

PHƯƠNG PHÁP VIẾT CÔNG THỨC CẤU TẠO
HỢP CHẤT HỮU CƠ

3.1

ANKAN

VD 1:Viết các đồng phân có thể có của ankan có công thức C_7H_{16}

Giải:

Bước 1:

Viết mạch C dưới dạng mạch thẳng n nguyên tử C. Được đồng phân thứ nhất.



Bước 2.1:

Bỏ 1 nguyên tử C ở mạch chính n nguyên tử C ở trên làm mạch nhánh. Mạch chính bây giờ gồm $m = n - 1$ nguyên tử C.

Di chuyển mạch nhánh từ vị trí C_2 đến vị trí $C_{\frac{n-1}{2}}$ nếu (n - 1) là số chẵn, đến vị trí $C_{\frac{n}{2}}$ nếu (n - 1) là số lẻ để được các đồng phân tiếp theo.



Bước 2.2:

Tiếp tục bỏ 2 nguyên tử C để làm nhánh.

Mạch chính bây giờ gồm $a = n - 2$ nguyên tử C.

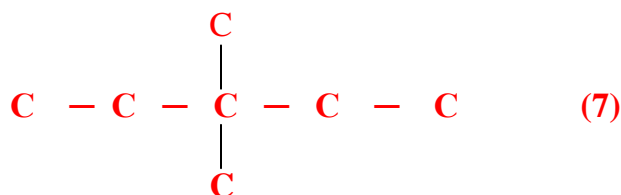
- Viết các đồng phân gồm hai nhánh mỗi nhánh gồm 1 nguyên tử C bằng cách cố định nhóm này di chuyển nhóm kia từ vị trí C_2 đến vị trí C_{a-1}



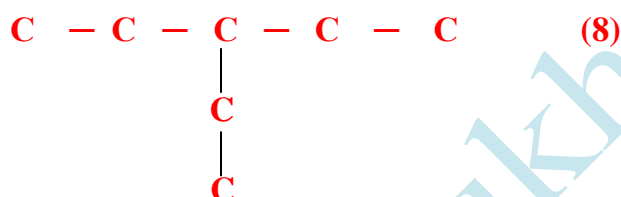
CHUYÊN ĐỀ PP VIẾT CÔNG THỨC CẤU TẠO CỦA CHẤT HỮU CƠ

$\begin{array}{c} | \\ \text{C} \\ | \end{array} \quad \begin{array}{c} | \\ \text{C} \\ | \end{array}$

Di chuyển đồng thời hai nhánh cùng lúc cùng liên kết cùng 1 nguyên tử C từ vị trí C_2 lần lượt đến vị trí $C_{\frac{a}{2}}$ nếu a là số chẵn, đến vị trí $C_{\frac{a+1}{2}}$ nếu a là số lẻ.



Viết các đồng phân chỉ gồm 1 nhánh gồm 2 nguyên tử C làm nhánh bắt đầu từ vị trí C_3 đến vị trí C_{a-2} thì dừng lại để tránh trùng lặp.



Để thực hiện được bước viết các đồng phân chỉ gồm 1 nhánh gồm $p = 2, 3, 4, \dots$ nguyên tử C làm nhánh bắt đầu từ vị trí C_{p+1} đến vị trí C_{a-p-1} này đòi hỏi phân tử ban đầu phải có tối thiểu là $3p + 1$ số nguyên tử C trong phân tử.

Bước 2.3:

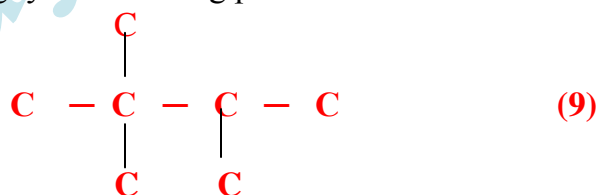
Bẻ 3 nguyên tử C để làm nhánh.

Mạch chính bây giờ gồm $b = n - 3$ nguyên tử C.

- Vì số nguyên tử C trong phân tử C_7H_{16} là $7 < 3 \cdot 3 + 1$ nên không thể viết các đồng phân chỉ gồm 1 nhánh gồm 3 nguyên tử C làm nhánh.

Viết các đồng phân gồm 3 nhánh mỗi nhánh gồm 1 nguyên tử C bằng cách cố định nhóm này di chuyển nhóm kia từ vị trí C_2 đến vị trí C_{a-1} .

Để thực hiện được bước viết các đồng phân gồm $q = 2, 3, 4, \dots$ nhánh mỗi nhánh gồm 1 nguyên tử C đòi hỏi phân tử ban đầu phải có tối thiểu là $2q + 1$ số nguyên tử C trong phân tử.



Để thực hiện được bước viết các đồng phân gồm $q = 2, 3, 4, \dots$ nhánh liên kết với q nguyên tử C ở mạch chính mà mỗi nhánh gồm 1 nguyên tử C đòi hỏi phân tử ban đầu phải có tối thiểu là $2q + 2$ số nguyên tử C trong phân tử.

Phân tử C_7H_{16} không thỏa mãn điều kiện này nên nó chỉ có 9 đồng phân.

CHUYÊN ĐỀ PP VIẾT CÔNG THỨC CẤU TẠO CỦA CHẤT HỮU CƠ

Bước 3: Điền H vào mạch C sao cho đúng hóa trị của các nguyên tố ta sẽ được tất cả các đồng phân cần tìm.

3.2

ANKEN, ANKIN:

VD 1:Viết các đồng phân có thể có của ankan có công thức C_7H_{14}

Giải:

Bước 1: Xác định độ bất bão hòa (số liên kết π hoặc số vòng của phân tử có công thức C_xH_y) theo công thức:

$$a = \frac{2x + 2 - y}{2}$$

Nếu $a = 1, 2, \dots$ thì có đồng phân là xicloankan và đồng phân cis - trans. Viết các đồng phân xicloankan và đồng phân cis - trans đó. Phần này các em tự viết lấy.

Bước 2:

Viết mạch C dưới dạng mạch thẳng n nguyên tử C và viết liên kết π ở vị trí C_1 . Được đồng phân thứ nhất.



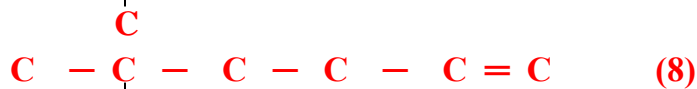
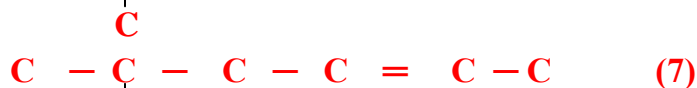
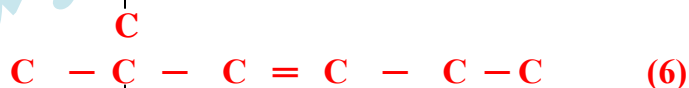
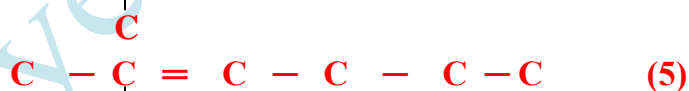
Di chuyển liên kết π từ vị trí C_1 đến vị trí $C_{\frac{n}{2}}$ (nếu n chẵn) và đến vị trí $C_{\frac{n-1}{2}}$ (nếu n là số lẻ) sẽ được các đồng phân tiếp theo.



Bước 3.1:

Bỏ 1 nguyên tử C ở mạch chính n nguyên tử C ở trên làm mạch nhánh. Mạch chính bây giờ gồm $m = n - 1$ nguyên tử C.

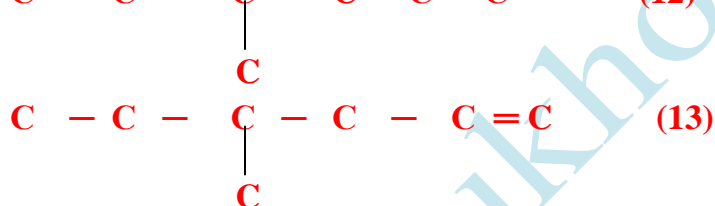
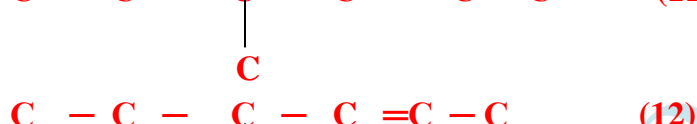
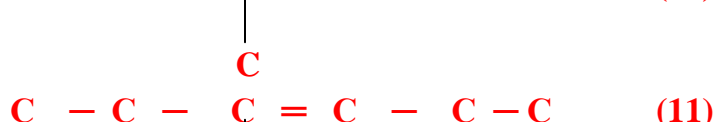
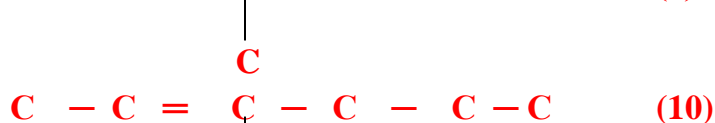
Di chuyển liên kết π từ vị trí C_1 đến vị trí C_{m-1} để được các đồng phân tiếp theo.



CHUYÊN ĐỀ PP VIẾT CÔNG THỨC CẤU TẠO CỦA CHẤT HỮU CƠ

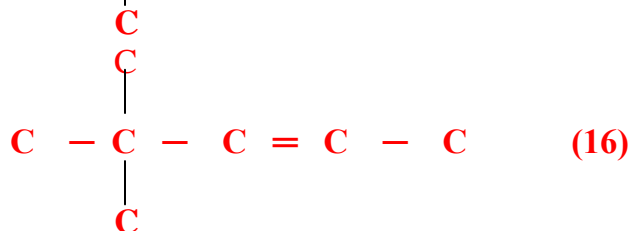
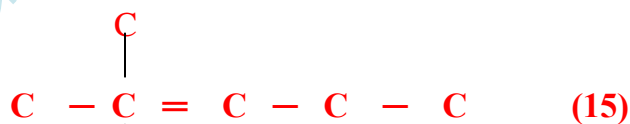
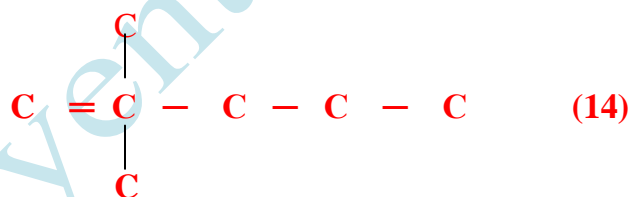
C

Di chuyển mạch nhánh từ vị trí C_2 đến vị trí $C_{\frac{n-1}{2}}$ nếu $(n-1)$ là số chẵn, đến vị trí $C_{\frac{n}{2}}$ nếu $(n-1)$ là số lẻ để được các đồng phân tiếp theo.

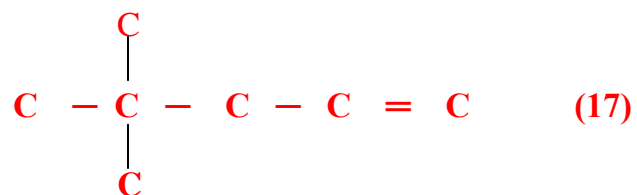


Bước 2.2:

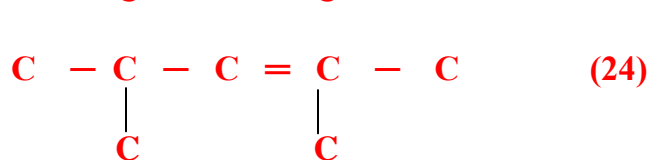
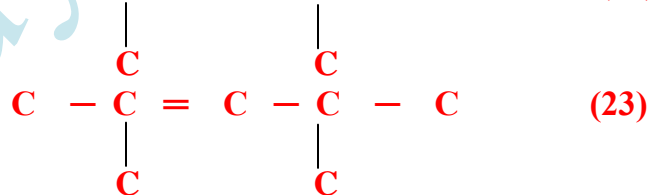
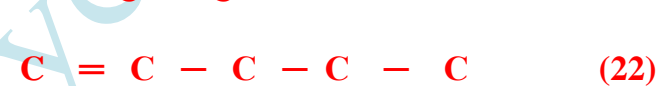
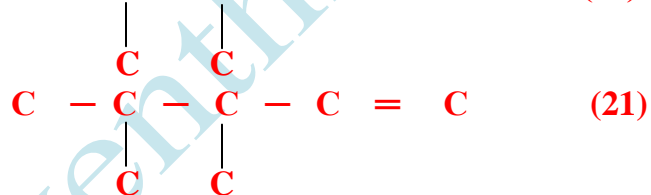
Tiếp tục bỏ 2 nguyên tử C để làm nhánh.
 Mạch chính bây giờ gồm $a = n - 2$ nguyên tử C.
 - Viết các đồng phân gồm hai nhánh mỗi nhánh gồm 1 nguyên tử C bằng cách cố định nhóm này di chuyển nhóm kia từ vị trí C_2 đến vị trí C_{a-1}



CHUYÊN ĐỀ PP VIẾT CÔNG THỨC CẤU TẠO CỦA CHẤT HỮU CƠ



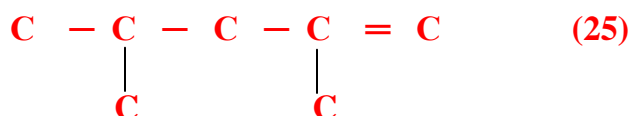
Ứng với mỗi công thức thu được Di chuyển liên kết π từ vị trí C_1 đến vị trí C_{a-1} để được các đồng phân tiếp theo.



CHUYÊN ĐỀ PP VIẾT CÔNG THỨC CẤU TẠO CỦA CHẤT HỮU CƠ

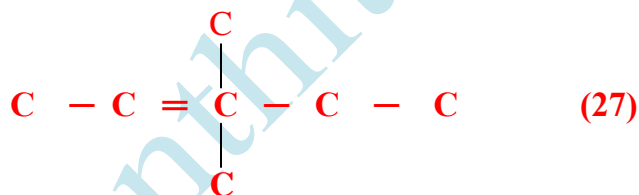
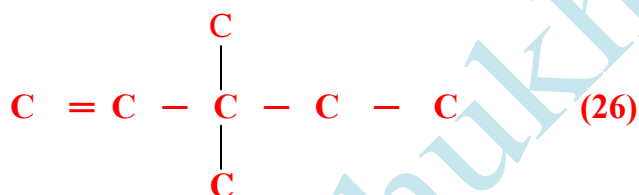
Nếu phân tử có mạch chính đối xứng thì di chuyển liên kết n từ vị trí C_1 đến vị trí $C_{\frac{a}{2}}$ nếu a chẵn, đến $C_{\frac{a-1}{2}}$ nếu a lẻ.

Nếu phân tử có mạch chính không đối xứng thì di chuyển liên kết n từ vị trí C_1 đến vị trí C_{a-1}

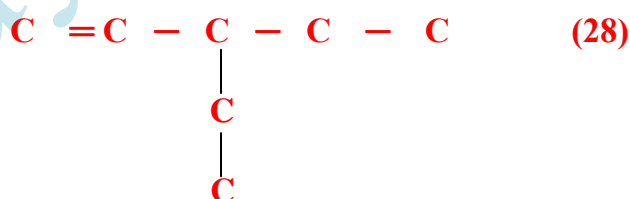


(phân tử có mạch C đối xứng nên CTCT (25) trùng với (22) và (24) trùng với (23))

Di chuyển đồng thời hai nhánh cùng lúc cùng liên kết cùng 1 nguyên tử C từ vị trí C_2 lần lượt đến vị trí $C_{\frac{a}{2}}$ nếu a là số chẵn, đến vị trí $C_{\frac{a+1}{2}}$ nếu a là số lẻ.



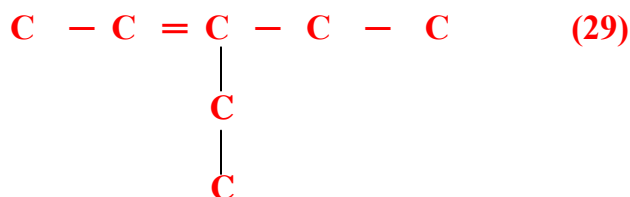
Viết các đồng phân chỉ gồm 1 nhánh gồm 2 nguyên tử C làm nhánh bắt đầu từ vị trí C_3 đến vị trí C_{a-2} thì dừng lại để tránh trùng lặp.



Để thực hiện được bước viết các đồng phân chỉ gồm 1 nhánh gồm $p = 2, 3, 4, \dots$ nguyên tử C làm nhánh bắt đầu từ vị trí C_{p+1} đến vị trí C_{a-p-1} này đòi hỏi phân tử ban đầu phải có tối thiểu là $3p + 1$ số nguyên tử C trong phân tử.

CHUYÊN ĐỀ PP VIẾT CÔNG THỨC CẤU TẠO CỦA CHẤT HỮU CƠ

Ứng với mỗi công thức thu được Di chuyển liên kết n từ vị trí C_1 đến vị trí C_{a-1} (nếu mạch chính đối xứng thì dừng lại ở vị trí $C_{\frac{n-3}{2}}$ để được các đồng phân tiếp theo.



Bước 2.3:

Bẻ 3 nguyên tử C để làm nhánh.

Mạch chính bây giờ gồm $b = n - 3$ nguyên tử C.

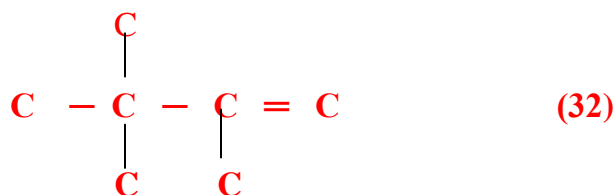
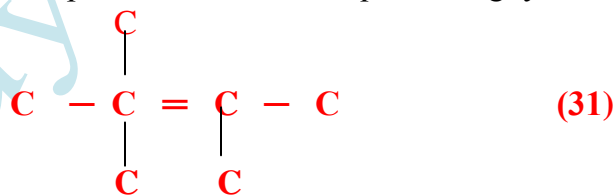
- Vì số nguyên tử C trong phân tử C_7H_{14} là $7 < 3 \cdot 3 + 1$ nên không thể viết các đồng phân chỉ gồm 1 nhánh gồm 3 nguyên tử C làm nhánh.

Viết các đồng phân gồm 3 nhánh mỗi nhánh gồm 1 nguyên tử C bằng cách cố định nhóm này di chuyển nhóm kia từ vị trí C_2 đến vị trí C_{a-1} .

Để thực hiện được bước viết các đồng phân gồm $q = 2, 3, 4, \dots$ nhánh mỗi nhánh gồm 1 nguyên tử C đòi hỏi phân tử ban đầu phải có tối thiểu là $2q + 1$ số nguyên tử C trong phân tử.



Để thực hiện được bước viết các đồng phân gồm $q = 2, 3, 4, \dots$ nhánh liên kết với q nguyên tử C ở mạch chính mà mỗi nhánh gồm 1 nguyên tử C đòi hỏi phân tử ban đầu phải có tối thiểu là $2q + 2$ số nguyên tử C trong phân tử.



Chú ý:

CHUYÊN ĐỀ PP VIẾT CÔNG THỨC CẤU TẠO CỦA CHẤT HỮU CƠ

Về cơ bản viết các đồng phân của anken, ankin giống với ankan. Từ khung cacbon của ankan ta di chuyển vị trí liên kết đôi để được các đồng phân của anken hoặc ankin và thêm bước viết đồng phân xicloankan và cis – trans. Đối với ankin thì có thêm đồng phân về vị trí liên kết π : hệ liên kết π liên hợp và không liên hợp.

Khi di chuyển liên kết π phải chú ý trường hợp mạch cacbon đối xứng để loại bỏ một số đồng phân trùng lặp

3.2

Đối với các chất hữu cơ còn lại thì phương pháp viết công thức cấu tạo cũng được suy ra từ cách viết của ankan. Nhưng chú ý các trường hợp sau:

Với hợp chất hữu cơ no có 1 nguyên tử O thì có 2 loại đồng phân: ancol và ete.

Với hợp chất hữu cơ có $a = 1$ và có 1 nguyên tử O thì có 2 loại đồng phân: ancol không no đơn chức, ete không no, andehit, xeton, ancol có mạch C là mạch vòng.

Với hợp chất hữu cơ có $a = 1$ và có 2 nguyên tử O thì có 2 loại đồng phân: ancol không no đa chức, hợp chất 2 chức andehit và ancol hoặc xeton và ancol, ancol 2 chức có mạch C là mạch vòng, axít, este.....

Và nhiều trường hợp khác nữa.

Xác định độ bất bão hòa (số liên kết π hoặc số vòng của phân tử có công thức $C_xH_yO_zN_tX_v$) theo công thức:

$$a = \frac{2x + 2 - (y + v) + t}{2}$$

Lời kết:

Trên đây là những hướng dẫn mang tính định hướng để các em học sinh lớp 11 tìm thấy hướng đi trong các bài tập viết đồng phân các hợp chất hữu cơ. Chúc các em thành công.

LÊ TRẦN TRÍ NGUYỄN

luyenthithukhoa.vn