

Trường Đại học Khoa học Tự nhiên
Khoa Hóa – Bộ môn Hóa Học Hữu cơ

U CƠ

GV: Đoàn Ngọc Nhuận

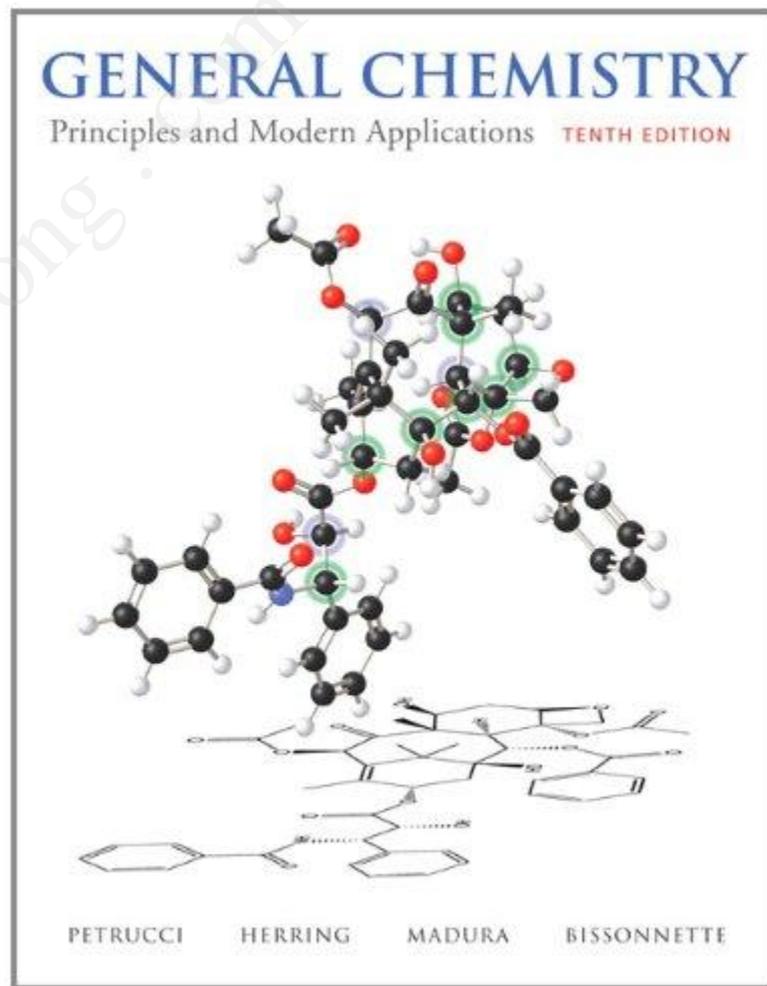
Email: dnnhuan@hcmus.edu.vn

HÓA HỮU CƠ ĐẠI CƯƠNG

C1: Cấu trúc của các hợp chất hữu cơ

C2: Phản ứng của các hợp chất hữu cơ

C3: Hóa học của sự sống



Chương 1 : Cấu trúc của các hợp chất hữu cơ

Tầm quan trọng của hóa học hữu cơ

Hóa học hữu cơ là ngành khoa học rất quan trọng vì:

- Số lượng các hợp chất hữu cơ rất lớn.
- Hiện diện trong nhiều ngành công nghiệp quan trọng.



Thực phẩm



Dược phẩm



Mỹ phẩm



Nhiên liệu

1. Tổng quan về hợp chất hữu cơ và cấu trúc

Hóa học hữu cơ là hóa học của các hợp chất chứa **Carbon (C)**

Hợp chất hữu cơ chỉ chứa **C, H** (hydrocarbon) (HCHC đơn giản nhất)

