

EVOLUCIÓN HISTÓRICA DE LA ESTRUCTURA MOLECULAR DEL BENCENO

Lorena Tobares

Instituto de Ciencia y Tecnología de los Alimentos.
FCEFN-Universidad Nacional de Córdoba.
Av. Velez Sarsfield 5016. Ciudad Universitaria.
E-mail: lorenatobares@hotmail.com

***Resumen:** El benceno fue descubierto en 1825 por Michael Faraday. El resultado del análisis experimental revelaba una fórmula molecular C_6H_6 , causando una verdadera sorpresa ya que mostraba una proporción de carbono hidrógeno inusualmente pequeña. El principal problema que enfrentaban los químicos de la época para determinar la disposición de los átomos en la molécula, era el limitado desarrollo de la teoría estructural. La combinación entre la experimentación, las teorías, los conceptos y la utilización de la tecnología disponible, hicieron posible demostrar que el benceno es un híbrido de resonancia.*

Palabra Claves: benceno, experimentación, teorías, conceptos, tecnología.

1 INTRODUCCIÓN

La Epistemología es la rama de la filosofía que se pregunta sobre la naturaleza del conocimiento: ¿Cómo podemos conocer? (disponible en internet, www.efn.uncor.edu).

Según Chalmers, no es posible llegar a la comprensión de los distintos procesos que están ocurriendo en el mundo que nos rodea, con sólo observar cuidadosamente los acontecimientos tal como ocurren típica y naturalmente. Con el fin de recoger hechos relevantes para la identificación y especificación de diversos procesos que ocurren en la naturaleza, es en general necesario intervenir prácticamente. En otras palabras, es necesario hacer experimentos.

La ciencia experimental comienza en el Renacimiento. Es a partir de este período, en que ocurre una gran transformación de los modos de pensamiento (Geymonat, 1971). Nace una fuerte convicción de que los experimentos pueden ser utilizados para explorar un comportamiento, o pueden ser realizados por simple curiosidad, a ver qué pasa. Pero no debe hacerse un experimento totalmente desprovisto de propósito, porque no se aprende nada de él (disponible en internet, www.efn.uncor.edu). Los experimentos son importantes porque pueden servir para contrastar una hipótesis o teoría, pero al mismo tiempo también pueden requerir una nueva teoría, conceptos y un instrumental adecuado para poder interpretar de manera correcta los resultados obtenidos (disponible en internet, www.sc.ehu.es).

Uno de los descubrimientos químicos más importantes de la época renacentista, fue el benceno. El desarrollo de la evolución del conocimiento a cerca de la estructura molecular de benceno, ha sido estudiada por varios autores: Devore, Fessenden, Morrinson, Boyd; debido a la gran importancia de esta molécula en química orgánica ya que las propiedades de este hidrocarburo vinieron a ser atributos general de los compuestos aromáticos.

El asentamiento de la actual estructura del benceno está estrechamente ligada con este gran cambio filosófico ocurrido en la época renacentista, en la cual, el saber se edifica no sólo por la simple observación del comportamiento de la materia sino también por las experiencias concretas.

El objetivo del trabajo fue realizar una descripción del desarrollo de la estructura molecular del benceno y examinar la importancia que tuvieron en el mismo, la experimentación, la tecnología, los conceptos y teorías .

2 CONCEPTO E HISTORIA DE LA QUÍMICA ORGANICA

La química orgánica es el estudio de los compuestos del carbono. Los compuestos del carbono constituyen los productos químicos centrales en todos los seres vivos de este planeta. Los compuestos del carbono incluyen el ADN, forman las proteínas de la sangre, músculos y

piel ; constituyen las enzimas que catalizan reacciones que ocurren en nuestro cuerpo. Junto con el oxígeno presente en el aire, los compuestos del carbono proporcionan la energía que mantiene la vida (Devore,1970).

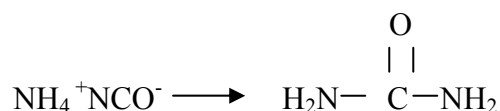
A continuación se realizará un breve recorrido por el desarrollo de la Química Orgánica a lo largo de su historia que permitirá una visión más concreta sobre las bases en que se asentará la elucidación del benceno.

Durante la década de 1780 los científicos empezaron a distinguir entre compuestos orgánicos y compuestos inorgánicos. Los compuestos orgánicos se identificaron como compuestos que podían ser obtenidos de organismos vivos. Los compuestos inorgánicos eran aquellos que provenían de fuentes no vivas. Junto con esta diferenciación, se alentó una creencia llamada “vitalismo”. De acuerdo con esta idea, era necesaria la intervención de una “fuerza vital” para la síntesis de un compuesto orgánico. Esta síntesis, sostenían los químicos de entonces, sólo podía tener lugar en los organismos vivos y no podía llevarse a cabo en los matraces de un laboratorio químico.

En 1784, Antoine Lavoisier demostró por primera vez que los compuestos orgánicos se componían de carbono, hidrógeno y oxígeno.

En 1811 y 1831, Justus Liebig, J.J. Berzelius y J.B.A. Dumas, elaboraron los métodos cuantitativos para determinar la composición de los compuestos orgánicos.

Entre 1828 y 1850, se sintetizaron varios compuestos claramente “orgánicos” a partir de fuentes claramente “inorgánicas”. La primera de estas síntesis la llevó a cabo Friedrich Wöhler encontró que el compuesto orgánico urea (un constituyente de la orina) podía obtenerse por la evaporación de una solución acuosa que contenía el compuesto inorgánico llamado cianato de amonio.

