

PGS. NGUYỄN ĐÌNH CHI

HOÁ HỌC ĐẠI CƯƠNG

(Tái bản lần thứ nhất)

ĐẠI HỌC THÁI NGUYÊN
TRUNG TÂM HỌC LIỆU

NHÀ XUẤT BẢN GIÁO DỤC

những nội dung có liên quan đến "Hoá học đại cương" đã được tác giả trình bày tương đối đầy đủ.

Trân trọng tình cảm và công sức của Phó giáo sư Nguyễn Đình Chi đã biến những tích lũy của mình sau nhiều năm đứng trên bục giảng thành những trang sách đầy tâm huyết dành cho học sinh, sinh viên và bạn đồng nghiệp.

Chúng tôi hy vọng cuốn "Hoá học đại cương" sau khi được xuất bản sẽ là tài liệu bổ ích cho sinh viên, cán bộ giảng dạy và những người yêu thích nghiên cứu Hoá học.

Cuốn sách có thể còn có những thiếu sót, mong bạn đọc thông cảm và những thiếu sót nếu được phát hiện, bạn đọc gửi về Nhà xuất bản Giáo dục – Công ty CP sách Đại học, Dạy nghề 25 Hàn Thuyên, Hà Nội.

NHÀ XUẤT BẢN GIÁO DỤC

MỞ ĐẦU

0.1. ĐỐI TƯỢNG VÀ PHƯƠNG PHÁP CỦA HOÁ HỌC

Con người sống và hoạt động trong thế giới vật chất. Người ta phân biệt hai hình thức tồn tại cơ bản của vật chất là *chất* và *trường*. Chất là dạng tồn tại của vật chất cấu tạo từ những hạt riêng biệt có khối lượng riêng (“khối lượng nghỉ”) và chiếm một thể tích xác định trong không gian. Trường là những dòng lượng tử không có khối lượng nghỉ, ví dụ trường hấp dẫn, trường điện từ...

Theo quan điểm của khoa học hiện đại, các hạt có bản chất *nhị nguyên*: vừa có tính hạt, vừa có tính sóng (còn gọi là *lưỡng tính sóng hạt*). Trường cũng có bản chất nhị nguyên như vậy. Giữa chất và trường có mối liên hệ mật thiết. Tương tác giữa các hạt được thực hiện qua trường.

Mục đích của khoa học tự nhiên trước hết là khám phá ra bản chất của các hiện tượng tự nhiên, nhận thức các định luật của tự nhiên và ứng dụng các định luật đó vào hoạt động thực tiễn của con người. Hoá học là một bộ phận của khoa học tự nhiên, nghiên cứu về các chất và sự biến đổi của các chất. Đối tượng vật chất mà các nhà hoá học quan tâm nghiên cứu là các *chất hoá học*. Chất hoá học là dạng vật chất có thành phần xác định và những tính chất đặc thù. Mỗi chất hoá học cấu tạo từ những nguyên tử của một hay một số nguyên tố hoá học. Các nguyên tử đó có thể tồn tại độc lập hoặc liên kết với nhau tạo thành phân tử hoặc tinh thể. *Hỗn hợp* là tập hợp gồm hai hay nhiều chất trong đó các chất vẫn giữ được tính chất đặc thù của chúng.

Mỗi chất hoá học có thành phần xác định và các tính chất xác định. Các tính chất đó lại được phân chia thành *tính chất vật lý* và *tính chất hoá học*. Tính chất vật lý là những tính chất có thể quan sát được hay đo được mà không cần làm thay đổi thành phần hay bản chất của chất đó. Tính chất hoá học là tính chất mà ta muốn quan sát được hoặc đo được thì cần phải thực hiện biến đổi chất đó tức là tính chất chỉ thể hiện trong các biến đổi hoá học hay còn gọi là các *phản ứng hoá học*.