Mạch thẳng

Mạch nhánh

Mạch vòng

Bão hòa

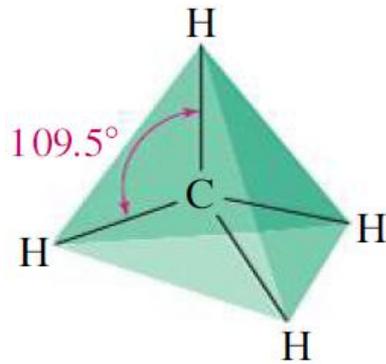
Bão hòa

Bất bão hòa

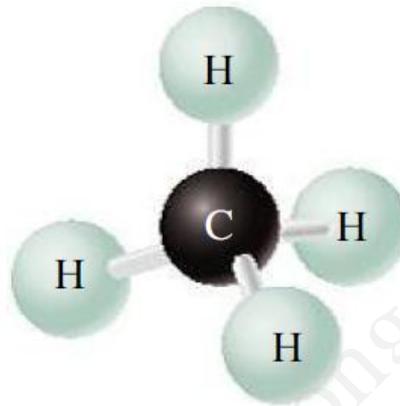
Bất bão hòa

Hợp chất hữu cơ chỉ chứa **C, H** và các nguyên tử khác: **O, N, S ...**

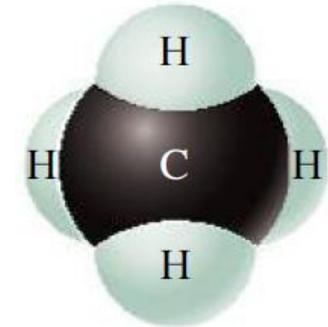
Cấu trúc phân tử methane



Cấu trúc tứ diện



Mô hình ball-and-stick



Mô hình space-filling

Cấu trúc phối cảnh

Nối nằm trong mặt phẳng

Nối hướng ra ngoài mặt phẳng

Nối hướng ra sau mặt phẳng

Xác định công thức phân tử

$$\text{C}_x\text{H}_y\text{N}_z\text{O}_t : \quad \frac{12x}{\text{C}\%} = \frac{y}{\text{H}\%} = \frac{14z}{\text{N}\%} = \frac{16t}{\text{O}\%} = \dots\dots\dots = \frac{M}{100}$$

$$\text{Độ bất bão hòa :} \quad \Omega = \frac{\sum n_i (v_i - 2) + 2}{2}$$

n_i : số nguyên tử của nguyên tố i trong phân tử hợp chất.

v_i : hóa trị của nguyên tố i .

BT: Xác định độ bất bão hòa của các hợp chất công thức phân tử C_5H_{10} , $\text{C}_5\text{H}_9\text{Cl}$, $\text{C}_3\text{H}_6\text{O}$, $\text{C}_3\text{H}_6\text{O}_2$, $\text{C}_3\text{H}_8\text{O}$, $\text{C}_3\text{H}_9\text{N}$

$$\text{C}_5\text{H}_{10} \quad \Omega = 1 \quad \text{C}_5\text{H}_9\text{Cl} \quad \Omega = 1 \quad \text{C}_3\text{H}_6\text{O} \quad \Omega = 1 \quad \text{C}_3\text{H}_8\text{O} \quad \Omega = 0$$

$$\text{C}_3\text{H}_6\text{O}_2 \quad \Omega = 1 \quad \text{C}_3\text{H}_9\text{N} \quad \Omega = 0$$

Đồng phân trong hóa hữu cơ

Đồng phân

Các đồng phân có cùng công thức hóa học nhưng khác nhau về cấu trúc và tính chất.

Đồng phân cấu tạo

Những phân tử này có cùng công thức nhưng khác nhau về cách nối.

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. (Ví dụ: đồng phân *cis-trans*)

Đối phân

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

Đồng phân cấu tạo

Những phân tử này có cùng công thức nhưng khác nhau về cách nối.

⇒ những hợp chất khác nhau

⇒ có tính chất vật lí, hóa học khác nhau

BT: Xác định đồng phân

Viết tất cả đồng phân cấu tạo ứng với công thức phân tử C_5H_{12}

Mạch carbon dài nhất có 5 C

Mạch carbon dài nhất gồm 4C và 1 C ở mạch nhánh

Mạch C gồm 3 C với hai mạch nhánh chứa 1 C

Số đồng phân của C_5H_{12} là ba

BT: Viết 5 đồng phân cấu tạo ứng với công thức phân tử C_4H_8O



cuu duong than cong . com

Nhóm chức

Alkane	$R-H$
Alkene	$\begin{array}{c} \diagup \quad \diagdown \\ C=C \\ \diagdown \quad \diagup \end{array}$
Alkyne	$-C\equiv C-$
Alcohol	$R-OH$
Alkyl halide	$R-X^b$
Ether	$R-O-R'$
Amine	$R-NH_2$
Aldehyde	$\begin{array}{c} O \\ \\ R-C-H \end{array}$
Ketone	$\begin{array}{c} O \\ \\ R-C-R' \end{array}$

Carboxylic acid	$\begin{array}{c} O \\ \\ R-C-OH \end{array}$
Ester	$\begin{array}{c} O \\ \\ R-C-OR' \end{array}$
Amide	$\begin{array}{c} O \\ \\ R-C-NH_2 \end{array}$
Arene	$Ar-H^d$
Aryl halide	$Ar-X^b$
Phenol	$Ar-OH$

^a Nhóm chức được biểu diễn bằng màu đỏ. R, R' là nhóm alkyl.