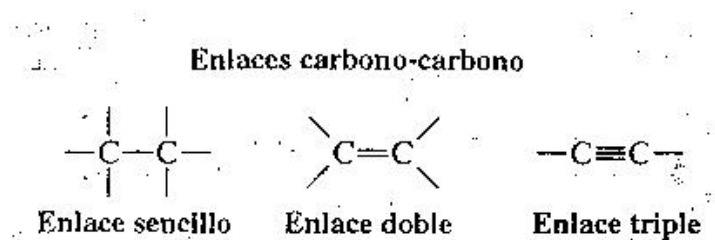


Aunque el “vitalismo” desapareció lentamente de los círculos científicos después de la síntesis de Wöhler, su paso hizo posible el florecimiento de la ciencia de la química orgánica, ocurrido desde 1850.

En 1860 se aclaró la gran confusión cuando Stanislao Cannizzaro demostró que la hipótesis de Amedeo Abogador podía usarse para distinguir entre fórmulas empíricas y moleculares. Como resultado de esto, se vio que muchas moléculas que anteriormente parecían tener la misma fórmula estaban compuestas de un número diferentes de átomos. Por ejemplo, el etileno y el ciclohexano tienen la misma fórmula empírica: CH₂. Sin embargo, tienen fórmulas moleculares distintas correspondientes a C₂H₄ y C₆H₁₂, respectivamente.

Entre 1858 y 1861, August Kekulé, Archibald Scott Couper y Alexander M. Butlerov, trabajando independientemente, sentaron las bases de una de las teorías más importantes de la química orgánica: la teoría estructural. Dos son las premisas fundamentales:

- 1- Los átomos de los elementos en los compuestos orgánicos pueden formar un número fijo de enlaces. La medida de la capacidad se llama valencia. El carbono es tetravalente, es decir, los átomos de carbono forman cuatro enlaces. El oxígeno es divalente, los átomos de oxígeno forman dos enlaces. El hidrógeno y por lo general los halógenos son monovalentes, sus átomos forman solamente un enlace.
- 2- Un átomo de carbono puede usar una o más de sus valencias para formar enlaces con otros átomos de carbono.



En su publicación original, Couper representó estos enlaces por medio de líneas. En su texto de 1861, Kekulé dio a la ciencia de la química orgánica su definición más moderna: estudio de los compuestos del carbono.

La importancia de la teoría estructural puede apreciarse si se considera un ejemplo simple. Estos son dos compuestos que tienen la misma fórmula molecular, C_2H_6O , pero estos compuestos tienen notablemente distintas. Uno de los compuestos es el dimetil éter y el otro es el alcohol etílico.

Como la fórmula molecular de estos dos compuestos es la misma, no nos proporciona una base para comprender la diferencia entre ellos. Sin embargo, la teoría estructural resuelve esta situación.

Durante la última parte del siglo XIX, la teoría de la valencia Kekulé-Couper-Butlerov, se aplicó sistemáticamente a todos los compuestos orgánicos conocidos. Un resultado de este trabajo fue la colocación de los compuestos orgánicos en una de dos amplias categorías; los compuestos se clasificaron como alifáticos o aromáticos. Ser clasificado como alifático significaba que el comportamiento químico era “similar al de las grasas”. Ser clasificado como aromático significaba que el compuesto era “fragante” (Fessenden et al., 1983).

3 EL BENCENO

El estudio de la clase de compuestos que los químicos orgánicos llaman compuestos aromáticos comenzó con el descubrimiento de un nuevo hidrocarburo por Michael Faraday en 1825. Faraday, aisló un compuesto puro a partir de una mezcla aceitosa que condensaba

del gas del alumbrado, que era el combustible que se empleaba en las lámparas de gas (Morrison et al.,1990).

Es importante señalar que durante esta época renacentista, la influencia de Aristóteles comenzó a debilitarse. La simple observación del comportamiento de la materia y la teoría en la que el mundo estaba compuesto por solamente 4 elementos ,comenzaba arrojar dudas sobre las explicaciones simples de carácter filosófico, astrológico y místico que Aristóteles había proporcionado. El nacimiento de la ciencia experimental guarda relación con el descubrimiento de que existen técnicas muy precisas para dominar racionalmente el curso de la experiencia, es decir, para provocar ciertos fenómenos que pueden repetirse a voluntad y medirse con exactitud matemática, en condiciones controladas por el intelecto. Fue necesario un profundo cambio filosófico para inducir a los espíritus cultos a estudiar ordenada y seriamente dichas técnicas, es decir, para superar el doble prejuicio de que toda actividad práctica resultase demasiado inferior para ser digna de investigación racional, o demasiado recóndita y misteriosa para ser accesible a las fuerzas humanas. (Dampier,1950 ; Geymonat,1971).

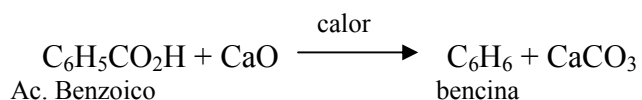
El ideal de Galileo, Descartes, etc.,era el de unir íntima y definitivamente la concepción de la ciencia de la antigüedad con la del arte de la Edad Media, es decir, edificando un saber fundado sobre nuevas técnicas, racionales, válidas ya no sólo en campo de las ideas abstractas, sino en el campo mucho más rico de las experiencias concretas. Este cambio filosófico trató de dar la consolidación victoriosa, decidida, de nuevas riquezas directamente vinculadas con el trabajo y del surgimiento de grupos cada vez más numerosos de científicos profundamente sensibles a los intereses de la producción y capaces de darse cuenta de la unidad indisoluble entre la práctica y la teoría.

