

I. Khái niệm về đồng phân

Đồng phân là những hợp chất hữu cơ khác nhau nhưng có cùng công thức phân tử. Sự khác nhau giữa các đồng phân là do sự khác biệt về cấu tạo hóa học (thứ tự liên kết của các nguyên tử) hoặc về sự phân bố không gian của các nguyên tử trong phân tử.

Ví dụ: Hợp chất có công thức phân tử C_2H_6O có hai đồng phân là ethanol (rượu etylic) và dimethyl ether.

- **Ethanol:** CH_3-CH_2-OH (chất lỏng, tan vô hạn trong nước)
- **Dimethyl ether:** CH_3-O-CH_3 (chất khí, tan ít trong nước)

Có hai loại đồng phân chính: Đồng phân cấu tạo và Đồng phân lập thể.

II. Đồng phân cấu tạo (Constitutional Isomers)

Đồng phân cấu tạo là những hợp chất có cùng công thức phân tử nhưng khác nhau về cấu tạo hóa học (thứ tự liên kết giữa các nguyên tử).

1. Đồng phân mạch carbon (Chain Isomers)

Đây là loại đồng phân gây ra bởi sự khác biệt về cách sắp xếp mạch carbon (mạch không phân nhánh, mạch phân nhánh).

- **Đặc điểm:** Các đồng phân này có cùng nhóm chức nhưng khác nhau về khung xương carbon.

- **Ví dụ 1: C_4H_{10} (Butane)**

Có 2 đồng phân mạch carbon:

- Mạch không phân nhánh: $CH_3-CH_2-CH_2-CH_3$ (n-butane)
- Mạch phân nhánh: $CH_3-CH(CH_3)-CH_3$ (isobutane hoặc 2-methylpropane)

- **Ví dụ 2: C_5H_{12} (Pentane)**

Có 3 đồng phân mạch carbon:

- Mạch không phân nhánh: $CH_3-CH_2-CH_2-CH_2-CH_3$ (n-pentane)
- Mạch phân nhánh (1 nhánh): $CH_3-CH(CH_3)-CH_2-CH_3$ (isopentane hoặc 2-methylbutane)
- Mạch phân nhánh (2 nhánh): $C(CH_3)_4$ (neopentane hoặc 2,2-dimethylpropane)

2. Đồng phân vị trí nhóm chức hoặc liên kết bội (Position Isomers)

Đây là loại đồng phân gây ra bởi sự khác biệt về vị trí của nhóm chức, liên kết bội (liên kết đôi, ba) hoặc nhóm thế trên cùng một mạch carbon.

- **Đặc điểm:** Các đồng phân này có cùng mạch carbon, cùng nhóm chức nhưng vị trí của nhóm chức hoặc liên kết bội là khác nhau.

- **Ví dụ 1: C_3H_8O (Propanol)**

Có 2 đồng phân vị trí nhóm chức -OH:

- Nhóm -OH ở carbon số 1: $CH_3-CH_2-CH_2-OH$ (Propan-1-ol)
- Nhóm -OH ở carbon số 2: $CH_3-CH(OH)-CH_3$ (Propan-2-ol)

- **Ví dụ 2: C_4H_8 (Butene)**

Có 2 đồng phân vị trí liên kết đôi $C=C$ (xét mạch thẳng):

- Liên kết đôi ở vị trí số 1: **$CH_2=CH-CH_2-CH_3$** (But-1-ene)
- Liên kết đôi ở vị trí số 2: **$CH_3-CH=CH-CH_3$** (But-2-ene)

- **Ví dụ 3: $C_6H_4Cl_2$ (Dichlorobenzene)**

Có 3 đồng phân vị trí nhóm thế $-Cl$ trên vòng benzene:

- Vị trí ortho (o-): Hai nhóm $-Cl$ ở hai carbon kề nhau (vị trí 1,2).
- Vị trí meta (m-): Hai nhóm $-Cl$ cách nhau một carbon (vị trí 1,3).
- Vị trí para (p-): Hai nhóm $-Cl$ ở hai carbon đối diện nhau (vị trí 1,4).

3. Đồng phân nhóm chức (Functional Group Isomers)

Đây là loại đồng phân có cùng công thức phân tử nhưng chứa các nhóm chức khác nhau, do đó thuộc các dãy đồng đẳng khác nhau và có tính chất hóa học đặc trưng khác nhau.

- **Đặc điểm:** Các phân tử có công thức phân tử giống nhau nhưng khác nhau hoàn toàn về loại hợp chất.

- **Ví dụ 1: C_2H_6O**

- Alcohol: **CH_3-CH_2-OH** (Ethanol)
- Ether: **CH_3-O-CH_3** (Dimethyl ether)

- **Ví dụ 2: C_3H_6O**

- Aldehyde: **CH_3-CH_2-CHO** (Propanal)

- Ketone: **CH₃-CO-CH₃** (Propanone/Acetone)

- **Ví dụ 3: C₃H₄O₂**

- Carboxylic acid: **CH₃-CH₂-COOH** (Propanoic acid)

- Ester: **CH₃-COO-CH₃** (Methyl acetate)

- Tạp chức: **HO-CH₂-CH=O** (Glycolaldehyde)

III. Đồng phân lập thể (Stereoisomers)

Đồng phân lập thể là những hợp chất có cùng công thức phân tử, cùng cấu tạo hóa học (cùng thứ tự liên kết) nhưng khác nhau về sự phân bố không gian của các nguyên tử. Trong chương trình lớp 11, chúng ta tập trung vào đồng phân hình học.

Đồng phân hình học (Geometric Isomers / Cis-Trans Isomers)

Đồng phân hình học là loại đồng phân lập thể phát sinh do sự phân bố khác nhau của các nhóm thế đối với một mặt phẳng tham chiếu trong phân tử (thường là mặt phẳng của liên kết đôi hoặc mặt phẳng vòng no).

1. Điều kiện để có đồng phân hình học

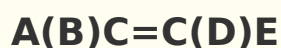
Một phân tử có đồng phân hình học khi thỏa mãn đồng thời hai điều kiện sau:

1. **Điều kiện 1:** Phân tử phải có một bộ phận cứng nhắc, không quay tự do được. Đó có thể là:
 - Liên kết đôi **C=C**.

- Vòng no (ví dụ: cyclopropane, cyclobutane...).

2. **Điều kiện 2:** Trên mỗi nguyên tử carbon của bộ phận cứng nhắc đó, phải liên kết với hai nguyên tử hoặc nhóm nguyên tử khác nhau.

Xét phân tử có dạng **a-C(1)=C(2)-b** với các nhóm thế gắn vào mỗi C là A, B và D, E:



Để có đồng phân hình học thì: **A ≠ B** và **D ≠ E**.

2. Cách gọi tên đồng phân hình học

- **Đồng phân cis-:** Khi hai nhóm thế có độ ưu tiên cao hơn (hoặc hai nhóm thế giống nhau) nằm về **cùng một phía** so với mặt phẳng của liên kết đôi (hoặc mặt phẳng vòng).
- **Đồng phân trans-:** Khi hai nhóm thế có độ ưu tiên cao hơn (hoặc hai nhóm thế giống nhau) nằm về **hai phía khác nhau** so với mặt phẳng của liên kết đôi (hoặc mặt phẳng vòng).

3. Ví dụ minh họa

- **Ví dụ 1: But-2-ene (CH₃-CH=CH-CH₃)**

Phân tử này thỏa mãn cả hai điều kiện:

- Có liên kết đôi C=C.
- Mỗi carbon của liên kết đôi đều liên kết với 2 nhóm khác nhau (một nhóm -H và một nhóm -CH₃).

Do đó, but-2-ene có 2 đồng phân hình học:

- **cis-but-2-ene:** Hai nhóm -CH_3 (hoặc hai nguyên tử H) ở cùng phía.
- **trans-but-2-ene:** Hai nhóm -CH_3 (hoặc hai nguyên tử H) ở khác phía.

- **Ví dụ 2: But-1-ene ($\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}_2-\text{CH}_3$)**

Phân tử này **không có** đồng phân hình học.

- Lý do: Nguyên tử carbon thứ nhất (C1) của liên kết đôi liên kết với hai nguyên tử H giống hệt nhau, vi phạm điều kiện 2.

- **Ví dụ 3: 1,2-dichloroethene ($\text{Cl}-\text{CH}=\text{CH}-\text{Cl}$)**

Phân tử này có đồng phân hình học vì mỗi carbon của liên kết đôi đều liên kết với 1 nguyên tử H và 1 nguyên tử Cl (khác nhau).

- **cis-1,2-dichloroethene:** Hai nguyên tử Cl ở cùng phía.
 - **trans-1,2-dichloroethene:** Hai nguyên tử Cl ở khác phía.
-

IV. Bảng tổng kết các loại đồng phân

Loại đồng phân	Đặc điểm chính	Ví dụ
Đồng phân cấu tạo	Cùng CTPT, khác thứ tự liên kết.	
1. Đồng phân mạch C	Khác nhau về cấu trúc mạch carbon (thẳng/nhánh).	n-butane và isobutane (C ₄ H ₁₀)
2. Đồng phân vị trí	Khác nhau về vị trí nhóm chức/liên kết bội.	Propan-1-ol và Propan-2-ol (C ₃ H ₈ O)
3. Đồng phân nhóm chức	Khác nhau về loại nhóm chức.	Ethanol và Dimethyl ether (C ₂ H ₆ O)
Đồng phân lập thể	Cùng CTPT, cùng thứ tự liên kết, khác sự phân bố không gian.	
Đồng phân hình học	Khác sự phân bố không gian quanh liên kết đôi C=C hoặc vòng no.	cis-but-2-ene và trans-but-2-ene (C ₄ H ₈)