

# CẤU TẠO PHÂN TỬ VÀ LIÊN KẾT HÓA HỌC

Ban chuyên môn Hóa học – The Gifted Battlefield

Vũ Minh Khang – Trần Kiên

Xuất bản vào Ngày 21 tháng 3 năm 2024

## Mục lục

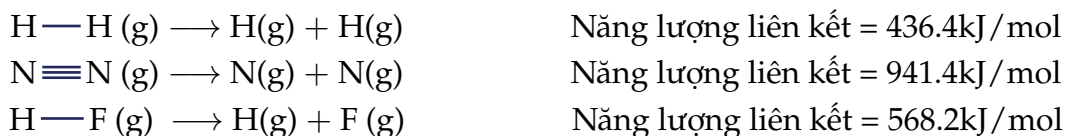
<b>1</b>	<b>Đặc trưng của liên kết hóa học</b>	<b>3</b>
1.1	Năng lượng liên kết . . . . .	3
1.2	Hóa trị của nguyên tố . . . . .	3
1.3	Từ tính . . . . .	3
<b>2</b>	<b>Các loại liên kết hóa học</b>	<b>4</b>
2.1	Liên kết ion . . . . .	4
	Sự hình thành liên kết ion . . . . .	4
	Điều kiện hình thành liên kết ion . . . . .	4
	Các tính chất của liên kết ion . . . . .	5
	Hợp chất ion . . . . .	5
2.2	Liên kết cộng hóa trị . . . . .	6
	Sự hình thành liên kết cộng hóa trị . . . . .	6
	Moment lưỡng cực của liên kết . . . . .	7
2.3	Sự không phân định ranh giới giữa các loại liên kết . . . . .	7
	Tác dụng phân cực của cation . . . . .	7
	Sự bị phân cực của anion . . . . .	7
	Sự không phân định ranh giới . . . . .	8
<b>3</b>	<b>Công thức Lewis</b>	<b>8</b>
3.1	Cách biểu diễn công thức lewis . . . . .	8
3.2	Cấu trúc cộng hưởng . . . . .	9
	Cấu trúc cộng hưởng tương đương . . . . .	9
	Điện tích hình thức . . . . .	9
	Các dạng cộng hưởng không tương đương . . . . .	10
3.3	Các trường hợp không thỏa bát tử . . . . .	10
	Thiếu electron hóa trị . . . . .	11
	Lẻ electron hóa trị . . . . .	11
	Quá bát tử . . . . .	12

<b>4</b>	<b>Thuyết VSEPR (Valence shell electron pair repulsion)</b>	<b>12</b>
<b>5</b>	<b>Sự lai hóa</b>	<b>13</b>
5.1	Định nghĩa . . . . .	13
5.2	Các kiểu lai hóa . . . . .	14
<b>6</b>	<b>Thuyết VB</b>	<b>17</b>
6.1	Sơ lược về sự hình thành liên kết . . . . .	17
6.2	Thuyết VB . . . . .	18
<b>7</b>	<b>Thuyết MO (Molecular Orbital)</b>	<b>19</b>
7.1	Đặt vấn đề . . . . .	19
7.2	Thuyết MO . . . . .	19
	Giản đồ MO của các hợp chất nhị nguyên tử giống nhau thuộc chu kì 2 . . . . .	20
	Giản đồ MO của các hợp chất nhị nguyên tử khác nhau thuộc chu kì 2 . . . . .	20
7.3	Liên kết trong kim loại . . . . .	21
<b>8</b>	<b>Bài tập vận dụng</b>	<b>23</b>

# 1 Đặc trưng của liên kết hóa học

## 1.1 Năng lượng liên kết

Năng lượng liên kết giữa hai nguyên tử là năng lượng cần để phá vỡ toàn bộ liên kết giữa hai nguyên tử đó. VD:



Năng lượng liên kết được quyết định bởi:

- Bậc của liên kết: Bậc liên kết càng cao, năng lượng liên kết càng lớn.
- Độ dài của liên kết: Liên kết càng ngắn, năng lượng liên kết càng lớn.

**Lưu ý:** Đây chỉ là những quy tắc chung. Ngoài ra vẫn còn nhiều ngoại lệ.

## 1.2 Hóa trị của nguyên tố

Hóa trị của nguyên tử là đại lượng đặc trưng cho số lượng liên kết mà nguyên tử tạo ra. Trong hợp chất ion, hóa trị của nguyên tử bằng với điện tích của ion đó. Trong hợp chất cộng hóa trị, hóa trị của nguyên tử bằng tổng số liên kết của nguyên tử đó.

## 1.3 Từ tính

Trong các chuyên đề trước, một nguyên tử sẽ thể hiện từ tính của thông qua việc các cặp electron đã ghép đôi hay chưa:

- Nếu như **tất cả** các electron trong các orbital của nguyên tử đều đã ghép đôi thì nguyên tử ấy có tính **nghịch từ** (không bị nam châm hút).
- Nếu như vẫn còn electron chưa ghép đôi thì nguyên tử ấy có tính **thuận từ** (bị nam châm hút).

Tương tự như nguyên tử, phân tử cũng thể hiện từ tính của mình thông qua việc ghép đôi electron và được dự đoán chính xác nhất bằng thuyết Molecular Orbital (Vận đạo phân tử):

- Nếu như **tất cả** các electron trong các orbital của phân tử đều đã ghép đôi thì phân tử ấy có tính **nghịch từ**.
- Nếu như vẫn còn electron chưa ghép đôi thì phân tử ấy có tính **thuận từ**.

Một ví dụ rất phổ biến cho vấn đề này là Oxygen lỏng và Nitrogen lỏng. Nếu ta viết ra được cấu hình MO của hai chất, ta sẽ thấy rằng Oxygen vẫn còn 2 electron chưa ghép đôi, do đó nó có tính thuận từ. Ngược lại Nitrogen không còn electron độc thân, do đó nó thể hiện tính nghịch từ. Vì vậy Oxygen lỏng bị nam châm hút còn Nitrogen lỏng thì không.



Hình 1. Oxygen lỏng có màu xanh đang bị hút và giữ cố định bởi 2 nam châm.

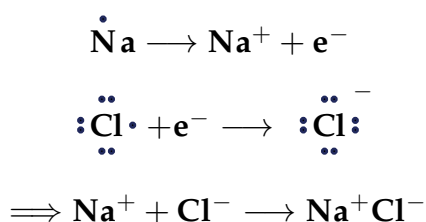
## 2 Các loại liên kết hóa học

### 2.1 Liên kết ion

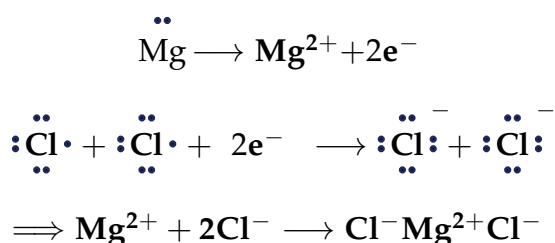
#### ■ Sự hình thành liên kết ion

Như đã nói ở các chuyên đề trước, kim loại ở nhóm 1 & 2 rất dễ cho electron tạo thành ion dương gọi là cation. Tương tự, các nguyên tố ở nhóm 6 & 7 cũng có xu hướng nhận e để tạo thành ion âm gọi là anion. Khi các cation và anion tiếp xúc với nhau, chúng sẽ tạo thành liên kết ion do lực hút tĩnh điện giữa các ion mang điện tích trái dấu.

Ví dụ: Sự hình thành liên kết trong NaCl



Sự hình thành liên kết trong  $\text{MgCl}_2$



#### ■ Điều kiện hình thành liên kết ion

Khi chênh lệch độ âm điện giữa hai nguyên tố A và B  $\geq 2.2$  thì tính ion  $\geq 70\%$  và có thể xem như liên kết có bản chất ion (Điều kiện này chỉ mang tính chất tương đối).

Hợp chất	Năng lượng liên kết	Nhiệt độ nóng chảy (°C)
LiF	1017	845
LiCl	860	610
LiBr	787	550
LiI	732	450
NaCl	787	801
NaBr	736	750
NaI	686	662
KCl	699	772
KBr	689	735
KI	632	680
MgO	3890	2800
ScN	7547	>3000

Bảng 1. Năng lượng liên kết của 1 số hợp chất ion

## ■ Các tính chất của liên kết ion

- Do bản chất của lực liên kết ion là sự tương tác tĩnh điện của hai ion nên liên kết ion có hai tính chất chính là **bất định hướng** và **bất bão hòa**.
- Tính bất định hướng khiến cho một ion hút các ion ngược dấu theo mọi phương là như nhau nên các ion có thể liên kết với các ion trái dấu theo bất kì phương nào
- Tính bất bão hòa khiến cho một ion có xu hướng hút tối đa các ion trái dấu. Tuy nhiên hiệu ứng lập thể giới hạn lượng ion trái dấu có thể bao quanh ion đó.
- Độ bền của liên kết ion càng cao khi các cation và anion có:
  - Điện tích của các ion càng lớn
  - Bán kính của các ion càng nhỏ

Trong các hợp chất ion, **hóa trị** của ion là điện tích của ion đó

## ■ Hợp chất ion

Trong tự nhiên, các hợp chất ion không tồn tại đơn lẻ ở dạng phân tử mà chúng tồn tại dưới dạng rắn kết tinh tạo thành các mạng tinh thể. Các mạng tinh thể này gồm hàng tỷ tỷ các cation và anion sắp xếp trật tự với nhau tạo thành cấu trúc 3D. Ta sẽ đi sâu hơn về sự hình thành của mạng tinh thể ở những chuyên đề tiếp theo.

