



Trường Đại Học Điện Lực

Khoa Đại Cường

Hóa Đại Cường

Chương 2.

Các trạng thái tập hợp của vật chất



Liên kết hóa học



Tương tác giữa các phân tử



Liên kết Hidro



Các trạng thái của vật chất

I. Liên kết hóa học

1. Một số đại lượng có liên quan đến liên kết

a. Độ âm điện của nguyên tố (χ)

b. Năng lượng liên kết:

Đó là năng lượng cần thiết để phá vỡ mỗi liên kết và tạo ra các nguyên tử ở thể khí. Năng lượng liên kết thường kí hiệu E và tính bằng kcal/mol cho một mol liên kết. Năng lượng liên kết càng lớn thì liên kết càng bền

c. Độ dài liên kết

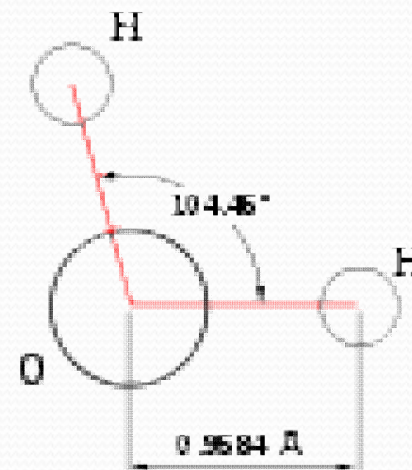
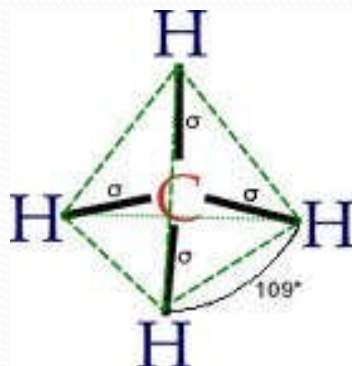
Đó là khoảng cách giữa hai nhân nguyên tử khi đã hình thành liên kết. Độ dài liên kết thường kí hiệu r_0 và tính bằng $\text{Å} = 10^{-8} \text{ cm}$

d. Độ bội của liên kết

Số liên kết được hình thành giữa hai nguyên tử cho trước được gọi là độ bội của liên kết và kí hiệu là Đ. Độ bội của liên kết càng lớn thì liên kết càng bền, năng lượng liên kết càng lớn và độ dài liên kết càng nhỏ.

e. Góc liên kết(góc hóa trị)

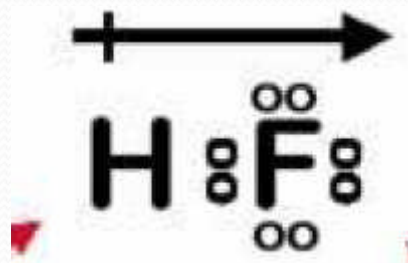
Đó là góc tạo bởi 2 mối liên kết giữa một nguyên tử với hai nguyên tử khác



e. Độ phân cực của liên kết, momen lưỡng cực

Trong những liên kết giữa hai nguyên tử khác nhau, do có sự chênh lệch về độ âm điện, e liên kết bị lệch về phía nguyên tử có độ âm điện lớn hơn, tạo ra ở đây một điện tích âm nào đó (δ^-), còn ở nguyên tử kia mang một điện tích (δ^+). Khi đó người ta nói liên kết bị phân cực.

Ví dụ: HF, CO₂



Độ phân cực của liên kết được đánh giá qua momen lưỡng cực μ , đơn vị tính là D

Độ phân cực của liên kết phụ thuộc vào điện tích trên cực và độ dài của liên kết

Sự chênh lệch độ âm điện giữa hai nguyên tử càng lớn thì liên kết giữa chúng càng phân cực.

f. Quy tắc bát tử

Tất cả các khí trơ (trừ He) đều có 8 e ở lớp ngoài cùng. Chúng rất ít hoạt động hóa học (không liên kết với nhau và hầu như không liên kết với những nguyên tử khác để tạo thành phân tử. Các khí trơ tồn tại trong tự nhiên dưới dạng các nguyên tử tự do.

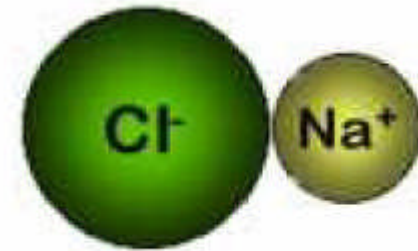
Vì vậy cấu trúc 8 e lớp ngoài cùng là một cấu trúc đặc biệt bền vững. Do đó các nguyên tử có xu hướng liên kết với nhau để đạt được cấu trúc e bền vững của các khí trơ

2. Các dạng liên kết hóa học

a. Liên kết ion

Là liên kết giữa hai ion trái dấu do lực hút tĩnh điện tạo thành.

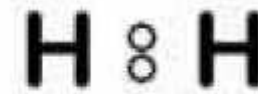
Trong liên kết ion, hóa trị của nguyên tố bằng số điện tích của ion với dấu tương ứng. Ví dụ: $\text{Na}^+ + \text{Cl}^- \rightarrow \text{NaCl}$



Liên kết ion là liên kết bền , năng lượng liên kết khá lớn($\approx 100\text{kcal/mol}$).

