

Phân GV bổ sung, chỉnh sửa : Tô vàng

CHUYÊN ĐỀ 10. ĐẠI CƯƠNG HÓA HỌC HỮU CƠ

Phần I: HỆ THỐNG LÝ THUYẾT CƠ BẢN VÀ NÂNG CAO

Hợp chất của carbon là hợp chất hữu cơ (trừ một số các hợp chất như carbon monoxide (CO), carbon dioxide (CO₂), muối carbonate (CO₃²⁻), cyanide (CN⁻), carbide (CaC₂),...)



Đường mía chứa saccharose (C₁₂H₂₂O₁₁)



Dung dịch sát khuẩn chứa ethanol (C₂H₅OH)



Giấm táo chứa acetic acid (CH₃COOH)

A. CÔNG THỨC PHÂN TỬ, CÔNG THỨC CẤU TẠO HỢP CHẤT HỮU CƠ.

I. CÔNG THỨC PHÂN TỬ

1. Khái niệm

Công thức phân tử cho biết thành phần nguyên tố và số lượng nguyên tử của mỗi nguyên tố trong phân tử. Ví dụ: khí propane: C₃H₈; khí butane: C₄H₁₀;...

2. Cách biểu diễn công thức phân tử hợp chất hữu cơ

a) Công thức tổng quát: Cho biết các nguyên tố có trong phân tử hợp chất hữu cơ.

Ví dụ: C_xH_yO_z (x,y,z là các số nguyên dương) hợp chất hữu cơ có 3 nguyên tố C, H, O.

b) Công thức đơn giản nhất: cho biết tỉ lệ tối giản số nguyên tử của các loại nguyên tố trong phân tử hợp chất hữu cơ.

Ví dụ: CTPT: C₂H₄O₂ => Công thức đơn giản nhất là CH₂O.

3. Quan hệ giữa CTPT & CTĐGN: CTPT=(CTĐGN)_n, n: số nguyên dương

	Ethane	Glucose	Ethylamine	Alanine
Công thức phân tử	C ₂ H ₆	C ₆ H ₁₂ O ₆	C ₂ H ₇ N	C ₃ H ₇ O ₂ N
Công thức đơn giản nhất	CH ₃	CHO	C ₂ H ₇ N	C ₃ H ₇ O ₂ N
Công thức tổng quát	C _x H _y	C _x H _y O _z	C _x H _y N _z	C _x H _y O _z N _t

⇒ Công thức phân tử có thể trùng với công thức đơn giản nhất hoặc gấp công thức đơn giản nhất một số lần.

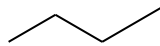
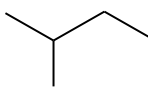
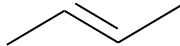
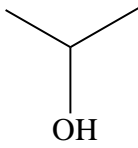
II. CÔNG THỨC CẤU TẠO

1. Khái niệm

Công thức cấu tạo biểu diễn cách liên kết và thứ tự liên kết giữa các nguyên tử trong phân tử.

2. Cách biểu diễn cấu tạo phân tử hợp chất hữu cơ

Công thức cấu tạo đầy đủ	Công thức cấu tạo thu gọn	
	Dạng 1: Cấu tạo thu gọn (hay dùng). Các nguyên tử, nhóm nguyên tử cùng liên kết với một nguyên tử carbon được viết thành một nhóm	Dạng 2: Khung phân tử (ít dùng) Chỉ biểu diễn liên kết giữa nguyên tử carbon với nhóm chức. Mỗi đầu một đoạn thẳng hoặc điểm gấp khúc ứng với một nguyên tử carbon (không biểu thị số nguyên

