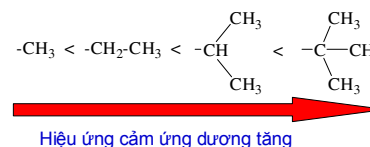
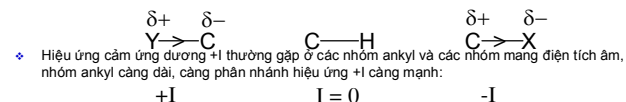


## HIỆU ỨNG HÓA HỌC ( Hiệu ứng điện tử )

Sự tác động tương hỗ giữa các nguyên tử trong phân tử làm thay đổi sự phân cực của phân tử được gọi là hiệu ứng hóa học hay hiệu ứng điện tử. Tùy theo bản chất của sự tác động mà người ta chia các hiệu ứng hóa học thành 3 loại:

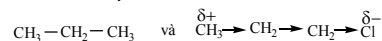
- ❖ Hiệu ứng cảm ứng
- ❖ Hiệu ứng liên hợp
- ❖ Hiệu ứng siêu liên hợp

Những nguyên tử, nhóm nguyên tử có khả năng đẩy electron mạnh hơn hydro được coi là có hiệu ứng cảm ứng dương +I:



### I- HIỆU ỨNG CẢM ỨNG:

**1- Định nghĩa:** Xét 2 phân tử:



Vậy: sự phân cực phân tử do sự dịch chuyển mật độ các electron  $\sigma$  mà nguyên nhân là do sự khác nhau về độ âm điện được gọi là ảnh hưởng cảm ứng hay hiệu ứng cảm ứng. Kí hiệu I ( *Inductive effect* )

**2- Phân loại:** Qui ước nguyên tử hydro trong liên kết C-H

Có hiệu ứng cảm ứng I = 0. Những nguyên tử hay nhóm nguyên tử có khả năng hút electron mạnh hơn hydro được coi là có hiệu ứng cảm ứng âm -I

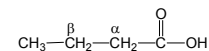
❖ Hiệu ứng cảm ứng âm -I thường gặp ở các nhóm không no, các nhóm mang điện tích dương, các nguyên tử có độ âm điện lớn. Nguyên tử, nhóm nguyên tử có độ âm điện càng lớn hiệu ứng -I càng mạnh:

➤ -F > -Cl > -Br > -I

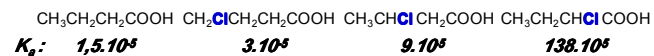
➤ -F > -OR > -NR<sub>2</sub> > -CR<sub>3</sub>

**3- Đặc tính:** Hiệu ứng cảm ứng lan truyền dọc theo trục liên kết đơn  $\sigma$  và giảm nhanh khi kéo dài mạch carbon.

**Ví dụ:**



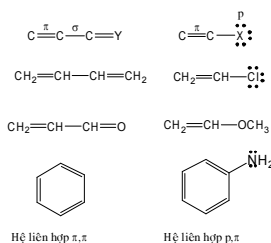
Khi thế 1H <sub>$\alpha$</sub>  bằng clo, tính axit tăng 92 lần, thế 1H <sub>$\beta$</sub>  tăng 6 lần, còn khi thế H <sub>$\gamma$</sub>  tính axit chỉ tăng 2 lần so với axit không có nhóm thế clo:



## II- HIỆU ỨNG LIÊN HỢP

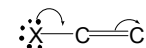
### 1- Định nghĩa:

- ❖ Hệ liên hợp là hệ thống bao gồm các liên kết đôi luân phiên với các liên kết đơn ( *liên hợp  $\pi, \pi$*  ), hoặc hệ thống có nguyên tử còn cặp electron tự do nối với một liên kết đôi ( *liên hợp  $p, \pi$*  ):



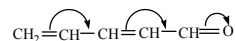
### 2- Phân loại: 2 loại

- ❖ *Hiệu ứng liên hợp dương +C*: Gây nên bởi các nhóm có khả năng đẩy electron. Hiệu ứng +C thường gặp ở các hệ liên hợp  $p, \pi$  có dạng chung:



Trong đó X = -OH, -OR, -NH<sub>2</sub>, -NHR, -NR<sub>2</sub>, các halogen, ...  
Chiều dịch chuyển electron là từ nhóm thế X về phía liên kết  $\pi$

Xét phân tử:



Do đặc tính phân cực sẵn có của nhóm CHO, mật độ electron bị dịch chuyển về phía nguyên tử oxi và kết quả làm cho phân tử bị phân cực.

Vậy: *Ảnh hưởng của các nguyên tử hay nhóm nguyên tử trong hệ liên hợp gây ra sự phân cực phân tử do sự dịch chuyển mật độ các electron  $\pi$  được gọi là ảnh hưởng liên hợp hay hiệu ứng liên hợp. Kí hiệu C ( Conjugate effect )*

- ❖ *Hiệu ứng liên hợp âm -C*: Gây nên bởi các nhóm có khả năng hút electron. Hiệu ứng -C thường gặp ở các hệ liên hợp  $\pi, \pi$  có chứa các nhóm không no có dạng:

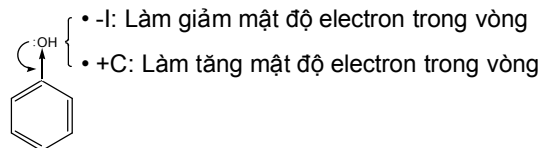


Trong đó C=Y là: -NO<sub>2</sub>, -COOH, -COOR, -CHO, CO, ...  
Chiều dịch chuyển electron từ phía liên kết đôi tới nhóm C=Y

**3- Đặc tính:** Hiệu ứng liên hợp lan truyền trong các hệ liên hợp và độ mạnh hầu như không thay đổi khi kéo dài mạch carbon.

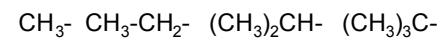
- **Chú ý:** Một số nhóm có thể gây ra 2 loại hiệu ứng có tác dụng ngược chiều ( +C, -I ), trong trường hợp này hiệu ứng liên hợp sẽ thắng thế.

### Ví dụ:



Do hiệu ứng liên hợp ưu thế hơn nên mật độ electron trong vòng benzen của phenol vẫn cao hơn của benzen

Như vậy các nhóm ankyl bản thân gây 2 loại hiệu ứng có tác dụng cùng chiều ( đều là đẩy electron ), trong trường hợp này hiệu ứng siêu liên hợp sẽ thắng thế:



Hiệu ứng cảm ứng dương tăng

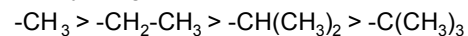
Hiệu ứng siêu liên hợp giảm

### III- 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  $\alpha$  so với liên kết đôi, liên kết ba hay vòng benzen.



Hiệu ứng siêu liên hợp của các gốc ankyl 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  $\alpha$  so với liên kết đôi, liên kết ba hay vòng benzen:



■ THƯ GIẢN 1

■ THƯ GIẢN 2