^b X là nguyên tử halogen: F, Cl, Br, I

^d Ar là nhóm thơm (aryl), ví dụ vòng benzene.

Danh pháp

Alkane: C_nH_{2n+2} vần cuối là **-ane**

CH_4 : meth**ane**

C_2H_6 : eth**ane**

C_3H_8 : prop**ane**

C_4H_{10} : but**ane**

C_5H_{12} : pent**ane**

C_6H_{14} : hex**ane**

C_7H_{16} : hept**ane**

C_8H_{18} : oct**ane**

C_9H_{20} : non**ane**

$C_{10}H_{22}$: dec**ane**

$C_{11}H_{24}$: undecane

$C_{12}H_{26}$: dodecane

$C_{13}H_{28}$: tridecane

$C_{14}H_{30}$: tetradecane

$C_{15}H_{32}$: pentadecane

$C_{20}H_{42}$: icosane

$C_{21}H_{44}$: henicane

$C_{22}H_{46}$: docosane

$C_{30}H_{62}$: triacontane

$C_{31}H_{64}$: tetracontane

$C_{50}H_{102}$: pentacontane

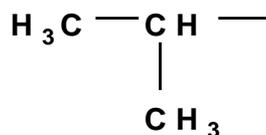
$C_{100}H_{202}$: hectane

Tên gốc hóa trị **alkyl**: thay **-ane** bằng **-yl**

$\text{CH}_3 -$: meth**yl**

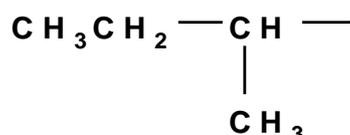
$\text{C}_2\text{H}_5 -$: eth**yl**

$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2 -$: *n*-prop**yl**



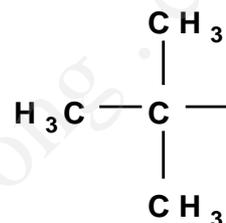
i-Propyl

1-Methylethyl



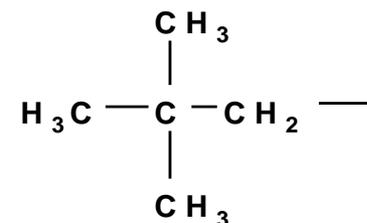
s-Butyl

1-Methylpropyl



t-Butyl

1,1-Dimethylethyl



Neopentyl

2,2-Dimethylpropyl

normal (*n*-) dùng cho alkyl mạch thẳng, như *n*-propyl hay *n*-butyl

sec (*s*) = secondary *tert* (*t*) = tertiary

Carbon nhất cấp (primary carbon) nối với một nguyên tử carbon khác

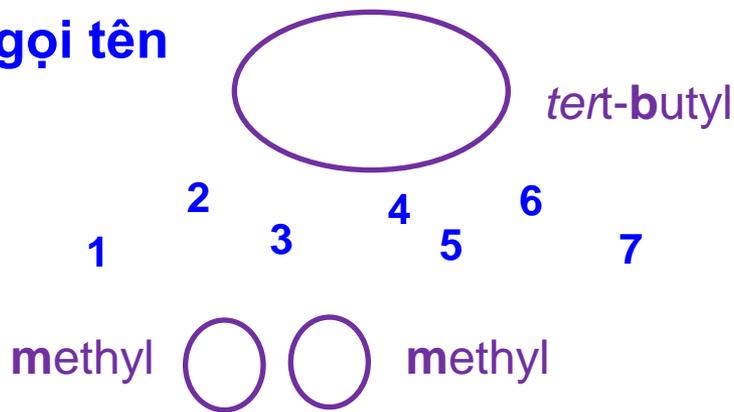
Carbon nhị cấp (secondary carbon) nối với hai nguyên tử carbon khác

