Esta guía se elaboró para CONALIVI, entidad ejecutora del proyecto WIKITIFLOS – Inclusión Educativa digital Colombia 2020, financiado por la Agencia Española de Cooperación Internacional para el Desarrollo, AECID y la Fundación ONCE - América Latina, FOAL

QUÍMICA GRADO 11

Guía 4: Benceno tiempo: 10 horas

Estándar básico de competencia: Relaciono grupos funcionales con las propiedades físicas y químicas de las sustancias.

DBA: Representa las reacciones químicas entre compuestos orgánicos utilizando fórmulas y ecuaciones químicas y la nomenclatura propuesta por la Unión Internacional de Química Pura y Aplicada (IUPAC).

Subtemas:

- Estructura
- Resonancia
- Tipos (antraceno, naftaleno, fenantreno)

Fundamentación Teórica

EL BENCENO

Propiedades

Líquido incoloro de olor fuerte, (D=0.889 g/cm³). Hierve a 80.1°C y funde a 5.4°C; á 1 atm de presión. Es tóxico, poco soluble en agua. Es un buen disolvente.

Es el hidrocarburo aromático más importante y se ha comprobado que forma parte del humo del tabaco (la concentración en espacios cerrados puede ser alta, y por lo tanto peligrosa), además en los productos de la combustión de la gasolina y en las emisiones de la mayoría de los procesos industriales.

La contaminación de benceno en los seres humanos puede producirse por medio de la respiración, por contacto con la piel, al comer y beber alimentos contaminados con este producto, que entran a nuestro cuerpo por la boca; en la actualidad no se recomienda su uso ya que se ha determinado clínicamente que es una sustancia altamente cancerígena, pero al ser la principal materia prima para obtener resinas, plásticos, gomas, lubricantes entre otros, su utilización se realiza.

En 1865 August Kekulé científico alemán planteó una fórmula para el benceno. La fórmula propuesta por Kekulé estaba formada por un anillo de seis átomos de carbono con tres dobles enlaces alternados siendo los seis carbones equivalentes, es decir iguales e idénticos.

Actualmente se lo representa por una estructura híbrida, llamada de Resonancia o Mesomería que es empleada como una herramienta (especialmente en química orgánica) para representar ciertos tipos de estructuras moleculares cuando no es posible determinar su correcta fórmula estructural.

ESTRUCTURA DEL BENCENO

Las primeras evidencias acerca de su estructura sugirieron que la molécula estaba formada sólo por carbono e hidrógeno, de ahí que fuese clasificado como hidrocarburo y la relación entre carbono e hidrógeno de 1:1 sugirió una estructura altamente insaturada.

Posteriormente se determinó su fórmula molecular: C6H6. No obstante y a pesar de su fórmula molecular, el benceno no se comporta como un compuesto insaturado, ya que no reacciona en los ensayos de adición de bromo y de oxidación con permanganato de potasio. Las reacciones características del benceno son las de sustitución.

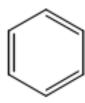
Kekulé, propuso la primera estructura para la molécula de benceno. En ellos los seis átomos de carbono están unidos formando un hexágono regular y para completar la valencia de los carbonos sugirió que el anillo se completara por tres enlaces dobles conjugados. Kekulé propuso que "los enlaces simples y dobles se intercambiaban de manera tan rápida que sería imposible llevar a cabo reacciones de adición al enlace doble tal cual lo hacen los alquenos y los alquinos".

Hoy sabemos que lo anterior no es así. Las estructuras de Kekulé representan dos estructuras contribuyentes al híbrido de resonancia (Las estructuras resonantes son imaginarias, no reales; la estructura del benceno es un híbrido que no cambia, único, en el que coexisten 3 enlaces sencillos y 3 enlaces dobles) del benceno, y difieren solamente en la posición de los electrones.

Experimentos de difracción de rayos X apoyan esta estructura. La molécula de benceno es plana, y cada átomo de carbono ocupa los vértices de un hexágono regular.

La longitud de cada uno de los seis enlaces carbono carbono es 1.39 Å (Es una unidad de medida equivalente a la diezmilmillonésima parte del metro: 0,000 000 000 1 metros), una longitud intermedia entre un enlace simple y uno doble.

