

CHƯƠNG 3. ĐẠI CƯƠNG VỀ HÓA HỌC HỮU CƠ

BÀI 10. HỢP CHẤT HỮU CƠ VÀ HÓA HỌC HỮU CƠ

1.1. Lí thuyết cần nắm

1.1.1. Hợp chất hữu cơ – Hóa học hữu cơ

a) Khái niệm

- Hợp chất hữu cơ là hợp chất của carbon (trừ một số các hợp chất như carbon monoxide, carbon dioxide, muối carbonate, cyanide, carbide,...).
- Hoá học hữu cơ là ngành hoá học chuyên nghiên cứu các hợp chất hữu cơ.

b) Đặc điểm chung của các hợp chất hữu cơ

- *Thành phần nguyên tố*: Nhất thiết phải chứa nguyên tố carbon, thường có H, O, N,...
- *Đặc điểm liên kết*: Liên kết hóa học trong các hợp chất hữu cơ thường là liên kết cộng hóa trị.
- *Tính chất vật lí*: Các hợp chất hữu cơ thường có nhiệt độ nóng chảy và nhiệt độ sôi thấp, không tan hoặc ít tan trong nước, tan nhiều trong dung môi hữu cơ.
- *Tính chất hóa học*: Đa số các hợp chất hữu cơ dễ cháy, thường kém bền với nhiệt nên dễ bị phân hủy bởi nhiệt. Phản ứng của các chất hữu cơ thường xảy ra chậm, không hoàn toàn và không theo một hướng nhất định nên tạo thành hỗn hợp các sản phẩm.

1.1.2. Phân loại hợp chất hữu cơ

Hợp chất hữu cơ							
Hydrocarbon (hợp chất được tạo thành chỉ từ hai nguyên tố carbon và hydrogen)				Đẫn xuất hydrocarbon (hợp chất mà trong phân tử ngoài nguyên tố C còn có các nguyên tố khác: O, N, S,...)			
Alkane	Alkene	Alkyne	Arene	DX halogen	Alcohol	Carboxylic acid	...
CH ₄	CH ₂ =CH ₂	CH≡CH	C ₆ H ₆	CH ₃ Cl	C ₂ H ₅ OH	CH ₃ COOH	...

1.1.3. Nhóm chức và phổ hồng ngoại (IR)

a) Khái niệm

Nhóm chức là nguyên tử hoặc nhóm nguyên tử trong phân tử gây ra những tính chất hoá học đặc trưng của hợp chất hữu cơ.

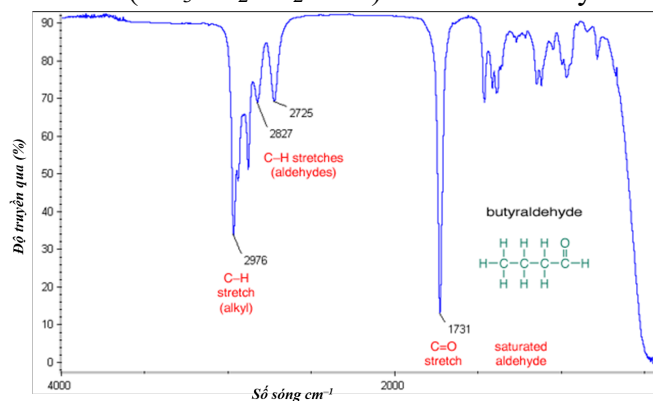
Hợp chất	Ví dụ	Nhóm chức
Alcohol, phenol	CH ₃ OH, C ₂ H ₅ OH; C ₆ H ₅ OH,...	–OH
Ether	CH ₃ –O–CH ₃ , CH ₃ –O–CH ₂ –CH ₃ ,...	–O–
Amine bậc I	CH ₃ –NH ₂ , CH ₃ –CH ₂ –NH ₂ ,...	–NH ₂
Amine bậc II	CH ₃ –NH–CH ₃	–NH–
Amine bậc III	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 - \text{N} - \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$	$\begin{array}{c} -\text{N}- \\ \end{array}$
Aldehyde	H–CHO, CH ₃ –CHO,...	–CHO
Ketone	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 - \text{C} - \text{CH}_3 \\ \\ \text{O} \end{array}$	$\begin{array}{c} -\text{C}- \\ \\ \text{O} \end{array}$
Carboxylic acid	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 - \text{C} - \text{O} - \text{H} \\ \\ \text{O} \end{array}$	$\begin{array}{c} -\text{C} - \text{O} - \text{H} \\ \\ \text{O} \end{array}$
Ester	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 - \text{C} - \text{O} - \text{CH}_3 \\ \\ \text{O} \end{array}$	$\begin{array}{c} -\text{C} - \text{O}- \\ \\ \text{O} \end{array}$

