

# Tổng quan về cấu tạo Ankadien

Ankadien là một phần quan trọng trong chương trình Hóa học hữu cơ lớp 11, là nền tảng cho nhiều phản ứng hóa học đặc trưng. Hiểu rõ cấu tạo của ankadien giúp học sinh dễ dàng dự đoán tính chất hóa học và giải thích các cơ chế phản ứng. Tài liệu này sẽ hệ thống hóa toàn bộ kiến thức về cấu tạo của ankadien.

## 1. Định nghĩa và Công thức chung

### a. Định nghĩa

Ankadien là những hidrocacbon không no, mạch hở, trong phân tử có chứa **hai liên kết đôi C=C**.

- **Ví dụ 1:** Propadien ( $C_3H_4$ ) có công thức cấu tạo là  $CH_2=C=CH_2$ .
- **Ví dụ 2:** Buta-1,3-dien ( $C_4H_6$ ) có công thức cấu tạo là  $CH_2=CH-CH=CH_2$ .

### b. Công thức chung

Công thức phân tử chung của ankadien là:

**$C_nH_{2n-2}$  (với  $n \geq 3$ )**

**Giải thích:** Công thức này xuất phát từ công thức của ankan ( $C_nH_{2n+2}$ ). Khi tạo một liên kết đôi, phân tử mất đi 2 nguyên tử hydro. Do đó, với hai liên kết đôi, phân tử sẽ mất đi 4 nguyên tử hydro, dẫn đến công thức là  $C_nH_{2n+2-4} = C_nH_{2n-2}$ . Điều kiện  $n \geq 3$  vì cần ít nhất 3 nguyên tử carbon để tạo thành một phân tử có hai liên kết đôi.

- **Ví dụ 1:** Với  $n = 3$ , ta có  $C_3H(2 \cdot 3 - 2) = C_3H_4$  (Propadien).
- **Ví dụ 2:** Với  $n = 4$ , ta có  $C_4H(2 \cdot 4 - 2) = C_4H_6$  (Butadien).
- **Ví dụ 3:** Với  $n = 5$ , ta có  $C_5H(2 \cdot 5 - 2) = C_5H_8$  (Pentadien).

## 2. Phân loại Ankadien

Dựa vào vị trí tương đối của hai liên kết đôi trong phân tử, ankadien được chia thành ba loại chính:

### a. Ankadien liên hợp

Là ankadien có hai liên kết đôi  $C=C$  được ngăn cách bởi **một liên kết đơn C-C**.

**Cấu trúc đặc trưng:**  $\dots-CH=CH-CH=CH-\dots$

**Giải thích:** Trong ankadien liên hợp, các orbital p của 4 nguyên tử carbon tham gia liên kết đôi xen phủ với nhau tạo thành một hệ liên kết  $\pi$  chung (hệ liên hợp), làm cho loại ankadien này bền vững và có nhiều tính chất hóa học đặc trưng (như phản ứng cộng 1,4).

- **Ví dụ 1:** Buta-1,3-dien:  **$CH_2=CH-CH=CH_2$** . Đây là ankadien liên hợp quan trọng và phổ biến nhất.
- **Ví dụ 2:** Isopren (2-metylbuta-1,3-dien):  **$CH_2=C(CH_3)-CH=CH_2$** . Đây là monome của cao su thiên nhiên.

### b. Ankadien không liên hợp (Ankadien riêng rẽ)

Là ankadien có hai liên kết đôi  $C=C$  được ngăn cách bởi **hai hay nhiều liên kết đơn C-C**.

**Cấu trúc đặc trưng:**  $\dots-CH=CH-(CH_2)_n-CH=CH-\dots$  (với  $n \geq 1$ )

**Giải thích:** Trong ankadien không liên hợp, hai liên kết đôi hoạt động độc lập với nhau. Tính chất hóa học của chúng tương tự như anken thông thường.

