**CHUYÊN ĐỀ: CẤU TRÚC PHÂN TỬ VÀ LIÊN KẾT HOÁ HỌC**

**BỒI DƯỠNG HỌC SINH GIỎI HÓA LỚP 10**

**Ví dụ1:**

a. Nguyên tử nguyên tố X có tổng số hạt cơ bản là 92. Trong đó , số hạt mang điện nhiều hơn hạt không mang điện là 24. Viết cấu hình electron của X và các ion đơn nguyên tử tương đương của X. Giải thích tại sao ion X2+ có khả năng tạo phức với NH3. Viết công thức ion phức của X2+ với NH3.

b. Giải thích tại sao có CO32- mà không có CO42-, trong khi đó có SO32- ,SO42-.

(Câu 1 ý b, c đề thi chọn HSG cấp tỉnh 2012-2013 tỉnh Thanh Hoá)

**Hướng dẫn**:

a.

**\*** Gọi số tổng số hạt p; n; e tương ứng của X là Z; N; E.

=> E=Z=29; N=34 => Là đồng vị 

Cấu hình e: Cu [Ar]3d104s1 hoặc 1s22s22p63s23p63d104s1;

Cu+:[Ar]3d10;

Cu2+:[Ar]3d9.

**\*** Cu2+ có khả năng tạo phức với NH3:

- do có nhiều obitan hóa trị, trong đó có obitan trống.

=> Cu2+ có khả năng tạo liên kết cho-nhận với cặp e của NH3

=> Công thức phức [Cu(NH3)4]2+

b.

- Trong CO32- nguyên tử C không còn electron chưa tạo liên kết nên không thể tạo liên kết thêm với nguyên tử oxi thứ 4.

- Trong SO32- nguyên tử S còn 1 cặp electron chưa tạo liên kết nên có thể tạo liên kết thêm với nguyên tử oxi thứ 4.

**Ví dụ 2:** Viết công thức Lewis, dự đoán dạng hình học của các phân tử và ion sau (có giải thích) và trạng thái lai hóa của nguyên tử trung tâm? SO2; SO3; SO42- ; SF4; SCN-.

( Câu 2, đề thi HSG duyên hải bắc bộ lần 5 năm 2011, hoá học 10)

**Hướng dẫn**

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| Phân tử | Công thức Lewis | Công thức cấu trúc | Dạng lai hóa của NTTT | Dạng hình học của phân tử |
| SO2 |  | AX2E | sp2 | Gấp khúc |
| SO3 |  | AX3 | sp2 | Tam giác đều |
| SO42- |  | AX4 | sp3 | Tứ diện |
| SF4 |  | AX4E | sp3d | Cái bập bênh |
| SCN- |  | AX2 | Sp | Đường thẳng |

**Ví dụ 3:** Viết công thức Liuyt, dự đoán cấu trúc phân tử, góc liên kết của các phân tử sau: SF2, SF6, S2F4. (Câu 1, đề thi HSG Thái Nguyên 2011-2012)

**Hướng dẫn:**

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Phân tử | SF2 | SF6 | S2F4 |
| Công thức Liuyt | F  S  F |  | F  F S S’ F  F |
| Trạng thái lai hoá của S | sp3 | sp3d2 | S: sp3d (MX4E)  S’: sp3 (MX2E2) |
| Hình học phân tử | Chữ V | Bát diện đều | Cái bập bênh nối với chữ V |
| Góc liên kết | < 109o28’ vì S còn 2 cặp e không liên kết nên ép góc liên kết. Góc liên kết vào khoảng 103o | 90o | - Góc SS’F< 109o28’ bởi S’ còn 2 cặp e không liên kết  - Góc FSF<90o, góc FSF< 1200 do S còn 1 cặp e không liên kết |

**Ví dụ** 4: Hãy cho biết dạng lai hóa của nguyên tố trung tâm và dạng hình học theo mô hình VSEPR của các phân tử, ion sau: SF4; HClO2; HOCl; ICl; IF7; BrF5; HNO3; C2H6. ( Câu 2, ý 1 đề thi HSG Vĩnh Phúc 2012-2013)