Es así como en la química, aquellos procesos ordinarios que durante mucho tiempo habían encontrado aplicación en la artesanía (debilitar e intensificar, combinar y separar, disolver y evaporar, calentar y enfriar, etc.) ya no fueron desdeñados. Fueron adoptados para sustraer algún secreto a la naturaleza, en lugar de empleárselos únicamente para producir objetos de uso y función prácticos (Geymonat,1971).

De esta manera, Faraday comenzó a elaborar sus propias experiencias a fin de descubrir características de este nuevo compuesto que se le presentaba ante sus ojos. Midió su punto de ebullición , obteniendo 80°C. El resultado del análisis elemental realizado a dicho compuesto mostraba una proporción de carbono e hidrógeno de 1:1, lo cual resultaba ser inusualmente pequeña, ya que teóricamente corresponde a una fórmula empírica de CH. A este compuesto lo llamó “bicarburet de hidrógeno” .

Posteriormente en 1834, Eilhard Mitscherlich sintetizó el mismo compuesto calentando ácido benzoico, aislado de la goma benjuí, en presencia de cal. Al igual que Faraday encontró que la fórmula empírica era de CH. También efectuó una medición de densidad de vapor, lo que le permitió obtener el peso molecular que era aproximadamente de 78, el cual correspondía a

una fórmula molecular de C_6H_6 . Como el nuevo compuesto se derivaba de la goma benjuí le llamó bencina y actualmente se le llama benceno (disponible en internet, www.monografias.com).



La misma fórmula molecular causó sorpresas. El principal problema era debido no a la complejidad de la molécula en sí, sino que era consecuencia del limitado desarrollo de la teoría estructural alcanzado en aquella época.

El benceno tiene solamente tantos átomos de hidrógeno como átomos de carbono. La mayoría de los compuestos que se conocían hasta entonces tenían una proporción mucho más alta de átomos de hidrógeno, casi siempre el doble. El benceno de fórmula C_6H_6 o C_nH_{2n-6} , debía de ser un compuesto muy insaturado, porque tiene un índice de deficiencia de hidrógeno igual a cuatro. En un tiempo muy corto, los químicos comenzaron a observar que el benceno tenía propiedades muy inusitadas y, finalmente empezaron a reconocer que el benceno era un miembro de una nueva clase de compuestos orgánicos con propiedades especiales e interesantes. (Fessenden et al.,1983)

En la solución de un problema comienza a sentirse un interés que excede los límites del problema mismo. Estas dudas a cerca del benceno comenzaron a expandirse con rapidez mediante el uso de la imprenta con tipos móviles. Por este motivo, aparecieron cada vez más trabajos relacionados con este nuevo compuesto. Se difunde la convicción de que era un absurdo trabajar en el secreto del propio laboratorio, ocultando a los demás las tentativas realizadas, los métodos. Se realiza el esfuerzo de describir con máxima precisión los procedimientos empleados para aislar el benceno y se lo comunica a otros químicos para que también ellos experimenten con la intención de conocer la verdadera realidad del fenómeno. Esta colaboración depara inmediatamente todas sus ventajas y se abren nuevas sendas con posibilidades más amplias. A mediados del siglo XIX, el benceno se presenta a todos los químicos como un verdadero rompecabezas.

El estudio de productos y aparatos químicos condujeron a grandes avances. Se descubrieron importantes reactivos como los álcalis, sales de amonio, alcohol y ácidos minerales. Utilizando estos poderosos reactivos podían realizarse muchas reacciones nuevas. La Química Orgánica, tuvo un importante desarrollo porque estas nuevas drogas permitían conocer el comportamiento de diversos grupos de compuestos y de esta manera poder identificarlos. Así, muchos trabajos requirieron el uso de la balanza o una escala de laboratorio y el desarrollo de métodos de análisis cuantitativos y cualitativos (disponible en internet, www.centros5.pntic.mec.es)

El benceno, fue el “blanco” de muchas reacciones químicas con el fin de poder determinar a qué grupo de compuestos pertenecía. Los químicos de la época, según sus propias especulaciones lo asemejaban a un alqueno, por tal motivo lo sometieron a una serie de pruebas sencillas. Esperaban que se adicionara al bromo; esperaban que decolorara al permanganato de potasio acuoso al oxidarse, que adicionara hidrógeno rápidamente en presencia de un catalizador metálico y que adicionara agua en presencia de ácidos fuertes. Sin embargo, todas estas pruebas fueron negativas.

Benceno	{	Br ₂ /CCl ₄ Oscuridad a 25°C	→	No se adiciona
	{	KMnO ₄ /H ₂ O a 25 °C	→	No hay Oxidación
	{	H ₃ O ⁺ /H ₂ O calor	→	No hay hidratación
	{	H ₂ /Ni	→	Adición lenta a temp. y presión elevada

Figura 1

En 1865 Friedrich August Kekulé (1829-1896), propuso para poder resolver el problema del benceno, que estas cadenas carbonadas a veces se pueden cerrar formando anillos. Sugirió que los seis átomos de carbono están localizados en los vértices de un hexágono regular, con un átomo de hidrógeno unido a cada átomo de carbono. Para completar una valencia de cuatro para cada átomo de carbono, sugirió que alrededor del anillo había enlaces sencillos y dobles alternados (Fessenden et al.,1983).

Resulta interesante saber que Kekulé primero estudió arquitectura y después se dedicó a la química. A juzgar por sus contribuciones, aparentemente visualizaba la química como arquitectura molecular.

El 11 de marzo de 1890, químicos, industriales y personalidades del gobierno, se reunieron en la ciudad de Berlín para celebrar el 25 aniversario del primer “paper” de Kekulé que trataba acerca de la estructura del benceno. Este encuentro es ahora conocido como *Benzol Fest*. Luego de que varios estudiantes de química de aquella época rindieran homenaje al “gran Kekulé”, él decidió pronunciar una conferencia sin la ayuda de ningún manuscrito (Ramsay,1984 ; Wotiz et al.,1984 ; Noe,1993).

