

ỦY BAN NHÂN DÂN THÀNH PHỐ HỒ CHÍ MINH  
**TRƯỜNG CAO ĐẲNG BÁCH KHOA NAM SÀI GÒN**



**GIÁO TRÌNH**  
**MÔN HỌC/MÔ ĐUN: HÓA HỮU CƠ**  
**NGÀNH/NGHỀ: DƯỢC**  
**TRÌNH ĐỘ: TRUNG CẤP**

*Ban hành kèm theo Quyết định số: 453/QĐ-NSG - ngày 29 tháng 08 năm 2022*  
*của Hiệu trưởng Trường Cao đẳng Bách Khoa Nam Sài Gòn*

**Tp. Hồ Chí Minh, năm 2022**

## **TUYÊN BỐ BẢN QUYỀN**

Tài liệu này thuộc loại sách giáo trình nên các nguồn thông tin có thể được phép dùng nguyên bản hoặc trích dùng cho các mục đích về đào tạo và tham khảo.

Mọi mục đích khác mang tính lệch lạc hoặc sử dụng với mục đích kinh doanh thiếu lành mạnh sẽ bị nghiêm cấm.

TaiLieu.vn

## LỜI GIỚI THIỆU

*Giáo trình Hóa hữu cơ được biên soạn dựa vào chương trình giáo dục của Trường Cao đẳng Bách khoa Nam Sài Gòn trên cơ sở chương trình khung đã được phê duyệt. Giáo trình được tập thể các giảng viên giàu kinh nghiệm về giảng dạy Trường Cao đẳng Bách khoa Nam Sài Gòn biên soạn theo phương châm: kiến thức cơ bản, hệ thống; nội dung chính xác, khoa học; cập nhật các kiến thức y dược học hiện đại và thực tiễn Việt Nam*

*Nội dung sách chỉ đề cập những kiến thức lý thuyết về hóa hữu cơ, gồm 6 chương trình bày những kiến thức cơ bản về danh pháp, cấu trúc, tính chất lý học và tính chất hóa học của các hợp chất hydrocarbon và các hợp chất đơn chất.*

*Trường Cao đẳng Bách khoa Nam Sài Gòn chân thành cảm ơn các tác giả và Hội đồng chuyên môn thẩm định đã giúp hoàn thành giáo trình để cuốn sách sớm hoàn thành kịp thời phục vụ cho công tác đào tạo nhân lực y tế.*

*Lần đầu tiên soạn giáo trình, chúng tôi mong nhận được ý kiến đóng góp của đồng nghiệp, sinh viên và các độc giả để lần biên soạn sau giáo trình được hoàn thiện hơn.*

Tp. Hồ Chí Minh, ngày 05 tháng 07 năm 2022

Tham gia biên soạn

1. Ds. Phạm Phước Đây
2. Ths. Nguyễn Anh Tuấn

# MỤC LỤC

|                                                            |           |
|------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>LỜI GIỚI THIỆU .....</b>                                | <b>4</b>  |
| <b>MỤC LỤC .....</b>                                       | <b>5</b>  |
| <b>CHƯƠNG 1. ĐẠI CƯƠNG HÓA HỮU CƠ.....</b>                 | <b>6</b>  |
| 1. CẤU TẠO CÁC HỢP CHẤT HỮU CƠ.....                        | 6         |
| 2. CÁC HIỆU ỨNG ĐIỆN TỬ TRONG HÓA HỮU CƠ .....             | 14        |
| <b>CHƯƠNG 2. HYDROCARBON .....</b>                         | <b>20</b> |
| 1. HYDROCARBON MẠCH HỎ .....                               | 20        |
| 2. HYDROCARBON CYCLANIC.....                               | 37        |
| <b>CHƯƠNG 3. DẪN CHẤT HALOGEN VÀ HỢP CHẤT CƠ KIM .....</b> | <b>42</b> |
| 1. DẪN CHẤT HALOGEN .....                                  | 42        |
| 2. HỢP CHẤT CƠ KIM.....                                    | 46        |
| <b>CHƯƠNG 4. ALCOL, PHENOL, ETHER OXYD.....</b>            | <b>49</b> |
| 1. ALCOL.....                                              | 49        |
| 2. PHENOL .....                                            | 55        |
| <b>CHƯƠNG 5. ALDEHYD VÀ KETON .....</b>                    | <b>60</b> |
| <b>CHƯƠNG 6. ACID CARBOXYLIC VÀ CÁC DẪN CHẤT .....</b>     | <b>70</b> |
| 1. ACID CARBOXYLIC .....                                   | 70        |
| 2. DẪN XUẤT CỦA ACID CARBOXYLIC .....                      | 76        |

## CHƯƠNG TRÌNH MÔN HỌC/MÔ ĐUN

**Tên môn học/mô đun: HÓA HỮU CƠ**

**Mã môn học/mô đun: MH 12**

**Vị trí, tính chất, ý nghĩa và vai trò của môn học/mô đun:**

- Vị trí: Hóa hữu cơ là một trong những môn khoa học cơ sở quan trọng trong chương trình đào tạo Trung cấp dược.

- Tính chất: Môn học trình bày về cấu tạo, danh pháp, đồng phân, các phương pháp điều chế chính, các tính chất vật lý và hoá học, các chất điển hình được ứng dụng trong hoá học, đời sống và trong Y- Dược học.

- Ý nghĩa và vai trò của môn học/mô đun: Môn học này làm nền tảng cơ sở cho các môn nghiệp vụ như Hoá dược, Hoá sinh, Dược liệu, Dược lý, Bào chế...

**Mục tiêu của môn học/mô đun:**

- Về kiến thức:

+ Giải thích được hiện tượng đồng phân trong hoá hữu cơ

+ Viết được tên các hợp chất hữu cơ theo danh pháp quốc tế và tên thông thường.

+ Trình bày được các phương pháp điều chế chính của các hoá chức hữu cơ cơ bản.

+ Trình bày được cấu tạo, các hoá tính và các phản ứng định tính chính của các hoá chức hữu cơ cơ bản.

- Về kỹ năng:

+ Phân biệt được các hợp chất hữu cơ

+ Gọi tên khoa học được các loại hoá chất, thuốc

+ Trình bày được cấu tạo, tính chất hoá lý, phương pháp điều chế, và ứng dụng của các hợp chất hữu cơ đối với ngành dược

- Về năng lực tự chủ và trách nhiệm:

+ Ý thức được tầm quan trọng của hóa hữu cơ trong ngành Dược

+ Rèn luyện tính kỷ luật trong công việc nâng cao trình độ, tác phong làm việc khoa học.

