

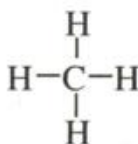
SỰ LAI HOÁ CÁC OBITAN NGUYÊN TỬ. SỰ HÌNH THÀNH LIÊN KẾT ĐƠN, LIÊN KẾT ĐÔI VÀ LIÊN KẾT BA

- Khái niệm về sự lai hoá các obitan nguyên tử.
- Một số kiểu lai hoá điển hình.
- Vận dụng kiểu lai hoá để giải thích dạng hình học của phân tử.
- Thế nào là liên kết đơn, liên kết đôi và liên kết ba.
- Thế nào là liên kết xích ma (σ), liên kết pi (π) ?

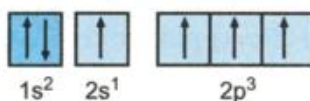
Sự lai hoá các obitan nguyên tử là khái niệm quan trọng nhất của thuyết hoá trị định hướng, được Pau-linh đưa ra năm 1931 để giải thích sự định hướng cũng như độ bền của liên kết ở nhiều hợp chất hữu cơ và vô cơ (đặc biệt là phức chất).

I - KHÁI NIỆM VỀ SỰ LAI HOÁ

Để hiểu được khái niệm về sự lai hoá các obitan, ta xét liên kết trong phân tử CH_4 . Công thức cấu tạo :



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



Trong phân tử CH_4 có 4 liên kết C-H tạo thành bởi 4 obitan hoá trị (mỗi obitan có một electron độc thân) của nguyên tử C (một obitan 2s và ba obitan 2p) xen phủ với 4 obitan 1s của 4 nguyên tử H. Như vậy, đáng lẽ trong phân tử CH_4 phải có 2 loại liên kết khác nhau là : 1 liên kết s-s và 3 liên kết p-s. Tuy nhiên, thực nghiệm cho biết 4 liên kết C-H trong phân tử CH_4 giống hệt nhau và tạo thành các góc liên kết đều bằng $109^\circ 28'$.

Để giải thích trường hợp trên đây và các trường hợp tương tự, các nhà hoá học Mĩ Slây-tơ(J. Slater) và Pau-linh đã đề ra *thuyết lai hoá*.

Theo thuyết này, khi nguyên tử C tham gia liên kết với bốn nguyên tử H tạo thành phân tử CH_4 thì một orbital 2s đã tổ hợp (“trộn lẫn”) với ba orbital 2p tạo thành bốn orbital mới giống hệt nhau, gọi là bốn orbital lai hoá sp^3 (hình 3.9). Bốn orbital lai hoá sp^3 xen phủ với bốn orbital 1s của bốn nguyên tử H tạo thành bốn liên kết C–H giống hệt nhau.

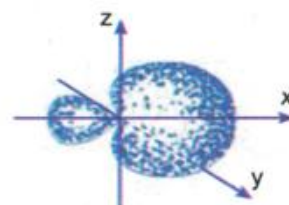
Như vậy : Sự lai hoá orbital nguyên tử là sự tổ hợp (“trộn lẫn”) một số orbital trong một nguyên tử để được từng ấy orbital lai hoá giống nhau nhưng định hướng khác nhau trong không gian.

Nguyên nhân của sự lai hoá là các orbital hoá 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.

II - CÁC KIỂU LAI HOÁ THƯỜNG GẶP

1. Lai hoá sp

Lai hoá sp là sự tổ hợp 1 orbital s với 1 orbital p của một nguyên tử tham gia liên kết tạo thành 2 orbital lai hoá sp nằm thẳng hàng với nhau hướng về 2 phía, đối xứng nhau (hình 3.6). Lai hoá sp được gặp trong phân tử BeH_2 (hình 3.7) và trong các phân tử C_2H_2 , BeCl_2 ,...