Kekulé introdujo su monólogo con las siguientes palabras:

“Quizás le interesará a Usted si yo le permitiese conocer cómo arrivé a algunas de mis ideas”

En su discurso , manifestó por primera vez cómo él había llegado a establecer la estructura del anillo de benceno.

Durante una noche de invierno de 1862 en su estudio en Ghent:

“Volví la silla hacia el fuego y empecé a quedarme dormido. De nuevo los átomos saltaban delante de mis ojos. Ahora los grupos más pequeños permanecían modestamente al fondo. Mi ojo mental, más agudo, debido a las repetidas visiones de este tipo, podía distinguir estructuras mayores, con conformaciones diversas, largas filas, a veces más íntimamente unidas, todas retorciéndose y agitándose con un movimiento parecido al de una serpiente. Pero de repente...¿qué era aquello?Una de las serpientes había cogido con la boca su propia cola y su figura daba vueltas violenta y burlescamente delante de mis ojos. Como si hubiese sido el resplandor de un relámpago me desperté, y pasé el resto de la noche desarrollando las consecuencias de esta hipótesis.”

La serpiente mordeándose la cola fue la pista que permitió a Kekulé llegar a formular el anillo de benceno como estructura .

En esta nueva etapa del pensamiento, se intentaban modelos teóricos deducidos de la observación de relaciones precisas. Y esto no bastaba: apenas formulada la hipótesis, se ensayaba su validez, verificando si las consecuencias de que se deducían de ella hallaban o no confirmación en los hechos. Los resultados de estas comprobaciones se explotaban a su vez para retocar la hipótesis, formando así un círculo ininterrumpido entre la teoría y la práctica. En este período, la combinación de la metodología con el uso de los instrumentos de observación y de experimentación llevó en efecto a una extraordinaria explosión de los conocimientos (Geymonat,1971).

La estructura de Kekulé para el benceno, fue muy discutida, debido a que los químicos no podían concebir esta idea.

Para comprobar o rechazar la hipótesis propuesta por Kekulé , se propusieron otras posibles estructuras tales como:

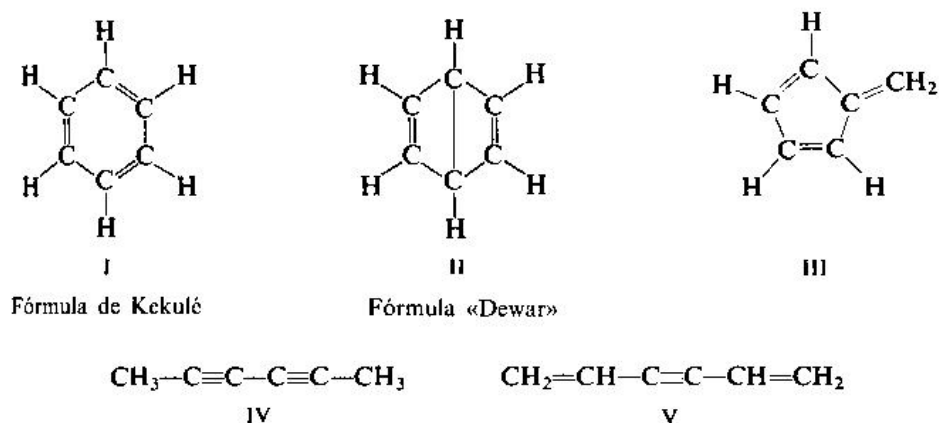


Figura 2

Todas estas fórmulas que se ajustaban perfectamente a la fórmula C_6H_6 , como II-V. Con el fin de recoger hechos relevantes para la determinación de la estructura del benceno fue necesario acudir a la experimentación. Los experimentos realizados suponían el conocimiento previo de conceptos desarrollados en aquella época : isómeros. La espectroscopia, las difracciones de rayos X y la electrónica mediante el uso del polarímetro, hicieron posible llevar a cabo con mucho esfuerzo los mismos. Sin embargo, de todas las estructuras propuestas ellas, la de Kekulé se aceptó casi como la más satisfactoria .

Los resultados experimentales evidenciaron lo siguiente:

Cuando al benceno se lo hacía reaccionar sólo daba un producto monosustituído, C_6H_5Y : Cuando se reemplazaba un átomo de hidrógeno por bromo, sólo se obtenía un bromobenceno, C_6H_5Br ; análogamente , también se obtenía un clorobenceno, C_6H_5Cl , o un nitrobenceno, $C_6H_5NO_2$, etc.

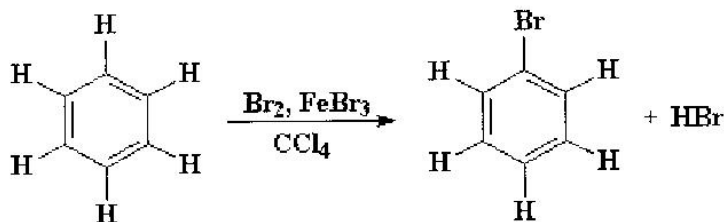


Figura 3

Este hecho imponía una severa limitación a la estructura del benceno: todos sus hidrógenos debían ser exactamente equivalentes. El reemplazo de cualquiera de ellos daba el mismo producto. Así por ejemplo, la estructura V debía descartarse, ya que daría dos derivados monobromados isómeros, los compuestos 1-y 2- bromados; no todos los hidrógenos de V son equivalentes. Un razonamiento similar permitía deducir que II y III tampoco servían. Sin embargo, entre otras I y IV seguían siendo posibles.

