

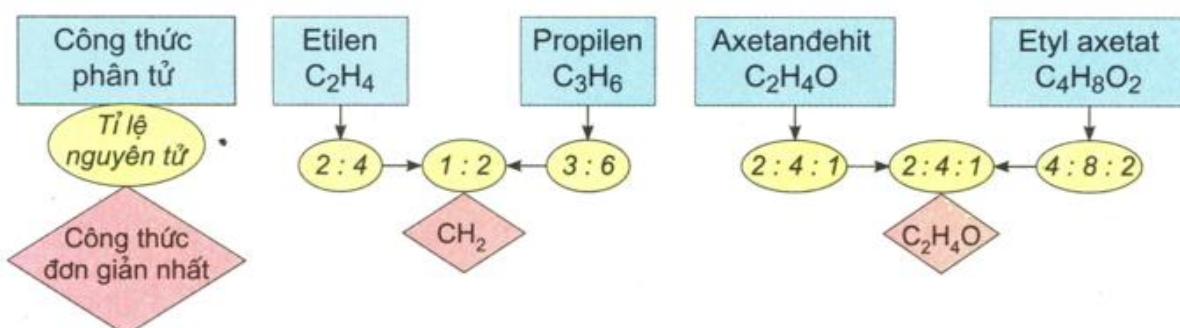
Bài
28

CÔNG THỨC PHÂN TỬ HỢP CHẤT HỮU CƠ

- Biết cách thiết lập công thức đơn giản nhất từ kết quả phân tích nguyên tố.
- Biết cách tính phân tử khối và cách thiết lập công thức phân tử.

I - CÔNG THỨC ĐƠN GIẢN NHẤT

1. Công thức phân tử và công thức đơn giản nhất



Công thức phân tử cho biết số nguyên tử của các nguyên tố có trong phân tử.

Công thức đơn giản nhất cho biết tỉ lệ số nguyên tử của các nguyên tố có trong phân tử (biểu diễn bằng tỉ lệ các số nguyên tối giản).

Công thức phân tử (chẳng hạn $C_xH_yO_zN_t$) có thể trùng hoặc là bội số của công thức đơn giản nhất ($C_pH_qO_rN_s$):

$$C_xH_yO_zN_t = (C_pH_qO_rN_s)_n, n \text{ có thể là } 1 \text{ hoặc } 2, 3, \dots$$

$$x : y : z : t = p : q : r : s$$

2. Thiết lập công thức đơn giản nhất

a) Thí dụ

Từ tinh dầu hoa nhài người ta tách được hợp chất A có chứa cacbon, hidro và oxi. Phân tích định lượng cho kết quả: 73,14% C; 7,24% H. Hãy thiết lập công thức đơn giản nhất của A.

Đặt công thức phân tử của A là $C_xH_yO_z$.

Thiết lập công thức đơn giản nhất của A là lập tỉ lệ $x : y : z$ ở dạng các số nguyên tối giản.

A (C, H, O), %C : 73,14 %H : 7,24 %O : 19,62 <hr/> 100,00	$x:y:z = \frac{73,14}{12} : \frac{7,24}{1} : \frac{19,62}{16} = 6,095 : 7,240 : 1,226$ $= \frac{6,095}{1,226} : \frac{7,240}{1,226} : \frac{1,226}{1,226} = 4,971 : 5,905 : 1,000 = 5:6:1$ <p>Công thức đơn giản nhất của A là : C_5H_6O</p>
--	---

Công thức phân tử của A có dạng : $C_{5n}H_{6n}O_n$ hoặc $(C_5H_6O)_n$ với n có thể bằng 1, 2, 3, ...

b) Tổng quát

Từ kết quả phân tích nguyên tố hợp chất $C_xH_yO_zN_r$, ta lập tỉ lệ số nguyên tử trong phân tử rồi chuyển tỉ lệ đó thành tỉ số tối giản các số nguyên p, q, r, s thì được công thức đơn giản nhất :

$$x:y:z:t = \frac{\%C}{12} : \frac{\%H}{1} : \frac{\%O}{16} : \frac{\%N}{14} = \dots = p:q:r:s$$