Carbon tam cấp (tertiary carbon) nối với ba nguyên tử carbon khác

Carbon tứ cấp (quaternary carbon) nối với bốn nguyên tử carbon khác

Hydrogen nhất , nhị, tam cấp nối với carbon nhất, nhị, tam cấp tương ứng

Quy tắc gọi tên



4-(tert-butyl)-3,3-dimethylheptane

1. Chọn dây dài nhất làm dây chính, sử dụng tên hydrocarbon của dây này làm tên cơ sở. Nếu hai dây cùng chiều dài chọn dây có nhiều nhánh làm dây chính.
 2. Xem mỗi nhánh của dây chính là một nhóm thế alkyl, đổi đuôi *-ane* thành *-yl*.
 3. Đánh số nguyên tử C trên dây chính sao cho các nhóm thế có số chỉ vị trí thấp nhất có thể.
 4. Gọi tên mỗi nhóm thế kèm theo số chỉ vị trí. Đối với các nhóm thế giống nhau sử dụng *di*, *tri*, *tetra*, ... và viết số chỉ vị trí thích hợp của mỗi nhóm thế.
 5. Tách các chữ số với nhau bằng dấu phẩy nhưng không có khoảng cách. Tách chữ số và chữ cái bằng dấu gạch nối.
 6. Liệt kê tên các nhóm thế theo thứ tự bảng chữ cái.
- Bỏ qua các tiếp đầu ngữ *di-*, *tri-*, *sec-*, và *tert-* nhưng tiếp đầu ngữ *iso-* không được bỏ qua.

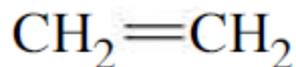
Cycloalkane: C_nH_{2n}

1,1,3-trimethylcyclopentane

Alkene: C_nH_{2n}

Alkyne: C_nH_{2n-2}

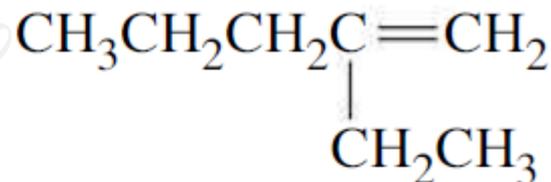
1. Chọn mạch chính là mạch dài nhất **có chứa nối đũa**.
2. Đánh số nguyên tử C của mạch chính sao cho nối đũa có số chỉ vị trí thấp nhất.
3. Sử dụng đuôi **-ene** cho alkene và **-yne** cho alkyne.



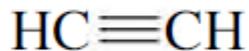
Ethene
(ethylene)



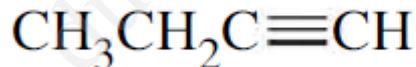
1-Butene



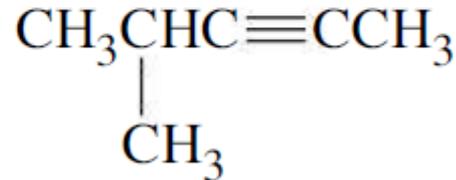
2-Ethyl-1-pentene



Ethyne
(acetylene)



1-Butyne
(ethylacetylene)



4-Methyl-2-pentyne
(isopropylmethylacetylene)

Aren – Hydrocarbon hương thơm

Tên thông thường

Tên một số gốc aril

Danh pháp quốc tế

Xem như dẫn xuất từ benzene, vị trí các nhóm trí hoán trên nhân benzene được xác định bằng: ortho (*o*), meta (*m*), para (*p*).

Halogenoalkane R-X

F (fluoro)

Cl (chloro)

Br (bromo)

I (iodo)

Tên thông thường:

CHCl_3 : chloroform

CHBr_3 : bromoform

CHI_3 : iodoform

Alcohol và Phenol

Alcohol và Phenol là hợp chất hữu cơ có chứa nhóm định chức hydroxyl, -OH

CTTQ: Alcohol **R-OH**, Phenol **ArOH**

Alcohol được chia làm 3 bậc

Alcohol nhất cấp

Alcohol nhị cấp

Alcohol tam cấp

Tên theo hệ thống IUPAC

sử dụng tiếp vĩ ngữ **-ol**

Ether: R-O-R'

Dùng từ ether đặt sau tên gốc của nhóm thế

Xem ether như một dẫn xuất alkoxy của hydrocarbon

Aldehyde và Ketone

Aldehyde và ketone là những hợp chất có chứa nhóm carbonyl $>\text{C}=\text{O}$

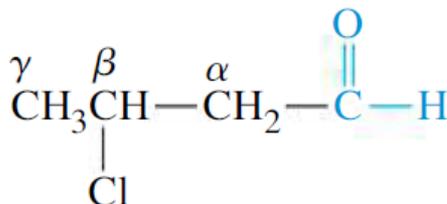
Aldehyde

Tên dẫn xuất từ acid: Thay thế **-ic** hoặc **-oic** trong tên thông thường của acid carboxylic tương ứng bằng **-aldehyde**

