

ỦY BAN NHÂN DÂN TỈNH CÀ MAU
TRƯỜNG CAO ĐẲNG Y TẾ



GIÁO TRÌNH
MÔN HỌC: HÓA HỌC HỮU CƠ
NGÀNH: DƯỢC
TRÌNH ĐỘ: CAO ĐẲNG

*Ban hành kèm theo Quyết định số: 19/QĐ-CDYT ngày 25 tháng 01 năm 2022
của Hiệu trưởng Trường Cao đẳng Y tế Cà Mau.*

LƯU HÀNH NỘI BỘ
Cà Mau, 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

Hóa hữu cơ là một trong những môn khoa học cơ sở quan trọng trong chương trình đào tạo Dược sĩ cao đẳng.

Môn Hóa hữu cơ trang bị cho sinh viên kiến thức cơ sở về hóa hữu cơ như liên kết hóa học, hiệu ứng điện tử, phân loại trong hóa hữu cơ và kiến thức về các hóa chức hữu cơ chính như cấu tạo, danh pháp, đồng phân, tính chất hóa học và một số chất hữu cơ điển hình được ứng dụng trong hóa học, đời sống và trong Y – Dược, từ đó vận dụng được kiến thức để làm bài tập, giải thích được một số vấn đề thực tế liên quan về chuyên môn và vận dụng vào các môn học chuyên ngành như Hóa sinh, Hóa dược, Kiểm nghiệm, Dược liệu, Bào chế,...

Môn Hóa hữu cơ gồm 2 đơn vị học trình (30 tiết), trong đó có 1 đơn vị học trình lý thuyết (15 tiết) và 1 đơn vị học trình thực hành dạng bài tập (15 tiết). Môn Hóa hữu cơ được học trong kỳ 1 của năm thứ nhất.

Nội dung của giáo trình bao gồm các chương/bài sau:

Chương 1. Cấu trúc điện tử của nguyên tử carbon và sự tạo thành các liên kết trong hợp chất hữu cơ.

Chương 2. Cấu trúc phân tử hợp chất hữu cơ đồng phân và cấu dạng

Chương 3. Các phương pháp hóa học và vật lý xác định cấu trúc hợp chất hữu cơ

Chương 4. Alcol, phenol

Chương 5. Aldehyd, ceton, quinon

Chương 6. Acid carboxylic

Chương 7. Dẫn xuất của acid carboxylic

Chương 8. Hợp chất dị vòng

Trong quá trình biên soạn, chúng tôi lấy giáo trình Hóa học hữu cơ, tập 1, 2 (Sách đào tạo dược sĩ ĐH, 2017), Chủ biên GS.TS. Trần Mạnh Bình, PGS.TS. Nguyễn Quang Đạt và giáo trình Thực tập Hóa hữu cơ của Trường ĐH Dược HN (2016), làm tài liệu tham khảo.

Tuy nhiên, lần đầu biên soạn không thể tránh khỏi những thiếu sót. Chúng tôi mong nhận được góp ý từ các nhà giáo, các nhà khoa học, các bạn đọc và các sinh viên để cuốn sách được sửa chữa, bổ sung hoàn thiện hơn.

Cà Mau, ngày tháng năm 2022

CHỦ BIÊN SOẠN

1. Đinh Thuý Lan

2. Huỳnh Công Đoàn

TaiLieu.vn

MỤC LỤC

<u>TUYÊN BỐ BẢN QUYỀN.....</u>	<u>2</u>
<u>LỜI GIỚI THIỆU.....</u>	<u>2</u>
<u>GIÁO TRÌNH MÔN HỌC.....</u>	<u>6</u>
<u>CHƯƠNG 1. CẤU TRÚC ĐIỆN TỬ CỦA NGUYÊN TỬ CARBON VÀ ..</u>	<u>12</u>
<u>SỰ TẠO THÀNH LIÊN KẾT TRONG HỢP CHẤT HỮU CƠ.....</u>	<u>12</u>
<u>CHƯƠNG 2. CẤU TRÚC PHÂN TỬ HỢP CHẤT HỮU CƠ ĐỒNG PHÂN</u>	
<u>VÀ CẤU DẠNG.....</u>	<u>25</u>
<u>CHƯƠNG 3. CÁC PHƯƠNG PHÁP HOÁ HỌC VÀ VẬT LÝ XÁC ĐỊNH</u>	
<u>CẤU TRÚC HỢP CHẤT HỮU CƠ.....</u>	<u>44</u>
<u>CHƯƠNG 4. ALCOL, PHENOL</u>	<u>54</u>
<u>CHƯƠNG 5. ALDEHYD, CETON, QUINON.....</u>	<u>78</u>
<u>CHƯƠNG 6. ACID CARBOXYLIC VÀ CÁC DẪN CHẤT.....</u>	<u>99</u>
<u>CHƯƠNG 7. DẪN XUẤT CỦA ACID CARBOXYLIC.....</u>	<u>114</u>
<u>CHƯƠNG 8. HỢP CHẤT DỊ VÒNG.....</u>	<u>129</u>
<u>TÀI LIỆU THAM KHẢO.....</u>	<u>143</u>

