

1. Ôn tập về liên kết cộng hóa trị

1.1. Khái niệm

Liên kết cộng hóa trị là liên kết được hình thành giữa hai nguyên tử bằng một hay nhiều cặp electron dùng chung.

Mỗi cặp electron dùng chung tạo thành một liên kết cộng hóa trị. Các nguyên tử tham gia liên kết cộng hóa trị thường là các nguyên tử phi kim.

- **Ví dụ 1: Phân tử hydrogen (H_2):** Mỗi nguyên tử H có 1 electron. Hai nguyên tử H góp chung 2 electron tạo thành một cặp electron dùng chung.

Cấu trúc: H-H.

- **Ví dụ 2: Phân tử chlorine (Cl_2):** Mỗi nguyên tử Cl có 7 electron lớp ngoài cùng. Hai nguyên tử Cl góp chung 1 cặp electron để mỗi nguyên tử đạt cấu hình 8 electron bền vững. **Cấu trúc: Cl-Cl.**

2. Độ âm điện và sự phân cực của liên kết cộng hóa trị

2.1. Độ âm điện (χ)

Độ âm điện là đại lượng đặc trưng cho khả năng hút electron của một nguyên tử trong phân tử khi hình thành liên kết hóa học.

- Trong một chu kì, theo chiều tăng của điện tích hạt nhân, độ âm điện của các nguyên tố có xu hướng tăng dần.

- Trong một nhóm A, theo chiều tăng của điện tích hạt nhân, độ âm điện của các nguyên tố có xu hướng giảm dần.
- Flo (F) là nguyên tố có độ âm điện lớn nhất ($\chi = 3.98$).

2.2. Hiệu độ âm điện ($\Delta\chi$) và phân loại liên kết

Dựa vào hiệu độ âm điện giữa hai nguyên tử tham gia liên kết ($\Delta\chi$), ta có thể dự đoán loại liên kết.

Công thức: $\Delta\chi = |\chi_1 - \chi_2|$

Trong đó χ_1 và χ_2 là độ âm điện của hai nguyên tử tương ứng.

Hiệu độ âm điện ($\Delta\chi$)	Loại liên kết
$0 \leq \Delta\chi < 0.4$	Liên kết cộng hóa trị không cực
$0.4 \leq \Delta\chi < 1.7$	Liên kết cộng hóa trị có cực (phân cực)
$\Delta\chi \geq 1.7$	Liên kết ion

Lưu ý: Các giá trị này chỉ mang tính tương đối, ranh giới giữa các loại liên kết không hoàn toàn rõ rệt.

3. Các loại liên kết cộng hóa trị

3.1. Liên kết cộng hóa trị không cực

Là liên kết cộng hóa trị trong đó cặp electron dùng chung không bị lệch về phía nguyên tử nào.

- **Điều kiện:** Liên kết được hình thành giữa các nguyên tử có độ âm điện bằng nhau hoặc chênh lệch không đáng kể ($\Delta\chi$ 0.4). Thường gặp ở các phân tử đơn chất (H_2 , O_2 , N_2 , Cl_2) hoặc một số hợp chất (CH_4).
- **Đặc điểm:** Cặp electron dùng chung phân bố đối xứng giữa hai hạt nhân nguyên tử.

Ví dụ minh họa:

1. **Phân tử H_2 :** Liên kết giữa hai nguyên tử H. $\Delta\chi = |2.20 - 2.20| = 0$. Đây là liên kết cộng hóa trị không cực. Cặp electron dùng chung nằm chính giữa hai nguyên tử.
2. **Phân tử Cl_2 :** Liên kết giữa hai nguyên tử Cl. $\Delta\chi = |3.16 - 3.16| = 0$. Đây là liên kết cộng hóa trị không cực.
3. **Liên kết C-H trong CH_4 :** $\Delta\chi = |\chi(C) - \chi(H)| = |2.55 - 2.20| = 0.35$. Vì $\Delta\chi$ 0.4 nên liên kết C-H được coi là liên kết cộng hóa trị không cực.

