

LIÊN KẾT CỘNG HOÁ TRỊ

- Sự hình thành liên kết cộng hoá trị trong phân tử đơn chất và hợp chất như thế nào ?
- Sự phân cực trong liên kết cộng hoá trị như thế nào ?
- Phân loại các loại liên kết hoá học theo hiệu độ âm điện.

I - SỰ HÌNH THÀNH LIÊN KẾT CỘNG HOÁ TRỊ

1. Liên kết cộng hoá trị hình thành giữa các nguyên tử giống nhau. Sự hình thành đơn chất

a) Sự hình thành phân tử hiđro (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 H 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 hiđro có 1 cặp electron liên kết biểu thị bằng một gạch (-), đó là **liên kết đơn**.

b) Sự hình thành phân tử nitơ (N_2)

Cấu hình electron của N ($Z = 7$) $1s^2 2s^2 2p^3$, 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.



Hai nguyên tử N 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 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 tạo nên 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. Liên kết giữa các nguyên tử khác nhau. Sự hình thành hợp chất

a) Sự hình thành phân tử hidro clorua (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 khí cacbon đioxit (CO_2) (có cấu tạo thẳng⁽¹⁾) :

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

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

Trong phân tử CO_2 , nguyên tử C ở giữa 2 nguyên tử O và nguyên tử C 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 :



⁽¹⁾ Phân tử H_2O và NH_3 có cấu tạo góc (xem bài đọc thêm trang 67).

Như vậy, theo công thức electron, 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 cấu tạo thẳng nên hai liên kết đôi phân cực ($\text{C} = \text{O}$) triệt tiêu nhau, kết quả là phân tử này không bị phân cực.

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, hidro,... Các chất có cực như etanol (rượu etylic), đường,... tan nhiều trong dung môi có cực như nước. Phần lớn các chất không cực như lưu huỳnh, 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 - ĐỘ ÂM ĐIỆN VÀ LIÊN KẾT HOÁ HỌC

1. Quan hệ giữa liên kết cộng hoá trị không cực, liên kết cộng hoá trị có cực và liên kết ion

Trong phân tử, nếu cặp electron chung ở giữa 2 nguyên tử, ta có liên kết cộng hoá trị không cực. Nếu cặp electron chung lệch về một phía của một nguyên tử thì đó là liên kết cộng hoá trị có cực. Nếu cặp electron chung chuyển về một nguyên tử, ta sẽ có liên kết ion. Như vậy, liên kết ion có thể được coi là trường hợp riêng của liên kết cộng hoá trị.

2. Hiệu độ âm điện và liên kết hoá học

Để đánh giá loại liên kết trong phân tử hợp chất, người ta có thể dựa vào hiệu độ âm điện. Người ta phân loại một cách tương đối loại liên kết hoá học theo quy ước kinh nghiệm dựa vào thang độ âm điện của Pau-linh như sau⁽¹⁾ :

Hiệu độ âm điện	Loại liên kết
từ 0,0 đến < 0,4	Liên kết cộng hoá trị không cực
từ 0,4 đến < 1,7	Liên kết cộng hoá trị có cực
$\geq 1,7$	Liên kết ion

⁽¹⁾ Hiệu độ âm điện chỉ cho ta dự đoán về mặt lí thuyết loại liên kết hoá học trong phân tử. Dự đoán này còn phải được xác minh độ đúng đắn bởi nhiều phương pháp thực nghiệm khác.

Thí dụ : Trong NaCl, hiệu độ âm điện của Cl và Na là : $3,16 - 0,93 = 2,23$.

Vậy, liên kết giữa Na và Cl là liên kết ion.

Trong phân tử HCl, hiệu độ âm điện của Cl và H là : $3,16 - 2,20 = 0,96$.

Vậy, liên kết giữa H và Cl là liên kết cộng hoá trị có cực.

