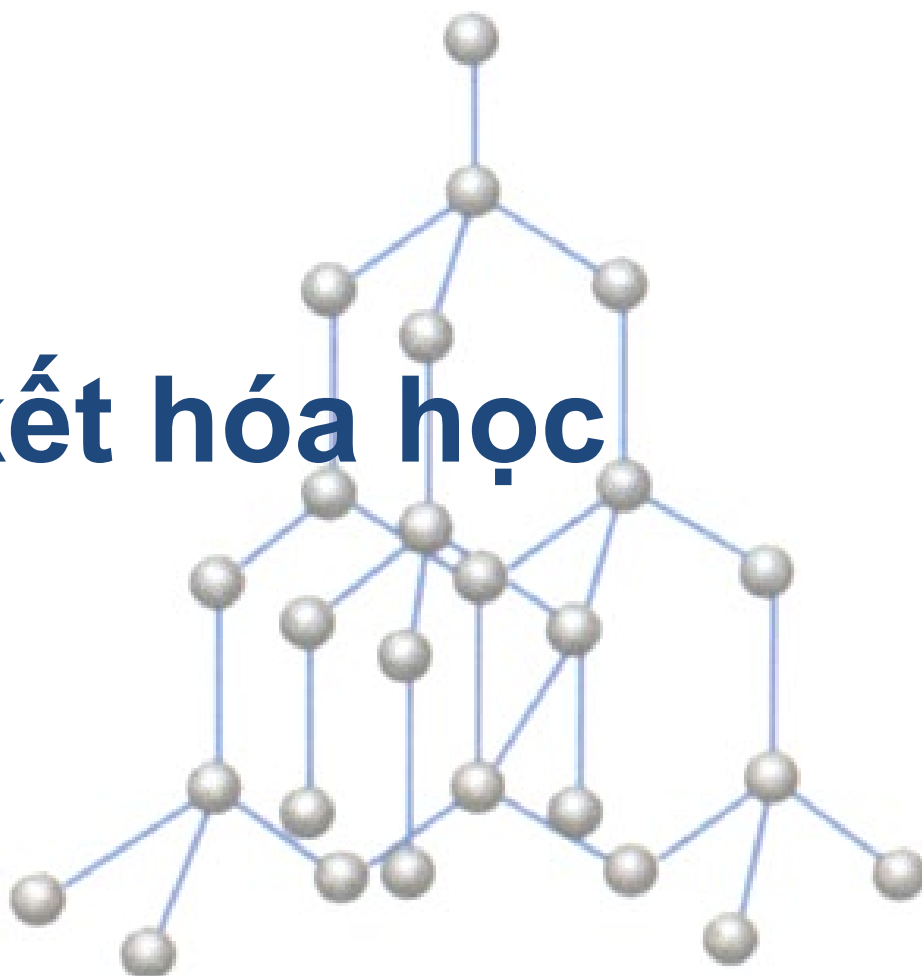


Sở GD và ĐT Thừa Thiên Huế
Trường THPT chuyên Quốc Học

Liên kết hóa học



- Nguyễn Viết Kỳ Long
- Phạm Thị Ngọc Hòa
- Nguyễn Thị Khánh Vy
- Nguyễn Văn Việt Văn
- Nguyễn Thị Thanh Hòa
- Nguyễn Thị Phương Thảo
- Mai Trần Phước Lộc
- Nguyễn Đình Thiên Phú

Nhóm 4

Lớp 10 Hóa

Niên Khóa: 2010 – 2013

Huế, 10-2010

Lời nói đầu

Nhóm 4 lớp 10 Hóa trường THPT chuyên Quốc Học, với đề tài tiểu luận của mình là “Liên Kết Hóa Học”, chúng tôi hy vọng đã có thể chuyển tải những nội dung cơ bản và phù hợp với kiến thức phổ thông nâng cao về các mẫu chốt, trọng tâm cơ bản của nội dung này. Xin được chia tiểu luận này làm 2 phần: Lí thuyết và bài tập

Phần lí thuyết – bằng những kiến thức của mình cùng với việc tham khảo một số tài liệu, chúng tôi muốn truyền tải phần nội dung của “Liên Kết Hóa Học” một cách ngắn gọn, đầy đủ và dễ hiểu. Những phần kiến thức trong tiểu luận cũng có giới hạn trong chương trình chuyên lớp 10.

Phần bài tập – Là những đề bài, những bài tập mà mỗi thành viên trong nhóm thu thập và đóng góp, đi cùng đề bài là bài giải. Những bài tập này, theo chúng tôi nhận xét là không phải dễ, nhưng cũng không quá khó nếu tìm hiểu lí thuyết kĩ càng.

Nhóm chúng tôi rất hân hạnh nhận được sự góp ý của thầy cô và bạn đọc để bổ sung những điểm khuyết hay sửa chữa những nhầm lẫn và sai sót. Xin cảm ơn quý thầy cô và các bạn đã dành thời gian theo dõi tiểu luận này.

*Nhóm 4 lớp 10 Hóa, THPT chuyên Quốc Học
Niên khóa 2010 – 2013*

A. Khái quát về liên kết hóa học

I. Khái niệm về liên kết hóa học

Liên kết hóa học là sự kết hợp giữa các nguyên tử để tạo thành phân tử hoặc tinh thể bền hơn

II. Vì sao các nguyên tử phải liên kết với nhau?

- Đối với các nguyên tử khí hiếm, do các phân lớp đã bão hòa nên cấu hình electron vững bền. Do đó các nguyên tử có thể tồn tại độc lập từng nguyên tử riêng biệt
- Đối với các nguyên tử khác khí hiếm, do các phân lớp chưa bão hòa nên cấu hình electron chưa bền vững, do đó các nguyên tử không thể tồn tại độc lập từng nguyên tử riêng biệt mà phải luôn liên kết với nhau để tạo thành những phân tử hoặc tinh thể bền hơn

III. Các kiểu liên kết chính

Có 2 kiểu liên kết chính:

- Hoặc có sự chuyển e từ nguyên tử này sang nguyên tử khác, lúc đó liên kết được hình thành là liên kết ion
- Hoặc có sự góp chung e, lúc đó liên kết được hình thành là liên kết cộng hóa trị

IV. Quy tắc bát tử (Octet)

Chúng ta đều biết ở điều kiện thường, các nguyên tử khí trơ (hay khí quý) như Xe, Ar, Ne,... đều rất bền về mặt hóa học. Người ta khẳng định được rằng sự bền vững đó là do sự bão hòa electron ở vỏ hóa trị - tức là lớp ngoài cùng - của nguyên tử mỗi nguyên tố đó. Số electron vỏ hóa trị bão hòa này là 8.

Liuyxơ đưa ra quy tắc sau đây, thường được gọi là quy tắc bát tử hay octet:

Khi tạo ra thêm một phân tử (có từ hai nguyên tử trở lên) nguyên tử thu thêm hoặc mất bớt hoặc góp chung electron để nguyên tử đó có 8 electron ở vỏ



*Gilbert Newton Lewis
(1875-1946)*

hóa trị (hay lớp ngoài cùng)

Có một số ngoại lệ đối với quy tắc này.

Sau khi liên kết hóa học đã hình thành mà ở vỏ hóa trị của nguyên tử chỉ có 2e như Li^+ , Be^{2+}

Cũng có trường hợp khi liên kết hóa học đã được hình thành, ở vỏ hóa trị của các nguyên tử chỉ có số electron khác 8e và khác 2e. Thực tế quy tắc này chỉ áp dụng chủ yếu cho nguyên tố chu kì II

Bây giờ ta xét các trường hợp hình thành liên kết hóa học, áp dụng được quy tắc bát tử.

V. Electron hóa trị

Electron hóa trị hay **electron ngoài cùng** là những electron ở các orbital ngoài cùng và có thể tham gia vào các liên kết của nguyên tử. Electron hóa trị các nguyên tố nhóm chính nằm ở lớp ngoài cùng, trong nguyên tố nhóm phụ (kim loại chuyển tiếp) electron hóa trị có tại lớp ngoài cùng và lớp d kế cận.

Các electron hóa trị có thể hay không tham gia vào liên kết của nguyên tử, phụ thuộc vào trạng thái hóa học của nguyên tử, khi tham gia chúng được gọi là electron liên kết. Ví dụ, clo trong HCl có 1 electron hóa trị tham gia liên kết, nhưng ở HClO_4 có 7 electron liên kết.

B. Các dạng liên kết hóa học chủ yếu

I. Liên kết ion

1. Ion, sự tạo thành ion

Ion: là nhóm nguyên tử hoặc nguyên tử mang điện tích
Ví dụ: NH_4^+ , SO_3^{2-} , Na^+ , Cl^- ,...

Có thể phân loại ion dựa vào điện tích (ion dương và ion âm hay cation và anion) hoặc dựa vào số nguyên tử có trong ion (ion đơn nguyên tử và ion đa phân tử)

Ion dương:

Ví dụ: Nguyên tử Na có cấu hình e $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$, có nhiều hơn nguyên tử Ne ($1s^2 2s^2 2p^6$) một electron, vì vậy nó dễ dàng nhường 1 e ở lớp ngoài cùng. Khi nguyên tử Na nhường một electron, vỏ nguyên tử chỉ còn 10 electron trong khi đó số proton trong hạt nhân vẫn là 11, như vậy là dư ra 1 điện tích dương và nguyên tử Na không còn trung hòa về điện nữa mà đã biến thành một hạt mang điện, đó là ion dương (Na^+)

Sơ đồ tổng quát: $M \rightarrow M^{n+} + ne$

Gọi tên: ion + tên kim loại tương ứng.

Ion âm

Ví dụ: nguyên tử clo có 17e và 17p ($1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$), ít hơn nguyên tử khí hiếm gần nó nhất là argon 1 electron (Ar: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$), do đó nó dễ dàng nhận thêm 1 e cho đủ 8 electron ngoài cùng ứng với cấu hình $ns^2 np^6$. Khi nhận thêm e, số e ở vỏ tăng lên 18 trong khi số p trong nhân vẫn là 17. Như vậy là dư ra 1 điện tích âm. Nguyên tử clo không còn trung hòa về điện nữa mà đã biến thành một hạt mang điện âm, đó là ion âm clorua (Cl^-)

Sơ đồ tổng quát: $X + me \rightarrow X^{m-}$

Gọi tên: ion + gốc axit tương ứng

2. Sự tạo thành liên kết ion

Để có 8e ở lớp vỏ hóa trị, nguyên tử kim loại mất số e hóa trị vốn có để trở thành cation, nguyên tử phi kim thu hay nhận thêm e để trở thành anion.

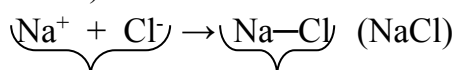
Khi hai ion tích điện trái dấu hút nhau (bằng lực hút tĩnh điện) tạo ra hợp chất liên kết ion.

Ví dụ: xét sự tạo thành liên kết trong NaCl khi đốt Na trong Cl_2

- Sự tạo thành ion:

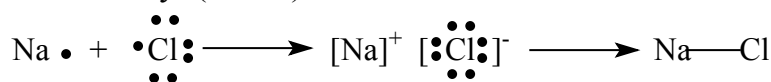


- Lúc này giữa Na^+ và Cl^- có lực hút tạo thành liên kết ion Na—Cl (ứng với NaCl)



Lực hút Liên kết ion

- Sơ đồ Li-uyt (Lewis)



- PTPU: $2\text{Na} + \text{Cl}_2 \rightarrow 2\text{NaCl}$

- Ta có kết luận:

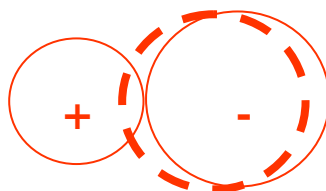
Electron chuyển từ nguyên tử kim loại sang nguyên tử phi kim tạo thành các ion tích điện trái dấu, các ion này hút nhau tạo thành hợp chất ion

Định nghĩa: Liên kết ion là liên kết hóa học được hình thành nhờ lực hút tĩnh điện giữa các ion trái dấu

Lúc đó hiệu độ âm điện $\Delta X \geq 1,7$

3. Sự phân cực ion:

Định nghĩa: Sự phân cực ion là sự chuyển dịch đám mây e ngoài cùng so với hạt nhân của một ion dưới tác dụng của điện trường của ion khác.



Hình 4.10. Sự phân cực ion

Do sự phân cực ion này mà các đám mây của cation và anion không hoàn toàn tách rời nhau mà che phủ nhau một phần $\rightarrow$ Không có liên kết ion 100%. Trong liên kết ion có một phần liên kết cộng hóa trị.

4. Các yếu tố ảnh hưởng đến sự tạo thành liên kết ion

Có 3 yếu tố:

- Năng lượng ion hóa
- Ái lực electron
- Năng lượng của mạng lưới tinh thể

a) Năng lượng ion hóa

Nguyên tử có năng lượng ion hóa càng nhỏ càng dễ tách electron và trở thành ion dương (cation)

Ví dụ: Năng lượng ion hóa thứ nhất của nguyên tử Na, Li, Be lần lượt là 496 kJ/mol, 500 kJ/mol, 900 kJ/mol. Theo đó thì nguyên tử Na dễ biến thành ion dương hơn nguyên tử Li và nguyên tử Li dễ biến thành ion dương hơn nguyên tử Be

b) Ái lực electron

- Trong quá trình cho nhận electron giữa các nguyên tử còn có sự tỏa nhiệt. Năng lượng tỏa ra đó gọi là ái lực electron.

- Định nghĩa: Ái lực electron là năng lượng tỏa ra khi một nguyên tử kết hợp với electron để trở thành ion âm.
- Ái lực electron của một nguyên tố càng lớn thì nguyên tố đó càng dễ nhận electron để trở thành ion âm.
- Ví dụ: Ái lực electron của các nguyên tố Cl, Br, I lần lượt là 389 kJ/mol, 342 kJ/mol, 295 kJ/mol. Theo các số liệu trên thì clo dễ biến thành ion âm hơn brom và brom dễ biến thành ion âm hơn iot

c) Năng lượng mạng lưới

- Khi các ion được tạo thành, chúng hút nhau bằng lực hút tĩnh điện để tạo thành hợp chất. Quá trình này tỏa ra một lượng nhiệt lớn.
- Năng lượng tỏa ra khi các ion kết hợp với nhau để tạo thành mạng lưới tinh thể được gọi là năng lượng mạng lưới.
- Năng lượng mạng lưới càng lớn thì tinh thể tạo thành càng bền.

5. Độ bền của hợp chất ion

- Muốn xét xem các ion ngược dấu hút nhau mạnh yếu tới mức nào, người ta đưa ra một đại lượng gọi là năng lượng phân li (kí hiệu là E_{pl}) của một cặp ion
- Định nghĩa: năng lượng phân li là năng lượng cần thiết để phá hủy tinh thể ion tạo thành các ion tự do
$$|E_{\text{mạng lưới}}| = |E_{\text{phân li}}|$$
- Năng lượng phân li tỉ lệ thuận với điện tích của các ion: Điện tích của các ion càng lớn, chúng hút nhau càng mạnh nên năng lượng cần thiết để phá hủy tinh thể ion càng lớn. Do đó năng lượng phân li càng lớn.
- Năng lượng phân li tỉ lệ nghịch với kích thước ion: Kích thước ion càng lớn thì chúng hút nhau càng yếu.

6. Hóa trị của các nguyên tố

Hóa trị của một nguyên tố trong hợp chất ion (gọi tắt là điện hóa trị) bằng điện tích của ion đó

Ví dụ 1: NaCl

Điện hóa trị của Na là 1+, của Cl là 1-

Ví dụ 2: BaO

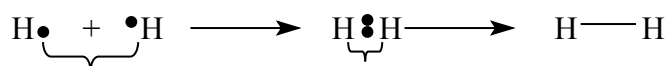
Điện hóa trị của Ba là 2+, của O là 2-

II. Liên kết cộng hóa trị

I. Sự tạo thành liên kết cộng hóa trị bằng cặp electron chung

1. Đối với các đơn chất

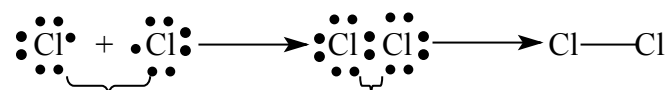
Ví dụ 1: H_2



Góp chung e 1 cặp e chung

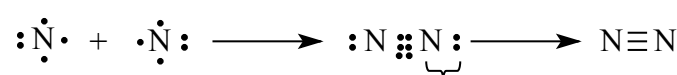
Nhờ sự góp chung 1 electron nên trong phân tử H_2 , mỗi nguyên tử H trở nên có 2 electron, đạt cấu hình electron của He

Ví dụ 2: Cl_2



Góp chung e 1 cặp e chung

Ví dụ 3: N_2



Có 3 cặp e chung

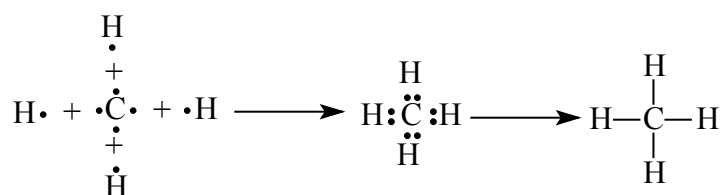
2. Đối với hợp chất

Ví dụ 1: HCl



Mỗi nguyên tử hidro và mỗi nguyên tử clo góp 1e để tạo thành một cặp electron chung. Trong phân tử HCl, mỗi nguyên tử đều có cấu hình electron của khí hiếm

Ví dụ 2: CH_4



Định nghĩa: Liên kết cộng hóa trị là liên kết giữa hai nguyên tử bằng một hoặc nhiều electron chung mà cặp electron chung này là do sự góp chung của hai nguyên tử tham gia liên kết.

II. Tính chất của liên kết cộng hóa trị

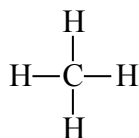
1. Bậc của liên kết

Định nghĩa: Bậc của liên kết là số cặp e góp chung bởi hai nguyên tử trong một phân tử

a. Bậc một (còn gọi là liên kết đơn)

Liên kết có bậc một khi chỉ có một liên kết giữa hai nguyên tử

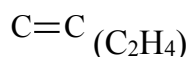
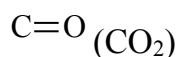
Ví dụ: $H-H$, $H-Cl$,



b. Bậc hai

Liên kết có bậc hai khi có hai cặp electron chung giữa hai nguyên tử

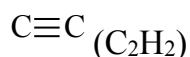
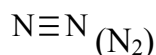
Ví dụ:



c. Bậc ba (còn gọi là liên kết ba)

Liên kết có bậc ba khi có 3 cặp electron chung giữa hai nguyên tử

Ví dụ:



2. Độ dài liên kết

- Độ dài liên kết là khoảng cách giữa các hạt nhân của hai nguyên tử liên kết với nhau
- Các yếu tố ảnh hưởng đến độ dài liên kết
 - Kích thước nguyên tử: Kích thước nguyên tử càng lớn, độ dài liên kết càng lớn
 - Bậc của liên kết: Bậc của liên kết càng thấp, độ dài liên kết càng lớn

3. Góc liên kết

Là góc tạo bởi hai nửa đường thẳng xuất phát từ hạt nhân của một nguyên tử và đi qua hạt nhân của hai nguyên tử khác liên kết trực tiếp với hai nguyên tử trên.

Ví dụ: Trong phân tử nước, góc liên kết $\text{HOH}=104^\circ 28'$

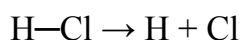
4. Năng lượng liên kết (Kí hiệu: E_{lk})

Định nghĩa: Năng lượng liên kết là năng lượng tỏa ra khi tạo thành một liên kết hóa học từ những nguyên tử cô lập, thường được tính bằng kJ/mol liên kết

Ví dụ: Đối với quá trình tạo thành HCl từ H_2 và Cl_2 , năng lượng tỏa ra là 431 kJ/mol. Đó là năng lượng liên kết H—Cl

Năng lượng phân li, kí hiệu là D, là năng lượng cần thiết để phá vỡ một liên kết hóa học, tách phân tử thành các nguyên tử.

Ví dụ: Đối với quá trình



Năng lượng cần cung cấp là 431 kJ/mol. Đó là năng lượng phân li liên kết H—Cl

Như vậy năng lượng liên kết bằng năng lượng phân li nhưng trái dấu

III. Liên kết cộng hóa trị phân cực và không phân cực

1. Liên kết cộng hóa trị không phân cực

Liên kết cộng hóa trị không phân cực là liên kết cộng hóa trị mà cặp e chung phân bố đồng đều giữa hai nguyên tử tham gia liên kết

Lúc đó hiệu độ âm điện $0 \leq \Delta X \leq 0,4$

Ví dụ: H_2 , Cl_2 , O_2 , N_2

2. Liên kết cộng hóa trị phân cực

Liên kết cộng hóa trị phân cực là liên kết cộng hóa trị mà cặp e chung bị lệch về phía nguyên tử có độ âm điện lớn hơn

Lúc đó hiệu độ âm điện: $0,4 \leq \Delta X \leq 1,7$

Ví dụ: Trong phân tử HCl có $\Delta X = 0,96$, vì clo có độ âm điện lớn hơn của hidro nên cặp electron chung sẽ bị lệch về phía clo

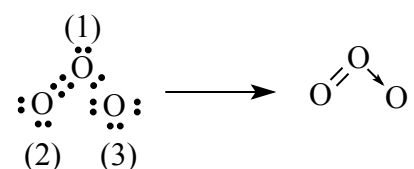
Liên kết trong clo là liên kết có cực, một đầu là cực âm, một đầu là cực dương.

Người ta kí hiệu: δ (đọc là đen ta)

$\delta+$ chỉ một phần điện tích dương; $\delta-$ chỉ một phần điện tích âm

3. Liên kết cho nhận

Ví dụ 1: O_3

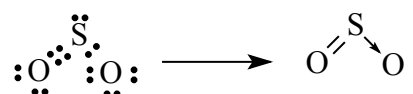


Giữa (1) và (2) góp chung e hình thành cặp e chung, ứng với 2 liên kết cộng hóa trị. Một trong hai nguyên tử oxi này (1 hoặc 2) đưa một cặp e cho (3) dùng chung, ứng với sự hình thành liên kết cho nhận (hay liên kết phối tử), biểu diễn bằng một mũi tên.

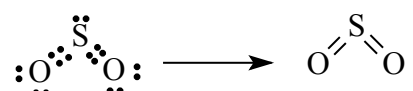
Định nghĩa: Liên kết cho nhận là liên kết giữa hai nguyên tử bằng một hoặc nhiều cặp e chung này là do một nguyên tử đóng góp.

Ví dụ 2: SO_2

Hướng 1: S ở trạng thái cơ bản $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4 3d^0$



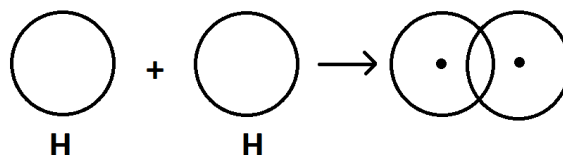
Hướng 2: S ở trạng thái kích thích ($\text{S}^*: 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3 3d^1$)



Giữa S và O hình thành 2 cặp e chung

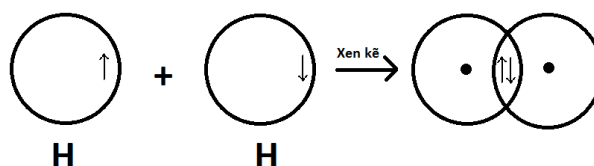
IV. Liên kết cộng hóa trị và sự xen phủ obitan

Ví dụ 1: H_2



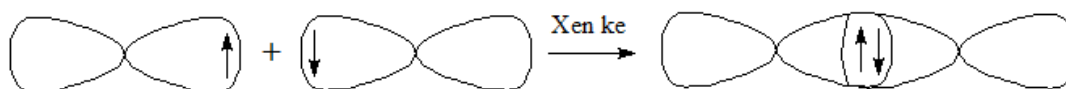
Hai nguyên tử hidro tham gia liên kết: Giữa hai hidro xuất hiện lực đẩy giữa hai hạt nhân với nhau và giữa hai e với nhau, đồng thời còn có lực hút giữa hạt nhân với electron.

