

KỸ THUẬT XÁC ĐỊNH ĐỒNG PHÂN

CÔNG THỨC TÍNH NHANH SỐ ĐỒNG PHÂN

I. Khái niệm và phân loại

1. Khái niệm:

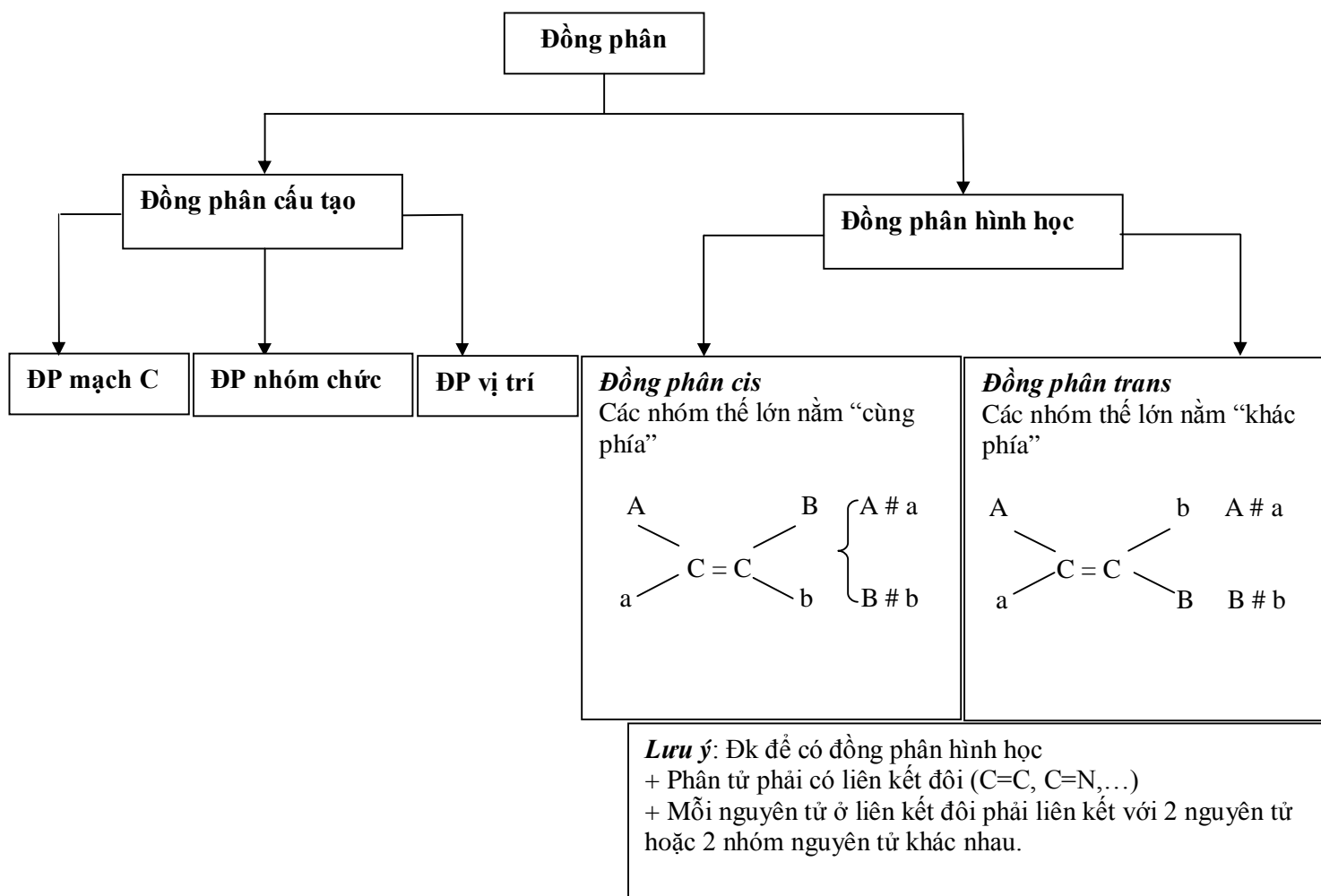
Đồng phân: Cùng CTPT, khác CTCT \Rightarrow khác tính chất hóa học.

* *Chú ý:* Các chất là đồng phân của nhau thì có cùng phân tử khối, nhưng các chất có cùng phân tử khối chưa chắc là đồng phân của nhau.

Ví dụ: $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$ ($M=60$); CH_3COOH ($M=60$) không phải là đồng phân.

2. Phân loại

Trong chương trình hóa học phổ thông chủ yếu xét cho các loại đồng phân sau:



II. Độ bất bão hòa và một số công thức tổng quát

1. Cách tính độ bất bão hòa (số liên kết π và vòng): k (hoặc Δ)

Cho A có CTTQ: $C_xH_yO_zN_tX_v$ (X là Halogen)

$$\text{Độ bất bão hòa: } k = \frac{(2x + 2) + t - (y + v)}{2}$$

* Chú ý:

- Công thức trên không áp dụng cho hợp chất chứa liên kết ion

- Một liên kết $\pi = 1$ vòng no

$$\Rightarrow k = \sum \text{số lk } \pi + \sum \text{số vòng no}$$

- $k = 0$: (A) no, mạch hở và chỉ có liên kết đơn trong phân tử

- $k = 1$: (A) có 2 loại mạch:

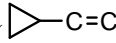

- + Mạch hở: có 1 lk π ($C=C, C=O, \dots$)



- + Mạch vòng: có một vòng no (xiclo)

- $k = 2$: (A) có 2 loại mạch:

- + Mạch hở: - có 1 liên kết ba ($C\equiv C, C\equiv N, \dots$)

- có 2 liên kết đôi ($C=C-C=O, \dots$)

- + Mạch vòng: - có 1 liên kết đôi + 1 vòng (, , ...)

- có 2 vòng no (, , ...)

- Một số điều kiện:

Hợp chất	M	Điều kiện biện luận
C_xH_y	$12x + y$	x, y, z: nguyên
$C_xH_yO_z$	$12x + y + 16z$	x, y, z ≥ 1 y: luôn là số chẵn $y \leq 2x + 2$
$C_xH_yN_t$	$12x + y + 14t$	x, y, z, t: nguyên
$C_xH_yO_zN_t$	$12x + y + 16z + 14t$	x, y, z, t ≥ 1 $y \leq 2x + 2 + t$ y chẵn khi t chẵn y lẻ t lẻ
$C_xH_yO_zX_v$	$12x + y + 16z + Xv$	$y + v \leq 2x + 2$ y và v cùng chẵn (lẻ)

Ví dụ : Hợp chất (A) có công thức phân tử là $(C_4H_9Cl)_n$ có mấy đồng phân cấu tạo?

A. 2 B. 3 C. 4 D. 5

Phân tích, hướng dẫn giải:

(A): $(C_4H_9Cl)_n \equiv C_{4n}H_{9n}Cl_n$, điều kiện: $(n + 9n) \leq 2.4n + 2 \Rightarrow n \leq 1$

$\Rightarrow n = 1$ (n nguyên dương).

