

## **TEMA 10 (III)**

### **HIDROCARBUROS SATURADOS, INSATURADOS Y AROMÁTICOS**

#### **COMPUESTOS AROMÁTICOS**

**10.1 Nomenclatura de los derivados del benceno.**

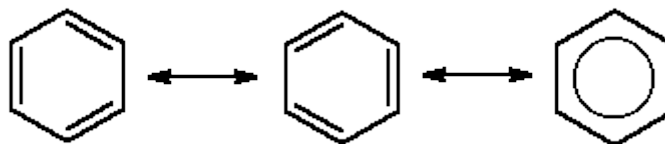
**10.2 La estructura del benceno. El carácter aromático.**

**10.3 Obtención y propiedades de los hidrocarburos aromáticos.**

**10.4 Compuestos heterocíclicos**

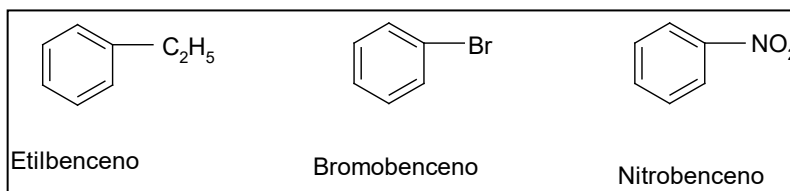
### 10.1 Nomenclatura de los derivados del benceno.

El benceno, de fórmula molecular  $C_6H_6$ , es el sistema básico de los hidrocarburos aromáticos (Arenos). La estructura del benceno puede representarse como un ciclo plano de seis eslabones, con tres dobles enlaces conjugados, por lo que podría llamarse ciclohexatrieno, pero debido al fenómeno de resonancia, dicho nombre no tiene sentido.

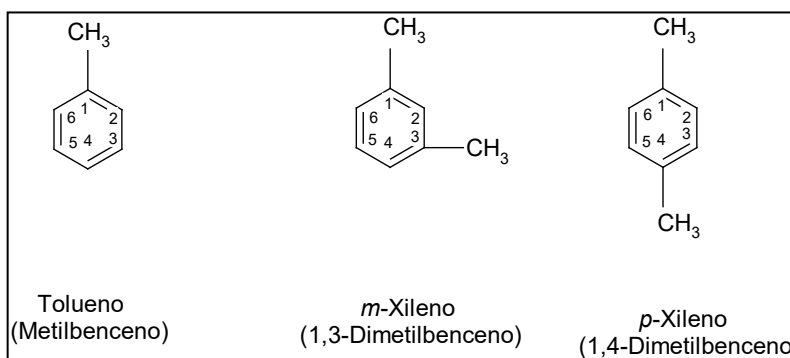


Al igual que los compuestos de cadena abierta o alifáticos, los compuestos aromáticos tienen nombres vulgares y sistemáticos:

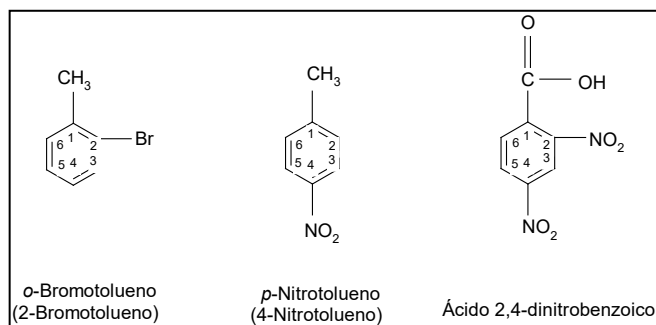
- Cuando el benceno lleva un radical se nombra primero dicho radical seguido de la palabra “-benceno”



- Cuando hay dos sustituyentes en el anillo bencénico deben indicarse sus posiciones relativas mediante números que los localicen o mediante prefijos (orto (o), meta (m), para (p)):