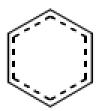
La representación del benceno en el plano puede ser realizada empleando las estructuras de Kekulé, o con líneas continuas y de trazos que simbolizan el orbital π deslocalizado como enlaces intermedios entre simples y dobles, o con un círculo en el interior del hexágono, que representa el orbital pi deslocalizado (Los orbitales deslocalizados son aquellos que tienen la misma energía, por lo tanto, los electrones "viajan" de un orbital a otro libremente).





Benceno Según Kekulé.

Esta imagen exhibe un hexágono (6 lados) y de forma intercalada tres dobles enlaces, siendo uno doble, uno sencillo, uno doble, uno sencillo, uno doble y por último uno sencillo unidos de forma cerrada, resultando en una estructura cíclica.





Benceno Con orbital π deslocalizado.

En esta imagen se representa un hexágono (6 lados) y uno de ellos con doble borde o línea, una continua y otra punteada interna y discontinua que puede ser una opción de representación, también se representa un hexágono con un círculo adentro, representando en ambos casos un orbital pi deslocalizado.

Hibrido de resonancia del benceno.

Estas representaciones sugieren que cada punto de unión (6 puntos) entre línea y línea del hexágono, indica la presencia de un carbono con sus respectivos hidrógenos, C-H; además internamente de forma alterna se incluyen tres dobles enlaces, completando así 6 enlaces, tres sencillos y tres dobles.

Estabilidad y derivados del benceno

El benceno no representa el comportamiento característico de los alquenos. Posee bastante estabilidad. Por ejemplo, no reacciona con permanganato de potasio para formar productos de ruptura, ni con ácido acuoso para generar alcoholes y tampoco con HCl gaseoso para producir halogenuros de alquilo.

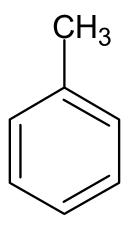
Otra prueba de la estabilidad poco usual del benceno se debe a la longitud de sus enlaces. Los enlaces sencillos carbono - carbono, tienen una longitud de 1,54 A°, y los de los dobles normales, es de 1,34 A°, en el benceno la longitud de enlace es de 1,39 A°.

El benceno, a pesar de su estructura molecular, se comporta como un compuesto relativamente saturado, por lo que permiten con cierta facilidad la sustitución de sus seis hidrógenos por átomos o grupos atómicos monovalentes originando derivados, mono, di, tri, tetra, Penta y hexasustituidos, según que le sean reemplazados 1, 2, 3, 4, 5 o sus 6 hidrógenos, respectivamente.

Los derivados del benceno pueden obtenerse mediante dos métodos:

- 1. sustitución de los hidrógenos del benceno por otro grupo.
- 2. uniendo dos anillos de benceno.

Compuestos aromáticos

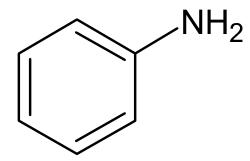


Tolueno.

En la imagen se encuentra un hexágono, el cual en sus lados contiene dobles enlaces intercalados, y en la parte superior de este se encuentra un enlace con un CH3, También lo puede encontrar como C₆H₅CH_{3.} O Ar-CH_{3,} su nombre es Tolueno o metilbenceno, (recordando la nomenclatura de los hidrocarburos)

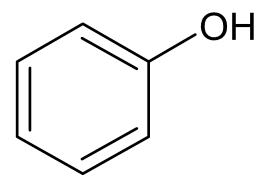
Bifenilo.

En la imagen anterior se encuentran dos bencenos (hexágonos con 3 tres dobles enlaces intercalados) unidos por un enlace en los vértices o puntos de unión, de forma que parece una mancuerna o pesa, se encuentra también como C12H10, su nombre es Bifenilo.



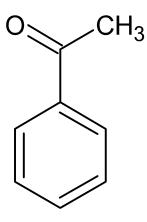
Anilina.