Hình 3.6. Dạng của một orbital lai hoá sp



Trạng thái lai hoá sp của nguyên tử berili

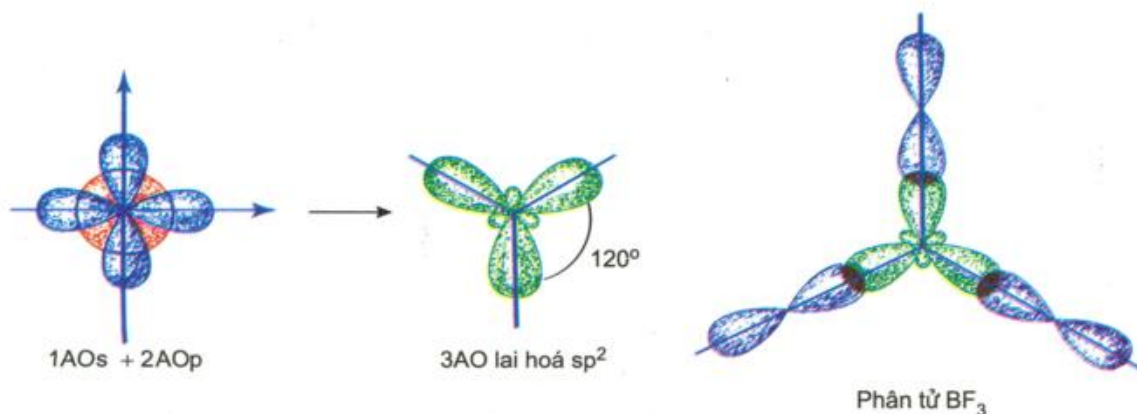
Sự xen phủ các orbital tạo liên kết Be–H

Hình 3.7. Sự lai hoá sp và sự xen phủ các orbital liên kết

Như thế, sự lai hoá sp là nguyên nhân dẫn đến tính thẳng hàng (góc liên kết bằng 180°) của các liên kết trong những phân tử nêu trên.

2. Lai hoá sp^2

Lai hoá sp^2 là sự tổ hợp 1 orbital s với 2 orbital p của một nguyên tử tham gia liên kết tạo thành 3 orbital lai hoá sp^2 nằm trong một mặt phẳng, định hướng từ tâm đến đỉnh của tam giác đều. Lai hoá sp^2 được gặp trong các phân tử BF_3 (hình 3.8), C_2H_4 ,...

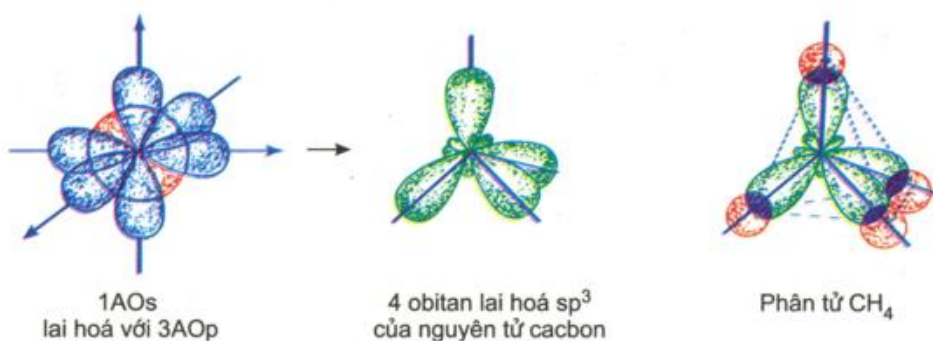


Hình 3.8. Sự lai hoá sp^2 và sự hình thành các liên kết trong phân tử BF_3

Sự lai hoá sp^2 là nguyên nhân dẫn đến các góc liên kết phẳng 120° trong BF_3 .

