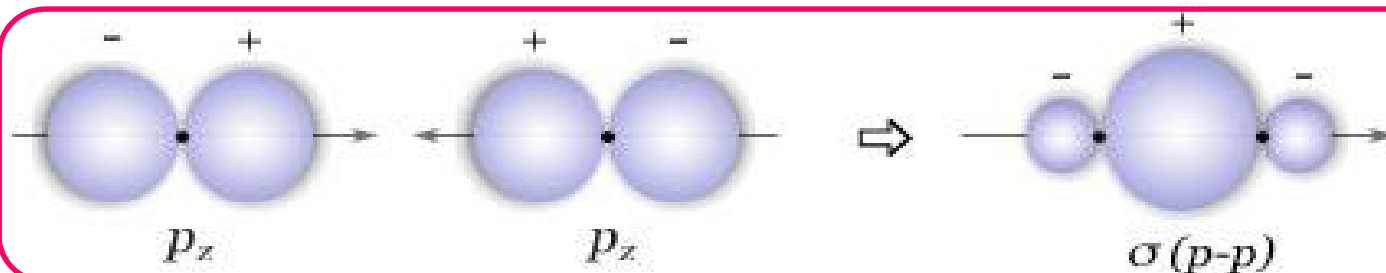
s-p



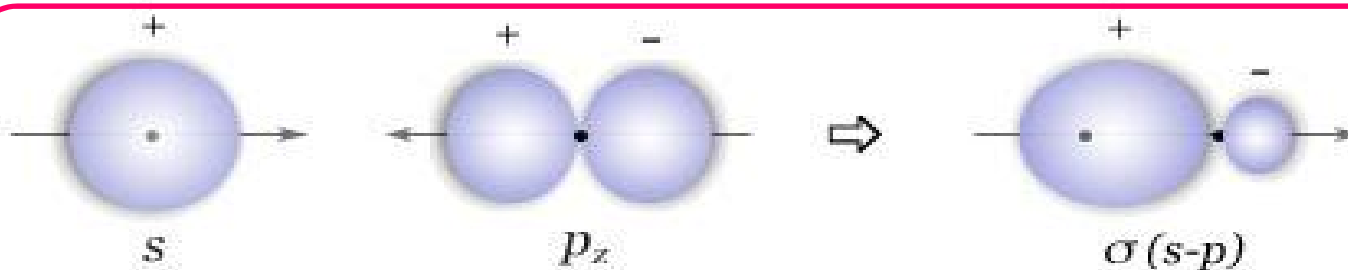
p-p



H - H



Cl - Cl

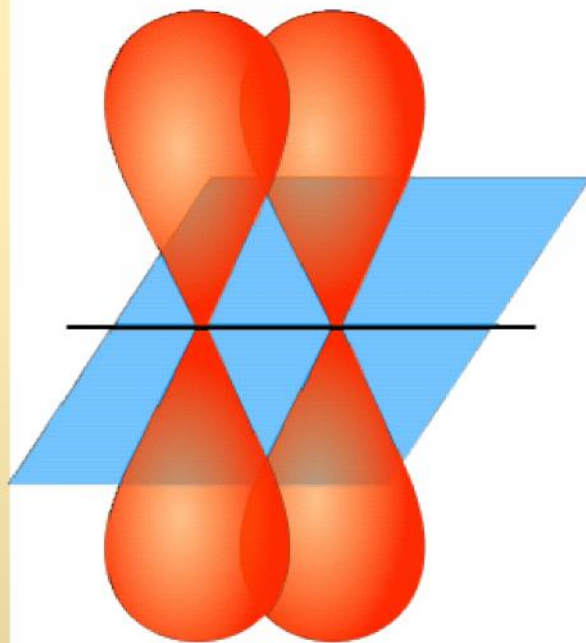


H - Cl

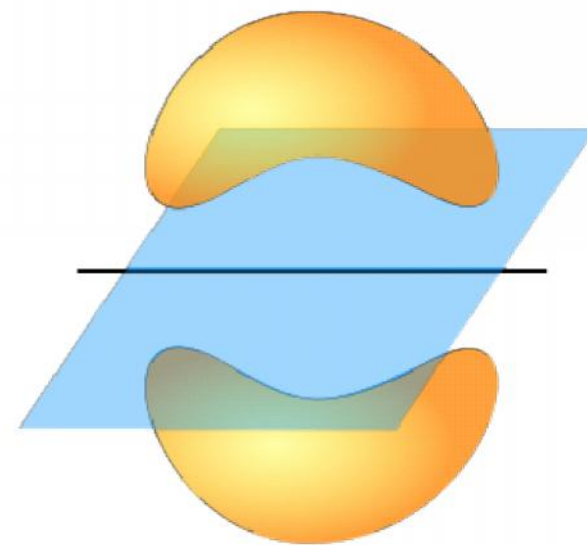
❖ Xen phủ trực hông (bên)



Liên kết pi p



p-p



Ví dụ:

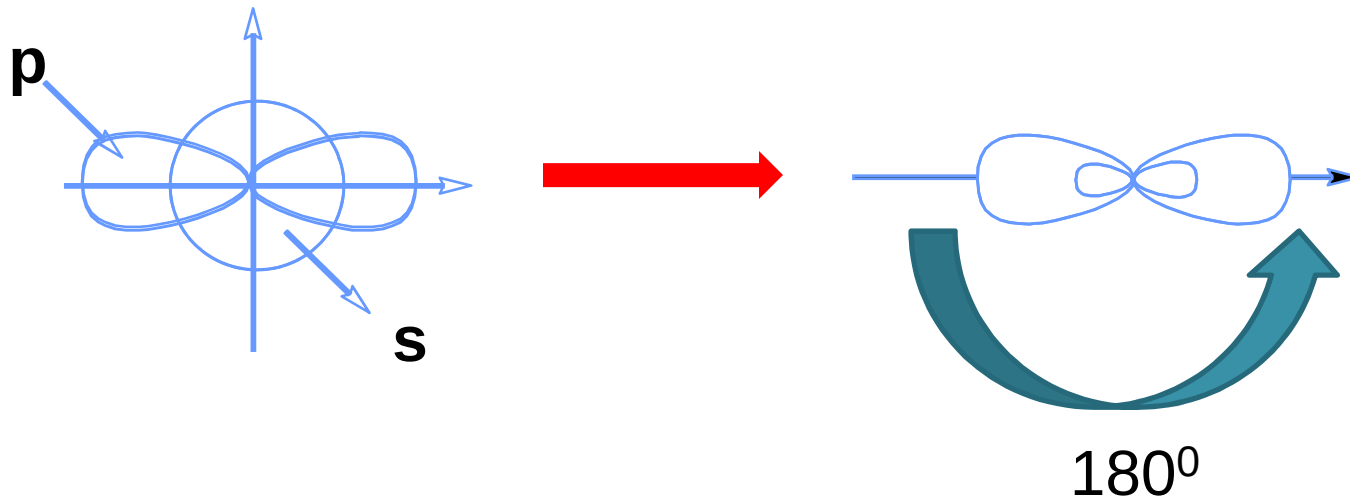
Xác định công thức cấu tạo (số bậc liên kết, loại liên kết, góc hóa trị) của các phân tử sau: F_2 , O_2 , N_2 , H_2O .

Thuyết lai hóa các orbital nguyên tử

- Trước khi tham gia liên kết, các orbital s, p, d tổ hợp lại với nhau để tạo ra các orbital lai hóa.
- Các orbital lai hóa có năng lượng, hình dạng và kích thước giống nhau.
- Có bao nhiêu AO tham gia lai hóa thì có bấy nhiêu AO lai hóa tạo thành, và bố trí đối xứng trong không gian.
- Các kiểu lai hóa sp^3 , sp^2 , sp , sp^3d , sp^3d^2