II - THIẾT LẬP CÔNG THỨC PHÂN TỬ

1. Xác định khối lượng mol phân tử

Đối với chất khí và chất lỏng dễ hoá hơi, người ta xác định khối lượng mol phân tử dựa vào tỉ khối của chúng (ở thể khí) so với một chất khí đã biết theo công thức :

$$M_A = M_B \cdot d_{A/B} ; \quad M_A = 29 \cdot d_{A/kk}$$

Đối với chất rắn và chất lỏng khó hoá hơi, người ta đo độ giảm nhiệt độ đồng đặc hoặc đo độ tăng nhiệt độ sôi của dung dịch so với dung môi (xem phần tư liệu) và tính được khối lượng mol phân tử của chất tan không bay hơi, không điện li. Ngày nay, người ta thường dùng phương pháp **phổ khối lượng** để xác định khối lượng mol phân tử.

2. Thiết lập công thức phân tử

a) Thí dụ

Từ tinh dầu hoa nhài, người ta tách được hợp chất A có chứa cacbon, hiđro và oxi. Phân tích định lượng cho kết quả : 73,14% C ; 7,24% H. Biết phân tử khối của A là 164. Hãy xác định công thức phân tử của A.

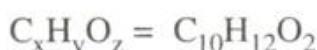
• Thiết lập công thức phân tử của A qua công thức đơn giản nhất.

Từ số liệu phân tích nguyên tố, ở mục I.2, chúng ta đã thiết lập được công thức đơn giản nhất của A là C_5H_6O .

Đặt công thức phân tử của A là $C_xH_yO_z$ ta có $C_xH_yO_z = (C_5H_6O)_n$

$$\Rightarrow M_{(C_5H_6O)_n} = 164 \Rightarrow (5.12 + 6 + 16)n = 164 \Rightarrow n = 2$$

Vậy :



• Thiết lập công thức phân tử của A không qua công thức đơn giản nhất

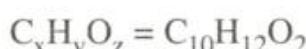
Ta có : $M_{(C_xH_yO_z)} = 164$; C = 73,14%; H = 7,24%; O = 19,62%.

Vậy :

$$\frac{x.12}{164} = \frac{73,14}{100} \Rightarrow x = \frac{164.73,14}{12.100} = 9,996 \approx 10$$

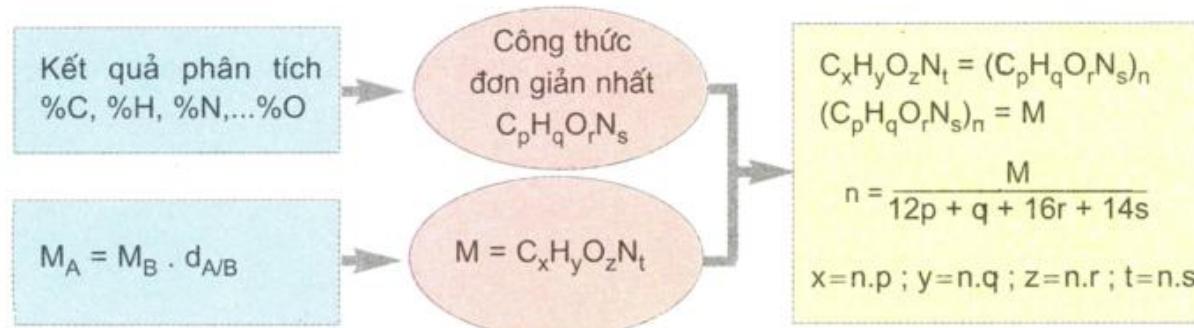
$$\frac{y}{164} = \frac{7,24}{100} \Rightarrow y = \frac{164.7,24}{100} = 11,874 \approx 12$$

$$\frac{z.16}{164} = \frac{19,62}{100} \Rightarrow z = \frac{164.19,62}{16.100} = 2,01 \approx 2$$



b) Tổng quát

Thiết lập công thức phân tử qua công thức đơn giản nhất là cách thức tổng quát hơn cả.