**Đặc trưng của hợp chất ion:** Các hợp chất ion có độ bền lớn và nhiệt độ nóng chảy cực kì cao. Lực hút tĩnh điện giữa các ion trái dấu càng mạnh thì độ bền càng lớn dẫn đến nhiệt độ nóng chảy càng cao. Ở dạng nóng chảy, hợp chất ion còn có khả năng dẫn điện rất tốt và được ứng dụng nhiều trong thực tế.

## 2.2 Liên kết cộng hóa trị

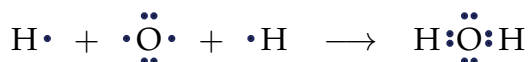
### ■ Sự hình thành liên kết cộng hóa trị

Liên kết cộng hóa trị thường được hình thành giữa hai nguyên tố không có sự chênh lệch quá lớn về độ âm điện. Trong loại liên kết này, các nguyên tử tạo liên kết với nhau bằng cách chia sẻ các cặp electron hóa trị với nhau để đạt được cấu hình của khí hiếm (8 electron ở lớp hóa trị, hay còn gọi là bát tử (đây chỉ là 1 quy luật phổ biến, không bao gồm nhiều trường hợp ngoại lệ)). **Nguyên tắc chung để hình thành liên kết cộng hóa trị:**

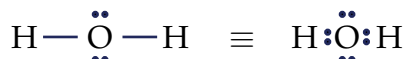
- Các nguyên tử góp chung e để đạt cấu hình bền của khí hiếm
- Nguyên tử thiếu bao nhiêu e thì sẽ góp chung bấy nhiêu e
- Đôi e góp chung thuộc về cả 2 nguyên tử.

Ví dụ: Giải thích sự tạo thành liên kết trong  $\text{H}_2\text{O}$ .

Hydro có cấu hình  $1s^1$  và Oxy có cấu hình  $1s^2 2s^2 2p^4$ . Hydro cần thêm 1 electron để đạt cấu hình của Heli ( $1s^2$ ), Oxy cần thêm 2 electron để đạt bát tử (cấu hình của Neon,  $1s^2 2s^2 2p^6$ ). Do đó 1 nguyên tử Oxy sẽ liên kết với 2 nguyên tử Hydro để thỏa mãn cấu hình khí hiếm của các nguyên tử.



Để cho thuận tiện thì ta cũng có thể biểu diễn một cặp electron góp chung bằng một nét gạch.



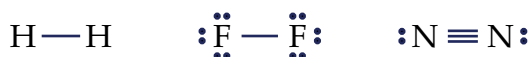
**Bậc liên kết** là số cặp e góp chung giữa 2 nguyên tử

- Bậc 1: liên kết đơn  $\text{H}-\text{H}$
- Bậc 2: liên kết đôi  $\ddot{\text{O}}=\ddot{\text{O}}$
- Bậc 3: liên kết ba  $:\text{N}\equiv\text{N}:$

Bậc liên kết càng cao, liên kết càng ngắn và liên kết càng bền. (**Lưu ý:** Đây chỉ là quy tắc chung, vẫn còn nhiều trường hợp ngoại lệ khác).

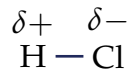
⇒ Các phân tử có bậc liên kết cao thường rất kém hoạt động do rất khó để phá vỡ liên kết. Điều này giải thích vì sao  $\text{N}_2$  rất kém hoạt động hóa học.

**Liên kết cộng hóa trị không có cực:** Thường là đặc trưng của các liên kết trong đơn chất, các cặp electron dùng chung không lệch về phía nào. Các hợp chất không phân cực này thường có nhiệt độ sôi và nhiệt độ nóng chảy vô cùng thấp. Do đó các hợp chất không phân cực thường tồn tại ở dạng khí ở nhiệt độ thường. VD:



Trong các trường hợp mà chênh lệch độ âm điện quá nhỏ (thường là  $\Delta\chi \leq 0.5$ ) cũng có thể coi là liên kết không phân cực (VD: liên kết C-H trong các hợp chất hữu cơ)

**Liên kết cộng hóa trị có cực:** Là đặc trưng của các liên kết trong hợp chất. Cặp e góp chung bị lệch về phía nguyên tử có độ âm điện lớn hơn. Chênh lệch độ âm điện càng lớn thì độ phân cực càng lớn. Điều này làm tăng mật độ điện tích trên nguyên tử có độ âm điện lớn hơn và giảm mật độ điện tích trên nguyên tử có độ âm điện thấp hơn. Nguyên tử có mật độ điện tích cao hơn được kí hiệu bằng  $\delta^-$  và mật độ điện tích thấp hơn là  $\delta^+$ . Ví dụ như phân tử  $\text{HCl}$ :



Các hợp chất cộng hóa trị này tùy thuộc vào mức độ phân cực mà có thể tồn tại ở dạng rắn, lỏng hoặc khí ở nhiệt độ thường.

## ■ Moment lưỡng cực của liên kết

Moment lưỡng cực là một đại lượng vector dùng để đo độ phân cực của liên kết cộng hóa trị và được kí hiệu là  $\vec{\mu}$ . Liên kết càng phân cực thì giá trị của  $\vec{\mu}$  càng lớn. Vì moment lưỡng cực là các đại lượng vector nên moment lưỡng cực của một phân tử là tổng các vector thành phần. Điều này làm cho một số phân tử mặc dù có liên kết phân cực nhưng cả phân tử lại không hề phân cực.

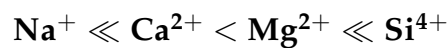
Ví dụ như phân tử  $\text{SO}_3$ . Phân tử  $\text{SO}_3$  có dạng tam giác đều với các nguyên tử Oxy là đỉnh của tam giác và nguyên tử lưu huỳnh nằm ở trọng tâm tam giác. Mặc dù các liên kết S-O là liên kết phân cực nhưng khi ta cộng moment lưỡng cực của cả ba liên kết lại thì kết quả là moment tổng sẽ bằng 0. Do đó, trên thực tế  $\text{SO}_3$  lại là một phân tử không phân cực.

## 2.3 Sự không phân định ranh giới giữa các loại liên kết

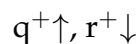
### ■ Tác dụng phân cực của cation

Cation vì mang điện tích dương nên có xu hướng kéo đám mây electron mang điện tích âm về phía mình. Tác dụng phân cực của cation (polarizing power) là khả năng kéo đám mây electron của anion về phía mình.

**Tác dụng phân cực của cation càng mạnh** khi điện tích của cation càng lớn và bán kính càng nhỏ.



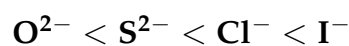
—————> Tác dụng phân cực tăng



→ Tác dụng phân cực càng mạnh, đám mây electron càng bị kéo về phía cation, tính ion của liên kết giảm, tính cộng hóa trị tăng.

### ■ Sự bị phân cực của anion

Các anion mang điện tích âm bị các cation kéo đám mây điện tử khiến cho mật độ điện tích trên anion giảm. Ngược lại với cation, **anion bị phân cực càng mạnh** khi điện tích trên anion càng bé và bán kính của anion càng lớn.



—————> Anion càng bị phân cực



→ Anion càng bị phân cực, đám mây càng bị kéo xa khỏi anion, tính ion của liên kết giảm, tính cộng hóa trị tăng.

Ion → Ion–Cộng hóa trị → Cộng hóa trị có cực → Cộng hóa trị không phân cực

Tác dụng phân cực tăng | Tác dụng bị phân cực tăng

## ■ Sự không phân định ranh giới

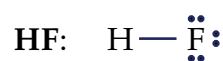
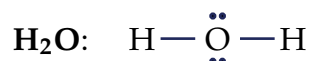
Như đã trình bày ở trên, tác dụng phân cực của cation và sự bị phân cực của anion sẽ ảnh hưởng tới mức độ ion hay cộng hóa trị của liên kết. Do đó, không có sự phân định rõ ràng về ranh giới giữa liên kết ion và liên kết cộng hóa trị. Vì vậy ta chỉ có thể phân ra làm 4 mức với là:

Ion → Ion–Cộng hóa trị → Cộng hóa trị có cực → Cộng hóa trị không có cực

Vì sự không phân định ranh giới này nên khi so sánh hoặc giải thích tính chất của các hợp chất, cần phải áp dụng đúng lý thuyết của các loại liên kết để giải thích.

