

CHUYÊN ĐỀ PHƯƠNG PHÁP QUY ĐỔI GIẢI BÀI TOÁN HỖN HỢP ESTE CỦA PHENOL VÀ ESTE THƯỜNG

Phương pháp quy đổi là một công cụ tư duy mạnh mẽ trong giải toán Hóa học, đặc biệt hiệu quả với các bài toán hỗn hợp phức tạp. Chuyên đề này sẽ hệ thống hóa kiến thức và hướng dẫn áp dụng phương pháp quy đổi để xử lý dạng bài hỗn hợp este của phenol và este của ancol (este thường).

I. Kiến thức nền tảng cần nắm vững

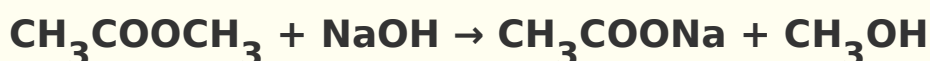
1. Este thường (Este của Ancol)

- **Công thức tổng quát:** RCOOR' (với R' là gốc hidrocacbon, không phải gốc phenyl C_6H_5 - gắn trực tiếp vào nhóm $-\text{COO}-$).
- **Phản ứng đặc trưng (Thủy phân trong môi trường kiềm):** Phản ứng chỉ tiêu tốn 1 phân tử NaOH , tạo ra muối và ancol tương ứng. Tỷ lệ mol este : NaOH là 1:1.



- **Ví dụ:**

Metyl axetat ($\text{CH}_3\text{COOCH}_3$) tác dụng với NaOH :



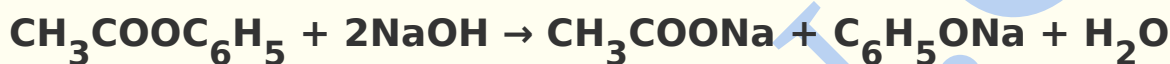
2. Este của Phenol

- **Công thức tổng quát:** $\text{RCOOC}_6\text{H}_4\text{R}'$ (nhóm $-\text{COO}-$ gắn trực tiếp vào vòng benzen).
- **Phản ứng đặc trưng (Thủy phân trong môi trường kiềm):** Phản ứng tiêu tốn 2 phân tử NaOH . Một NaOH thủy phân este tạo ra muối và phenol. Phenol sinh ra có tính axit yếu nên tiếp tục tác dụng với NaOH . Kết quả tạo ra 2 muối và nước. Tỉ lệ mol este : NaOH là 1:2.



- **Ví dụ:**

Phenyl axetat ($\text{CH}_3\text{COOC}_6\text{H}_5$) tác dụng với NaOH :



3. Dấu hiệu nhận biết bài toán có Este của Phenol

Trong một bài toán hỗn hợp este, các dấu hiệu sau đây cho thấy khả năng cao có chứa este của phenol:

- Tỉ lệ mol: $n_{\text{NaOH phản ứng}} / n_{\text{hỗn hợp este}} > 1$ (và 2 nếu có cả este thường).
- Sản phẩm sau phản ứng xà phòng hóa thu được **hai muối và nước**.
- Sản phẩm thu được **nhiều hơn 2 muối** (trường hợp các este có gốc axit khác nhau).
- Đề bài cho este đơn chức, mạch hở tác dụng với NaOH dư, cô cạn dung dịch thu được khối lượng chất rắn lớn hơn khối lượng este ban đầu (do M_{NaOH} lớn hơn $M_{\text{H}_2\text{O}}$ và $M_{\text{R}'\text{OH}}$ trong nhiều trường hợp).

II. Phương pháp quy đổi và các hướng áp dụng

1. Nguyên tắc chung

Quy đổi là phương pháp biến đổi một hỗn hợp phức tạp (nhiều chất, công thức chưa xác định) thành một hỗn hợp đơn giản hơn (ít chất hơn, công thức xác định) nhưng vẫn đảm bảo tương đương về số mol các nguyên tố và khối lượng. Mục đích là giảm số lượng ẩn số trong bài toán, giúp việc thiết lập và giải hệ phương trình trở nên dễ dàng hơn.

