

ĐẶNG NHƯ TÀI - TRẦN QUỐC SƠN

TRƯỜNG ĐẠI HỌC
DÂN LẬP HÀI PHÒNG

THƯ VIỆN

547

Đ 116 NH

HÓA HỌC HỮU CƠ

ĐẶNG NHƯ TÀI
TRẦN QUỐC SƠN

HÓA HỌC HỮU CƠ

DVV523



NHÀ XUẤT BẢN ĐẠI HỌC QUỐC GIA HÀ NỘI

527
Đ 116Nh

GS. TS ĐẶNG NHƯ TÀI
GS. PTS TRẦN QUỐC SƠN

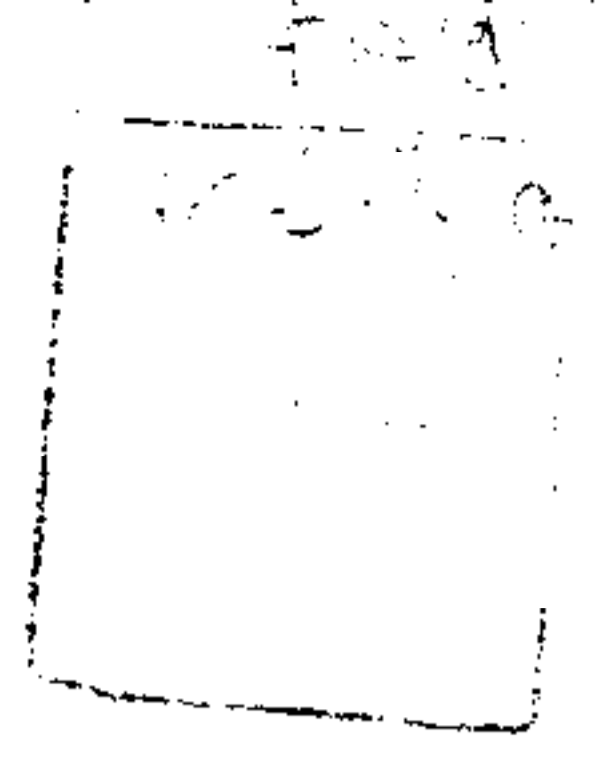
Hoahocngaynay.com

HOÁ HỌC HỮU CƠ

PHÒNG ĐỌC
2000 - ĐVY 523

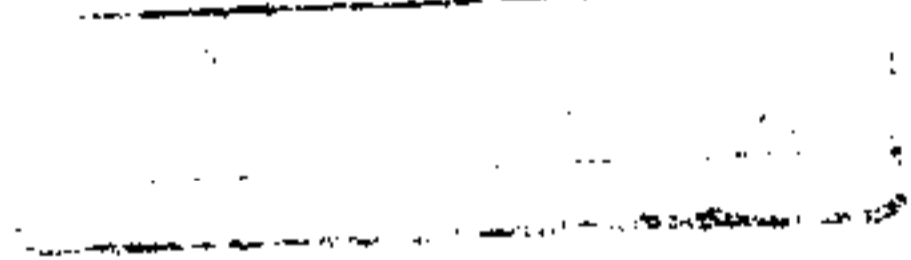
NHÀ XUẤT BẢN ĐẠI HỌC QUỐC GIA HÀ NỘI - 1999

TRƯỜNG ĐẠI HỌC QUỐC GIA HÀ NỘI
TRƯỜNG ĐẠI HỌC QUỐC GIA HÀ NỘI



TRƯỜNG ĐẠI HỌC QUỐC GIA HÀ NỘI

TRƯỜNG ĐẠI HỌC QUỐC GIA HÀ NỘI



TRƯỜNG ĐẠI HỌC QUỐC GIA HÀ NỘI - 1999

Lời nhà xuất bản

Giáo trình hóa học hữu cơ được biên soạn theo chương trình hoá học hữu cơ do Bộ Giáo dục và Đào tạo ban hành cho nhóm ngành III và các nhóm ngành có liên quan.

Sách gồm 5 chương: hai chương đầu (do GS. PTS. Trần Quốc Sơn trường ĐHSP - ĐHQG Hà Nội viết) là đại cương về hoá hữu cơ và hidrocacbon; ba chương còn lại (do GS. TS. Đặng Như Tại trường ĐHKHTN - ĐHQG Hà Nội viết) đề cập đến các dẫn xuất của hidrocacbon và hợp chất dị vòng.

Mặc dù chương trình hóa học hữu cơ nhóm ngành III rất hạn chế về thời lượng (tổng số 3 đơn vị học trình kể cả phần bài tập), giáo trình này được biên soạn theo tinh thần nâng cao về mặt cơ sở lí thuyết và phương pháp nghiên cứu, nhằm phát triển tư duy của sinh viên và vận dụng tốt những hiểu biết mà sinh viên đã được học trong chương trình hóa học đại cương và đặt nền móng hoá hữu cơ cho việc học hoá sinh học sau này. Những phần mở rộng thêm được in bằng chữ nhỏ để tham khảo. Sau mỗi bài của từng chương đều có một số bài tập; tổ hợp tất cả những bài tập này sẽ phản ánh những yêu cầu cơ bản của chương trình hóa học hữu cơ.

Giáo trình này được dùng làm tài liệu học tập cho sinh viên; ngoài ra có thể dùng làm tài liệu tham khảo cho giáo viên phổ thông trung học và học sinh các lớp năng khiếu về hóa học.

Nhà xuất bản rất mong nhận được những ý kiến đóng góp về nội dung và hình thức của cuốn sách này.

Nhà xuất bản ĐHQG Hà Nội

ĐỀ THI THỬ ĐẠI HỌC

ĐỀ THI THỬ ĐẠI HỌC NĂM 2007 MÔN TOÁN

ĐỀ THI THỬ ĐẠI HỌC NĂM 2007 MÔN TOÁN

ĐỀ THI THỬ ĐẠI HỌC NĂM 2007 MÔN TOÁN

ĐỀ THI THỬ ĐẠI HỌC NĂM 2007 MÔN TOÁN

ĐỀ THI THỬ ĐẠI HỌC NĂM 2007 MÔN TOÁN

ĐỀ THI THỬ ĐẠI HỌC NĂM 2007 MÔN TOÁN

Chương 1

ĐẠI CƯƠNG VỀ HÓA HỌC HỮU CƠ

1.1 MỞ ĐẦU

1.1.1 Hợp chất hữu cơ và hóa học hữu cơ

1. Khái niệm về hợp chất hữu cơ và hóa học hữu cơ

Cacbon là một nguyên tố hóa học rất đặc biệt: các nguyên tử cacbon có thể kết hợp với nhau và với nguyên tử của nguyên tố khác tạo nên khoảng mười triệu hợp chất khác nhau, ấy là những hợp chất của cacbon. Trong khi đó, các nguyên tố hóa học còn lại trong bảng hệ thống tuần hoàn chỉ có thể tạo nên chừng gần một triệu hợp chất không chứa cacbon.