BÀI TẬP

1. Chọn câu 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 tạo nên giữa 2 nguyên tử bằng một hay nhiều cặp electron chung.
2. Chọn câu đúng trong các câu sau :
A. Trong liên kết cộng hoá trị, cặp electron lệch về phía nguyên tử có độ âm điện nhỏ hơn.
B. Liên kết cộng hoá trị có cực được tạo thành giữa 2 nguyên tử có hiệu độ âm điện từ 0,4 đến nhỏ hơn 1,7.
C. Liên kết cộng hoá trị không cực được tạo nên từ các nguyên tử khác hẳn nhau về tính chất hoá học.
D. Hiệu độ âm điện giữa 2 nguyên tử lớn thì phân tử phân cực yếu.
3. Độ âm điện của một nguyên tử đặc trưng cho
A. khả năng hút electron của nguyên tử đó khi hình thành liên kết hoá học.
B. khả năng nhường electron của nguyên tử đó cho nguyên tử khác.
C. khả năng tham gia phản ứng mạnh hay yếu của nguyên tử đó.
D. khả năng nhường proton của nguyên tử đó cho nguyên tử khác.
Chọn đáp án đúng.
4. Thế nào là liên kết ion, liên kết cộng hoá trị không cực, liên kết cộng hoá trị có cực ?
Cho thí dụ minh hoạ.
5. Dựa vào hiệu độ âm điện của các nguyên tố, hãy cho biết loại liên kết trong các chất sau đây : AlCl_3 , CaCl_2 , CaS , Al_2S_3 .
(Lấy giá trị độ âm điện của các nguyên tố ở bảng 6, trang 45.)
6. Viết công thức electron và công thức cấu tạo của các phân tử sau :
 Cl_2 , CH_4 , C_2H_4 , C_2H_2 , NH_3 .
7. X, A, 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 liên kết hoá học có thể có giữa các cặp X và A, A và Z, X và Z.



Bài đọc thêm

§ 1. SỰ XEN PHỦ CÁC OBITAN NGUYÊN TỬ SỰ LAI HOÁ CÁC OBITAN NGUYÊN TỬ

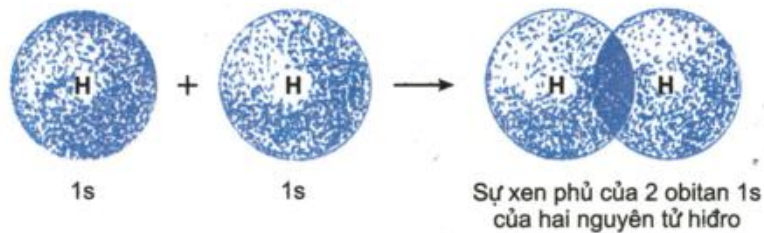
I - SỰ XEN PHỦ CÁC OBITAN NGUYÊN TỬ

Theo quan điểm hiện đại, khi 2 nguyên tử lại gần nhau, nếu xác suất tìm thấy electron ở giữa 2 nguyên tử đó tăng lên thì có liên kết hoá học, nếu nó bằng không thì không có liên kết hoá học.

Để giải thích sự tạo thành liên kết hoá học nói trên, người ta đưa ra khái niệm sự xen phủ các obitan nguyên tử. Có hai kiểu xen phủ :

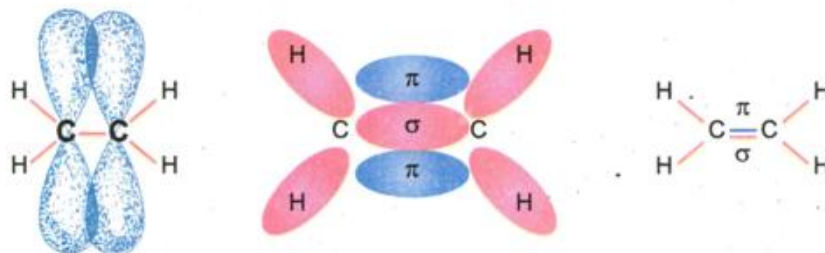
– Xen phủ trực : Sự xen phủ xảy ra trên trục nối giữa hai hạt nhân nguyên tử. Sự xen phủ này tạo ra liên kết σ (xích ma).

Thí dụ : Sự xen phủ trực giữa 2 obitan s của 2 nguyên tử hydro tạo liên kết σ trong phân tử H_2 .



– Xen phủ bên : Sự xen phủ thực hiện ở hai bên trục nối giữa hai hạt nhân nguyên tử. Sự xen phủ này tạo ra liên kết π (pi).

Thí dụ : Xen phủ bên trong phân tử C_2H_4 .



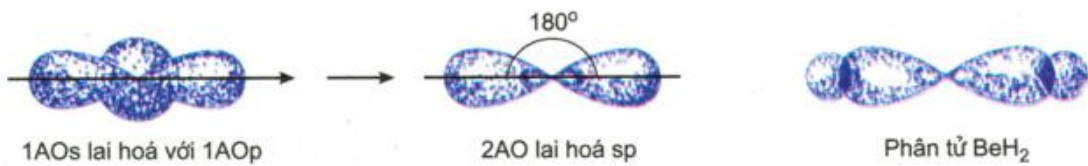
Sự xen phủ trực giữa hai nguyên tử lớn hơn xen phủ bên nên liên kết σ bền hơn liên kết π .

