

4. Hiện tượng đồng phân lập thể trong hóa hữu cơ

Đồng phân lập thể

Những phân tử này có cùng công thức và cách nối nhưng khác nhau về cách sắp xếp các nhóm trong không gian.

Xuyên lập thể phân

Là những đồng phân lập thể mà không phải là đối phân. (VD: *cis-trans*, *E-Z*)

Đối phân

Những phân tử này không thể trùng với hình ảnh qua gương

Đối
phân

Giống
nhau

Tính quang hoạt

Tính chất làm xoay mặt phẳng ánh sáng phân cực phẳng một góc α .

Chất tả triền: làm quay mặt phẳng ánh sáng phân cực về bên tay **trái**

Ký hiệu: (-) hoặc *l* (levoratory)

Chất hữu triền: làm quay mặt phẳng ánh sáng phân cực về bên tay **phải**

Ký hiệu: (+) hoặc *d* (dextroratory)

Dung dịch

$$[\alpha]_D^t = \frac{\alpha}{lc} = \frac{100 \alpha}{lc'}$$

α : góc quay quan sát (°)

l: độ dài ống chứa mẫu (dm)

c: nồng độ dung dịch (g/ml); *c'*: (g/100ml dung môi)

d: tỷ trọng chất lỏng tinh chất (g/ml)

Chất lỏng

$$[\alpha]_D^t = \frac{\alpha}{ld}$$

t : nhiệt độ khi đo (°C)

D: ánh sáng đơn sắc của đèn natrium ($\lambda = 589 \text{ nm}$)

Nguyên nhân của tính quang hoạt

- Do sự bất đối xứng trong phân tử của hợp chất đó, nghĩa là ảnh qua gương của nó không thể trùng khít với phân tử ban đầu (**tính thủ tính**).
- Sự bất đối xứng này có thể do nhiều nguyên nhân, **thường** là do trong phân tử của nó chứa một hoặc nhiều **carbon thủ tính**.
- **Carbon thủ tính** (carbon phi đối xứng) là carbon mang 4 nhóm thế khác nhau. Kí hiệu C*.

(Hợp chất A), (B) thủ tính. Hợp chất (C) không thủ tính

BT: Xác định một phân tử thủ tính

Dự đoán hợp chất 2-chloropentane hay 3-chloropentane thủ tính

Thủ tính

Không thủ tính

BT: Xác định carbon thủ tính trong cycloalkane

Xác định carbon thủ tính trong hợp chất sau.



Không có C thủ tính

Có 2C thủ tính

Xác định cấu hình R, S (R : rectus, phải ; S : sinister, trái)

- Đồng phân quang học có chứa C thủ tính : C*abde

- Xếp các phối tử a, b, d, e theo thứ tự ưu tiên dựa vào quy tắc chuỗi

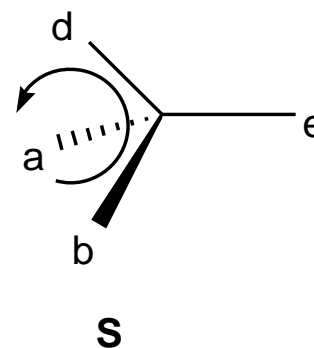
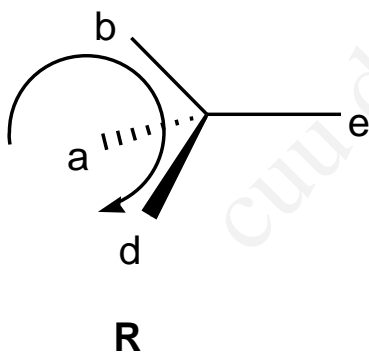
$$(a > b > d > e)$$

- Nhìn C* theo chiều từ C* đến phối tử có độ ưu tiên thấp nhất

- Xác định chiều đi từ a đến b rồi đến d.

