




CẤU TRÚC PHÂN TỬ HỢP CHẤT HỮU CƠ




-  Biết các nội dung cơ bản của thuyết cấu tạo hoá học ; khái niệm đồng đẳng, đồng phân.
-  Biết cách viết công thức cấu tạo của các chất đồng phân cấu tạo.
-  Biết sơ lược về cấu trúc phân tử hợp chất hữu cơ.

I - CÔNG THỨC CẤU TẠO

1. Khái niệm

Công thức cấu tạo biểu diễn thứ tự và cách thức liên kết (liên kết đơn, liên kết bội) của các nguyên tử trong phân tử.

2. Các loại công thức cấu tạo

Công thức cấu tạo khai triển	Công thức cấu tạo thu gọn
$ \begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \\ \quad \quad \\ \text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{H} \\ \quad \quad \\ \text{H} \quad \text{C} \quad \text{H} \\ \quad \quad \\ \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \end{array} $	$ \begin{array}{c} \text{CH}_3-\text{CH}-\text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 \end{array} $ hoặc 
$ \begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \quad \quad \text{H} \\ \quad \quad \quad \\ \text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{C}=\text{C} \\ \quad \quad \quad \\ \text{H} \quad \text{C} \quad \text{H} \quad \text{H} \\ \quad \quad \\ \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \end{array} $	$ \begin{array}{c} \text{CH}_3-\text{CH}-\text{CH}=\text{CH}_2 \\ \\ \text{CH}_3 \end{array} $ hoặc 
$ \begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \\ \quad \quad \\ \text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{O}-\text{H} \\ \quad \quad \\ \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \end{array} $	$ \text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}_2\text{OH} $ hoặc 
<p>Biểu diễn trên mặt phẳng giấy tất cả các liên kết</p>	<p>Các nguyên tử, nhóm nguyên tử cùng liên kết với một nguyên tử cacbon được viết thành một nhóm</p> <p>Chỉ biểu diễn liên kết giữa các nguyên tử cacbon và với nhóm chức.</p> <p>Mỗi đầu một đoạn thẳng hoặc điểm gấp khúc ứng với một nguyên tử cacbon ; không biểu thị số nguyên tử hydro liên kết với mỗi nguyên tử cacbon.</p>

II - THUYẾT CẤU TẠO HOÁ HỌC

1. Nội dung

Thuyết cấu tạo hoá học giữ vai trò quan trọng trong việc nghiên cứu cấu tạo và tính chất của hợp chất hữu cơ. Nội dung cơ bản của thuyết cấu tạo hoá học gồm các luận điểm chính sau :

- a) 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 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 : Ancol etylic và dimetyl ete đều có công thức phân tử C_2H_6O , nhưng chúng có cấu tạo hoá học khác nhau.

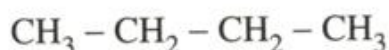
Ancol etylic
 $CH_3 - CH_2 - OH, t_s = 78,3 \text{ }^\circ C$

Tan vô hạn trong nước, tác dụng với natri sinh ra khí hiđro.

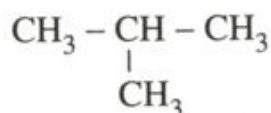
Dimetyl ete
 $CH_3 - O - CH_3, t_s = - 23 \text{ }^\circ C$

Tan ít trong nước, không tác dụng với natri.

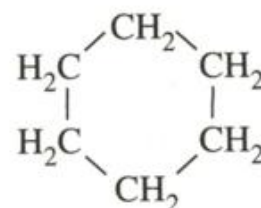
- b) Trong phân tử hợp chất hữu cơ, cacbon có hoá trị bốn. Nguyên tử cacbon không những có thể liên kết với nguyên tử của các nguyên tố khác mà còn liên kết với nhau tạo thành mạch cacbon (mạch vòng, mạch không vòng, mạch nhánh, mạch không nhánh).



