

Hiệu ứng

Thảo Lê- BKĐCMP

Chương 3:

Hiệu ứng trong hợp chất hữu cơ

KN: Ảnh hưởng hút hoặc đẩy e của ngử hay nhóm ngử gây nên sự chuyển dịch điện tử trong ptử

→ *Sự phân bố lại mật độ điện tử và điện tích.*

Phân loại:

1. HU' cảm ứng (Inductive effect : I)
2. HU' liên hợp (Conjugation effect: C)
3. HU' siêu liên hợp (Hyper conjugation effect: H)

1. Hiệu ứng cảm ứng: I

KN: Sự khác nhau về độ âm điện (χ) của 2 nguyên tử trong phân tử

→ ảnh hưởng hút hoặc đẩy e truyền dọc trục liên kết σ .

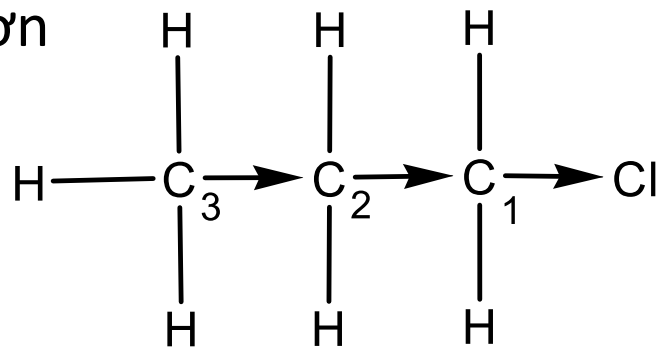
Quy ước:

- H ν của H trong liên kết C-H = 0

- Chiều chuyển dịch được mô tả bằng mũi tên thẳng hướng từ phía nguyên tử

có χ nhỏ hơn hướng về nguyên tử có χ lớn hơn

+ I : Đẩy và - I: Hút

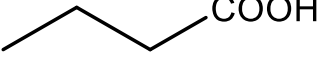
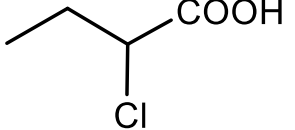
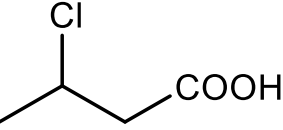
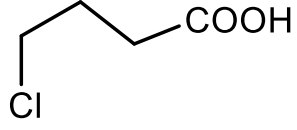


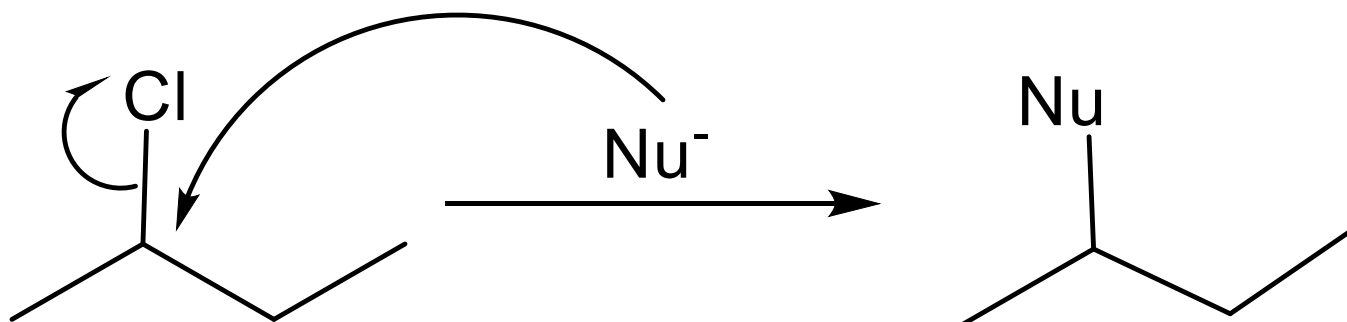
Đặc điểm của hiệu ứng cảm ứng

- Đặc trưng cho sự dịch chuyển electron σ trên trục liên kết σ
- I giảm rất nhanh khi kéo dài mạch truyền ảnh hưởng
- Coi như không bị cản trở bởi các yếu tố không gian

