



CẤU TRÚC PHÂN TỬ HỢP CHẤT HỮU CƠ

- Hiểu những luận điểm cơ bản của thuyết cấu tạo hoá học.
- Biết viết công thức cấu tạo của các hợp chất hữu cơ.
- Biết khái niệm về đồng phân cấu tạo, đồng phân lập thể.

I - THUYẾT CẤU TẠO HOÁ HỌC

1. Nội dung của thuyết cấu tạo hoá học

Ngay từ năm 1861, Bút-lê-rốp, đã đưa ra khái niệm cấu tạo hoá học và thuyết cấu tạo hoá học gồm những luận điểm chính sau :

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

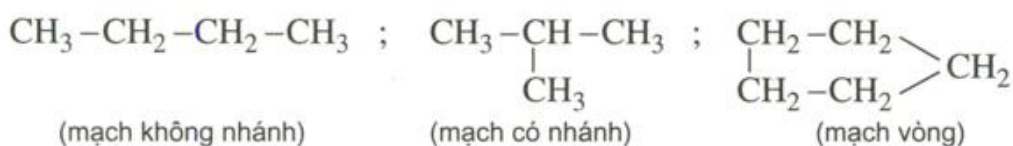
Thí dụ : Công thức phân tử C_2H_6O có hai công thức cấu tạo (thứ tự liên kết khác nhau) ứng với 2 hợp chất sau :

$H_3C-O-CH_3$: dimetyl ete, chất khí, không tác dụng với Na.

H_3C-CH_2-O-H : ancol etylic, chất lỏng, tác dụng với Na giải phóng hidro.

2. Trong phân tử hợp chất hữu cơ, cacbon có hoá trị 4. Nguyên tử cacbon không những có thể liên kết với nguyên tử của các nguyên tố khác mà còn liên kết với nhau thành mạch cacbon.

Thí dụ :



3. Tính chất của các chất phụ thuộc vào thành phần phân tử (bản chất, số lượng các nguyên tử) và cấu tạo hoá học (thứ tự liên kết các nguyên tử).

Thí dụ :

– Phụ thuộc thành phần phân tử : CH_4 là chất khí dễ cháy, CCl_4 là chất lỏng không cháy ; CH_3Cl là chất khí không có tác dụng gây mê, còn $CHCl_3$ là chất lỏng có tác dụng gây mê.

– Phụ thuộc cấu tạo hoá học : $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ và CH_3OCH_3 khác nhau cả về tính chất vật lí và tính chất hoá học.

2. Đồng đẳng, đồng phân

a) Đồng đẳng

Các hidrocarbon trong dãy : $\text{CH}_4, \text{C}_2\text{H}_6, \text{C}_3\text{H}_8, \text{C}_4\text{H}_{10}, \text{C}_5\text{H}_{12}, \dots, \text{C}_n\text{H}_{2n+2}$, chất sau hơn chất trước một nhóm CH_2 nhưng đều có tính chất hoá học tương tự nhau.

Các ancol trong dãy : $\text{CH}_3\text{OH}, \text{C}_2\text{H}_5\text{OH}, \text{C}_3\text{H}_7\text{OH}, \text{C}_4\text{H}_9\text{OH}, \dots, \text{C}_n\text{H}_{2n+1}\text{OH}$ cũng có thành phần hơn kém nhau một hay nhiều nhóm CH_2 nhưng có tính chất hoá học tương tự nhau.

- Khái niệm : Những hợp chất có thành phần phân tử hơn kém nhau một hay nhiều nhóm CH_2 nhưng có tính chất hoá học tương tự nhau là những chất đồng đẳng, chúng hợp thành dãy đồng đẳng.

- Giải thích : Mặc dù các chất trong cùng dãy đồng đẳng có công thức phân tử khác nhau một hay nhiều nhóm CH_2 nhưng do chúng có cấu tạo hoá học tương tự nhau nên có tính chất hoá học tương tự nhau.

b) Đồng phân

Etanol và dimetyl ete là hai chất khác nhau (có tính chất khác nhau) nhưng lại có cùng công thức phân tử là $\text{C}_2\text{H}_6\text{O}$.