Cuando al benceno nuevamente se lo hacía reaccionar daba tres productos di-sustituídos isómeros : de fórmula molecular $C_6H_4X_2$ ó C_6H_4XZ . Sólo existían tres di-bromobenceno isómeros, $C_6H_4Br_2$; tres cloronitrobenceno; $C_6H_4ClNO_2$, etc. Este hecho limitaba aún más las posibilidades estructurales. Por ejemplo ahora debía rechazarse IV. A primera vista, la estructura I parecía congruente con este nuevo hecho. Es decir, se podía esperar que los tres derivados dibromados isómeros 1,2-,1,3- y 1,4- que se ilustra a continuación:

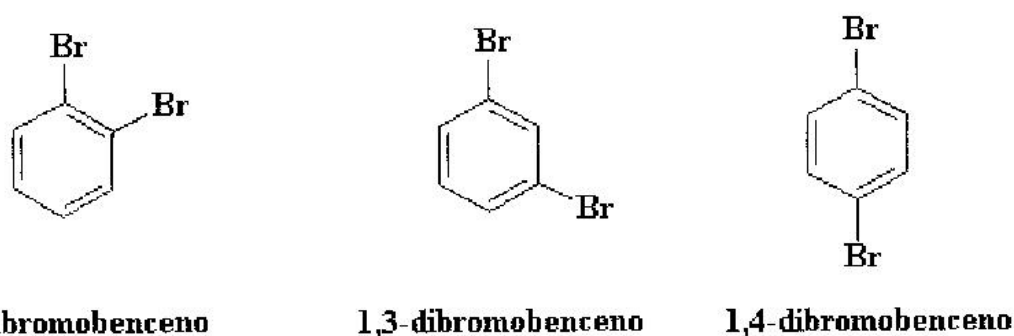


Figura 4

Sin embargo, pronto surgió un problema con la estructura de Kekulé. La estructura de Kekulé predecía que habría dos 1,2- dibromobenceno diferentes:

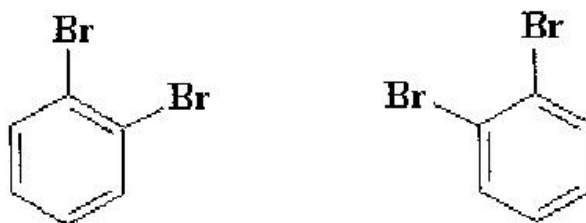


Figura 5

En uno de estos compuestos hipotéticos, los átomos de carbono que contienen a los bromos están separados por un enlace sencillo, y el otro están separados por un enlace doble. Sin embargo, solamente se encontró un 1,2-dibromobenceno.

Para resolver esta objeción, Kekulé propuso que las dos formas del benceno y de los derivados del benceno, estaban en un estado de equilibrio, y que este equilibrio se establecía con tanta rapidez que evitaba el aislamiento de los compuestos separados.

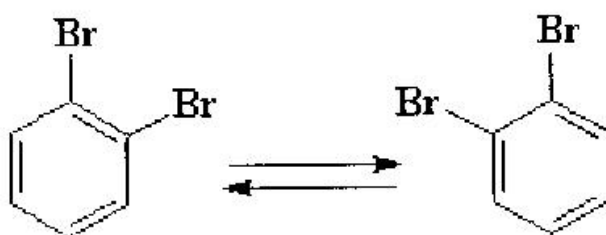


Figura 6

Así, los dos 1,2- dibromobencenos se equilibrarían rápidamente, y esto explicaría por qué los químicos no habían sido capaces de aislar las dos formas.

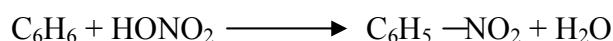
La estructura de Kekulé, explicaba satisfactoriamente los hechos anteriores (Morrison et al.,1990; (disponible en internet, www.cccb.ulpgc.es).

La deficiencia de la estructura propuesta hasta ese momento, aparecieron solamente a la luz de otros adelantos en la Química Orgánica. Las reacciones para la identificación de grupos de compuestos resultaron ser cada vez más específicas, se introdujeron nuevos conceptos para explicar estas reacciones tales como calor de reacción, energía de activación; se propusieron mecanismos de reacción , dando origen a la cinética química y termodinámica (disponible en internet, www.centros5.pntic.mec.es)

Con todos estos adelantos, la estructura propuesta por Kekulé para el benceno comenzaba a tener serios problemas. Dicha estructura ya no explicaba satisfactoriamente varios comportamientos de esta molécula. La mayoría de estos problemas se relacionaban con la estabilidad inusual del anillo bencénico. Las pruebas más sorprendentes de esta estabilidad eran las reacciones químicas del benceno (Fessenden et al.,1983).

El benceno experimentaba reacciones de sustitución, más que adición: la estructura bencénica de Kekulé correspondía a una que se llamaría “Ciclohexatrieno”. Por esto debería reaccionar con facilidad por adición, como lo hacían los alquenos. Pero eso no era el caso, como lo demuestra la figura 1. En condiciones donde los alquenos reaccionaban rápidamente, el benceno no lo hacía o lo hacía muy lento. En lugar de las reacciones de adición, experimentaba con mayor facilidad un conjunto de reacciones, todas de sustitución. A continuación se indica las más importantes (Morrison et al.,1990).