Lực hút tĩnh điện giữa các ion không định hướng, một ion dương có tác dụng hút nhiều ion âm xung quanh nó và ngược lại. Vì vậy người ta nói liên kết ion không có định hướng. Những hợp chất ion thường có dạng tinh thể bền vững

b. Liên kết cộng hóa trị

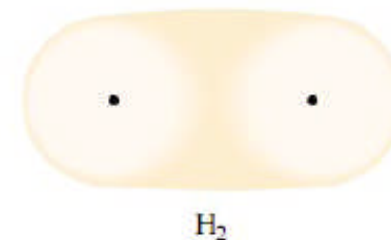
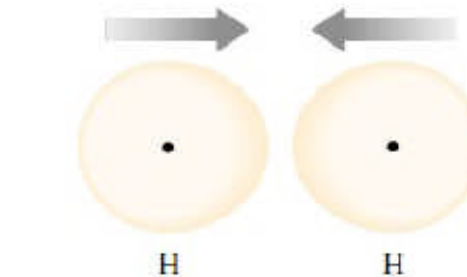


Thuyết của Lewis

Theo Lewis, liên kết cộng hóa trị được hình thành giữa các nguyên tử của cùng một nguyên tố ($\Delta\chi = 0$) hay của các nguyên tố có sự chênh lệch nhỏ về độ âm điện ($\Delta\chi$ nhỏ).

Trong liên kết cộng hóa trị, các nguyên tử tham gia liên kết bỏ ra 1, 2, 3 hay 4 e dùng chung để mỗi nguyên tử đạt được 8e hay 2e ở lớp ngoài cùng.

Ví dụ: H_2 , N_2 , O_2 , CO_2 , HF , NH_3



Thuyết MO (lai hóa orbital nguyên tử)

Từ những nghiên cứu về phương pháp liên kết hóa trị của Heitler, London, Pauling, Slater đã đề nghị sử dụng thuyết MO để giải thích.

➤ Liên kết cộng hóa trị được hình thành do sự ghép đôi hai electron độc thân có spin ngược chiều của hai nguyên tử, khi đó có sự xen phủ hai AO

➤ Mức độ xen phủ của các AO càng lớn thì liên kết càng bền, liên kết được thực hiện theo phương tại đó sự xen phủ là lớn nhất

Thuyết MO(lai hóa obitan nguyên tử)

Sự định hướng liên kết. Liên kết σ và liên kết π

- Phân tử - tổ hợp thống nhất gồm các hạt nhân và các electron của các nguyên tử tương tác.
- Trạng thái của e được mô tả bằng các MO. Mỗi MO được xác định gần đúng bằng phương pháp tổ hợp tuyến tính các orbital nguyên tử $\psi_{MO} = \sum C_i \psi_{AO}$
- **Số MO tạo thành bằng số AO tham gia tổ hợp tuyến tính**

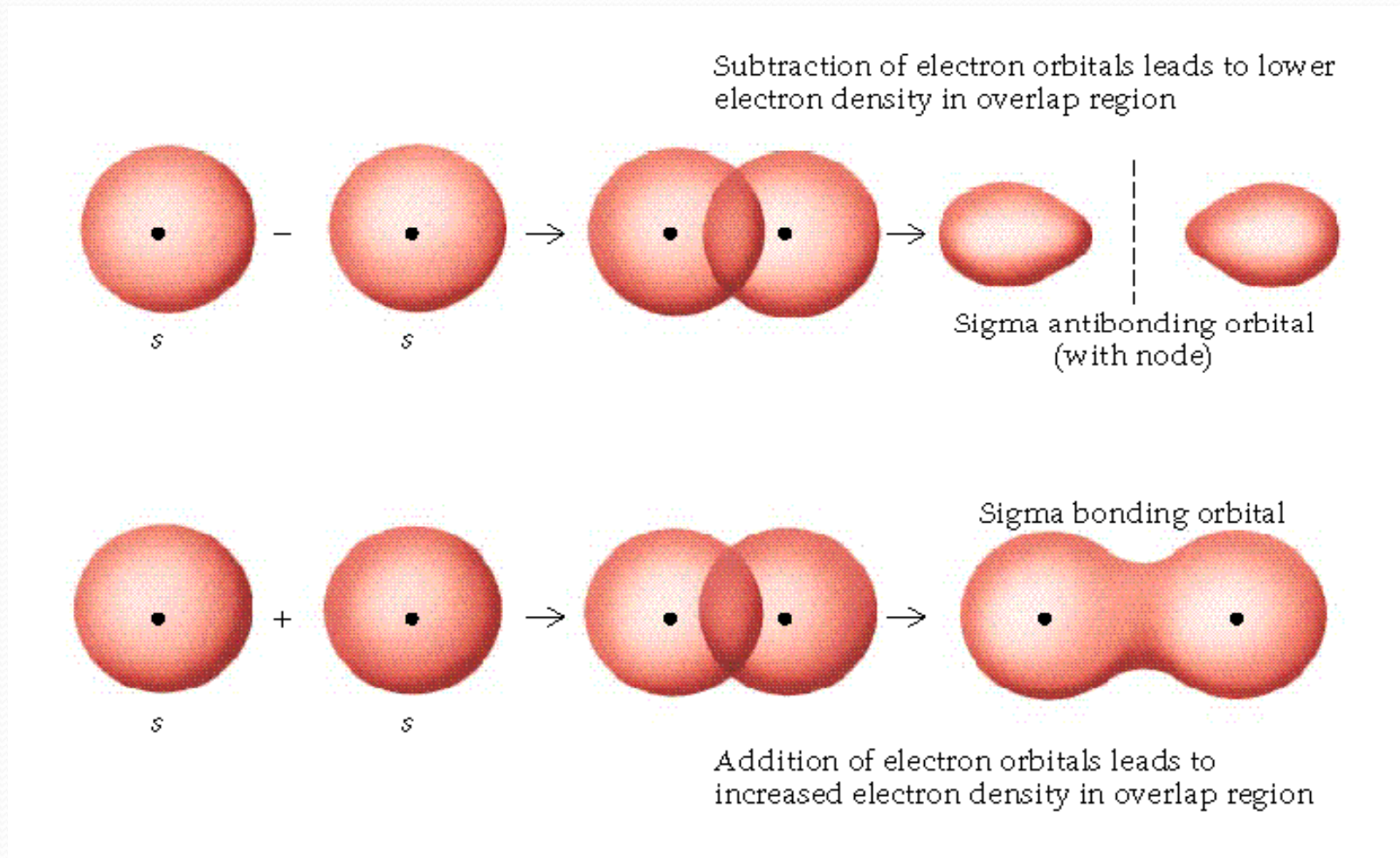
Điều kiện các AO tham gia tổ hợp tuyến tính

