

Tổng hợp kiến thức về Phenol và Dẫn xuất Benzen

Phần 1: Phenol

I. Định nghĩa, Phân loại và Danh pháp

1. Định nghĩa

Phenol là những hợp chất hữu cơ mà phân tử có nhóm hydroxyl (-OH) liên kết trực tiếp với nguyên tử carbon của vòng benzen.

- **Công thức chung:** Ar-OH (trong đó Ar là gốc aryl).
- **Công thức phenol đơn giản nhất:** C_6H_5OH .

Ví dụ:

- Phenol (C_6H_5OH)
- p-Cresol ($p-CH_3C_6H_4OH$)
- α -Naphthol ($C_{10}H_7OH$)

2. Phân loại

Dựa vào số lượng nhóm -OH trong phân tử, phenol được chia thành:

- **Monophenol:** Phân tử có một nhóm -OH.

Ví dụ: Phenol (C_6H_5OH), o-cresol, m-cresol, p-cresol.

- **Polyphenol:** Phân tử có nhiều nhóm -OH.

Ví dụ: Catechol (benzen-1,2-điol), Resorcinol (benzen-1,3-điol), Hydroquinone (benzen-1,4-điol).

3. Danh pháp

- **Tên thông thường:** Một số phenol có tên thông thường. Ví dụ: Phenol, Cresol, Naphthol.
- **Tên thay thế (IUPAC):** Tên của hydrocarbon thơm + vị trí nhóm -OH + "ol". Vòng benzen được đánh số sao cho nguyên tử C liên kết với nhóm -OH có chỉ số nhỏ nhất.

Ví dụ:

1. **C₆H₅OH:** Phenol
2. **CH₃-C₆H₄-OH:** 2-methylphenol (o-cresol), 3-methylphenol (m-cresol), 4-methylphenol (p-cresol)
3. **C₆H₄(OH)₂:** Benzen-1,2-điol (catechol)

II. Tính chất vật lí

- **Trạng thái:** Phenol là chất rắn, không màu, ở điều kiện thường. Để lâu trong không khí bị oxi hóa thành màu hồng.
- **Mùi:** Có mùi đặc trưng.
- **Nhiệt độ nóng chảy:** 43°C.
- **Nhiệt độ sôi:** 182°C. Nhiệt độ sôi của phenol cao hơn các alcohol có cùng số nguyên tử carbon do liên kết hydro giữa các phân tử phenol bền hơn.

- **Độ tan:** Ít tan trong nước lạnh, tan vô hạn ở nhiệt độ trên 66°C. Tan tốt trong các dung môi hữu cơ như ethanol, ether.
- **Độc tính:** Phenol rất độc, có thể gây bỏng nặng khi tiếp xúc với da.

III. Tính chất hóa học

Do ảnh hưởng qua lại giữa nhóm -OH và vòng benzen:

- Vòng benzen hút electron làm tăng sự phân cực của liên kết O-H, khiến nguyên tử H linh động hơn so với alcohol. → Phenol có tính axit.
- Nhóm -OH đẩy electron vào vòng benzen, làm tăng mật độ electron ở các vị trí ortho và para. → Phenol dễ tham gia phản ứng thế ở vòng benzen hơn benzen.

1. Tính axit yếu

Phenol có tính axit yếu, mạnh hơn alcohol nhưng yếu hơn axit cacbonic (H_2CO_3).

- **Tác dụng với kim loại kiềm (Na, K):**



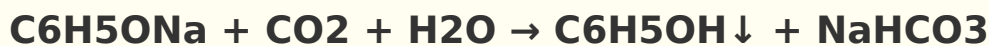
Ví dụ: Cho một mẩu natri vào ống nghiệm chứa phenol nóng chảy, thấy có khí không màu thoát ra.

- **Tác dụng với dung dịch bazơ mạnh (NaOH, KOH):**



Ví dụ: Cho dung dịch NaOH vào ống nghiệm chứa phenol, phenol tan dần tạo dung dịch trong suốt.

- **Phản ứng với CO₂ để chứng minh tính axit yếu hơn H₂CO₃:**



Ví dụ: Sục khí CO₂ vào dung dịch natri phenolat, thấy dung dịch vẩn đục do phenol không tan được tái tạo lại. Phản ứng này chứng tỏ phenol có tính axit yếu hơn axit cacbonic.