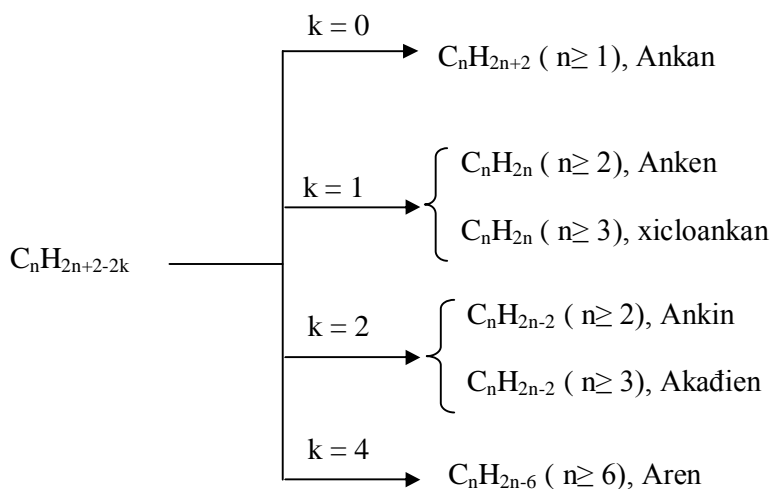
Vậy A là C_4H_9Cl có 4 đồng phân

$Cl-CH_2CH_2CH_2CH_3$; $CH_3CHClCH_2CH_3$; $ClCH_2CH(CH_3)CH_3$; $CH_3CCl(CH_3)CH_3$

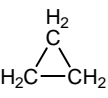
→ Đáp án C

2. Các công thức tổng quát:

* Xét hidrocarbon A(C, H): $C_nH_{2n+2-2k}$



Ví dụ : C_3H_6 có k = 1 \Rightarrow có 1 liên kết π hay 1 vòng no. Vậy C_3H_6 có 2 đồng phân là:

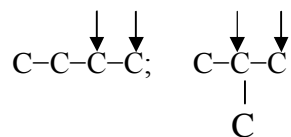
Propen: $CH_3-CH=CH_2$ và xiclo propan 

* Xét A(C, H, O) mạch hở: $C_nH_{2n+2-2k}O_z$

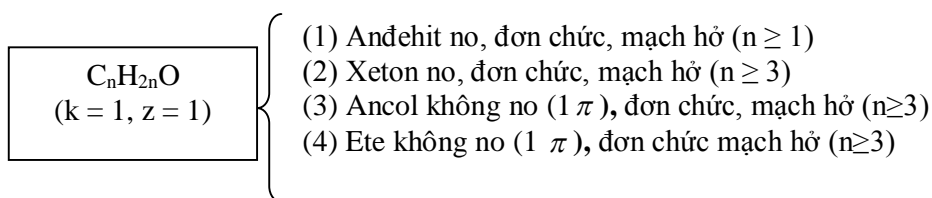
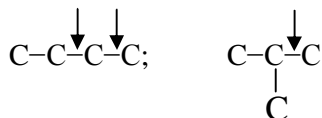
$C_nH_{2n+2}O$ (k = 0, z = 1)	}	(1) Ancol no, đơn chức, mạch hở (n ≥ 1) (2) Ete no, đơn chức, mạch hở (n ≥ 2)
----------------------------------	---	--

Ví dụ : $C_4H_{10}O$, $k = 0 \Rightarrow (1 \pi + 1)$ Oxi có 7 đồng phân cấu tạo:

+ 4 đồng phân Acol (OH):



+ 3 đồng phân ete (-O-):



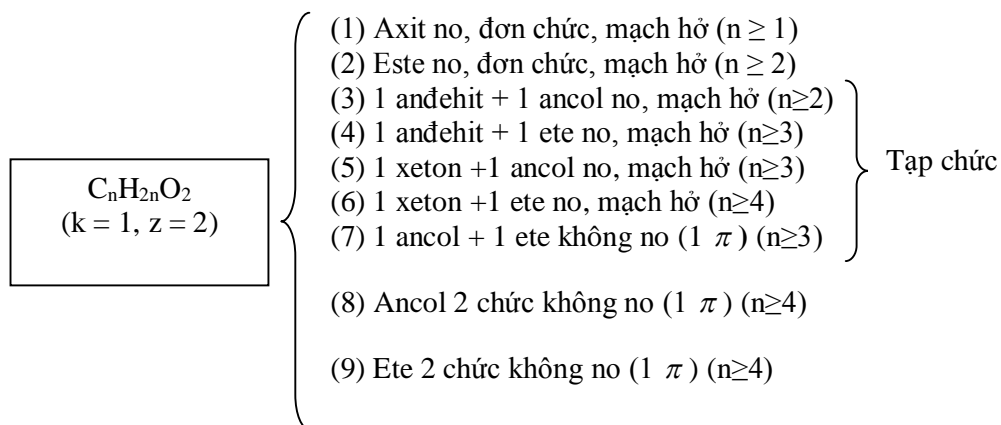
Ví dụ : C_3H_6O có $k = 1 \Rightarrow (1 \pi + 1O)$ có 4 đồng phân cấu tạo mạch hở

Anđehit: CH_3-CH_2CHO

Xeton: CH_3COCH_3

Ancol không no: $HO-CH_2CH=CH_2$

Ete không no: $CH_3-O-CH=CH_2$



(Học sinh thường không để ý đến các tập chức, hoặc đa chức)

Ví dụ : $C_3H_6O_2$ có $k = 1, 2$ Oxi có 8 đồng phân cấu tạo mạch hở

Axit: CH_3CH_2COOH

Este: $HCOOCH_2CH_3$ và CH_3COOCH_3

1 anđehit + 1 ancol no, mạch hở: $HOCH_2CH_2CHO$; $CH_3CH(OH)CHO$

1 anđehit + 1 ete no, mạch hở: CH_3-O-CH_2CHO

1 xeton + 1 ancol no, mạch hở: $HOCH_2COCH_3$

1 ancol + 1 ete không no: $HOCH_2-O-CH=CH_2$

Ancol 2 chức, ete 2 chức; tạp chức xeton + ete không tồn tại vì số $C < 4$

III. Nhóm chức

Là nhóm nguyên tử quyết định tính chất hóa học của hợp chất hữu cơ

- Đơn chức: Hợp chất chỉ có một nhóm chức trong phân tử.
- Đa chức: Hợp chất có từ 2 hay nhiều nhóm chức giống nhau.
- Tạp chức: Hợp chất có 2 hay nhiều nhóm chức khác nhau trong cùng phân tử.
- Một loại nhóm chức: có thể đơn chức hoặc đa chức.

TT	Nhóm chức	Công thức	Cấu tạo	Số lk π
1	Ancol	-OH	-O-H	0
2	Ete	-O-		0
3	Xeton (cacbonyl)	-CO-	$\begin{array}{c} -C- \\ \\ O \end{array}$	1
4	Anđehit	-CHO	$\begin{array}{c} -C-H \\ \\ O \end{array}$	1
5	Axit (cacboxyl)	-COOH	$\begin{array}{c} -C-O-H \\ \\ O \end{array}$	1
6	Este	-COO	$\begin{array}{c} -C-O- \\ \\ O \end{array}$	1

IV. Các bước viết công thức cấu tạo

+ **Bước 1:** Tính độ bất bão hòa (số liên kết π và vòng).

+ **Bước 2:** Dựa vào số lượng các nguyên tố O, N,... và độ bất bão hòa để xác định các nhóm chức phù hợp ($-\text{OH}$, $-\text{CHO}$, $-\text{COOH}$,...) đồng thời xác định độ bất bão hòa trong gốc hydrocarbon.

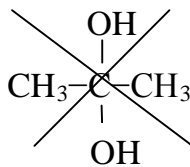
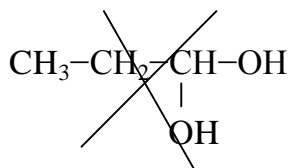
+ **Bước 3:** Viết cấu trúc mạch cacbon

- Mạch hở: không nhánh và có nhánh (1 nhánh \rightarrow 2 nhánh \rightarrow ...)
- Mạch vòng: vòng không nhánh và có nhánh.

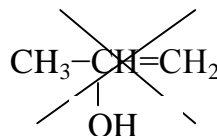
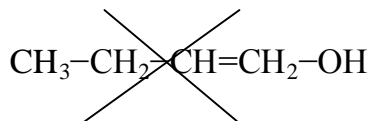
Đưa liên kết bội (liên kết đôi, ba) vào mạch cacbon (nếu có).

+ **Bước 4:** Đưa nhóm chức vào mạch cacbon (cần chú ý các trường hợp kém bền hoặc không tồn tại của nhóm chức).

Ví dụ: - Không tồn tại rượu mà 2, 3 nhóm OH cùng liên kết với một nguyên tử C.



