## CHU'O'NG II: HIDROCACBON

CHU'O'NG IIA: ANKAN

• Trong phân tử hợp chất hữu cơ người ta phân biệt làm hai phần: phần khung sườn cacbon (R) như ankan, anken, akin, aren (hydrocacbon) tạo nên phần xương sống cho các hợp chất hữu cơ. Mặc dù chiếm khối lượng lớn nhưng các hydrocacbon ít quyết định tính chất vật lý và đặc biệt là tính chất hóa học của hợp chất hữu cơ.

 Phần nhóm chức lại quyết định tính chất vật lý và hóa học của hợp chất hữu cơ.

- Phần lớn các nối trong hợp chất hữu cơ là nối cộng hóa trị thuần túy → rất bền, khó cắt đứt → hầu như trơ về mặt hóa học.
- Phần khung sườn cacbon này phân cực kém nên không tan trong nước, dây cacbon càng dài càng kém tan. Người ta gọi chúng là đầu "kỵ nước" hay "ưa dầu". Ngược lại, phần nhóm chức hóa học nếu phân cực mạnh được gọi là đầu "kỵ béo" hay "ưa nước".

- \* Các bước gọi tên quốc tế của hợp chất hữu cơ:
- Trước đây tên của hợp chất hữu cơ thường là do nhà hóa học tìm ra nó đặt cho, tên này thường có gốc Latinh xuất phát từ nguồn gốc hay đặc tính nổi bật của hợp chất đó. Ví dụ: Ure (urine), Morphin (morpheus), acid barbatiric (Barbara),...
- Nhu cầu đặt ra phải có một hệ thống đọc tên thống nhất cho tất cả các hợp chất hữu cơ. Hiệp hội Hóa học thuần túy và ứng dụng quốc tế đã đề quy tắc đọc tên chuẩn (danh pháp quốc tế hay IUPAC).
- Để đọc tên quốc tế của hợp chất hữu cơ, chúng ta phải tiến hành 4 bước.

• Bước 1: Xác định nhóm chức chính. Thứ tự ưu tiên của các nhóm định chức được sắp xếp theo thứ tự sau

$$-COOH > -SO_3H > -CO-O-COR > -COOR > -COX > -CONH_2 > -CN > -CHO > -COR > -OH > -NH_2 > -OR > -O-O-R$$

Table 18.1	Summary of Functional Group Nomenclature					
	Class	Suffix Name	Prefix Name			
increasing priority	Carboxylic acid Ester Amide Nitrile Aldehyde Aldehyde Ketone Alcohol Amine Alkene Alkyne Alkane Ether Alkyl halide	-oic acid -oate -amide -nitrile -al -al -one -ol -amine -ene -yne -ane	Carboxy Alkoxycarbonyl Amido Cyano Oxo (=O) Formyl (-CH=O) Oxo (=O) Hydroxy Amino Alkenyl Alkynyl Alkyl Alkoxy Halo			

• Bước 2: Xác định mạch chính là mạch cacbon dài nhất có chứa nhóm chức chính. Trong trường hợp có nhiều nhóm chức chính thì mạch chính phải là mạch chứa tất cả các nhóm chức chính (hoặc chứa nhiều nhóm chức chính nhất có thể).

$$\begin{array}{c} \hline \text{CH}_{3} \\ \hline \text{CH}_{2} \\ \hline \text{CH}_{2} \\ \hline \text{CH}_{2} \\ \hline \text{CH}_{3} \\ \hline \text{CH}_{2} \\ \hline \text{CH}_{3} \\ \hline \text{CH}_{2} \\ \hline \text{CH}_{2} \\ \hline \text{CH}_{3} \\ \hline \text{CH}_{2} \\ \hline \text{CH}_{2} \\ \hline \text{CH}_{2} \\ \hline \text{CH}_{3} \\ \hline \text{CH}_{3} \\ \hline \text{CH}_{2} \\ \hline \text{COOH} \\ \hline \\ \hline \text{HOOC} \\ \hline \text{CH}_{2} \\ \hline \text{CH}_{2} \\ \hline \text{COOH} \\ \hline \end{array}$$

- Bước 3: Đánh số trên mạch chính theo tuân theo các quy tắc ưu tiên dưới đây
- Đánh số sao cho nhóm chức chính có số thứ tự nhỏ nhất (trong trường hợp có thì nhiều nhóm chức chính thì phải đánh số sao cho tổng số thứ tự các nhóm chức chính là nhỏ nhất).
- Đánh số sao cho tổng số thứ tự nhóm thế là nhỏ nhất.
- Khi vừa có nhóm ankyl và nhóm halogen thì ưu tiên nhóm halogen có số thứ tự nhỏ hơn.
- Khi có nhiều nhóm thế tương đương thì đánh số sao cho nhóm thế có chữ cái đầu tiên đứng trước trong vần a,b,...có số thứ tự nhỏ hơn.

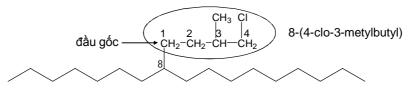
- Bước 4: Đọc tên tuân theo các quy tắc sau
- STT nhóm thế-tên nhóm thế + tên mạch chính.
- Giữa số và số là dấu phẩy (,) ; giữa số và chữ là dấu gạch (-)
- Nếu có nhiều nhóm thế giống nhau thì thêm tiếp đầu ngữ: di, tri, tetra, penta, hexa, ... vào trước tên nhóm thế và phải lập lại STT của nhóm thế đó (STT được viết từ nhỏ đến lớn). Đối với các nhóm thế phức tạp thì sử dụng tiếp đầu ngữ bis, tris, tetrakis, ...
- Các nhóm thế được viết theo thứ tự a,b,c (dựa vào chữ cái đầu tiên của các nhóm thế mà không bao gồm các tiếp đầu ngữ di, tri, tetra, ...

Nhóm thế	Tên gọi	Nhóm thế	Tên gọi
<b>−</b> F	Flo(ro)	-ОН	Hidroxi
-CI	Clo(ro)	-NH <sub>2</sub>	Amino
—Br	Brom(o)	$-NO_2$	Nitro
<b>—</b> I	lod(o)	-NO	Nitroso
		-CN	Ciano

- Gốc hidrocacbon: gốc xuất phát từ ankan tên ankan bỏ an thêm yl(il), nhưng gốc xuất phát từ anken, akin thì chỉ cần thêm yl(il).

Gốc	Tên gọi	Viết tắt	Gốc	Tên gọi	Viết tắ
-CH <sub>3</sub>	Metyl	Me	_	Ciclohexyl	
-CH <sub>2</sub> -CH <sub>3</sub>	Etyl	Et			
-CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>3</sub>	n-propyl	n-Pr	<b>~</b>	Phenyl	Ph
-CHCH <sub>3</sub>     CH <sub>3</sub>	Isopropyl (i-propyl)	i-Pr	-CH <sub>2</sub> -()	Benzyl	
-CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>3</sub>	n-butyl	n-Bu	CH <sub>3</sub>		
-CH <sub>2</sub> -CHCH <sub>3</sub> CH <sub>3</sub>	Isobutyl (i-butyl)	i-Bu	-\(\)	o-Tolyl	
CH-CH <sub>2</sub> -CH <sub>3</sub> CH <sub>3</sub>	sec-butyl (s-butyl)	s-Bu	CH <sub>3</sub>	m-Tolyl	
CH <sub>3</sub> -C	tert-butyl (t-butyl)	t-Bu		p-Tolyl	
CH <sub>3</sub> -CH <sub>2</sub> -CCH <sub>3</sub> 	Neopentyl				

• Đối với các gốc phức tạp thì ta đánh số từ đầu gốc rồi đổi tiếp vĩ ngữ theo quy luật trên:



• Gốc có chứa oxi:

# Tiếp đầu ngữ chỉ số C

		10	Dec	20	(E)Icos	30	Triacont
1	Met	11	Undec	21	Hen(e)icos	31	Hentriacont
2	Et	12	Dodec	22	Docos	32	Dotriacont
3	Prop	13	Tridec	23	Tricos	40	Tetracont
4	But	14	Tetradec	24	Tetracos	50	Pentacont
5	Pent	15	Pentadec	25	Pentacos	60	Hexacont
6	Hex	16	Hexadec	26	Hexacos	70	Heptacont
7	Hept	17	Heptadec	27	Heptacos	80	Octacont
8	Oct	18	Octadec	28	Octacos	90	Nonacont
9	Non	19	Nonadec	29	Nonacos	100	Hect

#### II. Gọi tên:

1. Tên thông thường: áp dụng với các ankan có mạch đơn giản

#### 2. Tên quốc tế:

Các chữ n-, s-, t-, i- (viết tắt của normal, sec-, tert-, iso-) không được tính đến khi sắp thứ tự theo vần a,b,c. Tuy nhiên Iso (không viết tắt) và neo (không có dạng viết tắt thì được tính)

#### 3. Tên cicloankan:

- Nếu số cacbon trên dây nhánh ≤ số cacbon trên vòng thì xem vòng là mạch chính.

 Nếu số cacbon trên dây nhánh > số cacbon trên vòng thì dây nhánh là mạch chính.

#### II. Tính chất vật lý:

- Không tan trong nước, chỉ tan trong các dung môi hữu cơ không phân cực, không tan trong axit, bazơ loãng, dung dịch H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> đđ lạnh.
- Nhe hơn nước.
- Nhiệt độ sôi, nóng chảy thấp. Số C tăng, nhiệt độ sôi, nóng chảy tăng.
- Cùng số C, đồng phân có nhiều dây nhánh hơn sẽ có nhiệt độ sôi, nóng chảy thấp hơn.

 $C_1$ - $C_4$ : khí  $C_5$ - $C_{17}$ : lỏng  $C_{18}$ : rắn

#### III. Điều chế:

1. Hidro hóa anken, akin:

$$C = C + H_2 \xrightarrow{Ni} C - C$$

$$-C = C + 2H_2 \xrightarrow{Ni} C - C$$

$$+ H_1 + H_2$$

- 2. Khử Halogenua ankyl (RX):
  - a. Dùng H<sub>2</sub> xúc tác Pt hoặc Ni:

$$RX + H_2 \xrightarrow{Pt} RH + HX$$

b. Dùng H đang sinh:

$$RX + 2[H] \xrightarrow{Zn/HCI} RH + HX$$

c. Dùng LiAlH<sub>4</sub> (Liti nhôm hidrua):

$$RX + LiAIH_4 \longrightarrow 4RH + LiX + AIX_3$$

3. Tổng hợp Wurtz:

$$2RX + Na \xrightarrow{t^0} R-R + 2NaX$$

 Chỉ thích hợp điều chế ankan đối xứng, khi dùng 2 halogenua ankyl khác nhau thì sẽ tạo hỗn hợp sản phẩm → hiệu suất thấp.

$$RX + RX' + Na$$
  $t^0$   $R-R + R'-R' + R-R + NaX$ 

4. Phản ứng khử cacbonyl (Clemensen):

5. Khử CO<sub>2</sub> của muối RCOONa:

RCOONa + NaOH 
$$\frac{\text{CaO}}{\text{t}^{\text{o}}}$$
 R-H + Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>

#### IV. Tính chất hóa học:

1. Phản ứng đốt cháy:

- Ankan cho khả năng cháy tốt: cho ngọn lửa sáng, không khói.
- Tuy nhiên khi số C tăng thì khả năng cháy càng giảm.
- So sánh giữa các ankan > anken > ankin > aren.
- Trong trường hợp đốt cháy những hydrocacbon có khả năng cháy kém hoặc đốt cháy trong điều kiện thiếu oxy thì quá trình đốt cháy cho nhiều khói, muội than.

### 2. Phản ứng halogen hóa:

- Điều kiện: ánh sáng tử ngoại hoặc 200-400°C
- Cơ chế: gốc tự do qua 3 giai đoạn
  - + Giai đoạn khai mào (nhanh):  $G\acute{o}c t\psi do$
  - + Giai đoạn truyền (chậm):

#### + Giai đoạn kết thúc:

 Trong trường hợp ankan có nhiều "loại" hidro ta sẽ thu được nhiều sản phẩm halogen hóa. Sản phẩm chính sẽ là sản phẩm xuất phát từ gốc tự do bền nhất.

- Độ phản ứng:  $Cl_2 > Br_2 > l_2$  ( $l_2$  hầu như không phản ứng). Tuy nhiên  $Br_2$  lại có độ chọn lọc cao hơn  $Cl_2$ .

III II I CI 5 : 3,5 : 1 Br 1600 : 82 : 1

- 3. Phản ứng nitro hóa:
  - Xảy ra ở pha khí, nhiệt độ cao, mạch cacbon có thể bị cắt đứt cho hỗn hợp sản phẩm.

$$\mathsf{RH} \ + \ \mathsf{HNO}_3 \quad \longrightarrow \quad \mathsf{RNO}_2 \ + \ \mathsf{H}_2\mathsf{O}$$

4. Phản ứng cracking:

$$R-CH_2-CH_2-R' \xrightarrow{t^0} R-CH=CH_2 + R'H$$