Khi lực đẩy và lực hút cân bằng, liên kết được hình thành, cặp e chung tập trung ở hai vùng xen phủ vì tại đó electron chịu lực hút mạnh nhất của cả hai hạt nhân



Hai electron tham gia góp chung để hình thành liên kết phải có spin đối song

Ví dụ 2: Cl_2



V. Momen lưỡng cực

1. Không có ranh giới rõ ràng giữa liên kết cộng hóa trị và liên kết ion

Cl_2	HCl	$LiCl$
$Cl:Cl$	$H:Cl$	$Li-Cl$
Liên kết cộng hóa trị không phân cực (điện cực âm và dương trùng nhau)	Liên kết cộng hóa trị phân cực (lưỡng cực)	Liên kết ion

Suy ra liên kết cộng hóa trị phân cực là sự chuyển tiếp giữa liên kết cộng hóa trị không phân cực và liên kết ion

Tuy nhiên

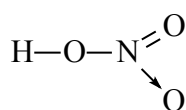
- Liên kết cộng hóa trị thuần túy xuất hiện ở phân tử đơn chất
- Liên kết ion thuần túy xuất hiện ở một số tinh thể ion

Còn thông thường trong liên kết cộng hóa trị sẽ có một phần tính chất của liên kết ion và ngược lại

VI. Hóa trị của các nguyên tố

Hóa trị của một nguyên tố trong phân tử cộng hóa trị bằng số liên kết mà nguyên tố có thể tạo thành với các nguyên tử khác

Ví dụ: HNO_3



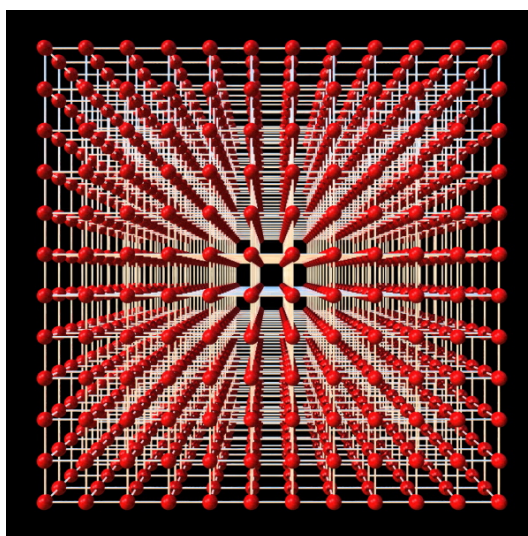
Cộng hóa trị của O là 1 và 2, N là 4

III. Liên kết kim loại

1. Các tính chất của kim loại:

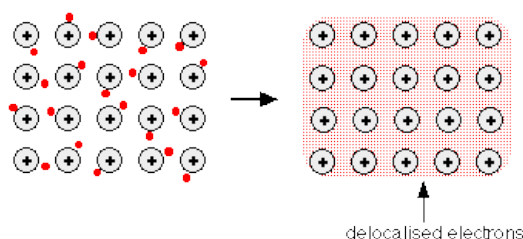
- Không trong suốt
- Có ánh kim
- Dẫn nhiệt, dẫn điện tốt
- Dẻo ...

2. Cấu tạo kim loại và liên kết kim loại



Hình 4.11. Mạng tinh thể kim loại

- Mạng tinh thể kim loại được tạo thành từ:
 - Những ion dương ở nút mạng tinh thể
 - Các e hóa trị tự do chuyển động hỗn loạn trong toàn bộ tinh thể kim loại → khí e → Liên kết có tính không định chỗ rất cao (liên kết rất nhiều tâm):



Hình 4.11. Khí electron trong kim loại

IV. Các mối liên kết yếu

I. Tương tác yếu Vanderwaals (Van der Waals)

Định nghĩa: tương tác yếu van der Waals là lực hút tĩnh điện giữa các phân tử do sự phân cực tạm thời trong phân tử

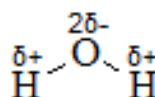
Phân loại

- Lực định hướng: xuất hiện trong các phân tử có cực như dẫn xuất halogen
- Lực khuếch tán: các phân tử không cực

Lực hút van der Waals cũng thuộc loại lực tương tác yếu, ảnh hưởng đến nhiệt độ sôi tương tự như lực H có liên kết van der Waals thì nhiệt độ sôi cao hơn.

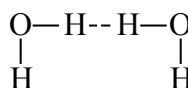
II. Liên kết Hidro

Ví dụ: H_2O có CTCT



Liên kết O—H phân cực, phân tử H_2O là phân tử phân cực

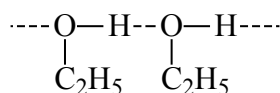
Giữa các phân tử H_2O xuất hiện tương tác tĩnh điện



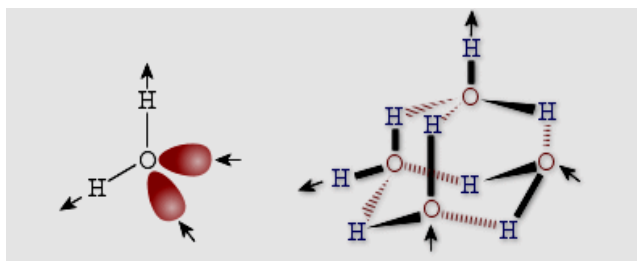
Vậy liên kết hidro được hình thành bằng lực hút tĩnh điện giữa H (mang một phần δ^+) của phân tử này với X (mang một phần δ^-) của phân tử kia, với X có độ âm điện cao như F, O, Cl, N, ...)

- Điều kiện xuất hiện liên kết hidro giữa các phân tử
 - Phải có H liên kết với nguyên tử X (O, F, Cl, N)
 - X phải còn cặp e không liên kết

Ví dụ: Biểu diễn liên kết hidro trong ancol etylic



- Ảnh hưởng của liên kết hidro:
 - Làm nhiệt độ sôi, nhiệt độ nóng chảy tăng cao
 - Chất có thể hình thành liên kết hidro với nước thì tan dễ trong nước



C. Các lí thuyết về liên kết

I. Thuyết VB (Thuyết liên kết hóa trị)

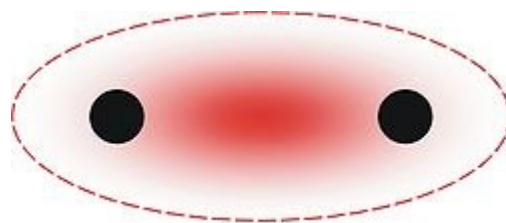
Ở phần trên ta xét liên kết cộng hóa trị theo quan niệm của thuyết liên kết hóa trị (thường gọi tắt là thuyết VB). Một trong những luận điểm cơ bản của thuyết VB là: Mỗi liên kết hóa học giữa hai nguyên tử được đảm bảo bởi một đôi e có spin đối song do hai nguyên tử đó góp chung. Dựa vào quan niệm này, Heiler- London đã giải thích được một cách định lượng liên kết hóa học trong phân tử hidro. Sự thành công đó cũng là một thành tựu lớn của hóa học vào những năm 20 của thế kỉ này

Tuy nhiên khi mở rộng việc áp dụng kết quả đó để giải thích liên kết hóa học trong các hệ khác thì kết quả không phù hợp. Chẳng hạn phân tử H_2O , thực nghiệm đo được góc liên kết HOH bằng $104,5^\circ$. Nếu giả thiết rằng trong H_2O , nguyên tử oxi đưa ra hai obitan p xen phủ với hai obitan 1s của hai nguyên tử hidro thì góc liên kết đó phải là 90° . Rõ ràng sự giải thích đó không phù hợp với thực nghiệm. Nguyên nhân có thể là ở chỗ: Kết quả thu được với H_2 là kết quả của một trường hợp đơn giản nhất, vì H có cấu hình e là $1s^1$, trong H_2 có sự xen phủ $2\text{AO} - 1s$ tạo liên kết. Trường hợp H_2O thì O có $2\text{AO} - 2p$ khác xa về nhiều mặt với $\text{AO} - 1s$.

Để áp dụng được thuyết VB cho các hệ khác H_2 , có các luận điểm hay thuyết được bổ sung vào thuyết VB. Thuyết lai hóa là một trong số các thuyết bổ sung đó

Liên kết sigma (σ) và liên kết pi (π)

Liên kết sigma là liên kết hóa học được hình thành do sự xen phủ trực, do đó hai nguyên tử ở hai đầu liên kết có thể quay



quanh trục một cách tự do.

Liên kết này rất bền nên rất khó xảy ra các phản ứng phân cắt liên kết sigma (trừ trường hợp nhiệt độ rất cao).

Giữa hai nguyên tử chỉ có tối đa một liên kết sigma. Nếu xuất hiện thêm một liên kết thì đó là liên kết pi (hay liên kết bội).

- Sự phân cực của liên kết sigma Khi hai nguyên tử đồng nhất liên kết với nhau bằng liên kết sigma thì không xảy ra sự phân cực. Vd: H-H; Cl-Cl.

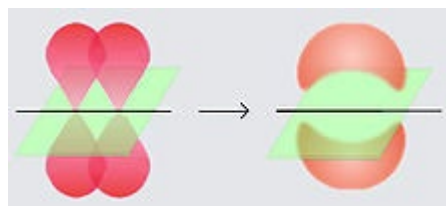
- Trái lại, khi 2 nguyên tử không đồng nhất với nhau mà liên kết với nhau bằng liên kết sigma thì sẽ xảy ra sự phân cực về phía nguyên tử của nguyên tố nào có sự âm điện lớn hơn. Làm xuất hiện một đầu mang điện tích âm (sigma -), và một đầu mang điện tích dương (sigma +).

Trong hóa học, **liên kết pi** (hay **liên kết π**) là liên kết cộng hóa trị được tạo nên khi hai thùy của một electron orbital tham gia xen phủ với hai thùy của electron orbital khác tham gia liên kết (sự xen phủ như thế này được gọi là sự xen phủ bên của các orbital). Chỉ một trong những mặt phẳng nút của orbital đi qua cả hai hạt nhân tham gia liên kết.

Ký tự Hy Lạp π trong tên của liên kết này ám chỉ các orbital p, vì sự đối xứng orbital trong các liên kết pi cũng là sự đối xứng của các orbital khi xét dọc theo trục liên kết. Các orbital p thường tham gia vào loại liên kết này. Tuy nhiên, các orbital d cũng có thể thực hiện liên kết p.

Các liên kết pi thường yếu hơn các liên kết sigma do sự phân bố electron (mang điện âm) tập trung ở xa hạt nhân nguyên tử (tích điện dương), việc này đòi hỏi nhiều năng lượng hơn. Từ góc nhìn của cơ học lượng tử, tính chất yếu của liên kết này có thể được giải thích bằng sự xen phủ với một mức độ ít hơn giữa các orbital-p bởi định hướng song song của chúng.

Mặc dù bản thân liên kết pi yếu hơn một liên kết sigma, song liên kết pi là thành phần cấu tạo nên các liên kết bội, cùng với liên kết sigma. Sự kết hợp giữa liên kết pi và sigma mạnh hơn bất kì bản thân một liên kết nào trong hai liên kết ấy. Sức mạnh được gia tăng của một liên kết bội khi đem so với một liên kết đơn (liên kết sigma) có thể được biểu thị bằng nhiều cách, nhưng rõ



rệt nhất là bởi sự co độ dài của các liên kết. Ví dụ: trong hóa học hữu cơ, độ dài của liên kết carbon-carbon của ethane là 154 pm, ethylene là 133 pm và acetylene là 120 pm.

Ngoài một liên kết sigma, một đôi nguyên tử liên kết qua liên kết đôi và liên kết ba lần lượt có một hoặc hai liên kết pi. Các liên kết pi là kết quả của sự xen phủ các orbital nguyên tử với hai vùng xen phủ. Các liên kết pi thường

là những liên kết trải dài trong không gian hơn các liên kết sigma. Các electron trong các liên kết pi thường được gọi là các electron pi. Các mảng phân tử liên kết bởi một liên kết pi không thể xoay quanh liên kết của chúng mà không làm gãy liên kết pi ấy, do việc làm này phá hủy định hướng song song của các orbital p cấu thành.

II. Sự lai hóa

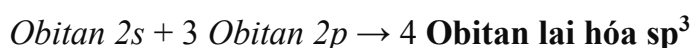
Sự lai hóa các obitan nguyên tử là sự tổ hợp một số các obitan trong nguyên tử để được chừng ấy obitan lai hóa giống nhau nhưng định hướng khác nhau trong không gian.

Ví dụ: Trong phân tử CH_4 , khi nguyên tử cacbon (C) tham gia liên kết với bốn nguyên tử H tạo thành phân tử CH_4 thì obitan 2s đã trộn lẫn với ba obitan 2p tạo thành bốn obitan mới giống hệt nhau gọi là bốn obitan lai hóa sp^3 . Bốn obitan lai hóa sp^3 xen phủ với bốn obitan 1s của bốn nguyên tử H tạo thành bốn liên kết C - H giống nhau.

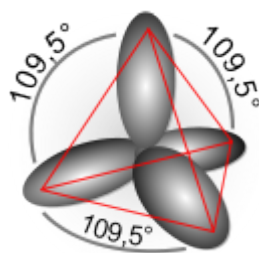
Nguyên nhân của sự lai hoá là các obitan hóa trị ở các phân lớp khác nhau có năng lượng và hình dạng khác nhau cần phải đồng nhất để tạo được liên kết bền với các nguyên tử khác.

Lai hóa giữa obitan 2s và obitan 2p

Khi obitan 2s của nguyên tử cacbon tổ hợp với 1 hoặc nhiều obitan 2p thì sẽ xảy ra ba trường hợp sau:



Orbitan lai hóa sẽ được dùng trong liên kết sigma với nguyên tử khác, các obitan còn lại được dùng cho liên kết pi. Obitan lai hóa sp thường được dùng để liên kết với 2 nguyên tử hoặc nhóm nguyên tử, obitan lai hóa sp^2 thường liên kết với 3 và obitan lai hóa sp^3 thường liên kết với 4 nguyên tử hoặc nhóm nguyên tử.

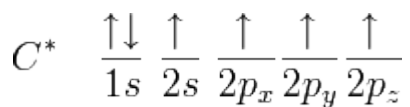
Lai hóa sp^3 4 obitan lai hóa sp^3

Lai hóa sp^3 là sự tổ hợp 1 obitan s với 3 obitan p của một nguyên tử tham gia liên kết tạo thành 4 obitan lai hóa sp^3 định hướng từ tâm đến 4 đỉnh của hình tứ giác đều, các trục đối xứng của chúng tạo với nhau một góc $\approx 109.5^\circ$

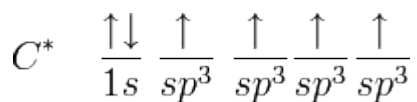
Lai hóa sp^3 được gặp ở các nguyên tử O, N, C trong các phân tử H_2O , NH_3 , CH_4 và các ankan.

Ví dụ: phân tử metan CH_4

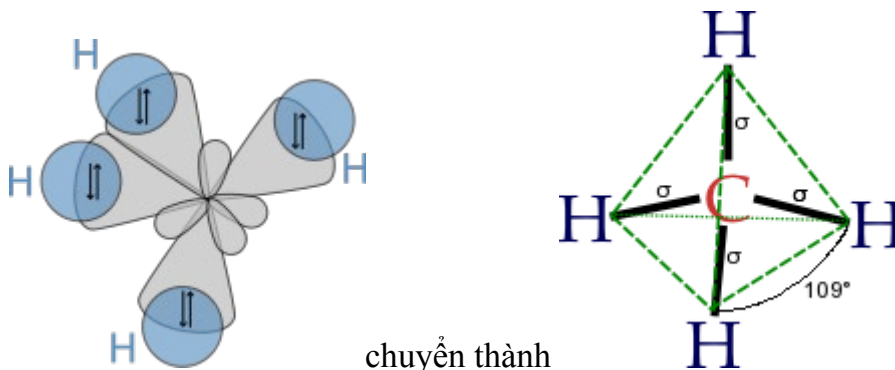
Cấu hình electron của nguyên tử C ở trạng thái kích thích:



Orbitan 2s lai hóa với 3 obitan 2p tạo thành 4 obitan lai hóa sp^3

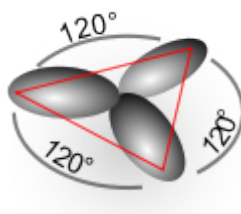


4 obitan lai hóa sp^3 xen phủ với obitan 1s của nguyên tử hydro tạo thành 4 liên kết sigma.

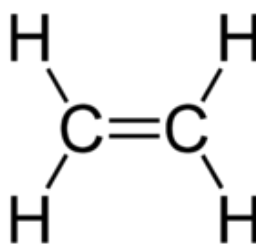


chuyển thành

Góc liên kết trong phân tử CH_4 là $109^\circ 28''$

Lai hóa sp^2 

3 obitan lai hóa sp^2



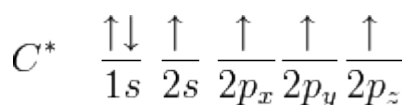
Mô hình phân tử C_2H_4

Lai hóa sp^2 là sự tổ hợp 1 obitan s với 2 obitan p của một nguyên tử tham gia liên kết tạo thành 3 obitan lai hóa sp^2 nằm trong một mặt phẳng, định hướng từ tâm đến đỉnh của tam giác đều. Góc liên kết là 120° .

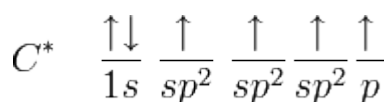
Lai hóa sp^2 được gặp trong các phân tử BF_3 , C_2H_4 ...

Ví dụ: phân tử etilen C_2H_4 :

Cấu hình electron của nguyên tử C ở trạng thái kích thích:



Orbitan 2s lai hóa với 2 obitan 2p tạo thành 3 obitan lai hóa sp^2



Ba obitan lai hóa sp^2 tạo 1 liên kết sigma giữa hai nguyên tử cacbon và 2 liên kết sigma với hai nguyên tử hydro. Mỗi nguyên tử cacbon còn 1 obitan p không tham gia lai hóa sẽ xen phủ bên với nhau tạo liên kết pi.

Lai hóa sp

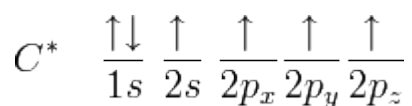
Mô hình phân tử C_2H_2

Lai hóa sp là sự tổ hợp 1 obitan s với 1 obitan p của một nguyên tử tham gia liên kết tạo thành 2 obitan lai hóa sp nằm thẳng hàng với nhau hướng về 2 phía, đối xứng nhau. Góc liên kết là 180° .

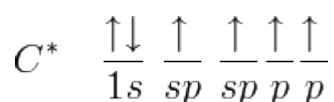
Lai hóa sp được gặp trong các phân tử BeH_2 , C_2H_2 , BeCl_2 ...

Ví dụ: phân tử C_2H_2

Cấu hình electron của nguyên tử C ở trạng thái kích thích:



Orbitan 2s lai hóa với 1 obitan 2p tạo thành 2 obitan lai hóa sp



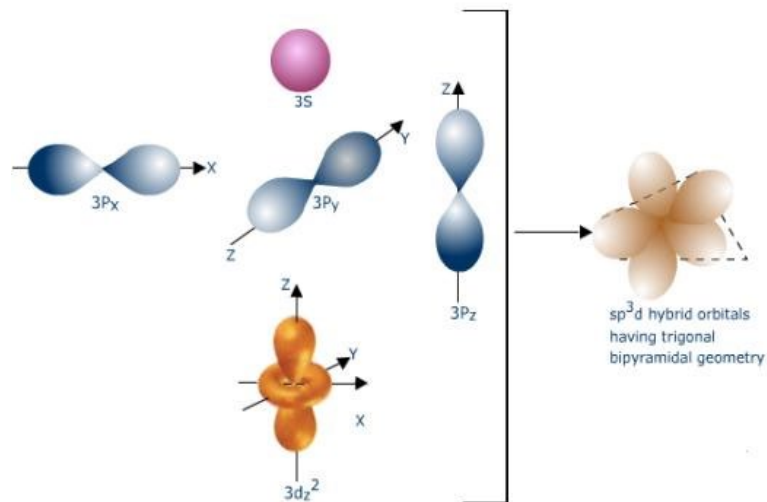
Hai obitan lai hóa sp tạo 1 liên kết sigma giữa hai nguyên tử cacbon và 1 liên kết sigma với 2 nguyên tử hydro. Hai obitan p còn lại xen phủ bên với nhau từng đôi một tạo ra 2 liên kết pi.

Ngoài 3 kiểu lai hóa thường gặp trên, còn có một số dạng lai hóa thường gặp như sp^3d , sp^3d^2

Lai hóa sp^3d (lai hóa lưỡng tháp tam giác)

1 obitan s + 3 obitan p + 1 obitan d $\rightarrow$ 5 obitan lai hóa hướng về 5 đỉnh của một tứ diện đều, góc lai hóa: 120° (tạo bởi trục của các obitan lai hóa nằm ngang), 90° (tạo bởi obitan lai hóa trục)

Ví dụ: PCl_5 : P: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3 3d^0 \rightarrow \text{C}^*$: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1 3p^3 3d^1$



Lai hóa sp^3d^2

1 obitan s + 3 obitan p + 2 obitan d $\rightarrow$ 6 obitan lai hóa hướng về 6 đỉnh của hình bát diện đều, góc lai hóa: 90°

Ví dụ: SF_6

S: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4 \rightarrow S^*: 1s^2 2s^2 2p^6 3s^1 3p^3 3d^2$

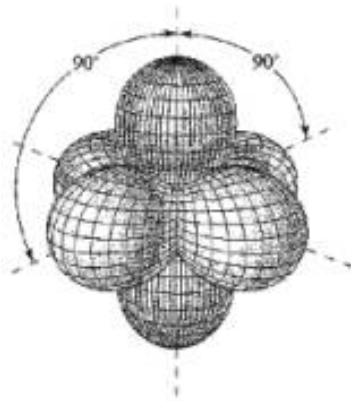
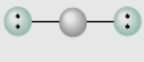
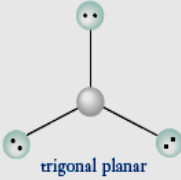
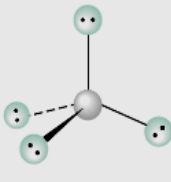
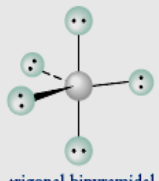


TABLE 8-4 A Summary of Electronic and Molecular Geometries of Polyatomic Molecules and Ions

Regions of High Electron Density ^a	Electronic Geometry	Hybridization at Central Atom (Angles)	Hybridized Orbital Orientation	Examples	Molecular Geometry
2	 linear	sp (180°)		BeCl ₂ HgBr ₂ CdI ₂ CO ₂ ^b C ₂ H ₂ ^c	linear linear linear linear linear
3	 trigonal planar	sp^2 (120°)		BF ₃ BCl ₃ NO ₃ ^{-c} SO ₂ ^{d,e} NO ₂ ^{-d,e} C ₂ H ₄ ^f	trigonal planar trigonal planar trigonal planar angular (AB ₂ U) angular (AB ₂ U) planar (trig. planar at each C)
4	 tetrahedral	sp^3 (109.5°)		CH ₄ CCl ₄ NH ₄ ⁺ SO ₄ ²⁻ CHCl ₃ NH ₃ ^d SO ₃ ^{2-d} H ₃ O ⁺ ^d H ₂ O ^d	tetrahedral tetrahedral tetrahedral tetrahedral distorted tet. pyramidal (AB ₃ U) pyramidal (AB ₃ U) pyramidal (AB ₃ U) angular (AB ₂ U ₂)
5	 trigonal bipyramidal	sp^3d (90°, 120°, 180°)		PF ₅ SbCl ₅ SF ₄ ^d ClF ₃ ^d XeF ₂ ^d I ₃ ^{-d}	trigonal bipyramidal trigonal bipyramidal seesaw (AB ₄ U) T-shaped (AB ₃ U ₂) linear (AB ₂ U ₃) linear (AB ₂ U ₃)
6	 octahedral	sp^3d^2 (90°, 180°)		SF ₆ SeF ₆ PF ₆ ⁻ BrF ₅ ^d XeF ₄ ^d	octahedral octahedral octahedral square pyramidal (AB ₅ U) square planar (AB ₄ U ₂)

^aThe number of locations of high electron density around the central atom. A region of high electron density may be a single bond, a double bond, a triple bond, or an unshared pair. These determine the electronic geometry, and thus the hybridization of the central atom.