Metyl axetat ($\text{CH}_3\text{COOCH}_3$), etyl fomat (HCOOC_2H_5) và axit propionic ($\text{CH}_3\text{CH}_2\text{COOH}$) là ba chất khác nhau nhưng có cùng công thức phân tử là $\text{C}_3\text{H}_6\text{O}_2$.

- Khái niệm : Những hợp chất khác nhau nhưng có cùng công thức phân tử là những chất đồng phân.

- Giải thích : Những chất đồng phân tuy có cùng công thức phân tử nhưng có cấu tạo hoá học khác nhau, chẳng hạn etanol có cấu tạo $\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_2-\text{O}-\text{H}$, còn dimetyl ete có cấu tạo $\text{H}_3\text{C}-\text{O}-\text{CH}_3$, vì vậy chúng là những chất khác nhau, có tính chất khác nhau.

II - LIÊN KẾT TRONG PHÂN TỬ HỢP CHẤT HỮU CƠ

1. Các loại liên kết trong phân tử hợp chất hữu cơ

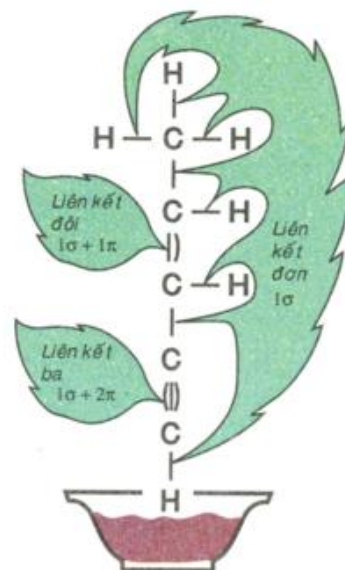
Theo Li-uyt (Lewis), các nguyên tử có xu hướng dùng chung electron để đạt được 8 electron (đối với H chỉ cần đạt 2 electron) ở lớp ngoài cùng (quy tắc bát tử). Công thức có viết đầy đủ các electron hoá trị được gọi là công thức Li-uyt.

Thí dụ :

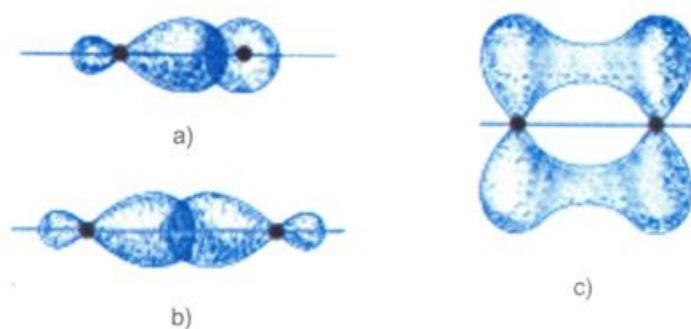


Liên kết trong phân tử các hợp chất hữu cơ chủ yếu dựa vào sự dùng chung các cặp electron (liên kết cộng hoá trị).

- Liên kết tạo bởi 1 cặp electron dùng chung là liên kết đơn. Liên kết đơn thuộc loại liên kết σ . Liên kết đơn được biểu diễn bởi 2 dấu chấm hay 1 gạch nối giữa 2 nguyên tử.
- Liên kết tạo bởi 2 cặp electron dùng chung là liên kết đôi. Liên kết đôi gồm 1 liên kết σ và 1 liên kết π , biểu diễn bởi 4 dấu chấm hay 2 gạch nối.
- Liên kết tạo bởi 3 cặp electron dùng chung là liên kết ba. Liên kết ba gồm 1 liên kết σ và 2 liên kết π , biểu diễn bởi 6 dấu chấm hay 3 gạch nối.
- Liên kết đôi và liên kết ba gọi chung là liên kết bội.