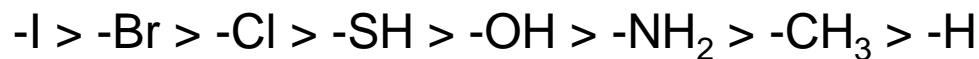
Nếu chiều quay **theo chiều kim đồng hồ** : R

ngược chiều kim đồng hồ : S



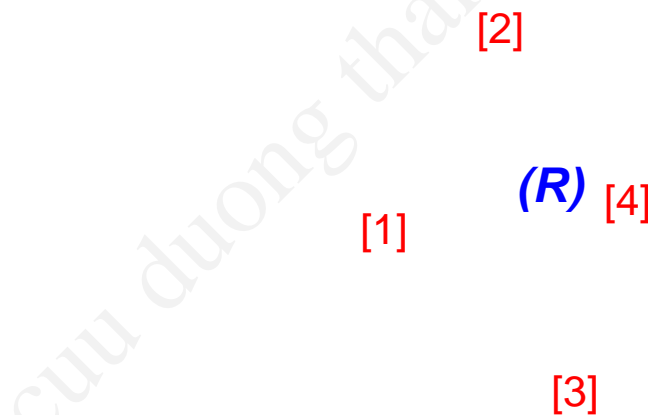
Quy tắc Cahn, Ingold, Prelog, xác định độ ưu tiên các nhóm thế

1. Nguyên tử số hiệu nguyên tử cao ưu tiên hơn nguyên tử số hiệu nguyên tử thấp



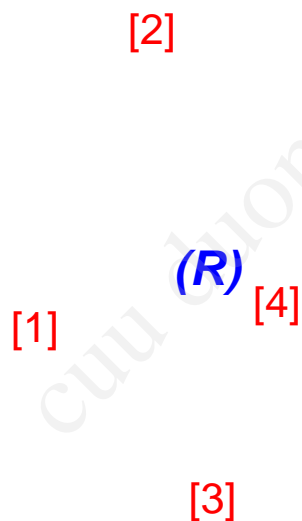
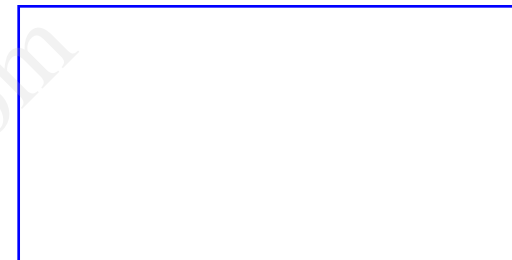
Đồng vị có khối lượng lớn thì ưu tiên hơn : $^{18}O > ^{17}O > ^{16}O$ $T > D > H$

2. Nếu hai nguyên tử cùng nối vào C^* giống nhau, áp dụng các quy tắc trên cho nguyên tử kế tiếp để xếp hạng nhóm đó.



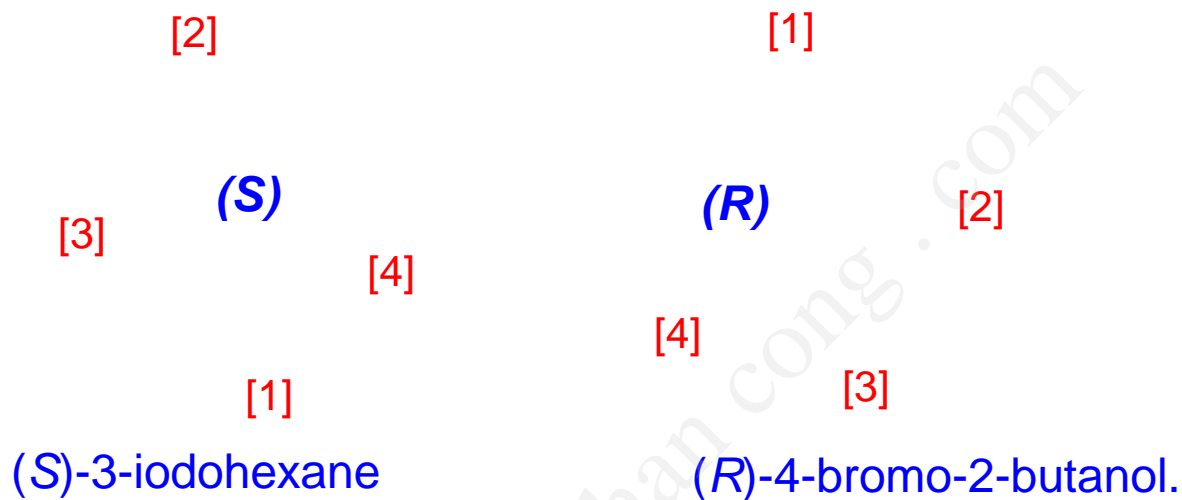
Quy tắc Cahn, Ingold, Prelog, xác định độ ưu tiên các nhóm thế