^bContains two double bonds.

^cContains a triple bond.

^dCentral atom in molecule or ion has unshared pair(s) of electrons.

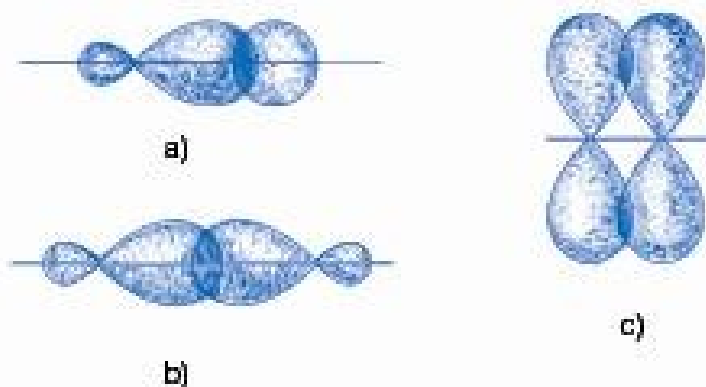
^eBonding involves resonance.

^fContains one double bond.

Các kiểu lai hóa và cấu hình không gian phân tử cùng góc liên kết

Xen phủ trực, xen phủ bên

- Xen phủ trực xảy ra giữa hai obitan có trục trùng nhau tạo thành liên kết bền (liên kết sigma)
- Xen phủ bên xảy ra giữa hai obitan có trục song song với nhau tạo thành liên kết pi kém bền hơn (dễ bị phá vỡ trong các phản ứng hóa học)



a), b) Xen phủ trực

c) Xen phủ bên

III. Mô Hình sự đẩy giữa các đối electron vỏ hóa trị hay mô hình VSEPR

- Công thức phân tử của một chất chỉ cho ta biết số nguyên tử trong phân tử mà không cho biết được hình dạng hoá học của phân tử, nghĩa là chưa biết được một số tính chất suy ra trực tiếp từ các đặc trưng hình học của phân tử. Ví dụ các phân tử H_2O và H_2S có dạng góc nên ở trạng thái lỏng, chúng là những dung môi tuyệt vời đối với các chất ion trong khi các chất tương tự chúng như CO_2 hay CS_2 có dạng thẳng và chỉ dùng làm dung môi cho các phân tử cộng hoá trị. Trong thực tế biết số m nguyên tử X kết hợp với nguyên tử trung tâm A chưa đủ để xác định cấu trúc phân tử AX_m vì chính số electron hoá trị tổng cộng $N.e$ mới đóng vai trò quyết định.

- Xuất phát từ ý tưởng các cặp electron hoá trị của một nguyên tử luôn đẩy lẫn nhau, R.J.Gillespie đã đưa ra quy tắc tiên đoán sự định hướng các liên kết xung quanh một nguyên tử trung tâm của phân tử hoặc ion gọi là "thuyết sự đẩy các cặp electron của những lớp hoá trị", viết tắt là VSEPR (từ Tiếng Anh: Valence Shell Electronic Pair Repulsions).

- Nội dung: Mọi cặp electron liên kết và không liên kết (cặp electron tự do) của lớp ngoài đều cư trú thống kê ở cùng một khoảng cách đến hạt nhân, trên bề mặt quả cầu mà hạt nhân nằm ở tâm. Các electron tương ứng sẽ ở vị trí xa nhau nhất để lực đẩy của chúng giảm đến cực tiểu.

- Mô hình VSEPR: Xét phân tử AX_mE_n trong đó nguyên tử X liên kết với nguyên tử ở trung tâm A bằng những liên kết σ và n cặp electron không liên kết hay cặp electron tự do E. Khi đó tổng $m + n$ xác định dạng hình học

của phân tử :

$m + n = 2 \rightarrow$ phân tử thẳng

$m + n = 3 \rightarrow$ phân tử phẳng tam giác

$m + n = 4 \rightarrow$ phân tử tứ diện

$m + n = 5 \rightarrow$ phân tử tháp đôi đáy tam giác (lưỡng tháp tam giác)

$m + n = 6 \rightarrow$ phân tử tháp đôi đáy vuông (bát diện)

$m + n = 7 \rightarrow$ phân tử tháp đôi đáy ngũ giác

TABLE 8-3 *Molecular Geometry of Species with Lone Pairs (U) on the Central Atom*

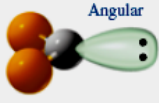
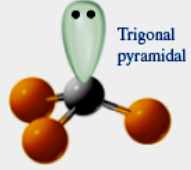
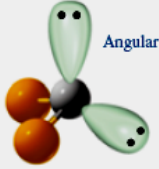
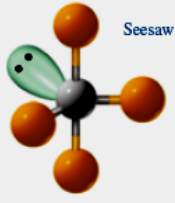
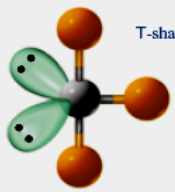
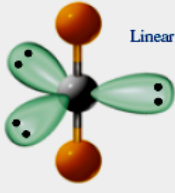
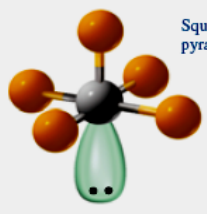
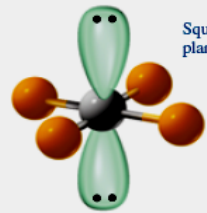
General Formula	Regions of High Electron Density	Electronic Geometry	Hybridization at Central Atom	Lone Pairs	Molecular Geometry	Examples
AB_2U	3	trigonal planar	sp^2	1		O_3, NO_2^-, SO_2
AB_3U	4	tetrahedral	sp^3	1		NH_3, SO_3^{2-}
AB_2U_2	4	tetrahedral	sp^3	2		H_2O, NH_2^-
AB_4U	5	trigonal bipyramidal	sp^3d	1		SF_4

TABLE 8-3 (continued)						
General Formula	Regions of High Electron Density	Electronic Geometry	Hybridization at Central Atom	Lone Pairs	Molecular Geometry	Examples
AB_3U_2	5	trigonal bipyramidal	sp^3d	2	 T-shaped	ICl_3, ClF_3
AB_2U_3	5	trigonal bipyramidal	sp^3d	3	 Linear	XeF_2, I_3^-
AB_5U	6	octahedral	sp^3d^2	1	 Square pyramidal	IF_5, BrF_5
AB_4U_2	6	octahedral	sp^3d^2	2	 Square planar	XeF_4, IF_4^-

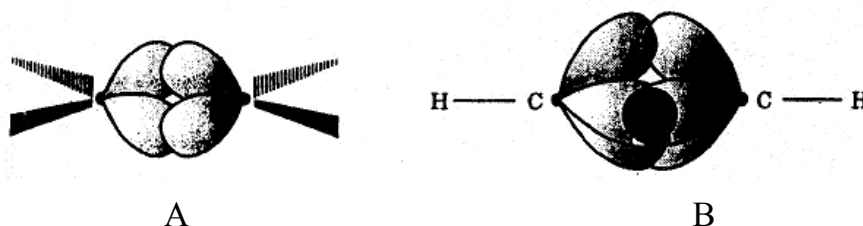
IV. Mô hình liên kết bị uốn cong

Cơ sở để xây dựng mô hình này là công nhận C có hóa trị 4; sự định hướng các hóa trị này tạo ra tứ diện đều mà tâm là nguyên tử C được xét; (tức C có lai hóa sp^3)

Áp dụng cơ sở này đối với các liên kết trong các phân tử ankan thu được kết quả hiển nhiên phù hợp thực nghiệm.

Đối với các phân tử có liên kết bội (kép), cần đưa vào khái niệm *liên kết bị uốn cong*. Cần lưu ý là mỗi hóa trị định hướng nói trên của C tương đương như một AO.

Để tạo ra liên kết giữa hai nguyên tử C trong C_2H_4 , mỗi nguyên tử C dùng 2 trong 4 hóa trị định hướng tứ diện tạo 2 liên kết với 2H. Mỗi C còn lại 2 hóa trị (tức 2AO); các AO này bị biến đổi để tạo ra 2 liên kết bị uốn cong giữa 2 nguyên tử C (xem hình A dưới đây).



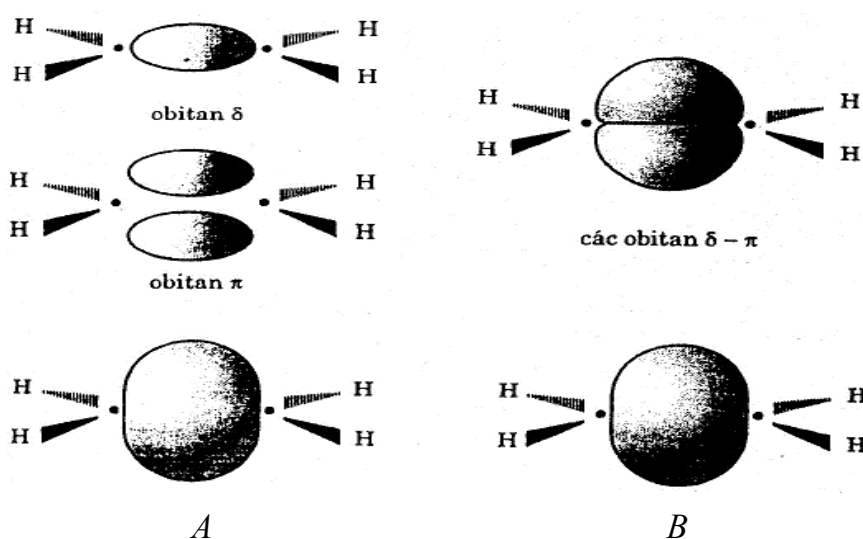
Mô hình liên kết bị uốn cong

A Trong phân tử C_2H_4

B Trong phân tử C_2H_2

Có sự tương đương giữa các mô hình đã đề cập ở trên.

Hình sau đây minh họa kết luận đó.



Minh họa sự tương đương giữa hai mô hình

a) Mô hình lai hóa mô tả liên kết trong C_2H_4

b) Mô hình liên kết bị uốn cong cũng xét với C_2H_4

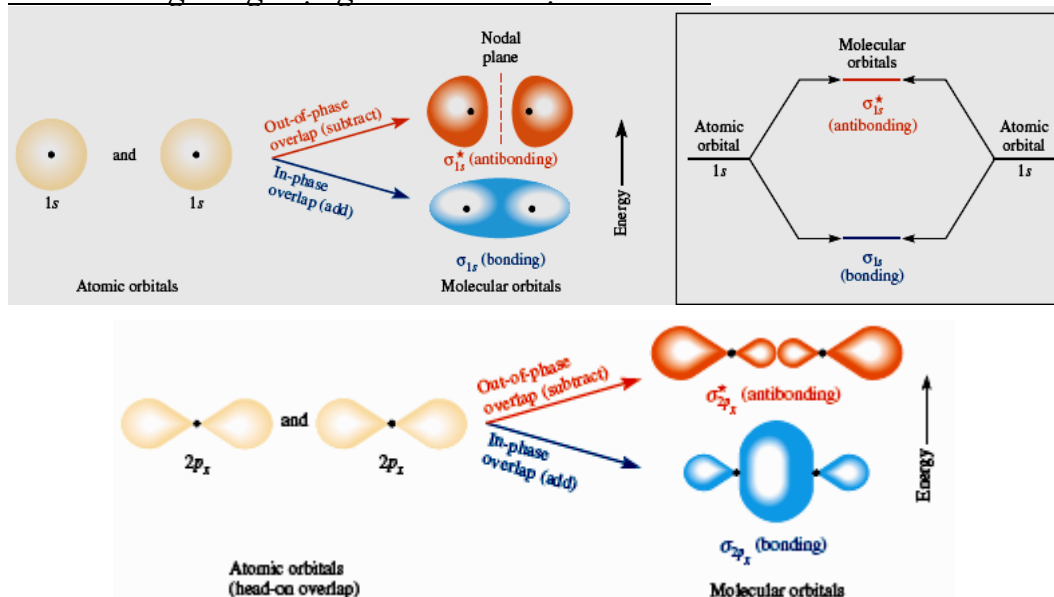
V. Thuyết Orbital phân tử (Thuyết MO)

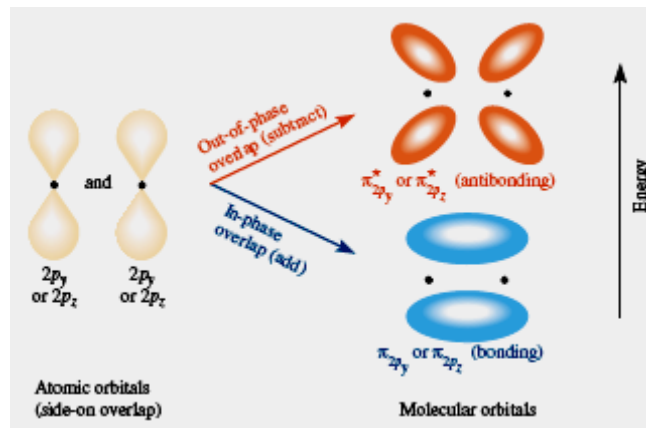
a. Nội dung cơ bản của phương pháp MO:

- Theo thuyết MO thì phân tử phải được xem là một hạt thống nhất bao gồm các hạt nhân và các e của các nguyên tử tương tác. Trong đó mỗi electron sẽ chuyển động trong điện trường do các hạt nhân và các electron còn lại gây ra.
- Tương tự như trong nguyên tử, trạng thái của electron trong phân tử được xác định bằng các MO. Mỗi một MO cũng được xác định bằng tổ hợp các số lượng tử đặc trưng cho năng lượng, hình dạng... của orbital.

l	0	1	2	3
AO trong nguyên tử	s	p	d	f
MO trong phân tử	σ	π	δ	ϕ

- Các MO khác nhau bởi sự phân bố mật độ electron tương đối so với trục liên nhân:
 - σ - dọc theo trục liên nhân
 - π - nằm ở hai bên trục liên nhân
- Các MO được hình thành do sự tổ hợp tuyến tính (cộng hay trừ) các AO (tức là sự xen phủ)
 - Sự tổ hợp cộng các AO sẽ tạo thành các **MO liên kết** ($\sigma, \pi \dots$) có năng lượng nhỏ hơn năng lượng của các AO tham gia tổ hợp ban đầu.
 - Sự tổ hợp trừ các AO sẽ tạo thành các **MO phản liên kết** ($\sigma^*, \pi^* \dots$) có năng lượng lớn hơn năng lượng của các AO tham gia tổ hợp ban đầu.
 - MO không liên kết** ($\sigma^0, \pi^0 \dots$) do các AO chuyển nguyên vẹn mà thành. Các MO này không ảnh hưởng tới liên kết. Năng lượng của các MO không liên kết bằng năng lượng của các AO tạo thành nó.





Hình 4.6. Tổ hợp các AO tạo MO

- Số MO tạo thành bằng tổng số AO tham gia tổ hợp
- Sự tạo thành các MO từ các AO có thể biểu diễn bằng giản đồ năng lượng
- **Điều kiện của các AO tham gia tổ hợp có hiệu quả:**
 - Các AO tham gia tổ hợp phải có mức năng lượng bằng hoặc gần bằng nhau
 - Các AO phải có mật độ electron đủ lớn.
 - Các AO phải có cùng tính đối xứng đối với trục nối hạt nhân.
- Sự phân bố e trên các MO cũng tương tự như trong nguyên tử đa e, tuân theo các nguyên lý vững bền, ngoại trừ Pauli và quy tắc Hund.

b. Các đặc trưng liên kết:

- Liên kết được quyết định bởi các e liên kết (e nằm trên các MO liên kết) mà không bị triệt tiêu. Cứ một cặp e liên kết bị triệt tiêu bởi một cặp e phản liên kết tương ứng
- Một bậc liên kết ứng với một cặp e liên kết không bị triệt tiêu

Bậc liên kết (tính cho liên kết 2 tâm):
$$BLK = \frac{\sum e_{lk} - \sum e^*}{2}$$

Bậc liên kết tăng thì năng lượng liên kết tăng và độ dài liên kết giảm.

- Sau khi phân bố e vào các MO mà vẫn còn các e độc thân thì phân tử có tính thuận từ (paramagnetic, có từ tính), ngược lại tất cả e đều ghép đôi thì nghịch từ (diamagnetic, không có từ tính).

=> Tóm lại, việc mô tả cấu trúc phân tử gồm các bước:

- Bước 1: Xét sự tạo thành MO từ các AO
- Bước 2: Sắp xếp các MO tạo thành theo thứ tự năng lượng tăng dần
- Bước 3: Xếp các e vào các MO
- Bước 4: Xét các đặc trưng liên kết: bậc liên kết, từ tính.

b. Áp dụng phương pháp MO

• Các phân tử hai nguyên tử của những nguyên tố chu kỳ I

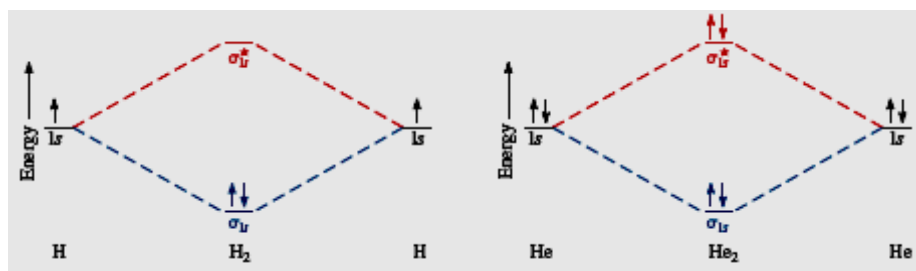


TABLE 16.1

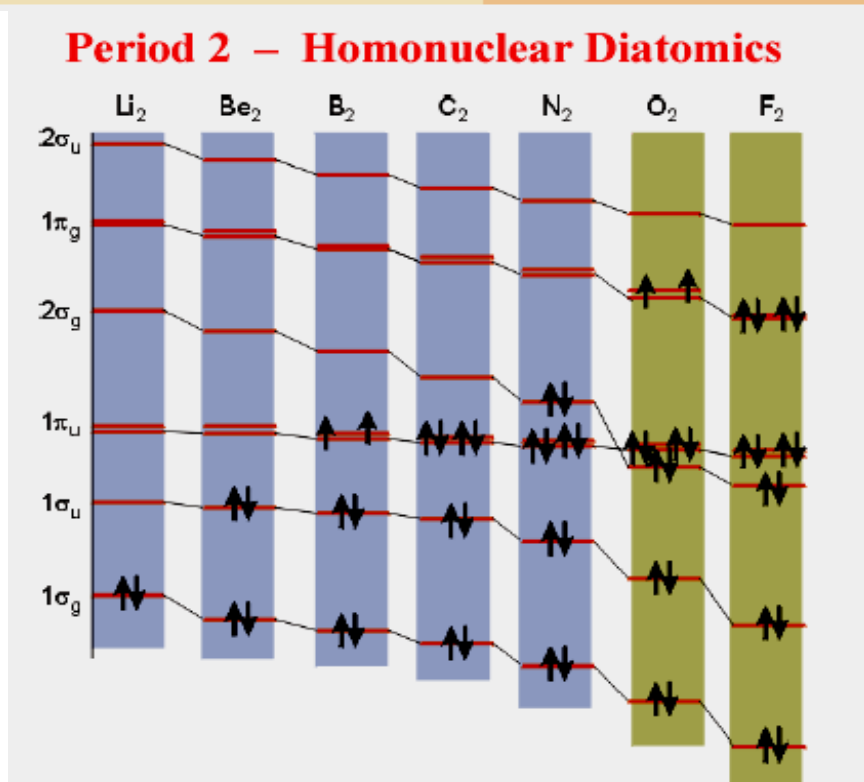
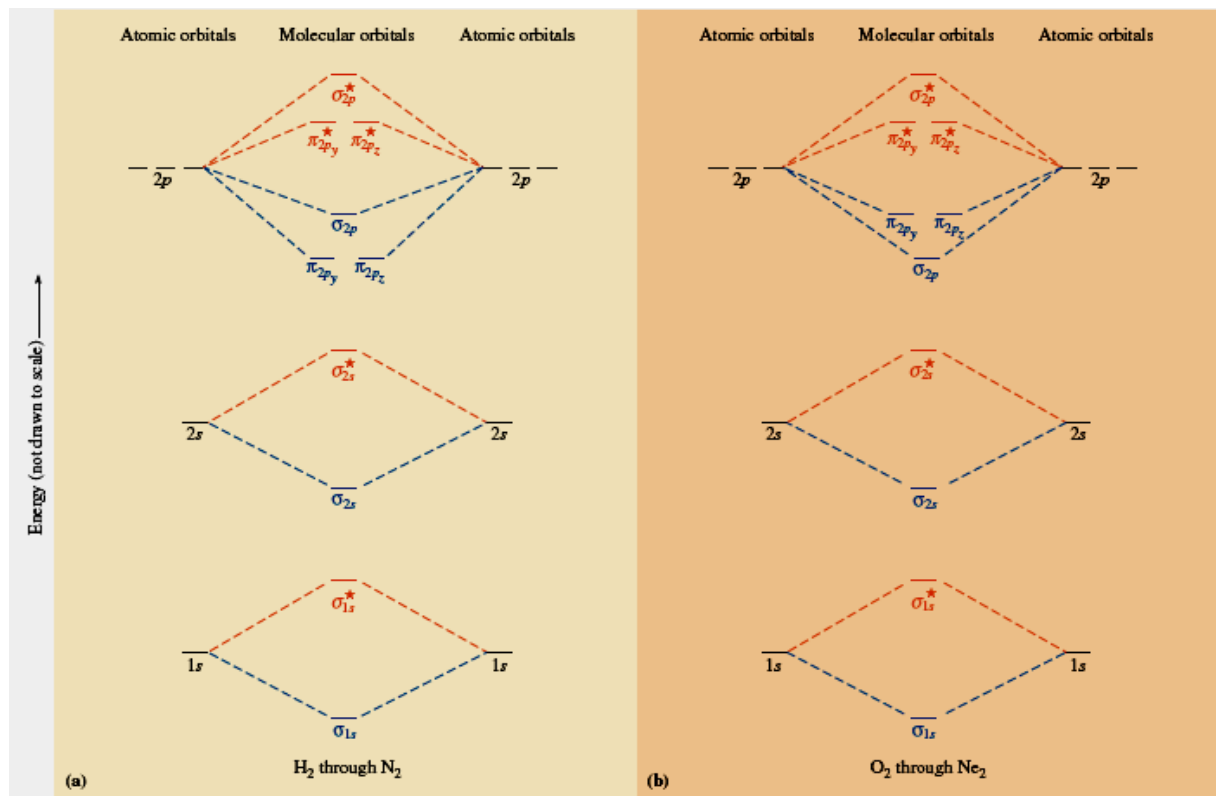
Configurations and Bond Orders for First-Row Diatomic Molecules

Species	Electron Configuration	Bond Order	Bond Energy (kJ mol ⁻¹)	Bond Length (Å)
H ₂ ⁺	(σ _{1s}) ¹	$\frac{1}{2}$	255	1.06
H ₂	(σ _{1s}) ²	1	431	0.74
He ₂ ⁺	(σ _{1s}) ² (σ _{1s} [*]) ¹	$\frac{1}{2}$	251	1.08
He ₂	(σ _{1s}) ² (σ _{1s} [*]) ²	0	~0	Large

Hình 4.7. MO các phân tử của nguyên tố chu kỳ I

• Các phân tử hai nguyên tử của những nguyên tố chu kỳ II: Có 2 trường hợp:

- Các phân tử của nguyên tố đầu chu kỳ (từ Li₂ – N₂): Do có bán kính nguyên tử lớn nên có xáo trộn năng lượng do tương tác đẩy giữa các cặp MO: (σ_{2s} σ_{2s}^{*}) <=> (σ_x σ_x^{*}).



