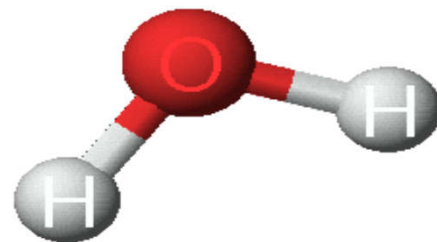
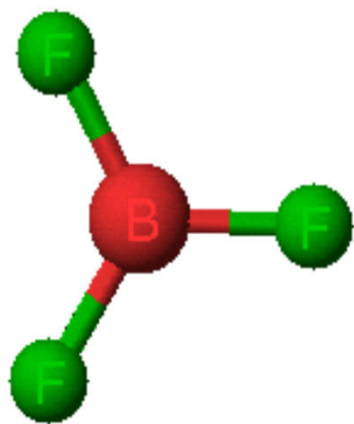


## CHƯƠNG III

### CHEMICAL BONDING



## LIÊN KẾT HÓA HỌC VÀ



## CẤU TẠO PHÂN TỬ

# NHỮNG KHÁI NIỆM CƠ BẢN VỀ LIÊN KẾT HÓA HỌC

- Bản chất của liên kết
- Một số đặc trưng liên kết
- Các loại liên kết

# Bản chất của liên kết

*Electron hoá trị -  $ns(\textcolor{red}{s})$ ,  $ns\ np(\textcolor{red}{p})$ ,  $(n-1)d\ ns(\textcolor{red}{d})$ ,  
 $(n-2)f\ (n-1)d\ ns(\textcolor{red}{f})$*

*Liên kết hoá học có bản chất điện (lực hút)*

# Một số đặc trưng liên kết

*Đường cong thế năng*

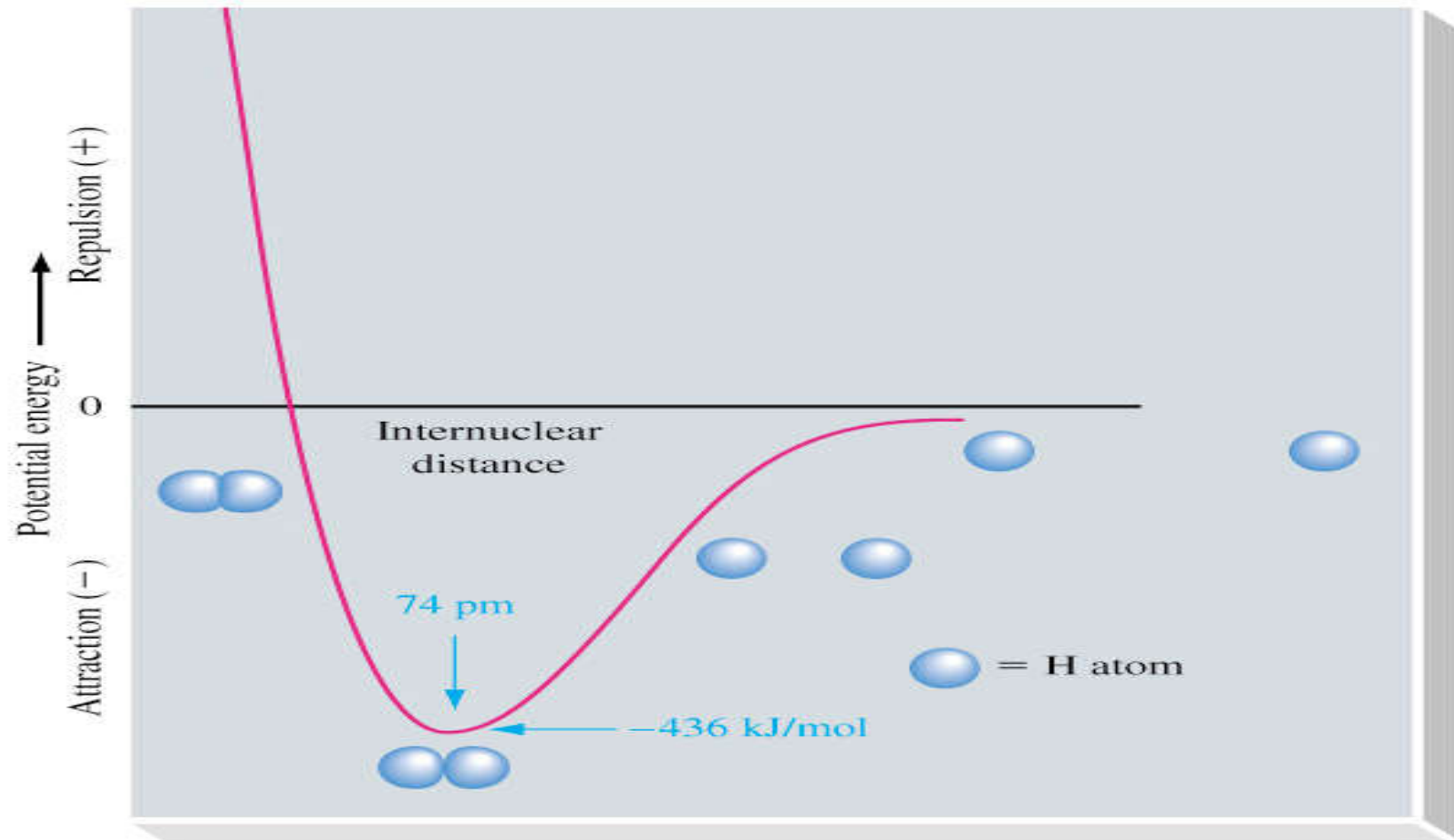
*Độ dài liên kết*

*Năng lượng liên kết*

*Bậc liên kết*

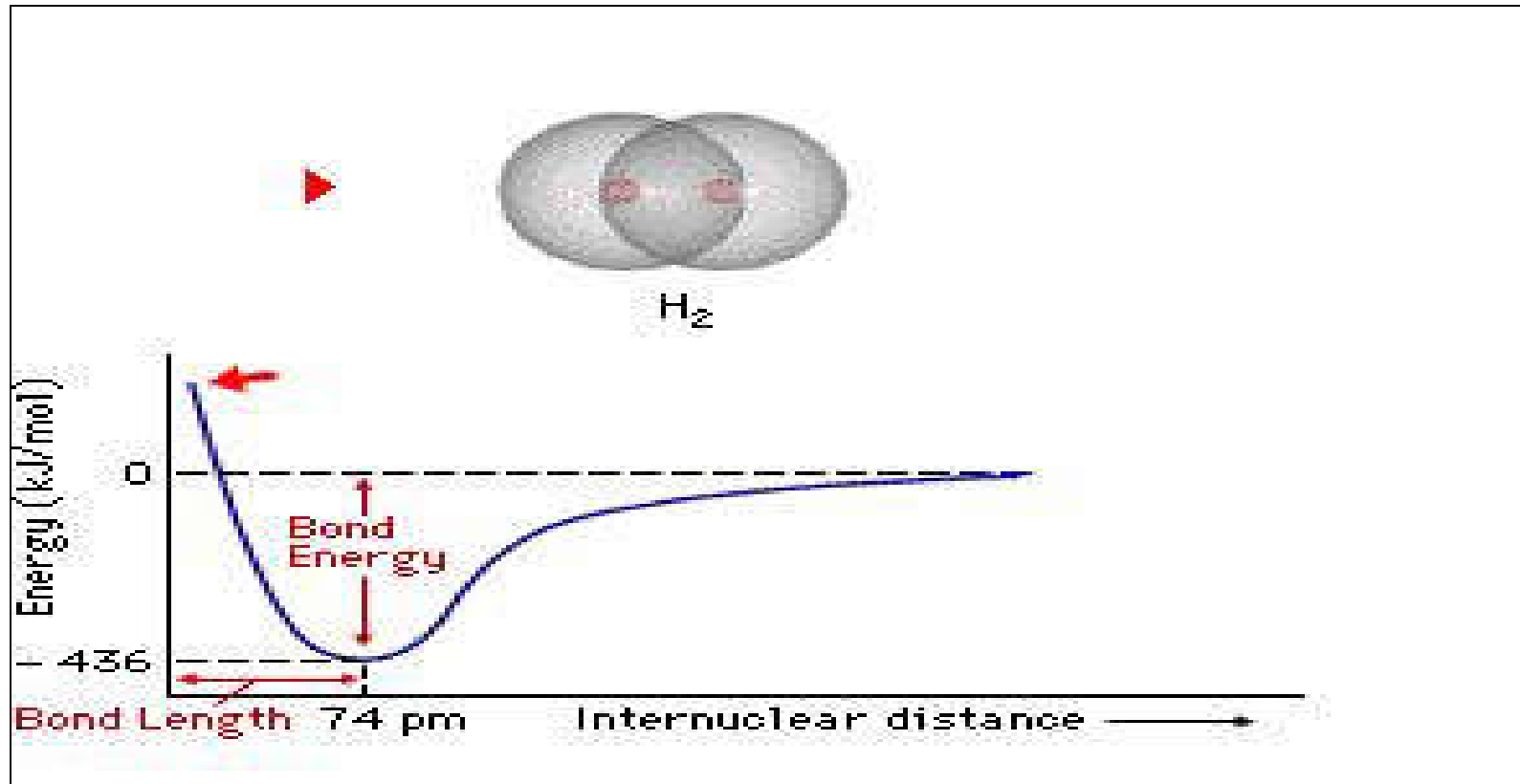
*Góc hóa trị*

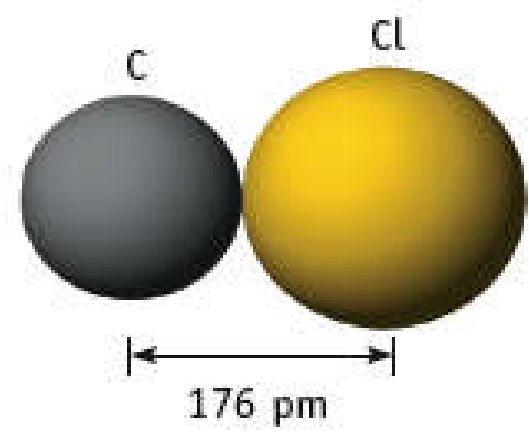
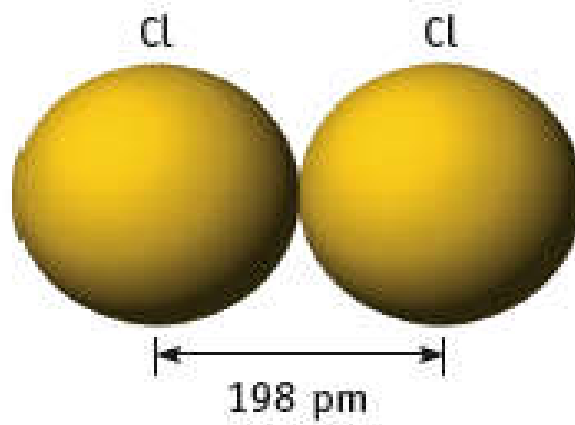
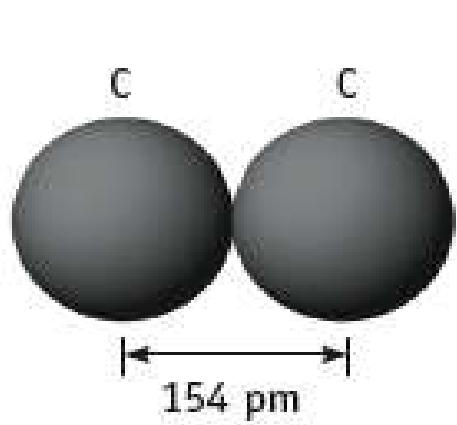
# Đường cong thế năng



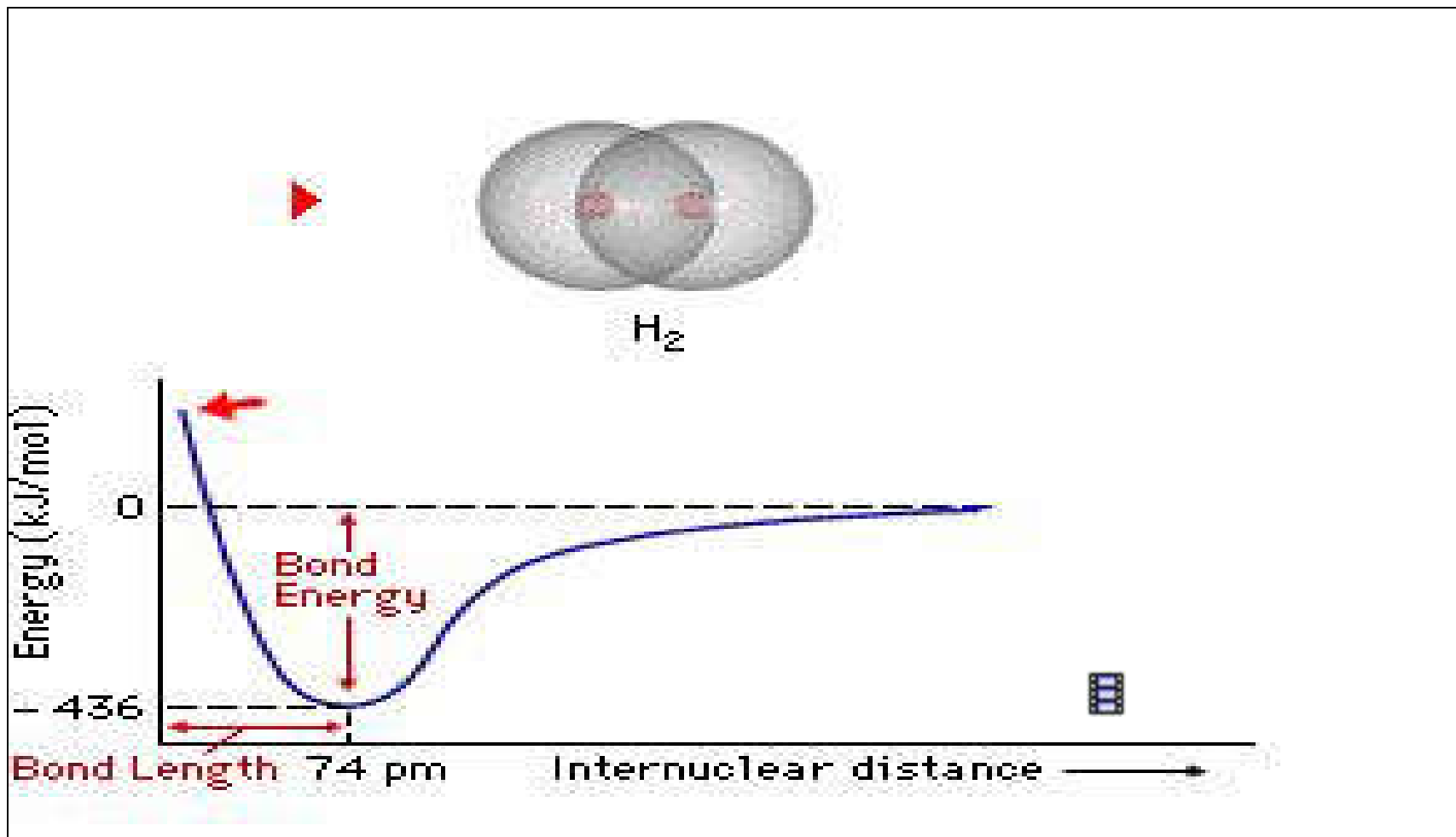
# **Độ dài liên kết** ( Bond Length)

- Là khoảng cách giữa hai hạt nhân của hai nguyên tử tạo liên kết.***

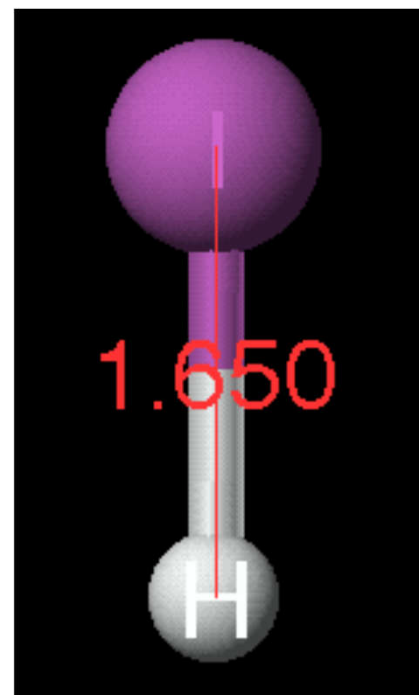
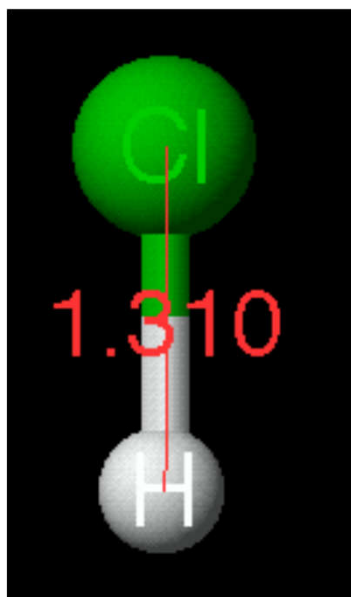
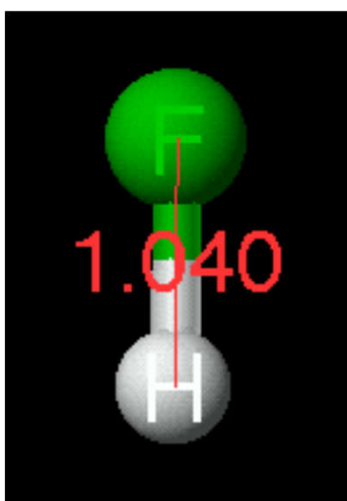




# Năng lượng liên kết



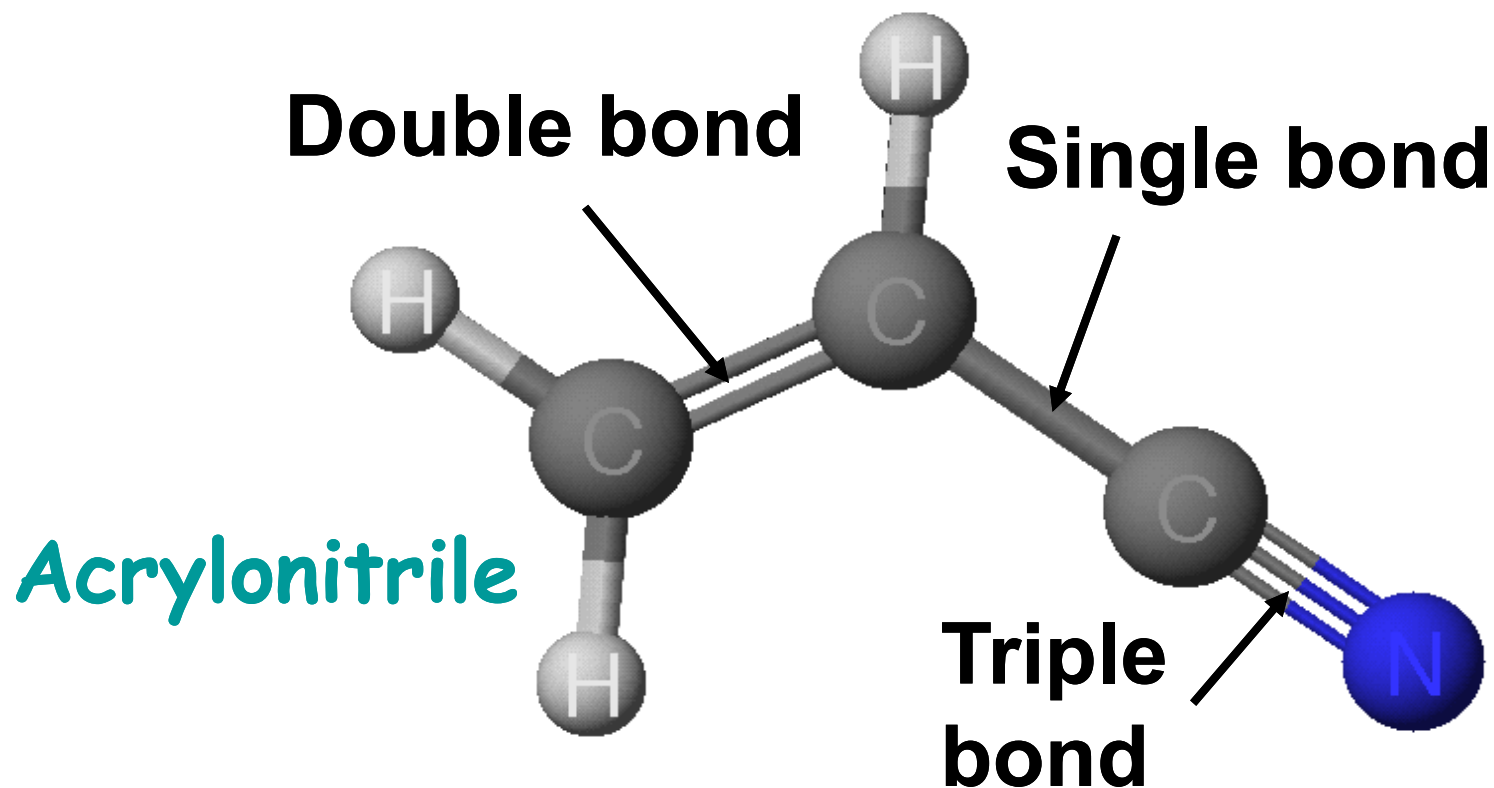




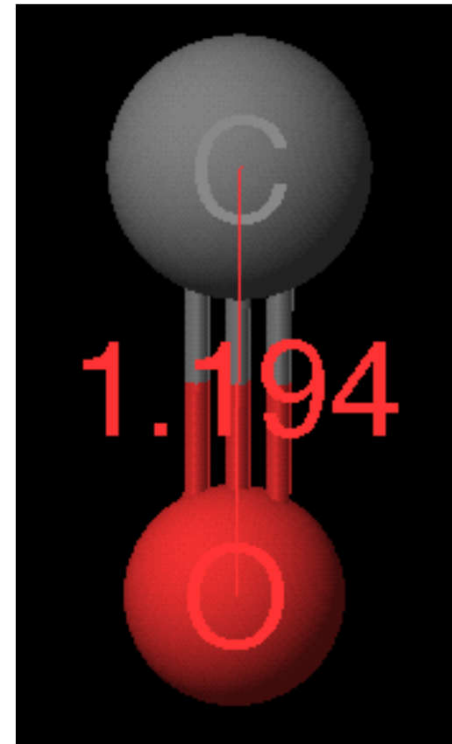
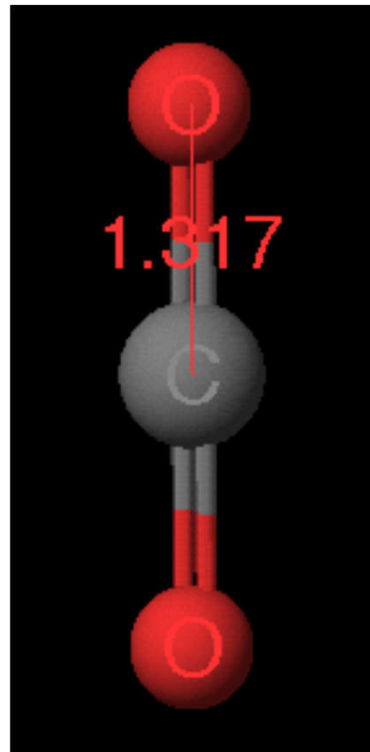
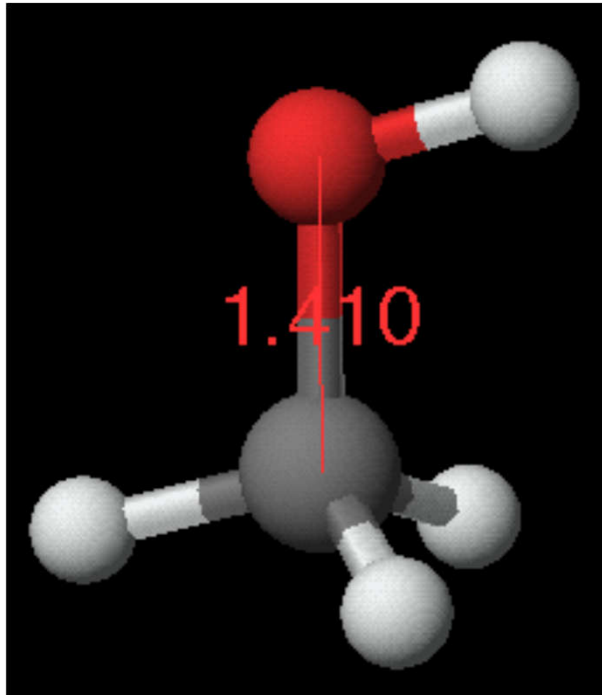
Chiều dài liên kết  
càng lớn thì liên  
kết càng kém bền

# Bậc liên kết

- Là số liên kết tạo thành giữa hai nguyên tử tham gia liên kết.



