ĐÀO ĐÌNH THỨC

CẤU TẠO NGUYÊN TỬ VÀ LIÊN KẾT HOÁ HỌC

TẬP II

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

Phần thứ hai

PHÂN TỬ

Chương 1

KHÁI QUÁT VỀ PHÂN TỬ VÀ LIÊN KẾT HÓA HỌC

§1. PHÂN TỬ

Khái niệm *phân tử* được Avogadro, nhà vật lý học người Ý, đưa ra đầu tiên năm 1811. Trong một giả thuyết được gọi là giả thuyết Avogadro[1], khái niệm phân tử được sử dụng để chỉ những hạt nhỏ nhất của một chất khí, có khả năng tồn tại độc lập, chứa ít nhất là hai nguyên tử[2].

Theo lý thuyết cấu tạo kinh điển thì phân tử gồm một số có giới hạn những nguyên tử kết hợp với nhau bằng những liên kết hoá học.

Theo quan niệm hiện nay thì sự hình thành phân tử xuất hiện do tác dụng tương hỗ giữa các nguyên tử tham gia tạo thành phân tử. Tác dụng này dẫn đến sự thay đổi cấu tạo của các nguyên tử tương tác và dẫn đến sự phân bố các hạt nhân nguyên tử cũng như các điện tử theo một cấu hình vững bền xác định ứng với sự giảm năng lượng của hệ thống.

Vì khi hình thành phân tử, cấu tạo của các nguyên tử thay đổi nên nói một cách chính xác thì trong phân tử không còn tồn tại những nguyên tử xuất phát và sự liên kết trong phân tử không phải đơn giản là sự nối kết giữa nguyên tử này với nguyên tử khác.

Trong những phần sau, khi nói đến những nguyên tử trong phân tử hay sự liên kết giữa các nguyên tử thì nên hiểu đó là một cách nói gần đúng.

Theo quan niệm hiện nay : **Phân tử gồm một số có giới hạn các điện tử và các hạt nhân nguyên tử tương tác với nhau và được phân bố một cách xác định trong không gian tạo thành một cấu trúc thống nhất vững bền.**

Trong phân tử trung hoà tổng số các điện tử bằng tổng số các số điện tích hạt nhân.

Người ta nói đến những *phân tử đồng hạch* khi các hạt nhân trong phân tử đều là những hạt nhân nguyên tử của cùng một nguyên tố (thí dụ : H_2, O_2, O_3,...). Trong trường hợp ngược lại, ta có các *phân tử dị hạch* (thí dụ : H_2O, CO, HCl,...).

---

(1) Trong cùng những điều kiện áp suất và nhiệt độ như nhau, những thể tích bằng nhau của các khí lý tưởng đều chứa cùng số phân tử như nhau.

(2) Trừ các khí trơ tồn tại dưới dạng nguyên tử (khí đó chưa được biết).

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

Trong những *ion phân tử* (thí dụ : H_2^+, NO^+, NO_2^-,...) tổng số các điện tử lớn hoặc nhỏ hơn tổng số các số điện tích hạt nhân.

Từ những phân tử hay ion đơn giản còn có thể hình thành những hạt phức tạp hơn được gọi là những *phân tử phức*. Chúng thường mang một điện tích dương hay âm (thí dụ: $[Fe(CN)_6]^{4-}$, $[Ni(NH_3)_4]^{2+}$,...).

Trong nhiều phản ứng hoá học và trong những điều kiện đặc biệt (trong khí quyển mặt trời, trong ngọn lửa, v.v...) còn xuất hiện những hạt chưa bão hoà hóa trị, có tổng số spin khác không được gọi là những *gốc tự do* (thí dụ : OH, CN, NH_2, CH, CH_3,...). Gốc tự do thường không bền (đặc biệt là những gốc tự do đơn giản) và có khả năng phản ứng cao.

Hiểu theo nghĩa rộng, khái niệm phân tử bao gồm cả những ion phân tử, những ion phức và những gốc tự do.

Trong các *tinh thể* (thí dụ : tinh thể kim loại liti, tinh thể cacbon hay tinh thể muối ăn), các nguyên tử hay các ion được sắp xếp theo một quy luật tuần hoàn xác định, tạo thành một mạng lưới không gian đều đặn. Số nguyên tử hay số ion là vô hạn định, chúng không tạo thành những phân tử độc lập. Những phân tử riêng rẽ (Li_2, C_2, NaCl) chỉ tồn tại ở trạng thái hơi khi các tinh thể này được đưa lên một nhiệt độ cao.

