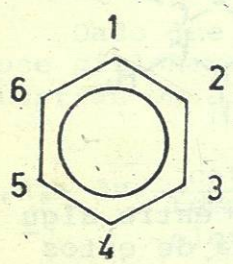
Como no podemos representar el benceno con las dobles ligaduras localizadas en algunos átomos de carbono, para evitar problemas de hoy en adelante la estructura del benceno la representaremos como sigue:

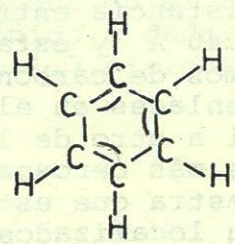


En donde el círculo interno corresponde a las dobles ligaduras cambiando de posición y el hexágono externo, en cada vértice, a un átomo de carbono con su respectivo hidrógeno enlazado.

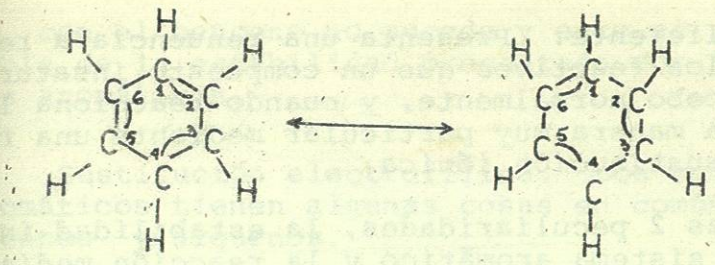
Benceno p.e.b. 80° p.f. 6°.

3-3 TEORÍA DE LA RESONANCIA.

Cuando August Kekulé de la Universidad de Gante propuso la fórmula estructural del benceno como:



se dio cuenta que esta fórmula no correspondía a todas las propiedades del benceno y por consiguiente, consideró que era necesario dos fórmulas de valencia de enlace para poder explicar las propiedades del benceno:



Hoy sabemos que la molécula real del benceno no está representada por ninguna de estas fórmulas, sino por una combinación mental de ambas y, por consiguiente, en la fórmula combinada el enlace entre los carbonos del benceno no será ni doble ni sencillo, sino un tipo intermedio.

Siempre que es necesario emplear dos o más fórmulas con valencias de enlace para representar una molécula y estas 2 o más fórmulas difieren en la posición de los electrones, se dice que la molécula real es un híbrido de resonancia de estas fórmulas con valencias de enlace.

En las fórmulas de los híbridos de resonancia se utiliza la flecha de doble cabeza (↔), que nos indica el fenómeno de resonancia, y esta flecha no debe confundirse con la mezcla en equilibrio (⇌) ya que estos son dos fenómenos distintos.

Aparte del benceno existen otros hidrocarburos aromáticos e incluso iones como el nitrato, que presentan el fenómeno de resonancia.

3-4 CARÁCTER AROMÁTICO.

Contrario a las reacciones usuales de los compuestos insaturados, el benceno se comporta de

manera diferente. Presenta una renuencia a reacci nar con los reactivos que un compuesto insaturado lleva a cabo normalmente, y cuando reacciona lo ha ce de una manera muy particular mediante una reacción de sustitución iónica.

Estas 2 peculiaridades, la estabilidad inespe rada del sistema aromático y la reacción mediante sustitución iónica, son características de los com puestos aromáticos y se conocen como "carácter aro mático" el cual resulta en un orbital deslocalizad circular que tiene 6 electrones.

Estabilidad. Para poder explicar esta inespe rada estabilidad de los compuestos aromáticos, hay que hacer la comparación con algún compuesto similar (insaturado) en donde las dobles ligaduras sí están localizadas como en los alquenos.

Recordando que la principal forma de reacción de un alqueno es por adición, explicaremos que los electrones que forman la doble ligadura en estos compuestos están siendo atraídos fuertemente por los núcleos de los átomos de carbono de la doble l gadura, y si incluimos por ejemplo bromo al sistem lo que resulta es que la fuerza de atracción que s fren los electrones de la doble ligadura es mayor por los átomos del bromo que la de los átomos de carbono, lo cual trae como consecuencia que el bro mo se une al alqueno para formar un derivado halog nado y desaparece la doble ligadura entre carbón y carbón.