b) *Xác định nhóm chức bằng phổ hồng ngoại (IR)*

Phương pháp phổ hồng ngoại (IR) là phương pháp vật lý rất quan trọng và phổ biến để nghiên cứu cấu tạo phân tử hợp chất hữu cơ.

Mỗi liên kết trong phân tử hợp chất hữu cơ hấp thụ một vài bức xạ hồng ngoại đặc trưng cho liên kết đó.

Ví dụ: Trên phổ IR của butanal ($\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CHO}$) ở hình dưới đây:



Tín hiệu đặc trưng của nhóm $-\text{CHO}$:

- + Tín hiệu ở 1731 cm^{-1} là tín hiệu đặc trưng của liên kết $\text{C}=\text{O}$;
- + Tín hiệu ở 2827 cm^{-1} và 2725 cm^{-1} là các tín hiệu đặc trưng của liên kết $\text{C}-\text{H}$ trong nhóm $-\text{CHO}$.

BÀI 11. PHƯƠNG PHÁP TÁCH BIỆT VÀ TINH CHẾ HỢP CHẤT HỮU CƠ

2.1. Lí thuyết cần nắm

Phương pháp	Nguyên tắc	Cách tiến hành	Ứng dụng
Chưng cất	Chưng cất là phương pháp tách chất dựa vào sự khác nhau về nhiệt độ sôi của các chất trong hỗn hợp ở một áp suất nhất định.	Chất lỏng cần tách được chuyển sang pha hơi, rồi làm lạnh cho hơi ngưng tụ, thu lấy chất lỏng ở khoảng nhiệt độ thích hợp.	Để tách các chất lỏng ra khỏi hỗn hợp các chất có nhiệt độ sôi khác nhau, nhằm thu được chất lỏng tinh khiết hơn.
Chiết	Chiết là phương pháp tách biệt và tinh chế hỗn hợp các chất dựa vào sự hòa tan khác nhau của chúng trong hai môi trường không trộn lẫn vào nhau.	Chiết lỏng – lỏng: thường dùng để tách các chất hữu cơ hòa tan trong nước.	Chiết lỏng – lỏng: Tách chất hữu cơ ở dạng nhũ tương hoặc huyền phù trong nước.
		Chiết lỏng – rắn: dùng dung môi lỏng hòa tan chất hữu cơ để tách chúng ra khỏi hỗn hợp rắn.	Chiết lỏng – rắn: ngâm rượu thuốc, phân tích thổ nhưỡng, phân tích dư lượng thuốc bảo vệ thực vật trong nông sản.
Kết tinh	Kết tinh là phương pháp tách biệt và tinh chế hỗn hợp các chất rắn dựa vào độ tan khác nhau và sự thay đổi độ tan của chúng theo nhiệt độ.	- Hòa tan chất rắn lẫn tạp chất vào dung môi để tạo dung dịch bão hòa ở nhiệt độ cao. - Lọc nóng loại bỏ chất không tan. - Để nguội và làm lạnh dung dịch thu được, chất cần tinh chế sẽ kết tinh. - Lọc để thu được chất rắn.	Dùng để tách và tinh chế chất rắn.
Sắc kí cột	- Là phương pháp tách biệt và tinh chế hỗn hợp các chất dựa vào sự phân bố khác nhau của chúng giữa hai pha động và pha tĩnh. + Pha động là dung môi và dung dịch mẫu chất cần tách di chuyển qua cột. + Pha tĩnh là một chất rắn có diện tích bề mặt lớn, có khả năng hấp phụ khác nhau các chất trong hỗn hợp cần tách.	- Sử dụng các cột thủy tinh có chứa các chất hấp phụ dạng bột (pha tĩnh). - Cho hỗn hợp cần tách lên cột sắc kí. - Cho dung môi thích hợp chảy liên tục qua cột sắc kí. - Loại bỏ dung môi để thu được chất cần tách.	Dùng để tách các chất hữu cơ có hàm lượng nhỏ và khó tách ra khỏi nhau.