GIÁO TRÌNH MÔN HỌC

1. Tên môn học: Hóa Hữu cơ

2. Mã môn học: MH19

Thời gian thực hiện môn học: 30 giờ (Lý thuyết: 15 giờ; Thực hành, thí nghiệm, thảo luận, bài tập: 15 giờ; Kiểm tra: 02 giờ).

3. Vị trí, tính chất của môn học:

3.1. Vị trí: Môn Hóa hữu cơ nằm trong khối kiến thức cơ sở ngành.

3.2. Tính chất: Giáo trình cung cấp kiến thức, kỹ năng và năng lực tự chủ và trách nhiệm cho người học liên quan đến các hợp chất hữu cơ có nhiều ứng dụng trong Y – Dược. Qua đó, người học đang học tập tại trường sẽ:

(1) có bộ giáo trình phù hợp với chương trình đào tạo của trường;

(2) dễ dàng tiếp thu cũng như vận dụng các kiến thức và kỹ năng được học vào môi trường học tập và thực tế lâm sàng.

3.3. Ý nghĩa và vai trò của môn học: Môn Hóa hữu cơ trang bị cho sinh viên kiến thức cơ sở về hóa hữu cơ như liên kết hóa học, hiệu ứng điện tử, phân loại trong hóa hữu cơ và kiến thức về các hóa chức hữu cơ chính như cấu tạo, danh pháp, đồng phân, phương pháp điều chế, hoá tính và các phản ứng định tính chính, các chất điển hình được ứng dụng trong hóa học, đời sống và trong Y – Dược, từ đó vận dụng được kiến thức để làm bài tập, giải thích được một số vấn đề thực tế liên quan về chuyên môn và vận dụng vào các môn học chuyên ngành như Hóa sinh, Hóa dược, Kiểm nghiệm, Dược liệu, Bào chế,...

4. Mục tiêu môn học

4.1. Về kiến thức

A1. Trình bày được các loại liên kết hóa học, hiệu ứng điện tử, phân loại trong hợp chất hữu cơ.

A2. Trình bày được cấu tạo, danh pháp, đồng phân, tính chất hóa học và một số chất hữu cơ điển hình được ứng dụng trong hóa học, đời sống và trong Y – Dược.

4.2. Về kỹ năng

B1. Vận dụng được kiến thức lý thuyết để làm bài tập liên quan.

B2. Vận dụng được kiến thức lý thuyết giải thích được một số vấn đề thực tế liên quan về chuyên môn và vận dụng vào các môn học chuyên ngành như Hóa sinh, Hóa dược, Kiểm nghiệm, Dược liệu, Bào chế, ...

4.3. Về năng lực tự chủ và trách nhiệm

C1. Thể hiện được năng lực tự học, tự nghiên cứu trong học tập.

C2. Chịu trách nhiệm về kết quả học tập của bản thân, sự chính xác trong công tác chuyên môn sau này.

5. Nội dung môn học

STT	TÊN BÀI GIẢNG	SỐ TIẾT			CÁN BỘ GIẢNG	GHI CHÚ
		LT	TH	TS		
1	Chương 1: Cấu trúc điện tử của nguyên tử carbon và sự tạo thành các liên kết trong hợp chất hữu cơ.	2	2	4		
2	Chương 2: Cấu trúc phân tử hợp chất hữu cơ đồng phân và cấu dạng	2	2	4		
3	Chương 3: Các phương pháp hóa học và vật lý xác định cấu trúc hợp chất hữu cơ	2	2	4		
Kiểm tra thường xuyên						
4	Chương 4: Alcol và Phenol	2	2	4		
5	Chương 5: Andehyd, Ceton và Quinon	2	2	4		
Kiểm tra định kỳ						
6	Chương 6: Acid carboxylic	2	2	4		
7	Chương 7: Dẫn xuất của acid carboxylic	2	2	4		

