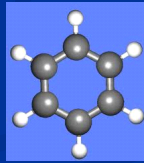


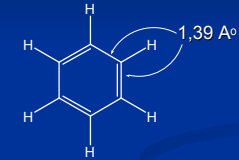
D – HIDROCARBON THƠM

- Hidrocarbon thơm là những HDRCB mạch vòng có một đặc tính gọi là *tính thơm*.
- *Benzen* là một HDRCB thơm quan trọng nhất vì nó là hợp chất gốc của tất cả các HDRCB thơm có vòng *benzen*.

I- CẤU TẠO CỦA BENZEN:



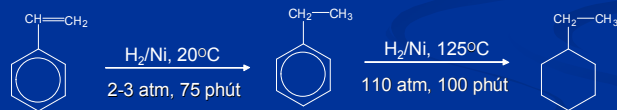
- ❖ Độ dài các liên kết trong benzen đều bằng nhau và bằng $1,39\text{Å}$, dài hơn 1 liên kết đôi C=C ($1,33\text{Å}$) nhưng lại ngắn hơn 1 liên kết đơn C-C ($1,54\text{Å}$).



- ❖ Với CTPT C_6H_6 , năm 1865 Kekule cho rằng benzen có cấu tạo của một xiclohexatrien:

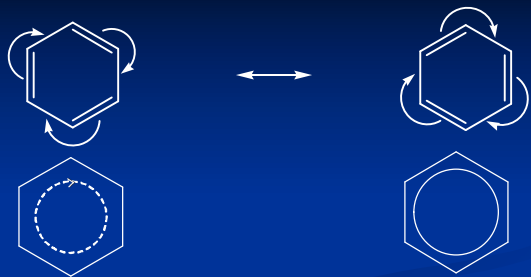


Tuy nhiên về mặt hoạt độ hóa học benzen không thể hiện tính không no ở mức độ cao như có thể dự đoán cho một cấu trúc xiclohexatrien:



- ❖ Ngày nay người ta biết rằng các orbital p trong vòng benzen xen phủ liên tục với nhau tạo thành hệ electron π liên hợp kín giải tỏa trên toàn bộ vòng benzen:

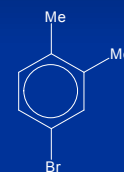




❖ **Vậy:**

Các hệ thống có một hệ electron π liên hợp tạo thành vòng kín, tương đối bền vững, có khuynh hướng dễ tham gia vào các phản ứng thế, khó tham gia vào các phản ứng cộng được gọi là các hệ thống thơm hay có **tính thơm**

- Nếu trên nhân thơm chứa nhiều nhóm thế thì phải đánh số (theo quy tắc) :



4-Brom-1,2-dimetylbenzen



2-Clo-1,4-dinitrobenzen

II. TÊN GỌI :

1. Tên quốc tế :

- Nếu trên nhân thơm chỉ chứa nhóm thế như : anky, halogen, NO_2 , ...



Etylbenzen



n-Propylbenzen



t-Butylbenzen



Nitrobenzen



Brombenzen

- Tuy nhiên nếu trên nhân thơm chứa nhóm định chức hóa học thì mạch chính lúc này (bao gồm benzen và nhóm định chức đó) sẽ có tên riêng và nhóm định chức đương nhiên đánh số 1.



Acid benzoic



Acid benzensulfonic



Benzandehit



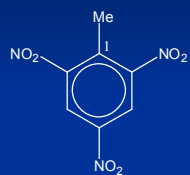
Phenol



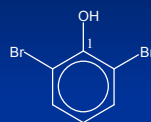
Anilin



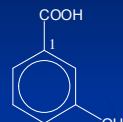
Toluen



2,4,6-Trinitrotoluen

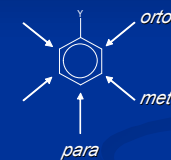


2,6-Dibromophenol



Acid 3-hidroxi benzoic

- Ngoài cách đánh số để chỉ vị trí 2 nhóm thế trên nhân thơm với nhau người ta còn dùng các tiếp đầu ngữ : *orto*, *meta*, *para* viết tắt *o-*, *m-*, *p-* (cử xử như số).