Si tratamos de hacer lo mismo con el benceno por ejemplo, lo que pasa es que como los electrone de las dobles ligaduras del benceno no están local zadas y están circulando a través de todo el compuesto, éstos sufren una atracción pero no de 2 núcleos de átomos de carbono que forman el benceno lo cual da una diferencia en atracción mucho mayor que en los alquenos, de tal manera que en las mismas condiciones con el bromo reacciona con un alque

no, con el benceno no sucede y esto es prueba palpable de la estabilidad presentada por los compuestos aromáticos.

Sustitución electrofílica. Los compuestos aromáticos tienen algunas cosas en común con los alcanos y alquenos.

Con los alcanos, en cuanto a que éstos reaccionan por sustitución a través de radicales libres y los aromáticos sufren sustitución, pero mediante un mecanismo iónico.

En cuanto a los alquenos, los enlaces π de las dobles ligaduras constituyen lugares de elevada densidad electrónica de igual manera que los aromáticos (nube electrónica) siendo estos puntos centros de atracción de reactivos electrofílicos.

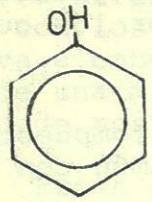
La mayoría de las reacciones de los compuestos aromáticos se llevan de la siguiente manera:

1º Las condiciones de reacción deben ser favorables para la formación de iones electrofílicos.

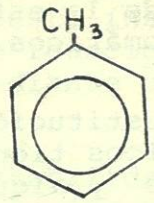
2º El ion electrofílico formado se sustituye en el anillo aromático por un ion hidrógeno.

3-5 NOMENCLATURA.

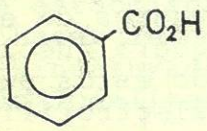
Aunque muchos de los compuestos aromáticos se les reconoce por su nombre común, tales como



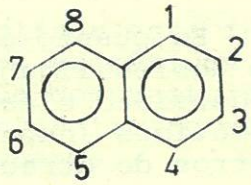
Fenol



Tolueno



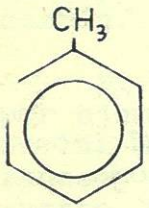
Ác. benzoico



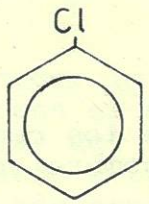
Neftaleno

Las reglas de nomenclatura que se deben seguir son:

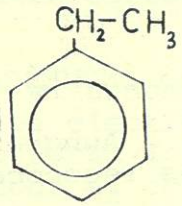
Para los bencenos monosustituidos se debe enunciar primero al nombre del sustituyente y enseguida el del benceno:



<u>Metil</u> benceno

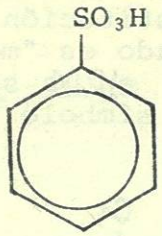


<u>Cloro</u> benceno



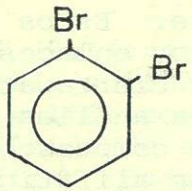
<u>Etil</u> benceno

salvo en algunos casos excepcionales como:

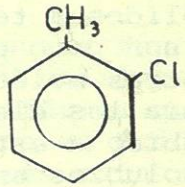


Ác. bencensulfónico.

De aquí en adelante para derivados di, tri, etc., sustituidos se debe enumerar el anillo bencénico a partir del sustituyente más reactivo, o sea el radical más importante y buscando siempre la numeración más baja. Ejemplo:



1,2 dibromo benceno

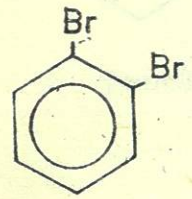


2, cloro 1 metil benceno

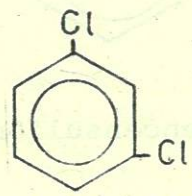
En particular, para los bencenos disustituidos se acustumbra nombrarlos indicando la posición de los sustituyentes por un prefijo.

Cuando la sustitución es en los carbonos 1-2, el prefijo utilizado es "orto" y el símbolo representativo del prefijo es "o".

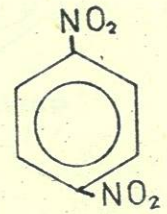
Así, cuando la sustitución es en los carbonos 1-3, el prefijo utilizado es "meta" y el símbolo representativo es "m"; en la sustitución 1-4 el prefijo es "para" y el símbolo "p". Ejemplos:



o-dibromo benceno



m-dicloro benceno



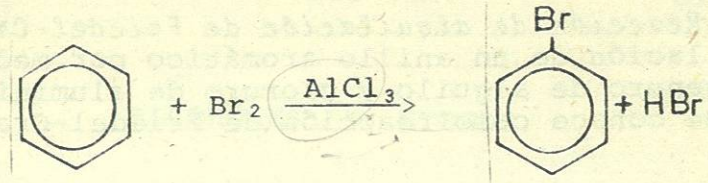
p-dinitro benceno

3-6 PROPIEDADES FÍSICAS.