**Hướng dẫn:**

\* SF4: (AX4E) lai hóa sp3d. Hình dạng cái bập bênh

\* HClO2: (AX3E2) lai hóa sp3d. Hình dạng chữ T

\* HClO : (AX2E3) lai hóa sp3d. Hình dạng đường thẳng

\* ICl: (AX4E2) lai hóa sp3d2 . Hình dạng vuông phẳng

\* IF7: (AX7) lai hóa sp3d3. Hình dạng lưỡng chóp ngũ giác

\* BrF5: (AX5E) lai hóa sp3d2 . Hình dạng tháp vuông

\* HNO3: (AX3) lai hóa sp2 . Hình dạng tam giác phẳng

\* C2H6: (AX4) lai hóa sp3 . Hình dạng 2 tứ diện chung đỉnh

**Ví dụ 5**: Sử dụng mô hình về sự đẩy nhau của các cặp electron hóa trị (mô hình VSEPR), dự đoán dạng hình học của các ion và phân tử sau: BeH2, BCl3, NF3, SiF62-, NO2+, I3-. ( Câu 1 ý 3 đề thi chọn đội tuyển dự thi HSG quốc gia 2012-2013 tỉnh Nghệ An)

Như vậy, trong quá trình bồi dưỡng HSG môn Hoá học, giáo viên cần cung cấp thêm cho học sinh Thuyết lực đẩy các cặp electron ở lớp vỏ hoá trị (VSEPR) để học có thể giải quyết những câu hỏi dạng này. Sau đây tôi xin tóm tắc lại những nội dung cơ bản nhất của thuyết này.

**4.1. Thuyết lực đẩy các cặp electron ở lớp vỏ hoá trị (VSEPR)**

**4.1.1. Nguyên tử trung tâm, cặp electron hoá trị và công thức VSEPR.**

**a**. **Nguyên tử trung tâm**

Trong thuyết VSEPR , nguyên tử được bao quanh bởỉ các nguyên tử khác sẽ được gọi là nguyên tử trung tâm. Sự định hướng các nguyên tử khác xung quanh nguyên tử trung tâm cho ta biết hình dạng của phân tử. Chẳng hạn trong phân tử NH3, nitơ là nguyên tử trung tâm, được bao quanh bởi các nguyên tử hiđro. Sự định hướng các nguyên tử hiđro xung quanh nguyên tử nitơ tạo thành dạng hình học của phân tử.

**b**. **Số cặp electron hoá trị**

Các electron thuộc lớp vỏ hoá trị của nguyên tử trung tâm có thể tham gia vào liên kết hoá học hoặc không tham gia vào liên kết. Thuyết VSEPR đưa ra khái niệm số cặp electron hoá trị (trong một số tài liệu còn được gọi là chỉ số không gian – steric number). được tính như sau:

***Số cặp electron hoá trị được tính bằng tổng số các cặp e tham gia liên kết σ, kí hiệu là B (bond pair), và số các cặp electron hoá trị không liên kết, kí hiệu là L (lone pair)***, tức là:

Số cặp electron hoá trị = B + L

Chú ý rằng một liên kết đôi hoặc ba của nguyên tử trung tâm chỉ được tính là 1 cặp electron hoá trị , vì trong đó có 1 liên kết σ.

Như thế, phân tử nước có nguyên tử O là nguyên tử trung tâm và số cặp electron hoá trị = 2+ 2



Phân tử CO2 có nguyên tử C là nguyên tử trung tâm và số cặp electron hoá trị = 2 + 0 = 2. Chú ý: mỗi liên kết đôi trong phân tử cũng chỉ được tính là một cặp electron hoá trị.



Phân tử NH3 có nguyên tử N là nguyên tử trung tâm và số cặp electron hoá trị = 3 + 1 = 4



Góc liên kết = 107o

**c**. C**ông thức VSEPR.**

Thuyết VSEPR đưa ra cách ghi công thức phân tử hoặc ion một cách *“đầy đủ”* trong đó cho biết số cặp electron hoá trị liên kết và không liên kết ở nguyên tử trung tâm, nguyên tử trung tâm được viết trước tiên.

Dạng tổng quát của công thức VSEPR: AXnEm hoặc AXnLm

Trong đó: A là kí hiệu nguyên tử trung tâm, X kí hiệu nguyên tử liên kết với ion trung tâm, chỉ số n của X cho biết số cặp electron liên kết, E kí hiệu các cặp electron hoá trị không phân chia của nguyên tử trung tâm, chỉ số m của E cho biết số cặp electron không phân chia.