		từ hydrogen liên kết với mỗi nguyên tử carbon).
$ \begin{array}{cccc} \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} \\ & & & \\ \text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{H} \\ & & & \\ \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} \end{array} $	$\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_3$	
$ \begin{array}{cccc} \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} \\ & & & \\ \text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{H} \\ & & & \\ \text{H} & \text{C} & \text{H} & \text{H} \\ & & & \\ & \text{H} & & \end{array} $	$ \begin{array}{c} \text{CH}_3-\text{CH}-\text{CH}_2-\text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 \end{array} $	
$ \begin{array}{cccc} \text{H} & & & \text{H} \\ & & & \\ \text{H}-\text{C}-\text{C}=\text{C}-\text{C}-\text{H} \\ & & & \\ \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} \end{array} $	$\text{CH}_3-\text{CH}=\text{CH}-\text{CH}_3$	
$ \begin{array}{cccc} \text{H} & \text{H} & \text{H} & \\ & & & \\ \text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{H} \\ & & & \\ \text{H} & \text{O} & \text{H} & \\ & & & \\ & \text{H} & & \end{array} $	$ \begin{array}{c} \text{CH}_3-\text{CH}-\text{CH}_3 \\ \\ \text{OH} \end{array} $	

3. Liên kết đơn, đôi, ba

- Liên kết đơn: gồm 1 liên kết **sigma (δ)**: “-”.
- Liên kết đôi: gồm 1 liên kết **sigma (δ)** + 1 liên kết **pi (π)**: “=”
- Liên kết ba: gồm 1 liên kết **sigma (δ)** + 2 liên kết **pi (π)**: “≡”

B. ĐỒNG ĐẲNG – ĐỒNG PHẦN – CẤU DẠNG.

I. ĐỒNG PHẦN

1. Khái niệm: Những chất khác nhau (cấu tạo hoặc sự phân bố nguyên tử, nhóm nguyên tử) nhưng có cùng công thức phân tử được gọi là các chất đồng phần của nhau.

2. Phân loại

a) Đồng phần cấu tạo

Cách tính độ bất bão hòa (tổng số liên kết **pi (π)** và số vòng)

- Độ bất bão hòa chính là tổng số liên kết **pi (π)** và số vòng trong hợp chất hữu cơ, kí hiệu là **k**.

$$k = \frac{2.IV + 2 + 1.III - I}{2} \quad (\text{IV, III, I lần lượt là số nguyên tử hóa trị IV, III, I})$$

- Với **hợp chất hữu cơ** có công thức $\text{C}_x\text{H}_y\text{O}_z\text{N}_t\text{Cl}_u$, biểu thức tính k như sau:

$$k = \frac{2x + x + 1.t - (y + u)}{2}$$

- Nếu N có chứa liên kết cho nhận (ví dụ muối **amonium**) thì biểu thức tính k:

$$k = \frac{2x + x + 3.t - (y + u)}{2}$$

b) Đồng phần hình học

- Điều kiện xuất hiện đồng phần hình học:
- + Điều kiện cần: Phân tử phải có liên kết đôi hoặc vòng no.
- + Điều kiện đủ: Ở mỗi nguyên tử **carbon** của liên kết đôi và ở ít nhất hai nguyên tử **carbon** của vòng no phải có 2 nguyên tử hoặc nhóm nguyên tử khác nhau.

- Các trường hợp có liên kết đôi:

+ Trường hợp có một liên kết đôi

- Hệ $abC=Cef$ ($a \neq b$; $e \neq f$), hệ này có 2 ĐPHH.
- Hệ $abC=Nf$ ($a \neq b$), hệ này có 2 ĐPHH
- Hệ $aN=Nb$, hệ này có 2 ĐPHH dù $a = b$ hay $a \neq b$

+ Trường hợp có nhiều liên kết đôi

- Hệ gồm **một số** liên kết $C=C$ liên nhau dạng $abC=C=C=Cef$. Hệ này có vai trò tương tự một liên kết $C=C$ nên nếu $a \neq b$, $e \neq f$ sẽ có **2 đồng phân hình học**.
- Hệ gồm **hai hoặc nhiều** liên kết $C=C$ **liên hợp** dạng $abC=CH-[-CH=CH-]_{n-2}-CH=Cef$.