Những hợp chất của cacbon (trừ CO, CO₂, các muối cacbonat...) được gọi là hợp chất hữu cơ.

Ngành hóa học chuyên nghiên cứu các hợp chất hữu cơ, tức là các hợp chất của cacbon, được gọi là hóa học hữu cơ.

2. Lược sử phát triển của hóa học hữu cơ

Loài người biết điều chế và sử dụng các sản phẩm hữu cơ ở dạng không tinh khiết hoặc hỗn hợp đã từ rất lâu (đường mía, giấm, phẩm nhuộm, tinh dầu, v.v...), song mãi tới giữa thế kỉ XVIII mới tách được từ thực vật và động vật một số chất hữu cơ tương đối tinh khiết (axit xitric, axit tactric, ure, v.v...).

Đầu thế kỉ XIX hóa học hữu cơ tách ra từ hóa học nói chung, và trở thành một ngành khoa học độc lập. Người ta gọi là *hóa học hữu cơ* (Beczeliiuyt, 1806) vì hồi đó chỉ biết có các chất hữu cơ thiên nhiên tồn tại

trong cơ thể động vật và thực vật. Vì thế, thời bấy giờ đã xuất hiện một quan niệm duy tâm gọi là "thuyết lực sống", theo đó các chất hữu cơ chỉ có thể sinh ra trong cơ thể sống nhờ có một lực huyền bí nào đó. Quan niệm này chỉ tồn tại được vài chục năm, và đã bị bác bỏ bởi các công trình tổng hợp hàng loạt hợp chất hữu cơ xuất phát từ các chất hữu cơ khác hoặc từ các chất vô cơ, như tổng hợp axit oxalic (1824), ure (1828), chất béo (1854), v.v... Cùng với những thành tựu về tổng hợp hữu cơ, từ giữa thế kỉ XIX đã hình thành thuyết cấu tạo hóa học (1861) và quan niệm đầu tiên về hóa học lập thể (1874).

Bước sang thế kỉ XX, trong hóa học hữu cơ đã hình thành thuyết electron về cấu trúc phân tử và khởi đầu thời kì phát triển mạnh mẽ công nghiệp hữu cơ (nhiên liệu, dược phẩm, phẩm nhuộm, polime, v.v...).

Sau đại chiến thế giới lần thứ hai, cùng với sự phát triển vũ bão của hóa học lập thể, của thuyết electron về cấu trúc phân tử và cơ chế phản ứng, là sự thâm nhập của toán học, cơ học, vật lí học... vào hóa học hữu cơ và sự thâm nhập sâu rộng của hóa học hữu cơ vào các ngành sinh học, y dược, nông nghiệp, v.v... và đặc biệt là sự phát triển các phương pháp vật lí nghiên cứu chất hữu cơ cùng các phép phân tích và tổng hợp hữu cơ hiện đại.

Hiện nay hóa học hữu cơ đang ở thời kì phát triển mạnh mẽ nhất và có vai trò rất quan trọng trong mọi ngành kinh tế quốc dân. Các chất hữu cơ có mặt khắp nơi, ngoài cơ thể sống ta gặp chất hữu cơ trong thực phẩm, dược phẩm, phẩm nhuộm, chất dẻo, tơ sợi, cao su, mĩ phẩm, bột giặt, chất phòng trừ dịch hại, chất kích thích tăng trưởng, thuốc nổ, nhiên liệu, v.v... Trong thế giới quanh ta, đâu đâu cũng có bóng dáng hợp chất hữu cơ.

Nhờ có hóa học hữu cơ người ta mới hiểu được sâu sắc các chất tạo nên cơ thể sống và bản chất các quá trình diễn ra trong cơ thể sống. Vì vậy hóa học hữu cơ là cơ sở của các ngành trung gian như hoá sinh học, hoá dược học, v.v... Hoá học hữu cơ không còn là một môn học mô tả thuần túy như trước đây, mà từ lâu đã trở thành một môn học có suy luận, vừa lí thuyết vừa thực nghiệm.

3. Phân loại hợp chất hữu cơ

Có thể phân loại các hợp chất hữu cơ theo hai cách chính sau đây:

a) Phân loại thành hidrocarbon và dẫn xuất của hidrocarbon

Hidrocarbon là những hợp chất hữu cơ được cấu tạo chỉ bởi hai nguyên tố C và H.

Các dẫn xuất của hidrocarbon chứa trong phân tử không những C và H, mà cả những nguyên tố khác như N, O, S, v.v... Đó là những *hợp chất có nhóm chức*.

