

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

### MỤC TIÊU BÀI HỌC

*Học sinh hiểu :*

- 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.
  - Liên kết  $\sigma$ , liên kết  $\pi$  được hình thành như thế nào ?
  - Thế nào là liên kết đơn, liên kết đôi, liên kết ba ?

### CHUẨN BỊ

- Tranh vẽ các kiểu lai hoá các obitan như SGK (hình 3.6 ; 3.7 ; 3.8 ; 3.9).
- Tranh vẽ sự xen phủ trực, xen phủ bên của các obitan (hình 3.10 SGK).
- Tranh vẽ mô tả sự hình thành phân tử  $C_2H_4$  (hình 3.11 SGK).

## GỢI Ý TỔ CHỨC HOẠT ĐỘNG DẠY HỌC

Đây là một bài học khó đối với HS. Do đó, GV nên trình bày thật đơn giản, dễ hiểu. Mục tiêu chủ yếu là giới thiệu một số kiểu lai hoá cơ bản và nêu lên được ý nghĩa của hiện tượng lai hoá là để giải thích dạng hình học của phân tử.

### I. KHÁI NIỆM VỀ SỰ LAI HOÁ

#### Hoạt động 1 :

GV trình bày một cách ngắn gọn nguyên nhân xuất hiện khái niệm lai hoá, lai hoá là gì, đặc điểm của hiện tượng lai hoá và obitan lai hoá :

– Để giải thích dạng hình học của phân tử trong nhiều trường hợp người ta phải dùng đến khái niệm về sự lai hoá các obitan nguyên tử.

– Hiện tượng tổ hợp các obitan của cùng một nguyên tử, có năng lượng gần nhau để hình thành các obitan có năng lượng như nhau gọi là hiện tượng lai hoá.

– Đặc điểm của các obitan lai hoá :

+ Có kích thước và hình dạng hoàn toàn giống nhau, chỉ khác nhau về phương phân bố trong không gian

+ Có bao nhiêu obitan nguyên tử tham gia tổ hợp, sẽ tạo nên bấy nhiêu obitan lai hoá.

### II. CÁC KIỂU LAI HOÁ THƯỜNG GẶP

#### 1. Lai hoá sp

#### Hoạt động 2 :

- GV sử dụng tranh vẽ sự hình thành các obitan lai hoá sp (hình 3.7 SGK) mô tả sự hình thành phân tử BeH<sub>2</sub> để giới thiệu kiểu lai hoá sp : đó là sự tổ hợp của một obitan s và một obitan p của nguyên tử Be, tạo thành 2 obitan lai hoá sp. Hai obitan lai hoá sp giống hệt nhau, cùng nằm trên một đường thẳng nhưng ngược chiều. Vì vậy, kiểu lai hoá này còn được gọi là *lai hoá đường thẳng*.

Hai obitan lai hoá sp xen phủ với 2 obitan 1s của 2 nguyên tử hidro. Phân tử BeH<sub>2</sub> có dạng đường thẳng.

- GV bổ sung : ngoài phân tử BeH<sub>2</sub>, trong một số phân tử như C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>, BeCl<sub>2</sub> ... cũng có hiện tượng lai hoá sp.

#### 2. Lai hoá sp<sup>2</sup>

#### Hoạt động 3 :

- GV sử dụng tranh (hình 3.8 SGK) kết hợp với việc mô tả phân tử BF<sub>3</sub>, để giới thiệu kiểu lai hoá sp<sup>2</sup> : đó là *sự tổ hợp của một obitan s và hai obitan p*

của nguyên tử B, tạo thành 3 obitan lai hoá  $sp^2$ . Ba obitan lai hoá  $sp^2$  giống hệt nhau, hướng về các đỉnh của một tam giác đều. Góc tạo bởi các trục của hai obitan lai hoá (góc lai hoá) là  $120^\circ$ . Kiểu lai hoá này còn được gọi là lai hoá tam giác.

Ba obitan lai hoá  $sp^2$  xen phủ với 3 obitan 2p chứa electron độc thân của 3 nguyên tử F. Phân tử  $BF_3$  có dạng tam giác.

- GV bổ sung : ngoài phân tử  $BF_3$ , trong một số phân tử như  $C_2H_4$ ,  $AlCl_3$  ... cũng có hiện tượng lai hoá  $sp^2$ .

