ĐÀO ĐÌNH THỨC

CẤU TẠO NGUYÊN TỬ VÀ LIÊN KẾT HOÁ HỌC

TẬP I

NHÀ XUẤT BẢN GIÁO DỤC VIỆT NAM

www.lib.haui.edu.vn - www.lib.haui.edu.vn - www.lib.haui.edu.vn - www.lib.haui.edu.vn - www.lib.haui.edu.vn

www.lib.haui.edu.vn - www.lib.haui.edu.vn - www.lib.haui.edu.vn - www.lib.haui.edu.vn - www.lib.haui.edu.vn

www.lib.haui.edu.vn - www.lib.haui.edu.vn - www.lib.haui.edu.vn - www.lib.haui.edu.vn - www.lib.haui.edu.vn

www.lib.haui.edu.vn - www.lib.haui.edu.vn - www.lib.haui.edu.vn - www.lib.haui.edu.vn - www.lib.haui.edu.vn

PHẦN THỨ NHẤT

NGUYÊN TỬ

CHƯƠNG I

KHÁI QUÁT VỀ NGUYÊN TỬ

§1. Nguyên tử

Sắt, đồng, thuỷ ngân, ôxy, hyđrô... là những *nguyên tố hoá học*.

Khái niệm nguyên tố hoá học đã được Robert Boyle (Rô-bớc Bôi-lơ, 1627 – 1691, người Anh) đưa ra từ giữa thế kỉ XVII.

Theo Robert Boyle : *Nguyên tố hoá học là những chất cơ sở, đơn giản nhất, không thể phân tích thành những chất khác bằng phương pháp hóa học*(*).

Theo giả thuyết nguyên tử của Dalton (Đan-tơn, người Anh, 1807) thì những nguyên tố hoá học không thể phân chia được đến vô cùng tận mà cấu tạo bởi những hạt nhỏ nhất không thể phân chia hơn nữa bằng những phương pháp hoá học. Những hạt này được gọi là *nguyên tử*. Nguyên tử của những nguyên tố hoá học khác nhau thì có cấu tạo khác nhau và do đó những nguyên tố hoá học khác nhau thì có những tính chất khác nhau.

Như vậy, *nguyên tử là phần tử nhỏ nhất của một nguyên tố hoá học còn mang tính chất hoá học của nguyên tố đó.*

Khái niệm nguyên tử thực ra đã được nói đến từ thế kỉ thứ V trước công nguyên trong những giả thuyết giải thích về vũ trụ và vật chất.

Trong thời kì cổ Hy-Lạp, đối lập với những học thuyết duy tâm thần bí, giải thích vũ trụ bằng những lực lượng siêu tự nhiên, phi vật chất, một số nhà triết học đã cố gắng đi từ cơ sở vật chất để giải thích vũ trụ, lấy bản thân giới tự nhiên để giải thích tự nhiên.

Một số nhà triết học này chủ trương *thuyết nguyên thể vật chất*. Theo quan điểm của những nhà triết học này thì mọi biến đổi trong vũ trụ đều giải thích bằng sự vận động vĩnh viễn, sự biến hoá vô cùng tận của những nguyên thể vật chất.Những nguyên thể vật chất này là cơ sở của mọi vật trong vũ trụ. Theo Thalès (Ta-lét, thế kỉ thứ VI trước công nguyên) thì nguyên thể vật chất đó là *nước*, theo Anaxième (A-na-xi-em) thì là *không khí* và theo Héraclite (Hê-ra-cơ-lit) thì vũ trụ phát triển một cách hợp quy luật do sự bùng cháy và tắt đi của *lửa*. Sang thế kỉ sau (thế kỉ thứ V trước công nguyên) Empédocle (Em-pê-đô-clơ) lại đưa ra thuyết 4 yếu tố. Theo Empédocle thì cơ sở vật chất không phải là một mà là sự tổng hợp của 4 yếu tố đầu tiên khác nhau là : *đất, nước, lửa và không khí*.

(*) Trong số các nguyên tố tìm thấy chỉ có 88 nguyên tố tồn tại trong tự nhiên còn những nguyên tố khác được điều chế nhân tạo qua các phản ứng hạt nhân(4 nguyên tố có số thứ tự nhỏ hơn số thứ tự của uran và tất cả các nguyên tố có số thứ tự lơn hơn số thứ tự của uran). Uran là nguyên tố có số thứ tự lớn nhất (Z = 92) được tìm thấy trong tự nhiên.

www.lib.haui.edu.vn - www.lib.haui.edu.vn - www.lib.haui.edu.vn

Cũng trong thời đại này, về phía Á-đông cũng có những thuyết tương tự.