Mạch hở không nhánh



Mạch hở có nhánh



Mạch vòng

- c) 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 :

Khác về loại nguyên tử	CH ₄	t _s = -162 °C	Không tan trong nước, bị cháy khi đốt với oxi.
	CCl ₄	t _s = 77,5 °C	Không tan trong nước, không cháy khi đốt với oxi.
Cùng CTPT, khác CTCT	CH ₃ - CH ₂ - OH	t _s = 78,3 °C	Tan nhiều trong nước, tác dụng với natri.
	CH ₃ - O - CH ₃	t _s = - 23 °C	Tan ít trong nước. Không tác dụng với natri.
Khác CTPT, tương tự về CTCT	CH ₃ - CH ₂ - OH	t _s = 78,3 °C	Tan nhiều trong nước, tác dụng với natri.
	CH ₃ - CH ₂ - CH ₂ - OH	t _s = 97,2 °C	Tan nhiều trong nước, tác dụng với natri.

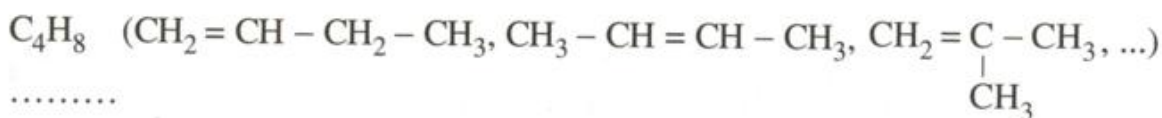
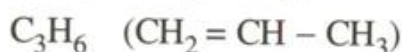
2. Ý nghĩa

Thuyết cấu tạo hoá học giúp giải thích được hiện tượng đồng đẳng, hiện tượng đồng phân.

III - ĐỒNG ĐẲNG, ĐỒNG PHÂN

1. Đồng đẳng

a) *Thí dụ*, xét các hidrocarbon :



.....



Công thức phân tử các chất trên hơn kém nhau một hay một số nhóm CH₂ và chúng có tính chất hoá học tương tự nhau (giống etilen). Chúng được gọi là các chất đồng đẳng của nhau.

Các ancol CH₃ - OH, C₂H₅ - OH, C₃H₇ - OH, ..., C_nH_{2n+1} - OH có thành phần phân tử hơn kém nhau một hay nhiều nhóm CH₂, có tính chất hoá học tương tự nhau (giống ancol etylic). Các ancol này được gọi là đồng đẳng của nhau.

b) 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.

Sở dĩ các chất trong cùng dãy đồng đẳng có tính chất hoá học tương tự nhau là do chúng có cấu tạo hoá học tương tự nhau.

2. Đồng phân

a) Thí dụ

Ancol etylic ($\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-OH}$) và dimetyl ete ($\text{CH}_3\text{-O-CH}_3$) đều có công thức phân tử $\text{C}_2\text{H}_6\text{O}$, nhưng có tính chất khác nhau. Ta nói ancol etylic và dimetyl ete là các chất đồng phân của nhau.

Các chất đồng phân của nhau có tính chất khác nhau là do chúng có cấu tạo hoá học khác nhau.

b) Khái niệm

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

Có nhiều loại đồng phân : đồng phân cấu tạo (gồm đồng phân mạch cacbon, đồng phân loại nhóm chức, đồng phân vị trí liên kết bội hoặc nhóm chức,...) và đồng phân lập thể (đồng phân khác nhau về vị trí không gian của các nhóm nguyên tử).

Thí dụ :

Đồng phân mạch cacbon	$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-OH}$ $t_s = 117,3^\circ\text{C}$	$\text{CH}_3\text{-CH-CH}_2\text{-OH}$ CH_3 $t_s = 108^\circ\text{C}$
Đồng phân vị trí liên kết bội	$\text{CH}_2\text{=CH-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_3$ $t_s = 30^\circ\text{C}$	$\text{CH}_3\text{-CH=CH-CH}_2\text{-CH}_3$ $t_s = 38^\circ\text{C}$
Đồng phân loại nhóm chức (1)	$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-OH}$ $t_s = 78,3^\circ\text{C}$	$\text{CH}_3\text{-O-CH}_3$ $t_s = -23^\circ\text{C}$
Đồng phân vị trí nhóm chức	$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-OH}$ $t_s = 117,3^\circ\text{C}$	$\text{CH}_3\text{-CH-CH}_2\text{-CH}_3$ OH $t_s = 99,5^\circ\text{C}$

(1) Nhóm chức là nhóm nguyên tử gây ra phản ứng hoá học đặc trưng của phân tử hợp chất hữu cơ.

