


Họ và
tên:
Lớp:
.

Chuyên đề 10.1
LIÊN KẾT HÓA HỌC VÀ
HÌNH HỌC PHÂN TỬ

 Theo em, dạng hình học nào sau đây của hai phân tử carbon dioxide và nước là đúng?

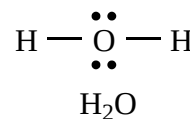
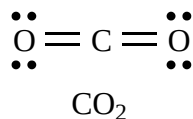


I. CÔNG THỨC LEWIS VÀ MÔ HÌNH VSEPR

1) Công thức Lewis

Công thức Lewis là công thức biểu diễn phân tử qua

Ví dụ 1: Công thức Lewis của CO₂ và H₂O



Câu hỏi 1: Những electron như thế nào được gọi là:

(a) electron hóa trị?

(b) electron chung?

(c) electron hóa trị riêng?

Câu hỏi 2: Viết công thức cấu tạo của CO₂ và H₂O?

Phương pháp này dựa trên những cơ sở nào?

.....
.....
.....
.....
.....



Các nguyên tử nguyên tố chu kì 2 không thể có nhiều hơn 8 electron ở lớp vỏ ngoài cùng khi hình thành liên kết do lớp ngoài cùng chỉ có 4 orbital là: 2s, 2p_x, 2p_y và 2p_z.

Ví dụ 2: Viết công thức Lewis của CO₂.

.....
.....
.....


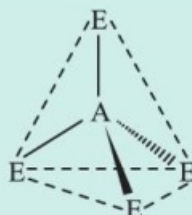
2) Mô hình VSEPR

Mô hình lực đẩy giữa các cặp electron vỏ hóa trị VSEPR (Valence Shell Electron Pair Repulsion) có thể giúp ta dự đoán dạng hình học của phân tử (đặc trưng bởi cách sắp xếp của các nguyên tử trong không gian).

Mô hình này dựa trên cơ sở

Vị trí phân bố các đám mây electron E xung quanh nguyên tử trung tâm A theo số lượng đám mây khác nhau được cho trong Bảng 1.1.

Bảng 1.1. Dạng hình học phân tử theo VSEPR

Công thức VSEPR	Hình học	Dạng phân bố không gian
AE_2	E — A — E	Thẳng
AE_3		Tam giác phẳng
AE_4		Tứ diện

Một đám mây electron hoá trị có thể là một liên kết (đơn, đôi, ba), một cặp electron riêng hoặc một electron độc thân.

EM CÓ BIẾT

Việc xác định hình học phân tử có ý nghĩa quan trọng trong nghiên cứu hoá học: giúp ta có thêm những hiểu biết về khả năng phản ứng, về độ bền, về tính phân cực của phân tử,...

EM CÓ BIẾT

Mô hình VSEPR còn có thể vận dụng cho các hệ AE_5 (dạng phân bố không gian: lưỡng tháp tam giác) và AE_6 (dạng phân bố không gian: bát diện).

Câu hỏi 4: Giải thích vì sao khi xung quanh nguyên tử trung tâm có 3 đám mây electron hóa trị E thì 3 đám mây này có xu hướng nằm ở 3 đỉnh của một tam giác phẳng?

Ví dụ 4: Dự đoán dạng hình học của phân tử CO_2 .

Ví dụ 5: Dự đoán dạng hình học của phân tử NH_3 .

Câu hỏi 5: Viết công thức Lewis; dự đoán dạng hình học của phân tử CH_4 .

.....

.....

.....



Nếu nguyên tử C trong phân tử CH_4 không có sự lai hóa AO thì sẽ xuất hiện góc liên kết $\text{HCH} = 90^\circ$, trái với thực nghiệm là $109^\circ 28'$.

II. SỰ LAI HÓA ORBITAL

1) Khái niệm

Lai hóa là

Các AO lai hóa phải là các AO hóa trị.

2) Các dạng lai hóa phổ biến

a) Lai hóa sp

- Khái niệm:

- Sơ đồ:

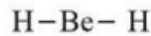


Phân tử tương ứng với công thức VSEPR AE_2 thì nguyên tử trung tâm A thường có dạng lai hoá sp .

Lai hóa sp thuộc loại lai hóa thẳng

Ví dụ 6: Giải thích sự hình thành liên kết trong phân tử BeH_2 qua sự lai hóa của nguyên tử trung tâm Be.

Từ công thức Lewis của BeH_2 , xác định được phân tử này có dạng đường thẳng theo mô hình VSEPR.



Cấu hình electron của Be ($Z = 4$) là $1s^2 2s^2 2p^0$. Để tạo liên kết với H, trước tiên có sự dịch chuyển 1 electron từ 2s lên 2p tạo cấu hình electron ở trạng thái kích thích là $1s^2 2s^1 2p^1$.