### 3. Lai hoá $sp^3$

#### Hoạt động 4 :

- GV sử dụng tranh (hình 3.9 SGK) kết hợp với việc mô tả phân tử  $CH_4$  để giới thiệu kiểu lai hoá  $sp^3$  : đó là sự tổ hợp của một obitan s và ba obitan p của nguyên tử C, tạo thành 4 obitan lai hoá  $sp^3$ . Bốn obitan lai hoá  $sp^3$  giống hệt nhau, hướng về các đỉnh của một tứ diện đều. Góc lai hoá  $sp^3$  là  $109^\circ 28'$ . Kiểu lai hoá này còn được gọi là lai hoá tứ diện.

Bốn obitan lai hoá  $sp^3$  xen phủ với 4 obitan 1s của 4 nguyên tử hiđro. Phân tử  $CH_4$  có dạng tứ diện đều.

- GV bổ sung : ngoài phân tử  $CH_4$ , trong một số phân tử như  $H_2O$ ,  $NH_3$  ... cũng có hiện tượng lai hoá  $sp^3$

GV lưu ý HS : chỉ có những obitan có năng lượng xấp xỉ nhau mới có thể lai hoá với nhau được.

## III. NHẬN XÉT CHUNG VỀ THUYẾT LAI HOÁ

#### Hoạt động 5 :

GV giải thích cho HS thấy rõ thuyết lai hoá có ý nghĩa là để giải thích dạng hình học của phân tử.

*Thí dụ :* Phân tử  $BeH_2$  và phân tử  $H_2O$  cùng có 3 nguyên tử trong phân tử, trong khi phân tử  $BeH_2$  có dạng đường thẳng thì phân tử  $H_2O$  có dạng góc, giải thích tại sao ?

## IV. SỰ XEN PHỦ TRỤC VÀ XEN PHỦ BÊN

### 1. Sự xen phủ trực

#### Hoạt động 6 :

- GV sử dụng tranh vẽ sự xen phủ các obitan s-s, s-p, p-p (hình 3.10a SGK) để phân tích đặc điểm của sự xen phủ này.

Sự xen phủ của các obitan này có những đặc điểm giống nhau : trục của obitan tham gia liên kết trùng với đường nối tâm của hai nguyên tử liên kết, đám mây electron liên kết có đối xứng quay xung quanh trục liên kết. Người ta gọi đó là sự xen phủ trực. Liên kết được tạo bởi sự xen phủ trực là liên kết  $\sigma$ .

- HS rút ra kết luận : Liên kết  $\sigma$  là liên kết trong đó trục của các obitan liên kết trùng với đường nối tâm của hai nguyên tử liên kết.

## 2. Sự xen phủ bên

### Hoạt động 7 :

- HS quan sát tranh (hình 3.10b SGK) để phát hiện sự khác nhau giữa hai kiểu xen phủ.
- GV chốt lại các đặc điểm của sự xen phủ bên :
  - Trục của obitan liên kết song song với nhau và vuông góc với đường nối tâm hai nguyên tử liên kết.
  - Liên kết được hình thành do sự xen phủ bên là liên kết  $\pi$ .
  - Liên kết  $\pi$  kém bền hơn liên kết  $\sigma$ .

## V. SỰ TẠO THÀNH LIÊN KẾT ĐƠN, LIÊN KẾT ĐÔI VÀ LIÊN KẾT BA

### 1. Liên kết đơn

#### Hoạt động 8 :

- GV yêu cầu HS nhắc lại sự hình thành liên kết giữa các nguyên tử trong phân tử H–H, H–Cl, Cl–Cl : Các nguyên tử trong các phân tử đó liên kết với nhau bằng một cặp electron chung.
- GV thông báo : Liên kết được tạo thành bằng một cặp electron chung được gọi là liên kết đơn.
- GV yêu cầu HS dựa vào hình ảnh xen phủ các obitan để tạo thành liên kết trong các phân tử H<sub>2</sub>, HCl, Cl<sub>2</sub> rút ra nhận xét về đặc điểm của kiểu liên kết : Theo quan niệm về sự xen phủ các obitan nguyên tử đó là liên kết  $\sigma$ .
- GV kết luận : *Liên kết đơn là liên kết được tạo thành bằng một cặp electron chung. Liên kết đơn bao giờ cũng là liên kết  $\sigma$ .*

### 2. Liên kết đôi

#### Hoạt động 9 :

- GV hướng dẫn HS dựa vào quy tắc bát tử mô tả sự hình thành phân tử C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> để đi đến kết luận là các nguyên tử C trong các phân tử trên liên kết với nhau bằng hai cặp electron chung (viết công thức electron để thấy rõ 2 cặp electron chung).

