

Metas de Unidad.....	204
Lecturas.....	205
Resumen de reacciones.....	220
Actividades.....	221
Ejercicios de Unidad.....	234
Autoevaluación.....	238

**UNIDAD XIV. Derivados de hidrocarburos. Funciones químicas que identifican.**

Objetivo y Estructura Conceptual.....	241
Programa.....	243
Metas de Unidad.....	245
Lecturas ( Halogenuros de alquilo).....	246
Actividades (Halogenuros de alquilo).....	258
Lecturas ( Alcoholes ).....	266
Actividades ( Alcoholes).....	279
Lecturas ( Eteres).....	288
Actividades (Eteres).....	293
Lecturas (Aldehídos y Cetonas).....	296
Actividades (Aldehídos y Cetonas).....	309
Lecturas (Acidos Carboxílicos).....	315
Actividades (Acidos Carboxílicos).....	327
Lecturas (Aminas).....	334
Actividades (Aminas).....	342
Resumen de reacciones.....	348
Ejercicios de Unidad.....	354
Autoevaluación.....	372

**UNIDAD XV. Compuestos orgánicos de importancia. Sustancias de la vida y del entorno**

Objetivos y Estructura Conceptual.....	379
Programa.....	381
Metas de Unidad.....	382
Lecturas.....	383

**Recursos Didácticos**

Demostraciones en el aula.....	433
Prácticas de laboratorio.....	439
Bibliografía.....	