**Ví dụ:**  Công thức phân tử Công thức VSEPR dạng chung

H2O AX2E2

CO2 AX2E0

NH3 AX3E1

**Bài tập áp dụng 1.**

Viết công thức VSEPR của các phân tử và ion sau: BCl3, PCl3, ; ; H3O+; H2S ; CH4; SF4 ; XeF4 ;  ; ; ; ; CO2; ; SO2

**4.1. 2. Lực đẩy giữa các cặp e hoá trị và hình học phân tử**

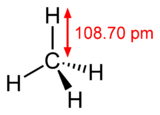
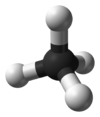
Thuyết VSEPR cho rằng: ***các cặp electron hoá trị (liên kết cũng như không liên kết) đều đẩy nhau và phân bố trong không gian xung quanh nguyên tử trung tâm theo hình cầu sao cho lực đẩy là nhỏ nhất.***

a. Các cặp electron của E cũng như X đều ảnh hưởng đến hình dạng phân tử. Tuy nhiên, ảnh hưởng của các căp E và X không hoàn toàn giống nhau. Các cặp electron E chỉ bị hút bởi 1 hạt nhân nên chiếm một không gian lớn hơn so với các cặp electron X, bị hút bởi 2 hạt nhân. Vì thế, lực đẩy giữa các cặp electron hoá trị thay đổi theo thứ tự dưới đây:

E-E > X- E > X-X hoặc L-L > L-B > B-B

Lực đẩy giữa hai cặp electron không liên kết (E-E) lớn nhất, giữa 2 cặp electron liên kết (X-X) nhỏ nhất. Sự thay đổi độ mạnh lực đẩy như trên làm thay đổi góc hoá trị của các liên kết. Trong phân tử CH4, chỉ có lực đẩy giữa các cặp electron X phân tử có dạng tứ diện đều với góc liên kết 109,5o.



[](http://en.wikipedia.org/wiki/File:Methane-CRC-MW-dimensions-2D.png)[](http://en.wikipedia.org/wiki/File:Methane-CRC-MW-3D-balls.png) [](http://en.wikipedia.org/wiki/File:Ch4-structure.png)

Trong phân tử NH3, sức đẩy mạnh hơn của cặp electron E làm cho góc liên kết thu hẹp hơn chỉ còn 107o. Trong phân tử nước, hai cặp electron E đẩy nhau mạnh, chiếm không gian lớn hơn, làm cho góc liên kết chỉ bằng 104,5o.



b. Trong thuyết VSEPR Các liên kết đôi, liên kết ba đều được đánh giá bằng một cặp electron liên kết. Để phân biệt các liên kết này người ta bổ sung thêm rằng cặp elctrron liên kết biểu thị liên kết ba chiếm không gian lớn hơn liên kết đôi vì thế lực đẩy mạnh hơn, tức là lực đẩy của cặp elctrron liên kết biểu thị liên kết ba, đôi và đơn giảm dần trong dẫy sau:

LK ba > LKđôi > LK đơn

c. Sự định hướng các cặp electron hoá trị tạo thành góc càng hẹp thì lực đẩy càng mạnh. Chẳng hạn: lực đẩy E-E(90º) > lực đẩy E-E(120º)...

d. Tập hợp các yếu tố a), b) và c) tạo thành một bộ các dữ liệu để đánh giá độ bền của một dạng hình học.

Nếu từ một cấu tạo phân tử, có thể đưa ra nhiều dạng hình học khác nhau, thì dạng nào có lực đẩy giữa các cặp electron hoá trị nhỏ nhất sẽ là bền nhất. Khi có nhiều yếu tố trái ngược nhau, yếu tố độ lớn của góc liên kết có ý nghĩa ưu tiên.

e. Cũng cần phân biệt hai khái niệm: “hình học electron” và “hình học phân tử”.

- Khi mô tả cấu tạo VSEPR có cả phân bố không gian của các cặp electron không liên kết ( cặp electron E), hình ảnh thu được gọi là “hình học electron” (electron arrangement).