3. Các nối đa được xem như những nối đơn tương ứng.



BT: Xác định độ ưu tiên và cấu hình của tâm thủ tính

Xác định cấu hình và gọi tên các hợp chất sau đây



Cách 2: đổi nhóm có độ ưu tiên thấp nhất ra sau mặt phẳng tờ giấy

5. Alkene và alkyne

Tính chất vật lí

- Ở nhiệt độ phòng, alkene chứa 2 đến 4 carbon là chất khí, alkene chứa 5 đến 18 carbon là chất lỏng, và alkene có nhiều hơn 18 carbon là chất rắn.
- Nhìn chung, alkyne có nhiệt độ sôi cao hơn alkene và alkane tương ứng.

Điều chế alkene và công dụng:

Phản ứng tách loại

- Alkene chủ yếu trong ngành công nghiệp hóa học là ethene (ethylene). Công dụng chính của nó là dùng trong sản xuất polymer
- Sự sản xuất thương mại của ethylene thu được chủ yếu bằng cách cracking nhiệt các hydrocarbon khác.

Điều chế alkyne và công dụng:

Từ than đá, nước, đá vôi

Từ acetylide phản ứng với alkyl halide

Các acetylene đơn hoán có chứa một nguyên tử hydrogen có tính acid nên có thể tác dụng được với baz mạnh NaNH_2 , Na

Tiếp tục phản ứng này, nối ba có thể ở vị trí như mong muốn trong mạch carbon

- Công dụng chính của acetylene là ứng dụng trong sản xuất polymer, như vinyl chloride $\text{CH}_2=\text{CHCl}$ được polymer hóa thành polyvinyl chloride (PVC).
- Acetylene được sử dụng để sản xuất ngọn lửa nhiệt độ cao: hàn cắt kim loại.

Phản ứng cộng

(mất màu nâu đỏ nước bromine)

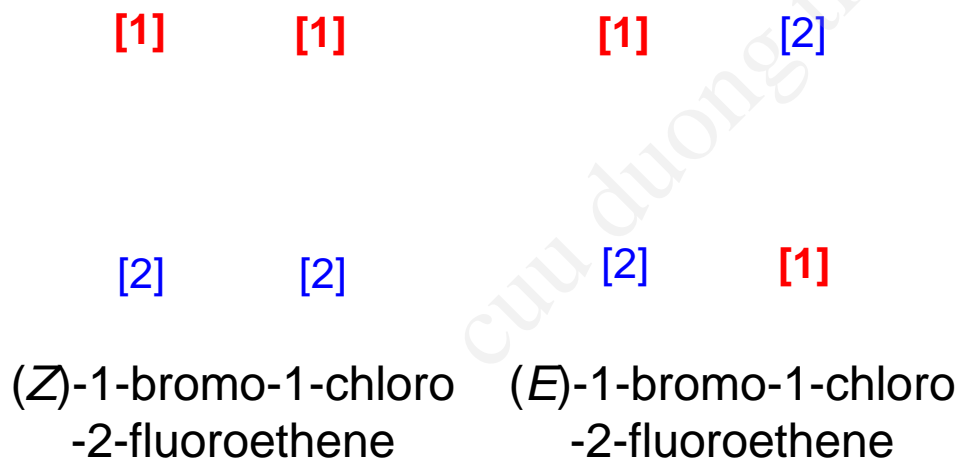
Hiện tượng đồng phân trong alkene

Danh pháp cis – trans

cis: hai phối tử giống nhau cùng nằm một bên mặt phẳng tham chiếu.

trans: hai phối tử giống nhau nằm ở hai bên mặt phẳng tham chiếu.

Danh pháp E - Z



BT: Xác định cấu hình của alkene

Xác định cấu hình và gọi tên các hợp chất sau đây.