Để hiểu được thành phần và tính chất của các chất ta phải nghiên cứu các chất và các quá trình. Hoá học là khoa học thực nghiệm. Về đại thể có thể coi nghiên cứu hoá học gồm ba bước chính: quan sát, miêu tả và giải thích. Các nghiên cứu hoá học trước đây và phần lớn nghiên cứu hiện nay của hoá học được thực hiện ở quy mô *vĩ mô*, tức là ở quy mô mà con người có thể quan sát trực tiếp được. Tuy nhiên để giải thích các kết quả vĩ mô mà ta quan sát được lại phải xem xét đến cấu tạo nguyên tử

và phân tử tức là tìm hiểu vật chất ở mức độ *vi mô*. Với tiến bộ của kỹ thuật thực nghiệm ngày nay nhiều thí nghiệm được tiến hành ở quy mô vi mô tức là ở mức độ từng nguyên tử, phân tử.

Khi tiến hành nghiên cứu trước hết nhà hoá học xác định hệ thống (gọi tắt là hệ) dùng làm đối tượng nghiên cứu. Sau đó tiến hành quan sát và đo lường để thu thập các dữ kiện bao gồm cả những *thông tin định tính* và *định lượng*. Từ khối lượng lớn các dữ kiện thu được từ thực nghiệm, người ta thường tổng kết lại thành *định luật* dưới dạng một phát biểu hay một mệnh đề toán học. Từ đó người ta có thể nêu *giả thuyết* để giải thích các kết quả thực nghiệm. Nếu sau nhiều lần kiểm tra giả thuyết thể hiện được tính đúng đắn thì giả thuyết trở thành *lý thuyết*. Lý thuyết là một nguyên lý thống nhất cho phép giải thích hàng loạt sự kiện và định luật trong một phạm vi xác định.

0.2. QUAN HỆ GIỮA HOÁ HỌC VÀ CÁC NGÀNH KHOA HỌC KỸ THUẬT KHÁC

Ngay từ khi mới hình thành hoá học đã có quan hệ mật thiết với các ngành khoa học và kỹ thuật khác. Ngày nay khi khoa học đã phát triển đến trình độ cao thì ảnh hưởng lẫn nhau và sự xâm nhập lẫn vào nhau giữa hoá học và các ngành khác càng mạnh mẽ và sâu sắc.

Trước hết là sự áp dụng toán học và hoá học. Các mối quan hệ định lượng rộng lớn trong hoá học chỉ có thể diễn đạt được nhờ các phương pháp và công cụ toán học. Ví dụ để thể hiện trong mọi lĩnh vực khác nhau của hoá học. Ví dụ để hiểu bản chất của cấu tạo nguyên tử, cấu tạo phân tử và tương tác giữa các loại hạt đó không thể thiếu các kiến thức đại số, hình học, vi phân, tích phân... Để xây dựng các lý thuyết của nhiệt động hoá học ta phải dùng khái niệm hàm số, đạo hàm riêng, vi phân, tích phân... Ngược lại thực tế của hoá học và công nghệ hoá học lại là động lực thúc đẩy sự nghiên cứu và áp dụng toán học được phát triển. Trong những năm gần đây sự áp dụng tin học vào hoá học có tác dụng rất mạnh mẽ đến sự phát triển của hoá học và công nghệ hoá học.

Mối quan hệ giữa hoá học và vật lý học đặc biệt mật thiết. Mọi lý thuyết của hoá học và kỹ thuật hoá học đều được xây dựng trên cơ sở lý thuyết vật lý áp dụng cho các hệ hoá học. Các lý thuyết của vật lý về lượng tử, nhiệt, nhiệt động lực học, điện học, từ học, quang học... đều là cơ sở để xây dựng các lý thuyết và phương pháp nghiên cứu, ứng dụng trong hoá học.

Hoá học cũng có ảnh hưởng đến và chịu ảnh hưởng của nhiều ngành khoa học và kỹ thuật khác. Cơ thể sống là hệ hoá học phức tạp, vì vậy việc khám phá ra các quy luật sự sống gắn liền với việc tìm hiểu bản chất hoá học trong các hệ đó. Kiến thức hoá học là cực kỳ quan trọng đối với các ngành sinh vật học, nông học, y, dược...