- **Năng lượng gần nhau.**
- **Mức độ che phủ đáng kể.**
- **Cùng tính đối xứng đối với trục liên nhân.**

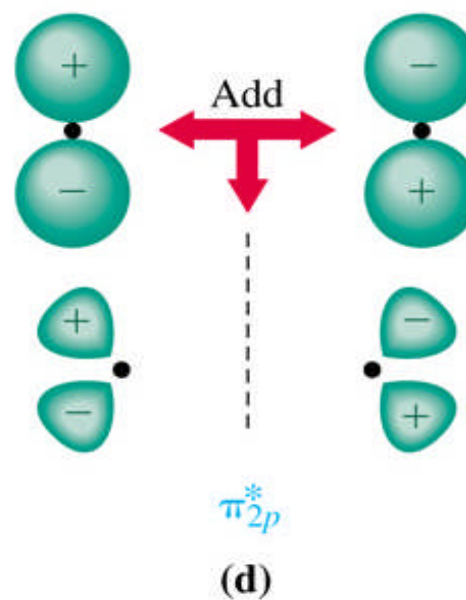
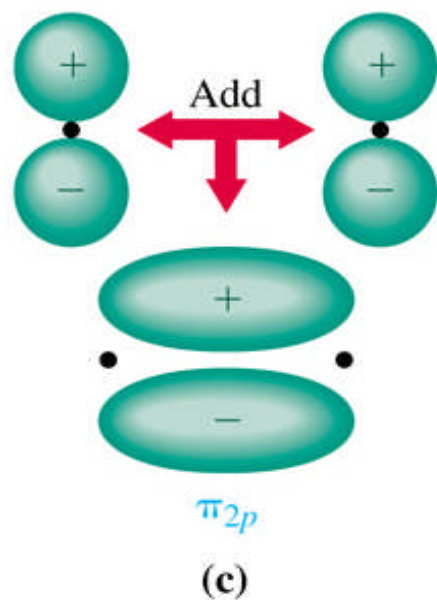
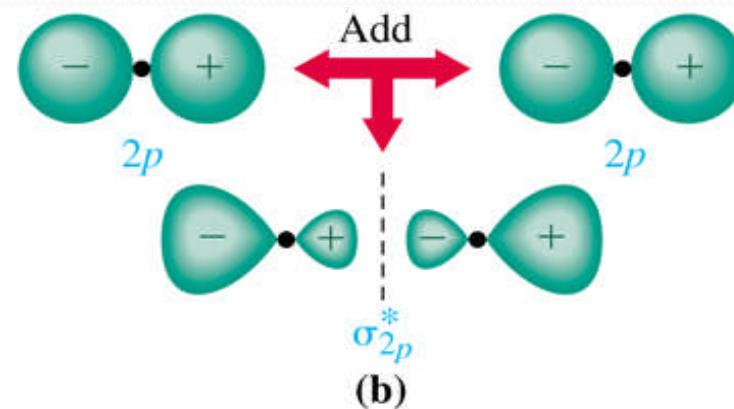
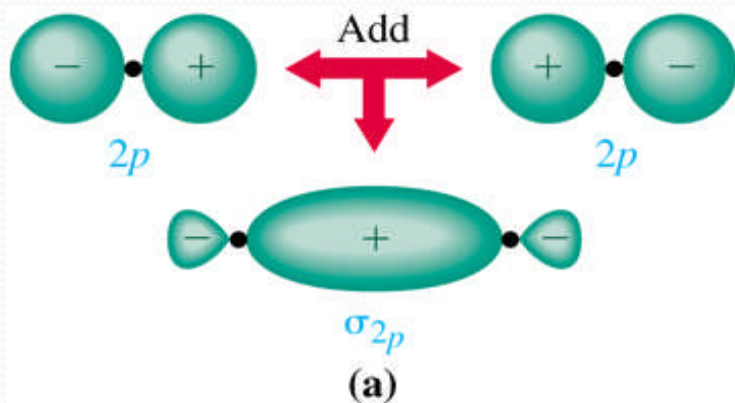
- Sự che phủ các đám mây e dọc theo trục liên nhân → liên kết σ , nhận trục liên nhân làm trục đối xứng, là một liên kết bền. Liên kết σ có thể hình thành do sự xen phủ các đám mây s-s, s-p, p-p