o-Diclobenzen



m-Bromtoluen



p-Clobenzandehit

2. Tên thông thường :



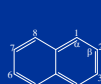
Toluen



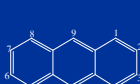
o,m,p-Xilen



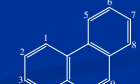
Biphenyl



Naptalen



Antrancen



Phenantren



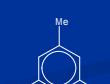
Stiren



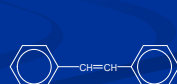
Cumen



o,m,p-Cimen

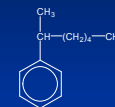


Mestilen



Stilben

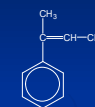
- Trong một số trường hợp gọi tên aren gặp khó khăn, có thể xem nhân thơm làm nhóm thế.



2-Phenylheptan



Phenylacetilen



2-Phenylbuten-2

II. Tính chất vật lý :

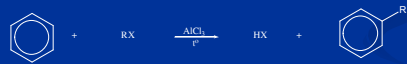
- Đa số là chất lỏng trừ các hợp chất đa nhân là chất rắn.
- Đồng phân *para* thường có điểm chảy cao hơn và độ tan kém hơn đồng phân *orto*, *meta*.

III. Điều chế :

1. Phản ứng Wurtz - Fittig :



2. Phản ứng anky hóa Friedel - Craft :



3. Phản ứng anky hóa Friedel - Craft :

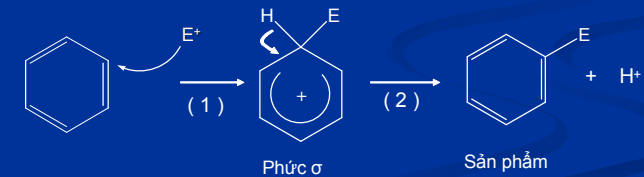


❑ Phản ứng thế ái điện tử (thân điện tử):

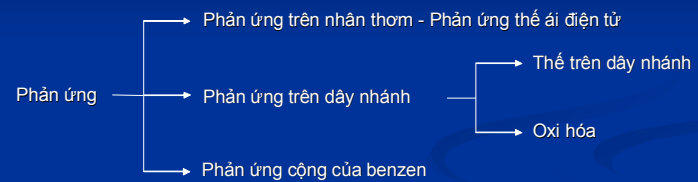
Cơ chế: 2 bước

➤ Bước chậm: Tác nhân ái điện tử E^+ tấn công (1)

➤ Bước nhanh: Loại proton để hình thành sản phẩm (2)



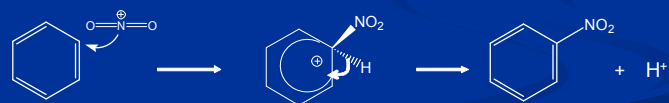
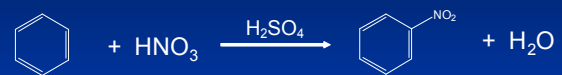
IV. Tính chất hóa học :



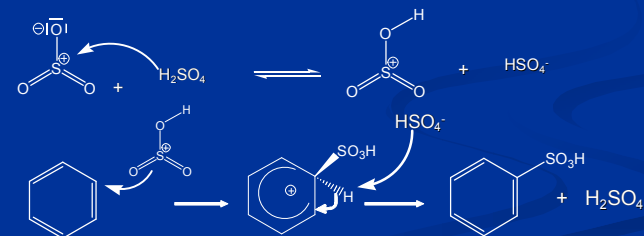
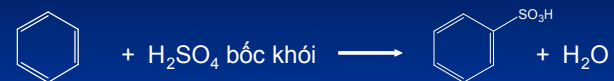
Có 5 loại phản ứng thế ái điện tử vào vòng benzen, bao gồm:

- ❑ Phản ứng nitro hóa
- ❑ Phản ứng sunfon hóa
- ❑ Phản ứng halogen hóa
- ❑ Phản ứng anky hóa
- ❑ Phản ứng axyl hóa

1. Phản ứng nitro hóa :



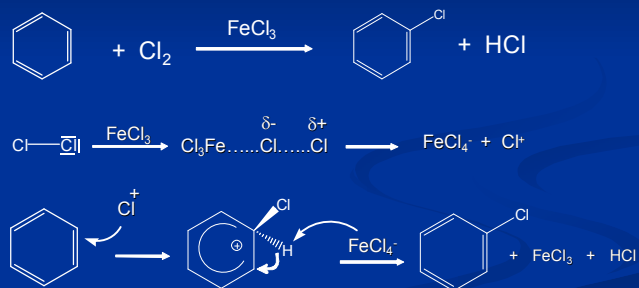
2. Phản ứng sulfon hóa :



Phản ứng Nitro hóa

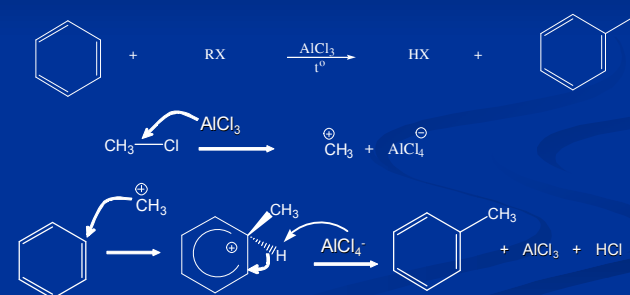
Phản ứng sulfon hóa

3. Phản ứng halogen hóa : Pư với halogen xúc tác axit Lewis: AlCl_3 , FeCl_3 (hoặc Fe)



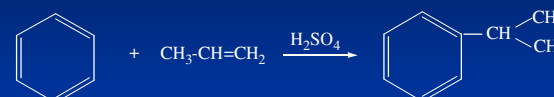
4. Phản ứng anky hóa Fridel-Crafts :

❖ Tác nhân: anky halogenua RX , xúc tác AlCl_3



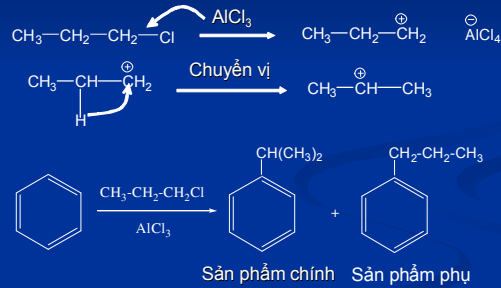
Phản ứng Halogen hóa

❖ Tác nhân anky hóa, ngoài anky halogenua RX có thể dùng ancol, anken với xúc tác H_2SO_4 :



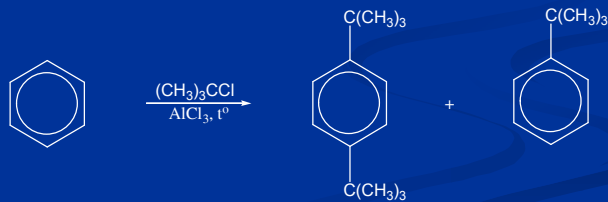
❖ Phản ứng anky hóa không xảy ra khi trên vòng benzen có các nhóm hút electron mạnh: $-\text{NO}_2$, $-\text{COOH}$, $-\text{COOR}$, $-\text{CHO}$, SO_3H ...