BÀI 12. CÔNG THỨC PHÂN TỬ HỢP CHẤT HỮU CƠ

3.1. Lí thuyết cần nắm

3.1.1. Công thức phân tử

a) Công thức phân tử

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: C_3H_8 ; khí butane: C_4H_{10} ;...

b) Công thức đơn giản nhất (công thức nguyên, công thức thực nghiệm)

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: $C_2H_4O_2 \longrightarrow$ Công thức đơn giản nhất là CH_2O .

3.1.2. Lập công thức phân tử hợp chất hữu cơ

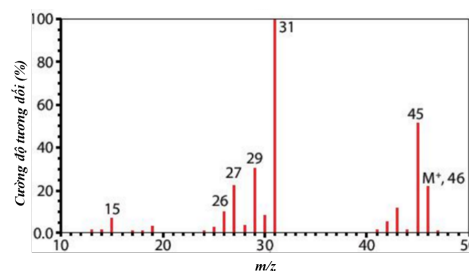
a) Xác định phân tử khối bằng phương pháp phổ khối lượng (MS)

Tổng quát: $M \xrightarrow[10-100\text{ eV}]{+E} M^+ + e$

Trong đó: + Mảnh ion $[M^+]$ được gọi là mảnh ion phân tử.

+ Hợp chất đơn giản: mảnh có giá trị m/z lớn nhất ứng với mảnh ion phân tử $[M^+]$ và có giá trị bằng phân tử khối của chất nghiên cứu.

Ví dụ: Phổ MS (hình bên) của ethanol (C_2H_6O) có peak ion phân tử $[C_2H_6O^+]$ có giá trị $m/z = 46$.



b) Lập công thức phân tử hợp chất hữu cơ

+ Bước 1: Đặt công thức phân tử: $C_xH_yO_z$.

+ Bước 2: Thiết lập công thức đơn giản nhất (lập tỉ lệ $x : y : z$).

$$x : y : z = \frac{\%m_C}{12} : \frac{\%m_H}{1} : \frac{\%m_O}{16} = p : q : r$$

$\longrightarrow$ Công thức đơn giản nhất: $C_pH_qO_r$

+ Bước 3: Mối quan hệ giữa công thức phân tử và công thức đơn giản nhất

$$\longrightarrow C_xH_yO_z = (C_pH_qO_r)_n$$

Khi biết phân tử khối, xác định n , từ đó suy ra công thức phân tử.

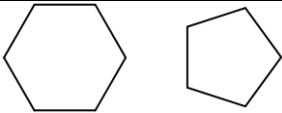
BÀI 13. CÔNG THỨC CẤU TẠO HỢP CHẤT HỮU CƠ

4.1. Lí thuyết cần nắm

4.1.1. Thuyết cấu tạo hóa học

a) Trong phân tử hợp chất hữu cơ, các nguyên tử liên kết với nhau theo đúng hóa trị và theo một thứ tự nhất định. Thứ tự liên kết đó gọi là cấu tạo hóa học. Sự thay đổi thứ tự liên kết đó sẽ tạo ra chất khác.

b) Trong hợp chất hữu cơ, carbon có hóa trị IV. Các nguyên tử carbon không những liên kết với nguyên tử của nguyên tố khác mà còn có thể liên kết trực tiếp với nhau tạo thành mạch carbon gồm: mạch vòng, mạch hở phân nhánh, mạch hở không phân nhánh.

$CH_3 - CH_2 - CH_2 - CH_3$	$CH_3 - CH(CH_3) - CH_2 - CH_3$ $CH_3 - C(CH_3)_2 - CH_3$	
-----------------------------	--	---

Mạch hở không phân nhánh	Mạch hở phân nhánh	Mạch vòng
--------------------------	--------------------	-----------

c) Tính chất của chất phụ thuộc vào thành phần phân tử và cấu tạo hóa học. Các nguyên tử trong phân tử có ảnh hưởng qua lại lẫn nhau.