Kiến thức hoá học cũng là cơ sở quan trọng để hiểu biết nhiều dạng tồn tại của vật chất như cấu tạo vỏ quả đất, khoáng sản, bầu khí quyển và môi trường sống...

Vì vậy hoá học là môn khoa học cơ bản quan trọng đối với các ngành mỏ, địa chất, khí tượng, thủy văn,...

Tiến bộ của mọi ngành kỹ thuật đều quan hệ mật thiết với việc sử dụng vật liệu và bảo vệ môi trường sống. Việc cải tiến phương pháp sử dụng các vật liệu sẵn có trong thiên nhiên và việc tìm kiếm các nguồn vật liệu mới và cả các nguồn năng lượng mới chỉ có thể thực hiện được khi có những tiến bộ của hoá học. Có thể nói rằng trong thời đại hiện nay kiến thức hoá học là một trong những yếu tố quan trọng nhất của tiến bộ khoa học kỹ thuật trong mọi lĩnh vực hoạt động khoa học kỹ thuật của con người.

Con người sống trong môi trường cấu tạo từ các chất hoá học, thường xuyên tiếp xúc với các chất hoá học và các biến đổi hoá học. Cuộc sống của loài người chỉ có thể được bảo tồn và cải thiện nếu con người biết bảo vệ và cải thiện môi trường sống của mình. Điều này gắn liền với các hiểu biết hoá học.

Cuối cùng, hoá học là một bộ phận của khoa học tự nhiên đóng góp phần quan trọng vào hiểu biết về thế giới vật chất, hình thành thế giới quan và phương pháp hoạt động đúng đắn của con người.

0.3. CON ĐƯỜNG PHÁT TRIỂN CỦA HOÁ HỌC

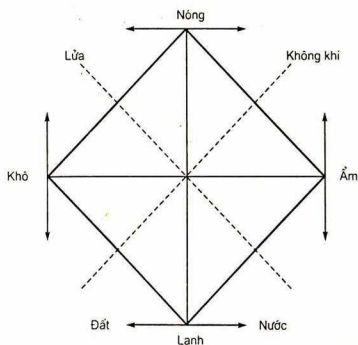
Cách đây hàng triệu năm, ngay từ khi thoát thai từ loài vượn, con người đã bắt đầu tìm hiểu các vật liệu để dùng làm công cụ lao động, vũ khí và vật dụng. Sau đó trong quá trình tiến hoá lâu dài, cùng với sự phát triển của trí tuệ, loài người dần dần mở rộng nhận thức của mình đối với thế giới vật chất chung quanh và khám phá ra nhiều khác ứng dụng các vật liệu vào cuộc sống. Tới khi những trung tâm văn minh lớn đầu tiên xuất hiện trên quả đất cách đây 5, 6 nghìn năm – những quốc gia chiếm hữu nô lệ ở Ai Cập, Lưỡng Hà, Trung Quốc, Ấn Độ – thì hiểu biết của con người về vật liệu đã khá cao. Các nghề luyện kim, gốm, chế thuốc nhuộm và sơn, thuộc da, kéo sợi, dệt vải, làm đường, mật... đã hình thành. Vào các thiên niên kỷ thứ 2, 3 trước công nguyên ở Ai Cập, Lưỡng Hà, Ấn Độ, Trung Quốc người ta đã biết đến nhiều hợp chất hoá học như các hương liệu, dầu thảo mộc, dược liệu, chất màu như oxit sắt, son..., người ta đã biết các quá trình bay hơi, lợc, lên men...

Nhiều hoạt động nghiên cứu hoá học đã được tiến hành vào trước và đầu công nguyên. Trong thâm cung của các nhà thờ Ai Cập cổ cũng như trong lâu đài của các hoàng đế Trung Hoa nhiều giáo sĩ và đạo sĩ miệt mài làm các thí nghiệm nhằm biến đổi các kim loại không quý thành vàng hoặc chế thuốc trường sinh bất tử và các dung môi vạn năng. Những hoạt động đó là mầm mống của trào lưu giả kim thuật lan tràn khắp châu Âu vào thời Trung cổ sau này.