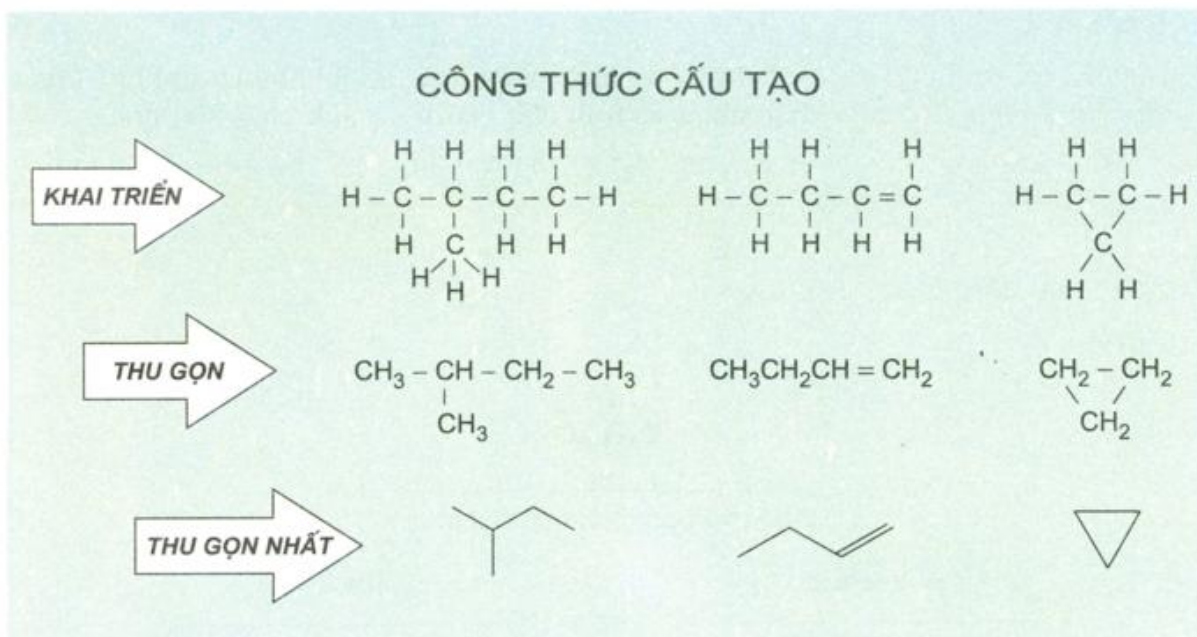
Nguyên tử C sử dụng obitan lai hoá để tạo liên kết σ theo kiểu xen phủ trực (hình 4.7a, b) và dùng obitan p để tạo liên kết π theo kiểu xen phủ bên (hình 4.7c).



Hình 4.7. a), b) Xen phủ trực ; c) Xen phủ bên

2. Các loại công thức cấu tạo

Công thức cấu tạo biểu diễn thứ tự và cách thức liên kết của các nguyên tử trong phân tử. Có cách viết khai triển, thu gọn và thu gọn nhất.



Công thức cấu tạo khai triển : Viết tất cả các nguyên tử và các liên kết giữa chúng.

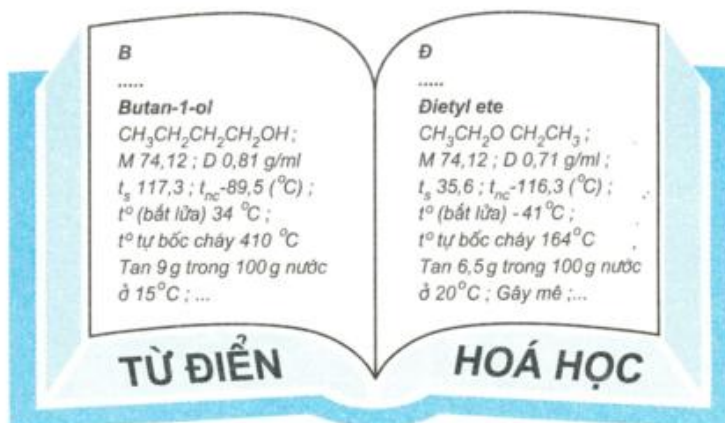
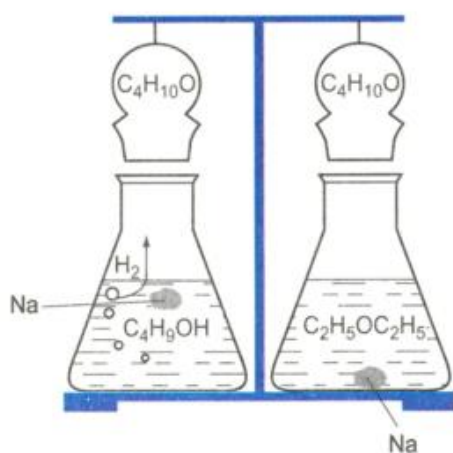
Công thức cấu tạo thu gọn : Viết gộp nguyên tử cacbon và các nguyên tử khác liên kết với nó thành từng nhóm.