# Chương 1

## ĐẠI CƯƠNG HÓA HỮU CƠ

### MỤC TIÊU

1. Trình bày được cấu tạo các hợp chất hữu cơ
2. Trình bày được các hiệu ứng điện tử trong hóa hữu cơ
3. Trình bày được các loại đồng phân trong hóa hữu cơ

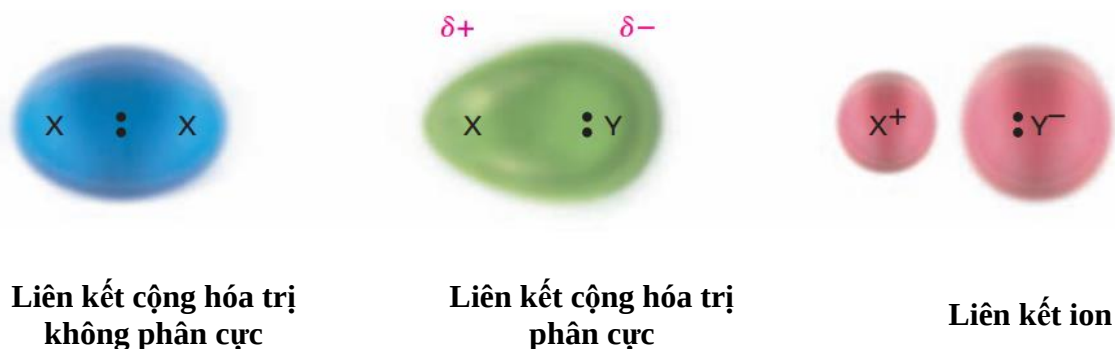
### 1. CẤU TẠO CÁC HỢP CHẤT HỮU CƠ

Hóa học hữu cơ là ngành học chuyên nghiên cứu về các hợp chất của carbon. Khác với một số hợp chất vô cơ đơn giản của carbon như CO, CO<sub>2</sub>, muối carbonat, các hợp chất hữu cơ là các hydrocarbon (có cấu tạo thành mạch) và các dẫn xuất của chúng (có chứa các nguyên tố khác: oxy, nitơ, lưu huỳnh, halogen và một số kim loại).

Sự hình thành các hợp chất hữu cơ là do các liên kết hoá học tạo nên.

#### 1.1. Các kiểu liên kết trong hoá học hữu cơ

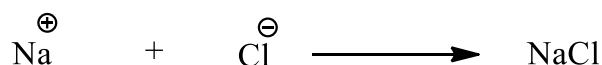
Các liên kết hoá học được tạo thành do tương tác của các điện tử lớp ngoài cùng của các nguyên tử, phân tử hay các tiểu phân khác (gốc, ion, ion gốc) kèm theo sự phân bố lại mật độ điện tử, thiết lập lại và xuất hiện các orbital mới.



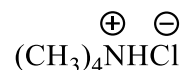
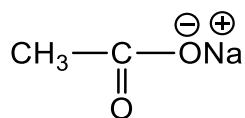
##### 1.1.1. Liên kết dị cực hay liên kết điện hóa trị

Đó là liên kết hình thành do tương tác tĩnh điện giữa hai tiểu phân (hai nguyên tử hay hai nhóm nguyên tử). Điển hình trong loại liên kết này là liên kết ion. Liên kết ion sinh ra do lực hút tĩnh điện giữa các ion mang điện tích trái dấu nhau.

**Ví dụ:**



Liên kết ion ít phổ biến trong hoá học hữu cơ. Ta thường gặp liên kết này trong những phân tử muối của acid carboxylic hay muối amoni.

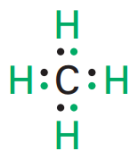


**Tetra methyl amoni clorid**

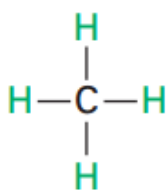
### 1.1.2. Liên kết cộng hóa trị

Đây là liên kết phổ biến và quan trọng nhất trong hoá học hữu cơ. Liên kết này hình thành do sự xen phủ của các orbital nguyên tử (AO) thành orbital phân tử (MO) chung cho cả hai nguyên tử tham gia liên kết.

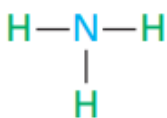
Liên kết cộng hoá trị hình thành giữa hai nguyên tử có độ âm điện giống nhau hoặc ít khác nhau do sự góp chung điện tử giữa chúng. Sự góp chung điện tử tuân theo quy tắc “bộ tám” nghĩa là sự đóng góp tạo ra lớp vỏ điện tử bền vững giống khí trơ.



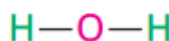
Viết dưới dạng đơn giản:



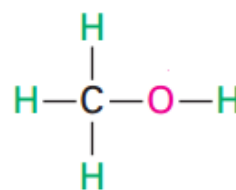
**Methan**



**Amoniac**



**Nước**



**Methanol**

Liên kết cộng hoá trị được phân làm hai loại:

#### – Liên kết cộng hoá trị thuần túy

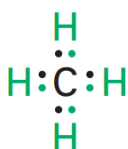
Liên kết này được hình thành trong hai trường hợp:

- Khi hai nguyên tử tương tác thuộc cùng một nguyên tố (có độ âm điện như nhau).

**Ví dụ:** H : H, Cl : Cl, H<sub>3</sub>C : CH<sub>3</sub>

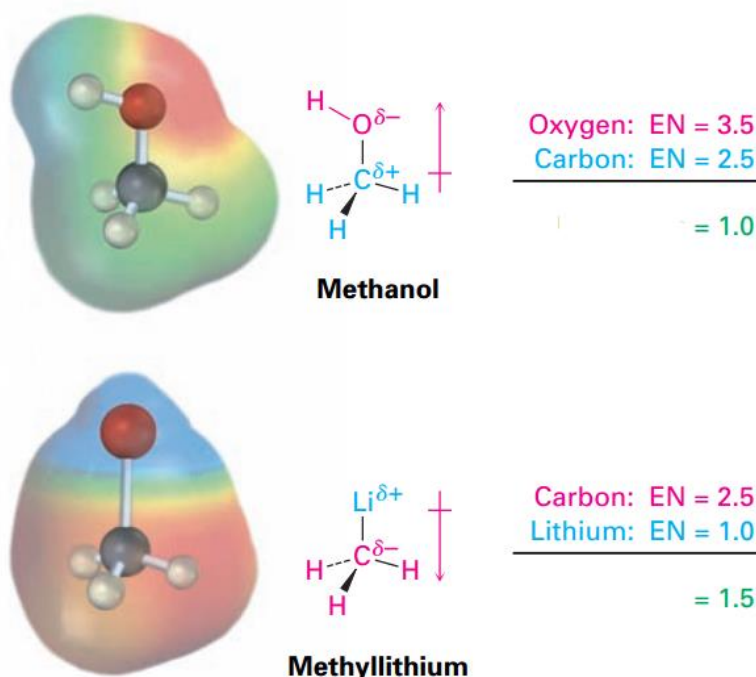
- Khi hai nguyên tử tương tác khác nhau có độ âm điện gần như nhau hoặc phân tử có cấu tạo đối xứng, có trọng tâm điện tích dương và âm trùng nhau.

