

ĐẠI HỌC NÔNG LÂM TP. HỒ CHÍ MINH
KHOA KHOA HỌC/ BỘ MÔN HÓA HỌC

HÓA ĐẠI CƯƠNG



CHƯƠNG 1:

ĐẠI CƯƠNG VỀ

HÓA HỌC HỮU CƠ

PHẦN 1A

- ĐỒNG PHÂN

PHẦN 1B

- CÁC HIỆU ỨNG ĐIỆN TỬ

ĐỒNG PHÂN

❖ Khái niệm:

Hiện tượng một công thức phân tử ứng với hai hay nhiều hợp chất khác nhau được gọi là hiện tượng đồng phân

❖ Phân loại:

ĐỒNG PHÂN CẤU TẠO
(Đồng phân phẳng)

TỰ ĐỌC

ĐỒNG PHÂN LẬP THỂ
(Đồng phân không gian)

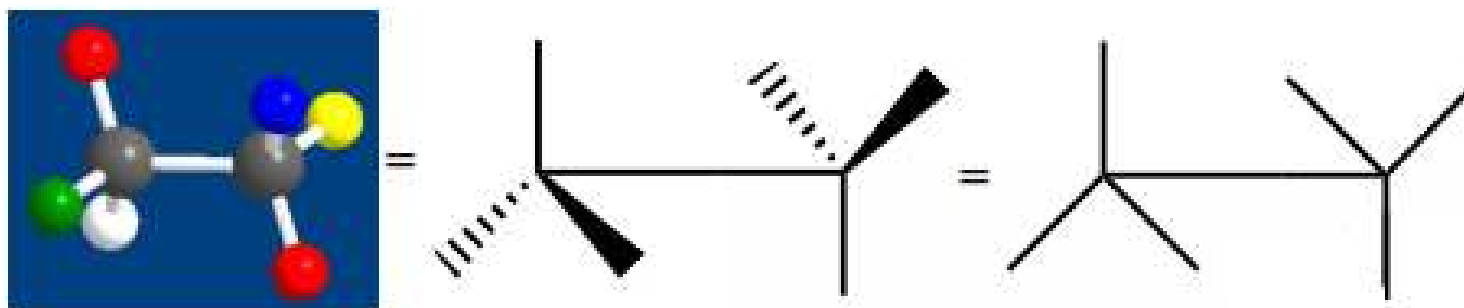
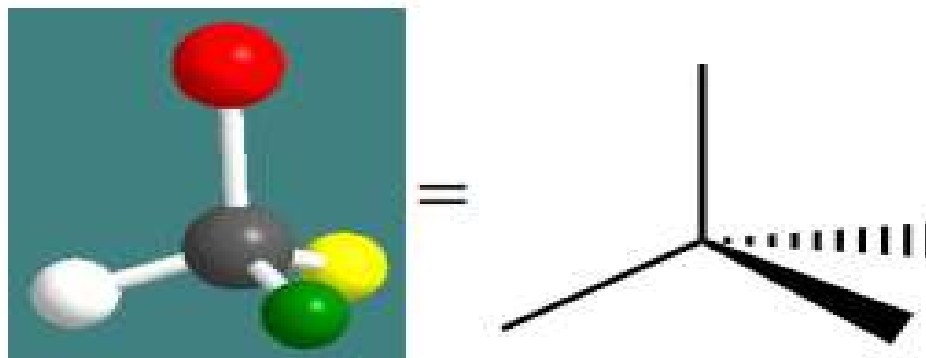
ĐP hình học

