

- Liên kết cộng hoá trị trong phân tử đơn chất và hợp chất được hình thành như thế nào ?
- Sự phân cực trong liên kết cộng hoá trị như thế nào ?

I - SỰ HÌNH THÀNH LIÊN KẾT CỘNG HOÁ TRỊ BẰNG CẶP ELECTRON CHUNG

1. Sự hình thành phân tử đơn chất

a) Sự hình thành phân tử H_2

Nguyên tử H ($Z = 1$) có cấu hình electron là $1s^1$, hai nguyên tử H liên kết với nhau bằng cách mỗi nguyên tử H góp 1 electron tạo thành một cặp electron chung trong phân tử H_2 . Như thế trong phân tử H_2 , mỗi nguyên tử có 2 electron, giống cấu hình electron bền vững của khí hiếm heli :

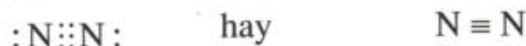


Mỗi chấm bên kí hiệu nguyên tố biểu diễn một electron ở lớp ngoài cùng, $H : H$ được gọi là *công thức electron*. Thay hai chấm bằng 1 gạch, ta có $H - H$ gọi là *công thức cấu tạo*. Giữa 2 nguyên tử hydro có 1 cặp electron liên kết biểu thị bằng một gạch (-), đó là *liên kết đơn*.

b) Sự hình thành phân tử N_2

Cấu hình electron nguyên tử của N ($Z = 7$) là $1s^2 2s^2 2p^3$, có 5 electron ở lớp ngoài cùng.

Trong phân tử nitơ N_2 , để đạt cấu hình electron của nguyên tử khí hiếm gần nhất (Ne), mỗi nguyên tử nitơ phải góp chung 3 electron.



Công thức electron

Công thức cấu tạo

Hai nguyên tử nitơ liên kết với nhau bằng 3 cặp electron liên kết biểu thị bằng ba gạch (\equiv), đó là *liên kết ba*. Liên kết ba này bền nên ở nhiệt độ thường, khí nitơ rất bền, kém hoạt động hoá học.

Liên kết được hình thành trong phân tử H_2 , N_2 vừa trình bày ở trên là liên kết cộng hoá trị.

Liên kết cộng hoá trị là liên kết được hình thành giữa hai nguyên tử bằng một hay nhiều cặp electron chung.

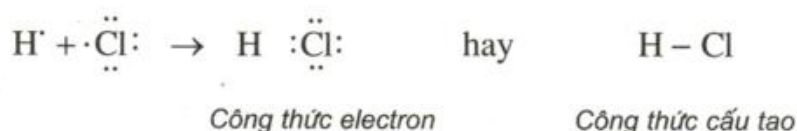
Mỗi cặp electron chung tạo nên một liên kết cộng hoá trị.

Các phân tử H_2 , N_2 tạo nên từ hai nguyên tử của cùng một nguyên tố (có độ âm điện như nhau), nên các cặp electron chung không bị hút lệch về phía nguyên tử nào. Do đó, liên kết trong các phân tử đó không bị phân cực. Đó là liên kết cộng hoá trị không cực.

2. Sự hình thành phân tử hợp chất

a) Sự hình thành phân tử HCl

Trong phân tử hidro clorua, mỗi nguyên tử (H và Cl) góp 1 electron tạo thành 1 cặp electron chung để tạo nên một liên kết cộng hoá trị. Độ âm điện của clo là 3,16 lớn hơn độ âm điện của hidro là 2,20 nên cặp electron liên kết bị lệch về phía clo, liên kết cộng hoá trị này bị phân cực.



Trong công thức electron của phân tử có cực, người ta đặt cặp electron chung lệch về phía kí hiệu của nguyên tử có độ âm điện lớn hơn. *Thí dụ :*



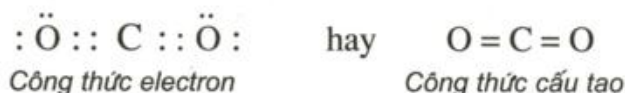
Liên kết cộng hoá trị trong đó cặp electron chung bị lệch về phía một nguyên tử được gọi là liên kết cộng hoá trị có cực hay liên kết cộng hoá trị phân cực.

b) Sự hình thành phân tử CO_2 (có cấu tạo thẳng)

Cấu hình electron nguyên tử của C ($Z = 6$) là $1s^2 2s^2 2p^2$, nguyên tử cacbon có 4 electron ở lớp ngoài cùng.

