

ANKAN

Phần 2

hydrocacbon

Chương 1: ANKAN

- 1.1 Khái niệm
- 1.2 Cấu trúc phân tử
- 1.3 Danh pháp, đồng phân
- 1.4 Tính chất vật lý
- 1.5 Điều chế
- 1.6 Tính chất hoá học
- 1.7. Chất tiêu biểu

1.1 Khái niệm

- Là hợp chất hidrocarbon no mạch hở, trong phân tử chỉ có liên kết đơn xigma. Nó còn gọi là parafin
- Công thức tổng quát C_nH_{2n+2} ($n \geq 1$)
- Chất đầu tiên và đơn giản nhất là metan

1.2 Cấu trúc phân tử

- Các nguyên tử cacbon trong ankan ở trạng thái lai hoá sp^3
- Các liên kết định hướng theo kiểu tứ diện
- Các góc hoá trị chuẩn là $109^{\circ}28'$
- Độ dài liên kết C-C là $1,54 \text{ \AA}$ và C-H là $1,09 \text{ \AA}$

1.3 Danh pháp, đồng phân

1.3.1 Danh pháp

1. Danh pháp thông thường

- 4 chất đầu mang tên lịch sử
- Từ C_5 trở lên gọi theo tên hệ thống gồm tiếp đầu ngữ bằng chữ số Hy Lạp chỉ số nguyên tử cacbon trong phân tử và có tiếp vĩ là an
- Nếu hợp chất mạch thẳng có thêm tiếp đầu ngữ là n-
- Nếu có 2 nhóm methyl cuối mạch thêm tiếp đầu ngữ là iso Nếu có 3 nhóm methyl là neo

2. Tên hợp lý :

Người ta coi ankan như là dẫn xuất thế H của metan bằng các gốc ankyl, trong đó nguyên tử C của metan là C bậc cao nhất khi đó gọi tên các gốc ankyl và cuối cùng là metan. Khi gọi thì gọi gốc đơn giản trước, phức tạp sau

Ví dụ :

isopentan $(\text{CH}_3)_2\text{CH}-\text{CH}_2\text{CH}_3$

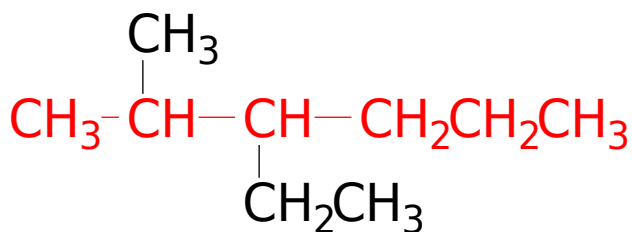
.đimetyl etyl metan

3. Tên IUPAC

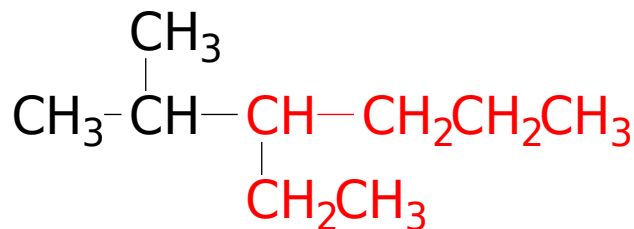
a. Đối với mạch thẳng: gọi như tên thường