Vận dụng

- Giải thích tính phân cực \rightarrow khả năng pư.
- Giải thích tính acid và tính base

				
$K_a \cdot 10^5$	1,5	139	8,9	3



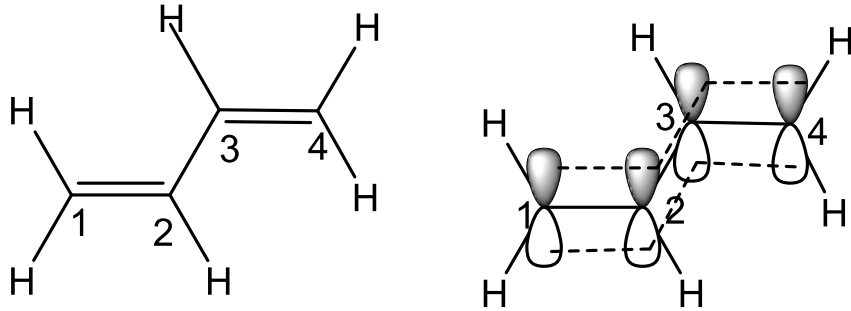
2. Hiệu ứng liên hợp: C

2.1. Hệ liên hợp

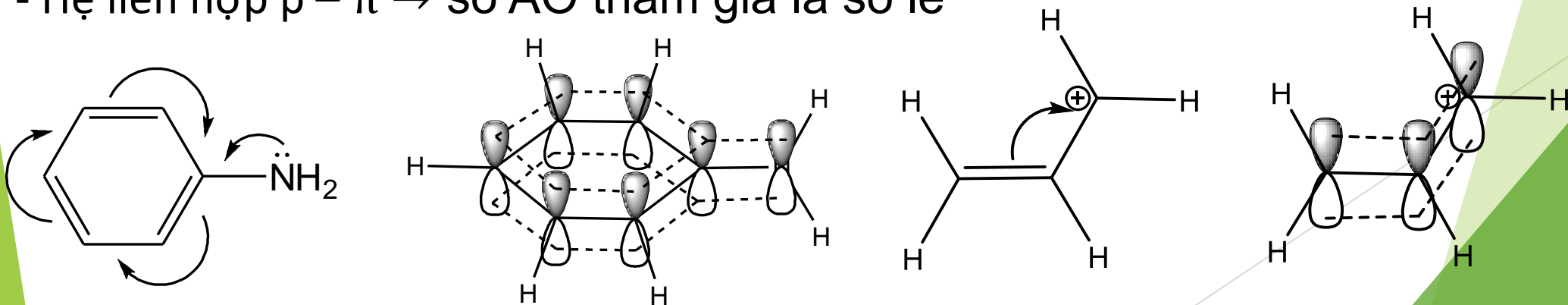
KN: Hệ liên hợp là hệ các AO p của nguyên tử C cạnh nhau, có thể xen phủ với nhau dẫn đến e có thể di chuyển từ AO p này sang AO p khác.

Phân loại

- Hệ liên hợp $\pi - \pi \rightarrow$ số AO tham gia là số chẵn



- Hệ liên hợp $p - \pi \rightarrow$ số AO tham gia là số lẻ



2.2, KN HU' liên hợp

ĐN: sự truyền e p và π trên hệ liên hợp gây nên sự phân cực của hệ đó.

Chiều chuyển dịch e: mũi tên cong

+ Hướng về phía ngử hoặc nhóm ngử có khả năng hút e

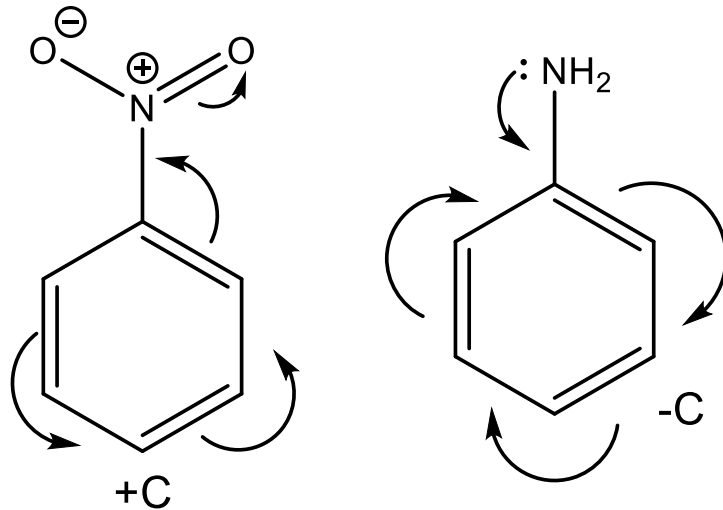
+ Hướng từ phía cặp e chưa chia vào liên kết π