Cùng với những hoạt động thực tiễn, những suy nghĩ cổ nhất của loài người về bản chất sự vật cũng xuất hiện rất sớm tại trung tâm văn minh cổ. Ở Trung Quốc từ những thế kỷ thứ 7 – 5 trước Công nguyên đã lưu truyền thuyết ngũ hành nói rằng cơ sở của mọi vật thể là năm nguyên tố "kim, mộc, thủy, hỏa, thổ" (kim loại,

gỗ, nước, lửa, đất) và hai lực lượng nguyên thủy đối lập “Đương” và “Âm” là động lực thúc đẩy mọi quá trình biến hoá của vật chất. Những quan niệm tương tự cũng được thấy trong kinh Vệ Đà của Ấn Độ xuất hiện vào khoảng thế kỷ thứ 6 trước Công nguyên.

Triết học tự nhiên về bản chất của thế giới vật chất phát triển đặc biệt rực rỡ ở Cổ Hy Lạp. Vào khoảng thế kỷ thứ 7 – 5 trước Công nguyên, ở Hy Lạp đã thịnh hành quan niệm coi các chất đầu tạo ra mọi vật là Nước, Không khí, Lửa và Đất (khởi xướng bởi Empedocles và các nhà triết học khác). Sau này Aristoteles phát triển học thuyết của Empedocles và cho rằng bốn nguyên tố đó chỉ là chất mang các tính chất chính của vật chất là Nóng, Lạnh, Khô, Ẩm. Các tính chất này kết hợp đôi một tạo thành các nguyên tố. Ví dụ Lạnh và Ẩm kết hợp với nhau tạo thành Nước, Lạnh và Khô kết hợp với nhau tạo thành Đất, Nóng và Ẩm kết hợp với nhau tạo thành Không khí, Nóng và Khô kết hợp với nhau tạo thành Lửa (xem hình 1.1). Khi biến đổi lượng tính chất trong một nguyên tố ta có thể biến đổi nguyên tố này thành nguyên tố khác. Trên cơ sở quan niệm như vậy Aristoteles đã phát biểu lý thuyết về nguồn gốc của các khoáng vật và kim loại là do hơi ẩm và hơi khô tương tác với Đất mà thành. Học thuyết *Nguyên tố – Tính chất* của Aristoteles về sau trở thành cơ sở lý luận của trào lưu giả kim thuật (Alchemie) kéo dài suốt thời Trung cổ.



Hình 0.1. Bốn nguyên tố của Aristoteles

Bên cạnh thuyết duy tâm của Aristoteles về cấu tạo vật chất cũng chính ở Cổ Hy Lạp đã xuất hiện học thuyết duy vật đầu tiên về cấu tạo vật chất, đó là học thuyết nguyên tử của Democritus (vào khoảng 400 trước Công nguyên) cho rằng mọi vật đều cấu tạo từ những hạt rất nhỏ gọi là nguyên tử (tiếng Hy Lạp là atomos nghĩa là không thể phân chia). Nguyên tử là giới hạn phân chia cuối cùng của vật chất. Theo Democritus, các nguyên tử liên tục chuyển động xoay và thường xuyên va chạm

nhau, chúng cực kỳ cứng và không thể bị biến đổi. Các nguyên tử có thể tụ hợp và phân tán..., nhờ vậy từ các nguyên tử có thể tạo ra mọi vật thể kể cả cơ thể con người cùng với tinh thần và cảm giác. Những luận điểm của Democritos hoàn toàn độc lập với quan điểm duy tâm về bản chất sự vật và bị bài bác trong suốt hơn hai nghìn năm.