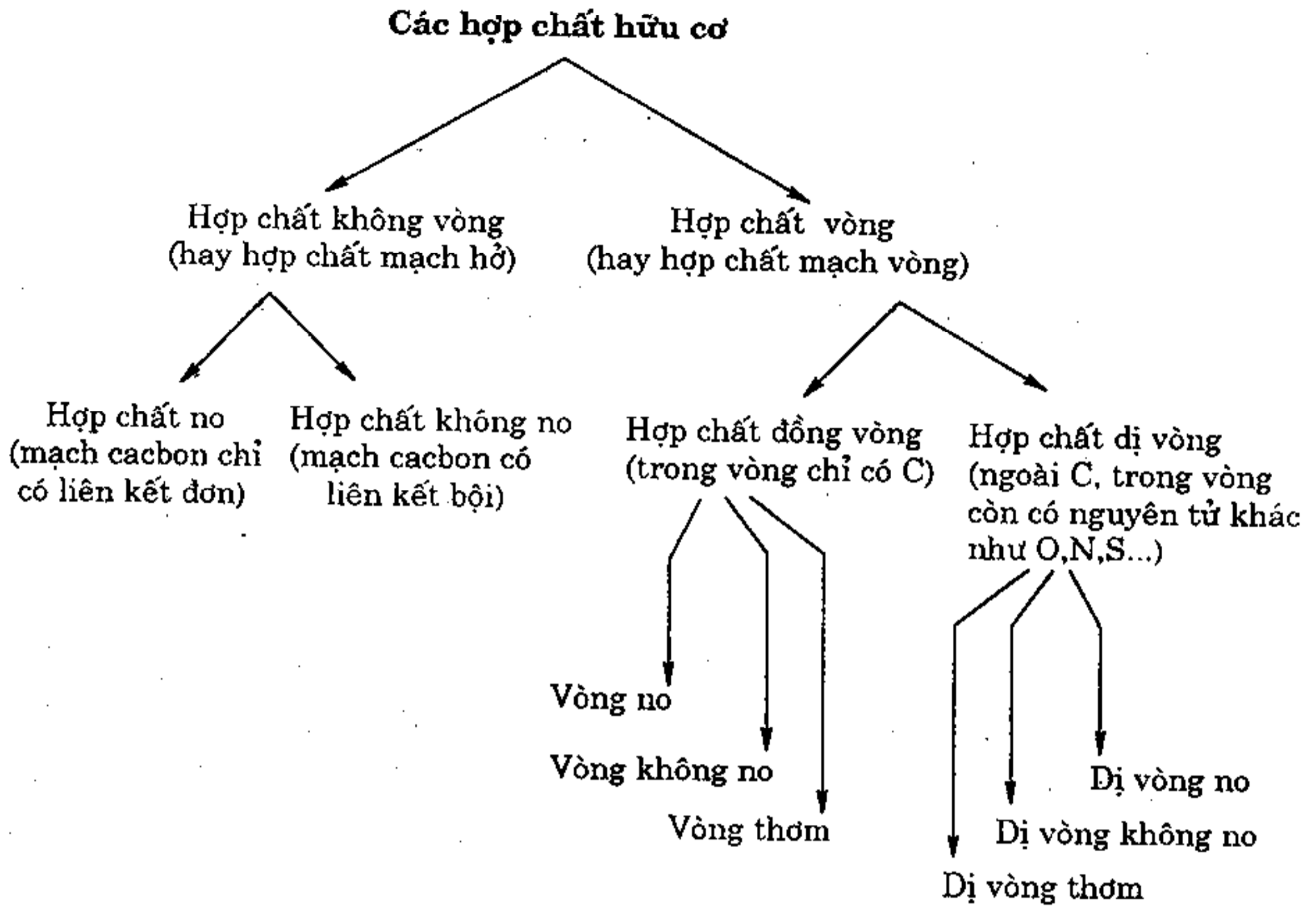
Nhóm chức là nhóm nguyên tử (hoặc nguyên tử) quyết định tính chất hóa học đặc trưng của cả dãy hợp chất có cùng một loại nhóm chức trong phân tử (gọi là *chức hóa học*). Thí dụ $-OH$ là nhóm chức ancol, $-COOH$ là nhóm chức axit, $-NH_2$ là nhóm chức amin.

Khi phân tử chỉ có một nhóm chức duy nhất ta có *hợp chất đơn chức* (thí dụ: CH_3CH_2OH , CH_3COOH ...). Nếu có hai hay nhiều nhóm chức đồng nhất trong phân tử, ta có *hợp chất đa chức* (thí dụ: $HOCH_2CHOHCH_2OH$, $HOOC-CH_2-COOH$,...). Trong trường hợp có hai hay nhiều nhóm chức khác nhau trong phân tử, ta có *hợp chất tạp chức* (thí dụ: H_2NCH_2COOH , $HOCH_2CHOHCH=O$,...).

b) Phân loại theo mạch cacbon

Hidrocarbon và dẫn xuất của hidrocarbon đều có thể được phân loại theo mạch cacbon (mạch hở và mạch vòng, mạch no

và mạch không no,...).



4. Nguồn hợp chất hữu cơ

a) *Trong thiên nhiên* có nhiều nguồn hợp chất hữu cơ rất phong phú. Đó là: dầu mỏ và các khí thiên nhiên (chứa chủ yếu là các hydrocacbon), than đá (cung cấp nhựa than đá chứa hydrocacbon thơm, phenol, v.v...), các sản phẩm động-thực vật (cung cấp glucit, lipit, protein, tecpen, ancaloit và rất nhiều sản phẩm khác)...

b) *Trong phòng thí nghiệm và trong công nghiệp* người ta có thể tổng hợp hàng triệu hợp chất hữu cơ khác nhau, xuất phát từ các chất hữu cơ và vô cơ, trong đó có nhiều sản phẩm

công nghiệp được sản xuất trên cơ sở các nguồn nguyên liệu thiên nhiên nêu ở trên.

1.1.2 Phương pháp tách biệt và tinh chế chất hữu cơ

Hầu hết các hoá chất có trong thiên nhiên hay mới điều chế trong phòng thí nghiệm đều ở trạng thái hỗn hợp với thành phần khác nhau. Để khảo sát cấu trúc và tính chất của một chất hữu cơ bằng thực nghiệm và để sử dụng trong thực tiễn người ta thường phải tách chất đó ra khỏi hỗn hợp, nhằm tinh chế nó thành một *chất tinh khiết* hay là *chất nguyên chất*.

1. Các phương pháp thông thường

a) Chiết

Người ta dùng một dung môi thích hợp (ete, benzen, nước,...) có khả năng hoà tan tốt chất hữu cơ cần tách từ một hỗn hợp lỏng hoặc rắn với các chất khác sang dung dịch trong dung môi đó. Sau khi đuổi dung môi ra khỏi dung dịch sẽ thu được chất cần tách.

Thí dụ: khi điều chế anilin bằng phương pháp khử nitrobenzen có một phần nhỏ anilin tan trong nước; để tách anilin đó ra khỏi nước, người ta lắc kĩ dung dịch với ete, anilin dễ tan trong ete hơn trong nước sẽ chuyển sang dung dịch ete. Tách dung dịch ete ra và chưng cất đuổi ete đi sẽ thu được anilin.

Hiện nay, có những dụng cụ cho phép chiết liên tục.

b) Kết tinh

Phương pháp này dựa vào sự khác nhau về độ tan của các

chất (chủ yếu là các chất rắn) trong một dung môi thích hợp, và sự khác nhau về độ tan của một chất trong một dung môi ở nhiệt độ khác nhau.

