

Бензойная кислота

Выполнил: Тугашев Р.М.

Студент группы: 1201

Проверила: Илюса Илшатовна

История

Впервые выделена возгонкой в 16 веке из бензойной смолы (росного ладана), отсюда и получила своё название. Этот процесс был описан у Нострадамуса (1556), а затем у Жироламо Рушелли (1560, под псевдонимом Alexius Pedemontanus) и у Blaise de Vigenire (1596).

В 1832 году немецкий химик Юстус фон Либих определил структуру бензойной кислоты. Он также исследовал, как она связана с гиппуровой кислотой.

В 1875 немецкий физиолог Эрнст Леопольд Зальковский исследовал противогрибковые свойства бензойной кислоты, которая долгое время использовалась в консервировании фруктов.

Введение

- Систематическое наименование бензойная кислота
- Традиционные названия бензойная кислота
- Химическая формула C_6H_5COOH
- Молярная масса 122.12 г/моль
- Физические свойства
- Состояние (ст. усл.) твердая
- Термические свойства
- Температура плавления 122.4 °C
- Температура кипения 249.2 °C
- Температура разложения 370 °C
- Удельная теплота парообразования 527 Дж/кг
- Удельная теплота плавления 18 Дж/кг
- Химические свойства
- Растворимость в воде 0,001 г/100 мл

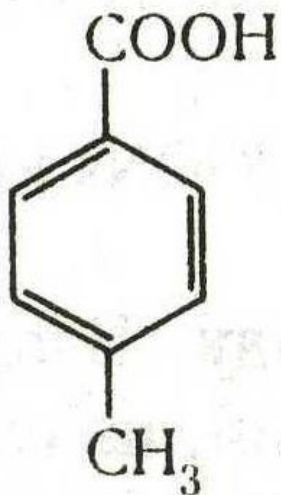
Ароматическими карбоновыми кислотами называются производные бензола, содержащие карбоксильные группы, непосредственно связанные с углеродными атомами бензольного ядра. Кислоты, содержащие карбоксильные группы в боковой цепи, рассматриваются как жирноароматические.

Ароматические кислоты могут быть разделены по количеству карбоксильных групп на одно-, двух- и более основные. Названия кислот, у которых карбоксильная группа непосредственно связана с ядром, производятся от ароматических углеводородов. Названия кислот с карбоксилем в боковой цепи производятся обычно от наименований соответствующих кислот жирного ряда.

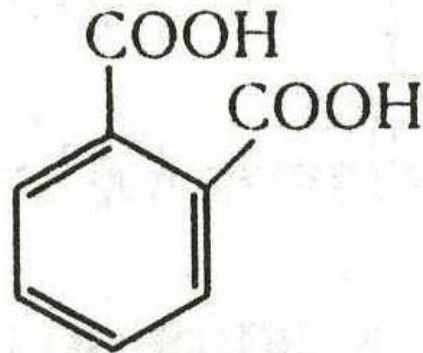
Наибольшее значение имеют кислоты первого типа:

Например

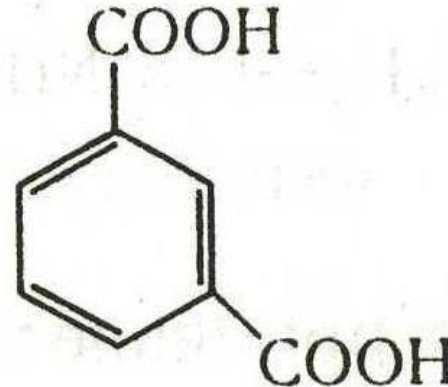
- Бензойная (бензолкарбоновая) C_6H_5-COOH ,
- *n*-толуиловая (*n*-толуолкарбоновая)
- фталевая (1,2-бензолдикарбоновая)
- изофталевая (1,3-бензолдикарбоновая)
- терефталевая (1,4-бензолдикарбоновая)