II - SỰ LAI HOÁ CÁC OBITAN NGUYÊN TỬ

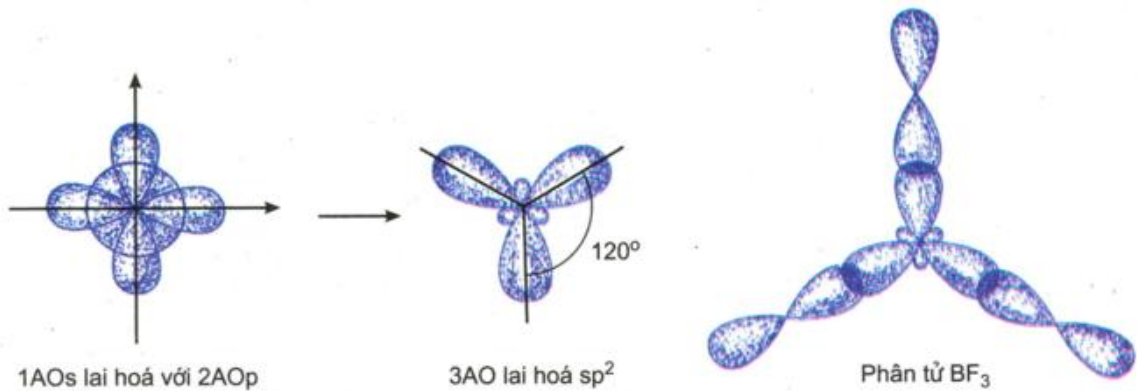
Trong thực tế, các nguyên tử liên kết cộng hoá trị với nhau trong phân tử không chỉ nằm trên một đường thẳng mà còn phân bố trên mặt phẳng và trong không gian. Để giải thích được liên kết trong các phân tử đó, Pau-ling là người đầu tiên đưa ra khái niệm sự lai hoá các obitan nguyên tử.

Sự lai hoá các obitan nguyên tử là sự tổ hợp (trộn lẫn) một số obitan nguyên tử trong một nguyên tử để được từng ấy obitan lai hoá giống nhau nhưng định hướng khác nhau trong không gian. Các obitan tham gia lai hoá phải có năng lượng không khác nhau nhiều.

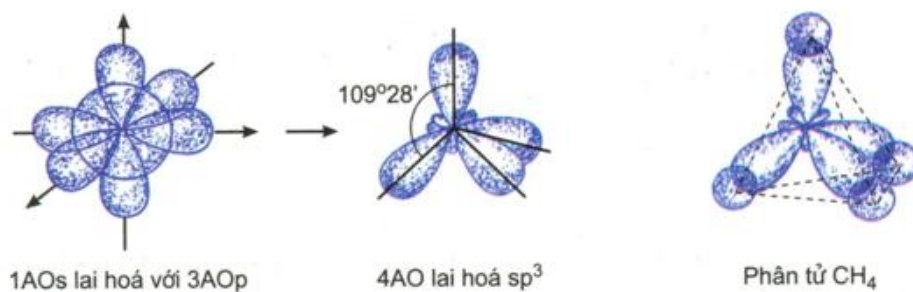
Thí dụ 1 : Lai hoá thẳng sp trong phân tử BeH_2 .



Thí dụ 2 : Lai hoá sp^2 trong phân tử BF_3 .



Thí dụ 3 : Lai hoá sp^3 trong phân tử CH_4 .



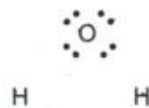
Việc chọn dạng lai hoá nào để giải thích sự liên kết trong phân tử tùy thuộc vào cấu trúc hình học thực nghiệm của phân tử. Thí dụ, phân tử metan CH_4 có cấu trúc tứ diện, ta chọn 4 AO lai hoá sp^3 của nguyên tử cacbon để giải thích sự xen phủ trực của chúng với 4AOs của 4 nguyên tử H tạo ra 4 liên kết σ trong phân tử metan với góc liên kết $109^\circ 28'$. Còn trong phân tử BeF_3 có cấu trúc tam giác đều, ta lại phải chọn lai hoá sp^2 để giải thích góc liên kết trong phân tử đó là 120° ...

Orbitan lai hoá chỉ xen phủ trực để tạo liên kết σ .

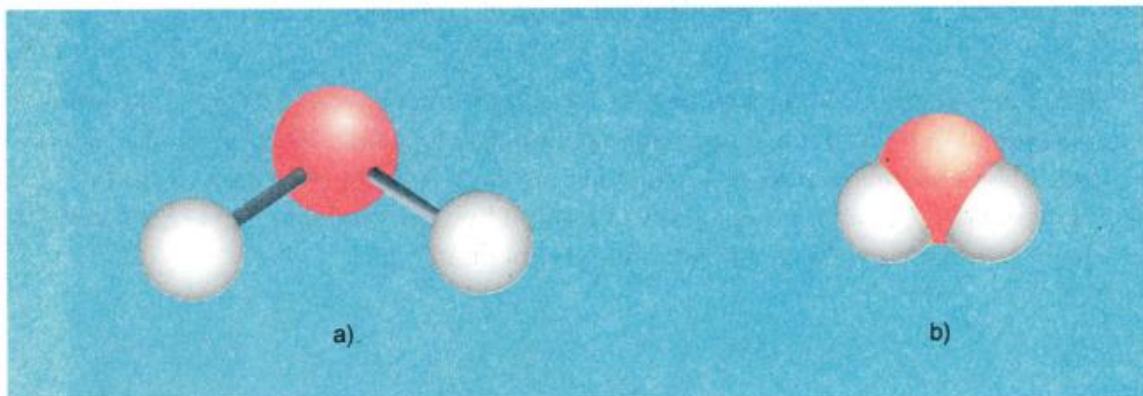
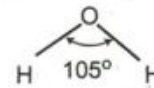
§ 2. SỰ TẠO THÀNH PHÂN TỬ H_2O , NH_3 (có cấu tạo góc)