STT	TÊN BÀI GIẢNG	SỐ TIẾT			CÁN BỘ GIẢNG	GHI CHÚ
		LT	TH	TS		
8	Chương 8. Hợp chất dị vòng	1	1	2		
Thi kết thúc môn học						
	TỔNG	15	15	30		

6. Điều kiện thực hiện môn học:

6.1. Phòng học Lý thuyết/Thực hành: Đáp ứng phòng học chuẩn.

6.2. Trang thiết bị dạy học: Máy vi tính, máy chiếu projector, phấn, bảng.

6.3. Học liệu, dụng cụ, mô hình, phương tiện: Giáo trình.

6.4. Các điều kiện khác: mạng Internet.

7. Nội dung và phương pháp đánh giá:

7.1. Nội dung:

- Kiến thức: Đánh giá tất cả nội dung đã nêu trong mục tiêu kiến thức.
- Kỹ năng: Đánh giá tất cả nội dung đã nêu trong mục tiêu kỹ năng.
- Năng lực tự chủ và trách nhiệm: Trong quá trình học tập, người học cần:

+ Nghiên cứu bài trước khi đến lớp.

+ Chuẩn bị đầy đủ tài liệu học tập.

+ Tham gia đầy đủ thời lượng môn học.

+ Nghiêm túc trong quá trình học tập.

7.2. Phương pháp:

7.2.1. Cách đánh giá

- Áp dụng quy chế đào tạo Cao đẳng hệ chính quy ban hành kèm theo Thông tư số 09/2017/TT-LĐTBXH, ngày 13/3/2017 của Bộ trưởng Bộ Lao động - Thương binh và Xã hội.

- Hướng dẫn thực hiện quy chế đào tạo áp dụng tại Trường Cao đẳng Y tế Cà Mau như sau:

Điểm đánh giá	Trọng số
+ Điểm kiểm tra thường xuyên (Hệ số 1)	40%
+ Điểm kiểm tra định kỳ (Hệ số 2)	
+ Điểm thi kết thúc môn học	60%

7.2.2. Phương pháp đánh giá

Phương pháp đánh giá	Phương pháp tổ chức	Hình thức kiểm tra	Chuẩn đầu ra đánh giá	Số cột	Thời điểm kiểm tra
Thường xuyên	Viết	Tự luận cải tiến	A1, A2, B1, B2, C1, C2	1	Sau 12 giờ. (sau khi học xong bài 3)
Định kỳ	Trắc nghiệm	Trắc nghiệm	A1, A2, B1, B2, C1, C2	1	Sau 20 giờ (sau khi học xong bài 5)
Kết thúc môn học	Trắc nghiệm	Trắc nghiệm	A1, A2, B1, B2, C1, C2	1	Sau 30 giờ

7.2.3. Cách tính điểm

- Điểm đánh giá thành phần và điểm thi kết thúc môn học được chấm theo thang điểm 10 (từ 0 đến 10), làm tròn đến một chữ số thập phân.

- Điểm môn học là tổng điểm của tất cả điểm đánh giá thành phần của môn học nhân với trọng số tương ứng. Điểm môn học theo thang điểm 10 làm tròn đến một chữ số thập phân.

8. Hướng dẫn thực hiện môn học

8.1. Phạm vi, đối tượng áp dụng: Môn học được áp dụng cho đối tượng sinh viên Cao đẳng Dược hệ chính quy học tập tại Trường CDYT Cà Mau.

8.2. Phương pháp giảng dạy, học tập môn học

8.2.1. Đối với người dạy

- + Lý thuyết: Thuyết trình, động não, thảo luận nhóm, làm việc nhóm, giải quyết tình huống.
- + Thực hành, bài tập: Thảo luận nhóm.
- + Hướng dẫn tự học theo nhóm: Nhóm trưởng phân công các thành viên trong nhóm tìm hiểu, nghiên cứu theo yêu cầu nội dung trong bài học, cả nhóm thảo luận, trình bày nội dung, ghi chép và viết báo cáo nhóm.