**Ví dụ:**



#### – Liên kết cộng hoá trị phân cực

Liên kết được hình thành khi các nguyên tử tương tác thuộc những nguyên tố có độ âm điện khác nhau nhưng chưa đủ trở thành liên kết ion (sự phân bố điện tử trong phân tử bất đối xứng, mật độ điện tử chuyển dịch về phía nguyên tử có độ âm điện lớn hơn).

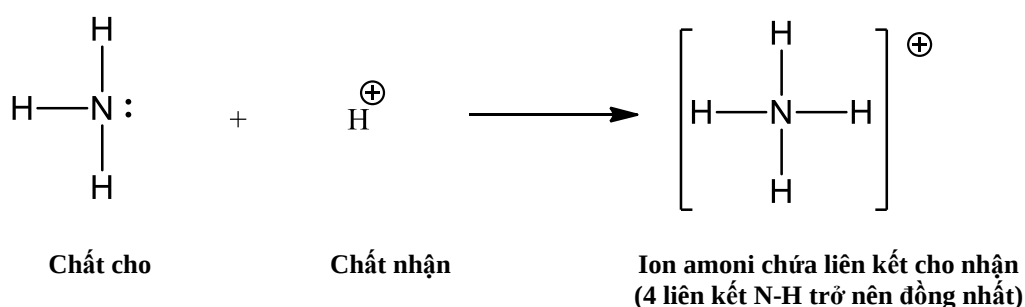


Đặc tính và mức độ phân cực trong phân tử đóng vai trò quan trọng trong khả năng phản ứng của phân tử.

### 1.1.3. Liên kết cho - nhận (hay liên kết phối trí)

Đây là dạng đặc biệt của liên kết cộng hoá trị, được tạo nên bởi một cặp điện tử không phân chia của một nguyên tử (chất cho) và orbital còn trống của một nguyên tử khác (chất nhận)- được gọi là liên kết cho nhận.

**Ví dụ:**



Trong hoá hữu cơ thường biểu diễn liên kết cho nhận theo hai cách:

- Dùng mũi tên từ nguyên tử cho đến nguyên tử nhận:  $\text{R}_3\text{N} \rightarrow \text{O}$ ;  $\text{F}_3\text{B} \leftarrow \text{O}(\text{C}_2\text{O}_5)_2$
- Ghi dấu  $\oplus$  trên nguyên tử cho, dấu  $\ominus$  trên nguyên tử nhận:  $\text{BF}_3^{\oplus}-\text{O}^{\ominus}(\text{C}_2\text{H}_5)_2$

### 1.1.4. Liên kết hydro (cầu hydro)

Đây là liên kết yếu, được hình thành do lực tĩnh điện giữa hydro (đã tham gia liên kết) với một nguyên tử có độ âm điện mạnh có kích thước bé (oxy, nitơ, fluor) ở một phân tử khác hay cùng phân tử.

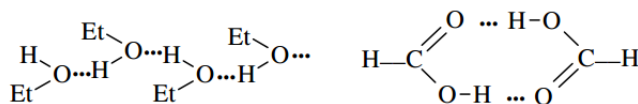


Liên kết hydro được biểu diễn bằng dấu ba chấm (...). Liên kết hydro có thể hình thành giữa các phân tử hay nội phân tử.

Có hai loại liên kết hydro:

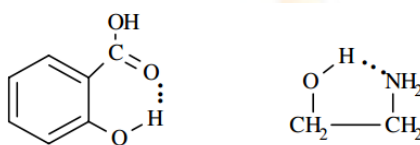
- Liên kết hydro liên phân tử

Liên kết hydro được tạo thành giữa các phân tử với nhau.



- Liên kết hydro nội phân tử

Liên kết hydro được tạo thành trong cùng một phân tử



Liên kết hydro liên quan đến nhiều tính chất vật lý của hợp chất như điểm sôi, độ tan.

| Tính chất                            | Liên kết hydro liên phân tử   | Liên kết hydro nội phân tử                  |
|--------------------------------------|-------------------------------|---------------------------------------------|
| <b>Độ tan</b>                        | Tăng trong dung môi phân cực  | Tăng trong dung môi kém phân cực            |
| <b>T<sub>nc</sub>, T<sub>s</sub></b> | Tăng                          | Ít ảnh hưởng                                |
| <b>Pha lỏng</b>                      | Trong dung môi trơ bị cắt đứt | Không ảnh hưởng                             |
| <b>Độ bền</b>                        | Ít/ Không ảnh hưởng           | Bền vững hơn khi tạo thành vòng 5 và vòng 6 |

## 1.2. Sự tạo chuỗi carbon, cấu trúc không gian của khung carbon. Gốc và nhóm chức.

- Sự tạo chuỗi carbon

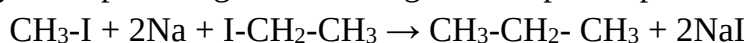
- Những hợp chất hữu cơ đơn giản chỉ chứa một nguyên tử carbon, việc biểu diễn cấu tạo phân tử của nó đơn giản chỉ dựa trên hoá trị của các nguyên tử thành phần và thoả mãn thuyết “bộ tám” mà thôi.

**Ví dụ:** Methan-  $\text{CH}_4$ , Methylclorid -  $\text{CH}_3\text{Cl}$ , Methyl amin-  $\text{CH}_3\text{NH}_2$ ...

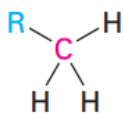
- Mỗi cặp điện tử liên kết được thay bằng một vạch (-). Khi phân tử có từ hai carbon trở lên như ethan, propan.. ( $\text{C}_2\text{H}_6$ ,  $\text{C}_3\text{H}_8$ ...) ta coi như phân tử methan chứa các nhóm thế  $-\text{CH}_3$ ,  $-\text{CH}_2-\text{CH}_3$ ...