Giữa các phân tử riêng rẽ cũng có những tác dụng tương hỗ khác nhau. Tuy nhiên luôn luôn tồn tại giữa các phân tử một lực được gọi là lực *Van der Waals* (Van-đéc-Van). Lực Van der Waals yếu hơn nhiều so với lực liên kết giữa các nguyên tử trong phân tử hay trong các tinh thể vừa kể trên.

Trong trường hợp tương tác giữa các phân tử rất yếu, ở điều kiện bình thường, các phân tử ở trạng thái phân tán và khi đó ta có trạng thái khí (thí dụ : O_2, H_2, C_nH_{2n+2} với $n \leq 4$). Khi tương tác này mạnh hơn, ta có trạng thái lỏng hay rắn (thí dụ : P_4, S_8, C_nH_{2n+2} với $n \geq 5$). Trong trường hợp cuối, người ta nói tới những *tinh thể phân tử*.

§2. QUÁ TRÌNH PHÁT TRIỂN CÁC THUYẾT VỀ CẤU TẠO PHÂN TỬ VÀ LIÊN KẾT HÓA HỌC

Những vấn đề về cấu tạo phân tử và bản chất lực liên kết hoá học (tại sao các nguyên tử lại kết hợp với nhau tạo thành phân tử có thành phần xác định?, lực liên kết có bản chất như thế nào?) thuộc về những vấn đề quan trọng nhất trong hoá học và được chú ý đến từ lâu.

Lực hấp dẫn vũ trụ. Ngay từ cuối thế kỷ XVIII, Bergmann (Béc-man, Thuỵ Điển, 1775) đã cố gắng giải thích "ái lực hóa học" mà lúc đó được hiểu là khả năng tương tác hay "lực hút đặc trưng" giữa các nguyên tử trong phân tử bằng lực hấp dẫn vũ trụ. Đây cũng là quan điểm của các nhà bác học Pháp như Bertholet (Béc-tô-lê), Lavoisier (La-voa-ziê) và Laplace (La-pơ-lát). Tuy nhiên, sau đó người ta thấy ngay rằng, với lực hấp dẫn vũ trụ không thể giải thích được những đặc điểm của "ái lực hóa học" như tính bão hòa, tính chọn lọc, không tỷ lệ thuận với khối lượng của các hạt tương tác và giảm nhanh theo khoảng cách.

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

Thuyết điện hoá về liên kết. Đầu thế kỷ XIX, những phát minh trong lĩnh vực tĩnh điện và trong các quá trình điện phân đã ảnh hưởng đến các quan điểm về liên kết hoá học. Từ những kết quả nghiên cứu về các quá trình điện phân, Davy (Đê-vi, 1807) cho rằng những nguyên tử có ái lực tương hỗ đều ở trong những trạng thái tích điện khác dấu. Quan điểm này được Berzelius (Be-xê-li-ut, Thuỵ Điển, 1812) mở rộng cho mọi hợp chất và cho rằng : "trong tất cả các hợp chất hoá học, lực liên kết đều có bản chất tĩnh điện". Berzelius cũng phát triển quan điểm trên thành **thuyết điện hoá về liên kết.**

Theo Berzelius thì mỗi nguyên tử có hai cực tích điện. Điện tích ở hai cực đó có dấu khác nhau và có thể không đồng đều nhau. Nếu điện tích dương chiếm ưu thế thì nguyên tử sẽ là dương điện (thí dụ nguyên tử hydrô, nguyên tử kim loại). Ngược lại, nếu điện tích âm lớn hơn thì nguyên tử sẽ là âm điện (thí dụ nguyên tử clo, nguyên tử oxy). Khi điện phân, những nguyên tử dương điện sẽ thoát ra ở catôt và những nguyên tử âm điện sẽ thoát ra ở anôt. Lực hút tĩnh điện giữa hai phân tử tích điện khác dấu sẽ là nguyên nhân của liên kết hoá học. Theo Berzelius, những phân tử tích điện trên không những chỉ là những nguyên tử mà còn có thể là những nhóm nguyên tử. Trên cơ sở đó, công thức hoá học của một hợp chất được viết tách thành hai phần, một phần mang điện tích âm và một phần mang điện tích dương (hệ thống nhị nguyên). Trong hợp chất canxi sunfat, theo Berzelius thì nhóm CaO là dương điện và nhóm SO_3 là âm điện. Do đó công thức hoá học của canxi sunfat được viết là $CaO.SO_3$. Cũng trên cơ sở đó, công thức hoá học của axit sunfuric được viết là $H_2O.SO_3$, của tricanxi phôtphat được viết là $3CaO.P_2O_5$.