8.2.2. Đối với người học

Người học phải thực hiện các nhiệm vụ như sau:

- Nghiên cứu kỹ bài học tại nhà trước khi đến lớp. Các tài liệu tham khảo sẽ được cung cấp nguồn trước khi người học vào học môn học này (trang web, thư viện, tài liệu...)
- Tham dự tối thiểu 70% các buổi giảng lý thuyết. Nếu người học vắng >30% số tiết lý thuyết phải học lại môn học mới được tham dự kì thi lần sau.
- Tự học và thảo luận nhóm: là một phương pháp học tập kết hợp giữa làm việc theo nhóm và làm việc cá nhân. Một nhóm gồm 8-10 người học sẽ được cung cấp chủ đề thảo luận trước khi học lý thuyết, thực hành. Mỗi người học sẽ chịu trách nhiệm về 1 hoặc một số nội dung trong chủ đề mà nhóm đã phân công để phát triển và hoàn thiện tốt nhất toàn bộ chủ đề thảo luận của nhóm.
- Tham dự đủ các bài kiểm tra thường xuyên, định kỳ.
- Tham dự thi kết thúc môn học.
- Chủ động tổ chức thực hiện giờ tự học.

9. Tài liệu tham khảo

[1]. **Bộ Lao động, Thương binh và Xã hội (2018)**, Thông tư số 54/2018/TT-BLĐTBXH ngày 28/12/2018 của Bộ Lao động, Thương binh và Xã hội về việc quy định khối lượng kiến thức tối thiểu yêu cầu về năng lực mà người học đạt được sau khi tốt nghiệp trình độ trung cấp, trình độ cao đẳng các ngành, nghề thuộc lĩnh vực sức khỏe và dịch vụ xã hội.

- [2]. **Chủ biên GS.TS. Trần Mạnh Bình, PGS.TS. Nguyễn Quang Đạt (2017).** *Hóa học hữu cơ, tập 1, 2 (Sách đào tạo dược sĩ ĐH)*, NXB Y học.
- [3]. **Trường ĐH Dược HN (2016).** *Thực tập Hóa hữu cơ*.
- [4] **PGS.TS. Trương Thế Kỹ.** Hóa hữu cơ , NXB Y học Hà Nội, 2006.
- [5] **Ths. Nguyễn Ngọc Yến.** Giáo trình hóa học hữu cơ, Đại Học Tây Đô, 2014.
- [6] **PGS. TS. Thái Doãn Tĩnh.** Cơ sở hóa học hữu cơ, NXB Khoa học và Kỹ thuật Hà Nội, 2005.
- [7] **Trần Quốc Sơn.** Cơ sở lý thuyết hóa hữu cơ, NXB Giáo dục, 1974

CHƯƠNG 1. CẤU TRÚC ĐIỆN TỬ CỦA NGUYÊN TỬ CARBON VÀ SỰ TẠO THÀNH LIÊN KẾT TRONG HỢP CHẤT HỮU CƠ

❖ GIỚI THIỆU CHƯƠNG 1

Chương 1 là chương giới thiệu tổng quan về một số kiến thức chung trong Hóa hữu cơ để người học có được kiến thức nền tảng và vận dụng được kiến thức đã học vào vào sử dụng hiệu quả các chất hữu cơ trong Y – Dược.

❖ MỤC TIÊU CHƯƠNG 1

Sau khi học xong chương này, người học có khả năng:

➤ Về kiến thức:

1. Trình bày được cấu tạo của hợp chất hữu cơ.
2. Giải thích được ảnh hưởng của các hiệu ứng điện tử đến một số tính chất của các hợp chất hữu cơ.
3. Viết được đồng phân của một số hợp chất hữu cơ.

➤ Về kỹ năng:

1. Vận dụng được kiến thức để làm bài tập về phản đại cương hoá hữu cơ.
2. Vận dụng được kiến thức giải thích một số vấn đề thực tế liên quan về phản đại cương hoá hữu cơ.

➤ Về năng lực tự chủ và trách nhiệm:

1. Thể hiện được năng lực tự học, tự nghiên cứu trong học tập.
2. Chịu trách nhiệm về kết quả học tập của bản thân, sự chính xác trong công tác chuyên môn sau này.

❖ PHƯƠNG PHÁP GIẢNG DẠY VÀ HỌC TẬP CHƯƠNG 1

- Đối với người dạy: sử dụng phương pháp giảng dạy tích cực (diễn giảng, vấn đáp, dạy học theo vấn đề); yêu cầu người học thực hiện câu hỏi thảo luận và bài tập chương 1 (cá nhân hoặc nhóm).
- Đối với người học: chủ động đọc trước giáo trình (Chương 1) trước buổi học; hoàn thành đầy đủ câu hỏi thảo luận chương 1 theo cá nhân hoặc nhóm và nộp lại

cho người dạy đúng thời gian quy định.