$\text{CH}_3-\text{CH}_3$ ,  $\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}_3$ ...

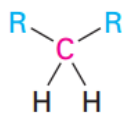
- Quan niệm này được phản ứng Wurtz chứng minh là phù hợp



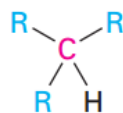
- Đó chính là sự tạo chuỗi hydrocarbon. Bằng cách này người ta đã điều chế được chuỗi hydrocarbon bão hoà đến 70 nguyên tử carbon (heptacontan).
- Trong chuỗi carbon người ta phân biệt:
  - + Carbon gắn với 1 carbon khác là carbon bậc nhất.
  - + Carbon gắn với 2 carbon khác là carbon bậc hai.
  - + Carbon gắn với 3 (hoặc 4) carbon khác là carbon bậc ba (hoặc bốn).



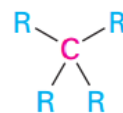
**Carbon bậc I**



**Carbon bậc II**

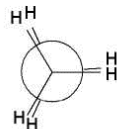
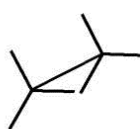


**Carbon bậc III**

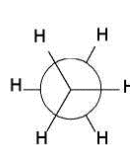
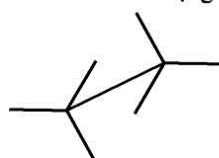


**Carbon bậc IV**

- Nếu thay thế một hay hai nguyên tử hydro của carbon bậc 2 bằng gốc  $-CH_3$  thì thu được chuỗi carbon có mạch nhánh (tương ứng carbon chứa nhóm thế trở thành carbon bậc 3 hoặc 4)
  - Ngoài những chuỗi carbon mạch hở còn có những chuỗi carbon mạch vòng. Sự đóng vòng được thực hiện bằng cách loại hai nguyên tử hydro không gần nhau trong một phân tử.
  - Ngoài những hợp chất vòng carbon còn có những hợp chất có những nguyên tử của nguyên tố khác tham gia tạo vòng (gọi là dị vòng).
- *Cấu trúc không gian của khung carbon*
- Công thức khai triển phẳng không phản ánh đầy đủ cấu trúc thực của chuỗi carbon, cấu trúc thực của chuỗi carbon gắn liền với hai yếu tố:
- Tính định hướng đặc trưng của các orbital. Các góc hoá trị  $109^\circ 28'$  đối với các hợp chất no,  $120^\circ$  đối với các hợp chất ethylenic,  $180^\circ$  đối với các hợp chất acetylenic.
  - Khả năng quay của các nhóm thế xung quanh liên kết đơn. Các nhóm thế có thể ở bất kỳ vị trí nào trong không gian quanh trục liên kết C-C. Hình dạng khác nhau khi các nhóm thế quay xung quanh trục liên kết C-C gọi là cấu dạng. Tình trạng quay tự do không xảy ra trong trường hợp liên kết bội ethylenic và acetylenic.
  - Xét phân tử ethan  $CH_3-CH_3$ . Vì có sự quay tự do của nhóm methyl xung quanh liên kết đơn C-C nên phân tử ethan có vô số cấu dạng khác nhau ứng với thế năng khác nhau, trong đó có hai cấu dạng đáng chú ý.



Cấu dạng che khuất



Cấu dạng xen kẽ

- Cấu dạng che khuất không bền vì hai nguyên tử hydro của hai nhóm methyl ở rất gần nhau, đẩy nhau.
- Cấu dạng xen kẽ bền nhất vì các nguyên tử hydro của hai nhóm methyl ở xa nhau, thuận lợi về mặt năng lượng.
- Sự bền vững của cấu dạng xen kẽ giải thích được hình dạng không gian của các mạch hydrocarbon bão hoà. Mạch hydrocarbon bão hoà tồn tại trong không gian theo một đường gẫy khúc, trong đó các liên kết C-H của các nhóm  $-CH_2-$  kề cận luôn ở cấu dạng xen kẽ.
- Các nhóm chưa no có cách bố trí hoàn toàn khác vì các nguyên tử chung quanh liên kết bội đều nằm trong mặt phẳng, có sự cản quay. Các nhóm chưa no này làm thay đổi cấu dạng của chuỗi carbon.

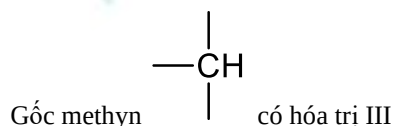
– *Gốc hữu cơ*

Trong hoá hữu cơ thuật ngữ “gốc” được dùng với hai quan niệm: Gốc hydrocarbon và gốc tự do.

- Gốc hydrocarbon: Đó là một nhóm nguyên tử (xuất phát từ hydrocarbon) có một hay nhiều hoá trị còn trống.

**Ví dụ:** Gốc methyl  $-CH_3$  có hoá trị I

Gốc methylen- $CH_2-$  có hoá trị II.



Trong các phản ứng hoá học gốc có thể chuyển từ phân tử này sang phân tử khác. Các gốc hữu cơ thường gặp là:

|           |                                |                    |                                    |           |                                                |
|-----------|--------------------------------|--------------------|------------------------------------|-----------|------------------------------------------------|
| methyl    | $CH_3-$                        | <i>sec</i> -butyl  | $CH_3CH_2CH-$<br>$ $<br>$CH_3$     | neopentyl | $CH_3$<br>$ $<br>$CH_3CCH_2-$<br>$ $<br>$CH_3$ |
| ethyl     | $CH_3CH_2-$                    |                    |                                    | hexyl     | $CH_3CH_2CH_2CH_2CH_2CH_2-$                    |
| propyl    | $CH_3CH_2CH_2-$                |                    |                                    | isohexyl  | $CH_3CHCH_2CH_2CH_2-$<br>$ $<br>$CH_3$         |
| isopropyl | $CH_3CH-$<br>$ $<br>$CH_3$     | <i>tert</i> -butyl | $CH_3C-$<br>$ $<br>$CH_3$          |           |                                                |
| butyl     | $CH_3CH_2CH_2CH_2-$            | pentyl             | $CH_3CH_2CH_2CH_2CH_2-$            |           |                                                |
| isobutyl  | $CH_3CHCH_2-$<br>$ $<br>$CH_3$ | isopentyl          | $CH_3CHCH_2CH_2-$<br>$ $<br>$CH_3$ |           |                                                |

- Gốc tự do: Là nguyên tử hay nhóm nguyên tử có điện tử độc thân. Gốc tự do được hình thành trong quá trình phân cắt đồng ly liên kết cộng hoá trị giữa hai nguyên tử. Thời gian tồn tại của gốc rất ngắn ( $8 \cdot 10^{-3}$  giây). Gốc tự do có năng lượng lớn và khả năng phản ứng cao.
- *Nhóm chức*
- Nhóm chức là nhóm nguyên tử (hay nguyên tử) quyết định tính chất hoá học của hợp chất hữu cơ và là yếu tố đặc trưng nhất của phân tử hữu cơ.