Hình 4.8. Mức năng lượng các MO phân tử 2 nguyên tử chu kỳ II

Phân tử, ion	Li ₂	Be ₂	B ₂	C ₂	N ₂	N ₂ ⁺
Tổng số e hóa trị	2	4	6	8	10	11
σ_x^*	—	—	—	—	—	—
π_y^*, π_z^*	— —	— —	— —	— —	— —	— —

σ_X	—	—	—	—	$\downarrow\uparrow$	$\uparrow$
π_Y, π_Z	— —	— —	$\uparrow \uparrow$	$\downarrow\uparrow \downarrow\uparrow$	$\downarrow\uparrow \downarrow\uparrow$	$\downarrow\uparrow \downarrow\uparrow$
σ_S^*	—	$\downarrow\uparrow$	$\downarrow\uparrow$	$\downarrow\uparrow$	$\downarrow\uparrow$	$\downarrow\uparrow$
σ_S	$\downarrow\uparrow$	$\downarrow\uparrow$	$\downarrow\uparrow$	$\downarrow\uparrow$	$\downarrow\uparrow$	$\downarrow\uparrow$
Bậc liên kết	1	0	1	2	3	2,5
Độ dài liên kết (Å)	2,67	—	1,59	1,24	1,10	1,12
Năng lượng lk (kJ/mol)	105	—	289	599	940	828
Từ tính	nghịch từ	—	thuận từ	nghịch từ	nghịch từ	thuận từ

TABLE 9-1 Molecular Orbitals for First- and Second-Period (Row) Diatomic Molecules ^a												
	H ₂	He ₂ ^c	Li ₂ ^b	Be ₂ ^c	B ₂ ^b	C ₂ ^b	N ₂		O ₂	F ₂	Ne ₂ ^c	
Increasing energy (not to scale)	σ_{2p}^* $\pi_{2p_y}^*$ $\pi_{2p_z}^*$ σ_{2p} π_{2p_y} π_{2p_z} σ_{2s}^* σ_{2s} σ_{1s}^* σ_{1s}	—	—	—	—	—	—	—	π_{2p_y}, π_{2p_z} σ_{2p}	—	—	$\uparrow\downarrow$
	—	—	—	—	—	—	—	$\uparrow\uparrow$		$\uparrow\uparrow$	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$
	—	—	—	—	$\uparrow\uparrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$		$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$
	—	—	—	—	$\uparrow\uparrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$		$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$
	—	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$		$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$
	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$		$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$
Paramagnetic [?]	no	no	no	no	yes	no	no		yes	no	no	
Bond order	1	0	1	0	1	2	3		2	1	0	
Observed bond length (Å)	0.74	—	2.67	—	1.59	1.31	1.09		1.21	1.43	—	
Observed bond energy (kJ/mol)	436	—	110	9	≈270	602	945		498	155	—	

^aElectron distribution in molecular orbitals, bond order, bond length, and bond energy of homonuclear diatomic molecules of the first- and second-period elements. Note that nitrogen molecules, N₂, have the highest bond energies listed; they have a bond order of three. The species C₂ and O₂ with a bond order of two, have the next highest bond energies.

^bExists only in the vapor state at elevated temperatures.

^cUnknown species.

- Các phân tử của nguyên tố cuối chu kỳ (O₂ – Ne₂): Do bán kính nguyên tử nhỏ nên không có xáo trộn năng lượng.

TD: *O₂(Σe = 16 , không xáo trộn năng lượng)(chọn trục x là trục liên nhân) :

$\sigma_{1s}^2 \sigma_{1s}^{*2} \sigma_{2s}^2 \sigma_{2s}^{*2} \sigma_x^2 (\pi_y^2 \pi_z^2)(\pi_y^{*1} \pi_z^{*1})$. BLK = $\frac{1}{2}(10-6) = 2$; có 2e độc thân: thuận từ.

*N₂(Σe = 14 , xáo trộn năng lượng)(chọn trục x là trục liên nhân) :

$\sigma_{1s}^2 \sigma_{1s}^{*2} \sigma_{2s}^2 \sigma_{2s}^{*2} (\pi_y^2 \pi_z^2) \sigma_x^2$. BLK = $\frac{1}{2}(10-4) = 3$. Tất cả e ghép đôi: nghịch từ.

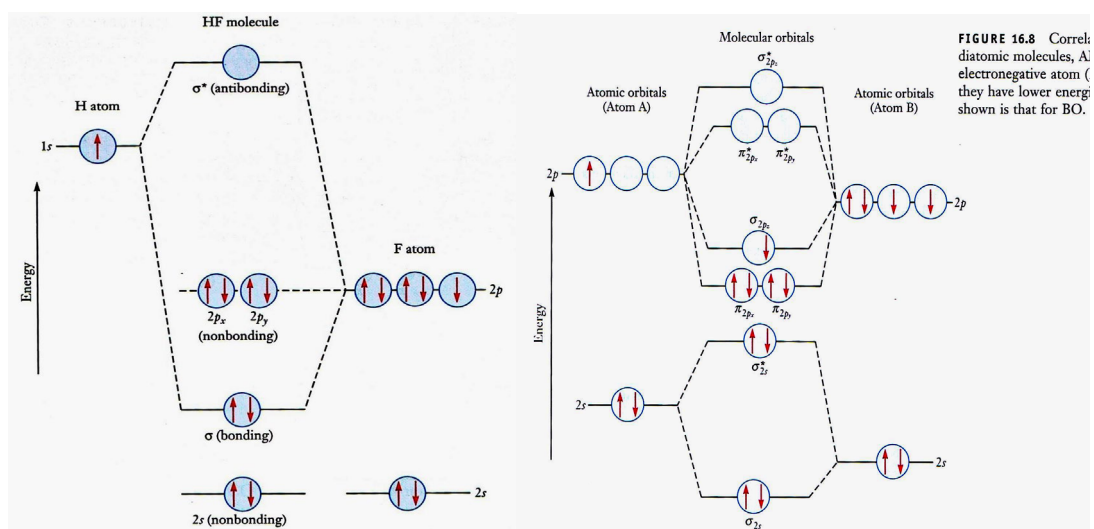
Phân tử, ion	O_2^+	O_2	O_2^-	F_2	F_2^-	Ne_2
Tổng số e	15	16	17	18	19	20
σ_x^*	—	—	—	—	↑	↓↑
π_y^*, π_z^*	↑ —	↑ ↑	↓↑ ↑	↓↑ ↓↑	↓↑ ↓↑	↓↑ ↓↑
π_y, π_z	↓↑ ↓↑	↓↑ ↓↑	↓↑ ↓↑	↓↑ ↓↑	↓↑ ↓↑	↓↑ ↓↑
σ_x	↓↑	↓↑	↓↑	↓↑	↓↑	↓↑
σ_s^*	↓↑	↓↑	↓↑	↓↑	↓↑	↓↑
σ_s	↓↑	↓↑	↓↑	↓↑	↓↑	↓↑
Bậc liên kết	2,5	2	1,5	1	0,5	0
Độ dài liên kết (Å)	1,12	1,21	1,26	1,41		—
Năng lượng lk (kJ/mol)	629	494	328	154		—
Từ tính	thuận từ	thuận từ	thuận từ	nghịch từ	thuận từ	—

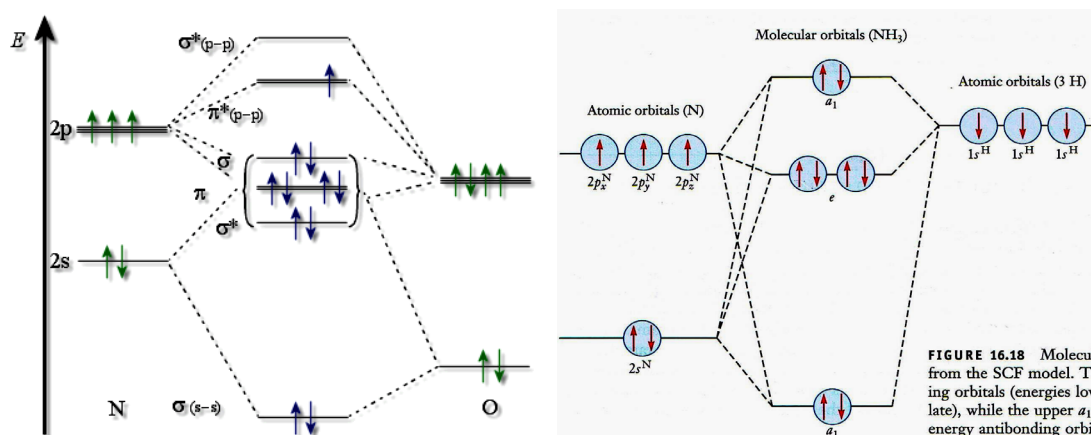
• **Các phân tử hai nguyên tử khác loại của những nguyên tố chu kỳ II:** Các MO tạo thành tương tự trường hợp phân tử 2 nguyên tử cùng loại chu kỳ II. *Chỉ cần có một nguyên tử có bán kính lớn (Li → N) thì phân tử có xáo trộn năng lượng.*

***Chú ý:** N₂ ; CO ; CN⁻ ; NO⁺ có công thức e phân tử giống hệt nhau.

Phân tử, ion	N ₂	CO	CN ⁻	NO ⁺
Tổng số e	14	14	14	14

σ_x^*	—	—	—	—
π_y^*, π_z^*	— —	— —	— —	— —
σ_x	$\downarrow\uparrow$	$\downarrow\uparrow$	$\downarrow\uparrow$	$\downarrow\uparrow$
π_y, π_z	$\downarrow\uparrow$ $\downarrow\uparrow$	$\downarrow\uparrow$ $\downarrow\uparrow$	$\downarrow\uparrow$ $\downarrow\uparrow$	$\downarrow\uparrow$ $\downarrow\uparrow$
σ_{s^*}	$\downarrow\uparrow$	$\downarrow\uparrow$	$\downarrow\uparrow$	$\downarrow\uparrow$
σ_s	$\downarrow\uparrow$	$\downarrow\uparrow$	$\downarrow\uparrow$	$\downarrow\uparrow$
Bậc liên kết	3	3	3	3
Độ dài liên kết (Å)	1,10	1,13	1,14	1,06
Năng lượng lk (kJ/mol)	940	1073	1004	1051
Từ tính	nghịch từ	nghịch từ	nghịch từ	nghịch từ





Hình 4.9. MO một số hợp chất khác

D. Tinh thể

Về mặt cấu tạo có thể chia các chất rắn thành hai nhóm lớn: các chất tinh thể và các chất vô định hình

Hơn 95% toàn bộ chất rắn đều là tinh thể. Thạch anh trong suốt và graphit màu đen, hoạt thạch mềm và kim cương siêu cứng, những hạt đường, hạt muối và những nhũ thạch, nham thạch, kim loại và đá quý, ... đều là những tinh thể

Đặc điểm nổi bật của các vật rắn tinh thể là các hạt (ion, nguyên tử, phân tử) tạo nên tinh thể được sắp xếp đều đặn, tuần hoàn theo một trật tự xác định trong không gian gọi là mạng tinh thể

Hơn nữa, các vật rắn tinh thể có nhiệt độ nóng chảy hoàn toàn xác định.

Các vật rắn vô định hình ta thường gặp là thủy tinh, cao su, nhựa, ... Trong chất vô định hình, các ion, nguyên tử, phân tử tạo nên chất đó được sắp xếp một cách hỗn độn. Các chất vô định hình không có nhiệt độ nóng chảy xác định. Khi đun nóng nó mềm ra, nhão dần rồi hóa lỏng

Thật ra, không có ranh giới rõ rệt giữa chất rắn tinh thể và chất rắn vô định hình: trong những điều kiện thích hợp, một chất có thể tồn tại ở trạng thái tinh thể hay trạng thái vô định hình.

Có thể quy các tinh thể thành 4 loại tùy theo kiểu liên kết giữa các hạt trong tinh thể.

I. Tinh thể nguyên tử

Tinh thể được tạo nên bởi các nguyên tử nằm ở các nút của mạng tinh thể, liên kết với nhau bằng liên kết cộng hóa trị

Ta lấy tinh thể kim cương làm ví dụ. Tinh thể kim cương tạo nên từ các nguyên tử cacbon.

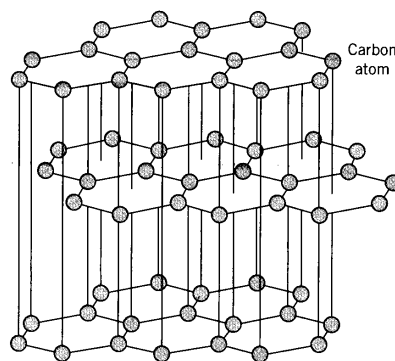
Nguyên tử cacbon có 4 electron ngoài cùng. Trong tinh thể kim cương, mỗi nguyên tử cacbon liên kết với bốn nguyên tử cacbon lân cận gần nhất bằng bốn cặp electron chung. Các nguyên tử cacbon này nằm trên bốn đỉnh của một tứ diện đều (lai hóa sp^3). Mỗi nguyên tử cacbon ở đỉnh lại liên kết với 4 nguyên tử cacbon khác,...

Lực liên kết cộng hóa trị rất lớn, vì vậy các tinh thể nguyên tử đều bền vững, khá cứng, khó nóng chảy, khó bay hơi.

Kim cương, silic, germani, silic cacbua (SiC),... là những tinh thể nguyên tử, kim cương có độ cứng lớn nhất so với các chất khác.

Than chì (graphit)

Kim cương và than chì đều được cấu tạo nên từ những nguyên tử cacbon. Tinh thể kim cương có cấu trúc như đã xét ở trên, tinh thể than chì có cấu trúc lớp.



Cấu trúc tinh thể than chì

Trong mỗi lớp, các nguyên tử cacbon liên kết với nhau bằng liên kết cộng hóa trị theo kiểu sp^2 (góc liên kết CCC bằng 120°).

Liên kết trong mỗi lớp rất bền vững. Tuy nhiên liên kết giữa các lớp lại rất yếu làm cho các lớp có thể trượt lên nhau, do đó mà than chì mềm và dễ tách ra thành vảy nhỏ.

Tuy cùng được tạo nên từ những nguyên tử cacbon nhưng do cách sắp xếp khác nhau trong mạng lưới tinh thể mà kim cương và than chì có tính chất khác hẳn nhau: kim cương thì trong suốt, than chì thì đen; kim cương thì cứng, than chì thì mềm

II. Tinh thể phân tử

Tinh thể phân tử được tạo nên từ các phân tử, liên kết với nhau bằng tương tác van der Waals.

Ta lấy tinh thể nước làm ví dụ.

Trong tinh thể nước đá, mỗi phân tử nước liên kết với bốn phân tử nước lân cận nằm trên bốn đỉnh của một tứ diện đều. Mỗi phân tử nước ở đỉnh lại

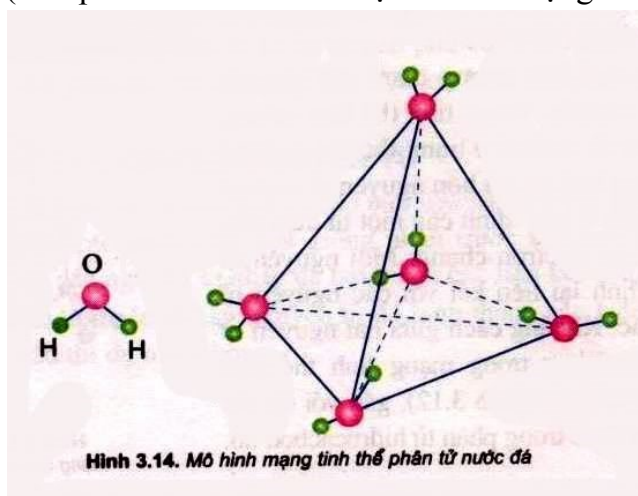
liên kết với bốn phân tử lân cận nằm ở bốn đỉnh của một tứ diện đều khác và cứ tiếp tục như vậy.

Vì lực hút giữa các phân tử yếu hơn nhiều so với liên kết cộng hóa trị và lực hút tĩnh điện giữa các ion (yếu hơn hàng chục lần) cho nên nước đá dễ nóng chảy, dễ bay hơi. Ở 0°C , nước đá đã bị phân hủy một phần. Các phân tử nước dịch chuyển lại gần nhau làm cho tỉ khối của nước (lỏng) lớn hơn tỉ khối của nước đá, vì vậy nước đá nổi lên mặt nước lỏng.

Do liên kết hidro nên tinh thể nước đá có cấu trúc tứ diện, mà cấu trúc tứ diện là cấu trúc rỗng: Đó là đặc điểm của nước đá (thông thường khi các chất đông đặc, chất ở trạng thái rắn có tỉ khối lớn hơn chất ở trạng thái lỏng).

Các tinh thể naphthalen (băng phiến), iot, tuyết cacbonic (CO_2),... là những tinh thể phân tử, chúng cũng dễ bị nóng chảy, bay hơi. Ngay ở nhiệt độ thường, một phần tinh thể naphthalen và iot đã bị phá hủy. Các phân tử tách rời ra khỏi tinh thể à khuếch tán vào không khí làm cho ta dễ nhận ra mùi của chúng.

Cần lưu ý rằng, trong tinh thể phân tử, các phân tử vẫn tồn tại như những đơn vị độc lập (mỗi phân tử vẫn chiếm một nút của mạng tinh thể)



III. Tinh thể ion

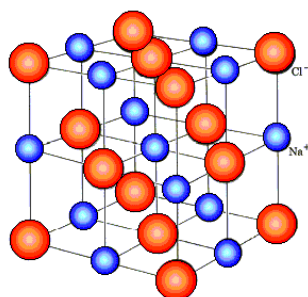
Tinh thể ion được tạo nên bởi các ion, liên kết với nhau bằng lực hút tĩnh điện.

Ta lấy tinh thể NaCl làm ví dụ.

Trong tinh thể NaCl , các ion Na^+ và Cl^- được phân bố luân phiên đều đặn trên các đỉnh của một hình lập phương. Xung quanh mỗi ion đều có 6 ion ngược dấu gần nhất

Vì lực hút tĩnh điện giữa các ion ngược dấu lớn nên tinh thể ion rất bền vững. Các hợp chất ion đều khá rắn, khó bay hơi, khó nóng chảy, ví dụ nhiệt độ nóng chảy của NaCl là 800°C

Dung dịch của các hợp chất ion hòa tan trong nước và các hợp chất ion nóng chảy đều dẫn điện vì ion là những phần tử mang điện, khi đó có thể chuyển động tự do



IV. Tinh thể kim loại

Trong số 109 nguyên tố đã biết thì có hơn 80 nguyên tố là kim loại.

Trừ thủy ngân, tất cả các kim loại đều là chất rắn ở nhiệt độ thường và đều có cấu tạo tinh thể.

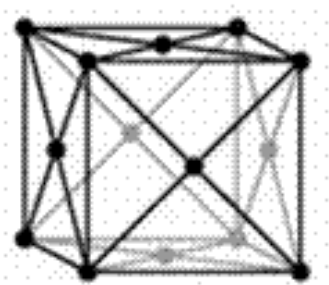
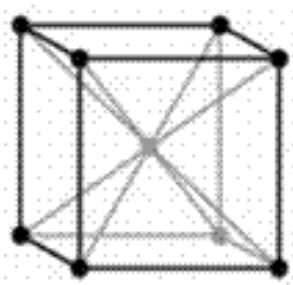
Trong tinh thể kim loại, các ion dương chiếm những nút của mạng tinh thể. Vì các nguyên tử kim loại có năng lượng ion hóa thấp, các electron ngoài cùng liên kết yếu với hạt nhân nên dễ tách ra khỏi nguyên tử và chuyển động tương đối tự do trong toàn mạng lưới tinh thể tạo thành một “biển electron”. Các electron mang điện tích âm hút tất cả các ion mang điện tích dương và liên kết hạt nhân với nhau, đó là liên kết kim loại.

Tất cả các tính chất đặc trưng của kim loại như dẫn điện, dẫn nhiệt, dễ dát mỏng, dễ kéo dài,... là do liên kết kim loại quyết định.

Liên kết kim loại khá vững chắc nên các kim loại đều khó nóng chảy, khó bay hơi.

Ở trên, ta đã nêu bốn kiểu mạng tinh thể điển hình: mạng tinh thể nguyên tử, phân tử, ion, kim loại

Trên thực tế, có nhiều chất có mạng tinh thể hỗn tạp, chẳng hạn nhiều muối silicat vừa có mạng tinh thể ion vừa có mạng tinh thể cộng hóa trị...



Tinh thể kim loại

E. Bài tập vận dụng

Bài 1:

- Có 5 lọ chưa riêng lẻ từng dung dịch của các chất H_2SO_4 , HCl , NaCl , NaBr , NaClO . Nêu phương pháp hóa học để phân biệt các dung dịch nói trên.
- Hãy sắp xếp (có giải thích) các axit của clo theo thứ tự:
 - Tính axit giảm dần
 - Tính oxy hóa tăng dần
 - Độ bền giảm dần
- Nêu cấu trúc hình học của các gốc axit ứng với các axit nói trên
(Trường THPT chuyên Lâm Đồng-Olympic 30-4 lần thứ VI)

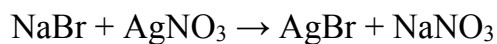
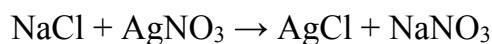
Giải:

- Thực hiện trên từng lượng nhỏ mẫu chất dùng làm mẫu thử
 - Đầu tiên dùng BaCO_3 nhận ra hai axit:

$$\text{BaCO}_3 + \text{H}_2\text{SO}_4 \rightarrow \text{BaSO}_4 + \text{H}_2\text{O} + \text{CO}_2$$

$$\text{BaCO}_3 + 2\text{HCl} \rightarrow \text{BaCl}_2 + \text{H}_2\text{O} + \text{CO}_2$$
 Các chất còn lại không phản ứng được với muối rắn.
 - Dùng dung dịch KI nhận ra được NaClO vì NaClO là muối có tính oxy hóa mạnh).

$$\text{NaClO} + \text{H}_2\text{O} + 2\text{KI} \rightarrow \text{I}_2 + \text{NaCl} + 2\text{KOH}$$
 I_2 sinh ra làm xanh giấy tím hồ tinh bột
 - Sau đó dùng dung dịch AgNO_3 sẽ phân biệt được các muối Cl^- và Br^- :



2. Các axit có oxy của clo có dạng chung là HClO_n (n: Nguyên dương 1, 2, 3, 4).

Các axit lần lượt là HClO , HClO_2 , HClO_3 , HClO_4

a) Tính axit giảm dần như sau:

HClO_4 , HClO_3 , HClO_2 , HClO

Giải thích: Do số oxy hóa của nguyên tố trung tâm clo giảm dần từ +7 xuống +1.

Đồng thời số nguyên tử oxy liên kết giảm dần làm cho liên kết $\text{H}-\text{O}$ càng ít phân cực.

b) Tính oxy hóa tăng dần như sau:

HClO_4 , HClO_3 , HClO_2 , HClO

3. Giải thích: Càng có ít công thức cộng hưởng $\rightarrow$ Tính oxy hóa tăng dần.

c) Độ bền tăng dần như sau:

HClO_4 , HClO_3 , HClO_2 , HClO

Giải thích: Do khoảng cách $\text{Cl}-\text{O}$ tăng dần.

4.

Axit	HClO	HClO_2	HClO_3	HClO_4
Anion	ClO^-	ClO_2^-	ClO_3^-	ClO_4^-
Trạng thái lai hóa	O lai hóa sp^3	Cl lai hóa sp^3	Cl lai hóa sp^3	Cl lai hóa sp^3
Cấu trúc hình học	Đường thẳng	Hình góc (gấp khúc)	Hình tháp tam giác	Hình tứ diện

Bài 2:

a) Thế nào là liên kết sigma, liên kết pi theo quan điểm thuyết cơ học lượng tử?