(*Z*)-1,2-dichloro-3-ethyl-4-methylpent-2-ene

(*E*)-2-chloro-3-ethyl-4-(fluoromethyl)-5-methylhex-3-ene

6. Hydrocarbon hương phượng

Tính chất vật lí

- Hydrocarbon thơm rất dễ cháy và luôn luôn cần thao tác cẩn thận.
- Benzene: độc, hít nhiều có thể tử vong, chất gây ung thư.
- Benzene và đồng đẳng của nó không tan trong nước nhưng tan trong các dung môi hữu cơ.
- Nhiệt độ sôi của các hydrocarbon thơm hơi thấp hơn so với alkane có cùng số carbon. Ví dụ: hexane C_6H_{14} sôi ở $69\text{ }^{\circ}\text{C}$ trong khi benzene sôi ở $80\text{ }^{\circ}\text{C}$.
- Benzene có nhiệt độ nóng chảy cao hơn hexane. Benzene nóng chảy ở $5,5\text{ }^{\circ}\text{C}$ và hexane nóng chảy ở $-95\text{ }^{\circ}\text{C}$.

Điều chế và công dụng:

- Benzene được sản xuất từ dầu mỏ.
- Công dụng quan trọng nhất của benzene là tổng hợp ethylbenzene cho sản xuất nhựa styrene. Những ứng dụng khác bao gồm sản xuất phenol, tổng hợp dodecylbenzene (cho chất tẩy rửa), và là chất làm tăng chỉ số octane trong xăng.

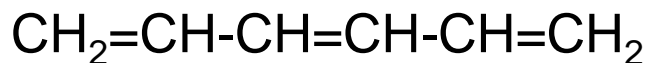
Đặc tính cấu trúc của các hợp chất thơm (quy tắc Hückel)

Cấu trúc phân tử hương phương có các đặc điểm chung sau đây:

- Cơ cấu vòng phẳng.
- Có hệ thống nối liên hợp trải khắp vòng— hệ thống sắp xếp các nối giữa các nguyên tử của vòng thơm gồm các nối đơn và nối đôi luân phiên.
- Có $(4n + 2)$ electron π , với $n = 1, 2 \dots$

Hương phương

Không hương phương



1,3,5-Hexatriene

7. Các nhóm chức hữu cơ

Alcohol và Phenol

Tính chất vật lí

- Tính chất vật lí chịu ảnh hưởng mạnh bởi liên kết hydrogen. Tuy nhiên, khi chiều dài dây tăng, ảnh hưởng của nhóm hydroxyl phân cực lên tính chất của phân tử giảm.
- Các alcohol có khối lượng phân tử thấp có xu hướng tan trong nước
- Các alcohol có khối lượng phân tử cao thì không.
- Nhiệt độ sôi và độ tan của các hợp chất phenol rất đa dạng, phụ thuộc vào những nhóm thế khác trên vòng benzene.

Điều chế:

Hydrate hóa alkene

Từ alkyl halide

Từ carbon monoxide CO và H₂

Khử alcohol bằng NaBH₄

Aldehyde có thể bị khử thành alcohol nhất cấp và ketone có thể bị khử thành alcohol nhị cấp bởi sodium borohydride NaBH₄.

Lên men đường

Ethanol được sản xuất bằng cách lên men nước mía hay những vật liệu khác chứa đường tự nhiên.

Ether

Điều chế:

Từ ion alkoxide và haloalkane

Loại nước từ alcohol

cuu duong than cong . com

Aldehyde và Ketone

Điều chế:

Oxi hóa alcohol nhất cấp tạo aldehyde

Oxi hóa alcohol nhị cấp tạo ketone

Acid carboxylic

Tính chất

- Acid carboxylic có mùi đặc trưng.
- Acid carboxylic khối lượng thấp có thể tan trong nước.
- Acid carboxylic có nhiệt độ sôi và nhiệt độ nóng chảy tương đối cao.
- Acid carboxylic là acid yếu

Điều chế:

Oxi hóa alcohol nhất cấp

Thủy giải nitrile

Ester

Tính chất

- Một số ester có mùi thơm dễ chịu.
- Hầu hết các ester là chất lỏng không màu và không tan trong nước.
- Nhiệt độ nóng chảy và nhiệt độ sôi của chúng thấp hơn của acid và alcohol có cùng số carbon. Đó là do sự thiếu liên kết hydrogen trong ester.

Điều chế:

Phản ứng của acid carboxylic với alcohol

Amide

Tính chất

- Nối hiện diện trong amide là nối peptide, loại nối quan trọng trong protein.
- Do sự cộng hưởng, amide không phải là base như amine hay ammonia.