Trong phân tử BeH_2 , nguyên tử Be phải có lai hoá sp giữa 2 AO (1 AO 2s và 1 AO 2p) chứa electron độc thân để tạo ra 2 AO lai hoá cùng nằm trên một đường thẳng; 2 AO lai hoá này xen phủ với AO 1s của 2 nguyên tử H tạo ra 2 liên kết Be – H.



EM CÓ BIẾT

Trong phân tử BeH_2 , nguyên tử Be chưa được "octet" nên chất này rất kém bền, các phân tử tự liên kết với nhau thành dạng polymer $(\text{BeH}_2)_n$.

2 electron hoá trị của Be nằm trong 2 AO lai hoá để tạo liên kết với H.

Câu hỏi 6: Nguyên tử C trong CO_2 có dạng lai hóa gì? Trình bày sự hình thành dạng lai hóa đó?

.....

.....

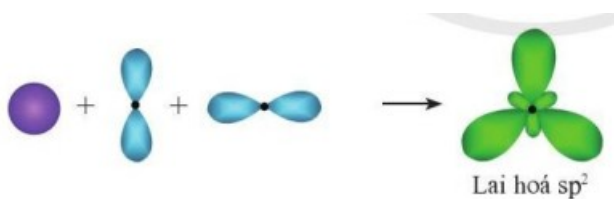
.....

.....

b) Lai hóa sp^2

-
niệm: Khái

- Sơ đồ:

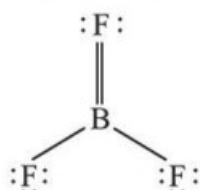


Phân tử tương ứng với công thức VSEPR AX_3 thì nguyên tử trung tâm A thường có dạng lai hoá sp^2 .

Lai hóa sp^2 thuộc loại lai hóa tam giác phẳng.

Ví dụ 7: Giải thích sự hình thành liên kết trong phân tử BF_3 qua sự lai hóa của nguyên tử trung tâm B.

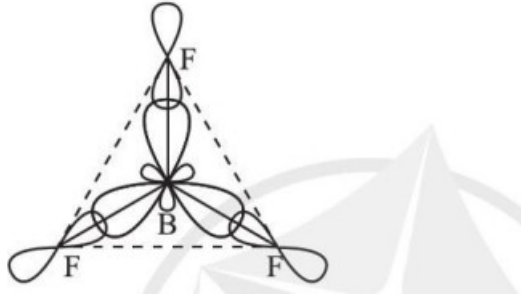
Từ công thức Lewis của BF_3 , xác định được phân tử này có dạng tam giác theo mô hình VSEPR.



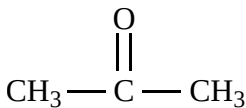
3 electron hoá trị của B nằm trong 3 AO lai hoá để tạo liên kết với F. Liên kết π có bản chất là liên kết cho nhận được tạo nên từ cặp electron của F và AO trống của B.

Cấu hình electron của B ($Z = 5$) là $1s^2 2s^2 2p^1$. Để tạo liên kết với F, trước tiên có sự dịch chuyển 1 electron từ 2s lên 2p tạo cấu hình electron ở trạng thái kích thích là $1s^2 2s^1 2p^2$.

Trong phân tử BF_3 , nguyên tử B phải có lai hoá sp^2 giữa 3 AO (1 AO 2s và 2 AO 2p) chứa electron độc thân để tạo 3 AO lai hoá hướng tới 3 đỉnh của một tam giác đều; 3 AO lai hoá này xen phủ với AO 2p của 3 nguyên tử F tạo ra 3 liên kết BF.



Câu hỏi 7: Phân tử acetone có dạng tam giác phẳng theo hình VSEPR. Xác định dạng lai hóa của nguyên tử trung tâm C. Biết công thức của acetone

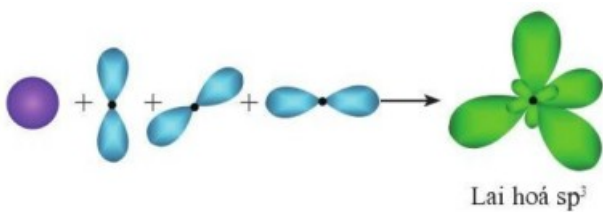


.....

c) Lai hóa sp^3

- Khái niệm:

- Sơ đồ:



Lai hóa sp^3 thuộc loại lai hóa tứ diện.

Câu hỏi 8: Trình bày sự hình thành lai hóa sp^3 của nguyên tử C trong CH_4 và sự hình thành các liên kết trong phân tử này.

.....