Vào thế kỷ thứ tư trước Công nguyên, thành phố Alexandria bên bờ Địa trung hải được thành lập và trở thành một trung tâm khoa học lớn với Viện Hàn lâm khoa học Alexandria và Thư viện Alexandria. Tại đây các kiến thức về “Nghệ thuật bí mật” Cổ Ai Cập hoà hợp với triết học và kỹ thuật thủ công Hy Lạp được truyền bá rộng rãi ở vùng Địa Trung Hải. Mười thế kỷ tồn tại của Viện Hàn lâm khoa học Alexandria đã góp phần thu thập, hoàn thiện và mở rộng kiến thức về kỹ thuật hoá học thủ công và từ đó truyền sang Hy Lạp rồi sang La Mã và các nơi khác ở vùng Địa Trung Hải. Kiến thức hoá học dưới tên gọi “Nghệ thuật bí mật thiêng liêng” đã thịnh hành và lan truyền khắp lãnh thổ rộng lớn của Đế quốc La Mã từ châu Âu sang Cận Đông và cả châu Phi, nhờ vậy đã tập trung về kinh đô La Mã một lượng của cải khổng lồ và thu hút về đây nhiều nhà bác học và thợ thủ công từ khắp mọi nơi. Khoa học và kỹ thuật thủ công ở La Mã đã đạt tới trình độ cao thể hiện trong hai tác phẩm là bài thơ *De Rerum natura* (Về bản chất sự vật) của Lucretius và bộ sách *Historia naturalis* (Lịch sử tự nhiên) của Plinius.

Một số đóng góp của lịch sử phát triển hoá học đến từ những người Ả-rập theo đạo Hồi. Họ tiếp nhận các kiến thức hoá học từ những bản viết tay của Xyri, Ba Tư, Ấn Độ, Hy Lạp, Alexandria và phát triển các hoạt động *giả kim thuật* của họ. Vào thế kỷ thứ 8 kinh đô Baghdad là một trung tâm khoa học đạt được nhiều thành tựu rực rỡ trong nhiều lĩnh vực khác nhau. Một số kiến thức hoá học của người Ả-rập được trình bày trong cuốn “Sách 70 chương” của Giabia-íp-Gaia và cuốn “Sách về những bí mật” của Ar-Razi, là những nhà giả kim thuật nổi tiếng.

Trào lưu Giả kim thuật ở châu Âu thịnh hành vào thời Trung cổ (khoảng từ thế kỷ thứ 10 đến thế kỷ 14 sau Công nguyên) với ảnh hưởng của Nhà thờ Thiên chúa giáo lan tràn khắp châu Âu. Học thuyết của Aristotles được giới giáo sĩ trình bày và giải thích theo cách phù hợp với các giáo điều của Nhà thờ và trở thành cơ sở của triết học kinh viện. Cùng với sự phát triển vai trò chính trị và kinh tế của các thành phố, nghề nghệ thủ công hoá học phát triển, đặc biệt là nghề luyện kim. Nhờ các cuộc viễn chinh thập tự, người châu Âu làm quen với các thành tựu hoá học thủ công ở Bizantium và các nơi khác, từ đó phát triển các ngành nghề thủ công hoá học tại các thành phố châu Âu. Các nhà giả kim thuật châu Âu trung cổ mặc dù mãi miết với mục tiêu viễn vông tìm “hòn đá triết học” để biến các kim loại không quý thành vàng nhưng cũng đã tích lũy được nhiều hiểu biết thực tế, phát hiện được nhiều chất mới, hoàn thiện nhiều kỹ thuật thí nghiệm và khám phá ra nhiều hiện tượng thực tế trong phòng thí nghiệm. Đó là những bước chuẩn bị cho sự phát triển hoá học thời sau.