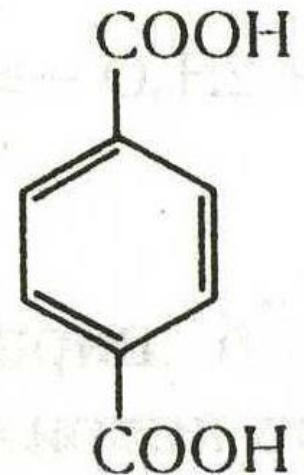
n-толуоловая
кислота



фталевая
кислота



изофталевая
кислота



терефталевая
кислота

Физические свойства и нахождение в природе

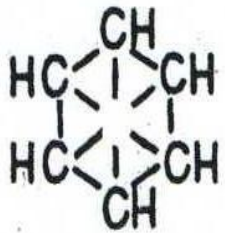
Монокарбоновые кислоты ряда бензола — бесцветные кристаллические вещества с температурой плавления выше 100 °С. Кислоты с пара-положением заместителей плавятся при значительно более высоких температурах, чем их изомеры. Ароматические кислоты кипят при несколько более высоких и плавятся при значительно более высоких температурах, чем кислоты жирного ряда с тем же числом углеродных атомов. Монокарбоновые кислоты довольно плохо растворяются в холодной воде и значительно лучше в горячей. Низшие кислоты летучи с парами воды. В водных растворах монокарбоновые кислоты обнаруживают большую степень диссоциации, чем кислоты жирного ряда: константа диссоциации бензойной кислоты $6,6 \cdot 10^{-5}$, уксусной кислоты $1,8 \cdot 10^{-5}$. При 370С она разлагается до бензола и CO_2 (в небольшом количестве образуются фенол и CO). При взаимодействии с бензоилхлоридом при повышенных температурах бензойная кислота превращается в бензойный ангидрид. Бензойная кислота и ее эфиры содержатся в эфирных маслах (например, в гвоздичном, толуанском и перуанском бальзамах, бензойной смоле). Производное бензойной кислоты и глицина — гиппуровая кислота — продукт жизнедеятельности животных. Кристаллизуется в виде бесцветных пластинок или игл, плавящихся при 121 оС, легко растворимых в спирте и эфире, но трудно растворимых в воде. В настоящее время бензойная кислота довольно широко применяется в промышленности красителей. Бензойная кислота обладает антисептическими свойствами и поэтому используется для консервирования пищевых продуктов. Значительное применение находят также различные производные бензойной кислоты.

Химические свойства

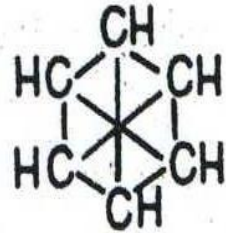
Бензол был открыт Фарадеем в 1825 г. и была установлена его брутто-формула- C_6H_6 . В 1865 г. Кекуле предложил его структурную формулу как циклогексатриена-1,3,5. Этой формулой пользуются и в настоящее время, хотя она, как позднее будет показано, несовершенна - не отвечает полностью свойствам бензола. Наиболее характерной особенностью химического поведения бензола является удивительная инертность двойных углерод - углеродных связей в его молекуле: в отличие от рассмотренных; ранее непредельных соединений он устойчив к действию окислителей (например, перманганата калия в кислой и щелочной среде, хромового ангидрида в уксусной кислоте) и не вступает в обычные реакции электрофильного присоединения, характерные для алкенов, алкадиенов и алкинов. Пытаясь объяснить свойства бензола особенностями строения, многие ученые вслед за Кекуле выдвигали по этому поводу свои гипотезы. Поскольку непредельность бензола явно не проявлялась, считали, что двойных связей в молекуле бензола нет. Так, Армстронг и Байер, а также Клаус предположили, что в молекуле бензола четвертые валентности всех шести атомов углерода направлены к центру и насыщают друг друга, Ладенбург - что углеродный скелет бензола представляет собой призму, Чичибабин - что в бензоле углерод трехвалентен.

Химическая формула: C_6H_5COOH

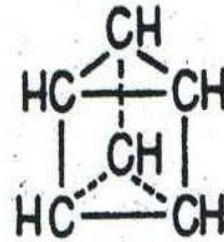
Тиле, усовершенствова формулу Кекуле, утверждал, что двойные связи в последнем не фиксированы, а постоянно перемещаются - «осциллируют», а Дьюар и Хюккель предложили структурные формулы бензола с двойными связями и малыми циклами.