+C : Thường là ngử hay nhóm ngử có cặp e chưa dùng hoặc ion (-)

VD: $-\text{NH}_2$, $-\text{OH}$, ...

-C : Thường là nhóm không no

VD: $-\text{NO}_2$, $-\text{CN}$, $-\text{CHO}$,

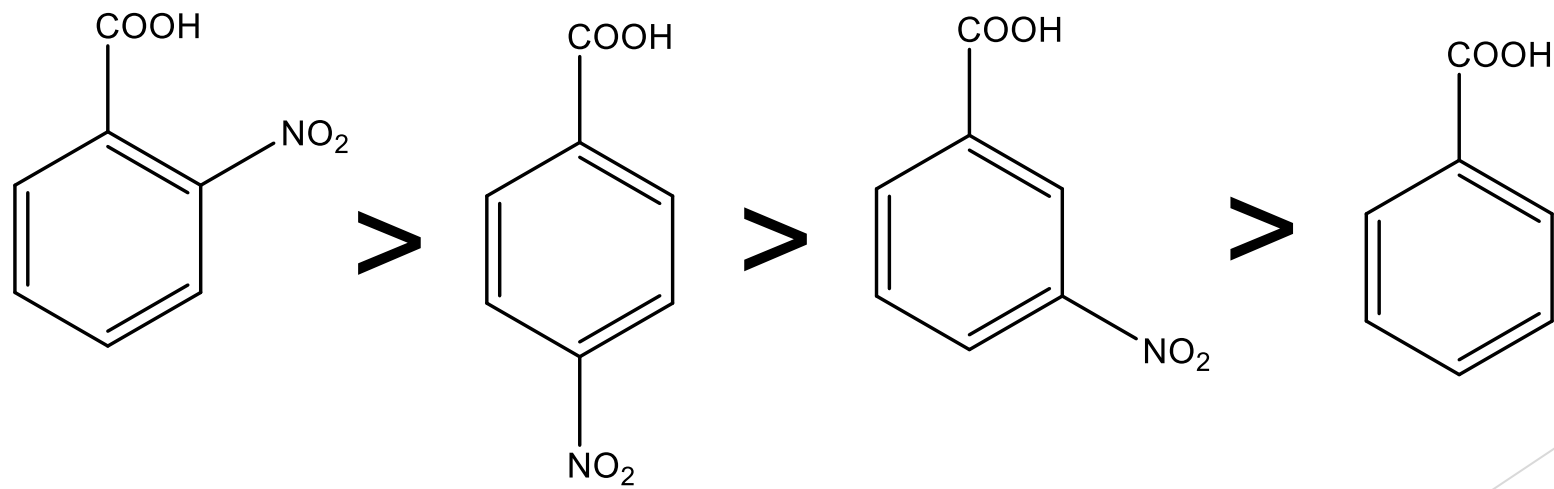
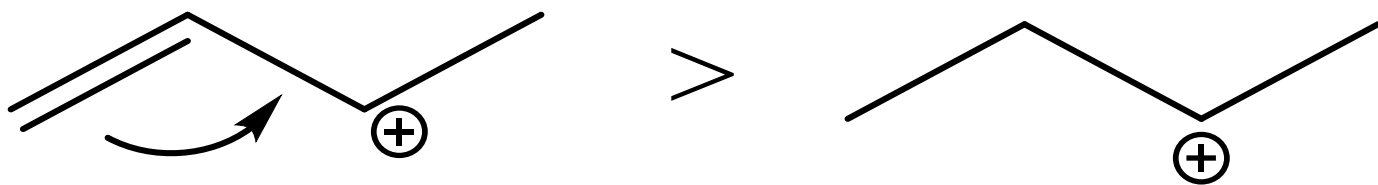
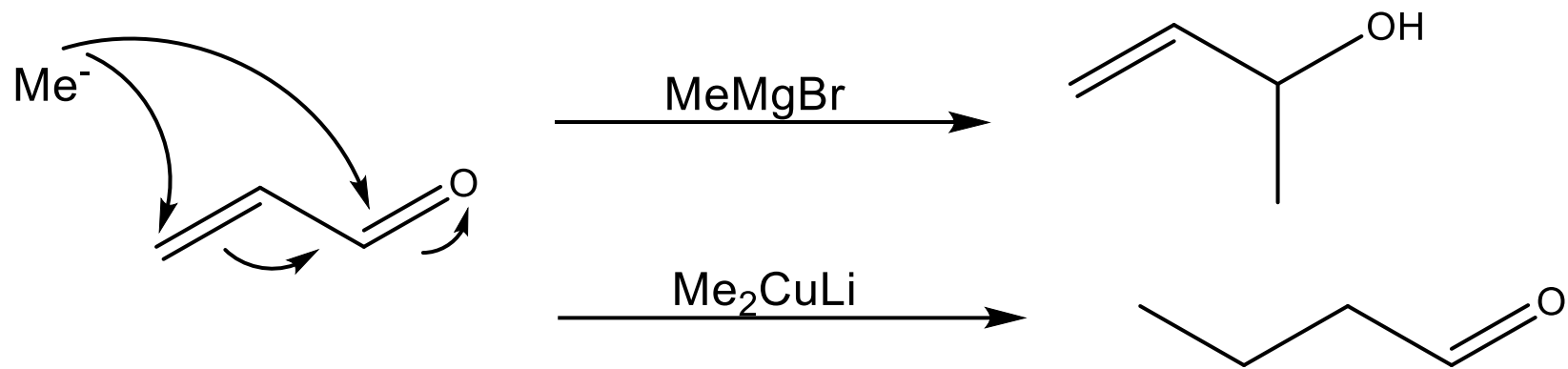


2.3, Đặc điểm HU' liên hợp

- Đặc trưng cho sự dịch chuyển e π và p trên hệ liên hợp
- C thay đổi tương đối ít khi kéo dài hệ liên hợp
- Chỉ có hiệu lực mạnh trên hệ liên hợp phẳng

Vận dụng

- GT khả năng, cơ chế pứ với các tác nhân E, Nu
- Định hướng cho sản phẩm của pứ hữu cơ
- GT độ bền vững của các sản phẩm trung gian, các cacbocation
- GT tính acid, base

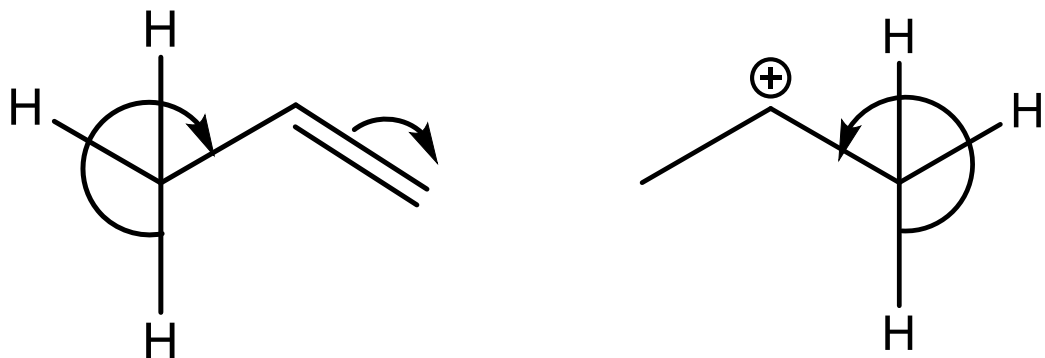


3. Hiệu ứng siêu liên hợp: H

KN: Là sự tương tác giữa các liên kết C-H hoặc N-H với liên kết đôi, AO p trống hoặc điện tử lẻ nằm trên AOp qua một liên kết đơn.

Bản chất: sự xen phủ giữa AO liên kết σ và AO p.

Biểu diễn: mũi tên cong hướng từ liên kết C-H đến liên kết đơn hướng về liên kết đôi. Thể hiện sự dịch chuyển e σ về liên kết π .

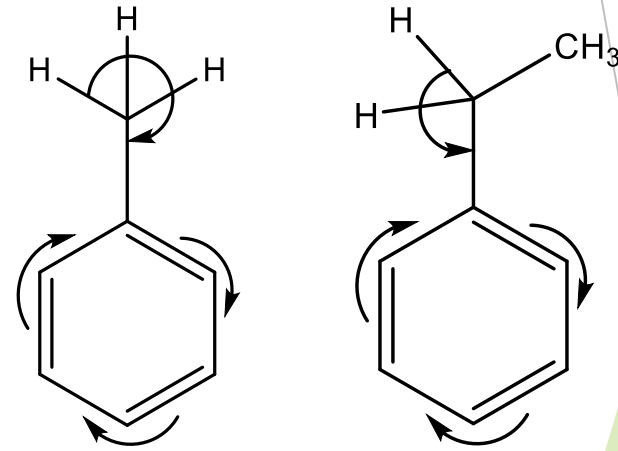


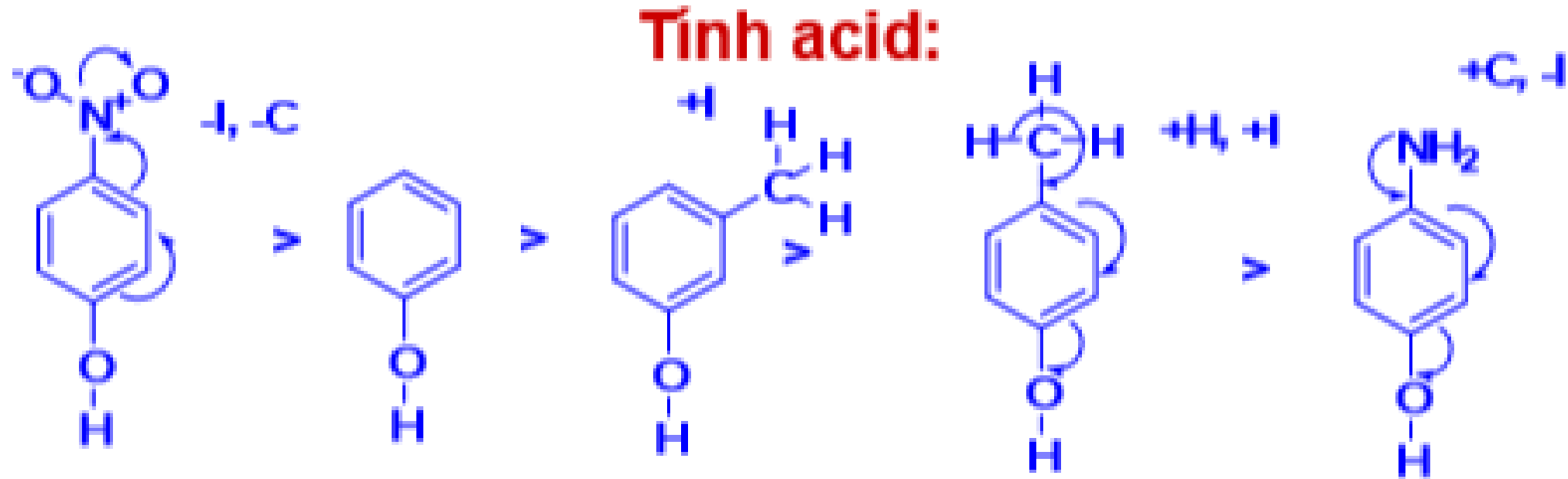
Đặc điểm HƯ siêu liên hợp

- Càng nhiều H α thì hiệu ứng H của nhóm ankyl càng mạnh
- Hiệu ứng H gần như không thay đổi khi kéo dài hệ liên hợp

Vận dụng

- GT độ bền cacbocation, gốc tự do, alkene
- GT độ bền sản phẩm, xác định sản phẩm chính, phụ
- GT độ linh động của ngtử H trong hợp chất carbonyl
- GT tính acid, base





Thông thường (không luôn luôn!) : $C > H > I$