Bằng hình vẽ, mô tả sự xen phủ giữa các obitan nguyên tử để hình thành liên kết trong phân tử: CO_2 , C_2H_4 , N_2 , C_2H_2 , $(\text{CN})_2$.

Bằng cách dùng sơ đồ xếp các e vào ô lượng tử của lớp ngoài cùng, hãy giải thích sự tạo thành phân tử CO theo thuyết cơ học lượng tử.

b) Thế nào là sự lai hóa các obitan nguyên tử? Dùng thuyết obitan lai hóa, hãy cho biết kiểu lai hóa của các nguyên tử trung tâm trong: PCl_5 , BeH_2 , SF_6 , SO_2Cl_2 .

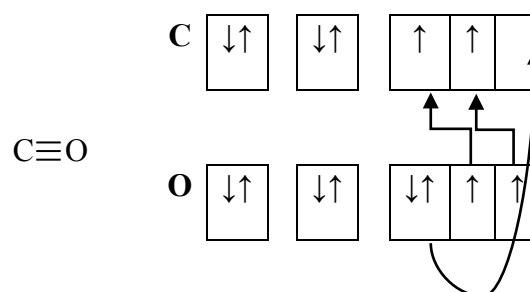
(Trường THPT Nguyễn Thị Minh Khai, tp Hồ Chí Minh-Olympic 30-4 lần thứ VI)

Giải:

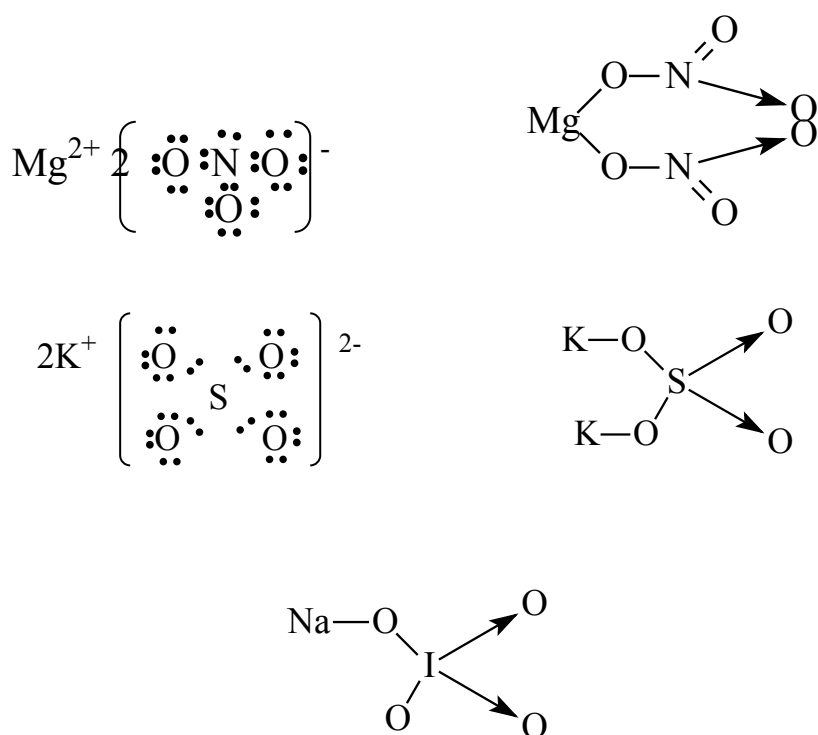
a) Liên kết sigma: liên kết hình thành do sự xen phủ dọc theo trục của 2 obitan, mỗi obitan chứa 1e với spin trái chiều.

Liên kết pi: liên kết hình thành do sự xen phủ bên của 2 obitan p có trục song song nhau, mỗi obitan chứa 1e với spin trái chiều.

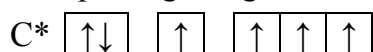
Sự tạo liên kết trong phân tử CO theo thuyết cơ học lượng tử:



b) Sự lai hóa các obitan nguyên tử: sự tổ hợp của các obitan của cùng 1 nguyên tử để tạo ra các obitan nguyên tử đồng nhất có năng lượng bằng



2. a) Để hình thành 4 liên kết σ (C—H) trước hết nguyên tử C phải chuyển từ trạng thái cơ bản $1s^2 2s^2 2p^2$ sang trạng thái kích thích $1s^2 2s^1 2p^3$



Sau đó 4 obitan $2s$, $2p_x$, $2p_y$, $2p_z$ được tổ hợp lại tạo ra 4 obitan lai hóa sp^3 , mỗi obitan có 1 e, sự phủ 4 obitan 1 e này với 4 obitan của 1 e $1s$ của nguyên tử H dẫn đến sự hình thành 4 liên kết σ (C—H). Trục của liên kết σ hướng tâm đến 4 đỉnh tứ diện đều với góc là $109^\circ 28'$.

b) Trong phân tử H_2O và NH_3 , nguyên tử trung tâm là O và N tương đương đều ở trạng thái lai hóa sp^3 .

Ở phân tử NH_3 có 3 obitan lai hóa sp^3 được dùng để tạo ra 2 liên kết σ (N—H) tương đương còn 1 obitan lai hóa có 2 e.

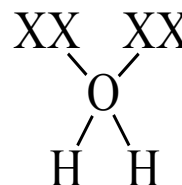
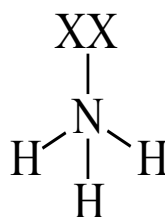
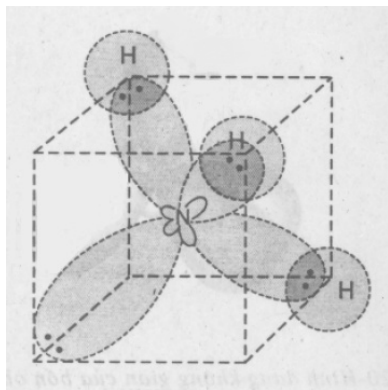
- Ở phân tử H_2O có 2 obitan lai hóa sp^3 được dùng để tạo ra 2 liên kết σ (O—H) tương đương, 2 obitan lai hóa còn lại đều có 2e.

- Phân tử NH_3 có hình chóp tam giác với góc liên kết $\text{HNH} = 107^\circ$. Phân tử H_2O dạng chữ V có góc $\text{HOH} = 104^\circ 29'$. Sự sai lệch với góc tứ diện $109^\circ 28'$ được giải thích:

+ Do 2 đôi e không liên kết chiếm vùng không gian lớn sẽ chèn ép 2 đôi điện tử liên kết gần nhau nên góc liên kết còn $104^\circ 29'$.

+ Ở NH_3 chỉ có 1 đôi điện tử nên sự chèn ép ít, nên góc là $107^\circ 25'$.

Hình vẽ:

**Bài 4:**

- Cho biết sự lai hóa nào xảy ra khi hình thành phân tử NH_3 , H_2O . So sánh độ lớn các góc hóa trị: $\text{H}-\text{N}-\text{H}$ với $\text{H}-\text{O}-\text{H}$
- a) Liên kết H được hình thành trên cơ sở nào.
b) Trong các chất sau, dự đoán:
 - Chất nào dễ hóa lỏng nhất: F_2 , NH_3 , CO_2 , CH_4
 - Chất nào dễ tan trong nước nhất: H_2 , CH_4 , NH_3
 - Chất nào có nhiệt độ sôi cao nhất: CO_2 , SO_2 , HF
 Giải thích các trường hợp trên
(*THPT Hùng Vương – Olympic 30-4 lần thứ VI*)

Giải:

- H_2O , NH_3 : sp^3 ; $\text{H}-\text{N}-\text{H}$: $107,1^\circ$, $\text{H}-\text{O}-\text{H}$: $104,5^\circ$
- a) Liên kết hidro là liên kết yếu hình thành có các phân tử hút nhau, Trong đó H linh động của nguyên tử này liên kết với nguyên tử có độ âm điện lớn (F , O , N , Cl ,...) và còn có cặp e chưa dùng đến của phân tử kia
Liên kết hidro liên phân tử kí hiệu ...
b) Chất dễ hóa lỏng là các phân tử khí dễ tạo liên kết $\text{H} \rightarrow \text{NH}_3$ dễ hóa lỏng nhất
Chất dễ tan nhất trong nước là chất nối liên kết H với H_2O bền chặt nhất $\rightarrow \text{NH}_3$ dễ tan trong nước.
Chất có nhiệt độ sôi cao nhất: HF

Bài 5:

Trình bày sự hình thành liên kết hóa học trong các phân tử: NO_2 , N_2O_4 , H_2S , SO_3 bằng thuyết lai hóa obitan.
(*TH chuyên Nguyễn Bình Khiêm, Vĩnh Long – Olympic 30-4 lần thứ VI*)

Bài 6:

Dựa vào lí thuyết lai hóa các obitan, em hãy giải thích sự tạo thành các ion phân tử:



(*THPT Thoại Ngọc Hầu, An Giang – Olympic 30-4 lần thứ VI*)

Bài 7:

- Viết các công thức cấu tạo có thể ứng với công thức phân tử $\text{C}_2\text{H}_6\text{O}$, cho biết:
+ Chất nào ở thể lỏng, thể khí
+ Chất nào có nhiệt độ sôi cao hơn
+ Chất nào dễ tan trong nước hơn? Có giải thích
- Cho biết trạng thái lai hóa của các nguyên tử trung tâm trong các phân tử (và ion) sau: NH_4^+ , CS_2 , NH_3 , BF_3 , SO_2 . Cho biết phân tử nào là phân tử phân cực? Không phân cực? (*THPT chuyên Lương Văn Chánh, Phú Yên – Olympic 30-4 lần thứ VI*)

Bài 8:

- Dùng thuyết obitan lai hóa, hãy giải thích liên kết hóa học trong O_3 , NH_4^+
- Cho biết trạng thái lai hóa của các nguyên tử trung tâm trong các phân tử sau: AsCl_5 , BeF_4^{2-} , BF_4^- , BCl_3 , PCl_3 , IF_7
Nêu cấu trúc không gian của các phân tử đó.
- a) Tại sao canxi chỉ có một trạng thái hóa trị là 2, còn Fe lại có nhiều trạng thái hóa trị?
b) Hãy so sánh tính khử của Ca với Fe, tính bazơ của $\text{Fe}(\text{OH})_2$ và $\text{Fe}(\text{OH})_3$. Nêu thí dụ để minh họa.
(*THPT Hoàng Lê Kha, Tây Ninh – Olympic 30-4 lần thứ VI*)

Bài 9:

Nguyên tử A có electron sau chót của cấu hình biểu diễn bằng các số lượng tử sau: $n=2$, $l=1$, $m_l=+1$, $m_s=+1/2$

- Viết cấu hình electron của A, xác định vị trí của nguyên tố A trong bảng hệ thống tuần hoàn.
- Viết công thức cấu tạo của các chất AH_3 , AO_2 . Nêu trạng thái lai hóa của A trong các chất trên.
- Viết công thức cấu tạo của các chất AH_4NO_3 và AH_3AlCl_3 . Xác định loại liên kết trong mỗi phân tử trên.
(*THPT Chuyên Lê Quý Đôn, Đà Nẵng – Olympic 30-4 lần thứ VI*)

Bài 10:

- Trong dung dịch rượu etylic và phetol có thể tồn tại những liên kết hiđro khác nhau giữa các phân tử. Hãy biểu diễn các liên kết hiđro và cho biết dạng liên kết hiđro nào bền vững hơn cả?

1. H₂O và HCl

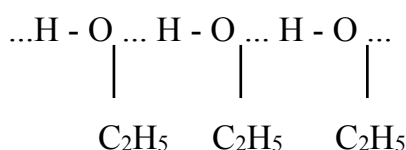
3. $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ và CH_3OCH_3

2. SO₂ và O₂

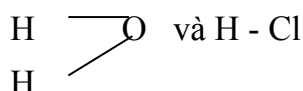
4. CH_3COOH và HCOOCH_3

Giải:

Ruou - ruou:


$$\begin{array}{ccccc} \cdots \text{H} - \text{O} & \cdots \text{H} - \text{O} & \cdots \text{H} - \text{O} & \cdots & \\ | & | & | & & \\ \text{C}_6\text{H}_5 & \text{C}_6\text{H}_5 & \text{C}_6\text{H}_5 & & \end{array}$$
$$\begin{array}{ccc} \text{...H - O} & \text{... H - O} & \text{v\`a ... H - O} & \text{... H - O} \\ | & | & | & | \\ \text{C}_6\text{H}_5 & \text{C}_2\text{H}_5 & \text{C}_2\text{H}_5 & \text{C}_6\text{H}_5 \end{array}$$
$$\begin{array}{ccc} \text{H} - \text{O} & \cdots & \text{H} - \text{O} \\ | & & | \\ \text{C}_2\text{H}_5 & & \text{C}_6\text{H}_5 \end{array}$$

b) 1. H₂O và HCl có CTPT:



Do $\chi_{\text{O}} \gg \chi_{\text{Cl}} \rightarrow$ liên kết - O - H bị phân cực nhiều hơn liên kết H - Cl, nguyên tử H của H_2O linh động hơn, bởi vậy mỗi liên kết hiđro liên phân tử H_2O bền chặt hơn $\rightarrow \text{H}_2\text{O}$ sôi ở nhiệt độ cao hơn.

2. SO₂ và O₂ có CTPT: O = S → O (M = 64) và O = O (M = 32)

Do $\text{MCO}_2 > \text{MO}_2 \rightarrow$ lực Vanderwaals giữa các phân tử SO_2 mạnh hơn giữa các phân tử O_2 vì SO_2 có tính phân cực hơn $\rightarrow t^\circ\text{s}$ của $\text{SO}_2 > t^\circ\text{s}$ của O_2 .

3. $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ và $\text{CH}_3\text{-O-CH}_3$ có H trong nhóm OH của rượu linh động hơn các nguyên tử H trong $\text{CH}_3\text{OCH}_3 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ có thể tạo được liên kết hidro liên phân tử với chính nó, còn CH_3OCH_3 thì không $\rightarrow t^\circ\text{s}(\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}) > t^\circ\text{s}(\text{CH}_3\text{OCH}_3)$

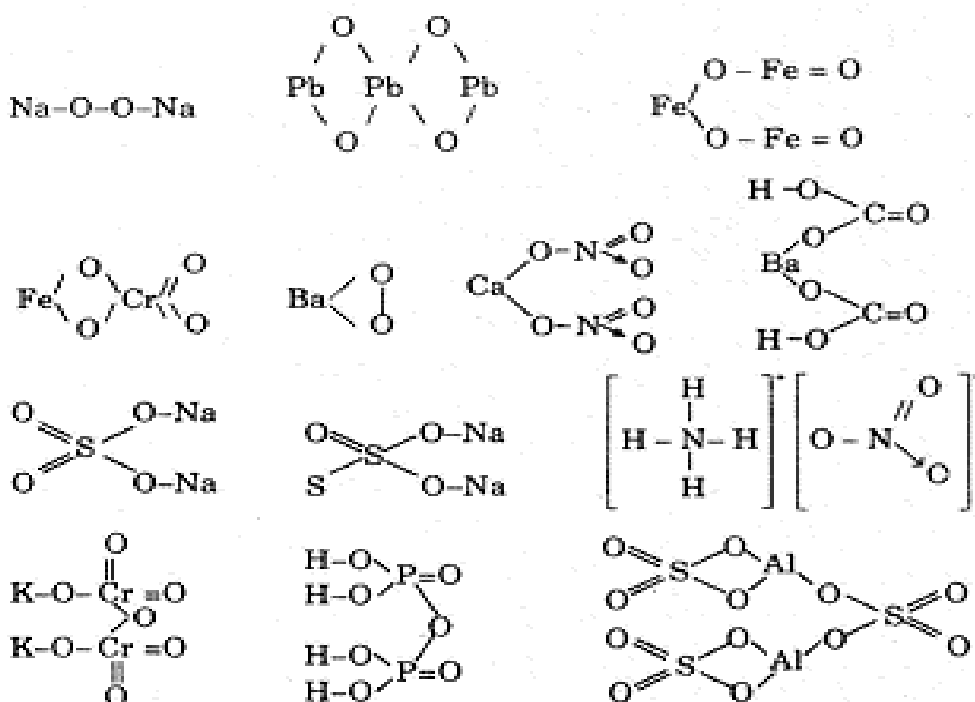
4. Tương tự câu 3 $\rightarrow t^\circ\text{s}(\text{CH}_3\text{COOH}) > t^\circ\text{s}(\text{HCOOCH}_3)$

c) Khi mạch cacbon tăng trong rượu và trong axit thì tính kỵ nước của gốc hidrocarbon tăng $\rightarrow$ giảm sự hòa tan trong nước.

Bài 11:

Viết CTCT của các hợp chất sau: Na_2O_2 , Pb_3O_4 , FeCr_2O_4 , BaO_2 , $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2$, $\text{Ba}(\text{HCO}_3)_2$, Na_2SO_4 , $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$, NH_4NO_3 , $\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$, $\text{Al}_2(\text{SO}_4)_3$.

Giải:



Bài 12:

a) Liên kết hidro là gì?

b) Hợp chất nào sau đây tạo ra được liên kết hidro giữa các phân tử. Giải thích.
 C_2H_6 , $\text{C}_2\text{H}_5\text{Cl}$, $\text{C}_2\text{H}_5\text{NH}_2$, $\text{CH}_3\text{COOC}_2\text{H}_5$, CH_3COOH , CH_3CHO

c) Dựa vào sự tạo thành liên kết hidro giữa các phân tử, hãy cho biết trong các chất sau đây:

* Chất nào có nhiệt độ sôi cao nhất?



* Chất nào dễ tan trong nước nhất?



Giải:

a) Liên kết hidro là liên kết tạo bởi lực hút tĩnh điện giữa:

- Phần dương là nguyên tử H mang điện dương (do H nối với một nguyên tử có độ âm điện lớn như Cl, N, O, F)

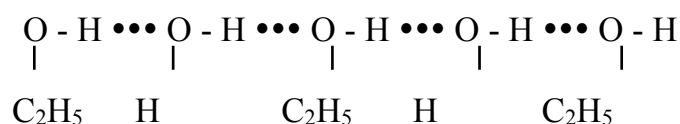
- Phần âm là nguyên tử có độ âm điện lớn (còn đôi e tự do) của một phân tử khác.

b) Trong các hợp chất đã cho, chỉ có $\text{C}_2\text{H}_5\text{-NH}_2$ và $\text{CH}_3\text{-COOH}$ tạo được liên kết H giữa các phân tử. Còn các phân tử C_2H_6 , $\text{C}_2\text{H}_5\text{Cl}$, $\text{CH}_3\text{COO-C}_2\text{H}_5$, CH_3CHO mặc dù chứa các nguyên tố độ âm điện lớn (Cl, O) nhưng không tạo được liên kết hidro vì nguyên tử H không nối trực tiếp với Cl, O mà liên kết với C:



c) * Chỉ có $\text{C}_2\text{H}_5\text{-OH}$ và $\text{CH}_3\text{-COOH}$ chứa H linh động (nối với O) tạo được liên kết hidro giữa các phân tử, nhưng $M = 60$ của $\text{CH}_3\text{-COOH}$, lớn hơn $M = 46$ của $\text{C}_2\text{H}_5\text{-OH}$ nên $\text{CH}_3\text{-COOH}$ có nhiệt độ sôi cao nhất (ngoài ra liên kết H giữa các phân tử $\text{CH}_3\text{-COOH}$ bền hơn)

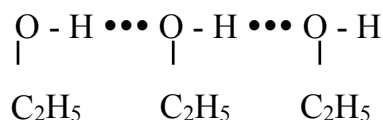
* Chỉ có $\text{C}_2\text{H}_5\text{-OH}$ tan nhiều trong nước vì có thể liên kết H với nước

**Bài 13:**

Nhiệt độ sôi của $\text{C}_2\text{H}_5\text{-Cl}$, $\text{C}_2\text{H}_5\text{-OH}$, CH_3COOH và $\text{CH}_3\text{-COOC}_2\text{H}_5$ tương ứng bằng: $12,5^\circ\text{C}$; $78,3^\circ\text{C}$; 118°C ; $77,1^\circ\text{C}$. Hãy giải thích vì sao PTL của $\text{C}_2\text{H}_5\text{-OH}$ ($M=46$); CH_3COOH ($M=60$) nhỏ hơn của $\text{C}_2\text{H}_5\text{Cl}$ ($M=64,5$); $\text{CH}_3\text{COOC}_2\text{H}_5$ ($M=88$) nhưng nhiệt độ sôi lại cao hơn và vì sao nhiệt độ sôi của axit axêtic CH_3COOH cao hơn của rượu êtylic $\text{C}_2\text{H}_5\text{-OH}$?

Giải:

Do $\text{C}_2\text{H}_5\text{-OH}$ và CH_3COOH có thể tạo thành liên kết hidro giữa các phân tử còn $\text{C}_2\text{H}_5\text{-Cl}$ và $\text{CH}_3\text{-COO-C}_2\text{H}_5$ (không có H linh động) không tạo được liên kết hidro nên $\text{CH}_3\text{-COOH}$ và $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ có nhiệt độ sôi cao hơn $\text{C}_2\text{H}_5\text{-Cl}$ và $\text{CH}_3\text{-COO-C}_2\text{H}_5$. Ngoài ra sự tạo liên kết hidro giữa các phân tử $\text{CH}_3\text{-COOH}$ bền hơn giữa các phân tử rượu $\text{C}_2\text{H}_5\text{-OH}$ nên nhiệt độ sôi của $\text{CH}_3\text{-COOH}$ cao hơn của rượu $\text{C}_2\text{H}_5\text{-OH}$:



(Liên kết H giữa các phân tử axit xem câu 12)

Bài 14:

Cho ba nguyên tố X, Y, Z thuộc cùng một chu kì nhỏ trong hệ thống tuần hoàn ($Z_x < Z_y < Z_z$). Số hiệu nguyên tử của Y bằng trung bình cộng số hiệu nguyên tử của X và Z. Electron cuối cùng của nguyên tử Y có giá trị các số lượng tử là:

$$l = 1; m = 1; s = +\frac{1}{2}.$$

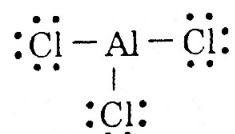
(Quy ước: số lượng tử từ nhận giá trị từ $-l$ qua 0 đến $+l$)

1. Xác định số hiệu nguyên tử và gọi tên ba nguyên tố trên, biết rằng chỉ có hai trong ba nguyên tố này có khả năng tạo hợp chất khí với hidro.

2. Viết công thức phân tử, công thức Lewis, cho biết bản chất liên kết và đặc điểm cấu tạo (hình học phân tử và khả năng dimer hóa) của các phân tử hình thành giữa từng cặp nguyên tố Al và Cl, P và Cl. Từ đặc điểm cấu tạo phân tử cho biết hai chất nào có thể tạo cặp axit - bazơ Lewis.

Giải:

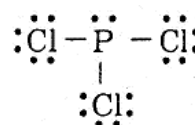
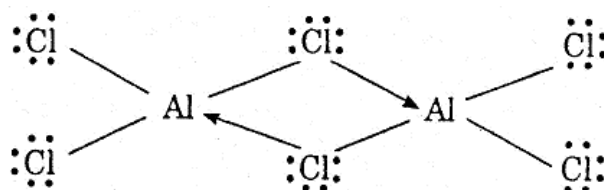
* AlCl_3 : - Hợp chất giữa X và Z có công thức phân tử là AlCl_3



- Công thức cấu tạo:

- Bản chất liên kết là liên kết cộng hóa trị.

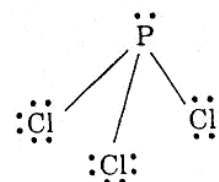
- Đặc điểm cấu tạo phân tử: Có khả năng nhị hợp tạo Al_2Cl_6 vì xung quanh Al mới có 6e chưa đạt cơ cấu bền giống khí hiếm nên 2 phân tử AlCl_3 có khuynh hướng liên kết với nhau bằng 2 liên kết phối trí:



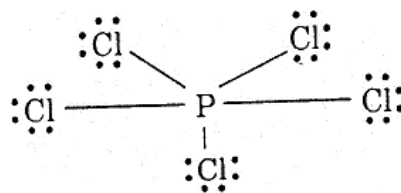
- Hợp chất giữa Y và X có công thức phân tử là:

* PCl_3 : - Bản chất liên kết là liên kết cộng hóa trị.