Ở Ấn-Độ, phái Cha-vơ-rắc (= bốn chữ) cũng chủ trương thuyết bốn yếu tố : *đất, nước, lửa, và không khí*.

Ở Trung-Quốc, theo Vương Sung (nhà triết học duy vật cổ Trung Hoa) thì nguyên thể đầu tiên là những vật chất cực nhỏ mà ông gọi là "khí" tồn tại trong tự nhiên dưới dạng *ngũ hành : kim, mộc, thuỷ, hoả, thổ (kim khí, gỗ, nước, lửa, đất)*.

Khác với những nhà triết học trên, quan niệm rằng những hiện tượng muôn màu muôn vẻ của tự nhiên đều là sự thay hình đổi dạng của một hay một số nguyên thể nào đó, Leucippe (Lơ-xíp, thế kỉ thứ V trước công nguyên) đã đưa ra thuyết nguyên tử để giải thích vũ trụ. Học thuyết này được Démocrite (Đê-mô-crít) phát triển thêm và được xây dựng thành một hệ thống *triết học duy vật nguyên tử luận cổ Hy-Lạp*.

Theo Leucippe và Démocrite thì vật chất không thể chia cắt đến vô cùng tận được; phần tử nhỏ nhất không thể chia sẻ được gọi là *nguyên tử* (tiếng Hy-Lạp : *atomos* = không thể chia sẻ được). Nguyên tử của các chất khác nhau có kích thước, hình dạng và sự xắp xếp khác nhau, thí dụ nguyên tử sắt thì cứng, chắc và có những móc để móc vào nhau, nguyên tử nước thì mềm và dễ trượt, nguyên tử muối thì nhọn và chọc được vào lưỡi.

Ta thấy học thuyết này hoàn toàn có tính chất thuần lý, không xây dựng trên các dữ kiện thực nghiệm nên còn mang nặng tính chất phác thô sơ. Tuy vậy, đối với thời đại đó, học thuyết này có thể coi là một phóng đoán thiên tài về cấu tạo chất.

Sau này với sự phát triển của khoa học, một mặt quan điểm về các nguyên thể vật chất và phi vật chất được nhà bác học Anh Robert Boyle phê phán một cách có hệ thống, mặt khác khi thuyết nguyên tố hoá học của Robert Boyle được công thức hoa một cách rõ ràng thì quan niệm nguyên tử được phát triển và trở thành một giả thuyết có căn cứ vững vàng.

Theo thuyết nguyên tố hoá học của Robert Boyle thì những nguyên thể vật chất đơn giản nhất về phương diện hoá học chính là những nguyên tố hóa học (ôxy, nitơ, hiđrô, cacbon ...). Để xây dựng lý thuyết về nguyên tố hóa học, Robert Boyle đã đi từ quan niệm về nguyên tử của thuyết nguyên tử trên. Theo Boyle thì mỗi nguyên tố hoá học bao gồm những hạt có độ lớn, hình dạng và chuyển động xác định. Những hạt này hay những nguyên tử của các nguyên tố hoá học có khả năng kết hợp lại thành những tập hợp lớn hơn mà Boyle gọi là những hạt thứ cấp.

Nguyên tử của các nguyên tố hoá học đều có một *hạt nhân* và những *điện tử* (êlectron) chuyển động xung quanh hạt nhân.

Những điện tử chuyển động trong một không gian lớn hơn nhiều (hàng vạn lần) so với thể tích của hạt nhân và tạo thành một "*lớp vỏ điện tử*". Đường kính nguyên tử d_A có độ lớn vào khoảng 10^{-8} cm và hạt nhân có đường kính d_n độ 10^{-12} cm :

$$d \approx 10^{-8} \text{ cm}; \; d_n \approx 10^{-12} \text{ cm}$$

Hạt nhân lại được cấu tạo bằng những hạt *prôton* và *nơtron*. Vì các hạt như điện tử, prôton, nơtron được coi là những đơn vị nhỏ nhất của vật chất, những hạt cơ sở hay sơ cấp nhất nên chúng được gọi là những *hạt sơ đẳng* hay những *hạt cơ bản*(*) (Ngoài những hạt prôton, nơtron hay điện tử, trong thời gian độ 30 năm gần đây người ta còn tìm thấy độ 200 hạt cơ bản khác, thường có đời sống ngắn).