IV - LIÊN KẾT HOÁ HỌC VÀ CẤU TRÚC PHÂN TỬ HỢP CHẤT HỮU CƠ

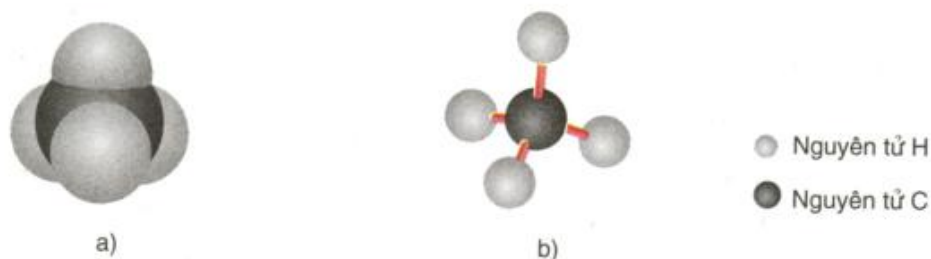
Liên kết hoá học thường gặp nhất trong phân tử các hợp chất hữu cơ là liên kết cộng hoá trị. Liên kết cộng hoá trị được chia thành hai loại : liên kết xích ma (σ) và liên kết pi (π).

Sự tổ hợp liên kết σ với liên kết π tạo thành liên kết đôi hoặc liên kết ba.

1. Liên kết đơn

Liên kết đơn (hay liên kết σ) do một cặp electron chung tạo nên và được biểu diễn bằng một gạch nối giữa hai nguyên tử. Liên kết σ là liên kết bền.

Thí dụ : Trong phân tử metan, nguyên tử cacbon tạo được bốn liên kết đơn bằng bốn cặp electron dùng chung với bốn nguyên tử hidro. Bốn liên kết này hướng từ nguyên tử cacbon (nằm ở tâm của hình tứ diện đều) ra bốn đỉnh của tứ diện đều. Do đó, các nguyên tử trong phân tử metan không nằm trong cùng một mặt phẳng (hình 4.2).



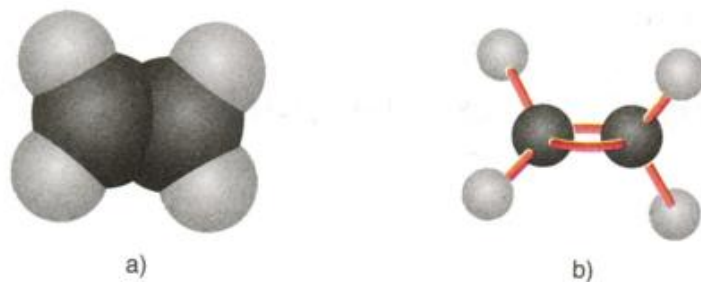
Hình 4.2. Mô hình phân tử metan dạng đặc (a) và dạng rỗng (b)

2. Liên kết đôi

Liên kết đôi do 2 cặp electron chung giữa 2 nguyên tử tạo nên. Liên kết đôi gồm một liên kết σ và một liên kết π . Liên kết π kém bền hơn liên kết σ nên dễ bị đứt ra trong các phản ứng hoá học. Liên kết đôi được biểu diễn bằng hai gạch nối song song giữa hai nguyên tử.

Mỗi nguyên tử cacbon của liên kết đôi còn tạo được hai liên kết đơn với hai nguyên tử khác. Bốn nguyên tử liên kết trực tiếp với hai nguyên tử cacbon của liên kết đôi nằm trong cùng một mặt phẳng với hai nguyên tử cacbon đó.

