



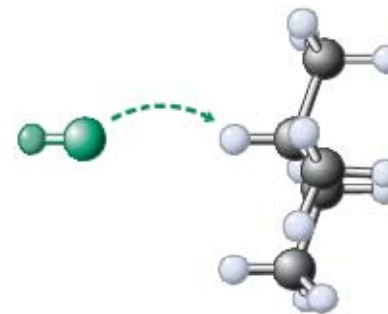
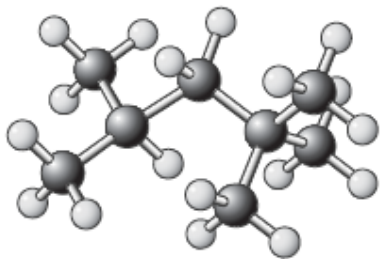
propano



Altramuz salvaje

## 2.- Principales familias de compuestos orgánicos:

- Hidrocarburos alifáticos: alcanos, alquenos y alquinos.
- Hidrocarburos aromáticos.
- Aminas.
- Compuestos halogenados.
- Compuestos carbonílicos.



# Tema 11. ALCANOS



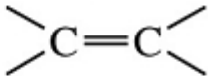

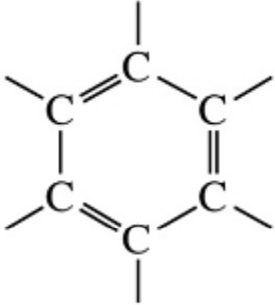
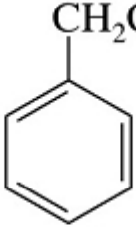
# Tema 11. ALCANOS

---

1. Clasificación de los hidrocarburos
2. Fórmulas moleculares de alcanos
3. Nomenclatura de alcanos
4. Propiedades físicas de alcanos
5. Aplicaciones y fuentes de alcanos
6. Reacciones de alcanos
7. Estereoisomería configuracional en cicloalcanos
8. Conformación de alcanos

# 1. Clasificación de hidrocarburos

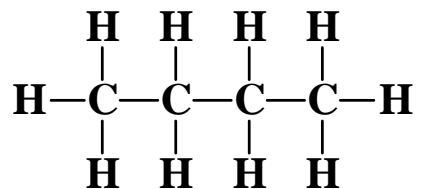
## Nomenclatura

<i>Compound Type</i>	<i>Functional Group</i>	<i>Example</i>
alkanes	none (no double or triple bonds)	$\text{CH}_3\text{—CH}_2\text{—CH}_3$ , propane
alkenes	 double bond	$\text{CH}_2=\text{CH—CH}_3$ , propene
alkynes	 triple bond	
aromatics	benzene ring 	 ethylbenzene

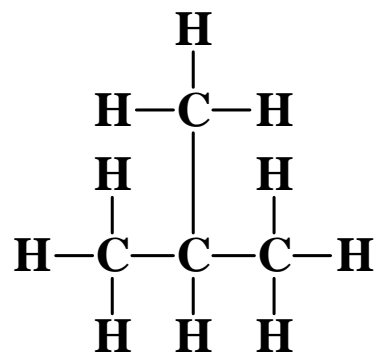
## 2. Fórmulas moleculares de los alcanos

---

- **Saturado** con hidrógenos, todo enlaces sencillos C-C
- Fórmula general:  $C_nH_{2n+2}$
- **Alcanos lineales homólogos:**  $CH_3(CH_2)_nCH_3$
- **Alcanos ramificados:** misma fórmula molecular



butano,  $C_4H_{10}$



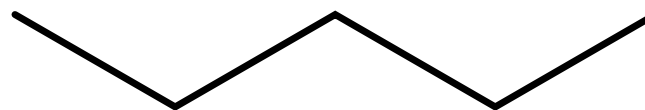
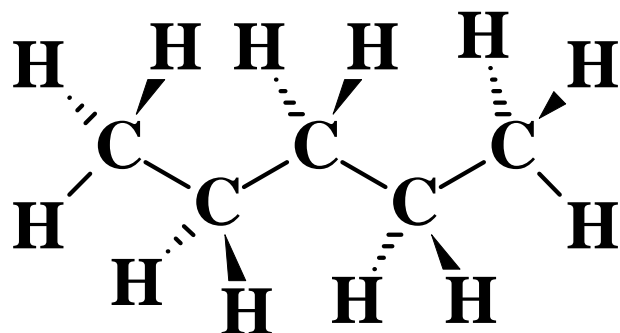
isobutano,  $C_4H_{10}$

## 2. Representación de alcanos de cadena larga.

---

La conformación anti es la más baja en energía.

Las cadenas lineales son en zigzag.