- Sự che phủ các đám mây e về hai phía trục liên nhân → liên kết π có mặt phẳng đối xứng chứa trục liên nhân, liên kết π kém bền hơn liên kết σ . Liên kết π có thể hình thành do sự xen phủ các đám mây p-p, p-d

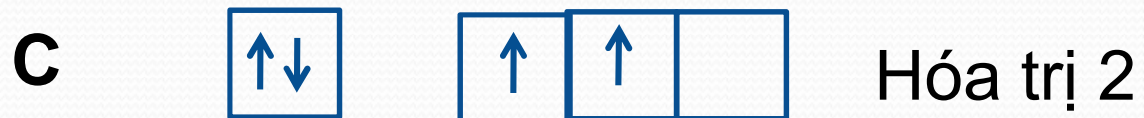
Sự tạo thành các MO σ từ AO s



Sự tạo thành các MO σ , MO π từ các AOp

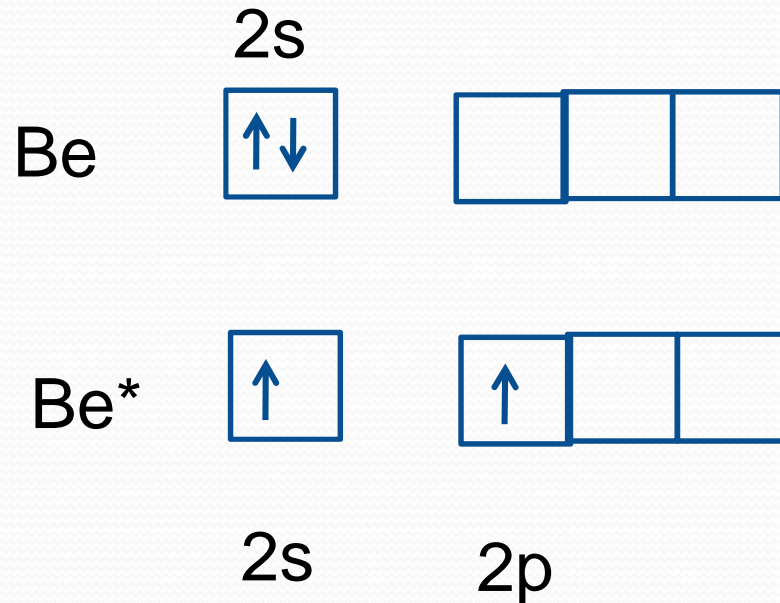


Trong thuyết MO, hóa trị của nguyên tố bằng số e độc thân của nguyên tử ở trạng thái cơ bản hay trạng thái kích thích



Lai hóa sp

Sự tổ hợp một đám mây s với một đám mây p tạo ra 2 đám mây lai hướng theo 2 hướng trong không gian. Trục của 2 đám mây này tạo ra góc 180°



Lai hóa sp^2

Sự tổ hợp một đám mây s với 2 đám mây p tạo ra 3 đám mây lai hướng theo 3 hướng trong không gian. Trục của 3 đám mây này tạo ra góc 120°



Lai hóa sp^3

Sự tổ hợp một đám mây s với 3 đám mây p tạo ra 4 đám mây lai hướng theo 4 đỉnh của một tứ diện đều. Trục của các AO này tạo ra góc $109^\circ 28'$.

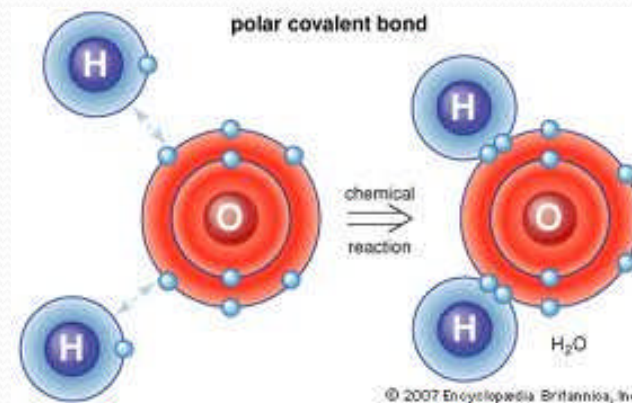
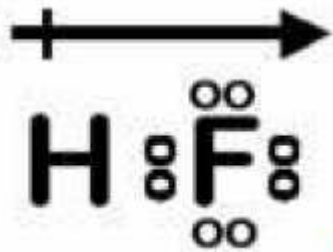


Có hai liên kết cộng hóa trị:

- Liên kết cộng hóa trị không phân cực. Trong đó, cặp e liên kết phân bố đều giữa hai nguyên tử. Ví dụ: H₂, O₂, N₂, C – H.
- Liên kết cộng hóa trị phân cực. Trong đó cặp e liên kết bị lệch về phía nguyên tử có độ âm điện lớn hơn.

