

# HÓA HỌC HỮU CƠ

*GV*            **Hoàng Thị Bích Kiều**

*Bộ Môn*    **Hóa Học**

*Khoa*        **Khoa Học Cơ Bản**

# Nội Dung Chính

1. Liên kết hóa học
2. Đồng phân của các HCHC
3. Hiệu ứng cấu trúc của các HCHC
4. Cơ chế phản ứng của các HCHC
5. Ankan
6. Anken
7. Ankyn
8. Ankadien
9. Aren
10. Dẫn xuất halogen
11. Alcohol-Phenol
12. Aldehyde-Ketone
13. Carboxylic acid
14. Amin

**Hoá học hữu cơ** – môn khoa học nghiên cứu các hợp chất hữu cơ.

**Hợp chất hữu cơ (HCHC)** - những hợp chất chứa cacbon.

**Thành phần nguyên tố của HCHC:**

- *Nguyên tố chính*: C, H.

Vd : than chì (graphit), cacbin ...

Ngoài ra các HCHC còn có thể chứa các nguyên tố sau :

- *Nguyên tố cổ điển* : N, O, S, halogen.

- *Nguyên tố kim loại* (hợp chất cơ kim) : Zn, Mg, Hg... (cơ kẽm, cơ magie, cơ thủy ngân)

- *Nguyên tố phi kim* (cơ phi kim) : P, Si, N... (cơ photpho, cơ silic, cơ nitơ...)

## I. Phương pháp mô tả HCHC

1. *Công thức đơn giản* - cho biết thành phần nguyên tố và tỷ lệ giữa các nguyên tố ( $\text{CH}_2\text{O}$ -CTĐG của axit axetic ( $\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2$ ))
2. *Công thức phân tử* - cho biết thành phần nguyên tố và số lượng nguyên tử của mỗi nguyên tố ( $\text{C}_x\text{H}_y\text{N}_z\text{O}_n$ )  
CTĐG hay CTPT được xác định dựa trên phương pháp Lavoisier – Leibig.
3. *Công thức cấu tạo phẳng* - biểu diễn cấu trúc của phân tử quy ước trên một mặt phẳng.
  - a/ *Công thức Lewis* - biểu diễn các liên kết trong phân tử bằng electron.

# *CHƯƠNG I*

# **LIÊN KẾT HOÁ HỌC**

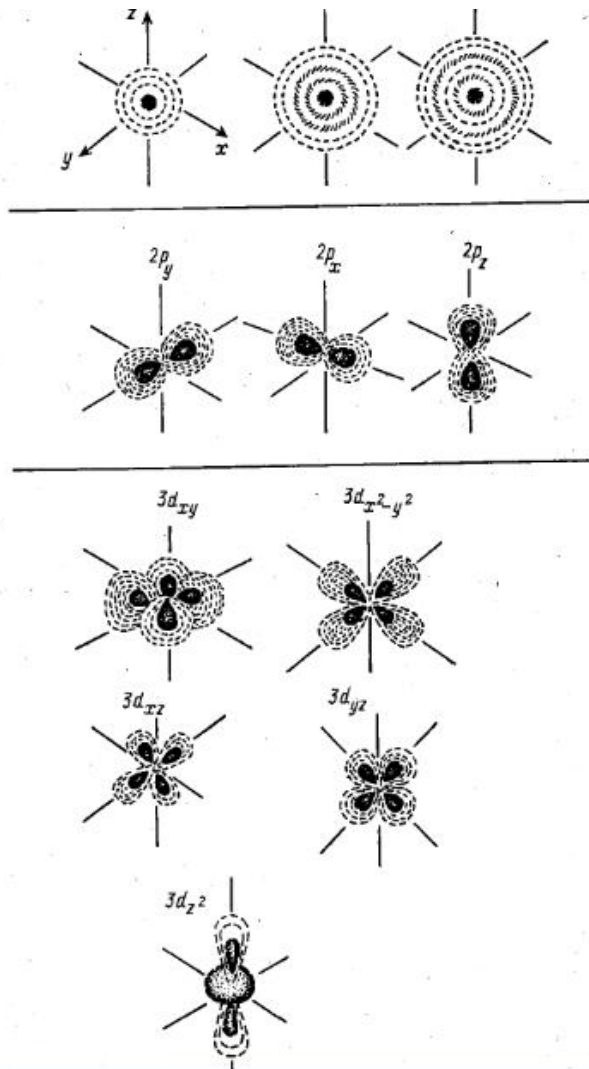
b/ ***Công thức Kekulé*** - biểu diễn các liên kết trong phân tử bằng vạch ngang.

c/ ***Công thức cộng hưởng*** - biểu diễn các liên kết trong phân tử bằng sự tổ hợp của các cấu trúc Lewis có thể tồn tại của chính phân tử đó



# II. ORBITAN

## 1. Orbitan nguyên tử



... является  $1s$ -орбиталью. Если  $n=2$  и  $l=0$ , то это  $2s$ -орби  
 Ее энергия выше, чем энергия  $1s$ -орбитали, по двум причи  
 Во-первых, она имеет радиальный узел (рис. 1.2), предст