Người ta hoà tan một hỗn hợp rắn trong một dung môi thích hợp bằng cách đun nóng và lọc, sau đó lọc nóng để loại bỏ tạp chất không tan rồi làm lạnh. Khi ấy chất ít tan hơn sẽ tách ra trước ở dạng tinh thể sạch và được lấy ra bằng cách lọc. Thí dụ axit benzoic C_6H_5COOH là một chất rắn tan nhiều trong nước nóng và rất ít tan trong nước nguội. Để tinh chế người ta đun axit này trong nước để được dung dịch bão hoà nóng; đem lọc nóng nếu cần, rồi để nguội các tinh thể axit tinh khiết hơn sẽ tách ra.

c) Chứng cất

Phương pháp này dựa trên sự khác nhau về nhiệt độ sôi của các chất khác nhau ở một áp suất nhất định. Người ta dùng nhiệt (đun nóng) để chuyển hỗn hợp chất lỏng sang pha hơi và thu chất lỏng ở khoảng nhiệt độ thích hợp bằng cách cho hơi ngưng tụ. Ba kiểu chưng cất thông dụng là:

– Chưng cất thường

Khi tách một chất lỏng có nhiệt độ sôi không cao ra khỏi các chất khác có nhiệt độ sôi khác xa ta có thể chưng cất bằng cách đơn giản nhất gọi là chưng cất thường. Thí dụ: đun sôi nước sinh hoạt trong bình, nước sẽ bốc thành hơi, dẫn hơi nước qua bộ phận làm lạnh để hơi nước ngưng đọng thành nước tinh khiết hơn, còn lại trong bình là các chất khó bay hơi.

– Chưng cất phân đoạn

Phương pháp này dùng để tách hỗn hợp lỏng gồm các chất có nhiệt độ sôi cách nhau không nhiều lắm, nhờ một dụng cụ gọi là *cột cất phân đoạn* gắn liền hoặc lắp thêm vào bình cất. Chất nào có nhiệt độ sôi thấp hơn sẽ bay hơi trước rồi ngưng tụ và được lấy riêng ra, tiếp theo đến chất nào có nhiệt độ sôi cao hơn. Thí dụ: đun hỗn hợp gồm benzen và toluen trong bình có lắp cột cất phân đoạn, benzen sẽ bay hơi và thoát ra trước, sau đó đến toluen.

Đối với những chất có nhiệt độ sôi cao và dễ phân huỷ ở nhiệt độ sôi của nó, người ta *chưng cất dưới áp suất thấp* để hạ nhiệt độ sôi và tránh sự phân huỷ.

- **Chưng cất bằng cách cho lôi cuốn theo hơi nước**

Có những chất hữu cơ sôi ở nhiệt độ sôi rất cao và rất ít tan trong nước, song có thể được chưng cất ở dạng hỗn hợp với hơi nước ở nhiệt độ sôi của nước.

Cách tiến hành: cho một dòng hơi nước nóng đi vào hỗn hợp các chất cần tách ra, hơi nước sẽ làm cho một vài thành phần của hỗn hợp bay hơi theo hơi nước. Thí dụ chưng cất anilin, tinh dầu thực vật, v.v...

2. Phương pháp sắc kí

Nguyên tắc: Hỗn hợp các chất cần tách và dung môi được dùng làm *pha động* ở thể lỏng hoặc khí. Pha động thường xuyên tiếp xúc với pha tĩnh là một chất rắn có diện tích bề mặt rất lớn, hoặc một chất lỏng tráng lên bề mặt chất rắn, khiến cho các thành phần của hỗn hợp có tốc độ chuyển dịch khác nhau sẽ tách ra khỏi nhau.

Phân loại: Ta phân biệt hai loại chính là sắc kí hấp phụ và sắc kí phân bố.

- **Sắc kí hấp phụ** dựa theo sự khác nhau về hệ số hấp phụ của các chất. Pha tĩnh là một chất rắn, pha động là chất lỏng hoặc chất khí. Sắc kí hấp phụ có thể có các dạng: sắc kí cột, sắc kí lớp mỏng, sắc kí khí.

- **Sắc kí phân bố**: pha tĩnh là chất lỏng, pha động là chất lỏng hoặc chất khí. Sắc kí phân bố có thể là sắc kí cột, sắc kí lớp mỏng, sắc kí giấy, sắc kí khí.

Sắc kí cột thường gặp là loại mà pha tĩnh là một chất rắn như alumin (Al_2O_3), silicagel ($\text{SiO}_2 \cdot n\text{H}_2\text{O}$) được đặt trong một ống thẳng đứng (cột); pha động là dung dịch chứa hỗn hợp cần tách trong dung môi thích hợp.

Sắc kí giấy: thường pha tĩnh là nước định vị trên giấy.

Sắc kí lớp mỏng: pha tĩnh là lớp mỏng chất hấp phụ như silicagel tráng trên mặt bản thuỷ tinh hoặc bản nhôm; pha động là dung dịch chứa hỗn hợp

cần tách được đưa vào bằng cách nhúng hoặc nhỏ giọt, chất lỏng di chuyển nhờ tác dụng mao dẫn.

Sắc kí khí: pha động là một chất khí, còn pha tĩnh có thể là chất rắn hoặc chất lỏng.