Ví dụ: HCl, HF, H₂O, NH₃

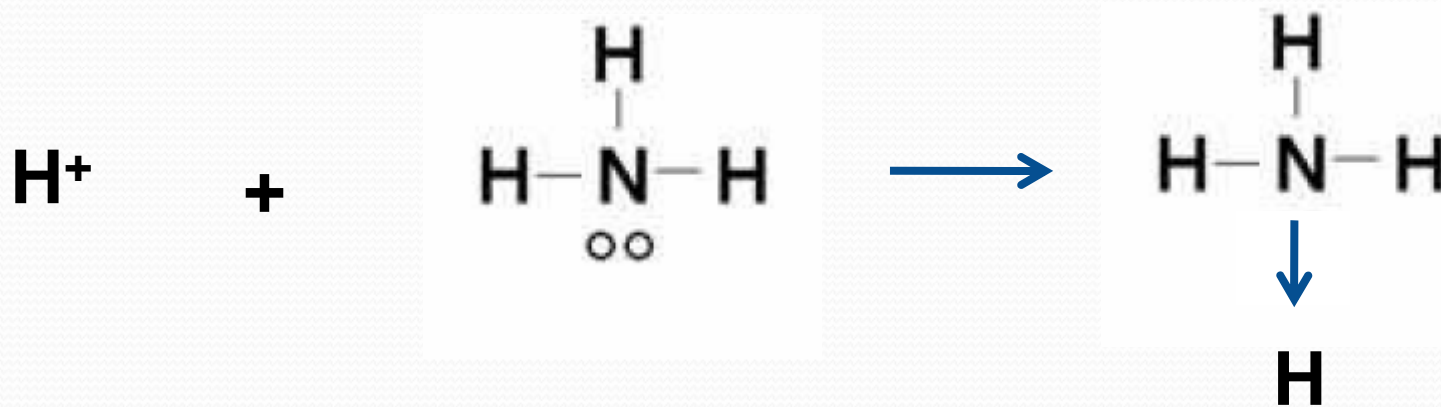
Liên kết cộng hóa trị tương đối bền. Năng lượng liên kết khoảng vài chục kcal/mol



c. Liên kết cho nhận

Liên kết cho nhận hay còn gọi là liên kết phối trí có thể xem là một dạng đặc biệt của liên kết cộng hóa trị. Trong liên kết này cặp e dùng chung chỉ do 1 nguyên tử đưa ra gọi là chất cho, còn nguyên tử kia có 1 obitan trống gọi là chất nhận.

Ví dụ: sự hình thành ion amoni từ phân tử NH_3 và H^+



I. Tương tác giữa các phân tử (Lực Van der Waals)

Lực tương tác giữa các phân tử được đặc trưng bằng những giá trị năng lượng khác nhau tùy thuộc vào mức độ có cực của các phân tử tương tác.

Những phân tử phân cực tồn tại dưới dạng những lưỡng cực có momen không đổi đều định hướng đối với nhau bằng các đầu tích điện ngược dấu. Tương tác này gọi là tương tác định hướng. Năng lượng của nó

$$E_{dh} = -\frac{2\mu^4}{3r^6kT}$$

μ : là momen lưỡng cực phân tử
 r : khoảng cách giữa các tâm của lưỡng cực, k : hằng số Boltzman
 T : nhiệt độ tuyệt đối

Khả năng phân cực của phân tử do sự dịch chuyển các e dưới tác dụng của điện trường ngoài được xác định bằng độ phân cực α của chúng. Năng lượng tương tác cảm ứng được xác định như sau:

$$E_{cu} = -\frac{2\alpha\mu^2}{r^6}$$

Mặc dù hai phân tử không cực có momen lưỡng cực bằng không, chuyển động của các e bên trong phân tử làm xuất hiện tức thời momen lưỡng cực nhỏ khi chúng tiến lại gần nhau. Phân tử này với momen lưỡng cực nhỏ lại gây ra một lưỡng cực cho phân tử cạnh bên. Năng lượng này được gọi là năng lượng tương tác khuếch tán.