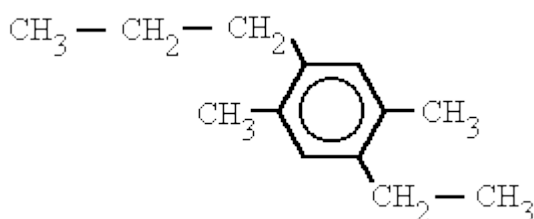


- Cuando se emplea el nombre vulgar se presupone que el sustituyente responsable del nombre, por ejemplo, el metilo en el caso del tolueno está en el carbono nº 1. Cuando el nombre no es vulgar sino sistemático, por ejemplo, p-cloronitrobenceno el grupo cuyo nombre precede al del hidrocarburo es el que se considera en el carbono nº 1:

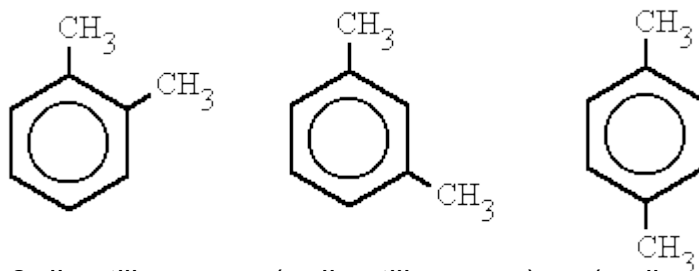


- En el caso de haber más de dos sustituyentes, se numeran de forma que reciban los localizadores más bajos, y se ordenan por orden alfabético. En caso de que haya varias opciones decidirá el orden de preferencia alfabético de los radicales.

1-Etil-2,5-dimetil-4-propilbenceno



- Los dimetilbencenos se llaman xilenos.



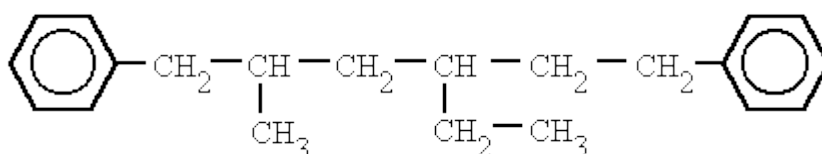
1,2-dimetilbenceno, (o-dimetilbenceno) o (o-xileno)

1,3-dimetilbenceno, (m-dimetilbenceno) o (m-xileno)


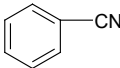
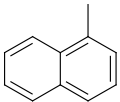
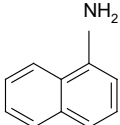
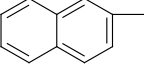
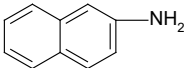
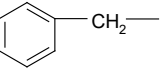
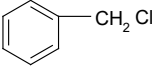
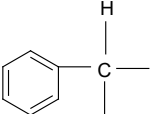
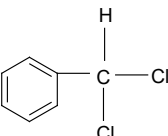
1,4-dimetilbenceno, (p-dimetilbenceno) o (p-xileno)

- Cuando el benceno actúa como radical de otra cadena se utiliza el nombre de "**fenilo**" y con frecuencia se abrevia como  $C_6H_5$  o Ph.

4-Etil-1,6-difenil-2-metilhexano



- El nombre **bencilo** (fenilmetilo), se reserva al grupo derivado del tolueno al eliminar un átomo de hidrógeno del grupo metilo. Así se puede decir que la eliminación de un átomo de H de un areno o hidrocarburo aromático produce un grupo arilo.

GRUPOS ARILO MÁS FRECUENTES			
Estructura	Nombre del grupo	Ejemplo	Nombre del ejemplo
	Fenilo		Cianuro de fenilo
	$\alpha$ -Naftilo		$\alpha$ -Naftilamina
	$\beta$ -Naftilo		$\beta$ -Naftilamina
	Bencilo		Cloruro de bencilo
	Benzal		Cloruro de benzal

## 10.2 La estructura del benceno. El carácter aromático.

Algunos de estos valiosos productos químicos se pueden obtener a partir del petróleo, siendo la base para la preparación de muchos productos farmacéuticos, colorantes, plásticos, pesticidas, explosivos y otros muchos productos de empleo cotidiano. Aunque el olor del alquitrán es repugnante, este contiene hidrocarburos aromáticos, algunos de los cuales tienen un olor muy agradable, de ahí el nombre "aromático".