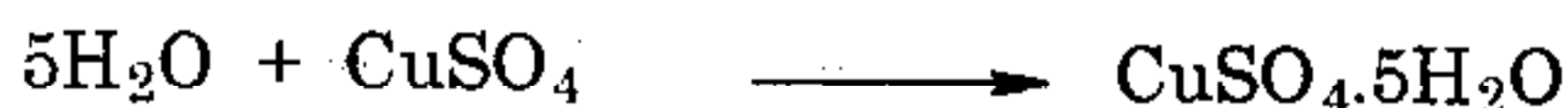
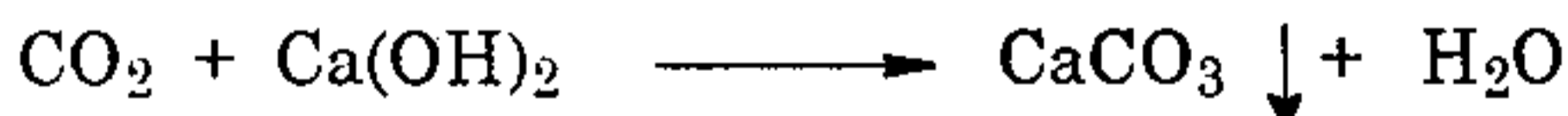
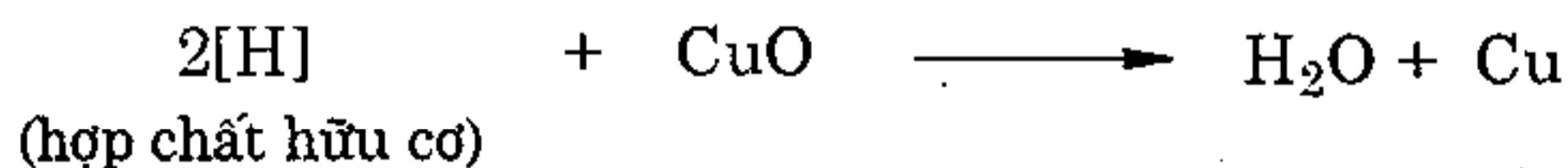
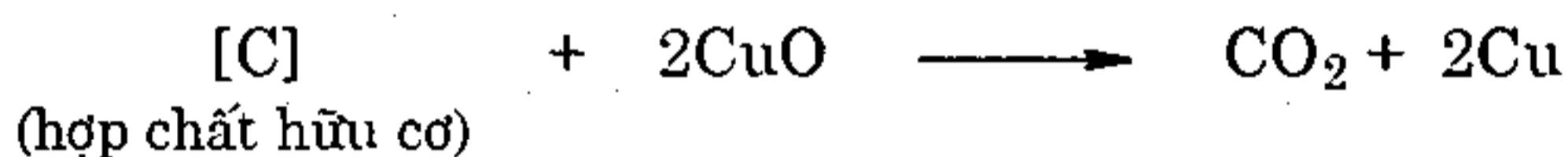
1.1.3 Phân tích nguyên tố và thiết lập công thức phân tử

1. Phân tích định tính nguyên tố

Phân tích định tính nguyên tố nhằm xác định các loại nguyên tố có mặt trong hợp chất hữu cơ. Nguyên tắc chung là chuyển các nguyên tố trong hợp chất cần khảo sát thành các chất vô cơ đơn giản rồi nhận ra các sản phẩm này dựa vào những tính chất đặc trưng của chúng.

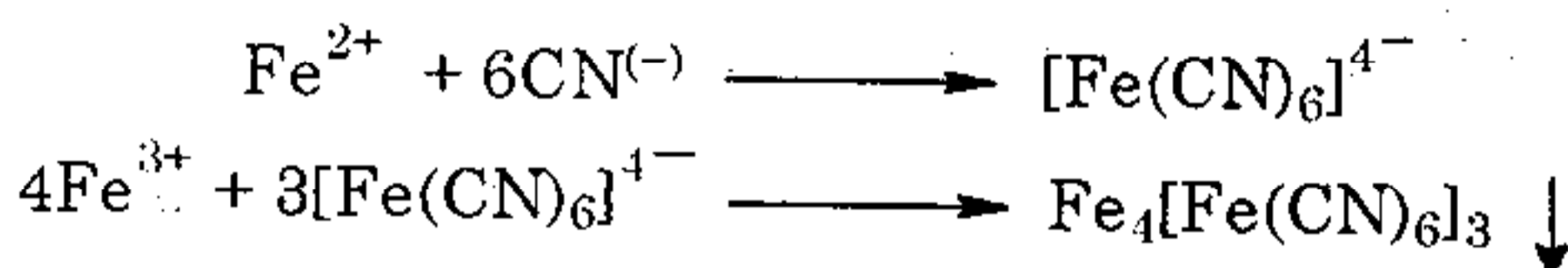
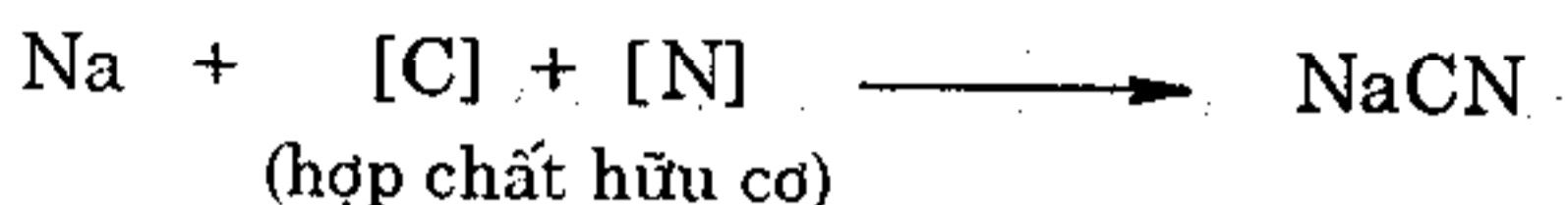
a) Xác định cacbon và hiđro

Đun nóng chất hữu cơ với CuO (chất oxi hoá) để chuyển cacbon thành CO₂ và hiđro thành H₂O rồi nhận ra CO₂ bằng nước vôi trong (tạo thành kết tủa trắng CaCO₃) và nhận ra H₂O bằng CuSO₄ khan (bột CuSO₄ màu trắng chuyển thành CuSO₄.5H₂O màu xanh).



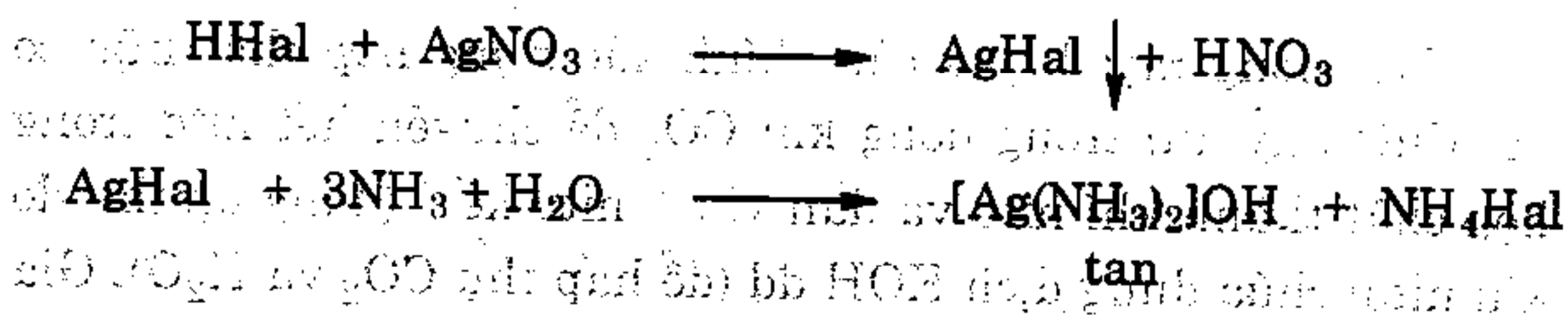
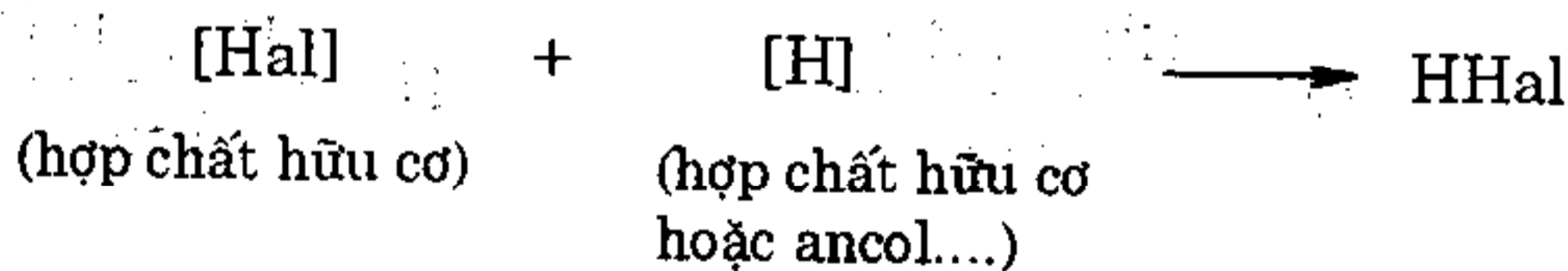
b) Xác định nitơ

Đun nóng hợp chất hữu cơ với Na sẽ sinh ra NaCN. Để nhận ra ion CN^- (chứa nitơ) ta cho thêm Fe^{2+} và Fe^{3+} rồi axit hoá nhẹ, nếu có CN^- sẽ sinh ra kết tủa màu xanh đậm rất đặc trưng của $\text{Fe}_4[\text{Fe}(\text{CN})_6]_3$:



c) Xác định halogen

Đốt một băng giấy lọc tẩm chất hữu cơ chứa halogen và ancol etylic (nhiên liệu) sẽ sinh ra hidro halogenua. Ta nhận ra hidro halogenua bằng dung dịch AgNO_3 (sinh ra kết tủa AgHal) sau đó xác nhận AgHal bằng dung dịch amoniac (hoà tan kết tủa):



2. Phân tích định lượng nguyên tố

Phân tích định lượng nhằm xác định thành phần % về khối lượng của các nguyên tố trong hợp chất hữu cơ. Nguyên tắc chung là chuyển hoàn toàn các nguyên tố trong một lượng cân nhất định của chất hữu cơ thành các chất vô cơ đơn giản, sau đó xác định khối lượng (hoặc thể tích đối với chất khí) của các sản phẩm đó, rồi tính thành phần % các nguyên tố.

a) Định lượng cacbon và hiđro

Nung nóng một lượng cân chính xác a mg hợp chất hữu cơ với CuO (lấy dư) trong dòng khí oxi. Khí CO_2 và hơi nước sinh ra được hấp thụ hoàn toàn và riêng rẽ bởi những bình chứa các chất hấp thụ thích hợp được cân trước và sau khi thí nghiệm [thí dụ dùng $\text{Mg}(\text{ClO}_4)_2$ hoặc H_2SO_4 đđ...để hấp thụ H_2O , dùng NaOH ...để hấp thụ CO_2]. Giả sử trong thí nghiệm sinh ra m mg CO_2 và m' mg H_2O , ta tính:

$$m_{\text{C}} = \frac{12m_{\text{CO}_2}}{44} \qquad m_{\text{H}} = \frac{2m'_{\text{H}_2\text{O}}}{18}$$
$$\% \text{C} = \frac{12m_{\text{CO}_2} \cdot 100}{44a} \qquad \% \text{H} = \frac{2m'_{\text{H}_2\text{O}} \cdot 100}{18a}$$

b) Định lượng nitơ

Đun nóng một lượng cân chính xác a mg hợp chất hữu cơ với CuO (lấy dư) trong dòng khí CO_2 để chuyển hết nitơ trong hợp chất thành khí nitơ và dẫn vào “nitơ kế” (dung cụ thu đo khí nitơ) chứa dung dịch KOH đđ (để hấp thụ CO_2 và H_2O). Giả

sử thu được V ml khí nitơ, đo ở nhiệt độ t , áp suất khí quyển p , áp suất hơi nước bão hoà f , ta tính được:

$$m_{N_2} = \frac{28}{22400} \cdot V \cdot \frac{p-f}{760} \cdot \frac{1}{1 + \frac{t}{273}}$$

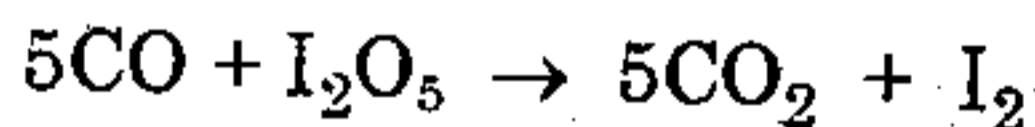
$$\%N = \frac{m_{N_2} \cdot 100}{a}$$

c) Định lượng halogen

Sau khi phân huỷ mẫu chất hữu cơ chẳng hạn bằng oxi hay axit nitric bốc khói, các halogen được chuyển thành $AgHal$ để định lượng.

d) Định lượng oxi

Thông thường hàm lượng oxi trong một hợp chất hữu cơ được xác định gián tiếp bằng cách lấy 100% trừ đi tổng số % của các nguyên tố khác có trong hợp chất. Tuy vậy, khi cần thiết cũng có thể xác định trực tiếp bằng cách chuyển oxi trong mẫu chất thành CO rồi định lượng CO dựa theo phản ứng:



3. Xác định phân tử khối

a) Các phương pháp thông thường

– Đối với các *chất khí* hoặc *chất lỏng dễ bay hơi*, ta có thể xác định tỉ khối hơi d của chất đó so với một khí đơn giản nào đó (thí dụ hiđro, oxi, không khí...) rồi tính M theo biểu thức:

$$d = \frac{m \text{ (g) chất hữu cơ}}{m' \text{ (g) không khí}} = \frac{M \text{ (g)}}{29 \text{ (g)}} \longrightarrow M = 29d$$

m và m' lần lượt là khối lượng của cùng một thể tích khí hoặc hơi (V) chất hữu cơ và không khí trong điều kiện như nhau; khối lượng của 1 lít không khí ở đktc là 1,293 gam.

Tương tự như vậy ta có các biểu thức:

$$d = \frac{M}{M_{H_2}} \longrightarrow M = 2d \quad \text{và}$$

$$d = \frac{M}{M_{O_2}} \longrightarrow M = 32d$$

- Đối với *chất rắn* hoặc *chất lỏng không bay hơi* người ta có thể đo độ giảm nhiệt độ đông đặc Δt (phép nghiệm lạnh) hoặc độ tăng nhiệt độ sôi Δt (phép nghiệm sôi) của dung dịch (chứa m gam chất hữu cơ trong p gam dung môi) so với dung môi nguyên chất, rồi tính M theo biểu thức:

$$M = K \cdot \frac{m \cdot 1000}{p \cdot \Delta t}$$

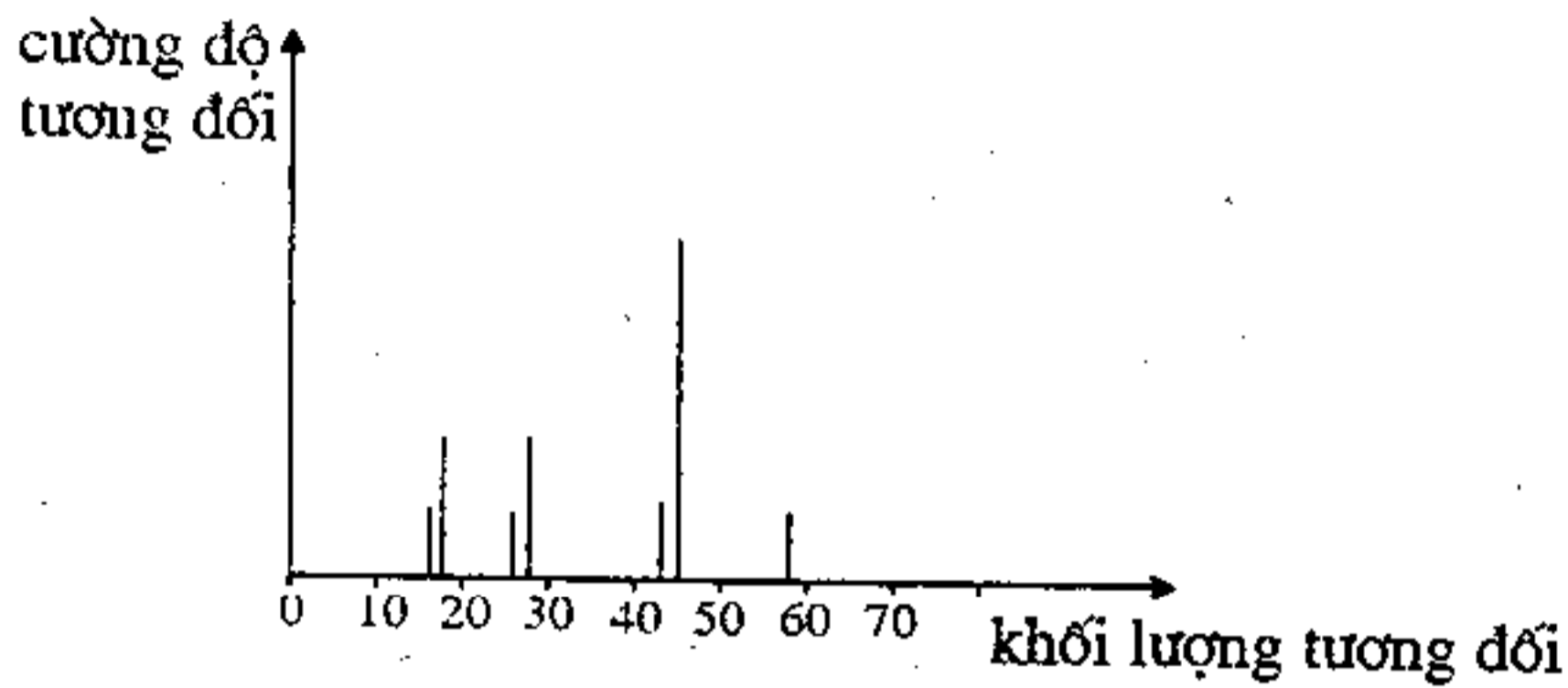
K là hằng số nghiệm lạnh (trong phép nghiệm lạnh) hoặc hằng số nghiệm sôi (trong phép nghiệm sôi). K chỉ phụ thuộc vào bản chất của dung môi.

Phép nghiệm lạnh được dùng rộng rãi hơn phép nghiệm sôi.

b) Phương pháp phổ khối lượng (khối phổ)

Khi cho các phân tử hữu cơ đi qua máy khối phổ, chúng bị phá vỡ thành

từng mảnh (thường là các ion dương) do bị va đập mạnh bởi một dòng electron với tốc độ lớn. Chỉ rất ít phân tử đi qua được một cách nguyên vẹn. Trên khối phổ đồ của một chất có rất nhiều pic ứng với các mảnh khác nhau, với khối lượng mol khác nhau và hàm lượng khác nhau (thể hiện ở vị trí và cường độ của pic). Pic ứng với khối lượng mol cao nhất (cường độ thường rất thấp) cho biết khối lượng mol của chất hữu cơ được khảo sát. Thí dụ khối phổ của axeton (kí hiệu X) có dạng như sau:



Hình 1.1 Phổ khối lượng của axeton.