En la imagen se encuentra un hexágono, el cual en sus lados contiene dobles enlaces intercalados, y en la parte superior de este se encuentra un enlace con un NH2, También lo puede encontrar como C₆H₅-NH₂.o Ar-NH₂, su nombre es anilina



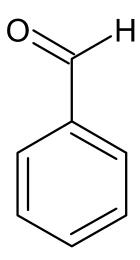
Fenol.

En la imagen se encuentra un hexágono, el cual en sus lados contiene dobles enlaces intercalados, y en la parte superior de este se encuentra un enlace con un OH, También lo puede encontrar como $C_6H_5OH.o$ Ar-OH, su nombre es fenol



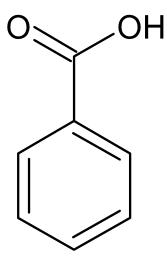
Acetofenona.

En la imagen se encuentra un hexágono, el cual en sus lados contiene dobles enlaces intercalados, y en la parte superior de este se encuentra un enlace con un COCH₃, También lo puede encontrar como C₅H₅COCH₃.o Ar-COCH₃, su nombre es Acetofenona



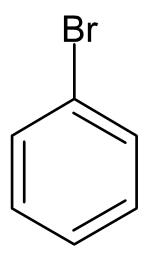
benzaldehído.

En la imagen se encuentra un hexágono, el cual en sus lados contiene dobles enlaces intercalados, y en la parte superior de este se encuentra un enlace con un COH, También lo puede encontrar como C₆H₅COH.o Ar-COH, su nombre es benzaldehído



Acido benzoico.

En la imagen se encuentra un hexágono, el cual en sus lados contiene dobles enlaces intercalados, y en la parte superior de este se encuentra un enlace con un COOH, También lo puede encontrar como C₀H₅COOH.o Ar-COOH, Su nombre es acido benzoico.



Bromo benceno.

En la imagen se encuentra un hexágono, el cual en sus lados contiene dobles enlaces intercalados, y en la parte superior de este se encuentra un enlace con un Br, También lo puede encontrar como $C_6H_5Br.o$ Ar-Br, su nombre es Bromo benceno

Los compuestos aromáticos se diferencian de otros compuestos orgánicos, principalmente, por su comportamiento químico particular, que no se restringe necesariamente a la aromaticidad en términos de emanación de fragancias, sino que incluyen una serie de desviaciones en relación con el comportamiento típico de los alquenos y arenos cíclicos y de cadena lineal. Por ejemplo, el anillo bencénico es mucho más estable a altas temperaturas y presenta reacciones de sustitución con halógenos en lugar de las de adición propias de moléculas insaturadas.

Además, como se evidencio, los cambios que se generan en ellos son las sustituciones que se dan sobre el anillo, la estructura básica es el benceno, y se sustituyen los hidrógenos por algunas especies químicas diferentes.

para que un compuesto sea aromático debe cumplir siguientes condiciones:

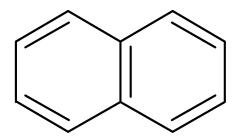
- 1) Tener una estructura cíclica con conjugación cerrada (continua).
- 2) La estructura tiene que ser plana, para que el solapamiento de los orbitales p sea efectivo.

Derivados policíclicos

Son sustancias formadas por la fusión de 2 o más anillos bencénicos, y no contienen ningún otro sustituyente. Se forman especialmente en la combustión incompleta de la materia orgánica y en varios procesos industriales.

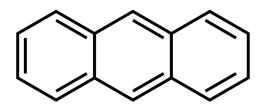
La presencia de hidrocarburos aromáticos policíclicos en los alimentos se debe a una contaminación ambiental o bien a una contaminación originada por los tratamientos térmicos a los que se somete el alimento durante su elaboración.

Algunos de estos hidrocarburos son considerados como cancerígenos, mutágenos y teratógenos. Se los ha encontrado en el humo del tabaco, por lo que los fumadores se encuentran en peligro de contraer cáncer.



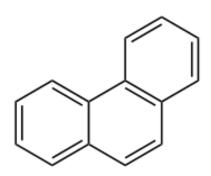
Naftaleno.

En la imagen se encuentran dos hexágonos unidos por uno de sus lados, en él se encuentran 5 dobles enlaces intercalados, también se puede encontrar como C10H8, su nombre es Naftaleno.