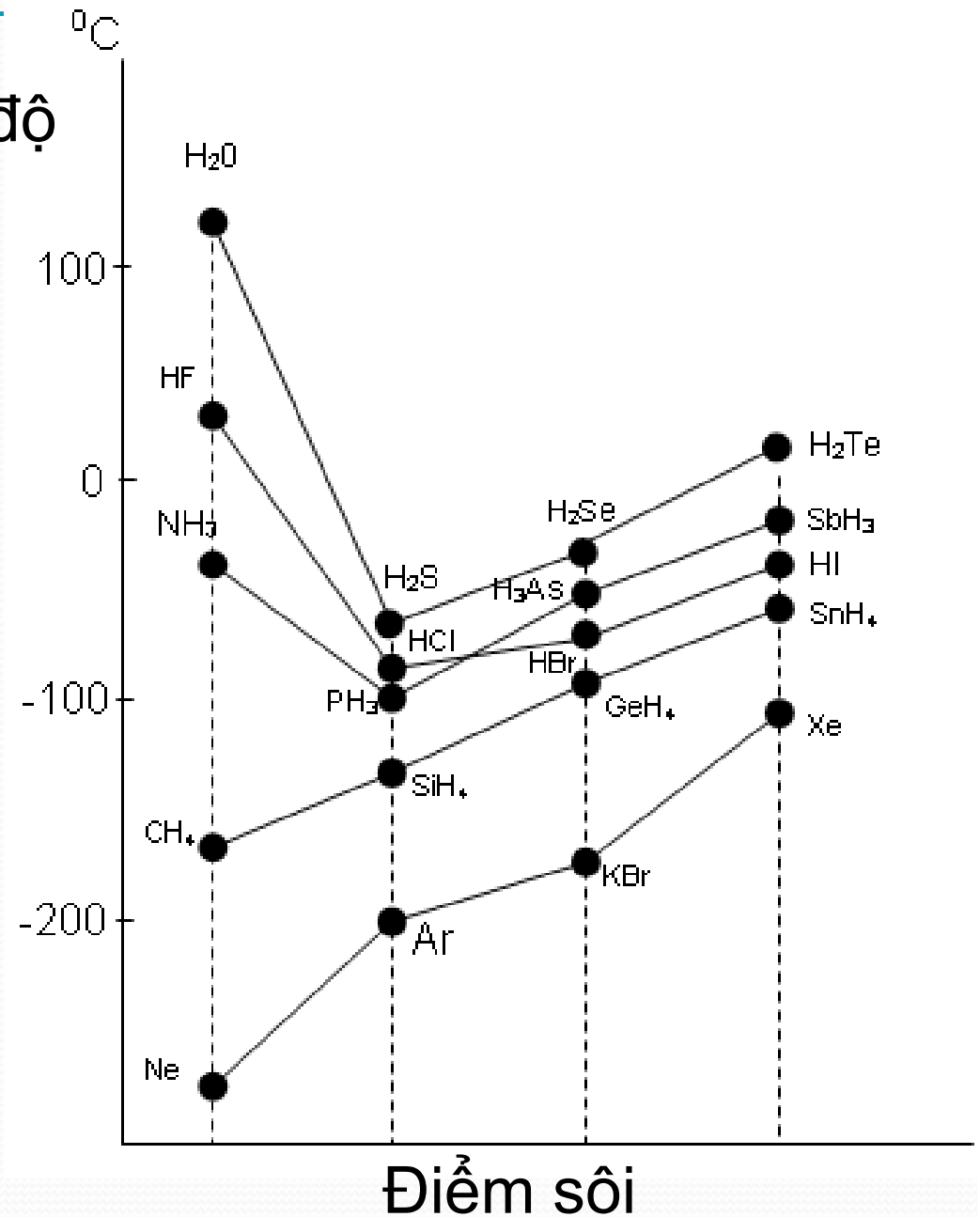
$$E_{kt} = -\frac{3\alpha^2}{4r^6} h\nu_0$$

$h\nu_0/2$ là năng lượng dao động của các nguyên tử ở 0°K với tần số ν_0

Năng lượng hấp dẫn giữa các phân tử E là tổng của 3 dạng năng lượng trên: $E_{\text{hấp dẫn phân tử}} = E_{\text{đh}} + E_{\text{cu}} + E_{\text{kt}}$

II. Liên kết Hidrô

Nhiệt độ sôi của H_2O , HF , NH_3 có điểm sôi cao hơn dự đoán cho thấy có một ngoại lực tương tác, đó chính là liên kết Hidrô



Nếu liên kết Hirdo xuất hiện ở những nguyên tố O, N, F(là những nguyên tố có độ âm điện mạnh, cặp e bị hút lệch về phía O, N, F. Tiếp tục nguyên tử H này lại bị hút bởi O, N, F kế bên



Liên kết Hdro có năng lượng cỡ 8 – 40 kJ/mol. Liên kết Hrdro càng bền khi nguyên tử phi kim liên kết với Hdro có độ âm điện càng lớn và kích thước càng nhỏ

Ảnh hưởng của liên kết Hidro đến tính chất lí, hóa của các chất

- *Làm tăng nhiệt độ sôi, nhiệt độ nóng chảy, nhiệt độ hóa hơi....*
- *Làm giảm độ điện li của axit*
- *Gây biến đổi độ tan*
- *Gây biến đổi khối lượng riêng của nước.*

III. Các trạng thái của vật chất

Một chất tồn tại ở trạng thái khí, lỏng hay rắn ở một điều kiện nào đó phụ thuộc vào động năng chuyển động nhiệt của hạt và thế năng tương tác của các tiểu phân

1. Trạng thái khí:

động năng chuyển động nhiệt vượt xa thế năng tương tác giữa các phân tử. Các phân tử khí chuyển động gần tự do chiếm toàn bộ thể tích bình đựng, chúng va chạm đàn hồi với nhau và với thành bình

Trạng thái của một chất khí được đặc trưng bởi 3 yếu tố: nhiệt độ(T), áp suất(p) và thể tích(V). Phương trình biểu diễn mối tương quan của 3 yếu tố này được gọi là phương trình trạng thái khí lý tưởng

$$pV = nRT$$

Trong đó: n: số mol khí

p: áp suất của chất khí ở thể tích V

R: hằng số khí = 0.082atm/molđộ hay = 62400mmHG/molđộ hay = 8.314J/molđộ

Khí lý tưởng là những khí thỏa mãn điều kiện:

- Kích thước không đáng kể so với thành bình
- Giữa các phân tử không có lực tương tác mà chỉ có va chạm đàn hồi giữa chúng, cũng như với thành bình.

