

BÀI GIẢNG GIÁO KHOA

Thầy giáo : Nguyễn Quốc Tùng

HOÁ HỌC

11

BÀI
12

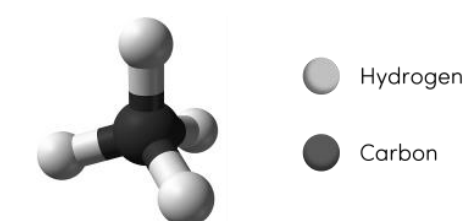
CÔNG THỨC PHÂN TỬ
HỢP CHẤT HỮU CƠ

I. CÔNG THỨC PHÂN TỬ

1. Khái niệm

Công thức phân tử cho biết thành phần nguyên tố và số lượng nguyên tử của từng nguyên tố có trong phân tử hợp chất hữu cơ.

Ví dụ: Methane có công thức phân tử là CH_4 , gồm 1 nguyên tử carbon và 4 nguyên tử hydrogen.



2. Cách biểu diễn công thức phân tử hợp chất hữu cơ

a. Công thức tổng quát

Công thức tổng quát cho biết các nguyên tố có mặt trong phân tử của hợp chất hữu cơ.

Ví dụ: Công thức C_xH_y (x, y là số nguyên dương) cho biết phân tử này có chứa nguyên tử C và H.

b. Công thức đơn giản nhất

Công thức đơn giản nhất cho biết tỉ lệ tối giản của các nguyên tử trong phân tử hợp chất hữu cơ.

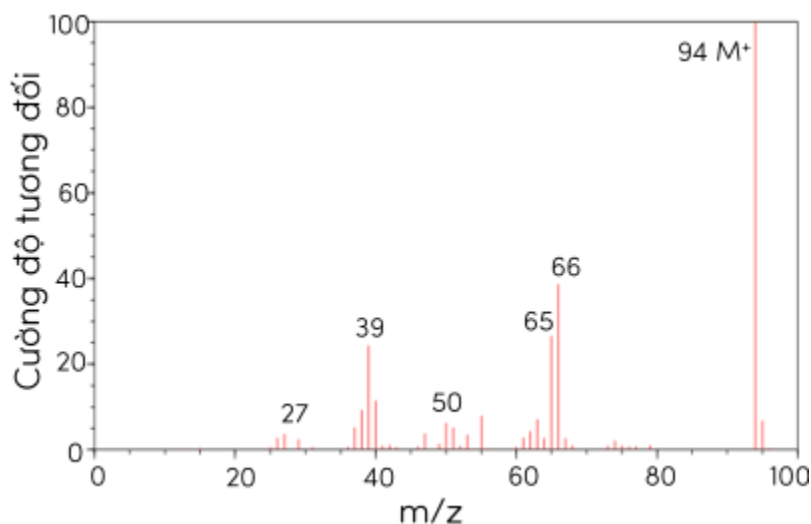
Ví dụ: Glucose $\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$ có công thức đơn giản nhất CH_2O với tỉ lệ nguyên tử C : H : O lần lượt là 1 : 2 : 1.

II. LẬP CÔNG THỨC PHÂN TỬ HỢP CHẤT HỮU CƠ

1. Xác định phân tử khối bằng phương pháp phổ khối lượng

Phổ khối lượng cho biết khối lượng phân tử hợp chất hữu cơ dựa vào mảnh ion phân tử $[\text{M}^+]$ có giá trị m/z lớn nhất.

Ví dụ: Phổ khối lượng (MS) của phenol có peak ion phân tử $[\text{M}^+]$ ứng với giá trị m/z = 94.



2. Lập công thức phân tử hợp chất hữu cơ

Xét hợp chất có công thức phân tử là $C_xH_yO_z$.

- Từ % nguyên tố, ta lập tỉ lệ $C : H : O$ theo số nguyên tối giản $p : q : r$. Từ đó, ta có công thức đơn giản nhất là $C_pH_qO_r$.

$$x:y:z = \frac{\%mC}{12} = \frac{\%mH}{1} = \frac{\%mO}{16} = p:q:r$$

- Mối liên hệ giữa công thức phân tử và công thức đơn giản nhất:

$$C_xH_yO_z = (C_pH_qO_r)_n$$

(với n là số nguyên dương)

- Từ phân tử khối của hợp chất hữu cơ, ta xác định được giá trị của n .

Ví dụ: Ethanol có phần trăm khối lượng của carbon, hydrogen, oxygen lần lượt là 52,14%, 13,13% và 34,37%. Khối lượng mol phân tử bằng 46,0 g/mol.

Ta có:

$$x:y:z = \frac{52,14}{12} = \frac{13,13}{1} = \frac{34,37}{16} \approx 4,345 : 13,13 : 2,15 \approx 2:6:1$$

⇒ Công thức đơn giản nhất của ethanol là C_2H_6O .

⇒ Công thức phân tử có dạng $(C_2H_6O)_n$.

Mà khối lượng phân tử $M = 46$ g/mol $\Rightarrow 46n = 46 \Rightarrow n = 1$.

⇒ Công thức phân tử của ethanol là C_2H_6O .