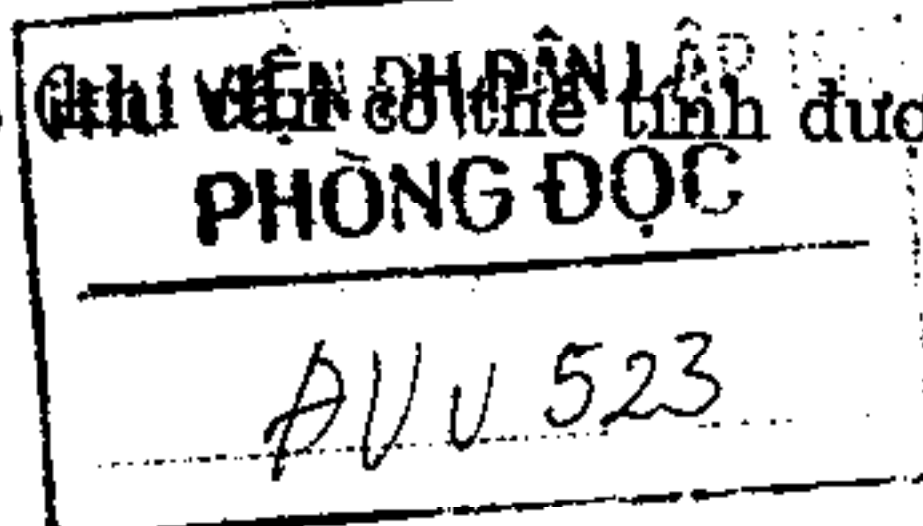
Tiêu phân lớn nhất tương ứng với một phân tử nguyên vẹn chỉ bớt đi một electron là $X^{(+)}$ có khối lượng mol là 58 gam. Ta suy ra $M = 58$.

4. Thiết lập công thức phân tử

Sau khi đã phân tích nguyên tố và xác định phân tử khối của hợp chất hữu cơ ta có thể thiết lập công thức phân tử của nó theo một trong ba cách phổ biến sau đây:

a) Lập công thức đơn giản nhất rồi đến công thức phân tử

Giả sử có hợp chất chỉ chứa C, H và O. Khi đốt cháy α gam chất này sinh ra m_{CO_2} và m_{H_2O} . Theo các biểu thức tính đã nêu ở trên ta tính được m_C , m_H và m_O (thứ tự cơ thể tính được %C,



%H và %O). Đem chia các đại lượng này cho khối lượng mol nguyên tử tương ứng, rồi chia cho ước số chung lớn nhất ta sẽ được tỉ lệ về số lượng nguyên tử của các nguyên tố trong phân tử, do đó lập được công thức đơn giản nhất. Từ công thức này và phân tử khối ta dễ dàng tìm ra công thức phân tử.

Thí dụ: Đốt cháy hoàn toàn 0,090 gam hợp chất chứa C, H, O cho 0,130 gam CO_2 và 0,054 gam H_2O . Tỉ khối hơi của chất này so với hiđro bằng 30. Hãy thiết lập công thức phân tử.

Giải: $m_{\text{C}} = 12 \cdot 0,130 : 44 = 0,036 \text{ (g)}$

$$m_{\text{H}} = 2 \cdot 0,054 : 18 = 0,006 \text{ (g)}$$

$$m_{\text{O}} = 0,090 - (0,036 + 0,006) = 0,048 \text{ (g)}$$

Tỉ lệ về số nguyên tử trong phân tử:

$$\text{C} : \text{H} : \text{O} = \frac{0,036}{12} : \frac{0,006}{1} : \frac{0,048}{16} = 1 : 2 : 1$$

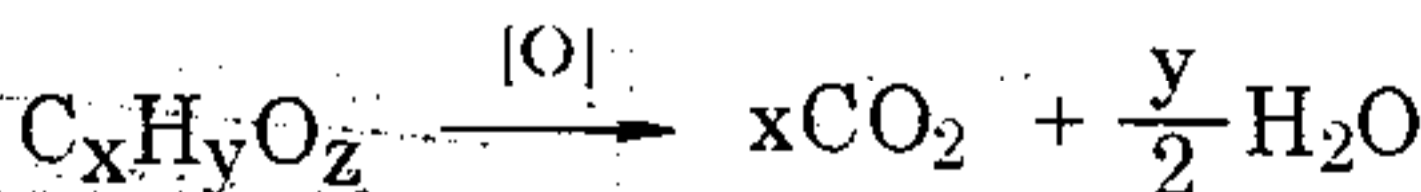
Công thức đơn giản nhất là CH_2O .

$$M = 2 \cdot 30 = 60 \quad (\text{CH}_2\text{O})_n = 60 \rightarrow n = 2$$

Vậy có công thức phân tử $(\text{CH}_2\text{O})_2$ hay là $\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2$.

b) Dựa vào khối lượng các sản phẩm đốt cháy và M mà không qua công thức đơn giản nhất

Đặt công thức của hợp chất là $\text{C}_x\text{H}_y\text{O}_z$. Theo sơ đồ:



ta có :
$$\frac{44x}{m_{\text{CO}_2}} = \frac{9y}{m_{\text{H}_2\text{O}}} = \frac{M}{a}$$

Từ đó ta có :
$$x = \frac{M \cdot m_{\text{CO}_2}}{44a} \quad \text{và} \quad y = \frac{M \cdot m_{\text{H}_2\text{O}}}{9a}$$

z được suy ra từ x, y và M.

Áp dụng phương pháp giải này vào thí dụ trên ta cũng tìm được $x = 2, y = 4, z = 2$ và công thức phân tử $\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2$.

c) Dựa vào thành phần % các nguyên tố và M, không qua công thức đơn giản nhất

Thành phần % các nguyên tố (tính được theo các biểu thức đã học) tỉ lệ với khối lượng mỗi nguyên tố trong phân tử. Ta có:

$$\frac{12x}{\%C} = \frac{y}{\%H} = \frac{16z}{\%O} = \frac{12x + y + 16z}{100} = \frac{M}{100}$$

Suy ra :
$$x = \frac{M \cdot \%C}{12 \times 100}; \quad y = \frac{M \cdot \%H}{100}; \quad z = \frac{M \cdot \%O}{16 \times 100};$$

Áp dụng phương pháp giải này vào thí dụ ở trên ta cũng tìm ra công thức phân tử $\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2$.

Bài tập:

1.1 a) Hãy nêu định nghĩa: chất hữu cơ, hoá học hữu cơ, hidrocarbon, gốc hidrocarbon, gốc tự do, dẫn xuất của hidrocarbon.

b) Cho các công thức hóa học sau đây: CH_3Cl (A); COCl_2 (B); CaC_2 (C); C_2H_6 (D); B_2H_6 (E); CH_3COOH (F); $\text{CH}_3^+\text{CHCH}_3$ (G); $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ (H);