I - PHÂN TỬ NƯỚC (H_2O)

Công thức electron



Công thức cấu tạo

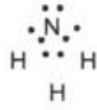


Hình 3.2. Mô hình rỗng (a) và đặc (b) của phân tử nước

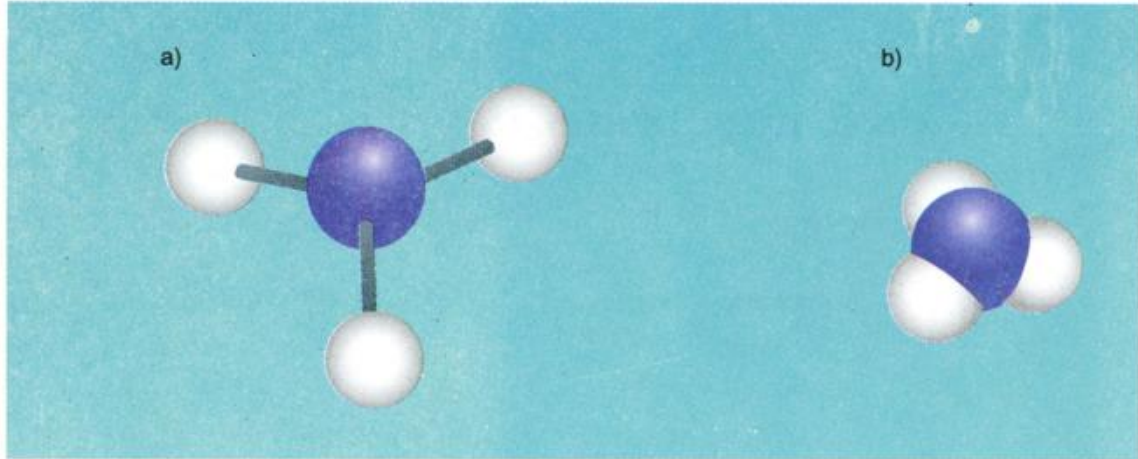
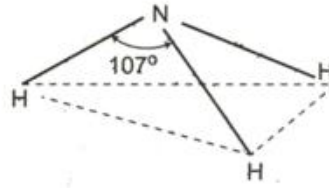
Cấu hình electron của nguyên tử H là $1s^1$, của nguyên tử O là $1s^2 2s^2 2p^4$. Khi tạo thành phân tử H_2O , mỗi nguyên tử H góp chung 1 electron với nguyên tử O và nguyên tử O góp chung 1 electron với mỗi nguyên tử H để tạo ra hai liên kết cộng hoá trị O-H, góc thực nghiệm là 105° . Độ âm điện của O (3,44) lớn hơn độ âm điện của H (2,20) nên liên kết O-H bị phân cực. Kết quả là phân tử H_2O bị phân cực.

II - PHÂN TỬ AMONIAC (NH₃)

Công thức electron



Công thức cấu tạo



Hình 3.3. Mô hình rỗng (a) và đặc (b) của phân tử amoniac

Cấu hình electron của nguyên tử N là $1s^2 2s^2 2p^3$, của nguyên tử H là $1s^1$. Khi hình thành phân tử NH₃, nguyên tử N góp chung với mỗi nguyên tử H 1 electron và mỗi nguyên tử H góp chung với nguyên tử N 1 electron tạo ra 3 liên kết cộng hoá trị N-H, góc thực nghiệm là 107°. Độ âm điện của N (3,04) lớn hơn độ âm điện của H (2,20) nên liên kết N-H bị phân cực. Kết quả là phân tử NH₃ bị phân cực.

Phân tử có cực hay không có cực không những phụ thuộc vào hiệu độ âm điện của các nguyên tử mà còn phụ thuộc vào góc liên kết trong phân tử đó.

Khi không cần nói đến cấu tạo không gian của phân tử, ta có thể viết công thức cấu tạo của H₂O và NH₃ trên mặt phẳng đơn giản như sau :