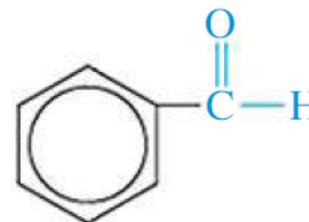
Tên IUPAC: sử dụng tiếp vĩ ngữ **-al**. Nhóm định chức **carbonyl** luôn luôn có chỉ số vị trí là **1**



Methanal
(formaldehyde)



3-Chlorobutanal
(β-chlorobutyraldehyde)



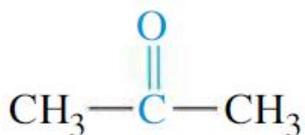
Benzaldehyde

Ketone

Ketone chi phương: Dùng từ **ketone** đặt sau tên gốc của nhóm thế

Ketone hương phương: Gọi tên theo tên thông thường của acid carboxylic tương ứng, thay **-ic** hoặc **-oic** bằng **-ophenone**

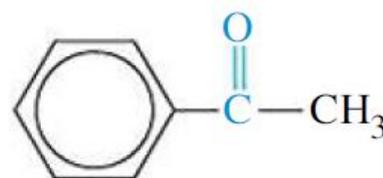
Tên IUPAC: sử dụng tiếp vĩ ngữ **-one**. Nhóm định chức **carbonyl** luôn luôn có chỉ số vị trí **nhỏ nhất**



Propanone
(acetone)



3-Pentanone
(diethyl ketone)



1-Phenylethanone
(acetophenone)

Acid carboxylic

R-COOH

Ar-COOH

Tên thông thường

Acid chi hoàn: acid cycloalkane**carboxylic**

Tên IUPAC: sử dụng tiếp vĩ ngữ **-oic**

Ester RCOOR'

Phần 1: gốc alkyl ứng với alcohol. Phần 2: thay đuôi **-ic** trong tên acid bằng **-ate**

Amide

Thay vắn **-ic** trong tên acid bằng **-amide**

Nếu là amide trí hoán thì gọi tên những gốc trí hoán đó sau chữ N-

Amine



Amine 1°



Amine 2°



Amine 3°



i ammonium

n alkyl

c amine

Độ ưu tiên của một số nhóm chức thông dụng

Acid carboxylic (*Độ ưu tiên cao nhất*) > ester > amide > aldehyde > ketone > alcohol > amine > alkoxy (*Độ ưu tiên thấp nhất*)

Cách gọi tên các hợp chất có nhiều nhóm thế

$\text{RCOOH} > \text{RCOOR}' > \text{RCONH}_2 > \text{RCHO} > \text{RCOR}' > \text{ROH} > \text{RNH}_2 > -\text{OR}$

Nhóm chức	Cấu trúc	Tiếp đầu ngữ	Tiếp vĩ ngữ
Alkane	R-H	alkyl-	-ane
Alkene	$>\text{C}=\text{C}<$	alkenyl-	-ene
Alkyne	$-\text{C}\equiv\text{C}-$	alkynyl-	-yne
Arene	Ar-H	aryl-	-ene
Halide	R-X	halogeno-	
Alcohol	R-OH	hydroxy-	-ol
Ether	R-O-R'	alkoxy-	ether
Amine	R-NR'R''	amino-	-amine
Aldehyde	RCHO	-CHO : -formyl	-al
Ketone	RCOR'	$>\text{C}=\text{O}$: -oxo	-one
Acid carboxylic	RCOOH	carboxy	-oic

BT: Gọi tên các hợp chất sau đây

$\text{RCOOH} > \text{RCOOR}' > \text{RCONH}_2 > \text{RCHO} > \text{RCOR}' > \text{ROH} > \text{RNH}_2 > \text{-OR}$

2. Alkane: C_nH_{2n+2}

Tính chất vật lí

- Không phân cực, không tan trong nước, dễ tan trong dung môi hữu cơ.
- Nhiệt độ nóng chảy, nhiệt độ sôi tương đối thấp.
- Với alkane dây thẳng: nhiệt độ sôi tăng theo số C.
- Đồng phân nhỏ gọn có nhiệt độ sôi thấp hơn.

Điều chế:

- **Trong kĩ nghệ:** từ dầu hỏa và khí thiên nhiên.
 - Khí thiên nhiên: chứa các alkane có phân tử khối thấp CH_4 , C_2H_6
 - Dầu mỏ: chứa các alkane có phân tử khối cao hơn, chưng cất phân đoạn tách ra những loại sản phẩm có công dụng khác nhau như: ether, dầu hỏa, dầu lửa, dầu cặn, dầu hắc...