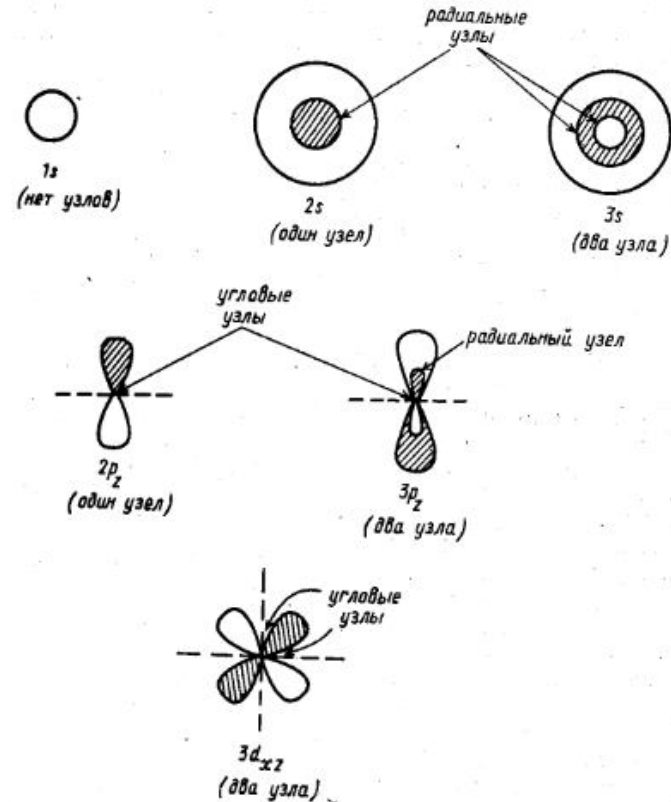
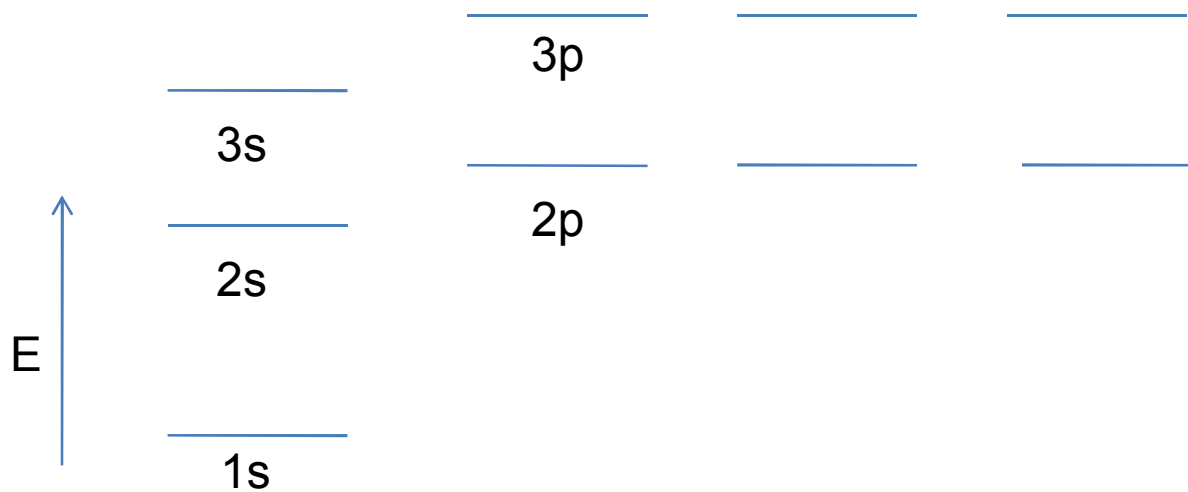


Рис. 1.2. Узловые свойства и симметрия атомных орбиталей. Орбиталь с  $n=1$  не имеет узлов. Орбитали с  $n=2$  имеют один узел, с  $n=3$  — два узла и т. д. Относительно операции симметрии инверсии (центр инверсии совпадает с центром ядра) все  $s$ -орбитали симметричны, все  $p$ -орбитали антисимметричны, все  $d$ -орбитали снова симметричны и т. д.

Sự xuất hiện của các nút làm tăng năng lượng electron của nguyên tử và cũng chính là năng lượng obitan, đồng nghĩa với tính hoạt hoá của nguyên tử cũng tăng lên.



**Mức năng lượng của các obitan**



## 2. Obitan phân tử

a/ *Obitan phân tử liên kết* - xảy ra khi có sự xen phủ của 2 obitan cùng dấu – xen phủ dương.

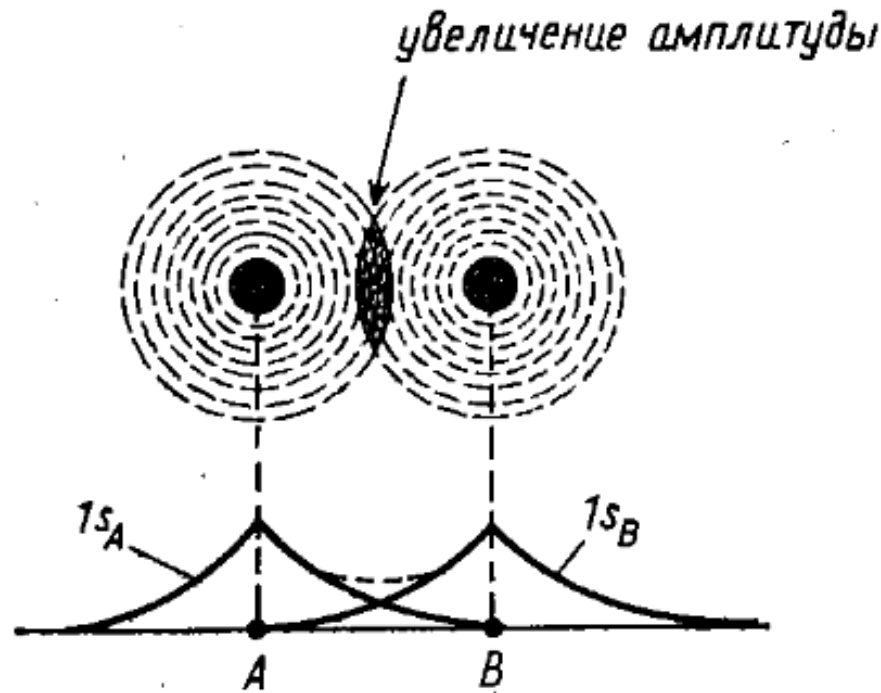


Рис. 1.3. Перекрывание АО, ведущее к связыванию

b/ Orbital phân tử phản liên kết - xảy ra khi có sự xen phủ của 2 orbital khác dấu – xen phủ âm.