❖ ĐIỀU KIỆN THỰC HIỆN CHƯƠNG 1

- Phòng học chuyên môn hóa/nhà xưởng: Phòng học lý thuyết. - Trang thiết bị máy móc: Máy chiếu và các thiết bị dạy học khác.
- Học liệu, dụng cụ, nguyên vật liệu: Chương trình môn học, giáo trình, tài liệu tham khảo, giáo án, phim ảnh, và các tài liệu liên quan.
- Các điều kiện khác: Không có.

❖ KIỂM TRA VÀ ĐÁNH GIÁ CHƯƠNG 1 - Nội dung:

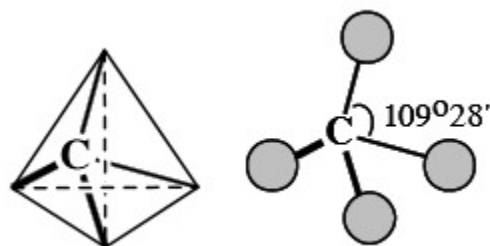
- ✓ *Kiến thức*: Kiểm tra và đánh giá tất cả nội dung đã nêu trong mục tiêu kiến thức.
 - ✓ *Kỹ năng*: Đánh giá tất cả nội dung đã nêu trong mục tiêu kỹ năng.
 - ✓ *Năng lực tự chủ và trách nhiệm*: Trong quá trình học tập, người học cần:
 - + Nghiên cứu bài trước khi đến lớp.
 - + Chuẩn bị đầy đủ tài liệu học tập.
 - + Tham gia đầy đủ thời lượng môn học.
 - + Nghiêm túc trong quá trình học tập.
- Phương pháp kiểm tra đánh giá:**
- ✓ *Điểm kiểm tra thường xuyên*: không có.
 - ✓ *Kiểm tra định kỳ lý thuyết*: không có.

NỘI DUNG CHƯƠNG 1

1. CẤU TRÚC ĐIỆN TỬ (ELECTRON) CỦA NGUYÊN TỬ CARBON

1.1. Thuyết carbon tứ diện.

Nguyên tử carbon có 4 hóa trị. Bốn hóa trị của carbon hướng ra bốn đỉnh của một tứ diện. Tâm của tứ diện là nguyên tử carbon.

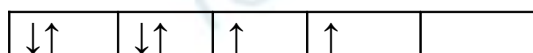


Các góc hóa trị ở tâm đều bằng nhau và bằng $109^{\circ}28'$. Khi nguyên tử carbon liên kết với 4 nguyên tử hoặc 4 nhóm thế đồng nhất ta được một tứ diện đều.

1.2. Cấu trúc điện tử của nguyên tử carbon.

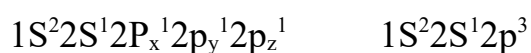
1.2.1. Carbon ở trạng thái cơ bản

Carbon có cấu hình điện tử $1S^22S^22p^2$

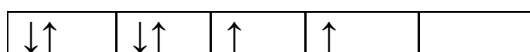


Hai điện tử độc thân p_x và p_y , còn một orbital $2p_z$ trống không có điện tử.

1.2.2. Carbon ở trạng thái kích thích C^*



Carbon hấp thu năng lượng 60 – 70 kcal/mol, một điện tử $2S^2$ chuyển lên trạng thái 2p (orbital $2p_z$).



Carbon có cấu hình điện tử $1S^22S^12p^3$ là carbon kích thích.

Kết quả là carbon có 4 điện tử đơn độc tạo liên kết. Carbon luôn có hóa trị 4. Bốn điện tử của carbon kích thích có năng lượng khác nhau do đó các liên kết của carbon phải khác nhau. Thực tế phân tử metan có 4 liên kết C – H hoàn toàn giống nhau.

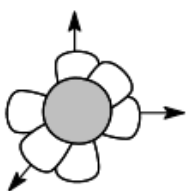
1.2.3. Carbon ở trạng thái lai hóa

Khi tạo thành các liên kết, orbital 2s và một số orbital 2p có khả năng xen phủ cao hơn do đó liên kết được hình thành cũng bền hơn. Sự tổ hợp đó được gọi là sự lai hóa.

- Lai hóa sp^3

Kiểu lai hóa thứ nhất gọi là lai hóa sp^3 (còn gọi là lai hóa tứ diện).

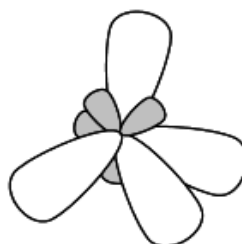
Một orbital 2s và 3 orbital p tổ hợp với nhau tạo thành 4 orbital lai hóa sp^3 .