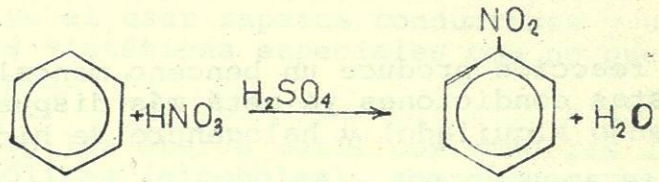
Todos los hidrocarburos aromáticos son líquidos o sólidos a temperatura ambiente. Estos compuestos son poco o nada polares y los enlaces polares de otras moléculas pueden tener cierta atracción hacia los electrones p de los anillos aromáticos; debido a este motivo algunos compuestos que no son solubles en los hidrocarburos alifáticos sí lo son en los aromáticos y por eso estos compuestos se utilizan en los laboratorios e industrias como disolvente.

3-7 PROPIEDADES QUÍMICAS.

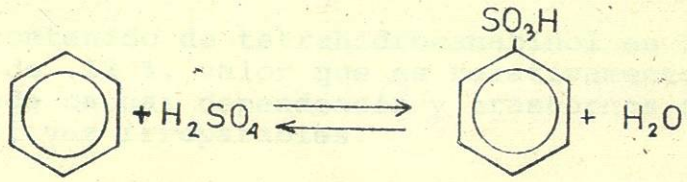
1. *Halogenación.* En presencia de cloruro de aluminio ($AlCl_3$) conocido como ácido de Lewis, el benceno reacciona fácilmente con el bromo y el cloro produciéndose un halobenceno y halogenuro de hidrógeno.



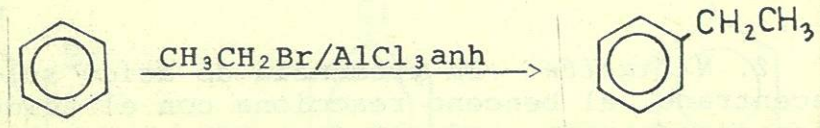
2. *Nitración.* En presencia de ácido sulfúrico concentrado, el benceno reacciona con el ácido nítrico concentrado produciéndose nitrobenceno y agua.



3. *Sulfonación.* El benceno puede reaccionar con ácido sulfúrico concentrado en caliente o bien, ácido sulfúrico fumante (ácido sulfúrico que contiene trióxido de azufre) y se produce el ácido bencensulfónico. Bajo ciertas condiciones esta reacción es reversible.



4. *Reacción de alquilación de Friedel-Crafts.* La alquilación de un anillo aromático por medio de un halogenuro de alquilo y cloruro de aluminio es lo que se conoce como reacción de Friedel-Crafts.



etilbenceno

Esta reacción produce un benceno monoalquilado (que en estas condiciones ya está más dispuesto a seguir siendo alquilado) y halogenuro de hidrógeno.

ALCOHOLES Y ÉTERES.

Desde 1842, el éter dietílico ha sido empleado como un anestésico común. Debido a su alta inflamabilidad y volatilidad, representa un serio peligro en la sala de operaciones por lo que debe ser administrado por personal altamente capacitado. Entre otras precauciones que han de observarse para reducir la posibilidad de la electricidad estática, se incluye el usar zapatos conductores y uniformes de fibras sintéticas especiales que no pueden generar chispas.

Tanto los éteres metílicos como las substancias fenólicas (alcoholes), son comunes en compuestos naturales. Como ejemplos podemos citar el eugenol, obtenido del aceite de clavo, así como el anetol, obtenido del aceite de anís.

El insecticida metoxicloro y el herbicida 2.4 -ácido dicloro fenoxiacético, son éteres que se producen comercialmente para fines agrícolas. La mariguana y el hashis, contienen a manera de constituyentes fisiológicamente activos a los tetrahidrocanabinoles, que poseen como grupos funcionales éteres, hidróxilo fenólico y alqueno.

El contenido de tetrahidrocanabinol en la mariguana es de .12 %, valor que es relativamente alto y que puede causar dependencia y trastornos fisiológicos, tal vez irreparables.