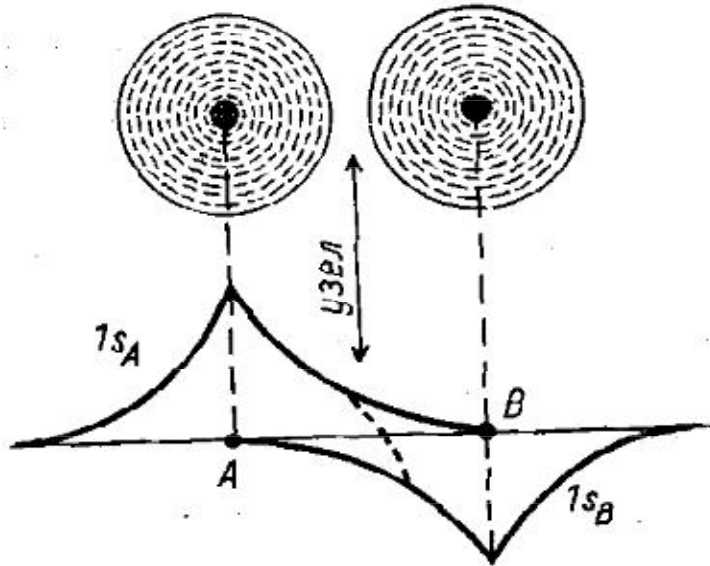


Рис. 1.5. Образование антисвязывающей (разрыхляющей) молекулярной орбитали

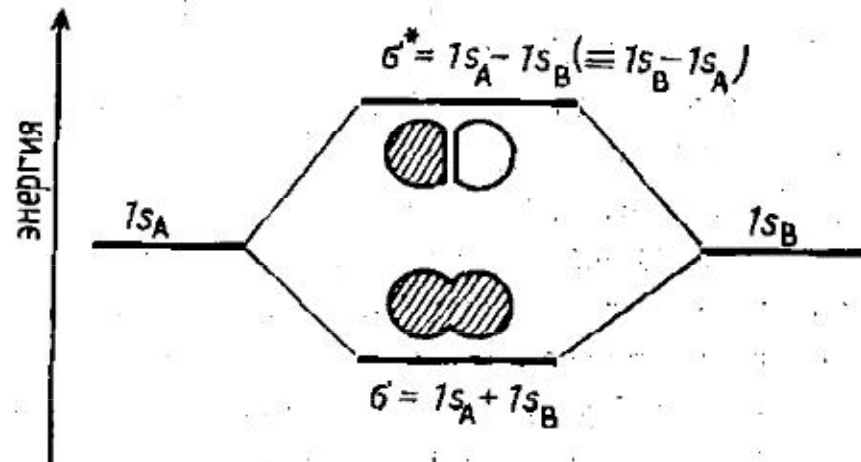


Рис. 1.6. Диаграмма энергетических уровней МО, образованных из 1s-орбиталей

Sự xen phủ âm dẫn đến sự tạo thành nút nên orbital phân tử có mức năng lượng cao, tính ổn định thấp hay tính hoạt hoá của phân tử cao.

## *c/ Orbital $2p\sigma$ , $2p\pi$*

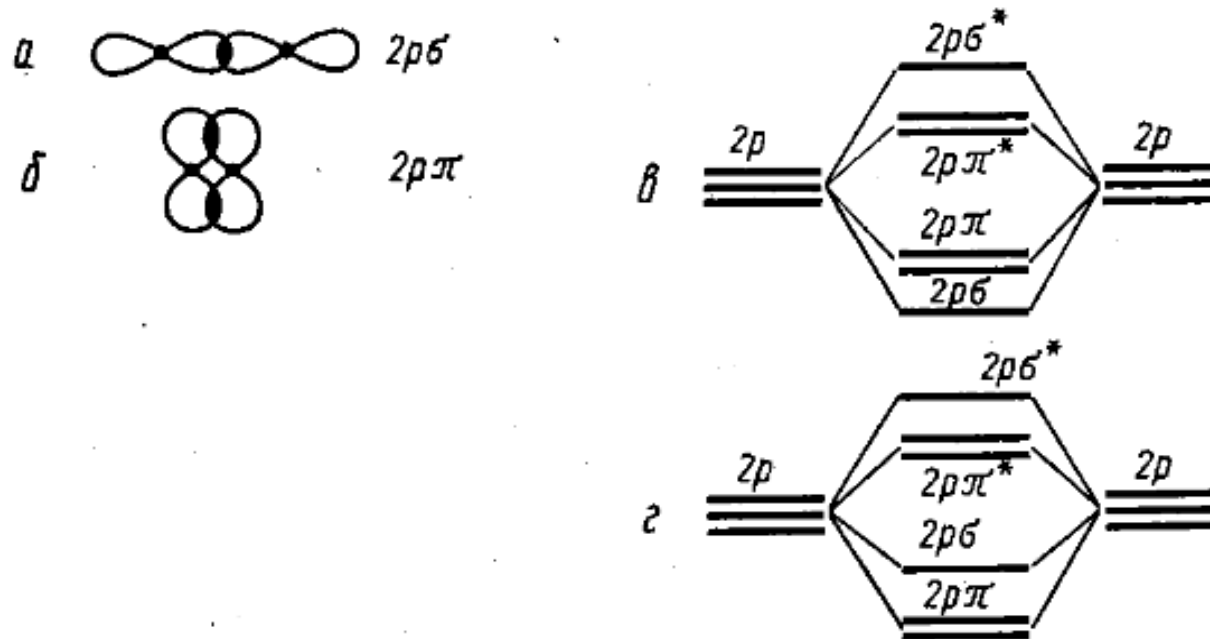
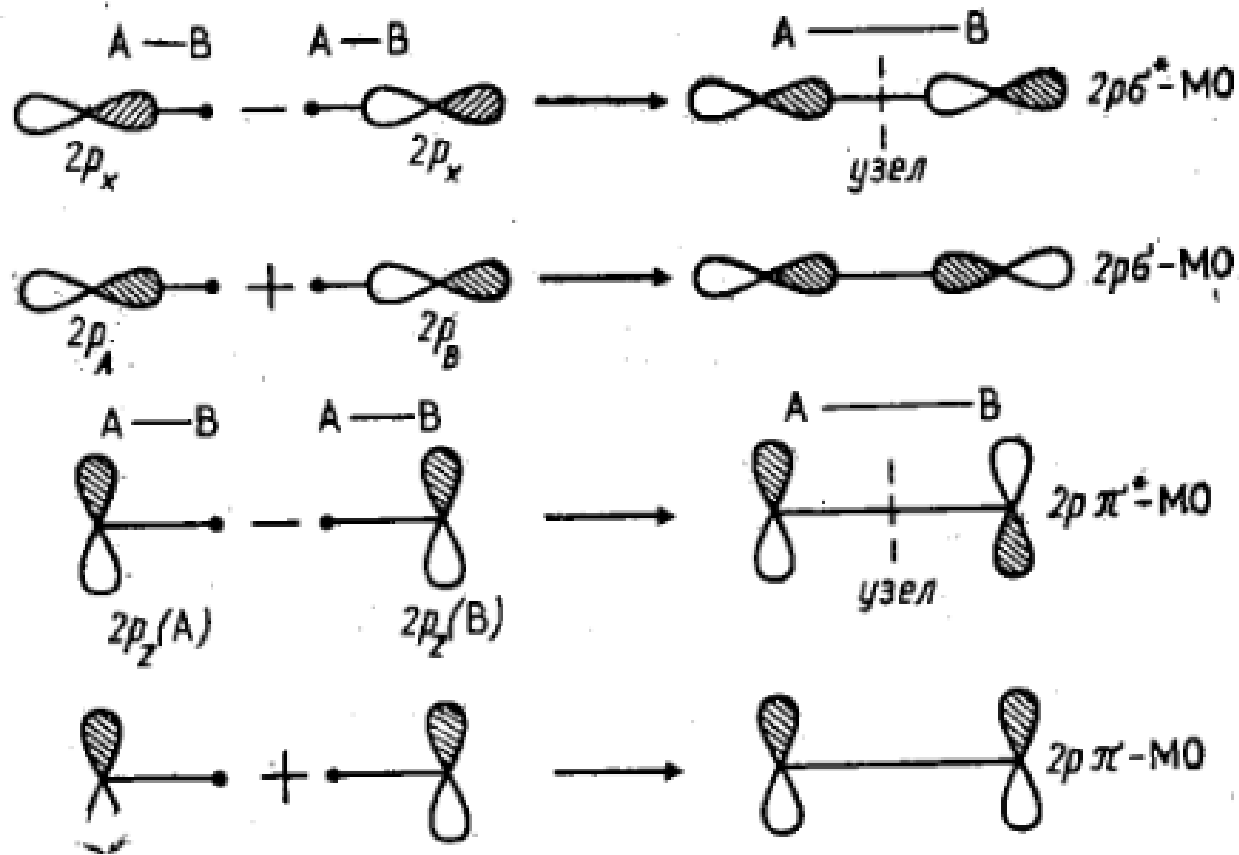


Рис. 1.8. Образование  $2p\sigma$ -МО (а) и  $2p\pi$ -МО (б); б — предсказанное расположение по энергии, з — часто наблюдаемая последовательность

- Orbital  $2p\sigma/2p\pi$  được tạo thành do sự xen phủ trục/bên của 2 orbital p và tạo nên liên kết  $\sigma/\pi$ , ứng với mức năng lượng thấp/cao hay tính hoạt hóa thấp/cao của phân tử.