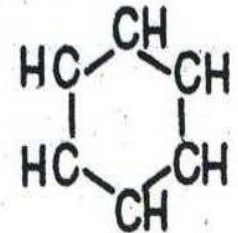
Амстронг
Байер



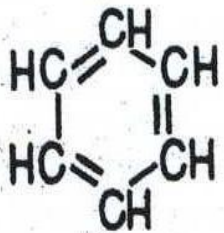
Клаус



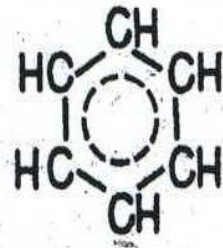
Ладенбург



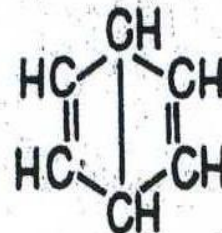
Чичибабин



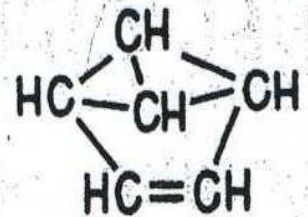
Кекуле



Тиле



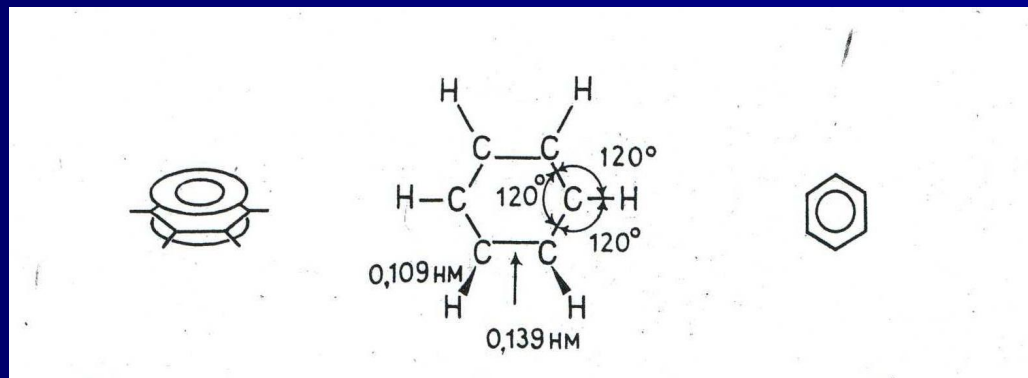
Дьюар



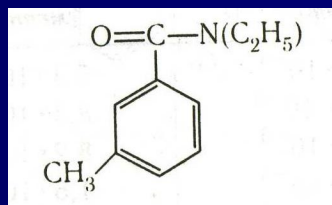
Хюккель

В настоящее время на основании данных многочисленных исследований можно считать твердо установленным, что шесть углеродных и шесть водородных атомов в молекуле бензола находятся в одной плоскости и что облака π -электронов атомов углерода перпендикулярны плоскости молекулы и, следовательно, параллельны друг другу и взаимодействуют между собой. Облако каждого π -электрона перекрывается облаками π -электронов соседних углеродных атомов. Реальная молекула бензола с равномерным распределением π -электронной плотности по всему кольцу может быть представлена в виде плоского шестиугольника, лежащего между двумя торами.

Отсюда следует, что формулу бензола логично изображать в виде правильного шестиугольника с кольцом внутри, подчеркивая тем самым полную делокализованность π -электронов в бензольном кольце и равноценность всех углерод-углеродных связей в нем. Справедливость последнего заключения подтверждена, в частности, результатами измерения длин $C-C$ -связей в молекуле бензола; они одинаковы и равны $0,139$ нм ($C-C$ -связи в бензольном кольце короче ординарных ($0,154$ нм), но длиннее двойных ($0,132$ нм)). Распределение электронной плотности в молекуле бензола; длины связей, валентные углы



- Очень важным производным бензойной кислоты является ее хлорангидрид — хлористый бензоил. Это жидкость с характерным запахом и сильным лакриматорным действием. Используется как бензоилирующий агент.
- **Пероксид бензоила** используется как инициатор для реакций полимеризации, а также как отбеливающий агент для пищевых масел, жиров, муки.
- **Толуиловые кислоты.** Метилбензойные кислоты называют толуиловыми кислотами. Они образуются при частичном окислении о-, м- и п-ксилолов. NN-Диэтил-м-толуилмид является эффективным репеллентом — препаратом, отпугивающим насекомых:



- **п-трет-Бутилбензойную** кислоту получают в промышленных масштабах жидкофазным окислением трет-бутилтолуола в присутствии растворимой соли кобальта в качестве катализатора. Применяется в производстве полиэфирных смол.
- **Фенилуксусную кислоту** получают из хлористого бензила через нитрил или через магнийорганические соединения. Это кристаллическое вещество с т. пл. 76 °С. Благодаря подвижности подородных атомов метиловой группы легко вступает в реакции конденсации. Эта кислота и ее эфиры применяются в парфюмерии.