b. Đối với hợp chất mạch nhánh

- Chọn mạch chính là mạch cacbon dài nhất, tên của ankan là tên của mạch chính

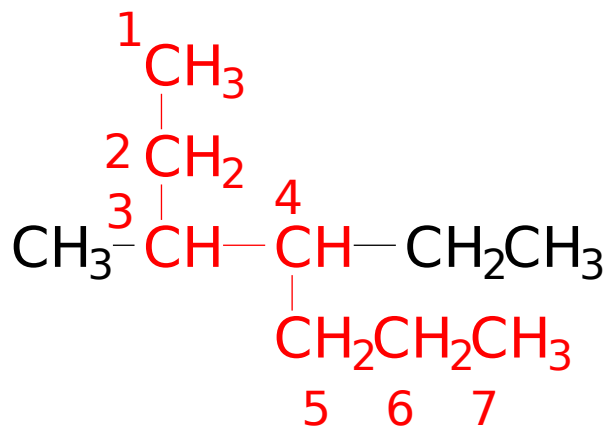


Tên nhỏ là hexan vô² nhóm thế

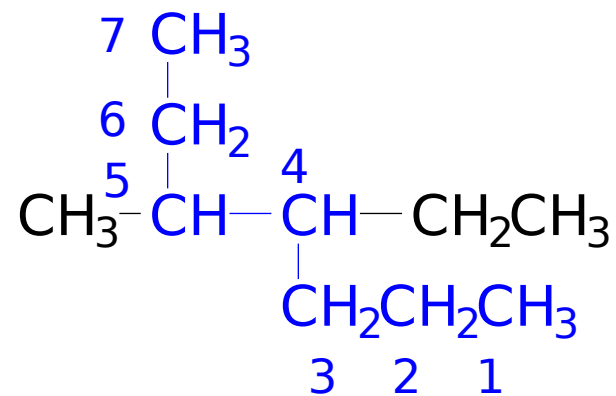


Không gọi nhỏ là hexan vô¹ nhóm thế

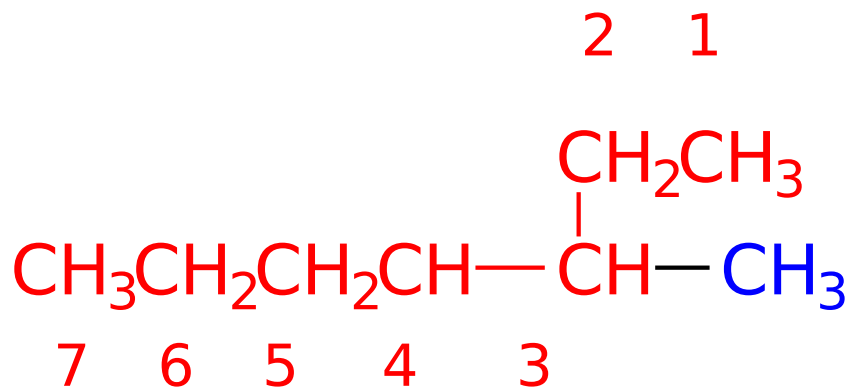
- Đánh số mạch chính để chỉ vị trí của nhóm thế, cách đánh sao cho tổng chỉ số của nhóm thế là nhỏ nhất



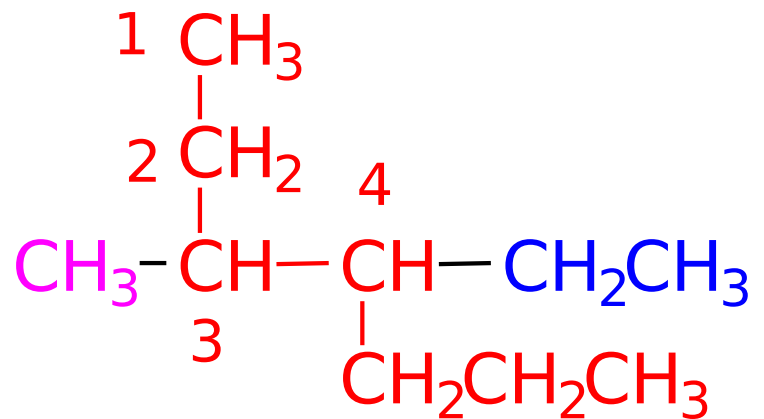
khoảng này không có số



- Trong tên gọi, mỗi nhóm thế có một chỉ số chỉ vị trí, nếu các nhóm thế giống nhau thì có thể gộp lại thành đi, tri, tetra... Khi gọi tên theo thứ tự a,b,c của nhóm thế. Giữa các con số chỉ nhóm thế có dấu phẩy, giữa các chỉ số chỉ vị trí với nhóm thế có dấu gạch ngang