Đặc điểm cấu tạo phân tử: Có cấu trúc hình tháp đáy tam giác với nguyên tử P ở trạng thái lai hóa sp^3 .

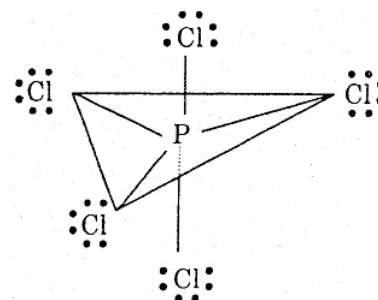


* PCl_5 :



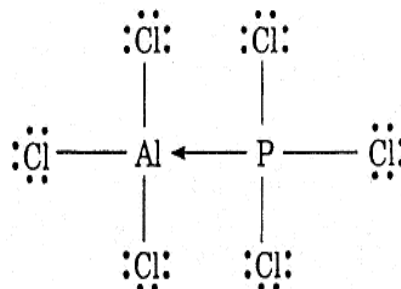
Bản chất liên kết là liên kết cộng hóa trị.

Đặc điểm cấu tạo phân tử: Có cấu trúc hình lưỡng tháp đáy tam giác với nguyên tử P ở trạng thái lai hóa sp^3d .



* Cặp axit - bazơ Lewis

- $AlCl_3$ là phân tử cộng hóa trị, với Al còn thiếu 2e để đạt cơ cấu bền (8e) trong khi đó PCl_3 còn 1 đôi electron chưa liên kết có thể “cho” để tạo liên kết cho - nhận với $AlCl_3$ nên $AlCl_3$ là axit Lewis còn PCl_3 là bazơ Lewis.



Bài 15:

a) Phát biểu đơn giản về chất thuận từ?

b) O_2 và NO có tính thuận từ không? Thuyết liên kết hóa trị giải thích sự có mặt của tính chất này ở các phân tử trên như thế nào?

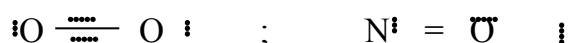
2. So sánh momen lưỡng cực của các phân tử sau: NF_3 ; NH_3

Giải:

1. a) Một chất thuận từ là chất mà các phân tử của nó (hay các nguyên tử, ion hợp phần) có chứa một hay vào electron độc thân. Chất sẽ bị hút vào trong từ trường.

b) N_2 ; NO là các chất thuận từ.

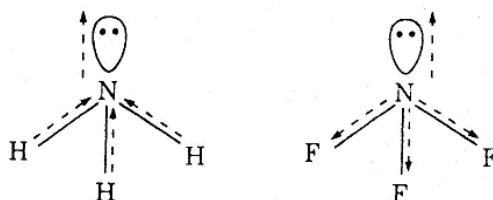
Theo thuyết liên kết hóa trị, nói chung người ta dùng liên kết 3 electron để biểu diễn các phân tử có electron độc thân. Liên kết 3 electron này chỉ bền bằng $\frac{1}{2}$ bằng 2 electron. Cấu trúc electron của 2 phân tử trên là:



2. Phân tử NH_3 và NF_3 đều có cấu trúc tháp, nguyên tử nitơ lai hóa sp^3 và còn một cặp electron chưa liên kết.

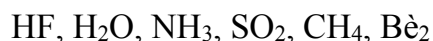
Momem lưỡng cực tổng hợp của ba liên kết N - H định hướng cùng chiều với momem lưỡng cực gây ra bởi cặp electron chưa liên kết, trong khi với phân tử NF_3 ; momem lưỡng cực tổng của ba liên kết N - F định hướng ngược chiều, do đó:

$$\mu_{NH_3} > \mu_{NF_3}$$



Bài 16:

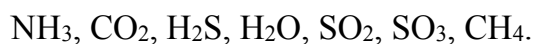
1. Hãy vẽ vector momen lưỡng cực của các liên kết trong các phân tử sau:



2. Mô tả dạng hình học, trạng thái lai hóa của nguyên tử trung tâm trong các phân tử và ion sau:



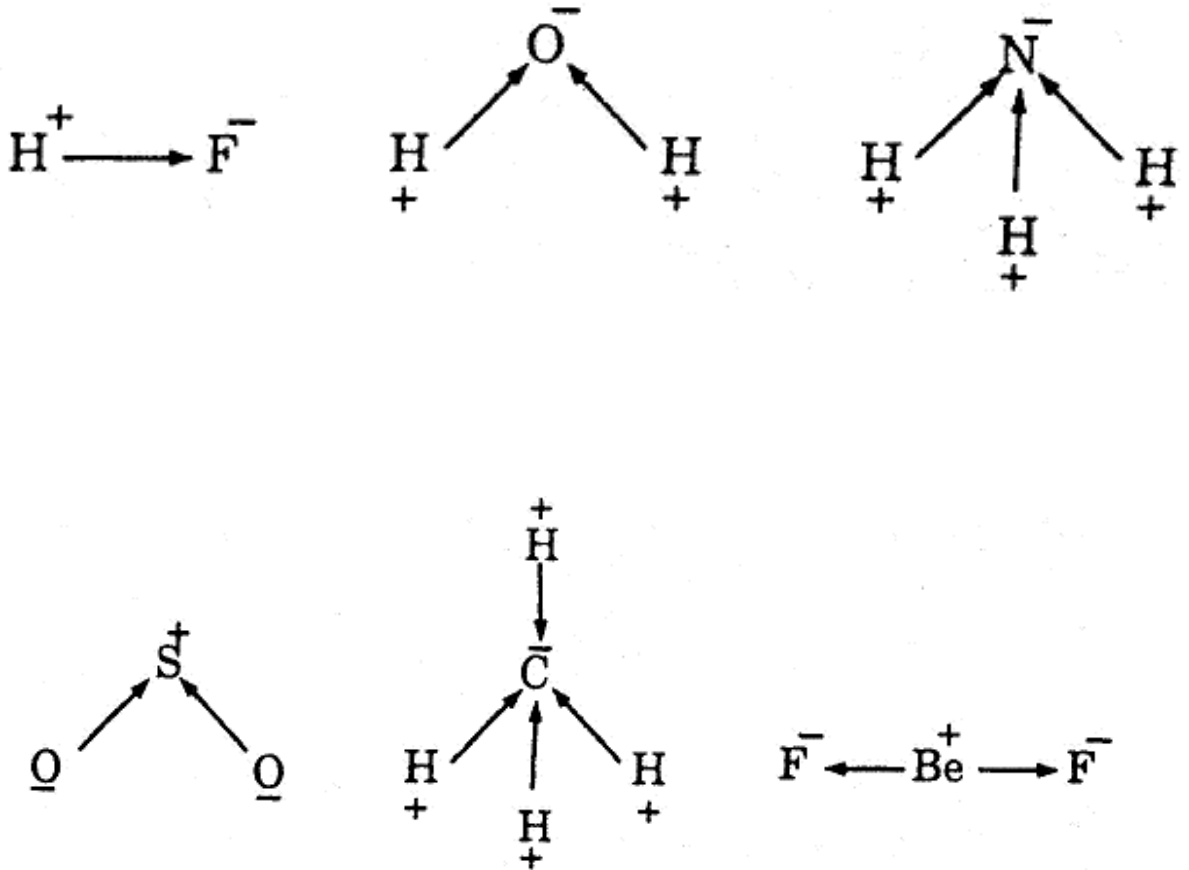
3. Trong các phân tử sau, hãy sắp xếp theo chiều tăng dần góc liên kết.



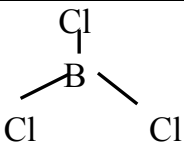
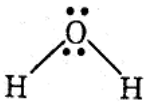
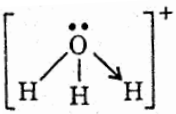
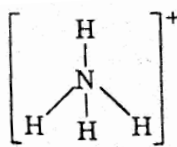
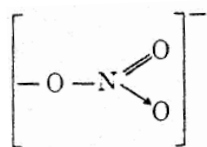
4. So sánh nhiệt độ nóng chảy và độ tan trong nước của các chất sau. Giải thích. KCl , KBr , KI

Giải:

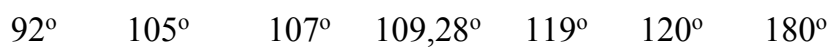
1. Vẽ vector moment lưỡng cực



2.

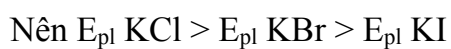
Công thức	Dạng hình học	Trạng thái lai hóa
$\text{F} - \text{Be} - \text{F}$	Đường thẳng	sp
	Tam giác phẳng	sp^2
	Gấp khúc (chữ V)	sp^3
	Tháp tam giác	sp^3
	Tứ diện đều	sp^3
	Tam giác phẳng	sp^2

3. Góc liên kết tăng dần:



4. Nhiệt độ nóng chảy và độ tan của nước.

Ta có: $E_{pl} = \frac{n^+ \times n^-}{d}$



Do đó: $\text{KCl} \rightarrow \text{KBr} \rightarrow \text{KI}$

Nhiệt độ nóng chảy giảm

Độ tan trong nước tăng.

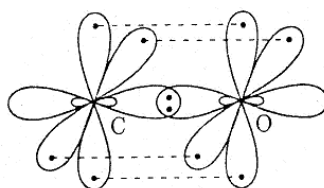
Bài 17:

Cho biết trạng thái lai của nguyên tử trung tâm và cấu tạo hình học của các phân tử và ion sau: CO , ClF_3 , I_3^- , PF_3Cl_2

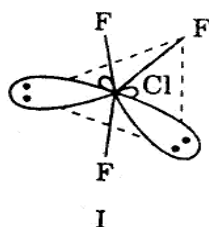
Vẽ hình các dạng và cho biết dạng bền nhất, vì sao ClF_3 bị biến dạng, I_3^- có bị biến dạng như vậy không?

Giải:

CO: Nguyên tử C ở trạng thái lai hóa sp , O không lai hóa:

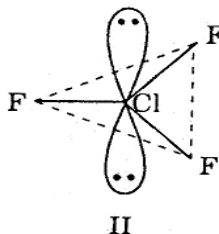


ClF_3 : Cl ở trạng thái lai hóa sp^3d

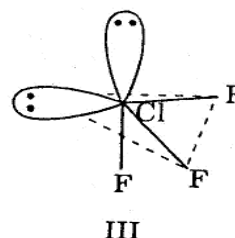


4: TD - N

2: N - N



6: TD - N



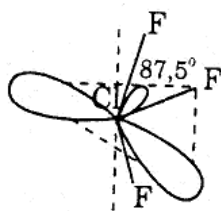
1: TD - TD

3: TD - N

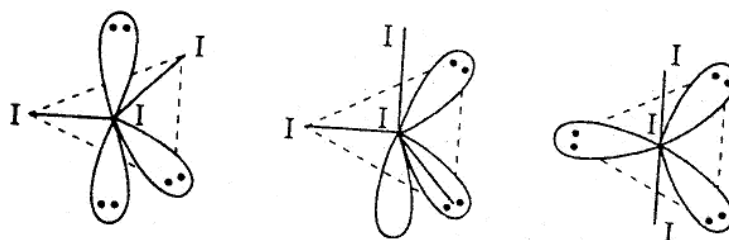
2: N - N

Cơ cấu (I) bền nhất.

Do lực đẩy của 2 cặp e tự do làm biến dạng: $\text{FClF} < 90^\circ$

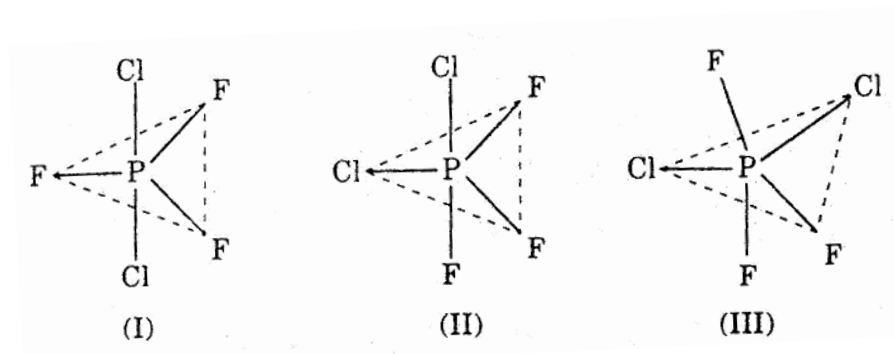


I_3 : nguyên tử I trung tâm ở trạng thái lai hóa sp^3d và ở các dạng:



I_3 : không bị biến dạng như ClF_3 , 3 nguyên tử I thẳng hàng.

PF_3Cl_2 : nguyên tử P trung tâm ở trạng thái lai hóa sp^3d .



Dạng (III) bền nhất do các nhóm thế lớn có khuynh hướng chiếm vị trí xích đạo để góc của chúng lớn hơn 90° .

Bài 18:

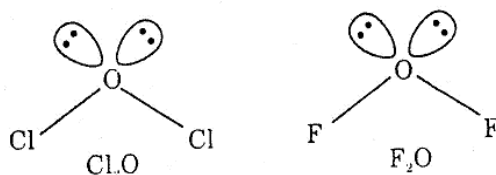
1. So sánh và giải thích trị số khác nhau của mỗi đại lượng dưới đây:

Chất:	Cl_2O	F_2O
Góc liên kết:	110°	103°
Độ phân cực phân tử:	0,78 D	0,30 D

2. Cho biết trạng thái lai hóa của nguyên tử trung tâm và cấu tạo hình học của mỗi phân tử và ion sau đây: ClF_3 , BeF_5 , XeF_5 , NO_2 , NO_2^+ , NO_2^-

Giải:

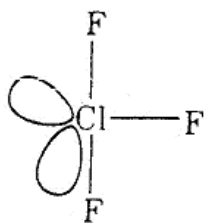
1. Trong cả hai phân tử Cl_2O và F_2O nguyên tử O đều ở trạng thái lai hóa sp^3 với cấu tạo như sau:



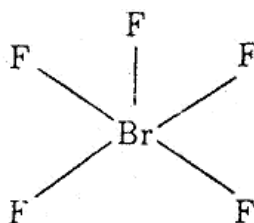
Liên kết O - Cl phân cực về phía O, còn liên kết O = F thì phân cực về phía F. Do vậy khoảng cách giữa 2 cặp electron liên kết trong phân tử Cl_2O nhỏ hơn, lực đẩy tĩnh điện mạnh hơn nên góc liên kết lớn hơn.

Trong phân tử Cl_2P lưỡng cực liên kết và lưỡng cực electron tự do cùng chiều, còn trong phân tử F_2O lưỡng cực electron tự do ngược chiều. Do vậy trong phân tử Cl_2O điện tích âm trên O nhiều hơn phân tử phân cực hơn nên trị số lưỡng cực của Cl_2O lớn hơn F_2O .

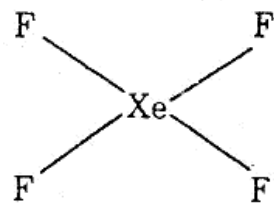
2. Trạng thái lai hóa và cấu tạo hình học:



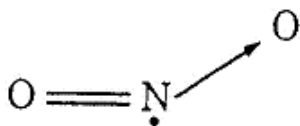
Cl lai hóa sp^3d
 ClF_3 : dạng chữ T



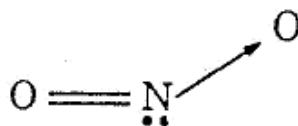
Br lai hóa sp^3d^2
 BrF_5 : dạng tháp
vuông



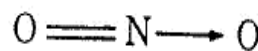
Cl lai hóa sp^3d^2
 BrF_5 : dạng vuông
phẳng



N lai hóa sp^2
 NO_2 : dạng chữ V



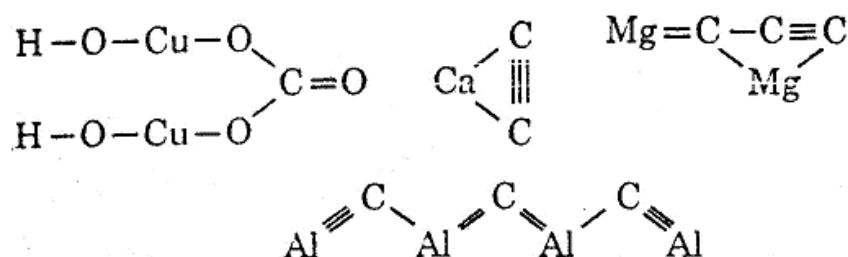
N lai hóa sp^2
 NO_2^- : dạng chữ V



N lai hóa sp
 NO_2^+ : dạng đường
thẳng

Bài 19:

Viết công thức cấu tạo của $\text{Cu}_2(\text{OH})_2\text{CO}_3$, Mg_2C_3 , CaC_2 , Al_4C_3 . Tại sao sự thủy phân các cacbua trên sản phẩm tạo thành lại không giống nhau?

Giải:

Khi thủy phân các cacbua trên: Do CaCl_2 có nhóm $-\text{C}\equiv\text{C}-$ nên tạo C_2H_2 . Mg_2C_3 có nhóm $-\text{C}-\text{C}\equiv\text{C}-$ nên tạo C_3H_4 . Còn Al_4C_3 chỉ tạo CH_4 .

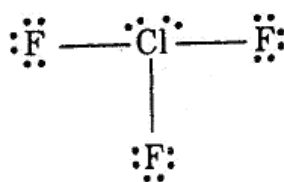
Bài 20:

Clotriflorua (ClF_3) là tác nhân flo hóa rất mạnh được dùng để tách urani ra khỏi các sản phẩm khác có trong thanh nhiên liệu hạt nhân đã qua sử dụng.

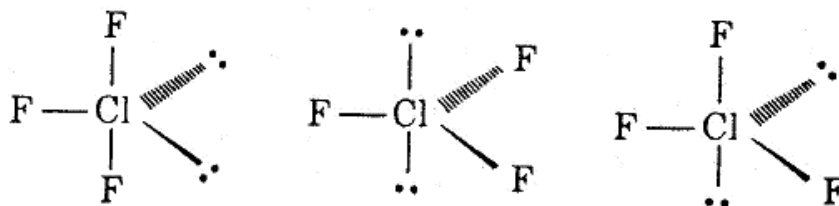
- Viết cấu trúc chấm Lewis của ClF_3 .
- Dựa trên thuyết liên kết hóa trị hãy vẽ các dạng hình học phân tử có thể có của ClF_3 .
- Mô tả rõ dạng hình học phân tử tồn tại trong thực tế của ClF_3 , giải thích vì sao nó tồn tại ở dạng này.
- Tính dẫn điện của ClF_3 lỏng chỉ hơi thấp hơn nước. Tính chất này được giải thích là do sự tự ion hóa của ClF_3 để tạo ion ClF_2^+ và ClF_4^- . Vẽ và mô tả cấu trúc phù hợp tương ứng của hai ion này.

Giải:

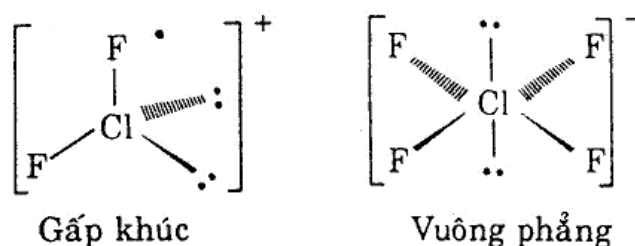
- Công thức Lewis của ClF_3 :



b) Trong phân tử ClF_3 , nguyên tử clo ở trạng thái lai hóa sp^3d , các dạng hình học phân tử có thể có:



c) Dạng chữ T, do tương tác đẩy giữa các đôi electron tự do và đôi electron liên kết là ít nhất, nên bền nhất



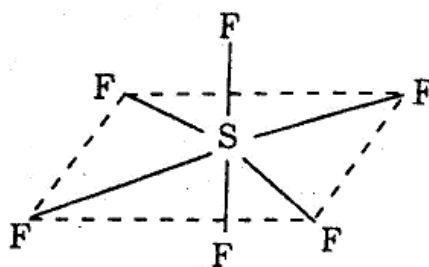
Bài 21:

Dùng thuyết nối hóa trị, hãy cho biết cơ cấu lập thể (biểu diễn bằng hình vẽ) và trạng thái lai hóa của nguyên tử trung tâm các phân tử và ion sau:

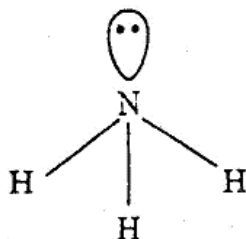


Giải:

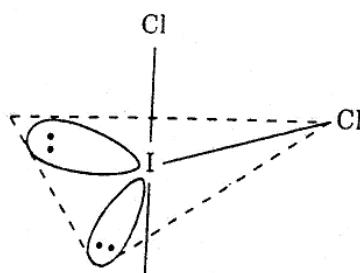
SF_6 : S ở trạng thái lai hóa sp^3d^2 , cơ cấu bát diện.



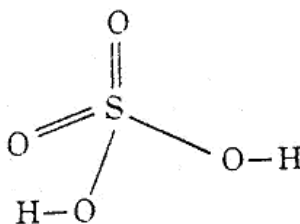
NH_3 : N ở trạng thái lai hóa sp^3 cơ cấu tứ diện



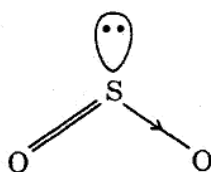
ICl_3 : I ở trạng thái lai hóa sp^3d , cơ cấu lưỡng tháp tam giác.



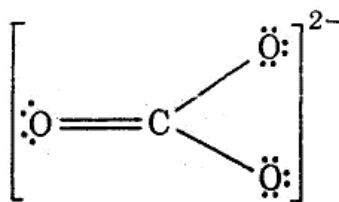
H_2SO_4 : S ở trạng thái lai hóa sp^3 , cơ cấu tứ diện



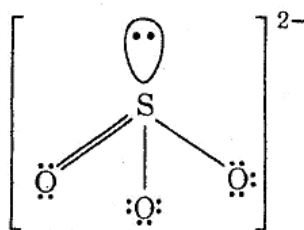
SO_2 : S ở trạng thái lai hóa sp^2 , cơ cấu phẳng



CO_3^{2-} : C ở trạng thái lai hóa sp^2 , cơ cấu phẳng



SO_3^{2-} : S ở trạng thái lai hóa sp^3 cơ cấu tứ diện



Cho 3 nguyên tố Am R, X ($Z_A < Z_R < Z_X$) đều ở phân nhóm chính và không cùng chu kì trong bảng HTTH (hệ thống tuần hoàn). Tổng số lượng tử chính của electron cuối cùng của 3 nguyên tử A, R, X (kí hiệu lần lượt là: e_A , e_R , e_X) bằng 6; tổng số lượng tử phụ của chúng bằng 22; tổng số lượng tử bằng -2 và tổng số lượng tử spin bằng -1/2; trong đó số lượng tử spin của e_A là +1/2.

- a) Gọi tên 3 nguyên tố đã cho.
- b) Cho biết dạng hình học của phân tử A_2R và A_2X . So sánh góc hóa trị trong 2 phân tử đó và giải thích.
- c) Đối với phân tử A_2XR_3 và ion XR^{2-}_4 , hãy viết công thức kiểu Lewis, cho biết dạng hình học và trạng thái lai hóa của nguyên tử trung tâm.