Berzelius cố mở rộng quan điểm đó cho mọi hợp chất, nhưng đối với những phân tử đồng hạch như O_2, Cl_2, v.v... và đối với những hợp chất hữu cơ thì quan điểm này tỏ ra bất lực vì trong những phân tử ôxy, clo trên, hai nguyên tử là hoàn toàn giống nhau, trong các hợp chất hữu cơ thì đa số các nguyên tố tạo thành như cacbon, ôxy, clo, nitơ đều âm điện nghĩa là không khác nhau về dấu của điện tích. Lập luận trên của Berzelius cũng hoàn toàn không giải thích được những hiện tượng thế hydrô bằng những nguyên tử "âm điện", thí dụ trong phản ứng thế ba nguyên tử hydrô trong axit axêtic bằng ba nguyên tử clo.

Về cơ bản, quan điểm về bản chất tĩnh điện của lực liên kết hoá học của Berzelius là đúng, tuy nhiên những phát triển của Berzelius như vậy không hoàn toàn chính xác.

Chống lại quan điểm về "hệ thống nhị nguyên" của Berzelius, nhà bác học Pháp Dumas (Duy-ma, 1840) đã đưa ra quan điểm về *"hệ thống nhất nguyên"* hay *"hệ thống hợp nhất"*. Theo Dumas, phân tử hợp thành một hệ thống thống nhất và do đó công thức của hợp chất phải là công thức hợp nhất, thí dụ công thức của axit sunfuric phải được viết là H_2SO_4 mà không phải là $H_2O.SO_3$.

Thuyết thế. Cũng trên cơ sở các kết quả nghiên cứu về các phản ứng thế trong hoá học hữu cơ Dumas và Laurent (Lô-răng, Pháp) đã đưa ra thuyết thế. Theo thuyết này thì các phản ứng thế có thể xảy ra mà không làm thay đổi căn bản những tính chất của hợp chất, hay nói một cách khác như Laurent : "Các chất hoa học là những lâu

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

đài phân tử trong đó ta có thể thay một nguyên tố này bằng một nguyên tố khác mà không làm thay đổi cấu trúc của lâu đài".

Thuyết kiểu. Phát triển "thuyết thế" của Dumas, năm 1856 Gerhardt (Giê-ra, Pháp) đưa ra *"thuyết kiểu"* hay *"thuyết dạng"*.

Theo thuyết này, các hợp chất hữu cơ có thể được xếp vào một số kiểu xác định. Những hợp chất trong cùng một kiểu có thể coi như là dẫn xuất của một hợp chất cơ bản (vô cơ) bằng cách thay thế những nguyên tử hay những nhóm nguyên tử trong phân tử của những hợp chất này bằng những nguyên tử hay những nhóm nguyên tử khác. Thí dụ : rượu (ROH) và ête (ROR') thuộc kiểu nước (HOH) ; các hợp chất amin như CH_3NH_2, $(CH_3)_2NH$ thuộc kiểu amôniac (NH_3).

Thuyết kiểu của Gerhardt đã dẫn đến sự phân loại các hợp chất hoá học. Tuy nhiên, ta thấy rằng sự phân loại này hoàn toàn không dựa trên cơ sở cấu tạo phân tử mà chỉ dựa trên những tương đồng nào đó về thành phần và tính chất của phân tử. Với nguyên tắc này, người ta đã phải gán cho cùng một hợp chất nhiều công thức thuộc nhiều kiểu khác nhau. Để biện bạch cho thuyết của mình, Gerhardt cho rằng công thức hoá học phải nêu lên những sự tương đồng của các phân tử mà không phải là để phản ảnh cấu trúc nội tại của phân tử. Theo Gerhardt, sự sắp xếp các nguyên tử trong phân tử, về nguyên tắc, là không thể biết được. Luận điểm "bất khả tri" này của Gerhardt đã kìm hãm sự phát triển của lý thuyết về cấu tạo phân tử.