**Chiều dài liên  
kết phụ thuộc  
vào bậc liên kết**

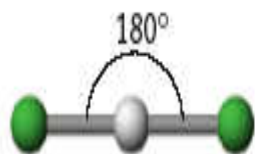


Liên kết	$d_{lk}(\text{pm})$	$E_{lk} \text{ (kJ/mol)}$
C - C	154	346
C = C	134	610
C $\equiv$ C	120	835
N - N	145	163
N = N	123	418
N $\equiv$ N	110	945

Bậc liên kết càng lớn thì chiều dài liên kết giảm  
năng lượng liên kết tăng.

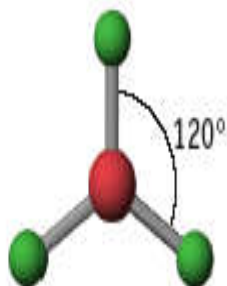
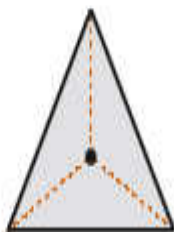
# Góc hóa trị ( $AB_n$ $n \geq 2$ )

Linear



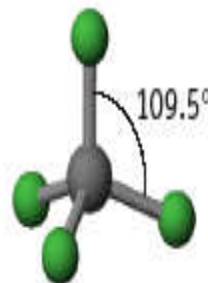
$AX_2$   
Example:  $BeF_2$

Trigonal-planar



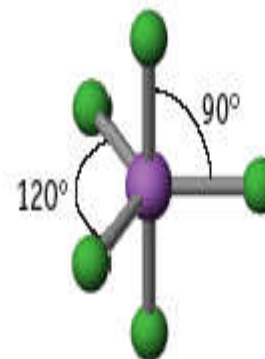
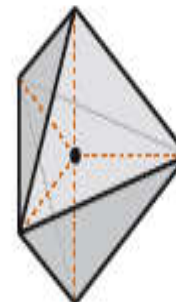
$AX_3$   
Example:  $BF_3$

Tetrahedral



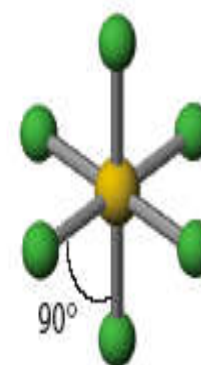
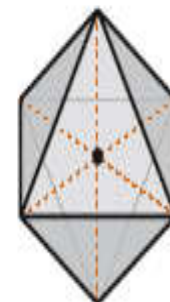
$AX_4$   
Example:  $CF_4$

Trigonal-bipyramidal



$AX_5$   
Example:  $PF_5$

Octahedral

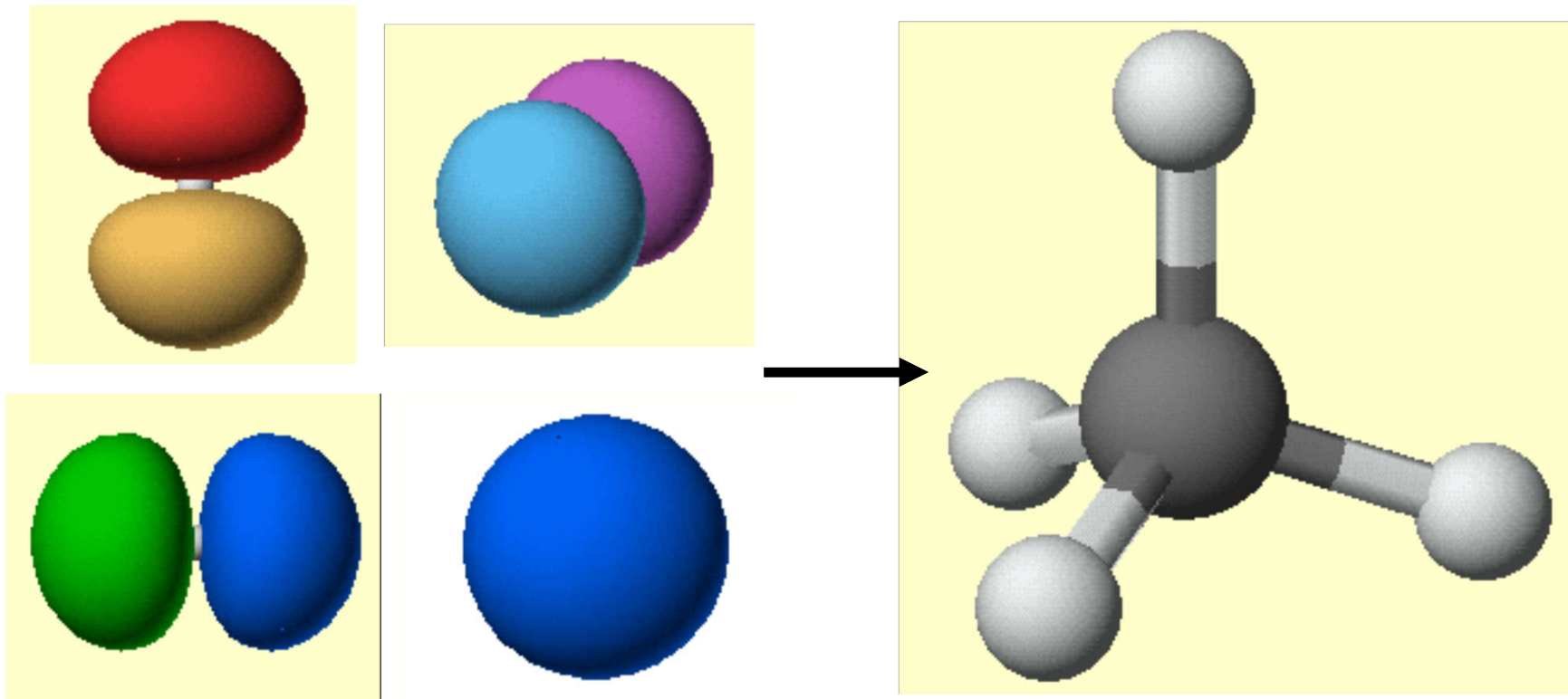


$AX_6$   
Example:  $SF_6$

# Các loại liên kết

- Liên kết cộng hoá trị theo cơ học lượng tử
- Liên kết ion
- Liên kết kim loại
- Liên kết Vanderwaals
- Liên kết Hydro

# LIÊN KẾT CỘNG HÓA TRỊ THEO CƠ HỌC LƯỢNG TỬ



**Atomic Orbitals**

**Molecules**

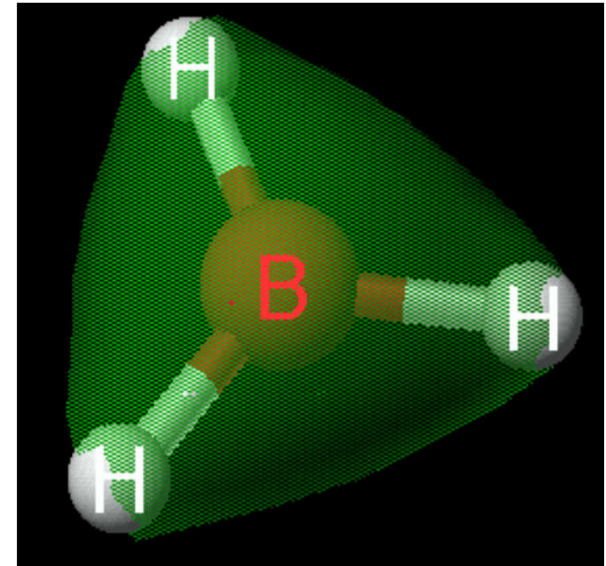
# Two Theories of Bonding

---

## MOLECULAR ORBITAL

THEORY — Robert  
Mullikan (1896-1986)

## THUYẾT MO



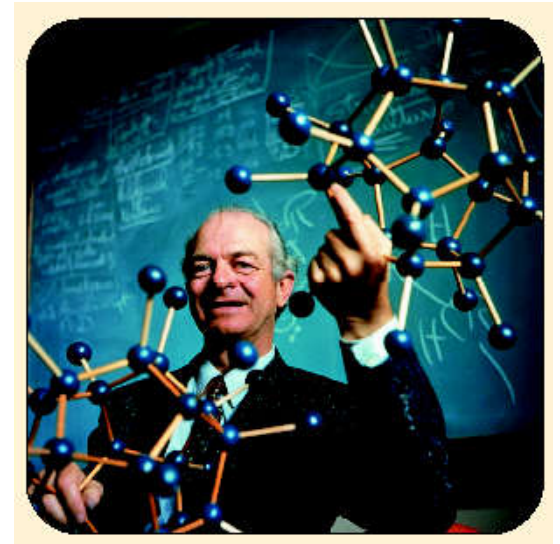
Phương pháp orbital phân tử (MO)



# Two Theories of Bonding

- VALENCE BOND THEORY  
— Linus Pauling

## THUYẾT VB



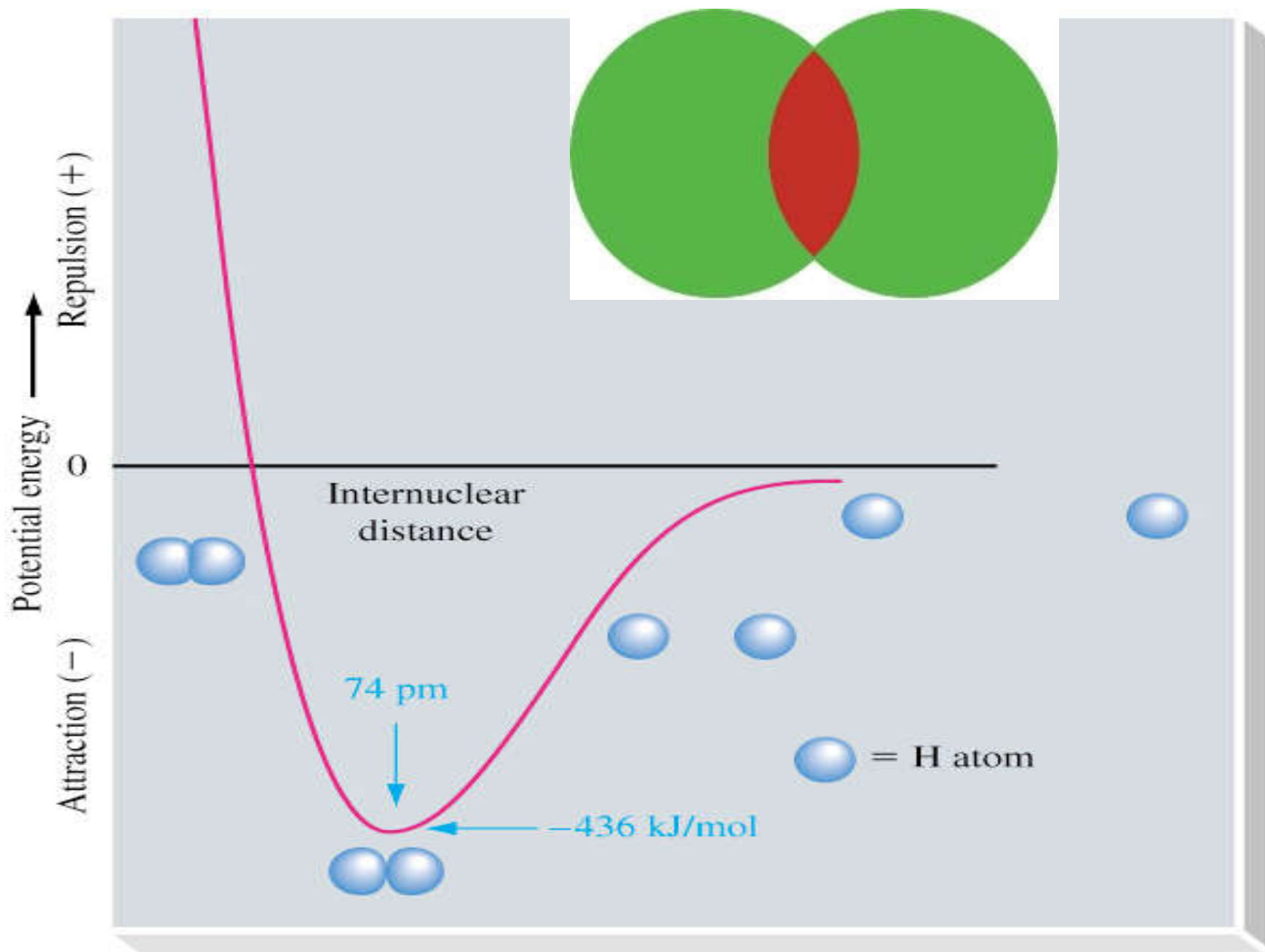
Phương pháp liên kết hóa trị (VB)

# **Phương pháp liên kết hóa trị (VB)**

**Quan niệm về liên kết cộng hóa trị theo  
phương pháp VB**

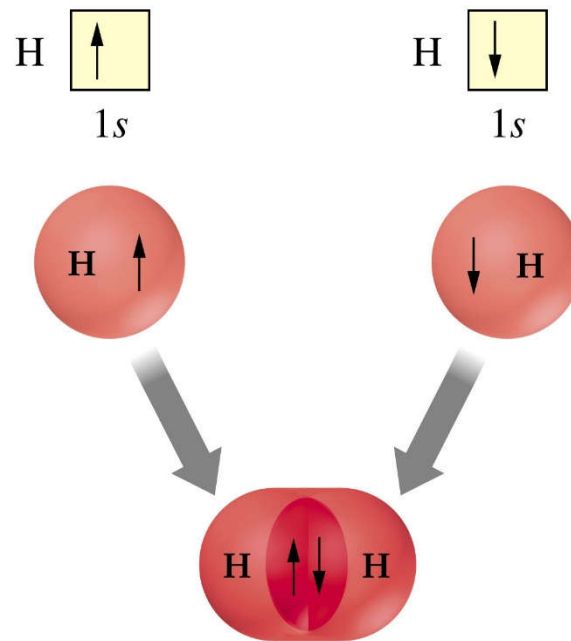
**Các tính chất của liên kết cộng hóa trị**

**Các loại liên kết cộng hóa trị và bậc liên kết**



# Luận điểm cơ bản của thuyết VB

- ✓ Lk cht cơ sở trên cặp e  $\uparrow\downarrow$  (pp cặp e định chỗ - lk 2e 2tâm)
- ✓ Lk cht được hình thành do sự che phủ của các AO hóa trị  
(che phủ dương)



# Luận điểm cơ bản của thuyết VB

- ✓ Biểu diễn lk cht như sau       $H : H$  hoặc  $H - H$
- ✓ Liên kết càng bền khi mật độ che phủ của các AO càng lớn

## Điều kiện tạo lk cht bền:

*Các AO có năng lượng xấp xỉ nhau*

*Các AO có mật độ e đủ lớn*

*Các AO có cùng tính định hướng*

# Cơ chế tạo liên kết cộng hóa trị

**Cơ chế ghép đôi (góp chung):**  $\boxed{\uparrow} + \boxed{\downarrow}$

→ Khả năng tạo lk được quyết định bởi số **AO hóa trị** chứa e độc thân  $\boxed{\uparrow}$

•Chú ý: số e độc thân có thể tăng lên nhờ kích thích

nguyên tử C  $\boxed{\uparrow\downarrow} \quad \boxed{\uparrow} \quad \boxed{\uparrow} \quad \boxed{\phantom{\uparrow\downarrow}} \rightarrow \text{C}^* \quad \boxed{\uparrow} \quad \boxed{\uparrow} \quad \boxed{\uparrow}$

Sự di chuyển điện tử trong quá trình kích thích thường xảy ra trong cùng một lớp.

# Cơ chế cho - nhận

Cơ chế cho - nhận



+

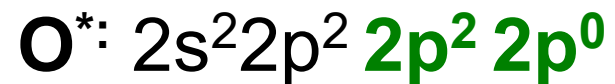


chất cho

chất nhận

- Khả năng tạo lk được quyết định bởi số  $\boxed{\uparrow\downarrow}$  và số  $\boxed{\phantom{\uparrow\downarrow}}$
- AO trống có thể có khi ng tử ở trạng thái kích thích

Ví dụ



→ Khả năng tạo liên kết cht (theo cả hai cơ chế) được quyết định bởi **số AO hóa trị của nguyên tố**:

- Các nguyên tố chu kỳ I có 1 AO hóa trị → tạo tối đa 1 lk cht
- Các nguyên tố chu kỳ II có 4 AO hóa trị → tạo tối đa 4 lk cht
- Các nguyên tố chu kỳ III có 9 AO hóa trị → tạo tối đa 9 lk cht

➤ ***Liên kết cộng hóa trị có tính bão hòa***



## Ví dụ

Hãy cho biết trong số các phân tử và ion sau cấu tử nào có khả năng tồn tại.



# Tính chất của liên kết cộng hóa trị

## ➤ Tính bão hòa

Số liên kết CHTcực đại = số AO hóa trị của nguyên tố.