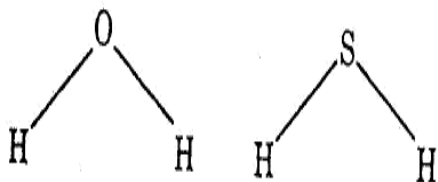
a) Vì A, R, X không cùng chu kì, $Z_A < Z_R < Z_X$ và tổng số lượng tử chính bằng 6 $\Rightarrow e_A$ có $n = 1$, e_R có $n = 2$, e_X có $n = 3$. Tổng số lượng tử phụ bằng 2, trong đó l của e_A phải là 0 (vì $n = 1$) $\Rightarrow l$ của e_R và e_X đều bằng 1 (vì R và X ở chu kì nhỏ, không thể có $l = 2$). Tổng số lượng tử từ bằng -2, trong đó m của $e_A = 0$ (vì $l = 0$), $\Rightarrow m$ của e_R và e_X đều bằng -1 (vì ứng với $l = 1$ thì m có giá trị -1, 0, +1). Tổng số lượng tử spin bằng -1/2, trong đó s của e_A bằng +1/2 (giả thiết) $\Rightarrow s$ của e_R và e_X đều bằng -1/2. Vậy cấu hình electron của 3 nguyên tử như sau:

A là hidro (H)

R là Oxi (O)

X: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$ X là Lưu huỳnh (S)

b) Phân tử A_2R (hay H_2O) và phân tử A_2X (hay H_2S) đều là phân tử có góc:

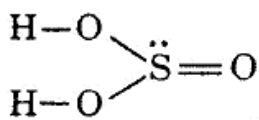


Trong đó $HOH = 104^\circ$ lớn hơn $HSH = 92^\circ$ vì O có độ âm điện lớn hơn, mây electron liên kết trong phân tử H_2O đẩy nhau nhiều hơn.

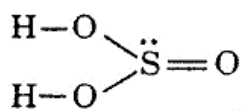
c) Công thức Lewis, dạng hình học, trạng thái lai hóa của nguyên tử trung tâm của H_2SO_3

và ion SO_4^{2-} như sau:

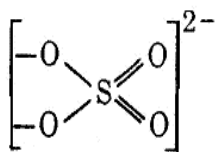
* H_2SO_3 :



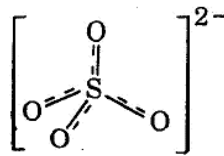
dạng tháp tam giác:



S lai hóa sp^3



* SO_4^{2-} : dạng tứ diện đều:



S lai hóa sp^3

Bài 23:

X có tổng số proton và neutron bé hơn 35, có tổng số đại số oxi hóa dương cực đại và 2 lần oxi hóa âm là - 1. Tìm X.

a) Cho biết 4 số lượng tử của electron cuối cùng X.

b) Viết công thức cấu tạo Lewis của hợp chất X, với hiđro.

c) Cho biết dạng hình học phân tử trạng thái lai hóa của nguyên tử nguyên tố trung tâm của hợp chất X với hiđro, phân tử F_2O , NO_2 và ion SiF_6^{2-} .

Giải:

X có $p + n < 35 \Rightarrow$ X phải thuộc chu kì 2 hoặc 3. Gọi x là số oxi hóa dương cực đại của X.

Gọi y là số oxi hóa âm của X.

$$x + y = 8 \quad (1)$$

$$x + 2(-y) = -1 \quad (2)$$

Từ (1) và (2) $\Rightarrow x = 5$ và $y = 3$

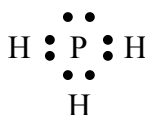
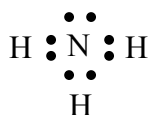
Vậy X là phi kim của phân nhóm chính nhóm V

Do đó X chỉ có thể là nitơ hoặc photpho.

a) * N ($Z = 7$) cấu hình electron $1s^2 2s^2 2p^3$ có 4 số lượng tử của electron cuối cùng là $n = 2, l = 1, m = +1, m_s = +1/2$.

* P ($Z = 15$) cấu hình electron $1s^2 2s^2 2p^6 3s^3 3p^3$ có 4 số lượng tử của electron cuối cùng là $n = 3, l = 1, m = +1, m_s = +1/2$.

b) NH_3 và PH_3 có công thức cấu tạo theo Lewis



c) NH_3 dạng hình chóp tam giác, N lai hóa sp^3 góc $170^\circ 3'$

PH_3 dạng hình chóp tam giác, P lai hóa sp^3 góc 94°

F_2O dạng hình góc, F lai hóa sp^3

NO_2 dạng đường gãy, N lai hóa sp^2

SiF_6^{2-} dạng bát diện 90° , S lai hóa sp^3d^2 .

Bài 24:

Một nguyên tố R và một nguyên tố X có cấu hình electron lớp ngoài cùng lần lượt là $\dots\dots 3s^1$ và $\dots\dots 3s^2 3p^5$.

a. Xác định các nguyên tố R, X, công thức hợp chất giữa chúng và loại liên kết hình thành trong hợp chất thu được.

b. Xác định nguyên tố A có cấu hình electron ngoài cùng là $\dots\dots 4s^1$. Xác định công thức hợp chất có thể có giữa AX.

Giải:

a. R, X có cấu hình electron lớp ngoài cùng lần lượt là $\dots\dots 3s^1$ và $\dots\dots 3s^2 3p^5$ nên R, X lần lượt là Na và Cl.

Công thức hợp chất giữa chúng: NaCl

Loại liên kết hình thành trong hợp chất thu được: liên kết ion.

b. A có cấu hình electron lớp ngoài cùng là $4s^1$

=> A có thể là: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1$ => A là K

$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^1$ => A là Cr

$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^1$ => A là Cu

Công thức hợp chất giữa A và X là : KCl, CrCl₅, CuCl, CuCl₂

Bài 25:

Electron cuối cùng phân bố vào các nguyên tử của các nguyên tố A, B lần lượt được đặc trưng bởi:

A: $n=3, l=1, m=-1, s=1/2$

B: $n=3, l=1, m=0, s=-1/2$

- Dựa trên cấu hình electron xác định vị trí của A, B trong bảng tuần hoàn.
- Cho biết loại liên kết và viết công thức cấu tạo của phân tử AB₃.
- Trong tự nhiên tồn tại hợp chất A₂B₆. Giải thích sự hình thành liên kết trong phân tử của hợp chất này

Giải:

a. A: $n=3, l=1, m=-1, s=1/2$

=> phân lớp ứng với mức năng lượng cao nhất là $3p^1$.

=> Cấu hình electron của A là $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$

=> Nguyên tố A ở ô thứ 14, chu kỳ 3, nhóm III_A.

=> Nguyên tố A là Al

B: $n=3, l=1, m=0, s=-1/2$

=> Phân lớp ứng với mức năng lượng cao nhất là $3p^5$

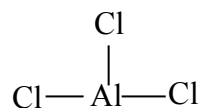
=> cấu hình electron của B là $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$

=> nguyên tố B ở ô thứ 17, thuộc chu kỳ 3, nhóm VII_A

=> nguyên tố B là Cl

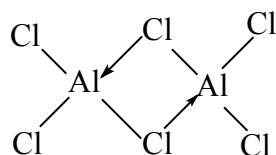
b. Loại liên kết giữa các nguyên tử trong phân tử AlCl_3 là liên kết cộng hoá trị.

Cấu tạo :



c. Phân tử Al_2Cl_6 được hình thành do sự nhị hợp AlCl_3 , liên kết giữa 2 phân tử AlCl_3 hình thành do việc tạo liên kết phối trí giữa nguyên tử Cl với Al.

Cấu tạo :



Bài 26:

Cho biết độ âm điện của các nguyên tố sau

Nguyên tố	Be	Al	P	S	Cl	F
Độ âm điện	1,5	1,6	2,2	2,6	3,1	4

Hãy cho biết trong các hợp chất BeCl_2 , AlCl_3 , PCl_5 , SF_6 là liên kết cộng hoá trị hay liên kết ion?

Giải:

BeCl_2 có $\Delta X = 3,1 - 1,5 = 1,6$

Vì $\Delta X > 0,4$ nên liên kết trong hợp chất là liên kết cộng hoá trị.

AlCl_3 có $\Delta X = 3,1 - 1,6 = 1,5$

Vì $\Delta X > 0,4$ nên liên kết trong hợp chất là liên kết cộng hoá trị

PCl_5 có $\Delta X = 3,1 - 2,2 = 0,9$

Vì $\Delta X > 0,4$ nên liên kết trong hợp chất là liên kết cộng hoá trị

SF_6 có $\Delta X = 4 - 2,6 = 1,4$

Vì $\Delta X > 0,4$ nên liên kết trong hợp chất là liên kết cộng hoá trị

Bài 27: Mô tả sự dịch chuyển electron từ nguyên tử Liti sang nguyên tử Flo để tạo thành hợp chất Liti Florua theo 2 cách

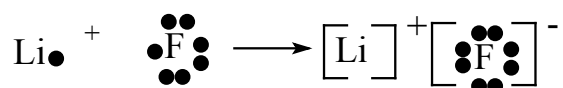
a. Theo cấu hình electron

b. Theo sơ đồ ký hiệu Liuyt

Giải:

a. $\text{Li}[\text{He}]2s^1 + \text{F}[\text{He}]2s^22p^5 \longrightarrow \text{Li}^{1+} 1s^1 + \text{F}^{-}[\text{He}]2s^22p^6$

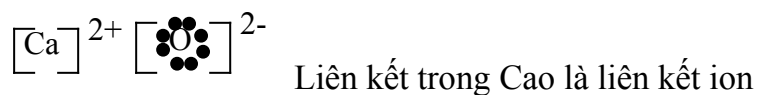
b.



Bài 28:

Mô tả kiểu liên kết trong các hợp chất: CaO , CaCl_2 , $\text{Ca}(\text{OH})_2$, NaClO_3 , Na_2SO_3

Giải:



Tương tự giải các hợp chất còn lại

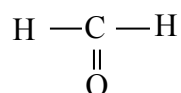
Bài 29:

Xét liên kết cacbon-oxi trong Fomaldenhit H_2CO và trong Cacbon oxit CO trong phân tử nào liên kết cacbon-oxi ngắn hơn? bền hơn? Vì sao?

Giải:

Ta có: liên kết trong CO : $\text{C}\equiv\text{O}$

H_2CO :



Liên kết cacbon-oxi trong CO là liên kết ba, liên kết cacbon-oxi trong H_2CO là liên kết đôi.

Nên phân tử CO liên kết cacbon-oxi ngắn hơn và bền hơn vì hai hạt nhân ở gần nhau hơn, lực hút giữa electron và hạt nhân mạnh hơn, các nguyên tử kéo lại gần nhau và khó tách ra hơn.

Bài 30:

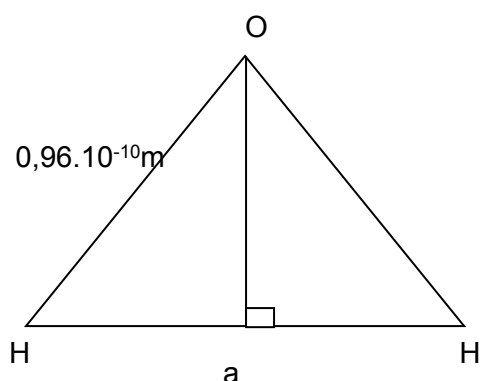
So sánh liên kết nitơ-nitơ trong hidrazin H_2NNH_2 và trong khí cười N_2O

Trong phân tử nào liên kết nitơ-nitơ ngắn hơn? bền hơn? Vì sao?

Bài 31:

Trong phân tử H_2O , độ dài liên kết O-H bằng $0,96 \cdot 10^{-10}\text{m}$ và góc HOH bằng $104,5^\circ$.
Tính khoảng cách giữa hai nguyên tử H (theo nm)

Giải:



$$d_{O-H} = 0,96.10^{-10}m = 0.096nm$$

Ta có:

Khoảng cách giữa 2 nguyên tử:

$$\frac{\sin 104,5^\circ}{2} = \frac{d/2}{d} \Leftrightarrow a = 2d \sin \frac{104,5^\circ}{2}$$

$$\Leftrightarrow a = 2.0,096. \sin 52,25^\circ$$

$$\Leftrightarrow a = 0,152(nm)$$

Bài 32:

Trong mỗi cặp liên kết sau đây hãy nêu số liên kết nào phân cực hơn và dùng mũi tên để chỉ chiều của sự phân cực (từ dương sang âm) ở mỗi liên kết

a. C-O và C-N

b. P-O và P-S

c. P-H và P-N

d. B-H và B-I

Giải:

a. C-O > C-N

+ → - + → -

b. P-O > P-S

+ → - + → -

c. P-N > P-H

+ → - + → -

d. B-I > B-H

+ → - + → -

Bài 33:

Cho các phân tử sau:

- a. CO_2
- b. H_2O
- c. NH_3
- d. NF_3

Phân tử nào phân cực phân tử nào không phân cực? Vì sao?

Bài 34:

1. Tính số electron trong ion: SO_4^{2-} , PO_4^{3-} , CO_3^{2-} , NO_3^- , NH_4^+ .
2. Dự đoán loại liên kết trong các phân tử sau, và sắp xếp theo thứ tự tăng dần độ phân cực của liên kết HCl , CaH_2 , AlBr_3 , CaCl_2 , N_2 .
3. Trình bày liên kết cho nhận trong các phân tử và ion sau CO , H_3O^+ , HNO_3 .
4. Thế nào là năng lượng ion hóa của một nguyên tử? Nguyên tử A có năng lượng ion hóa lớn hơn năng lượng ion hóa của nguyên tố B. Hỏi nguyên tử nào dễ mất electron hơn.
5. Thế nào là bậc liên kết? Thế nào là số liên kết? Cho ví dụ MgCl_2 , AlCl_3 . Hãy cho biết liên kết trong phân tử nào mang nhiều tính chất cộng hóa trị, trong phân tử nào mang nhiều tính chất ion.
7. Hãy cho biết dạng của anion phụ thuộc vào điện tích và bán kính của cation như thế nào từ đó cho biết anion như thế nào thì dễ bị biến dạng.
8. Sự chuyển tiếp từ liên kết cộng hóa trị sang liên kết ion và ngược lại được giải thích như thế nào?

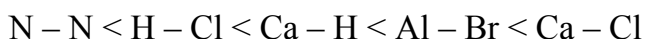
Giải:

1. SO_4^{2-} : S có $Z=16$; O có $z=8 \Rightarrow$ Số electron trong SO_4^{2-} : $16+4.8+2=50$

NH_4^+ : N có $Z=7$; H có $Z=1 \Rightarrow$ Số electron trong NH_4^+ : $7+4-1=10$

Tương tự tìm các ion còn lại

2. Dựa trên sự sai lệch về độ âm điện giữa hai nguyên tử suy ra thứ tự tăng dần độ phân cực của liên kết:



3. Sự hình thành liên kết cho nhận (phối trí) trong CO.



Sau khi mỗi nguyên tử góp chung hai electron, O đạt cấu hình bền của khí hiếm mà C chỉ mới có sáu electron lớp ngoài cùng nên O sẽ cho C một cặp electron (Trong hai cặp electron chưa sử dụng) và hình thành liên kết cho nhận C ←

Tương tự cho các phân tử và ion còn lại

4. Năng lượng ion hóa của một nguyên tử là năng lượng tối thiểu để tách một electron ở trạng thái cơ bản ra khỏi nguyên tử. Nguyên tử có năng lượng ion hóa càng nhỏ càng dễ nhường electron.

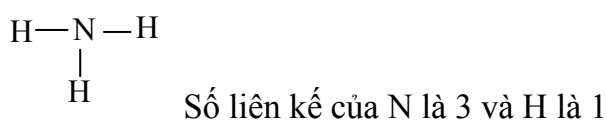
5. Bậc liên kết là số liên kết cộng hóa trị giữa hai nguyên tử.

Ví dụ: S=C=S: Bậc liên kết giữa hai nguyên tử C và S là 2.

H-C≡N: Bậc liên kết giữa hai nguyên tử C và N là 3

Số liên kết của một nguyên tử là số liên kết cộng hóa trị của nguyên tử đó với các nguyên tử khác trong phân tử

Ví dụ:



6. Sự biến dạng ion là do lực hút của cation lên lớp vỏ electron của anion ngoài lớp vỏ bị kéo lệch về phía cation.

Các ion Na^+ , Mg^{2+} , Al^{3+} đều có mười electron phân bố trên hai lớp vỏ như sau: $1s^2 2s^2 2p^6$.

Vì có cùng số lớp electron nhưng số điện tích cation tăng từ Na^+ đến Al^{3+} nên tác dụng biến dạng anion tăng.

Liên kết trong AlCl_3 mang nhiều tính chất cộng hóa trị nhất; liên kết trong NaCl mang nhiều tính chất ion nhất.

7. Sự biến dạng cầu anion càng lớn khi: bán kính của cation càng nhỏ và điện tích của cation càng lớn.

Anion càng dễ biến dạng khi: bán kính của anion càng lớn và điện tích anion càng lớn

8. Sự chuyển tiếp từ liên kết cộng hóa trị sang liên kết còn được giải thích dựa vào sự chênh lệch độ âm điện của hai nguyên tử: dự chênh lệch càng lớn thì độ phân cực càng tăng: liên kết cộng hóa trị chuyển dần sang liên kết ion.

Sự chuyển tiếp từ liên kết ion sang liên kết cộng hóa trị được giải thích dựa vào biến dạng ion. Khi cation có bán kính càng nhỏ và điện tích càng lớn thì liên kết mang nhiều tính chất của liên kết cộng hóa trị.

Bài 35:

Khi khảo sát halogen người ta thu được các dữ liệu sau:

Halogen X_2	F_2	Cl_2	Br_2	I_2
Chiều dài liên kết (Å)	1,42	1,99	2,28	2,67

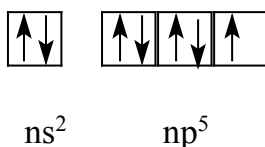
a. Giải thích sự tạo thành liên kết trong phân tử Halogen.

b. Giải thích sự biến thiên độ dài liên kết

c. Dự đoán nhiệt độ nóng chảy, nhiệt độ sôi của các halogen thay đổi như thế nào? Tại sao?

Giải:

a. Các nguyên tử halogen có cấu hình electron ns^2np^5 (lớp electron ngoài cùng có 7 electron) và cấu hình electron trên các orbital là:



Cấu hình này cho thấy ở orbital p có chứa một electron độc thân nên hai orbital p của nguyên tử halogen chia phủ nhau theo trục tạo liên kết cộng hóa trị.

b. Các nguyên tử halogen có kích thước tăng dần từ $F \rightarrow I$ nên độ dài liên kết tăng dần từ $F - F$ đến $I - I$

c. Nhiệt độ nóng chảy và nhiệt độ sôi của halogen tăng dần từ F_2 đến I_2 vì lực liên kết giữa các phân tử halogen là lực hút VanderWaals lực này tăng theo khối lượng và kích thước phân tử các halogen.

Bài 36:

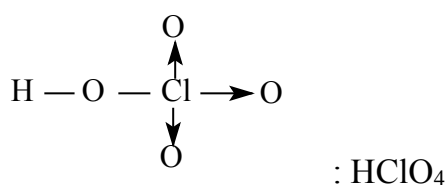
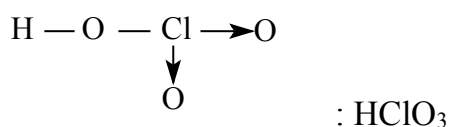
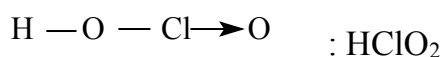
Có ba nguyên tố X, Y, Z có tổng điện tích hạt nhân là 26, tổng số electron trong $[YZ_4]^-$ là 82. Cho biết điện tích hạt nhân của X là 1.

- Tìm tên ba nguyên tố X, Y, Z.
- Viết công thức cấu tạo các hợp chất mà trong phân tử có chứa cả ba nguyên tố X, Y, Z. Cho biết loại liên kết trong các hợp chất này.
- So sánh tính bền, tính oxi-hóa, tính axit của các hợp chất này.

Giải:

a. X : H; Y : Cl; Z : O

b.



c. Tính axit và tính bền : $\text{HClO}_4 > \text{HClO}_3 > \text{HClO}_2 > \text{HClO}$

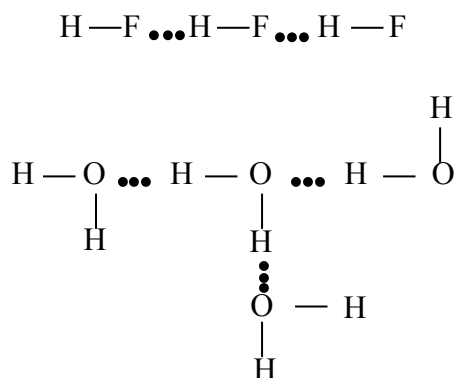
Tính oxi hóa : $\text{HClO} > \text{HClO}_2 > \text{HClO}_3 > \text{HClO}_4$

Bài 37:

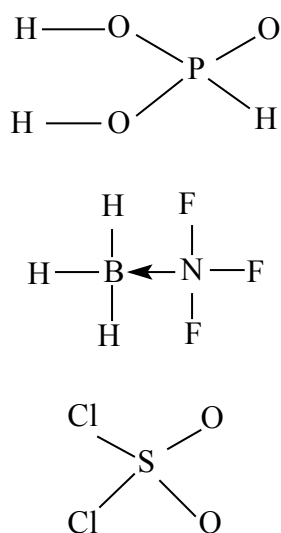
- So sánh độ sôi của H_2
- Viết công thức cấu tạo của H_3PO_3 , H_3BNF_3 , SO_2Cl_2

Giải:

a. H_2O có độ sôi cao hơn HF . Độ âm điện của F lớn hơn của O nên giữa các phân tử HF có mỗi liên kết hidro bền vững hơn. Tuy nhiên, một phân tử HF chỉ liên kết hai liên kết hidro với hai phân tử HF khác còn một phân tử H_2O liên kết được ba liên kết với ba phân tử H_2O khác do đó nước sôi cao hơn.



b.



Bài 38:

Lực hút Van der Waals là gì?

So sánh cường độ lực Van der Waals trong mỗi hợp chất sau đây:

a. H_2 và HCl

b. HBr và HF

c. Br_2 và ICl

Giải:

Lực hút Van der Waals là liên kết giữa phân tử này với phân tử kia, có nguồn gốc từ lực hút tĩnh điện được giải thích bởi sự phân cực của các phân tử:

Lực Van der Waals trong:

a. H_2 và HCl

Liên kết $H - Cl$ phân cực thường trực trong khí H_2 ($H - H$) không bị phân cực thường trực. HCl có khối lượng phân tử lớn hơn H_2 . Vậy lực Van der Waals trong HCl có cường độ lớn hơn trong H_2 .

b. HBr và HF

HF bị phân cực nhiều hơn HBr , tuy nhiên khối lượng phân tử của HF nhỏ hơn so với HCl nên ta chưa thể kết luận được.

c. $Br - Br$ không phân cực trong khi Icl bị phân cực về phía Cl . Vậy Icl có cường độ mạnh hơn Br_2 .

Bài 39:

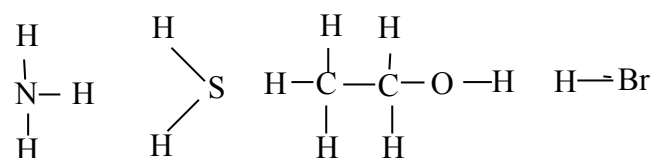
. Thế nào là liên kết hidro phân tử?

Trong các chất sau đây chất nào có mỗi liên kết hidro phân tử với chính nó. Biểu thị các mỗi liên kết đó ra: NH_3 , H_2S , C_2H_5OH , HBr

Giải:

Liên kết Hidro phân tử là mỗi liên kết xảy ra giữa các phân tử với nhau khi H linh động của phân tử này bị hút bởi nguyên tử có độ âm điện mạnh (F , O , N , Cl) của phân tử kia. Mỗi liên kết hidro phân tử thường được biểu thị bằng ba chấm. Mỗi liên kết hidro phân tử yếu hơn mỗi liên kết tạo phân tử (cộng hóa trị, ion).