Получение C_6H_5COOH

1. Путем окисления самых различных производных бензола, имеющих одну боковую цепь, например, толуола, этилбензола, бензилового спирта и т.д.: $C_6H_5CH_3 \rightarrow C_6H_5COOH$

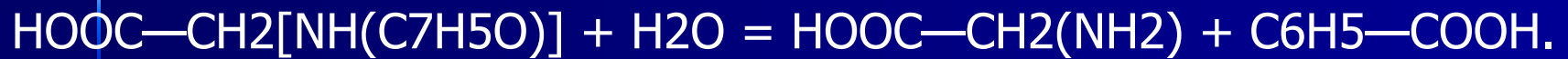
2. Из бензонитрила, который для этого гидролизуют кислотой или щелочью: $2H_2O + C_6H_5CN \rightarrow C_6H_5COOH + NH_3$

Бензойная (или росноладанная), *Acidum benzoicum sublimatum*, *Flores Benzolis* — весьма распространенное в природе вещество состава $C_7H_6O_2$, или C_6H_5COOH ; содержится в некоторых смолах, бальзамах, в травянистых частях и в корнях многих растений (согласно прежним, до сих пор не проверенным наблюдениям), а также в цветах *Unona odoratissima* (в эссенции алан-жилан, или иланг-иланг), в бобровой струе, а главным образом в белучше всего для этой цели брать сямский росной ладан, так как в нем нет коричной кислоты, или калькуттский, более дешевый и также содержащий много Б. кислоты.

Бензойной смоле, или росном ладане, откуда и ее название. О продуктах сухой перегонки этой смолы есть указания еще в сочинениях, относящихся к XVI ст.; Blaise de Vigenere в своем трактате (1608 г.) "Traité du feu et du sel" первый упоминает о кристаллическом веществе из бензойной смолы, которое впоследствии было исследовано Блихе и получило название *Flores benzolis*. Состав его окончательно установлен Либихом в 1832 г., а Кольбе предложил рассматривать его как фенолкарбоновую кислоту. Б. кислота может быть получена из бензола синтетически и образуется при многих реакциях, совершающихся с телами ароматического ряда.

Для фармацевтических надобностей пользуются исключительно кислотой, добытой посредством возгонки бензойной смолы. Лучше всего для этой цели брать сямский росной ладан, так как в нем нет коричневой кислоты, или калькуттский, более дешевый и также содержащий много Б. кислоты. Измельченную смолу слегка подогревают на песчаной бане в железных котелках, при чем масса сначала плавится, а затем выделяет тяжелые пары Б. кислоты, которые садятся на холодных частях прибора в виде кристаллов. Чтобы собрать вещество, котелок прикрывают бумажным конусом или крышкой с широкой трубкой, по которой пары отводят в деревянный ящик, оклеенный бумагой. По окончании операции (причем следует по возможности избегать сильного подогревания) кислота остается в приемнике или на бумажном конусе в виде снежно-белых кристаллов или хлопьев. Полученный этим путем препарат имеет явственный запах ванили, что зависит от содержания в смоле небольшого количества эфирного масла. Лучших выходов можно достигнуть, настаивая продолжительное время тонкоизмельченную смолу с известковым молоком или содой. Смесь затем нагревают до плавления смолы, и из образующейся бензойнокислой соли выделяют вещество соляной кислотой. Полученная таким способом кислота имеет более слабый запах, чем та, которая получается возгонкой. Для технических целей как исходный материал берут гиппуровую кислоту (см. это сл.), содержащуюся в моче травоядных.

Мочу быстро выпаривают до $\frac{1}{3}$ первоначального объема, фильтруют и обрабатывают избытком соляной кислоты, причем гиппуровая кислота выделяется в кристаллическом виде. По прошествии суток кристаллы отделяют от маточного раствора и очищают повторной кристаллизацией, пока почти вовсе не исчезнет упорно удерживающийся запах мочи. Очищенную гиппуровую кислоту кипятят с соляной кислотой, при чем происходит расщепление на Б. кислоту и гликокол:



Применение

- Бензойная кислота и ее соли обладают высокой бактерицидной и бактериостатической активностью, резко возрастающей с уменьшением pH среды. Благодаря этим свойствам, а также нетоксичности бензойную кислоту применяют:
- консервант в пищевой промышленности (добавка 0,1% кислоты к соусам, рассолам, фруктовым сокам, джемам, мясному фаршу и др.)
- в медицине при кожных заболеваниях как наружное антисептическое (противомикробное) и фунгицидное (противогрибковое) средства, а её натриевую соль – как отхаркивающее средство.
- Кроме того, бензойную кислоту и её соли используют при консервировании пищевых продуктов (пищевые добавки E210, E211, E212, E213). Эфиры бензойной кислоты (от метилового до амилового), обладающие сильным запахом, применяют в парфюмерной промышленности. Различные производные бензойной кислоты, например хлор- и нитробензойные кислоты, широко применяют для синтеза красителей.
- Бензойную кислоту используют в производстве
- фенола
- капролактама
- бензоилхлорида
- добавка к алкидным лакам, улучшающая блеск, адгезию, твердость и химическую стойкость покрытия
- Большое практическое значение имеют соли и эфиры бензойной кислоты (бензоаты).
- Бензоат натрия консервант пищевых продуктов, стабилизатор полимеров, ингибитор коррозии в теплообменниках, отхаркивающее средство в медицине.