Sự hình thành các obitan  $2p\sigma$ ,  $2p\pi$  được mô tả bằng sơ đồ sau

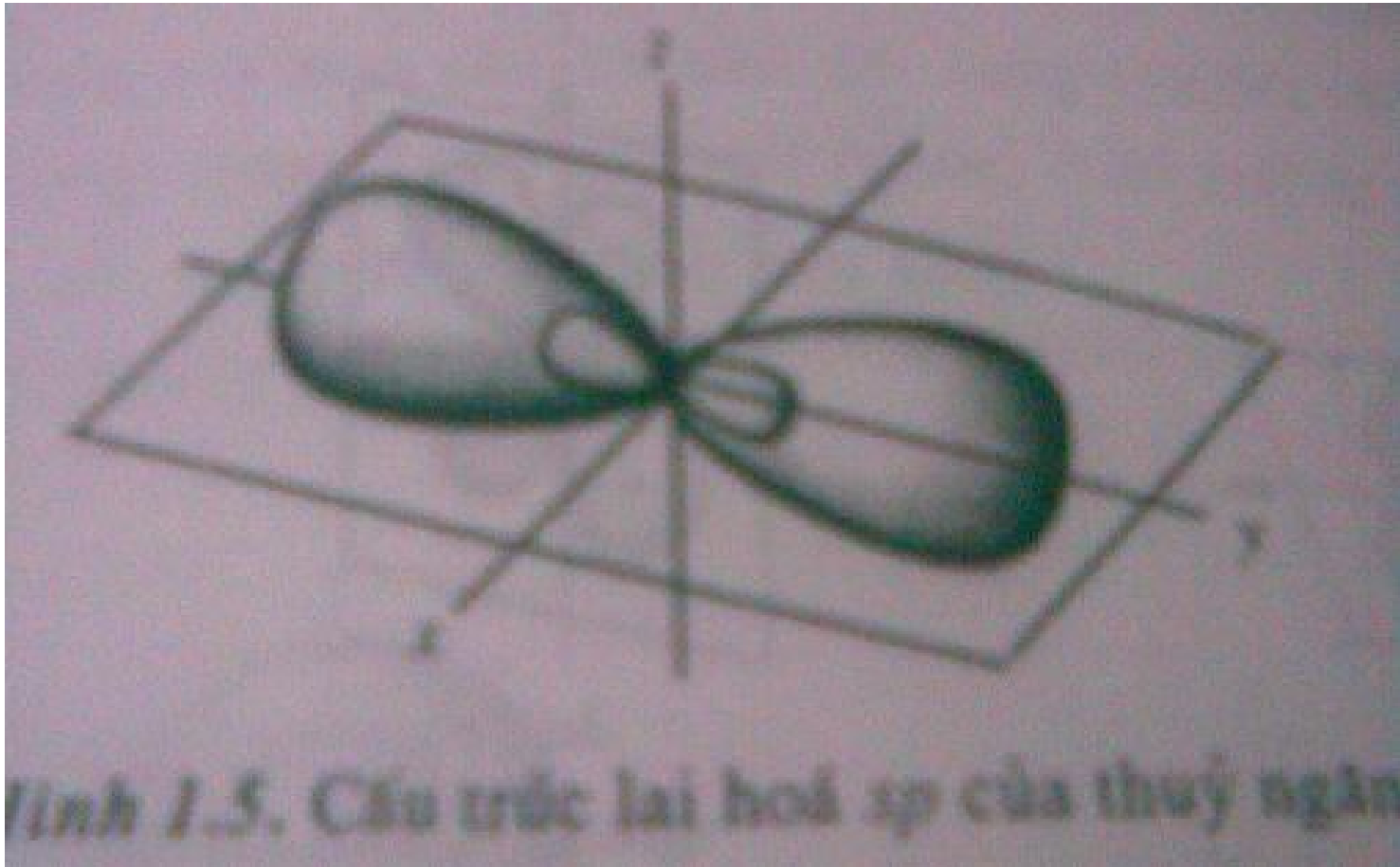


Sơ đồ hình thành obitan  $2p\sigma$ ,  $2p\pi$

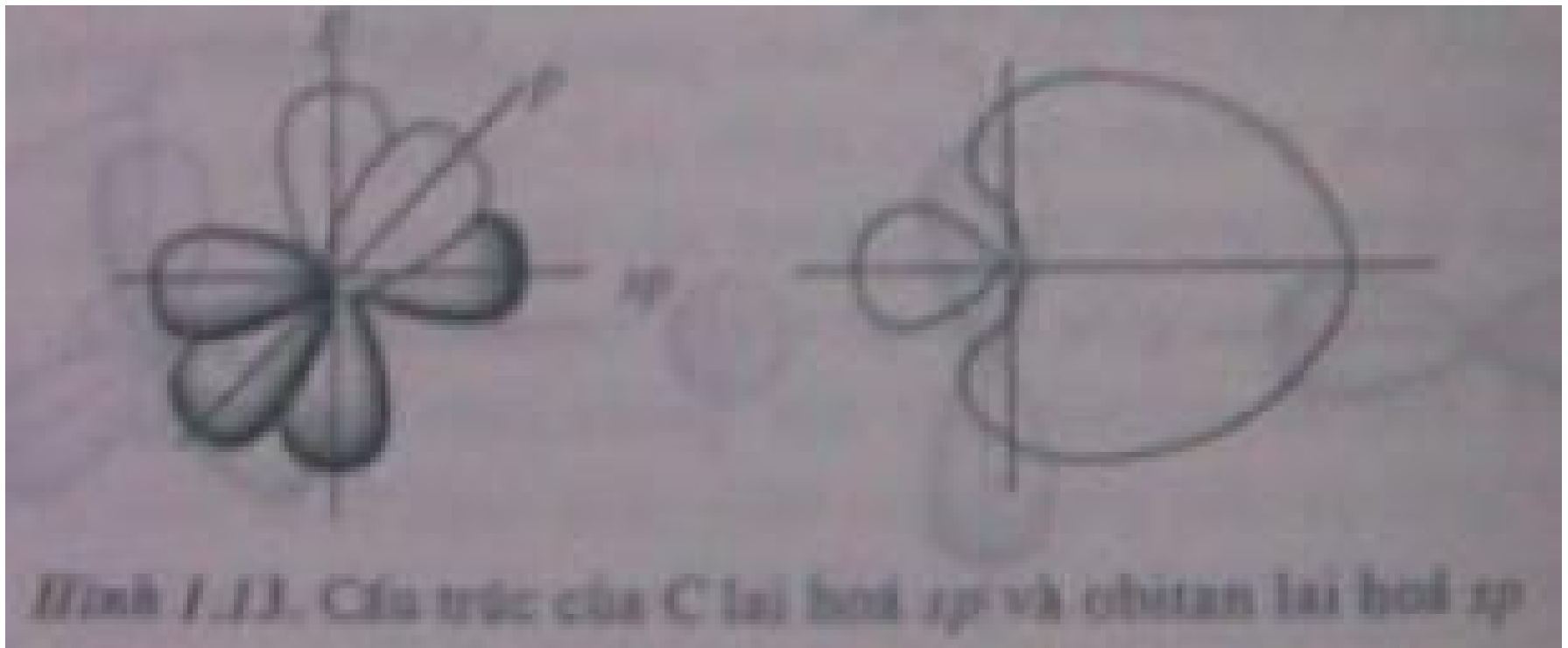
### 3. Obitan lai hóa

- Đó là sự tương tác của các obitan có năng lượng gần giống nhau để tạo thành các obitan mới với năng lượng thấp hơn obitan ban đầu và có khả năng xen phủ cao hơn khi liên kết.
- Obitan lai hóa chỉ có trong các nguyên tử trong phân tử, không có trong các nguyên tử riêng rẽ.
- Obitan lai hóa khác với các obitan s, p, d và f; chúng mang đặc tính phụ thuộc vào tỷ lệ của các obitan nguyên tử tham gia tạo nên chúng (obitan  $sp^2$  có  $1/3$  bản chất của obitan s và  $2/3$  bản chất của obitan p)

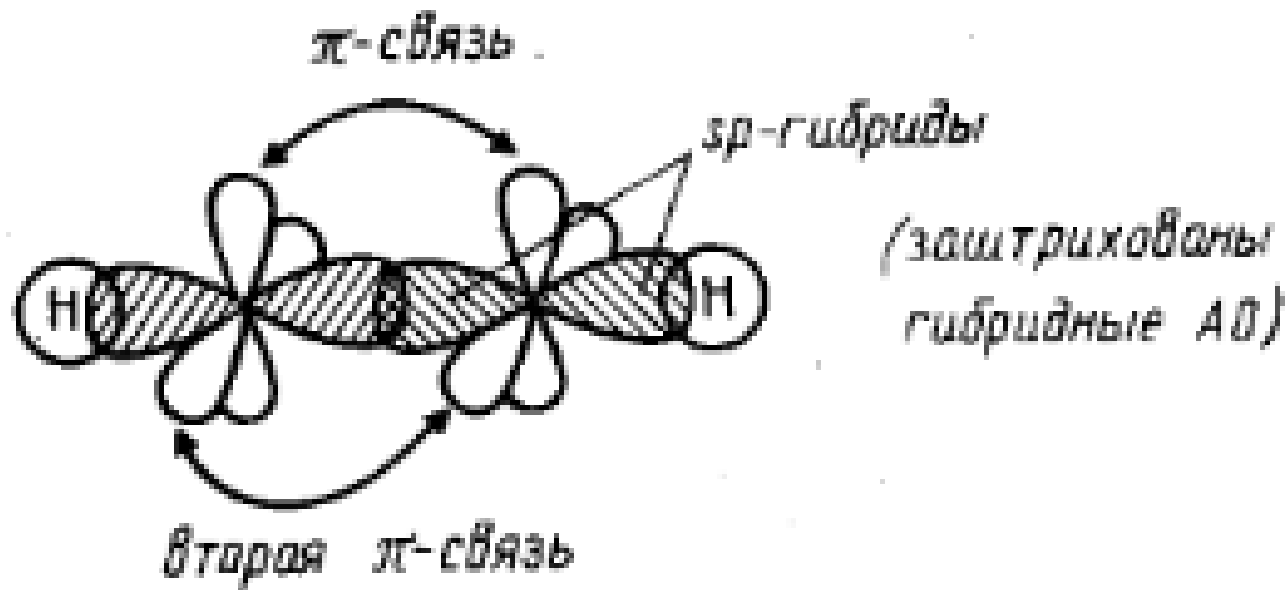
*a/ Lai hóa sp* (lai hóa nhị giác – diagonal hybridization)



# Cấu trúc lai hoá sp của C và orbital lai hoá sp



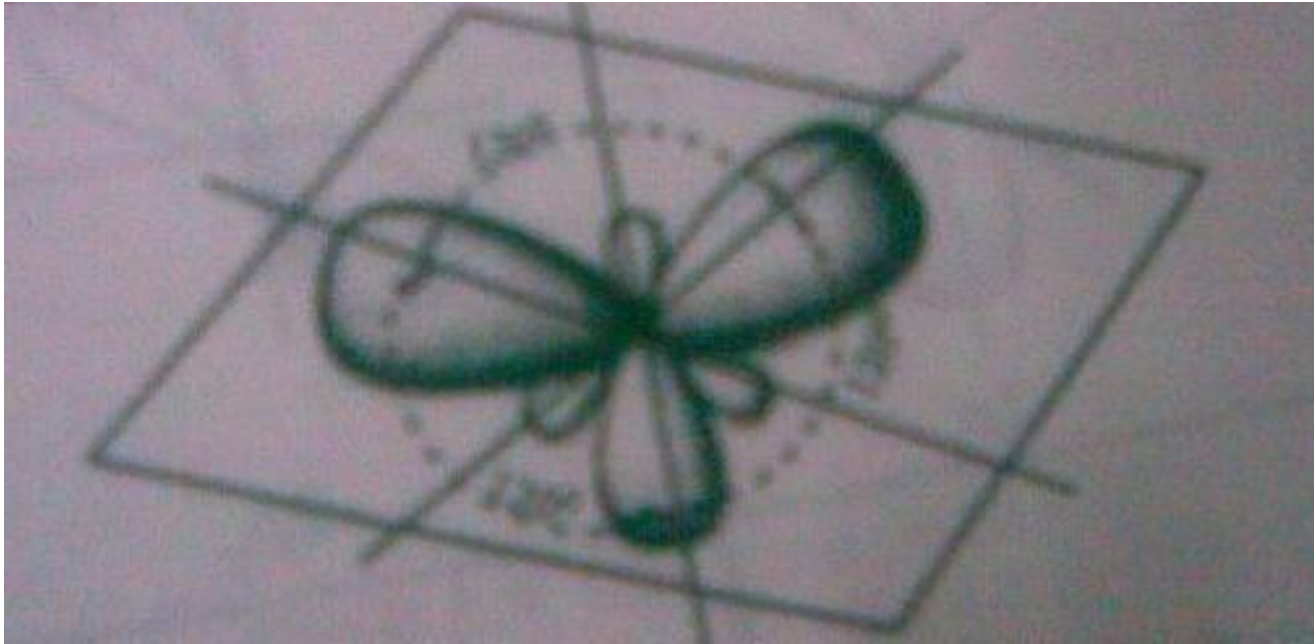
# Giải thích cho sự hình thành liên kết trong hợp chất axetylen





- Obitan sp gồm 2 obitan, có  $\frac{1}{2}$  bản chất của obitan s và  $\frac{1}{2}$  bản chất của obitan p, mỗi obitan gồm có 2 thùy, 1 thùy lớn và 1 thùy rất nhỏ, 2 obitan này nằm trên đường thẳng với góc  $180^\circ$ .
- Cấu trúc obitan lai hoá có mật độ electron lớn ở thùy lớn của obitan để tham gia tạo liên kết còn thùy nhỏ có mật độ electron gần bằng 0, không tham gia xen phủ với obitan khác, thường được gọi là obitan trống hay phản liên kết.
- Các obitan lai hoá có khả năng xen phủ trực với các obitan s, p, ... để tạo thành liên kết  $\sigma$ .

***b/ Lai hoá  $sp^2$***  (lai hoá tam giác – trigonal hybridization)

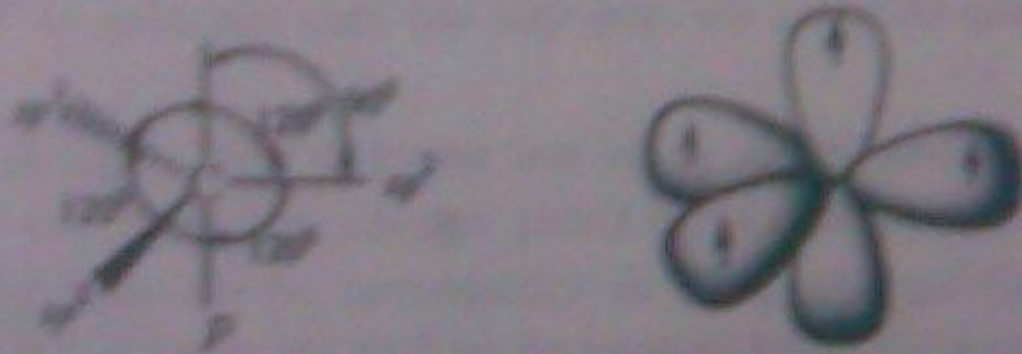


- Các obitan  $sp^2$  được phân bố trong không gian với ba trục nằm trên mặt phẳng với góc  $120^\circ$

# Cấu trúc lai hoá $sp^2$ của C và orbital lai hoá $sp^2$

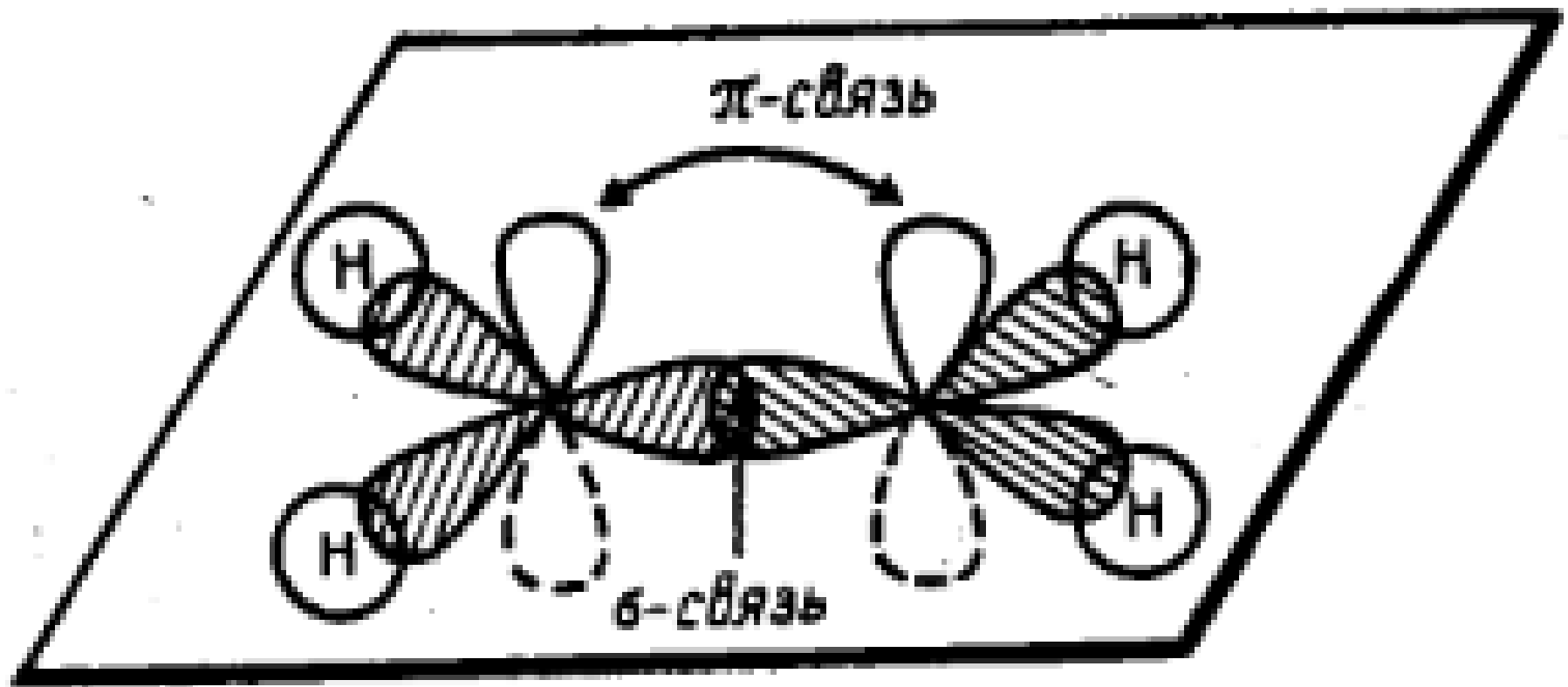


Hình 1.10. Sự lai hoá  $sp^2$  của carbon và cấu hình orbital lai hoá

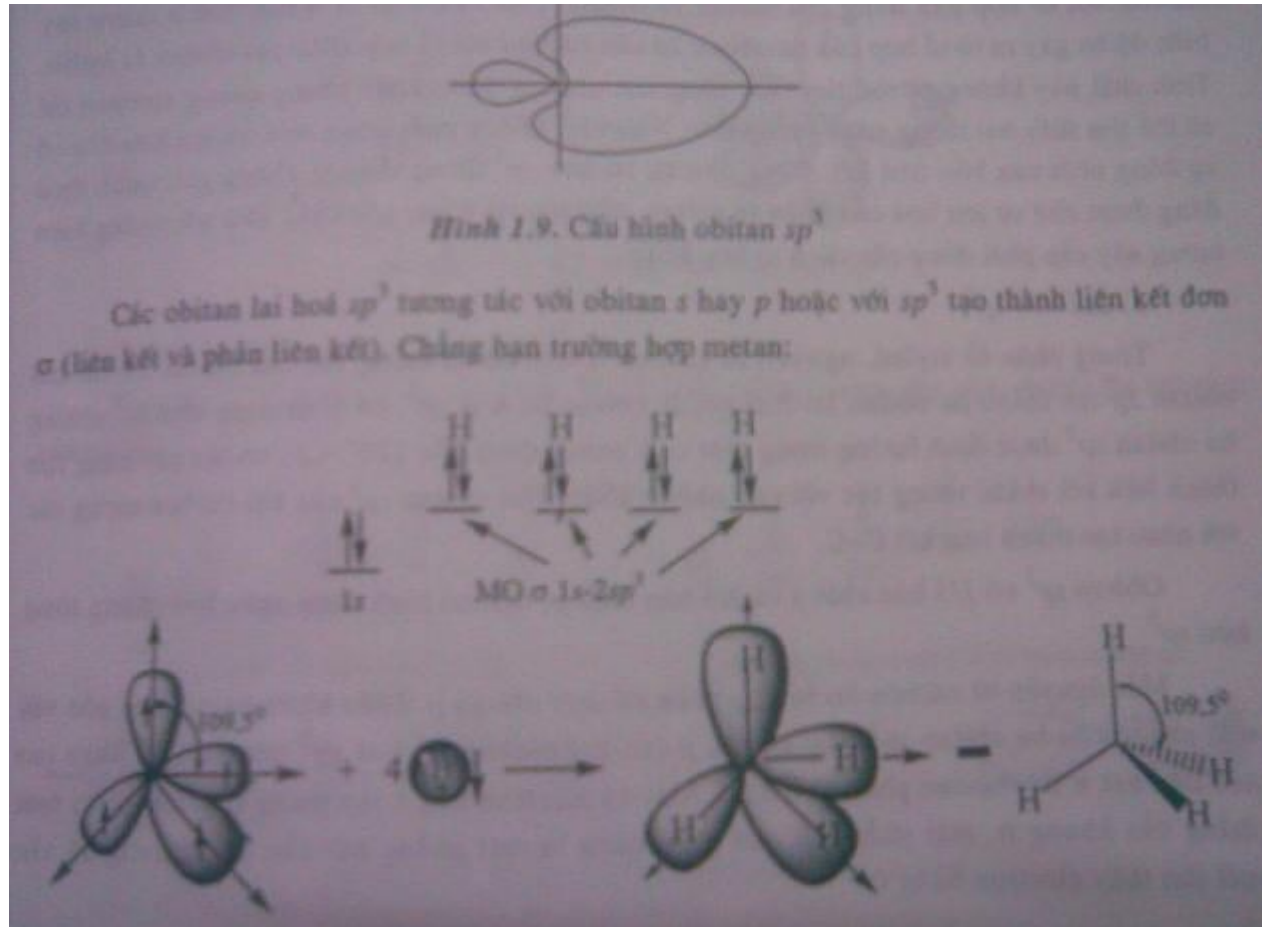


Hình 1.11. Cấu hình của C lai hoá  $sp^2$

Giải thích cho sự hình thành liên kết trong hợp chất etylen



## c/ Lai hoá $sp^3$



Obitan  $sp^3$  gồm 4 obitan định hướng trong không gian theo hình tứ diện đều với góc là  $109^{\circ}28'$

## *Tổng quan về các orbital lai hoá $sp$ , $sp^2$ và $sp^3$*

- Các orbital này đều có hình dáng giống nhau nhưng orbital  $sp^3$  chứa 25% bản chất s,  $sp^2$  chứa 33%,  $sp$  chứa 50% , còn lại là bản chất p.
- Hàm lượng orbital p trong orbital lai hoá càng lớn, orbital càng kéo dài hơn, trọng tâm trọng lực của mây electron càng đi xa hạt nhân hơn.
- Hàm lượng s tăng, orbital ít bị kéo dài hơn, nghĩa là có xu hướng tiến tới hình cầu hơn, trung tâm mật độ electron ở gần hạt nhân hơn.
- Sự khác nhau về hình dáng orbital thể hiện ở chiều dài liên kết, năng lượng tạo thành liên kết và đặc tính quang phổ.

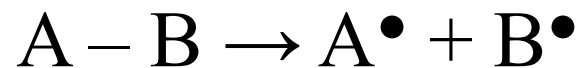
### 3. Tính hình học của phân tử

a/ Chiều dài liên kết - tổng bán kính hóa trị của 2 nguyên tố tạo nên liên kết.

Bán kính hóa trị - nửa chiều dài liên kết của phân tử đối xứng. Vd chiều dài của liên kết H-Cl

$$l_{\text{H-Cl}} = (r_{\text{H}} + r_{\text{Cl}}) = 1/2(r_{\text{H-H}} + r_{\text{Cl-Cl}})$$

b/ Năng lượng liên kết – năng lượng cần để phân cắt một liên kết.



c/ Góc liên kết – góc giữa 2 liên kết hay còn gọi là góc hoá trị.

## 4. Độ âm điện

- Ký hiệu:  $\chi$
- Thang độ âm điện Pauling dựa trên năng lượng liên kết của phân tử hai nguyên tử.

Nguyên tố	$\chi$ , eV	Nguyên tố	$\chi$ , eV
F	4.0	C	2.5
O	3.5	H	2.1
Cl	3.0	P	2.1
N	3.0	B	2.0
Br	2.8	Si	1.8
S	2.5	Mg	1.2
I	2.5	Na	0.9



- Độ âm điện cần được tính cho các trạng thái hoá trị khác nhau, độ lai hoá khác nhau và nguyên tử cacbon bậc khác nhau:

Trạng thái lai hoá	$C_{sp^3}$	$C_{sp^2}$	$C_{sp}$
$\chi, eV$	2.5	2.8	3.5

- $\chi \neq \text{const}$ ,  $\chi$  phụ thuộc vào sự định hướng của liên kết và vào các nhóm thế khác có trong thành phần nguyên tử, đặc biệt là những nguyên tử liên kết trực tiếp.

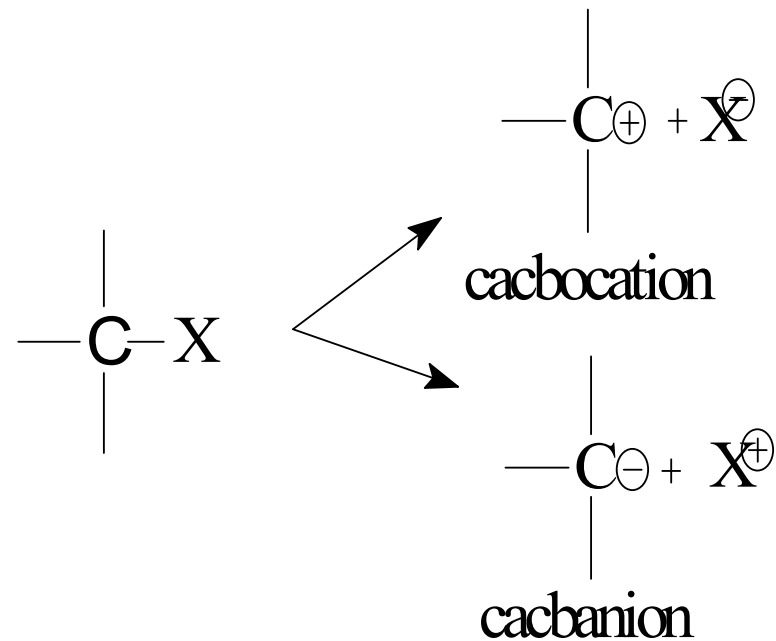
Nhóm thế	$\chi, eV$	Nhóm thế	$\chi, eV$
$CH_3$	2.472	$CH_3CH_2$	2.482
$C_6H_5$	2.717	$NO_2$	3.421
$CBr_3$	2.561	$CHO$	2.800
$CCl_3$	2.666	$COOH$	2.900

## 5. Liên kết hoá học

a/ *Liên kết tĩnh điện* - được thực hiện bằng lực hút giữa các tiểu phân tích điện trái dấu nhau (lực hút Coulomb).

### a.1. Liên kết ion

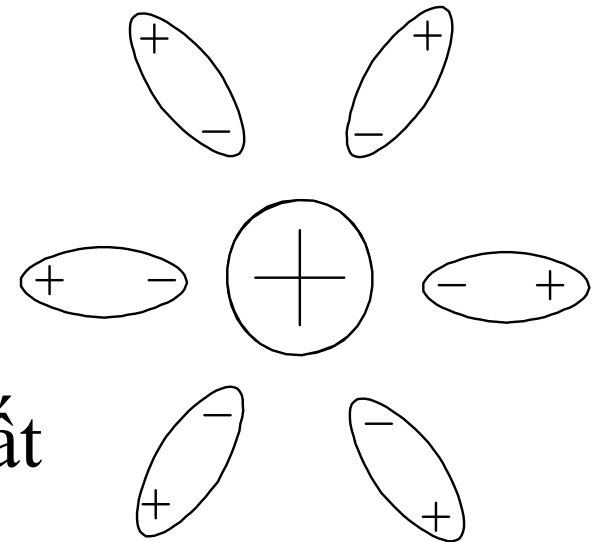
- Các hợp chất ion tồn tại dưới dạng muối phức, muối của axit  $\text{RCOO}^- \text{Na}^+$  muối amoni  $\text{R}_4\text{N}^+ \text{Cl}^-$  muối sunfonat  $\text{RSO}_3^- \text{Na}^+$ , .....



## a.2. Tương tác ion-lưỡng cực và lưỡng cực-lưỡng cực

- *Tương tác ion-lưỡng cực:*

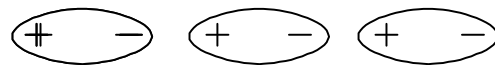
tương tác giữa ion dương và đầu âm lưỡng cực hay ngược lại.



– Hydrat hoá – hoà tan các hợp chất ion (các muối) vào trong nước.

– Sonvat hoá – thay nước bằng dung môi hữu cơ.

- *Tương tác lưỡng cực - lưỡng cực:* tương tác giữa 2 đầu ngược dấu nhau của những phân tử phân cực mạnh.



– Các hợp chất phân cực có nhiệt độ nóng chảy tương đối cao, độ nhớt cao và giảm áp suất hơi.

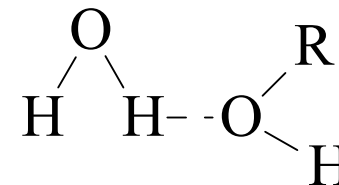
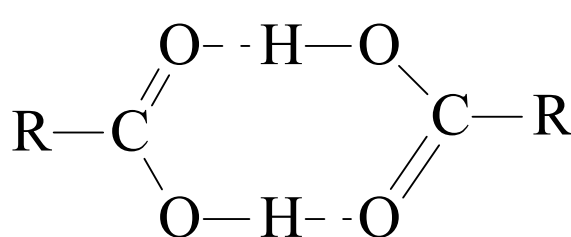
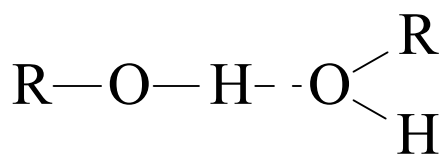
### a.3. Liên kết hydro

- Một trong những loại tương tác lưỡng cực - lưỡng cực mạnh nhất như là một liên kết ion yếu.



liên kết hydro

- Đó là tương tác giữa hydro trong liên kết X – H phân cực do X có độ âm điện lớn và nguyên tử Y có cặp electron n.
- Có 2 loại : liên kết hydro nội và ngoại phân tử.



- Liên kết hydro giữa 2 chất lỏng cùng loại sẽ làm tăng  $t_s^0$  của chất, nhất là chất lỏng có khối lượng phân tử thấp.

## ***b/ Liên kết cộng hoá trị (LKCHT)***

*b.1. Phương pháp obitan phân tử: liên kết hình thành bằng sự xen phủ của các obitan nguyên tử.*

### **Thuyết obitan phân tử:**

- MO chỉ có trong phân tử, AO là của nguyên tử. MO mô tả khoảng không gian trong phân tử.
- MO tổ hợp bằng các AO. Số MO bằng số AO tổ hợp nên.
- MO có năng lượng thấp hơn AO ban đầu tạo MO liên kết, cao hơn là MO phản liên kết, cùng năng lượng với AO ban đầu là MO không liên kết.

## *b.2. Phương pháp liên kết hoá trị*

- Đặc tính chung của liên kết cộng hoá trị là để chung cặp e hoá trị giữa hai nhân của hai nguyên tử tham gia liên kết.
- Liên kết cộng hoá trị có thể là:
  - $\sigma$  với 2e gọi là liên kết đơn
  - $\sigma + \pi$  với 4e gọi là liên kết đôi
  - $\sigma + 2\pi$  với 6e gọi là liên kết ba.

### **Thuyết liên kết hoá trị:**

- LKCHT hình thành bằng sự xen phủ của các AO mà mỗi AO chứa một e có spin ngược nhau.
- Mỗi nguyên tử liên kết giữ nguyên AO của mình nhưng cặp e trên obitan xen phủ là thuộc về cả 2 nguyên tử.
- Độ xen phủ của obitan càng lớn thì liên kết càng bền.