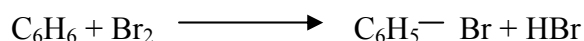
Nitración



Sulfonación



Halogenación



Alquilación



Acilación



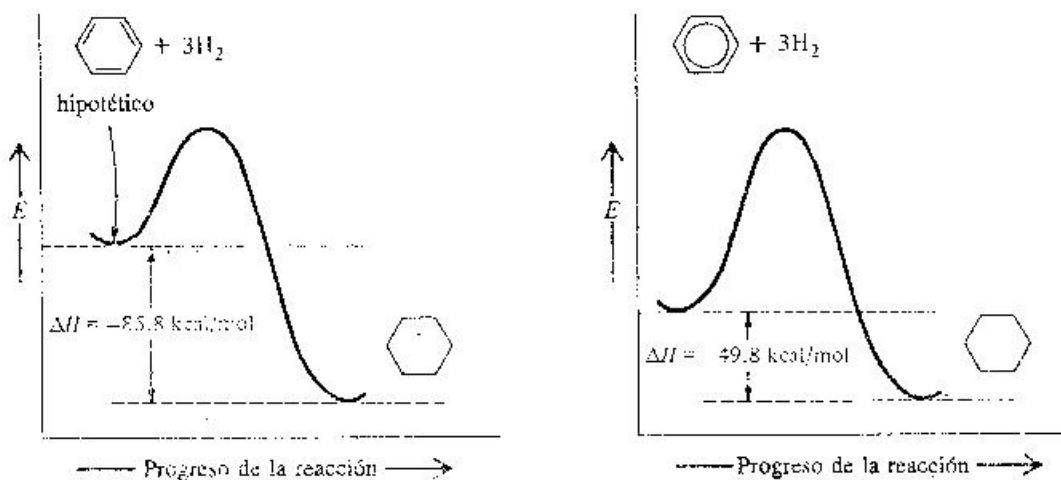


Figura 8

El calor de combustión del benceno también era menor en aproximadamente la misma cantidad que el estimado.

Todos los enlaces carbono-carbono del benceno eran iguales y de una longitud intermedia entre enlaces simples y dobles: estudios de difracción de rayos X indicaban que los dobles enlaces carbono-carbono eran de aproximadamente 1,34 Å en una gran variedad de compuestos; los simples donde los núcleos permanecían unidos por un solo par de electrones, eran considerablemente más largos :1,48 Å (en el 1,3-butadieno, por ejemplo). Si el benceno contuviese tres enlaces simples y tres enlaces sencillos, como en la estructura de Kekulé, se hubiera esperado que hubiese tres enlaces cortos (1,34 Å) y tres enlaces más largos (1,48 Å). Sin embargo, se encontró que los seis enlaces carbono-carbono del benceno eran iguales y con una longitud de 1,39^a, por lo que eran intermediarios entre simples y dobles (Fessenden et al., 1983 ; Morrison, 1990).

4 TEORIAS MODERNAS DE LA ESTRUCTURA DEL BENCENO.

Aunque evidentemente no satisfactoria, la estructura del benceno propuesta por Kekulé, se usó de forma generalizada por mucho tiempo. No fue sino hasta que se desarrolló la mecánica cuántica en el año 1920 que comenzó a comprenderse el comportamiento y la estabilidad poco usual del benceno.

La estructura aceptada actualmente no es resultado de nuevos descubrimientos sobre el benceno, sino que es la consecuencia de una ampliación de la teoría estructural, que corresponde al concepto de resonancia y orbital molecular.

Ahora se observará cómo se aplican ambas al benceno.

Las estructuras de Kekulé I y II satisfacen las condiciones para la resonancia, como podemos apreciar de inmediato: son estructuras que sólo difieren en la disposición de los electrones. El benceno es un híbrido de I y II. Puesto que I y II son exactamente equivalentes, y por tanto de igual estabilidad, contribuyen por igual al híbrido, y al ser exactamente equivalentes, la estabilización debida a la resonancia debe ser grande (Figura 9).

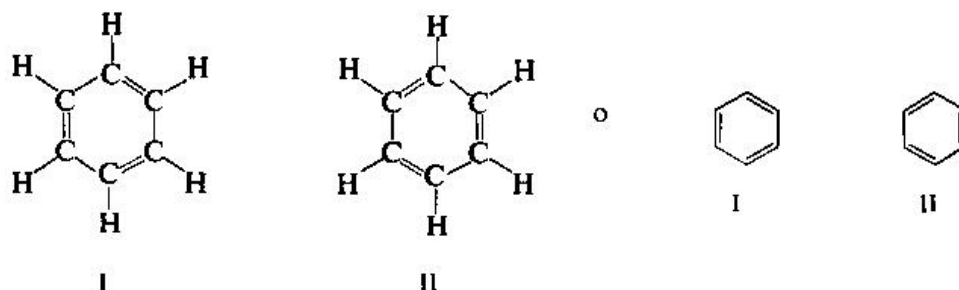


Figura 9

Lo desconcertante de las propiedades del benceno queda ahora aclarado. Las seis longitudes de enlace son iguales, porque las seis uniones son idénticas. De hecho, un enlace y medio cada uno, y su longitud 1,39 Å, es intermedia entre la longitud de un enlace simple y la de uno doble.

Al reconocer que todos los enlaces carbono-carbono del benceno son equivalentes, desaparece la dificultad para justificar el número de productos disustituídos isómeros: es evidente que sólo debe haber tres, de acuerdo con las pruebas experimentales (Figura 10).