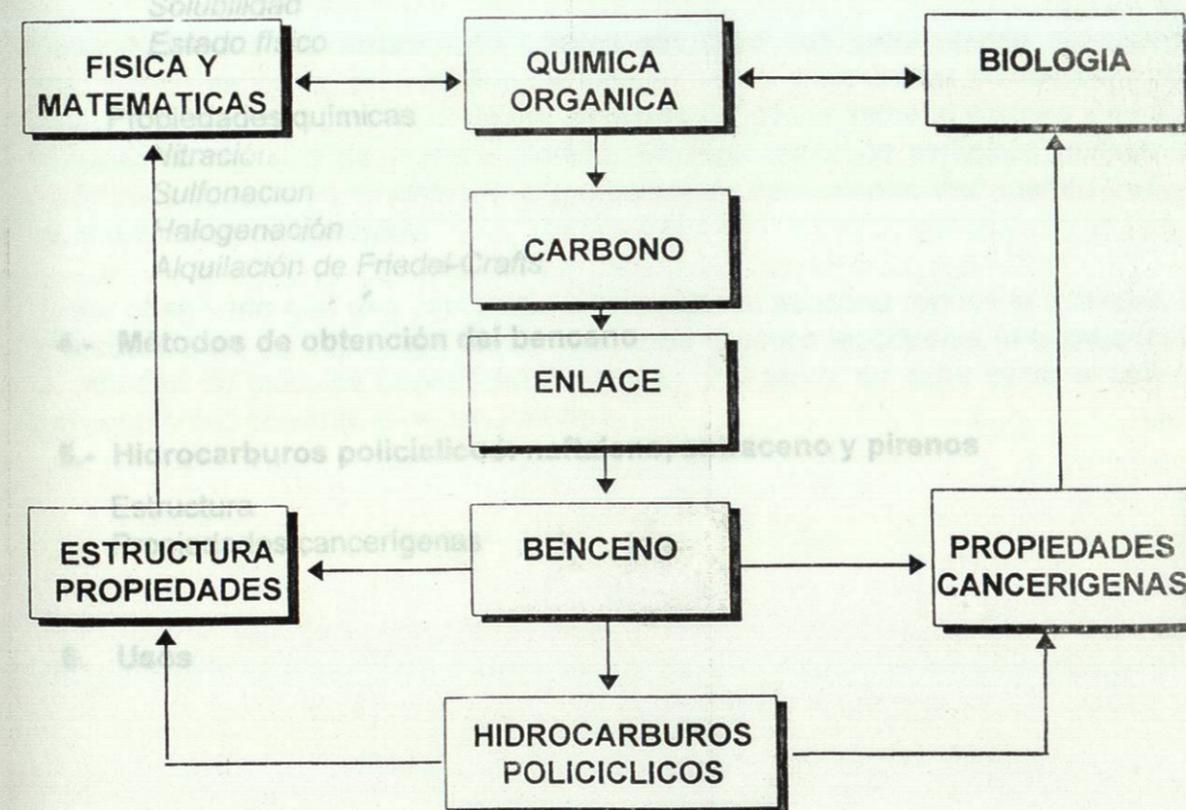
# UNIDAD XIII

## Benceno. Esencia de los compuestos aromáticos

### OBJETIVO DE LA UNIDAD

Identificar al benceno como base de los compuestos aromáticos, enfatizando el fenómeno de resonancia y su estructura. Reconocer los beneficios y los efectos nocivos de sus derivados sobre la naturaleza.

### ESTRUCTURA CONCEPTUAL



## METAS DE UNIDAD

Al término de la unidad, el estudiante:

1. Describirá la estructura y el enlace del benceno, explicando el fenómeno de resonancia.
2. Nombrará y representará las estructuras de derivados mono y disustituidos del benceno y de algunos hidrocarburos policíclicos aromáticos.
3. Señalará algunas propiedades físicas y químicas del benceno.
4. Describirá algunos métodos de obtención del benceno.
5. Enunciará algunas de las propiedades y usos de los compuestos aromáticos.

## UNIDAD XIII

### Benceno. Esencia de los compuestos aromáticos

#### Introducción

En los inicios de la Química orgánica, la palabra aromático se usó para describir sustancias fragantes como el benzaldehído (de cerezas, durazno y almendras), el tolueno (del bálsamo de tolú) y el benceno (del destilado del carbón). Sin embargo, pronto se comprendió que las sustancias agrupadas como aromáticas se comportaban de manera químicamente distinta de como lo hace la mayoría de los otros compuestos orgánicos.

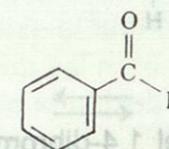
En la actualidad, el término "aromático" se emplea para referirse al benceno y a los compuestos relacionados estructuralmente con éste. En esta Unidad se verá que las sustancias aromáticas presentan un comportamiento químico muy distinto del de las sustancias alifáticas que se han estudiado hasta aquí. De modo que los químicos de principios del siglo XIX tenían razón cuando hicieron notar que existe una diferencia química entre los compuestos aromáticos y los otros; sin embargo, hace mucho que se perdió la asociación de la aromaticidad con la fragancia.

Muchos compuestos aislados de fuentes naturales son parcialmente aromáticos. Además de benceno, benzaldehído y tolueno, otros compuestos complejos tienen anillos aromáticos, como la hormona esteroide femenina llamada estrona y el bien conocido analgésico de nombre morfina. Muchos fármacos sintéticos usados en medicina son también aromáticos; el tranquilizante denominado diazepam (o Valium) es uno de muchos ejemplos.

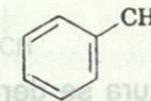
Se ha observado que una exposición prolongada al benceno reduce la actividad de la médula ósea (la deprime) y en consecuencia provoca leucopenia (disminución de la cantidad de glóbulos blancos en la sangre). Por tanto, se debe evitar el uso del benceno como solvente en el laboratorio.



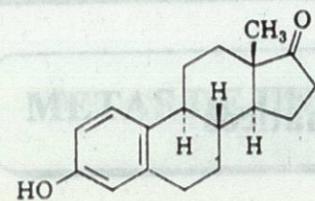
Benceno



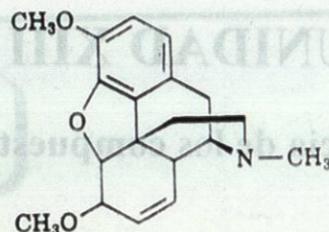
Benzaldehído



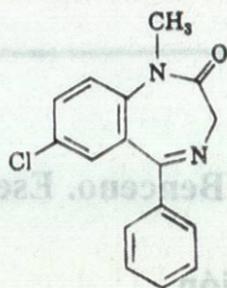
Tolueno



Estrona



Morfina



Diazepam (Valium)

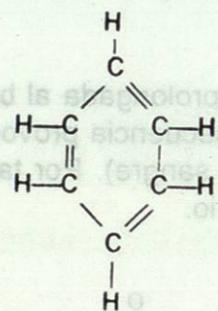
## 1.- La molécula del benceno

### Fórmula. Enlace y estructura. Resonancia

El benceno se conoce desde 1825; pero no fue sino hasta mediados de ese siglo que se propuso un modelo estructural adecuado, para explicar su comportamiento.