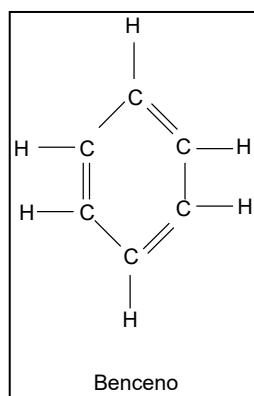
### 10.2.1 La estructura del benceno

En 1825 Michael Faraday, un científico a quien se le recuerda por su trabajo con la electricidad, aisló una nueva sustancia a partir de un gas que en aquella época se utilizaba para iluminación. Este compuesto, se llama benceno.

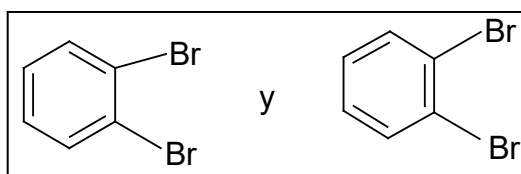
En 1834 se demostró que el benceno tiene la fórmula empírica CH. Más tarde se demostró que su fórmula molecular es  $C_6H_6$ .

Puesto que la fórmula molecular del benceno proporcionaba un único átomo de hidrógeno por cada carbono, cabía esperar que la molécula fuese insaturada y por lo tanto muy reactiva.

En 1865 August Kekulé propuso una estructura para el benceno. Sugirió que los átomos de carbono en el benceno se encuentran en un anillo, que están enlazados entre sí por enlaces sencillos y dobles alternados y que a cada átomo de carbono se encuentra unido un átomo de hidrógeno. Esta estructura satisfacía los requisitos de que los átomos de carbono forman cuatro enlaces y que todos los átomos de hidrógeno del benceno son equivalentes.

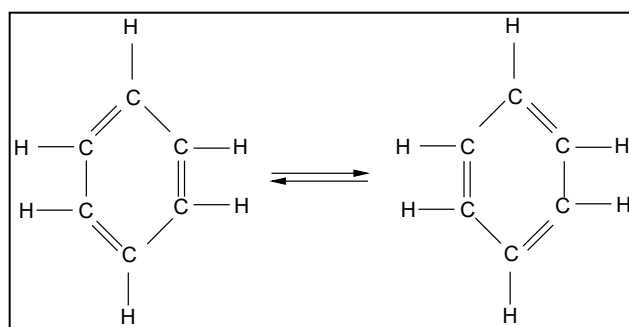


Sin embargo, pronto se presentó un problema en la estructura de Kekulé, ya que esta predice haber dos 1,2-dibromobenzenos diferentes:

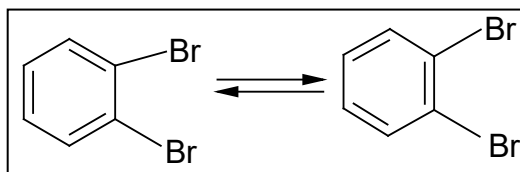


Pero siempre se ha encontrado uno sólo 1,2-dibromobenceno.

Para hacer frente a esta objeción, Kekulé propuso que las dos formas del benceno (y los derivados del benceno) se encuentran en un estado de equilibrio y que dicho equilibrio se establece en forma tan rápida que evita el aislamiento de los dos compuestos.