- Không tồn tại rượu mà nhóm $-\text{OH}$ liên kết với một nguyên tử cacbon có liên kết π .



+ **Bước 5:** Điền số H vào để đảm bảo đủ hóa trị của các nguyên tố, sau đó xét đồng phân hình học (nếu có). Với các bài tập trắc nghiệm có thể không cần điền số H.

V. Một số chú ý khi xác định đồng phân (có điều kiện).

Với một số bài tập, căn cứ vào điều kiện kèm theo để phân tích. Cần nắm vững tính chất hóa học của các nhóm chức.

1. (A) + Na → H ₂ ↑ => A chứa nguyên tử H linh động	$\left\{ \begin{array}{l} - \text{OH (ancol, phenol)} \\ - \text{COOH (axit)} \end{array} \right.$
2. (A) + NaOH (t ⁰ thường) => A chứa nhóm chức	$\left\{ \begin{array}{l} - \text{OH (phenol)} \\ - \text{COOH (axit)} \\ - \text{Muối tạo bởi bazơ yếu} \\ \quad (\text{RCOONH}_4, \text{RCOONH}_3\text{R}') \\ - \text{NH}_2\text{RCOOH aminoaxit} \end{array} \right.$
3. (A) + NaOH (t ⁰) => A chứa nhóm chức	$\left\{ \begin{array}{l} -\text{COOR}' \text{ (este)} \\ -\text{R-X (dẫn xuất halogen, X không} \\ \quad \text{liên kết trực tiếp với nhân thơm)} \end{array} \right.$
4. (A) + H ₂ (Ni, t ⁰) => A chứa liên kết π (trừ liên kết π trong -COOH, -COOR') hoặc vòng không bền.	
5. (A) + dd HCl => A chứa nhóm có tính bazơ	$\left\{ \begin{array}{l} - \text{RNH}_2 \text{ (amin).} \\ - \text{NH}_2\text{-R-COOH (amino axit).} \\ - \text{Muối tạo bởi axit yếu.} \end{array} \right.$
6. (A) + AgNO ₃ /NH ₃ → Ag↓, trắng => A chứa nhóm chức -CH=O	
	$\left\{ \begin{array}{l} - \text{RCHO (andehit)} \\ - \text{HCOOH (axit fomic)} \\ - \text{HCOOR}' \text{ (este của axit fomic)} \\ - \text{HCOONH}_4, \text{HCOONa} \\ - \text{Glucosơ, fructosơ, mantosơ.} \end{array} \right.$
7. (A) + AgNO ₃ /NH ₃ → ↓ vàng => A là ankin đầu mạch (HC≡CH, R-(C≡CH) _x	
8. (A) + Cu(OH) ₂ (t ⁰ thường) => A có	$\left\{ \begin{array}{l} - \text{Rượu có ít nhất 2 nhóm -OH cạnh nhau.} \\ - \text{Nhóm axit -COOH.} \\ - \text{Có chứa từ 2 liên kết peptit trở lên (phản ứng màu} \\ \quad \text{Biure)} \end{array} \right.$
Lưu ý: - Nếu A có nhiều nhóm -OH cạnh nhau => tạo phức màu xanh lam.	
- Nếu A có nhóm -COOH sẽ hòa tan Cu(OH) ₂ => dung dịch màu xanh (Cu ²⁺).	
- Nếu A có từ 2 liên kết peptit trở lên => tạo phức màu tím (tripeptit, polipeptit, protein,...).	

9. (A) + Cu(OH)₂/OH⁻, t⁰ → ↓ Cu₂O, đỏ gạch => A chứa nhóm -CHO.

10. (A) + dd Br₂ → mất màu dd Br₂ => A chứa

- Liên kết π ở gốc hiđrocacbon kém bền (nối đôi, ba).
- Nhóm anđehit -CHO (trừ fructozơ).
- Vòng không bền (3 cạnh) hoặc phenol, anilin (cho kết tủa trắng)

VI. Công thức tính nhanh số đồng phân

1. Hợp chất no, đơn chức mạch hở

TT	Hợp chất	CTTQ	Công thức tính	Điều kiện
1	Ancol no, đơn chức, mạch hở	C _n H _{2n+2} O	2 ⁿ⁻²	1 < n < 6
2	Ete no, đơn chức, mạch hở	C _n H _{2n+2} O	$\frac{(n-1)(n-2)}{2}$	2 < n < 6
3	Anđehit no, đơn chức, mạch hở	C _n H _{2n} O	$\frac{(n-2)(n-3)}{2}$	2 < n < 7
4	Xeton no, đơn chức, mạch hở	C _n H _{2n} O	2 ⁿ⁻³	2 < n < 7
5	Axit no, đơn chức, mạch hở	C _n H _{2n} O ₂	2 ⁿ⁻³	2 < n < 7
6	Este no, đơn chức, mạch hở	C _n H _{2n} O ₂	2 ⁿ⁻²	1 < n < 5
7	Amin no, đơn chức, mạch hở	C _n H _{2n+3} N	2 ⁿ⁻¹	1 < n < 5

2. Tính số loại trieste

Khi cho glixerol + n axit béo (n nguyên dương) thì số loại tri este tạo ra được tính theo công thức:

Loại trieste	Công thức (số loại tri este)
Trieste chứa 1 gốc axit giống nhau	= n
Trieste chứa 2 gốc axit khác nhau	= 4.C _n ²
Trieste chứa 3 gốc axit khác nhau	= 3.C _n ³
Công thức chung (tổng số trieste)	= n + 4.C _n ² + 3.C _n ³ (n ≥ 3)

Với n = 1: => Số trieste = 1

Với n = 2: => Số trieste = 2 + 4.C₂² = 6

Với n = 3: => Số trieste = 3 + 4.C₃² + 3.C₃³ = 18

Với $n \geq 4 \Rightarrow$ Số trieste = $n + 4.C_n^2 + 3.C_n^3$

Công thức 2: Số trieste = $\frac{n^2(n+1)}{2}$

- Tính số loại mono este, dieste

Khi cho glixerol + n axit béo thì số loại mono este và di este tạo ra được tính theo công thức:

Loại este	Công thức
Mono este	= 2n
Đi este	Công thức
- Đi este chứa 1 loại gốc axit	= 2n
- Đi este chứa 2 loại gốc axit khác nhau	= $3.C_n^2$ ($n \geq 2$)
Tổng	$2n + 2n + 3.C_n^2$

Ví dụ : Cho glixerin tác dụng với hỗn hợp 3 axit béo gồm $C_{17}H_{35}COOH$, $C_{17}H_{31}COOH$ và $C_{17}H_{33}COOH$ thì tạo được tối đa bao nhiêu loại chất béo?

- A. 12 B. 16 C. 18 D. 20

Phân tích, hướng dẫn giải:

- Lưu ý số chất béo là số trieste

- Áp dụng công thức với $n = 3$ ta có:

$$n + 4.C_n^2 + 3.C_n^3 = 3 + 4.C_3^2 + 3.C_3^3 = 18 \Rightarrow \text{Đáp án C.}$$

Hoặc áp dụng công thức $\frac{n^2(n+1)}{2} = \frac{3^2(3+1)}{2} = 18$

3. Từ n amino axit khác nhau ta có n! số peptit. Nhưng nếu có i cặp amino axit giống

nhau thì công thức tính số peptit là: $\frac{n!}{2^i}$

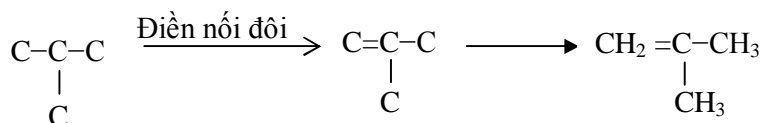
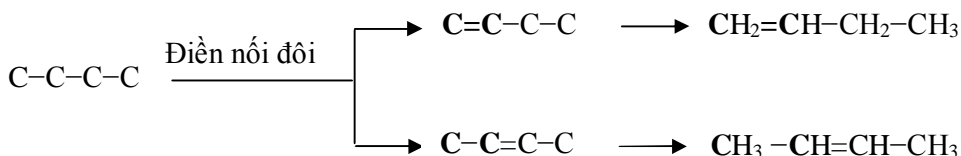
VII. Bài tập có lời giải

Bài 1: Hợp chất X có CTPT C_4H_8 , xác định các đồng phân cấu tạo của X

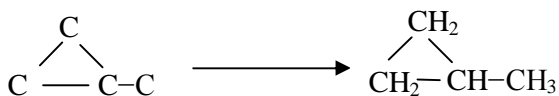
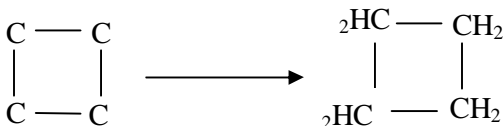
Phân tích, hướng dẫn giải:

Ta có: $k = \frac{2.4 + 2 - 8}{2} = 1 \Rightarrow$ Có 1 lk π hay 1 vòng \Rightarrow có 2 dạng mạch cacbon:

- Mạch hở có một liên kết đôi trong phân tử.