2. Hướng quy đổi phổ biến: Đồng đẳng hóa

Đây là kỹ thuật quy đổi mạnh và phổ biến nhất cho dạng bài este. Ta sẽ quy đổi hỗn hợp các este về các chất đầu dãy đồng đẳng của chúng và các nhóm CH_2 .

- **Bước 1: "No hóa" hỗn hợp (nếu cần):** Nếu hỗn hợp chứa các este không no, ta có thể "bơm" một lượng H_2 vào để biến chúng thành các este no tương ứng. Lượng H_2 này sẽ là một ẩn số (thường có giá trị âm trong kết quả cuối cùng, thể hiện lượng liên kết π).
- **Bước 2: Quy đổi hỗn hợp no về đầu dãy và CH_2 :**
 - Mọi este thường, no, đơn chức, mạch hở đều có thể được coi là tạo thành từ este đầu dãy HCOOCH_3 và một số nhóm CH_2 .
 - Mọi este của phenol, no, đơn chức đều có thể được coi là tạo thành từ este đầu dãy HCOOC_6H_5 và một số nhóm CH_2 .

Như vậy, một hỗn hợp X gồm este thường và este của phenol (đều no, đơn chức) có thể được quy đổi thành hỗn hợp Y gồm:

Hỗn hợp X $\rightarrow$ Hỗn hợp Y { HCOOCH_3 (a mol), HCOOC_6H_5 (b mol), CH_2 (c mol) }

Nếu hỗn hợp X ban đầu không no, ta quy đổi thành:

Hỗn hợp X $\rightarrow$ Hỗn hợp Y { HCOOCH_3 (a mol), HCOOC_6H_5 (b mol), CH_2 (c mol), H_2 (d mol) } (với d là số mol H_2 bơm vào, $d < 0$ nếu X không no)

3. Các bước giải chi tiết

- 1. Phân tích đề bài:** Xác định các dữ kiện quan trọng: khối lượng hỗn hợp, số mol O_2 (đốt cháy), số mol CO_2 , H_2O , số mol NaOH phản ứng. Khẳng định sự có mặt của este phenol.
- 2. Thực hiện quy đổi:** Chọn mô hình quy đổi phù hợp (thường là đồng đẳng hóa). Đặt ẩn số mol cho các chất trong hỗn hợp đã quy đổi (a, b, c...).
- 3. Thiết lập hệ phương trình:** Dựa vào các dữ kiện của đề bài để lập hệ phương trình theo các ẩn đã đặt.
 - **Phương trình khối lượng hỗn hợp:** $m_X = m_{\text{HCOOCH}_3} + m_{\text{HCOOC}_6\text{H}_5} + m_{\text{CH}_2} = 60a + 122b + 14c$
 - **Phương trình mol NaOH:** $n_{\text{NaOH}} = n_{\text{HCOOCH}_3} + 2 * n_{\text{HCOOC}_6\text{H}_5} = a + 2b$
 - **Phương trình bảo toàn C (đốt cháy):** $n_{\text{CO}_2} = 2a + 7b + c$
 - **Phương trình bảo toàn H (đốt cháy):** $n_{\text{H}_2\text{O}} = 2a + 3b + c$
 - **Phương trình bảo toàn O (đốt cháy):** $2n_{\text{hỗn hợp quy đổi}} + 2n_{\text{O}_2} = 2n_{\text{CO}_2} + n_{\text{H}_2\text{O}}$

4. **Giải hệ phương trình:** Tìm giá trị các ẩn a, b, c.

5. **Biện luận và kết luận:** Từ các giá trị a, b, c, ta có thể tìm được các thông tin đề bài yêu cầu như % khối lượng, công thức phân tử của các este.

Lưu ý: $n_{\text{CH}_2}(\text{c}) = k_1 * n_{\text{este thường}}(\text{a}) + k_2 * n_{\text{este phenol}}(\text{b})$. Ta cần biện luận để tìm các số nguyên k_1, k_2 hợp lý để "ghép" các nhóm CH_2 trở lại các este đầu dãy.

