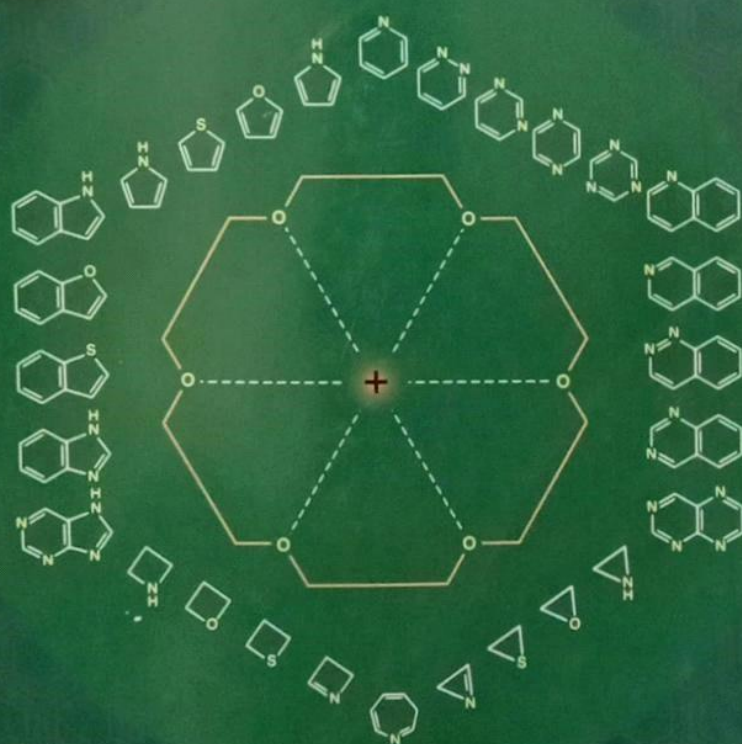


TRẦN QUỐC SƠN

CƠ SỞ HÓA HỌC DI VÒNG

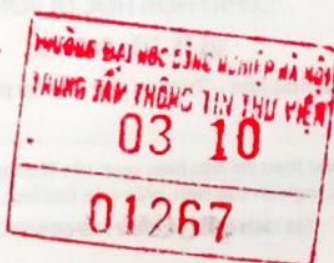


NHÀ XUẤT BẢN ĐẠI HỌC SƯ PHẠM

GS.TS. TRẦN QUỐC SƠN

CƠ SỞ HOÁ HỌC DỊ VÒNG

(Tái bản lần thứ hai)



NHÀ XUẤT BẢN ĐẠI HỌC SƯ PHẠM

MỤC LỤC

Trang

Lời nói đầu.....	5
Chương 1 Danh pháp dị vòng	7
Chương 2 Cấu trúc dị vòng	37
Chương 3 Tính chất vật lí của dị vòng	76
Chương 4 Dị vòng thơm sáu cạnh chứa một dị tử.....	120
Chương 5 Dẫn xuất benzo của dị vòng thơm sáu cạnh chứa một dị tử.....	195
Chương 6 Dị vòng thơm sáu cạnh chứa nhiều nguyên tử nitrogen.....	260
Chương 7 Dị vòng thơm năm cạnh chứa một dị tử.....	325
Chương 8 Dẫn xuất benzo của dị vòng thơm năm cạnh chứa một dị tử.....	399
Chương 9 Dị vòng thơm năm cạnh chứa nhiều dị tử.....	460
Chương 10 Hệ dung hợp giữa hai dị vòng chứa nitrogen.....	550
Chương 11 Dị vòng no và dị vòng không no.....	641
Danh mục các chữ viết tắt và kí hiệu	726
Tài liệu đọc thêm.....	727
Danh mục các công trình nghiên cứu về dị vòng của tác giả và cộng sự	728
Mục lục tra cứu.....	732

LỜI NÓI ĐẦU

DANH PHÁP DỊ VÒNG

Hoá học các hợp chất dị vòng có ý nghĩa lí thuyết cũng như thực tiễn rất to lớn và đang phát triển rất mạnh mẽ từ hơn nửa thế kỉ nay. Vì vậy, việc đào tạo các nhà hoá học làm việc trong các lĩnh vực tổng hợp hữu cơ, lí thuyết hữu cơ, dược hoá học, sản xuất phẩm nhuộm, hoá sinh học, nghiên cứu hoạt tính sinh học, v.v... không thể thiếu kiến thức về các hợp chất dị vòng.

Sách *Cơ sở hoá học dị vòng* được biên soạn trên cơ sở kinh nghiệm nhiều năm giảng dạy chuyên đề và nghiên cứu khoa học của tác giả trong lĩnh vực các hợp chất dị vòng. Sách gồm 11 chương, được phân bố như sau: Ba chương đầu (1, 2 và 3) là các vấn đề đại cương, như danh pháp, cấu trúc, tính chất vật lí. Ba chương tiếp theo (4, 5 và 6) nói về các dị vòng thơm sáu cạnh. Ba chương tiếp nữa (7, 8 và 9) đề cập đến các dị vòng thơm năm cạnh. Chương 10 giới thiệu hệ dung hợp giữa hai dị vòng, trong đó có purin và pteridin. Nội dung của chương cuối cùng là các dị vòng no và không no, bao gồm cả các vòng nhỏ và các vòng lớn. Trừ ba chương đầu, trọng tâm của mỗi chương là phản ứng của dị vòng, tổng hợp dị vòng, trạng thái thiên nhiên và ứng dụng thực tiễn.

Về vấn đề thuật ngữ và danh pháp, trong khi chờ đợi những quy định mới của Nhà nước về thuật ngữ và cách phiên chuyển từ tiếng nước ngoài, tác giả vẫn áp dụng các cách quen dùng, trên cơ sở chủ yếu là cuốn *Danh pháp hợp chất hữu cơ* do tác giả chủ biên (Nhà xuất bản Giáo dục phát hành).

Sách này có thể dùng cho các đối tượng khác nhau, bao gồm sinh viên, học viên cao học và nghiên cứu sinh về hoá học, hoá sinh học, hoá nông học, dược học,... của các Trường Đại học như Sư phạm, Khoa học Tự nhiên, Dược khoa, Bách khoa, Nông nghiệp,... cùng các Viện nghiên cứu hoá học.

Ngoài ra, sách còn là tài liệu tham khảo cho các nhà nghiên cứu hoá học hữu cơ và tất cả những ai quan tâm đến hoá học về các hợp chất dị vòng, bao gồm cả giáo viên và học sinh các lớp chuyên hoá học.

Sách được biên soạn không tránh khỏi thiếu sót. Tác giả mong nhận được nhiều ý kiến đóng góp của các đồng nghiệp và các độc giả nói chung về nội dung, cấu trúc và hình thức của cuốn sách để sách ngày càng hoàn thiện hơn.

TÁC GIẢ

1 DANH PHÁP DỊ VÒNG

1.1 ĐỊNH NGHĨA VÀ PHÂN LOẠI

1.1.1 Định nghĩa dị vòng.....	8
1.1.2 Phân loại dị vòng.....	9
1.1.2.1 Phân loại theo kích thước của vòng.....	9
1.1.2.2 Phân loại theo đặc tính của vòng.....	9
1.1.2.3 Phân loại theo bản chất của dị nguyên tử.....	10
1.1.2.4 Phân loại theo số lượng dị tử trong vòng.....	10
1.1.2.5 Phân loại theo vị trí tương hỗ của các dị tử.....	10
1.1.2.6 Phân loại theo số lượng vòng và cách nối giữa hai vòng trong một phân tử.....	10

1.2 DANH PHÁP DỊ VÒNG ĐƠN

1.2.1 Danh pháp thông thường và nửa hệ thống.....	11
1.2.1.1 Tên thông thường của một số dị vòng thơm và nhóm hóa trị một tương ứng.....	11
1.2.1.2 Tên thông thường của một số dị vòng no và không no cùng các nhóm hóa trị một tương ứng.....	13
1.2.2 Danh pháp hệ thống Hantzsch-Widman.....	13
1.2.2.1 Quy tắc về tiền tố, phần cơ sở và hậu tố.....	13
1.2.2.2 Quy tắc về đánh số các nguyên tử mắt vòng.....	15
1.2.2.3 Quy tắc gọi tên các dị vòng không no.....	16
1.2.3 Danh pháp trao đổi.....	17
1.2.3.1 Dị vòng đơn chứa một dị tử.....	17
1.2.3.2 Dị vòng chứa hai hoặc hơn hai dị tử.....	17
1.2.3.3 Dị vòng chứa dị tử mang điện tích dương.....	18

1.3 DANH PHÁP DỊ VÒNG ĐA

1.3.1 Danh pháp thông thường và nửa hệ thống.....	18
1.3.1.1 Một số dị vòng đa chỉ chứa dị tử là nitrogen.....	18
1.3.1.2 Một số dị vòng đa chỉ chứa hoặc chứa thêm dị tử khác nitrogen.....	20
1.3.1.3 Một số dị vòng đa không thơm hoặc không hoàn toàn thơm.....	21
1.3.2 Danh pháp dung hợp.....	22
1.3.2.1 Các bộ phận cấu thành tên dung hợp.....	22
1.3.2.2 Phần dung hợp.....	22
1.3.2.3 Phần cơ sở.....	22
1.3.2.4 Cách đánh số toàn bộ hệ thống dị vòng dung hợp.....	24
1.3.2.5 Tên của hệ dung hợp có cầu nối.....	26
1.3.3 Danh pháp trao đổi.....	27
1.3.3.1 Dị vòng dung hợp.....	27
1.3.3.2 Dị vòng hệ spiro.....	28
1.3.3.3 Dị vòng hệ bixiclo.....	28
1.3.4 Danh pháp các tập hợp của hai hay nhiều dị vòng tương tự nhau, nối trực tiếp với nhau.....	29
1.3.5 Danh pháp "phan".....	29

1.4 DANH PHÁP CÁC DẪN XUẤT CỦA DỊ VÒNG

1.4.1 Danh pháp các dẫn xuất cơ bản.....	31
1.4.1.1 Danh pháp thay thế.....	31
1.4.1.2 Danh pháp loại chức.....	32
1.4.1.3 Danh pháp cộng.....	32
1.4.1.4 Danh pháp trừ.....	32
1.4.1.5 Danh pháp kết hợp.....	33
1.4.2 Danh pháp một số dẫn xuất phức tạp trong thiên nhiên.....	33
1.4.2.1 Tiền tố và hậu tố về sự thêm hoặc bớt hydrogen.....	33
1.4.2.2 Tiền tố về sự tạo thêm vòng hoặc mở vòng.....	33
1.4.2.3 Tiền tố về sự thêm hay bớt nhóm metylen hoặc sự chuyển chỗ liên kết.....	34
1.4.2.4 Tiền tố về sự biến đổi cấu hình lập thể.....	35
1.4.2.5 Tiền tố <i>a</i>	36
1.4.2.6 Tiền tố <i>o</i>	36

Danh pháp các hợp chất dị vòng là vấn đề phức tạp hơn danh pháp các hợp chất đồng vòng, vì sự có mặt của các dị nguyên tử và vì có rất nhiều tên thông thường được IUPAC lưu dùng. Đối với phần lớn các dị vòng cơ bản, tên thông thường được dùng làm nền cho danh pháp hệ thống.

Trong chương này, trước khi đi sâu vào các loại danh pháp khác nhau, cần tìm hiểu định nghĩa dị vòng và các cách phân loại dị vòng.

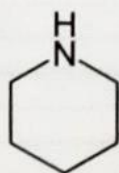
1.1 ĐỊNH NGHĨA VÀ PHÂN LOẠI

1.1.1 Định nghĩa dị vòng

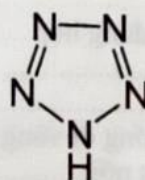
Các hợp chất mạch vòng trong đó các nguyên tử mắt vòng thuộc cùng một loại thì được gọi là hợp chất đồng vòng (homocyclic). Nếu mạch vòng chứa ít nhất một nguyên tử của nguyên tố khác các nguyên tử còn lại thì đó là dị vòng (heterocyclic). Trong các hợp chất hữu cơ đồng vòng các nguyên tử mắt vòng đều là cacbon, còn trong các hợp chất hữu cơ dị vòng các nguyên tử mắt vòng gồm có cacbon và ít nhất một nguyên tử của nguyên tố khác cacbon. Sau đây là một số thí dụ về hợp chất đồng vòng và hợp chất dị vòng hữu cơ và vô cơ :



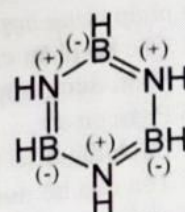
Hợp chất
đồng vòng hữu cơ
(Xiclohexan)



Hợp chất
dị vòng hữu cơ
(Piperidin)



Hợp chất
đồng vòng vô cơ
(Pentazole)



Hợp chất
dị vòng vô cơ
(Borazole)

Vậy, hợp chất dị vòng hữu cơ (hay thường nói gọn là hợp chất dị vòng) là những hợp chất mạch vòng, trong vòng đó ngoài cacbon ra còn có một hay nhiều nguyên tử khác cacbon.