Công thức cấu tạo thu gọn nhất : Chỉ viết các liên kết và nhóm chức, đầu mút của các liên kết chính là các nhóm CH_x với x đảm bảo hoá trị 4 ở C.

III - ĐỒNG PHÂN CẤU TẠO

1. Khái niệm đồng phân cấu tạo

a) Thí dụ



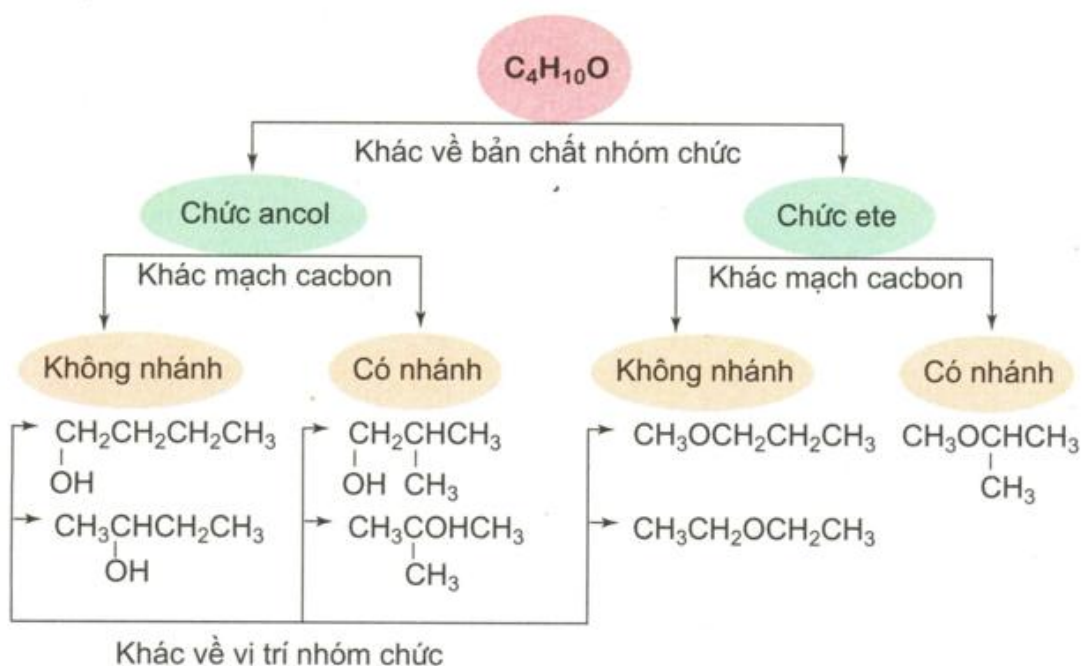
b) Kết luận

Butan-1-ol và dietyl ete có cùng công thức phân tử $C_4H_{10}O$ nhưng do khác nhau về cấu tạo hoá học nên khác nhau về tính chất vật lí và tính chất hoá học.

Vậy, những hợp chất có cùng công thức phân tử nhưng có cấu tạo hoá học khác nhau gọi là những đồng phân cấu tạo.

2. Phân loại đồng phân cấu tạo

a) Thí dụ

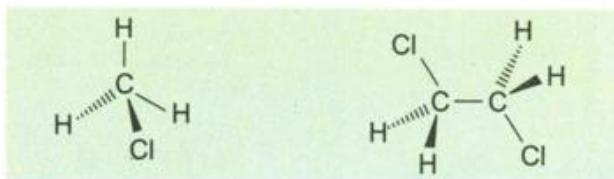


b) Kết luận

Những đồng phân khác nhau về bản chất nhóm chức gọi là đồng phân nhóm chức. Những đồng phân khác nhau về sự phân nhánh mạch cacbon gọi là đồng phân mạch cacbon. Những đồng phân khác nhau về vị trí của nhóm chức gọi là đồng phân vị trí nhóm chức.