ĐP quang học

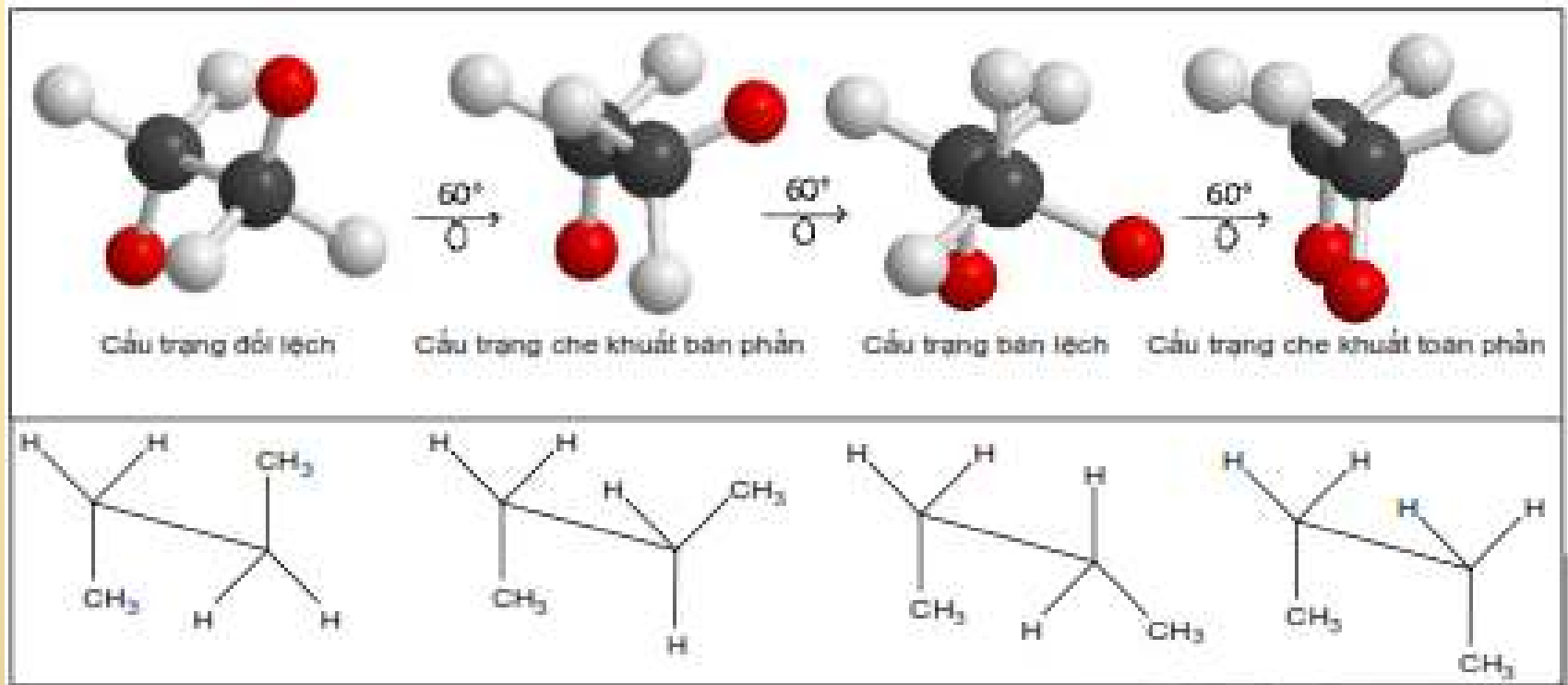
II. Đồng phân lập thể

II.1. Biểu diễn công thức phân tử trong không gian

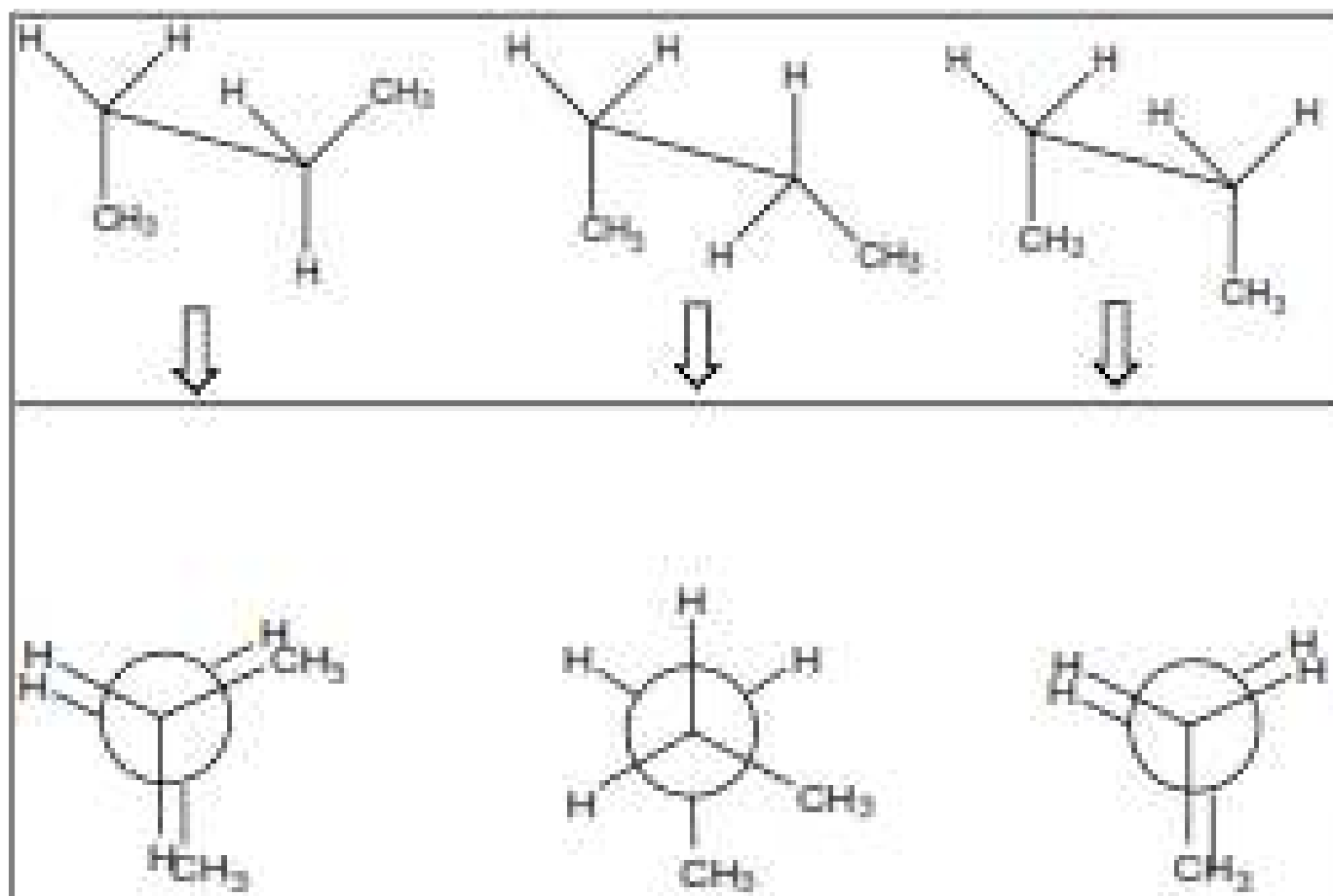
❖ Công thức phối cảnh



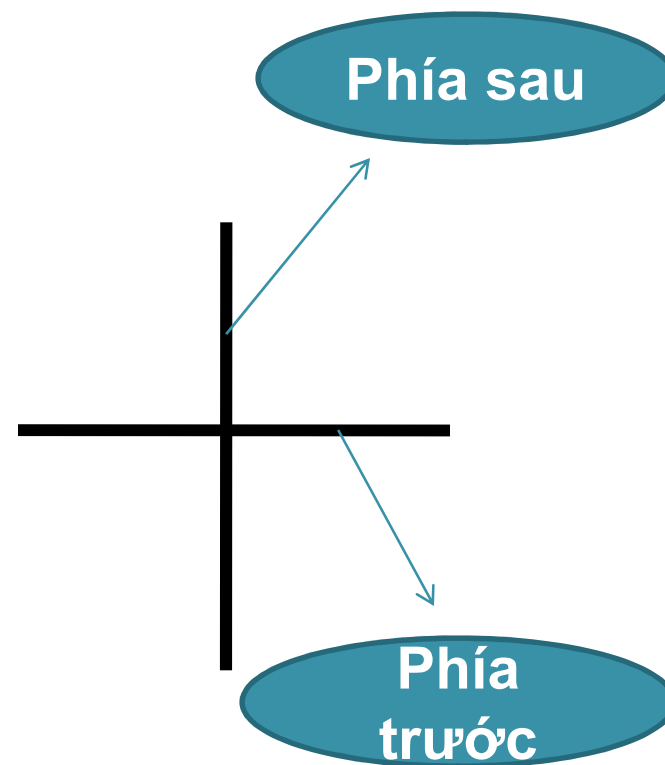
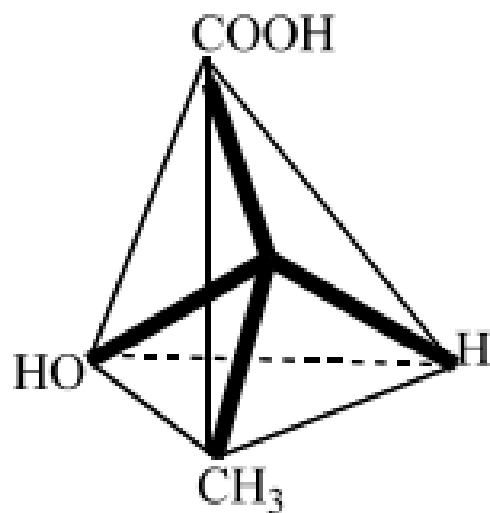
❖ Công thức phối cảnh



