

I. Giới thiệu chung về Benzen và Toluen

1. Benzen (C_6H_6)

Công thức phân tử: C_6H_6

Cấu trúc: Benzen có cấu trúc vòng 6 cạnh đều, phẳng. Sáu nguyên tử cacbon và sáu nguyên tử hydro cùng nằm trên một mặt phẳng. Trong vòng benzen, có hệ liên kết π liên hợp chung cho cả 6 nguyên tử cacbon, làm cho vòng benzen rất bền vững.

Tính chất đặc trưng: Do cấu trúc bền vững, benzen thể hiện tính chất hóa học đặc trưng là **dễ tham gia phản ứng thế, khó tham gia phản ứng cộng và bền với các chất oxi hóa.**

2. Toluen (C_7H_8 hay $C_6H_5-CH_3$)

Công thức phân tử: C_7H_8

Cấu trúc: Toluen có cấu trúc gồm một vòng benzen liên kết với một nhóm methyl ($-CH_3$). Nhóm methyl là nhóm đẩy electron, làm tăng mật độ electron trong vòng benzen, đặc biệt là ở các vị trí ortho (vị trí 2, 6) và para (vị trí 4).

Tính chất đặc trưng: Do ảnh hưởng của nhóm $-CH_3$, toluen tham gia phản ứng thế ở vòng benzen **dễ dàng hơn benzen** và ưu tiên thế vào vị trí ortho, para. Ngoài ra, toluen còn có phản ứng ở mạch nhánh (nhóm $-CH_3$).

II. Phản ứng hóa học đặc trưng của Benzen

1. Phản ứng thế (Phản ứng đặc trưng nhất)

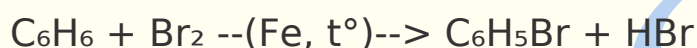
Đây là loại phản ứng thay thế nguyên tử H của vòng benzen bằng các nhóm thế khác.

a. Halogen hóa (tác dụng với brom, clo)

Điều kiện: Cần có xúc tác là bột sắt (Fe) hoặc muối halogenua tương ứng (ví dụ: AlCl_3 , FeCl_3) và đun nóng.

Giải thích: Xúc tác Fe giúp phân cực phân tử halogen (Br_2 , Cl_2), tạo ra tác nhân electrophin mạnh (Br^+ , Cl^+) tấn công vào vòng benzen. Phản ứng không xảy ra nếu không có xúc tác bột sắt.

Ví dụ 1: Tác dụng với brom khan (xúc tác Fe, t°)



Sản phẩm tạo thành là brombenzen và khí hiđro bromua.

Ví dụ 2: Tác dụng với clo khan (xúc tác Fe, t°)



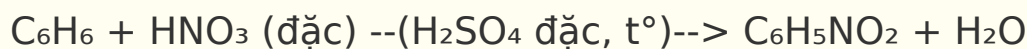
Sản phẩm tạo thành là clobenzen và khí hiđro clorua.

b. Nitro hóa (tác dụng với axit nitric đặc)

Điều kiện: Hỗn hợp axit gồm HNO_3 đặc và H_2SO_4 đặc, đun nóng (khoảng 50-60°C).

Giải thích: H_2SO_4 đặc có vai trò hút nước và tạo ra tác nhân nitro hóa là ion nitroni (NO_2^+). Ion này sẽ tấn công vào vòng benzen để thế nguyên tử H.

Ví dụ:



Sản phẩm là nitrobenzen (chất lỏng màu vàng nhạt, mùi hạnh nhân).

Nếu tiếp tục nitro hóa trong điều kiện khắc nghiệt hơn, có thể thu được dinitrobenzen.

2. Phản ứng cộng

Phản ứng cộng phá vỡ cấu trúc vòng thơm bền vững nên xảy ra ở điều kiện khó khăn hơn (nhiệt độ, áp suất cao hoặc chiếu sáng).

a. Cộng hiđro (Hiđro hóa)

Điều kiện: Xúc tác Niken (Ni) hoặc Platin (Pt), nhiệt độ và áp suất cao.

Giải thích: Ba liên kết đôi trong vòng benzen bị phá vỡ và cộng 3 phân tử H_2 để tạo thành vòng no.

Ví dụ:



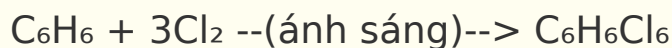
Sản phẩm là xiclohexan.

b. Cộng clo

Điều kiện: Chiếu sáng bằng ánh sáng tử ngoại (UV) hoặc ánh sáng khuếch tán, không có xúc tác bột sắt.

Giải thích: Dưới tác dụng của ánh sáng, 3 phân tử Cl_2 cộng vào vòng benzen.

Ví dụ:



Sản phẩm là hexacloran (thuốc trừ sâu 666), một chất độc.

3. Phản ứng oxi hóa

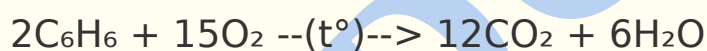
a. Oxi hóa không hoàn toàn

Kết luận: Benzen rất bền với các chất oxi hóa. Nó **không làm mất màu** dung dịch thuốc tím (KMnO_4) ở điều kiện thường cũng như khi đun nóng. Đây là một tính chất quan trọng để phân biệt benzen với các hidrocarbon không no khác và với đồng đẳng của nó như toluen.

b. Oxi hóa hoàn toàn (Phản ứng cháy)

Khi bị đốt cháy, benzen cháy trong không khí tạo ra CO_2 và H_2O , tỏa nhiều nhiệt và có nhiều khói đen (muội than) do hàm lượng cacbon cao.

Phương trình tổng quát:



III. Phản ứng hóa học đặc trưng của Toluene

Do ảnh hưởng của nhóm methyl ($-\text{CH}_3$), toluen có hai trung tâm phản ứng: vòng benzen và mạch nhánh.