- Một số nhóm chức thường gặp trong hoá hữu cơ

| Tên                   | Cấu trúc                   | Tên cuối        | Ví dụ                                              |
|-----------------------|----------------------------|-----------------|----------------------------------------------------|
| Monophosphat          |                            | <i>phosphat</i> | $\text{CH}_3\text{OPO}_3^{2-}$<br>Methyl phosphat  |
| Amin                  |                            | <i>-amin</i>    | $\text{CH}_3\text{NH}_2$<br>Methylamin             |
| Imin<br>(Schiff base) |                            |                 | $\text{CH}_3\text{C(=NH)CH}_3$<br>Aceton imin      |
| Nitril                | $-\text{C}\equiv\text{N}$  | <i>-nitril</i>  | $\text{CH}_3\text{C}\equiv\text{N}$<br>Ethannitril |
| Nitro                 |                            |                 | $\text{CH}_3\text{NO}_2$<br>Nitromethan            |
| Thiol                 |                            | <i>-thiol</i>   | $\text{CH}_3\text{SH}$<br>Methanthiol              |
| Alken                 |                            | <i>-en</i>      | $\text{H}_2\text{C}=\text{CH}_2$<br>Ethen          |
| Alkyn                 | $-\text{C}\equiv\text{C}-$ | <i>-yn</i>      | $\text{HC}\equiv\text{CH}$<br>Ethyn                |
| Aren                  |                            |                 | <br>Benzen                                         |
| Halid                 | <br>(X = F, Cl, Br, I)     |                 | $\text{CH}_3\text{Cl}$<br>Chloromethan             |
| Alcol                 |                            | <i>-ol</i>      | $\text{CH}_3\text{OH}$<br>Methanol                 |
| Ether                 |                            | <i>ether</i>    | $\text{CH}_3\text{OCH}_3$<br>Dimethyl ether        |

| Tên                      | Cấu trúc | Tên cuối             | Ví dụ                                           |
|--------------------------|----------|----------------------|-------------------------------------------------|
| Acid carboxylic          |          | <i>acid -oic</i>     | $\text{CH}_3\text{COOH}$<br>Acid ethanoic       |
| Ester                    |          | <i>-oat</i>          | $\text{CH}_3\text{COCH}_3$<br>Methyl ethanoat   |
| Amid                     |          | <i>-amid</i>         | $\text{CH}_3\text{CNH}_2$<br>Ethanamid          |
| Anhydrid acid carboxylic |          | <i>Anhydrid -oic</i> | $\text{CH}_3\text{COCH}_3$<br>Anhydrid ethanoic |
| Acyl clorid              |          | <i>-oyl chlorid</i>  | $\text{CH}_3\text{CCl}$<br>Ethanoyl chlorid     |
| Sulfid                   |          | <i>sulfid</i>        | $\text{CH}_3\text{SCH}_3$<br>Dimethyl sulfid    |
| Disulfid                 |          | <i>disulfid</i>      | $\text{CH}_3\text{SSCH}_3$<br>Dimethyl disulfid |
| Carbonyl                 |          |                      |                                                 |
| Aldehyd                  |          | <i>-al</i>           | $\text{CH}_3\text{CH}$<br>Ethanal               |
| Keton                    |          | <i>-on</i>           | $\text{CH}_3\text{CCH}_3$<br>Propanon           |

## 2. CÁC HIỆU ỨNG ĐIỆN TỬ TRONG HÓA HỮU CƠ

Trong hợp chất hữu cơ có nhiều trường hợp tồn tại các nguyên tử không liên kết trực tiếp với nhau, nhưng lại có ảnh hưởng qua lại lẫn nhau làm thay đổi tính chất hoá học, khả năng phản ứng, chiều hướng phản ứng, cơ chế phản ứng.. và đặc biệt là ảnh hưởng đến tính chất acid- base của nhiều hợp chất hữu cơ. ảnh hưởng như vậy gọi là hiệu ứng.

Có hai loại hiệu ứng thường gặp là hiệu ứng không gian và hiệu ứng điện tử. Ta xét kỹ hiệu ứng điện tử.

Trong phân tử do bản chất của các nguyên tử tham gia liên kết mà sự phân bố điện tử trong phân tử không đều. Do độ âm điện của các nguyên tử khác nhau làm cho liên kết bị phân cực, do đó phân tử bị ảnh hưởng phân cực theo. Sự chênh lệch về độ âm điện càng lớn thì độ phân cực càng lớn.

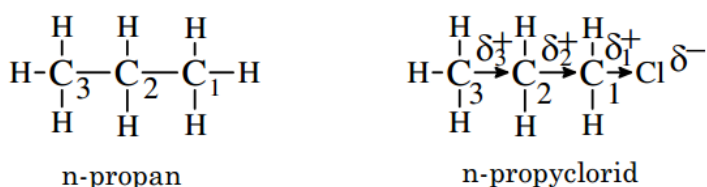
Sự phân cực của liên kết trong phân tử còn phụ thuộc vào các nguyên tử hay nhóm nguyên tử không liên kết trực tiếp, ảnh hưởng này truyền qua hiệu ứng điện tử.

Dựa vào cơ chế chuyển dịch điện tử người ta chia hiệu ứng điện tử thành ba loại: Hiệu ứng cảm ứng, hiệu ứng liên hợp và hiệu ứng siêu liên hợp.

### 2.1. Hiệu ứng cảm ứng

Hiệu ứng cảm ứng (Kí hiệu là I) sinh ra do sự phân cực hoá liên kết (có tính dây chuyền) do một trung tâm ảnh hưởng (hút hoặc đẩy điện tử) gây nên.