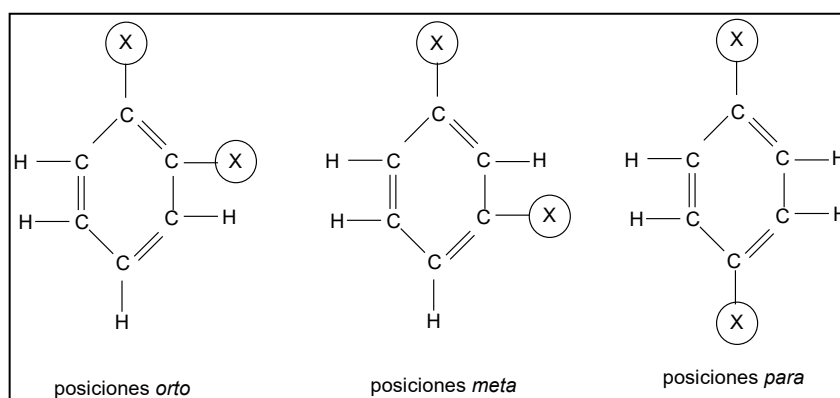


Es así como los dos 1,2-dibromobenzenos se equilibrarían con tanta rapidez que esto explicaría el porqué los químicos no han sido capaces de aislar las dos formas.

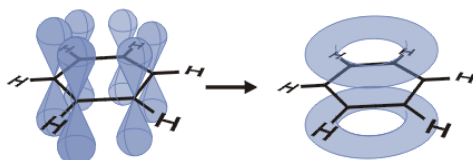


Ahora se sabe que esta hipótesis estaba equivocada y que no existe tal equilibrio. Sin embargo la formulación de Kekulé para la estructura del benceno fue un avance importante y todavía se usa hoy en día.

La estructura propuesta para el benceno permitía tres derivados disustituídos isómeros en posiciones orto, meta y para.



Hoy en día admitimos que la estructura del benceno es la de un híbrido de resonancia intermedio entre las dos estructuras. Los seis electrones  $\pi$  que parecen formar los tres dobles enlaces entre carbonos alternos, se extienden en realidad a lo largo de los seis átomos de carbono. Así pues, parecen una nube por encima y por debajo del plano del anillo de forma semejante a dos rosquillas hexagonales que encierran como en un bocadillo los seis átomos de carbono y los seis de hidrógeno.



### 10.3 Propiedades físicas y obtención de los hidrocarburos aromáticos.

#### 10.3.1 Propiedades físicas.

La planaridad de las moléculas de los hidrocarburos aromáticos influye mucho en sus propiedades físicas: sus densidades son mayores que la de los alifáticos y sus P. Eb. Y P.f. son más altos. Los puntos de ebullición aumentan regularmente con su peso molecular.

Todos estos hidrocarburos, con excepción de los condensados, son líquidos.

Todos ellos son insolubles en agua, poseen olores característicos, y, en algunos casos, huelen a aromas. El benceno disuelve un 1% de agua y es miscible en todas las proporciones con productos de una amplia gama de polaridades como gasolina, éteres, cetonas, alcoholes y ácidos carboxílicos, y, es por ello, un buen disolvente para reacciones industriales. Es muy volátil y sus vapores son inflamables estando declarado como cancerígeno por las autoridades de la salud. También lo es el 1,2-benzopireno, que se produce en la combustión incompleta de hidrocarburos.

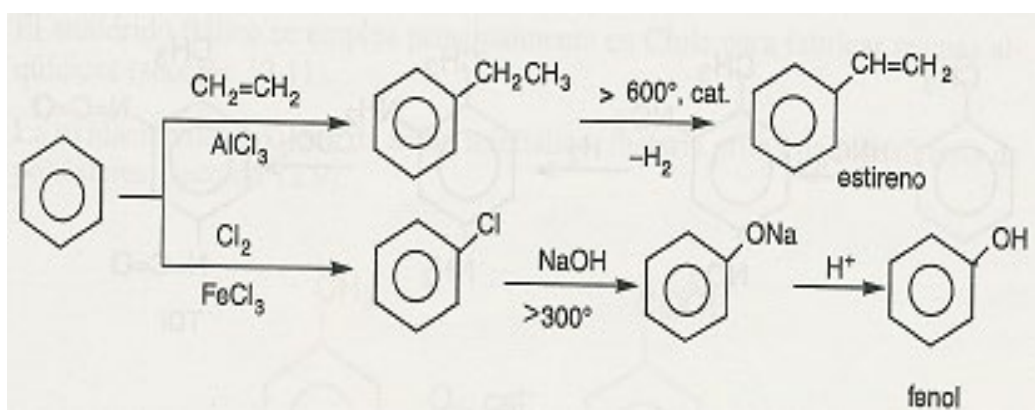
Se usa como combustible, como materia prima en colorantes, productos farmacológicos etc.

### **10.3.2 Obtención hidrocarburos aromáticos.**

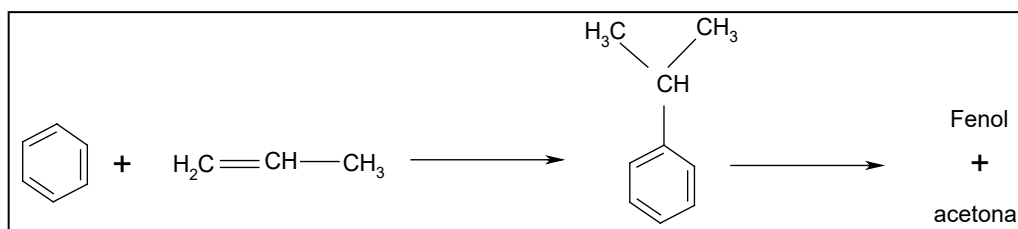
Los hidrocarburos aromáticos tienen mucha importancia industrial, debido a que son materia prima para más del 60% del tonelaje de plásticos, elastómeros, fibras sintéticas, colorantes, insecticidas, medicamentos, etc. Los siguientes son los nombres con que se designan los tres principales hidrocarburos aromáticos que se encuentran en el petróleo y en la hulla: benceno, tolueno y xilenos (orto, meta y para) la mezcla de estos tres se denomina BTX y, detrás, el naftaleno y el antraceno. Por tanto las dos fuentes de hidrocarburos aromáticos son la hulla y el petróleo.

**10.3.2.1. Del benceno** se preparan dos productos industriales muy importantes:

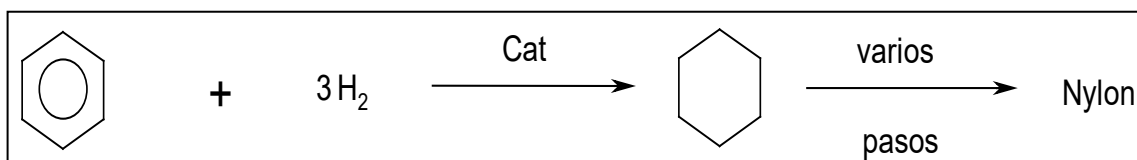
1. Casi el 50% se utiliza para obtener etilbenceno, después estireno y finalmente plástico.



2. Alrededor del 20% para obtener fenol vía cumeno. El fenol se utiliza para obtener resinas fenólicas y para numerosas síntesis de plaguicidas, medicamentos, etc.

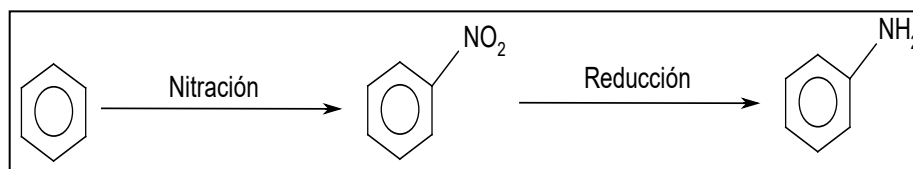


3. Entre el 15 y el 20% se usa para obtener nylon vía ciclohexano.

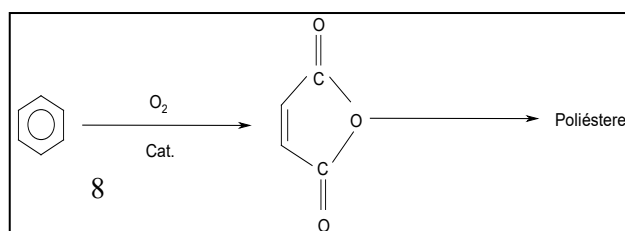


4. Otros usos importantes son:

- Para anilina vía nitrobeneno la cual es intermedio para colorantes y numerosas síntesis.

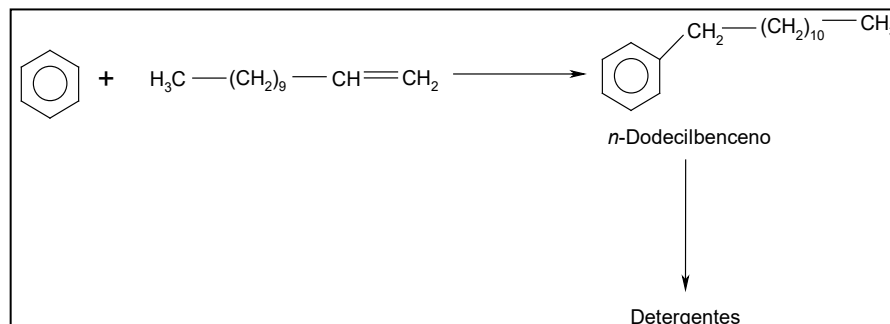


- Para fibras y barnices de poliéster a través de anhídrido maleico

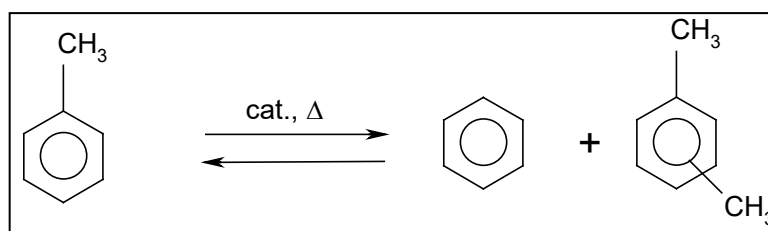




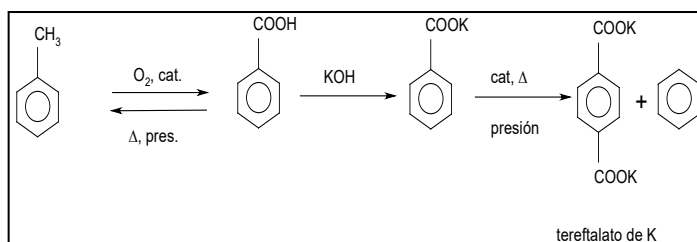
- Para obtener detergentes vía dodecilbenceno



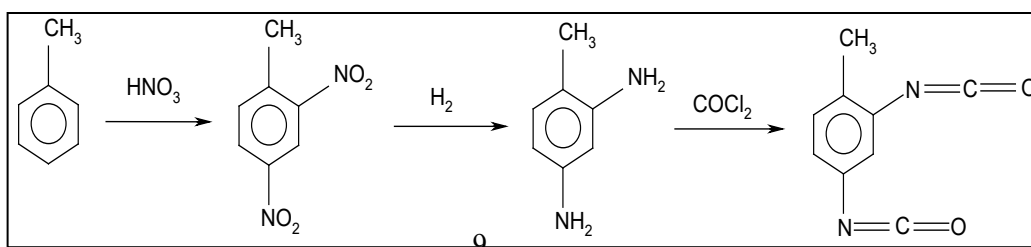
**10.3.2.2 El tolueno** es un hidrocarburo barato y abundante de la industria petroquímica. Sus reacciones son variadas. Se obtiene de las mismas fuentes que el benceno y se separa de éste y de los xilenos por sucesivas destilaciones fraccionadas. En relación con la demanda comercial se produce un exceso de tolueno por lo que lo transformaremos en benceno por hidrodealquilación. En mucha menor escala se utiliza la desproporción catalítica.



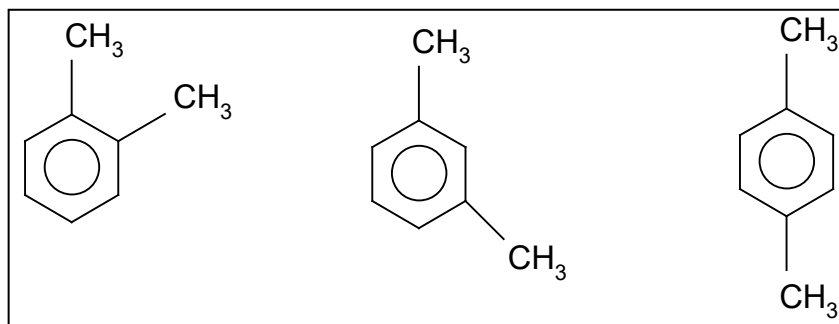
Otro ejemplo de desproporción es la transformación del benzoato de potasio conseguido por oxidación de tolueno, en tereftalato de K, materia prima para la síntesis de poliésteres



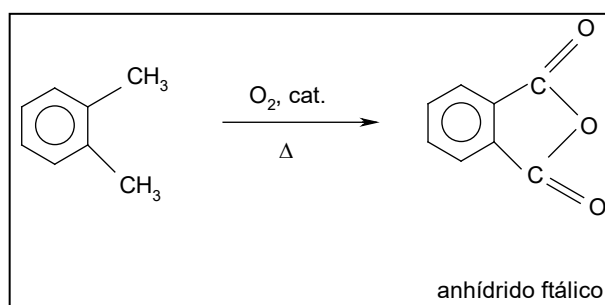
La nitración controlada del tolueno da el producto dinitrado en posiciones 2 y 4 el que por hidrogenación y tratamiento con fosgeno (COCl<sub>2</sub>) produce el 2,4-toluendiisocianato (TDI), que es una de las materias primas para la síntesis de poliuretanos.



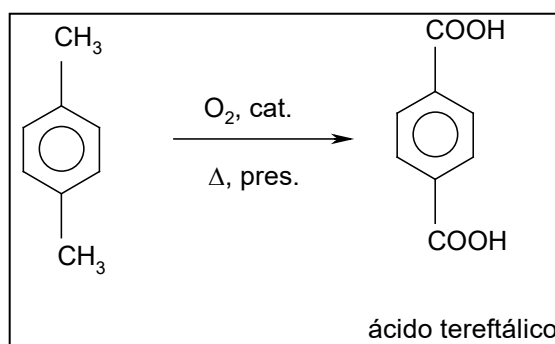
**10.3.2.3** La mezcla de los tres isómeros líquidos del **xileno** no se puede separar por destilación directa, debido a que los puntos de ebullición son muy cercanos. Se recurre entonces a la separación por congelación del isómero para, que deja la mezcla orto-meta, que se puede separar por cuidadosa destilación fraccionada.



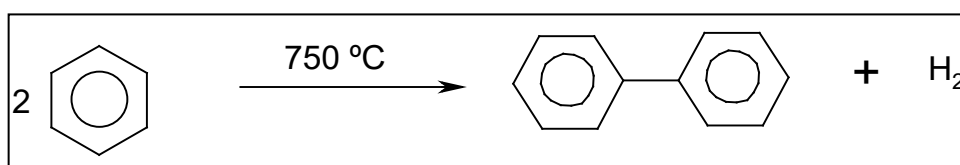
La oxidación del o-xileno produce anhídrido ftálico, reacción que es del mismo tipo que la que experimenta el tolueno. El anhídrido ftálico se emplea principalmente en Chile para fabricar resinas alquídicas.



La oxidación del p-xileno da ácido tereftálico, materia prima para la síntesis de poliésteres.

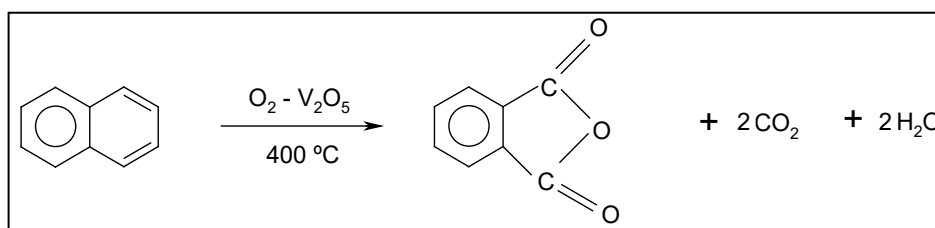


**10.3.2.4.** Dentro de los **hidrocarburos aromáticos policíclicos**, el bifenilo se obtiene industrialmente, por fuerte calentamiento del benceno.



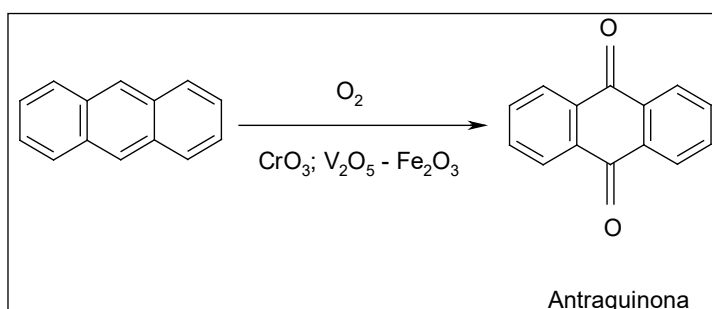
Se utiliza como fluido calefactor industrial para temperaturas elevadas y tiene importancia en la industria de los colorantes.

El naftaleno es el de mayor importancia y se obtiene de las fracciones medias destiladas del alquitrán de hulla y su principal uso es la producción de anhídrido ftálico.



También se utiliza para la fabricación de insecticidas, disolventes (decalina y tetralina) y productos intermedios de la industria de los colorantes.

El antraceno se obtiene de las fracciones pesadas de la destilación del alquitrán de hulla. Se usa en la industria para obtener antraquinona muy importante en la industria de colorantes.

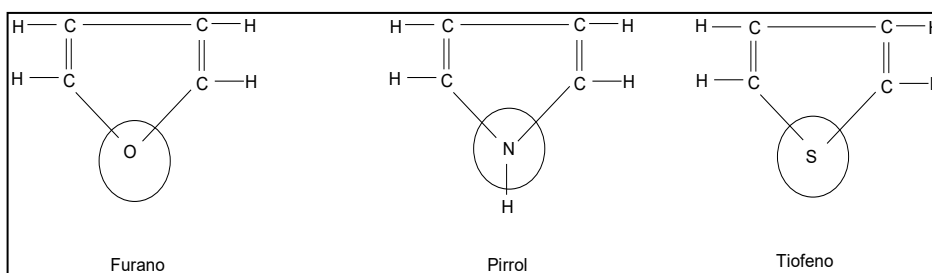


## 10.4 Compuestos heterocíclicos

Los compuestos cíclicos estudiados hasta el momento han sido, en su mayor parte, anillos en los que sólo estaban enlazados átomos de carbono. Estos anillos se denominan carbocíclicos. Los compuestos cíclicos que contienen, además de carbono, uno o más átomos de otra clase en el anillo, se denominan heterocíclicos. Los heteroátomos que aparecen con mayor frecuencia en los anillos heterocíclicos son el nitrógeno, el oxígeno y el azufre.

Los heterociclos **pentagonales** (cinco eslabones) más sencillos son los que sólo tienen un heteroátomo. Consideremos tres: furano, pirrol y

**tiofeno.**



### **BIBLIOGRAFÍA:**

- **GRAHAM SOLOMONS.** Fundamentos de Química orgánica. Limusa Noriega Editores, 1999.
- **WALTER W. LINSTROMBERG.** Química orgánica. Reverté S.A., 1979.
- **M<sup>a</sup> DEL PILAR CABILDO.** Química Orgánica. UNED, Madrid 1999.
- **FRANCIS A.** Química orgánica. McGraw-Hill Interamericana, México 2006.
- **JUAN CARLOS VEGA.** Química orgánica para estudiantes de ingeniería. Alfaomega, Mexico 2000.