4.1.2. Công thức cấu tạo

a) Khái niệm

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

b) Cách biểu diễn cấu tạo phân tử hợp chất hữu cơ

CTCT đầy đủ	CTCT thu gọn	Công thức khung phân tử
CTCT đầy đủ là CTCT biểu diễn tất cả các nguyên tử và liên kết trong phân tử.	Viết gộp carbon và các nguyên tử liên kết trực tiếp với nguyên tử carbon đó thành một nhóm nguyên tử.	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.
$ \begin{array}{cccc} & H & H & H & H \\ & & & & \\ H & -C- & C- & C- & C-H \\ & & & & \\ & H & H & H & H \end{array} $	$CH_3-CH_2-CH_2-CH_3$	
$ \begin{array}{ccccc} & H & & H & \\ & & & & \\ H & -C- & C- & C- & H \\ & & & & \\ & H & C & H & \\ & & & & \\ & & H & & \end{array} $	$CH_3-CH(CH_3)-CH_3$	
$ \begin{array}{cccc} & H & H & H & H \\ & & & & \\ H & -C- & C= & C- & C-H \\ & & & & \\ & H & & H & \end{array} $	$CH_3-CH=CH-CH_3$	
$ \begin{array}{cccc} & H & H & H \\ & & & \\ H & -C- & C- & C- & O-H \\ & & & \\ & H & H & H \end{array} $	$CH_3-CH_2-CH_2-OH$	

4.1.3. Đồng phân

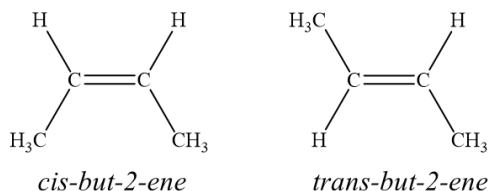
a) Khái niệm

Những hợp chất hữu cơ khác nhau nhưng có cùng công thức phân tử được gọi là các chất đồng phân của nhau.

b) Phân loại

Đồng phân cấu tạo		
Đồng phân mạch carbon	$CH_3-CH_2-CH_2-CH_2-CH_3$	$CH_3-CH(CH_3)-CH_2-CH_3$
Đồng phân vị trí nhóm chức	$CH_3-CH_2-CH_2-CH_2-OH$	$CH_3-CH_2-CH(OH)-CH_3$
	$CH_2=CH-CH_2-CH_2-CH_3$	$CH_3-CH=CH-CH_2-CH_3$
Đồng phân nhóm chức	$CH_3-CH_2-CH_2-OH$	$CH_3-O-CH_2-CH_3$

- Đồng phân lập thể: đồng phân hình học và đồng phân quang học.
- Đồng phân hình học xuất hiện khi: $abC=Ccd$ (Với $a \neq b$ và $c \neq d$).
- Ví dụ:



4.1.4. Đồng đẳng

- Khái niệm: Các chất hữu cơ có tính chất hóa học tương tự nhau và thành phần phân tử hơn kém nhau một hay nhiều nhóm CH_2 được gọi là các chất đồng đẳng của nhau, chúng hợp thành một dãy đồng đẳng.

- Ví dụ:

Dãy đồng đẳng	Công thức chung	Một số hợp chất tiêu biểu
Alkane	$\text{C}_n\text{H}_{2n+2}$ ($n \geq 1$)	CH_4 , C_2H_6 , C_3H_8 ,...
Alcohol no, đơn chức, mạch hở	$\text{C}_n\text{H}_{2n+2}\text{O}$ ($n \geq 1$)	CH_3OH , $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$, $\text{C}_3\text{H}_7\text{OH}$,...
Aldehyde no, đơn chức, mạch hở	$\text{C}_n\text{H}_{2n}\text{O}$ ($n \geq 1$)	HCHO , CH_3CHO , $\text{C}_2\text{H}_5\text{CHO}$,...

VI. PHẦN PHỤ LỤC

Tính hiệu phổ hồng ngoại của một số nhóm chức cơ bản

Hợp chất	Liên kết	Số sóng (cm^{-1})
Alcohol	O–H	3 600 – 3 300
Aldehyde	C=O	1 740 – 1 720
	C–H	2 900 – 2 700
Carboxylic acid	C=O	1 725 – 1 700
	O–H	3 300 – 2 500
Ester	C=O	1 750 – 1 735
	C–O	1 300 – 1 000
Ketone	C=O	1 725 – 1 700
Amine	N–H	3 500 – 3 300