- Khi bỏ qua phân bố không gian của các cặp electron E (chỉ giữ lại các nguyên tử), hình ảnh thu được gọi là “hình học phân tử”. Để minh hoạ ta trở lại trường hợp phân tử nước:



Công thức cấu tạo Dạng hình học của phân tử Dạng hình học electron

Lewis (Đường gấp khúc) (Tứ diện)

**Dưới đây là một số dạng hình học phân tử:**

**\*n + m = 2**, , X = 2, E= 0 ,công thức VSEPR là AX2E0

Dạng đường thẳng, ví dụ: **Be**Cl2, **S**iO2, H**C**N,…

**\* n+m = 3**, Dạng tam giác có hai kiểu:

- X = 3, E = 0: tam giác đều, công thức VSEPR là AX3E0,

Ví dụ: **B**Cl3, **S**O3, **N**O3−, …

- B = 2, L = 1: dạng gấp khúc, công thức VSEPR là AX2E1,

Ví dụ: **S**O2, **N**O2, **N**OCl, …

**\* n + m = 4**. Dạng tứ diện có ba dạng:

- n = 4, m = 0: tứ diện đều, công thức VSEPR là AX4E0,

Ví dụ: **C**H4, **C**Cl4, **P**O43−, **N**H4+, SO42−,…

- n = 3, m = 1: tháp tam giác, công thức VSEPR là AX3E1,

Ví dụ: **N**H3, **P**Cl3, **S**O32−,**Cl**O3−,…

- n = 2, m = 2: gấp khúc (gẫy góc) công thức VSEPR là AX2E2,

Ví dụ: H2**O**, **O**F2, **N**H2−,…

**\* n + m = 5.** Dạng lưỡng tháp tam giác có bốn dạng:

- n = 5, m = 0: lưỡng tháp tam giác đều công thức VSEPR là AX5L0,

Ví dụ: **P**Cl5, **As**F5, **Fe**(CO)5…

- n = 4, m = 1: dạng cầu bập bênh công thức VSEPR là AX4L1,

Ví dụ: **P**Cl4−, **Te**Cl4, **I**F4+, **Xe**F2O2

- n = 3,m = 2: hình chữ T công thức VSEPR là AX3L2,

Ví dụ: **I**F3, **Br**F3, ICl2(C6H­5);

- n = 2, m = 3: hình đường thẳng công thức VSEPR là AX2L3,

Ví dụ: I3− , **Xe**F2,…

**\* n + m = 6.** Dạng bát diện có một số dạng thường gặp:

- n = 6, m = 0: bát diện đều công thức VSEPR là AX6L0,

Ví dụ: **S**F6, **I**F5O,…

- n = 5, m = 1: tháp đáy vuông công thức VSEPR là AX5L1,

Ví dụ: **Br**F5, **Sb**Cl5−,…

- n = 4, m = 2: vuông phẳng công thức VSEPR là AX4L2,

Ví dụ:

**I**Cl4−, **Xe**F4, **Pt**(NH3)2Cl2,…

**\* n+m = 7:** Dạng AX7 : lưỡng tháp ngũ giác: VD IF7

Dạng AX6L: VD XeF6

**Bảng1. Cách biểu diễn (vẽ) đơn giản hình học electron của các phân tử**

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| **n+m** | **L = 0** | **L=1** | **L=2** | **L=3** |
| 2 | [128px-AX2E0-2D](http://en.wikipedia.org/wiki/Image:AX2E0-2D.png)  Th¼ng |  |  |  |
| 3 | [128px-AX3E0-side-2D](http://en.wikipedia.org/wiki/Image:AX3E0-side-2D.png)  Tam gi¸c ph¼ng | [128px-AX2E1-2D](http://en.wikipedia.org/wiki/Image:AX2E1-2D.png)  GÉy gãc |  |  |
| 4 | [128px-AX4E0-2D](http://en.wikipedia.org/wiki/Image:AX4E0-2D.png)  Tø diÖn | [128px-AX3E1-2D](http://en.wikipedia.org/wiki/Image:AX3E1-2D.png)  Th¸p tam gi¸c | [128px-AX2E2-2D](http://en.wikipedia.org/wiki/Image:AX2E2-2D.png)  GÉy gãc |  |
| 5 | [128px-AX5E0-2D](http://en.wikipedia.org/wiki/Image:AX5E0-2D.png)  L­ìng th¸p tam gi¸c | [128px-AX4E1-2D](http://en.wikipedia.org/wiki/Image:AX4E1-2D.png)  CÇu bËp bªnh | [128px-AX3E2-2D](http://en.wikipedia.org/wiki/Image:AX3E2-2D.png)  Chữ T | [128px-AX2E3-2D](http://en.wikipedia.org/wiki/Image:AX2E3-2D.png)  Th¼ng |
| 6 | [128px-AX6E0-2D](http://en.wikipedia.org/wiki/Image:AX6E0-2D.png)  B¸t diÖn | [128px-AX5E1-2D](http://en.wikipedia.org/wiki/Image:AX5E1-2D.png)  Th¸p ®¸y vu«ng | [128px-AX4E2-2D](http://en.wikipedia.org/wiki/Image:AX4E2-2D.png)  Vuông phẳng |  |
| 7 | [128px-AX7E0-2D](http://en.wikipedia.org/wiki/Image:AX7E0-2D.png)  L­ìng th¸p ngò gi¸c | [128px-AX6E1-2D](http://en.wikipedia.org/wiki/Image:AX6E1-2D.png)  Th¸p ngò gi¸c |  |  |