III. Ví dụ minh họa

Ví dụ 1

Đốt cháy hoàn toàn 15,44 gam hỗn hợp E gồm một este no, đơn chức, mạch hở X và một este đơn chức Y ($M_X < M_Y$) có chứa vòng benzen cần dùng 17,248 lít O_2 (đktc), thu được 31,68 gam CO_2 . Mặt khác, đun nóng 15,44 gam E với dung dịch NaOH dư thì có 0,18 mol NaOH phản ứng, thu được dung dịch T chứa hai muối và một ancol Z duy nhất. Tìm phần trăm khối lượng của X trong E.

Phân tích:

- n_E chưa biết. $n_{\text{NaOH}} = 0,18 \text{ mol}$. $n_{\text{O}_2} = 0,77 \text{ mol}$. $n_{\text{CO}_2} = 0,72 \text{ mol}$.
- Thu được 1 ancol duy nhất Z $\rightarrow$ X và Y có cùng gốc ancol hoặc Y là este của phenol.
- Bảo toàn khối lượng cho phản ứng cháy: $m_E + m_{\text{O}_2} = m_{\text{CO}_2} + m_{\text{H}_2\text{O}} \rightarrow 15,44 + 0,77 * 32 = 31,68 + m_{\text{H}_2\text{O}} \rightarrow m_{\text{H}_2\text{O}} = 8,46 \text{ gam} \rightarrow n_{\text{H}_2\text{O}} = 0,47 \text{ mol}$.
- Nhận thấy $n_{\text{CO}_2} (0,72) > n_{\text{H}_2\text{O}} (0,47) \rightarrow$ Hỗn hợp có chứa vòng benzen.

- Giả sử cả 2 este đều là este thường $\rightarrow n_E = n_{NaOH} = 0,18 \text{ mol}$. Điều này không đủ dữ kiện để kết luận.
- Xét tỉ lệ n_{NaOH} / n_E . Vì chưa biết n_E , ta sẽ dùng phương pháp quy đổi. Y chứa vòng benzen, phản ứng tạo 2 muối và 1 ancol $\rightarrow Y$ phải là este của phenol.

Giải bằng phương pháp quy đổi (Đồng đẳng hóa):

1. Quy đổi hỗn hợp E thành: $\{ \text{HCOOCH}_3 \text{ (a mol)}, \text{HCOOC}_6\text{H}_5 \text{ (b mol)}, \text{CH}_2 \text{ (c mol)} \}$.
 - Este X no, đơn hử nên quy về HCOOCH_3 và CH_2 .
 - Este Y của phenol nên quy về HCOOC_6H_5 và CH_2 .
2. Thiết lập hệ phương trình:
 - $m_E = 60a + 122b + 14c = 15,44 \text{ (1)}$
 - $n_{NaOH} = a + 2b = 0,18 \text{ (2)}$ (Vì este thường tác dụng tỉ lệ 1:1, este phenol 1:2)
 - $n_{CO_2} = 2a + 7b + c = 0,72 \text{ (3)}$ (Bảo toàn C)
3. Giải hệ (1), (2), (3):
 Từ (2) $\rightarrow a = 0,18 - 2b$. Thay vào (1) và (3):

$$60(0,18 - 2b) + 122b + 14c = 15,44 \rightarrow 10,8 - 120b + 122b + 14c = 15,44 \rightarrow 2b + 14c = 4,64$$

$$2(0,18 - 2b) + 7b + c = 0,72 \rightarrow 0,36 - 4b + 7b + c = 0,72 \rightarrow 3b + c = 0,36$$

Ta có hệ mới: $\{ 2b + 14c = 4,64; 3b + c = 0,36 \}$. Giải hệ này ta được: $b = 0,04$ và $c = 0,24$.

Suy ra $a = 0,18 - 2 \cdot 0,04 = 0,1$.