Antraceno.

En la imagen se encuentran tres hexágonos unidos por uno de sus lados, formando una línea recta, en esta representación se encuentran 3 dobles enlaces intercalados en el primer hexágono, dos dobles enlaces intercalados en el segundo hexágono, y 2 dobles enlaces intercalados en el último hexágono, para un total de 7 enlaces dobles intercalados en esta estructura, también se puede encontrar como C14H10, su nombre es Antraceno.



Fenantreno.

En la imagen se encuentran tres hexágonos unidos por uno de sus lados, generando una forma de V, en esta representación se encuentran 3

dobles enlaces intercalados en el primer hexágono, dos dobles enlaces intercalados en el segundo hexágono, y 2 dobles enlaces intercalados en el último hexágono, para un total de 7 enlaces dobles intercalados en estructura, también se puede encontrar como C14H10, su nombre es Fenantreno.

Ejercicios de muestra:

 Indique cual sería la forma más adecuada de representar el Yodo benceno

De acuerdo a lo explicado en los compuestos aromáticos, el Bromo benceno puede representarse como C_6H_5 Br.o Ar-Br, bajo esta lógica, como el anillo aromático no cambia, solo su sustituyente, el Yodo benceno puede representarse como C_6H_5 I o Ar-I

2. Teniendo en cuenta lo expuesto en los compuestos aromáticos, y la nomenclatura de los hidrocarburos, como se llamaría el compuesto representado por C₆H₅CH₂-CH₂-CH₃

Se evidencia que la formula contiene la representación del benceno, y además está acompañada de un CH₂-CH₂-CH₃, que, si recordamos la nomenclatura de los hidrocarburos, al tener 3 carbonos se propil, este compuesto se denominara, Propil benceno.

Ejercicios de practica:

- 1. Indaga que significa que un compuesto químico sea cancerígeno, mutágeno y teratógeno.
- 2. Investiga sobre el uso de benceno en la industria, menciona 5 sustancias donde se utilice y que tipo de compuestos forma.
- 3. Lee el cuento "El poder de la imaginación" y describe que relación encuentras con las estructuras resonantes del benceno

"El poder de la imaginación"

"Erase una vez tres gusanos de seda que ignoraban su futuro como mariposas. Sus nombres eran: Pesimista, Realista e Idealista. Se les acercaba la hora de su transformación y empezaron a sentir los primeros síntomas....

Su voraz apetito fue desapareciendo, su movilidad menguaba a gran velocidad y, finalmente, sintieron como el capullo les aislaba del mundo conocido, de la seguridad de lo cotidiano. En la oscuridad del misterio de su futuro, tuvieron pensamientos distintos:

Pesimista se dijo a sí mismo que estaba viviendo el final de su vida, y en lo más profundo de su sentir, se despidió de los buenos momentos.

Realista se dio ánimos diciéndose que todo aquello sería momentáneo y que, tarde o temprano, todo volvería a la normalidad.

Idealista sintió que, aquello que le estaba ocurriendo, podría ser la oportunidad para que se cumpliese su sueño más preciado: poder volar. Y aprovechó la oscuridad para perfeccionar sus sueños.

Cuando los tres capullos se abrieron, dejaron ver tres realidades iguales y distintas, a la vez... Pesimista era una bellísima mariposa, pero.... estaba muerta... Había muerto de miedo.

Realista era una hermosísima mariposa, pero.... a pesar de ello, empezó arrastrarse como cuando era gusano. Con satisfacción, dio las gracias al cielo por haber podido seguir igual.

Idealista, nada más ver la luz del día, buscó sus alas... y al verlas, su corazón rezumó alegría, emprendió el vuelo, y dio las gracias, repartiendo su dicha por todo el bosque."

- 4. Indique cual sería la forma más adecuada de representar el Cloro benceno.
- 5. Teniendo en cuenta lo expuesto en los compuestos aromáticos, y la nomenclatura de los hidrocarburos, como se llamaría el compuesto representado por C₆H₅CH₂-CH₃ O Ar- CH₂-CH₃