Chú thích: A-nguyên tử trung tâm, X- nguyên tử liên kết với nguyên tử trung tâm, E- cặp electron tự do.

Các hình vẽ mô tả hình học electron nhưng tên gọi tứ diện, bát diện… đều là tên gọi dạng hình học phân tử  
Bảng 2. So sánh hình học electron và hình học phân tử

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| **Dạng công thức VSEPR** | **Tên gọi dạng hình học** | **Hình học electron**  **†** | **Hình học phân tử** | **Ví dụ** |
| **AX1Ln** | l­ìng nguyªn tö – th¼ng | [100px-AX1E0-3D-balls](http://en.wikipedia.org/wiki/Image:AX1E0-3D-balls.png) | [100px-AX1E0-3D-balls](http://en.wikipedia.org/wiki/Image:AX1E0-3D-balls.png) | [HF](http://en.wikipedia.org/wiki/Hydrogen_fluoride), [O2](http://en.wikipedia.org/wiki/Dioxygen) |
| **AX2L0** | th¼ng | [100px-AX2E0-3D-balls](http://en.wikipedia.org/wiki/Image:AX2E0-3D-balls.png) | [100px-Linear-3D-balls](http://en.wikipedia.org/wiki/Image:Linear-3D-balls.png) | [BeCl2](http://en.wikipedia.org/wiki/Beryllium_chloride), [HgCl2](http://en.wikipedia.org/wiki/Mercury%28II%29_chloride), [CO2](http://en.wikipedia.org/wiki/Carbon_dioxide) |
| **AX2L1** | gÉy gãc | [100px-AX2E1-3D-balls](http://en.wikipedia.org/wiki/Image:AX2E1-3D-balls.png) | [100px-Bent-3D-balls](http://en.wikipedia.org/wiki/Image:Bent-3D-balls.png) | [NO2−](http://en.wikipedia.org/wiki/Nitrite), [SO2](http://en.wikipedia.org/wiki/Sulfur_dioxide), [O3](http://en.wikipedia.org/wiki/Ozone) |
| **AX2L2** | gÉy gãc | [100px-AX2E2-3D-balls](http://en.wikipedia.org/wiki/Image:AX2E2-3D-balls.png) | [100px-Bent-3D-balls](http://en.wikipedia.org/wiki/Image:Bent-3D-balls.png) | [H2O](http://en.wikipedia.org/wiki/Water_%28molecule%29), [OF2](http://en.wikipedia.org/wiki/Oxygen_difluoride) |
| **AX2L3** | th¼ng | [100px-AX2E3-3D-balls](http://en.wikipedia.org/wiki/Image:AX2E3-3D-balls.png) | [100px-Linear-3D-balls](http://en.wikipedia.org/wiki/Image:Linear-3D-balls.png) | [XeF2](http://en.wikipedia.org/wiki/Xenon_difluoride), [I3−](http://en.wikipedia.org/wiki/Triiodide) |
| **AX3L0** | tam gi¸c ph¼ng | [100px-AX3E0-3D-balls](http://en.wikipedia.org/wiki/Image:AX3E0-3D-balls.png) | [100px-Trigonal-3D-balls](http://en.wikipedia.org/wiki/Image:Trigonal-3D-balls.png) | [BF3](http://en.wikipedia.org/wiki/Boron_trifluoride), [CO32−](http://en.wikipedia.org/wiki/Carbonate), [NO3−](http://en.wikipedia.org/wiki/Nitrate), [SO3](http://en.wikipedia.org/wiki/Sulfur_trioxide) |
| **AX3L1** | th¸p tam gi¸c | [100px-AX3E1-3D-balls](http://en.wikipedia.org/wiki/Image:AX3E1-3D-balls.png) | [100px-Pyramidal-3D-balls](http://en.wikipedia.org/wiki/Image:Pyramidal-3D-balls.png) | [NH3](http://en.wikipedia.org/wiki/Ammonia), [PCl3](http://en.wikipedia.org/wiki/Phosphorus_trichloride) |