Sự khám phá ra hiện tượng đồng phân. Cùng trong khoảng thời gian này (năm 1823), hai nhà bác học Đức : Liebig (Li-bích) và Woehler (Vuê-le) đã tìm ra hai hợp chất có tính chất khác nhau nhưng có thành phần hoàn toàn giống nhau ứng với công thức nguyên là HNCO. (Liebig điều chế được axit funminic: $\overset{(-)}{C} \equiv \overset{(+)}{N} - OH$ và Woehler điều chế được axit xyanic : $H - \overline{\underline{O}} - C \equiv N$). Hiện tượng này được Berzelius gọi là hiện tượng đồng phân và là một điều hoàn toàn mới lạ đối với các nhà hoá học trong thời kỳ đó. Sau này, hiện tượng đồng phân được giải thích bằng sự tồn tại những hợp chất có thành phần hoàn toàn như nhau nhưng có cấu tạo phân tử khác nhau và do đó có tính chất khác nhau.

Sau đó ít lâu, năm 1848, nhà bác học Pháp Pasteur (Pa-xtơ) đã khám phá ra hai dạng hoạt động quang (chất có khả năng làm quay mặt phẳng dao động của ánh sáng phân cực) của axit tactric (COOH – CH(OH) – CH(OH) – COOH) có tính chất hoá, lý giống nhau nhưng có tính chất hoạt động quang ngược nhau (làm quay mặt phẳng dao động của ánh sáng phân cực một góc bằng nhau nhưng theo hai chiều khác nhau). Hiện tượng này được gọi là *hiện tượng đồng phân quang học* hay *đồng phân gương*. Sau đó, Pasteur cũng đã giải thích hiện tượng trên bằng sự khác nhau về cấu tạo không gian của phân tử.

Hóa trị. Khái niệm hoa trị được nhà bác học Anh Frankland (Fren-clen) đưa ra năm 1852.

Hoá trị được coi là khả năng của một nguyên tử có thể kết hợp với một số xác định nguyên tử khác tạo thành một hợp chất.

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

Hai nguyên tử hay hai nhóm nguyên tử có cùng hoá trị khi chúng có thể thay thế cho nhau hay kết hợp với nhau.

Với sự thừa nhận hoá trị của hydrô bằng một, người ta định nghĩa :

Hoá trị của một nguyên tố bất kỳ là số nguyên tử hydrô hay số nguyên tử của một nguyên tố khác tương đương với hydrô có thể thay thế hay liên kết với một nguyên tử của nguyên tố trên.

Một nguyên tử hay một nhóm nguyên tử có hoá trị là n nếu nguyên tử hay nhóm nguyên tử này có thể thay thế hay liên kết với n nguyên tử hydrô.

Trên cơ sở các kết quả nghiên cứu của mình (chủ yếu là các hợp chất cơ kim như CH_3Na, $(CH_3)_2Hg$,...) Frankland đã xác định được hoá trị của một số nguyên tố như N, P, Na, Hg, As, Pb, Sn.

Không phụ thuộc vào nhau, ba nhà bác học : Kékulé (Kê-cu-lê, Đức, 1857), Kolbe (Con-be, Đức, 1857) và Couper (Cu-pê, Pháp, 1858) đã tìm thấy hoá trị bốn của cacbon. Trên cơ sở đó, người ta xác định được sự tạo thành mạch cacbon cũng như sự tồn tại các liên kết đôi, ba giữa các nguyên tử cacbon trong các hợp chất hưu cơ. Couper cũng là người đầu tiên đề nghị biểu diễn các liên kết hoá trị bằng những vạch giữa các ký hiệu nguyên tử trong công thức phân tử và trên cơ sở đó Frankland đã viết công thức cấu trúc đầu tiên của phân tử.

Sau đó ít lâu, năm 1861, Butlerow, nhà bác học Nga, đã phát triển và hệ thống hóa các kiến thức về phân tử và đưa ra thuyết **"cấu tạo hóa học".**

Theo thuyết cấu tạo hoá học:

– Các nguyên tử trong phân tử kết hợp với nhau theo một thứ tự xác định phù hợp với hoá trị của chúng.