- Бензоат аммония – антисептик, консервант в пищевой промышленности, ингибитор коррозии, стабилизатор в производстве латексов и клеев.
- Бензоаты переходных металлов – катализаторы жидкофазного окисления алкилароматических углеводородов в бензойную кислоту.
- Сложные эфиры бензойной кислоты от метилового до изоамилового – душистые вещества. Метилбензоат – растворитель эфиров целлюлозы.
- Изоамилбензоат – компонент фруктовых эссенций.
- Бензилбензоат – фиксатор запаха в парфюмерии, растворитель душистых веществ, антисептик, репеллент от моли.
- Меры предосторожности:
 - При попадании на кожу вызывает раздражения.
 - Вдыхание аэрозоля вызывает судорожный кашель, насморк, иногда тошноту и рвоту.

Заключение

Латинское название: Acidum benzoicum

Бензойная кислота C_6H_5COOH – простейшая одноосновная карбоновая кислота ароматического ряда.

Бензойная кислота – бесцветные кристаллы, плохо растворимые в воде, хорошо – в этаноле и диэтиловом эфире.

Используется в основном в виде натриевых (большая растворимость в воде)- Бензонат натрия, калиевых и кальциевых солей.

Температура плавления - $122.4^{\circ}C$,

Температура кипения - $249^{\circ}C$.

Легко возгоняется(один из способов получения- сухая перегонка смолы бензоина); перегоняется с водяным паром.

Бензойную кислоту (Б.к) применяют в медицине при кожных заболеваниях как наружное антисептическое (противомикробное) и фунгицидное (противогрибковое) средства, а её натриевую соль – как отхаркивающее средство.

Б. к. и ее соли обладают высокой бактерицидной и бактериостатической активностью, резко возрастающей с уменьшением pH среды.

Возможна реакция с некоторыми формами аскорбиновой кислоты (витамина С).

В организме бензойная кислота соединяется с глицином, образуя безвредную гиппуровую кислоту, которая выводится с мочой.

Допустимая доза бензойной кислоты и ее соли для человека - 5 мг/кг веса тела в день.

Концентрация рецептах: 0,2-0,5 % (на 50 г крема - 0,2 г бензоата натрия).

Активность бензойной кислоты падает в присутствии неионных ПАВ, белков и глицерина.

Используется совместно с другими консервантами

Будучи растворима в жирах, она может применяться как консервант жиров, губных помад и т.д. Максимальная концентрация в косметических изделиях составляет 0,5 %.

Соли бензойной кислоты – бензоаты (например, бензоат натрия) тоже используются как консерванты.

Другое применение: Эфиры бензойной кислоты, обладающие сильным запахом, применяют в парфюмерной промышленности.

Различные производные бензойной кислоты, например хлор- и нитробензойные кислоты, широко применяют для синтеза красителей.

Б. к. и ее эфиры содержатся в эфирных маслах (например, в гвоздичном), толуанском и перуанском бальзамах, бензойной смоле (до 20% кислоты и до 40% ее сложных эфиров).

Дополнительная информация:

На практике чаще всего используют водные растворы бензоата натрия с концентрацией от 5 до 25%.

Для приготовления раствора нужное количество консерванта растворяют приблизительно в половине требуемого объема питьевой воды, нагретой до 50...80С. После полного растворения соли в полученный раствор добавляют оставшуюся воду и тщательно перемешивают. Рекомендуется отфильтровать раствор через слой хлопчатобумажной ткани (бязи). Если консервант растворен в жесткой воде, то раствор может быть слегка мутным, но это не влияет на его консервирующее действие.

При разработке конкретной рецептуры внесения консерванта в продукт необходимо учитывать следующее:

кислотность среды влияет на эффективность консервантов - чем более кислую реакцию имеет продукт, тем меньше в него требуется добавить консерванта;

как правило, продукты пониженной калорийности имеют высокое содержание воды и легко подвергаются порче, поэтому количество добавляемого к ним консерванта должно быть на 30-40% больше, чем рекомендуется для обычных продуктов;

добавка спирта, большого количества сахара или другого вещества, проявляющего консервирующие свойства, снижает требуемое количество консерванта.