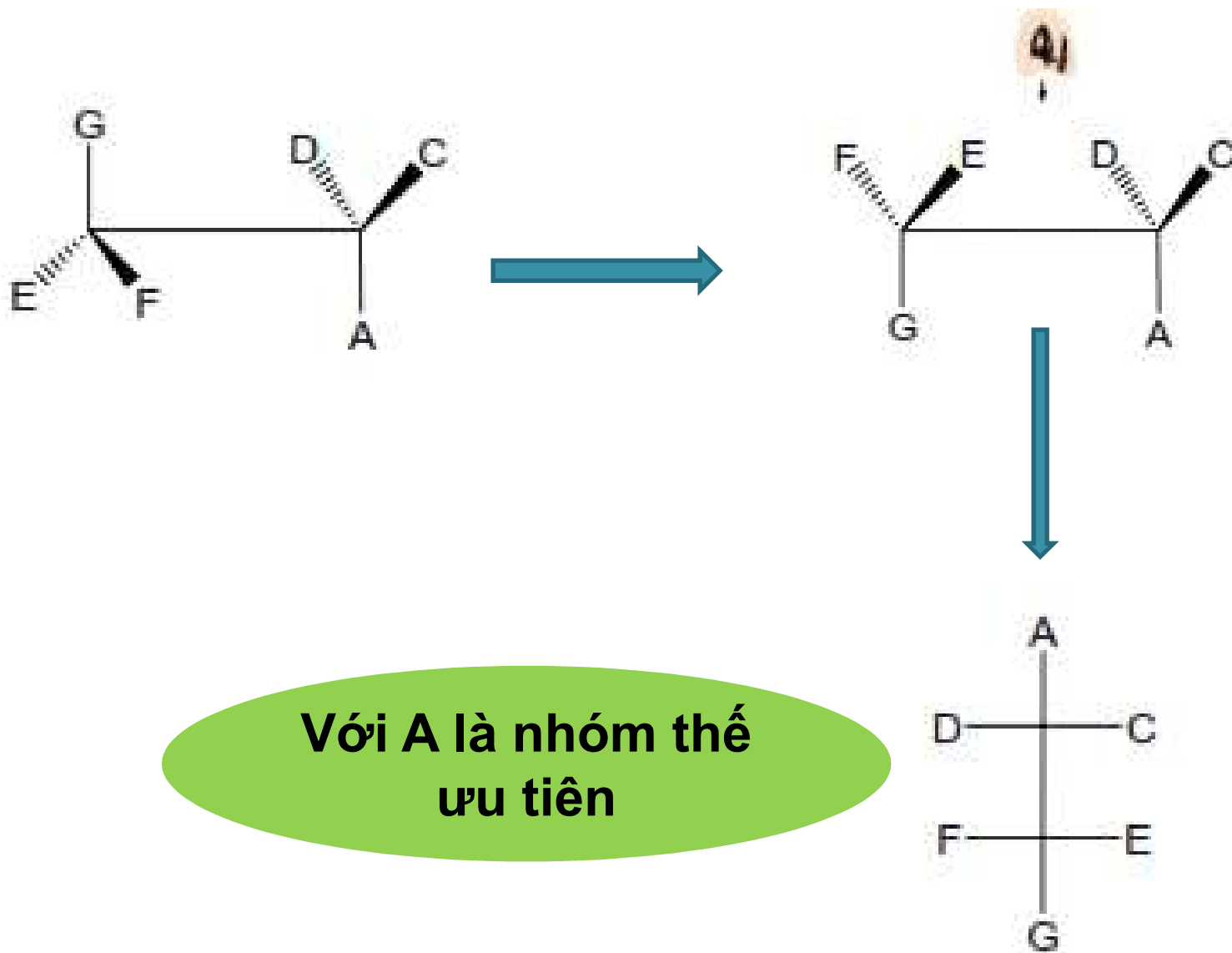
❖ Công thức Newman



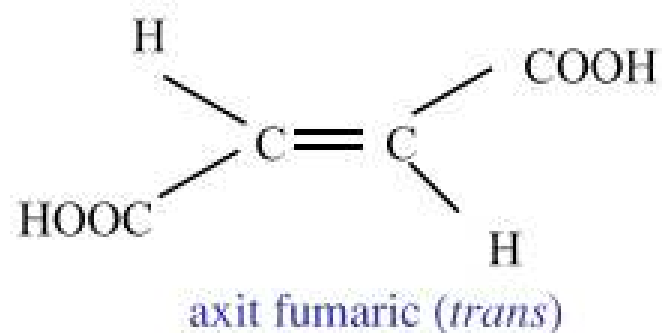
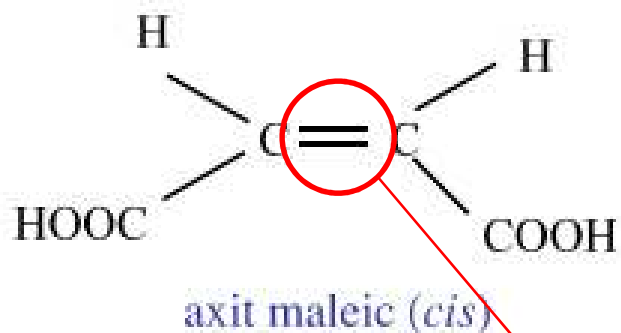
❖ Công thức Fisher



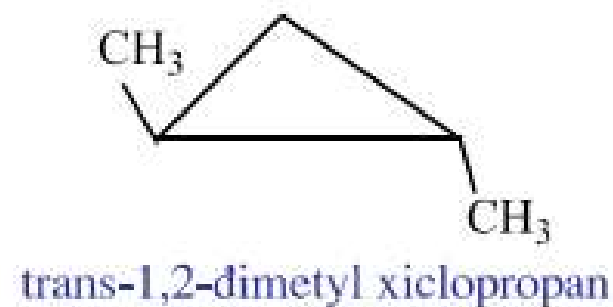
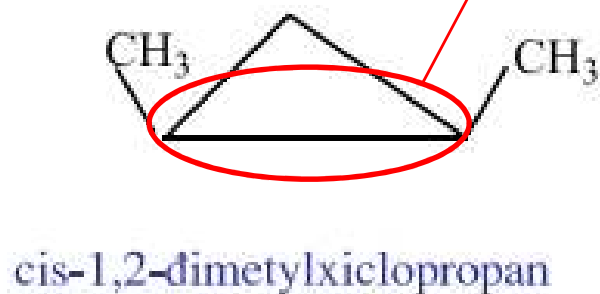
❖ Công thức Fisher



II.2. Đồng phân hình học



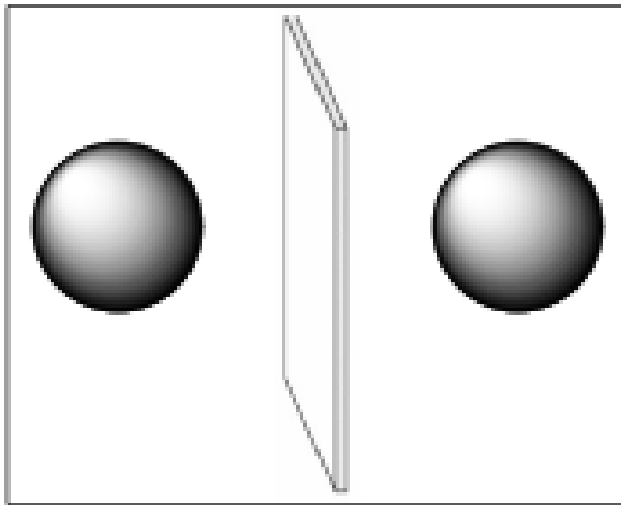
Phần tử “cứng nhắc”



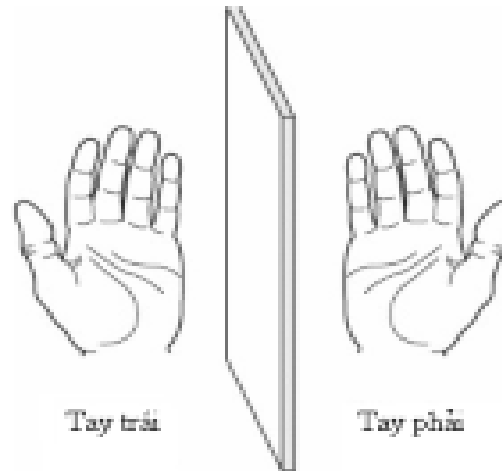
Các đồng phân hình học *khác nhau về tính chất vật lý*