– Tính chất của một chất không những chỉ phụ thuộc vào số lượng và bản chất của các nguyên tử mà còn phụ thuộc vào cách sắp xếp các nguyên tử nghĩa là phụ thuộc vào "cấu tạo hoá học" của phân tử.

(Bản chất hoá học của một hạt phức tạp được xác định bởi bản chất của các cấu tử cơ bản, bởi số lượng của chúng và bởi "cấu tạo hoá học").

Butlerow đã nhấn mạnh đến tác dụng tương hỗ giữa các nguyên tử trong phân tử và sự phụ thuộc của tính chất hoá học các hợp chất vào cấu trúc phân tử của chúng. Trên cơ sở đó, Butlerow đã phê phán quan điểm "bất khả tri" của Gerhardt và cho rằng "cấu tạo hoá học" có thể xác định được qua các phản ứng hoá học.

Thuyết "cấu tạo hoá học" cũng đã giải thích được hiện tượng đồng phân do Liebig và Woehler khám phá ra năm 1823. Những đồng phân là các hợp chất có thành phần giống nhau (cùng công thức nguyên) nhưng có cấu tạo phân tử khác nhau.

Trên cơ sở lý thuyết về hoá trị và về cấu tạo phân tử, năm 1866 Kékulé đưa ra công thức cấu tạo của benzen và cho rằng benzen phải có cấu tạo vòng với sáu nhóm CH lần lượt liên kết với nhau bằng những nối đơn C – C và những nối đôi C = C. (Trong phần sau, ta sẽ thấy công thức này không phản ánh được đúng quan hệ về liên kết thực trong phân tử benzen).

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

Hoá trị định hướng và cấu hình phân tử. Năm 1874, một cách độc lập với nhau, nhà bác học Hà Lan van't Hoff (Van Hốp) và nhà bác học Pháp Le Bel (Lơ Ben) đã nêu lên giả thiết cho rằng bốn hoá trị của cacbon (liên kết đơn) được phân bố một cách xác định trong không gian hướng về bốn đỉnh của một tứ diện đều mà tâm trùng với tâm của nguyên tử cacbon (mẫu tứ diện cacbon). Trên cơ sở này xuất hiện khái niệm về sự định hướng của hoá trị cũng như khái niệm "cấu hình không gian" của phân tử. Sự khám phá trên đã đánh dấu một bước phát triển mới trong lý thuyết về cấu tạo phân tử. Trong phân tử, các nguyên tử chẳng những được sắp xếp theo một trật tự nào đó mà còn được phân bố theo một cấu hình hình học xác định.

Sự phát triển việc nghiên cứu cấu trúc không gian của phân tử đã dẫn đến sự xuất hiện ngành *hoá học lập thể* mà người sang lập chính là *van't Hoff và Le Bel.*

Trong lĩnh vực cấu tạo phân tử, trong thời gian sau đó người ta phải kể đến công trình của nhà bác học Thuỵ Sĩ Alfred Werner (Vec-ne), người đã vận dụng hoá học lập thể trong các phức chất vô cơ và xây dựng *lý thuyết phối trí về phức chất* (1892).

Cùng với sự phát triển lý thuyết về cấu tạo phân tử, trong thời gian này, trong hoá học, đặc biệt trong ngành hoá học hữu cơ đã có sự phát triển rất nhanh chóng. Hàng ngàn hợp chất mới được tổng hợp. Cấu trúc phân tử của hàng loạt các hợp chất được xác định. Tuy nhiên, đến đây, sự phát triển của khoa học còn chưa cho phép đi sâu vào những vấn đề lý thuyết về liên kết hoá học và đặc biệt về bản chất của lực liên kết mà trong thời gian này còn được gọi một cách khái quát là "lực hoa học".

Hợp chất ion và hợp chất phi ion. Sau khi Arrhenius (A-rê-ni-út, 1883) tìm ra hiện tượng phân ly ion người ta phân biệt được hai loại hợp chất hóa học khác nhau mà được giả thiết là ứng với hai loại liên kết hoá học khác nhau.

Những hợp chất thứ nhất được gọi là những *hợp chất ion*, được cấu tạo bằng những ion tích điện trái dấu. Những hợp chất này thường gặp trong hoá học vô cơ.

Những hợp chất thứ hai được gọi là những *hợp chất phi ion*, được cấu tạo bằng những nguyên tử không tích điện. Những hợp chất này thường gặp trong hoá học hữu cơ.