El benceno tiene la fórmula molecular  $C_6H_6$ ; se puede hidrogenar a presión y con catalizadores, produciendo ciclohexano. Por sustitución de un átomo de hidrógeno, se obtiene solamente un derivado monosustituido; y por sustitución de dos hidrógenos, produce tres derivados disustituídos, por ejemplo: 1, 2-dibromobenceno, 1, 3-dibromobenceno y el 1, 4-dibromobenceno. Todos estos datos indican que es una molécula en forma de anillo, donde todos los hidrógenos son equivalentes entre sí.

En 1865, Kekulé propuso para el benceno una estructura cíclica con 3 dobles enlaces alternados.

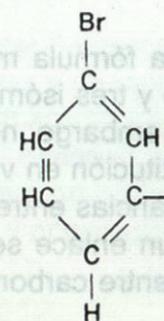


De esta estructura se derivan el 1,3 y el 1,4-dibromobenceno y además aparentemente dos isómeros del 1,2-dibromobenceno que difieren solamente en la posición de los bromos, en relación a la doble ligadura.

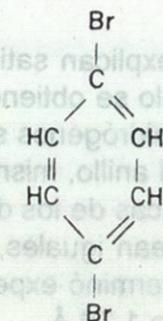
Tolueno

Benzaldehído

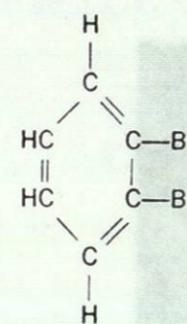
Benceno



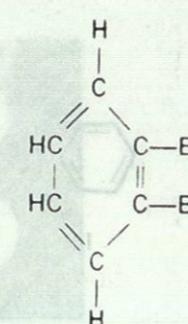
1, 3-dibromobenceno



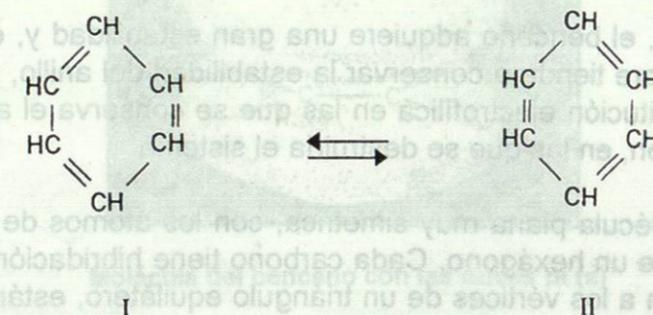
1, 4-dibromobenceno



1, 2-dibromobenceno



Sin embargo, en la práctica, se obtiene sólo un derivado 1, 2 disustituido. Kekulé, sugirió entonces que los dobles enlaces no se encontraban fijos, sino que se movían constantemente alrededor del anillo, pasando rápidamente de la estructural a la II, y como consecuencia no era posible aislar los dos isómeros 1, 2 disustituídos.



Estas estructuras explican satisfactoriamente porqué, con la fórmula molecular del benceno ( $C_6H_6$ ), sólo se obtiene un derivado monosustituido y tres isómeros disustituidos; ya que, los hidrógenos son equivalentes entre sí. Sin embargo, no explican la gran estabilidad del anillo, mismo que da reacciones de sustitución en vez de las de adición, características de los dobles enlaces, y que las distancias entre los enlaces carbono-carbono sean iguales, e intermedias entre las de un enlace sencillo y uno doble, como se determinó experimentalmente. La distancia entre carbono y carbono en el benceno es de 1,39 Å.

Con el desarrollo de la teoría cuántica y del concepto de resonancia, se propuso un mejor modelo molecular del benceno, al considerar su estructura como un híbrido de resonancia de las dos fórmulas de Kekulé, que sólo difieren entre sí en el arreglo de sus electrones.