- Mạch vòng và chỉ có liên kết đơn

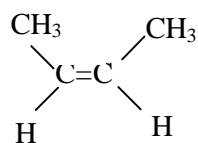


Bài 2: Viết các đồng phân mạch hở của C_4H_8 , trong các công thức cấu tạo nào có đồng phân hình học?

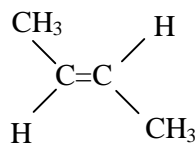
Phân tích, hướng dẫn giải:

Các đồng phân mạch hở của C_4H_8 : $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}_2-\text{CH}_3$ (1)
 $\text{CH}_3-\text{CH}=\text{CH}-\text{CH}_3$ (2); $\text{CH}_2=\text{C}-\text{CH}_3$ (3);
 $\quad \quad \quad |$
 $\quad \quad \quad \text{CH}_3$

Trong số các đồng phân này chỉ có (2) là thỏa mãn các điều kiện của đồng phân hình học.



Đồng phân Cis



Đồng phân trans

Bài 3: Cho các chất sau: $\text{CH}_2 = \text{CH}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}=\text{CH}_2$, $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}=\text{CH}-\text{CH}_2-\text{CH}_3$, $\text{CH}_3-\text{C}(\text{CH}_3)=\text{CH}-\text{CH}_3$, $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}_2-\text{CH}=\text{CH}_2$.

A. 2 B. 3 C. 1 D. 4

(Trích ĐTTS vào các trường Đại học, cao đẳng khối A, 2008)

Phân tích, hướng dẫn giải:

Dựa vào điều kiện cần và đủ để có đồng phân hình học

=> chỉ có $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}=\text{CH}-\text{CH}_3$ có đồng phân hình học.

Bài 4 : Có bao nhiêu hợp chất là đồng phân cấu tạo của nhau có cùng công thức phân tử C_4H_8 , đều làm mất màu dung dịch brom ở điều kiện thường?

Phân tích, hướng dẫn giải:

Cách viết đồng phân như bài tập trên, trong 5 đồng phân của C_4H_8 ở trên thì xiclobutan không có phản ứng với brom ở điều kiện thường.

☞ Các dẫn xuất của xiclopropan tham gia phản ứng cộng mở vòng với brom.

Bài 5: C_6H_{12} có bao nhiêu đồng phân cấu tạo, mạch hở tác dụng với HBr chỉ cho một sản phẩm duy nhất?

A. 4 B. 3 C. 2 D. 1

Phân tích, hướng dẫn giải:

- C_6H_{12} có cấu tạo mạch hở => là anken.

- Phản ứng cộng hợp vào anken tuân theo quy tắc Maccopnhicop khi cả anken và tác nhân cộng hợp đều bất đối.

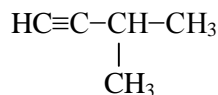
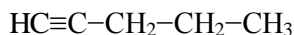
=> Để C_6H_{12} tác dụng với HBr cho một sản phẩm duy nhất thì C_6H_{12} có cấu tạo đối xứng: $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}=\text{CHCH}_2\text{CH}_3$ và $(\text{CH}_3)_2\text{C}=\text{C}(\text{CH}_3)_2$ => Đáp án C.

☞ Khi cộng phân tử bất đối xứng (HX, H_2O ,...) vào anken đối xứng chỉ thu được 1 sản phẩm duy nhất

Bài 6: Có bao nhiêu hợp chất là đồng phân cấu tạo của nhau có cùng công thức phân tử C_5H_8 khi phản ứng với dung dịch $[\text{Ag}(\text{NH}_3)_2]^+$ đều tạo kết tủa?

Phân tích, hướng dẫn giải:

☞ Chỉ những ankin đầu mạch có nguyên tử H ở liên kết ba mới có phản ứng tạo kết tủa với dung dịch $[\text{Ag}(\text{NH}_3)_2]^+$



=> Có 2 đồng phân ankin đầu mạch tạo ra kết tủa.

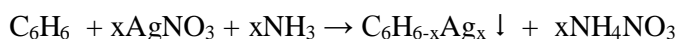
Bài 7: Chất hữu cơ X có công thức phân tử C_6H_6 mạch hở, không phân nhánh. Biết 1 mol X tác dụng với $AgNO_3/NH_3$ dư tạo ra 292 gam kết tủa. Số đồng phân cấu tạo có thể có của X là

- A. 1 B. 2 C. 3 D. 4

Phân tích, hướng dẫn giải:

X có độ bất bão hòa $k = 4$

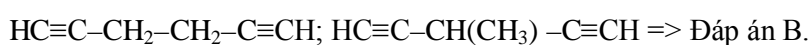
Phương trình phản ứng:



$$M \downarrow = \frac{292}{1} = 292 = 78 + 107x \Rightarrow x = 2 \Rightarrow x \text{ có 2 liên kết ba ở đầu mạch (tương ứng với 4}$$

liên kết π , $k = 4$).

\Rightarrow có 2 công thức cấu tạo:



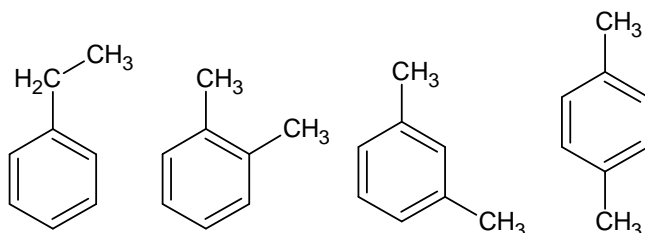
Bài 8: Xác định số đồng phân thơm có công thức phân tử C_8H_{10}

Ghi nhớ:

- Các ankyl benzen có gốc ankyl $\geq 2C$ sẽ có đồng phân mạch C.
- Đồng phân vị trí nhánh: o, m, p, ...
- Vòng benzen bền, không làm mất màu dung dịch Br_2 và dung dịch thuốc tím. Vì vậy, nếu hiđrocacbon có công thức C_nH_{2n-6} ($n \geq 6$) thỏa mãn các tính chất trên thì phải chứa vòng benzen.
- Số lượng tối đa các sản phẩm thế (1 lần) vào vòng benzen bằng số loại H tương đương có trong vòng.

Phân tích, hướng dẫn giải:

C_8H_{10} là đồng phân thơm \Rightarrow có 2 C ở nhánh. Có 4 đồng phân sau:



Bài 9: Một hợp chất hữu cơ A có công thức phân tử C_8H_8 . Khi cho A phản ứng với lượng dư H_2 (Ni, t^0) thì 1 mol A phản ứng hết 4 mol H_2 , nhưng nếu cho A phản ứng với dung dịch Brom dư thì 1 mol A chỉ phản ứng hết với 1 mol Br_2 . Xác định công thức cấu tạo của A.

Phân tích, hướng dẫn giải:

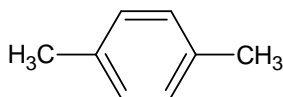
- Độ bất bão hòa: $k = 5$ (tổng số liên kết π và vòng)
 - Cứ 1 mol A + 4 mol $H_2 \Rightarrow$ A có 4 liên kết $\pi \Rightarrow$ A phải có một mạch vòng C
 - Mặt khác, 1 mol A + 1 mol Br_2 (tối đa) \Rightarrow trong 4 liên kết π chỉ có 1 liên kết π ở nhánh, 3 liên kết π còn lại nằm trong vòng benzen
- \Rightarrow A là $C_6H_5-CH=CH_2$

Bài 10: Hidrocacbon X chứa vòng benzen có công thức phân tử C_8H_{10} , khi cho X tác dụng với dung dịch Br_2 có mặt bột Fe hoặc không có mặt bột Fe, trong mỗi trường hợp đều tạo được một dẫn xuất monobrom. Công thức cấu tạo của X.

Phân tích, hướng dẫn giải:

X thỏa mãn công thức C_nH_{2n-6} , có 8 C, chứa vòng benzen nên X là ankyl benzen (có 2 nguyên tử C ở nhánh).

Do X tác dụng với Br_2 đun nóng X tạo 1 dẫn xuất monobrom nên X chứa 2 nhóm methyl. Trong vòng benzen còn 4 nguyên tử H có thể thay thế bởi brom khi có mặt bột Fe. Theo đầu bài chỉ tạo thành 1 dẫn xuất monobrom nên 4 nguyên tử H này là tương đương

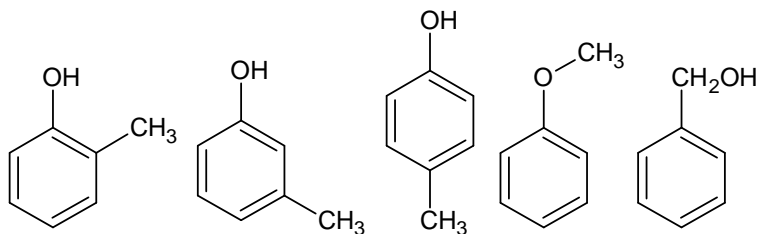


\Rightarrow CTCT phù hợp của X là:

Bài 11: Cho X có CTPT C_7H_8O . Xác định số đồng phân cấu tạo thuộc loại hợp chất thơm của X.

Phân tích, hướng dẫn giải:

Các đồng phân đều phải chứa vòng benzen, như vậy còn 1 nguyên tử C ở nhánh nên X có thể có các đồng phân sau:



Bài 12: Hợp chất hữu cơ X (phân tử có vòng benzen) có công thức phân tử là $C_7H_8O_2$, tác dụng với Na và với NaOH. Biết rằng khi cho X tác dụng với Na dư, số mol H_2 thu được bằng số mol X tham gia phản ứng và X chỉ tác dụng được với NaOH theo tỉ lệ mol 1 : 1. Xác định công thức cấu tạo của X.

☞ Ghi nhớ:

- Phenol đơn giản là C_6H_5OH

- Công thức phân tử chung của phenol đơn chức: $C_nH_{2n-7}OH$ ($n \geq 6$)
- Do ảnh hưởng của vòng benzen, nguyên tử H trong nhóm $-OH$ của phenol linh động hơn nguyên tử H trong nhóm $-OH$ của ancol.
- Phenol tác dụng với kim loại kiềm và dung dịch kiềm còn ancol chỉ phản ứng với kim loại kiềm.
- Phenol phản ứng được với dung dịch brom tạo kết tủa

Phân tích, hướng dẫn giải:

- X tác dụng với Na thu được số mol H_2 bằng số mol X nên trong phân tử X có 2 nguyên tử H linh động, X có 2 oxi nên X có 2 nhóm $-OH$.
- Mặt khác, X chỉ tác dụng với NaOH theo tỉ lệ mol 1 : 1 nên X có 1 nhóm OH phenol.
- => X chứa vòng benzen, có 1 nhóm $-OH$ phenol, 1 nhóm $-OH$ ancol thơm
- => X là $HOC_6H_4CH_2OH$.

Bài 13: Có bao nhiêu đồng phân ứng với công thức phân tử $C_8H_{10}O$ (là dẫn xuất của benzen) không tác dụng với NaOH, còn khi tách nước thu được sản phẩm có thể trùng hợp tạo polime?

- A. 2 B. 3 C. 4 D. 5

(Trích ĐTTS vào các trường Đại học, Cao đẳng khối B, 2007)

Phân tích, hướng dẫn giải:

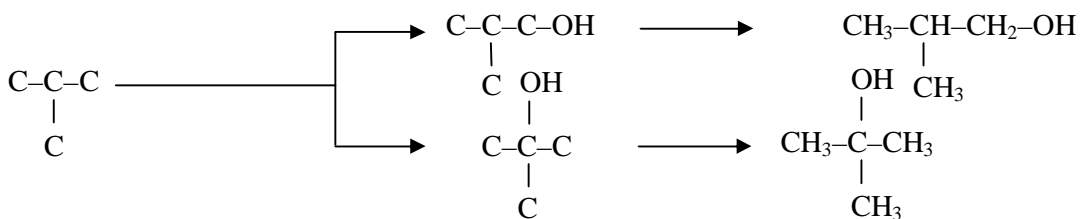
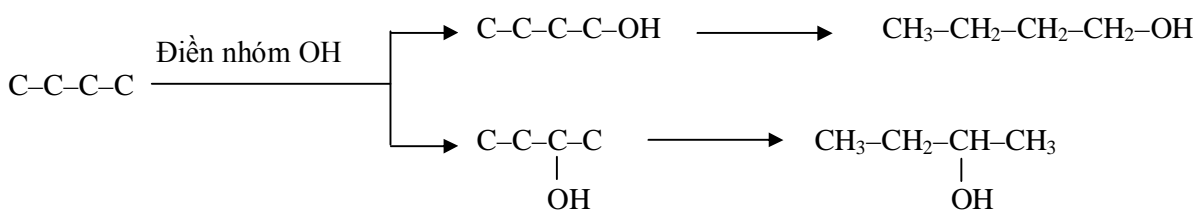
- $C_8H_{10}O$ là dẫn xuất của benzen (C_6H_5-R) => R có R = C_2H_5O
- $C_8H_{10}O$ không tác dụng với NaOH, tách nước thu được sản phẩm có thể trùng hợp tạo polime => có nhóm $-OH$ không dính trực tiếp vào vòng benzen mà dính vào gốc R, R có 2 cacbon để có thể tạo liên kết đôi
- => $C_6H_5-CH(OH)-CH_3$ và $C_6H_5-CH_2-CH_2OH$ (cả 2 khi tách nước đều cho anken $C_6H_5CH=CH_2$)

Bài 14: Viết các đồng phân cấu tạo có cùng CTPT $C_4H_{10}O$

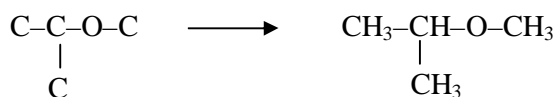
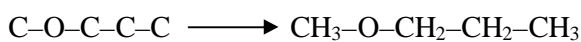
Phân tích, hướng dẫn giải:

Ta có: $k = 0$ => chỉ có các đồng phân mạch hở và chỉ có liên kết đơn trong phân tử. $k = 0$ nên nhóm chức chỉ có thể là $-OH$ (ancol) hoặc $-O-$ (ete).

- Đồng phân ancol:



- Đồng phân ete:



Bài 15: Khi phân tích thành phần một ancol đơn chức X thì thu được kết quả: tổng khối lượng của cacbon và hydro gấp 3,625 lần khối lượng oxi. Số đồng phân cấu tạo của X là

A. 3

B. 4

C. 2

D. 1

(Trích ĐTTS vào các trường Đại học, cao đẳng khối A, 2008)

Phân tích, hướng dẫn giải:

Gọi công thức của ancol là $\text{C}_x\text{H}_y\text{O}_z$ ($y \leq 2x + 2$)

Theo bài ta có: $12x + y = 16.3,625 \Rightarrow 12x + y = 58 \Rightarrow$ nghiệm phù hợp là $x = 4, y = 10 \Rightarrow$

Công thức phân tử $\text{C}_4\text{H}_{10}\text{O}$

Có 4 đồng phân cấu tạo: $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH(OH)CH}_3$, $(\text{CH}_3)_2\text{CHCH}_2\text{OH}$, $(\text{CH}_3)_3\text{C-OH} \Rightarrow$ Đáp án B.

Hoặc sử dụng công thức tính nhanh số đồng phân cho ancol no đơn chức

$$2^{n-2} = 2^{4-2} = 4.$$

Bài 16 : Số đồng phân este ứng với công thức phân tử $\text{C}_4\text{H}_8\text{O}_2$ là:

A. 5

B. 2

C. 4

D. 6

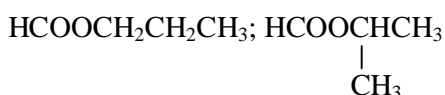
☞ Cách viết đồng phân este: $RCOOR'$ ($R' \neq H$)

+ Bước 1: Bắt đầu viết từ este fomat $H-COOR'$ (R' mạch không nhánh, mạch có nhánh)

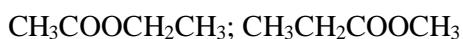
+ Bước 2: Viết các đồng phân ứng với R tăng 1C, 2C,... tương ứng với R' giảm 1C, 2C,... đảm bảo số C của este.

Phân tích, hướng dẫn giải:

+ Các đồng phân $HCOOR'$



+ Tăng dần số C trong R, giảm tương ứng trong R'



=> có 4 đồng phân.

Hoặc áp dụng công thức tính nhanh số đồng phân este đơn chức, no với $n = 4$

$2^{4-2} = 4$ đồng phân! => Đáp án C.

Bài 17: Tổng số hợp chất hữu cơ no, đơn chức, mạch hở, có cùng công thức phân tử $C_5H_{10}O_2$, phản ứng với dung dịch NaOH nhưng không có phản ứng tráng bạc là

A. 4 B. 5 C. 8 D. 9

(Trích ĐTTS vào các trường Đại học khối B, 2010)

Phân tích, hướng dẫn giải:

$C_5H_{10}O_2$ phản ứng được với dung dịch NaOH nhưng không có phản ứng tráng bạc => là axit hoặc este (không tạo bởi axit fomic):

Axit (4 đồng phân): $CH_3CH_2CH_2CH_2COOH$; $CH_3CH_2CH(CH_3)COOH$; $CH_3CH(CH_3)CH_2COOH$; $CH_3C(CH_3)_2COOH$.

Este (5 đồng phân): $CH_3CH_2CH_2COOCH_3$, $CH_3CH(CH_3)COOCH_3$, $CH_3CH_2COOC_2H_5$, $CH_3COOCH_2CH_2CH_3$, $CH_3COOCH(CH_3)_2$

=> Đáp án D

Bài 18: Số hợp chất là đồng phân cấu tạo, có cùng công thức phân tử $C_4H_8O_2$, tác dụng với dung dịch NaOH nhưng không tác dụng với Na là

A. 3 B. 2 C. 4 D. 1

(Trích ĐTTS các trường Cao đẳng khối A, 2009)

Phân tích, hướng dẫn giải:

$C_4H_8O_2$ tác dụng với dung dịch NaOH nhưng không tác dụng với Na => $C_4H_8O_2$ là este no, đơn chức mạch hở => Đáp án C.

Bài 19: Tổng số chất hữu cơ mạch hở, có cùng công thức phân tử $C_2H_4O_2$ là:

- A. 3 B. C. 2 D. 4

Phân tích, hướng dẫn giải:

$C_2H_4O_2$ có $k = 1$

+ Trường hợp 1: $C_2H_4O_2$ là axit (hoặc este) no, đơn chức mạch hở (nhóm chức axit và este đều chứa một liên kết đôi nên gốc hydrocacbon phải no, mạch hở).

+ Trường hợp 2: $C_2H_4O_2$ chứa đồng thời nhóm $-OH$ và $-CHO$

Các công thức thỏa mãn: CH_3COOH , $HCOOCH_3$ và $HOCH_2CHO$

=> Đáp án A.

* *Chú ý: Học sinh dễ mắc sai lầm trong trường hợp $C_2H_4O_2$ có một nhóm chức ete (-O-) và một nhóm chức $-CHO$: $CH_3-O-CHO$ => Chọn D. Tuy nhiên nhóm chức ete liên kết với nhóm chức anđehit hoặc xeton chính là nhóm chức este.*

Bài 20: Số đồng phân ứng với công thức phân tử $C_4H_8O_2$ mà tác dụng được với đá vôi là bao nhiêu?

- A. 2 B. 3 C. 1 D. 4

Phân tích, hướng dẫn giải:

$C_4H_8O_2$ mà tác dụng được với đá vôi => $C_4H_8O_2$ là axit

Công thức tính: $2^{n-3} = 2^{4-3} = 2$ => Đáp án A

Bài 21: Một este có công thức phân tử là $C_4H_6O_2$ khi thủy phân trong môi trường axit thu được dimetyl xeton. Công thức cấu tạo thu gọn của $C_4H_6O_2$ là công thức nào ?

- A. $HCOO-CH=CH-CH_3$ B. $CH_3COO-CH=CH_2$
C. $HCOO-C(CH_3)=CH_2$ D. $CH_2=CH-COOCH_3$

Phân tích, hướng dẫn giải:

☞ Đây là dạng bài tập xác định cấu tạo este dựa vào sản phẩm của phản ứng

Bình thường: Este thủy phân trong môi trường kiềm cho muối và rượu, trong môi trường H^+ cho axit + rượu.

Ngoài ra, các bạn cần chú ý tới một số trường hợp đặc biệt sau:

+ Este + NaOH \rightarrow 1 muối + **1 anđehit**

=> Este đơn chức có gốc ancol dạng công thức: $R'-CH=CH-$

Do $RCOO-CH=CH-R' + NaOH \rightarrow RCOONa + R'-CH=CH-OH$

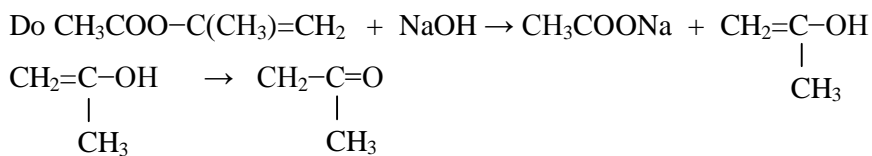
$R'-CH=CH-OH \rightarrow R'-CH-CHO$

Kém bên Bên

+ Este + NaOH \rightarrow 1 muối + **1 xeton**

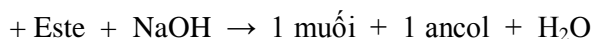
=> Este đơn chức với dạng công thức $RCOO-C(R_1)=C(R_2)R_3$

Thí dụ: $\text{CH}_3\text{COO}-\text{C}(\text{CH}_3)=\text{CH}_2$

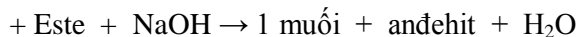
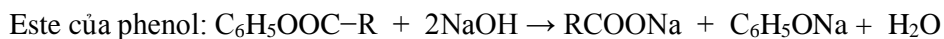
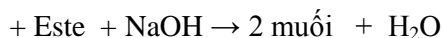
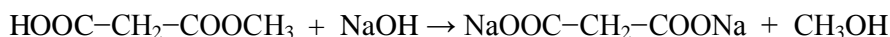


Kém bền

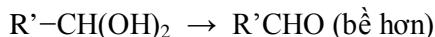
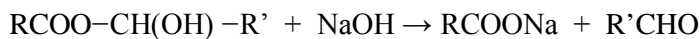
Bền



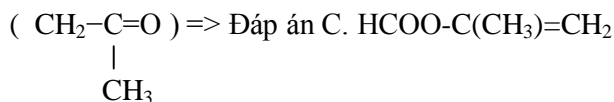
Este – axit: $\text{HOOC}-\text{R}-\text{COOR}'$ như $\text{HOOC}-\text{CH}_2-\text{COOCH}_3$



Hidroxi – este: dạng $\text{RCOO}-\text{CH}(\text{OH})-\text{R}'$



Áp dụng bài tập trên: $\text{C}_4\text{H}_6\text{O}_2$ khi thủy phân trong môi trường axit thu được dimetyl xeton



Đáp án A, B cho andehit, D cho rượu

Bài 22: Một este có công thức phân tử là $\text{C}_3\text{H}_6\text{O}_2$ có phản ứng tráng gương với dd AgNO_3 trong NH_3 Công thức cấu tạo của este đó là công thức nào?



