



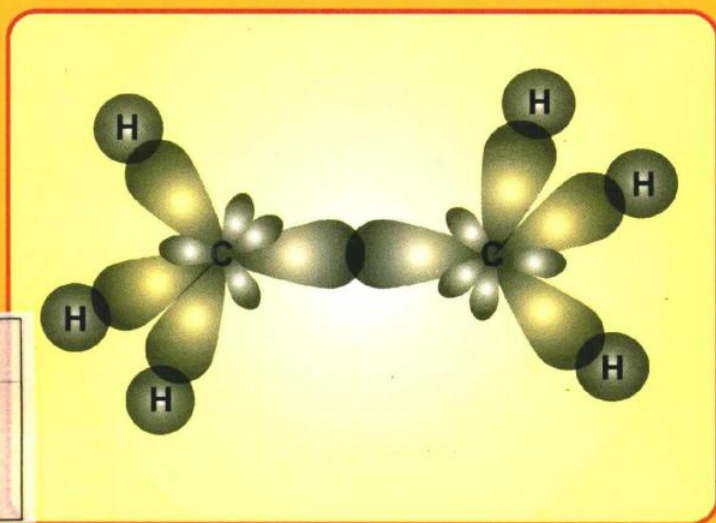
GT.0000027571

NGUYỄN ĐÌNH CHI

# CƠ SỞ LÍ THUYẾT HOÁ HỌC

DÙNG CHO CÁC TRƯỜNG ĐẠI HỌC KỸ THUẬT

## PHẦN I CẤU TẠO CHẤT



NGUYỄN  
ĐÌNH CHI



NHÀ XUẤT BẢN GIÁO DỤC VIỆT NAM



P.G.S NGUYỄN ĐÌNH CHI

# CƠ SỞ LÝ THUYẾT HÓA HỌC

(Dùng cho các trường đại học kỹ thuật)

PHẦN I

CẤU TẠO CHẤT

*(Tái bản lần thứ mười tám)*

NHÀ XUẤT BẢN GIÁO DỤC VIỆT NAM



## LỜI NÓI ĐẦU

Theo kế hoạch thực hiện chương trình I của Bộ Giáo dục và Đào tạo, sách giáo khoa "Cơ sở lý thuyết hoá học" được xuất bản để phục vụ việc giảng dạy và học tập môn Hoá học ở giai đoạn I của các trường đại học kỹ thuật. Sách gồm hai phần :

- Phần I : Cấu tạo chất
- Phần II : Các quá trình hoá học <sup>(1)</sup>

Cuốn sách này trình bày các kiến thức về cấu tạo chất theo chương trình môn học "Cơ sở lý thuyết hoá học" đã được hội đồng môn học Hoá học thông qua. Nội dung cuốn sách gồm những kiến thức cơ bản về cấu tạo nguyên tử, cấu tạo phân tử, liên kết hoá học và các trạng thái tập hợp. Đó là những kiến thức cần thiết chuẩn bị cơ sở cho sinh viên có thể tiếp thu được các môn hoá học khác và các môn kỹ thuật.

Việc giảng dạy cấu tạo ở những năm đầu của chương trình đại học cho đến nay vẫn còn là vấn đề nan giải. Đó là do mâu thuẫn giữa yêu cầu trang bị kiến thức sâu, rộng của chuyên đề này với sự hạn chế về thời gian và mức độ chuẩn bị về toán và vật lý của sinh viên trong những năm học đầu tiên ở đại học.

Theo tinh thần của chương trình môn học, cuốn sách chỉ bao gồm những phần kiến thức cơ bản nhất giúp cho sinh viên hiểu được các quy luật trong cấu tạo chất để tiếp tục học các

---

(1) Phần II do PGS Nguyễn Hạnh viết, Nhà xuất bản Đại học và GDCN đã xuất bản năm 1990.

môn khác ở giai đoạn hai. Một vài phần được viết sâu hơn (cách giải phương trình Schrödinger, giới thiệu phép tính biến phân trong phương pháp MO) để giúp cho một số sinh viên giỏi có thể tham khảo thêm. Phần trạng thái tập hợp viết gọn, không trình bày các dạng cấu trúc, bạn đọc có thể tham khảo thêm ở cuốn "Cơ sở lý thuyết hoá học" (Nguyễn Đình Chi, Phạm Thúc Côn, NXB Đại học THCN, In lần thứ 2, Hà Nội, 1985).