## 3 Công thức Lewis

Công thức Lewis (hay Cấu trúc Lewis) là một cách đơn giản để biểu diễn các liên kết trong hợp chất cộng hóa trị. Mỗi cặp electron liên kết được biểu diễn bằng một các nét gạch, các electron không liên kết được thể hiện bằng những dấu chấm (chỉ thể hiện các electron hóa trị). VD:



### 3.1 Cách biểu diễn công thức lewis

1. Đếm tổng số electron hóa trị của các nguyên tử, nếu công thức cần biểu diễn có mang điện tích ( $\text{SO}_4^{2-}$ ,  $\text{NO}_2^+$ , ...) thì cộng thêm  $n^-$  electron hoặc trừ đi  $n^+$  electron.
2. Từ công thức hóa học, vẽ khung của hợp chất. Nối các nguyên tử bằng 1 gạch nối (1 liên kết đơn sử dụng 2 electron).
3. Điền các electron vào các nguyên tử từ ngoài vào trong sao cho mỗi nguyên tử đủ bát tử (**Lưu ý: Mỗi liên kết giữa 2 nguyên tử được tính là 2 electron cho cả 2 nguyên tử**). Nếu như có nhiều nguyên tử xung quanh thì ưu tiên hoàn thành bát tử cho nguyên tử có độ âm điện lớn hơn trước. (**Lưu ý: Các trường mà nguyên tử không thể thỏa bát tử hoặc có số electron quá bát tử sẽ được trình bày ở phần kế tiếp**).
4. Điền tất cả các electron còn dư vào nguyên tử trung tâm.
5. Nếu như nguyên tử trung tâm vẫn chưa đủ bát tử thì sử dụng các cặp electron chưa liên kết ở nguyên tử xung quanh để tạo thành liên kết với nguyên tử trung tâm. Nếu có nhiều nguyên tử xung quanh thì ưu tiên nguyên tử có độ âm điện nhỏ hơn.

VD: Vẽ công thức lewis của  $\text{H}_2\text{O}$

- **Bước 1:**  $\text{H}_2\text{O}$  được tạo thành từ 2 nguyên tử H và 1 nguyên tử O. Mỗi H có 1 electron hóa trị, và O có 6 electron hóa trị

$$\implies \text{Tổng số electron} = 1 \times 2 + 6 = 8$$



- **Bước 2:** Vẽ khung hợp chất



Ta đã vẽ 2 liên kết đơn. Do đó tổng số electron hóa trị còn lại là:  $8 - 2 \times 2 = 4$

- **Bước 3:** 2 nguyên tử H xung quanh đã đạt cấu hình của khí trơ (2 electron) do đó không cần phải điền thêm electron vào H.
- **Bước 4:** Điền tất cả các electron hóa trị còn lại vào nguyên tử oxy trung tâm.

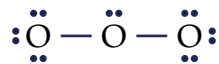


Kiểm tra lại thấy Oxy đã đủ bát tử. Vậy là ta đã hoàn thành công thức Lewis của  $\text{H}_2\text{O}$ .

## 3.2 Cấu trúc cộng hưởng

### ■ Cấu trúc cộng hưởng tương đương

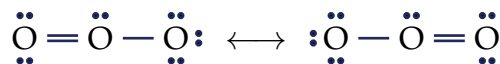
Đối với một số hợp chất, khi ta vẽ công thức Lewis sẽ có nhiều cách để thỏa mãn bát tử tương đương nhau. Ví dụ trường hợp của  $\text{O}_3$ . Sau khi đã điền đủ bát tử cho 2 Oxy ở ngoài và điền tất cả các electron còn lại vào Oxy trung tâm thì ta thấy rằng Oxy vẫn còn thiếu 2 electron để đủ bát tử.



Để thỏa mãn bát tử của Oxy trung tâm, ta có thể sử dụng 1 cặp electron trên 1 trong 2 Oxy xung quanh.



Theo cấu trúc Lewis thì  $\text{O}_3$  sẽ có 1 liên kết đôi, 1 liên kết đơn và liên kết đôi sẽ có độ dài ngắn hơn liên kết đơn. Tuy nhiên, trong thực tế khi đo đạc thì cả 2 liên kết trong phân tử  $\text{O}_3$  lại có chiều dài bằng nhau (128pm). Điều này cho thấy  $\text{O}_3$  tồn tại ở dạng trộn lẫn giữa cả 2 công thức. Vì vậy, công thức Lewis thường được biểu diễn bằng tất cả các dạng cộng hưởng tương đương và được phân cách với nhau bằng dấu  $\longleftrightarrow$ .



### ■ Điện tích hình thức

Điện tích hình thức trên nguyên tử đại diện cho sự chênh lệch giữa số electron thuộc về nguyên tử đó trong hợp chất so với electron hóa trị ban đầu của nguyên tử. Có 2 điều cần lưu ý khi tính điện tích hình thức như sau:

- Tất cả các electron không liên kết trên nguyên tử thì thuộc hoàn toàn về nguyên tử đó
- Đối với các electron đang tham gia liên kết thì chỉ có một nửa là thuộc về nguyên tử đó.

Vậy điện tích hình thức được tính như sau:

$$\text{Điện tích hình thức} = \text{Số electron hóa trị} - \text{Số electron không liên kết} - \frac{\text{Số electron liên kết}}{2}$$

VD: Tính điện tích hình thức trên các nguyên tử của  $\text{H}_2\text{O}$



- Nguyên tử H có 1 electron hóa trị và có 2 electron liên kết  
 $\implies$  Điện tích hình thức =  $1 - \frac{2}{2} = 0$
- Nguyên tử Oxy có 6 electron hóa trị, 4 electron không liên kết và 4 electron liên kết  
 $\implies$  Điện tích hình thức =  $6 - 4 - \frac{4}{2} = 0$

Vậy cả 3 nguyên tử trong  $\text{H}_2\text{O}$  đều có điện tích hình thức là 0

Tính điện tích hình thức của  $\text{O}_3$

- Đầu tiên ta vẽ công thức Lewis của  $\text{O}_3$ . Vì 2 công thức của Lewis  $\text{O}_3$  tương đương nhau thì ta có thể sử dụng 1 trong 2 công thức để tính:  $\text{:}\ddot{\text{O}} - \ddot{\text{O}} = \ddot{\text{O}}\text{:}$
- Đối với Oxy bên trái: ĐTHT =  $6 - 6 - \frac{2}{2} = -1$
- Đối với Oxy bên phải: ĐTHT =  $6 - 4 - \frac{4}{2} = 0$
- Đối với Oxy trung tâm: ĐTHT =  $6 - 2 - \frac{6}{2} = +1$

Đối với một phân tử thì tổng điện tích hình thức trên các nguyên tử phải bằng 0, đối với ion thì tổng điện tích hình thức bằng điện tích của ion đó.

**Lưu ý:** Điện tích hình thức chỉ mang tính chất **HÌNH THỨC** và không có ý nghĩa thực tiễn.

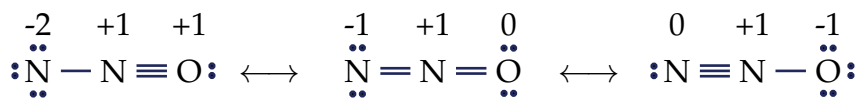
## ■ Các dạng cộng hưởng không tương đương

Trong một số trường hợp, có nhiều cách để thỏa mãn bát tử của nguyên tử trung tâm nhưng các cách này lại không tương đương nhau (gọi là các dạng cộng hưởng **không** tương đương). Do đó ta cần sử dụng điện tích hình thức để chọn ra dạng cộng hưởng phù hợp nhất. **Quy tắc chọn dạng cộng hưởng phù hợp nhất như sau:**

- Giá trị của các điện tích là nhỏ nhất
- Không có điện tích cùng dấu trên 2 nguyên tử kế cận
- Điện tích âm nằm trên nguyên tử có độ âm điện lớn hơn.

VD: Hãy vẽ các công thức Lewis của  $\text{N}_2\text{O}$  và chọn ra dạng cộng hưởng phù hợp nhất.

Ta có thể vẽ được 3 dạng cộng hưởng của  $\text{N}_2\text{O}$  như sau:



Ta có thể tính được điện tích hình thức trên các nguyên tử (như hình trên). Dựa vào các quy tắc nói trên, ta có thể chọn được công thức Lewis phù hợp nhất là công thức **bên phải**. Trong thực tế thì  $\text{N}_2\text{O}$  sẽ không tồn tại ở bất kì dạng cộng hưởng nào trong cả 3 công thức trên. Mà thay vào đó  $\text{N}_2\text{O}$  sẽ tồn tại ở dạng trộn lẫn của cả 3 công thức với sự đóng góp lớn nhất đến từ công thức **phù hợp nhất**.

## 3.3 Các trường hợp không thỏa bát tử

Có thể phân các trường hợp ngoại lệ thành 3 trường hợp sau:

- Nguyên tử trung tâm không đủ bát tử do thiếu electron hóa trị.
- Nguyên tử trung tâm không đủ bát tử do số electron hóa trị bị lẻ.
- Nguyên tử trung tâm quá bát tử.

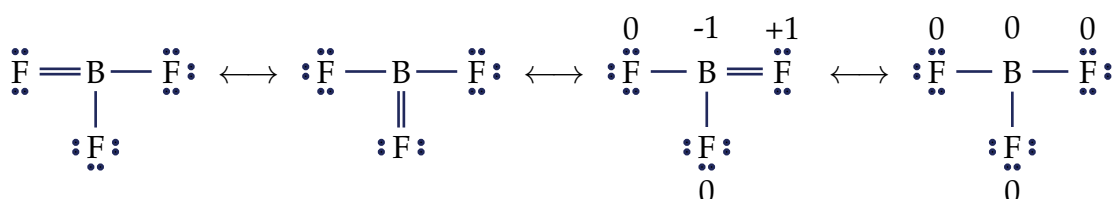
## ■ Thiếu electron hóa trị

Trong một số công thức Lewis, nguyên tử trung tâm sẽ không đủ bát tử. Ví dụ điển hình cho trường hợp này là  $\text{BeH}_2$ . Be thuộc nhóm IIA nên sẽ có cấu hình  $[\text{He}]2s^2$  tức là Be sẽ có 2 electron hóa trị, cộng thêm 2 electron từ 2 Hydro thì tổng số electron hóa trị trong  $\text{BeH}_2$  sẽ là 4. Nếu ta thử vẽ công thức Lewis thì ta sẽ được công thức sau:



Lúc này ta nhận thấy rằng nguyên tử Be vẫn chưa đủ bát tử nhưng 2 nguyên tử H xung quanh không còn cặp electron dư. Do đó, ta chấp nhận công thức trên là đúng.