Phân tích, hướng dẫn giải:

☞ Chỉ những este fomat HCOOR' mới có phản ứng tráng gương.

\Rightarrow A, C nhưng CTPT $\text{C}_3\text{H}_6\text{O}_2 \Rightarrow$ Đáp án A.

Bài 23: Amin nào dưới đây có 4 đồng phân cấu tạo?



Phân tích, hướng dẫn giải:

Số đồng phân của amin no, đơn chức = 2^{n-1}

Có $2^{n-1} = 4 = 2^2 \Rightarrow n - 1 = 2 \Rightarrow n = 3 \Rightarrow$ Đáp án B.

Bài 24: Trong số các chất: C_3H_8 , C_3H_7Cl , C_3H_8O và C_3H_9N , chất có nhiều đồng phân cấu tạo nhất là

- A. C_3H_7Cl B. C_3H_8O C. C_3H_8 D. C_3H_9N

(Trích ĐTTS vào các trường Đại học khối A, 2010)

Phân tích, hướng dẫn giải:

Các chất có cùng số nguyên tử cacbon, khi liên kết với với các nguyên tố hóa trị càng cao khả năng tạo liên kết sẽ nhiều hơn \Rightarrow N có hóa trị III cao nhất \Rightarrow nhiều đồng phân nhất \Rightarrow Đáp án D.

Bài 25: Ứng với công thức phân tử $C_2H_7O_2N$ có bao nhiêu chất vừa phản ứng được với dung dịch NaOH vừa phản ứng được với dung dịch HCl?

(Trích ĐTTS vào các trường Cao đẳng, 2010)

☞ **Gợi ý:** Xác định công thức cấu tạo của $C_xH_yO_2N$, $C_xH_yO_3N_2$

* $C_xH_yO_2N$ (2O và 1N):

Hãy viết các phản ứng sau:



Như vậy, ứng với CTPT dạng $C_xH_yO_2N$ (2O và 1N) có thể là:

+ Aminoaxit: $NH_2-R-COOH$

+ Este aminoaxit: $NH_2-R-COOR'$

+ Muối amoni của axit cacboxylic: $RCOONH_4$

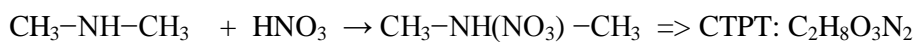
+ Ankyl amoni: $RCOONH_3R'$

} Vừa tác dụng với HCl, vừa tác dụng với NaOH

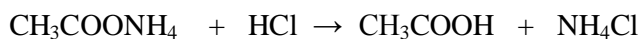
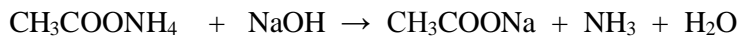
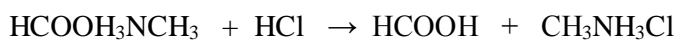
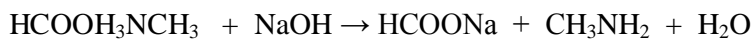
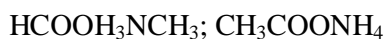
+ Hợp chất nitro của hidrocacbon: RNO_2

* $C_xH_yO_3N_2$ (3O và 2N):

Các bạn tự suy dựa vào một số phản ứng sau:



Phân tích, hướng dẫn giải:



Bài 26: Có bao nhiêu tripeptit (mạch hở) khác loại mà khi thủy phân hoàn toàn đều thu được 3 amino axit: glyxin, alanin và phenylalanin?

A. 3

B. 9

C. 4

D. 6

(Trích ĐTTS vào các trường Đại học khối A, 2010)

Phân tích, hướng dẫn giải:

Gọi 3 amino axit tạo ra tương ứng là X_1, X_2, X_3

Với X_2 nằm giữa X_1 và $X_3 \Rightarrow X_1 - X_2 - X_3; X_3 - X_2 - X_1$: có 2 tripeptit (mạch hở).

- Thay thế vị trí X_2 bằng X_1 hoặc $X_3 \Rightarrow$ có 4 tripeptit (mạch hở)

\Rightarrow Đáp án D.

Hoặc áp dụng công thức ta có số tripeptit = $n! = 3! = 3.2.1 = 6$

VIII. Bài tập tự luyện

Bài 1: Hidrocarbon X có 16,28% khối lượng H trong phân tử. Số đồng phân cấu tạo của x là

- A. 3 B. 4 C. 5 D. 6

Bài 2: $C_4H_{10}O$ và $C_4H_{11}N$ có số lượng đồng phân cấu tạo lần lượt là

- A. 4 và 6 B. 4 và 8 C. 6 và 7 D. 5 và 6

Bài 3: Hidrocarbon X có tỷ khối hơi so với H_2 là 28. X không có khả năng làm mất màu nước Brom. Số đồng phân cấu tạo của X là

- A. 3 B. 1 C. 2 D. 4

Bài 4: Số lượng đồng phân cấu tạo có công thức C_6H_{10} tác dụng với $AgNO_3/NH_3$ tạo kết tủa vàng là

- A. 4 B. 2 C. 1 D. 3

Bài 5: Chất X có công thức phân tử C_7H_8 . Cho X tác dụng với dung dịch $AgNO_3/NH_3$ được chất Y kết tủa. Phân tử khối của Y lớn hơn X là 214 g/mol. Số đồng phân cấu tạo có thể có của X là

- A. 2 B. 4 C. 5 D. 3

Bài 6: Khi cho Br_2 tác dụng với một hidrocarbon X thu được một sản phẩm duy nhất có tỷ khối hơi so với O_2 bằng 6,75. Số đồng phân cấu tạo của X là

- A. 4 B. 3 C. 2 D. 1

Bài 7: Có bao nhiêu đồng phân cấu tạo có cùng công thức phân tử C_5H_{10} ?

- A. 5 B. 10 C. 11 D. 12

Bài 8: Cho các chất:

$CH_2=CH-CH=CH_2$; $CH_3-CH_2-CH=C(CH_3)_2$; $CH_3-CH=CH-CH=CH_2$; $CH_3-CH=CH_2$; $CH_3-CH=CH-COOH$. Số chất có đồng phân hình học là

- A. 4 B. 3 C. 2 D. 1

(Trích ĐTTS vào trường Cao đẳng, 2009)

Bài 9: Chất nào sau đây có đồng phân hình học?

- A. But-2-in B. But-2-en
C. 1,2-dicloetan D. 2-clopropen

Bài 10: Có bao nhiêu đồng phân cấu tạo, mạch hở có công thức C_6H_{10} tác dụng với H_2 dư (Ni, t^0) thu được sản phẩm iso-hexan?

- A. 7 B. 8 C. 5 D. 6

Bài 11: Số đồng phân thơm ứng với công thức phân tử C_8H_{10} là

- A. 2 B. 4 C. 3 D. 5

(Trích ĐTTS vào các trường Đại học, Cao đẳng khối A, 2008)

Bài 12: Chất hữu cơ X có công thức phân tử $C_4H_{10}O$. Số lượng các đồng phân của X không tác dụng với Na là

- A. 2 B. 3 C. 4 D. 7

Bài 13: $C_3H_8O_x$ có tất cả bao nhiêu công thức cấu tạo ancol bền?

- A. 2 B. 3 C. 5 D. 4

Bài 14: Ancol X có công thức thực nghiệm $(C_2H_5O)_n$. Số đồng phân cấu tạo của X là

- A. 2 B. 3 C. 4 D. 7

Bài 15: Ứng với công thức $C_4H_{10}O_2$ có bao nhiêu đồng phân bền có thể hòa tan được $Cu(OH)_2$?

- A. 2 B. 3 C. 4 D. 5

Bài 16: Có bao nhiêu đồng phân ancol bậc 2 có cùng công thức phân tử $C_5H_{12}O$?

- A. 2 B. 3 C. 4 D. 5

Bài 17: Có bao nhiêu đồng phân có cùng công thức phân tử $C_5H_{12}O$ khi oxi hóa bằng CuO đun nóng tạo sản phẩm (giữ nguyên mạch cacbon) có phản ứng tráng bạc?

- A. 2 B. 3 C. 4 D. 5

Bài 18: Ứng với công thức C_3H_6O có bao nhiêu hợp chất mạch hở bền khi tác dụng với khí H_2 (xúc tác Ni, t^0) sinh ra ancol?

- A. 3 B. 4 C. 2 D. 1

(Trích ĐTTS vào các trường cao đẳng, 2010)

Bài 19: Số chất ứng với công thức phân tử C_7H_8O (là dẫn xuất của benzen) đều tác dụng được với dung dịch $NaOH$ là

- A. 2 B. 4 C. 3 D. 1

(Trích ĐTTS vào các trường Đại học, Cao đẳng khối B, 2007)

Bài 20: Có bao nhiêu đồng phân là hợp chất thơm có công thức phân tử $C_8H_{10}O$ tác dụng với Na, nhưng không tác dụng với $NaOH$ và không làm mất màu dung dịch brom?

- A. 4 B. 5 C. 6 D. 7

Bài 21: Hợp chất thơm có công thức phân tử $C_8H_8O_2$ vừa có khả năng tác dụng với Na, vừa có khả năng tác dụng với $NaOH$ và lam quỳ tím chuyển màu hồng có số đồng phân cấu tạo là

- A. 8 B. 12 C. 14 D. 10

Bài 22: Hợp chất X chứa vòng benzen có công thức phân tử $C_9H_8O_2$. Biết X làm mất màu dung dịch Br_2 , tác dụng với $NaHCO_3$. Số đồng phân cấu tạo của X thỏa mãn cả tính chất trên là

- A. 5 B. 4 C. 3 D. 6

Bài 23: Số lượng đồng phân chứa vòng benzen có công thức phân tử $C_7H_6O_2$, vừa tác dụng với NaOH, vừa tham gia phản ứng tráng gương?

- A. 3 B. 6 C. 1 D. 2

Bài 24: Số đồng phân xeton ứng với công thức phân tử $C_5H_{10}O$ là

- A. 5 B. 6 C. 3 D. 4

(Trích ĐTTS vào các trường Đại học, Cao đẳng khối A, 2008)

Bài 25: Công thức nguyên của anđehit mạch hở, chưa no (chứa một liên kết ba trong phân tử) là C_4H_4O . Số đồng phân cấu tạo của anđehit là

- A. 3 B. 2 C. 4 D. 1

Bài 26: C_3H_6O có bao nhiêu đồng phân mạch hở, bền có khả năng làm mất màu dung dịch Br_2 ?

- A. 1 B. 2 C. 3 D. 4

Bài 27: Axitcacboxylic no, mạch hở X có công thức đơn giản nhất là $C_2H_3O_2$. Số đồng phân cấu tạo của X là

- A. 2 B. 1 C. 3 D. 4

Bài 28: Số hợp chất là đồng phân cấu tạo, có cùng công thức phân tử $C_4H_8O_2$, tác dụng được với dung dịch NaOH nhưng không tác dụng được với Na là

- A. 3 B. 2 C. 4 D. 1

(Trích ĐTTS vào các trường Cao đẳng, 2009)

Bài 29: Có bao nhiêu đồng phân cấu tạo có công thức phân tử $C_4H_8O_2$ tác dụng được với NaOH

- A. 7 B. 4 C. 6 D. 5

(Trích ĐTTS vào các trường Cao đẳng, 2007)

Bài 30: Số đồng phân este ứng với công thức phân tử $C_4H_8O_2$ là

- A. 5 B. 2 C. 4 D. 6

(Trích ĐTTS vào các trường Đại học, Cao đẳng khối A, 2008)

Bài 31: Cho tất cả các đồng phân cấu tạo mạch hở có công thức phân tử $C_2H_4O_2$ tác dụng với NaOH, Na, $AgNO_3/NH_3$ thì số phương trình hóa học xảy ra là

- A. 3 B. 4 C. 5 D. 6

Bài 32: Cho tất cả các đồng phân đơn chức, mạch hở, có cùng công thức phân tử $C_2H_4O_2$ lần lượt tác dụng với: Na, NaOH, $NaHCO_3$. Số phản ứng xảy ra là

- A. 2 B. 5 C. 4 D. 3

(Trích ĐTTS vào các trường Đại học, Cao đẳng khối B, 2007)

Bài 33: Có bao nhiêu đồng phân cấu tạo este mạch hở có công thức phân tử $C_5H_8O_2$ khi thủy phân tạo ra một axit và một anđehit?

- A. 2 B. 3 C. 5 D. 4

Bài 34: X là một este không no (chứa 1 liên kết đôi C=C) đơn chức, mạch hở. Đốt cháy hoàn toàn 4,3 gam X cần vừa đủ 7,2 gam O₂. X có tối đa bao nhiêu công thức cấu tạo?

- A. 3 B. 4 C. 5 D. 6

Bài 35: Thủy phân hoàn toàn một triglixerit (X, thu được glixerol và hỗn hợp ba axit béo: axit panmitic, axit stearic và axit oleic. Số lượng đồng phân của X là

- A. 5 B. 3 C. 4 D. 2

Bài 36: Cặp chất nào sau đây **không** phải là đồng phân của nhau?

- A. Ancol etylic và đimetyl ete B. Glucozơ và fructozơ
C. Saccarozơ và xenlulozơ D. 2-metylpropan-1-ol và Butan-2-ol

(Trích ĐTTS vào các trường Cao đẳng, 2010)

Bài 37: Số đồng phân cấu tạo của amin bậc một có cùng công thức phân tử C₄H₁₁N là

- A. 4 B. 2 C. 5 D. 3

(Trích ĐTTS vào các trường Cao đẳng, 2009)

Bài 38: Có bao nhiêu đồng phân cấu tạo của amin có công thức phân tử C₄H₁₁N?

- A. 7 B. 8 C. 9 D. 10

Bài 39: Hợp chất hữu cơ X, mạch hở (chứa C, H, N), trong đó N chiếm 23,73% về khối lượng. Biết X tác dụng với HCl với tỉ lệ mol n_x : n_{HCl} = 1 : 1. Số đồng phân cấu tạo của X là

- A. 2 B. 3 C. 4 D. 5

Bài 40: C₄H₉O₂N có số đồng phân amino axit là

- A. 3 B. 6 C. 4 D. 5

Bài 41: Số amino axit và este của amino axit đồng phân cấu tạo của nhau có cùng công thức phân tử C₃H₇NO₂ là

- A. 5 B. 3 C. 2 D. 4

Bài 42: Khi thủy phân tripeptit có công thức phân tử C₁₁H₂₁N₃O₄, thu được 3 amino axit: glyxin, alanin, leuxin. Số đồng phân của tripeptit trên là

- A. 6 B. 4 C. 3 D. 5

Đáp án bài tập tự luyện

1C	2B	3B	4A	5D	6D	7B
8C	9B	10A	11B	12B	13C	14C
15B	16B	17C	18A	19C	20B	21C
22A	23B	24C	25B	26C	27A	28C
29C	30C	31D	32C	33D	34C	35B
36C	37A	38B	39C	40D	41B	42A