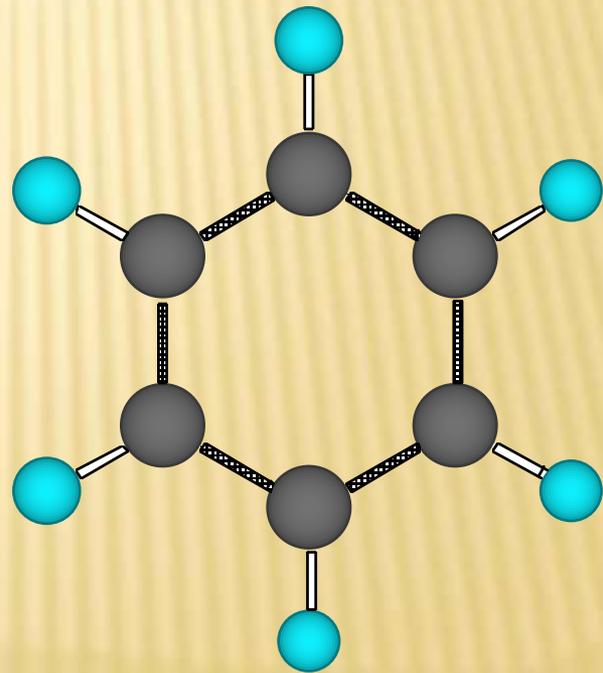
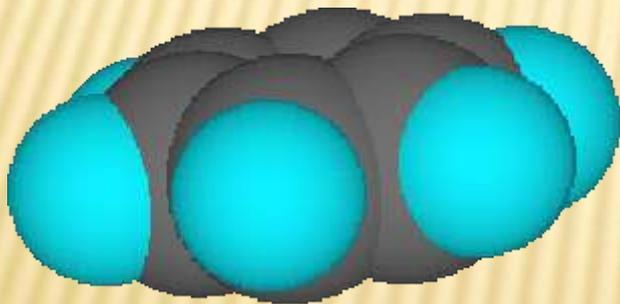


# COLEGIO VALLADOLID

Multiversidad Latinoamericana  
Campus Celaya Bachillerato  
Nombre: Noé Hernández Romero  
Semestre: EJ-2015  
Tema: Compuestos aromáticos  
Fecha: 05 de Junio 2015