II.3. Đồng phân quang học

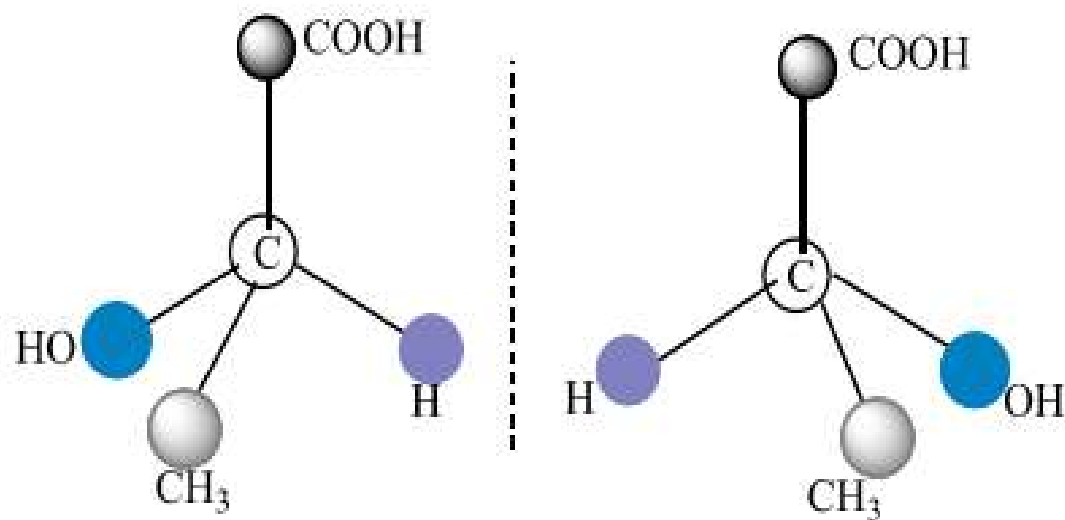
- Một số hợp chất hữu cơ làm quay mặt phẳng dao động của ánh sáng phân cực ➡ chất **QUANG HOẠT**
- Nguyên nhân: phân tử hữu cơ **bất đối xứng**



Đối xứng



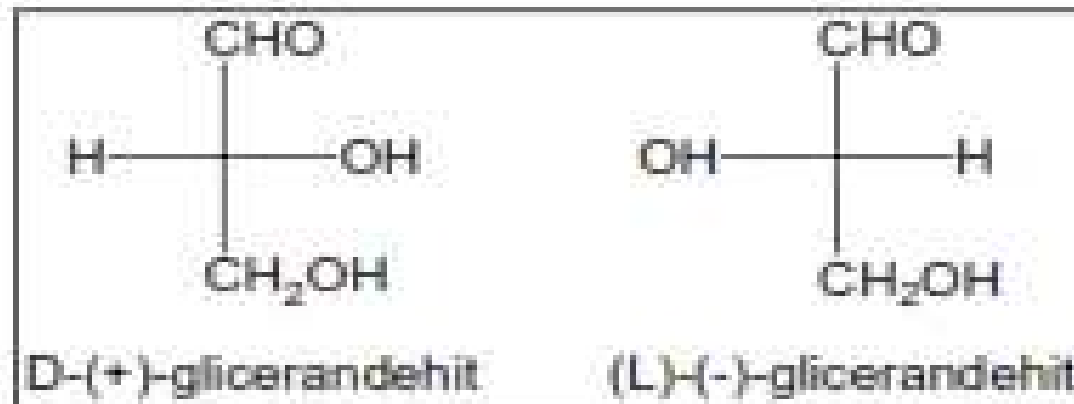
Bất đối xứng



Hai chất đối hình (đối quang)

➤ Phân tử hữu cơ **bất đối xứng**: phổ biến nhất là chứa C bất đối xứng hay còn gọi là C thủ tính (kí hiệu: C^{*})

➤ Kí hiệu D, L (cacbohydrat, amino axit)



Lưu ý:

- Đặt mạch chính trên trục dọc, C có số oxi hóa cao nhất trên cùng (COOH > CHO > C-OH)
- Nếu nhóm X nằm phía phải → cấu hình D
- Nếu nhóm X nằm phía trái → cấu hình L
- Nếu hợp chất có nhiều C* thì xác định cấu hình dựa vào C* có chỉ số cao nhất

➤ Quy tắc sử dụng công thức chiếu Fisher

❑ **Quy tắc 1:** nếu xoay toàn bộ công thức Fisher 180° trong mặt phẳng *không* làm thay đổi cấu hình chất đó

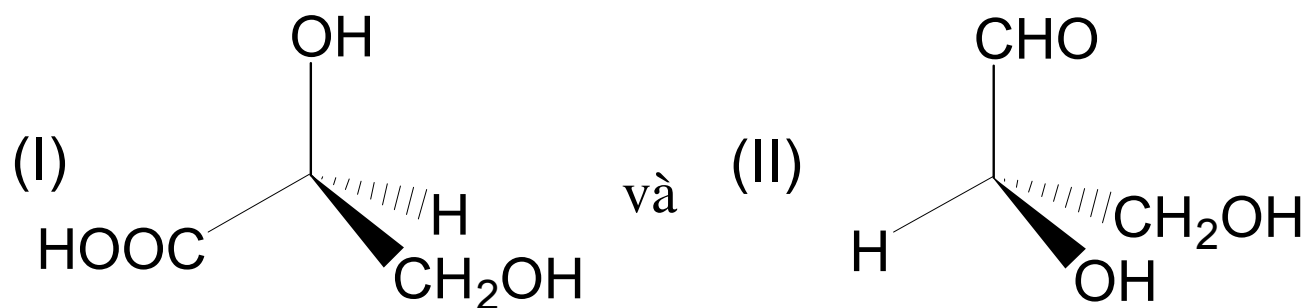
❑ **Quy tắc 2:** nếu xoay 90° hay 180° (ngoài mặt phẳng) sẽ *làm thay đổi* cấu hình chất đó

❑ **Quy tắc 3:** nếu đổi vị trí các nhóm thế số chẵn lần, *không* làm thay đổi cấu hình của chất đó