(*) Hiện nay những hạt cơ bản đang được nghiên cứu. Những công trình mới nhất cho biết những hạt như prôton, nơtron không thể coi như là những đơn vị nhỏ nhất mà chúng được cấu tạo từ những hạt nhỏ hơn gọi là quark, có điện tích là bội số của $e_o/3$.

Prôton được tạo thành từ hai hạt quark u ($+ 2e_o/3$) và một hạt quark d ($- e_o/3$) kí hiệu là p = (u, u, d).

Nơtron được tạo thành từ một hạt quark u và hạt quark d, được kí hiệu là n = (u, d, d).

www.lib.haui.edu.vn - www.lib.haui.edu.vn - www.lib.haui.edu.vn

Điện tử có khối lượng (khối lượng nghỉ) :

$$m_e = 9{,}1091.10^{-28}\text{g}.$$

Khối lượng này được kí hiệu là m_o. Mỗi điện tử mang một điện tích âm e^- :

$$e^- = 1{,}6021.10^{-19}\text{C}$$

Giá trị của điện tích này trùng với giá trị điện tích nhỏ nhất đến nay được tìm thấy bằng thực nghiệm, điện tích nhỏ nhất này được gọi là *điện tích sơ đẳng* và thường được kí hiệu là e_o.

Trong vật lý nguyên tử người ta thường dùng đơn vị điện tích là điện tích sơ đẳng e_o và đơn vị khối lượng là khối lượng m_e.

Prôton có khối lượng :

$$m_p = 1{,}672.10^{-24}\text{g} = 1836{,}12\ m_e$$

và mang điện tích dương bằng điện tích sơ đẳng e_o.

Nơtron có khối lượng xấp xỉ bằng khối lượng của prôton và không mang điện tích :

$$m_n = 1{,}675.10^{-24}\text{g} = 1838{,}65\ m_e$$

Vì khối lượng của điện tử rất nhỏ so với khối lượng của prôton và nơtron nên khối lượng của nguyên tử có thể coi như tập trung tại hạt nhân nguyên tử và do số nơtron và prôton quyết định.

Người ta gọi tổng số prôton và nơtron là *số khối nguyên tử*. Nếu gọi A là số khối nguyên tử, Z là số prôton và N là số nơtron, ta có :

$$A = Z + N$$

Trong nguyên tử, số điện tử bằng số prôton (Z) nên nguyên tử là một hệ trung hoà điện.

Những nguyên tử của cùng một nguyên tố hóa học đều có cùng một số prôton xác định, thí dụ nguyên tử hiđrô có 1 prôton, nguyên tử nguyên tử hêli có 2 prôton. Số prôton này còn được gọi là số *điện tích hạt nhân*. Vì lý do đó mỗi nguyên tố hoá học được đặc trưng bằng một số điện tích hạt nhân xác định.

Các nguyên tố hoá học được xếp thứ tự trong hệ thống tuần hoàn các nguyên tố theo số điện tích hạt nhân, vì vậy số điện tích hạt nhân còn được gọi là *số thứ tự* của nguyên tố tương ứng (Trong hệ thống tuần hoàn các nguyên tố, hiđrô được xếp ở vị trí thứ nhất, hêli được xếp ở vị trí thứ hai ...)

Vì A = Z + N nên trong nguyên tử nếu biết được số khối nguyên tử A và số thứ tự hay số điện tích hạt nhân Z, người ta sẽ biết được số điện tử và số nơtron. Trong trường hợp cần thiết, bên cạnh kí hiệu các nguyên tố người ta ghi thêm trị số của A và Z, thí dụ ${}^4_2\text{He}$ hay ${}_2\text{He}^4$.

Vì tính chất của nguyên tử trong các phản ứng hoá học thực tế chỉ phụ thuộc vào cấu trúc lớp vỏ điện tử và do đó chỉ phụ thuộc vào số prôton nên số nơtron trong nguyên tử ít được chú ý về phương diện hoá học. Cũng vì lý do này nên trước đây người ta hiểu là ứng với một nguyên tố hoá học chỉ có một loại nguyên tử hoàn toàn giống hệt nhau (cả về số nơtron).

www.lib.haui.edu.vn - www.lib.haui.edu.vn - www.lib.haui.edu.vn - www.lib.haui.edu.vn

Sau này, với những phương pháp vật lý chính xác, xác định khối lượng nguyên tử người ta thấy rằng, ứng với một nguyên tố hoá học trong tự nhiên có thể có (không phải là đối với tất cả các nguyên tố) hai hay nhiều loại nguyên tử với số nơtron khác nhau.