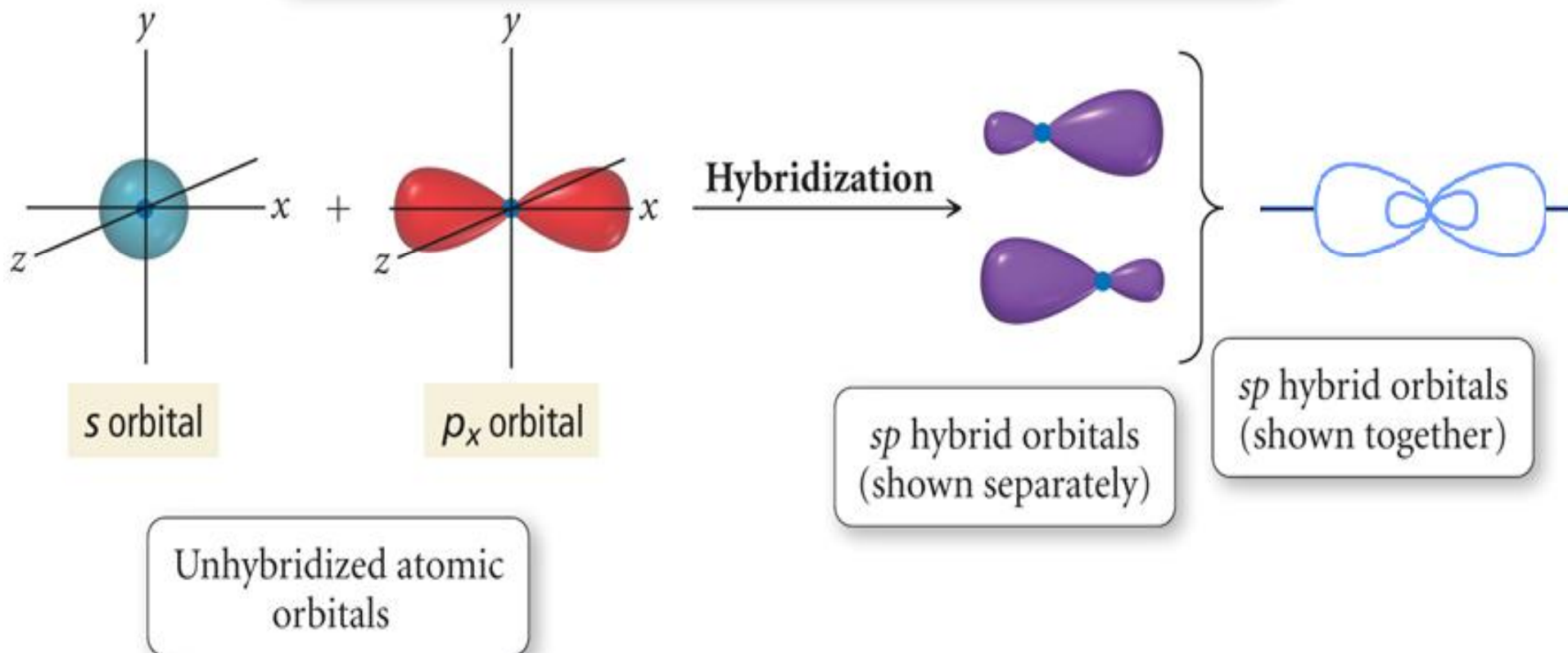
Lai hóa sp

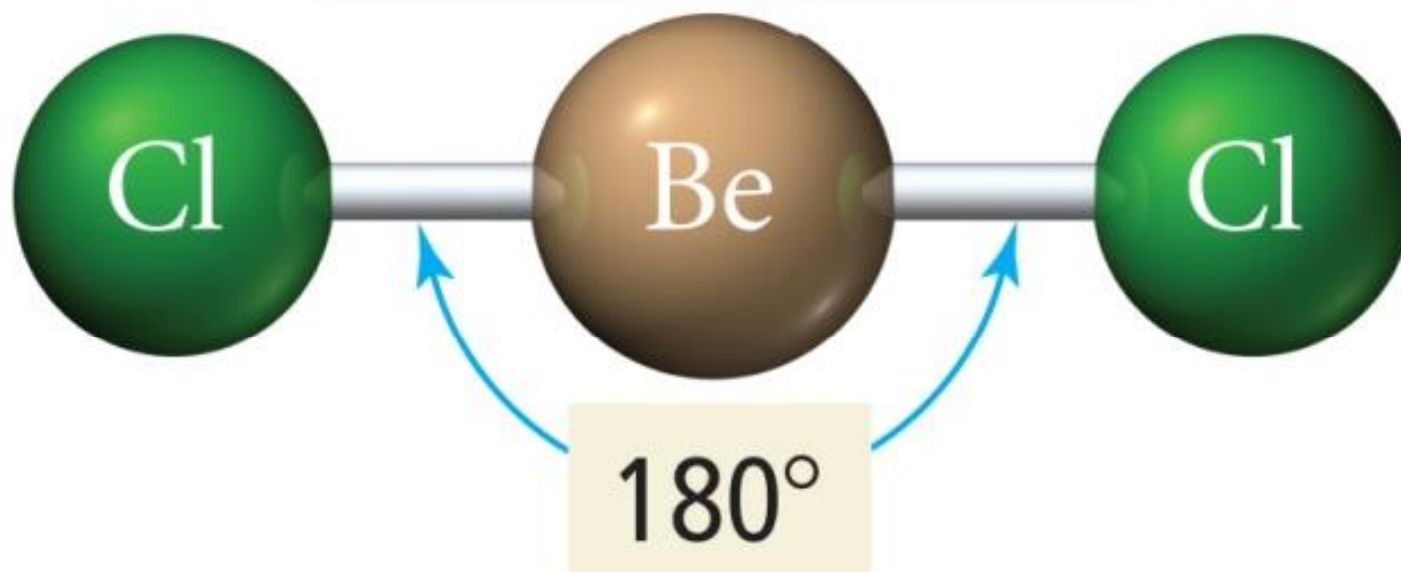
- ❖ Sự tổ hợp của 1 orbital s và 1 orbital p để hình thành 2 orbital sp.
- ❖ 2 orbital sp phân bố đối xứng có cùng trục nằm trên một đường thẳng (180°)



Formation of sp Hybrid Orbitals

One s orbital and one p orbital combine to form two sp orbitals.

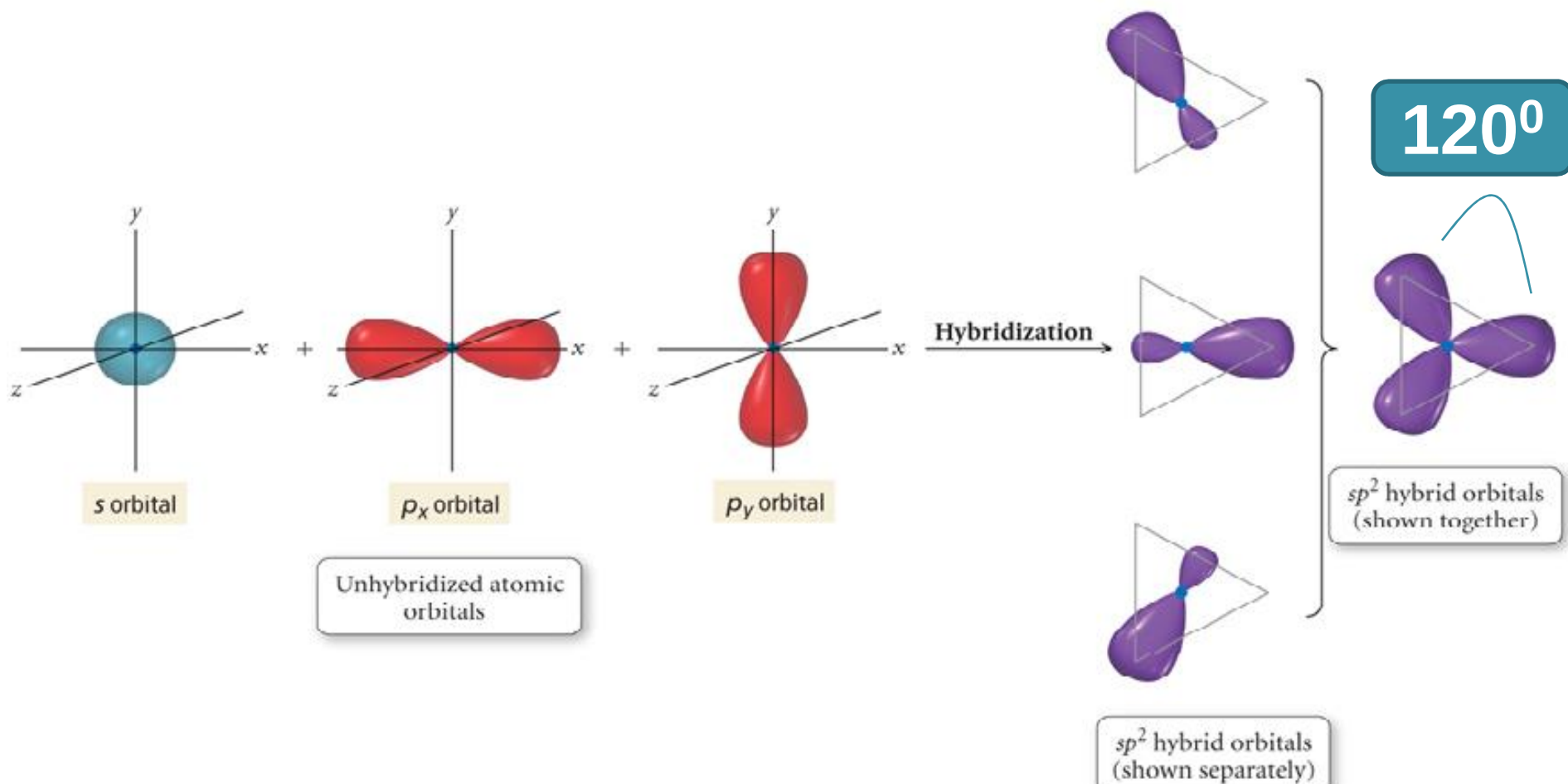


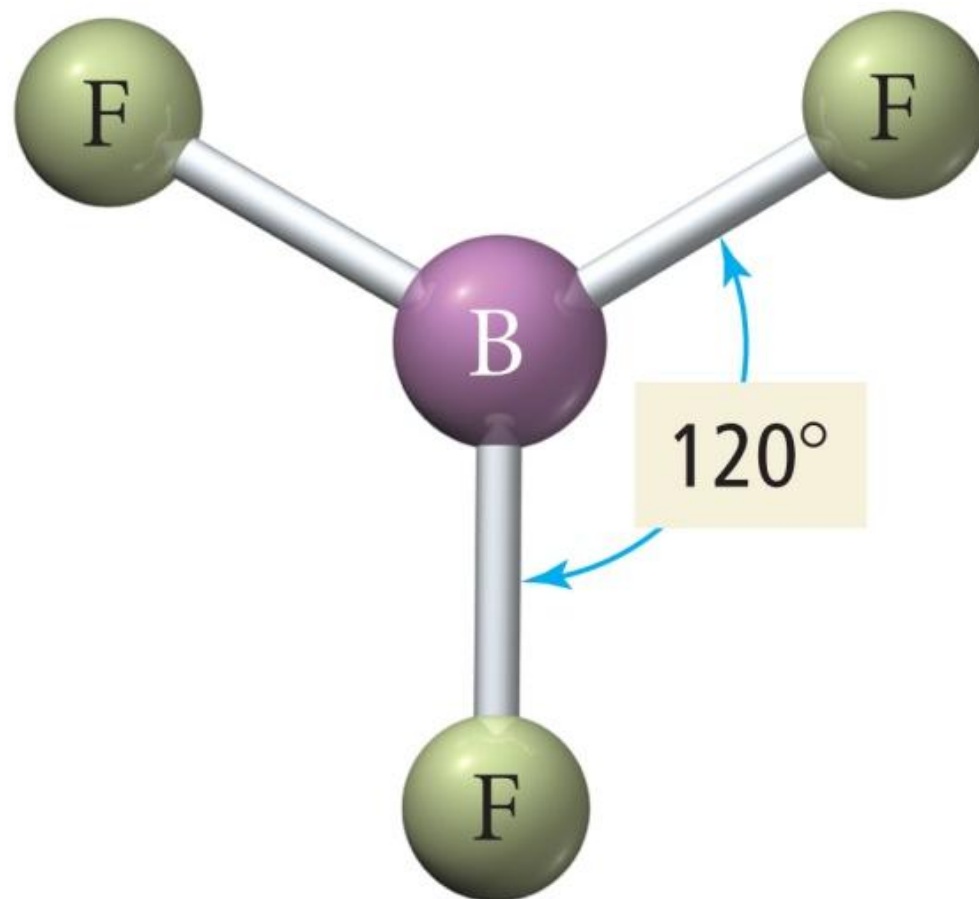


Lai hóa sp^2

Formation of sp^2 Hybrid Orbitals

One s orbital and two p orbitals combine to form three sp^2 orbitals.