- GV thông báo : Liên kết được tạo thành bằng hai cặp electron chung được gọi là liên kết đôi.
- GV hướng dẫn HS nghiên cứu SGK và quan sát tranh vẽ sự xen phủ các obitan tạo thành phân tử etilen (hình 3.11 SGK) để rút ra nhận xét :
  - + Trạng thái lai hoá của nguyên tử C trong phân tử etilen.
  - + Sự xen phủ của các obitan lai hoá của 2 nguyên tử C với nhau và với nguyên tử H.
  - + Sự xen phủ của obitan không lai hoá của 2 nguyên tử C.
- GV kết luận : Liên kết đôi là liên kết được tạo thành bằng hai cặp electron chung, gồm một liên kết  $\sigma$  và một liên kết  $\pi$ .

### 3. Liên kết ba

#### Hoạt động 10 :

- GV hướng dẫn HS dựa vào quy tắc bát tử mô tả sự hình thành phân tử  $N_2$  để đi đến kết luận là hai nguyên tử N trong phân tử nitơ liên kết với nhau bằng ba cặp electron chung.
- GV bổ sung : Liên kết được tạo thành bằng ba cặp electron chung được gọi là liên kết ba.
- Theo quan niệm về sự xen phủ các obitan nguyên tử, HS rút ra đặc điểm của liên kết ba giữa hai nguyên tử nitơ trong phân tử nitơ.
- GV kết luận : *Liên kết ba là liên kết tạo thành bằng ba cặp electron chung, gồm một liên kết  $\sigma$  và hai liên kết  $\pi$ .*

*Liên kết đôi và liên kết ba còn được gọi là liên kết bội.*

#### Hoạt động 10 : Củng cố bài học

- Sử dụng bài tập trong SGK để củng cố những kiến thức trọng tâm của bài :
  - + Khái niệm về sự lai hoá : Bài 1.
  - + Các kiểu lai hoá thường gặp : Bài 2.
  - + Giải thích dạng hình học của phân tử : Bài 3.
  - + Sự hình thành liên kết  $\sigma$  và liên kết  $\pi$  : Bài 8.
  - + Liên kết đơn, liên kết đôi, liên kết ba : Bài 8.

## □ HƯỚNG DẪN GIẢI VÀ ĐÁP SỐ BÀI TẬP TRONG SGK

1. Trả lời như SGK tr.79.
2. Trả lời như SGK : lai hoá sp (phân tử  $BeH_2$ ),  $sp^2$  (phân tử  $BF_3$ ),  $sp^3$  (phân tử  $CH_4$ ).
3. SGK tr. 79, 80.

#### 4. Phân tử $H_2O$ :

- 1 obitan 2s và 3 obitan 2p của nguyên tử O lai hoá với nhau tạo nên 4 obitan lai hoá  $sp^3$ , giống hệt nhau, hướng về 4 đỉnh của hình tứ diện đều. Trên 2 obitan lai hoá có electron độc thân ; còn trên hai obitan lai hoá khác có cặp electron ghép đôi.
- Hai obitan lai hoá chứa electron độc thân xen phủ với 2 obitan 1s chứa electron độc thân của 2 nguyên tử hidro, tạo nên 2 liên kết  $\sigma$ .

Phân tử  $H_2O$  có dạng góc.

#### Phân tử $NH_3$ :

- 1 obitan 2s và 3 obitan 2p của nguyên tử N lai hoá với nhau tạo nên 4 obitan lai hoá  $sp^3$ , giống hệt nhau, hướng về 4 đỉnh của hình tứ diện đều. Trên 3 obitan lai hoá có electron độc thân. Trên obitan lai hoá còn lại có cặp electron ghép đôi.
- 3 obitan lai hoá chứa electron độc thân xen phủ với 3 obitan 1s chứa electron độc thân của 3 nguyên tử hidro, tạo nên 3 liên kết  $\sigma$ .
- Phân tử  $NH_3$  có dạng hình chóp tam giác.

5. Xem SGK.

6. Xem SGK.

7. Xem SGK.

#### 8. – Phân tử $HCl$ :

Obitan 1s chứa electron độc thân của nguyên tử hidro xen phủ với obitan 3p chứa electron độc thân của nguyên tử clo, tạo thành 1 liên kết  $\sigma$ .