Sự tổ hợp 2s và 2p



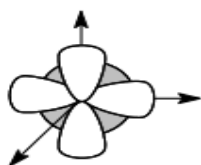
Orbital lai hoá sp



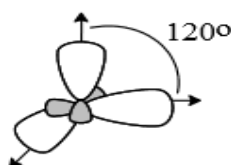
Carbon lai hoá sp^3

- Lai hóa sp^2

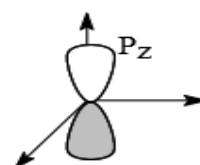
Sự tổ hợp orbital 2s với 2 orbital 2p ($2p_x$, $2p_y$) tạo thành 3 orbital lai hóa sp^2 hay còn gọi là lai hóa tam giác.



Sự tổ hợp 2s và 2p



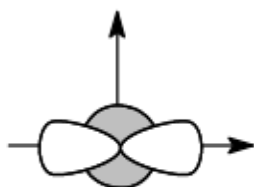
Carbon lai hoá sp^2



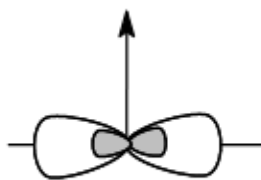
Orbital $2p_z$ không lai hoá

- Lai hóa sp

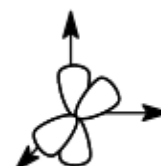
Tổ hợp một orbital s và một orbital $2p_x$ tạo thành 2 orbital lai hóa sp với khả năng xen phủ tương đối hay còn gọi là lai hóa thẳng, góc tạo bởi trục đối xứng của 2 orbital là 180° .



Sự tổ hợp 2s và 2p



Orbital lai hoá sp



2 Orbital $2p_y$ và $2p_z$

Sự lai hóa giữa orbital s và p cũng xảy ra trong nguyên tử oxy, nitơ,...

2. SỰ TẠO THÀNH LIÊN KẾT

2.1. Sự tạo thành liên kết cộng hóa trị - Liên kết σ và liên kết π

Liên kết được tạo thành do sự xen phủ cực đại của các orbital nguyên tử thành orbital phân tử. Khi vùng xen phủ của các orbital nguyên tử càng lớn thì liên kết (orbital phân tử) được tạo thành càng bền và năng lượng thoát ra khi hình thành liên kết càng lớn. Khuynh hướng của sự xen phủ là tiến tới cực đại, đó là nội dung của nguyên lý xen phủ cực đại.

Các orbital nguyên tử tương tác có hiệu quả với nhau thành orbital phân tử chúng phải thỏa mãn ba điều kiện sau.

- Năng lượng của chúng gần nhau
- Sự xen phủ ở mức độ lớn
- Chúng phải cùng một kiểu đối xứng với trục nối hai hạt nhân nguyên tử

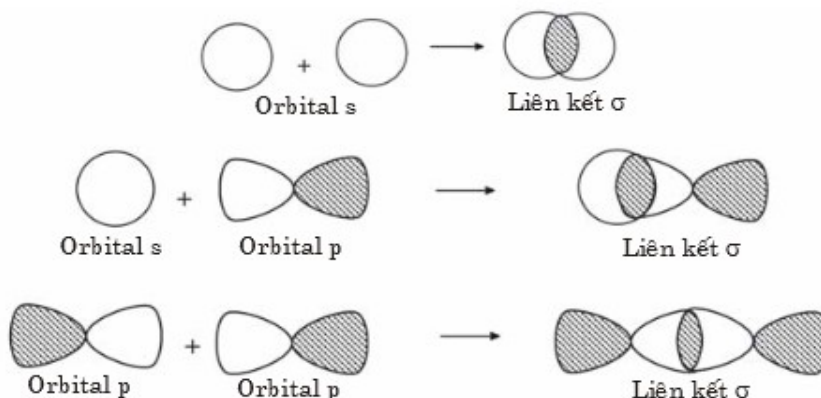
Như vậy 2 orbital s, hoặc 1 orbital s và 1 orbital p nào có trục đối xứng trùng với trục nối 2 hạt nhân có thể tham gia xen phủ nhau thành orbital phân tử.

Tùy theo đặc điểm đối xứng của các orbital nguyên tử, sự xen phủ của chúng có thể theo trục hay bên trục nối giữa hai nguyên tử.