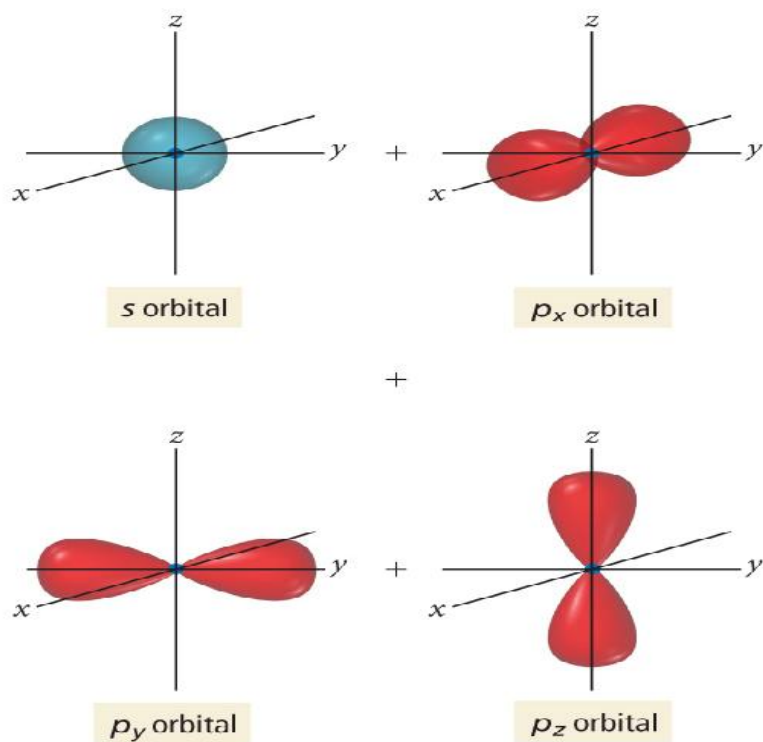




Lai hóa sp^3

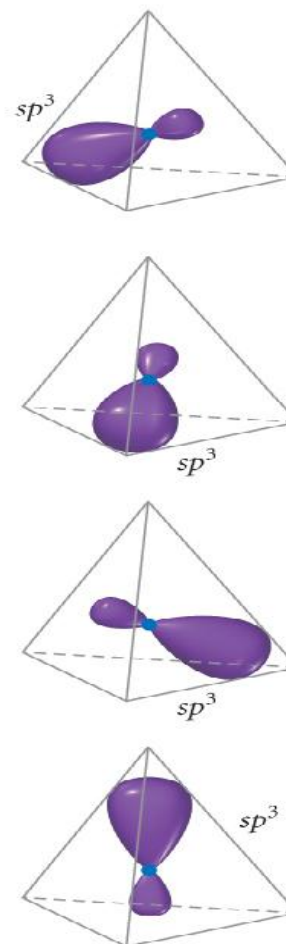
Formation of sp^3 Hybrid Orbitals

One s orbital and three p orbitals combine to form four sp^3 orbitals.



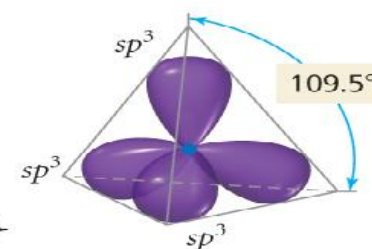
Unhybridized
atomic orbitals

Hybridization $\rightarrow$



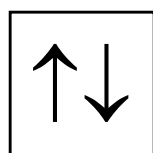
sp^3 hybrid orbitals
(shown separately)

109,5°

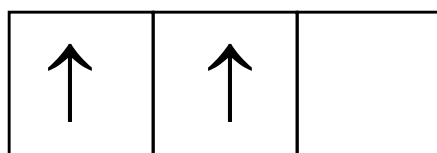


sp^3 hybrid orbitals
(shown together)