Khi lịch sử nhân loại bước sang *Thời kỳ Phục hưng* (từ thế kỷ 14 đến thế kỷ 17)

thì lịch sử hoá học cũng chuyển sang giai đoạn mới: *Thời kỳ Hoá Y học* và *Hoá Kỹ thuật*. Các nhà hoá học và thầy thuốc lúc này cho rằng nhiệm vụ của hoá học là phục vụ đời sống con người, đó là điều chế thuốc chữa bệnh và cải tiến các quá trình sản xuất, đặc biệt là quá trình luyện kim. Các nghề khai mỏ, luyện kim và gia công kim loại phát triển mạnh vào các thế kỷ 15, 16. Một số sách xuất hiện vào thời kỳ này mô tả chi tiết các quá trình công nghệ luyện kim với nhiều tên tuổi như V. Biringuccio, A. Agricola... Trào lưu Hoá Y học liên kết hoá học vào nhiệm vụ chữa bệnh, với các nhà bác học như Th. Paracelsus, A. Libavius, J.B. van Helmont... Các nhà hoá y học coi trọng việc xác định khách quan bằng thực nghiệm thành phần của các vật thể phức tạp, nhờ vậy phương pháp thực nghiệm thật sự xâm nhập vào nghiên cứu hoá học. Trong thời kỳ này kiến thức về các chất hoá học được tiếp tục mở rộng.

Vào thế kỷ 17 trong khi các hiểu biết thực tế về hoá học tích lũy được đã khá phong phú thì tiến bộ về lý thuyết vẫn rất chậm chạp. Nhu cầu phát triển sản xuất đòi hỏi các nhà hoá học phải giải quyết nhiều vấn đề lý thuyết. Một trong những vấn đề liên quan đến sự phát triển nhanh chóng ngành luyện kim là việc giải thích một cách khoa học hiện tượng biến đổi các "chất đất" (ôxít kim loại) thành kim loại và hiện tượng đốt cháy kim loại. Để giải thích bản chất hiện tượng cháy nhà hoá học Đức G. E. Stahl đề xuất ý kiến cho rằng mọi vật thể cháy được (bao gồm cả kim loại) đều có chứa một nguyên tố mà Stahl gọi là "*phlogiston*" (có thể dịch thành từ Hán - Việt là "*nhiên tố*"). Nguyên tố này được giải phóng khi ta đốt cháy và nung nóng vật thể. Các chất dễ cháy như than, dầu, lưu huỳnh... là những chất có chứa nhiều phlogiston. Khi nung nóng kim loại mất phlogiston và con lại "chất đất", ngược lại "chất đất" khi kết hợp với phlogiston thì lại tạo thành kim loại. Thuyết "phlogiston" được phổ biến rộng rãi trong các nhà hoá học ở châu Âu suốt hai thế kỷ 17 và 18. Nhiều nhà hoá học cố gắng tách phlogiston ở trạng thái tự do nhưng đều thất bại. Thuyết "phlogiston" có tác dụng tích cực là giúp cho việc hệ thống hoá các tài liệu hoá học thực nghiệm phong phú thời đó, nhưng quan niệm về sự tồn tại một "nguyên tố cháy" hoang đường như vậy thực chất là sai lầm.

Nửa sau thế kỷ 18 các công trình nghiên cứu về điều chế và xác định tính chất của các chất khí được tiến hành rộng rãi và có ảnh hưởng nhiều đến sự phát triển các quan niệm cơ bản trong hoá học. Vào thập kỷ 80 của thế kỷ 18, khí ôxy được J. Priestley, C.W. Scheele và A. Lavoisier khám phá một cách độc lập gần như đồng thời. Nhờ đó nhà hoá học Pháp A. Lavoisier đã giải thích đúng đắn hiện tượng cháy là sự kết hợp giữa các nguyên tố của chất cháy với khí ôxy. Cách giải thích của Lavoisier hoàn toàn phù hợp với thực nghiệm và giải đáp được những khó khăn mà trước đây thuyết "phlogiston" không vượt qua nổi, do đó lý thuyết của Lavoisier được chấp nhận và thuyết "phlogiston" hoàn toàn bị bác bỏ. Sự thất bại của thuyết "phlogiston" và việc xác lập *thuyết ôxy* về sự cháy của Lavoisier được các nhà lịch sử hoá học gọi là "*Cuộc cách mạng trong hoá học*". Thật vậy, kể từ đó mọi lý thuyết, thực nghiệm, các hiện tượng và quá trình hoá học được diễn tả bằng một thứ "ngôn

ngữ" mới đúng đắn, với một hệ thống khái niệm chính xác như nguyên tố, hợp chất, ôxít, muối, axit... cùng với cách phân loại các chất, danh pháp các chất và ký hiệu các chất hoá học. Hoá học đã thật sự trở thành một khoa học.