2. Phản ứng thế ở vòng benzen

Nhóm -OH làm hoạt hóa vòng benzen, ưu tiên thế vào các vị trí ortho và para.

- **Tác dụng với dung dịch Brom (Br₂):**

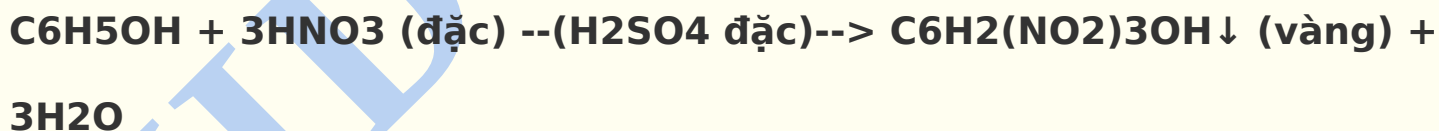
Phenol phản ứng với dung dịch brom ở nhiệt độ thường tạo ra kết tủa trắng của 2,4,6-tribromophenol. Đây là phản ứng dùng để nhận biết phenol.



Ví dụ: Nhỏ vài giọt dung dịch brom vào ống nghiệm chứa dung dịch phenol, xuất hiện ngay lập tức kết tủa trắng.

- **Tác dụng với axit nitric (HNO₃):**

Phenol phản ứng với dung dịch HNO₃ đặc (xúc tác H₂SO₄ đặc) tạo ra kết tủa vàng của 2,4,6-trinitrophenol (axit picric), một chất nổ mạnh.



Ví dụ: Thêm từ từ HNO₃ đặc vào phenol có mặt H₂SO₄ đặc, đun nóng nhẹ, thu được kết tủa màu vàng.

IV. Điều chế và Ứng dụng

1. Điều chế

- **Trong công nghiệp (Phương pháp cumen):** Đây là phương pháp chính hiện nay. Oxi hóa cumen (isopropylbenzen) thu được cumen hidropexit, sau đó thủy phân trong môi trường axit thu được phenol và axeton.



- **Từ nhựa than đá:** Chưng cất phân đoạn nhựa than đá thu được phenol.

2. Ứng dụng

- Sản xuất nhựa phenol-formaldehyt (nhựa bakelit) dùng làm đồ điện, đồ gia dụng.
- Sản xuất tơ poliamit (nilon-6,6).
- Điều chế thuốc nổ (axit picric).
- Điều chế dược phẩm (aspirin).
- Dùng làm chất diệt khuẩn, tẩy uế.

Phần 2: Một số dẫn xuất của Benzen

V. Dẫn xuất Halogen

1. Cấu trúc và Danh pháp

Là hợp chất thu được khi thay thế một hoặc nhiều nguyên tử H trong vòng benzen bằng nguyên tử halogen (F, Cl, Br, I).

- **Công thức:** $\text{C}_6\text{H}_5\text{Cl}$ (Chlorobenzene), $\text{C}_6\text{H}_5\text{Br}$ (Bromobenzene).

- **Danh pháp:** Tên halogen + "benzene".

Ví dụ: Chlorobenzene, 1,2-dibromobenzene (o-dibromobenzene).

2. Tính chất hóa học

Nguyên tử halogen có hiệu ứng -I (hút electron) mạnh hơn +C (đẩy electron), làm cho vòng benzen bị giảm hoạt hóa nhưng vẫn định hướng thế vào vị trí ortho, para.

- **Phản ứng thế ở vòng benzen:** Khó hơn so với benzen, cần điều kiện khắc nghiệt hơn.

Ví dụ: Nitro hóa chlorobenzene cần HNO₃ đặc và H₂SO₄ đặc, đun nóng, tạo ra hỗn hợp sản phẩm o-chloronitrobenzene và p-chloronitrobenzene (sản phẩm para là chính).

- **Phản ứng của nguyên tử halogen:** Liên kết C-Halogen rất bền vững, khó bị thay thế hơn so với dẫn xuất halogen của ankan.



Phản ứng này chỉ xảy ra ở nhiệt độ và áp suất rất cao.