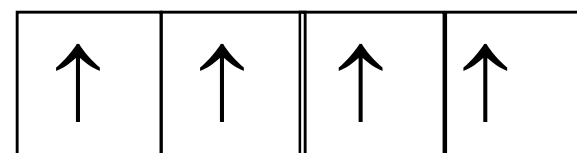
C



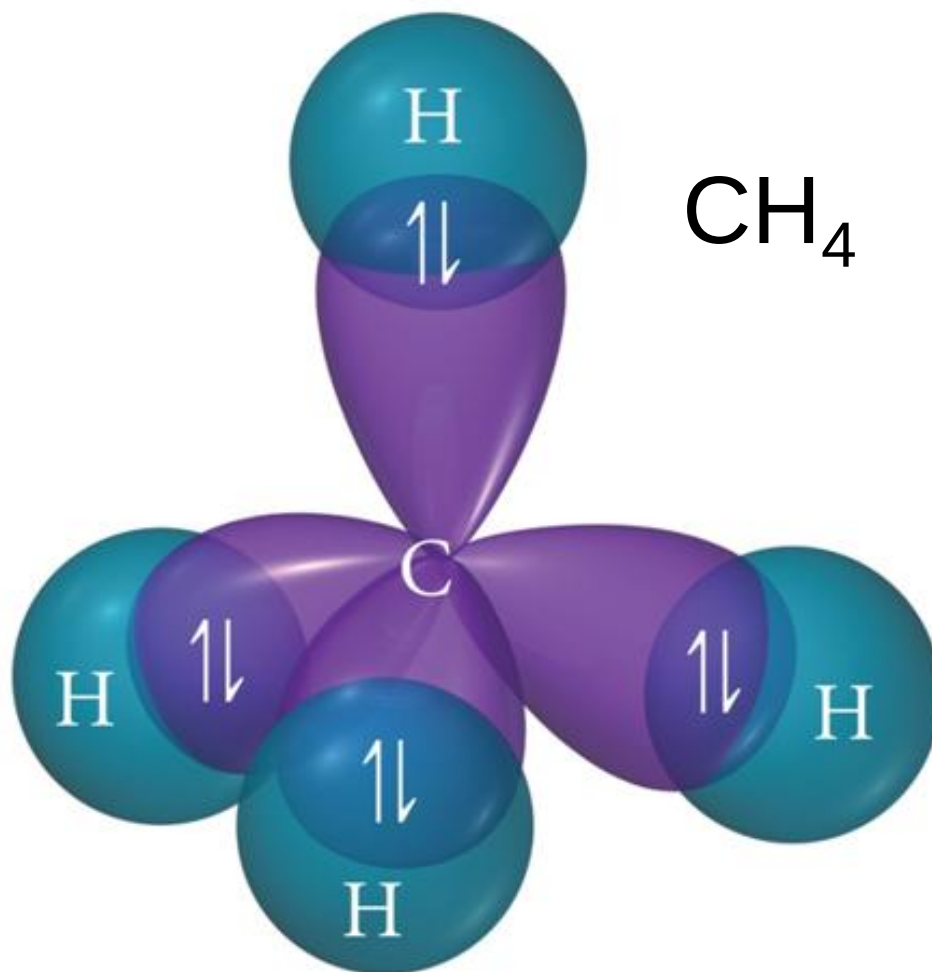
$2s$



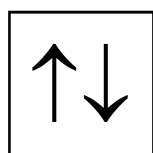
$2p$



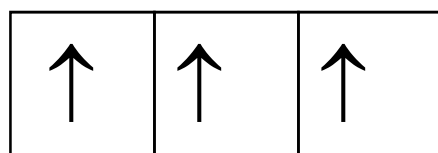
$2sp^3$



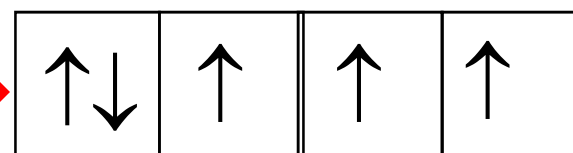
N



2s

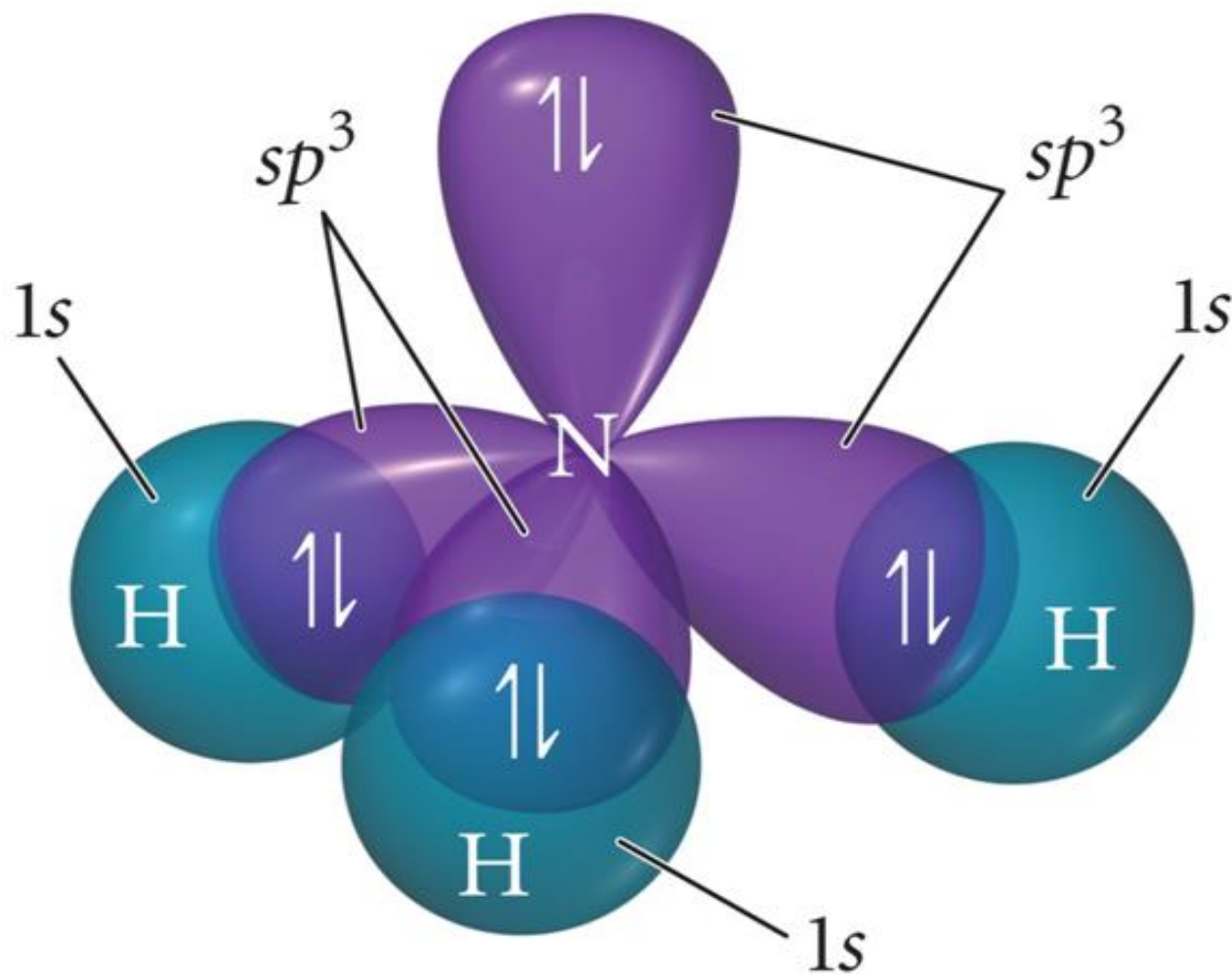


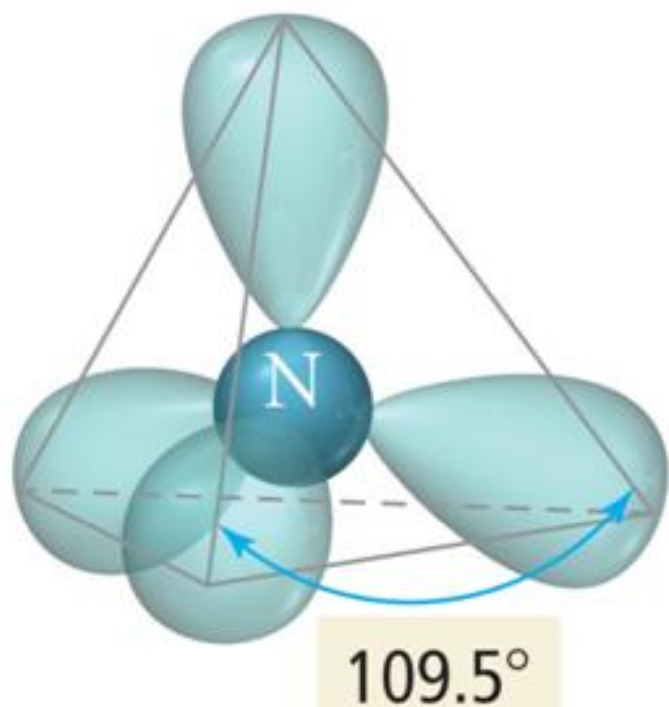
2p



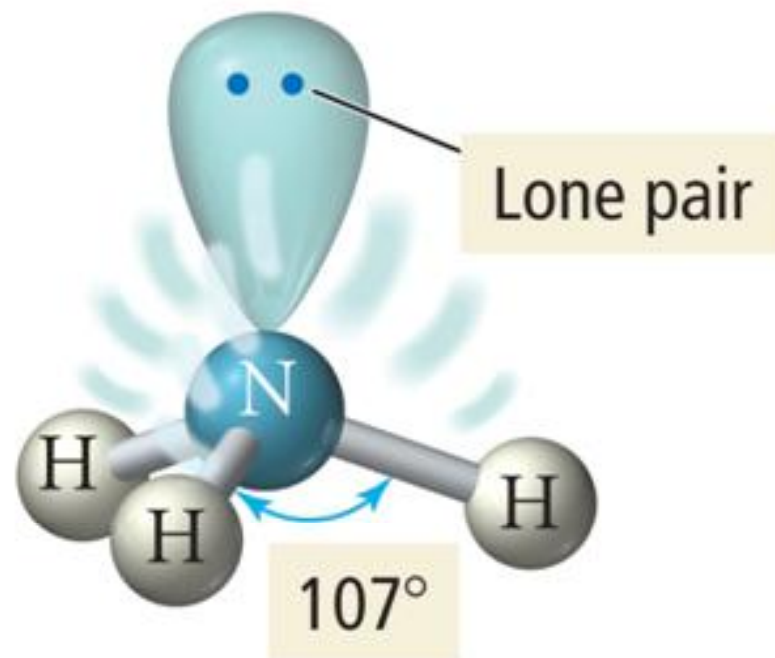
2sp³

NH₃





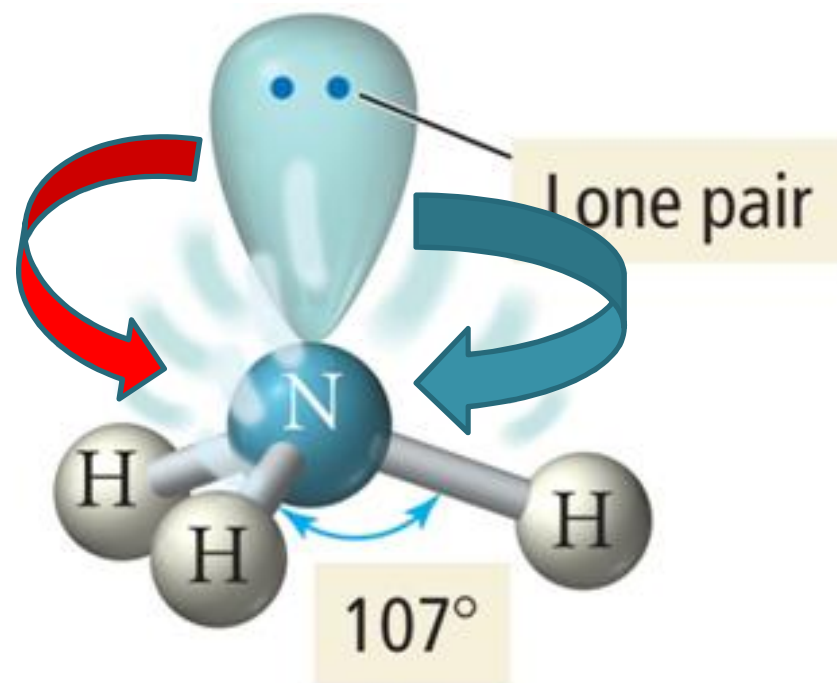
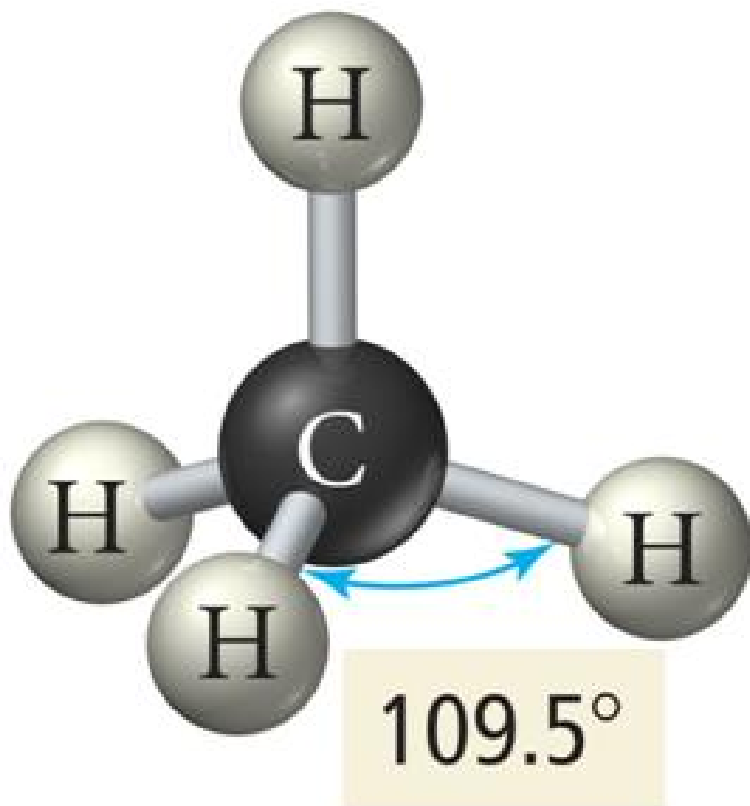
Ideal tetrahedral
geometry

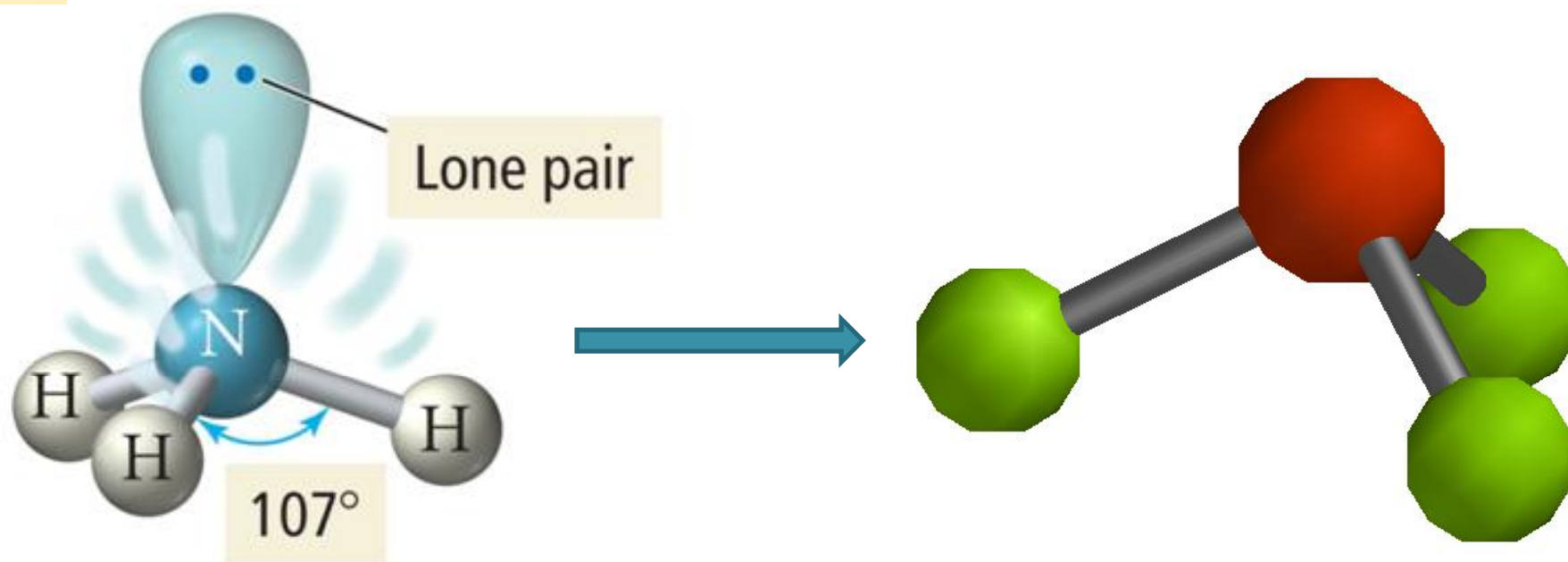


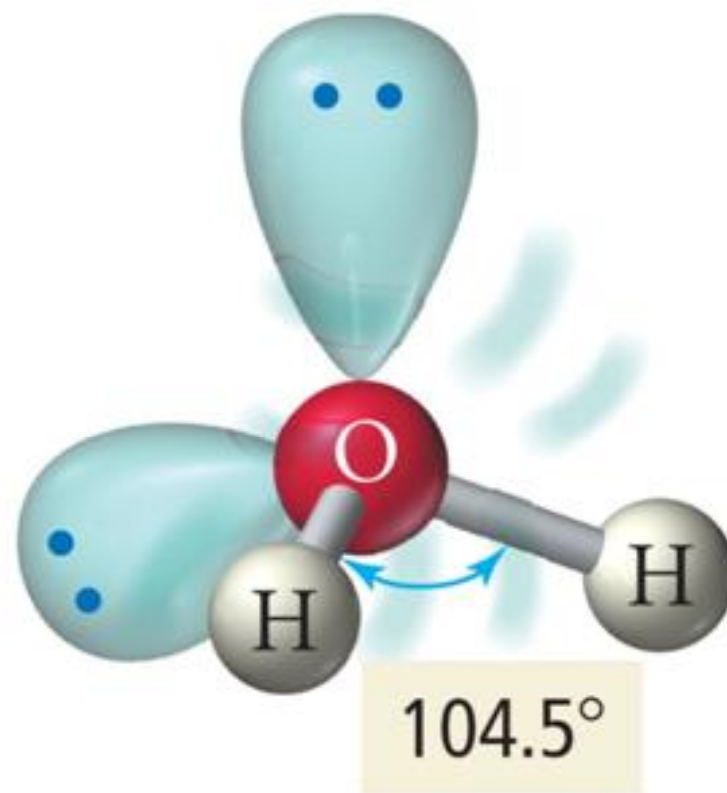
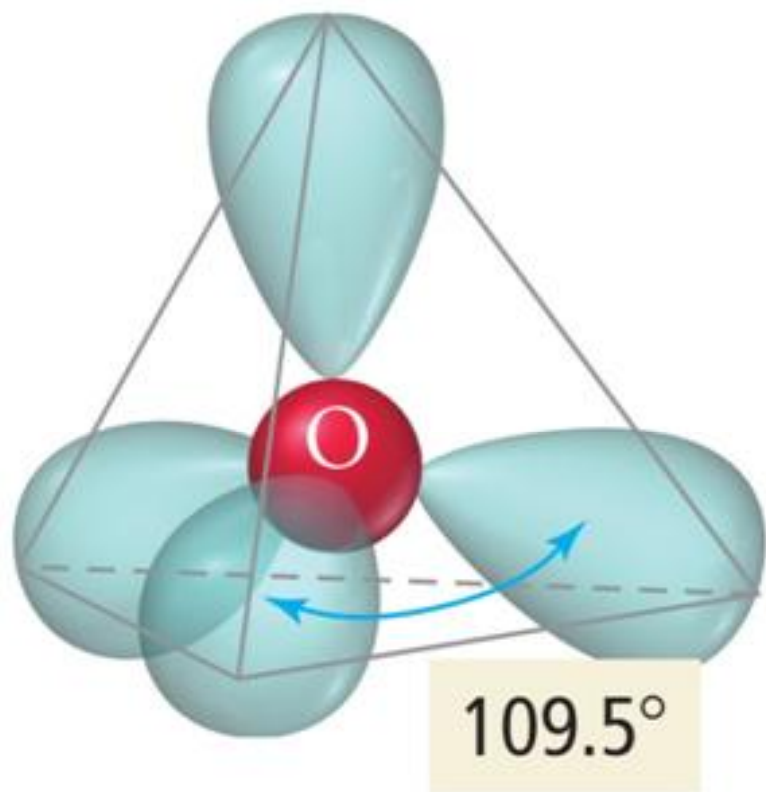
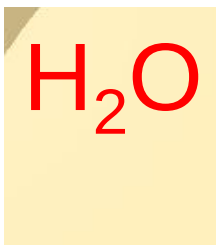
Actual molecular
geometry