Như đã nói, việc giảng dạy cấu tạo chất ở giai đoạn đầu của chương trình đào tạo đại học hiện nay vẫn là vấn đề thời sự của giáo dục hoá đại học không chỉ ở Việt Nam mà cả trên thế giới. Khi chuẩn bị bản thảo, tác giả xin bày tỏ lòng biết ơn chân thành. Tác giả cũng xin trân trọng cảm ơn các đồng chí cán bộ ở Vụ Đào tạo Đại học (Bộ Giáo dục và đào tạo) và nhà xuất bản Đại học và giáo dục chuyên nghiệp đã tạo nhiều thuận lợi cho việc xuất bản cuốn sách. Tác giả mong tiếp tục nhận được sự đóng góp ý kiến xây dựng của bạn đọc.

PGS NGUYỄN ĐÌNH CHI

## MỞ ĐẦU

### 1. Đối tượng của hóa học

#### 1.1. Đối tượng nghiên cứu của khoa học tự nhiên là vật chất

Vật chất tồn tại dưới hai hình thức là chất và trường.

Chất là hình thức tồn tại của vật chất dưới dạng những hạt có khối lượng như electron, proton, nơtron, nguyên tử, phân tử, tinh thể...

Trường là hình thức tồn tại của vật chất biểu hiện dưới dạng các lực tương tác giữa các vật hoặc dạng các tia, ví dụ lực hấp dẫn, bức xạ...

Giữa chất và trường không có sự đối lập mà có mối quan hệ thống nhất. Ví dụ ánh sáng vừa có bản chất hạt vừa có bản chất sóng.

#### 1.2. Vật chất tồn tại trong vận động

Vận động là tính chất có sẵn của vật chất. Trong vô số hình thức vận động của vật chất có thể phân chia ra 5 hình thức vận động cơ bản :

- Vận động cơ học : là sự chuyển đổi vị trí của vật.
- Vận động vật lí học thể hiện ở sự tương tác giữa các hạt cơ bản, ở các hiện tượng nhiệt, điện, từ...
- Vận động hóa học liên quan đến sự hình thành và phá vỡ các mối liên kết giữa các nguyên tử, tương ứng với hiệu ứng năng lượng từ vài  $J/mol$  đến hàng trăm  $kJ/mol$ .
- Vận động sinh vật học liên quan đến sự biến đổi các chất sống và các hoạt động sống của sinh vật.
- Vận động xã hội.



Các dạng vận động đó liên quan mật thiết với nhau và có thể chuyển hóa lẫn ra nhau.

Mỗi dạng vận động tương ứng với một trình độ tổ chức của vật chất. Tùy thuộc vào trình độ tổ chức của mình mỗi đối tượng vật chất có một hình thức vận động chính và những hình thức vận động thấp hơn. Ví dụ cơ thể sống có dạng vận động sinh vật học là chính (tương ứng với tổ chức tế bào) đồng thời có các dạng vận động hóa học, vật lí học, cơ học.

Thước đo vận động là năng lượng. Các dạng vận động có thể chuyển hóa lẫn ra nhau nên các dạng năng lượng cũng có thể chuyển hóa lẫn ra nhau.

Vật chất luôn luôn được bảo toàn, vận động cũng được bảo toàn cho nên năng lượng cũng được bảo toàn. Đó là nội dung của định luật bảo toàn vật chất và năng lượng.

**1.3. Hóa học** là một bộ phận của khoa học tự nhiên nghiên cứu dạng vận động hóa học của vật chất. Dạng vận động hóa học của vật chất liên quan với sự hình thành và phá vỡ các mối liên kết giữa các nguyên tử, thực chất đó là sự phân bố lại electron hóa trị giữa các nguyên tử đồng thời với sự sắp xếp lại các nguyên tử trong không gian. Quá trình đó dẫn đến sự biến đổi chất này thành chất khác kèm theo sự giải phóng hoặc hấp thụ năng lượng. Những quá trình như vậy được gọi là quá trình hóa học. Trong quá trình hóa học, bản chất của nguyên tử (đặc trưng bằng điện tích hạt nhân) không bị biến đổi.

Như vậy có thể xác định đối tượng của hóa học : hóa học là khoa học nghiên cứu sự phụ thuộc của tính chất các chất vào thành phần và cấu tạo của chúng và những quá trình liên quan đến sự biến đổi các chất.

## **2. Mối quan hệ giữa hóa học với các ngành khoa học khác. Vai trò của hóa học trong đời sống và kĩ thuật**

**2.1. Một đặc điểm của nền khoa học và kĩ thuật hiện đại** là việc xem xét toàn diện đối tượng nghiên cứu



bằng cách áp dụng một cách tổng hợp các quan điểm và phương pháp của nhiều ngành khoa học, do đó các ngành khoa học vừa chuyên môn hóa sâu sắc hơn lại vừa xâm nhập vào nhau mạnh mẽ hơn.