## 2. Formula molecular de Cicloalcanos. Propiedades.

---

Fórmula:  $C_nH_{2n}$

Anillos de átomos de carbono (grupos  $-CH_2-$ )

### Propiedades

No polares, insolubles en agua. Forma compacta

**Puntos de fusión y ebullición** similares a los de los alcanos ramificados con el mismo número de átomos de carbono

### 3. Nombres comerciales de alcanos

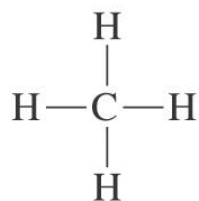
---

#### Alcanos ramificados

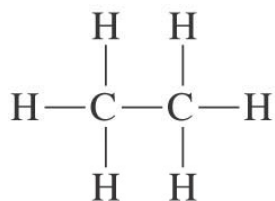
- **Iso**butano, "isómero del butano".
- **Iso**pentano
- **Iso**hexano, etc., radical metilo en el carbono contiguo al último.
  
- **Neo**pentano, el más ramificado.



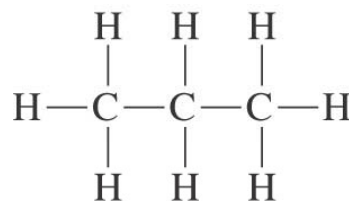
# Ejemplos de alcanos



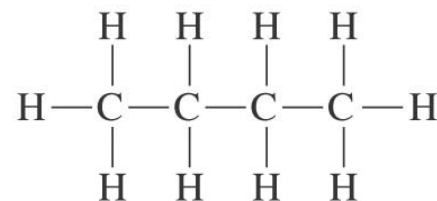
metano



etano



propano



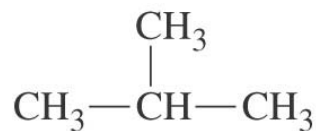
butano

## Lineales

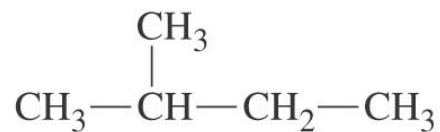


n-pentano

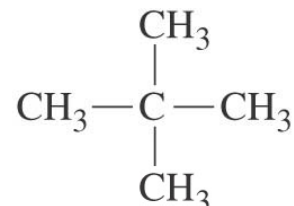
## Ramificados



isobutano



isopentano



neopentano

### 3. Nomenclatura de la IUPAC

---

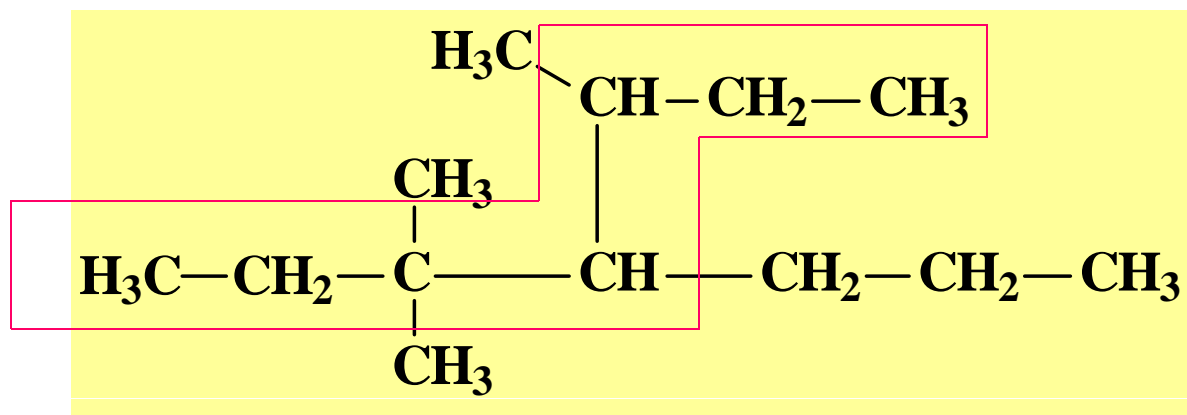
1. Cadena carbonada más larga.
2. Numerar los átomos de carbono, comenzando por el más cercano a la primera ramificación.
3. Nombrar los sustituyentes de la cadena más larga. Localizar cada sustituyente por el número del átomo de carbono de la cadena principal al que esté enlazado.
4. Ordenar por orden alfabético los sustituyentes. Usar di-, tri-, etc., para indicar el número de sustituyentes iguales.

### 3. Nomenclatura IUPAC. Cadena más larga

---

El número de átomos de carbono en la cadena más larga determina el nombre base del compuesto orgánico.

Si hay dos cadenas posibles con el mismo número de átomos de carbono, se usa la cadena que contiene mayor número de sustituyentes.