## ➤ Tính định hướng

## ➤ Tính có cực và không cực

# Sự phân cực của liên kết cộng hoá trị



$$\chi_{\text{F}} = \chi_{\text{F}}$$

Lk cht đồng cực



$$\chi_{\text{H}} < \chi_{\text{Cl}}$$

Lk cht có cực



$$\chi_{\text{Na}} \ll \chi_{\text{Cl}}$$

Lk ion

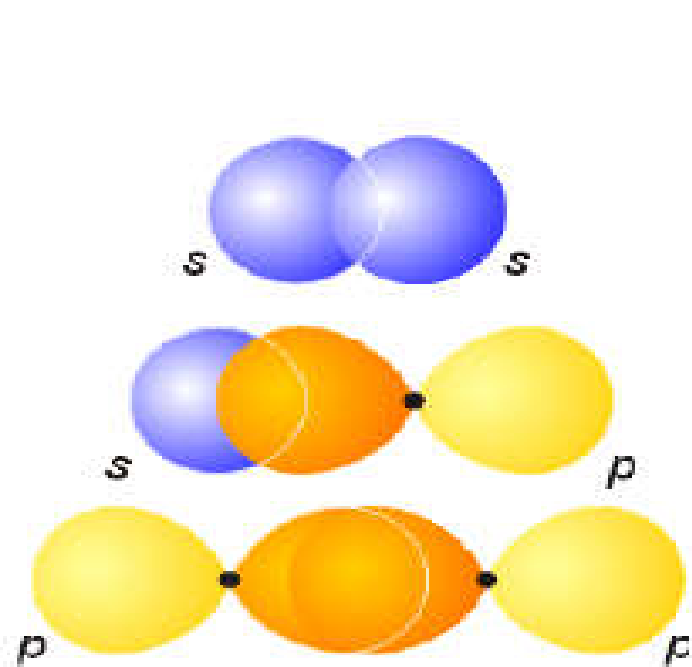


Cl bị phân cực âm

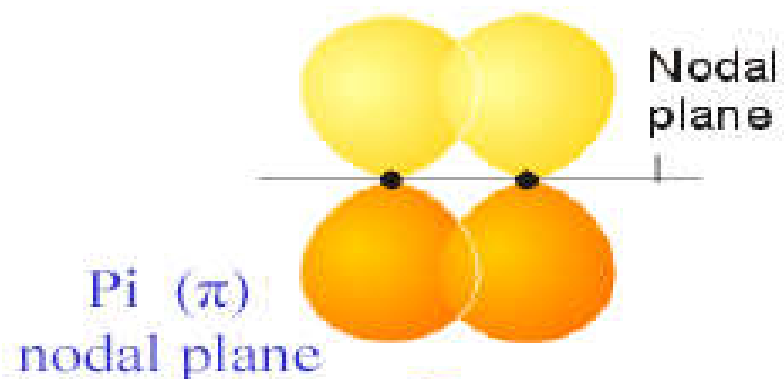
H bị phân cực dương

# Các loại liên kết cộng hóa trị và bậc liên kết

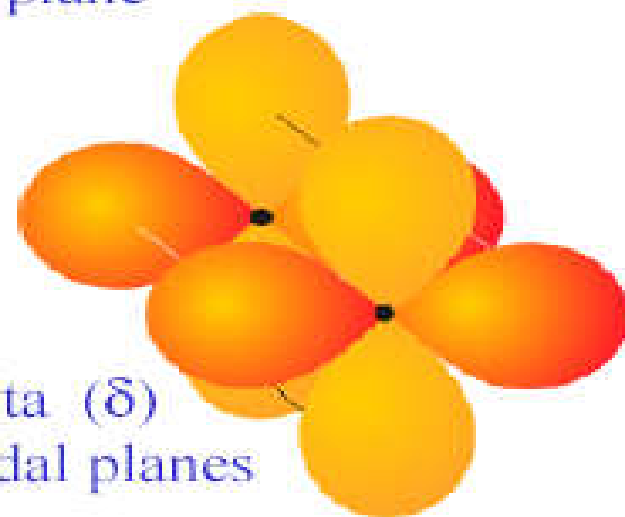
## Other Types of Bonding Interactions



Sigma ( $\sigma$ )  
cylindrical symmetry

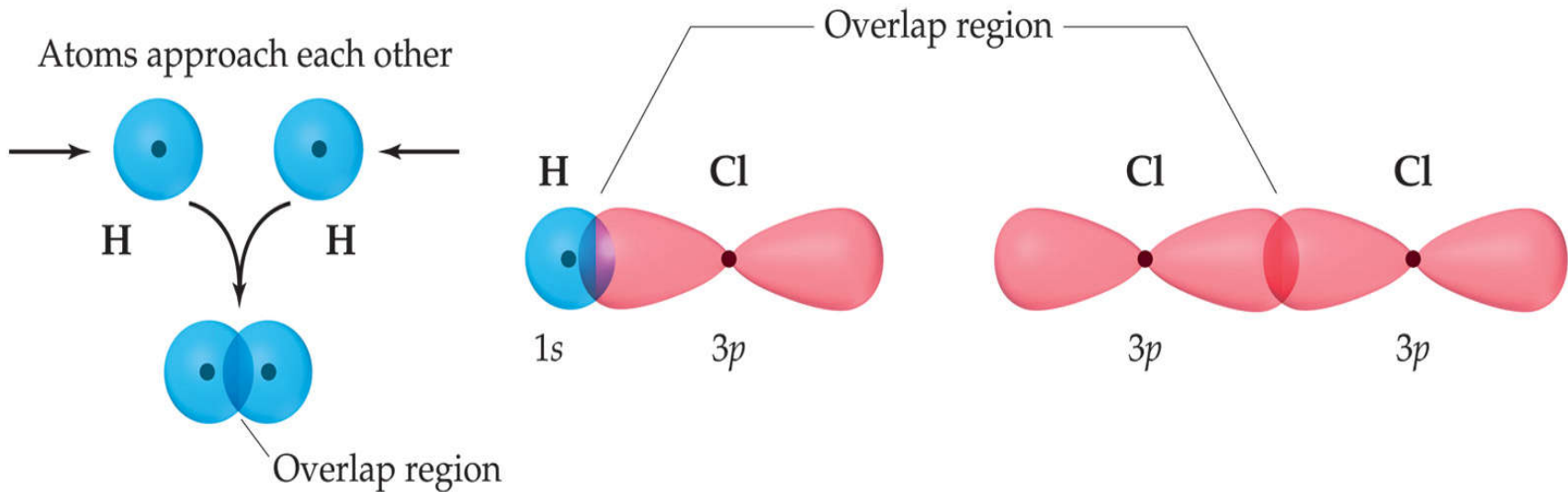


Pi ( $\pi$ )  
nodal plane



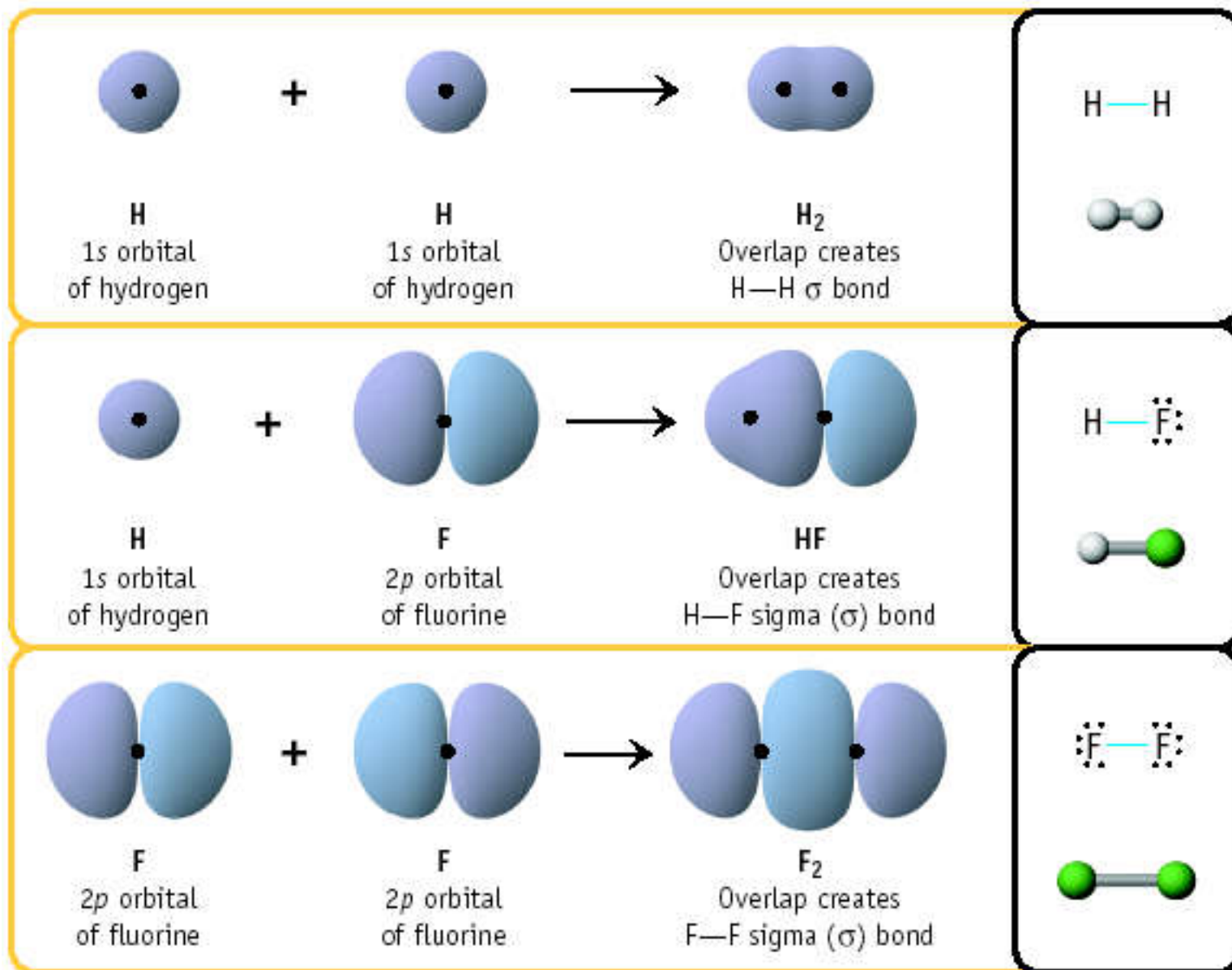
Chú ý: các vùng xen phủ phải cùng dấu

# Liên kết Sigma ( $\sigma$ )



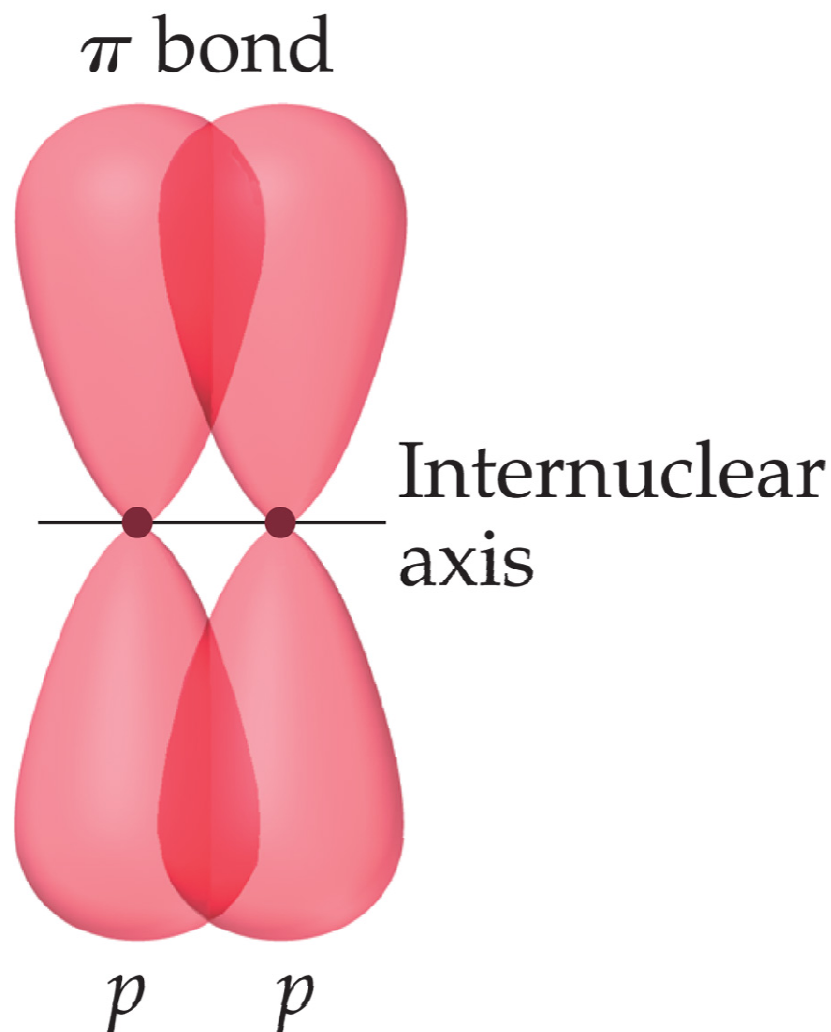
- Các AO che phủ dọc theo trục liên kết
- Nhận trục liên kết làm trục đối xứng.
- Liên kết  $\sigma$  không làm cản trở sự quay tự do của các nguyên tử quanh trục liên kết
- **Độ bền**  $\sigma(ns-ns) < \sigma(ns-np) < \sigma(np-np)$

# Sự hình thành liên kết $\sigma$



# Liên kết Pi ( $\pi$ )

- Hai AO che phủ ở hai phía của trục liên kết.
- Có mặt phẳng phản xứng chứa trục liên kết.



## Liên kết $\pi$

- Các nguyên tử thuộc chu kỳ 2 có khả năng tạo lk  $\pi_{2p-2p}$  hoặc  $\pi_{3p-2p}$
- Các nguyên tố thuộc chu kỳ 3 trở đi chỉ có khả năng hình thành liên kết  $\pi_{p-d}$  hoặc  $\pi_{d-d}$
- Số liên kết  $\pi(\text{ghép đôi}) = (\text{số oxh})_{\text{nttt}} - \text{số lk}\sigma$

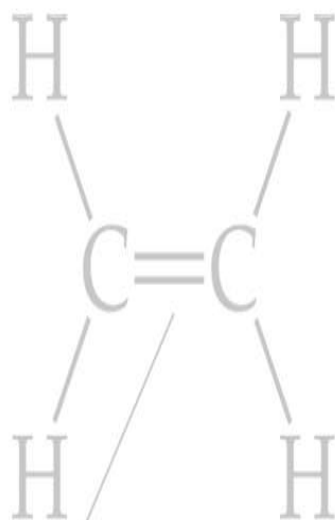


# Liên kết đơn

Liên kết đơn luôn luôn là liên kết  $\sigma$



One  $\sigma$  bond



One  $\sigma$  bond plus  
one  $\pi$  bond



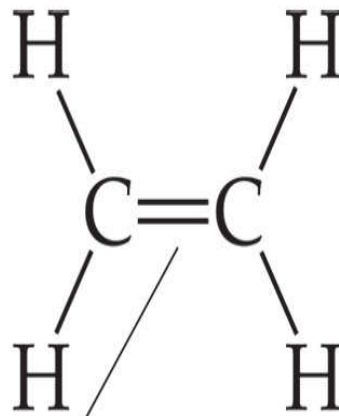
One  $\sigma$  bond plus  
two  $\pi$  bonds

# Liên kết bội

Trong liên kết bội thì sẽ có **1 liên kết  $\sigma$**  phần còn lại sẽ là **các liên kết  $\pi$**



One  $\sigma$  bond



One  $\sigma$  bond plus  
one  $\pi$  bond



One  $\sigma$  bond plus  
two  $\pi$  bonds

# Liên kết $\pi$ không định chỗ

**Cặp electron liên kết không thuộc hẳn về một cặp nguyên tử nào cả mà phân bố đồng đều cho một số hạt nhân nguyên tử kế cận.**

# Bậc liên kết

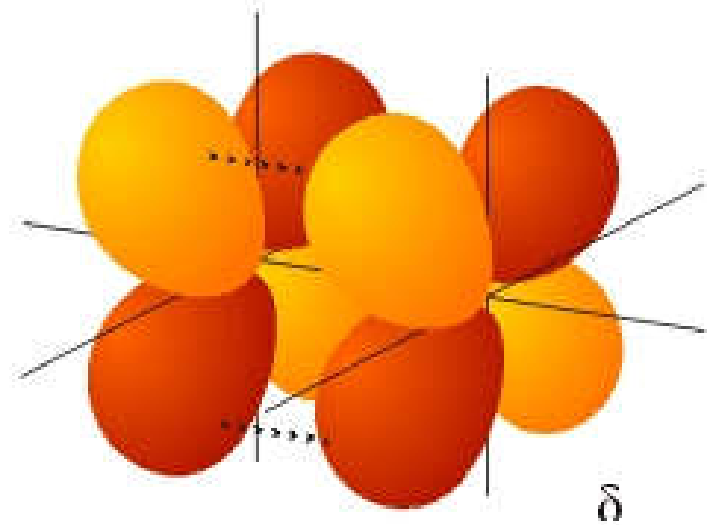
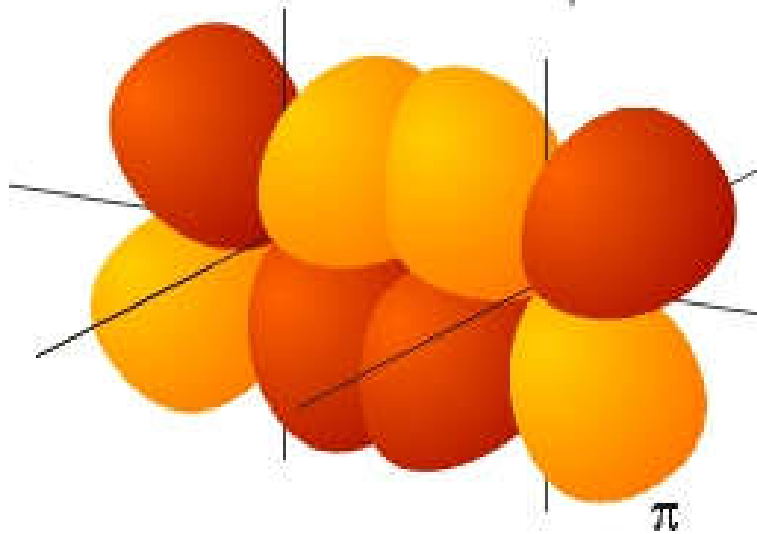
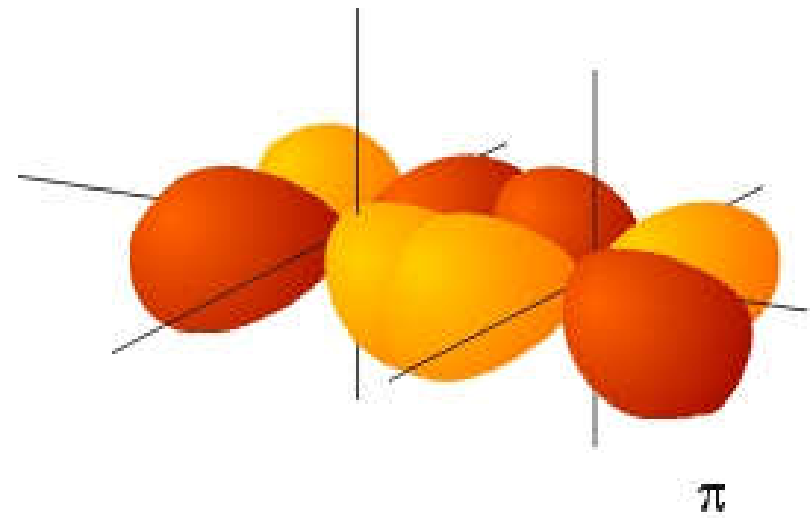
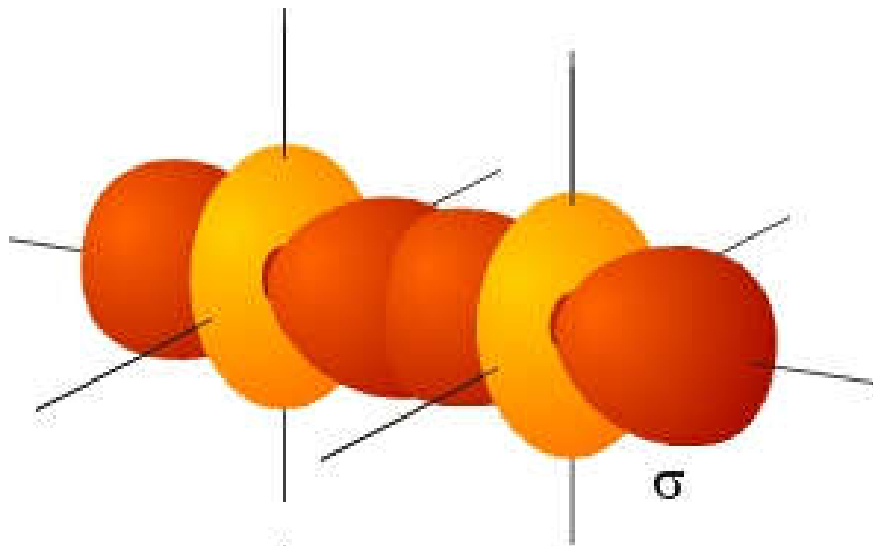
$$\text{Bậc liên kết} = 1 + \frac{\text{số lk } \pi_{\text{dc}} + \text{số lk } \pi_{\text{kdc}}}{\text{số cặp ng tử}}$$

Bậc liên kết có thể là số lẻ khi có mặt liên kết  $\pi$  không định chỗ

# Liên kết $\delta$

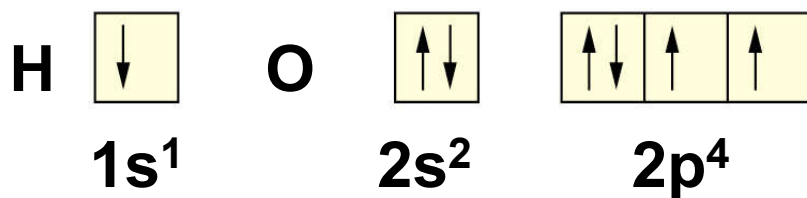
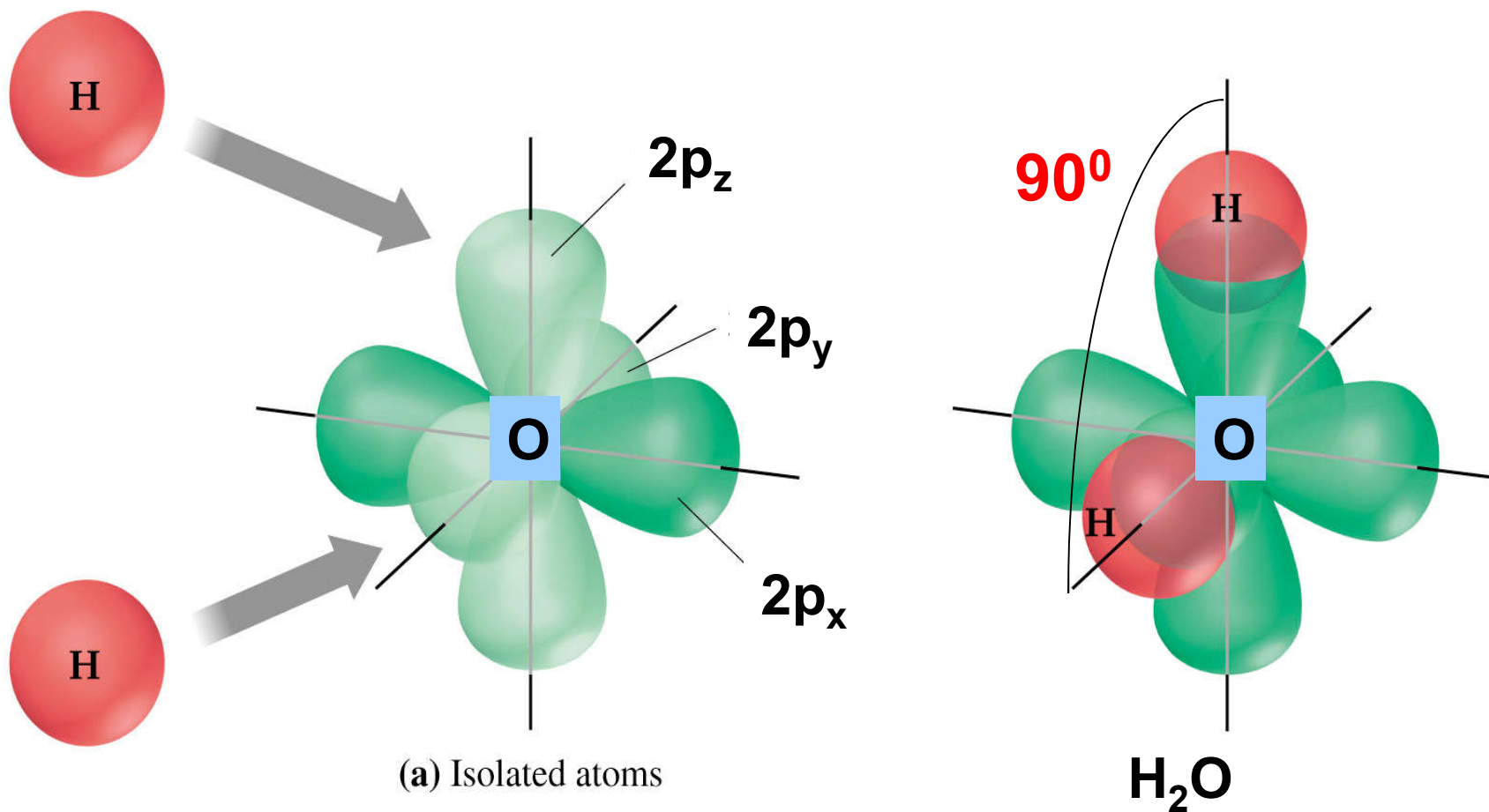
*Liên kết  $\delta$  được tạo thành khi hai AOd che phủ bằng tất cả bốn cánh.*