Những dạng khác nhau của một nguyên tố hoá học có số nơtron trong nguyên tử khác nhau và do đó có khối lượng nguyên tử khác nhau được gọi là những *đồng vị*(*) của nguyên tố đó. Thí dụ, hiđrô có 3 đồng vị là ${}_1^1H$, ${}_1^2H$ và ${}_1^3H$.

§2. Khối lượng nguyên tử và kích thước nguyên tử

I. HỆ THỐNG KHỐI LƯỢNG NGUYÊN TỬ, PHÂN TỬ

Đầu tiên, người ta chọn khối lượng nguyên tử H, sau đó là 1/16 khối lượng nguyên tử O và từ năm 1961 người ta chọn 1/12 khối lượng nguyên tử ${}^{12}C$ làm cơ sở cho hệ thống khối lượng nguyên tử, phân tử.

1. Số Avogadro

Số Avogadro là số nguyên tử ${}^{12}C$ có trong 12 g cacbon 12 (${}^{12}C$).

$$N = 6{,}022.10^{23}$$

(giá trị chính xác là $6{,}022045.\ 10^{23}$)

Tỉ số N/mol được gọi là hằng số Avogadro N_A :

$$N_A = 6{,}022.10^{23}\ mol^{-1}$$

2. Đơn vị khối lượng nguyên tử

• Theo công ước quốc tế :

Đơn vị khối lượng nguyên tử (u) bằng 1/12 khối lượng của một nguyên tử ${}^{12}C$.

$$u = \frac{1}{12} m_C = \frac{1}{12} \cdot \frac{12g}{N} = \frac{1g}{N} = 1{,}66056.10^{-24}\ g.$$

Đơn vị khối lượng nguyên tử còn được gọi là đơn vị cacbon đvC (thuật ngữ này ít được sử dụng).

Khối lượng nguyên tử (tuyệt đối) thường được kí hiệu là m_A.

Ví dụ : $m_H = 1{,}0074\ u = 1{,}673.10^{-24}g$.

Khối lượng phân tử (tuyệt đối) thường được kí hiệu là m_M, bằng tổng khối lượng của các nguyên tử trong phân tử.

Ví dụ : $m_{H_2} = 2{,}0158\ u = 3{,}346.10^{-24}g$.

(*) Dịch từ tiếng Hy-Lạp "isotop = cùng chỗ", các đồng vị của một nguyên tố có cùng số điện tích hạt nhân và do đó có tính chất hoá học giống nhau nên cùng được sắp xếp vào một vị trí trong hệ thống tuần hoàn các nguyên tố.

www.lib.hau.edu.vn - www.lib.hau.edu.vn - www.lib.hau.edu.vn - www.lib.hau.edu.vn

• Các nhà hoá học thường làm việc với một lượng chất lớn mà không làm việc với từng nguyên tử nên khái niệm này ít được sử dụng. Tuy nhiên, vì khối lượng là một đại lượng vật lí có thứ nguyên, không thể bằng một hư số nên khi nói đến khối lượng nguyên tử, phân tử thì phải biểu thị khối lượng đó ra đơn vị khối lượng.

3. Nguyên tử khối, phân tử khối (*)

Khối lượng nguyên tử tương đối (A_r) hay **nguyên tử khối của nguyên tử X cho biết khối lượng của nguyên tử X gấp bao nhiêu lần khối lượng được chọn làm đơn vị**, nghĩa là gấp bao nhiêu lần 1/12 khối lượng của nguyên tử ^{12}C.

$$A_r(X) = \frac{m_X}{u}$$

Vì là tỉ số của hai khối lượng nên nguyên tử khối không có thứ nguyên.

Ví dụ : $A_r(H) = 1,0079$.

Người ta cũng có thể định nghĩa (định nghĩa của vật lí) **nguyên tử khối của nguyên tử X là số đo của khối lượng nguyên tử X khi khối lượng nguyên tử này tính ra đơn vị khối lượng nguyên tử** :

Ví dụ : $m_C = 12u \rightarrow A_r(C) = 12$.

Phân tử khối của một phân tử bằng tổng nguyên tử khối của các nguyên tử tạo thành.

Ví dụ : $M_r(H_2) = 2,0158$.