3-Methylhexan



4-Etyl-3-methylheptan

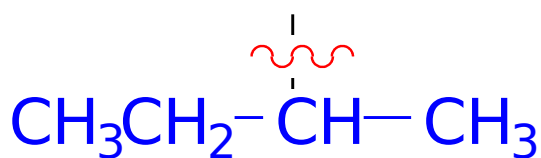
.Bậc cacbon và tên gọi của gốc hidrocacbon

- Bậc cacbon là số nguyên tử cacbon mà nó liên kết
- Nếu loại 1 H ra khỏi ankan thì ta được gốc anky.

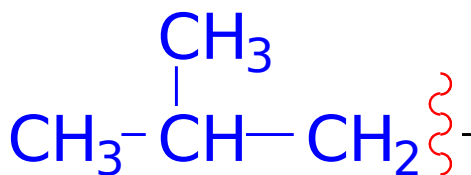
Tên gọi của gốc anky tương tự như tên của ankan tương ứng, thay đuôi an = yl

- Nếu loại nguyên tử H ở cacbon bậc 1,2,3 thì ta có gốc anky bậc 1, 2 và 3 tương ứng

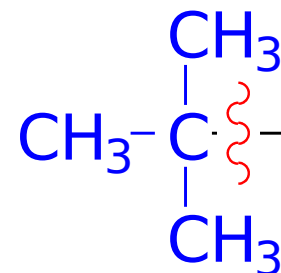
Gốc bậc 2 gọi là *sec-*, bậc 3 là *tert-*



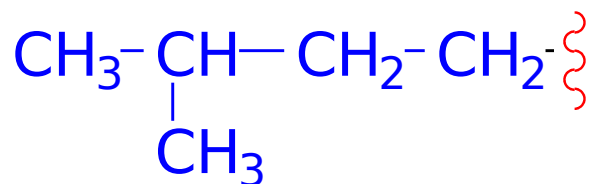
sec-Butyl
(*sec*-Bu)



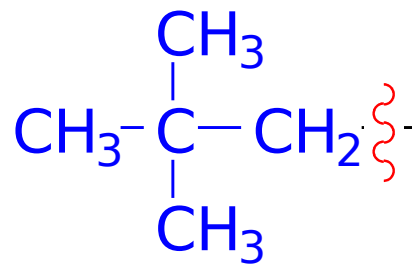
Isobutyl



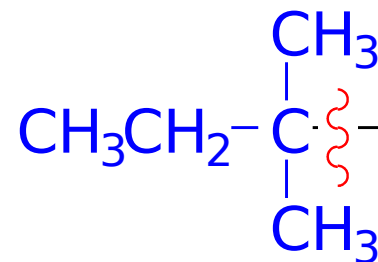
tert-Butyl
(*t*-butyl hoặc *t*-Bu)



Isopentyl
Isoamyl (*i*-amyl)



Neopentyl



tert-Pentyl
hoaë *tert*-amyl (*t*-amyl)

Công thức chung gọi tên theo IUPAC

Chỉ số chỉ vị trí nhóm thế - tên nhóm thế - tên hydrocarbon mạch chính

Lưu ý:

- Tên gộp của nhóm thế không được ưu tiên theo a,b,c
- Tên gọi của các gốc ankyll phức tạp thì C_1 là C có hoá trị tự do
- IUPAC chấp nhận tên thường một số gốc đơn giản, thường gặp như isopropyl, tert- butyl...