Bản chất lực liên kết trong các hợp chất thứ nhất có thể giải thích bằng lực hút tĩnh điện giữa các ion trái dấu. Tuy nhiên, sự hình thành những ion trái dấu trong các hợp chất này vẫn chưa được giải thích. Riêng đối với các hợp chất phi ion, đến đây vẫn hoàn toàn chưa có sự giải thích về bản chất cũng như sự hình thành liên kết.

Thuyết điện tử về hoá trị. Chúng ta đã biết khái niệm hoá trị đã được Frankland đưa ra năm 1852. Hoá trị của một nguyên tố bất kỳ được coi là số nguyên tử hydrô (hay những nguyên tử tương đương với hydrô) có thể liên kết hay thay thế một nguyên tử của nguyên tố trên. Sang đầu thế kỷ XX, trên cơ sở sự phát triển lý thuyết về cấu tạo nguyên tử (mô hình nguyên tử Thomson, 1904; mô hình nguyên tử Rutherford, 1911; mô hình nguyên tử Bohr, 1913) nhiều nhà bác học cố gắng giải thích vấn đề hoá trị hay nói chung là vấn đề liên kết hoa học bằng những tương tác điện tử ở lớp vỏ các nguyên tử tương tác.

Năm 1910 Thomson (Tom-xơn) đưa ra giả thuyết cho rằng hiện tượng liên kết giữa

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

các nguyên tử được thực hiện nhờ sự chuyển điện tử từ nguyên tử này sang nguyên tử khác. Những điện tử này được gọi là những **điện tử hoá trị.**

Cùng năm đó, Falk (Phôn-cơ) và Nilson (Nin-xơn) cho rằng hoá trị của một nguyên tố là số điện tử mà một nguyên tử của nguyên tố đó bỏ ra hay thu thêm trong các tương tác hoá học. Hoá trị này được Aberg (A-bec) và Bodlander (Bốt-len-đơ) gọi là **điện hoá trị.**

Năm 1916 nhà bác học Đức W.Kossel (Cốt-xen) đã vận dụng lý thuyết nguyên tử Bohr vào vấn đề liên kết giữa các nguyên tử và nêu lên giả thuyết cho rằng trong nhiều tương tác, các nguyên tử của các nguyên tố có xu hướng thu thêm hay bỏ ra một hay nhiều điện tử để đạt được cấu hình điện tử vững bền của các khí trơ đứng trước hoặc đứng sau nguyên tố đó trong hệ thống tuần hoàn Mendeleev với tám (hoặc hai) điện tử ở lớp ngoài cùng *(quy tắc bát tử).*

Trên cơ sở đó, Kossel cho rằng liên kết giữa hai nguyên tử có thể được hình thành :

a) Bằng sự chuyển một hay nhiều điện tử từ nguyên tử này sang nguyên tử khác ;

b) Bằng lực hút tĩnh điện giữa những ion tích điện trái dấu được tạo thành.

Loại liên kết này được gọi là *liên kết ion.* **Số điện tích sơ đẳng dương hoặc âm của các ion được gọi là *điện hoá trị.***

Giả thuyết Kossel đã giải thích được sự hình thành những ion trong các hợp chất ion đã được nói đến trong thời gian trước đó.

Cùng năm 1916, nhà bác học Mỹ G.N. Lewis (Lê-uýt) nêu lên giả thuyết cho rằng trong những phân tử như H_2, Cl_2, CH_4,... (những hợp chất phi ion), sự hình thành liên kết giữa hai nguyên tử được thực hiện bằng những cặp điện tử chung cho hai nguyên tử và với sự hình thành những cặp điện tử chung, các nguyên tử tương tác có cấu hình *điện tử* vững bền của các khí hiếm tương ứng(*). Loại liên kết này được gọi là *liên kết cộng hoá trị.*

Số cặp *điện tử* mà một nguyên tử có chung với những nguyên tử khác được gọi là *cộng hóa trị.*

Giả thuyết về liên kết ion của Kossel và giả thuyết về liên kết cộng hoá trị của Lewis được Langmuir (1919) phát triển thành lý thuyết tổng quát về liên kết được gọi là *thuyết điện tử hoá trị.*

Thuyết điện tử về hoá trị cũng đưa ra sự giải thích về loại liên kết hoá học cơ bản thứ ba được gọi là *liên kết kim loại* bằng sự hình thành những ion kim loại dương và những điện tử chuyển động tương đối tự do giữa những ion dương trong tinh thể kim loại.