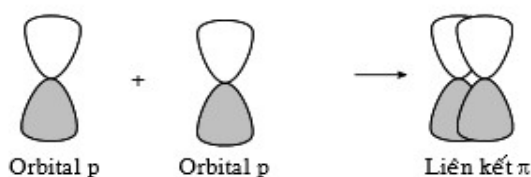
Sự xen phủ trục orbital tạo liên kết σ

Sự xen phủ bên xảy ra sẽ tạo thành liên kết π

• *Xen phủ trực - Tạo liên kết σ*



• *Xen phủ bên - Tạo liên kết π*



2.2. Liên kết σ và liên kết π trong các hợp chất hữu cơ.

2.2.1. Trong các hợp chất hữu cơ liên kết σ tạo thành do sự xen phủ

- Orbital s của nguyên tử hydro với các orbital lai hóa của carbon sp^3 , sp^2 , sp .
- Orbital lai hóa của carbon xen phủ với nhau.
- Orbital lai hóa s và p của nguyên tử oxy hoặc của nitơ với orbital s của hydron hoặc các orbital lai hóa sp^3 , sp^2 , sp trong các hợp chất có liên kết O – H, hoặc C – O và trong các hợp chất có liên kết N – H hoặc C – N.

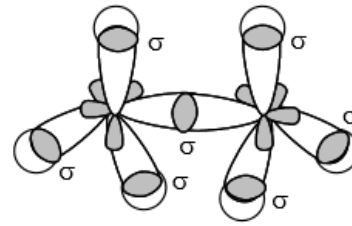
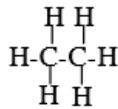
2.2.2. Liên kết π được tạo thành do sự xen phủ

- Orbital p_y hoặc p_z của các nguyên tử carbon xen phủ với nhau từng đôi một để tạo thành liên kết π trong $C = C$ hoặc trong $C \equiv C$.
- Orbital p của nguyên tử oxy, nitơ xen phủ với orbital p của nguyên tử carbon tạo thành liên kết π trong $C = O$ hoặc trong $C = N$, $C \equiv N$.

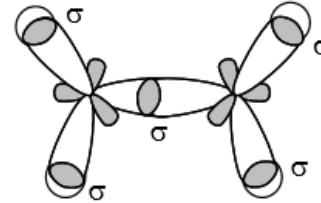
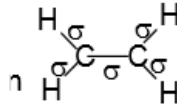
Ví dụ:

- Sự tạo thành liên kết σ và π trong các hợp chất etan, ethylen, acetylen, ancol, ethylic có thể được minh họa như sau:

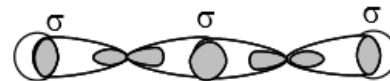
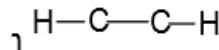
Các liên kết trong phân tử etan



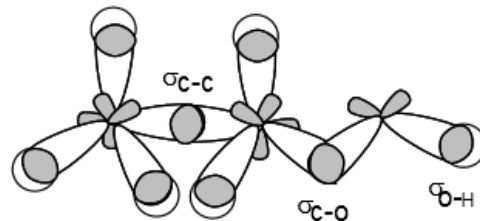
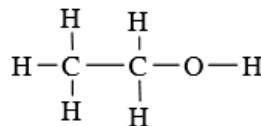
Các liên kết trong phân tử ethylen



Các liên kết trong phân tử acetylen



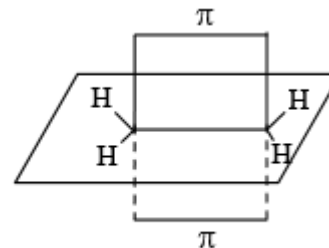
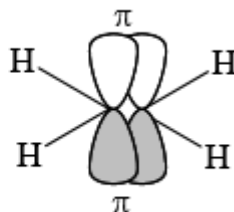
Các liên kết trong phân tử alcol ethylic



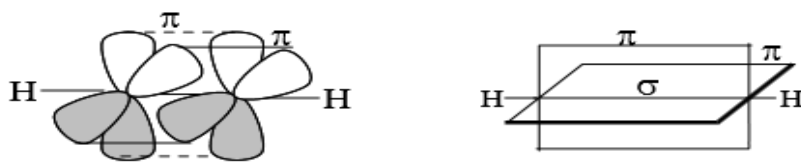
- Sự tạo thành liên kết trong phân tử ethylen, acetylen có thể minh họa như sau:

Liên kết trong ethylen được tạo thành do sự xen phủ cực đại về hai phía của các orbital p_z không lai hóa. Liên kết (orbital phân tử) nằm trong mặt phẳng thẳng góc với mặt phẳng chứa các nguyên tử C và H.