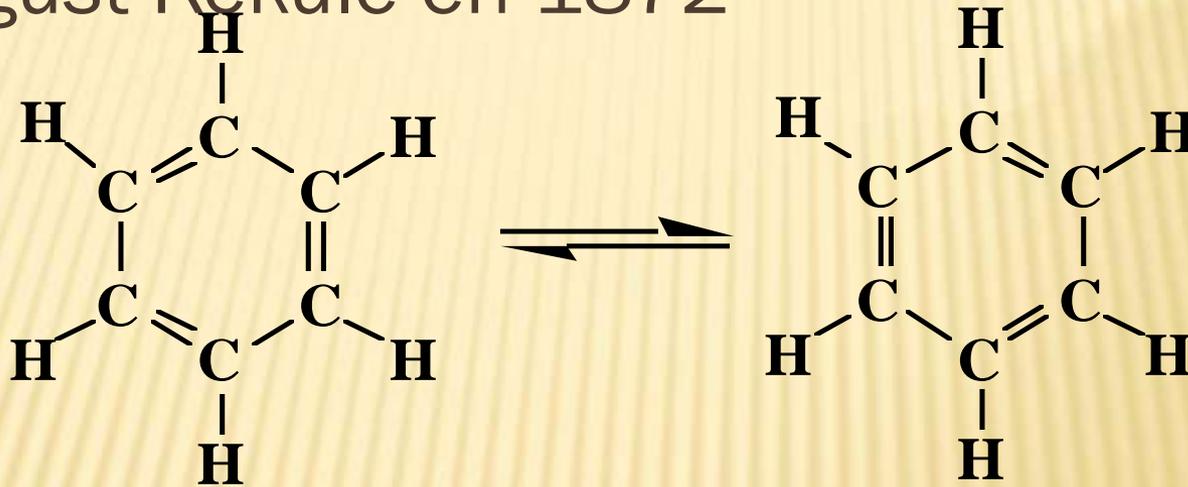
---

# Compuestos Aromáticos



# BENCENO - KEKULÉ

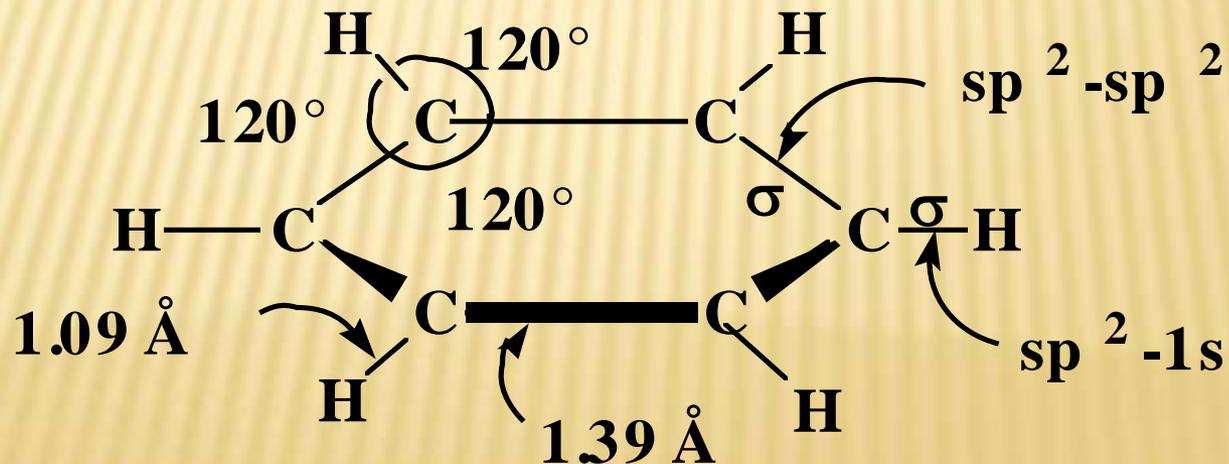
- ✘ La primera estructura del benceno es propuesta por August Kekulé en 1872



- + esta estructura, sin embargo, no consideró la reactividad química diferente del benceno

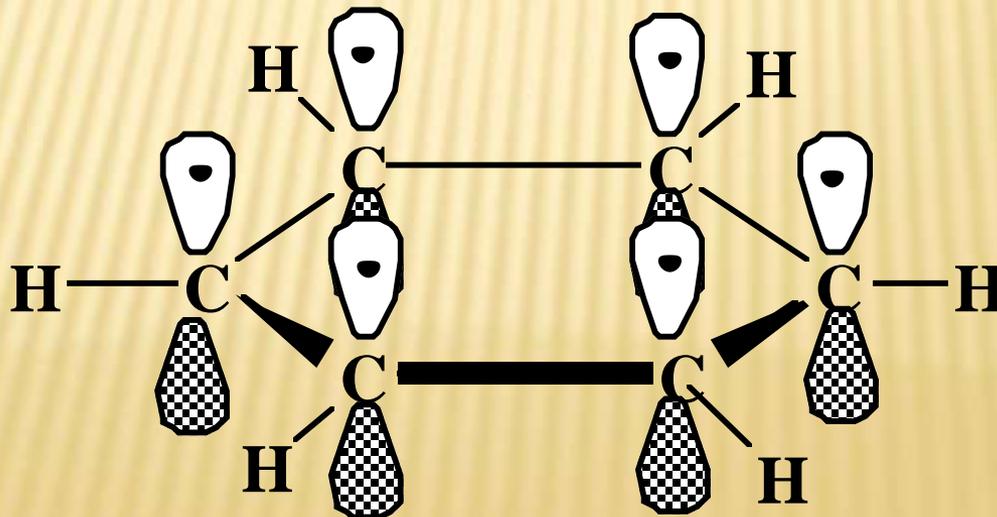
# BENCENO – MODELO O.M.

- ✗ El concepto de hibridación de orbitales atómicos y de la teoría de la resonancia, desarrollados en los años 1930, proviene la primera descripción adecuada de la estructura del benceno.
- + El esqueleto de carbono es un hexágono regular, con todos C-C-C y H-C-C ángulos de enlace  $120^\circ$



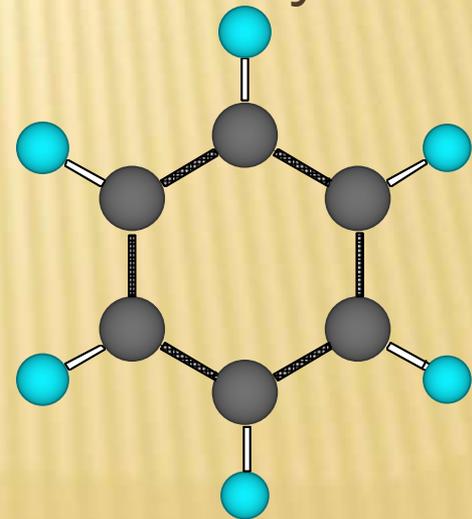
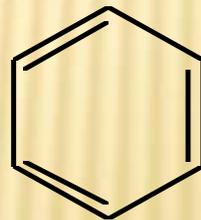
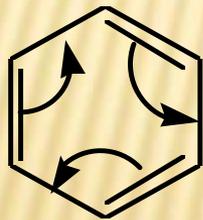
# BENCENO – MODELO O.M.

- + Cada carbono tiene un orbital 2p sin hibridar conteniendo un electrón
- + Con cada uno de los seis orbitales paralelos 2p se forma una nube continua orbital pi.
- + La densidad electrónica del benceno se encuentra en un anillo por encima del plano y otro por debajo del plano



# BENCENO - RESONANCIA

- ✗ A menudo representamos el benceno como un híbrido de dos estructuras equivalentes de Kekulé
- + cada una hace una contribución igual al híbrido, y los enlaces C-C están intermedios entre dobles y sencillos.



# BENCENO - RESONANCIA

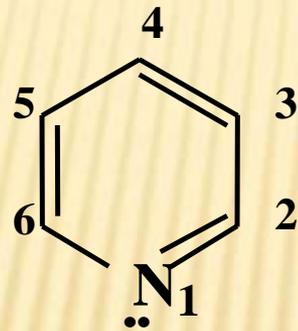
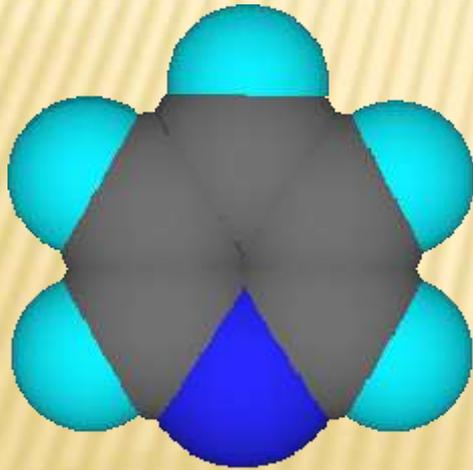
---

- ✘ **Energía de Resonancia** : la diferencia en la energía, entre la de un híbrido de resonancia y la de la estructura hipotética más estable en la cual los electrones son localizados sobre átomos particulares y en enlaces particulares
- ✘ Un modo de estimar la energía de resonancia del benceno es de comparar los calores de hidrogenación del benceno y ciclohexeno

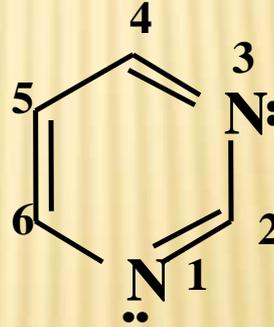


# HETEROCICLOS AROMÁTICOS

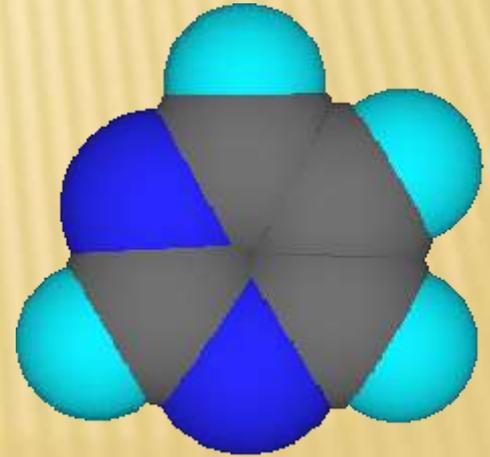
- ✘ **Compuestos Heterociclos** : contienen uno o más átomos diferentes al carbono en el anillo.
- ✘ Piridina y pirimidina son heterociclos análogos del benceno. Son aromáticos.



**Piridina**



**Pirimidina**



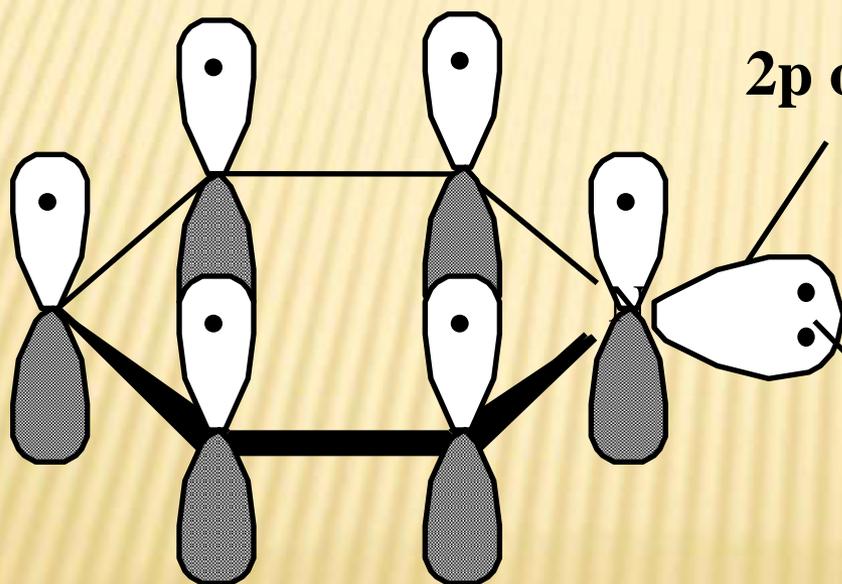
# PIRIDINA

- ✗ Piridina tiene 32 kcal/mol de energía de resonancia, ligeramente menor que la del benceno

**Este  $sp^2$  orbital híbrido es**

**perpendicular a los seis**

**2p orbitales del sistema pi**



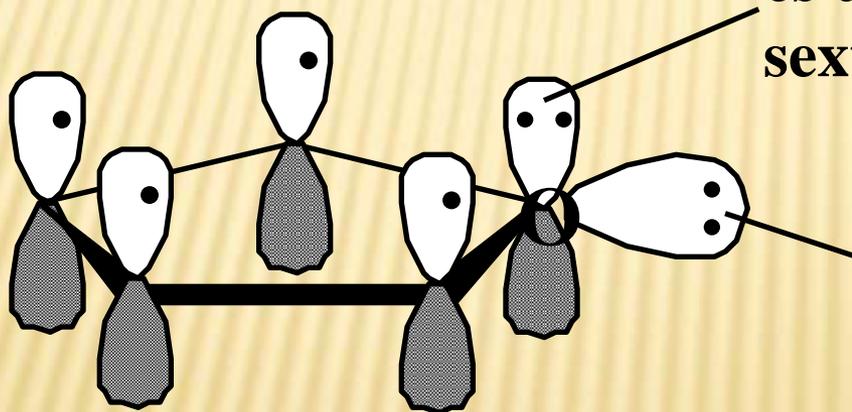
**Este par de electrones**

**No forma parte del**

**Sextete aromático**

# FURANO

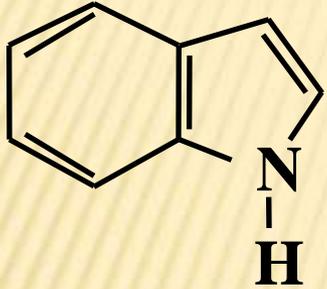
- ✗ De los dos orbitales con dos pares de electrones del átomo de oxígeno en el furano, uno forma parte del sextete aromático y el otro no.
- + La energía de resonancia del furano es 16 kcal/mol



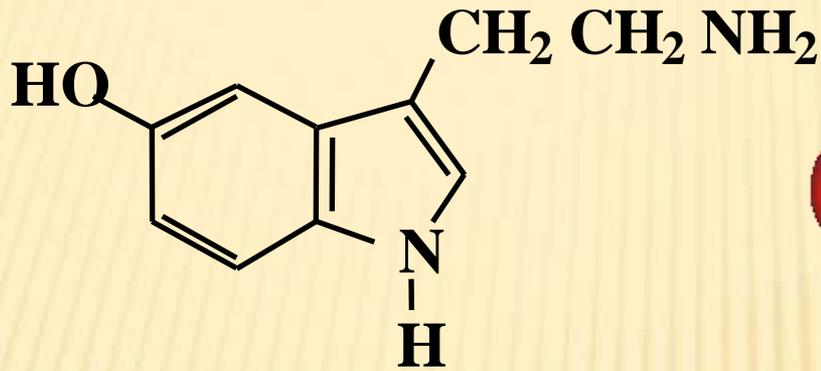
**este par de electrones  
es una parte del  
sextete aromático**

**este par de  
electrones  
no lo es**

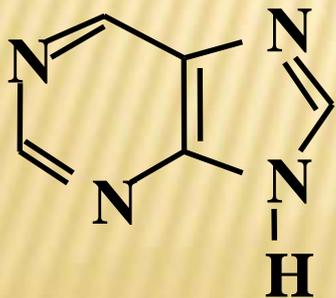
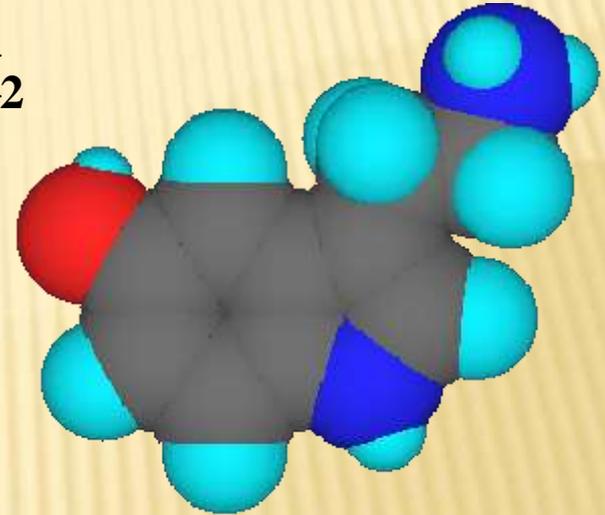
# OTROS HETEROCICLOS



**Indol**



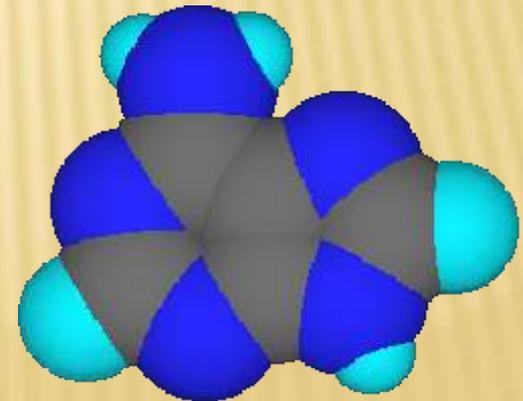
**Serotonina**  
(un neurotransmisor)



**Purina**



**Adenina**



# NOMENCLATURA

✗ alquilbencenos monosustituídos son nombrados como derivados del benceno

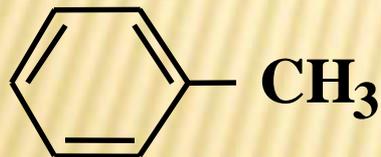
+ Pocos mantienen nombres comunes



**Benceno**



**Etilbenceno**



**Tolueno**



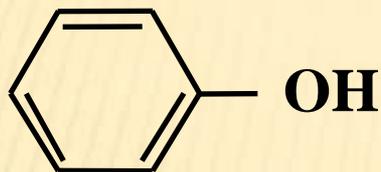
**Cumeno**



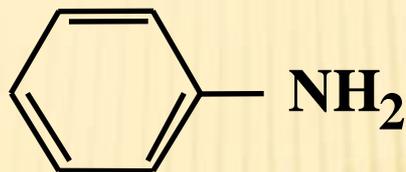
**Estireno**

# NOMENCLATURA

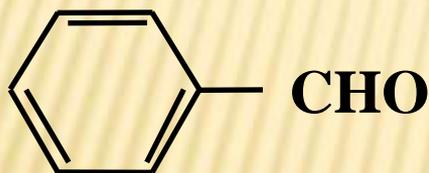
+ Nombres comunes que se mantienen



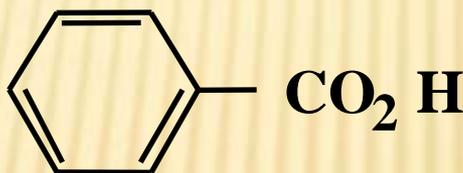
**Fenol**



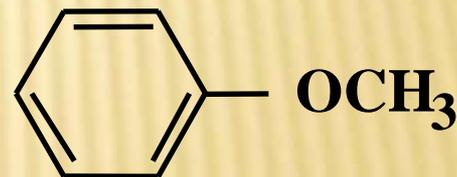
**Anilina**



**Benzaldehido**



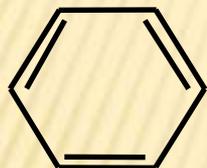
**Benzoico ácido**



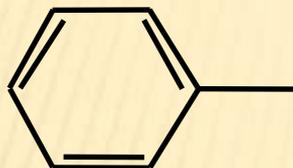
**Anisol**

# NOMENCLATURA

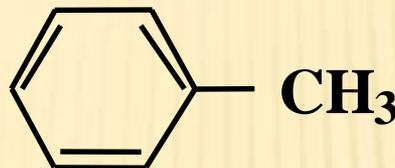
+ bencil y fenil grupos



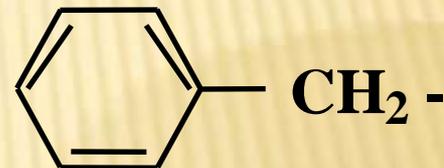
**Benceno**



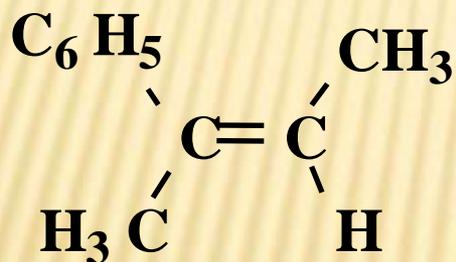
**Fenilo  
grupo**



**Tolueno**



**Bencilo grupo**

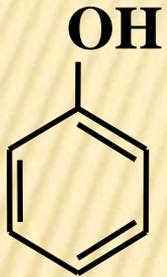


**(Z)-2-Fenil-2-buteno**

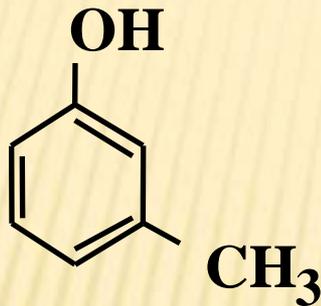


# FENOLES

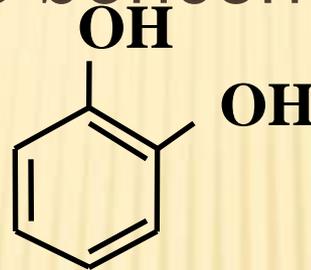
- ✗ El grupo funcional del fenol es un grupo -OH enlazado a un anillo de benceno



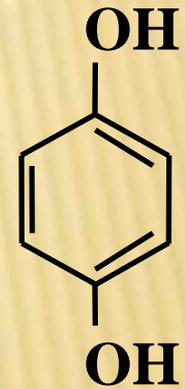
Fenol



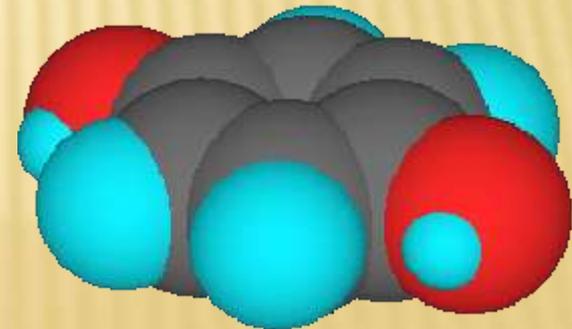
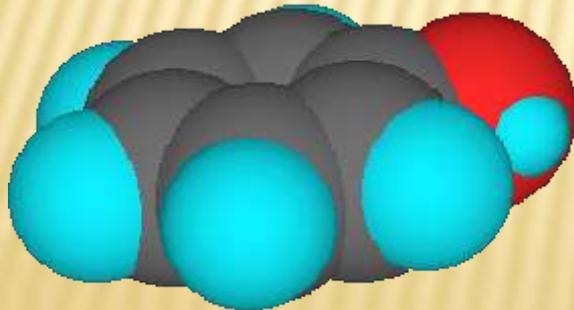
3-Metilfenol  
(m-Cresol)



1,2-Bencenodiol  
(Catecol)



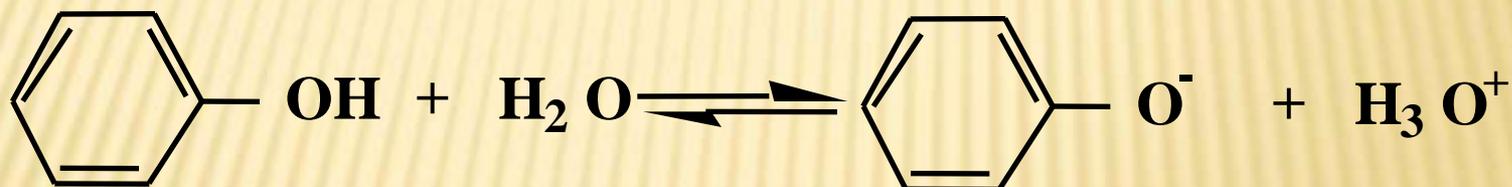
1,4-Bencenodiol  
(Hidroquinona)



# ACTIVIDAD DE LOS FENOLES

- Los fenoles son significativamente más ácidos que los alcoholes, compuestos que también contienen el grupo -OH

**Fenol:  $pK_a = 9.95$**



**Etol:  $pK_a = 15.9$**



# ACTIVIDAD DE LOS FENOLES

- ✘ Explicamos la acidez aumentada de fenoles en relación con alcoholes de manera siguiente
  - + delocalización de la carga negativo sobre un ión fenóxido lo estabiliza en relación con un ión alcóxido
  - + porque un ión fenóxido es más estable que un ión alcóxido, los fenoles son ácidos más fuertes que alcoholes
- ✘ Note que mientras este razonamiento nos ayuda a entender por qué los fenoles son más ácidos que alcoholes, esto no nos da ningún modo de predecir cuánto más fuerte son ellos