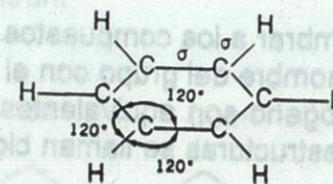
Por sí solas, ninguna de estas dos estructuras resonantes representa adecuadamente a la molécula del benceno, ya que su estructura verdadera se considera como un híbrido que tiene una estructura intermedia entre I y II, en donde existe un sistema conjugado, con la misma distancia entre los enlaces carbono-carbono y con enlaces intermedios entre doble y simple. Este nuevo tipo de enlace se conoce como enlace híbrido o enlace bencénico.

Generalmente, se representa al benceno por el símbolo que corresponde al híbrido de resonancia de las estructuras de Kekulé. El círculo representa a la nube de 6 electrones  $\pi$  deslocalizados. 

Debido a la resonancia, el benceno adquiere una gran estabilidad y, en su comportamiento químico, siempre tiende a conservar la estabilidad del anillo, por lo que sus reacciones son de sustitución electrofílica en las que se conserva el anillo, y resiste las reacciones de adición, en las que se destruiría el sistema.

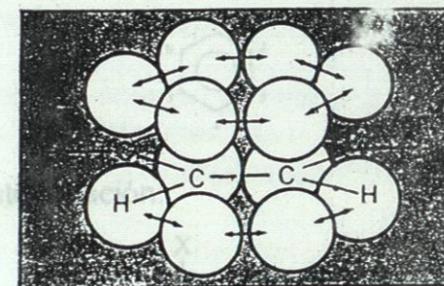
El benceno es una molécula plana muy simétrica, con los átomos de carbono colocados en los ángulos de un hexágono. Cada carbono tiene hibridación  $sp^2$ , sus orbitales híbridos se dirigen a los vértices de un triángulo equilátero, están unidos a tres átomos por uniones sigma( $\sigma$ ) con cada uno, la distancia carbono-carbono es 1,39 Å.

Posee además un orbital  $p$  puro que está perpendicular al plano.



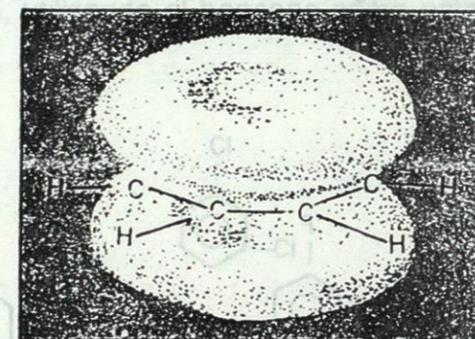
### Uniones sigma del benceno

y que al traslaparse con los orbitales  $p$  de los carbonos vecinos, permite la deslocalización de los electrones  $\pi$ .



### Traslape de orbitales $p$ para formar las uniones $\pi$

Los electrones  $\pi$  ( $\pi$ ) generan dos nubes electrónicas en forma de donas, colocadas arriba y abajo del plano del anillo bencénico.