Khái niệm nguyên tử khối, phân tử khối được sử dụng một cách rất phổ biến trong hoá học. Chẳng hạn khi biết nguyên tử khối của clo bằng 35,5, của hiđrô bằng 1 (xấp xỉ) thì khi tổng hợp HCl người ta có thể sử dụng một khối lượng bất kì (g, kg, tạ, tấn...) của hiđrô cho tác dụng với 35,5 khối lượng tương ứng của clo.

4. Mol

Các tương tác trong hoá học là các tương tác giữa các hạt vi mô, tuy nhiên, trong thực tế các nhà hoá học thường làm việc với một lượng chất lớn (lượng chất vĩ mô). Vì vậy, năm 1971 Hội nghị Đo lường quốc tế đã quy định sử dụng mol làm đơn vị lượng chất (đơn vị thứ 7 của hệ SI).

Mol là lượng chất chứa N (= $6,022.10^{23}$) hạt vi mô (nguyên tử, phân tử, điện tử,...)

1 mol H = $6,022.10^{23}$ nguyên tử H

1 mol H_2 = $6,022.10^{23}$ phân tử H_2.

(*) Ở nước ta, thuật ngữ này đã được thông dụng từ nửa thế kỉ qua mà lúc đầu được gọi là nguyên tử lượng, phân tử lượng.

www.lib.haui.edu.vn - www.lib.haui.edu.vn - www.lib.haui.edu.vn - www.lib.haui.edu.vn

5. Khối lượng mol

Các đại lượng vật lí ứng với một đơn vị chất (mol) được gọi là **đại lượng mol**, ví dụ khối lượng mol, thể tích mol, nhiệt phản ứng mol, ...

Khối lượng mol M_X của một loại hạt X (nguyên tử, phân tử...) là đại lượng được xác định bằng hệ thức

$$M_X = \frac{m_X}{n_X} [g/mol]$$

Trong đó, n_X là lượng chất X (tính ra mol) có khối lượng là m_X (thường tính ra gam).

• Hằng số Avogadro được sử dụng trong việc chuyển đổi các đại lượng vật lí ứng với từng hạt vi mô (nguyên tử, phân tử, ...) ra các đại lượng mol tương ứng.

Nếu m_X là khối lượng của hạt vi mô X thì khối lượng mol M_X được tính theo hệ thức :

$$M_X = m_X . N_A$$

Sở dĩ ngoài số Avogadro người ta phải đưa thêm khái niệm hằng số Avogadro (có thứ nguyên) là để bảo đảm nguyên tắc đồng nhất thứ nguyên.

Ví dụ : khối lượng mol nguyên tử của ^{12}C :

$$M_C = 1,99.10^{-23} (g) \times 6,022.10^{23} (mol^{-1}) = 12 \text{ g mol}^{-1}$$

6. Quan hệ giữa nguyên tử khối (phân tử khối) và khối lượng mol

• Từ định nghĩa về nguyên tử khối : $A_r(X) = m_X/u$ và từ các hệ thức : $m_X.N = M_X$, $u.N_A = 1 g/mol$ ta có :

$$A_r(X) = \frac{m_X}{u} = \frac{m_X.N_A}{u.N_A} = \frac{M_X}{1 g/mol}$$

hay $\mathbf{A_r(X)\ g/mol = M_X}$

Ta thấy, nếu thêm đơn vị g/mol vào nguyên tử khối ta được khối lượng mol (nguyên tử). Nói một cách khác : **Số đo của khối lượng mol (nguyên tử) M_X đồng nhất với nguyên tử khối $A_r(X)$.**

Ví dụ : Nguyên tử khối của hiđro : $A_r(H) = 1,0079$ thì khối lượng mol (nguyên tử) của hiđro :

$$M_H = 1,0079 \text{ g/mol}$$

Trước đây người ta sử dụng khái niệm nguyên tử gam, phân tử gam để tính một khối lượng vĩ mô.

Vì đối với oxi thì một nguyên tử gam bằng 16 g nhưng đối với cacbon thì một nguyên tử gam lại bằng 12 g nên nguyên tử gam hay phân tử gam là một đơn vị khối lượng riêng biệt (unité indiviuelle de masse). Xét về định nghĩa cũng như về thứ nguyên, khái niệm này không đồng nhất với khái niệm khối lượng mol nguyên tử, phân tử mặc dù chúng có số trị tương ứng giống nhau.

www.lib.haui.edu.vn - www.lib.haui.edu.vn - www.lib.haui.edu.vn - www.lib.haui.edu.vn