– Phân tử  $C_2H_4$  (SGK trang 81).

#### – Phân tử $CO_2$ :

Phân tử  $CO_2$  có dạng đường thẳng ; 1 obitan 2s và 1 obitan 2p của nguyên tử cacbon lai hoá tạo thành 2 obitan lai hoá  $sp$ . Hai obitan lai hoá chứa electron độc thân của nguyên tử C xen phủ trực với 2 obitan 2p chứa electron độc thân của 2 nguyên tử oxi, tạo thành 2 liên kết  $\sigma$ . Hai obitan 2p không lai hoá của nguyên tử cacbon có chứa electron độc thân xen phủ bên với 2 obitan 2p chứa electron độc thân còn lại của 2 nguyên tử oxi, tạo nên 2 liên kết  $\pi$ .

#### – Phân tử $N_2$ :

Mỗi nguyên tử nitơ có 3 electron độc thân nằm trên 3 obitan 2p ; 2 obitan 2p của 2 nguyên tử nitơ xen phủ trực, tạo nên 1 liên kết  $\sigma$ . Các obitan p còn lại xen phủ bên với nhau từng đôi một tạo nên 2 liên kết  $\pi$ . Như vậy, 2 nguyên tử nitơ liên kết với nhau bằng 1 liên kết  $\sigma$  và 2 liên kết  $\pi$ .

## **Thông tin bổ sung**

Khái niệm lai hoá được Pauli đưa ra trong khuôn khổ của thuyết liên kết hoá trị. Theo ông, khi tham gia vào liên kết các electron hoá trị của một nguyên tử không tham gia một cách riêng rẽ với nhau, mà các obitan của chúng trộn lẫn với nhau thành những tổ hợp tốt nhất để có thể tạo thành liên kết bền hơn. *Hiện tượng tổ hợp của các obitan nguyên tử trong một nguyên tử được gọi là hiện tượng lai hoá.*

Các obitan tương đương với nhau được tổ hợp nên gọi là obitan lai hoá. Những obitan lai hoá của một nguyên tử có kích thước, hình dạng hoàn toàn giống nhau, chỉ khác nhau về hướng trong không gian. Đặc điểm hình học của các obitan lai hoá là có một đầu nở rộng, còn đầu kia bị thu hẹp (hình 3.6 SGK).

*Số obitan lai hoá bằng số obitan tham gia lai hoá.*

Các obitan tham gia lai hoá phải có *năng lượng gần bằng nhau*.

Để giải thích dạng hình học khác nhau của các phân tử, người ta phải dùng đến khái niệm lai hoá.

Thí dụ : Xét phân tử BeCl<sub>2</sub>. Be (Z = 4) : 1s<sup>2</sup>2s<sup>2</sup>. Ở trạng thái kích thích, một electron đã ghép đôi trên obitan 2s tách ra, chuyển sang obitan 2p. Khi đó, nguyên tử Be có 2 electron độc thân : một trên obitan 2s còn một trên obitan 2p. Vì 2 obitan tham gia liên kết nằm trên 2 obitan có hình dạng, năng lượng khác nhau, người ta có thể nghĩ rằng hai liên kết Cl – Be phải khác nhau. Tuy nhiên trên thực tế, hai liên kết này hoàn toàn đồng nhất, nằm trên cùng một đường thẳng, hướng về hai phía khác nhau. Điều này chỉ có thể được giải thích bằng hiện tượng lai hoá các obitan nguyên tử. Trước khi tham gia liên kết, obitan 2s và 2p của nguyên tử Be tổ hợp lại, tạo thành hai obitan hoàn toàn tương đương nhau, nằm trên cùng một đường thẳng, nhưng ngược chiều. Người ta gọi đó là obitan lai hoá sp, lai hoá đường thẳng. Hai obitan lai hoá sp này che phủ với 2 obitan 2p có chứa electron độc thân của 2 nguyên tử clo, tạo thành liên kết bền vững hơn so với các liên kết tạo bởi các obitan s và p không lai hoá. Bằng cách tương tự, người ta giải thích được dạng tam giác đều của phân tử BF<sub>3</sub> là do hiện tượng lai hoá sp<sup>2</sup> của nguyên tử B, hay dạng tứ diện đều của phân tử CH<sub>4</sub> là do hiện tượng lai hoá sp<sup>3</sup> của nguyên tử C.