

Bài 18

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

3.17. Sự lai hoá giữa các obitan 2s và 3 obitan 2p của nguyên tử C tạo ra 4 obitan lai hoá (sp^3) giống hệt nhau hướng về 4 đỉnh của một tứ diện đều. Trên mỗi obitan lai hoá này có 1 electron độc thân sẽ ghép đôi với một electron độc thân của một nguyên tử hydro. Bốn liên kết cộng hoá trị được hình thành. Góc liên kết là góc tứ diện nên có giá trị bằng $109^{\circ}28'$.

3.18. Liên kết σ là liên kết được hình thành đầu tiên khi một phân tử tạo thành. Nếu theo quan điểm xen phủ obitan thì liên kết σ tạo ra do sự xen phủ trực của obitan liên kết trùng với đường nối hai hạt nhân nguyên tử liên kết. Phần obitan xen phủ này không bị thay đổi khi quay một obitan xung quanh trục liên kết và giữ nguyên obitan kia. Liên kết σ thường được tạo thành do sự xen phủ của hai obitan s với nhau, giữa một obitan s và một obitan p hay xen phủ đối đầu của hai obitan p. Liên kết trong phân tử H_2 tạo ra là do sự xen phủ giữa hai obitan 1s. Liên kết trong các phân tử halogen như F_2 , Cl_2 , ... do sự xen phủ đối đầu giữa hai obitan p. Liên kết trong phân tử HF tạo thành do sự xen phủ của obitan 1s của H và obitan 2p của F. Các liên kết này đều là liên kết σ .

Liên kết π là liên kết thường được hình thành sau khi đã có liên kết σ trong phân tử. Nếu theo quan điểm xen phủ obitan thì liên kết π tạo ra do sự xen phủ giữa 2 obitan ở hai bên trên trục nối hai hạt nhân nguyên tử. Sự xen phủ này bị thay đổi khi quay một obitan xung quanh trục liên kết và giữ nguyên obitan kia. Liên kết π là liên kết thường được tạo thành do sự xen phủ bên của hai obitan p song song với nhau và vuông góc với đường nối hai hạt nhân. Thí dụ có hai liên kết π và 1 liên kết σ trong phân tử nitơ.

3.19. Nguyên tử Be có 2 electron trên phân lớp 2s. Dưới tác dụng của điều kiện phản ứng một electron chuyển sang trạng thái 2p và tạo ra nguyên tử ở trạng thái kích thích có 2 electron độc thân. Hai electron độc thân của nguyên tử Be sẽ ghép với hai electron độc thân của hai nguyên tử H để tạo ra hai liên kết với hai cặp electron. Hai cặp electron liên kết này đẩy nhau và ở xa nhau nhất là hướng về hai phía của 1 đường thẳng. Phân tử BeH_2 là phân tử thẳng.

Theo quan điểm lai hoá 1 obitan 2s và 1 obitan 2p của nguyên tử Be lai hoá với nhau tạo ra hai obitan lai hoá (sp) mới hướng về hai phía của đường thẳng. Mỗi obitan lai hoá có 1 electron độc thân xen phủ với một obitan nguyên tử 1s có một electron độc thân của một nguyên tử H tạo ra một liên kết cộng hoá trị. Như vậy góc liên kết trong phân tử BeH_2 bằng 180° .

3.20. D.

3.21. A.

3.22. C.

3.23. Nguyên tử N có cấu hình electron : $1s^2 2s^2 2p^3$ với 3 electron độc thân trên 3 obitan 2p. Khi nguyên tử N ở trạng thái lai hoá sp^3 thì từ obitan 2s và 3 obitan 2p thu được 4 obitan lai hoá giống nhau. Năm electron hoá trị được phân bố vào 4 obitan lai hoá nên sẽ có 1 obitan lai hoá có hai electron, còn ba obitan lai hoá kia có một electron trên mỗi obitan. Ba obitan lai hoá chứa electron độc thân sẽ xen phủ với 3 obitan có electron độc thân của ba nguyên tử H tạo ra 3 liên kết σ . Lẽ ra góc liên kết sẽ là $109^{\circ}28'$ như phân tử metan, nhưng vì đám mây có cặp electron không liên kết chỉ bị hút về một phía hạt nhân N nên chiếm không gian lớn hơn làm góc liên kết giảm đi còn 107° .

3.24. Mỗi nguyên tử C ở trạng thái lai hoá sp (lai hoá thẳng). Mỗi nguyên tử C dùng một obitan lai hoá sp để xen phủ với nhau tạo ra liên kết σ_{C-C} . Mỗi nguyên tử C dùng obitan lai hoá sp còn lại để xen phủ với obitan 1s của một nguyên tử H tạo ra liên kết σ_{C-H} . Mỗi nguyên tử C còn lại hai obitan 2p song song từng đôi một. Chúng xen phủ bên với nhau tạo ra 2 liên kết π_{C-C} . Như vậy trong phân tử C_2H_2 có 3 liên kết σ và 2 liên kết π . Công thức cấu tạo của C_2H_2 có dạng sau : $H - C \equiv C - H$. Hình ảnh về các liên kết trong C_2H_2 được thể hiện trên hình sau:

