

# ĐẠI CƯƠNG HỢP CHẤT HỮU CƠ

## Giới thiệu

Hóa hữu cơ là một phân môn quan trọng của Hóa học. Chuyên đề này giới thiệu những kiến thức cơ bản của Hóa hữu cơ có trong chương trình phổ thông. Các kiến thức trong chuyên đề này phù hợp cho các bạn học sinh THCS có nguyện vọng thi vào 10 chuyên, cũng như các bạn học sinh THPT đang học chương trình phổ thông cơ bản.

Chuyên đề được viết bởi hai tác giả Nguyễn Gia Hân và Hoàng Tôn Bảo, hiện đang là học sinh trường Phổ thông Năng khiếu - ĐHQG TP.HCM.

## 1 KHÁI NIỆM HỢP CHẤT HỮU CƠ

Hợp chất hữu cơ là hợp chất của cacbon (trừ CO, CO<sub>2</sub>, muối carbonate, cyanide, carbide,...). Hợp chất hữu cơ nhất thiết phải có C, thường có H, O, hay gặp N; ngoài ra có thể có S, P, các halogen hay kim loại. Các hợp chất hữu cơ được chia thành những loại như sau:

- Hydrocarbon: là hợp chất hữu cơ có thành phần nguyên tố đơn giản nhất (chỉ chứa 2 nguyên tố C và H). Ví dụ: CH<sub>4</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>, ...

Hydrocarbon được chia thành 3 nhóm: hydrocarbon no, hydrocarbon không no và hydrocarbon thơm.

- Dẫn xuất hydrocarbon: là hợp chất hữu cơ có chứa nhóm nguyên tử (hay nhóm chức) quyết định tính chất hóa học đặc biệt của hợp chất đó. Ví dụ: CH<sub>3</sub>Cl, C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>O, ...

Các dẫn xuất hydrocarbon được giới thiệu trong chương trình phổ thông (cả THCS và THPT) gồm:

- Dẫn xuất halogen
- Alcohol, phenol
- Aldehyde, ketone
- Carboxylic acid, ester
- Amine
- Hợp chất tạp phức, polymer

Ngoài ra còn nhiều dẫn xuất chứa các nhóm chức khác.

## 2 ĐẶC ĐIỂM CHUNG CỦA HỢP CHẤT HỮU CƠ

- Thành phần cấu tạo chủ yếu là các nguyên tố phi kim. Vì vậy, liên kết hóa học trong hợp chất hữu cơ chủ yếu là liên kết cộng hóa trị.
- Tính chất vật lý:
  - Nhiệt độ nóng chảy, nhiệt độ sôi thấp so với nhiều hợp chất vô cơ. Các hợp chất hữu cơ thường dễ bay hơi.
  - Một số hợp chất không tan trong nước, mà tan nhiều trong dung môi hữu cơ.
- Tính chất hoá học:

- Kém bền với nhiệt, dễ cháy.
- Phản ứng hóa học giữa các chất hữu cơ có các đặc điểm sau đây:
  - \* Xảy ra chậm, không phản ứng hoàn toàn.
  - \* Xảy ra theo nhiều hướng khác nhau, tạo ra hỗn hợp nhiều sản phẩm khác nhau trong cùng một điều kiện.
  - \* Thường cần đun nóng, tăng (giảm) áp suất hoặc sử dụng chất xúc tác.

## 3 CÔNG THỨC PHÂN TỬ HỢP CHẤT HỮU CƠ

### 3.1 Công thức đơn giản nhất

Công thức đơn giản nhất (CTĐGN) là công thức biểu thị tỉ lệ tối giản về số nguyên tử của các nguyên tố trong phân tử. CTĐGN còn được gọi là công thức thực nghiệm.

Xét công thức chất hữu cơ có công thức  $C_xH_yO_zN_t$ . CTĐGN của hợp chất chính là tỉ lệ  $x : y : z : t$ .

Sau khi phân tích định lượng, ta có:

$$x : y : z : t = n_C : n_H : n_O : n_N = \frac{m_C}{12} : \frac{m_H}{1} : \frac{m_O}{16} : \frac{m_N}{14} = \frac{\%C}{12} : \frac{\%H}{1} : \frac{\%O}{16} : \frac{\%N}{14}$$

### 3.2 Công thức phân tử

Công thức phân tử là công thức biểu thị số lượng nguyên tử của mỗi nguyên tố trong phân tử.

Cách thiết lập công thức phân tử (CTPT) dựa vào dữ kiện các bài toán:

- Cách 1: Dựa vào CTĐGN
  - Tìm CTĐGN.
  - Tìm công thức nguyên (CTN) dưới dạng  $(C_xH_yO_zN_t)_n$ .
  - Dựa vào các dữ kiện liên quan đến khối lượng mol  $M$  để tìm  $n$ .
- Cách 2: Dựa vào công thức tỉ lệ
  - Gọi CTPT theo các nguyên tố có thể có trong hợp chất, ví dụ  $C_xH_yO_zN_t$ .
  - Công thức tỉ lệ:

$$\frac{m_C}{12x} = \frac{m_H}{y} = \frac{m_O}{16z} = \frac{m_N}{14t} = \frac{m_{HCHC}}{M_{HCHC}}$$

$$\frac{\%C}{12x} = \frac{\%H}{y} = \frac{\%O}{16z} = \frac{\%N}{14t} = \frac{100}{M_{HCHC}}$$

- Cách 3: Dựa vào phản ứng đốt cháy
  - Xác định tỉ lệ số mol hoặc tỉ lệ thể tích các sản phẩm cháy (ở cùng điều kiện nhiệt độ và áp suất các tỉ lệ này bằng nhau).
  - Bảo toàn nguyên tố để tính số nguyên tử mỗi nguyên tố.

# 4 CẤU TRÚC PHÂN TỬ HỢP CHẤT HỮU CƠ

## 4.1 Thuyết cấu tạo hóa học

- Luận điểm 1: Trong phân tử hợp chất hữu cơ, các nguyên tử liên kết với nhau theo đúng hóa trị và theo một thứ tự nhất định. Thứ tự liên kết đó gọi là cấu tạo hóa học. Nếu thay đổi thứ tự liên kết dẫn đến sự thay đổi cấu tạo hóa học sẽ tạo ra hợp chất mới.
- Luận điểm 2: Trong phân tử hợp chất hữu cơ, C có hóa trị bốn. Nguyên tử C không những liên kết với nguyên tử nguyên tố khác mà còn liên kết với nhau tạo thành mạch carbon (vòng, không vòng, nhánh, không nhánh).
- Luận điểm 3: Tính chất của các chất phụ thuộc vào thành phần phân tử (bản chất, số lượng các nguyên tử) và cấu tạo hóa học (thứ tự liên kết các nguyên tử).

## 4.2 Liên kết hóa học và cấu trúc phân tử hợp chất hữu cơ

- Liên kết cộng hóa trị (thường gặp trong hữu cơ) được chia thành hai loại: liên kết sigma ( $\sigma$ ) và liên kết pi ( $\pi$ ).
- Sự tổ hợp liên kết  $\sigma$  với các liên kết  $\pi$  tạo thành liên kết đôi hoặc ba.

### 4.2.1 Liên kết đơn

- Liên kết đơn (hay liên kết  $\sigma$ ) do một cặp electron chung tạo nên và được biểu diễn bằng một gạch nối giữa hai nguyên tử.
- Liên kết đơn bền.

### 4.2.2 Liên kết đôi

- Liên kết đôi do hai cặp electron chung giữa hai nguyên tử tạo nên, gồm một liên kết  $\sigma$  và một liên kết  $\pi$ , được biểu diễn bằng hai gạch nối giữa hai nguyên tử.
- Bốn nguyên tử liên kết trực tiếp với hai nguyên tử C tham gia liên kết đôi nằm trong cùng mặt phẳng với hai nguyên tử C đó. Khái quát hơn, tất cả nguyên tử liên kết trực tiếp với hai nguyên tử tham gia liên kết đôi nằm trong cùng mặt phẳng với hai nguyên tử đó.
- Liên kết  $\pi$  kém bền hơn nên dễ bị đứt ra trong các phản ứng hóa học.

### 4.2.3 Liên kết ba

- Liên kết ba do ba cặp electron chung giữa hai nguyên tử tạo nên, gồm một liên kết  $\sigma$  và hai liên kết  $\pi$ , được biểu diễn bằng ba gạch nối giữa hai nguyên tử.
- Tất cả các nguyên tử liên kết với hai nguyên tử tham gia vào liên kết ba nằm trên đường thẳng nối hai nguyên tử đó.

## 4.3 Công thức cấu tạo

Công thức cấu tạo (CTCT) biểu diễn thứ tự và cách thức liên kết (liên kết đơn hay liên kết bội) của các nguyên tử trong phân tử.

Các công thức cấu tạo có thể viết dưới dạng:

- CTCT khai triển biểu diễn trên mặt phẳng giấy tất cả các liên kết.
- CTCT thu gọn biểu diễn các nguyên tử, nhóm nguyên tử cùng liên kết với một nguyên tử C trong mạch. Cách viết này thuận tiện để biểu diễn các hợp chất và nhóm chức được học trong chương trình phổ thông.
- CTCT thu gọn nhất chỉ biểu diễn liên kết giữa các nguyên tử C và với nhóm chức. Mỗi đầu một đoạn thẳng hoặc điểm gấp khúc ứng với một nguyên tử C; không biểu thị số nguyên tử H. Cách viết này phù hợp để biểu diễn các hợp chất hữu cơ có cấu tạo phức tạp.

## 4.4 Những khái niệm khác

### 4.4.1 Đồng phân

Những hợp chất khác nhau có cùng CTPT được gọi là các chất đồng phân của nhau. Có hai loại đồng phân:

- Đồng phân cấu tạo khác nhau về mạch carbon (ví dụ n-butane và 2-methylpropane), vị trí liên kết bội (ví dụ 1-butene và 2-butene), loại nhóm chức (ví dụ ethyl alcohol và dimethyl ether), vị trí nhóm chức (n-propyl alcohol và isopropyl alcohol),...
- Đồng phân lập thể khác nhau về vị trí trong không gian, ví dụ đồng phân cis-trans, đồng phân R/S,...

### 4.4.2 Đồng đẳng

Những hợp chất có thành phần phân tử hơn kém nhau một hay nhiều nhóm  $\text{CH}_2$  nhưng có tính chất hóa học tương tự nhau là những chất đồng đẳng. Những hợp chất này hợp thành dãy đồng đẳng. Ví dụ:

- Dãy đồng đẳng alkane gồm các hợp chất  $\text{CH}_4$ ,  $\text{C}_2\text{H}_6$ ,  $\text{C}_3\text{H}_8$ ,  $\text{C}_4\text{H}_{10}$ ,...
- Dãy đồng đẳng alkyne gồm các alkyne  $\text{C}_2\text{H}_2$ ,  $\text{C}_3\text{H}_4$ ,  $\text{C}_4\text{H}_6$ ,  $\text{C}_5\text{H}_8$ ,...
- Dãy đồng đẳng carboxylic acid gồm các hợp chất có công thức tổng quát  $\text{R}-\text{COOH}$ , với gốc R là những gốc alkyl hơn kém nhau một hay nhiều nhóm  $\text{CH}_2$  như trên.

### 4.4.3 Độ bất bão hòa

Độ bất bão hòa cho biết tổng số vòng và liên kết  $\pi$  trong công thức cấu tạo.

Với CTPT  $\text{C}_x\text{H}_y\text{O}_z\text{N}_t$  độ bất bão hòa k được tính bằng:

$$k = \frac{2x - y + t + 2}{2}$$

Công thức tổng quát cho các hợp chất hữu cơ:

$$k = \frac{\sum(a - 2)n + 2}{2}$$

Trong đó a và n lần lượt là hóa trị của nguyên tố và số nguyên tử nguyên tố đó.

Một số tính chất liên quan đến độ bất bão hòa:

- Với mọi hợp chất hữu cơ, ta có  $k_{\text{phân tử}} = k_{\text{mạch C}} + k_{\text{nhóm chức}}$ .

- Gọi số nguyên tử C và H trong hợp chất là x và y, ta luôn có  $y \leq 2x + 2$ .
- Xét phản ứng cháy của n mol hợp chất dạng  $C_nH_{2n+2-2k}O_x$  (k là độ bất bão hoà của hợp chất), sau khi phân tích hệ số ta được phương trình:

$$(k - 1)n = n_{CO_2} - n_{H_2O}$$

Kết quả có thể mở rộng cho hợp chất chứa các nguyên tố khác.

Độ bất bão hoà là một dữ kiện có ý nghĩa trong việc xác định CTPT và các đồng phân cấu tạo, đồng thời có thể áp dụng để biện luận trong các bài toán hoá học.

## 5 SƠ LƯỢC VỀ PHÂN TÍCH NGUYÊN TỐ

Phân tích nguyên tố là một phương pháp quan trọng trong công tác xác định các hợp chất hữu cơ, bao gồm các bước phân tích định tính và định lượng.

- Phân tích định tính là phương pháp xác định thành phần nguyên tố trong hợp chất hữu cơ.
- Phân tích định lượng là phương pháp xác định phần trăm về khối lượng các nguyên tố đó.

Nguyên tắc của hai phương pháp này là sự chuyển các nguyên tố trong hợp chất hữu cơ thành hợp chất vô cơ đơn giản và có thể nhận biết. Khối lượng hoặc thể tích các sản phẩm được xác định, từ đó suy ra khối lượng của các nguyên tố và tỉ lệ số nguyên tử mỗi nguyên tố (công thức thực nghiệm).

Quá trình phân tích một số nguyên tố trong hợp chất hữu cơ được tiến hành theo phương pháp như sau:

- Để xác định các nguyên tố C và H, người ta nung hợp chất hữu cơ với CuO để chuyển các nguyên tử thành  $CO_2$  và  $H_2O$ , sau đó dẫn hỗn hợp khí qua các bình chất hấp thụ và đo đặc độ biến thiên khối lượng ( $\Delta m$ ) của các bình đó. Vì các nguyên tố C và H xuất hiện trong tất cả các hợp chất hữu cơ nên phương pháp này chỉ mang ý nghĩa định lượng nguyên tố trong hợp chất.
- Người ta cũng dùng phương pháp đó để xác định nguyên tố N, chỉ khác ở việc xác định thể tích  $N_2$  còn lại sau khi đã hấp thụ hết các khí khác.
- Để xác định hàm lượng halogen (ngoại trừ F), người ta oxi hoá hợp chất có mặt  $AgNO_3$  để tạo ra chất rắn AgX tương ứng. Chất rắn còn lại được lọc qua nước (AgX không tan trong nước) để đo đặc.
- Quá trình oxi hoá ở những điều kiện khác cũng có thể được sử dụng để xác định các nguyên tố khác để chuyển hoá các nguyên tố thành các chất vô cơ tương ứng (ví dụ S thành  $S^{2-}$ , P thành  $PO_4^{3-}$ , ...).
- Sau khi đã xác định hết các nguyên tố trong hợp chất, có thể gián tiếp xác định hàm lượng nguyên tố O bằng cách bảo toàn khối lượng.

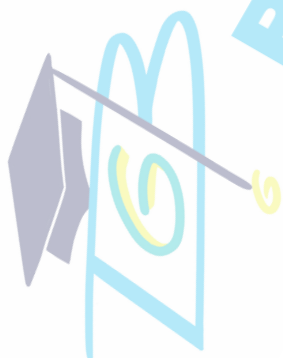
Hiện nay, đã có những phương pháp hiện đại hơn để phân tích nguyên tố, ví dụ như phương pháp Lassaigne, phương pháp phổ nguyên tử,...

## 6 PHƯƠNG PHÁP TÁCH VÀ THU HỒI CHẤT HỮU CƠ

Các phương pháp tách chất hữu cơ sử dụng các tính chất vật lí của các hợp chất (cụ thể là sự khác nhau về tính chất vật lí của các chất trong hỗn hợp), ví dụ nhiệt độ sôi, nhiệt độ đông đặc, độ tan, khối lượng riêng,...

Có bốn phương pháp chính để tách chất hữu cơ: chưng cất, chiết, kết tinh và sắc kí. Trong phạm vi chương trình phổ thông, bảng dưới đây tóm tắt các tính chất của phương pháp chưng cất, chiết và kết tinh.

Phương pháp	Chưng cất	Chiết	Kết tinh
Sử dụng cho các chất	Các chất lỏng có nhiệt độ sôi khác nhau	Dung dịch chất hữu cơ	Hỗn hợp các chất rắn có độ tan khác nhau và thay đổi theo nhiệt độ
Cách thực hiện	<ul style="list-style-type: none"><li>Đun sôi hỗn hợp, chất có nhiệt độ sôi thấp bay hơi trước.</li><li>Làm lạnh và thu được chất.</li></ul>	<ul style="list-style-type: none"><li>Lắc dung dịch chất hữu cơ với dung môi không lẫn với dung môi cũ, có khả năng hòa tan chất chiết hơn.</li><li>Tách chất chiết và đuổi dung môi mới đi.</li></ul>	<ul style="list-style-type: none"><li>Cho vào dung môi, tạo dung dịch bão hòa ở nhiệt độ sôi của dung môi.</li><li>Lọc nóng loại bỏ chất không tan.</li><li>Để nguội kết tinh.</li></ul>



## Bài tập tự luyện

1. Mật ong để lâu thường thấy có những hạt rắn xuất hiện ở đáy chai. Đó là hiện tượng gì, vì sao? Làm sao để chứng tỏ những hạt rắn đó là chất hữu cơ?
2. (Đề thi HSG TP. Đà Nẵng, 2016 – 2017) Nêu hiện tượng xảy ra khi cho 2 ml dầu hỏa hoặc xăng vào cốc nước nhỏ. Thí nghiệm này minh họa tính chất gì của hydrocarbon? Tại sao trên thực tế người ta không dùng nước để dập tắt các đám cháy do xăng dầu?
3. Khi đốt cháy hoàn toàn 1 lít khí  $C_xH_y$  thu được 4 lít  $CO_2$  và 5 lít khí hơi  $H_2O$ . Các khí và hơi nước được đo cùng nhiệt độ và áp suất. Xác định CTPT.
4. Đốt cháy 7,437 lít hỗn hợp X (điều kiện chuẩn:  $25^\circ C$ , 1 bar) gồm hai hydrocarbon A, B thu được 9,916 lít  $CO_2$  và 9 gam nước. Xác định CTPT của A, B và thành phần phần trăm thể tích mỗi chất trong X.
5. Xác định CTPT, CTCT của hydrocarbon A mạch hở biết rằng khối lượng V lít khí A bằng 2 lần khối lượng V lít khí  $N_2$  ở cùng điều kiện nhiệt độ và áp suất.
6. Một hợp chất A (gồm các nguyên tố C, H, O) có tỉ khối so với ethane bằng 2,4. Tìm CTPT của A.
7. (Đề thi HSG TP.HCM, 2014 – 2015) Đốt cháy hoàn toàn m gam hydrocarbon A ở thể khí điều kiện thường thu được m gam  $H_2O$ . Tìm CTPT của A.
8. (Đề thi HSG tỉnh Hải Dương, 2013 – 2014) Đốt cháy hoàn toàn 12 gam chất hữu cơ A chỉ thu được hỗn hợp khí và hơi gồm  $CO_2$ ,  $H_2O$ . Dẫn toàn bộ sản phẩm cháy vào bình dung dịch  $Ca(OH)_2$  dư thấy có 40 gam kết tủa trắng và khối lượng dung dịch giảm 15,2 gam so với khối lượng của dung dịch  $Ca(OH)_2$  ban đầu. Biết rằng 3 gam A ở thể hơi có thể tích bằng thể tích của 1,6 gam  $O_2$  ở cùng điều kiện nhiệt độ và áp suất. Xác định CTPT của A.
9. (Đề thi tuyển sinh vào 10 chuyên TP.HCM, 2011 – 2012) Đốt cháy hoàn toàn một hydrocarbon A, hấp thụ hết sản phẩm cháy vào một bình đựng dung dịch nước vôi trong. Sau thí nghiệm thấy khối lượng bình tăng thêm 26,24 gam. Lọc lấy phần không tan, đem rửa sạch và sấy khô, thu được 20 gam kết tủa và còn lại dung dịch B. Khi đun nóng dung dịch B một thời gian lâu, lại thu được tối đa 10 gam kết tủa nữa. Xác định công thức phân tử và các công thức cấu tạo có thể có của A.
10. (Đề thi tuyển sinh vào 10 chuyên TP.HCM, 2014 – 2015) Đốt cháy hoàn toàn một hydrocarbon (D), thu được số mol  $CO_2$  bằng 2 lần số mol  $H_2O$ . Mặt khác, đốt cháy 0,2 mol (D) thu được không quá 63,36 gam  $CO_2$ . Tìm công thức phân tử có thể có của (D).
11. (Đề thi tuyển sinh vào 10 chuyên TP. Hà Nội, 2022 – 2023) Chất hữu cơ X có trong các sản phẩm chăm sóc da để tẩy da chết, làm sáng da và làm mờ các vết thâm,... Trong công nghiệp thực phẩm, X được sử dụng như một chất tạo hương vị để thực phẩm có vị chua cay. X chứa C, H, O với tỉ lệ khối lượng  $m_C : m_O = 3 : 5$ . Phân tử khối của X là 134. Tìm CTCT của X.
12. (Đề thi tuyển sinh vào 10 chuyên TP. Đà Nẵng, 2017 – 2018) Đốt cháy hoàn toàn hỗn hợp X gồm  $C_xH_y$  và  $O_2$  dư, làm lạnh hỗn hợp sau phản ứng thu được hỗn hợp khí Y có thể tích giảm 25% so với thể tích của X. Cho khí Y đi qua dung dịch KOH dư thu được khí Z có thể tích giảm 40% so với thể tích của Y.
  - a. Xác định CTCT có thể có của  $C_xH_y$ , biết  $x < 6$ .
  - b. Tính thành phần phần trăm thể tích hỗn hợp X.