Thí dụ : Các nguyên tử C, H trong phân tử etilen $\text{H}_2\text{C} = \text{CH}_2$ nằm trong cùng một mặt phẳng (hình 4.3).



Hình 4.3. Mô hình phân tử etilen dạng đặc (a) và dạng rỗng (b)

3. Liên kết ba

Liên kết ba do 3 cặp electron chung giữa 2 nguyên tử tạo nên. Liên kết ba gồm một liên kết σ và hai liên kết π . Liên kết ba được biểu diễn bằng ba gạch nối song song giữa hai nguyên tử.

Mỗi nguyên tử C của liên kết ba còn tạo được một liên kết đơn với một nguyên tử khác. Hai nguyên tử liên kết với hai nguyên tử cacbon của liên kết ba nằm trên đường thẳng nối hai nguyên tử cacbon.

Thí dụ, các nguyên tử trong phân tử axetilen nằm trên một đường thẳng (hình 4.4) :



Công thức cấu tạo rút gọn : $\text{HC} \equiv \text{CH}$



a)



b)

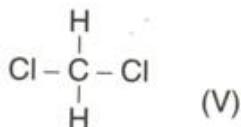
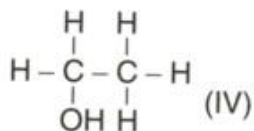
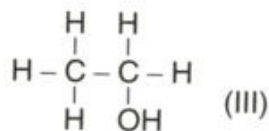
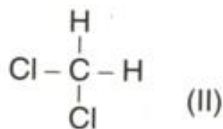
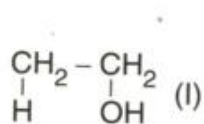
Hình 4.4. Mô hình phân tử axetilen dạng đặc (a) và dạng rỗng (b)

BÀI TẬP

1. Phát biểu nội dung cơ bản của thuyết cấu tạo hoá học.
2. So sánh ý nghĩa của công thức phân tử và công thức cấu tạo. Cho thí dụ minh hoạ.
3. Thế nào là liên kết đơn, liên kết đôi, liên kết ba ?
4. Chất nào sau đây trong phân tử chỉ có liên kết đơn ?
A. CH_4 B. C_2H_4 C. C_6H_6 D. CH_3COOH
5. Những chất nào sau đây là đồng đẳng của nhau, đồng phân của nhau ?
a) $\text{CH}_3 - \text{CH} = \text{CH} - \text{CH}_3$ e) $\text{CH}_3 - \text{CH} = \text{CH} - \text{CH}_2 - \text{CH}_3$
b) $\text{CH}_2 = \text{CH} - \text{CH}_2 - \text{CH}_3$ g) $\text{CH}_2 = \text{CH} - \underset{\text{CH}_3}{\text{CH}} - \text{CH}_3$
c) $\text{CH}_3 - \text{CH}_2 - \text{CH}_2 - \text{CH}_2 - \text{CH}_3$ h) $\text{CH}_3 - \text{CH}_2 - \text{CH}_2 - \text{CH}_2 - \text{CH}_2 - \text{CH}_3$
d) $\text{CH}_2 = \text{CH} - \text{CH}_3$ i) $\text{CH}_3 - \text{CH}_2 - \underset{\text{CH}_3}{\text{CH}} - \text{CH}_3$

6. Viết công thức cấu tạo có thể có của các chất có công thức phân tử như sau : C_2H_6O , C_3H_8O , C_4H_{10} .

7. Những công thức cấu tạo nào dưới đây biểu thị cùng một chất ?



8. Khi cho 5,30 gam hỗn hợp gồm etanol C_2H_5OH và propan-1-ol $CH_3CH_2CH_2OH$ tác dụng với natri (dư) thu được 1,12 lít khí (đktc).

a) Viết phương trình hoá học của các phản ứng xảy ra.

b) Tính thành phần phần trăm khối lượng của mỗi chất trong hỗn hợp.