**VD:** Phân tử propan  $C_3H_8$



Trong phân tử n- propyl clorid, nguyên tử clo có độ âm điện cao hơn carbon, hút cặp điện tử về phía nó nên mang điện tích âm phần  $\delta^-$ . Nguyên tử  $C_1$  sẽ tích điện dương phần  $\delta^+$ , đến lượt nguyên tử  $C_2$  cũng tích điện dương phần  $\delta_2^+$  nhưng mức độ thấp hơn. Ảnh hưởng này chuyển tới nguyên tử  $C_3$  tích điện dương phần  $\delta_3^+$  nhưng mức độ thấp hơn nữa.

Sự chuyển dịch điện tử (của liên kết  $\sigma$ ) theo mạch liên kết đơn, theo cơ chế cảm ứng tĩnh điện gọi là hiệu ứng cảm ứng. Sự chuyển dịch đó được ký hiệu bằng mũi tên.

#### 2.1.1. Phân loại

Hiệu ứng cảm ứng được phân làm hai loại có hướng ngược nhau. Nếu quy ước lấy nguyên tử hydro trong liên kết C-H của hydrocarbon no có hiệu ứng cảm ứng bằng không ( $I = 0$ ) làm chuẩn thì các nguyên tử hay nhóm nguyên tử hút điện tử mạnh hơn hydro được xem có hiệu ứng cảm ứng âm (-I), còn các nguyên tử hay nhóm nguyên tử đẩy điện tử mạnh hơn hydro sẽ có hiệu ứng cảm ứng dương (+I).



+I



I=0



-I

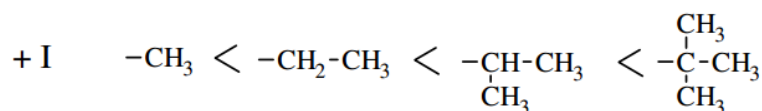
Từ sơ đồ trên ta thấy, khi trong phân tử chứa nhóm thế (nguyên tử hay nhóm nguyên tử) làm phát sinh hiệu ứng cảm ứng thì nguyên tử carbon liên kết với nhóm thế sẽ trở thành cực dương hay cực âm của lưỡng cực.

Độ lớn của hiệu ứng cảm ứng phụ thuộc vào bản chất của nhóm thế gây ảnh hưởng cảm ứng (độ lớn của điện tích, độ âm điện, cấu tạo của nhóm thế...)

### Hiệu ứng cảm ứng +I

Thường thấy ở các nhóm alkyl (R-) và các nhóm mang điện tích âm.

Trong dãy các nhóm alkyl, hiệu ứng cảm ứng +I tăng theo độ phân nhánh hay là bậc của nhóm.



### Hiệu ứng cảm ứng -I

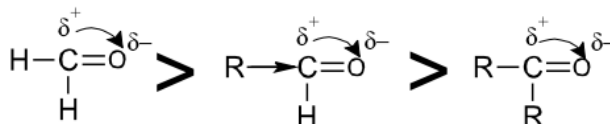
Là hiệu ứng rất phổ biến ở các nhóm không no, các nhóm mang điện tích dương và các nhóm ứng với các nguyên tố có độ âm điện lớn (như halogen, oxy, nito).

Độ âm điện càng tăng thì hiệu ứng cảm ứng -I càng lớn.

### 2.1.2. Ảnh hưởng của hiệu ứng cảm ứng

- Hiệu ứng cảm ứng ảnh hưởng đến tính acid- base của các chất hữu cơ.
  - Các nhóm có hiệu ứng -I làm tăng lực acid còn hiệu ứng +I làm giảm lực acid.  
Lực acid của  $Cl-CH_2-COOH >$  của  $CH_3COOH$ .  
Lực acid của  $CH_3-CH_2-COOH >$  của  $CH_3COOH$
  - Các nhóm có hiệu ứng +I làm tăng lực base, -I làm giảm lực base.  
 $(CH_3)_2NH > CH_3CH_2NH_2 > CH_3NH_2 > NH_3$
- Hiệu ứng cảm ứng ảnh hưởng đến khả năng và chiều hướng của phản ứng.

**Ví dụ:** Khả năng phản ứng cộng vào nhóm carbonyl

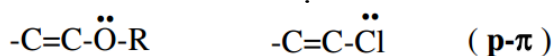


## 2.2. Hiệu ứng liên hợp

### 2.2.1. Hệ thống liên hợp

Hệ thống liên hợp là một hệ thống:

- Các liên kết bội (đôi, ba) luân phiên với liên kết đơn.  
 $C=C-C=C-C=C-(\pi-\pi) \quad C=C-C=C-C=O-(\pi-\pi)$
- Hệ thống chưa các nguyên tử còn cặp điện tử p tự do không liên kết trực tiếp với nguyên tử carbon có liên kết bội



Phân tử chứa hệ thống liên hợp là phân tử liên hợp.

### 2.2.2. Hiệu ứng liên hợp

Sự chuyển dịch của các điện tử  $\pi$ , p trong các hệ thống liên hợp gây ra sự phân bố lại mật độ điện tử trong phân tử gọi là hiệu ứng liên hợp- ký hiệu bằng chữ C (Conjugative effect).

Phân loại: Tùy thuộc vào hướng chuyển dịch  $\pi$  và p hiệu ứng liên hợp có thể âm (-C) hay dương (+C).

- Hiệu ứng liên hợp âm -C
  - Các nhóm không no chứa các nguyên tố có độ âm điện lớn hơn như:  $>C=O$ ,  $>C=NH$ ,  $-C\equiv N$  và các nhóm không chứa carbon như  $-NO_2$ ,  $-SO_3H$ .  
 $-NO_2 > -C\equiv N > -C=C-$
- Hiệu ứng liên hợp dương +C
  - Tất cả các nguyên tử hay nhóm nguyên tử có cặp điện tử tự do liên kết với hệ liên kết bội.
  - Độ lớn của hiệu ứng này tỷ lệ nghịch với độ âm điện và kích thước của nguyên tử có cặp điện tử tự do.  
 $-NH_2 > -OH$   
 $-F > -Cl > -Br > -I$   
 $-O > -OR > -O^+R_2...$

Hiệu ứng liên hợp có những đặc điểm khác hẳn hiệu ứng cảm ứng

- Hiệu ứng liên hợp chỉ có ở các hợp chất không no, hoặc các hệ liên hợp.
- Hiệu ứng liên hợp không bị tắt nhanh theo mạch carbon như hiệu ứng cảm ứng, nó được truyền đi trong toàn bộ hệ liên hợp.