1.3.2 Đồng phân

- Chỉ có đồng phân cấu tạo mạch cacbon
- Nếu có nguyên tử C bất đối thì có đồng phân quang học

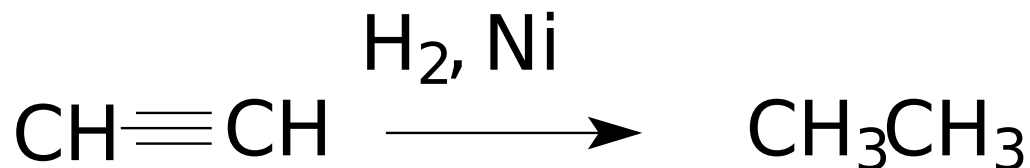
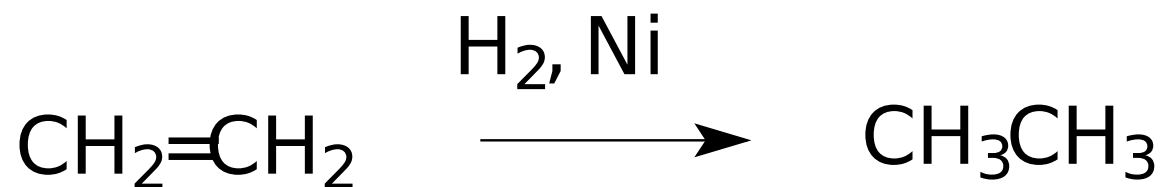
1.4 Tính chất vật lý

- Trạng thái : từ C_1 - C_4 : Khí; C_5 - C_{15} : lỏng, C_{16} trở lên là rắn
- Các ankan mạch thẳng có nhiệt độ sôi cao hơn mạch nhánh tương ứng
- Các ankan có C chẵn có nhiệt độ nóng chảy cao hơn ankan có C lẻ cạnh nó
- Tỷ trọng nhỏ
- Không tan trong nước, dễ tan trong dung môi không phân cực và bản thân nó cũng là dm tốt cho các hợp chất hữu cơ không phân cực khác

1.5 Phương pháp điều chế

1.5.1 Các phương pháp giữ nguyên mạch cacbon

- Từ anken, ankin + H₂ xt (Ni, Pt...)



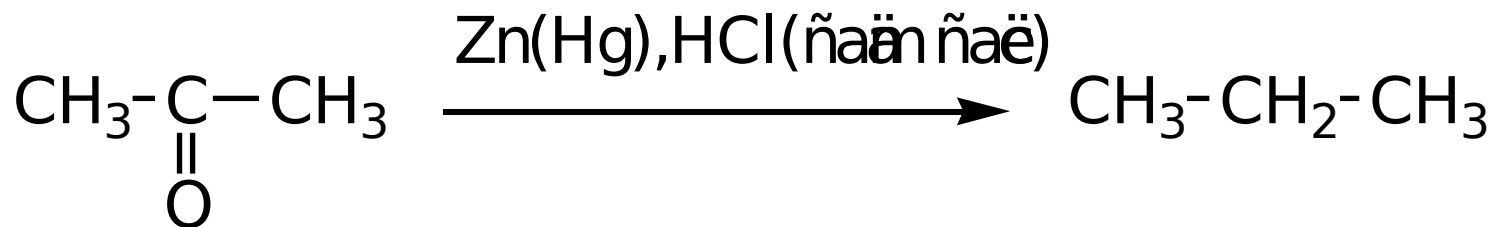
- **Từ Ancol:**

Cho ancol tác dụng với HI, (P đỏ)

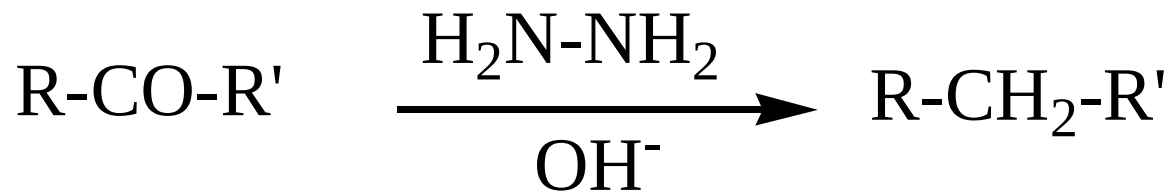


- **Từ andehyt, xeton**

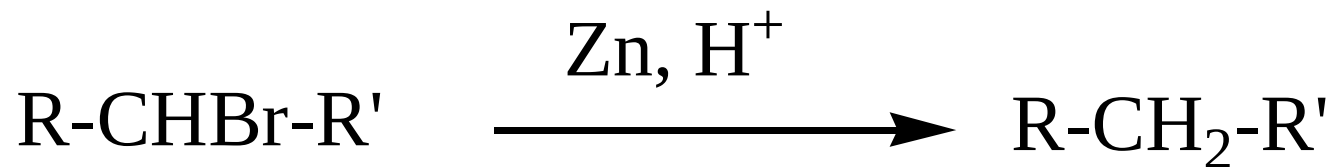
P/ứng Clemensen (Zn/Hg + HCl)



P/ứng Vonf-Kishner (tác nhân H_2N-NH_2/KOH)



- **Từ dẫn xuất halogen**

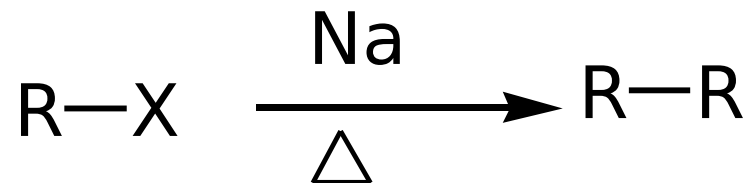


- **Từ hợp chất cơ kim**



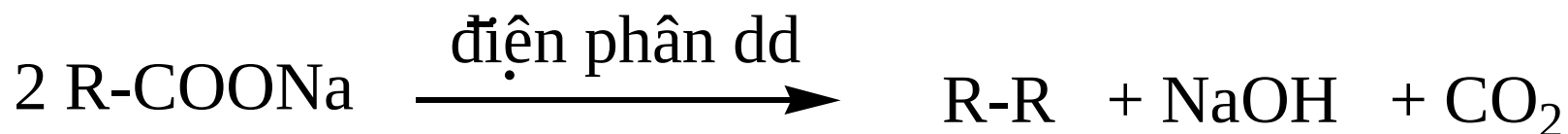
1.5.2 Phương pháp tăng mạch cacbon

- Phương pháp Wurtz

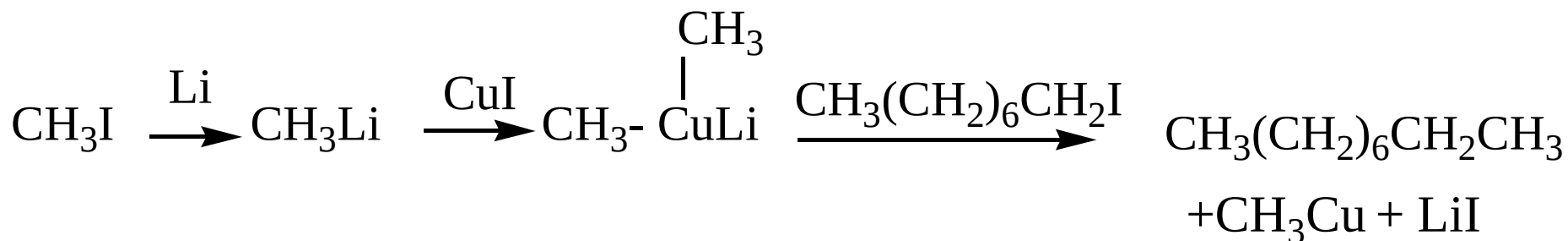


- Phương pháp điện phân Kolbe

Đi từ muối natri của axit cacboxylic



- Từ hợp chất cơ kim của Cu (p/ư Corey-House)



1.5.3 Phương pháp làm giảm mạch cacbon

- Nhiệt phân muối muối natri của axit cacboxylic với NaOH



1.6 Tính chất hoá học

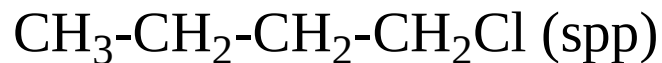
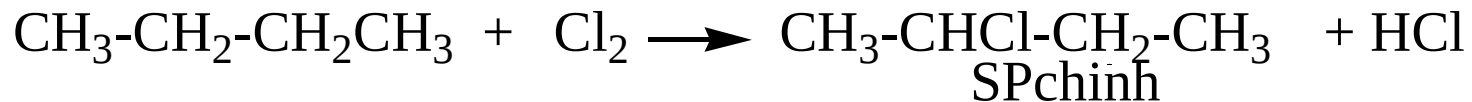
1.6.1 Phản ứng thế:

Phản ứng thế là đặc trưng đối với hợp chất no nói chung và ankan nói riêng,

1. Halogen hoá

Ví dụ: Trong điều kiện ánh sáng khuếch tán hay ở nhiệt độ cao, ankan cho phản ứng thế halogen.

Phản ứng thường cho ra hỗn hợp sản phẩm



• **Cơ chế phản ứng** Phản ứng xảy ra theo cơ chế thế gốc S_R . có 3 giai đoạn: khơi mào, phát triển mạch và tắt mạch

Khả năng phản ứng (Hidrocarbon, Halogen,)

+ Khả năng thế nguyên tử H ở nguyên tử cacbon:
Ở bậc 3 là dễ nhất, sau đó là bậc 2, khó nhất là bậc 1
+ Halogen thường dùng là Cl_2 và Br_2 . Người ta không dùng Flo vì thường xảy ra phản ứng hủy, cũng ít dùng Iod vì phản ứng xảy ra chậm và thuận nghịch.

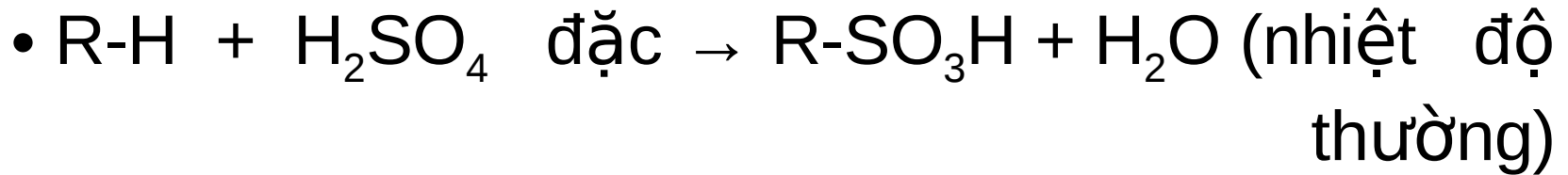
• Cách tính tỉ lệ các sản phẩm đồng phân

$$a_i (\%) = \frac{n_i r_i}{\sum n_i r_i} \cdot 100$$

b- Phản ứng nitro hóa và sunfo hóa



Phản ứng xảy ra ở nhiệt độ 110-140°C và áp suất cao, có sản phẩm là nitro của phản ứng cắt mạch.



- Các phản ứng này xảy ra dễ ở nguyên tử cacbon bậc cao

1.6.2 Những phản ứng làm đứt liên kết C-C

1. Phản ứng đốt cháy và oxi hoá
2. Phản ứng nhiệt phân và cracking
 - Trên 650°C là nhiệt phân
 - Dưới 650°C là cracking

1.6.3 Phản ứng dehidro hoá: tạo anken

(xt Cr_2O_3 .; $300-600^{\circ}\text{C}$)

1.6.4 - Phản ứng đồng phân hóa và phản ứng vòng hóa

- Ở nhiệt độ cao và có mặt của xúc tác như AlCl_3 các ankan có khả năng đồng phân hóa để tạo hỗn hợp các ankan đồng phân có mạch nhánh, có chỉ số octan cao.
- Ngoài phản ứng đồng phân hóa ở nhiệt độ cao có mặt của Pt và một số oxit kim loại như oxit nhôm... chúng có khả năng loại hidro và vòng hóa tạo hợp chất mạch vòng có chỉ số octan đặc biệt cao.
- Ví dụ từ n-hexan \rightarrow xiclohexan \rightarrow benzen + H_2

Chương 2: Xicloankan

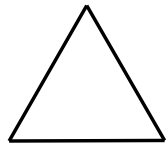
2.1 Khái niệm là loại hidrocarbon no, trong phân tử chỉ có liên kết đơn C-C và C-H, các nguyên tử cacbon trong phân tử liên kết với nhau tạo thành mạch vòng

2.2 Danh pháp- Đồng phân

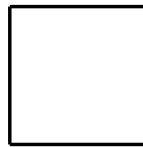
2.2.1 Danh pháp Tùy thuộc vào cấu tạo của vòng

•Vòng đơn

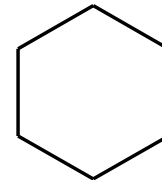
Ngoài một số hợp chất người ta gọi theo tên lịch sử hoặc tên thường, còn trong danh pháp IUPAC người ta gọi tên của xicloankan theo tên của ankan mạch thẳng tương ứng với số C trong vòng, có thêm tiếp đầu ngữ là xiclo.



xiclopropan



xiclobutan



xiclohexan

- Nếu trong phân tử có nhóm thế thì mạch chính là mạch vòng, và phải đánh số sao cho tổng chỉ số các nhóm thế trong vòng là nhỏ nhất, khi gọi tên nhóm thế cũng theo thứ tự a,b,c...
- **Hệ thống vòng xoắn** (spiro): đánh số từ C bên cạnh C chung của vòng nhỏ trước, tên gọi như sau
- ***Spiro [số C còn lại của vòng nhỏ. số C còn lại của vòng lớn] tên hidrocarbon***

- **Hệ thống 2 vòng giáp** (bixiclo): Đánh số từ 1 nguyên tử C của vòng giáp, vòng lớn trước, vòng bé sau
- ***Bixiclo[số C còn lại của vòng lớn. số C còn lại của vòng bé...]tên hidrocarbon***

2.2.2 Đồng phân

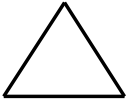

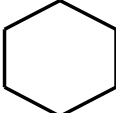

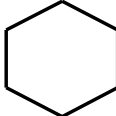
- Đồng phân về độ lớn của vòng
- Đồng phân về vị trí nhóm thế trong vòng
- Đồng phân hình học
- Đồng phân quang học

2.3 Phương pháp tổng hợp

- Tổng hợp từ dẫn xuất dihalogen (tác chất Na...)
- Từ muối canxi của axit đicacboxilic: nhiệt phân sau đó khử hoá xeton vòng

2.4 Tính chất hoá học

- Đối với vòng nhỏ 3 cạnh: Phản ứng cộng
- Vòng 5-6 cạnh trở lên: thể như ankan
- Vòng 4 cạnh là trung gian của hai loại trên
- Ví Dụ :
 - + Br₂: Cộng(vòng 3 cạnh);
 - Thế và Cộng (4 cạnh);
 - Thế(5,6 cạnh)
 - + HBr: chỉ vòng 3 cạnh phản ứng cộng
 - + H₂: (Ni, 100°C, 1at): Cộng với vòng 3, 4 cạnh

PHAN UNG				$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_3$
Br_2, t^0	$\begin{array}{c} \text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2 \\ \quad \\ \text{Br} \quad \text{Br} \end{array}$	 Br + $\text{CH}_2\text{Br}(\text{CH}_2)_2\text{CH}_2\text{Br}$	 Br	$\text{CH}_3\text{CHBrCH}_3$
HBr	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{Br}$	—	—	—
H_2/Ni	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_3$	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	—	—