Ví dụ: Xét CTCT các chất NH_3 , H_2S , C_2H_5OH , HBr :



Ta thấy do N và O có độ âm điện lớn hơn S và Br nên các nguyên tử H trong NH_3 và nguyên tử H trong OH của C_2H_5OH là linh động vì vậy: NH_3 và C_2H_5OH có mỗi liên kết hidro phân tử với chính nó:

Bài 40:

Cho biết dạng hình học và giải thích sự lai hóa của nguyên tử trung tâm trong $[\text{Ni}(\text{CN})_4]^{2-}$

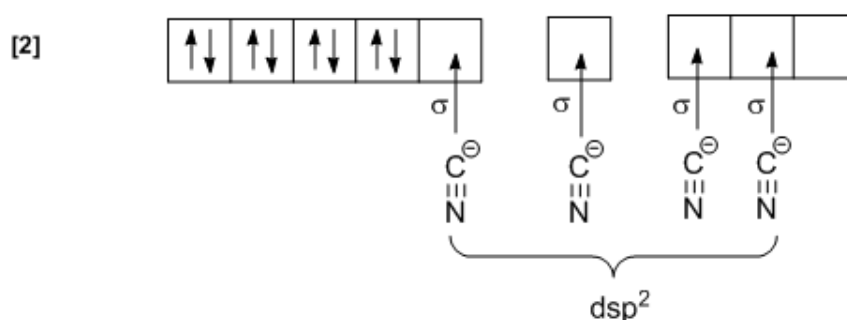
Giải:

Ion trung tâm Ni^{2+} ($Z_{\text{Ni}} = 28$) có cấu hình electron (xếp theo phân mức năng lượng) là: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^8 4p^0$

Các ion phối tử CN^- tác động mạnh lên ion trung tâm nên tất cả các electron d^8 ghép đôi lại với nhau (sự dồn electron). [Xem hình vẽ 1]



Do đó các ion phối tử sẽ dùng cặp các orbital với cặp electron của mình xen phủ với các orbital trống $3d$, $4s$ và $4p$ của $\text{Ni}^{2+} \Rightarrow$ Trạng thái lai hóa của Ni^{2+} là dsp^2 [Xem hình vẽ 2].



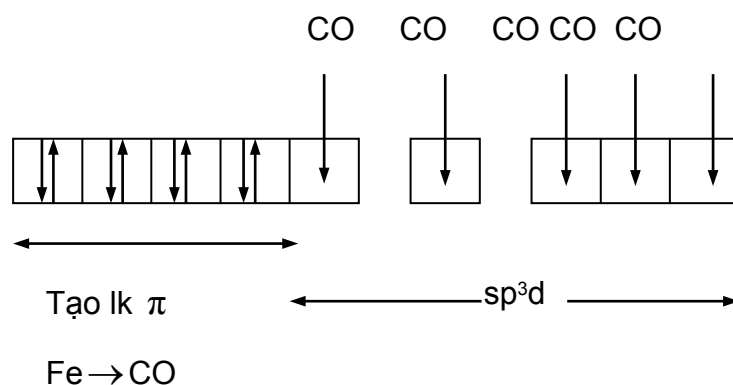
Lai hóa dsp^2 này là sự tổ hợp tuyến tính của 1 orbital $(n-1)d + 1$ orbital $ns + 2$ orbital $(n-1)p$ tạo thành 4 HO (hybridisation orbital) dsp^2 , mỗi HO này mang $1/4$ tính chất $d + 1/4$ tính chất $s + 1/2$ tính chất p . Trục của 4 HO này hướng về 4 góc của một hình vuông phẳng có tâm là nguyên tử trung tâm. [Xem hình vẽ 3]



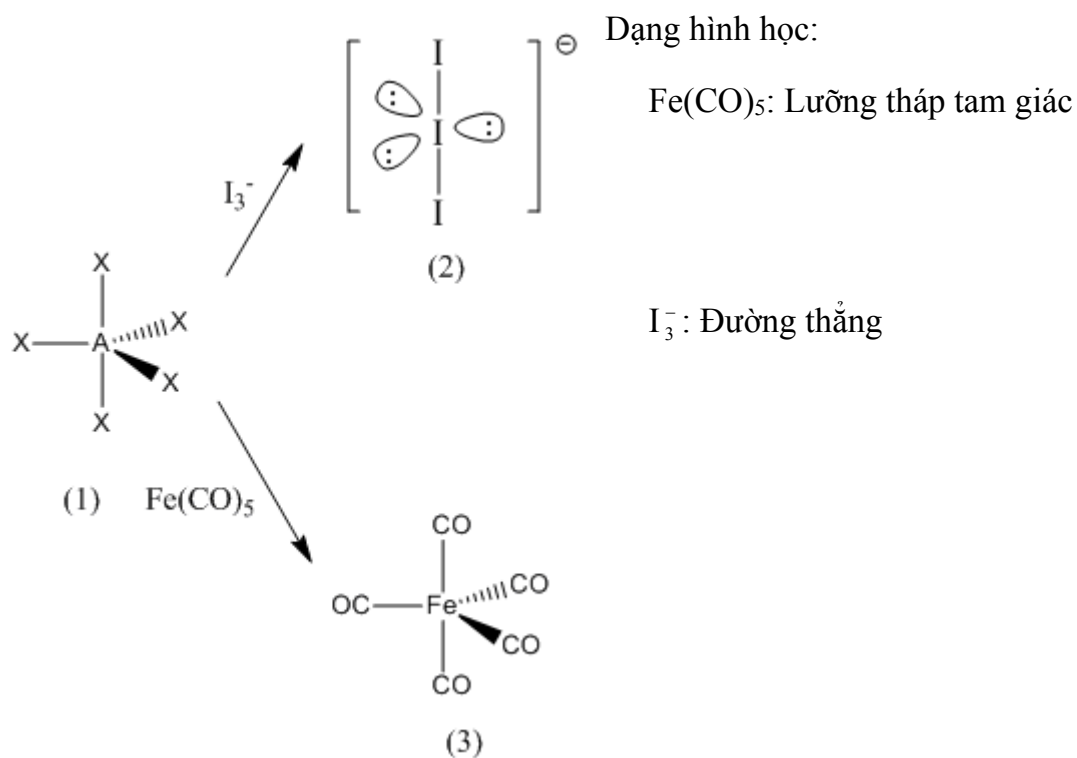
Bài 41: Giải thích và cho biết trạng thái lai hóa và dạng hình học của các phân tử $\text{Fe}(\text{CO})_5$ và I_3^-

Giải:

- Ở $\text{Fe}(\text{CO})_5$ xảy ra sự lai hóa tương tự như $[\text{Ni}(\text{CN})_4]^{2-}$ đã nói trên



- Ở I_3^- , I xảy ra lai hóa sp^3d tạo ra 5 orbital lai hóa và 2 orbital lai hóa liên kết với 2 orbital của 2 nguyên tử I khác



Bài 42:

So sánh và giải thích góc liên kết phân tử OF_2 và OCl_2 ; OCl_2 và SCl_2 .

Giải:

- Góc liên kết trong phân tử OF_2 và OCl_2 : Nguyên tử trung tâm là O ở trạng thái lai hoá sp^3 , phân tử dạng chữ V. Do liên kết O-F phân cực về phía F nên 2 đôi electron liên kết cách xa nhau còn liên kết O-Cl phân cực về phía O nên 2 đôi electron liên kết gần nhau do đó lực đẩy các đôi e này mạnh hơn làm góc liên kết trong phân tử OCl_2 lớn hơn góc liên kết trong phân tử OF_2 .

- Góc liên kết trong phân tử OCl_2 và SCl_2 : Nguyên tử trung tâm là O và S đều ở trạng thái lai hoá sp^3 , phân tử có dạng chữ V. Do liên kết O-Cl phân cực về phía O nên 2 đôi electron liên kết gần nhau còn liên kết S-Cl phân cực về phía Cl nên 2 đôi electron liên kết xa nhau do đó lực đẩy giữa các đôi e này yếu hơn làm cho góc liên kết trong phân tử SCl_2 bé hơn góc liên kết trong phân tử OCl_2 . (góc liên kết trong các phân tử OF_2 , OCl_2 và SCl_2 lần lượt là 105° , 111° , 103°).

Bài 43:

Cho nguyên tố X có bộ số lượng tử là:

$$n = 3, l = 1, m = 0, s = -1/2$$

có số oxi hoá dương cao nhất là a. Nguyên tố Y có dương cao nhất là b và số oxi hoá âm thấp nhất là c. Hợp chất Z được tạo bởi 2 nguyên tố X, Y với Y có số oxi hoá cao nhất. Xác định công thức phân tử Z, trạng thái lai hoá của nguyên tử trung tâm và cấu tạo hình học phân tử Z.

Cho biết: $|b| + |c| = 8$

$$|c| = 1,4 |b|$$

X, Y ở cùng 1 chu kỳ.

Giải:

Với 4 số lượng tử của X, X là Cl.

Cl thuộc ô 17, chu kỳ 3, nhóm VIIA.

Nên số oxi hoá dương cao nhất là của Cl là +7: $a = +7$

Mà: $|a| = 1,4 |b|$

$$\Rightarrow |b| = |a| / 1,4 = 7 / 1,4 = 5$$

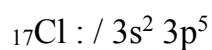
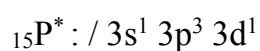
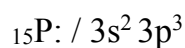
Số oxi hoá cao nhất của Y là : +5

$$\text{Theo đề } |b| + |c| = 8 \Rightarrow |c| = 3 \Rightarrow c = -3$$

Số oxi hoá âm thấp nhất của Y là: -3

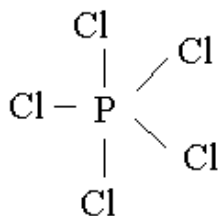
Mà X, Y ở cùng chu kỳ, X là Cl $\Rightarrow$ Y là P

Hợp chất Z của P, Cl với P có số oxi hoá dương cao nhất +5 nên Cl có số oxi hoá là -1, công thức phân tử Z là PCl_5 .



Sự hình thành liên kết :

Nguyên tử P dùng 5e độc thân ghép đôi với 5e độc thân của 5 nguyên tử Cl tạo thành 5 liên kết cộng hoá trị giữa P và Cl.



Lai hoá của nguyên tử trung tâm : sp^3d

Cấu tạo hình học : Lưỡng tháp tam giác

Một số câu hỏi trắc nghiệm ôn tập

Câu 01. Chọn phát biểu đúng nhất:

Liên kết cộng hoá trị là liên kết

- A. giữa các nguyên tử phi kim với nhau.
- B. được hình thành do sự dùng chung electron giữa hai nguyên tử khác nhau.
- C. được tạo nên giữa hai nguyên tử bằng một hay nhiều cặp electron dùng chung.
- D. trong đó cặp electron dùng chung bị lệch về phía một nguyên tử.

Câu 02. Chọn phát biểu đúng nhất:

Liên kết ion là liên kết

- A. được hình thành bởi lực hút tĩnh điện giữa cation kim loại và anion gốc axit.
- B. giữa nguyên tử kim loại với nguyên tử phi kim.
- C. được hình thành do nguyên tử phi kim nhận electron từ nguyên tử kim loại.
- D. được hình thành bởi lực hút tĩnh điện giữa các ion mang điện tích trái dấu.

Câu 03. Trong các hợp chất sau đây:

- A. H_2O
- B. NH_3
- C. KBr
- D. H_2S

Hợp chất nào là hợp chất ion?

Câu 04. Cho biết nguyên tử Clo có $Z=17$, cấu hình electron của ion Cl^- là:

- A. $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$
- B. $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$
- C. $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$
- D. $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1$

Câu 05. Cho biết nguyên tử Na, Mg, F lần lượt có số hiệu nguyên tử là 11, 12, 9. Các ion Na^+ , Mg^{2+} , F^- có đặc điểm chung là:

- A. Có cùng số proton.
- B. Có cùng neutron.
- C. Có cùng số electron.
- D. Không có đặc điểm gì chung.

Câu 06. Các phân tử sau đây đều có liên kết cộng hoá trị không phân cực:

- A. N_2 , Cl_2 , HCl , H_2 , F_2 .
- B. N_2 , Cl_2 , I_2 , H_2 , F_2 .
- C. N_2 , Cl_2 , CO_2 , H_2 , HF .
- D. NO_2 , Cl_2 , HI , H_2 , F_2 .

Câu 07. Một nguyên tử X có tổng số electron lớp ngoài cùng là 7. Công thức phân tử của hợp chất giữa nguyên tố này với hiđro là:

- A. H_2X
- B. XH_3
- C. XH_4
- D. HX

Câu 08. Chọn câu đúng nhất:

Độ âm điện của một nguyên tử đặc trưng cho

- A. khả năng nhường electron của nguyên tử đó khi hình thành liên kết hoá học.
- B. khả năng hút electron của nguyên tử đó khi hình thành liên kết hoá học.
- C. khả năng tham gia phản ứng mạnh hay yếu của nguyên tử đó.
- D. khả năng tạo thành liên kết hoá học.

Câu 09. Chọn câu sai trong các câu sau:

- A. Tinh thể iôt là tinh thể phân tử.
- B. Trong tinh thể phân tử, các phân tử liên kết với nhau bằng lực tương tác yếu giữa các phân tử.
- C. Lực liên kết giữa các phân tử trong tinh thể phân tử rất lớn.
- D. Nước đá thuộc loại tinh thể phân tử.

Câu 10. Chọn câu đúng nhất trong các câu sau:

- A. Liên kết cộng hoá trị không phân cực chỉ được tạo thành từ các nguyên tử giống nhau.
- B. Trong liên kết cộng hoá trị, cặp electron dùng chung bị lệch về phía nguyên tử có độ âm điện nhỏ hơn.
- C. Liên kết cộng hoá trị có cực được tạo thành giữa hai nguyên tử có hiệu độ âm điện lớn hơn 0,4.
- D. Liên kết cộng hoá trị trong đó cặp electron chung bị lệch về phía nguyên tử có độ âm điện lớn hơn được gọi là liên kết cộng hoá trị phân cực.

Câu 11. Anion X^{2-} có cấu hình electron giống R^+ (có cấu hình electron lớp vỏ ngoài cùng là $2p^6$) thì cấu hình electron của nguyên tử X là:

- A. $1s^2 2s^2 2p^2$
- B. $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$
- C. $1s^2 2s^2 2p^4$
- D. $1s^2 2s^2 2p^5$

Câu 12. Kết luận nào sau đây sai:

- A. Liên kết trong phân tử NH_3 , H_2O , H_2S là liên kết cộng hóa trị có cực.
- B. Liên kết trong phân tử BaF_2 và $CsCl$ là liên kết ion.
- C. Liên kết trong phân tử CaS và $AlCl_3$ là liên kết ion vì được hình thành giữa kim loại và phi kim.
- D. Liên kết trong phân tử Cl_2 , H_2 , O_2 , N_2 là liên kết cộng hóa trị không cực.

Câu 13. Cho các phân tử sau: $LiCl$, $NaCl$, KCl , $RbCl$, $CsCl$. Trong các phân tử trên, liên kết trong phân tử nào mang nhiều tính chất ion nhất.

- A. $CsCl$
- B. $LiCl$ và $NaCl$
- C. KCl
- D. $RbCl$

Câu 14. Nguyên tử X có cấu hình electron: $1s^2 2s^2 2p^5$ thì ion tạo ra từ nguyên tử X sẽ có cấu hình electron nào sau đây?

- A. $1s^2 2s^2 2p^4$
- B. $1s^2 2s^2 2p^6$
- C. $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 4p^6$
- D. $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$

Câu 15. Nguyên tử X có cấu hình electron: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2$ Chọn các cấu hình electron ứng với ion tạo ra từ nguyên tử X:

- A. $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2$
- B. $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$
- C. $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 4p^6$
- D. $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$

Câu 16. Chỉ ra các giá trị lớn nhất của số liên kết cộng hóa trị có thể được tạo thành bởi một nguyên tố có cấu hình electron lớp ngoài cùng là $3s^2 3p^4$?

- A. 2
- B. 3
- C. 4
- D. 6

Câu 17. Cation R^+ có cấu hình electron ở phân lớp ngoài cùng là $2p^6$. Liên kết của nguyên tố R với nguyên tố hiđrô thuộc loại liên kết nào sau đây:

A. Liên kết cộng hóa trị nhận

B. Liên kết cho

C. Liên kết ion.

D. Liên kết hidro.

Câu 18. Dãy nào trong dãy hợp chất dưới đây chứa các hợp chất có độ phân cực của liên kết tăng dần.

A. CO_2 , SiO_2 , ZnO , CaO

B. BaCl_2 , ZnSO_4 , CuCl_2 , Na_2O

C. FeCl_2 , CrCl_2 , NiCl , MnCl_2

D. NaBr , NaCl , KBr , LiF

Câu 19. Cho các chất sau: MgCl_2 , Na_2O , NCl_3 , HCl , KCl . Hợp chất nào sau có liên kết cộng hóa trị

A. MgCl và Na_2O

B. Na_2O và NCl_3

C. NCl_3 và HCl

D. HCl và KCl

Câu 20. Cho các phân tử sau: Cl_2O , NCl_3 , NO , H_2S , NH_3 . Trong các phân tử trên, phân tử có liên kết phân cực mạnh nhất là:

A. H_2S B. NO , NH_3 C. NH_3

D. NH_3 , Cl_2O

HÃY CHỌN PHƯƠNG ÁN ĐÚNG

Câu 21. Phân tử của một chất được đặc trưng bởi :

A- Khoảng cách trung bình giữa các phân tử

B- Giá trị trung bình của góc tạo bởi các liên kết

C- Độ bền của liên kết và độ bền của phân tử

D- Tất cả các yếu tố trên

Câu 22. Các liên kết trong phân tử Nitơ được tạo thành là do sự xen phủ của :

A- Các obitan S với nhau và các obitan P với nhau

B- 3 obitan P với nhau

C- 1 obitan S và 2 obitan P với nhau

D- 3 obitan P giống nhau về hình dạng kích thước nhưng khác nhau về định hướng không gian với nhau

Câu 23. Hình dạng phân tử CH_4 , BF_3 , H_2O , BeH_2 tương ứng là :

A- Tứ diện, tam giác, gấp khúc, thẳng

B- Tam giác, tứ diện, gấp khúc, thẳng

C- Gấp khúc, tam giác, tứ diện, thẳng

D- Thẳng, tam giác, tứ diện, gấp khúc

Câu 24. Phân tử H_2O có góc liên kết bằng $104,5^\circ$ do nguyên tử Oxi ở trạng thái lai hoá :

A- SP ; B- SP^2 ; C- SP^3 ; D- không xác định

Câu 25. Trong các hợp chất sau : $NaCl$, KF , CH_4 , LiF . Hợp chất nào có liên kết cộng hoá trị

a/ $NaCl$; b/ KF ; c/ CH_4 ; d/ LiF

Câu 26. Trong mạng tinh thể kim cương , góc liên kết tạo bởi các nguyên tử C bằng
A/ 120° ; B/ 90° ; C/ $104,5^\circ$; D/ $109^\circ 28'$

Câu 27. Nguyên tử Phốt pho trong PH_3 ở trạng thái lai hoá

a/ SP , b/ SP^2 , c/ SP^3 , d/ không xác định được

Câu 28. Cho tinh thể các chất sau :

Iôt , than chì , nước đá và muối ăn

Tinh thể nguyên tử là tinh thể

a/Iôt b/ than chì c/ nước đá d/ muối ăn

Câu 29. Cho tinh thể các chất sau :

Lưu huỳnh , than chì , nước đá , muối ăn

Tinh thể Ion là tinh thể

a/ Lưu huỳnh b/ than chì c/ nước đá d/ muối ăn

Câu 30. Yếu tố quyết định tính chất cơ bản của tinh thể kim loại là :

a/ Sự tồn tại mạng tinh thể kim loại

b/ Tính ánh kim

c/ Tính dẫn điện và dẫn điện tốt

d/ Sự chuyển động tự do của các e chung trong toàn mạng tinh thể

Câu 31. Liên kết ion là liên kết hóa học được tạo thành:

a. giữa các nguyên tử.

b. do sự góp chung electron.

c. do lực hút tĩnh điện giữa các phân tử mang điện trái dấu.

d. do lực hút tĩnh điện giữa các ion mang điện tích trái dấu.

Câu 32. Cho các hợp chất: HCl , $NaCl$, CaO , H_2O , NH_3 . Các hợp chất có liên kết ion là:

a. HCl , $NaCl$. b. $NaCl$, CaO . c. CaO , H_2O . d. H_2O , NH_3 .

Câu 33. Có các tinh thể: iôt, nước đá, than chì, muối ăn. Tinh thể nguyên thủy là tinh thể:

a. iôt. b. nước đá. c. than chì. d. muối ăn.

Câu 34. Cho F(Z=9), Ne(Z=10), Mg(Z=12). Các ion và nguyên tử F^- , Mg^{2+} , Ne có cùng:

- a. số proton. b. số khối. c. số electron. d. số notron.

Câu 35. Ion X^{2+} có cấu hình e: $1s^2 2s^2 2p^6$, vị trí của X trong bảng tuần hoàn là:

- a. chu kỳ 2, nhóm VIIIA. b. chu kỳ 2, nhóm IIA.
c. chu kỳ 3, nhóm VIIIA. d. chu kỳ 3, nhóm IIA.

Câu 36. Cho A(Z=11), B(Z=17). Công thức hợp chất và liên kết hóa học được hình thành trong hợp chất giữa A và B là:

- a. A_2B với liên kết ion. b. A_2B với liên kết cộng hóa trị.
c. AB với liên kết ion. d. AB với liên kết cộng hóa trị.

Câu 37. Cho N(Z=7), O(Z=8). Số electron có trong ion NO_3^- là:

- a. 29. b. 30. c. 31. d. 32.

Câu 38. Số oxy hóa của Clo trong hợp chất $KClO_3$ là:

- a. +1. b. +3. c. -1. d. +5.

Câu 39. Anion X^- có tổng số các hạt bằng 53, số hạt mang điện chiếm 66,04%. Cấu hình e của X^- là:

- a. $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$. b. $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$.
c. $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$. d. $1s^2 2s^2 2p^6$.

Câu 40. Tổng số e trong ion AB_3^{2-} là 32. Tổng số proton trong phân tử AB_2 là 22. phân tử AB_2 có liên kết:

- a. ion. b. cộng hóa trị. c. phối trí. d. cộng hóa trị, phối trí.

Các tài liệu tham khảo:

- Sách giáo khoa hóa học 10 nâng cao
- Tài liệu giáo khoa chuyên hóa học (Tập 1) – Đào Hữu Vinh, Nguyễn Duy Ái
- Một số vấn đề chọn lọc của hóa học (Tập 1) – Nguyễn Duy Ái, Nguyễn Tinh Dung, Trần Thành Huế, Trần Quốc Sơn, Nguyễn Văn Tòng
- Bài tập hóa học đại cương
- Hóa học cơ bản và nâng cao 10
- Tuyển tập 10 năm olympic 30 tháng 4 Hóa học 10
- Giải toán hóa học 10 – Ngô Ngọc An, Phạm Thị Minh Nguyệt
- Tuyển tập đề thi olympic 30-4 môn Hóa học lớp 10 lần thứ VI
- Hóa học vô cơ (Tập 1) – Hoàng Nhâm
- Hóa học các nguyên tố (Tập 2) – Hoàng Nhâm
- Câu hỏi lý thuyết và bài tập hóa học 10
- Mạng internet (www.tailieu.vn, www.wikipedia.org, www.dethi.violet.vn, ...)
- Cùng một số tư liệu và hình ảnh khác

Mục lục

Lời nói đầu	2
A. Khái quát về liên kết hóa học.....	3
B. Các dạng liên kết hóa học chủ yếu	4
I. Liên kết ion	4
II. Liên kết cộng hóa trị	7
III. Liên kết kim loại	13
IV. Các mối liên kết yếu	14
C. Các lí thuyết về liên kết.....	15
I. Thuyết VB	15
II. Sự lai hóa	17
III. Mô hình VSEPR.....	23
IV. Mô hình liên kết bị uốn cong	25
V. Thuyết MO.....	26
D. Các tính thể.....	35
I. Tính thể nguyên tử.....	35
II. Tính thể phân tử	36
III. Tính thể ion	37
IV. Tính thể kim loại	38
E. Bài tập vận dụng.....	39
Các tư liệu tham khảo	84
Mục lục.....	85