VI. Dẫn xuất Nitro

1. Cấu trúc và Danh pháp

Là hợp chất thu được khi thay thế nguyên tử H trong vòng benzen bằng nhóm nitro (-NO₂).

- **Công thức:** C₆H₅NO₂ (Nitrobenzene).

- **Danh pháp:** "Nitro" + tên hydrocarbon.

Ví dụ: Nitrobenzene, 1,3-dinitrobenzene (m-dinitrobenzene).

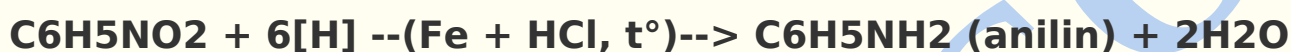
2. Tính chất hóa học

Nhóm -NO₂ là nhóm hút electron mạnh, làm giảm hoạt hóa vòng benzen và định hướng thế vào vị trí meta.

- **Phản ứng thế ở vòng benzen:** Rất khó khăn, cần điều kiện khắc nghiệt.

Ví dụ: Brom hóa nitrobenzene cần Br₂ khan, bột Fe và nhiệt độ cao, tạo sản phẩm chính là m-bromonitrobenzene.

- **Phản ứng khử nhóm nitro:** Nhóm nitro dễ bị khử thành nhóm amino (-NH₂).



Phản ứng này là phương pháp quan trọng để điều chế anilin.

VII. Ankylbenzen (Arene)

1. Cấu trúc và Danh pháp

Là hợp chất có gốc ankyl liên kết với vòng benzen.

- **Công thức:** C₆H₅CH₃ (Toluene), C₆H₅C₂H₅ (Ethylbenzene).

- **Danh pháp:** Tên gốc ankyl + "benzene".

Ví dụ: Toluene (methylbenzene), Ethylbenzene, 1,2-dimethylbenzene (o-xylene).

2. Tính chất hóa học

Nhóm ankyl là nhóm đẩy electron, làm hoạt hóa vòng benzen và định hướng thế vào vị trí ortho, para. Ngoài ra, mạch nhánh ankyl cũng có thể tham gia phản ứng.

- **a. Phản ứng thế ở vòng benzen:** Dễ hơn so với benzen.

Ví dụ 1: Brom hóa toluene (xúc tác bột Fe) tạo hỗn hợp sản phẩm o-bromotoluene và p-bromotoluene.



Ví dụ 2: Nitro hóa toluene tạo hỗn hợp o-nitrotoluene và p-nitrotoluene. Nếu dùng dư $\text{HNO}_3/\text{H}_2\text{SO}_4$ đặc, có thể tạo 2,4,6-trinitrotoluene (TNT).

- **b. Phản ứng ở mạch nhánh:**

Phản ứng thế (điều kiện ánh sáng hoặc nhiệt độ cao):



Phản ứng oxi hóa: Ankybenzen bị oxi hóa bởi các tác nhân mạnh như KMnO_4 , trong khi benzen thì không.



Sau đó axit hóa để thu được axit benzoic ($\text{C}_6\text{H}_5\text{COOH}$). Phản ứng này dùng để phân biệt ankybenzen và benzen.

Phần 3: Bảng so sánh khả năng phản ứng thế

Hợp chất	Tác nhân	Điều kiện	Sản phẩm chính	Nhận xét
Benzen (C6H6)	Br2 (lỏng)	Bột Fe, t°	Bromobenzene	Phản ứng thế khó.
Phenol (C6H5OH)	Dung dịch Br2	Nhiệt độ thường	2,4,6-tribromophenol (↓ trắng)	Phản ứng rất dễ dàng.
Toluene (C6H5CH3)	Br2 (lỏng)	Bột Fe, t°	o-bromotoluene, p-bromotoluene	Phản ứng dễ hơn benzen.
Benzen (C6H6)	HNO3 đặc	H2SO4 đặc, t°	Nitrobenzene	Phản ứng thế khó.
Phenol (C6H5OH)	HNO3 đặc	H2SO4 đặc, t°	2,4,6-trinitrophenol (↓ vàng)	Phản ứng rất dễ dàng.
Toluene (C6H5CH3)	HNO3 đặc	H2SO4 đặc, t°	o-nitrotoluene, p-nitrotoluene	Phản ứng dễ hơn benzen.