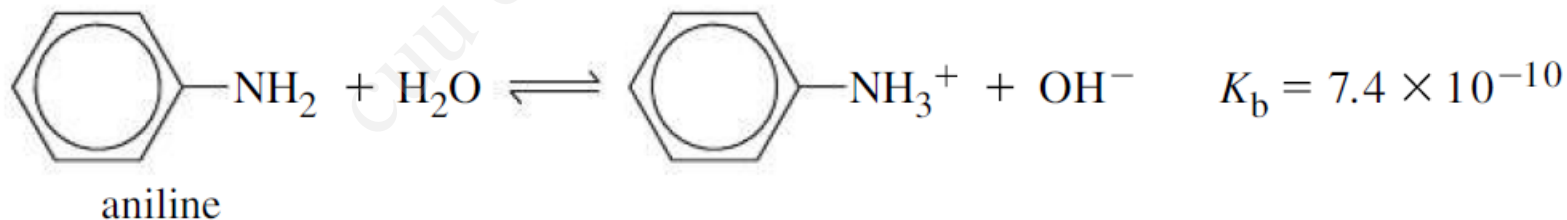
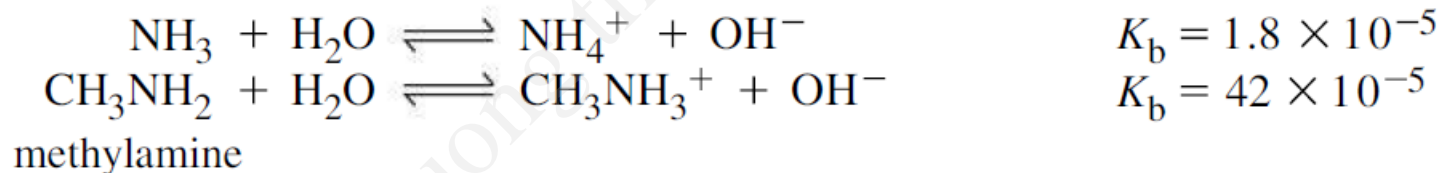
Điều chế:

Phản ứng của acid carboxylic với ammonia

Amine

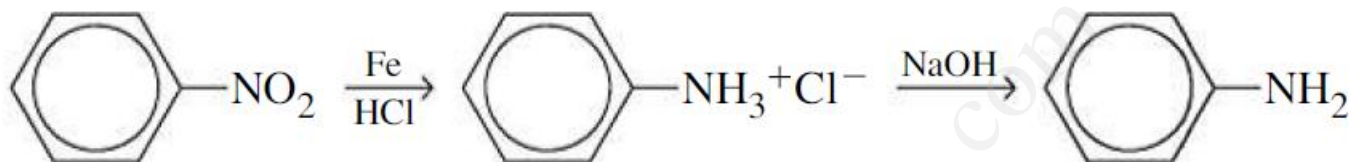
Tính chất

- Amine có khối lượng phân tử nhỏ là chất khí và dễ tan trong nước tạo dung dịch base.
- Amine nhất cấp và nhị cấp có thể tạo liên kết hydrogen nhưng những nối này yếu hơn liên kết hydrogen ở nước vì nitrogen kém âm điện hơn oxygen.
- Amine có tính base nhờ cặp electron độc thân trên N. Các amine thơm có tính base yếu hơn ammonia. Các amine béo có tính base hơi mạnh hơn ammonia.

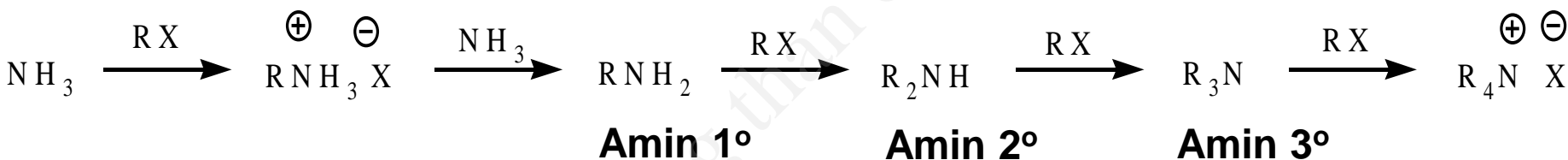


Điều chế:

Phản ứng khử hợp chất nitro



Phản ứng giữa ammonia và alkyl halide



p