Vậy hỗn hợp quy đổi gồm: $\{ \text{HCOOCH}_3 (0,1 \text{ mol}), \text{HCOOC}_6\text{H}_5 (0,04 \text{ mol}), \text{CH}_2 (0,24 \text{ mol}) \}$.

4. Biện luận và tìm công thức:

$n_{\text{este thường}} = a = 0,1 \text{ mol}$. $n_{\text{este phenol}} = b = 0,04 \text{ mol}$.

Số mol nhóm CH_2 cần ghép là $c = 0,24 \text{ mol}$.

Ta có: $c = k_1 \cdot a + k_2 \cdot b \rightarrow 0,24 = k_1 \cdot 0,1 + k_2 \cdot 0,04$.

Vì đề bài cho thu được 1 ancol duy nhất nên gốc ancol của este X phải giống phần ancol tạo ra phenol trong este Y. Điều này không thể xảy ra. Vậy đề bài có thể hiểu là "thu được dung dịch T chứa hai muối, và một sản phẩm hữu cơ Z là ancol duy nhất". Điều này khẳng định Y là este của phenol và X là este của ancol Z.

Ghép nhóm CH_2 : Ta thử các giá trị k_1, k_2 nguyên không âm.

Nếu $k_2 = 0 \rightarrow 0,24 = 0,1 \cdot k_1 \rightarrow k_1 = 2,4$ (Loại).

Nếu $k_2 = 1 \rightarrow 0,24 = 0,1 \cdot k_1 + 0,04 \rightarrow k_1 = 2$ (Nhận).

Nếu $k_2 = 2 \rightarrow 0,24 = 0,1 \cdot k_1 + 0,08 \rightarrow k_1 = 1,6$ (Loại).

Vậy $k_1 = 2$ và $k_2 = 1$ là nghiệm duy nhất.

○ Este X: $\text{HCOOCH}_3 + 2\text{CH}_2 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_5\text{COOCH}_3$ (Metyl propionat).

◦ Este Y: $\text{HCOOC}_6\text{H}_5 + 1\text{CH}_2 \rightarrow \text{HCOOC}_6\text{H}_4\text{CH}_3$ (Cresyl fomat).

Kiểm tra lại: Ancol Z là CH_3OH . Hai muối là $\text{C}_2\text{H}_5\text{COONa}$ và $\text{CH}_3\text{C}_6\text{H}_4\text{ONa}$.

Thỏa mãn điều kiện đề bài.

5. Tính kết quả:

Khối lượng của X ($\text{C}_2\text{H}_5\text{COOCH}_3$) là $0,1 \cdot 88 = 8,8$ gam.

$\%m_X = (8,8 / 15,44) \cdot 100\% \approx 57,0\%$.

IV. Lưu ý khi áp dụng phương pháp

- **Nhận diện đúng dạng toán:** Dấu hiệu quan trọng nhất là tỉ lệ $n_{\text{NaOH}} / n_{\text{este}} > 1$ hoặc sản phẩm có nước. Phải chắc chắn có este của phenol trước khi áp dụng mô hình quy đổi này.
- **Nắm vững các chất đầu dãy:** Cần nhớ chính xác công thức phân tử và phân tử khối của các chất đầu dãy như HCOOCH_3 ($M=60$), HCOOC_6H_5 ($M=122$).
- **Xử lý gốc không no:** Nếu đề bài cho este không no, cần thêm ẩn H_2 (với số mol d) vào mô hình quy đổi. Số mol d thường âm, và $|d|$ chính là số mol liên kết π trong gốc hidrocarbon.
- **Bảo toàn nguyên tố là chìa khóa:** Luôn sử dụng linh hoạt các định luật bảo toàn (khối lượng, C, H, O) để thiết lập đủ số phương trình cần thiết.
- **Bước biện luận "ghép CH_2 ":** Đây là bước cuối cùng và quan trọng nhất. Cần dựa vào các dữ kiện phụ của bài toán (ví dụ: cùng dãy đồng đẳng, cùng số C, thu được một ancol duy nhất...) để giới hạn các trường hợp và tìm ra

nghiệm hợp lý.

VIDOCU.COM