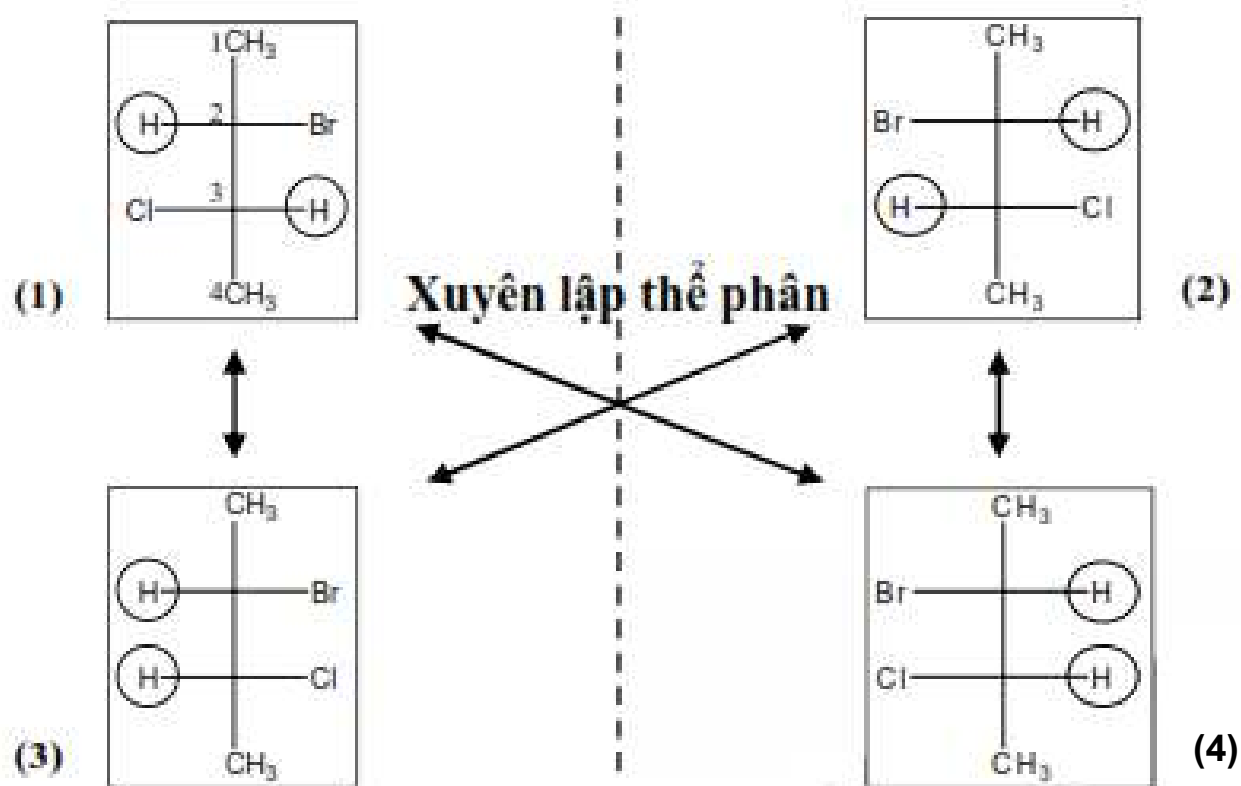
❑ **Quy tắc 4:** nếu đổi vị trí các nhóm thế số lẻ lần, sẽ *làm thay đổi* cấu hình của chất đó

VD: Cho 2 chất sau đây, chọn phát biểu đúng:

- A. (I) có cấu hình D, (II) có cấu hình L
- B. (I) và (II) đều có cấu hình D
- C. (I) và (II) đều có cấu hình L
- D. (I) có cấu hình L, (II) có cấu hình D

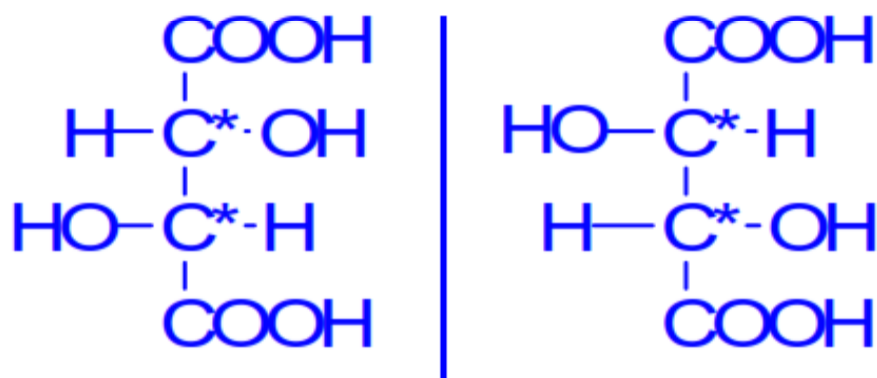
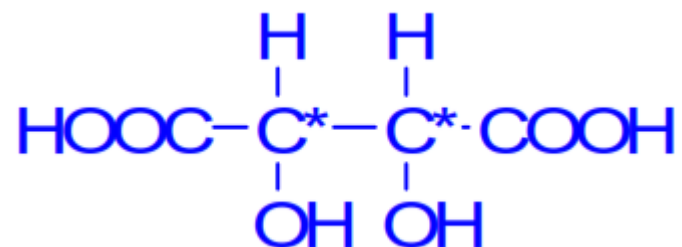


- Khi phân tử có 2 C* khác nhau → có 4 đp quang học

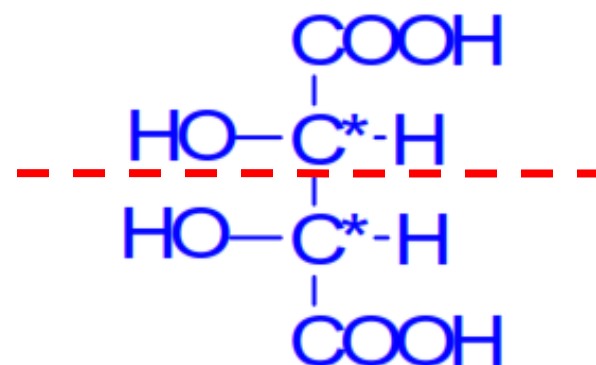


- đp (1), (2): cấu hình treo
- đp (3), (4): cấu hình eritro

➤ Khi phân tử có 2 C* giống nhau → có 3 đp quang học

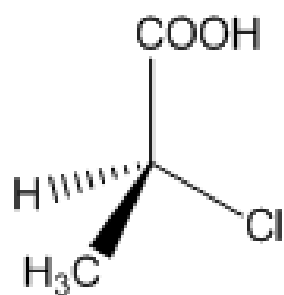


Hai đồng phân treo

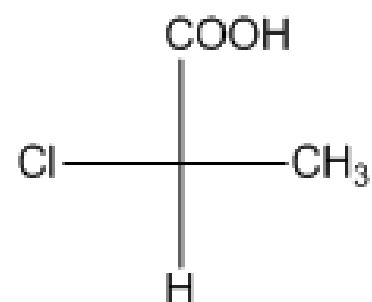


Đồng phân meso

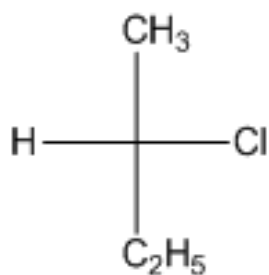
Cho cặp chất sau, chúng là đối hình hay cùng 1 chất



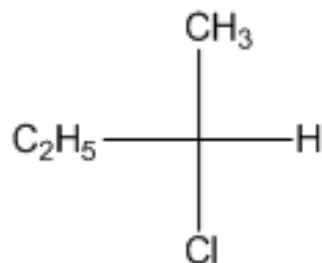
và



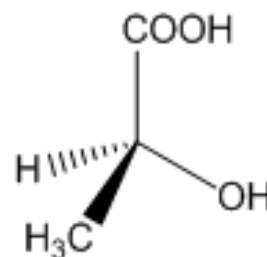
Cho cặp chất sau, hãy chọn phát biểu đúng:



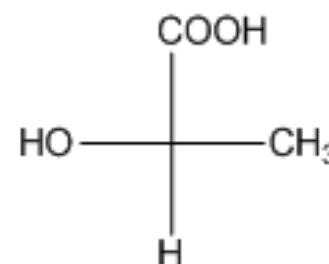
(I)



(II)



(III)



(IV)