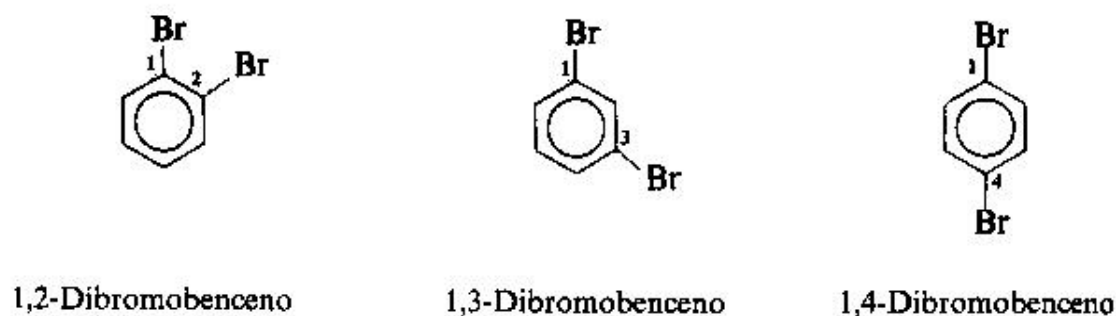


Figura 10

Finalmente la estabilidad “excepcional” del benceno no tiene nada de excepcional: es la que se espera de un híbrido de estructuras equivalentes. Las 36 kcal de energía que el benceno no contiene, es energía de resonancia. Estas 36 kcal de energía de estabilización de resonancia son las responsables del conjunto de propiedades nuevas que llamamos propiedades aromáticas.

Las reacciones de adición convierten un alqueno en un compuesto saturado más estable. Sin embargo la adición, convertiría al benceno en un producto menos estable, por destrucción del sistema anular bencénico estabilizado por resonancia. Esto no es todo con respecto a la estabilidad. Se necesita un factor adicional, aparte de la resonancia, para hacer del benceno lo que es.

Si se toma en consideración sus orbitales de enlace, se logra una descripción más detallada de la molécula del benceno.

Como cada carbono está enlazado a tres átomos, utiliza sp^2 que se encuentran en un mismo plano, el del núcleo del carbono, y se dirigen hacia los vértices de un triángulo equilátero. Si disponemos seis carbonos y seis hidrógenos de modo que se permita el solapamiento máximo de estos orbitales, obtenemos la estructura ilustrada en la figura 11.

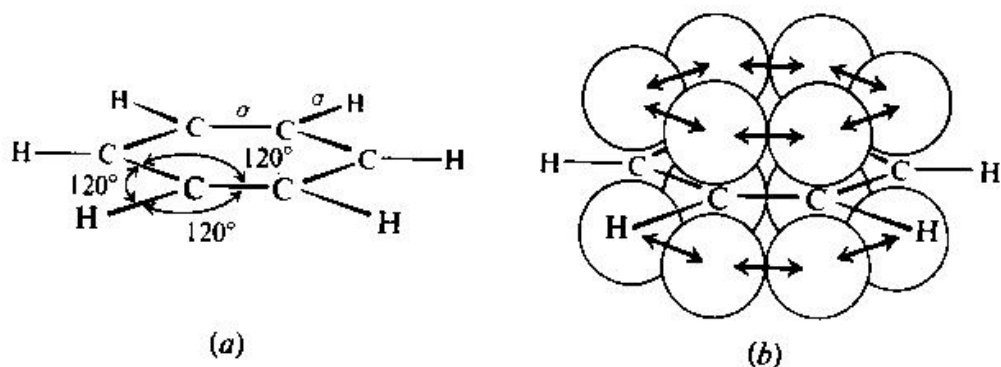


Figura 11

El benceno es una molécula plana, con todos los carbonos e hidrógenos ubicados en el mismo plano. Además, es una molécula muy simétrica, con todos los carbonos en los vértices de un hexágono regular. Cada ángulo de enlace mide 120° . Cada orbital de enlace es cilíndricamente simétrico alrededor de la línea de unión de los núcleos atómicos, por lo que estas unidades se designan como enlaces σ .

Sin embargo, todavía la molécula no está completa: aún quedan sin ubicar seis electrones. Aparte de los tres orbitales ya empleados, cada átomo de carbono aún dispone de un cuarto orbital p , que tiene, como sabemos, dos lóbulos: uno encima y el otros debajo del plano de los tres orbitales restantes; o sea, encima y debajo del plano del anillo. Ese orbital está ocupado por u solo electrón.

Como en el etileno, el orbital p de un carbono puede solapar al correspondiente de un carbono adyacente, lo que permite el apareamiento de los electrones y la formación de un enlace π adicional. Pero aquí el solapamiento no queda limitado a un par de orbitales p , como en el etileno: el orbital p de cualquiera de los carbonos solapa igualmente bien a los orbitales de

ambos carbonos unidos a él. El resultado son dos nubes electrónicas π continuas con forma de rosca, una encima y la otra debajo del plano de los átomos (Figura 12)

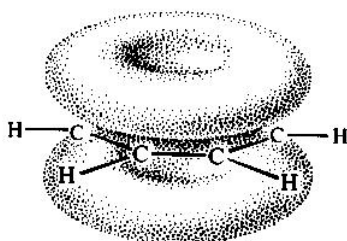


Figura 12

Como en el radical alilo, el solapamiento de los orbitales p en ambas direcciones y la participación resultante de cada electrón en varios enlaces es lo que corresponde a la descripción de la molécula como híbrido de resonancia de dos estructuras. Nuevamente, la deslocalización de los electrones, es la estabiliza la molécula.

La descripción orbital revela la importancia de la planaridad del anillo bencénico. El anillo es plano porque los ángulos trigonales (sp^2) de los enlaces del carbono se ajustan exactamente a los ángulos de 120° de un hexágono regular. Esta planaridad permite el solapamiento de los orbitales p en ambas direcciones, con la deslocalización y estabilización resultantes.

Los hechos concuerdan con esta descripción orbital del benceno. La difracción por rayos X y la electrónica indican que el benceno es una molécula completamente plana y simétrica, con todos los enlaces carbono-carbono iguales y todos los ángulos de enlace de 120° (Figura 13).