2. Trạng thái lỏng:

Khi làm nguội các chất trạng thái khí hay nén các chất khí thật mạnh. Lực tương tác giữa các phân tử bắt đầu trội hơn năng lượng chuyển động của chúng và ở nhiệt độ xác định chất khí chuyển qua trạng thái lỏng

Sự khác biệt giữa động năng chuyển động nhiệt và thế năng tương tác giữa chúng không lớn lắm. Lực tương tác giữa các phân tử chất lỏng đã lớn hơn giữa các phân tử chất khí nhưng cũng chỉ đủ để ngăn không cho chúng chuyển động hỗn loạn chứ chưa đủ lớn để ngăn không cho chúng ngừng hẳn sự chuyển động. Vì vậy chất lỏng không có hình dạng và cấu trúc xác định

Các tính chất của chất lỏng: tính nhớt và sức căng bề mặt

Tính nhớt: các chất lỏng cản trở sự chuyển động của chúng.

Nếu gọi F là lực cần thiết để làm dịch chuyển lớp chất lỏng này so với lớp chất lỏng khác. F được tính theo công thức:

$$F = \eta S \frac{\Delta v}{\Delta x}$$

S : diện tích tiếp xúc giữa 2 lớp chất lỏng

Δv : hiệu số tốc độ giữa 2 lớp chất lỏng

Δx : khoảng cách giữa 2 lớp chất lỏng

η : hệ số độ nhớt, tỷ lệ thuận với nhiệt độ

Sức căng bề mặt (σ): các phân tử nằm sâu bên trong chất lỏng và các phân tử nằm bên trên bề mặt chất lỏng chịu lực hút không giống nhau.

➤ Phân tử ở sâu được bao bọc bởi các phân tử khác từ mọi phía và các lực tác dụng lên nó cân bằng nhau.

➤ Các phân tử ở lớp mặt chịu lực tác dụng từ các phân tử ở lớp trong và có xu hướng bị hút vào trong. Vì vậy toàn bộ bề mặt ở trạng thái căng.

➤ Sức căng bề mặt được đặc trưng bằng công tiêu tốn để làm tăng diện tích bề mặt lên 1cm^2

Đơn vị tính của σ là (dyn/cm) hay erg/ cm^2

3. Trạng thái rắn

Khi chuyển qua trạng thái rắn, khoảng cách giữa các phân tử trở nên nhỏ hơn, lực tương tác giữa chúng mạnh hơn. Do đó chất rắn có thể tích và hình dạng không đổi. Chất rắn được đặc trưng bởi 2 trạng thái tinh thể và vô định hình.

Chất rắn tinh thể

Đó là những chất có thể tự kết tinh thành các tinh thể có hình dạng xác định. Bên trong tinh thể các nguyên tử, phân tử, ion được sắp xếp theo một trật tự xác định. Trật tự này quyết định hình dạng và tính đối xứng của tinh thể.

Chất tinh thể có nhiệt độ nóng chảy xác định và không đổi trong suốt quá trình nóng chảy.

Chất tinh thể có tính bất đẳng hướng

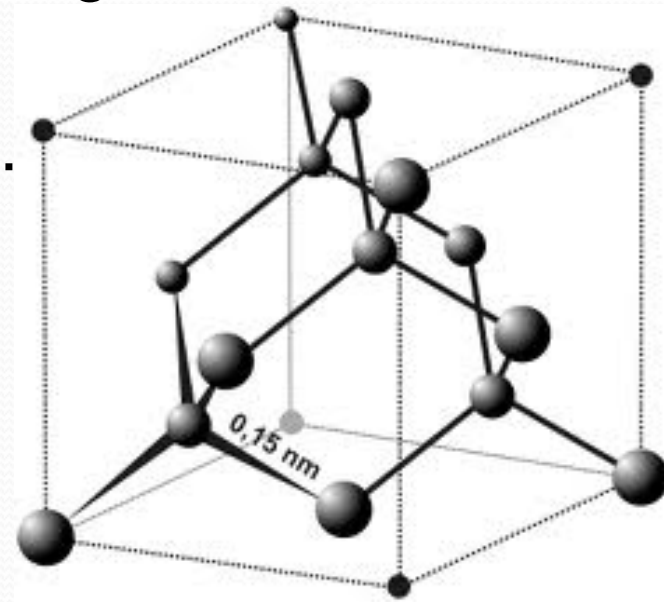
Các kiểu mạng tinh thể

Dựa vào bản chất của các tiểu phân ở nút mạng và lực liên kết giữa chúng, người ta chia mạng tinh thể thành 4 kiểu chính: mạng nguyên tử, mạng phân tử, mạng ion, mạng kim loại...

Mạng nguyên tử:

- Mạng nguyên tử được tạo thành từ những liên kết với nhau bằng lực liên kết cộng hóa trị. Quy luật phân bố các nguyên tử trong mạng tinh thể được quyết định bởi kiểu lai hóa các orbital của nguyên tử
- Số phối trí(số tiểu phân bao quanh gần nhất đối với ion trung tâm) của nguyên tử bằng số liên kết σ tạo thành bởi các nguyên tử.

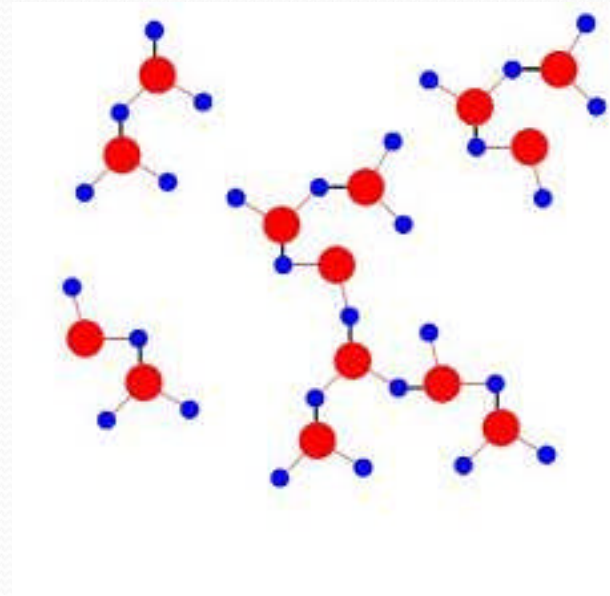
Ví dụ: kim cương, Si, Ge, ZnS..