3. Lai hoá sp^3

Lai hoá sp^3 là sự tổ hợp 1 orbital s với 3 orbital p của một nguyên tử tham gia liên kết tạo thành 4 orbital lai hoá sp^3 định hướng từ tâm đến 4 đỉnh của hình tứ diện đều, các trục đối xứng của chúng tạo với nhau một góc $109^\circ 28'$ (hình 3.9). Trong các phân tử H_2O , NH_3 , CH_4 và các ankan, ở các nguyên tử O, N, C có lai hoá sp^3 .



Hình 3.9. Sự lai hoá sp^3 và sự hình thành các liên kết trong phân tử CH_4 (góc liên kết $H-C-H = 109^\circ 28'$)

Chú ý : Các orbital chỉ lai hoá được với nhau khi năng lượng của chúng xấp xỉ bằng nhau.

III - NHẬN XÉT CHUNG VỀ THUYẾT LAI HOÁ

Thuyết lai hoá có vai trò giải thích hơn là tiên đoán dạng hình học của phân tử. Thường chỉ sau khi biết phân tử có dạng hình học gì, có những góc liên kết xác định được bằng thực nghiệm là bao nhiêu, mới dùng sự lai hoá để giải thích. Nếu cho một phân tử hay ion, chẳng hạn AB_4 mà không có dữ kiện nào, thì thuyết lai hoá sẽ không tiên đoán được là có sự lai hoá tứ diện hay vuông phẳng.

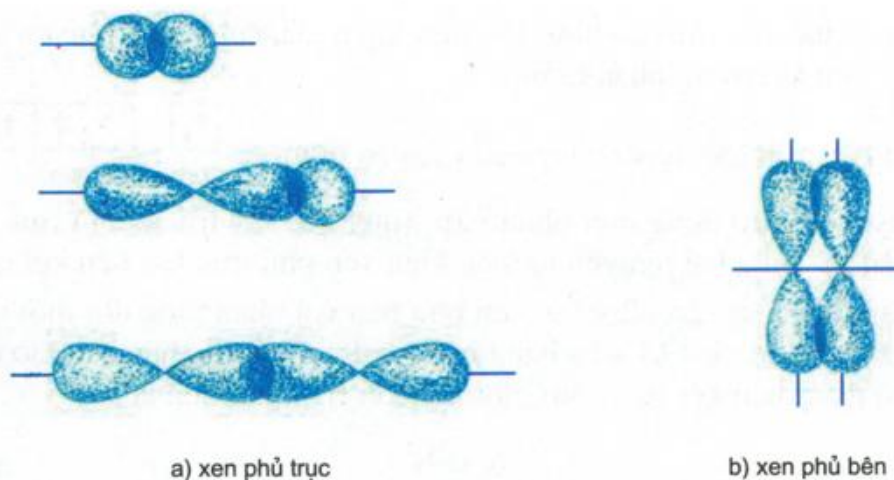
IV - SỰ XEN PHỦ TRỰC VÀ XEN PHỦ BÊN

1. Sự xen phủ trực

Sự xen phủ trong đó trục của các obitan tham gia liên kết trùng với đường nối tâm của hai nguyên tử liên kết gọi là sự xen phủ trực. Sự xen phủ trực tạo liên kết σ (hình 3.10a).

2. Sự xen phủ bên

Sự xen phủ trong đó trục của các obitan tham gia liên kết song song với nhau và vuông góc với đường nối tâm của hai nguyên tử liên kết được gọi là sự xen phủ bên. Sự xen phủ bên tạo liên kết π (hình 3.10b).