❖ Tác nhân ái điện tử trong phản ứng anky hóa là carbocation R⁺ nên đôi khi có chuyển vị từ bậc I sang bậc cao hơn bền hơn dẫn tới hình thành hỗn hợp sản phẩm:

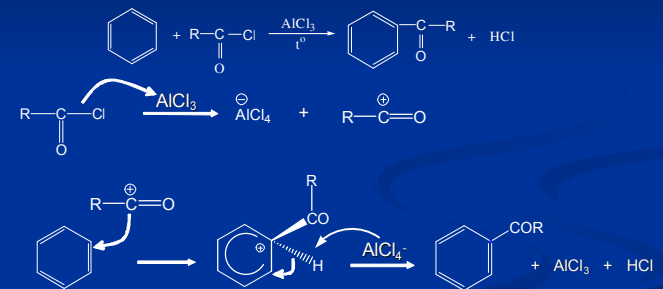


Phản ứng Alkyl hóa

❖ Phản ứng anky hóa rất khó dừng ở đơn anky hóa vì nhóm anky là nhóm tăng hoạt nhân thơm làm cho nhân thơm có thể nhận thêm nhiều nhóm anky nữa dẫn đến sự đa anky hóa. Để tránh sự đa anky hóa người ta thường sử dụng lượng thừa benzen.



5. Phản ứng axyl hóa Friedel-Crafts :

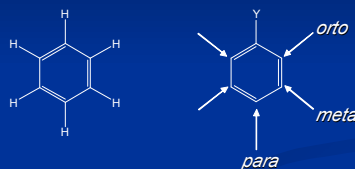


Phản ứng Acyl hóa

Tùy vào bản chất của các nhóm thế, người ta chia chúng thành 3 loại:

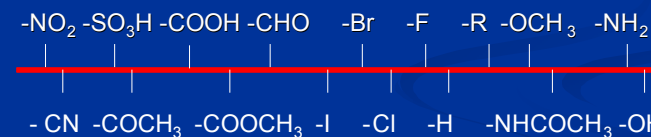
- ❖ Các nhóm đẩy electron: Nhóm tăng hoạt, định hướng o-, p-. Thuộc vào loại này gồm có: -OH, -OR, -NH₂, -NHR, -NR₂, -NHCOR, các gốc anky.
- ❖ Các nhóm hút electron: Nhóm hạ hoạt, định hướng m-. Thuộc vào loại này gồm có: -NO₂, -COOH, -COOR, -CHO, COR, -SO₃H.
- ❖ Riêng các halogen: Hạ hoạt, định hướng o-, p-.

❖ Quy tắc định hướng trên nhân thơm



- ❑ Khi trong vòng benzen có sẵn 1 nhóm thế, nó sẽ ảnh hưởng đến các phản ứng tiếp theo trên 2 phương diện:
 - Khả năng phản ứng (dễ hay khó hơn), và
 - Vị trí của nhóm vào sau (sự định hướng)

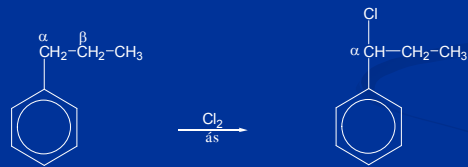
- ❑ Khi trong vòng benzen có sẵn 2 nhóm thế, 1 tăng hoạt, 1 hạ hoạt thì vị trí của nhóm thứ 3 được quyết định bởi nhóm tăng hoạt; còn nếu 2 nhóm đều tăng hoạt thì vị trí nhóm thứ 3 được quyết định bởi nhóm tăng hoạt mạnh hơn.
- ❑ Chiều tăng mức độ phản ứng của các nhóm thế như sau:



☐ Phản ứng trên dây nhánh :

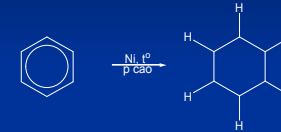
6. Phản ứng halogen hóa :

📌 Đặc điểm : phản ứng thế tại H α

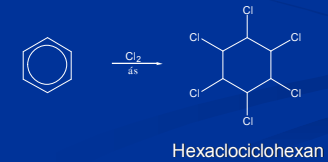


☐ Phản ứng cộng của benzen (tự đọc) :

8. Phản ứng cộng H $_2$:



9. Phản ứng cộng Cl $_2$:



7. Phản ứng oxi hóa (KMnO $_4$ đđ) :

📌 Đặc điểm : oxi hóa (cắt đứt mạch) tại tất cả C α