- Trong phòng thí nghiệm

Hydrogen hóa alkene, alkyne

Tổng hợp Wurtz

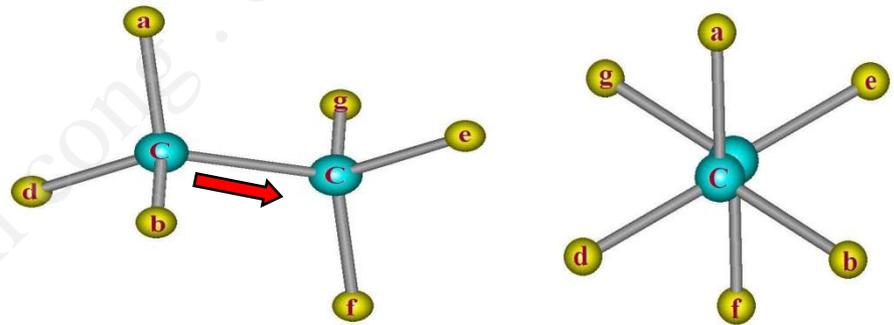
Từ muối RCOONa

Dùng để điều chế alkane đối xứng

Cấu trạng

Cấu trạng là các sắp xếp không gian khác nhau trong một phân tử. Chúng có được do sự quay quanh nối σ

Công thức chiếu Newman



Nhìn thẳng theo trục nối C-C

- C ở gần C_{abd} biểu diễn bằng 1 chấm tại tâm vòng tròn.
- Các nối của C ở gần xuất phát từ tâm vòng tròn: C-a, C-b, C-d.
- C ở xa C_{efg} được biểu diễn bằng vòng tròn.
- Các nối của C ở xa xuất phát từ trên đường tròn: C-e, C-f, C-g.

Cấu trạng lệch: các phối tử trên 2 carbon không che khuất nhau.

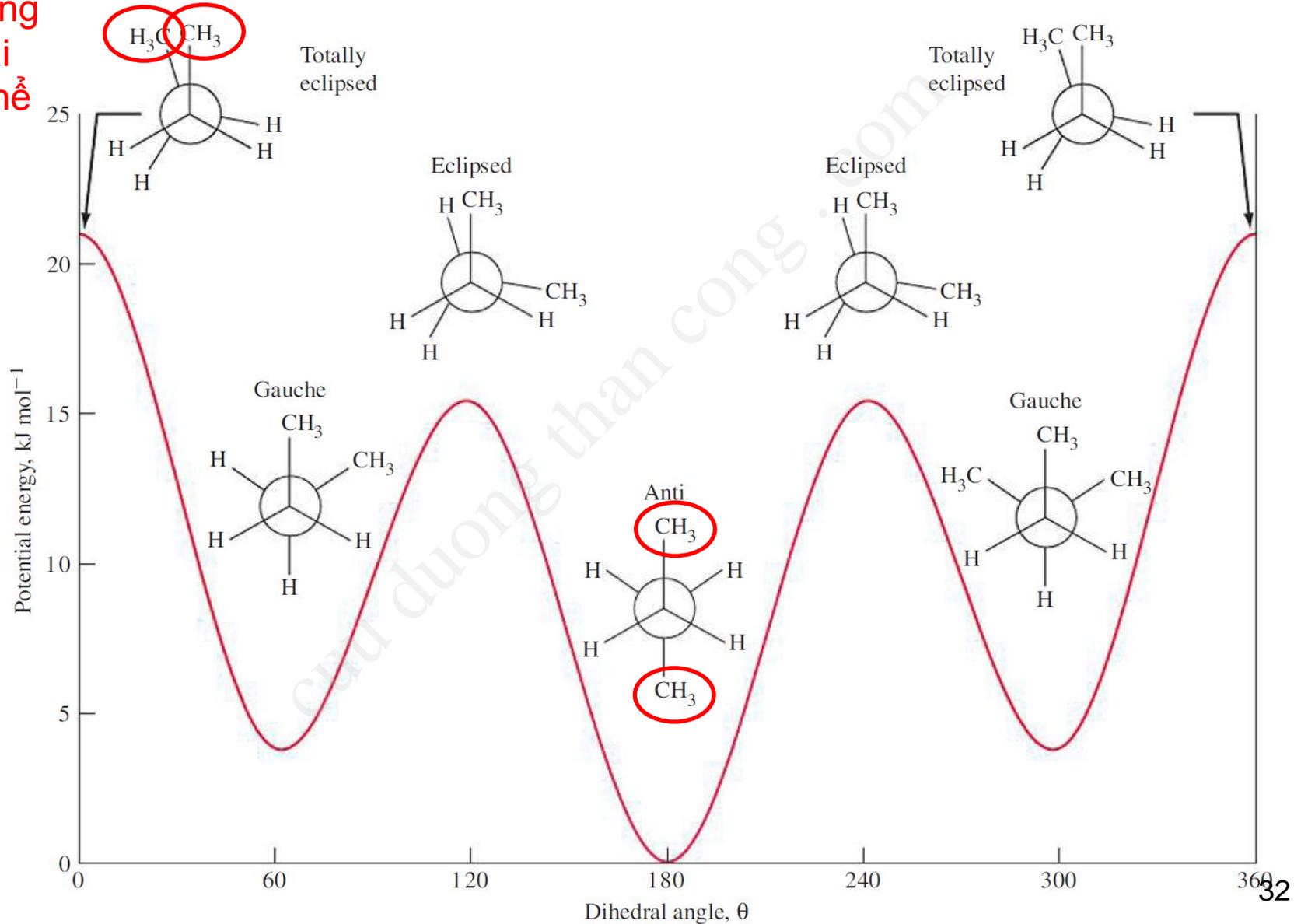
- Cấu trạng **đôi** lệch: 2 phối tử muốn so sánh lệch nhau một góc 180°
- Cấu trạng **bán** lệch: 2 phối tử muốn so sánh lệch nhau một góc 60°