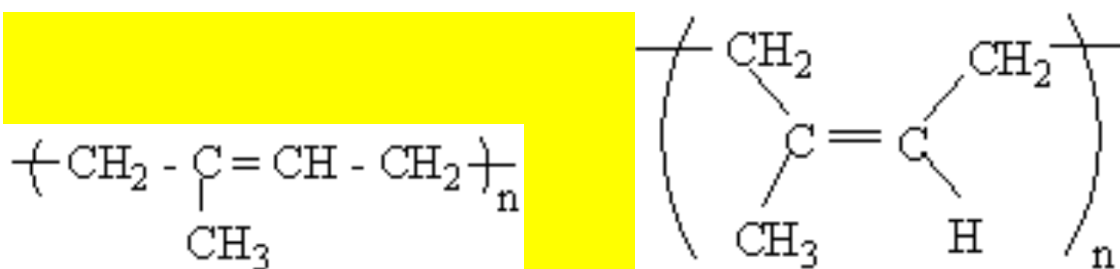
• Nếu cặp a, b không đồng nhất với cặp e, f sẽ có **2 đồng phân hình học**.

• Nếu cặp a, b đồng nhất với cặp e, f số **đồng phân hình học** sẽ ít hơn 2^n .

** Ứng với dạng $a[-CH=CH-]_ne$ thì số đồng phân hình học $N = 2^{n-1} + 2^{p-1}$.

** Nếu n chẵn thì $p = \frac{n}{2}$ nếu n lẻ thì $p = \frac{n-1}{2}$.

- Hệ có **nhiều** liên kết $C=C$ **biệt lập**: Mỗi nối đôi có thể có cấu hình cis hoặc trans, tương tự hệ liên hợp, do đó có thể xuất hiện nhiều **đồng phân hình học**. Cao su thiên nhiên là một hệ có rất nhiều liên kết đôi biệt lập song các nối đôi đó đều có dạng cis, trái lại trong trường hợp của nhựa Guttapercha các nối đôi đều có cấu hình trans.



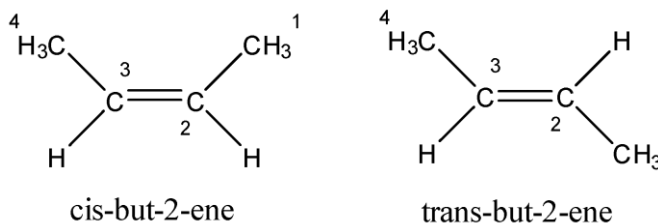
Cao su thiên nhiên

Danh pháp cis/trans: Theo hệ danh pháp này, nếu mạch chính thuộc về cùng một phía (phía trên hoặc phía dưới) ta được đồng phân cis; nếu mạch chính nằm khác phía ta được đồng phân trans. Hoặc cũng có thể dựa vào bản chất nhóm thế, nếu hai nhóm thế giống nhau (hoặc cùng bản chất electron) nằm hai bên mặt phẳng là trans, nếu cùng bên là cis. Hệ danh pháp cis/trans gặp khó khăn trong các trường hợp như $ClBrC=CBrI$, ...

*** Đồng phân hình học có 3 loại:**

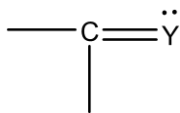
i. Đồng phân cis – trans

+ Đồng phân cis – trans xuất hiện ở các nối đôi $C=C$ khi có hai nguyên tử hoặc nhóm nguyên tử nằm cùng phía hoặc khác phía của mặt phẳng π .