- A.** I và II là một chất, III và IV là hai chất đối hình
- B.** I và II là một chất, III và IV là một chất
- C.** I và II là đối hình, III và IV là một chất
- D.** I và II là đối hình, III và IV là hai chất đối hình

CÁC HIỆU ỨNG ĐIỆN TỬ

Sự tác động của các nguyên tử (nhóm nguyên tử) trong phân tử làm thay đổi sự phân cực của phân tử đó được gọi là hiệu ứng điện tử

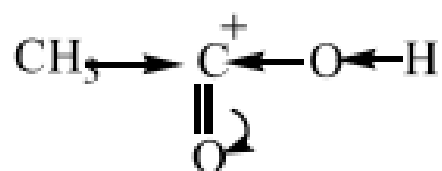
- Hiệu ứng cảm ứng
- Hiệu ứng liên hợp
- Hiệu ứng siêu liên hợp

Hiệu ứng cảm ứng



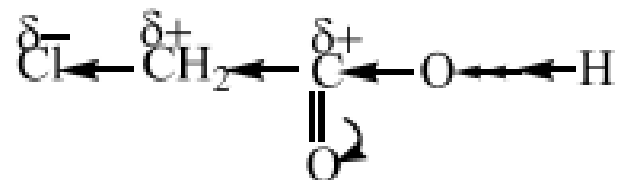
axit axetic

$$K_a = 1,8 \cdot 10^{-5}$$



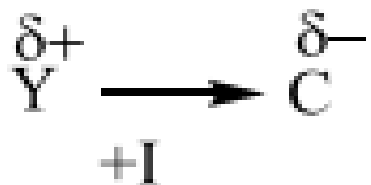
axit cloaxetic

$$K_a = 155 \cdot 10^{-5}$$

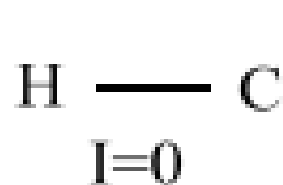


Sự phân cực phân tử do sự dịch chuyển mật độ electron trên liên kết đơn (lk σ) được gọi là hiệu ứng cảm ứng. Kí hiệu là I.

Phân loại

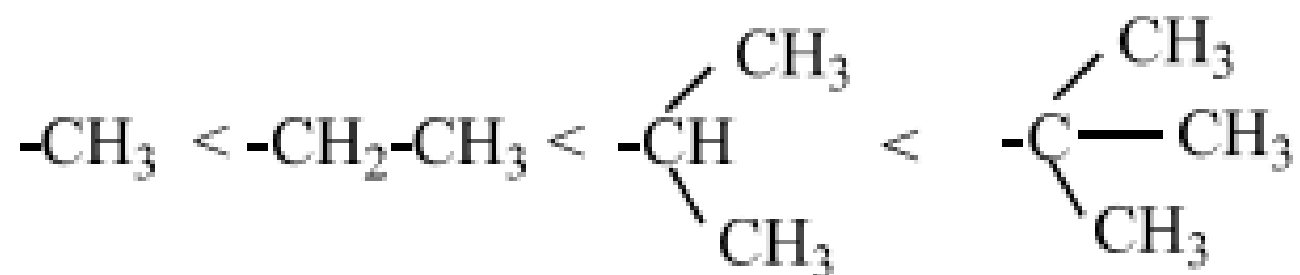


Hiệu ứng cảm ứng dương

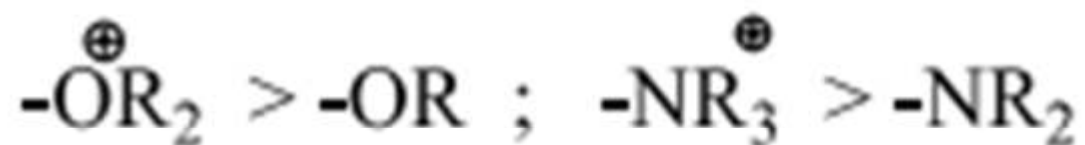
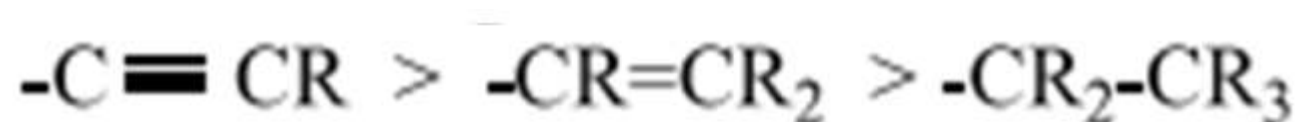


Hiệu ứng cảm ứng âm

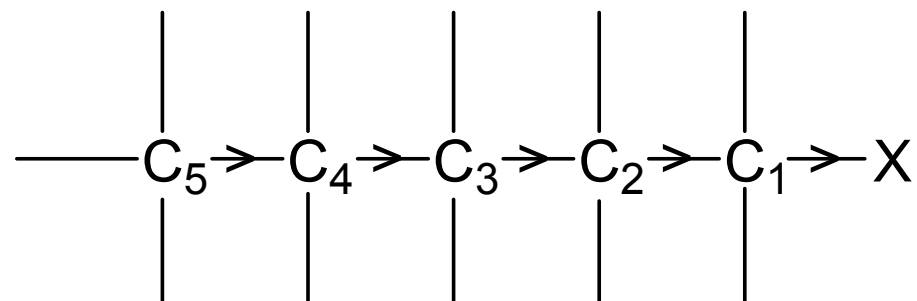
Hiệu ứng cảm ứng dương



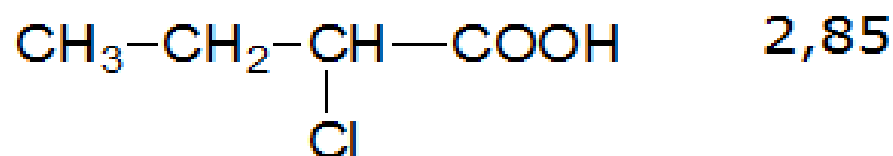
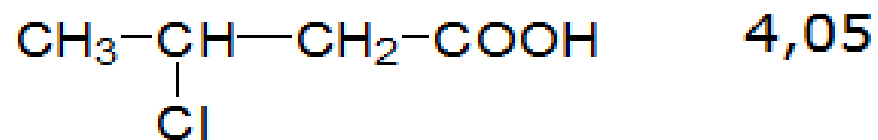
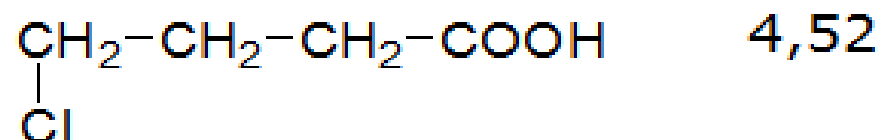
Hiệu ứng cảm ứng âm



➤ **Đặc điểm:**



Cường độ càng yếu dần khi càng xa X, trên thực tế hiệu ứng cảm sẽ bằng 0 khi lan truyền qua 3 hoặc 4 nối



➤ Ứng dụng:

❑ So sánh tính axit, baz

So sánh tính axit của các chất sau:

(I) HCOOH , (II) CH_3COOH , (III) $(\text{CH}_3)_2\text{CHCOOH}$ (IV) $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-COOH}$