1. Phản ứng thế

a. Thế ở vòng benzen (dễ hơn benzen)

Quy tắc thế: Nhóm $-\text{CH}_3$ là nhóm đẩy electron, làm hoạt hóa vòng benzen và định hướng phản ứng thế vào các vị trí **ortho (o-)** và **para (p-)**.

Ví dụ 1: Tác dụng với Brom (xúc tác bột Fe, t°)

Phản ứng xảy ra dễ dàng hơn benzen, không cần đun nóng. Sản phẩm chính là hỗn hợp o-bromtoluen và p-bromtoluen (sản phẩm para chiếm tỉ lệ cao hơn).

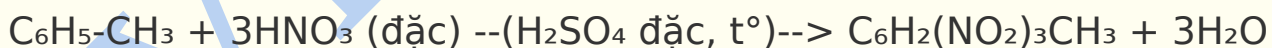
- $\text{C}_6\text{H}_5\text{-CH}_3 + \text{Br}_2 \xrightarrow{(\text{Fe}, t^\circ)} \text{o-Br-C}_6\text{H}_4\text{-CH}_3 + \text{HBr}$ (o-bromtoluen)
- $\text{C}_6\text{H}_5\text{-CH}_3 + \text{Br}_2 \xrightarrow{(\text{Fe}, t^\circ)} \text{p-Br-C}_6\text{H}_4\text{-CH}_3 + \text{HBr}$ (p-bromtoluen)

Ví dụ 2: Tác dụng với HNO_3 đặc (xúc tác H_2SO_4 đặc)

Phản ứng cũng xảy ra dễ hơn benzen, tạo ra hỗn hợp sản phẩm thế ở vị trí ortho và para.

- $\text{C}_6\text{H}_5\text{-CH}_3 + \text{HNO}_3 \xrightarrow{(\text{H}_2\text{SO}_4 \text{ đặc})} \text{o-NO}_2\text{-C}_6\text{H}_4\text{-CH}_3 + \text{H}_2\text{O}$ (o-nitrotoluen)
- $\text{C}_6\text{H}_5\text{-CH}_3 + \text{HNO}_3 \xrightarrow{(\text{H}_2\text{SO}_4 \text{ đặc})} \text{p-NO}_2\text{-C}_6\text{H}_4\text{-CH}_3 + \text{H}_2\text{O}$ (p-nitrotoluen)

Khi phản ứng với hỗn hợp axit đậm đặc và đun nóng, cả ba vị trí ortho và para đều bị thế, tạo ra sản phẩm 2,4,6-trinitrotoluen (TNT), một loại thuốc nổ mạnh.

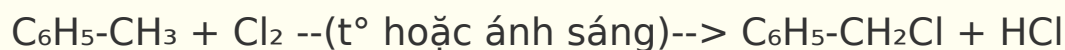


b. Thế ở mạch nhánh

Điều kiện: Phản ứng xảy ra khi đun nóng hoặc chiếu sáng, không có xúc tác bột sắt. Phản ứng xảy ra theo cơ chế gốc tự do, tương tự ankan.

Ví dụ: Tác dụng với Clo khi đun nóng hoặc chiếu sáng

Nguyên tử H của nhóm $-\text{CH}_3$ bị thế bởi clo.



Sản phẩm là benzyl clorua.

2. Phản ứng oxi hóa

a. Oxi hóa không hoàn toàn

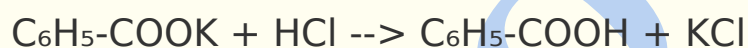
Đây là phản ứng quan trọng để phân biệt toluen và benzen.

Hiện tượng: Toluen làm mất màu dung dịch KMnO_4 khi đun nóng. Nhóm $-\text{CH}_3$ bị oxi hóa thành nhóm cacboxyl ($-\text{COOH}$).

Phương trình:



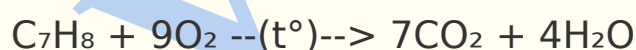
Sau đó axit hóa sản phẩm, ta thu được axit benzoic ($\text{C}_6\text{H}_5\text{-COOH}$).



b. Oxi hóa hoàn toàn (Phản ứng cháy)

Toluen cháy trong không khí tạo ra CO_2 và H_2O , cũng có nhiều khói đen.

Phương trình:



IV. Bảng tổng kết so sánh tính chất hóa học của Benzen và Toluen

Thuốc thử	Benzen (C ₆ H ₆)	Toluen (C ₇ H ₈)
Dung dịch Br ₂ (xúc tác Fe, t°)	Phản ứng xảy ra, tạo C ₆ H ₅ Br.	Phản ứng xảy ra dễ hơn, tạo hỗn hợp sản phẩm thế ở vị trí ortho và para.
Dung dịch Br ₂ (chiếu sáng)	Không phản ứng.	Không phản ứng ở vòng, nhưng nếu là Br ₂ khan có thể phản ứng thế ở nhánh.
Cl ₂ (chiếu sáng)	Phản ứng cộng tạo C ₆ H ₆ Cl ₆ .	Phản ứng thế H ở mạch nhánh tạo C ₆ H ₅ CH ₂ Cl.
HNO ₃ đặc / H ₂ SO ₄ đặc	Phản ứng xảy ra, cần đun nóng, tạo nitrobenzen.	Phản ứng xảy ra dễ hơn, tạo hỗn hợp o-nitrotoluen và p-nitrotoluen. Điều kiện khắc nghiệt tạo TNT.
Dung dịch KMnO ₄	Không phản ứng, không làm mất màu thuốc tím (kể cả khi đun nóng).	Không phản ứng ở nhiệt độ thường. Làm mất màu thuốc tím khi đun nóng.