

CÔNG THỨC CẤU TẠO LEWIS VÀ XÁC ĐỊNH TRẠNG THÁI LAI HÓA CỦA PHÂN TỬ

Phan Thị Xuân (Trường Đại Học Công Nghiệp Thực Phẩm tp HCM),

1. Giới thiệu

Bên cạnh công tác nghiên cứu khoa học thì công tác giảng dạy cũng đóng một vai trò quan trọng trong sự phát triển bền vững của nhà trường. Trong qua trình giảng dạy học phần Hóa Đại Cương cho sinh viên năm thứ nhất ở trường Đại học Công nghiệp Thực phẩm tp Hồ Chí Minh, tác giả bài viết này nhận thấy các em sinh viên thường lúng túng khi tiếp thu kiến thức về cách viết công thức cấu tạo Lewis cũng như dự đoán trạng thái lai hóa của các phân tử. Theo giáo trình Hóa Đại cương của tác giả Nguyễn Đình Soa – Nhà xuất bản Đại Học Quốc Gia thành phố Hồ chí Minh, để dự đoán trạng thái lai hóa phải tính tổng $T = \text{số liên kết } \sigma + \text{số cặp e tự do không liên kết}$. Cách tính toán này tương đối mất thời gian. Để có thể tính nhanh hơn tổng T có thể dùng cách đếm số cặp e chung quanh nguyên tử trung tâm gồm cả cặp e liên kết và cặp e không liên kết. Lưu ý liên kết đôi, ba xem như liên kết đơn (bởi trong liên kết đôi hay liên kết 3 chỉ có một liên kết σ)

Như vậy nếu viết được công thức cấu tạo Lewis thì xác định được tổng T , xác định được trạng thái lai hóa, xác định được hình học đám mây AO. Căn cứ vào số cặp e tự do không liên kết sẽ dự đoán hình học phân tử.

Cách viết công thức cấu tạo Lewis theo giáo trình Hóa Đại cương đang lưu hành tại Trường ĐHCN Thực Phẩm tp Hồ Chí Minh dựa vào quy tắc bát tử của cả nguyên tử trung tâm và nguyên tử biên (viết theo tác giả Nguyễn Đức Chung – Nhà xuất bản Đại Học Quốc Gia thành phố Hồ chí Minh -2002). Cách viết này qua nhiều bước và chỉ áp dụng cho trường hợp nghiệm đúng với qui tắc bát tử của tất cả nguyên tử có trong phân tử. Ở đây xin được nêu ra một cách viết công thức cấu tạo Lewis mà **chủ yếu chỉ dựa vào quy tắc bát tử của nguyên tử biên và áp dụng cho cả trường hợp nguyên tử trung tâm tuân theo hay không tuân theo qui tắc bát tử**, bên cạnh đó người viết cũng so sánh với cách viết đang được áp dụng trong giáo trình Hóa Đại cương đang lưu hành tại Trường ĐHCN Thực Phẩm tp Hồ Chí Minh

2. Cách viết công thức cấu tạo Lewis và hình học phân tử

2.1. Theo giáo trình Hóa Đại cương đang lưu hành ở Trường ĐHCN Thực Phẩm tp Hồ Chí Minh

2.1.1. Công thức cấu tạo Lewis (Viết theo tác giả Nguyễn Đức Chung)

Bước 1: Xác định bộ khung phân tử: xác định nguyên tử trung tâm (thường là nguyên tử có độ âm điện thấp) với các nguyên tử liên kết với nó. Biểu diễn chúng dưới dạng ký hiệu hóa học. Viết các liên kết đơn giữa các nguyên tử trung tâm với các nguyên tử liên kết.

Bước 2: Xác định tổng số electron hóa trị của tất cả các nguyên tử trong phân tử. Đối với ion nhiều điện tích, trừ bớt một electron cho mỗi điện tích dương, hoặc cộng thêm một electron cho mỗi điện tích âm.

Bước 3: Cứ mỗi liên kết đơn trong cấu trúc khung trừ đi 2 electron trong tổng số electron hóa trị. Số electron còn lại sẽ thêm vào vào cấu trúc Lewis.