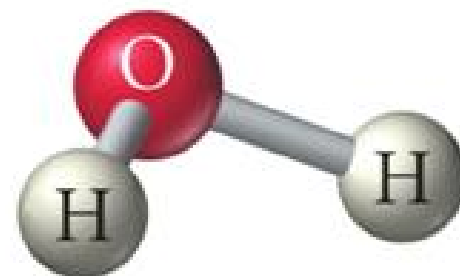
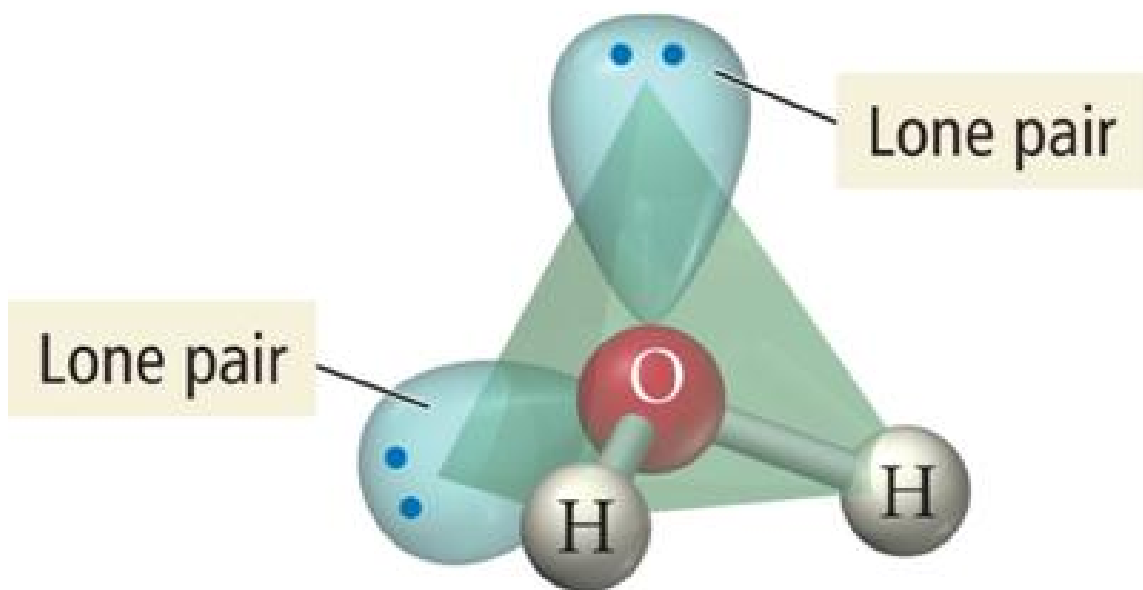
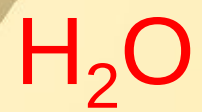
Thuyết đẩy nhau giữa các cặp electron hóa trị (VSEPR)

NH_3



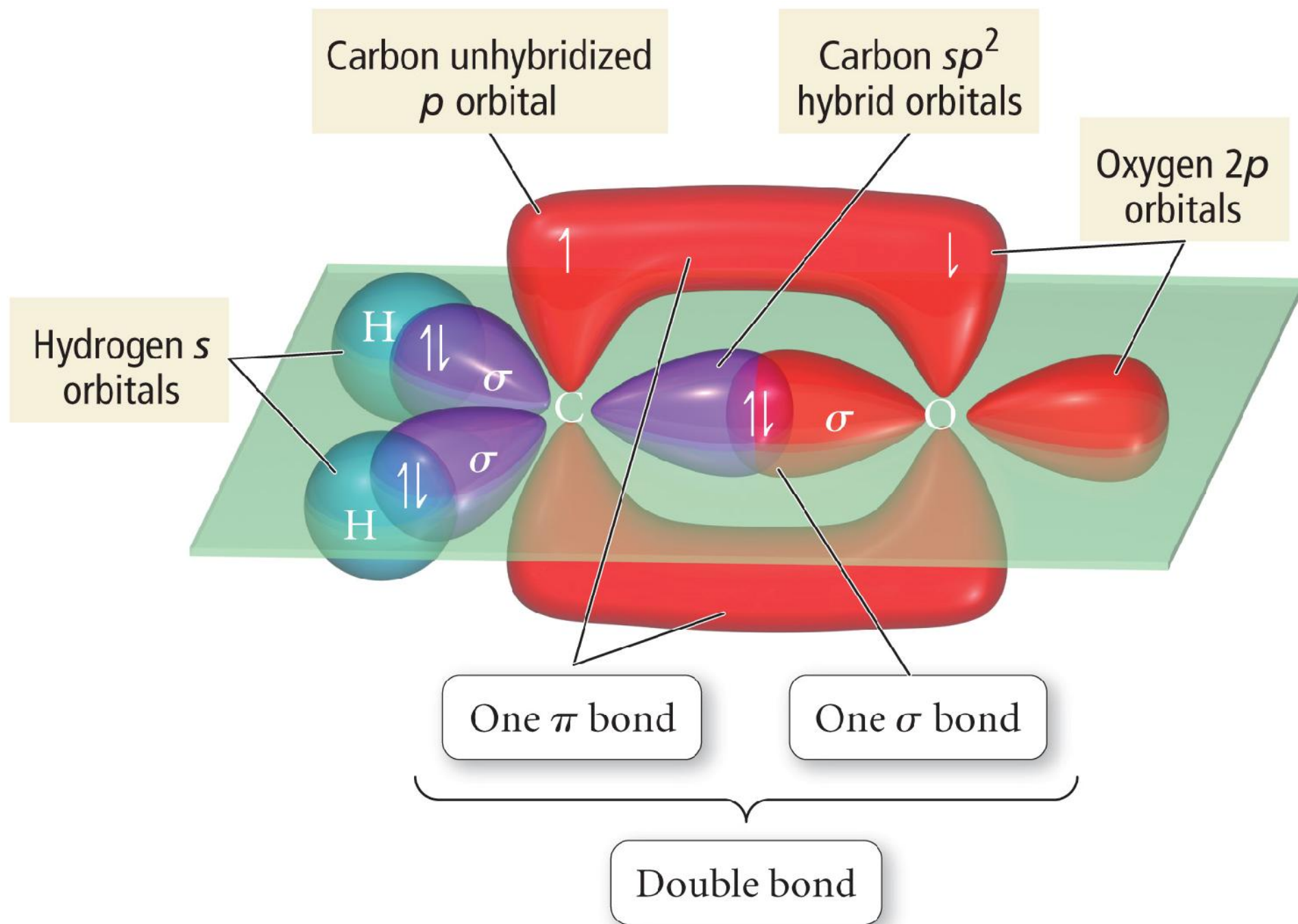






Ví dụ:

Xác định trạng thái lai hóa của nguyên tử C và công thức cấu tạo của HCHO.



Dự đoán trạng thái lai hóa

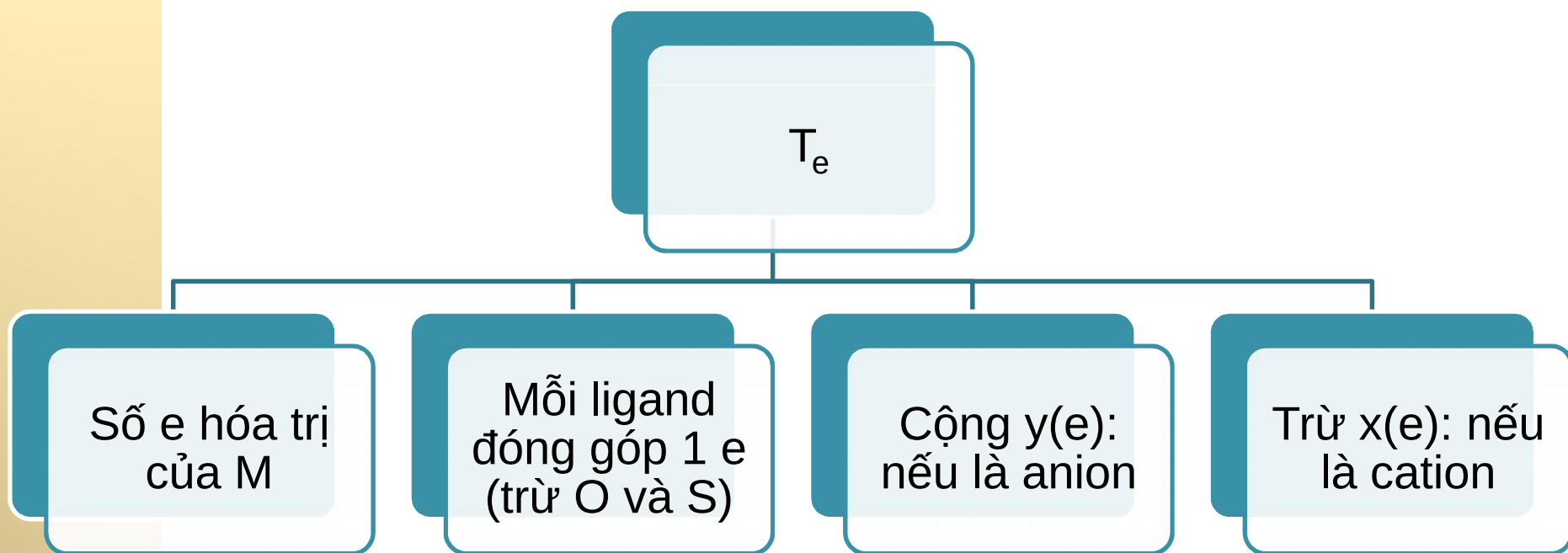
SỐ ĐIỆN TỬ (T_e)	TRẠNG THÁI LAI HÓA
4	sp
6	sp ²
8	sp ³
10	sp ³ d
12	sp ³ d ²

Tính T_e

Xét các hợp chất: ML_n , ML_n^{x+} , ML_n^{y-}

M: nguyên tử trung tâm.