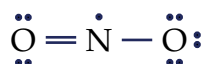
Một trường hợp tiêu biểu khác là phân tử  $\text{BF}_3$ . Nếu ta vẽ công thức của  $\text{BF}_3$  thì ta có thể vẽ được 3 dạng cộng hưởng tương đương và 1 dạng cộng hưởng không tương đương. (Điện tích hình thức của 2 dạng cộng hưởng ngoài cùng bên trái tương tự với dạng cộng hưởng thứ 3 từ trái sang).



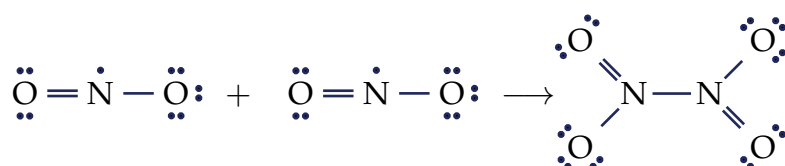
Dễ dàng nhận thấy rằng 3 dạng cộng hưởng tương đương sẽ làm thỏa mãn bát tử của nguyên tử B. Tuy nhiên nếu xét về mặt điện tích hình thức thì trong 3 dạng cộng hưởng sẽ có 1 nguyên tử F mang điện tích +1 và B mang điện tích -1. Ngược lại, trong dạng cộng hưởng không tương đương, cả 4 nguyên tử đều mang điện tích là 0 (ưu tiên) nhưng nguyên tử B lại không thỏa bát tử. Bởi vì nguyên tử Flo có độ âm điện lớn nhất nên trong các công thức Lewis, Flo thường sẽ được ưu tiên để mang điện tích nhỏ nhất có thể, do đó người ta thường biểu diễn  $\text{BF}_3$  ở dạng cộng hưởng không tương đương. Trên thực tế  $\text{BF}_3$  tồn tại ở dạng trộn lẫn của cả 4 dạng cộng hưởng, do đó liên kết B-F có năng lượng cao hơn và độ dài ngắn hơn so với liên kết đơn thông thường.

## ■ Lẻ electron hóa trị

Trong một số trường hợp, tổng số electron hóa trị của phân tử là số lẻ, điều này dẫn đến việc nguyên tử trung tâm không đủ bát tử. Ví dụ như phân tử  $\text{NO}_2$ , tổng số electron hóa trị trong  $\text{NO}_2$  bằng 17 electron. Vậy ta có thể vẽ công thức Lewis của  $\text{NO}_2$  như sau:

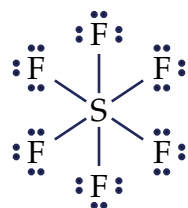


Sau khi ta hoàn tất bát tử cho 2 nguyên tử Oxy, ta chỉ còn dư 1 electron hóa trị. Ta điền electron hóa trị này vào nguyên tử N và sử dụng 1 cặp electron chưa liên kết để tạo liên kết với N thì N sẽ chỉ có 7 electron xung quanh. Bởi vì còn lẻ 1 electron nên  $\text{NO}_2$  sẽ có xu hướng dimer hóa bằng cách tạo liên kết N-N.

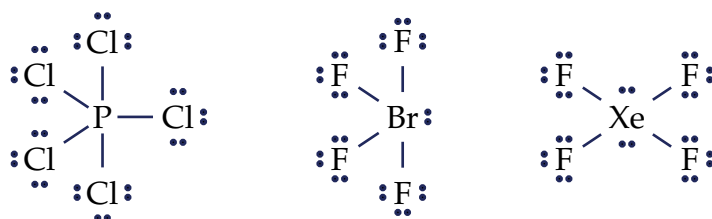


## ■ Quá bát tử

Các nguyên tố có orbital d trống (hoặc f trong 1 số trường hợp) có thể nhận cặp electron từ các nguyên tử xung quanh để tạo thành liên kết kể cả khi nguyên tử trung tâm đã đủ bát tử. Ví dụ như công thức Lewis của  $\text{SF}_6$ .



Một số trường hợp thường thấy có thể kể đến như  $\text{PCl}_5$ ,  $\text{SO}_4^{2-}$ ,  $\text{BrF}_5$ ,  $\text{XeF}_4$ .



## 4 Thuyết VSEPR (Valence shell electron pair repulsion)

Hay còn gọi là thuyết Gillespie-Nyholm, cho rằng các cặp electron không tham gia vào liên kết sẽ tương tác đẩy với nhau sao cho vị trí của các nhóm electron này được phân bố xa nhau nhất (tạo sự thuận lợi về mặt năng lượng). Thuyết này được dùng để có thể dự đoán hình học của phân tử.

Cách dự đoán hình học của phân tử như sau:

Gọi phân tử đang xét có dạng:  $\text{AX}_n\text{E}_m$

Trong đó:

- A là nguyên tử trung tâm có các electron hóa trị đang tạo liên kết
- X là nguyên tử tạo liên kết sigma với A (đối với các phân tử có liên kết đôi hay ba thì cũng sẽ không làm thay đổi hình dạng phân tử)
- n là số lượng nguyên tử X
- E là cặp electron không tham gia liên kết (không phân chia)
- m là số cặp electron không tham gia liên kết (không phân chia)

Vậy kết quả hình học dự đoán được đưa vào bảng sau:

Loại phân tử	Góc liên kết(°)	Hình học phân tử	Ví dụ
$AX_2$	180	Đường thẳng	$BeCl_2$
$AX_3$	120	Tam giác phẳng	$BF_3$
$AX_2E$	< 120	Gấp khúc	$SO_2$
$AX_4$	109.5	Tứ diện	$CH_4$
$AX_3E$	107.5	Chóp đáy tam giác	$NH_3$
$AX_2E_2$	104.5	Gấp khúc	$H_2O$
$AX_5$	120 (Mặt phẳng xích đạo) 90 (Liên kết - Mặt phẳng xích đạo)	Lưỡng tháp đáy tam giác	$PCl_5$
$AX_4E$	Phức tạp	Bập bênh	$SF_4$
$AX_3E_2$	$\approx 90$	Chữ T	$ClF_3$
$AX_2E_3$	180	Đường thẳng	$XeF_2$
$AX_6$	90	Bát diện	$SF_6$
$AX_5E$	$\approx 90$	Chóp đáy vuông	$BrF_5$
$AX_4E$	90	Vuông Phẳng	$XeF_4$

### Tổng quát:

- Hình học của một hợp chất hóa học có thể dự đoán được dựa trên số nhóm electron xung quanh nguyên tử trung tâm.
- Số electron liên kết hoặc không liên kết được xác định qua công thức Lewis (hoặc dùng 1 trong các công thức cộng hưởng (nếu có)).
- Góc liên kết của các phân tử trong thực tế đều có thể khác góc lý tưởng bởi có sự khác nhau giữa các liên kết đôi, liên kết ba, cặp electron tự do,... có thể định hướng khác nhau hoặc chiếm nhiều không gian hơn (tương tác giữa các cặp electron, các liên kết với nhau).
- Các tương tác giữa cặp electron tại mặt phẳng lên xích đạo lên các cặp electron tại vị trí trục và ngược lại đều không đáng kể.

## 5 Sự lai hóa

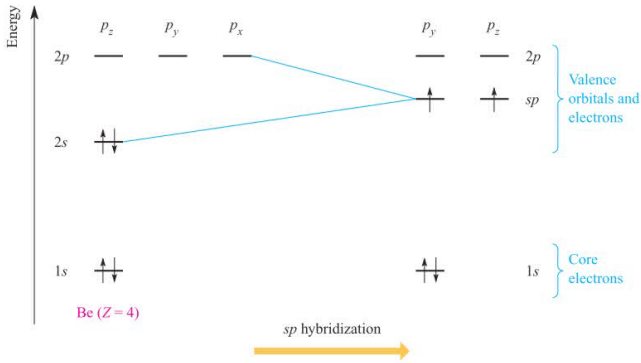
### 5.1 Định nghĩa

Sự lai hóa là thuật ngữ chỉ sự tổ hợp của các orbital trong nguyên tử để trở thành các orbital có trạng thái năng lượng (mức năng lượng) giống nhau nhưng định hướng khác nhau trong không gian. Theo nguyên lý vững bền, các electron được sắp xếp theo các mức năng lượng tăng dần theo các orbital khác nhau. Sự khác biệt này sẽ làm ra sự chênh lệch mức năng lượng và trở nên kém bền. Vì vậy, sự lai hóa làm cho các orbital chứa các electron có thể đồng hóa mức năng lượng và có thể tạo được liên kết bền với các nguyên tử khác.