Cấu trạng che khuất : các phối tử trên 2 carbon che khuất nhau từng cặp.

- Che khuất **toàn phần**: các phối tử giống nhau ở vị trí hoàn toàn che khuất nhau.
- Che khuất **một phần**: các phối tử khác nhau ở vị trí che khuất nhau.

Giản đồ năng lượng cho sự quay quanh nối C2-C3 của butane

Chương
ngại
lập thể



BT: Xác định cấu trạng bền nhất của alkane

Vẽ cấu trạng có mức năng lượng thấp nhất của hợp chất 2,3-dimethylpentane khi quan sát phân tử dọc theo trục C2-C3.

có 3 cấu trạng lệch

2 tương tác bán lệch

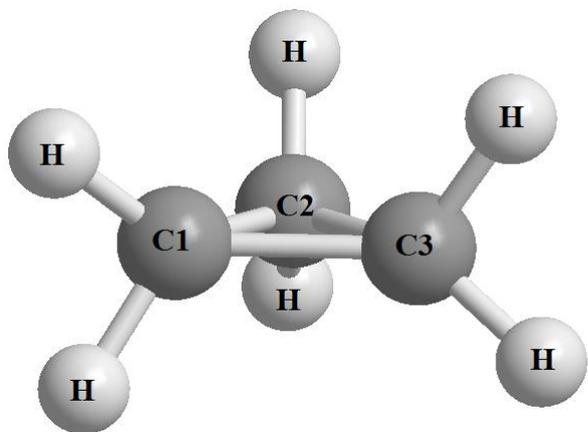
3 tương tác bán lệch

3 tương tác bán lệch

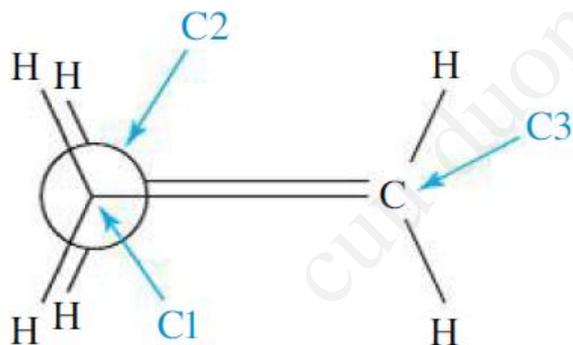
Năng lượng thấp nhất

3. Cycloalkane: C_nH_{2n}

Sức căng vòng ở cyclopropane

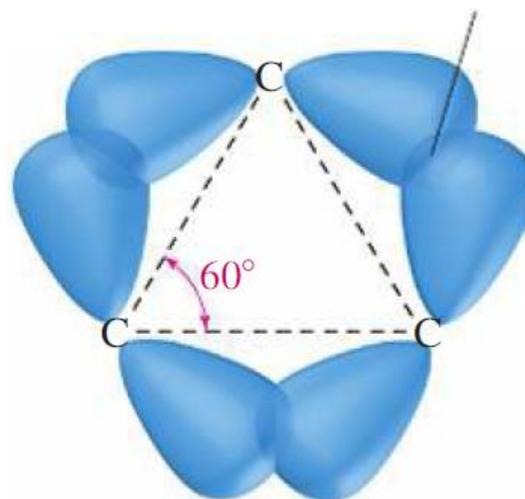


Sức căng do sự che khuất các nhóm thế



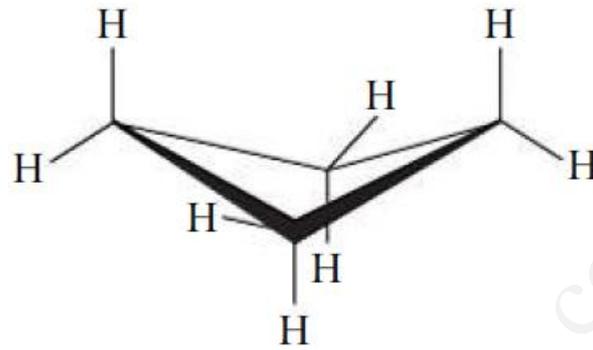
Sức căng do góc nối

Xen phủ vân đạo kém

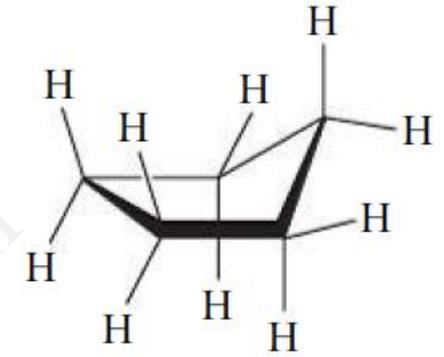


Cyclopropane rất căng, phản ứng mở vòng tạo alkane mạch thẳng dễ xảy ra 34

Cycloalkane



Cyclobutane



Cyclopentane

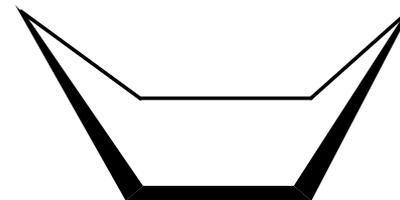
Dạng mặt phẳng