BÀI TẬP

1. Vitamin A (retinol) có công thức phân tử $C_{20}H_{30}O$. Vitamin C có công thức phân tử là $C_6H_8O_6$.
 - a) Viết công thức đơn giản nhất của mỗi chất.
 - b) Tính tỉ lệ % về khối lượng và tỉ lệ % số nguyên tử các nguyên tố ở vitamin A và vitamin C.
2. Hãy thiết lập công thức đơn giản nhất từ các số liệu phân tích sau :
 - a) 70,94 %C, 6,40 %H, 6,90 %N, còn lại là oxi.
 - b) 65,92 %C, 7,75 %H, còn lại là oxi.
3. Phân tích một hợp chất X người ta thu được các số liệu sau : 76,31%C, 10,18%H, 13,52%N. Công thức đơn giản nhất của X là
A. $C_6H_{10}N$. B. $C_{19}H_{30}N_3$. C. $C_{12}H_{22}N_2$. D. $C_{13}H_{21}N_2$.
4. Hãy thiết lập công thức phân tử hợp chất hữu cơ trong mỗi trường hợp sau :
 - a) Đốt cháy hoàn toàn 10 mg hợp chất hữu cơ Y sinh ra 33,85 mg CO_2 và 6,95 mg H_2O . Tỉ khối hơi của hợp chất đó đối với không khí là 2,69.
 - b) Đốt cháy hoàn toàn 28,2 mg hợp chất hữu cơ Z và cho các sản phẩm sinh ra lần lượt đi qua các bình đựng $CaCl_2$ khan và KOH dư thì thấy bình $CaCl_2$ tăng thêm 19,4 mg còn bình KOH tăng thêm 80,0 mg. Mặt khác, khi đốt 18,6 mg chất đó sinh ra 2,24 ml nitơ (đktc). Biết rằng, phân tử chất đó chỉ chứa một nguyên tử nitơ.



XÁC ĐỊNH KHỐI LƯỢNG MOL PHÂN TỬ CỦA CHẤT RẮN VÀ CHẤT LỎNG KHÓ HOÁ HƠI

Dung dịch của một chất rắn hoặc một chất lỏng không bay hơi thì đông đặc ở nhiệt độ thấp hơn so với dung môi nguyên chất. Độ giám nhiệt độ đông đặc và độ tăng nhiệt độ sôi, (Δt) phụ thuộc vào :

- a) Bán chất dung môi, thể hiện ở hằng số nghiệm lạnh K_{nl} (nếu xét sự đông đặc), hoặc hằng số nghiệm sôi, K_{ns} (nếu xét sự sôi), ghi chung là K.

Dung môi	$t_{nc}, ^\circ C$	K_{nl}	$t_s, ^\circ C$	K_{ns}
Nước	0,0	1,86	100	0,512
Benzen	5,5	5,12	80,1	2,53

b) Nồng độ của dung dịch biểu thị qua khối lượng dung môi (m_{dm}), khối lượng chất tan (m_{ct}) và khối lượng mol phân tử của chất tan (M).

Δt tuân theo biểu thức dưới đây.

$$\Delta t = \frac{K \cdot m_{ct} \cdot 1000}{M \cdot m_{dm}}$$

Thí dụ : Từ cây long não người ta tách được một chất rắn gọi là campho được dùng trong y dược. Hoà tan 3,042 g campho trong 40 g benzen thu được dung dịch đông đặc ở 2,94°C. Hãy xác định khối lượng mol phân tử của campho.

Từ biểu thức và các giá trị cho ở trên, ta có :

$$M = \frac{K \cdot m_{ct} \cdot 1000}{m_{dm} \cdot \Delta t} = \frac{5,12 \cdot 3,042 \cdot 1000}{40 \cdot (5,50 - 2,94)} = 152,1 \text{ (g/mol)}$$

Phương pháp nghiệm lạnh, nghiệm sôi cũng như phương pháp tỉ khối hơi, đòi hỏi một lượng mẫu đáng kể mà độ chính xác lại không cao.

Phương pháp hiện đại xác định phân tử khối là dùng máy phổ khối lượng. Chỉ cần một lượng mẫu không đáng kể (< 1mg) cũng vẫn xác định được phân tử khối với độ chính xác cao tới 0,0001. Nhờ vậy có thể suy ra được công thức phân tử mà không cần phân tích định lượng nguyên tố.