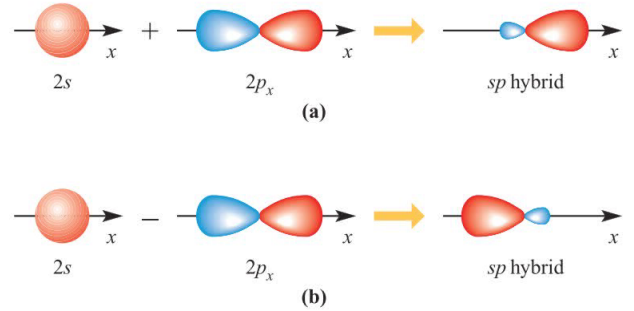
Sự lai hóa chỉ được dùng để giải thích thực nghiệm về hình học của phân tử.  
 → Không dùng để dự đoán khi chưa có dữ liệu thực nghiệm.

## 5.2 Các kiểu lai hóa

**Lai hóa  $sp$ :** 1 orbital s kết hợp với 1 orbital p tạo thành tổ hợp 2 orbital lai hóa  $sp$ .  
 Hình dạng hình học: đường thẳng.

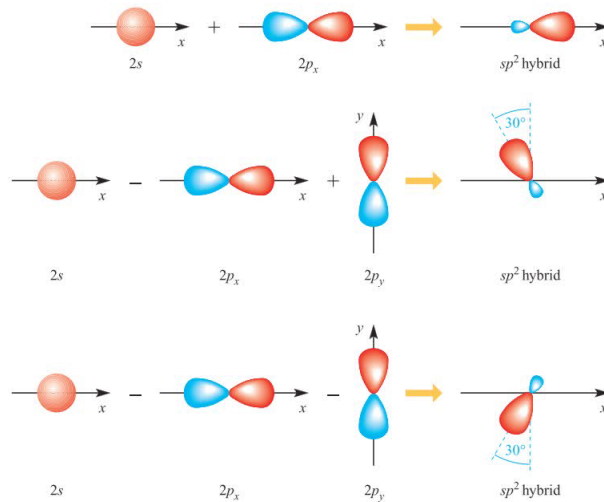


Hình 2. [1] Sự tổ hợp của 1 orbital s và 1 orbital p tạo thành 2 orbital lai hóa  $sp$  của nguyên tử  $sp$  để có thể tạo liên kết.



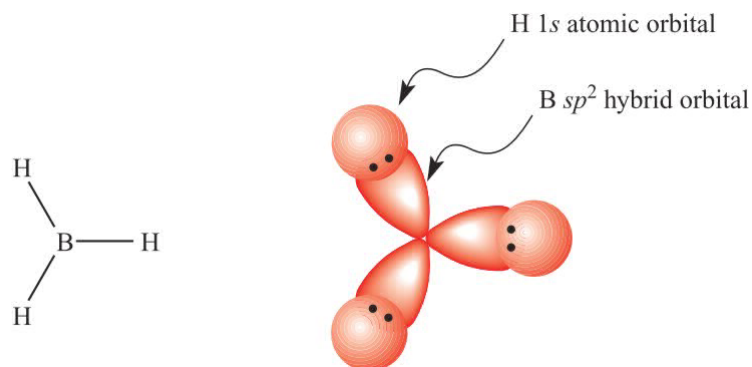
Hình 3. [1] Định hướng khác nhau trong không gian của kiểu lai hóa  $sp$ .

**Lai hóa  $sp^2$ :** 1 orbital s kết hợp với 2 orbital p tạo thành tổ hợp 3 orbital lai hóa  $sp^2$ .  
 Hình dạng hình học: tam giác phẳng.



Hình 4. [1] Sự tổ hợp 1 orbital s với 2 orbital p tạo thành tổ hợp các orbital lai hóa  $sp^2$  có định hướng khác nhau trong không gian.

Ví dụ: Giải thích vì sao  $\text{BH}_3$  có dạng hình tam giác phẳng?  
 $\rightarrow$  B có cấu hình electron là  $1s^2 2s^2 2p^1$ . Khi nhận năng lượng thì các electron hóa trị được kích thích tạo nên cấu hình electron:  $[\text{He}] 2s^1 2p^2$ . 1 orbital 2s kết hợp với 2 orbital 2p tổ hợp thành 3 orbital lai hóa  $sp^2$  có định hướng tạo thành hình tam giác phẳng.



Hình 5. [1] Phân tử  $\text{BH}_3$  và dạng hình học của các orbital trong không gian.

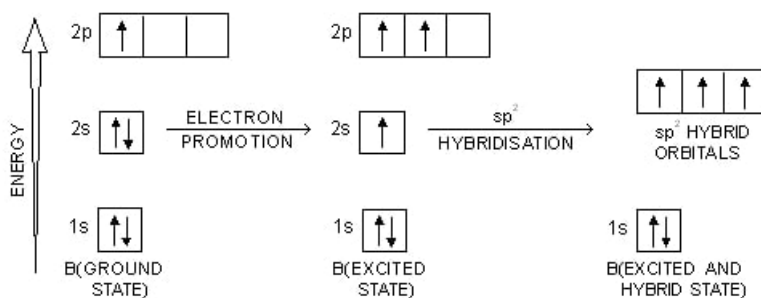
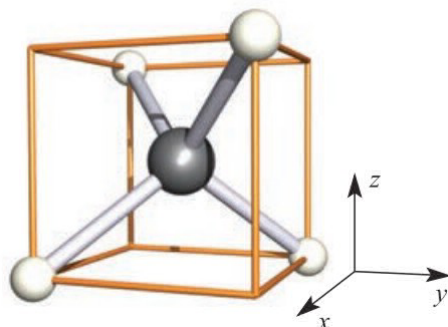


Figure.  $sp^2$  hybrid of boron.

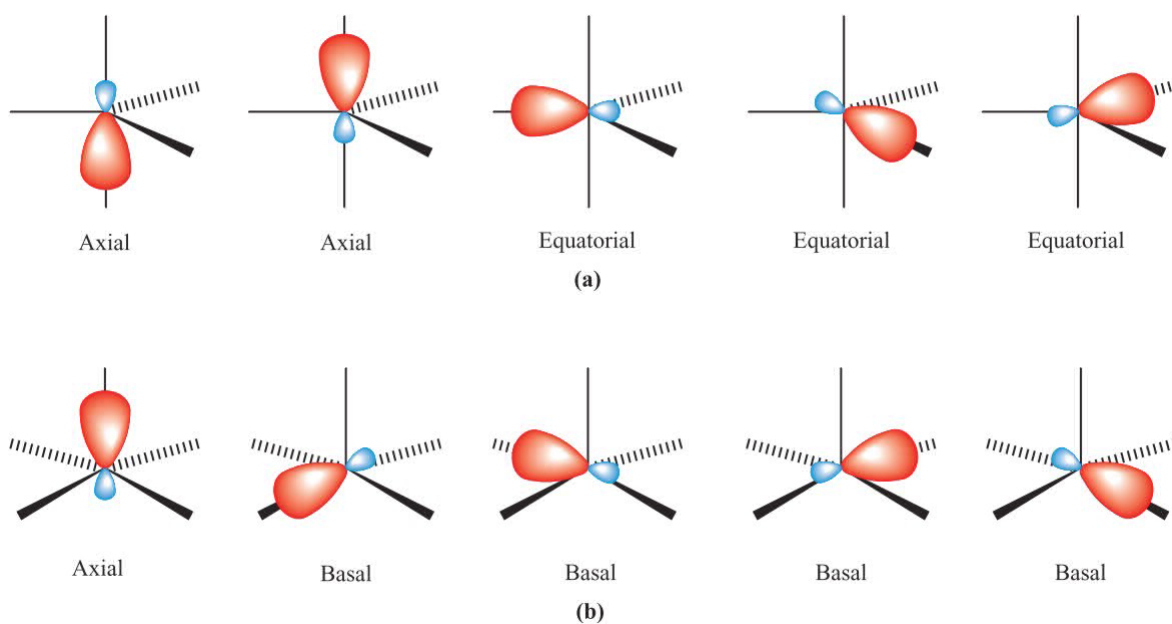
Hình 6. Sự lai hóa của nguyên tử Bo trong  $\text{BH}_3$

**Lai hóa  $sp^3$ :** 1 orbital s kết hợp với 3 orbital p tạo thành tổ hợp 4 orbital  $sp^3$ . Trong không gian, các orbital lai hóa này định hướng theo các hướng khác nhau, tạo hình một hình tứ diện, điển hình là phân tử  $CH_4$ .



Hình 7. <sup>[1]</sup> Định hướng của các orbital lai hóa  $sp^3$  trong không gian.

Ngoài ra, còn có các kiểu lai hóa khác như  $sp^3d$  với 2 loại hình học khác nhau là vuông phẳng và lưỡng tháp đáy tam giác:



Hình 8. <sup>[1]</sup> (a) Tổ hợp của các orbital lai hóa  $sp^3d_{z^2}$  tạo hình lưỡng tháp đáy tam giác; (b) Tổ hợp của các orbital lai hóa  $sp^3d_{x^2-y^2}$  tạo hình chóp đáy vuông.