Liên kết π trong ethylen



Hai liên kết trong acetylen được tạo thành do sự xen phủ cực đại về 2 phía của các orbital p_y và p_z tương ứng. Các orbital liên kết nằm trong 2 mặt phẳng thẳng góc với nhau.



Các liên kết trong phân tử acetylen

2.3. Tính chất của liên kết và liên kết

2.3.1. Sự phân cực của liên kết

- Khi phân tử có dạng $A - A$ đồng nhất thì phân tử không có sự phân cực. Nghĩa là cặp điện tử liên kết hay orbital phân tử liên kết được phân đều giữa hai nguyên tử và momen lưỡng cực () bằng 0.

Ví dụ: $H - H$, $Cl - Cl$, $O = O \dots$

- Khi hai nguyên tử liên kết với nhau không đồng nhất (phân tử có dạng $A - B$) như: $H - Cl$, $CH_3 - Cl \dots$ cặp điện tử liên kết sẽ lệch về phía nguyên tử có độ âm điện lớn hơn. Do đó trọng tâm điện dương và âm không trùng nhau và liên kết sẽ có momen lưỡng cực khác không ($\neq 0$), đó là liên kết cộng hóa trị phân cực.

Sự phân cực không chỉ xảy ra ở các liên kết mà còn xảy ra ở các liên kết (phân tử có dạng $A = B$, hoặc $A \equiv B$).

Trong các phân tử $H_2C=O$, và $CH_3 - C \equiv N \dots$ có sự phân cực của liên kết .

Để chỉ sự phân cực của liên kết người ta dùng mũi tên thẳng ($\rightarrow$) và sự chỉ sự phân cực của liên kết người ta dùng mũi tên cong ($\curvearrowright$). Chiều chuyển dịch của mũi tên là chiều chuyển dịch điện tử. Hoặc dùng ký hiệu , nhằm biểu thị các phần điện tích nhỏ ở những nguyên tử tham gia liên kết.

Ví dụ: $CH_3 \rightarrow Cl$, $CH_3 - Cl$, $H_2C \equiv O$, $H_2C = O$.

2.3.2. Độ tan

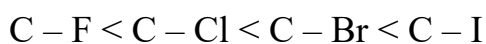
Các hợp chất hữu cơ có liên kết cộng hóa trị (là những liên kết có độ phân cực không lớn) rất ít hoặc không tan trong nước, trái lại tan nhiều trong các dung môi hữu cơ. Dung dịch các chất hữu cơ thường là không dẫn điện.

Các chất có liên kết ion dễ tan trong nước và không hoặc ít tan trong dung môi hữu cơ, dung dịch của chúng dẫn điện.

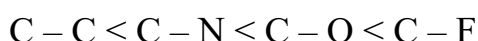
2.3.3. Độ dài liên kết.

Khoảng cách giữa hai hạt nhân nguyên tử liên kết thường gọi theo quy ước là độ dài liên kết.

- Độ dài liên kết cộng hóa trị giữa carbon và một nguyên tử khác cùng một phân nhóm của hệ thống tuần hoàn tăng theo số thứ tự của nguyên tử.



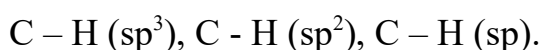
- Độ dài liên kết cộng hóa trị giữa carbon và một nguyên tử khác trong cùng một chu kỳ giảm khi số thứ tự tăng.



- Độ dài liên kết cộng hóa trị giữa hai nguyên tử càng giảm nếu số orbital liên kết càng lớn.



- Độ dài liên kết giữa carbon với một nguyên tử khác phụ thuộc trạng thái lai hóa của carbon. Tỷ lệ orbital s trong orbital lai hóa càng cao thì độ dài liên kết càng ngắn.



2.3.4. Năng lượng liên kết

Năng lượng liên kết A – B là số năng lượng thoát ra khi hình thành liên kết đó từ 2 nguyên tử hay 2 gốc A và B. Đó cũng chính là năng lượng cần thiết làm đứt liên kết A – B thành 2 nguyên tử hay gốc A và B.

2.4. Sự hình thành liên kết yếu hơn liên kết cộng hóa trị

2.4.1. Liên kết hydro:

Liên kết hydro có bản chất tĩnh điện. Năng lượng liên kết nhỏ.



Điều kiện hình thành liên kết hydro:

- X có độ âm điện lớn hơn hydro sao cho X – H phân cực.
- Y có cặp điện tử tự do $\bar{e}$. Kích thước của X và Y đều không lớn.