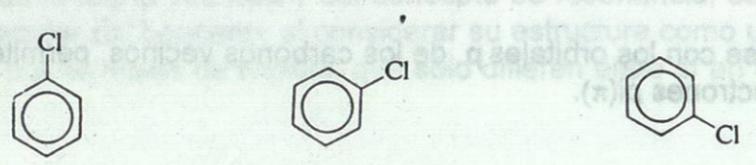


### Molécula del benceno con las nubes $\pi$

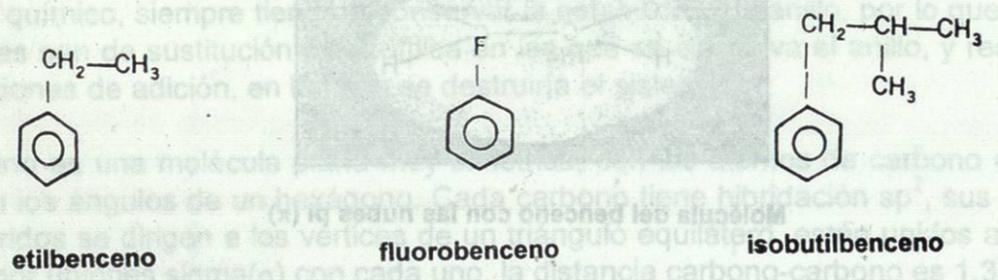
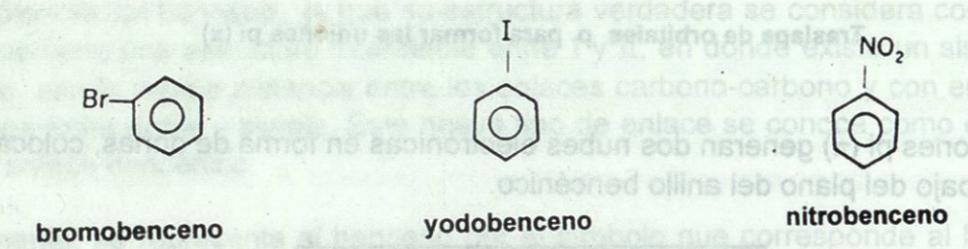
## ACTIVIDAD 13.1

## 2. Nomenclatura de los derivados del benceno

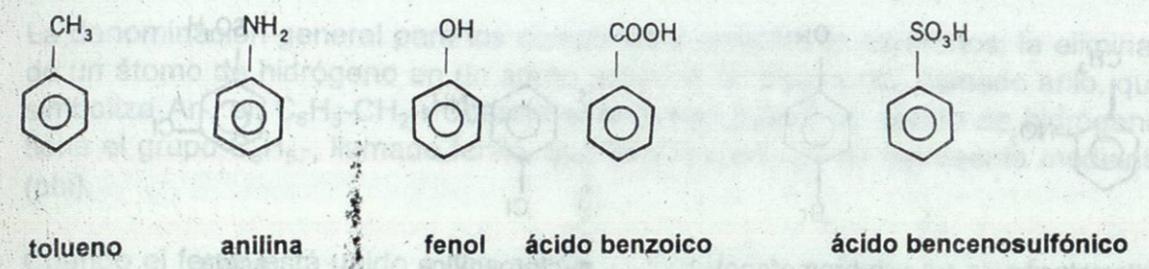
En el sistema IUPAC, podemos nombrar a los compuestos aromáticos que tienen un grupo sustituyente combinando el nombre del grupo con el de benceno. Ya que en el benceno todos los átomos de hidrógeno son equivalentes, el grupo puede estar en cualquier posición. Las siguientes estructuras se llaman clorobenceno y todas representan el mismo compuesto.



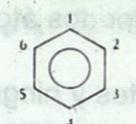
Otros ejemplos son:



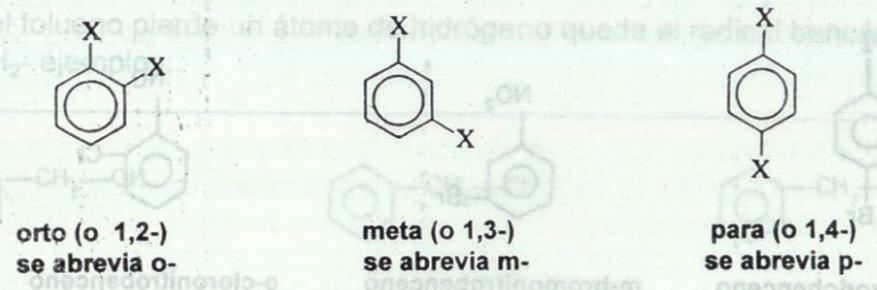
Otros derivados del benceno son más conocidos por sus nombres comunes, entre los más importantes se encuentran:



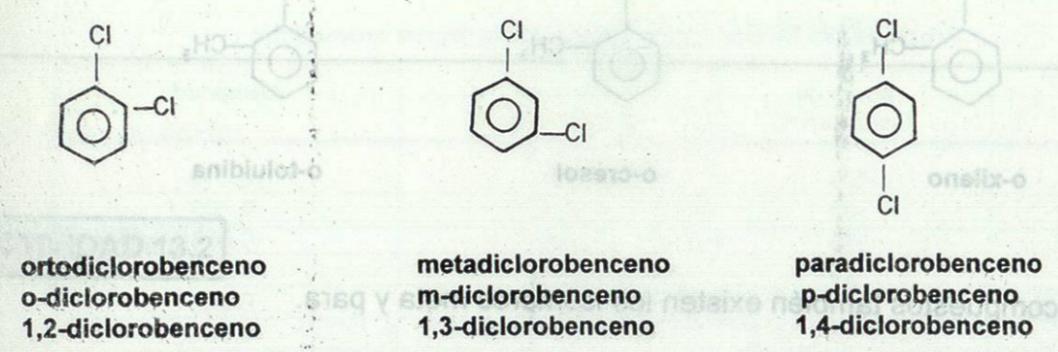
Cuando en el anillo aparece más de un grupo sustituido, las posiciones de los sustituyentes en el anillo se diferencian enumerando los carbonos:



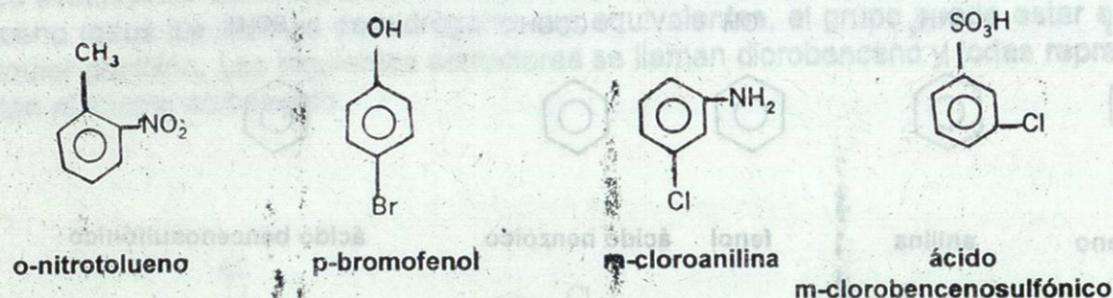
o bien, utilizando la siguiente notación:



Los siguientes ejemplos, utilizando el benceno como estructura principal, ilustran el sistema IUPAC.

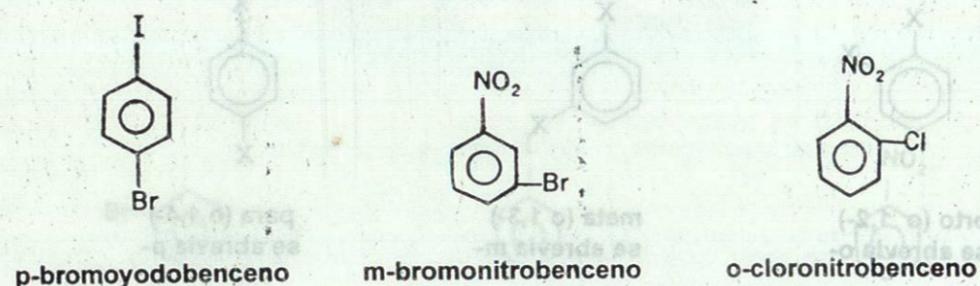


Si uno de los grupos sustituyentes le confiere un nombre especial a la molécula, el compuesto se nombra como derivado de ese compuesto, por ejemplo:

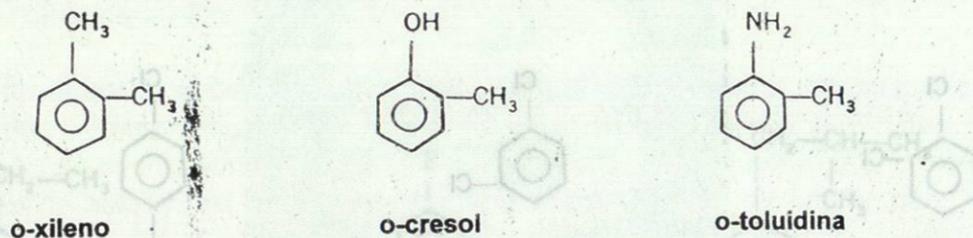


Como puede observarse, el isómero orto tiene los dos grupos sustituyentes, unidos a carbonos adyacentes; en el isómero meta, están separados por un átomo de carbono y en el isómero para, están separados por dos átomos de carbono.