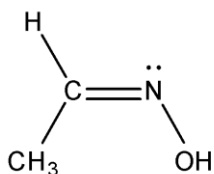
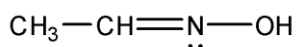
+ Trường hợp phân cứng nhắc của phân tử là một nối đơn hoặc một phân vòng trong các hợp chất vòng.

ii. Đồng phân syn-anti

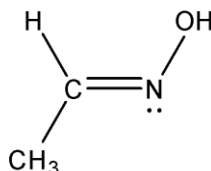


Danh pháp syn-anti: dùng cho nối đôi có một cặp điện tử không phân chia như đối với loại hợp chất andoxim, xetoxim không đối xứng, hydrazone, hợp chất azo có liên kết C=N, N=N (syn-cùng phía, anti-khác phía)

VD:



syn-



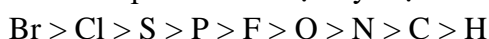
anti-

iii. Đồng phân E-Z

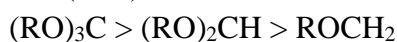
Trường hợp không dùng được danh pháp cis-trans thì dùng danh pháp chung gọi là danh pháp Z-E.

Danh pháp Z-E dựa trên tính hơn cấp của nguyên tố đính với carbon. Nhóm thế có nguyên tố có số thứ tự nguyên tố cao hơn (hay có khối lượng nguyên tử hoặc phân tử lớn hơn) thì có tính hơn cấp cao hơn. Nếu hai nhóm thế có tính hơn cấp ở cùng một phía của mặt phẳng là đồng phân Z, khác phía là đồng phân E.

- Nhóm thế có nguyên tử đính với C lai hóa sp^2 có số thứ tự hay điện tích hạt nhân lớn hơn sẽ hơn cấp hơn:



- Nếu các nguyên tử liên kết trực tiếp giống nhau thì xét lớp thứ hai:

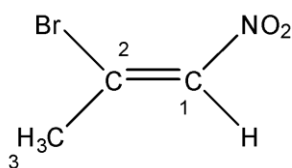


- Các nguyên tử có chứa liên kết bội được tính bội lần:

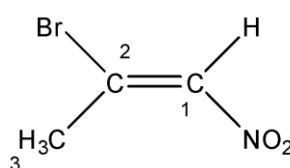


- Trong số các đồng vị, nguyên tử có số khối lớn hơn là hơn cấp hơn $\text{D} > \text{H}$.

VD:



(Z)-2-bromo-1-nitroprop-1-ene



(E)-2-bromo-1-nitroprop-1-ene

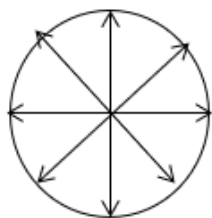
$\text{Br} > \text{CH}_3 ; \text{NO}_2 > \text{H}$

c) Đồng phân không gian

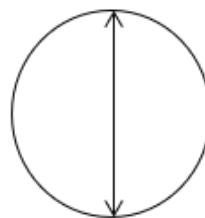
i. Đồng phân quang học

- Khái niệm: Những hợp chất có cấu trúc và tính chất vật lý, hóa học giống nhau nhưng khác nhau về khả năng quay mặt phẳng ánh sáng phân cực gọi là đồng phân quang học

- Ánh sáng là dao động sóng của trường điện và từ. Khi một electron tương tác với ánh sáng thì có dao động theo tần số của ánh sáng theo hướng của trường điện. Ánh sáng thường có vector trường điện của sóng ánh sáng trong tất cả các hướng của mặt phẳng. Ánh sáng phân cực có vecto của trường điện của tất cả các sóng ánh sáng trong cùng một mặt phẳng, gọi là mặt phẳng phân cực.



Ánh sáng thường



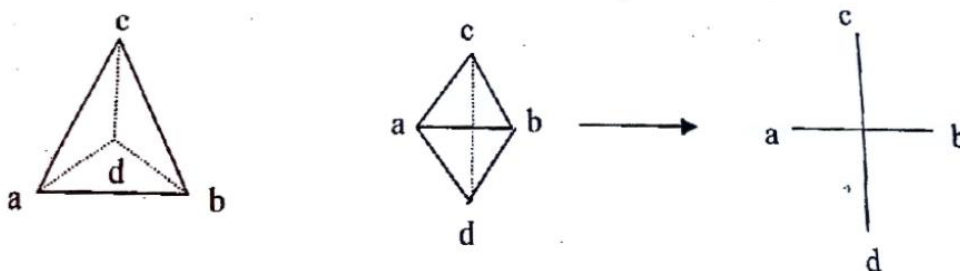
Ánh sáng phân cực

- Điều kiện để có đồng phân quang học:

- + Điều kiện cần: Phải có trung tâm bất đối (nguyên tử bất đối, phân tử bất đối hay tinh thể bất đối).
- + Điều kiện đủ: Phải được phân bố theo công thức chiều Fiso.

- Quy tắc chiều Fiso:

- + Mạch chính biểu diễn ở cạnh nằm dọc.
- + Nguyên tử hoặc nhóm nguyên tử có số oxi hóa cao thì được biểu diễn ở phía trên, ngược lại thì biểu diễn ở phía dưới.
- + Qui ước: Các nhóm nguyên tử ở đường kẻ ngang (a và b) ở phía gần người quan sát, còn các nhóm nguyên tử ở đường dọc (c và d) ở phía xa hơn. Muốn chuyển công thức hình tứ diện sang công thức Fiso ta dùng phương pháp chiếu các nhóm nguyên tử của tứ diện lên mặt phẳng giấy. Khi ấy cần chú ý là tứ diện phải được phân bố như thế nào đó một cạnh nằm ngang của tứ diện ở gần người quan sát.



II. ĐỒNG ĐẲNG

– **Đồng đẳng** là hiện tượng các chất có cấu tạo và tính chất tương tự nhau, nhưng CTPT hơn kém nhau một hay nhiều nhóm CH₂. Các chất đó hợp thành dãy chất gọi là dãy đồng đẳng.

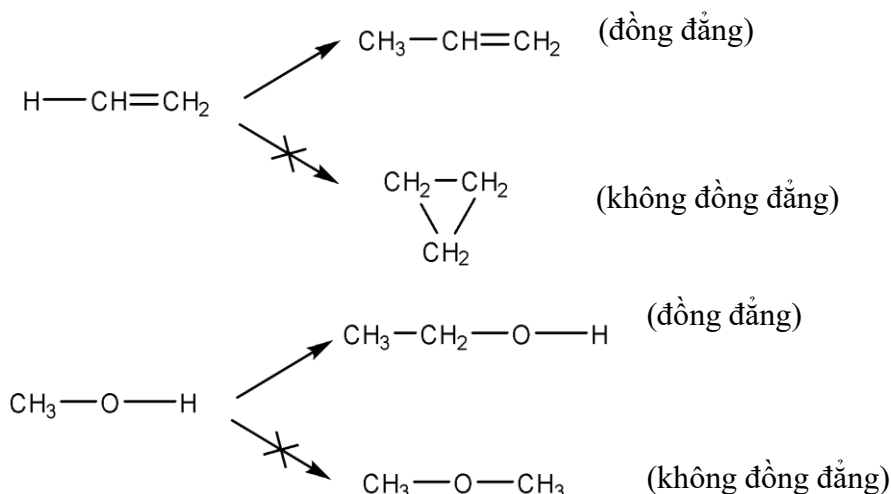
VD: Dãy đồng đẳng của alkane (C_nH_{2n+2}): CH₄, CH₃ – CH₃, CH₃ – CH₂ – CH₃, ...

Dãy đồng đẳng của alcohol no, đơn chức, mạch hở (C_nH_{2n+1}OH): CH₃OH, CH₃ – CH₂OH, ...

- Như vậy đồng đẳng được tạo ra do sự phân cắt liên kết để đưa nhóm -CH₂- vào phân tử, khi đó cần lưu ý

a) Liên kết bị cắt phải là liên kết đơn giữa các carbon với carbon hoặc với nguyên tử khác.

VD:



b) Không được cắt liên kết đơn trong hệ liên hợp (vi phạm tính liên hợp).

VD: