

SESIÓN 22 — Resonancia, deslocalización y estabilidad aromática (regla de Hückel $4n+2$)

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

Generado por PDF Project

Conexión con la sesión anterior

REC AP

De la Sesión 21

Dejamos el benceno con un problema: fórmula C_6H_6 (4 grados de insaturación) pero reactividad atípica, enlaces C-C iguales y sin adición fácil. Hoy resolvemos esa anomalía con el concepto de resonancia y la regla de Hückel.

DUR ACI ÓN

60 min

- 5 min activación.
- 15 min resonancia y deslocalización.
- 15 min hibridación sp^2 y nube π .
- 15 min regla de Hückel y ejemplos.
- 10 min ejercicio resuelto.

Objetivos de aprendizaje

OBJ

Al finalizar

- Explica qué es la resonancia y por qué el benceno es un híbrido de dos estructuras de Kekulé.
- Describe la deslocalización de los 6 electrones π en una nube sobre y bajo el anillo.
- Aplica la regla de Hückel ($4n+2$) para decidir si un compuesto es aromático.
- Distingue aromático, antiaromático y no aromático.

Activación de conocimientos previos

ACT

Sonda

- ¿Qué significa "enlace deslocalizado"? (concepto visto en iones poliatómicos como el carbonato, RAP de inorgánica).
- ¿Qué hibridación tienen los carbonos en un alqueno? ¿Y un carbono con doble enlace?
- ¿Por qué un doble enlace $C=C$ es reactivo hacia adición?

Recuérdelos que en sesiones previas de Química III ya usaron el concepto de resonancia en estructuras de Lewis de iones como el ozono (O₃) y el carbonato (CO₃²⁻).

Resonancia en el benceno

RES
1

No es un trieno

El benceno NO es una molécula con tres dobles enlaces fijos. Es un híbrido de resonancia de dos estructuras de Kekulé equivalentes. La estructura real no "oscila" entre ellas; es una mezcla donde los electrones π pertenecen a toda la molécula.

RES
2

Representaciones

- Estructura A: dobles enlaces en 1-2, 3-4, 5-6.
- Estructura B: dobles enlaces en 2-3, 4-5, 6-1.
- Híbrido: anillo con un círculo en el interior (la notación aceptada del benceno) que representa la nube π continua.

Use el círculo interior del hexágono como representación canónica del benceno; evite dibujar "dobles fijos" porque induce al error de pensar que hay enlaces distintos.

Hibridación sp^2 y nube π

HIB
1

Geometría

Cada carbono del benceno está hibridado sp^2 : tres orbitales sp^2 en el plano (forman los enlaces C-C sigma y C-H sigma, con ángulos de 120°) y un orbital p perpendicular al plano. Los seis orbitales p se solapan lateralmente formando un sistema π continuo y deslocalizado por encima y por debajo del anillo.

HIB
2

Consecuencias

- Todos los C-C son idénticos: longitud 1.39 Å (entre simple 1.54 y doble 1.34).
- Los 6 electrones π forman una nube que estabiliza la molécula.
- El anillo es planar (condición clave para la aromaticidad).

Energía de resonancia

EST

La energía de estabilización aromática (energía de resonancia) del benceno es ~150 kJ/mol (≈ 36 kcal/mol). Evidencia: la hidrogenación del benceno a ciclohexano libera ~208 kJ/mol MENOS que la de tres dobles enlaces aislados; esa diferencia es la estabilidad extra que impide la adición fácil.

Regla de Hückel ($4n+2$)

Criterio de aromaticidad

HÜC
1

Un compuesto es aromático si cumple TRES condiciones: 1) Es cíclico y planar. 2) Tiene conjugación completa: cada átomo del anillo aporta un orbital p (todos sp^2 o con par de electrones en p). 3) Tiene $(4n+2)$ electrones pi, con $n = 0, 1, 2, 3...$

El benceno

HÜC
2

Para el benceno: 6 electrones pi $\rightarrow 4n+2 = 6 \rightarrow n = 1$. Cumple las tres condiciones $\rightarrow$ aromático.

Anti y no aromático

HÜC
3

- Antiaromático: cumple 1 y 2 pero tiene $4n$ electrones pi ($n=1 \rightarrow 4$, p.ej. ciclobutadieno). Muy inestable.
- No aromático: no cumple alguna condición (p. ej. ciclooctatetraeno, C_8H_8 , con 8 electrones pi sería $4n$ pero adopta forma de bañera no planar $\rightarrow$ no aromático).

Ejemplos rápidos

EJH

- Benceno: 6 e-pi ($n=1$) aromático.
- Naftaleno: 10 e-pi ($n=2$) aromático.
- Anión ciclopentadienilo: 6 e-pi ($n=1$) aromático.
- Ciclobutadieno: 4 e-pi ($n=1$) antiaromático.

Ejercicio resuelto

Clasificación de aromaticidad

Tip aplicado: $4n+2$ y plano + conjugado

Enunciado: 1) El ciclobutadieno (C_4H_4) es un anillo de 4 carbonos con dobles enlaces conjugados. ¿Es aromático, antiaromático o no aromático? Justifique. 2) El ciclooctatetraeno (C_8H_8) tiene 8 electrones pi. ¿Por qué no es aromático pese a ser cíclico y conjugado? 3) Calcule n para el naftaleno (10 e-pi) y concluya. Resolución: 1) C_4H_4 tiene 4 electrones pi. Cumple ser cíclico, planar y conjugado, pero $4 = 4n$ ($n=1$), NO $4n+2$. Por tanto es antiaromático (altamente inestable, se dimeriza). 2) El ciclooctatetraeno tiene 8 e-pi = $4n$ ($n=2$), que en principio sería antiaromático; pero para evitar la antiaromaticidad adopta una geometría no planar en forma de bañera, rompiendo la conjugación continua. Al no ser planar ni totalmente conjugado, es no aromático (se comporta como un polieno normal y sufre adición). 3) $4n+2 = 10 \rightarrow n = 2$. Con anillo planar y conjugado completo, el naftaleno es aromático.

Refuerzo conceptual

Anticípales que la regla de Hückel es la "prueba de fuego" para reconocer aromáticos. En la Sesión 26 ligaremos esta estabilidad con el mecanismo de sustitución electrofílica: el anillo "defiende" su aromaticidad.

Cierre y resumen

CIE
RRE

Lo esencial

- El benceno es un híbrido de resonancia; sus electrones pi están deslocalizados en una nube.
- Cada carbono es sp^2 ; el anillo es planar y conjugado.
- Regla de Hückel: $4n+2$ electrones pi + planar + conjugado = aromático.
- Aromaticidad = estabilidad (≈ 150 kJ/mol); antiaromático = inestable; no aromático = sin estabilidad especial.

Tarea: dibujar el naftaleno y contar sus electrones pi para confirmar que es aromático.