Khoa học hóa học với quan điểm và phương pháp của mình đóng góp phần quan trọng vào việc hình thành phương pháp tư duy khoa học hoàn thiện và chính xác. Phong cách tư duy hóa học dựa trên cơ sở mối quan hệ biện chứng giữa tính chất và khả năng biến đổi của các chất với cấu trúc hóa học của chất.

Các quan niệm và khái niệm cơ bản của hóa học được áp dụng để tìm hiểu và xây dựng quan điểm lý thuyết cho nhiều ngành khoa học khác như vật lý học, sinh vật học, địa chất học... và các lĩnh vực kỹ thuật khác nhau. Các phương pháp nghiên cứu hóa học được sử dụng rộng rãi trong nhiều ngành khoa học và kỹ thuật.

Bản thân hóa học cũng áp dụng nhiều thành tựu của các ngành khoa học khác. Các phương pháp toán học ngày càng có vị trí quan trọng trong phát triển hóa học do sự chuyển mạnh phương pháp nghiên cứu hóa học từ định tính sang định lượng. Nhiều thành tựu lý thuyết của vật lý học đã trở thành nền tảng lý luận của các lý thuyết hóa học, nhiều phương pháp vật lý đã trở thành phương pháp nghiên cứu chủ yếu của hóa học.

**2.2. Ngày nay những thành tựu của hóa học có ảnh hưởng mạnh mẽ đến mọi lĩnh vực hoạt động của con người.** Trong sinh hoạt bình thường mỗi người đều luôn luôn tiếp xúc với các chế phẩm hóa học. Trong kỹ thuật, vấn đề vật liệu, một vấn đề sống còn của loài người, chỉ có thể giải quyết được trên cơ sở các thành tựu của hóa học. Người ta đã và đang tìm tòi các loại vật liệu mới có tính chất ưu việt hơn hẳn các vật liệu tự nhiên. Nhiều vật liệu truyền thống sau khi được chế hóa hóa học trở nên có giá trị sử dụng cao hơn trước rất nhiều. Về mặt năng lượng, hóa học góp phần tạo ra các nguồn năng lượng mới và nâng cao hiệu suất sử dụng các nguồn năng lượng hiện có bằng cách góp phần cải tiến các quá trình công nghệ. Hóa học cũng đóng góp phần quyết định vào việc bảo vệ và cải thiện môi trường sống cho con người. Việc hóa học hóa nền nông nghiệp là một biện pháp chủ yếu đảm bảo sự phát triển mạnh mẽ nông nghiệp.

### 3. Các khái niệm cơ bản của hóa học - đơn vị đo

#### 3.1. Các khái niệm cơ bản

Ngày nay khoa học đã chứng minh rằng các chất cấu tạo từ nguyên tử và phân tử. Mỗi nguyên tử có một hạt nhân mang điện tích dương xác định. Tập hợp các nguyên tử có cùng điện tích hạt nhân là một nguyên tố hóa học. Các nguyên tử có thể kết hợp với nhau tạo thành phân tử nhờ các mối liên kết hóa học.

Phản ứng hóa học là quá trình biến đổi các chất này thành các chất khác.

#### 3.2. Đơn vị đo

Ngoài những thứ đơn vị thường dùng chung cho nhiều ngành, trong hóa học còn hay dùng một số đơn vị sau :

a) *Mol* : là lượng chất có chứa số phân tử, số nguyên tử, số ion, số electron... hay nói chung là số đơn vị cấu trúc (hạt) bằng số nguyên tử  $^{12}\text{C}$  có trong 12 gam đồng vị cacbon - 12, tức là bằng số *Avogadro* ( $N_A = 6,0229 \cdot 10^{23}$ ).

Khi dùng khái niệm mol cần phải xác định rõ đơn vị cấu trúc hay hạt đơn vị là gì. Ví dụ một mol hidro-nguyên tử có khối lượng bằng 1,0079 gam, 1 mol hidro - phân tử có khối lượng bằng 2,0158 gam.

b) *Dương lượng* :

- *Dương lượng của một nguyên tố là lượng nguyên tố đó có thể kết hợp hoặc thay thế một mol nguyên tử hidro trong phản ứng hóa học.*

Ví dụ trong các hợp chất : HF, H<sub>2</sub>O, NH<sub>3</sub>, CH<sub>4</sub> dương lượng của các nguyên tố F, O, N, C lần lượt bằng 1 mol nguyên tử, 1/2 mol nguyên tử, 1/3 mol nguyên tử, 1/4 mol nguyên tử của các nguyên tố đó.

- *Khối lượng dương lượng (hay dương lượng khối) của một nguyên tố là khối lượng tính ra gam của một dương lượng của nguyên tố đó.*