L: các nguyên tử biên (ligand)



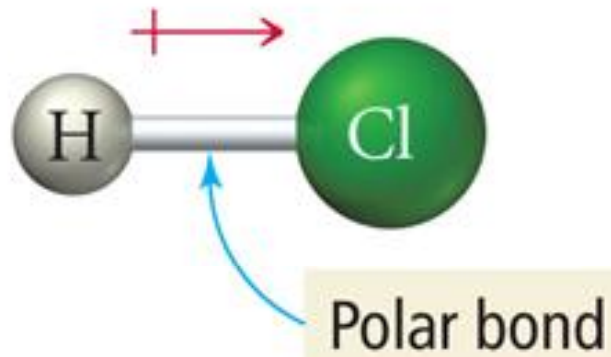
Ví dụ

PHÂN TỬ/ ION	NGUYÊN TỬ TRUNG TÂM	T_e	TRẠNG THÁI LẠI HÓA
CO_2	C		
NO_2	N		
NH_4^+	N		
NH_2^-	N		
NO_2^-	N		
CO_3^{2-}	C		

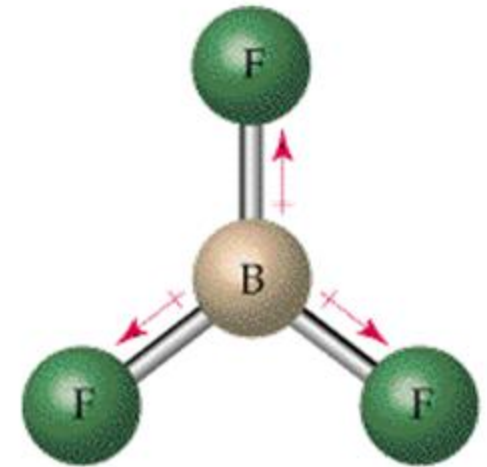
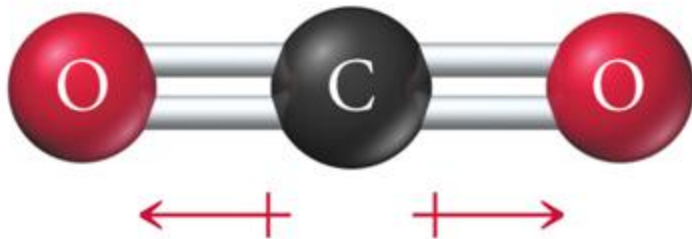

$$\text{Bac lien ket} = \frac{\text{Tong so e tham gia lien ket}}{\text{So lien ket } \sigma * 2}$$

Độ phân cực của phân tử

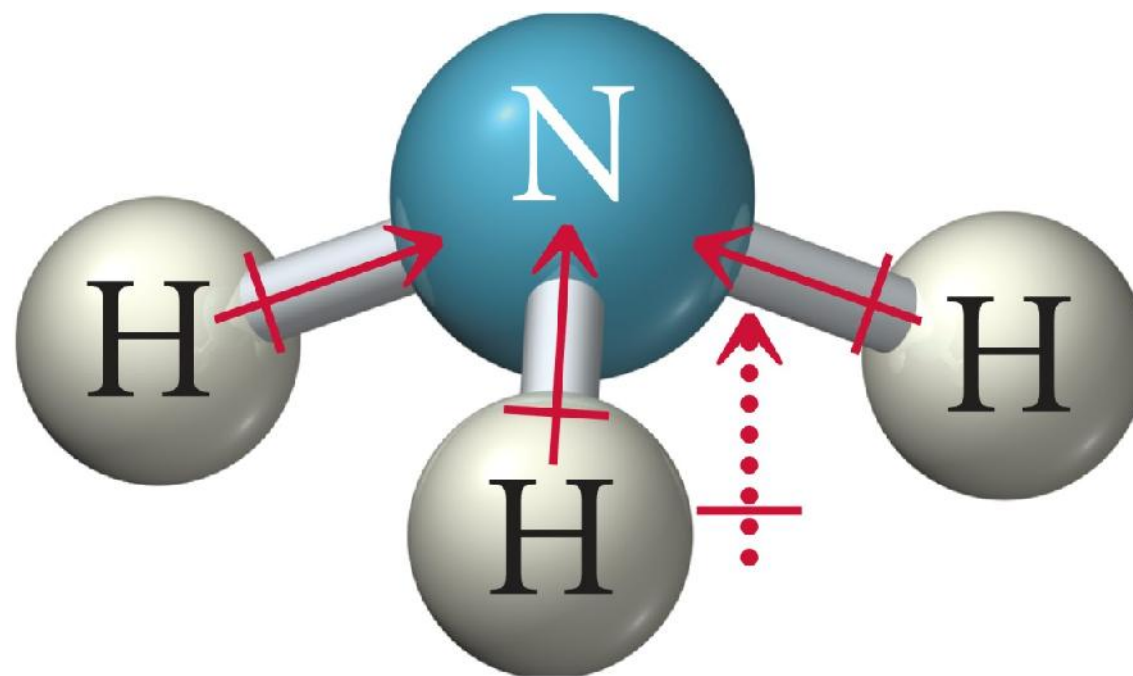
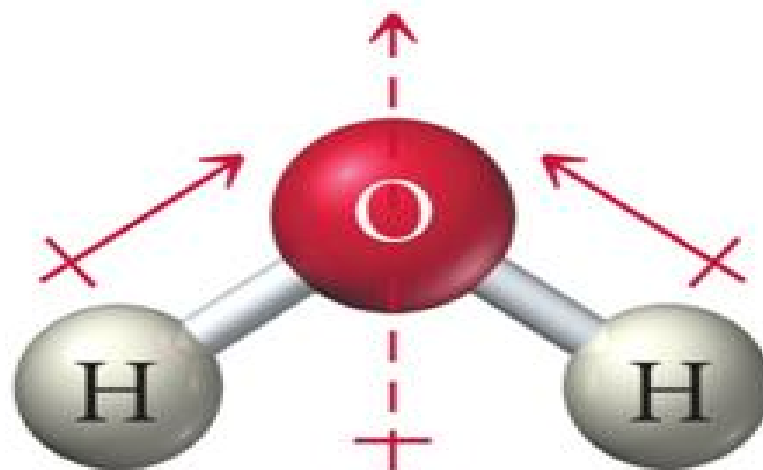
Momen lưỡng cực



No net dipole moment



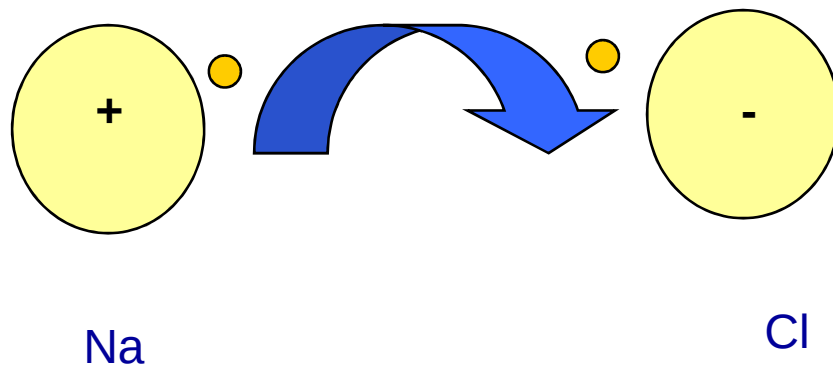
Nonpolar



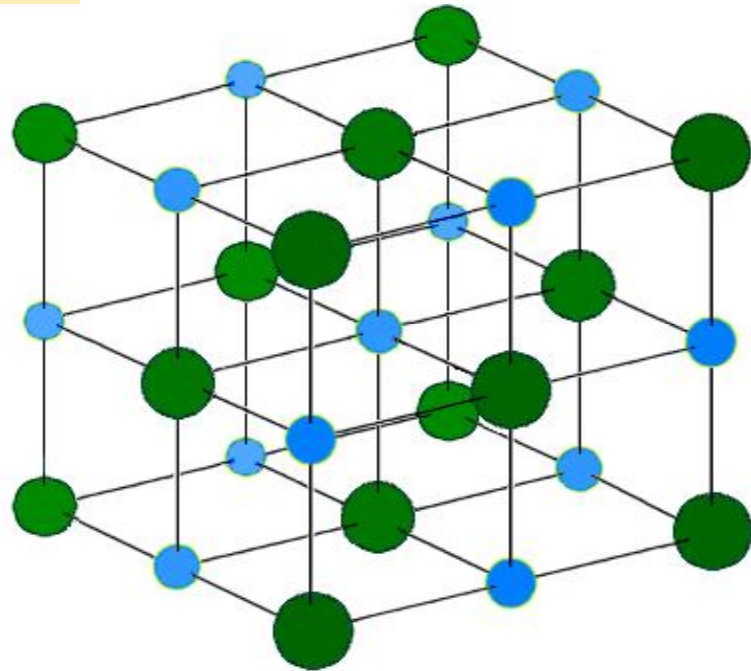
Copyright © 2008 Pearson Prentice Hall, Inc.