Mạng phân tử

Mạng phân tử có các tiểu phân cấu trúc là những phân tử(đối với khí trơ là những nguyên tố), chúng hút nhau bằng liên kết yếu Vander Waals. Do đó, chất có mạng phân tử dễ nóng chảy, dễ bay hơi, mềm và dễ tan.

Ví dụ: H_2 , O_2 , N_2 , khí trơ, CO_2 ... rắn

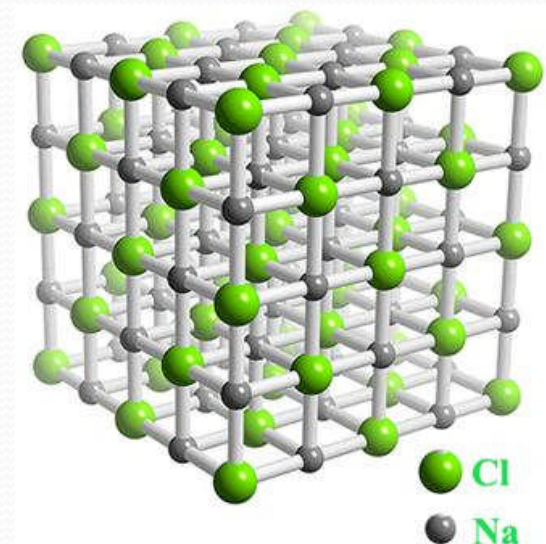


Mạng ion

Mạng ion được tạo thành từ những ion ngược dấu luân phiên nằm tại các nút mạng và liên kết với nhau bằng lực hút tĩnh điện.

Mạng ion có số phối trí cao(do liên kết ion không bão hòa và không định hướng), mỗi một ion được bao quanh bởi nhiều ion ngược dấu, nên toàn bộ tinh thể ion cũng là một phân tử khổng lồ bền vững có nhiệt độ sôi, nhiệt độ nóng chảy khá cao, độ cứng lớn, dễ tan và điện ly mạnh trong nước.

Ví dụ: NaCl, muối hlogenua của kl kiềm

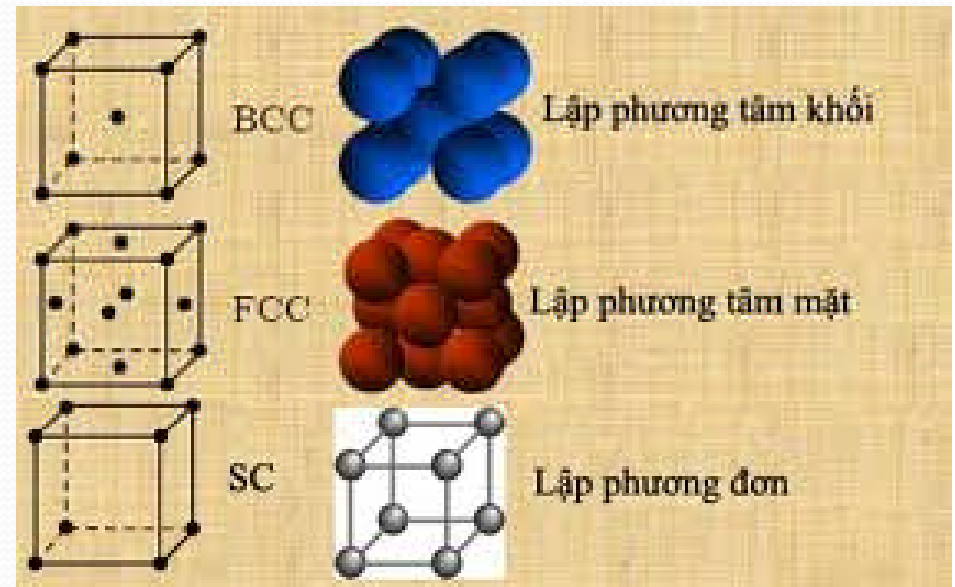


Mạng kim loại

Mạng kim loại được đặc trưng bằng các ion dương nằm tại nút mạng và liên kết giữa chúng là liên kết kim loại.

Trong tinh thể kim loại các nguyên tử có khuynh hướng sắp xếp thế nào cho sát sao nhất. Mạng kim loại có số phối trí rất cao

Mạng kim loại có 1 trong 3 kiểu: lục phương, lập phương tâm diện và lục phương tâm khối.



Chất rắn vô định hình

Là những chất rắn không thể kết tinh thành những tinh thể có hình dạng xác định. Trong chất vô định hình các phân tử sắp xếp hỗn độn. Chúng không có nhiệt độ nóng chảy nhất định. Khi bị đun nóng chúng mềm dần đến trạng thái chảy, sau đó biến thành chất lỏng hoàn toàn. Chất vô định hình có tính đẳng hướng
Ví dụ: thủy tinh, cao su