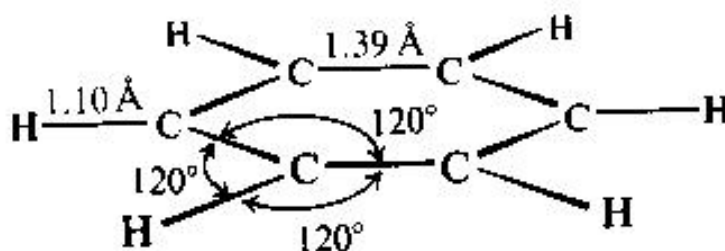


Figura 13

Veremos que las propiedades del benceno son justamente las que corresponden a esta estructura. A pesar de la deslocalización, los electrones π están más sueltos que los σ . Por lo tanto, los electrones π están especialmente disponibles para un reactivo que busca electrones. Las reacciones típicas del anillo bencénico son aquellas en las que el anillo sirve de fuente electrónica para reactivos electrofílicos (ácidos). Debido a la estabilización por resonancia del

anillo bencénico, esas reacciones llevan a la sustitución, en la cual se conserva el carácter aromático del anillo bencénico.

Por razones prácticas, representamos el anillo de benceno por medio de un hexágono regular con un círculo inscrito. Se entiende que hay un hidrógeno unido a cada ángulo del hexágono (Figura 14). El círculo simboliza la nube de seis electrones π deslocalizados (Fessenden et al., 1983 ; Morrison et al., 1990).

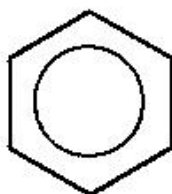


Figura 14

5 CONCLUSIONES

En la elucidación de la estructura molecular del benceno se pueden distinguir cuatro etapas: La primera, de carácter especulativa, corresponde al descubrimiento de un nuevo hidrocarburo por Michael Faraday, al que inicialmente se lo llamó bencina.

La segunda, data a mediados del siglo XIX, en el cual, el benceno se presenta a la comunidad química como un verdadero rompecabezas. Esta etapa se caracterizó por la definición y difusión del problema : ¿ cómo están distribuidos los átomos de carbono e hidrógeno en la molécula de benceno?.

La tercera etapa, eminentemente teórica. Kekulé formula la primer hipótesis acerca de la estructura del benceno con la finalidad de poder responder a la pregunta anteriormente mencionada.

La cuarta, en el cual el objetivo principal fue de ensayar la validez de la hipótesis propuesta por Kekulé. Cuatro elementos intervinieron en esta validación: la experimentación, la tecnología y la incorporación de nuevos conceptos y teorías.

Con respecto a este último período, se puede afirmar que los experimentos fueron adecuados, implicaron un considerable saber ya que hubo una selección previa o diseño de aquellas experiencias concretas cuyos resultados pudieron ser considerados de máxima relevancia para la hipótesis que se formuló. Se analizó y evaluó detalladamente los resultado obtenidos. Se puede decir también, que los mismos, fueron objetivos, en el sentido que cualquier químico que los repitiera en las mismas condiciones y con los mismos cuidados obtendría los mismos resultados. Los resultados experimentales se lograron con un gran esfuerzo y el establecerlos implicó la explotación de la tecnología disponible.

Sin bien, todas estas características son el fundamento de una correcta experimentación, en un primer momento, se llegó a conclusiones erróneas en la estructura del benceno.

El principal conflicto observado fue que el conocimiento que sustentaba esa estructura, era deficiente. Kekulé y demás químicos, no eran culpables de sacar esa conclusión. Dada la comprensión de la situación y el caudal de los conocimientos a los que podían recurrir, tenían buenas razones para creer que la molécula del benceno consistía en un anillo hexagonal, que poseía dobles y simples enlaces alternados.

Finalmente, este resultado, pudo ser corregido, reemplazado y puesto al día, con el cambio en la comprensión teórica por el surgimiento de dos nuevos conceptos: resonancia y orbital molecular; demostrando de esta manera que el benceno es un híbrido de resonancia.

La moraleja es, naturalmente ésta: ¿quien sabe qué adelantos en el futuro, pueden demostrar que la estructura del benceno contemporánea es insatisfactoria?

6 REFERENCIAS

- Chalmers, A. F., 2000. ¿Qué es esa cosa llamada ciencia? Siglo XXI de Argentina Editores. Argentina.
- Dampier, W. C., 1950. Historia de la Ciencia y sus relaciones con la filosofía y la religión. Editorial Galatea. México.
- Devore, G., 1970. Química Orgánica. Publicaciones Culturales. México.
- Fessenden, R. J. y Fessenden J. S., 1983. Química Orgánica. Iberoamérica. Mexico.
- Geymonat, L., 1971. El pensamiento científico. Editorial Universitaria de Buenos Aires. vol 37.
- Morrison R. T. y Boyd R. N., 1990. Química Orgánica. Iberoamericana SA. México-Chile.
- Noe, C. R. y Bader, A., 1993. Facts are better than dreams. Chemistry in Britain. 29:126-128.
- Ramsay, O. B y Rocke A J. 1984. Kekulé's dreams. Chemistry in Britain. 20:1093-1094.
- Wotiz, J., y Rudofsky S., 1984. Kekulé's dreams: fact or fiction? Chemistry in Britain. 20: 720-723.

<http://www.efn.unc.edu.ar/departamentos/estruct/Igody/Metodologia/Metodologia.htm>

<http://www.monografias.com>

<http://centros5.pntic.mec.es/ies.victoria.kent/Alumnos/big-bang/quimica.html>

<http://www.cbb.ulpgc.es/quimica/usuarios/corganica/HIDRAROMaTICOS.html#estru>

<http://www.sc.ehu.es/ilwtheor/theoria.html>