Dạng vòng gấp xếp

Dạng vòng gấp xếp



Cấu trạng ghế



Cấu trạng tàu

Cyclohexane

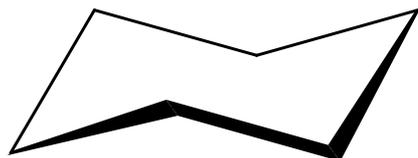
Đồng phân *cis-trans* trong cycloalkane mang hai nhóm thế

Đồng phân ***cis***: hai nhóm thế ở cùng phía mặt phẳng của vòng.

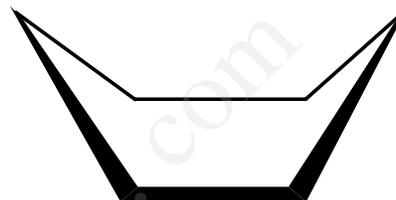
Đồng phân ***trans***: hai nhóm thế ở hai phía đối diện mặt phẳng của vòng.

Cyclohexane

Ở nhiệt độ phòng cyclohexane hầu như hoàn toàn nằm ở cấu trạng ghế.



Cấu trạng ghế
Cấu trạng bền



Cấu trạng tàu
Cấu trạng không bền

e (equatorial) : nối xích đạo

a (axial) : nối trục

α : nối hướng xuống mặt phẳng trung bình của vòng

β : nối hướng lên mặt phẳng trung bình của vòng

Cyclohexane

Ở nhiệt độ phòng cyclohexane hầu như hoàn toàn nằm ở cấu trạng ghế.

Cấu trạng bền

Cyclohexane, nhất là những cyclohexane có mang các nhóm thế, có thể nghịch chuyển để đi đến cấu trạng bền hơn.

Sau nghịch chuyển, **nội xích đạo e** trở thành **nội trục a** và ngược lại. Nhưng cấu hình α (hay β) của chúng vẫn **không thay đổi**.

Nhóm thế ở vị trí xích đạo
có cấu trạng bền hơn

Nhóm thế lớn ưu tiên
ở vị trí xích đạo