3.2. Liên kết cộng hóa trị có cực (phân cực)

Là liên kết cộng hóa trị trong đó cặp electron dùng chung bị lệch về phía nguyên tử có độ âm điện lớn hơn.

- **Điều kiện:** Liên kết được hình thành giữa các nguyên tử có độ âm điện chênh lệch nhau ($0.4 \leq \Delta\chi$ 1.7).
- **Đặc điểm:** Nguyên tử có độ âm điện lớn hơn sẽ hút cặp electron dùng chung, mang một phần điện tích âm (ký hiệu là δ^-). Nguyên tử có độ âm điện nhỏ hơn sẽ mang một phần điện tích dương (ký hiệu là δ^+). Đầu âm và đầu dương này tạo thành một lưỡng cực điện.

Ví dụ minh họa:

1. **Phân tử HCl:** Liên kết giữa H và Cl. $\Delta\chi = |\chi(\text{Cl}) - \chi(\text{H})| = |3.16 - 2.20| = 0.96$. Vì $0.4 < 0.96 < 1.7$, đây là liên kết cộng hóa trị có cực. Cặp electron dùng chung lệch về phía Cl. **Cấu trúc: $\text{H}^{\delta+}-\text{Cl}^{\delta-}$.**
2. **Liên kết O-H trong H_2O :** Liên kết giữa O và H. $\Delta\chi = |\chi(\text{O}) - \chi(\text{H})| = |3.44 - 2.20| = 1.24$. Đây là liên kết cộng hóa trị có cực. Cặp electron dùng chung lệch về phía O. **Cấu trúc: $\text{O}^{\delta-}-\text{H}^{\delta+}$.**
3. **Liên kết N-H trong NH_3 :** Liên kết giữa N và H. $\Delta\chi = |\chi(\text{N}) - \chi(\text{H})| = |3.04 - 2.20| = 0.84$. Đây là liên kết cộng hóa trị có cực. Cặp electron dùng chung lệch về phía N. **Cấu trúc: $\text{N}^{\delta-}-\text{H}^{\delta+}$.**

4. Sự phân cực của phân tử

Một phân tử có liên kết cộng hóa trị phân cực chưa chắc đã là một phân tử phân cực. Sự phân cực của toàn bộ phân tử phụ thuộc vào cả độ phân cực của các liên kết và cấu trúc hình học của phân tử.

4.1. Phân tử không phân cực

Là phân tử có các lưỡng cực liên kết (vector moment lưỡng cực) triệt tiêu lẫn nhau do cấu trúc đối xứng, làm cho moment lưỡng cực tổng cộng của phân tử bằng 0 ($\mu = 0$).

- **Trường hợp 1:** Phân tử chỉ chứa các liên kết cộng hóa trị không cực. Ví dụ: H_2 , Cl_2 , O_2 .
- **Trường hợp 2:** Phân tử chứa các liên kết cộng hóa trị có cực nhưng có cấu trúc hình học đối xứng.

Ví dụ minh họa:

- 1. Phân tử Carbon dioxide (CO_2):** Phân tử có cấu trúc thẳng ($\text{O}=\text{C}=\text{O}$). Liên kết $\text{C}=\text{O}$ là liên kết có cực ($\Delta\chi = |3.44 - 2.55| = 0.89$), electron lệch về phía O. Tuy nhiên, phân tử có hai liên kết $\text{C}=\text{O}$ giống hệt nhau, nằm trên một đường thẳng và hướng về hai phía ngược nhau. Do đó, hai vector moment lưỡng cực của hai liên kết này triệt tiêu lẫn nhau, làm cho toàn bộ phân tử CO_2 không phân cực.
- 2. Phân tử Methane (CH_4):** Phân tử có cấu trúc tứ diện đều. Các liên kết $\text{C}-\text{H}$ gần như không cực. Ngay cả khi coi là có cực nhẹ, bốn liên kết này được sắp xếp đối xứng trong không gian, hướng tới bốn đỉnh của một tứ diện đều. Sự đối xứng này làm cho các moment lưỡng cực của các liên kết triệt tiêu nhau. Do đó, phân tử CH_4 không phân cực.
- 3. Phân tử Boron trifluoride (BF_3):** Phân tử có cấu trúc tam giác đều. Liên kết $\text{B}-\text{F}$ phân cực mạnh ($\Delta\chi = |3.98 - 2.04| = 1.94$). Tuy nhiên, ba liên kết $\text{B}-\text{F}$ được sắp xếp đối xứng trong một mặt phẳng, tạo thành các góc 120° . Cấu trúc đối xứng này làm cho tổng các vector moment lưỡng cực bằng không. Do đó, phân tử BF_3 không phân cực.