Hình 3.10. Sự xen phủ các obitan tạo liên kết

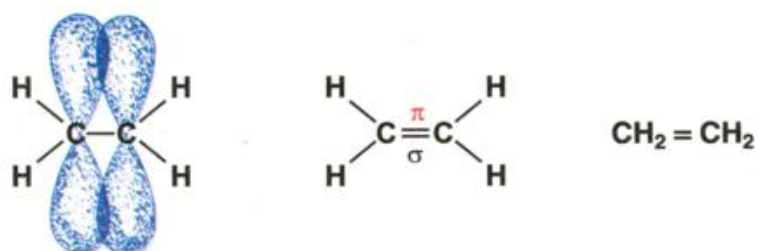
V - SỰ TẠO THÀNH LIÊN KẾT ĐƠN, LIÊN KẾT ĐÔI VÀ LIÊN KẾT BA

1. Liên kết đơn

Ta đã biết, mỗi cặp electron chung của hai nguyên tử được tính là một liên kết và được biểu diễn bằng một gạch nối giữa kí hiệu của hai nguyên tử đó. Các nguyên tử trong các phân tử đã xét như H – H, H – Cl đều liên kết với nhau bằng liên kết đơn. Liên kết đơn luôn luôn là liên kết σ , được tạo thành từ sự xen phủ trực và thường bền vững.

2. Liên kết đôi

Trong phân tử etilen (C_2H_4), mỗi nguyên tử cacbon có sự lai hoá giữa một obitan s với hai obitan p theo kiểu lai hoá sp^2 . Các obitan lai hoá tạo một liên kết σ giữa hai nguyên tử cacbon và hai liên kết σ với hai nguyên tử hidro. Mỗi nguyên tử cacbon còn một obitan p không tham gia lai hoá sẽ xen phủ bên với nhau tạo liên kết π . Liên kết giữa hai nguyên tử cacbon là liên kết đôi, gồm một liên kết σ và một liên kết π . Các liên kết π kém bền hơn so với liên kết σ (hình 3.11).



Hình 3.11. Liên kết trong phân tử etilen

3. Liên kết ba

Nguyên tử N có 5 electron lớp ngoài cùng, khi hình thành phân tử N_2 , mỗi nguyên tử góp 3 electron độc thân tạo thành ba liên kết. Người ta gọi đó là liên kết ba.

Chúng ta có thể dựa vào cấu hình electron lớp ngoài cùng của nguyên tử nitơ để giải thích liên kết trong phân tử nitơ.

Cấu hình electron lớp ngoài cùng của nguyên tử nitơ : $2s^2 \uparrow \uparrow \uparrow$ $2p^3$

Mỗi nguyên tử nitơ dùng một obitan $2p_z$ (quy ước lấy trục z làm trục liên kết) để tạo liên kết giữa hai nguyên tử theo kiểu xen phủ trục tạo liên kết σ .

Hai obitan p còn lại ($2p_x, 2p_y$) sẽ xen phủ bên với nhau từng đôi một tạo ra hai liên kết π . Mỗi liên kết kí hiệu bằng một gạch nối, công thức cấu tạo của phân tử nitơ có dạng liên kết ba : gồm một liên kết σ và hai liên kết π .



Công thức cấu tạo của phân tử nitơ.

Liên kết giữa hai nguyên tử được thực hiện bởi một liên kết σ và một hay hai liên kết π được gọi là liên kết bội.

BÀI TẬP

1. Thế nào là sự lai hoá ?
2. Lấy các thí dụ minh hoạ ba kiểu lai hoá đã học.
3. Mô tả liên kết hoá học trong phân tử BeH_2 , phân tử BF_3 , phân tử CH_4 theo thuyết lai hoá.
4. Mô tả sự hình thành liên kết trong các phân tử H_2O , NH_3 nhờ sự lai hoá sp^3 các AO hoá trị của các nguyên tử O và N. Hãy mô tả hình dạng của các phân tử đó.
5. Thế nào là sự xen phủ trục và sự xen phủ bên ? Lấy thí dụ minh hoạ.
6. Thế nào là liên kết σ , liên kết π và nêu tính chất của chúng ?
7. Thế nào là liên kết đơn ? Liên kết đôi ? Liên kết ba ? Cho thí dụ.
8. Mô tả sự hình thành các liên kết trong phân tử HCl , C_2H_4 , CO_2 , N_2 .