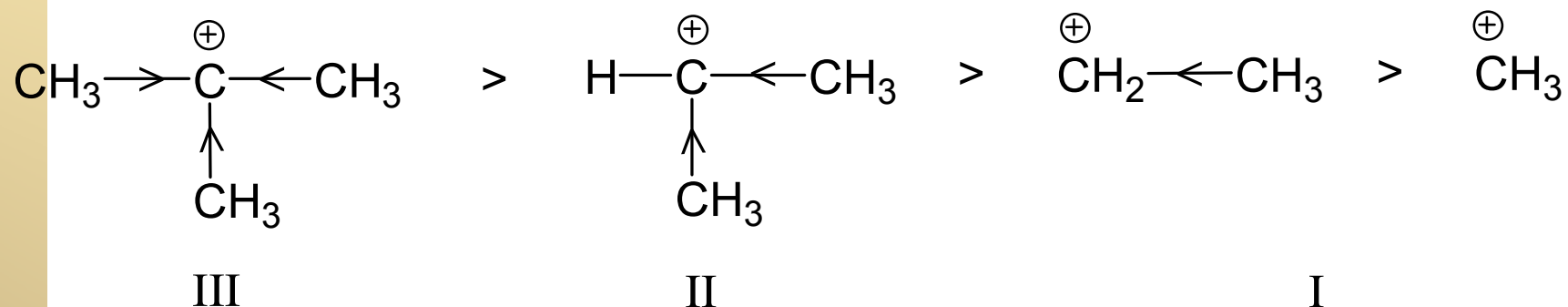
A. $\text{I} > \text{II} > \text{III} > \text{IV}$

B. $\text{II} > \text{I} > \text{III} > \text{IV}$

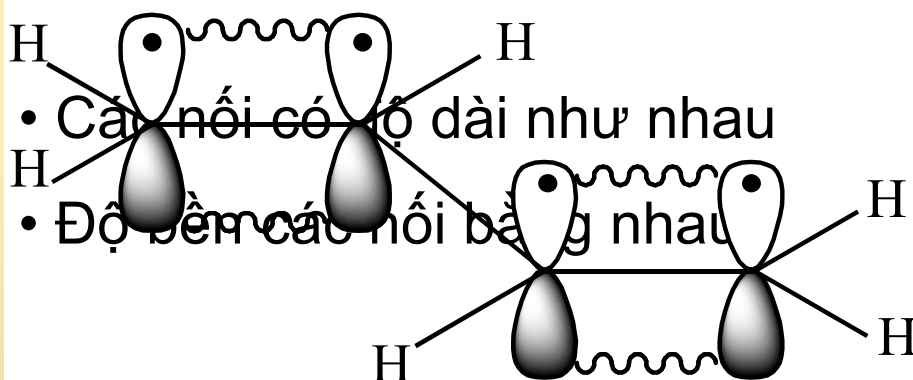
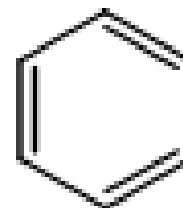
C. $\text{I} > \text{II} > \text{IV} > \text{III}$

D. $\text{I} > \text{III} > \text{II} > \text{IV}$

❑ Giải thích độ bền ion:



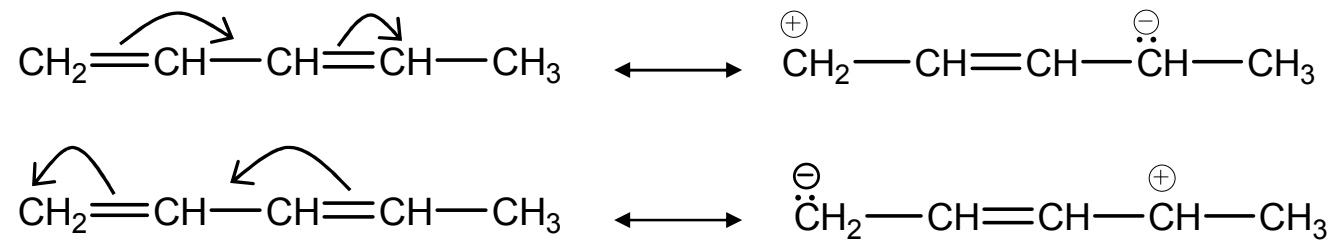
Hiệu ứng liên hợp (cộng hưởng)



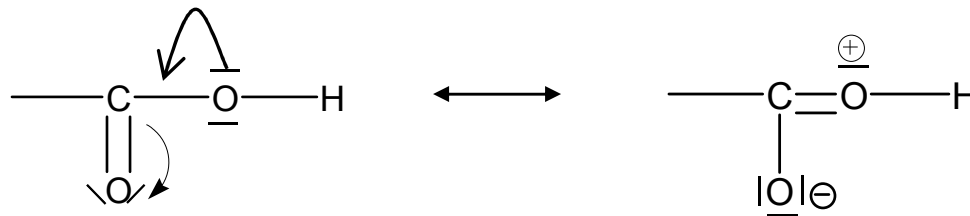
Hiệu ứng liên hợp chỉ đặc trưng cho các hệ liên hợp, trong đó có sự dịch chuyển của các electron π trong khắp phân tử. Kí hiệu là C

Các hệ liên hợp

π - σ - π : (nối π tiếp cách với nhau bởi nối σ)



p - σ - π :