| **AX3L2** | h×nh ch÷ T | [100px-AX3E2-3D-balls](http://en.wikipedia.org/wiki/Image:AX3E2-3D-balls.png) | [100px-T-shaped-3D-balls](http://en.wikipedia.org/wiki/Image:T-shaped-3D-balls.png) | [ClF3](http://en.wikipedia.org/wiki/Chlorine_trifluoride), [BrF3](http://en.wikipedia.org/wiki/Bromine_trifluoride) |
| **AX4L0** | tø diÖn | [100px-AX4E0-3D-balls](http://en.wikipedia.org/wiki/Image:AX4E0-3D-balls.png) | [100px-Tetrahedral-3D-balls](http://en.wikipedia.org/wiki/Image:Tetrahedral-3D-balls.png) | [CH4](http://en.wikipedia.org/wiki/Methane), [PO43−](http://en.wikipedia.org/wiki/Phosphate), [SO42−](http://en.wikipedia.org/wiki/Sulfate), [ClO4−](http://en.wikipedia.org/wiki/Perchlorate) |
| **AX4L1** | cÇu bËp bªnh | [100px-AX4E1-3D-balls](http://en.wikipedia.org/wiki/Image:AX4E1-3D-balls.png) | [100px-Seesaw-3D-balls](http://en.wikipedia.org/wiki/Image:Seesaw-3D-balls.png) | [SF4](http://en.wikipedia.org/wiki/Sulfur_tetrafluoride) |
| **AX4L2** | vu«ng ph¼ng | [100px-AX4E2-3D-balls](http://en.wikipedia.org/wiki/Image:AX4E2-3D-balls.png) | [100px-Square-planar-3D-balls](http://en.wikipedia.org/wiki/Image:Square-planar-3D-balls.png) | [XeF4](http://en.wikipedia.org/wiki/Xenon_tetrafluoride) |
| **AX5L0** | l­ìng th¸p tam gi¸c | [100px-Trigonal-bipyramidal-3D-balls](http://en.wikipedia.org/wiki/Image:Trigonal-bipyramidal-3D-balls.png) | [100px-Trigonal-bipyramidal-3D-balls](http://en.wikipedia.org/wiki/Image:Trigonal-bipyramidal-3D-balls.png) | [PCl5](http://en.wikipedia.org/wiki/Phosphorus_pentachloride) |
| **AX5L1** | th¸p ®¸y vu«ng | [100px-AX5E1-3D-balls](http://en.wikipedia.org/wiki/Image:AX5E1-3D-balls.png) | [100px-Square-pyramidal-3D-balls](http://en.wikipedia.org/wiki/Image:Square-pyramidal-3D-balls.png) | [ClF5](http://en.wikipedia.org/wiki/Chlorine_pentafluoride), [BrF5](http://en.wikipedia.org/wiki/Bromine_pentafluoride) |
| **AX6L0** | b¸t diÖn | [100px-AX6E0-3D-balls](http://en.wikipedia.org/wiki/Image:AX6E0-3D-balls.png) | [100px-Octahedral-3D-balls](http://en.wikipedia.org/wiki/Image:Octahedral-3D-balls.png) | [SF6](http://en.wikipedia.org/wiki/Sulfur_hexafluoride) |
| **AX6L1** | th¸p ngò gi¸c | [100px-AX6E1-3D-balls](http://en.wikipedia.org/wiki/Image:AX6E1-3D-balls.png) | [100px-Pentagonal-pyramidal-3D-balls](http://en.wikipedia.org/wiki/Image:Pentagonal-pyramidal-3D-balls.png) | [XeF6](http://en.wikipedia.org/wiki/Xenon_hexafluoride) |
| **AX7L0** | song tháp ngũ giác | [100px-AX7E0-3D-balls](http://en.wikipedia.org/wiki/Image:AX7E0-3D-balls.png) | [100px-Pentagonal-bipyramidal-3D-balls](http://en.wikipedia.org/wiki/Image:Pentagonal-bipyramidal-3D-balls.png) | [IF7](http://en.wikipedia.org/wiki/Iodine_heptafluoride) |

