

SESIÓN 21 — El benceno: descubrimiento, estructura de Kekulé y el problema de su fórmula

Química III · U1 RAP2 — Benceno y aromaticos (12 sesiones de 1h)

Generado por PDF Project

Introducción al RAP 2

RAP 2

Competencia en construcción

En el RAP 2 de Química III (Unidad Didáctica 1) el estudiante debe "utilizar reacciones químicas orgánicas con base en la traducción de la nomenclatura del benceno, identificando sus repercusiones ecológicas". Hoy abrimos el bloque de los hidrocarburos aromáticos, cuya molécula base es el benceno.

DUR ACI ÓN

1 hora (60 min)

- 5 min: activación de conocimientos previos.
- 15 min: descubrimiento histórico y fórmula molecular.
- 15 min: propuesta de Kekulé y el problema de la estructura.
- 10 min: evidencia experimental (longitudes y reactividad).
- 10 min: ejercicio resuelto.
- 5 min: cierre y resumen.

Objetivos de aprendizaje

OBJ

Al terminar la sesión el estudiante

- Identifica quién aisló el benceno y en qué contexto histórico (Faraday, 1825).
- Explica la estructura en anillo hexagonal propuesta por Kekulé.
- Plantea el problema estructural del benceno: fórmula C_6H_6 con alto grado de insaturación pero reactividad atípica.
- Diferencia la estabilidad del benceno frente a un alqueno típico.

Activación de conocimientos previos

ACT

Sonda inicial (preguntas al grupo)

- ¿Qué es la insaturación? ¿Cómo se calcula el grado de insaturación (GD)?
- Si una molécula es C_6H_6 , ¿cuántos grados de insaturación tiene?
- ¿Qué reacciones esperarías de una molécula con 4 grados de insaturación?

Recuerde al grupo que en las sesiones 1-20 ya calcularon el grado de insaturación para alquenos y alquinos, y que una molécula con dobles o triples enlaces suele sufrir adición (p. ej. Br₂, H₂) con facilidad.

REC
UEN
TO

Grado de insaturación (GD)

Para un hidrocarburo C_nH_m: $GD = (2n + 2 - m) / 2$. Para C₆H₆: $GD = (12 + 2 - 6) / 2 = 4$. Cuatro grados: equivalentes a tres dobles enlaces y un ciclo, o a un anillo con tres dobles enlaces.

Desarrollo del tema

El descubrimiento de Faraday (1825)

El hallazgo

HIS
T1

Michael Faraday aisló en 1825 una sustancia incolora, líquida y muy inflamable a partir del gas del alumbrado (gas de carbón, derivado del alquitrán de hulla). Lo obtuvo condensando el residuo aceitoso de la producción de gas para alumbrado público en Londres. Faraday reportó la fórmula C₂H (lo que hoy sabemos equivale a una fracción de la real C₆H₆) y lo llamó inicialmente "bicarburo de hidrógeno".

La corrección de la fórmula

HIS
T2

Fue el químico alemán Eilhard Mitscherlich quien, en 1834, obtuvo la misma sustancia por destilación seca del ácido benzoico con cal y estableció la fórmula correcta C₆H₆, dándole el nombre de benCeno (por el ácido benzoico). La relación 1:1 carbono-hidrógeno ya era extraña: un hidrocarburo tan pobre en hidrógeno era inusual para la época.

La propuesta de Kekulé (1865)

La estructura cíclica

KEK
1

August Kekulé propuso en 1865 que los seis carbonos forman un anillo hexagonal en el que cada carbono lleva un hidrógeno y se enlazan mediante dobles y simples enlaces alternados. Según la leyenda (relatada por el propio Kekulé en 1890), la idea le vino en una siesta en la que vio serpientes que se mordían la cola (el símbolo del ouroboros), sugiriendo la naturaleza cíclica.

KEK
2

Representación de Kekulé

El anillo se dibuja con tres enlaces dobles alternados:

hexágono con enlaces simples y dobles alternados (1,2; 3,4; 5,6) Carbono 1 = CH, carbono 2 = CH, ... todos equivalentes en composición.