Cấu hình electron nguyên tử của O ($Z = 8$) là $1s^2 2s^2 2p^4$, nguyên tử oxi có 6 electron ở lớp ngoài cùng.

Trong phân tử CO_2 , nguyên tử C nằm giữa 2 nguyên tử O và góp chung với mỗi nguyên tử O hai electron, mỗi nguyên tử O góp chung với nguyên tử C hai electron tạo ra 2 liên kết đôi. Ta có :



Như vậy, mỗi nguyên tử C hay O đều có 8 electron ở lớp ngoài cùng, đạt cấu hình bền vững của khí hiếm. Độ âm điện của oxi (3,44) lớn hơn độ âm điện

của C (2,55) nên cặp electron chung lệch về phía oxi. Liên kết giữa nguyên tử oxi và cacbon là phân cực, nhưng phân tử CO_2 có cấu tạo thẳng nên độ phân cực của hai liên kết đôi ($\text{C}=\text{O}$) triệt tiêu nhau, kết quả là toàn bộ phân tử không bị phân cực.

c) Liên kết cho – nhận

Trong một số trường hợp, cặp electron chung chỉ do một nguyên tử đóng góp thì liên kết giữa hai nguyên tử là liên kết cho – nhận.

Thí dụ : Đối với phân tử SO_2 công thức electron, công thức cấu tạo có thể biểu diễn như sau :



Nguyên tử S có 6 electron ở lớp ngoài cùng. Khi hình thành phân tử SO_2 , nguyên tử S đã dùng 2 electron độc thân góp chung với hai electron độc thân của một trong hai nguyên tử oxi. Nguyên tử S sử dụng một cặp electron để dùng chung với nguyên tử oxi còn lại. Trong công thức cấu tạo, người ta biểu diễn cặp electron chung bằng một gạch nối, cặp electron cho – nhận bằng một mũi tên có chiều hướng về phía nguyên tử nhận.

3. Tính chất của các chất có liên kết cộng hoá trị

Các chất mà phân tử chỉ có liên kết cộng hoá trị có thể là chất rắn như đường, lưu huỳnh, iot,..., có thể là chất lỏng như : nước, ancol,... hoặc chất khí như khí cacbonic, clo, hiđro,... Các chất có cực như ancol etylic, đường,... tan nhiều trong dung môi có cực như nước. Phần lớn các chất không cực như iot, các chất hữu cơ không cực tan trong dung môi không cực như benzen, cacbon tetraclorea,...

Nói chung, các chất chỉ có liên kết cộng hoá trị không cực không dẫn điện ở mọi trạng thái.

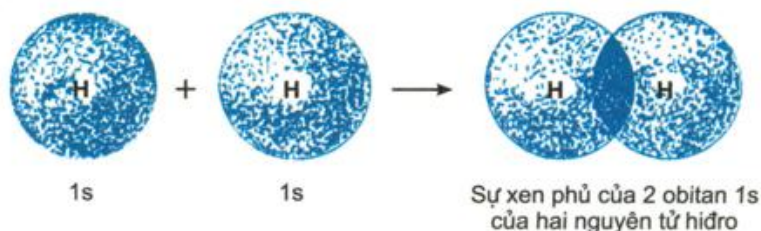
II - LIÊN KẾT CỘNG HOÁ TRỊ VÀ SỰ XEN PHỦ CÁC OBITAN NGUYÊN TỬ

1. Sự xen phủ của các obitan nguyên tử khi hình thành các phân tử đơn chất

a) Sự hình thành phân tử H_2

Để hình thành liên kết giữa hai nguyên tử H trong phân tử hiđro, hai obitan 1s của hai nguyên tử H xen phủ với nhau tạo ra một vùng xen phủ giữa hai hạt nhân nguyên tử. Xác suất có mặt của các electron tập trung chủ yếu ở khu vực giữa

hai hạt nhân. Vì vậy, ngoài lực đẩy tương hỗ giữa hai proton và hai electron còn có lực hút giữa các electron với hai hạt nhân hướng về tâm phân tử (hình 3.2).



Hình 3.2. Sự hình thành phân tử hidro

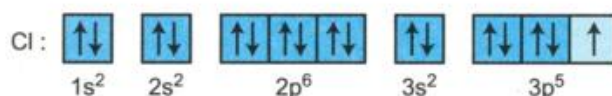
Khi hai hạt nhân ở khoảng cách $d = 0,074$ nm, các lực hút và lực đẩy cân bằng nhau (d được gọi là khoảng cách cân bằng hay độ dài của liên kết H – H).