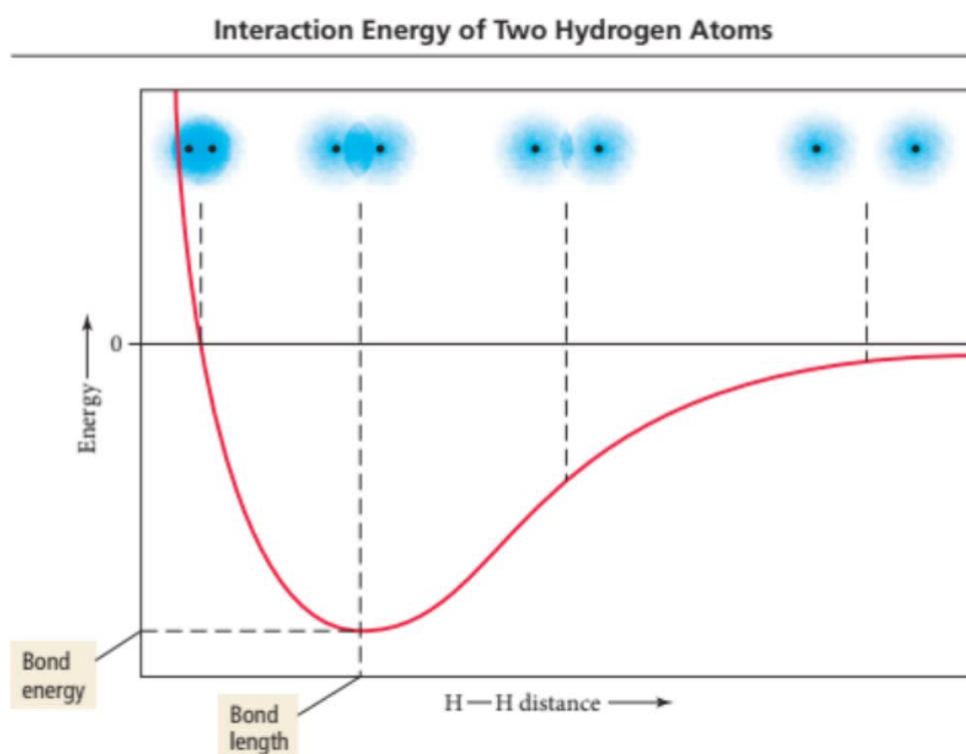


Tổng quát: Trạng thái lai hóa của nguyên tử trung tâm sẽ ứng với các dạng hình học như sau

Trạng thái lai hóa	Dạng hình học electron
$sp$	Đường thẳng
$sp^2$	Tam giác phẳng
$sp^3$	Tứ diện
$sp_3d_{z^2}$	Lưỡng tháp đáy tam giác
$sp^3d_{x^2-y^2}$	Chóp đáy vuông
$sp^3d^2$	Bát diện
$dsp^2$	Vuông phẳng
$sp^3d^2f$	Lưỡng tháp đáy ngũ giác

## 6 Thuyết VB

### 6.1 Sơ lược về sự hình thành liên kết



Hình 9. [1] Giảm đồ năng lượng quá trình hình thành liên kết và phá vỡ liên kết H-H.

- Khi năng lượng của hệ giảm đi (sự an định tăng) do sự hình thành liên kết mới → Liên kết mới được hình thành.
- Khi năng lượng của hệ tăng lên (sự an định giảm) do sự hình thành liên kết mới → Liên kết mới không được hình thành.

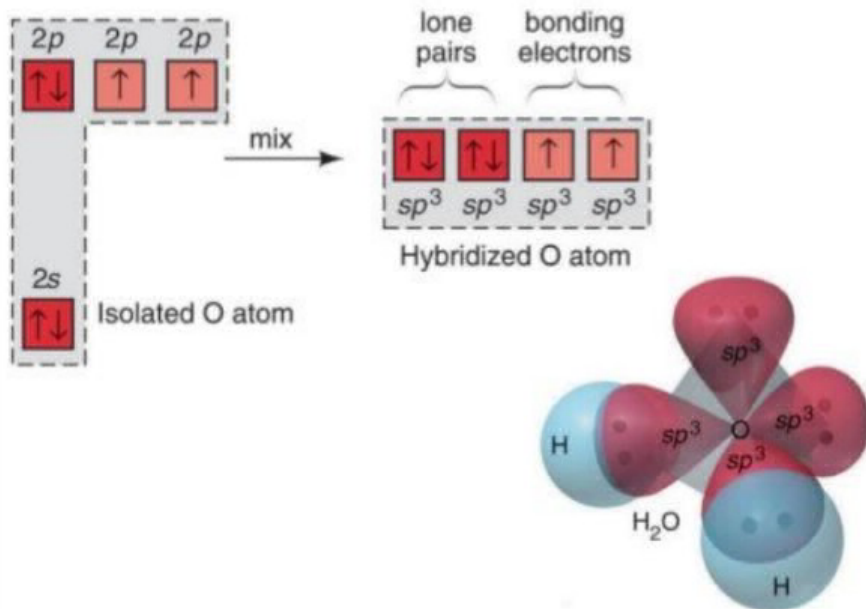
## 6.2 Thuyết VB

Hiện thuyết VB có 3 luận điểm chính như sau:

- Liên kết cộng hóa trị hình thành trên cơ sở các cặp electron ghép đôi có spin ngược dấu nhau (chiều quay ngược nhau) và đồng thời thuộc về cả 2 nguyên tử tạo nên liên kết đó.
- Liên kết cộng hóa trị được hình thành dựa trên sự xen phủ giữa các orbital hóa trị.
- Độ bền của liên kết cộng hóa trị dựa trên 3 yếu tố: mật độ electron vùng xen phủ, thể tích vùng xen phủ và mức độ đồng năng giữa 2 orbital xen phủ với nhau.

Các electron hóa trị của các nguyên tử tạo liên kết nằm trong các orbital hóa trị. Các orbital này có thể là các orbital chuẩn s, p, d và f hoặc là các orbital lai hóa. Dạng hình học của các orbital xen phủ sẽ giúp xác định hình dạng của phân tử. Ví dụ: Mô tả sự hình thành liên kết trong phân tử  $\text{H}_2\text{O}$  và  $\text{H}_2\text{S}$ .

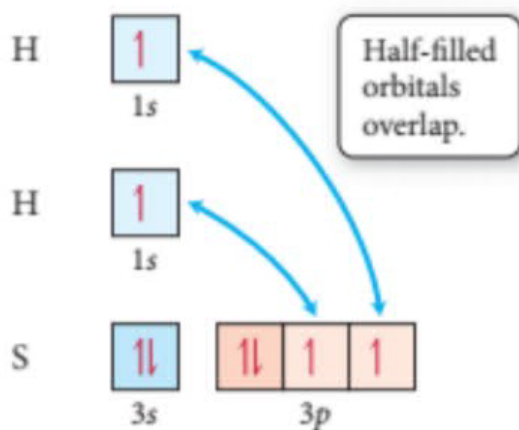
- $\text{H}_2\text{O}$ : Nguyên tử O sẽ dùng 2 orbital lai hóa  $sp^3$ , mỗi orbital chứa 1 electron tiến hành xen phủ với 2 orbital 1s chứa 1 electron của nguyên tử H để hình thành liên kết O-H.



Hình 10. <sup>[1]</sup> Sự hình thành phân tử  $\text{H}_2\text{O}$ .

- $\text{H}_2\text{S}$ : Nguyên tử S dùng 2 orbital 3p, mỗi orbital chứa 1 electron tiến hành xen phủ trực với 2 orbital 1s chứa 1 electron của nguyên tử H để hình thành liên kết S-H.

*Tồn tại tranh cãi giữa  $\text{H}_2\text{S}$  với S không lai hóa do góc liên kết khác góc lí tưởng rất nhiều (lần lượt là  $92^\circ$  và  $109,5^\circ$ ), nhưng 1 số quan điểm lại cho rằng tỉ lệ quá nhỏ nên sự lai hóa không đáng kể.*

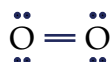


Hình 11. <sup>[1]</sup> Sự hình thành phân tử H<sub>2</sub>S.

## 7 Thuyết MO (Molecular Orbital)

### 7.1 Đặt vấn đề

Trong phân tử O<sub>2</sub> (được biểu thị dưới đây), không còn electron độc thân, nhưng thực nghiệm cho biết rằng O<sub>2</sub> cho kết quả thuận từ, tức O<sub>2</sub> còn electron độc thân. Vậy electron độc thân này (tính thuận từ) được giải thích như thế nào?



### 7.2 Thuyết MO

Trong phân tử, không tồn tại tính độc lập của nguyên tử. Các electron chuyển động trên mọi orbital chung của nguyên tử, tức có sự dịch chuyển electron giữa nhiều nguyên tử với nhau. Khi tạo thành phân tử, các electron được sắp xếp theo các mức năng lượng khác nhau, được xác định bởi hàm không gian gọi là orbital phân tử (MO). Trong đó, các electron cũng tuân theo nguyên lí vững bền, quy tắc Hund và nguyên lí Pauli giúp cho hệ được an định. Ngoài ra, các orbital được dùng để thực hiện sự xen phủ tạo thành các MO thì phải thỏa mãn mức năng lượng gần như là tương đồng nhau và có độ xen phủ rõ rệt.