*Liên kết  $\delta$  thường gặp trong phức chất của kim loại chuyển tiếp hoặc một số hợp chất của các nguyên tố thuộc chu kỳ 3.*



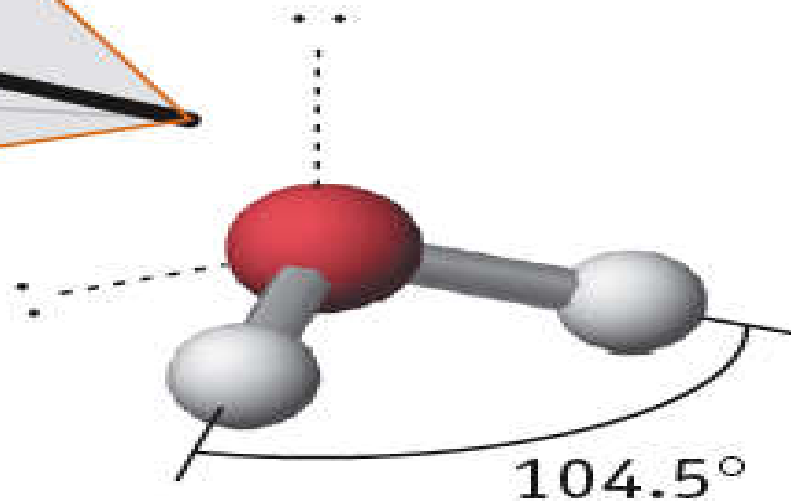
The d orbitals of the delta bond

# LIÊN KẾT CỘNG HÓA TRỊ $\text{H}_2\text{O}$



# Vì sao góc hóa trị là $104.5^\circ$ ?

**Bent**



**Water,  $\text{H}_2\text{O}$**   
2 bond pairs  
2 lone pairs



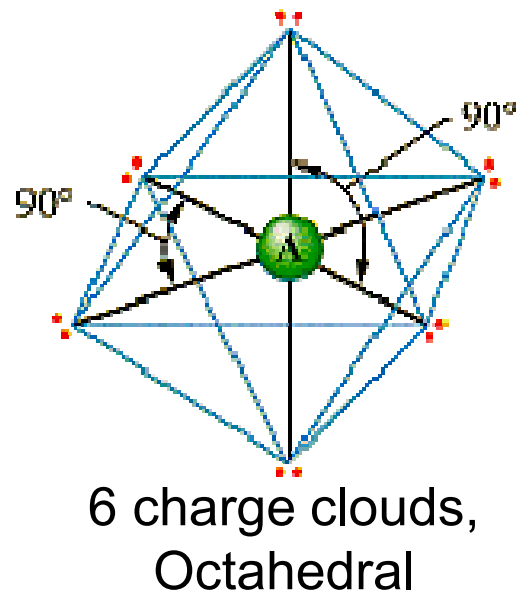
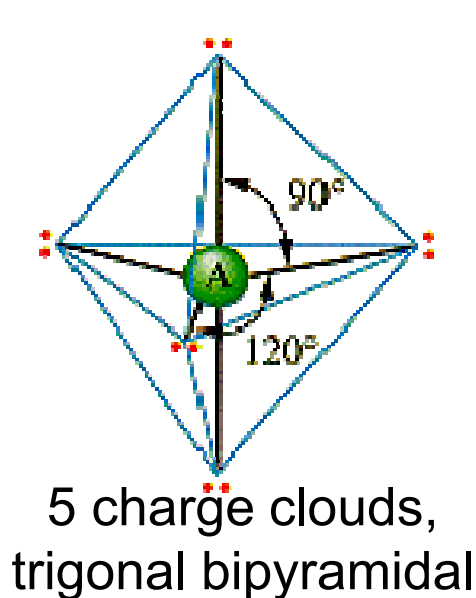
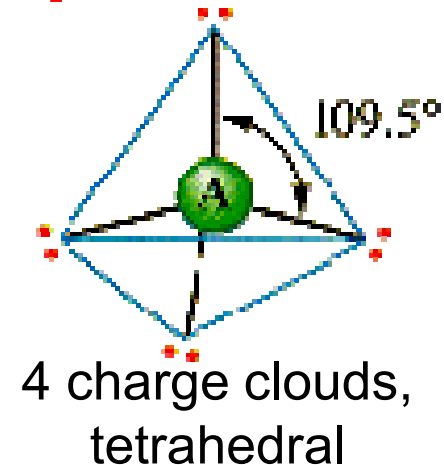
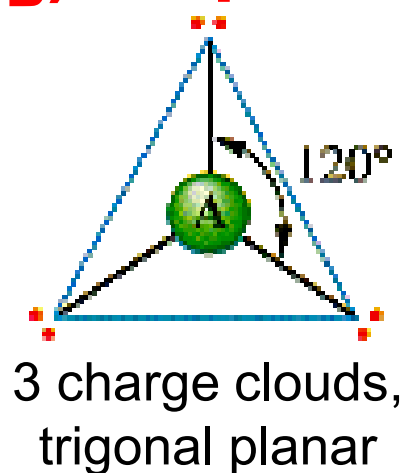
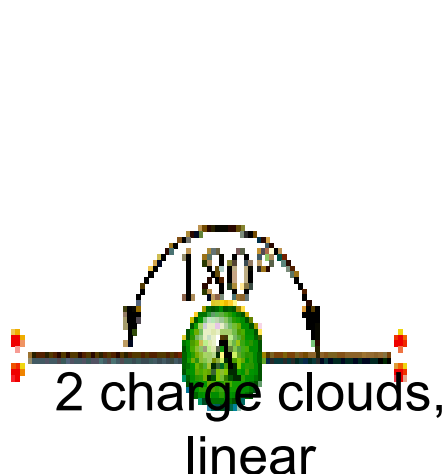


# THUYẾT SỨC ĐẨY CẶP ĐIỆN TỬ HÓA TRỊ

## Valence shell electron pair repulsion(VSEPR )

- Trong phân tử cộng hoá trị  $AB_n$  các cặp điện tử hóa trị liên kết ( $\sigma_{A-B}$ ) và cặp điện tử hoá trị tự do của A (nếu có) phải xa nhau ở mức tối đa sao cho lực đẩy giữa các cặp electron đó có giá trị nhỏ nhất.

# Định hướng trong không gian của các cặp e liên kết ( $\sigma_{A-B}$ ) hoặc e tự do quanh A



- **A phải ở trạng thái lai hóa.**
- **Số cặp e quanh A sẽ quyết định trạng thái lai hóa của nguyên tử trung tâm A .**

# Lai hóa là gì ?

➤ Nguyên tử trung tâm A sử dụng các AO s,p,d,f..trong nội bộ nguyên tử đem pha trộn (tổ hợp tuyến tính) với nhau để tạo thành các **AO lai hóa**. Các **AO lai hóa** này sẽ tham gia tạo lkσ với B hoặc chứa điện tử tự do của A.

# Đặc điểm các AO lai hóa

➤ Số cặp e(td+lkσ)quanh A =Số AO tham gia lai hoá  
= số AO lai hoá.

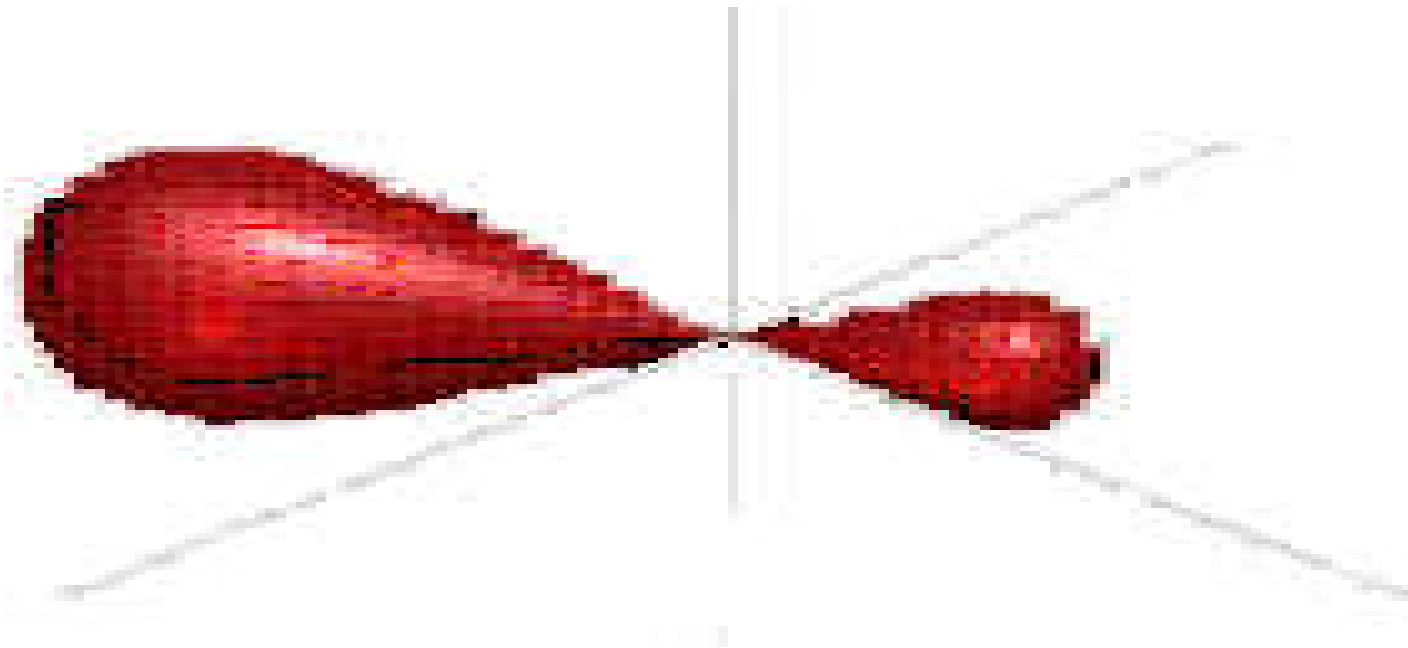
$AB_2$  , số cặp e quanh A = 2  $\rightarrow$  A lai hóa sp , 2AO lh sp

➤ Phân bố đối xứng với nhau trong không gian

➤ Các AO lai hoá có mức năng lượng bằng nhau

**Các AO lai hóa có kích thước hình dạng giống nhau, mật độ electron dồn về một phía.**

**→ Các AO lai hóa của A tạo lkσ với B bền hơn so với AO không lai hóa**



## ▪ ***Điều kiện để lai hóa bền***

- ***Năng lượng của các AO tham gia lai hóa xấp xỉ nhau***
- ***Mật độ e của các AO tham gia lai hóa đủ lớn***
- ***Mức độ che phủ của các AO phải cao***

Trong một chu kỳ:  $\Delta E_{ns - np} \uparrow$  nên khả năng Lai Hóa  $\downarrow$

	Li	Be	B	C	N	O	F	Ne
$\Delta E_{2p - 2s}$	1,9	2,8	5,7	8,1	11,4	18,9	22,6	26,8

Trong một phân nhóm chính:  $r \uparrow \rightarrow$  khả năng LH  $\downarrow$



**Số cặp e quanh A =  $1/2\{ (\sum e_{ht})AB_n - 8(2)n \} + n$**

**$n \geq 2$       A không là các kl chuyển tiếp**

**Số cặp e quanh A = số cặp  $e_{td}$  + số cặp  $e_{lk\sigma}$**

**= 2  $\rightarrow$  A:sp**

**= 3  $\rightarrow$  A:sp<sup>2</sup>**

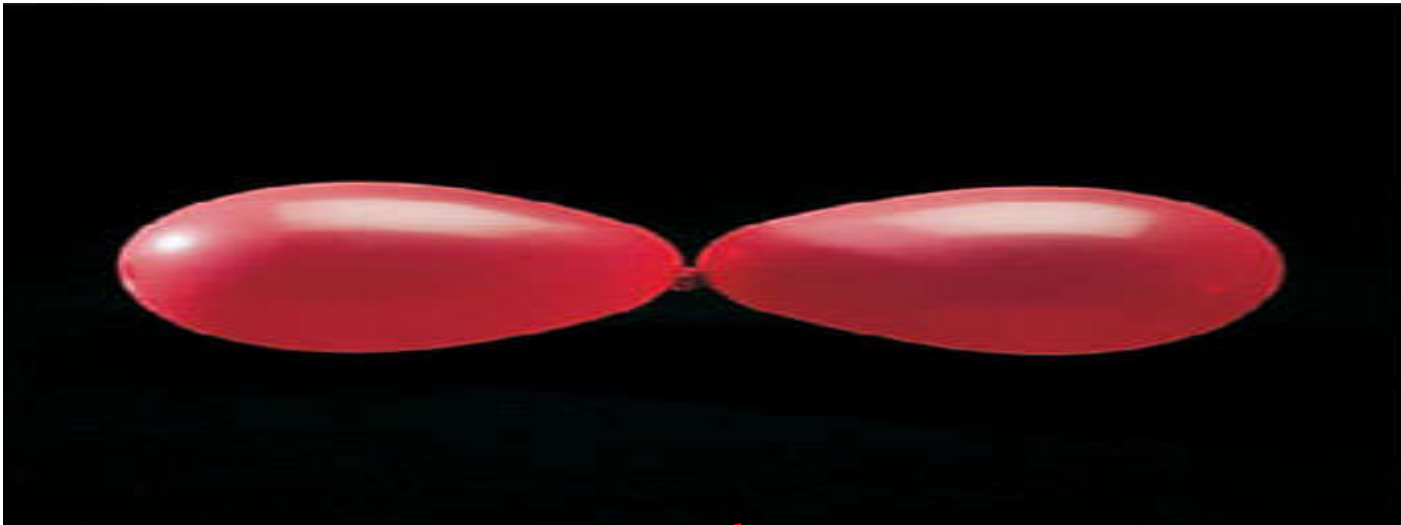
**= 4  $\rightarrow$  A:sp<sup>3</sup>**

**= 5  $\rightarrow$  A:sp<sup>3</sup>d**

**= 6  $\rightarrow$  A:sp<sup>3</sup>d<sup>2</sup>**

# Lai hóa sp

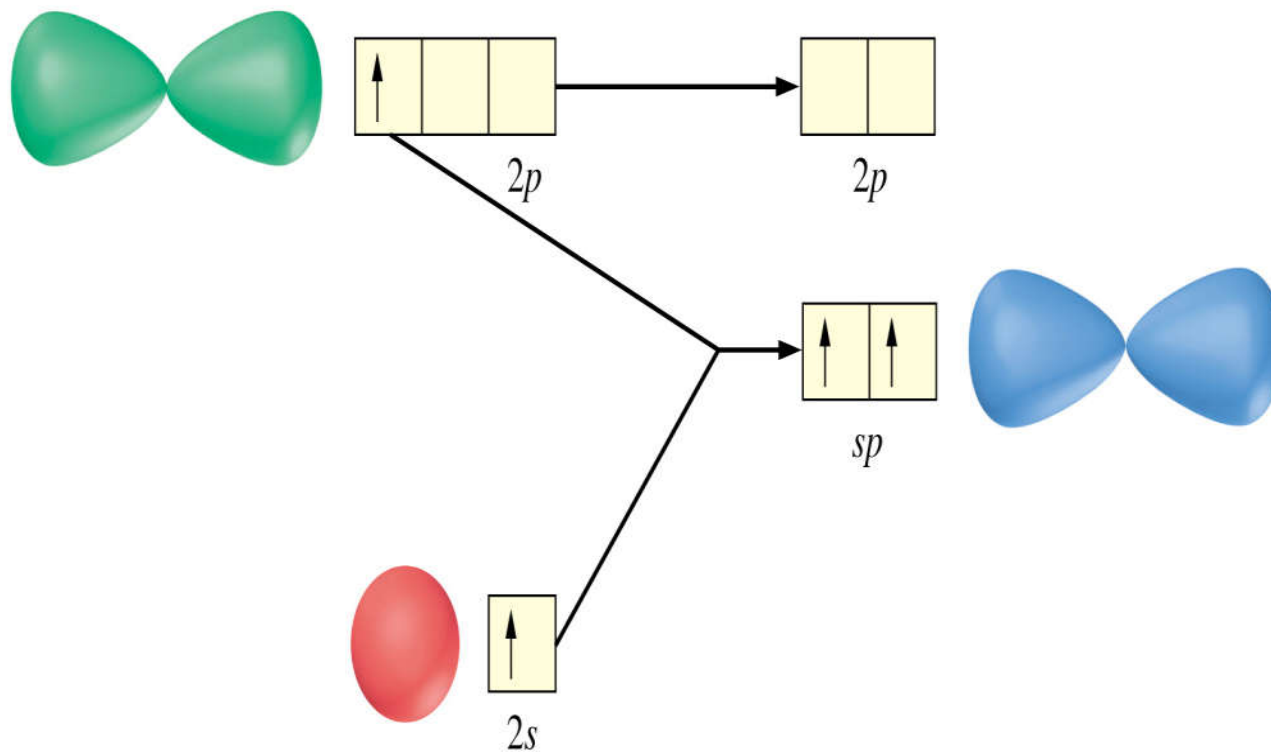
- Số cặp e quanh A = 2  $\rightarrow$  A ở trạng thái lai hóa SP
- $AB_2$                       dạng thẳng                      góc lk  $180^\circ$



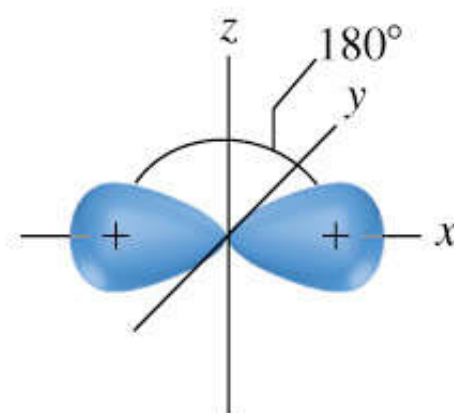
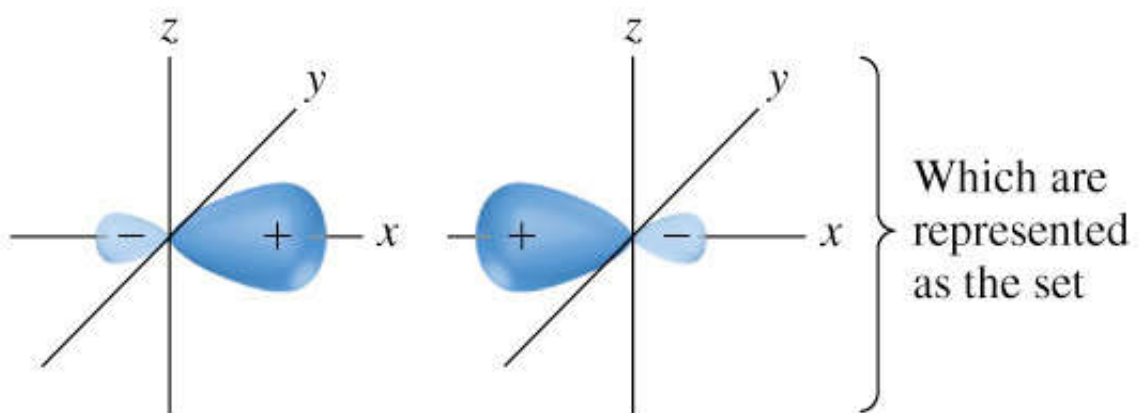
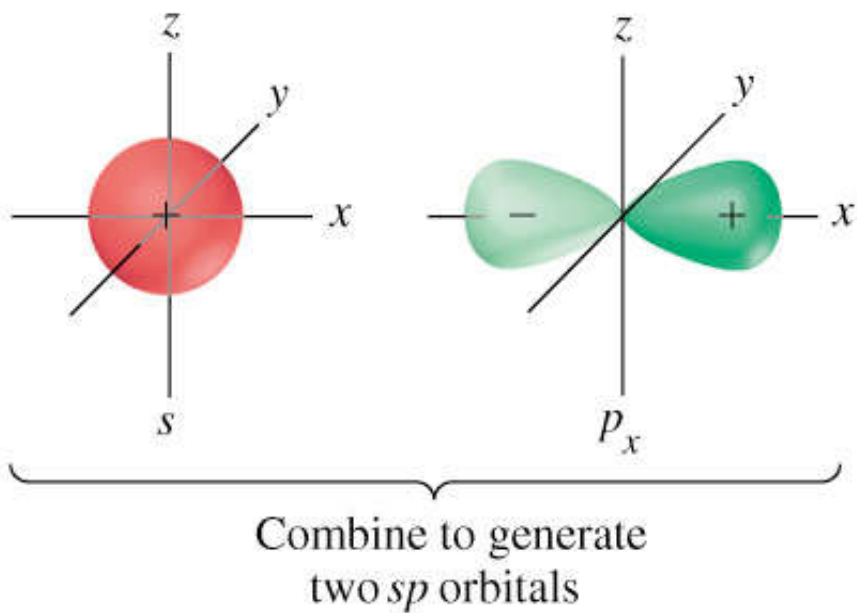
*linear*