3. LIÊN KẾT ION

Liên kết ion là loại liên kết được tạo thành nhờ lực hút tĩnh điện giữa các ion trái dấu

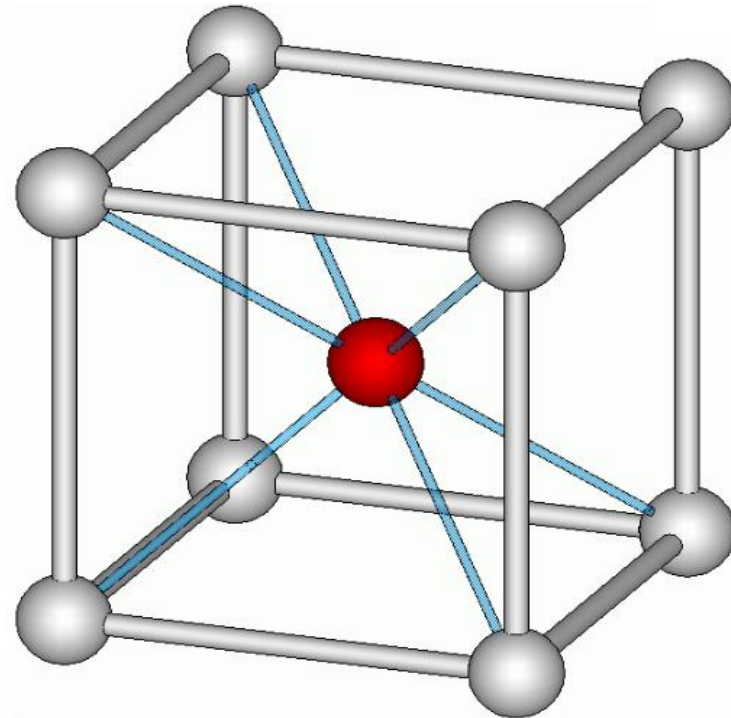


Mạng tinh thể ion



NaCl

Lập phương tâm diện



CsCl

Lập phương tâm khối

QUAN HỆ GIỮA NĂNG LƯỢNG MẠNG LƯỚI VÀ NHIỆT ĐỘ SÔI, NHIỆT ĐỘ NÓNG CHẢY

Tinh thể	NaF	NaCl	NaBr	NaI
$U_{ml}[\text{kcal/mol}]$	217	183	176	164
Nhiệt độ sôi [°C]	1695	1441	1393	1300
Nhiệt độ n.chảy [°C]	993	801	766	665

So sánh nhiệt độ nóng chảy NaCl và MgO

MgO

NaCl

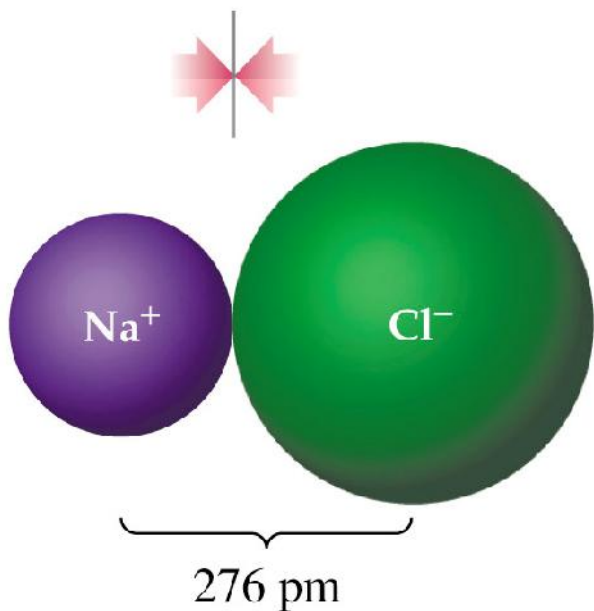
$T_{nc} = 2500^{\circ}\text{C}$

$T_{nc} = 800^{\circ}\text{C}$

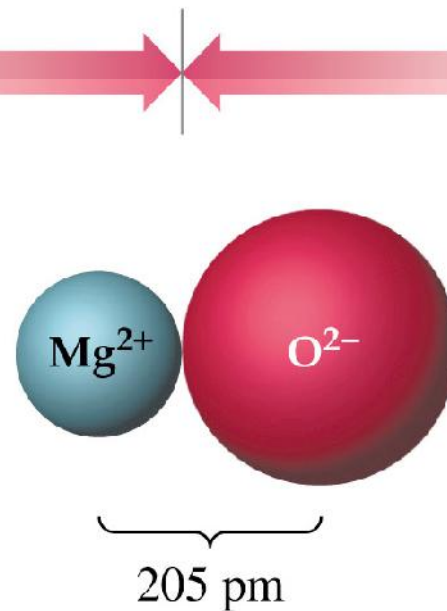
$\text{Mg}^{2+} \text{O}^{2-}$

$\text{Na}^{+} \text{Cl}^{-}$

Attractive force



Attractive force



Copyright © 2005 Pearson Prentice Hall, Inc.

So sánh LK Cộng hóa trị & LK ion

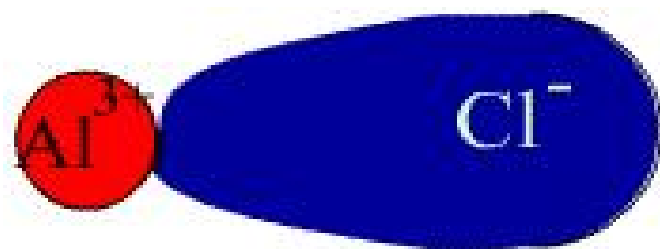
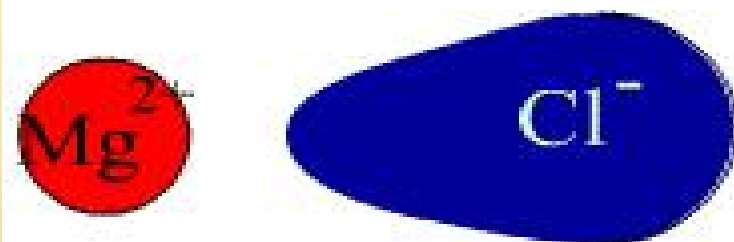
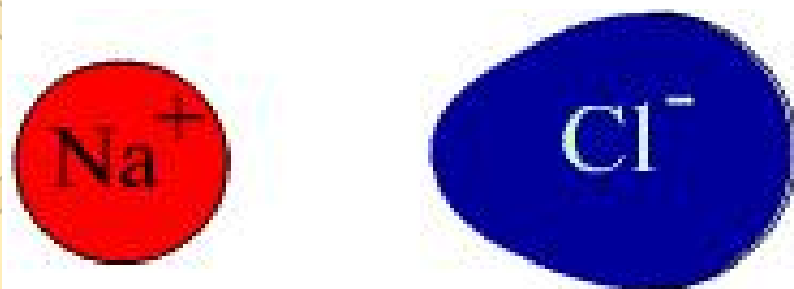
	LK CỘNG HÓA TRỊ	LK ION
	$\Delta\chi < 1,7$	$\Delta\chi > 1,7$
TÍNH CHẤT	Có tính định hướng	Bất định hướng
	Có tính bão hòa	Bất bão hòa

Sự phân cực ion

Sự chênh lệch độ âm điện của các nguyên tố càng lớn tính ion của hợp chất càng cao.

$\Delta\chi$	Độ ion %	$\Delta\chi$	Độ ion %	$\Delta\chi$	Độ ion %
0,2	1	1,2	30	2,2	70
0,4	4	1,4	39	2,4	76
0,6	9	1,6	47	2,6	82
0,8	15	1,8	55	2,8	86
1,0	22	2,0	63	3,0	89

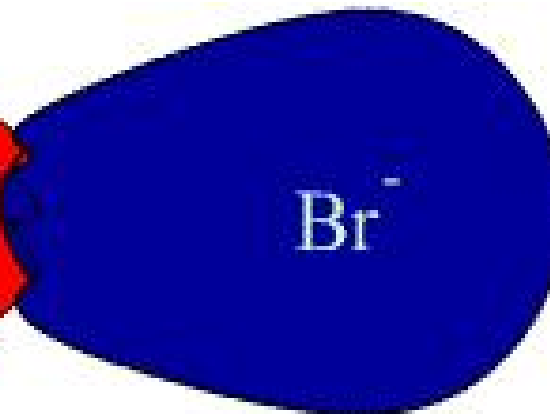
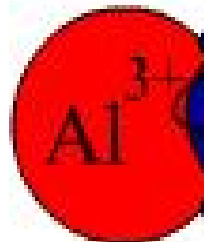
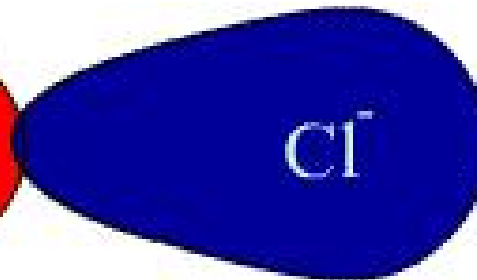
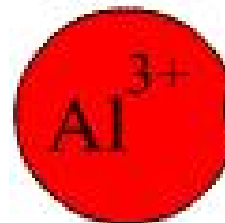
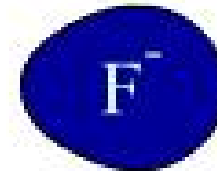
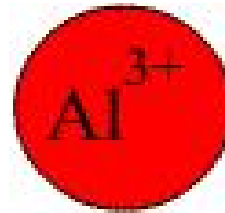
Điện tích cation càng lớn, bán kính cation càng nhỏ, tác dụng phân cực càng mạnh.



Tính
cộng
hóa
trị
tăng
dần

Bán kính anion càng lớn, anion càng dễ bị biến dạng

Tính
cộng
hóa
trị
tăng
dần



Ảnh hưởng của sự phân cực ion đến tính chất các hợp chất

- Sự phân cực ion làm **giảm độ bền tinh thể** của hợp chất

Chất	LiF	LiCl	LiBr	LiI
Nhiệt độ nóng chảy ($^{\circ}\text{C}$)	848	607	550	469

- Sự phân cực ion làm **giảm độ điện ly** của hợp chất ion trong dung dịch

4. LIÊN KẾT HYDRO

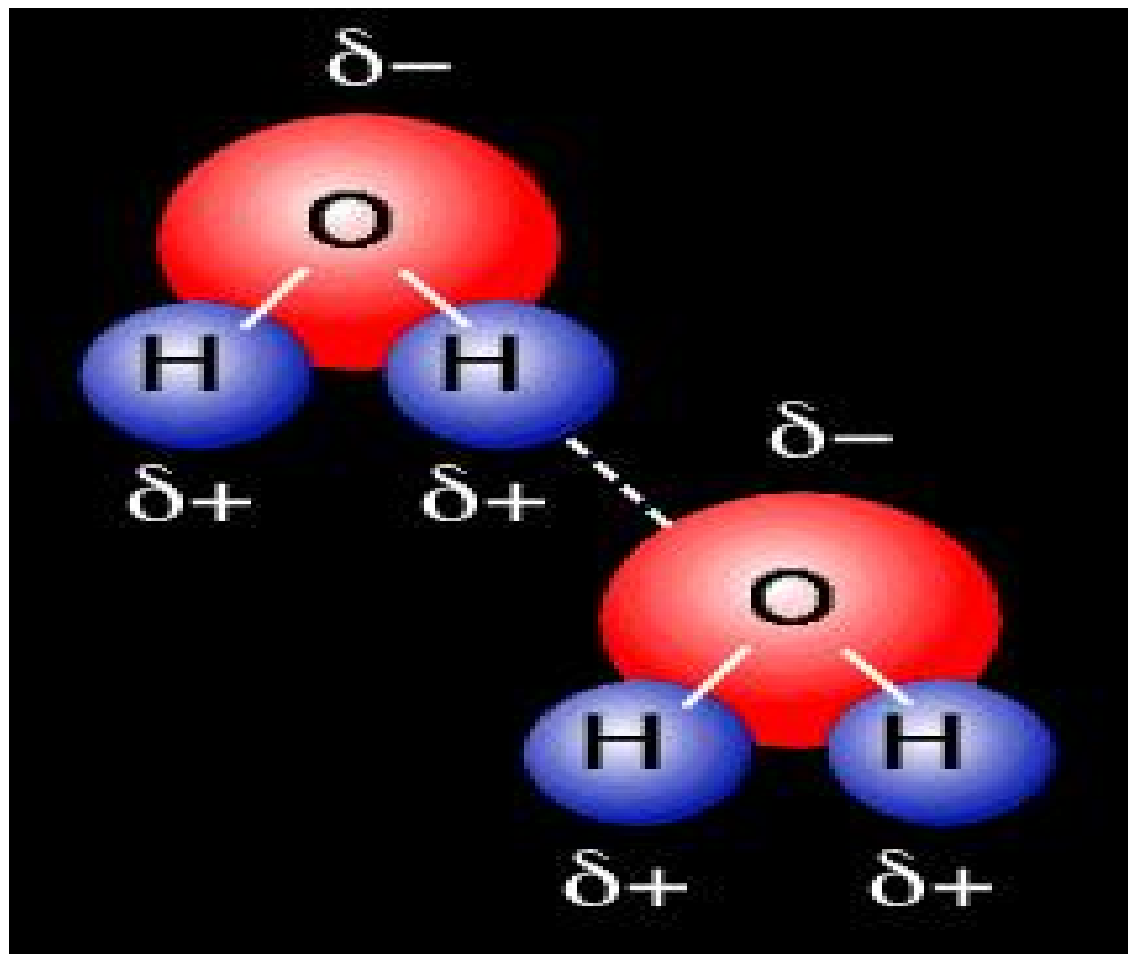
Là liên kết được hình thành bởi ***nguyên tử H linh động*** (H liên kết với 1 nguyên tử có độ âm điện lớn) với 1 ***nguyên tử có độ âm điện lớn*** khác.