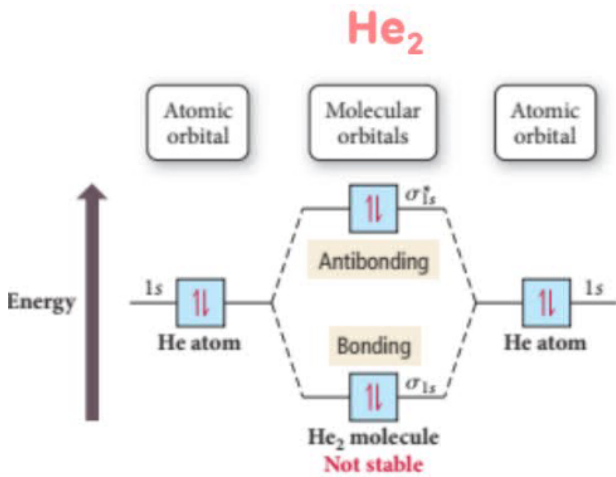
Các MO trong hàm không gian:

- MO liên kết (kí hiệu là  $\sigma$  hoặc  $\pi$  với các orbital tương ứng): Có mật độ xác suất electron cao ở giữa 2 nguyên tử, electron ở trạng thái này có tác dụng liên kết lại 2 nguyên tử với nhau. Ngoài ra, electron tại đây cũng có mức năng lượng thấp hơn năng lượng ban đầu của nguyên tử.
- MO phản liên kết (kí hiệu là  $\sigma^*$  hoặc  $\pi^*$  với các orbital tương ứng): Ngược lại với MO liên kết, tại đây mật độ electron thấp và có trạng thái kém bền hơn nguyên tử.
- MO không liên kết: Khi orbital ban đầu không đối xứng thì không có khả năng xen phủ, gọi là MO không liên kết.

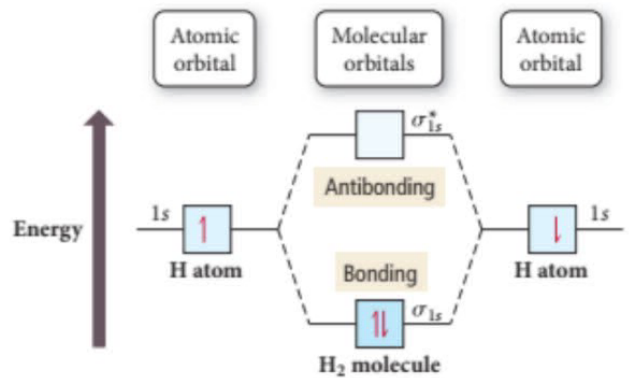
Cách tính bậc liên kết:  $N = \frac{\text{số electron trên MO liên kết} - \text{số electron trên MO phản liên kết}}{2}$

Bậc liên kết N càng cao, liên kết giữa phân tử đó càng nhiều. Khi bậc liên kết N tiến đến 0, liên kết giữa

phân tử đó không tồn tại → Phân tử đó không tồn tại.



Hình 12. <sup>[1]</sup>  $N_{\text{He}_2} = 0$  ( $\text{He}_2$  không tồn tại)



Hình 13. <sup>[1]</sup>  $N_{\text{H}_2} = 1$  ( $\text{H}_2$  tồn tại 1 liên kết  $\sigma$ )

## ■ Giải đồ MO của các hợp chất nhị nguyên tử giống nhau thuộc chu kì 2

Hình 14. <sup>[1]</sup> Giải đồ MO của các hợp chất nhị nguyên tử giống nhau thuộc chu kì 2

	$\text{B}_2$	$\text{C}_2$	$\text{N}_2$	$\text{O}_2$	$\text{F}_2$	$\text{Ne}_2$
$\sigma_{2p}^*$						$\uparrow\downarrow$
$\pi_{2p}^*$				$\uparrow$ $\uparrow$	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$
$\sigma_{2p}$			$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$
$\pi_{2p}$	$\uparrow$ $\uparrow$	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$
$\sigma_{2s}^*$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$
$\sigma_{2s}$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$

Qua số lượng electron độc thân, có thể tính được moment của phân tử và ngược lại theo công thức:

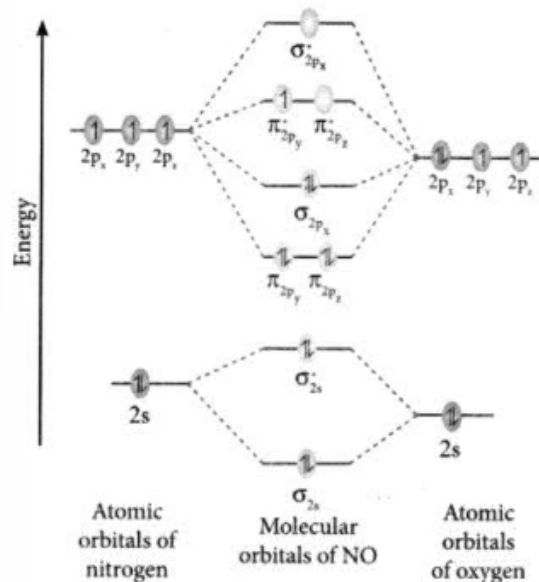
$$\mu_s = \sqrt{n(n+2)}$$

Trong đó:

- $\mu$  là moment của phân tử ( $\mu_B$ ).
- $n$  là số lượng electron độc thân

## ■ Giải đồ MO của các hợp chất nhị nguyên tử khác nhau thuộc chu kì 2

Đối với phân tử có dạng XY (tỉ lệ X và Y là 1:1) và X, Y đều thuộc chu kì 2, thì giải đồ MO của chúng sẽ tương tự như giải đồ MO của NO như sau:



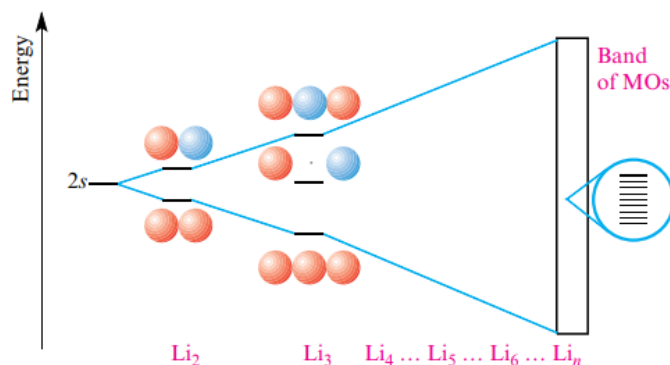
Hình 15. [1] Giải đồ MO của NO

Phân tích giản đồ MO của NO, các MO liên kết  $\pi$  có mức năng lượng thấp hơn MO liên kết  $\sigma$ . Ngoài ra NO còn có 1 electron độc thân nên NO sẽ có từ tính là thuận từ.

### 7.3 Liên kết trong kim loại

Khác với liên kết cộng hóa trị hay liên kết ion, liên kết trong tinh thể kim loại là 1 loại liên kết đặc biệt được hình thành dựa trên cơ sở của thuyết MO và được gọi là thuyết band (Band theory). Loại liên kết trong mạng tinh thể kim loại này được miêu tả qua một số luận điểm như sau:

1. Liên kết trong kim loại là các liên kết cộng hóa trị đa tâm đa điện tử hình thành giữa tất cả các nguyên tử trong toàn khối tinh thể kim loại.
2. Mỗi nguyên tử kim loại sẽ sử dụng các AO của mình để xen phủ với các AO của các nguyên tử xung quanh theo cả 3 phương trong mạng tinh thể.
3.  $n$  AO hóa trị của toàn bộ nguyên tử kim loại sẽ tổ hợp thành  $n/2$  MO liên kết và  $n/2$  MO phản liên kết.

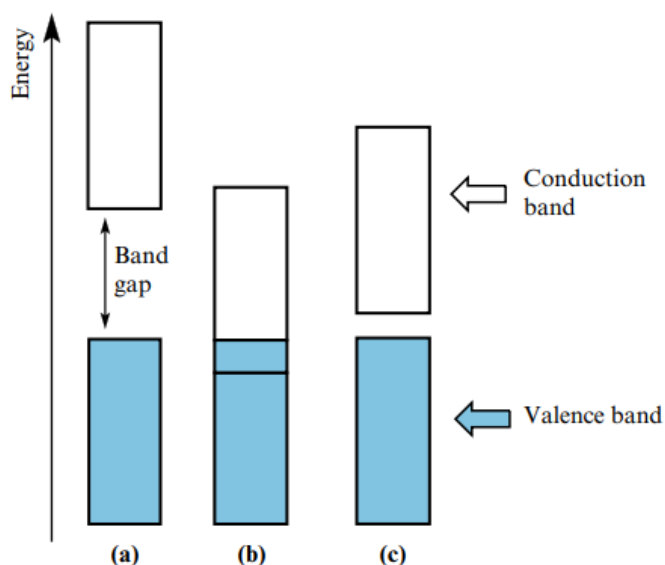


Hình 16. [1] Giải đồ MO của mạng tinh thể Lithium

Mức năng lượng cao nhất có chứa electron được gọi là HOMO (Highest occupied molecular orbital), mức năng lượng thấp nhất không chứa electron được gọi là LUMO (Lowest unoccupied molecular orbital).