# LAI HOÁ SP

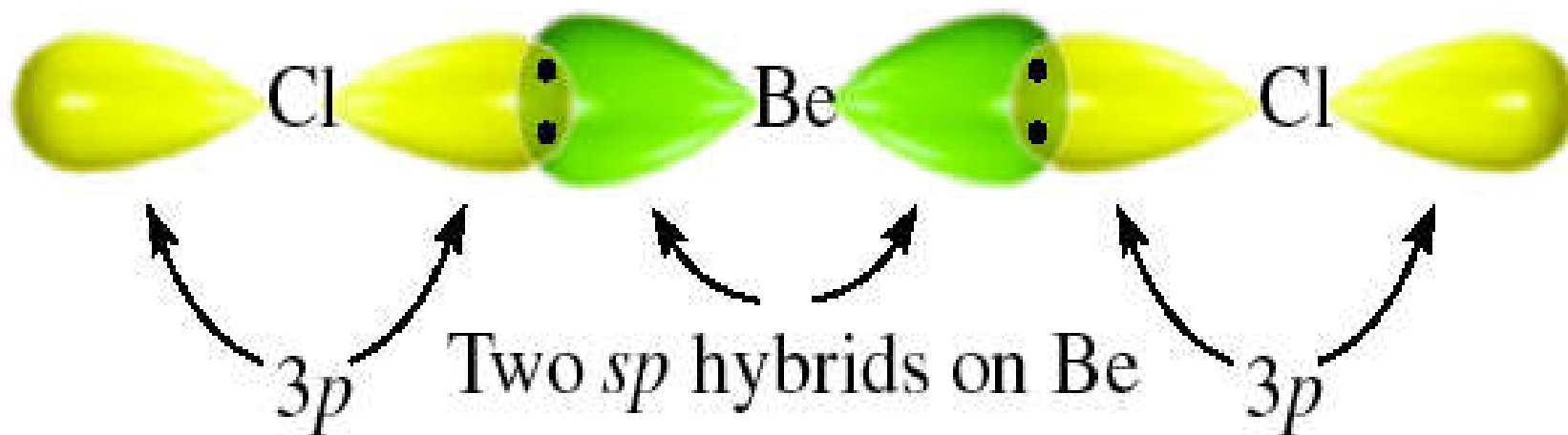
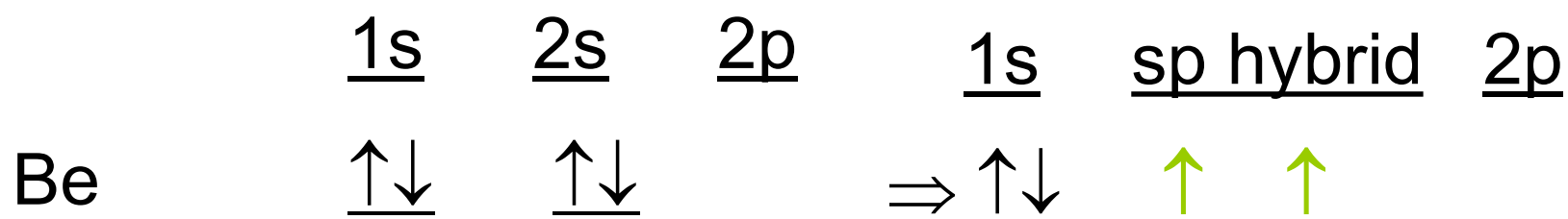


# Lai hóa sp



# BeCl<sub>2</sub> (AB<sub>2</sub>)

số cặp e quanh Be =  $\frac{1}{2}(16 - 8 \cdot 2) + 2 = 0 + 2 = 2 \rightarrow sp$



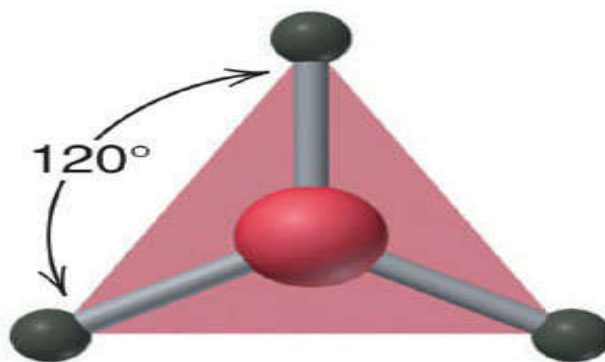
## Lai hóa $sp^2$

Số cặp e quanh A = 3  $\rightarrow$  A ở trạng thái lai hóa  $SP^2$

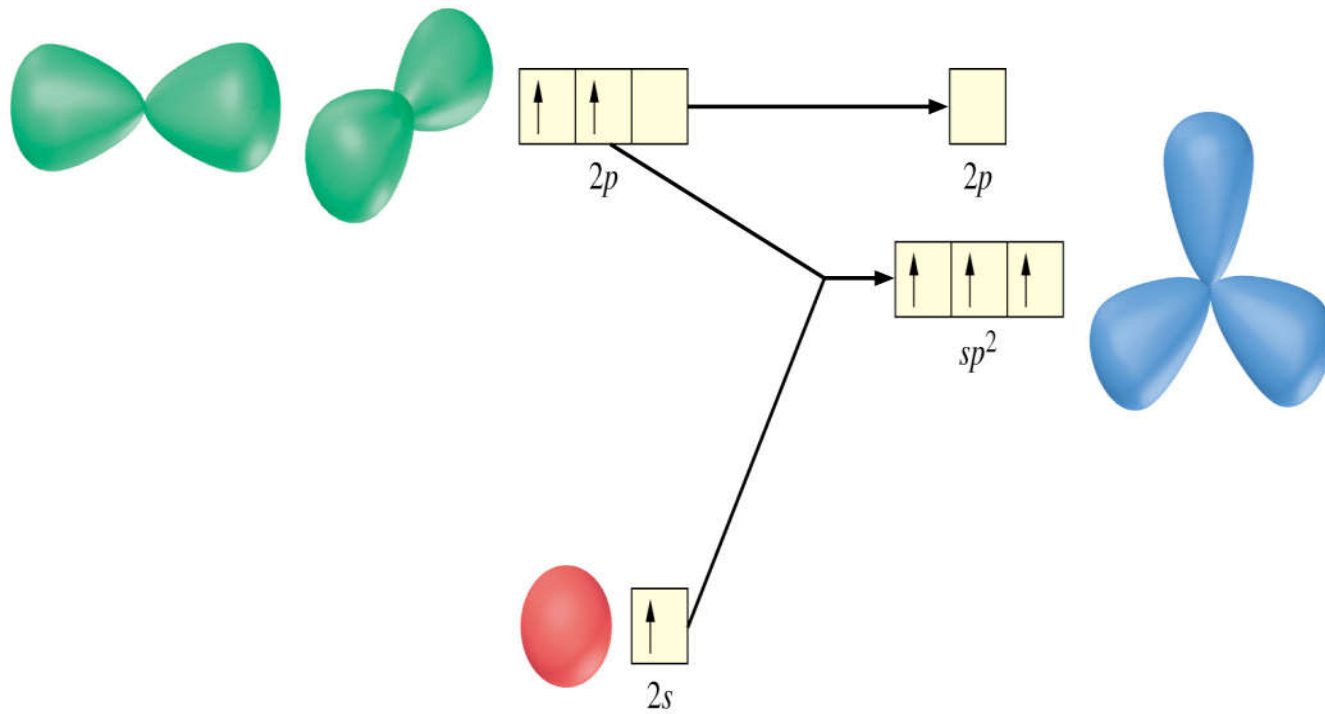
$AB_3, AB_2E$  - góc hóa trị  $120^\circ$



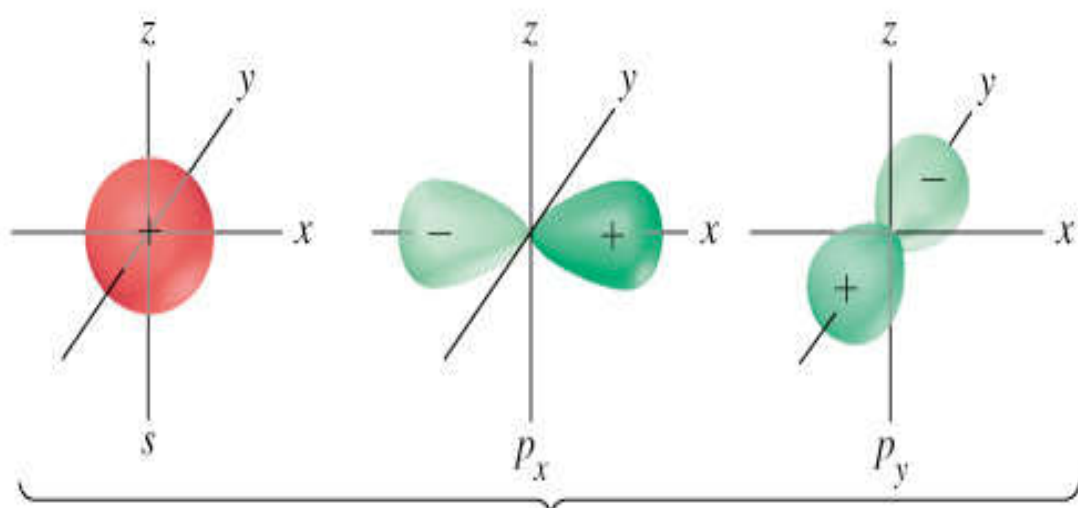
*trigonal planar*



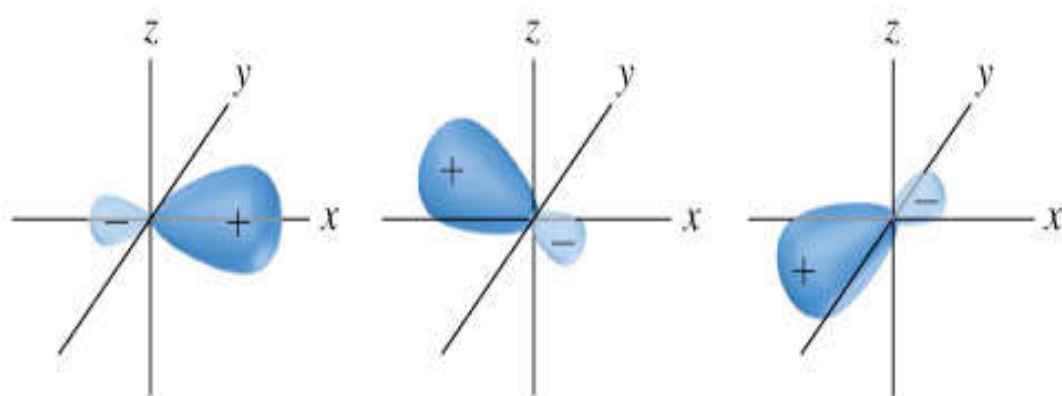
# LAI HÓA $sp^2$



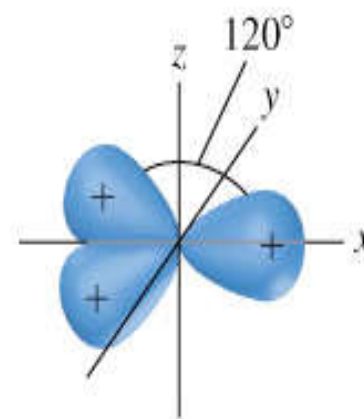
# Lai hóa $sp^2$



Combine to generate  
three  $sp^2$  orbitals



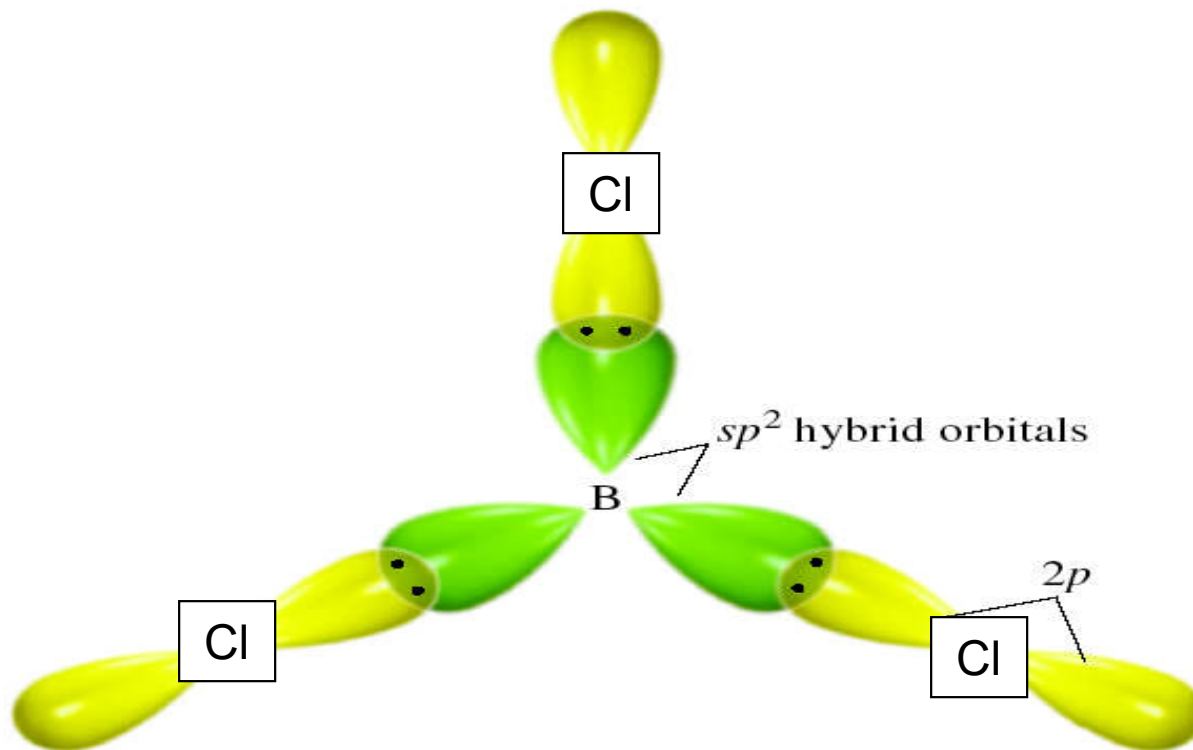
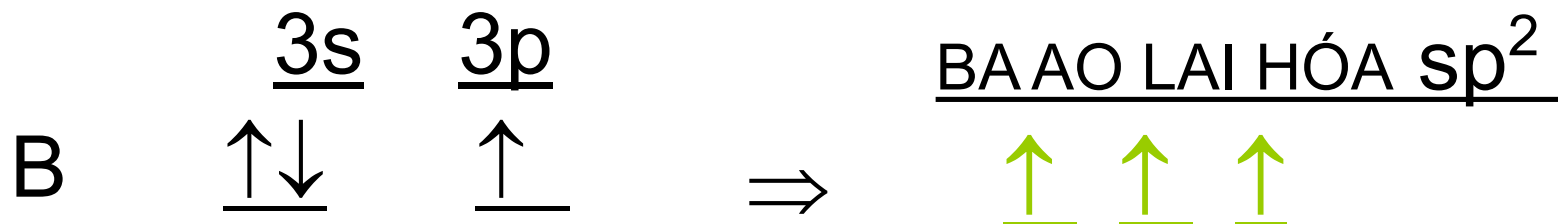
Which are  
represented  
as the set



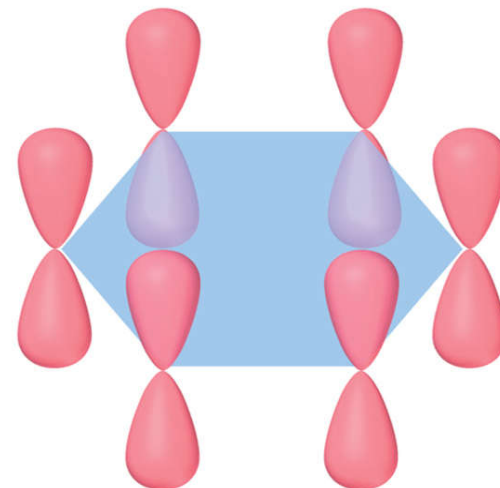
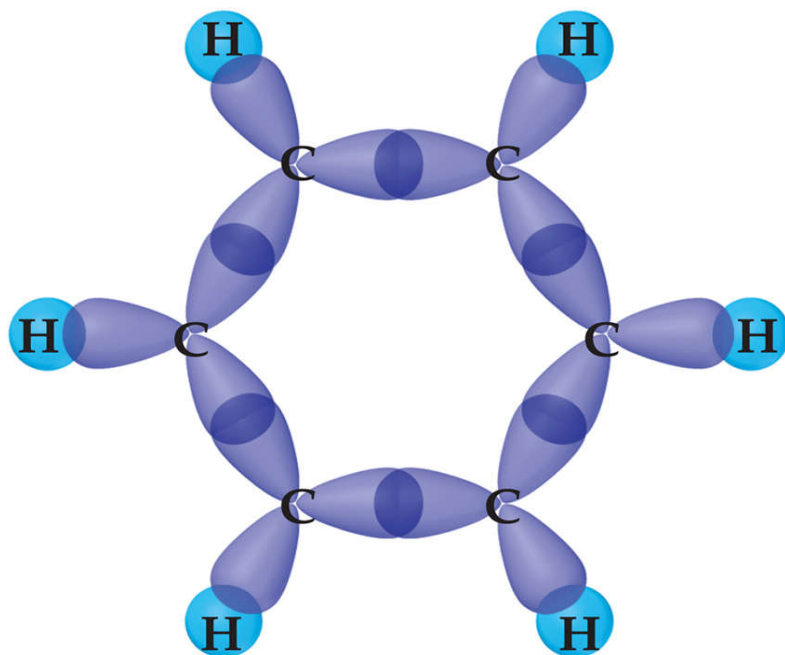




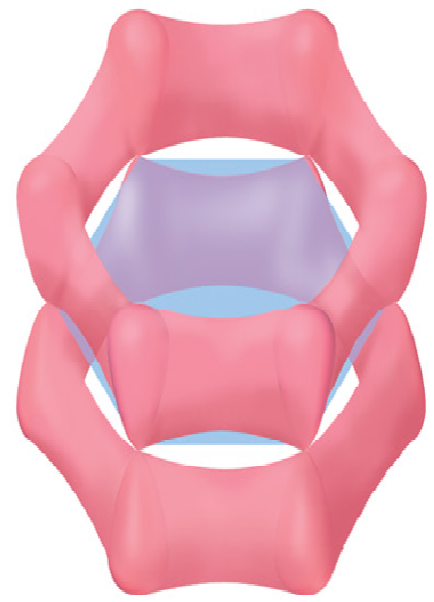
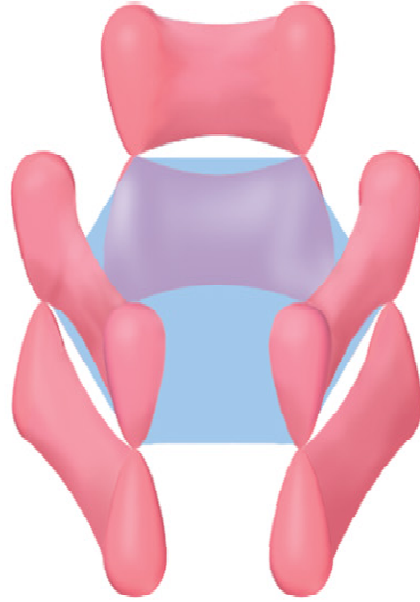
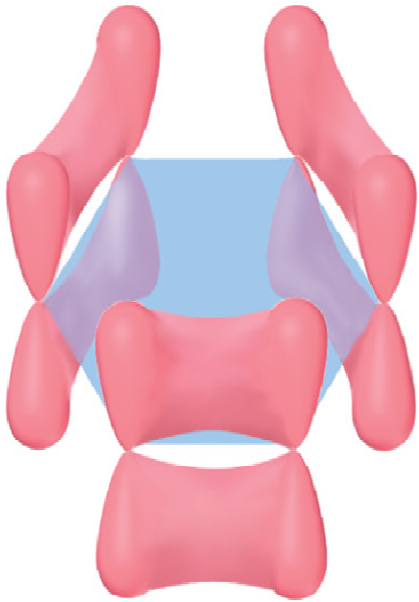
số cặp e quanh B =  $\frac{1}{2}(24 - 8 \cdot 3) + 3 = 0 + 3 = 3 \rightarrow sp^2$



# Liên kết $\pi$ không định chỗ $\text{C}_6\text{H}_6$



Bậc liên kết C-C =  $1 + 3/6 = 1,5$



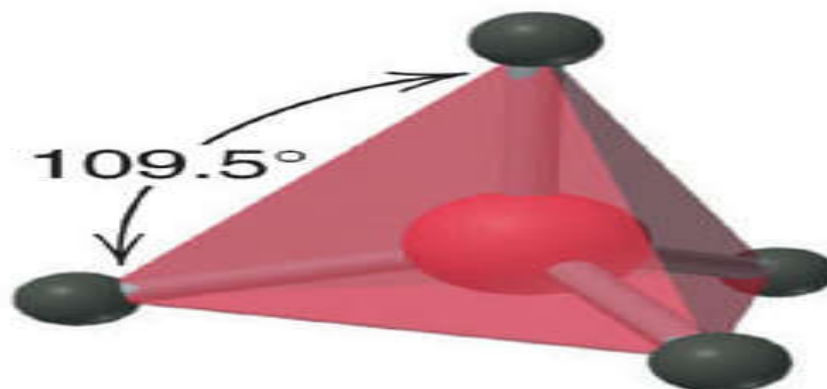
## Lai hóa $sp^3$

Số cặp e quanh A = 4  $\rightarrow$  A ở trạng thái lai hóa  $SP^3$

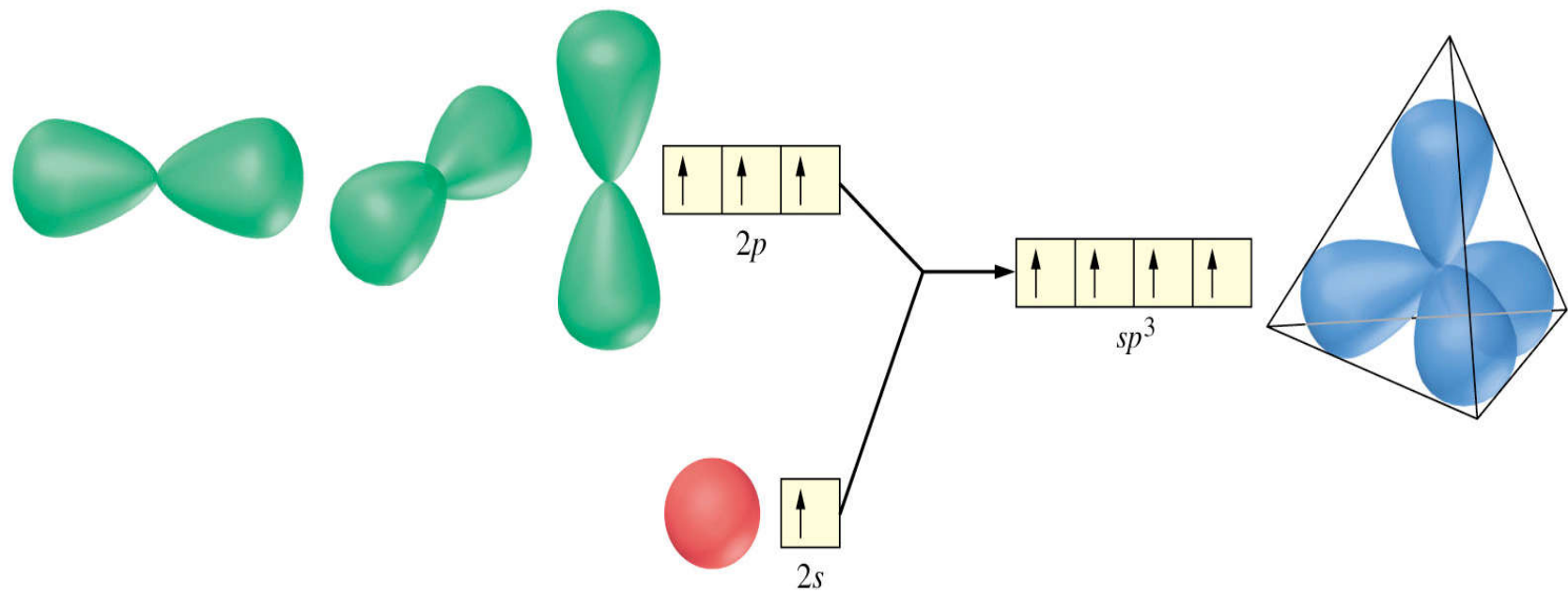
$AB_4$ ,  $AB_3E$ ,  $AB_2E_2$  - góc hóa trị  $109^\circ 28'$