Trong khoảng 60 năm đầu thế kỷ 19 các nhà hoá học và vật lý học liên tục khám phá ra các định luật định lượng, tạo cơ sở để hình thành học thuyết nguyên tử – phân tử. Như đã nói, quan niệm nguyên tử đã xuất hiện từ thời cổ và sau đó thường xuyên trở lại trong tâm trí loài người. Tuy nhiên khái niệm nguyên tử vẫn còn mang ý nghĩa triết học hơn là một khái niệm khoa học cụ thể. Nhiều nhà khoa học, đặc biệt là nhà bác học Nga M.V. Lomonosov vào cuối thế kỷ 18 đã có quan niệm khá đúng đắn về nguyên tử và phân tử. Tuy nhiên phải đến đầu thế kỷ 19 khoa học mới có đủ các bằng chứng thực nghiệm cần thiết để biến quan niệm nguyên tử và phân tử thành một học thuyết khoa học.

Sự thiết lập *thuyết nguyên tử* vào năm 1808 gắn liền với tên tuổi nhà bác học Anh J. Dalton. Theo lý thuyết của Dalton mọi nguyên tố đều cấu tạo từ các hạt nhỏ nhất gọi là *nguyên tử*. Các nguyên tử của một nguyên tố thì giống nhau nhưng khác nhau với nguyên tử của các nguyên tố khác. *Hợp chất* cấu tạo từ các nguyên tử của hai hay nhiều nguyên tố được kết hợp với nhau theo tỷ số xác định và đơn giản. Bản chất của phản ứng hoá học là sự tách rời các nguyên tử khỏi các chất kết hợp chúng lại theo cách mới để tạo ra chất mới.

Khái niệm *phân tử* ra đời sau khái niệm nguyên tử và gắn liền với các khám phá về các định luật khí. Để giải thích bản chất các định luật về chất khí nhà bác học Ý A. Avogadro đã nêu ra giả thuyết về sự tồn tại các phân tử khí. Avogadro cho rằng chất khí cấu tạo từ các phân tử khí. Khi các chất khí tham gia phản ứng hoá học các phân tử khí bị phân tích thành các nguyên tử, rồi các nguyên tử kết hợp với nhau theo kiểu mới để tạo thành các phân tử mới của các chất sản phẩm phản ứng. Giả thuyết của Avogadro được thực nghiệm hoàn toàn xác nhận, khái niệm phân tử trở thành một khái niệm cơ bản của hoá học, giả thuyết Avogadro trở thành định luật Avogadro.

Sự hình thành *học thuyết nguyên tử – phân tử* đã đưa hoá học vào một kỷ nguyên mới với toàn bộ hệ thống các khái niệm cơ bản của hoá học mà chúng ta sử dụng ngày nay. Trong công việc này phải kể đến công lao của nhà hoá học Ý S. Cannizarò, ông đã hệ thống hoá và làm sáng tỏ các khái niệm như nguyên tử, phân tử... đã hiệu chỉnh khối lượng nguyên tử của một số lớn nguyên tố hoá học, đặc biệt là các kim loại. Từ đó hoá học được phân chia thành nhiều chuyên ngành: hoá vô cơ, hoá hữu cơ, hoá lý, hoá phân tích... và hình thành nhiều lý thuyết làm nền tảng cho khoa học hoá học như các lý thuyết về nhiệt động lực học, động hoá học, điện hoá học...

Đầu thế kỷ 20 với sự khám phá ra cấu tạo nguyên tử và sự phát triển lý thuyết lượng tử về liên kết hoá học, hoá học lại bước vào một thời kỳ phát triển mới, đi sâu vào thế giới vi mô của vật chất và các biến đổi hoá học.