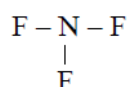
Bước 4: Tính số electron không liên kết cần thiết để thỏa mãn quy tắc bát tử đối với mỗi nguyên tử (lưu ý là nguyên tử hydro chỉ cần hai electron). Nếu số electron cần

thiết để thỏa mãn quy tắc bát tử bằng với số electron còn lại ở bước 3 thì hoàn thành cấu trúc Lewis bằng cách thêm các cặp điện tử không liên kết.

Bước 5: Nếu số electron hóa trị còn lại ít hơn số electron cần thiết để thỏa mãn quy tắc bát tử, cấu trúc Lewis có các liên kết đa. Cứ ứng với mỗi cặp electron cần có thêm để thỏa mãn quy tắc bát tử dùng một liên kết đa. Tạo ra số liên kết đa thích hợp và hoàn tất cấu trúc Lewis bằng cách thêm các cặp electron không liên kết.

Ví dụ : Viết công thức Lewis của NF_3

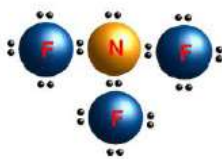
Bước 1: Viết bộ khung phân tử NF_3



Bước 2: Nguyên tử N có 5 electron hóa trị, nguyên tử F có 7 electron hóa trị. Tổng số electron hóa trị trong phân tử là: $5 + 7 \times 3 = 26$

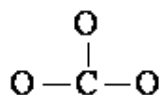
Bước 3: Số electron còn lại sẽ thêm vào vào cấu trúc Lewis: $26 - 3 \times 2 = 20$

Bước 4: Số electron không liên kết cần thiết để thỏa mãn quy tắc bát tử đối với mỗi nguyên tử là: $6 \times 3 + 2 = 20$ Như vậy công thức cấu tạo Lewis của NF_3 là



Ví dụ 2 : Viết công thức CO_3^{2-}

Bước 1: Viết bộ khung phân tử CO_3^{2-}

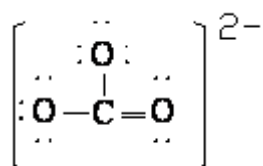


Bước 2: Tổng số electron hóa trị trong phân tử là: $4 + 6 \times 3 + 2 = 24$

Bước 3: Số electron còn lại sẽ thêm vào vào cấu trúc Lewis: $24 - 3 \times 2 = 18$

Bước 4: Số electron không liên kết cần thiết để thỏa mãn quy tắc bát tử đối với mỗi nguyên tử là: $6 \times 3 + 2 = 20$

Bước 5 : cấu trúc Lewis có liên kết đôi . Công thức cấu tạo Lewis của CO_3^{2-} sẽ là



2.1.2. Dự đoán trạng thái lai hóa (viết theo Nguyễn Đình Soa)

$T = \text{số liên kết } \sigma + \text{số cặp electron hóa trị tự do ở nguyên tử trung tâm.}$

+ *Tính số liên kết σ* : có bao nhiêu nguyên tử biên liên kết với nguyên tử trung tâm thì có bấy nhiêu liên kết σ .

+ *Tính số cặp electron hóa trị tự do*:

- Tính tổng số electron hóa trị của các nguyên tử trong phân tử (X) (nếu có a điện tích dương thì tổng số electron hóa trị bằng $X - a$, ngược lại nếu có b điện tích âm thì tổng số electron hóa trị bằng $X + b$).

- Tính số electron hóa trị bão hòa dành cho các phối tử liên kết với nguyên tử trung tâm (Y) (tính 8 electron cho mỗi phối tử nói chung và 2 electron cho mỗi nguyên tử H).

- Tính hiệu số giữa tổng số electron hóa trị của phân tử (X) và số electron hóa trị dành cho các phối tử (Y) (tức là hiệu số $X - Y$). Hiệu số này chia 2 chính là số cặp electron hóa trị tự do của nguyên tử trung tâm.