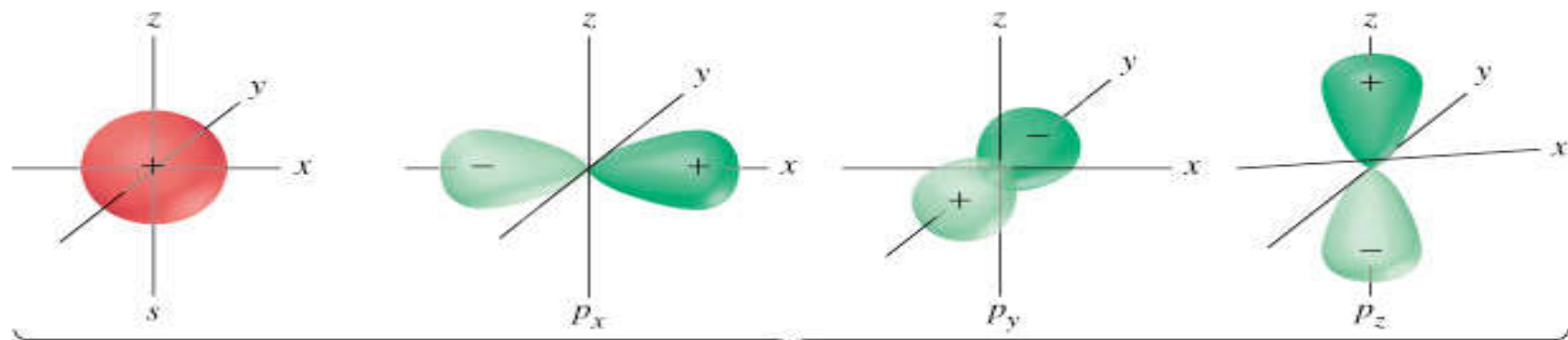


*tetrahedral*

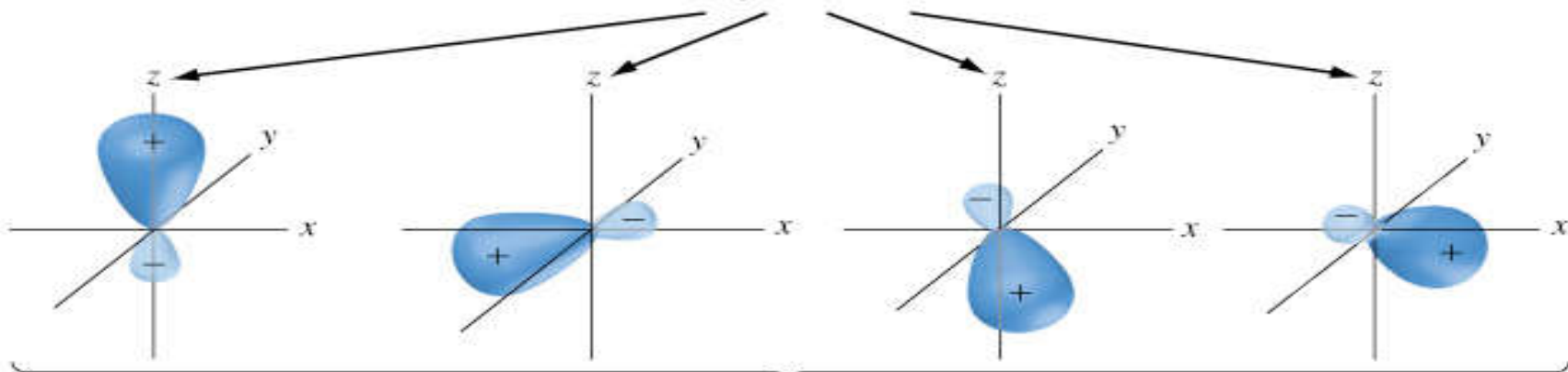


# LAI HÓA $sp^3$

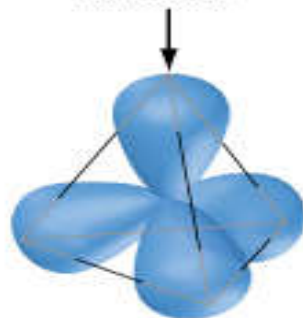




Combine to generate  
four  $sp^3$  orbitals

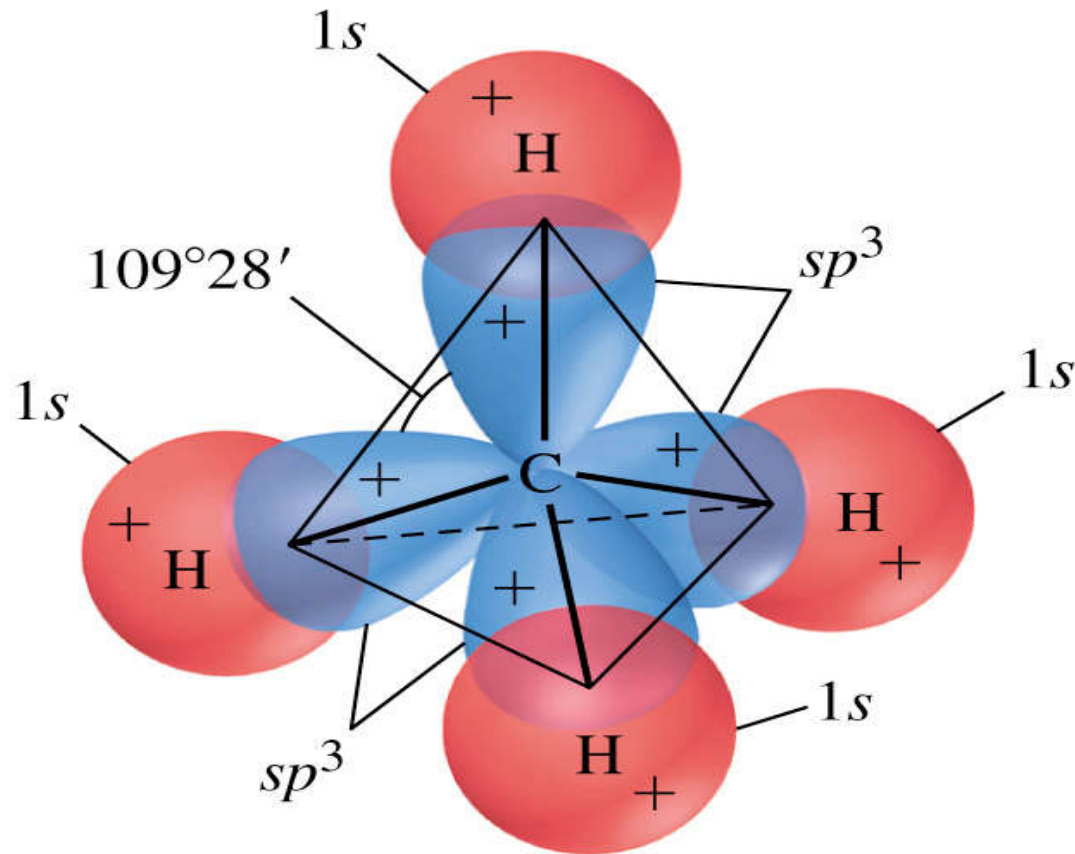
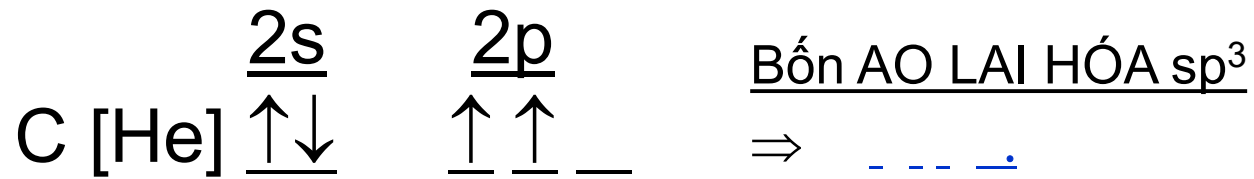


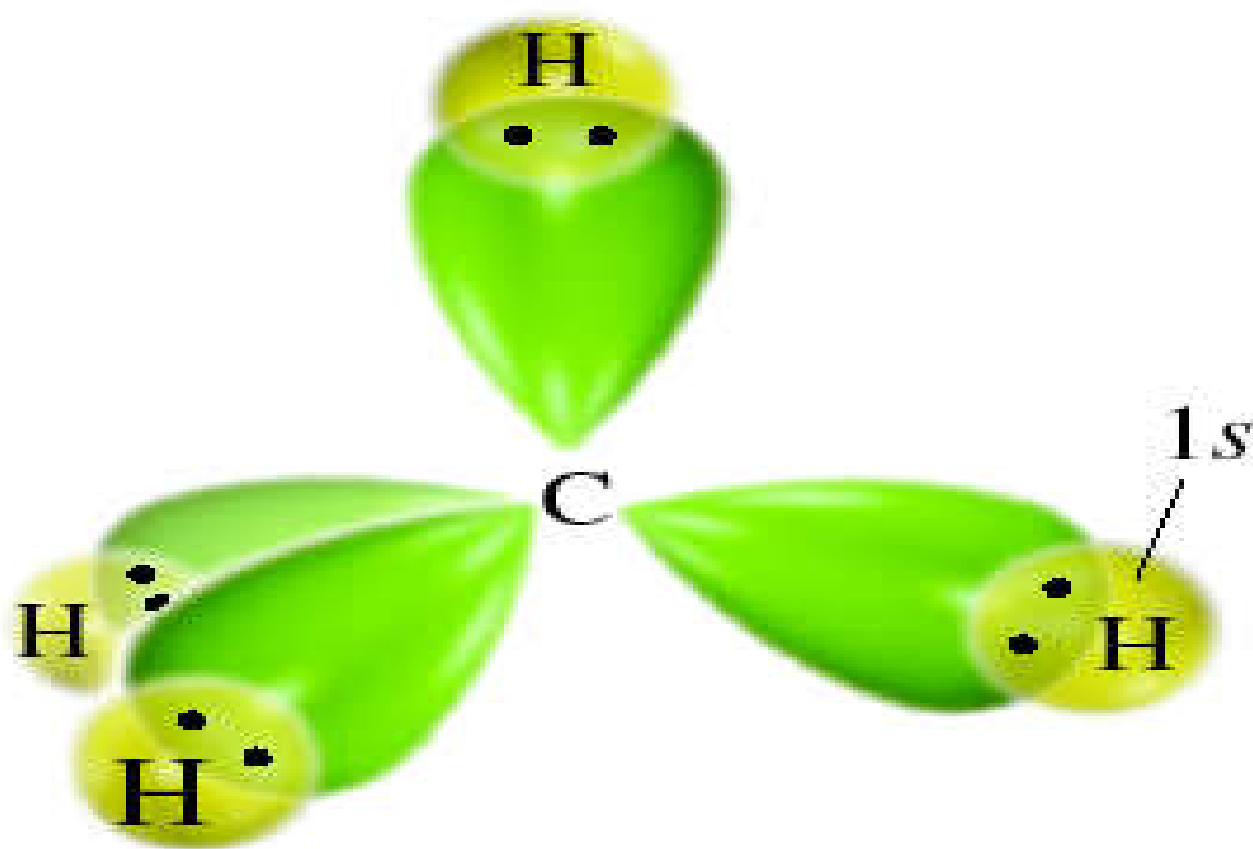
Which are represented  
as the set





số cặp e quanh C =  $\frac{1}{2}(8 - 2 \cdot 4) + 4 = 0 + 4 = 4 \rightarrow sp^3$

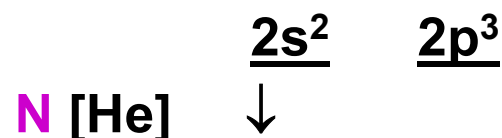








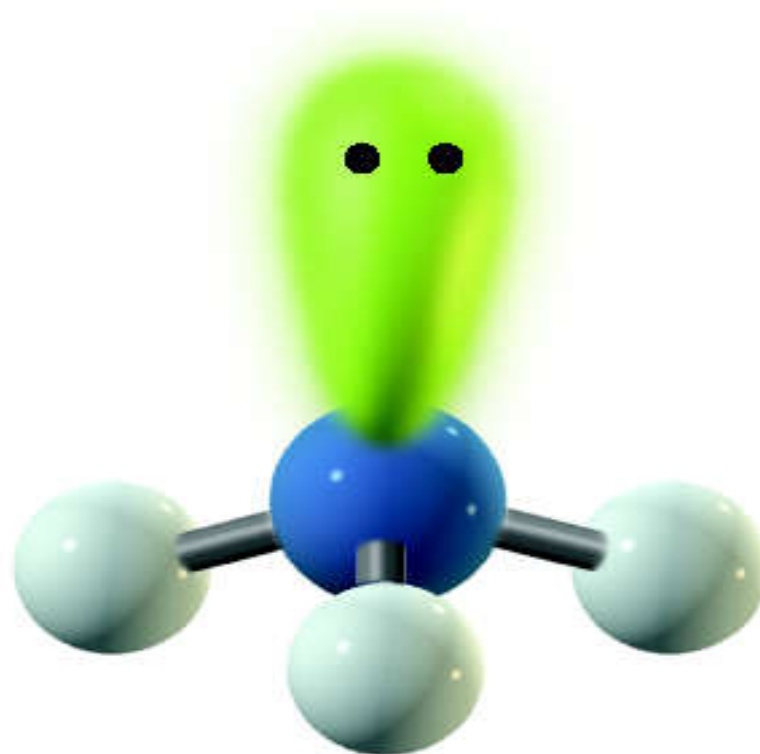
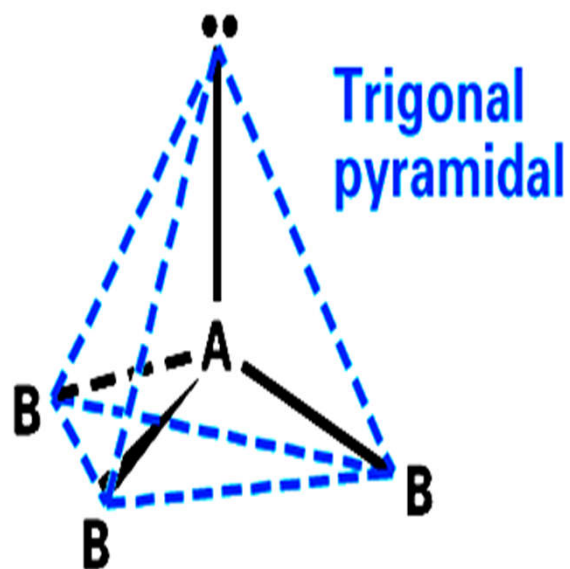
số cặp e quanh N =  $1/2(8 - 2 \cdot 3) + 3 = 1 + 3 = 4 \rightarrow sp^3$

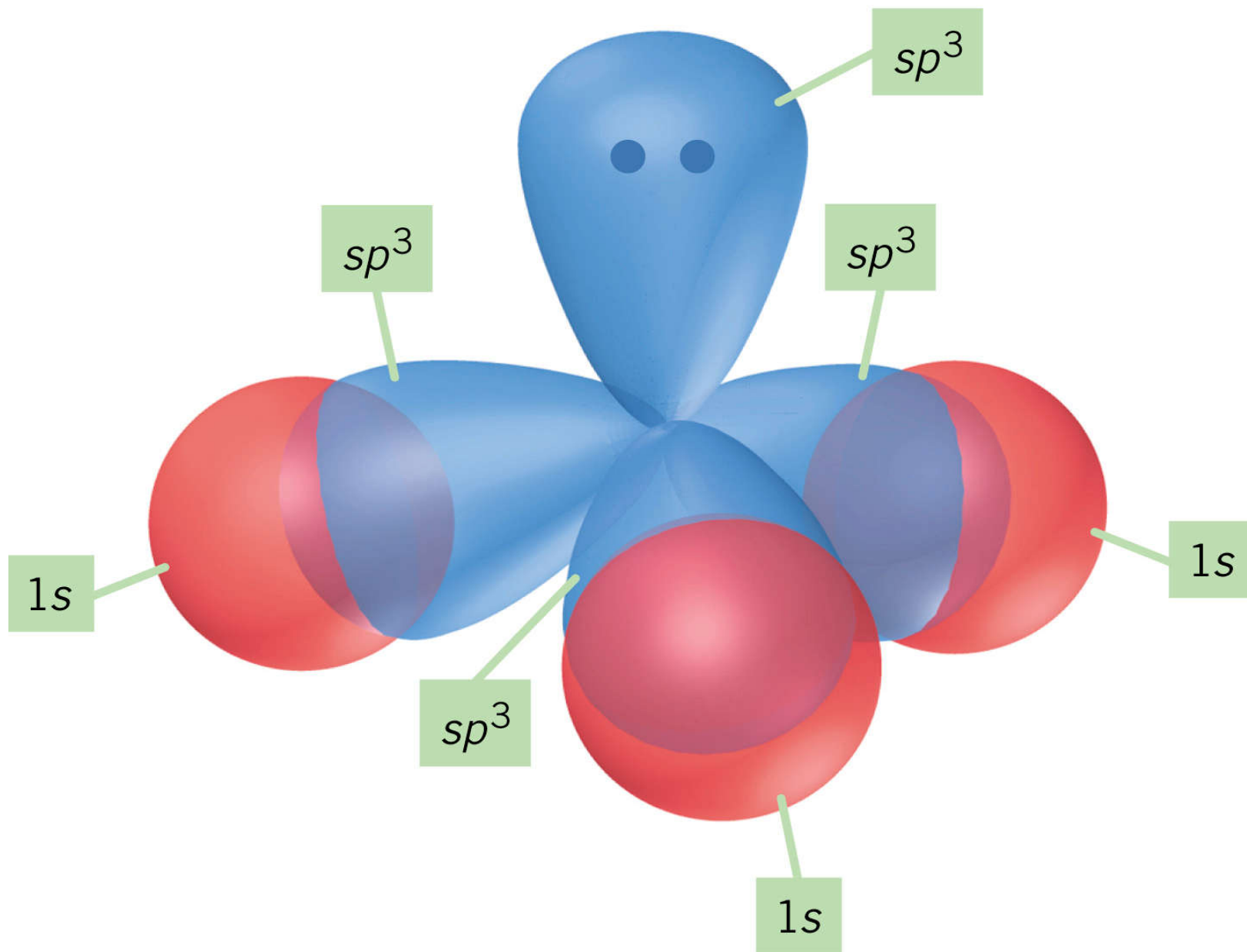


BỐN AO LẠI HÓA sp<sup>3</sup>  
 $\Rightarrow$  ↓ --

**sp<sup>3</sup>**

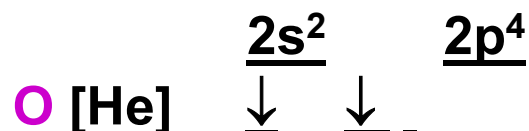
**1 unshared pair**





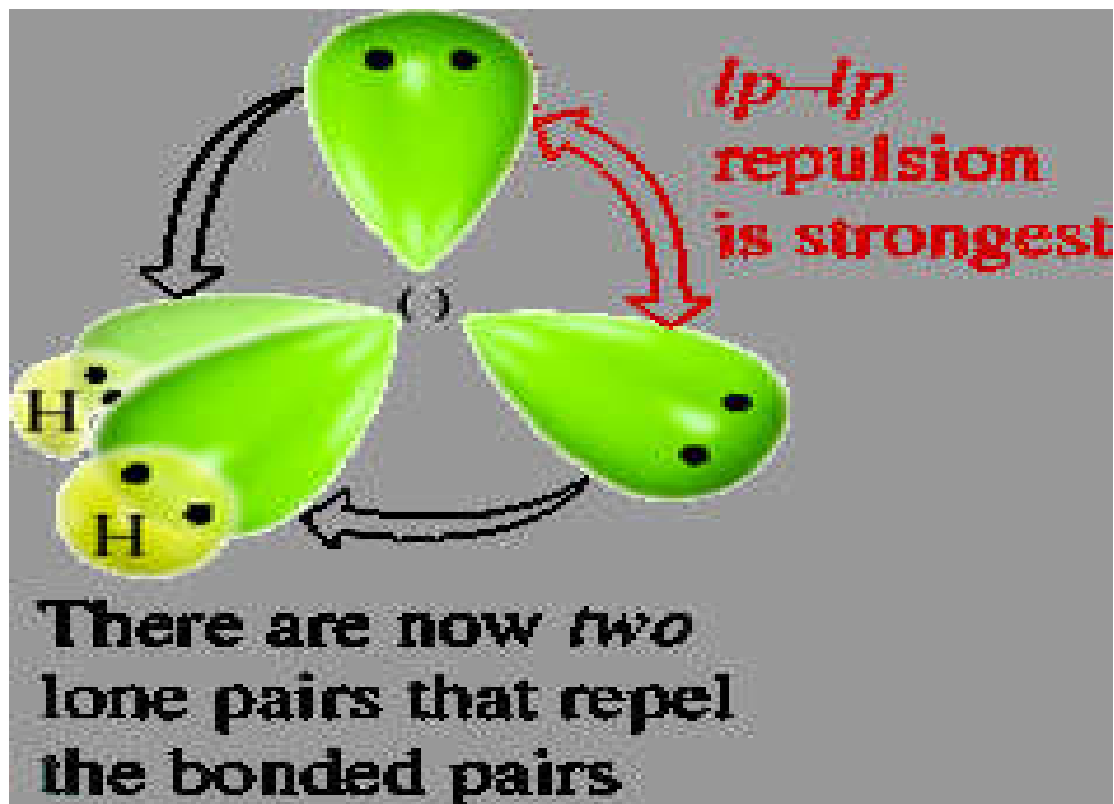
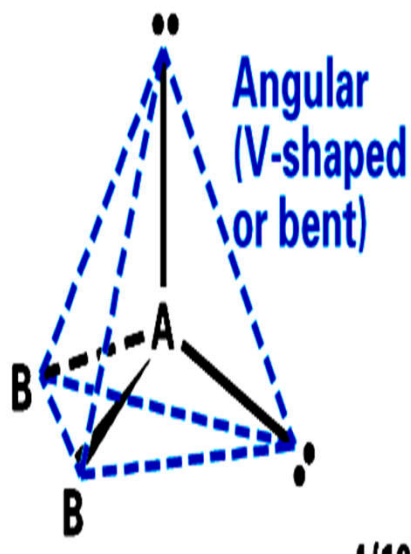
# H<sub>2</sub>O (AB<sub>2</sub>E<sub>2</sub>)

số cặp e quanh O =  $\frac{1}{2}(8-2 \cdot 2) + 2 = 2 + 2 = 4 \rightarrow sp^3$

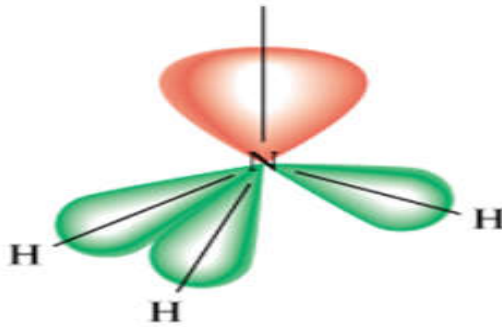
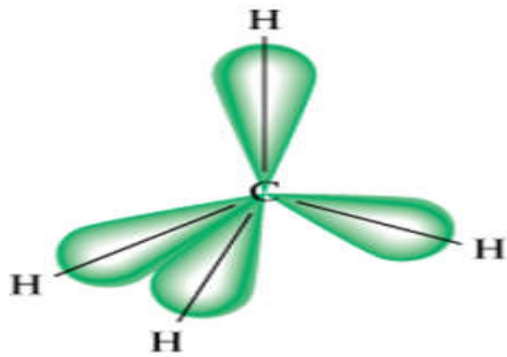