Phân loại



Hiệu ứng liên hợp âm -C



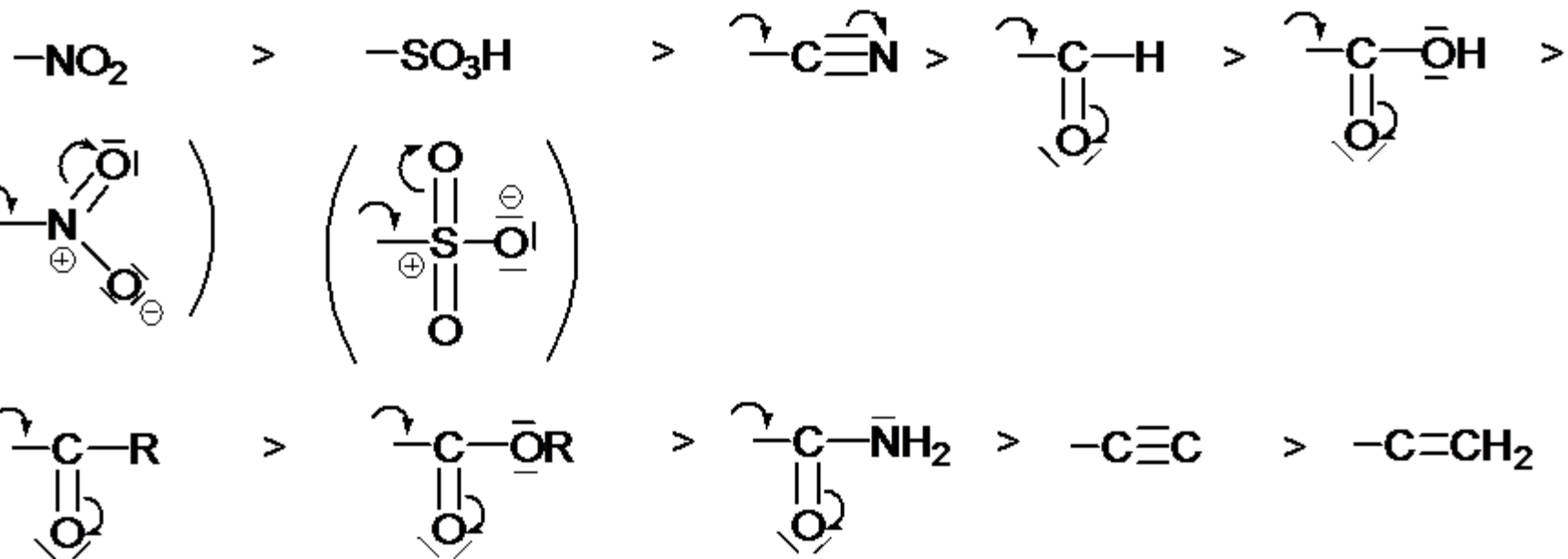
Hiệu ứng liên hợp dương +C

Đặc điểm

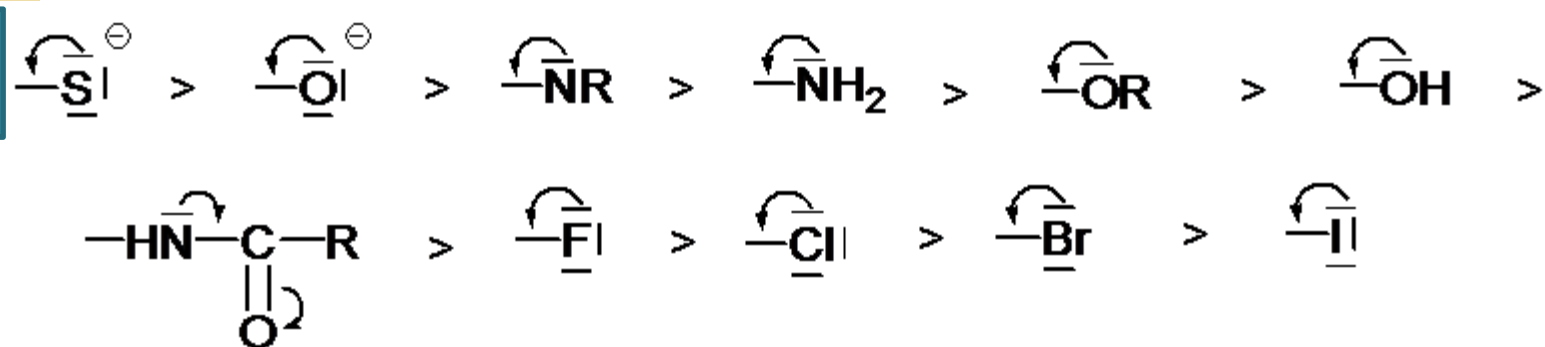
- (khác với hiệu ứng cảm), độ mạnh không giảm theo nối, kéo dài toàn bộ hệ liên hợp



- C



+ C



➤ Ứng dụng:

- ❑ So sánh tính axit, baz
- ❑ Giải thích độ bền ion:
- ❑ Ảnh hưởng đến độ dài, độ bền liên kết:
- ❑ Ảnh hưởng đến hoạt tính (khả năng phản ứng) của các chất:
- ❑ Ảnh hưởng đến định hướng của phản ứng:

So sánh tính axit của các hợp chất sau:

p-nitrophenol (1), *p*-clophenol (2), phenol (3), *p*-crezol (4)

A. $4 < 3 < 2 < 1$

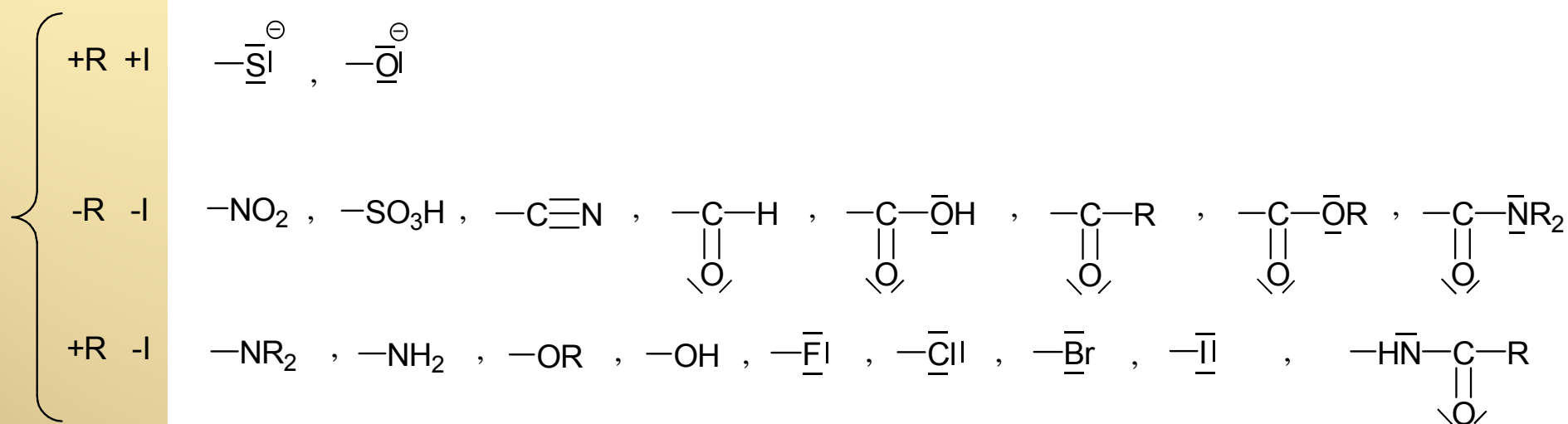
B. $4 < 3 < 1 < 2$

C. $3 < 2 < 4 < 1$

D. $1 < 2 < 3 < 4$

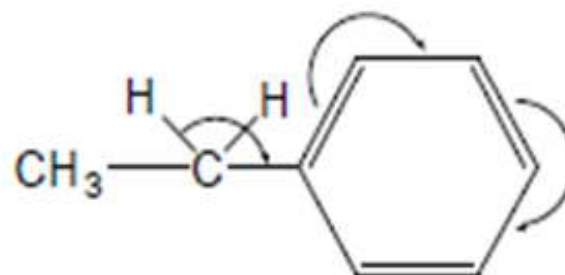
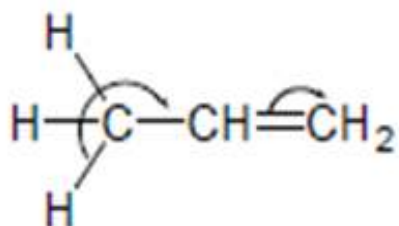
Nhận xét:

- Có những nhóm chỉ có một hiệu ứng.
- Đa số các nhóm có hai hiệu ứng cùng chiều, nhưng một số nhóm cho hai hiệu ứng ngược chiều.



Hiệu ứng siêu liên hợp

Hiệu ứng siêu liên hợp là hiệu ứng gây nên bởi hệ thống các liên kết C-H ở vị trí α so với liên kết đôi, liên kết ba hay vòng benzen.



Hiệu ứng siêu liên hợp của các gốc ankyr luôn luôn là hiệu ứng đẩy electron. Cường độ của nó tỉ lệ thuận với số lượng các liên kết C-H ở vị trí α so với liên kết đôi, liên kết ba hay vòng benzen:

