

BÀI GIẢNG HÓA HỮU CƠ

ThS Nguyễn Văn Tiến

Môn học: Hóa học hữu cơ

Tài liệu tham khảo

- Hóa học hữu cơ - Bộ Y Tế - Sách dùng đào tạo dược sĩ đại học - NXB Y học 2006 – 2 tập.
- Hóa học hữu cơ - Chu Phạm Ngọc Sơn
- Cơ sở hóa học hữu cơ – Thái Doãn Tĩnh – 3 tập
- Bài tập hóa học hữu cơ – Chu Phạm Ngọc Sơn
- Hóa học hữu cơ phần bài tập – Ngô Thị Thuận
- Bài tập hóa học hữu cơ – Nguyễn Đình Triệu

NỘI DUNG MÔN HỌC

Phần thứ nhất

CƠ SỞ LÝ THUYẾT HÓA HỌC HỮU CƠ

- Chương I Đại cương Hóa học hữu cơ
Chương II Cơ cấu điện tử của nguyên tử Cacbon – Sự hình thành liên kết trong hóa hữu cơ
Chương III Các Hiệu ứng điện tử trong Hóa hữu cơ
Chương IV Cấu trúc phân tử Hợp chất hữu cơ – Đồng Phân và cấu dạng
Chương V Các loại Phản ứng trong Hóa hữu cơ – Khái niệm về cơ chế phản ứng

Phần thứ hai

CÁC HỢP CHẤT HỮU CƠ CƠ BẢN

- Chương VI Hydrocacbon no
Chương VII Anken
Chương VIII Ankin
Chương IX Aren
Chương X Dẫn xuất Halogen – Hợp chất cơ nguyên tố
Chương XI Ancol – Phenol – Ete
Chương XII Andehyt – Xeton – Axit Cacboxylic - Este

Mục tiêu môn học

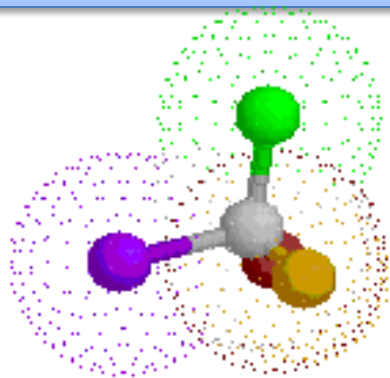
- * **Nắm được cơ sở lý thuyết căn bản của hóa học hữu cơ**
- * **Vận dụng được các lý thuyết cơ sở để áp dụng nghiên cứu, lý giải các tính chất, hiện tượng của các hợp chất cụ thể**

PHẦN 1:

CƠ SỞ LÝ THUYẾT HÓA HỮU CƠ

CHƯƠNG 1:

ĐẠI CƯƠNG HÓA HỮU CƠ



1.1. Lược sử phát triển:



Jöns Jacob Berzelius: thuyết lực sống (1827)



Friedrich Wöhler: axit Oxalic (1824); Ure (1828)



Adolph Wilhelm Hermann Kolbe: Axit Axetic (1845)



Marcellin Berthelot: Chất béo (1854)



Aleksandr Mikhailovich Butlerov: Đường (1861)

“Hóa học hữu cơ là học thuyết về hóa học của các hợp chất của cacbon”

“Hóa học hữu cơ là ngành hóa học của hydrocacbon và các dẫn xuất của chúng”

1.2. Đặc điểm chung và phân loại các hợp chất hữu cơ:

1.2.1. Đặc điểm chung:

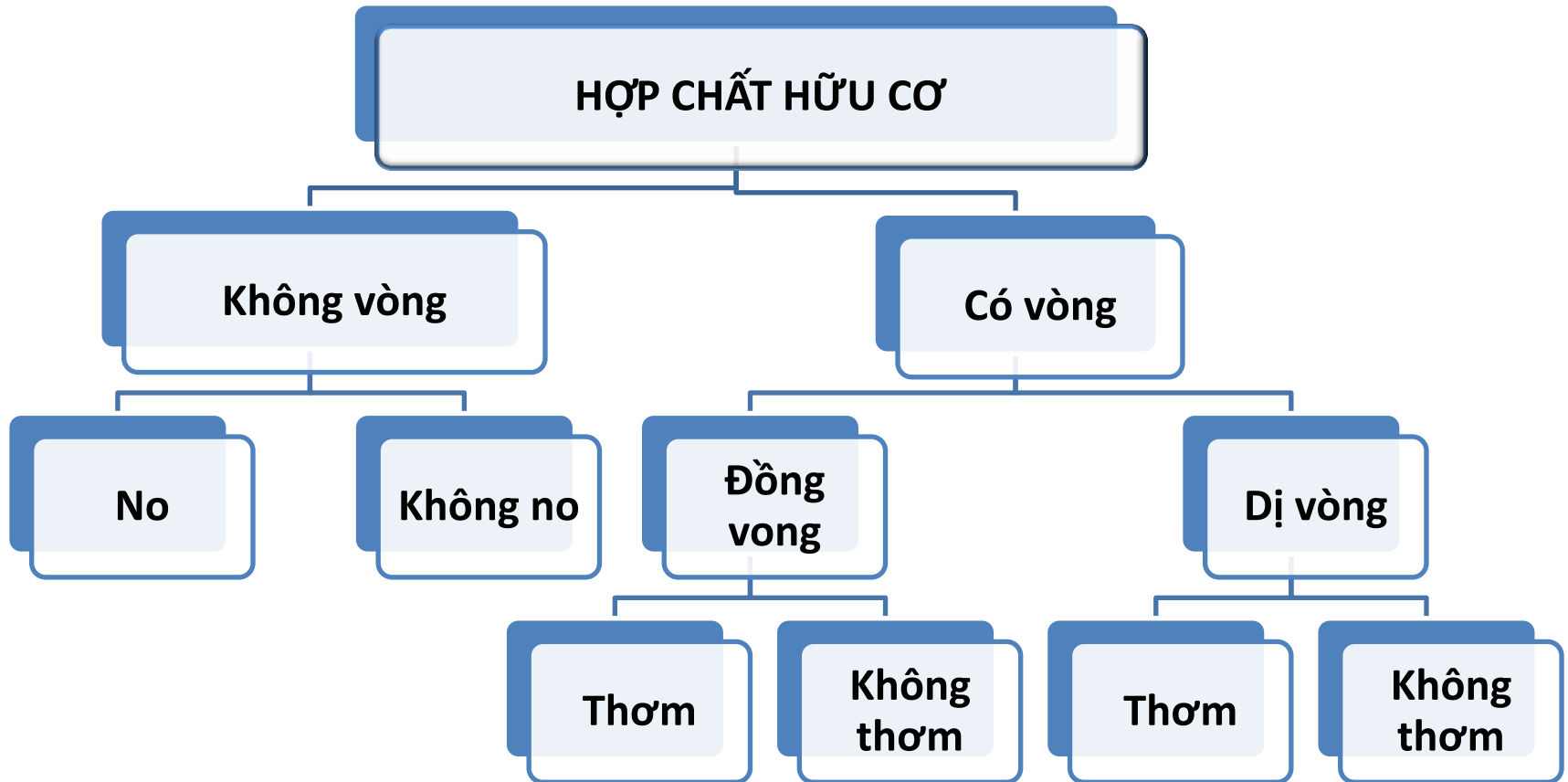
- Thành phần: C, H, O, N, P, S, ...
- Cấu tạo: Liên kết CHT, LK đôi, LK ba.

-Tính chất:

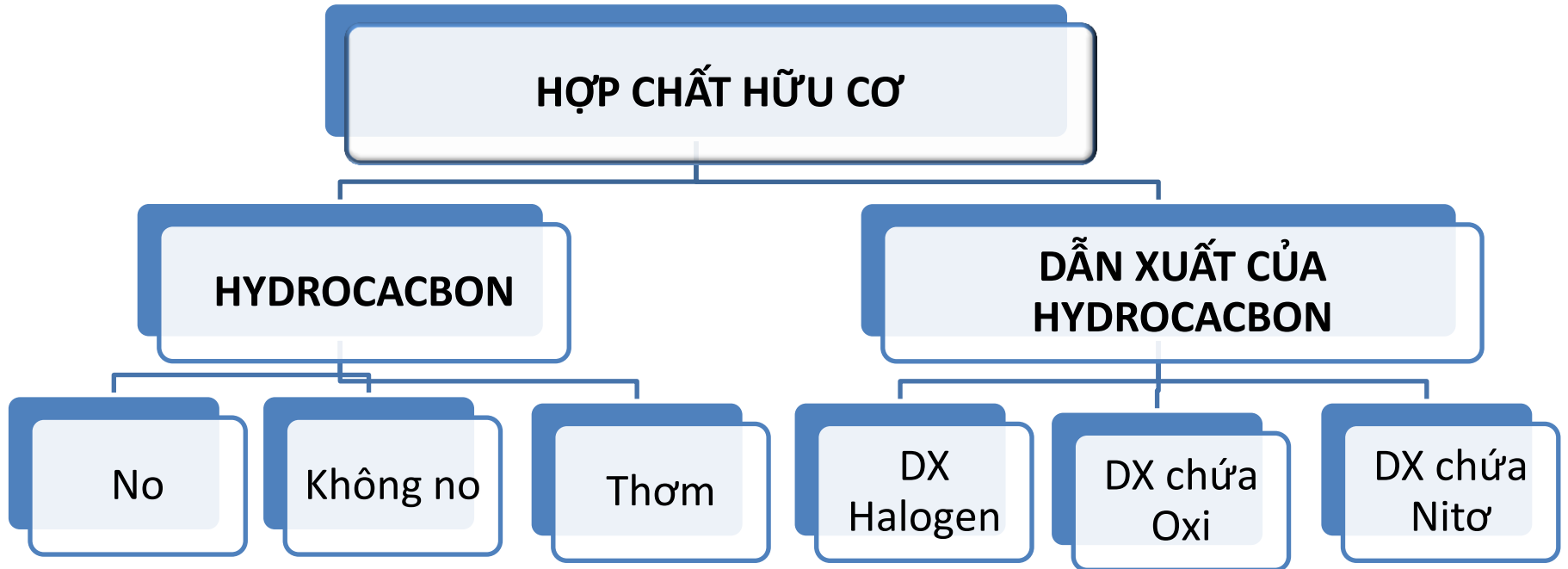
Vật lí: Kém bền nhiệt, dễ cháy, ít tan trong nước.

Hóa học: Phản ứng không hoàn toàn, xảy ra theo nhiều hướng.

1.2.2. Phân loại:

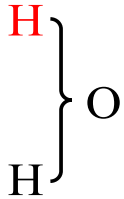


Phân loại

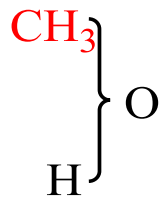


1.3. Thuyết cấu tạo HCHC:

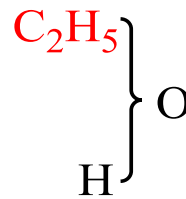
- Thuyết kiểu Zerar: HCHC hình thành theo kiểu H_2O , HCl , H_2



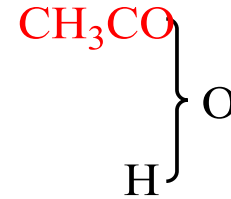
Nước



Metanol

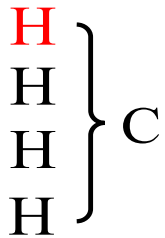


Etanol

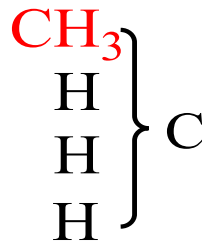


Axit Axetic

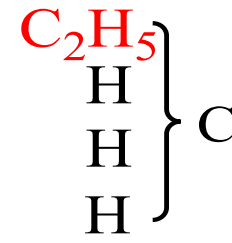
- Thuyết kiểu Metan của Kekule: Thừa nhận C có hóa trị 4



Metan



Etan



Propan

THUYẾT CẤU TẠO HCHC

-Thuyết cấu tạo hóa học của Butlerov (1861):

“Bản chất hóa học của một phân tử của một chất được xác định bởi bản chất các nguyên tử hợp thành, bởi số lượng của chúng và bởi cấu tạo hóa học”

1) Các nguyên tử trong phân tử kết hợp với nhau theo một trật tự xác định, theo đúng hóa trị của chúng.

2) Tính chất của các chất phụ thuộc vào thành phần, số lượng nguyên tử và cấu tạo hóa học của chúng.

3) Cấu tạo của các chất có thể xác định được khi nghiên cứu tính chất của chúng và có thể biểu diễn được bằng công thức cấu tạo.

1.4. Danh pháp các hợp chất hữu cơ

1.4.1. Danh pháp thông thường:

Axit Fomic: HCOOH (Fomica: con kiến).

Axit Axetic: CH_3COOH (Acetus: giấm)

Mentol : $\text{C}_{10}\text{H}_{20}\text{O}$ (Mentha piperita: Bạc hà)

1.4.2. Danh pháp IUPAC :

- Danh pháp gốc – chức

- Danh pháp thay thế

Bảng số đếm và tên của mạch C:

Số đếm	Mạch C	Tên mạch
1: mono	C	Met
2: di	C-C	Et
3: tri	C-C-C	Pro
4: tetra	C-C-C-C	But
5: penta	C-C-C-C-C	Pent
6: hexa	C-C-C-C-C-C	Hex
7: hepta	C-C-C-C-C-C-C	Hept
8: octa	C-C-C-C-C-C-C-C	Oct
9: nona	C-C-C-C-C-C-C-C-C	Non
10: deca	C-C-C-C-C-C-C-C-C-C	Dec

Không theo quy tắc

Theo quy tắc số đếm

Danh pháp IUPAC

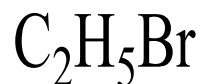
1.4.2.1. Danh pháp gốc - chức:

TÊN GỐC HYDROCARBON + TÊN CHỨC HÓA HỌC

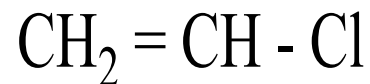
Ví dụ:



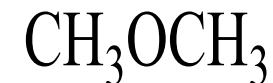
Metyl clorua



Etyl bromua



Vinyl clorua



Dimetyl ete

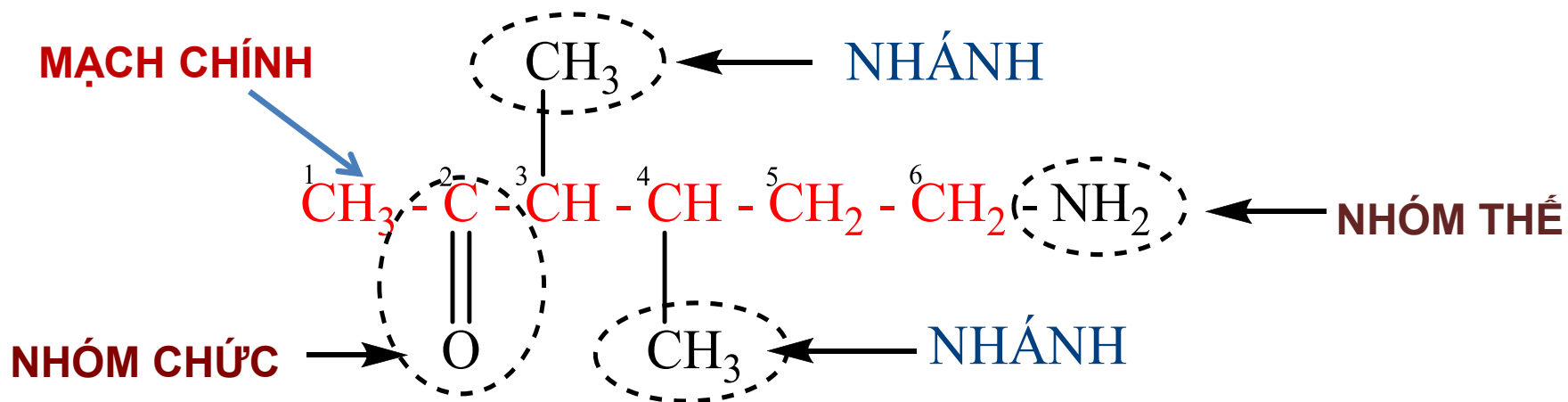
Hidrocarbon	Gốc	Danh pháp
CH ₄ Metan	-CH ₃	Metyl
C ₂ H ₆ Etan	-CH ₂ -CH ₃	Etyl
C ₃ H ₈ Propan	-CH ₂ -CH ₂ -CH ₃ -CH(CH ₃) ₂	Propyl <i>isopropyl</i>
C ₄ H ₁₀ Butan	-CH ₂ -CH ₂ -CH ₂ -CH ₃ -CH(CH ₃)-CH ₂ -CH ₃ -CH ₂ -CH(CH ₃) ₂ -C(CH ₃) ₃	n-Butyl sec-Butyl <i>isobutyl</i> <i>tert-butyl</i>
CH ₂ =CH ₂ eten	-CH=CH ₂	Etenyl (Vinyl)
CH ₃ -CH=CH ₂ propen	-CH ₂ -CH=CH ₂ -CH=CH-CH ₃	3-propenyl (alyl) 1-propenyl
HC≡CH etin	-C≡CH	Etinyl
C ₆ H ₆ benzen	-C ₆ H ₅	Phenyl
CH ₃ - C ₆ H ₅ Toluen	-CH ₂ -C ₆ H ₅	benzyl

1.4.2. Tên thay thế - danh pháp quốc tế: chỉ số chỉ vị trí đặt phía trước bộ phận cần gọi tên.

Cấu trúc của tên thay thế: Gồm 3 phần:

<i>Đầu</i>	+	Thân	+	<i>Đuôi</i>
<i>Nhánh</i>		<i>mạch chính</i>		<i>nối đa</i>
<i>nhóm thế</i>		<i>vòng</i>		<i>nhóm chức</i>
<i>nhóm chức phụ</i>				

DANH PHÁP HỮU CƠ:



6-amino-3,4-dimetyl hexan-2-on

Đầu

Thân

Đuôi

ĐẦU
Nhánh
nhóm thế
nhóm chức phụ

THÂN
mạch chính
vòng

ĐUÔI
nối đa
nhóm chức

1.4.3. CÁCH CHỌN MẠCH CHÍNH VÀ ĐÁNH SỐ

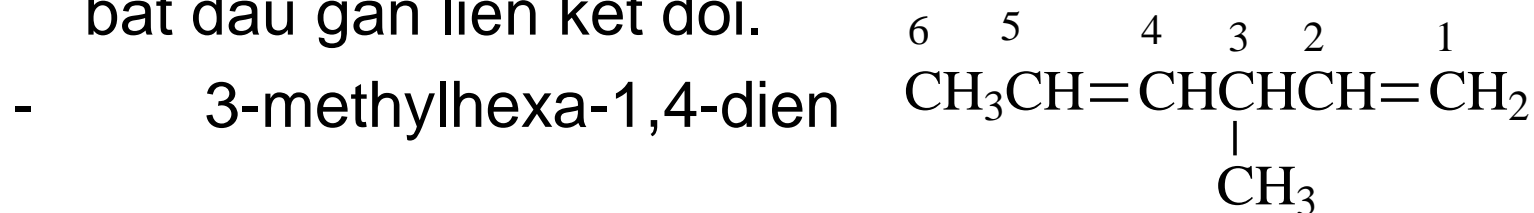
1. Với hydrocarbon no

- Mạch chính: dài nhất, nhiều nhánh nhất, C số 1 bắt đầu từ đầu mạch gần nhánh nhất
- Mạch chính: được đánh số theo quy tắc “Tổng số trên mạch chính là nhỏ nhất”
- Mạch chính: đánh số bắt đầu gần nhánh đơn giản hơn

CÁCH CHỌN MẠCH CHÍNH VÀ ĐÁNH SỐ

2. Với hydrocarbon không no

- Mạch chính: có nhiều liên kết đôi và dài nhất, đánh số bắt đầu gần liên kết đôi.



- Mạch chính có cả liên kết đôi và liên kết ba, số bắt đầu gần liên kết đôi

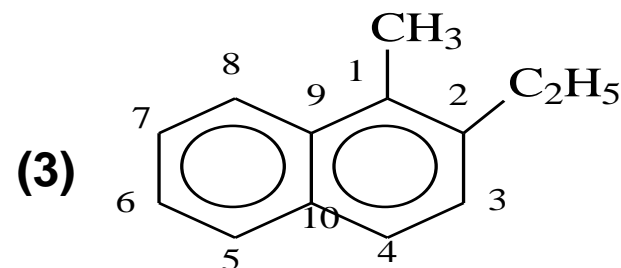
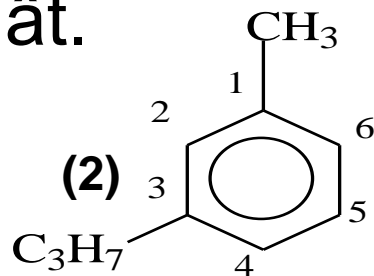
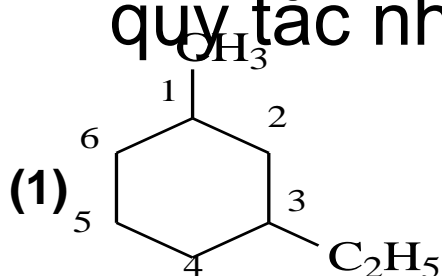
pent-1-en-4-in



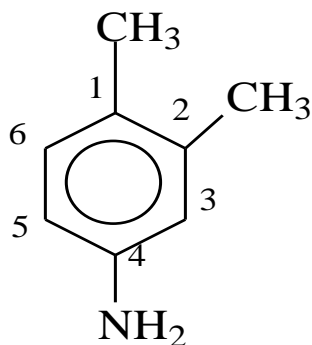
CÁCH CHỌN MẠCH CHÍNH VÀ ĐÁNH SỐ

3. Với hợp chất vòng

- Mạch chính là vòng, số bắt đầu từ C mang nhánh đơn giản nhất, số tiếp theo đánh theo quy tắc nhỏ nhất.

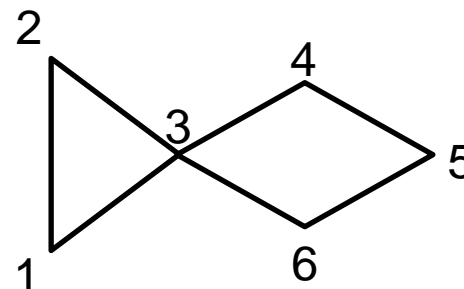


- Vòng có nhiều nhóm thế hoặc nhóm chức, số bắt đầu từ C mang nhóm có khối lượng nguyên tử nhỏ nhất, số tiếp theo đánh theo quy tắc nhỏ nhất.



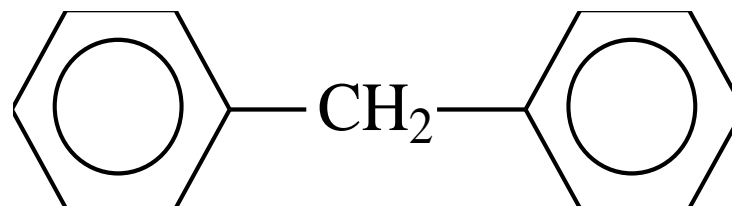
CÁCH CHỌN MẠCH CHÍNH VÀ ĐÁNH SỐ

Spiro [2,3] hexan



-Mạch chính không phải là vòng khi hợp chất có nhiều vòng rời rạc.

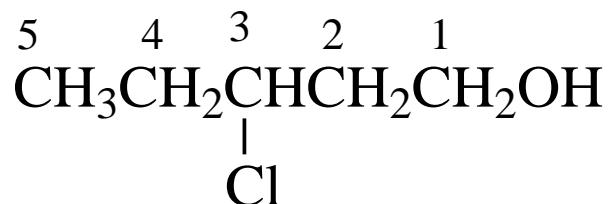
diphenyl methan



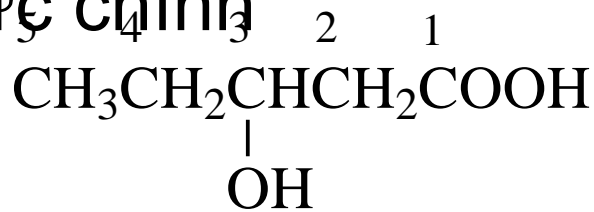
CÁCH CHỌN MẠCH CHÍNH VÀ ĐÁNH SỐ

4. Với hợp chất có nhóm thế, nhóm chức

- Mạch chính có nhóm thế, nhóm chức: số bắt đầu từ nhóm chức



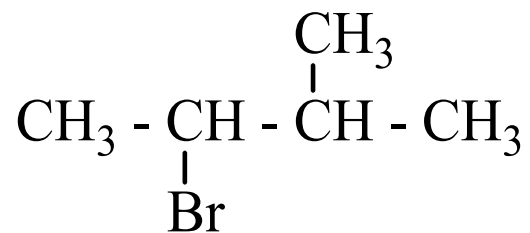
- Mạch chính có nhiều nhóm chức, số bắt đầu từ nhóm chức chính



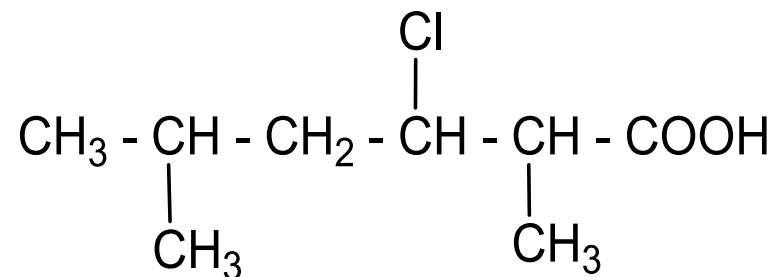
- Thứ tự ưu tiên nhóm chức:



Bài tập áp dụng

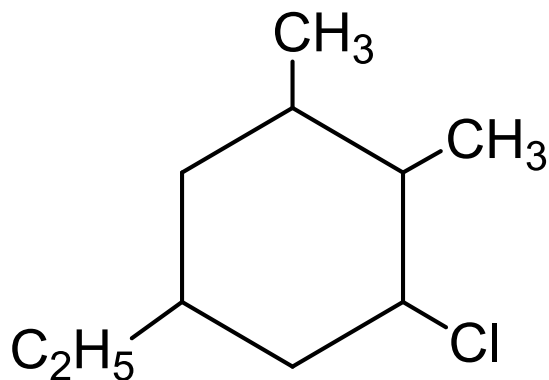


3-Brom-2-Metylbutan

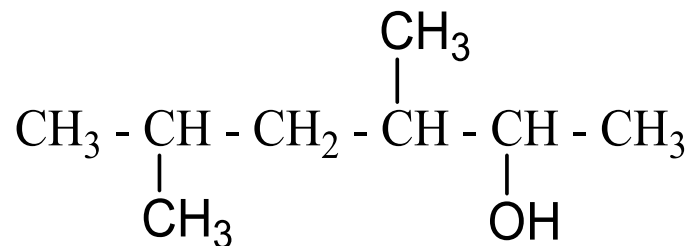


Axit-3-Clo-2,5-dimetylhexanoic

3-Clo-5-etyl-1,2-dimetyl xyclohexan



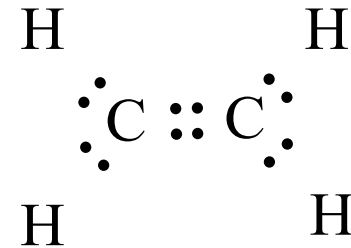
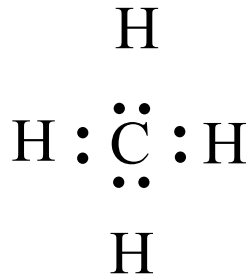
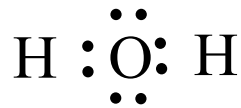
3,5-dimetyl hexan-2-ol



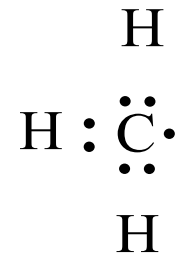
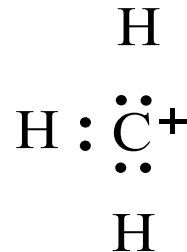
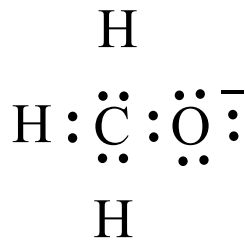
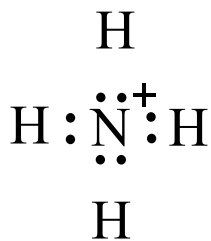
1.5. Cách biểu diễn công thức chất hữu cơ:

1.5.1. Công thức Lewis:

Biểu diễn các liên kết hoặc các electron hóa trị bằng các electron

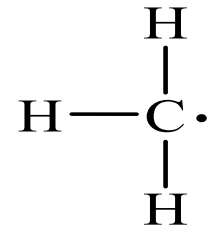
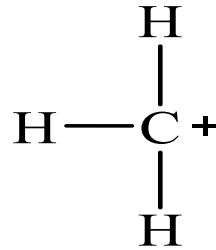
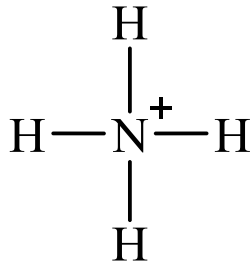


- Các công thức có thể mang điện tích hoặc có thể biểu diễn các tiểu phân trung gian không bền



Cách biểu diễn công thức chất hữu cơ

1.5.2. Công thức Kekule: biểu diễn các liên kết trong phân tử bằng vạch ngang thay cho cặp electron liên kết

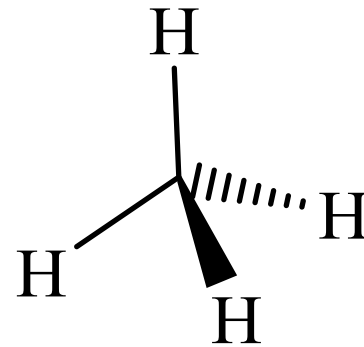
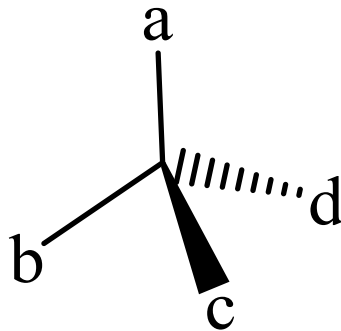


Cách biểu diễn công thức chất hữu cơ

1.5.3. Công thức phối cảnh:

Quy ước biểu diễn:

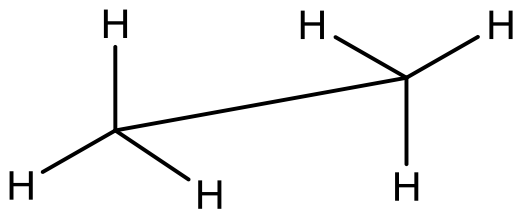
- + Liên kết nằm trong mặt phẳng được biểu diễn bằng đường liên tục
- + Liên kết hướng ra phía trước biểu diễn bằng đường đậm
- + Liên kết phía sau biểu diễn bằng đường đứt đoạn



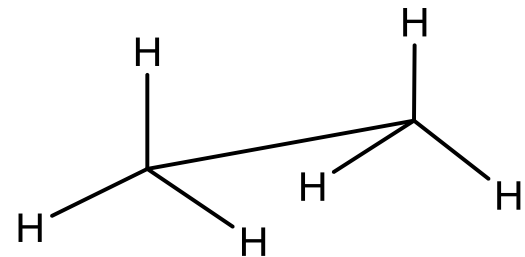
Metan

Cách biểu diễn công thức chất hữu cơ

Theo một cách khác: để biểu diễn phân tử có 2 nguyên tử C thì liên kết giữa 2C được biểu diễn bằng đường thẳng từ trái sang phải và xa dần người quan sát, các nguyên tử và nhóm nguyên tử liên kết với C cũng được biểu diễn trong không gian bằng các đoạn thẳng xuất phát từ C_1 và C_2



Xen kẽ



Che khuất

Cách biểu diễn công thức chất hữu cơ

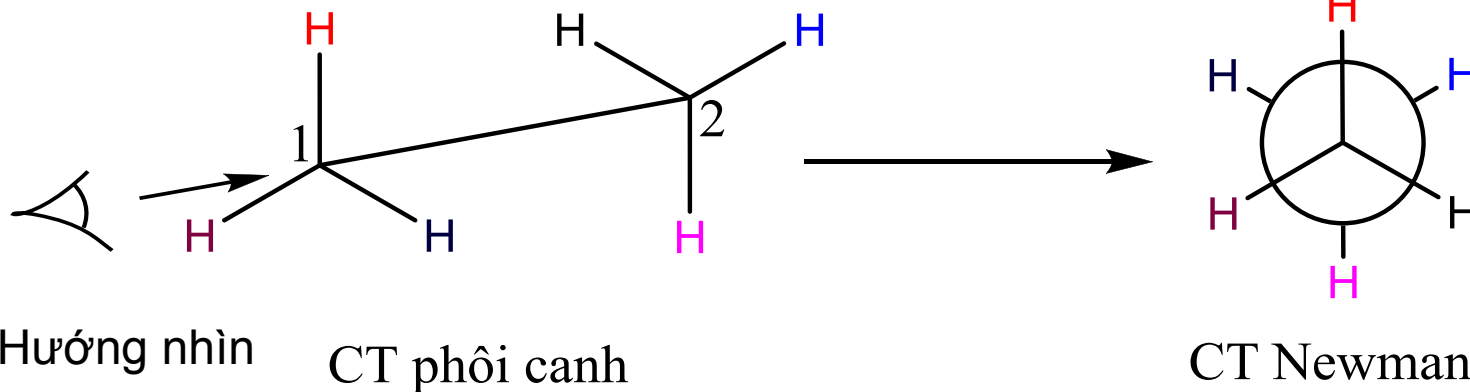
1.5.4. Công thức Newman:

Qui ước: Nhìn phân tử dọc theo 1 liên kết C-C

Nguyên tử C ở đầu liên kết xa mắt (bị che khuất C_2) được thể hiện bằng hình tròn và nguyên tử gần mắt quan sát (C_1) được biểu diễn bằng tâm của hình tròn.

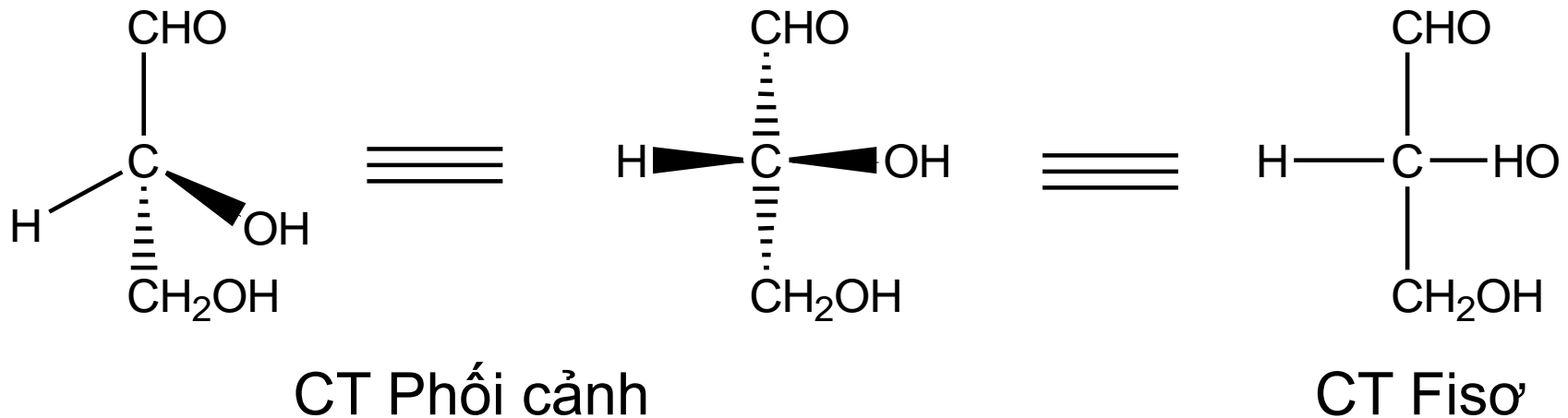
Các liên kết từ C_1 được nhìn thấy toàn bộ và xuất phát từ tâm hình tròn (C_1).

Các liên kết từ C_2 chỉ nhìn thấy được phần ló ra từ chu vi của hình tròn C_2 .



1.5.5. Công thức Fiso (Fischer)

Nguyên tắc: nguyên tử C trung tâm nằm trong mặt phẳng trang giấy, hai nhóm thế gần mắt người quan sát khi chiếu lên mặt phẳng thì nằm ở bên phải và bên trái nguyên tử C (hàng ngang), 2 nhóm nguyên tử còn lại xa mắt người quan sát khi chiếu lên nằm trên trục dọc của công thức Fiso (Fischer)

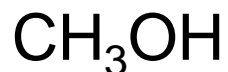
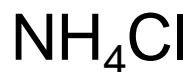


Thông thường công thức Fischer được biểu diễn ở dạng chuẩn như sau:

- Nếu phân tử có nhiều nguyên tử C thì trục dọc là trục của nguyên tử C của mạch chính
- Nhóm nguyên tử có số oxi hóa cao hơn thì được viết ở phía trên.
- Nếu hai nguyên tử C ở đầu mạch có số oxi hoá như nhau thì ở phía trên là nhóm thế có số thứ tự nhỏ hơn trong tên gọi

Bài tập:

Hãy biểu diễn các chất sau thành công thức Lewis, CT Kekule:



Trình bày công thức Newman dạng bên của chất sau:

