BÀI GIẢNG: SO SÁNH VỀ ALKANE; ALKENE VÀ ALKYNE - CƠ CHẾ THẾ GỐC S_R VÀ CƠ CHẾ CỘNG ELECTROPHILE A_E

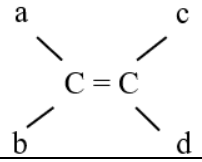
CHUYÊN ĐỀ: HYDROCARBON

MÔN: HÓA HỌC 12

GIÁO VIÊN: PHẠM THANH TÙNG

MỤC TIÊU

- ✓ *Alkane: khái niệm, danh pháp, đặc điểm cấu tạo, tính chất vật lí – hóa học, phương pháp điều chế trong công nghiệp và ứng dụng,*
- ✓ *Alkene và alkyne: khái niệm, danh pháp, đặc điểm cấu tạo, tính chất vật lí – hóa học, phương pháp điều chề và ứng dụng.*
- ✓ *Cơ chế thế gốc S_R và cơ chế cộng electrongphile A_E.*

Nội dung	Alkane	Alkene	Alkyne
Công thức tổng quát	C_nH_{2n+2} ($n \geq 1$)	C_nH_{2n} ($n \geq 2$)	C_nH_{2n-2} ($n \geq 2$)
Đặc điểm cấu tạo	- Trong phân tử chỉ chứa liên kết đơn (σ) ⟹ Hợp chất no - Liên kết trong phân tử kém phân cực	- Trong phân tử chứa 1 liên kết đôi (π + σ) ⟹ Hợp chất không no, mạch hở - Đồng phân hình học: *cis-; trans-* Điều kiện có đồng phân hình học: a ≠ b c ≠ d 	- Trong phân tử chứa 1 liên kết ba (2π + σ) ⟹ Hợp chất không no, mạch hở
Tính chất vật lí	- Alkane $C_1 – C_4$ là chất khí ở điều kiện thường,… - Alkane không tan hoặc ít tan trong nước và nhẹ hơn nước.		
Tính chất	***Phản ứng cháy (oxi hóa hoàn toàn):***	***Phản ứng cháy (oxi hóa hoàn toàn)***	***Phản ứng cháy (oxi hóa hoàn toàn)***

hóa học	$\mathbf{C_nH_{2n+2} + \frac{3n+1}{2}O_2 \xrightarrow{t^o} nCO_2 + (n+1)H_2O}$ ***Phản ứng thế: halogen*** $\mathbf{C_nH_{2n+2} + X_2 \xrightarrow[1:1]{as} C_nH_{2n+1}X + HX}$ *Ví dụ:* $CH_3-CH_2-CH_3 + Cl_2 \xrightarrow{as} \begin{bmatrix} CH_3-CHCl-CH_3 \\ CH_3-CH_2-CH_2Cl \end{bmatrix} + HCl$ *Quy tắc thế: Nguyên tử halogen ưu tiên thế hydrogen của carbon bậc cao hơn.* ***Phản ứng cracking:*** Phản ứng cắt/ bẻ gẫy mạch carbon. $CH_3-CH_2-CH_3 \xrightarrow{t^o,xt,p} CH_4 + C_2H_4$ ***Phản ứng reforing:*** Phản ứng đồng phân hóa, chuyển từ mạch thẳng thành mạch vòng/ mạch nhánh, $CH_3-CH_2-CH_3 \longrightarrow \begin{array}{c} CH_2 \\ / \quad \backslash \\ CH_2-CH_2 \end{array} + H_2$ $CH_3-CH_2-CH_2-CH_3 \xrightarrow{t^o,xt,p} CH_3-CH(CH_3)-CH_3$ ***Phản ứng oxi hóa không hoàn toàn:*** $CH_3-CH_2-CH_3 + O_2 \xrightarrow{xt} HCOOH + CH_3COOH + H_2O$	$\mathbf{C_nH_{2n+2} + \frac{3n}{2}O_2 \xrightarrow{t^o} nCO_2 + nH_2O}$ ***Phản ứng cộng:*** H_2, nước Br_2, HX, H_2O $CH_2=CH_2 + H_2 \xrightarrow[t^o]{Ni} CH_3-CH_3$ $\mathbf{C_nH_{2n} + H_2 \xrightarrow[t^o]{Ni} C_nH_{2n+2}}$ $CH_2=CH-CH_3 + Br_2 \rightarrow CH_2Br-CH_2Br-CH_3$ $\mathbf{C_nH_{2n} + Br_2 \xrightarrow[t^o]{Ni} C_nH_{2n}Br_2}$ $CH_2=CH-CH_3 + HCl \rightarrow \begin{bmatrix} CH_3-CHCl-CH_3\,(chinh) \\ CH_2Cl-CH_2-CH_3\,(phu) \end{bmatrix}$ $\mathbf{C_nH_{2n} + HX \longrightarrow C_nH_{2n+1}X}$ $CH_2=CH_2 + H-OH \xrightarrow[t^o]{H^+} CH_3-CH_2-OH$ $\mathbf{C_nH_{2n} + H_2O \xrightarrow[t^o]{H^+} C_nH_{2n+1}OH}$ ***Phản ứng trùng hợp:*** $CH_2=CH_2 \xrightarrow[t^o,p]{xt} -(CH_2-CH_2)-$ (P.E) $CH_2=\underset{\displaystyle CH_3}{\underset{\vert}{CH}} \xrightarrow[P]{t^o,xt} \left(CH_2-\underset{\displaystyle CH_3}{\underset{\vert}{CH}}\right)$ ***Phản ứng oxi hóa không hoàn toàn:*** $R_1 - CH = CH - R_2 \xrightarrow{KMnO_4} R_1 - CHOH - CHOH - R_2$	$\mathbf{C_nH_{2n+2} + \frac{3n-1}{2}O_2 \xrightarrow{t^o} nCO_2 + (n-1)H_2O}$ ***Phản ứng cộng:*** H_2, nước Br_2, HX, H_2O $\mathbf{C_nH_{2n} + H_2} \begin{cases} \xrightarrow[t^o]{Pd/PdCO_3} C_nH_{2n} \\ \xrightarrow[t^o]{Ni} C_nH_{2n+2} \end{cases}$ $CH \equiv CH + H_2 \xrightarrow{xt} CH_2=CH_2 \xrightarrow[xt]{+H_2} CH_3-CH_3$ $CH \equiv CH + HCl \xrightarrow[1:1]{} CH_2=CHCl$ *vinyl chloride* $\mathbf{C_nH_{2n-2} + 2Br_2 \longrightarrow C_nH_{2n-2}Br_4}$ ***Phản ứng thế bạc (sliver):*** Chỉ alkyne có hydrogen linh động (Có liên kết ba đầu mạch) mới tham gia phản ứng. $\mathbf{CH \equiv C - R \xrightarrow{AgNO_3/NH_3} CAg \equiv C - R\downarrow_{vàng}}$
Điều chế	***Trong công nghiệp***: khai thác từ dầu mỏ, khí thiên nhiên.	Tách nước từ alcohol: $C_2H_5OH \xrightarrow[180^oC]{H_2SO_4d} C_2H_4 + H_2O$ $\mathbf{C_nH_{2n+1}OH \xrightarrow[t^o]{H_2SO_4d} C_nH_{2n} + H_2O}$	***Trong phòng thí nghiệm:*** Thủy phân đất đèn: $CaC_2 + 2H_2O \longrightarrow C_2H_2 + Ca(OH)_2$ ***Trong công nghiệp:*** $2CH_4 \xrightarrow[LLN]{1500^oC} C_2H_2 + 3H_2$
Ứng dụng	Làm nhiên liệu, tạo năng lượng, khí LPG, khí gas Tổng hợp chất hữu cơ Tổng hợp xăng dầu, làm chất dưỡng ẩm.	- Ethylene kích thích hoa quả mau chín. - Nguyên liệu tổng hợp một số loại chất dẻo, polimer	Acetylene: Làm đèn xì, hàn.

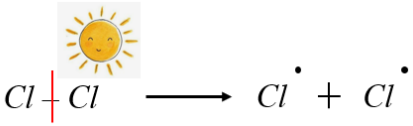
CƠ CHẾ

1 Cơ chế thế gốc S_R

Ví dụ: $CH_4 + Cl_2$

Giai đoạn 1: Khơi mào

Phân cắt đồng li



$$Cl - Cl \longrightarrow Cl^{\bullet} + Cl^{\bullet}$$

Giai đoạn 2: Phát triển mạch

$$CH_3 - H + Cl^{\bullet} \longrightarrow H - Cl + CH_3^{\bullet}$$

$$CH_3^{\bullet} + Cl - Cl \longrightarrow CH_3 - Cl + Cl^{\bullet}$$

Giai đoạn 3: Ngắt mạch

$$Cl^{\bullet} + Cl^{\bullet} \longrightarrow Cl - Cl$$

$$CH_3^{\bullet} + Cl^{\bullet} \longrightarrow CH_3 - Cl$$

$$CH_3^{\bullet} + CH_3^{\bullet} \longrightarrow CH_3 - CH_3$$

Tổng quát:

$$X - X \xrightarrow{as} X^{\bullet} + X^{\bullet}$$

$$R - H + X^{\bullet} \rightarrow R^{\bullet} + H - X$$

$$R^{\bullet} + X - X \rightarrow R - X + X^{\bullet}$$

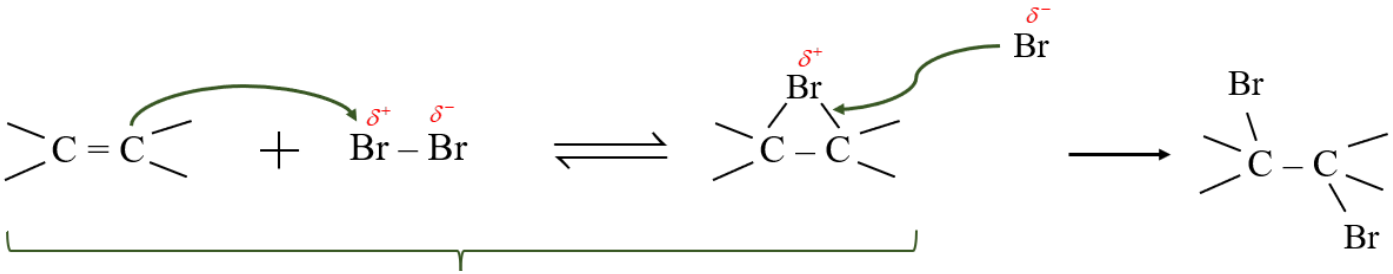
$$X^{\bullet} + X^{\bullet} \rightarrow X - X$$

$$R^{\bullet} + X^{\bullet} \rightarrow R - X$$

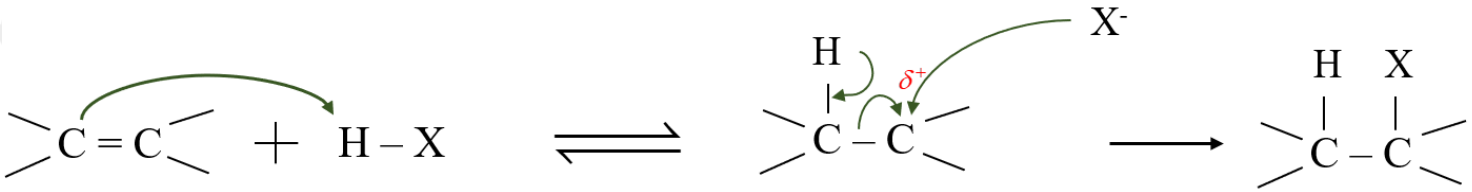
$$R^{\bullet} + R^{\bullet} \rightarrow R - R$$

2 Cơ chế cộng electronphile A_E

Tác nhân đối xứng: halogen, hydrgen



Tác nhân bất đối xứng: nước, hydrogen halide



Tại sao lại có sản phẩm chính, sản phẩm phụ?

Do gốc cation của C bậc cao bền vững hơn. Nếu xét về biến thiên enthalpy thì C bậc càng càng cao có biến thiên enthalpy càng cao

⟶ Năng lượng C bậc II > Năng lượng C bậc I