$sp^3$

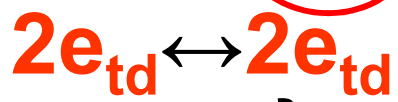
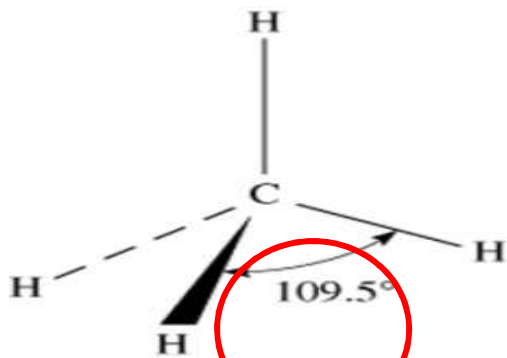
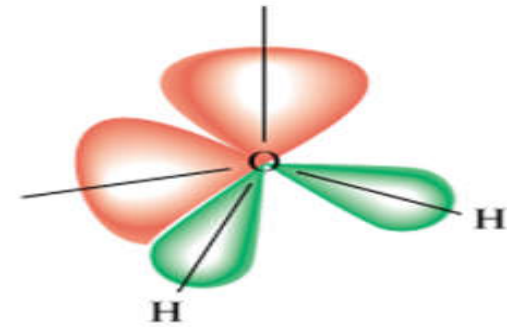
2 unshared pairs



# Ảnh hưởng của cặp điện tử tự do

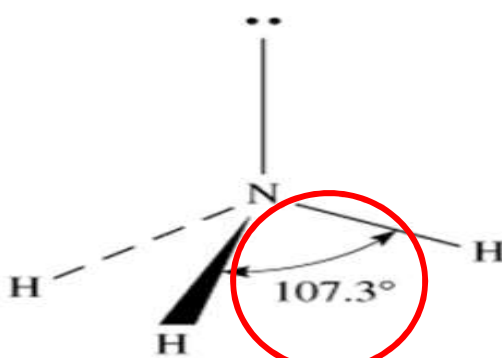


(a)



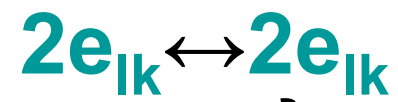
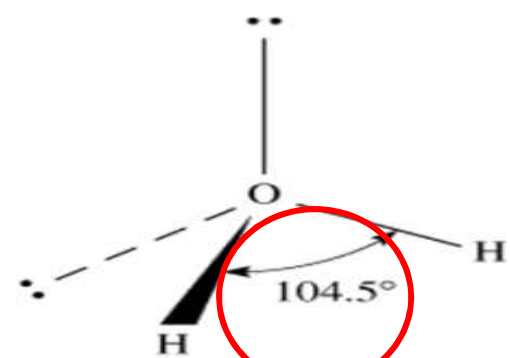
Lực đẩy

>



Lực đẩy

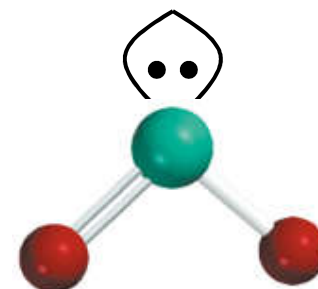
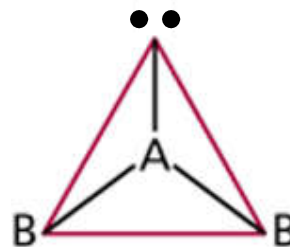
>



Lực đẩy

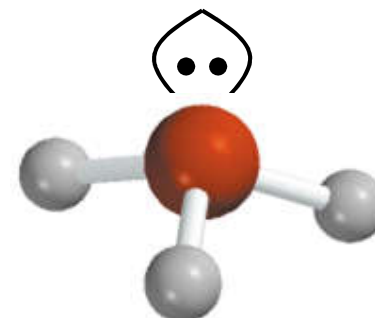
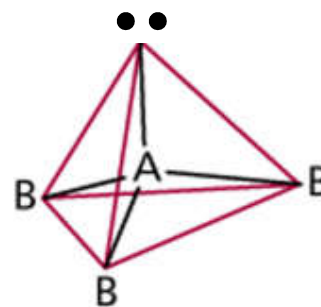
# VSEPR

<u>Loại ptử</u>	<u>Số cặp e liên kết</u>	<u>Số cặp e tự do</u>	<u>Sự định hướng của cặp e</u>	<u>Hình học phân tử</u>
$AB_3$	3	0	Tam giác phẳng	Tam giác phẳng
$AB_2E$	2	1	Tam giác phẳng	góc

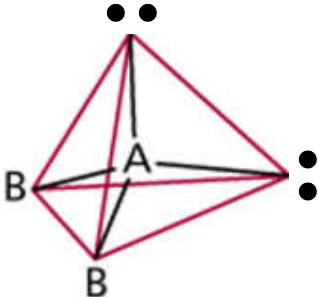
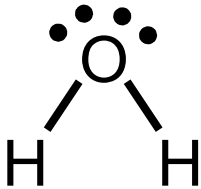


# VSEPR

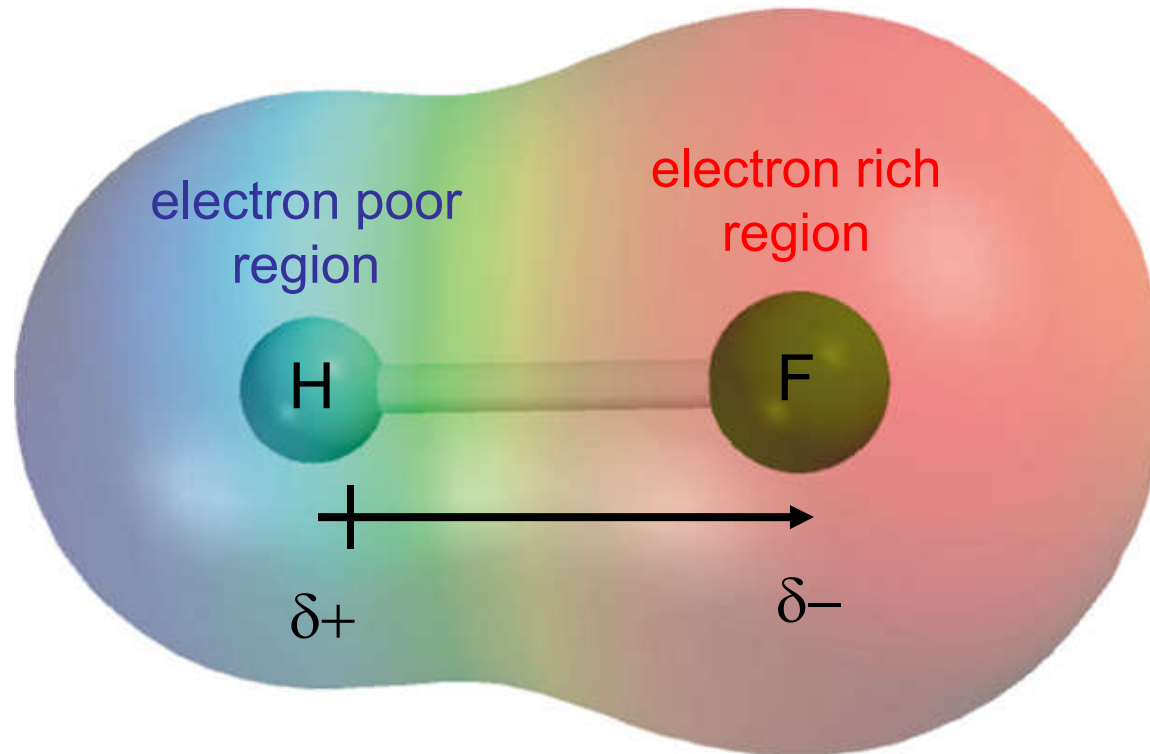
<u>Loại p tử</u>	<u>Số cặp Electron Liên kết</u>	<u>Số cặp Electron Tự do</u>	<u>Sự định hướng Các cặp e</u>	<u>Hình học Phân tử</u>
$AB_4$	4	0	Tứ diện	Tứ diện
$AB_3E$	3	1	Tứ diện	Tháp tam giác



# VSEPR

<u>Loại ptử</u>	<u>Số cặp Electron Liên kết</u>	<u>Số cặp Electron Tự do</u>	<u>Sự định hướng Các cặp e</u>	<u>Hình học Phân tử</u>
$AB_4$	4	0	Tứ diện	Tứ diện
$AB_3E$	3	1	Tứ diện	Tháp tam giác
$AB_2E_2$	2	2	Tứ diện 	<b>Góc</b> 

# Momen lưỡng cực và phân tử chđt có cực



**Momen lưỡng cực**  $\mu = \delta \times l$

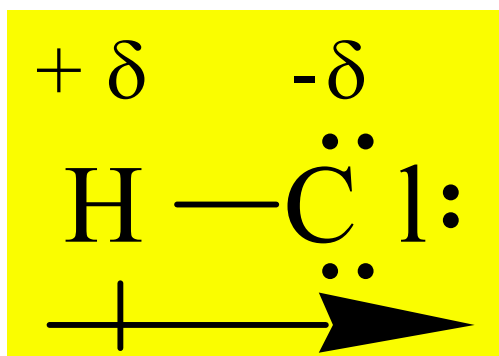
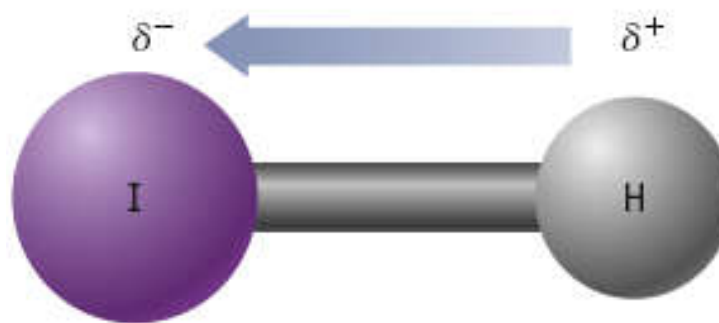
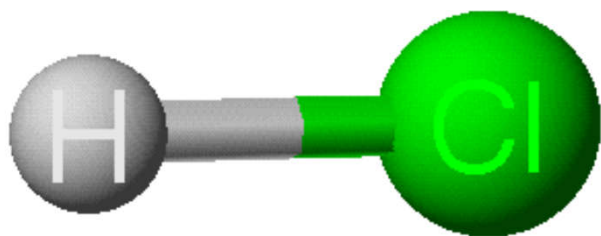
$\delta$  Điện tích [đơn vị tĩnh điện]

$l$  khoảng cách giữa hai điện tích[cm]

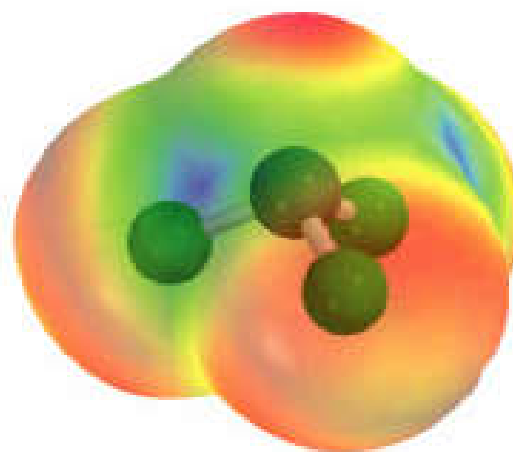
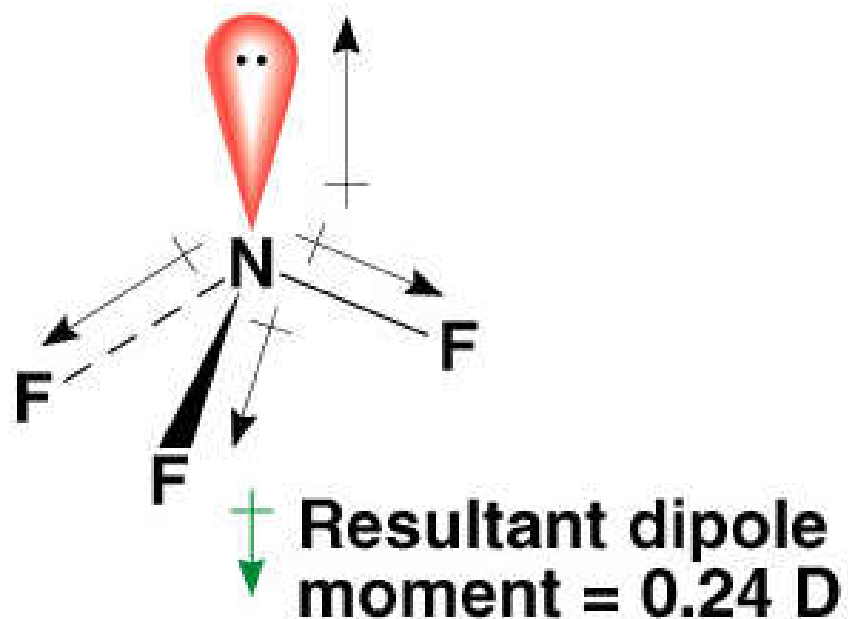
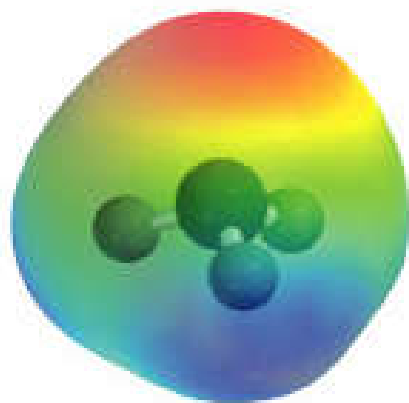
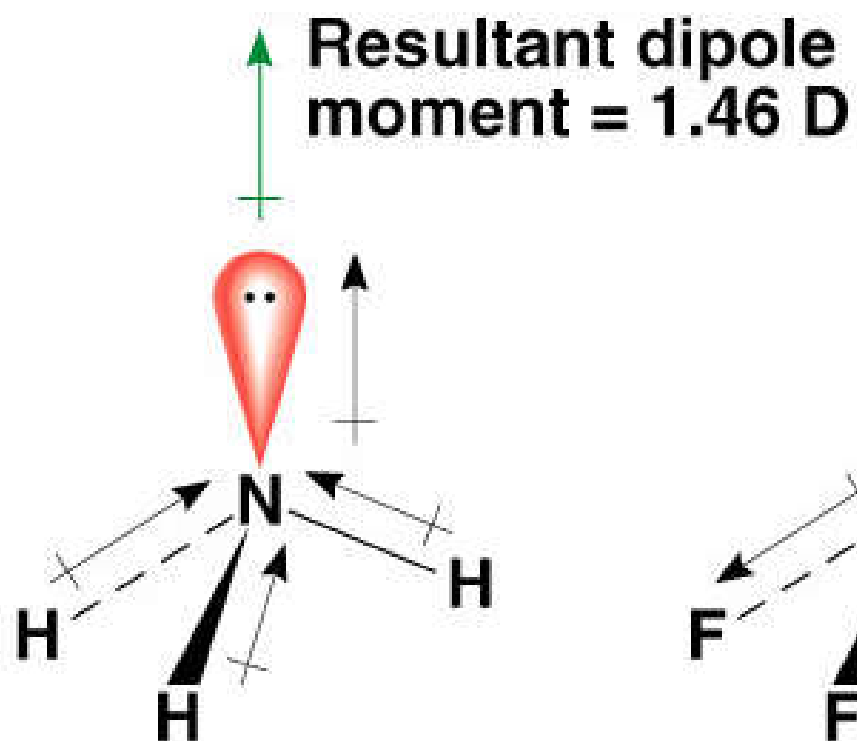
1 D =  $3.36 \times 10^{-30}$  C m =  $10^{-18}$  đvtd.cm



# Momen lưỡng cực phân tử

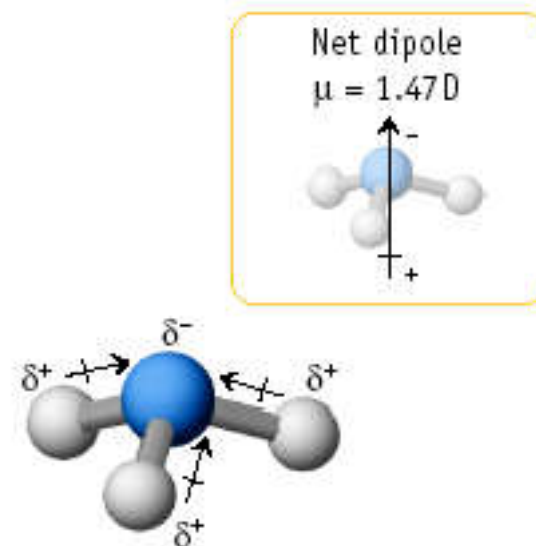
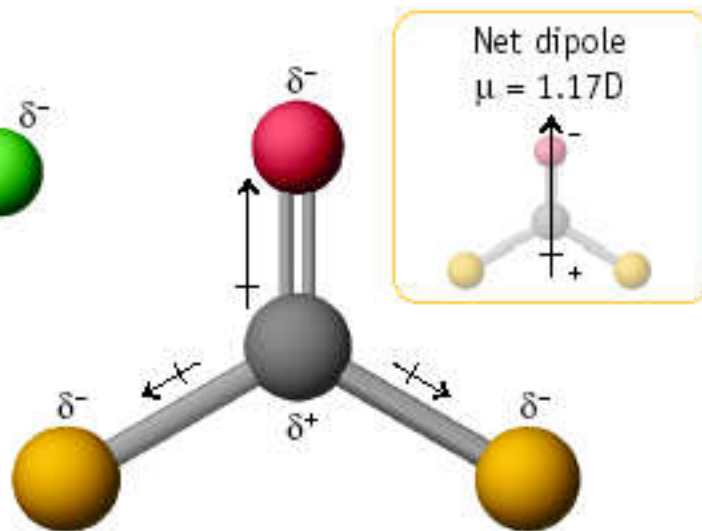
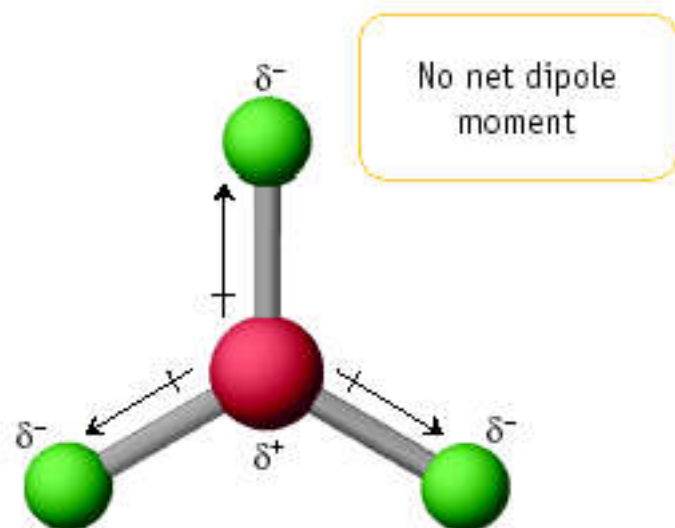


- **Momen lưỡng cực của phân tử là tổng vectơ momen lưỡng cực của các liên kết và cặp electron hoá trị tự do trong các AO lai hóa có trong phân tử.**