**4.2.** **Mối quan hệ giữa lý thuyết VSEPR với thuyết lai hoá của Pauling.**

Trước khi thuyết VSEPR ra đời, Pauling cũng giải thích hình dạng của phân tử, góc liên kết bằng thuyết lai hoá obitan nguyên tử. Tuy nhiên, thuyết lai hoá thiên về sự giải thích dạng hình học phân tử hơn là tiên đoán. Thường thì sau khi thực nghiệm đã xác định được dạng hình học của phân tử, thuyết lai hoá có thể đưa ra một trạng thái lai hoá thích hợp giải thích thành công dạng hình học đó. Trong khi đó, thuyết VSEPR cho phép dự đoán hình dạng phân tử một cách đơn giản và phù hợp với thực nghiệm.

Vì hình học phân tử được quyết định bởi độ lớn của các góc liên kết, mà góc liên kết lại liên quan với trạng thái lai hoá các AO của nguyên tử trung tâm, nên người ta rút ra được sự tương hợp sau đây giữa số cặp electron hoá trị trong thuyết VSEPR với trạng thái lai hoá nguyên tử trung tâm (không phải là nguyên tố chuyển tiếp):

\* n + m = 2 tương ứng với lai hoá **sp ;**

\* n + m = 3 tương ứng với lai hoá **sp2**

\* n + m = 4 tương ứng với lai hoá **sp3**

**4.3**. **Momen lưỡng cực, tính phân cực của một phân tử.**

Xét phân tử Aδ+ − Bδ − với độ dài liên kết giữa hai nguyên tử A-B là dAB.

Momen lưỡng cực p đo mức độ phân cực của liên kết A-B được xác định bởi biểu thức:

|| = | δ | . dAB

δ: điện tích trên nguyên tử A theo Culomb (C); dAB: độ dài liên kết (m)

p: C.m nhưng thường đổi sang Debye với 1D = 3,33.10−30 C.m

Hướng: từ hạt mang điện âm sang hạt mang điện dương.

Với các phân tử kiểu A-B như H-Cl, H-F, Na-Cl, hiển nhiên momen lưỡng cực của nó khác không và phân tử có tính phân cực bởi có sự chuyển electron sang nguyên tử có độ âm điện cao hơn ở những mức độ khác nhau. Với các phân tử đơn chất như O2, N2, H2, ..momen lưỡng cực bằng không vì chúng không phân cực.

Tuy nhiên, trong những phân tử có chứa nhiều liên kết thì momen lưỡng cực của mỗi liên kết thành phần không quyết định tính phân cực của phân tử. Momen lưỡng cực là đại lượng có hướng nên có thể xảy ra hiện tượng triệt tiêu các momen lưỡng cực thành phần khi phân tử đối xứng.

Một số trường hợp đối xứng thường gặp có công thức VSEPR như sau:

AX2L0 : BeH2, SO2, CO2, (phân tử hình đường thẳng)

AX3L0 : SO3, BeCl3, NO3−,…(phân tử hình tam giác đều)

AX4L0 : CH4, NH4+, SO42−,…(phân tử hình tứ diện đều)

AX5L0 : PCl5, AsF5, Fe(CO)5,…( phân tử hình lưỡng tháp tam giác đều)

AX2L3 : I3−, XeF2,…( phân tử hình đường thẳng)

AX6L0 : SF6,…( phân tử hình bát diện đều)

AX4L2 : XeF4, ICl4−,…(ph©n tö h×nh vu«ng ph¼ng).

Cã thÓ minh ho¹ mét sè tr­êng hîp ®¬n gi¶n nh­ sau?



**4.4. Bài tập áp dụng**

**Bài 1:** Mô tả sự hình thành liên kết trong phân tử NH3, , BF3. Vẽ sự xen phủ các obitan hình thành liên kết.

**Bài 2:** Dựa vào thuyết VSEPR, hãy cho biết trong hai ion CH3+ và CH3− , ion nào chứa mọi nguyên tử đều nằm trên một mặt phẳng?

**Bài 3:** Viết công thức VSEPR của các phân tử và ion SO32− , CO32−  , NO3− , SO3 và cho biết ion hoặc phân tử nào có cùng hình dạng với phân tử NH3?