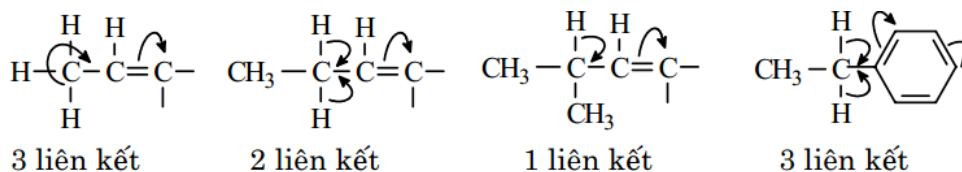
Ảnh hưởng của hiệu ứng liên hợp

- So với hiệu ứng cảm ứng, hiệu ứng liên hợp gây ảnh hưởng lớn hơn đến tính chất lý học và hoá học của các hợp chất hữu cơ
  - Hiệu ứng liên hợp ảnh hưởng đến tính acid- base của các hợp chất hữu cơ.
  - Hiệu ứng liên hợp ảnh hưởng đến khả năng và chiều hướng của phản ứng.
- Trên nhân thơm chứa nhóm thế toả hiệu ứng +C làm phản ứng thế xảy ra dễ dàng và phản ứng thế xảy ra ở các vị trí ortho và para. Nếu nhóm thế toả hiệu ứng -C thì phản ứng thế xảy ra khó khăn và phản ứng thế xảy ra ở vị trí meta.

### 2.2.3. Hiệu ứng siêu liên hợp

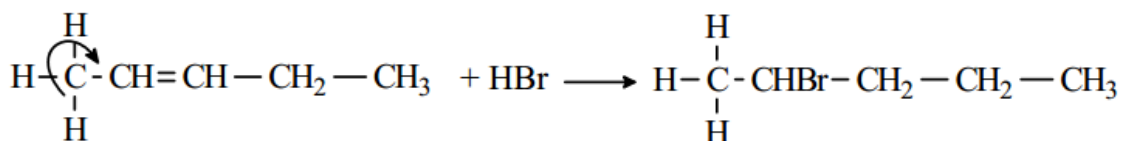
Ngoài sự liên hợp  $\pi-\pi$  và  $p-\pi$  đã nêu ở trên còn có sự liên hợp  $\sigma-\pi$  giữa các orbital  $\sigma$  của các liên kết C—H trong nhóm alkyl và orbital  $\pi$  của nối đôi, nối ba hay vòng thơm.



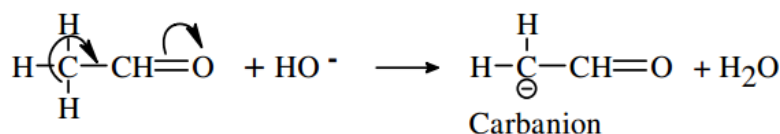


Sự tương tác liên hợp giữa orbital  $\sigma$  của liên kết C—H với orbital  $\pi$  của liên kết đôi, ba hoặc hệ thống liên hợp gọi là **hiệu ứng siêu liên hợp**.

- Hiệu ứng siêu liên hợp có ký hiệu là H.
- Hiệu ứng siêu liên hợp không những làm thay đổi bản chất của liên kết đôi mà còn làm thay đổi cả tính chất của liên kết đơn C—H.
- Hiệu ứng siêu liên hợp làm thay đổi hướng cộng hợp vào liên kết đôi.



- Hiệu ứng siêu liên hợp ảnh hưởng đến tính chất linh động của liên kết C—H trong gốc alkyl.



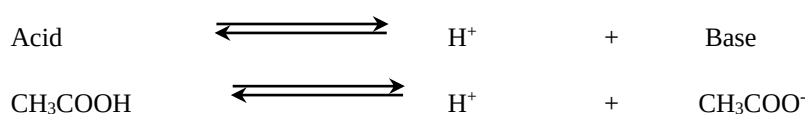
- Hiệu ứng siêu liên hợp tăng theo số lượng liên kết C—H ở vị trí  $\alpha$ .  
 $\text{CH}_3^- > \text{CH}_3\text{CH}_2^- > (\text{CH}_3)_2\text{CH}^- > (\text{CH}_3)_3\text{C}^-$
- Hiệu ứng siêu liên hợp và hiệu ứng cảm ứng +I luôn xảy ra cùng hướng.
- Hiện tượng phân bố lại mật độ điện tử còn có thể trong các trường hợp hệ thống carbanion và carbocation.

#### 2.2.4. Khái niệm về acid- base trong hợp chất hữu cơ

Khái niệm acid- base liên quan đến tính chất và phản ứng của các hợp chất hữu cơ.

- Trước kia, quan niệm acid là những chất khi tan trong nước cho ion  $\text{H}^+$ , còn base là những chất khi tan trong nước cho ion  $\text{OH}^-$  (Arrhenius). Sau này khái niệm mở rộng hơn: acid là những chất có khả năng cho proton, còn base là những chất có khả năng kết hợp với proton (Bronsted-Lowry)

**Ví dụ**



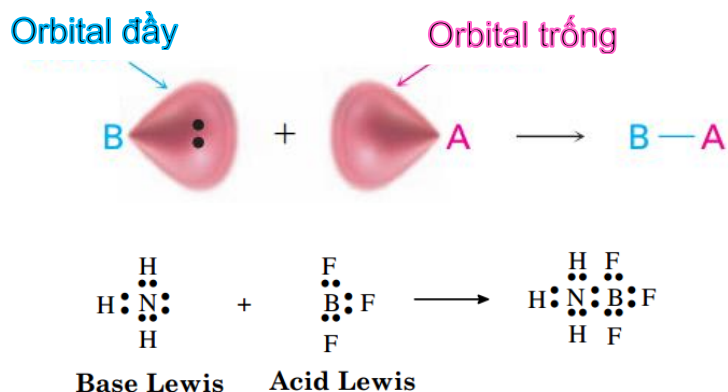
- Lewis đã đưa ra một khái niệm tổng quát hơn về acid - base dựa vào cấu tạo điện tử của chúng. Theo Lewis, acid là các ion hoặc phân tử trung hoà có khả năng tạo liên kết với

đôi điện tử tự do của base, còn base là các ion hay phân tử trung hoà có đôi điện tử tự do có khả năng tạo liên kết.