Với cách viết như trên thì viết công thức cấu tạo Lewis là không dễ dàng. Qua nhiều bước tính và cũng không dễ để xác định liên kết đa ở đây là 2 liên kết đôi hay một liên kết ba nếu thiếu tới 2 cặp e, cũng không xác định được vị trí của liên kết đôi hay đa ở đâu. Thêm nữa hoàn toàn không chỉ ra được mối liên hệ giữa công thức cấu tạo Lewis và trạng thái lai hóa của nguyên tử trung tâm. Vì thế khi dự đoán trạng thái lai hóa phải qua nhiều bước tính toán và nếu trường hợp trong phân tử khi nguyên tử vừa đóng vai trò nguyên tử biên, vừa đóng vai trò nguyên tử trung tâm thì rất khó tính tổng T. Để khắc phục những nhược điểm vừa nêu, Người viết đề nghị một cách viết công thức cấu tạo Lewis mới và cách xác định tổng T mới

2.2. Công thức cấu tạo Lewis và hình học phân tử

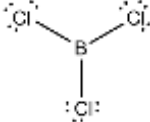
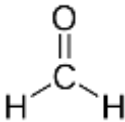
Bước 1: Xác định bộ khung phân tử: Xác định nguyên tử trung tâm (thường là nguyên tử có độ âm điện thấp) với các nguyên tử liên kết với nó. Biểu diễn chúng dưới dạng ký hiệu hóa học. Mỗi nguyên tử biên với nguyên tử trung tâm sẽ có ít nhất một liên kết

Bước 2 Xác định số e của mỗi nguyên tử và số e thêm vào nếu tiểu phân mang điện tích âm, số e trừ đi nếu tiểu phân mang điện tích dương

Bước 3 : Sắp xếp các e vào các nguyên tử tuân theo nguyên tắc sau :

- + Các nguyên tử dùng đủ các e của mình, nguyên tử trung tâm tùy thuộc vào số e của mình mà có thể tuân theo quy tắc bát tử hoặc không tuân theo quy tắc bát tử
- + Các e chung quanh nguyên tử biên đều có 8 e (trừ nguyên tử Hydro 2e)
- + Hydro chỉ hình thành một liên kết và không bao giờ là nguyên tử trung tâm
- + Nếu nguyên tử biên không có thêm electron thì liên kết với nguyên tử trung tâm được liệt kê theo Bảng 1

Bảng 1. Loại liên kết của nguyên tử biên

Nguyên tử biên ở nhóm	7A	6A	5A
Liên kết	Đơn	Đôi	Ba
Ví dụ	BCl_3	HCHO	HCN
Công thức cấu tạo			$\text{H}-\text{C}\equiv\text{N}$

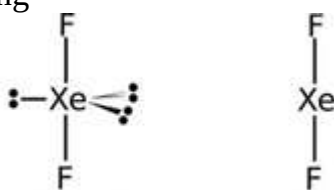
Sau khi xác định bộ khung phân tử sắp xếp liên kết của các nguyên tử biên với nguyên tử trung tâm sao cho đủ 8 e chung quanh nguyên tử biên (trừ nguyên tử H 2 e) theo quy luật trên nếu tiểu phân không có thêm e

- Xem xét số e mà nguyên tử trung tâm đã sử dụng cho các nguyên tử biên, số còn lại sẽ là số cặp e tự do

Nếu electron thêm vào nằm ở nguyên tử biên thì tính toán số liên kết sao cho đủ 8, và tiếp tục như trên với nguyên tử trung tâm.

Ví dụ 1. Nguyên tử biên là nguyên tố nhóm 7 như F trong phân tử XeF_2

Xác định bộ khung phân tử. F- Xe -F. Do F có 7 e nên để làm tròn 8 e . F chỉ tạo một liên kết đơn. Xe sẽ sử dụng 2 e tạo liên kết với 2 nguyên tử F. Số e còn lại ở Xe là 6 tức là Xe có 3 cặp e quay quanh ($T=5$). Trạng thái lai hóa là sp^3d . Hình học đám mây là lưỡng chóp tam giác. Nhìn vào công thức cấu tạo Lewis có 3 cặp e tự do, nên hình học phân tử là đường thẳng



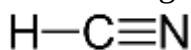
Ví dụ 2 Nguyên tử biên là nguyên tố ở nhóm 6 như O trong ion SO_4^{2-}

Xác định bộ khung phân tử S ở giữa chung quanh là 4 nguyên tử O. O có 6 e nên để có đủ 8 e phải tạo liên kết đôi với nguyên tử trung tâm. Tuy nhiên nếu cả 4 O đều tạo liên kết đôi thì S phải sử dụng 8e . Như vậy 2 e điện tích âm sẽ nằm ở S. Điện tích hình thức của S sẽ là 2-. Điều này không hợp lý vì O âm điện hơn S . Vì vậy sẽ có 2 O mang thêm một điện tử nữa . Và như vậy sẽ có 2 O tạo 2 liên kết đôi Và 2 O tạo 2 liên kết đơn với S. Số e S sử dụng đủ 6. Quanh S có 4 cặp e (liên kết đôi xem như liên kết đơn), không có cặp e tự do. $T=4$. Trạng thái lai hóa của nguyên tử trung tâm là sp^3 , không có cặp e tự do nên hình học phân tử là tứ diện.



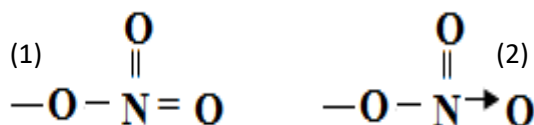
Ví dụ 3. Nguyên tử biên là nguyên tố nhóm 5 như N trong phân tử HCN

C là nguyên tử trung tâm do có độ âm điện thấp nhất, N là nguyên tử biên ở nhóm 5 nên sẽ tạo liên kết 3 với C để quanh N đủ 8 e. H sẽ tạo liên kết đơn để quanh H đủ 2 e. Như vậy C đã sử dụng đủ 4 e. Quanh C có 2 cặp e (T=2) không có cặp e tự do. Trạng thái lai hóa là sp. Hình học HCN là đường thẳng



Một lưu ý là khi sắp xếp các e sẽ có những phương án khác nhau như thay vì liên kết đôi là liên kết phối trí. Thực ra điều này không ảnh hưởng đến việc đếm tổng $T = \text{số liên kết } \sigma + \text{số cặp e tự do không liên kết}$. Nếu khi viết mà số liên kết $\sigma + \text{số cặp e tự do không liên kết}$ không khác nhau thì dù cho công thức Lewis có khác nhau kết quả vẫn không thay đổi.

Ví dụ như NO_3^- . Có thể có 2 cách viết



Cách viết 2 đảm bảo qui tắc bát tử của N. Tuy nhiên nếu đếm tổng T thì cả 2 cách viết đều cho $T=3$, lai hóa sp^2 và không có cặp e tự do nên hình học phân tử vẫn là hướng về 3 đỉnh của một tam giác.

3. Kết luận

Với cách viết công thức cấu tạo Lewis như trên sẽ không cần phải tính toán nhiều, và chỉ tuân theo qui tắc bát tử với nguyên tử biên nên dễ dàng để sắp xếp các nối đơn, nối đôi, nối ba quanh nguyên tử trung tâm. Khi đã viết được công thức cấu tạo Lewis thì không cần dùng công thức tính T mà chỉ cần đếm số cặp e liên kết và không liên kết. Từ công thức cấu tạo Lewis, xác định nhanh chóng các cặp e tự do không liên kết và sẽ rất dễ hình dung hình học phân tử. Với những phát hiện này hy vọng sẽ giúp cho giảng viên dạy tốt và sinh viên sẽ học tốt học phần Hóa Đại Cương

Ths Phan Thị Xuân – Cựu Giảng Viên Khoa Công Nghệ Hóa Học
Trường Đại Học Công nghiệp Thực Phẩm tp Hồ Chí Minh
Mobie phone: 0903004201- email: xuanpt@cntp.edu.vn

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] Nguyễn Đình Soa (2000), *Hóa Học Đại Cương*, Nhà xuất bản Đại học Quốc gia thành phố Hồ Chí Minh
- [2] Nguyễn Đức Chung (2003), *Bài Tập Hóa Học Đại Cương*, Nhà xuất bản Đại học Quốc gia thành phố Hồ Chí Minh
- [3] Lê thị Hồng Thúy và nhóm tác giả (2014), *Giáo trình Hóa Đại Cương*, Trường Đại Học Công Nghiệp Thực Phẩm tp Hồ Chí Minh lưu hành nội bộ