**Bài 4:** Trong các phân tử và ion SO3 , SO32−  , ClF3, ClO3− , tiểu phân nào có cùng dạng hình học với ion NO3−?

**Bài 5:** So sánh dạng hình học của các cặp ion dưới đây và cho biết cặp nào gồm hai ion có cùng hình dạng?

A. CO32− và NO3−  B. CO32− và SO32−

**Bài 6:** Vẽ các cấu trúc có thể có của ion I3−  , dạng nào là bền nhất, tại sao?

**Bài 7:** Dựa vào thuyết VSEPR, hãy so sánh các góc liên kết trong những phân tử BF3, CF4, NF3, OF2 và chỉ ra phân tử nào có góc liên kết lớn nhất?

**Bài 8:** Nguyên tử N trong NH3, NH2−, NH4+ đều được bao quanh bởi 8 electron. Hãy sắp xếp các phân tử và ion trên theo chiều tăng dần góc liên kết HNH.

**Bài 9:** Trong các phân tử NCl3, SO3 , PCl5**,** CO2, H2O, BF3, PCl3, SO2, SCl2, CS2 và NO2 phân tử nào không phân cực, phân tử nào có cực?

**Bài 10:** Hãy sắp xếp các phân tử H2Se, H2S, H2O theo thứ tự tăng dần góc liên kết.

**Bài 11:** Trong các phân tử BrF3 , CF4, SbF5, SF2, SF4, SF6, phân tử nào có momen lưỡng cực lớn hơn không?

**Bài 12:** Cho c¸c ph©n tö: Cl2O ; O3 ; SO2 ; NO2 ; CO2 vµ c¸c trÞ sè gãc liªn kÕt: 1200 ; 1110 ; 1320 ; 1170 ; 1800. H·y ghi gi¸ trÞ gãc liªn kÕt trªn cho phï hîp víi c¸c ph©n tö t­¬ng øng vµ gi¶i thÝch (ng¾n gän)

**Bài 13:** Thực nghiệm cho biết cả ba hợp chất CHBr3, SiHBr3, CH(CH3)3 đều có cấu tạo tứ diện. Có ba trị số góc liên kết tại tâm là 110o; 111o; 112o(không kể tới H khi xét các góc này). Độ âm điện của H là 2,20; CH3 là 2,27; Csp3 là 2,47; Si là 2,24; Br là 2,50. Dựa vào mô hình sự đẩy giữa các cặp e hóa trị (VSEPR) và độ âm điện, hãy cho biết trị số góc của mỗi hợp chất và giải thích

**Bài 14:** Nêu và giải thích quy luật biến đổi về góc liên kết trong các dãy chất sau

- NH3, PH3, AsH3, SbH3

- H2O, H2S, H2Se, H2Te

- PF3, PCl3, PBr3, PI3

**Bài 15:** Khi nghiên cứu cấu trúc của PCl5 (rắn), PBr5 (rắn) bằng tia X người ta thấy rằng

- Trong tinh thể PCl5 gồm các ion [PCl4]+ và [PCl6]-

- Trong tinh thể PBr5 gồm các ion [PBr4]+ và Br-

Hãy cho biết cấu trúc của các ion trên và giải thích sự khác nhau giữa PCl5 và PBr5

**Bài 16:** Hợp chất giữa các halogen: XX3, XX5, XX7**.**

a- Cho biết dạng hình học tr¹ng, th¸i lai hãa cña c¸c nguyªn tö trung t©m trong c¸c ph©n tö .

b- So s¸nh gãc liªn kÕt FBrF vµ FClF trong c¸c ph©n tö ClF3 vµ BrF3. Gi¶i thÝch?

c- ë tr¹ng th¸i láng, IF5, BrF3 ph©n ly theo ph¶n øng:

2IF5 = IF+4 + IF -6

BrF3 = BrF2+ + BrF4-

X¸c ®Þnh cÊu tróc cña c¸c ion ®ã vµ cho biÕt tr¹ng th¸i lai hãa cña nguyên tử trung tâm

**e-** Cho biết sự biến đổi độ bền nhiệt trong dãy **XX3, XX5** ( X lµ Cl, Br, I; X' lµ F)

f- Tại sao có Hợp chất IF7 nhưng ko có ClF7, BrF7.

**Bài 17:** Mô tả sự hình thành liên kết, so sánh góc liên kết, năng lượng liên kết, nhiệt độ nóng chảy, nhiệt độ sôi, độ tan trong nước của các cặp chất sau: PH3 và NH3; H2O và H2S ; NH3 và NF3