IV - CÁCH BIỂU DIỄN CẤU TRÚC KHÔNG GIAN PHÂN TỬ HỮU CƠ

1. Công thức phối cảnh



Hình 4.8. Công thức phối cảnh của CH_3Cl và $ClCH_2-CH_2Cl$

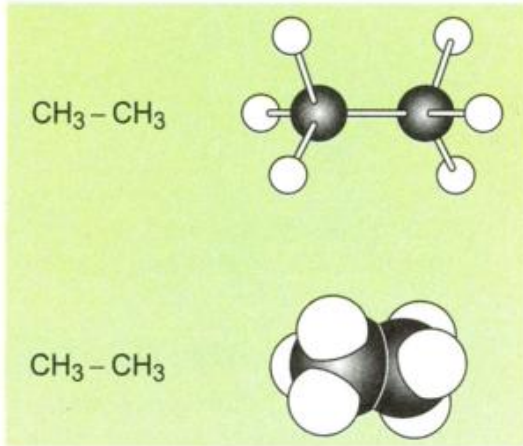
Công thức phối cảnh là một loại *công thức lập thể*.

Đường nét liền biểu diễn liên kết nằm trên mặt trang giấy.

Đường nét đậm biểu diễn liên kết hướng về mắt ta (ra phía trước trang giấy).

Đường nét đứt biểu diễn liên kết hướng ra xa mắt ta (ra phía sau trang giấy).

2. Mô hình phân tử



a) Mô hình rỗng

Các quả cầu tượng trưng cho các nguyên tử, các thanh nối tượng trưng cho các liên kết giữa chúng. Góc giữa các thanh nối bằng góc lai hoá.

b) Mô hình đặc

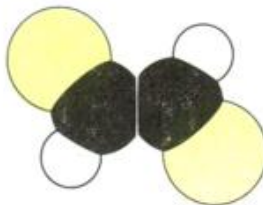
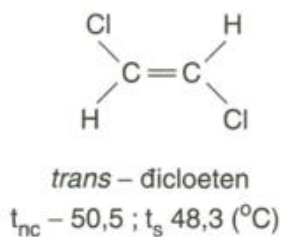
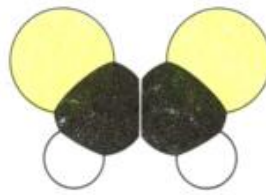
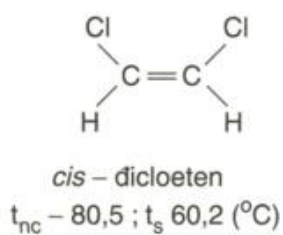
Các quả cầu cắt vát tượng trưng cho các nguyên tử được ghép với nhau theo đúng vị trí không gian của chúng.

V - ĐỒNG PHÂN LẬP THỂ

1. Khái niệm về đồng phân lập thể

a) Thí dụ

Ứng với công thức cấu tạo $\text{CHCl} = \text{CHCl}$ có hai cách sắp xếp không gian khác nhau dẫn tới hai chất đồng phân :



Hình 4.9. Đồng phân lập thể của $\text{CHCl} = \text{CHCl}$

b) Kết luận

Đồng phân lập thể là những đồng phân có cấu tạo hoá học như nhau (cùng công thức cấu tạo) nhưng khác nhau về sự phân bố không gian của các nguyên tử trong phân tử (tức khác nhau về cấu trúc không gian của phân tử).

2. Quan hệ giữa đồng phân cấu tạo và đồng phân lập thể



3. Cấu tạo hoá học và cấu trúc hoá học

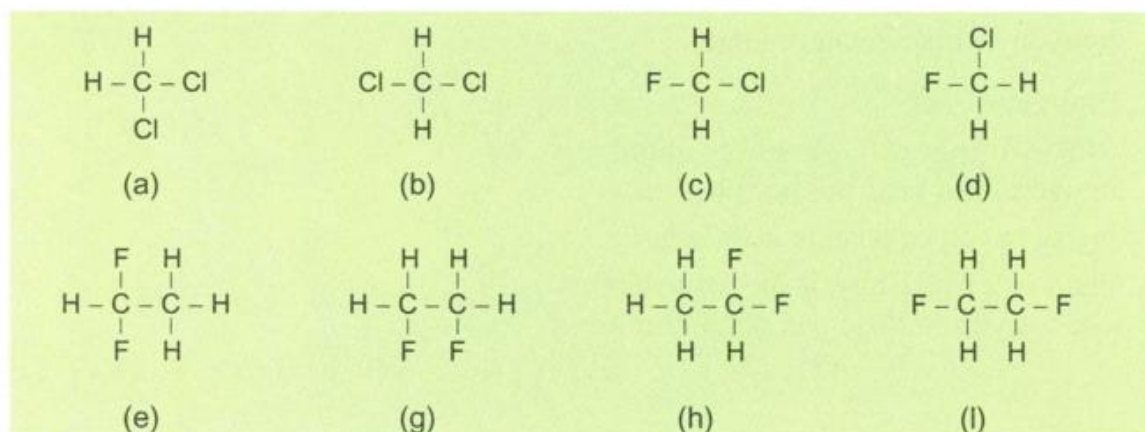
Cấu tạo hoá học cho ta biết các nguyên tử liên kết với nhau theo thứ tự nào, bằng liên kết đơn hay liên kết bội, nhưng không cho biết sự phân bố trong không gian của chúng. Cấu tạo hoá học được *biểu diễn bởi công thức cấu tạo*.