Si los dos grupos sustituyentes son diferentes y ninguno de ellos le confiere un nombre especial a la molécula, se nombran sucesivamente los dos grupos en orden alfabético y se termina con la palabra benceno. Ejemplos:



Algunos compuestos disustituídos importantes que conservan sus nombres comunes son:

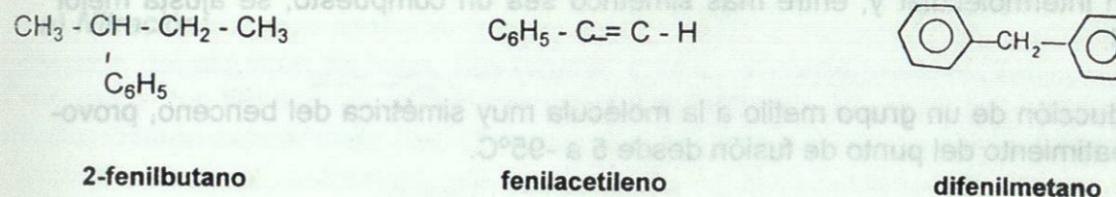


De estos compuestos también existen los isómeros meta y para.

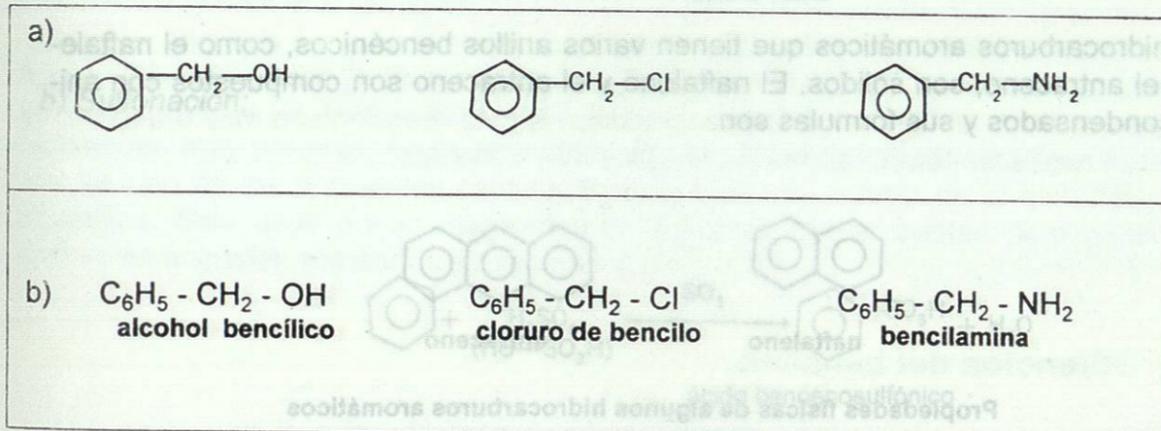
**Radicales arilo**

La denominación general para los compuestos aromáticos es arenos; la eliminación de un átomo de hidrógeno en un areno produce un fragmento, llamado arilo, que se simboliza Ar-, ej.  $C_6H_5-CH_2-$ . Cuando el benceno pierde un átomo de hidrógeno se tiene el grupo  $C_6H_5-$ , llamado fenilo, que frecuentemente se representa mediante  $\phi$  (phi).

Cuando el fenilo está unido a otro grupo de átomos de carbono se puede considerar como un sustituyente más, al igual que cualquier radical R-. Ejemplo:



Cuando el tolueno pierde un átomo de hidrógeno queda el radical bencilo  $C_6H_5-CH_2-$  ejemplos:



**ACTIVIDAD 13.2**

Compuesto	punto de fusión en °C	punto de ebullición en °C	Densidad
Benceno	5.5	80	0.879
Tolueno	-95	111	0.866
Etilbenceno	-95	136	0.861
o-xileno	-25	144	0.864
m-xileno	-48	139	0.861
p-xileno	-25	138	0.861
Nitrobenceno	5.7	212	1.204
Anilino	-6.3	234	1.026

**ACTIVIDAD 13.3**