El problema de la fórmula (núcleo de la sesión)

PRO
B1

Incongruencias

Con GD = 4 (un ciclo + tres dobles enlaces) uno esperaría que el benceno se comportara como un trieno cíclico y reaccionara rápidamente por adición. Sin embargo:

- No decolora bromo (Br₂) en oscuridad ni a temperatura ambiente (un alqueno sí lo hace).
- No añade H₂ con facilidad a menos que se usen catalizadores drásticos (Ni, 200 °C).
- Sus enlaces C-C son todos iguales (1.39 Å), intermedios entre simple (1.54 Å) y doble (1.34 Å).
- Es menos reactivo de lo que predice su insaturación y, cuando reacciona, lo hace por sustitución, no por adición.

Dos estructuras de Kekulé

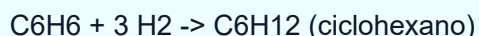
PRO
B2

Para explicar la equivalencia de los carbonos, Kekulé sugirió que las dos formas (con los dobles enlaces en posiciones 1-2/3-4/5-6 frente a 2-3/4-5/6-1) se intercambian rápidamente (oscilación). Hoy sabemos que el benceno no "oscila": es una estructura híbrida donde la carga y los electrones están repartidos por todo el anillo. Esto lo veremos formalmente en la Sesión 22 (resonancia).

PRO
B3

Estabilidad

El benceno es inusualmente estable. Si se compara la energía de hidrogenación:



La energía de hidrogenación del benceno es ~208 kJ/mol inferior (la molécula es más estable) que la esperada para tres dobles enlaces aislados; esa diferencia es la energía de resonancia o estabilización aromática (~150 kJ/mol).

Aclare al grupo: el benceno NO es "un trieno". La estabilidad extra es la clave de por qué sustituye en vez de adicionar (lo desarrollaremos en la Sesión 26).

Ejemplos y datos clave

DAT Datos para fijar

- Fórmula molecular: C_6H_6 ; masa molar 78.11 g/mol.
- Estado: líquido incoloro, olor dulce característico, punto de ebullición 80.1 °C.
- Muy inflamable, ligeramente soluble en agua.
- Tóxico y carcinógeno: se le asigna riesgo ambiental (lo retomaremos en sesiones de impacto ecológico).

Ejercicio resuelto

Cálculo de insaturación y predicción

Tip aplicado: $GD = (2n+2-m)/2$

Enunciado: 1) Calcule el grado de insaturación de C_6H_6 . 2) Si C_6H_6 fuera un trieno cíclico normal, escriba qué reacción de adición cabría esperar con Br_2 y con H_2 (ecuaciones tipo). 3) Explique con una frase por qué el benceno, pese a tener 4 grados de insaturación, no decolora Br_2 en condiciones normales. Resolución: 1) $GD = (2 \cdot 6 + 2 - 6)/2 = (14 - 6)/2 = 8/2 = 4$. Corresponde a un anillo (1) + tres dobles enlaces (3). 2) Como trieno cíclico esperaríamos adición:

- Adición de bromo: $C_6H_6 + 3 Br_2 \rightarrow C_6H_6Br_6$ (hexabromociclohexano, por adición de 3 Br_2).
 - Hidrogenación: $C_6H_6 + 3 H_2 \rightarrow C_6H_{12}$ (ciclohexano).
- 3) El benceno NO decolora Br_2 en oscuridad y a temperatura ambiente porque sus electrones π están deslocalizados y la molécula posee estabilidad aromática: romper el anillo para adicionar sería energéticamente desfavorable; en su lugar reacciona por sustitución electrofílica. (La explicación formal de resonancia llega en la Sesión 22.)

Conexión con el programa

Refuerce que este RAP conecta química con impacto ecológico: el benceno es contaminante del aire y del agua. Vincule con las sesiones de compuestos oxigenados (RAP 1) donde ya hablaron de sustancias tóxicas y biodegradabilidad.

Cierre y resumen

- El benceno fue aislado por Faraday (1825) del gas de alumbrado; fórmula correcta C_6H_6 establecida por Mitscherlich.
- Kekulé (1865) propuso el anillo hexagonal con dobles enlaces alternados.
- El problema: $GD = 4$ pero reactividad atípica; enlaces iguales, sin adición fácil.
- Esta anomalía se explica por resonancia/deslocalización (Sesión 22).

Tarea: traer mañana un dibujo del anillo de benceno y calcular el GD de C_7H_8 (tolueno, lo veremos en la Sesión 25).