4.2. Phân tử phân cực

Là phân tử có tổng các vector moment lưỡng cực của các liên kết khác không ($\mu \neq 0$) do cấu trúc không đối xứng.

- **Điều kiện:** Phân tử chứa các liên kết cộng hóa trị có cực và có cấu trúc hình học không đối xứng, làm cho các moment lưỡng cực liên kết không triệt tiêu

lẫn nhau.

Ví dụ minh họa:

1. **Phân tử Nước (H_2O):** Phân tử có cấu trúc dạng góc (chữ V). Hai liên kết O-H là liên kết có cực, cặp electron lệch về phía nguyên tử O. Do cấu trúc góc, hai vector moment lưỡng cực của hai liên kết O-H không triệt tiêu nhau. Tổng của chúng tạo ra một vector moment lưỡng cực tổng hợp hướng về phía nguyên tử O. Do đó, H_2O là một phân tử phân cực mạnh, với đầu O mang điện âm và đầu chứa hai nguyên tử H mang điện dương.
2. **Phân tử Ammonia (NH_3):** Phân tử có cấu trúc chóp tam giác. Ba liên kết N-H là liên kết có cực, cặp electron lệch về phía N. Cấu trúc chóp tam giác không đối xứng, làm cho ba vector moment lưỡng cực của ba liên kết N-H không triệt tiêu nhau. Tổng của chúng tạo ra một moment lưỡng cực tổng hợp hướng lên phía nguyên tử N. Do đó, NH_3 là một phân tử phân cực.
3. **Phân tử Hydrogen chloride (HCl):** Phân tử chỉ có một liên kết cộng hóa trị có cực (H-Cl). Do đó, sự phân cực của liên kết cũng chính là sự phân cực của cả phân tử. HCl là phân tử phân cực.

5. Bảng tổng kết so sánh

Tiêu chí	Liên kết CHT không cực	Liên kết CHT có cực	Phân tử không phân cực	Phân tử phân cực
Hiệu độ âm điện ($\Delta\chi$)	$\Delta\chi < 0.4$	$0.4 \leq \Delta\chi < 1.7$	Không xét trực tiếp cho cả phân tử	Không xét trực tiếp cho cả phân tử
Sự chia sẻ electron	Cân bằng, đối xứng	Lệch về nguyên tử có χ lớn hơn	Sự phân bố điện tích tổng thể là đối xứng	Sự phân bố điện tích tổng thể là không đối xứng
Cấu trúc	Liên kết giữa 2 nguyên tử	Liên kết giữa 2 nguyên tử	Phân tử có cấu trúc đối xứng (thẳng, tứ diện đều, tam giác đều...)	Phân tử có cấu trúc không đối xứng (góc, chóp tam giác...)
Moment lưỡng cực	$\mu_{\text{liên kết}} = 0$	$\mu_{\text{liên kết}} \neq 0$	$\mu_{\text{phân tử}} = 0$ (các $\mu_{\text{liên kết}}$ triệt tiêu nhau)	$\mu_{\text{phân tử}} \neq 0$ (các $\mu_{\text{liên kết}}$ không triệt tiêu nhau)
Ví dụ	H-H, Cl-Cl, C-H	H-Cl, O-H, N-H, C=O	H ₂ , Cl ₂ , CH ₄ , CO ₂ , BF ₃	HCl, H ₂ O, NH ₃ , SO ₂