+ Các chất sau đây là những base Lewis:  $R-\ddot{O}-R$  ;  $R-\ddot{N}H_2$  ;  $R-\ddot{O}H$  ;  $\ddot{N}H_3$  ;  $HO^-$  ;  $RO^-$

+ Các chất sau đây là những acid Lewis:  $BF_3$ ,  $AlCl_3$ ,  $FeCl_3$ ,  $ZnCl_2$ ,  $SO_3$ ,  $NH_4^+$

+ Phản ứng acid- base là quá trình chuyển điện tử từ base sang acid.



Các yếu tố ảnh hưởng đến tính acid- base của hợp chất hữu cơ:

- Cấu trúc điện tử của phân tử.
- Phân tử hữu cơ có chứa các nguyên tử hay nhóm nguyên tử có hiệu ứng cảm ứng, hiệu ứng liên hợp, hiệu ứng siêu liên hợp.

## Chương 2

# HYDROCARON

### MỤC TIÊU

1. Trình bày được cấu tạo, danh pháp, đồng phân, phương pháp điều chế, hoá tính của các hydrocarbon mạch hở.
2. Trình bày được danh pháp, đồng phân cyclanic và khái niệm về steroid.
3. Trình bày được định nghĩa, phân loại, cấu trúc, hoá tính của các terpen.
4. Trình bày được định nghĩa, phân loại, cấu trúc, hoá tính của các hydrocarbon thơm

### 1. HYDROCARBON MẠCH HỖ

Hydrocarbon là những hợp chất hữu cơ mà phân tử được cấu tạo bởi hai nguyên tố Carbon và Hydro

Hydrocarbon có mạch hở được chia làm hai loại

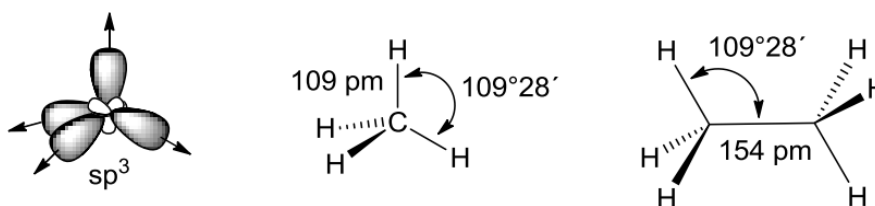
- Hydrocarbon no (alkan) chỉ có liên kết đơn trong phân tử
- Hydrocarbon không no có chứa liên kết đôi (alken) hoặc liên kết ba (alkyn)

#### 1.1. Alkan

##### 1.1.1. Cấu tạo

Alkan (còn gọi là parafin) là hydrocarbon mạch hở có công thức chung là  $C_nH_{2n+2}$ .

Trong phân tử alkan tất cả các nguyên tử carbon đều ở trạng thái lai hoá  $sp^3$  với góc hoá trị  $109^\circ 28'$ . Các liên kết C—C là 82,6 kcal/mol và C—H là 98,7 kcal/mol. Độ dài của liên kết C—C là 1,54 Å và C—H là 1,1 Å.



Dãy đồng đẳng của methan:  $CH_4$ ,  $C_2H_6$ ,  $C_3H_8$ ,...

##### 1.1.2. Đồng phân

Các alkan có thể có các dạng đồng phân cấu tạo, cấu dạng và đồng phân quang học.

Loại đồng phân phổ biến nhất của alkan là đồng phân cấu tạo, đó là các đồng phân do mạch carbon. Từ  $C_4H_{10}$  mạch carbon có thể phân nhánh tạo ra các đồng phân. Số đồng phân alkan tăng nhanh theo số nguyên tử carbon trong phân tử.

Alkan có từ 2C trở lên có những cấu dạng khác nhau do sự quay của các nguyên tử hay nhóm nguyên tử xung quanh liên kết đơn C-C

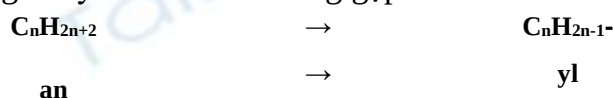
Nếu phân tử alkan bất đối xứng (có carbon bất đối) thì có đồng phân quang học.

### 1.1.3. Danh pháp quốc tế UIPAC

- Tên các alkan không phân nhánh và gốc alkyl
  - Tên chữ số Hy Lạp tương ứng số carbon trong phân tử [pent -(5), hex-(6), hept-(7)..] + thêm đuôi “an”

| Số lượng carbon | Tên    | Công thức                      | Số lượng carbon | Tên        | Công thức                       |
|-----------------|--------|--------------------------------|-----------------|------------|---------------------------------|
| 1               | Methan | CH <sub>4</sub>                | 9               | Nonan      | C <sub>9</sub> H <sub>20</sub>  |
| 2               | Ethan  | C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>  | 10              | Decan      | C <sub>10</sub> H <sub>22</sub> |
| 3               | Propan | C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>  | 11              | Undecan    | C <sub>11</sub> H <sub>24</sub> |
| 4               | Butan  | C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> | 12              | Dodecan    | C <sub>12</sub> H <sub>26</sub> |
| 5               | Pentan | C <sub>5</sub> H <sub>12</sub> | 13              | Tridecan   | C <sub>13</sub> H <sub>28</sub> |
| 6               | Hexan  | C <sub>6</sub> H <sub>14</sub> | 20              | Icosan     | C <sub>20</sub> H <sub>42</sub> |
| 7               | Heptan | C <sub>7</sub> H <sub>16</sub> | 30              | Triacontan | C <sub>30</sub> H <sub>62</sub> |
| 8               | Octan  | C <sub>8</sub> H <sub>18</sub> |                 |            |                                 |

- Tên gọi các gốc hydrocarbon thường gặp



+ Tên một số nhóm alkyl mạch thẳng

| Alkan                                                                           | Tên    | Nhóm alkyl                                                                       | Tên gốc alkyl (Viết tắt) |
|---------------------------------------------------------------------------------|--------|----------------------------------------------------------------------------------|--------------------------|
| CH <sub>4</sub>                                                                 | Methan | -CH <sub>3</sub>                                                                 | Methyl (Me)              |
| CH <sub>3</sub> CH <sub>3</sub>                                                 | Ethan  | -CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>                                                 | Ethyl (Et)               |
| CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>                                 | Propan | -CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>                                 | Propyl (Pr)              |
| CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>                 | Butan  | -CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>                 | Butyl (Bu)               |
| CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub> | Pentan | -CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub> | Pentyl, or amyl          |

+ Tên một số nhóm alkyl có 3C, 4C