- **Ví dụ 1:** Penta-1,4-dien: **CH<sub>2</sub>=CH-CH<sub>2</sub>-CH=CH<sub>2</sub>** (hai liên kết đôi cách nhau bởi một nhóm -CH<sub>2</sub>-).
- **Ví dụ 2:** Hexa-1,5-dien: **CH<sub>2</sub>=CH-CH<sub>2</sub>-CH<sub>2</sub>-CH=CH<sub>2</sub>** (hai liên kết đôi cách nhau bởi hai nhóm -CH<sub>2</sub>-).

### c. Ankadien liên kề (Allen)

Là ankadien có hai liên kết đôi C=C ở **liên kề nhau**.

**Cấu trúc đặc trưng:** ...=C=C=...

**Giải thích:** Nhóm C=C=C được gọi là nhóm allen. Nguyên tử carbon ở giữa có trạng thái lai hóa sp, trong khi hai nguyên tử carbon hai bên lai hóa sp<sup>2</sup>. Cấu trúc này kém bền hơn so với hai loại trên.

- **Ví dụ 1:** Propadien (tên thông thường là Allen): **CH<sub>2</sub>=C=CH<sub>2</sub>**.
- **Ví dụ 2:** Buta-1,2-dien: **CH<sub>2</sub>=C=CH-CH<sub>3</sub>**.

## Bảng so sánh các loại Ankadien

Tiêu chí	Ankadien liên hợp	Ankadien không liên hợp	Ankadien liên kề
Vị trí liên kết đôi	Cách nhau 1 liên kết đơn	Cách nhau $\geq 2$ liên kết đơn	Ở liền kề nhau
Cấu trúc đặc trưng	$C=C-C=C$	$C=C-(C)_n-C=C$ ( $n \geq 1$ )	$C=C=C$
Ví dụ	Buta-1,3-dien	Penta-1,4-dien	Propadien (Allen)
Đặc điểm	Bền, có hệ liên kết $\pi$ liên hợp	Tính chất giống anken	Kém bền

### 3. Đồng phân và Danh pháp

#### a. Đồng phân

Ankadien có các loại đồng phân sau:

- Đồng phân cấu tạo:** Bao gồm đồng phân về mạch carbon (mạch thẳng, mạch nhánh) và đồng phân về vị trí của hai liên kết đôi.
- Đồng phân hình học (cis-trans):** Xảy ra khi mỗi nguyên tử carbon ở liên kết đôi liên kết với hai nguyên tử hoặc nhóm nguyên tử khác nhau. Ankadien liên hợp thường có đồng phân hình học.

**Ví dụ: Viết các đồng phân cấu tạo mạch hở của ankadien  $C_5H_8$ .**

- **Mạch thẳng:**

- Penta-1,3-dien:  $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}=\text{CH}-\text{CH}_3$  (loại liên hợp, có đồng phân hình học)
- Penta-1,4-dien:  $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}_2-\text{CH}=\text{CH}_2$  (loại không liên hợp)
- Penta-1,2-dien:  $\text{CH}_2=\text{C}=\text{CH}-\text{CH}_2-\text{CH}_3$  (loại liên kề)
- Penta-2,3-dien:  $\text{CH}_3-\text{CH}=\text{C}=\text{CH}-\text{CH}_3$  (loại liên kề)

- **Mạch nhánh:**

- 2-Metylbuta-1,3-dien (Isopren):  $\text{CH}_2=\text{C}(\text{CH}_3)-\text{CH}=\text{CH}_2$  (loại liên hợp)
- 3-Metylbuta-1,2-dien:  $\text{CH}_2=\text{C}=\text{C}(\text{CH}_3)_2$  (loại liên kề)

## b. Danh pháp (Theo IUPAC)

Quy tắc gọi tên ankadien tương tự anken nhưng có một số điểm khác biệt:

- **Bước 1:** Chọn mạch carbon chính là mạch dài nhất có chứa cả hai liên kết đôi.
- **Bước 2:** Đánh số thứ tự các nguyên tử carbon trên mạch chính bắt đầu từ phía gần liên kết đôi hơn, sao cho tổng chỉ số vị trí các liên kết đôi là nhỏ nhất.
- **Bước 3:** Gọi tên theo cấu trúc: **(Số chỉ vị trí nhánh)-(Tên nhánh) + (Tên mạch chính với đuôi -a) - (Số chỉ vị trí các liên kết đôi) - dien.**

*Lưu ý: Thêm đuôi "a" vào sau tên của ankan tương ứng với mạch chính (ví dụ: butan → buta, pentan → penta).*

## Ví dụ minh họa:

### 1. $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}=\text{CH}_2$

- Mạch chính có 4C → Butan → Buta
- Liên kết đôi ở vị trí 1 và 3.
- Tên gọi: **Buta-1,3-đien**

### 2. $\text{CH}_2=\text{C}(\text{CH}_3)-\text{CH}=\text{CH}_2$

- Mạch chính có 4C chứa 2 liên kết đôi → Buta
- Đánh số từ trái qua phải hoặc phải qua trái đều cho vị trí nối đôi là 1 và 3. Ưu tiên đánh số sao cho vị trí nhánh là nhỏ nhất (đánh từ phải qua trái).
- Nhánh metyl ở vị trí số 2.
- Tên gọi: **2-Metylbuta-1,3-đien** (Tên thường: Isopren)

### 3. $\text{CH}_3-\text{CH}=\text{CH}-\text{CH}=\text{CH}-\text{CH}_3$

- Mạch chính có 6C → Hexan → Hexa
- Liên kết đôi ở vị trí 2 và 4.
- Tên gọi: **Hexa-2,4-đien** (chất này có đồng phân hình học cis-trans)

## 4. Đặc điểm cấu trúc của Buta-1,3-đien

Buta-1,3-dien là ankadien liên hợp tiêu biểu và có nhiều ứng dụng quan trọng.

Cấu trúc không gian của nó giải thích cho các tính chất hóa học đặc trưng.

## a. Trạng thái lai hóa và cấu trúc phẳng

- Tất cả 4 nguyên tử carbon trong phân tử buta-1,3-đien đều ở trạng thái **lai hóa  $sp^2$** .
- Các obitan lai hóa  $sp^2$  tạo thành các liên kết  $\sigma$  (C-C và C-H). Toàn bộ 4 nguyên tử C và 6 nguyên tử H cùng nằm trên một mặt phẳng (hoặc gần phẳng).
- Các góc liên kết CCC và HCH xấp xỉ  **$120^\circ$** .

## b. Hệ liên kết $\pi$ liên hợp

- Mỗi nguyên tử carbon  $sp^2$  còn một obitan p không lai hóa, chứa một electron. Các obitan p này song song và vuông góc với mặt phẳng phân tử.
- 4 obitan p này không chỉ xen phủ từng đôi một (giữa C1-C2 và C3-C4) mà xen phủ với nhau trên toàn bộ 4 nguyên tử carbon, tạo thành một **hệ liên kết  $\pi$  liên hợp chung**.
- **Hệ quả:**
  - Các electron  $\pi$  được giải tỏa đều trên cả 4 nguyên tử C, làm cho phân tử bền hơn.
  - Liên kết đơn C2-C3 có một phần tính chất của liên kết đôi, làm cho nó ngắn hơn (1,48 Å) so với liên kết đơn C-C thông thường (1,54 Å).
  - Liên kết đôi C1=C2 và C3=C4 lại dài hơn một chút (1,34 Å) so với liên kết đôi C=C thông thường trong anken (1,33 Å).

### c. Các dạng cấuformation (s-trans và s-cis)

Do sự quay tương đối tự do quanh trục liên kết đơn C2-C3, phân tử buta-1,3-đien tồn tại chủ yếu ở hai dạng cấu trúc bên:

- **Dạng s-trans:** Hai liên kết đôi nằm ở hai phía khác nhau của liên kết đơn C2-C3. Dạng này bền hơn do giảm được sức căng không gian (tương tác đẩy giữa các nguyên tử). Ở điều kiện thường, khoảng 98% phân tử buta-1,3-đien tồn tại ở dạng này.
- **Dạng s-cis:** Hai liên kết đôi nằm cùng một phía so với liên kết đơn C2-C3. Dạng này kém bền hơn nhưng là cấu dạng cần thiết để tham gia một số phản ứng đặc trưng như phản ứng Diels-Alder.

Sự chuyển đổi giữa hai dạng này có thể xảy ra khi cung cấp năng lượng.