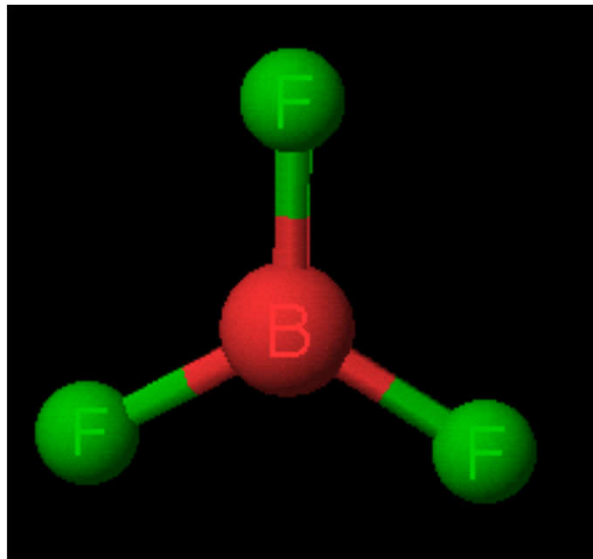
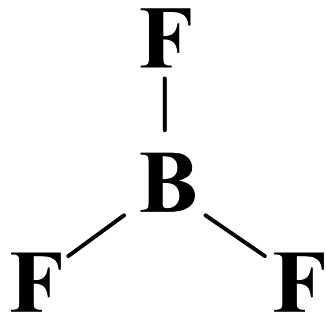


# Có cực hay không cực?

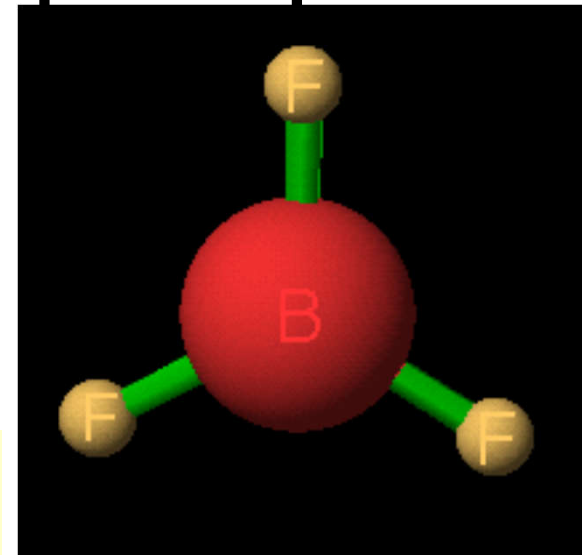
**$\text{BF}_3$ ,  $\text{Cl}_2\text{CO}$ , và  $\text{NH}_3$ .**



# Phân tử không cực, $\text{BF}_3$

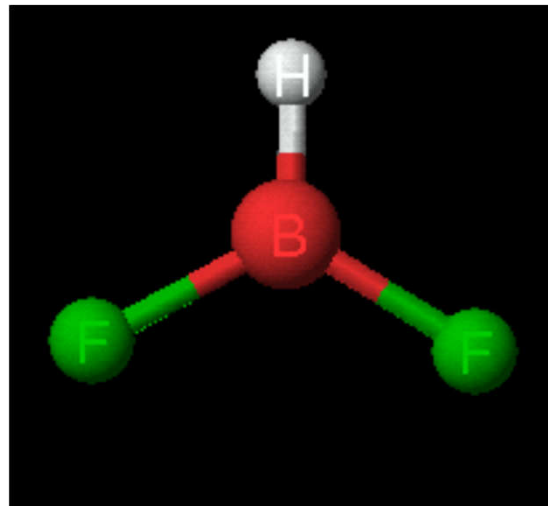
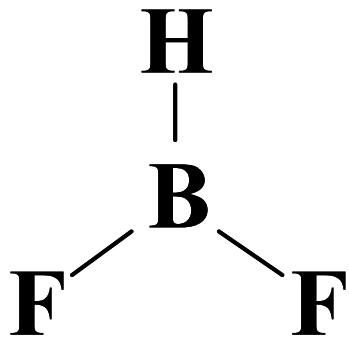


Nguyên tử B bị phân cực dương và nguyên tử F bị phân cực âm.



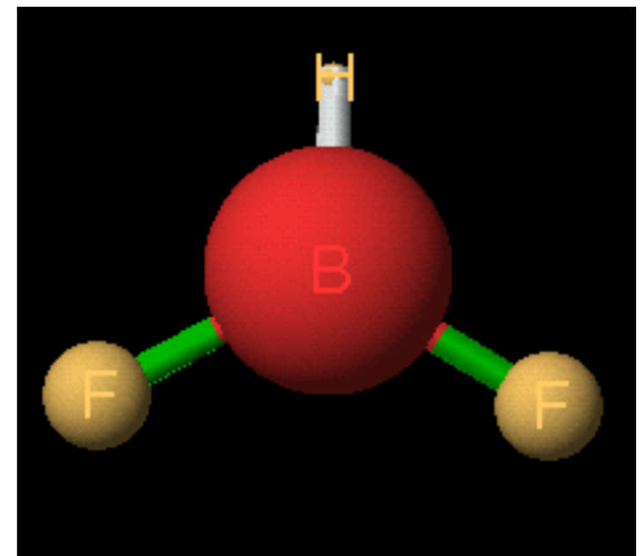
Liên kết B—F trong phân tử  $\text{BF}_3$  là  
Nhưng phân tử có cấu tạo đối xứng nên không cực.

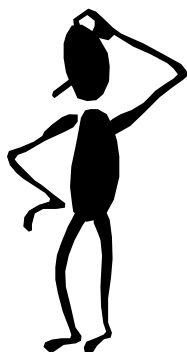
# Molecular Polarity, $\text{HBF}_2$



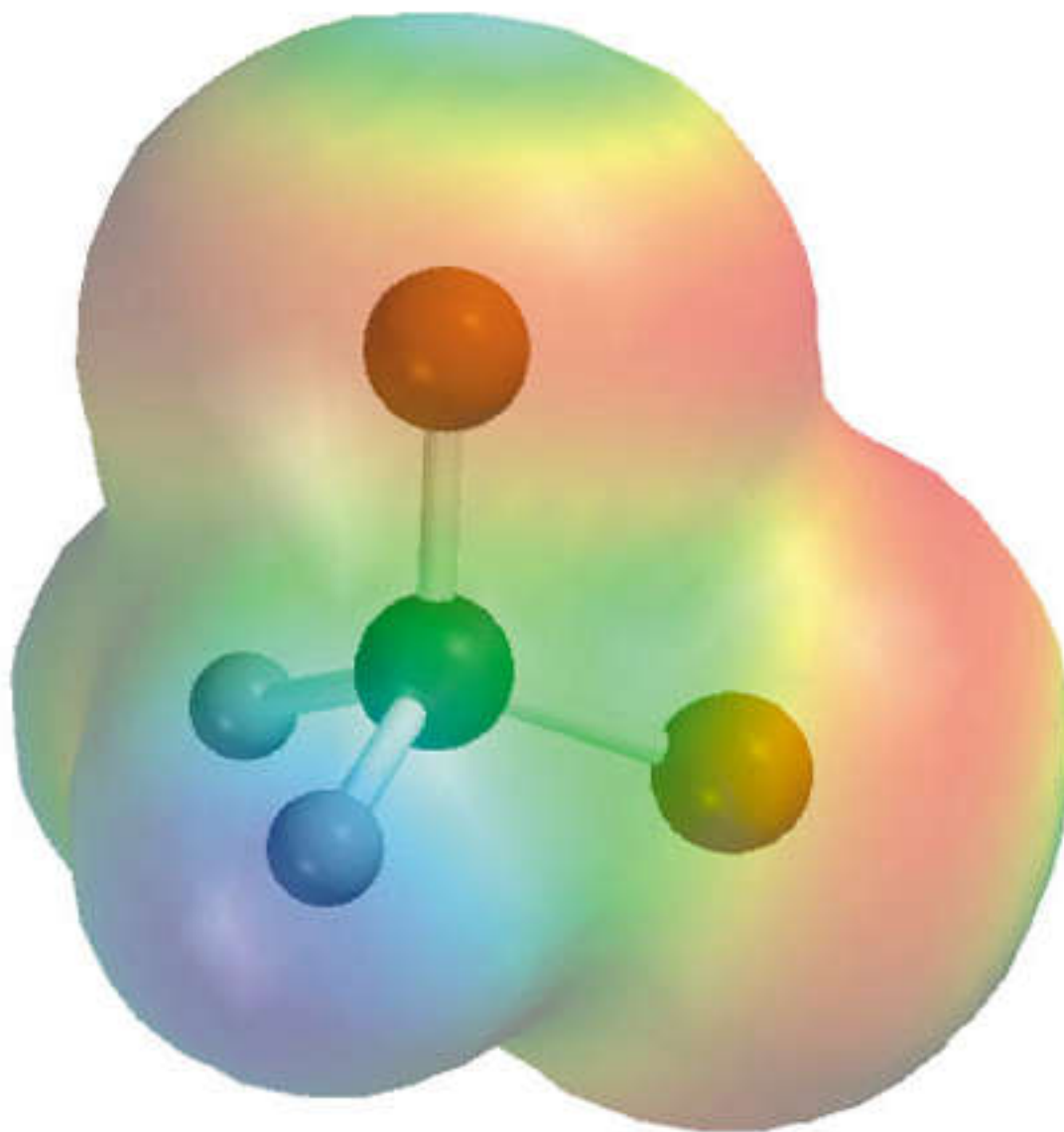
B bị phân cực dương nhưng H & F bị phân cực âm.

Liên kết B—F và B—H trong  $\text{HBF}_2$  là có cực. Nhưng do ptử không đối xứng nên có cực.



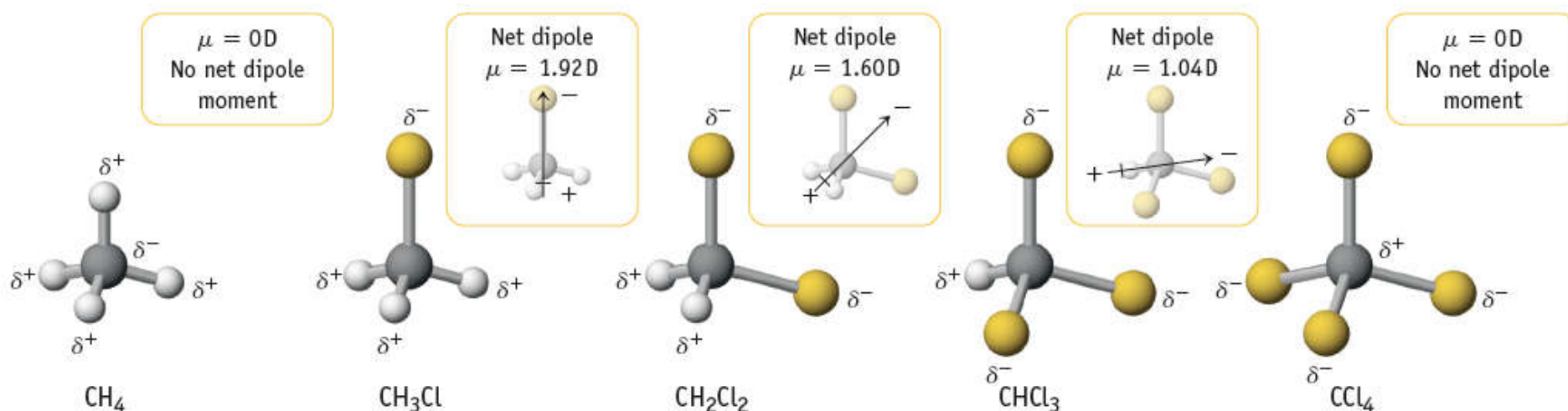


**$\text{CH}_2\text{Cl}_2$  có  
momen  
lượng cực  
hay không ?**



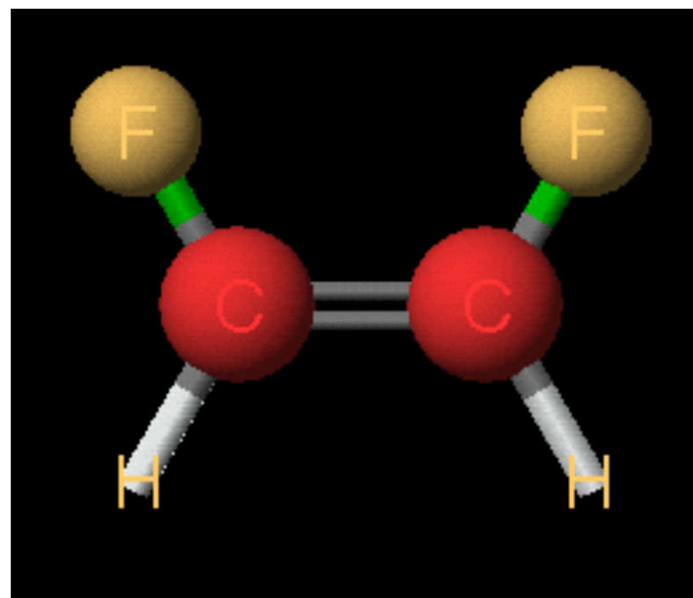
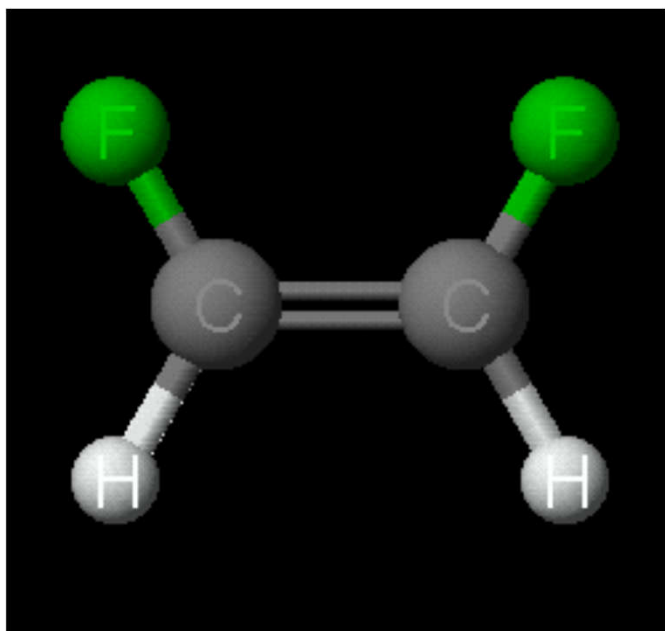
# CH<sub>4</sub> ... CCl<sub>4</sub>

## Có cực hay không cực?



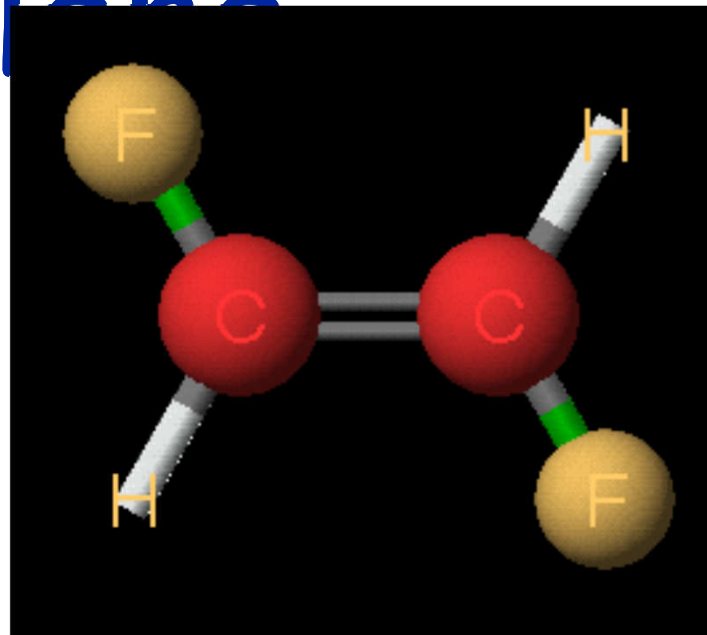
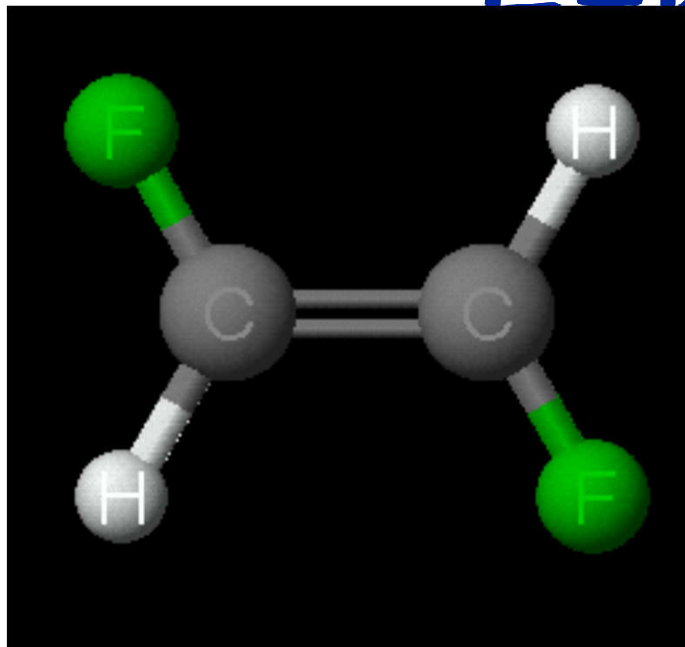
- Only CH<sub>4</sub> and CCl<sub>4</sub> are NOT polar. These are the only two molecules that are “symmetrical.”





- Liên kết C—F phân cực mạnh hơn liên kết C—H.
- Do cả hai liên kết C—F ở cùng một phía ,phân tử có cực.

# Substituted Ethylene



- Liên kết C—F phân cực mạnh hơn liên kết C—H.
- Do cả hai liên kết C—F nằm ở hai phía đối nhau , **phân tử không phân cực**

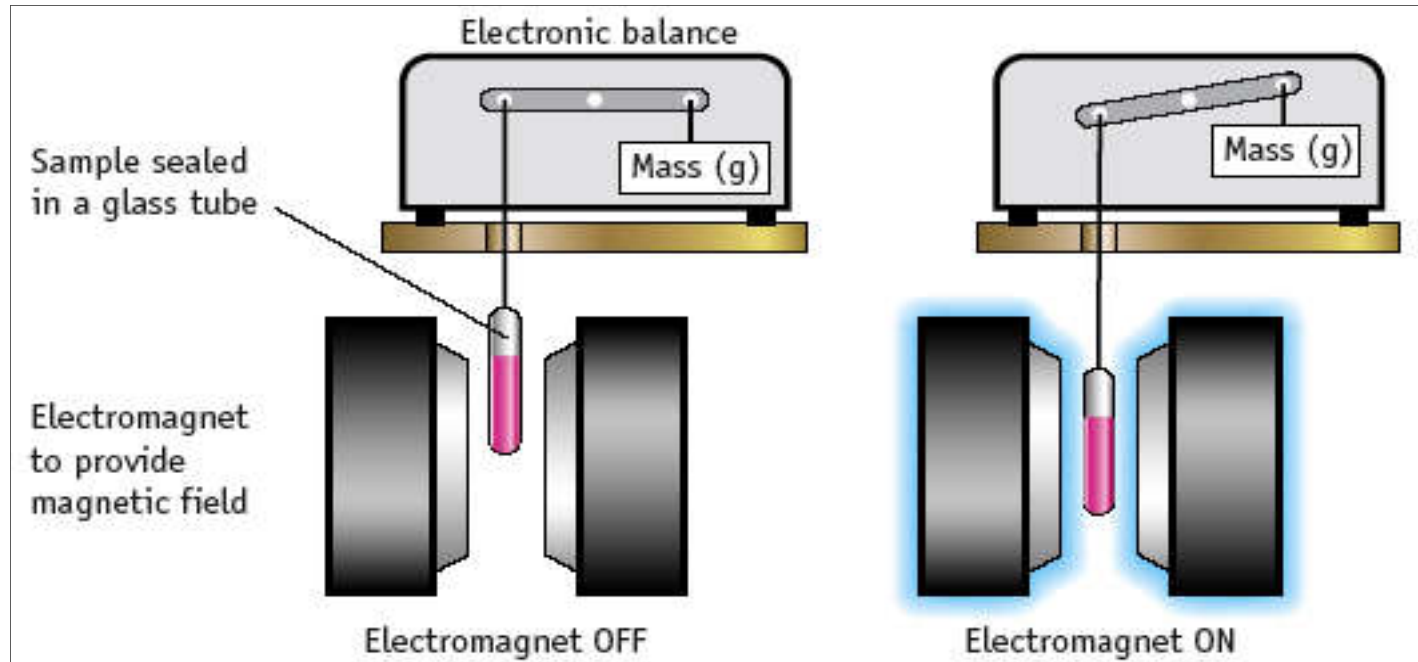
# Dipole Moments

## Momen lưỡng cực

**Table 9.8** Dipole Moments of Selected Molecules

Molecule (AB)	Moment ( $\mu$ , D)	Geometry	Molecule (AB <sub>2</sub> )	Moment ( $\mu$ , D)	Geometry
HF	1.78	linear	H <sub>2</sub> O	1.85	bent
HCl	1.07	linear	H <sub>2</sub> S	0.95	bent
HBr	0.79	linear	SO <sub>2</sub>	1.62	bent
HI	0.38	linear	CO <sub>2</sub>	0	linear
H <sub>2</sub>	0	linear			
Molecule (AB <sub>3</sub> )	Moment ( $\mu$ , D)	Geometry	Molecule (AB <sub>4</sub> )	Moment ( $\mu$ , D)	Geometry
NH <sub>3</sub>	1.47	trigonal-pyramidal	CH <sub>4</sub>	0	tetrahedral
NF <sub>3</sub>	0.23	trigonal-pyramidal	CH <sub>3</sub> Cl	1.92	tetrahedral
BF <sub>3</sub>	0	trigonal-planar	CH <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub>	1.60	tetrahedral
			CHCl <sub>3</sub>	1.04	tetrahedral
			CCl <sub>4</sub>	0	tetrahedral

# Tính chất từ của phân tử



- **chất thuận từ (Paramagnetic)**: chất có electron độc thân. Chất này khi đặt trong từ trường sẽ bị nam châm hút.
- **Chất nghịch từ (Diamagnetic)**: chất không có điện tử độc thân. Chất này khi đặt trong từ trường sẽ bị đẩy.