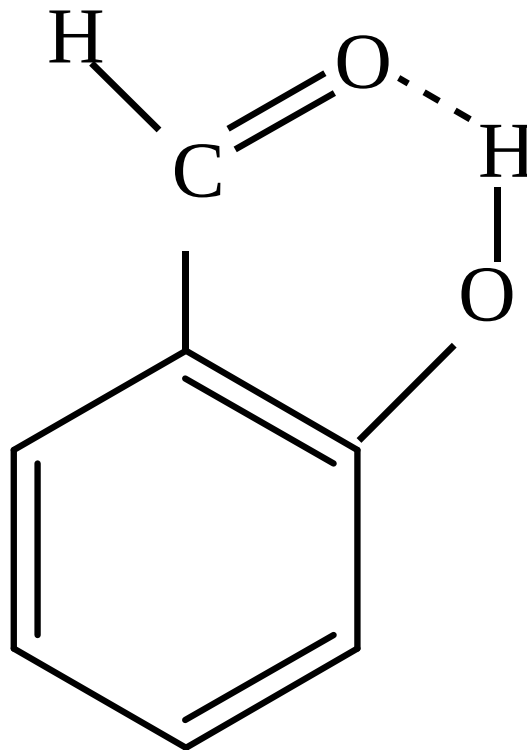
X, Y là các nguyên tử có độ âm điện lớn (***F, O, Cl, N***)

PHÂN LOẠI

❖ Liên kết hydro **liên** phân tử



❖ Liên kết hydro **nội** phân tử



andehit salyxilic

Ảnh hưởng của liên kết Hydro

➤ *Liên kết Hydro liên phân tử* làm tăng **hiệt độ sôi**, **hiệt độ nóng chảy** của hợp chất

o $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ có t_s , t_{nc} cao hơn CH_3OCH_3

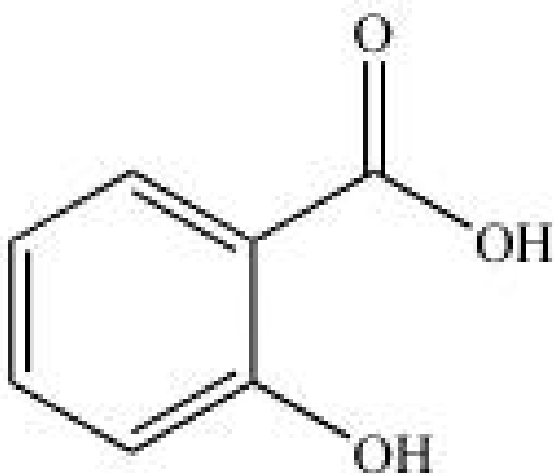
o CH_3COOH có t_s , t_{nc} cao hơn HCOOCH_3

➤ ***Liên kết Hydro liên phân tử*** với dung môi làm tăng **độ tan** của hợp chất trong dung môi đó.

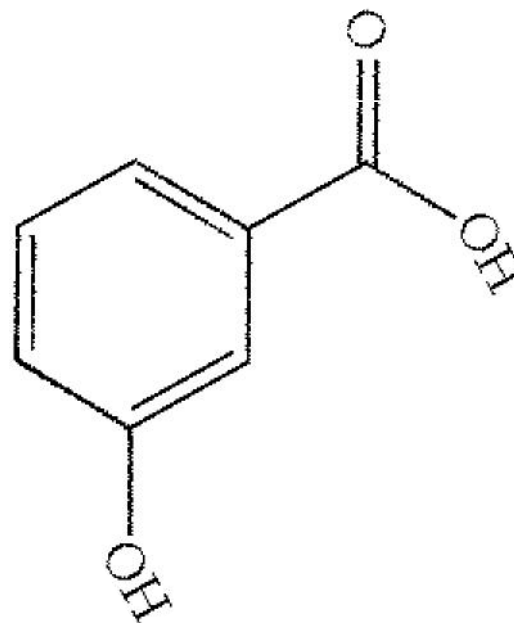
o $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ tan trong H_2O tốt hơn trong CH_3OCH_3

➤ ***Liên kết Hydro nội phân tử***

So sánh tính acid của 2 acid sau



Acid **ortho**-hydroxy benzoic



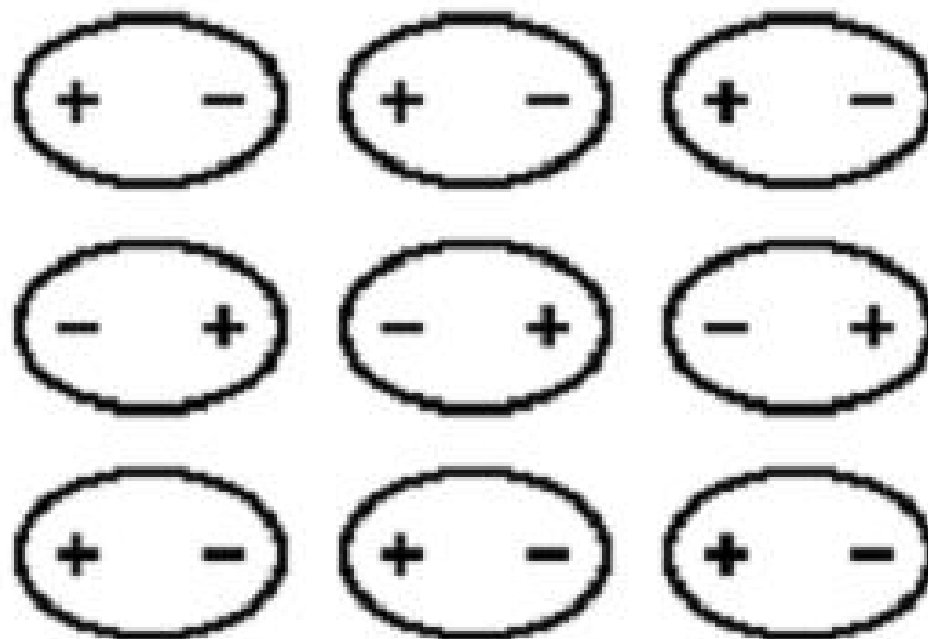
Acid **meta**-hydroxy benzoic

5. LIÊN KẾT VAN DER WALLS

- ❖ Là liên kết được hình thành giữa các phân tử trung hòa
- ❖ Có tính không định hướng, không bão hòa, không chọn lọc

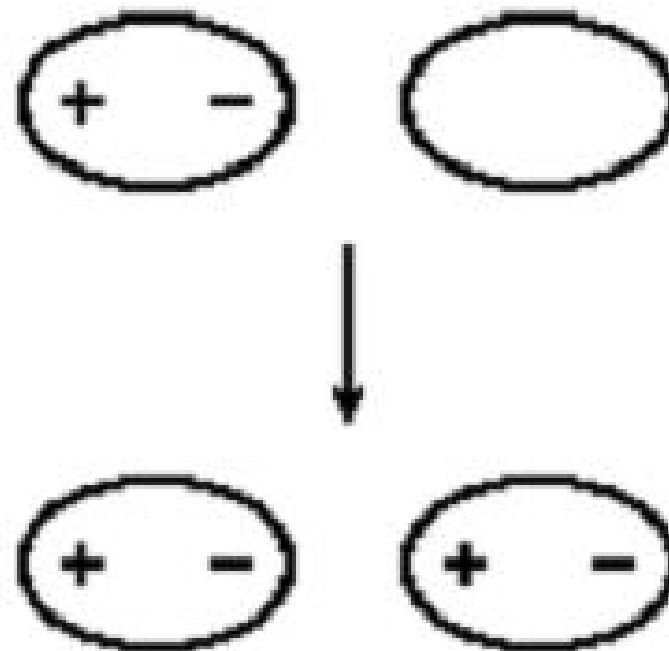
PHÂN LOẠI

❖ Tương tác định hướng



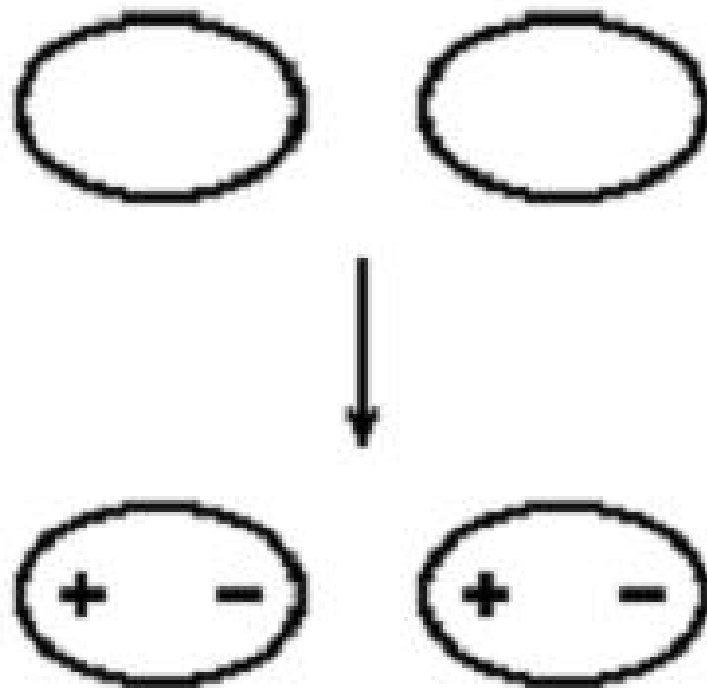
Tương tác định hướng

❖ Tương tác cảm ứng



Tương tác cảm ứng

❖ Tương tác khuếch tán



Tương tác khuếch tán

TÍNH CHẤT

- ❖ Lực định hướng > Lực cảm ứng > Lực khuếch tán
- ❖ Lực VDW càng lớn khi **kích thước** (khối lượng) càng lớn