Tùy thuộc vào độ chênh lệch mức năng lượng mà mạng tinh thể ấy có thể mang các tính chất như sau:

- **Chất dẫn điện:** Những chất này có sự chênh lệch năng lượng rất ít giữa LUMO và HOMO do đó electron từ HOMO dễ dàng được kích thích lên LUMO khi được đặt trong trường điện từ. Điều này giúp cho chất có tính dẫn điện.
- **Chất bán dẫn:** Những chất này có sự chênh lệch năng lượng tương đối nhỏ giữa LUMO và HOMO (thường là từ 0,1 đến 3 electron volts). Lúc này electron cần năng lượng tương đối lớn hơn để có khả năng dẫn điện. Điều này giúp cho chất có tính bán dẫn.
- **Chất cách điện:** Những chất này có sự chênh lệch năng lượng LUMO và HOMO rất lớn (thường lớn hơn 3 electron volts). Lúc này electron cần năng lượng vô cùng lớn để kích thích electron từ HOMO lên LUMO và thường rất khó đạt được trong điều kiện bình thường. Điều này giúp cho chất có tính cách điện



Hình 17. <sup>[1]</sup>(a) Chất cách điện, (b) Chất dẫn điện, (c) Chất bán dẫn

## 8 Bài tập vận dụng

- <sup>[3]</sup> Dựa vào độ âm điện hãy sắp xếp theo chiều giảm độ phân cực của liên kết giữa 2 nguyên tử trong những phân tử sau:  $\text{CaO}$ ,  $\text{MgO}$ ,  $\text{AlN}$ ,  $\text{N}_2$ ,  $\text{NaBr}$ ,  $\text{BCl}_3$ ,  $\text{AlCl}_3$ ,  $\text{CH}_4$ ,  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ,  $\text{CuCl}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Na}_2\text{S}$ ,  $\text{KBr}$   
Phân tử nào có liên kết ion, liên kết cộng hóa trị phân cực và không phân cực?
- <sup>[3]</sup> Dựa vào độ âm điện hãy nêu bản chất liên kết trong các anion:  $\text{HCO}_3^-$ ,  $\text{ClO}_4^-$ ,  $\text{SO}_4^{2-}$ .
- <sup>[3]</sup> Vẽ công thức Lewis của  $\text{AlCl}_3$ . Từ đó giải thích về sự hình thành của phân tử  $\text{Al}_2\text{Cl}_6$ . Vì sao không tồn tại phân tử  $\text{B}_2\text{Cl}_6$ ?
- <sup>[3]</sup> Mô tả sự hình thành liên kết và cấu trúc hình học của  $\text{CH}_4$ ,  $\text{C}_2\text{H}_4$ ,  $\text{C}_2\text{H}_2$
- <sup>[3]</sup> Năng lượng liên kết của  $\text{BF}_3$  bằng  $646\text{kJ/mol}$  còn của  $\text{NF}_3$  là  $280\text{kJ/mol}$ . Giải thích sự khác biệt năng lượng liên kết này.
- So sánh tính base của  $\text{CrO}$ ,  $\text{Cr}_2\text{O}_3$ ,  $\text{CrO}_3$ .

### 7. (Olympic 30/4 2008)

Cho bảng sau:

Chất	$\text{NH}_3$	$\text{NF}_3$
Moment lưỡng cực	1.46D	0.24D
Nhiệt độ sôi	$-33^\circ\text{C}$	$-129^\circ\text{C}$

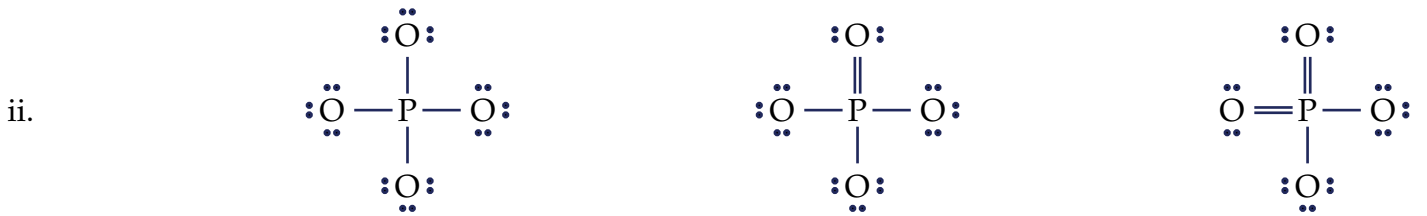
So sánh và giải thích ngắn gọn sự khác nhau về trị số của các đại lượng được cho trong bảng trên.

- (Olympic 30/4 2010)** X là nguyên tố thuộc nhóm A, tạo hợp chất với hidro có dạng  $\text{XH}_3$ . Electron cuối cùng trên nguyên tử X có tổng bốn số lượng tử bằng 4.5. (Quy ước từ -1 đến +1).
  - Viết cấu hình electron nguyên tử có thể có của X.
  - Ở điều kiện thường  $\text{XH}_3$  là một chất khí. X tạo với oxy cho một số phân tử và ion sau:  $\text{XO}_2$ ;  $\text{XO}_2^+$ ;  $\text{XO}_2^-$ .  
Hãy viết công thức Lewis, cho biết trạng thái lai hóa của nguyên tử trung tâm, dự đoán dạng hình học của các phân tử và ion trên, đồng thời sắp xếp các góc liên kết trong chúng theo chiều giảm dần (có giải thích).
  - Hãy so sánh góc liên kết và moment lưỡng cực của  $\text{XH}_3$  và  $\text{XF}_3$ . Giải thích.
- <sup>[3]</sup> Thực nghiệm xác định được giá trị moment lưỡng cực của phân tử  $\text{H}_2\text{S}$  là 1.09D và của liên kết S-H là  $2,61 \cdot 10^{-30}\text{C.m}$ . Hãy xác định góc liên kết H-S-H, cho  $1\text{D} = 3,33 \cdot 10^{-30}\text{C.m}$ .

### 10. (Olympic 30/4 2019)

- Lập luận và xác định công thức Lewis bền nhất trong từng trường hợp sau của  $\text{NO}_3^-$  và  $\text{PO}_4^{3-}$ .





b) Sử dụng mô hình VSERP, hãy dự đoán và vẽ cấu trúc hình học của các ion và phân tử sau:  $\text{ClOF}_2^+$ ,  $\text{ClOF}_3$ ,  $\text{ClOF}_4^-$ . Hãy cho biết trạng thái lai hóa của nguyên tử trung tâm Cl trong từng ion và phân tử trên.

11. Cho bảng sau:

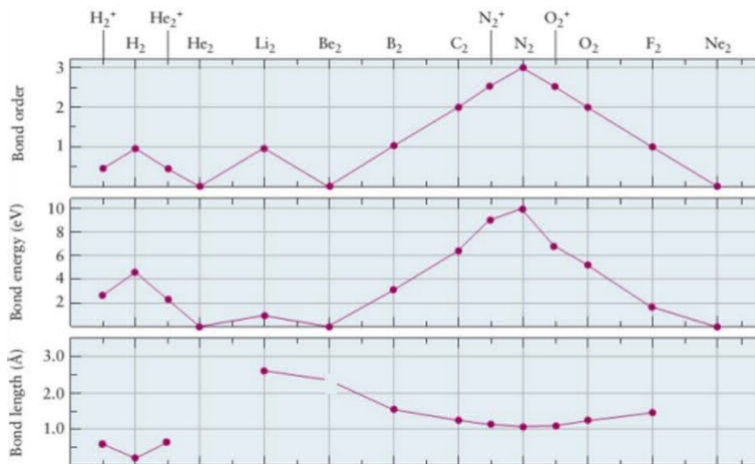
Muối	NaCl	KCl	RbCl	CsCl
Nhiệt độ nóng chảy ( $^{\circ}\text{C}$ )	801	770	718	645
Muối	$\text{MgCl}_2$	$\text{CaCl}_2$	$\text{SrCl}_2$	$\text{BaCl}_2$
Nhiệt độ nóng chảy ( $^{\circ}\text{C}$ )	714	772	874	962

Giải thích sự biến thiên nhiệt độ nóng chảy của muối clorua của 2 dãy kim loại IA và IIA. Vì sao các muối đều được sắp xếp theo chiều tăng dần của chu kì kim loại nhưng lại thể hiện 2 xu hướng biến thiên nhiệt độ nóng chảy nghịch nhau?

12. Dự đoán hình học và trạng thái lai hóa của nguyên tử trung tâm và xét tính phân cực của phân tử đó:  $\text{VOCl}_3$ ,  $\text{PCl}_3$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{SO}_2$ ,  $\text{CS}_2$ ,  $\text{PH}_3$ ,  $\text{PF}_5$ ,  $\text{IF}_5$ .

13. Mô tả sự hình thành liên kết trong các nguyên tử sau bằng thuyết VB:  $\text{N}_2$ ,  $\text{NH}_4^+$ , **benzene**,  $\text{NH}_3$ ,  $\text{PH}_3$ , **HCHO**.

14. Cho giản đồ sau: [1]



a) Vẽ giản đồ MO.

b) Tính bậc liên kết, xét độ bền của liên kết đó với H-H.

15. Dùng thuyết MO để xác định từ tính của các chất:  $\text{CN}^+$ ,  $\text{CN}$ ,  $\text{CN}^-$ .

## Tài liệu

[1] Housecroft, C.E. & Sharpe, A.G. 2012. *Inorganic chemistry* (4th ed.). Pearson Education, Barcelona, Spain.

[2] Burdge, J., Overby, J. 2012. *Chemistry atoms first* (1st ed.). McGraw-Hill.



- [3] Trường, N.X., Long, Q.V. & Hương, H.T.T. 2022. *Bồi dưỡng học sinh giỏi hóa học 10 (Theo chuyên đề)*. NXB Đại học Quốc gia Hà Nội
- [4] Các đề thi của Kỳ thi Olympic truyền thống 30/4