Cấu tạo hoá học và cấu trúc không gian của phân tử hợp thành *cấu trúc hoá học*. Cấu trúc hoá học vừa cho biết cấu tạo hoá học vừa cho biết sự phân bố trong không gian của các nguyên tử trong phân tử. Cấu trúc hoá học thường được *biểu diễn bởi công thức lập thể*.

BÀI TẬP

1. a) Liên kết cộng hoá trị là gì ?
b) Hãy cho biết mối liên quan giữa số cặp electron dùng chung của mỗi nguyên tử các nguyên tố C, O, H, Cl với số electron hoá trị của chúng trong phân tử hợp chất hữu cơ. Giải thích.
2. Dựa vào cấu tạo và tính chất của nguyên tử, hãy giải thích vì sao
a) cacbon chủ yếu tạo thành liên kết cộng hoá trị chứ không phải liên kết ion.
b) cacbon có hoá trị IV trong các hợp chất hữu cơ.
3. Hãy viết công thức electron và công thức cấu tạo các phân tử sau : CH_3Cl , CH_4O , CH_2O , CH_5N .

4. a) Liên kết đơn là gì, liên kết bội là gì ?
 b) Khi etilen cộng với brom thì liên kết σ hay liên kết π của nó bị phá vỡ, vì sao ?
 c) Hãy viết công thức cấu tạo khai triển và công thức cấu tạo thu gọn nhất của các hợp chất sau : C_3H_6 , CH_3CHO , $CH_3COOC_2H_5$, CH_3CN , biết rằng trong phân tử của chúng đều có liên kết bội.
5. a) Chất đồng đẳng là gì ?
 b) Hãy viết công thức phân tử của một vài hợp chất đồng đẳng của C_2H_2 và công thức tổng quát cho cả dãy đồng đẳng đó.
6. a) Chất đồng phân là gì ?
 b) Dùng sơ đồ phân loại đồng phân cấu tạo ở mục III.2, hãy viết công thức cấu tạo các đồng phân ứng với mỗi công thức phân tử sau : C_4H_9Cl , C_4H_8 .
 c) Trong số các đồng phân cấu tạo của C_4H_8 , cấu tạo nào có đồng phân lập thể ? Hãy viết công thức lập thể của chúng.
7. a) Hãy viết công thức phối cảnh của metanol (CH_3OH) và của clorofom ($CHCl_3$) .
 b) Hãy viết công thức phối cảnh của etan và etanol.
8. Những công thức nào dưới đây biểu diễn cùng một chất ? Hãy dùng công thức lập thể để minh hoạ cho ý kiến của mình.



9. Hãy vẽ mô hình rỗng các phân tử mà công thức phối cảnh của chúng được trình bày ở hình 4.9.
10. Câu nào dưới đây phản ánh đúng khái niệm về chất đồng phân ?
- A. Những hợp chất có cùng phân tử khối nhưng có cấu tạo hoá học khác nhau gọi là những chất đồng phân.
 B. Những hợp chất có cùng công thức phân tử nhưng có cấu tạo hoá học khác nhau gọi là những chất đồng phân.
 C. Những hợp chất có cùng công thức phân tử nhưng có tính chất hoá học khác nhau gọi là những chất đồng phân.
 D. Những hợp chất khác nhau nhưng có cùng công thức phân tử gọi là những chất đồng phân.