Lý thuyết cơ học lượng tử về liên kết hoá học. Như chúng ta đã biết, lý thuyết Bohr về nguyên tử không phải là một lý thuyết hoàn chỉnh vì không phản ánh được tính chất sóng của các hạt vi mô. Do đó, thuyết *điện tử* về hoá trị, xây dựng trên mô hình nguyên tử Bohr, cũng không phản ánh được hình ảnh thực tế về phân tử và các tương tác điện tử.

(*) Thực ra, trong cả hai trường hợp : Liên kết ion và liên kết cộng hoá trị, các ion và các nguyên tử không phải luôn luôn có cấu hình điện tử của các khí hiếm.

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

Đối với liên kết ion, bản chất lực liên kết có thể được giải thích bằng lực hút tĩnh điện giữa các phần tử tích điện khác dấu. Tuy nhiên, trong trường hợp liên kết cộng hoá trị, thuyết *điện tử* về hoá trị chỉ đưa ra một sự giải thích định tính và không cho một khả năng đi sâu vào bản chất lực liên kết.

Phân tử là một hệ thống các vi hạt. Lý thuyết về phân tử phải được xây dựng trên cơ sở của cơ học lượng tử. Vì vậy, ngay sau khi cơ học lượng tử ra đời (1926), năm 1927 đã có công trình của Heitler (Hét-le) và London (Lơn-đơn) về sự vận dụng cơ học lượng tử để giải bài toán về phân tử hyđrô. Công trình này đã đặt cơ sở cho việc áp dụng cơ học lượng tử trong việc giải quyết các vấn đề về liên kết hoá học.

Vì phân tử là một hệ thống phức tạp nên việc giải chính xác phương trình Schroedinger đối với các bài toán về phân tử là không thực hiện được. Vì vậy, người ta phải xây dựng những phương pháp gần đúng cơ học lượng tử để khảo sát các vấn đề về liên kết và phân tử.

Có hai phương pháp cơ bản là *phương pháp liên kết hoá trị* (valence bond, VB) và *phương pháp orbital phân tử* (molecular orbital, MO). Từ hai phương pháp này dẫn đến hai thuyết cơ bản về liên kết hoá học: thuyết liên kết hoá trị và thuyết orbital phân tử.

Sự phát triển nhanh chóng của việc áp dụng lý thuyết cơ học lượng tử trong các vấn đề về liên kết và cấu tạo phân tử nói riêng và trong hoá học nói chung đã làm xuất hiện ngành hoá học lượng tử. Các lý thuyết về hoá học đang được dần dần giải thích và phát triển trên cơ sở của hoá học lượng tử.

§ 3. CẤU TẠO PHÂN TỬ, CÔNG THỨC HÓA HỌC

Từ nửa cuối thế kỷ XVIII, thực nghiệm đã cho phép xác định thành phần định lượng của các hợp chất hoá học. Từ các dữ kiện thực nghiệm thu được và trên cơ sở những kiến thức cơ bản về lý thuyết nguyên tử (giả thuyết nguyên tử Dalton), đầu thế kỷ XIX người ta đã có thể biểu diễn nhiều hợp chất bằng những công thức được gọi là *công thức chất*, thí dụ:

$$CH_4,\ CH_3,\ H_2O,\ HO,\ NO_2.$$

Trong công thức chất, các hệ số (hệ số tỷ lượng) là những số nguyên nhỏ nhất.

- Tiếp theo đó, sau khi có những phương pháp xác định được khối lượng phân tử tương đối, người ta thành lập **công thức phân tử** để đặc trưng cho phân tử:

$$CH_4,\ C_2H_6,\ H_2O,\ H_2O_2,\ NO_2,\ N_2O_4.$$

Trong công thức phân tử, các hệ số cho biết số nguyên tử tương ứng có trong phân tử.

Các công thức chất và công thức phân tử là những **công thức nguyên**. Các công thức này không cho biết gì về cấu tạo nội tại của phân tử.

Năm 1823, Liebig và Woehler tìm ra hiện tượng đồng phân tức là sự tồn tại một số hợp chất có thành phần như nhau (cùng công thức phân tử) nhưng có cấu tạo phân tử khác nhau và do đó có tính chất khác nhau.

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