Ở khoảng cách cân bằng trên, phân tử H_2 có năng lượng thấp hơn tổng năng lượng của hai nguyên tử riêng rẽ.

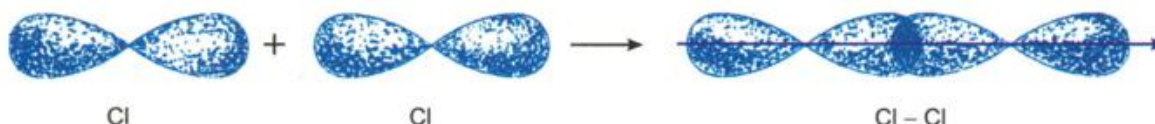
Đó là nguyên nhân của sự hình thành liên kết cộng hoá trị giữa hai nguyên tử H và là một liên kết hoá học bền.

b) Sự hình thành phân tử Cl_2

Để giải thích sự hình thành liên kết Cl–Cl, có thể dựa vào cấu hình electron của mỗi nguyên tử clo :



Sự hình thành liên kết giữa hai nguyên tử clo là do sự xen phủ giữa hai obitan p chứa electron độc thân của mỗi nguyên tử clo (hình 3.3).



Hình 3.3. Sự xen phủ 2 obitan p tạo thành liên kết Cl–Cl trong phân tử Cl_2

2. Sự xen phủ của các obitan nguyên tử khi hình thành các phân tử hợp chất

a) Sự hình thành phân tử HCl

Phân tử của hợp chất được hình thành từ các nguyên tử của các nguyên tố khác nhau, như phân tử HCl.

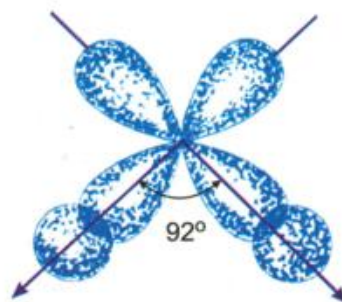
Liên kết hoá học trong phân tử hợp chất HCl được hình thành nhờ sự xen phủ giữa orbital 1s của nguyên tử hydro và orbital 3p có 1 electron độc thân của nguyên tử clo (hình 3.4).



Hình 3.4. Sự xen phủ orbital 1s của hydro với orbital 3p của nguyên tử Cl tạo liên kết H – Cl

b) Sự hình thành phân tử H₂S

Sự hình thành phân tử H₂S có thể mô tả bằng hình ảnh xen phủ giữa orbital 1s của các nguyên tử hydro và 2 orbital p của nguyên tử lưu huỳnh. Lớp ngoài cùng của nguyên tử S có cấu hình electron 3s² 3p⁴. Trên 2 orbital p có 2 electron độc thân. Hai orbital này xen phủ với 2 orbital 1s có electron độc thân của 2 nguyên tử H tạo nên 2 liên kết S–H (hình 3.5).



Hình 3.5. Sự xen phủ của hai AO 1s của hai nguyên tử hydro với hai AO 2p của nguyên tử S tạo hai liên kết S – H

BÀI TẬP

- Chọn định nghĩa đúng nhất về liên kết cộng hoá trị.
Liên kết cộng hoá trị là liên kết
A. giữa các phi kim với nhau.
B. trong đó cặp electron chung bị lệch về một nguyên tử.
C. được hình thành do sự dùng chung electron của 2 nguyên tử khác nhau.
D. được hình thành giữa 2 nguyên tử bằng một hay nhiều cặp electron chung.
- Hãy giải thích sự hình thành cặp electron liên kết giữa nguyên tử C và các nguyên tử H trong phân tử CH₄, giữa nguyên tử O và các nguyên tử H trong phân tử H₂O, giữa nguyên tử S và các nguyên tử H trong phân tử H₂S.
- Giải thích sự hình thành cặp electron liên kết giữa hai nguyên tử N trong phân tử N₂, giữa nguyên tử H và nguyên tử Cl trong phân tử HCl.
- Giải thích sự hình thành liên kết cộng hoá trị bằng sự xen phủ các orbital trong phân tử HCl.
- Hãy viết công thức electron và công thức cấu tạo của các phân tử sau đây :
H₂, HCl, H₂O, Cl₂, NH₃, CH₄.
- X, Y, Z là những nguyên tố có số đơn vị điện tích hạt nhân là 9, 19, 8.
a) Viết cấu hình electron nguyên tử của các nguyên tố đó.
b) Dự đoán kiểu liên kết hoá học có thể có giữa các cặp X và Y, Y và Z, X và Z.