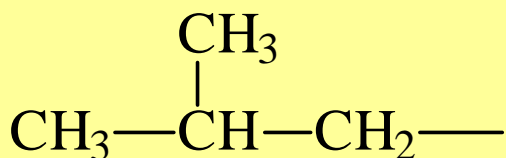




### 3. Nomenclatura IUPAC. Nombre de los radicales alquilo

---

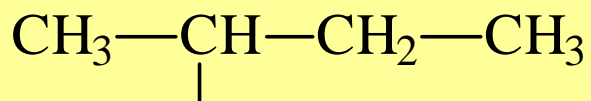
- $\text{CH}_3-$ , metilo
- $\text{CH}_3\text{CH}_2-$ , etilo
- $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2-$ , *n*-propilo
- $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2-$ , *n*-butilo



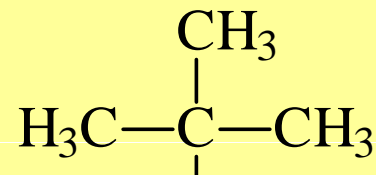
isobutilo



isopropilo



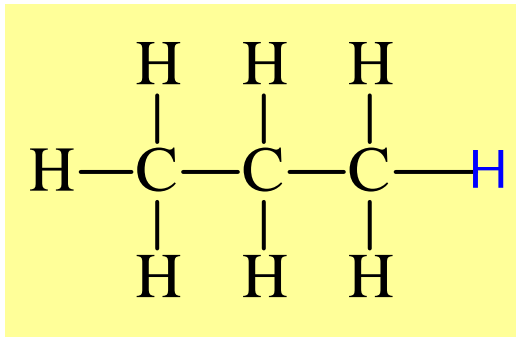
secbutilo



tert-butilo

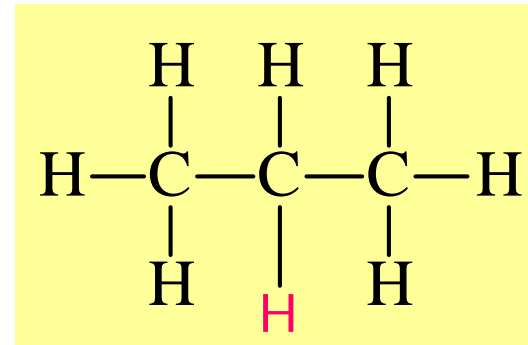
### 3. Nomenclatura IUPAC. Grupos propilo

---



*n*-propilo

Un carbono primario

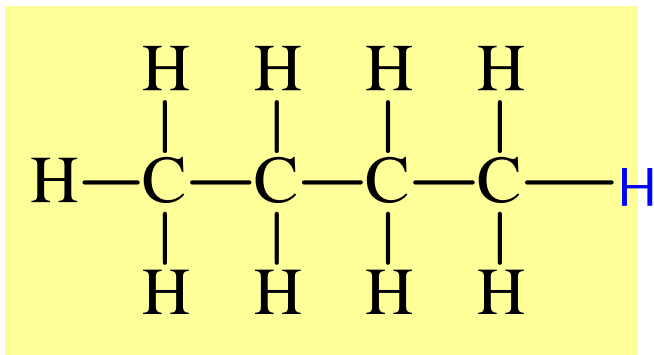


isopropilo

Un carbono secundario

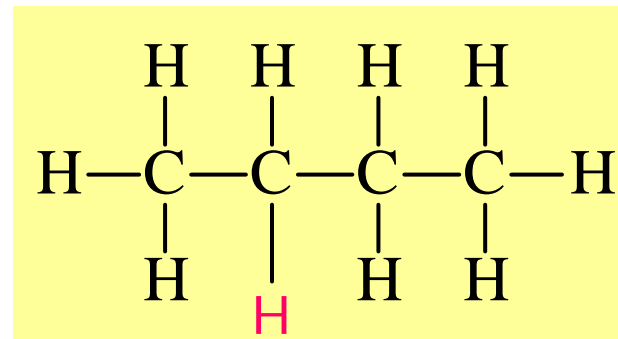
### 3. Nomenclatura IUPAC. Grupos butilo

---



*n*-butilo

Un carbono primario

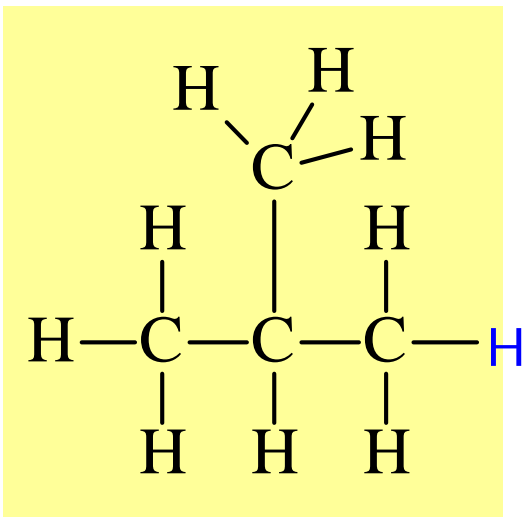


*sec*-butilo

Un carbono secundario

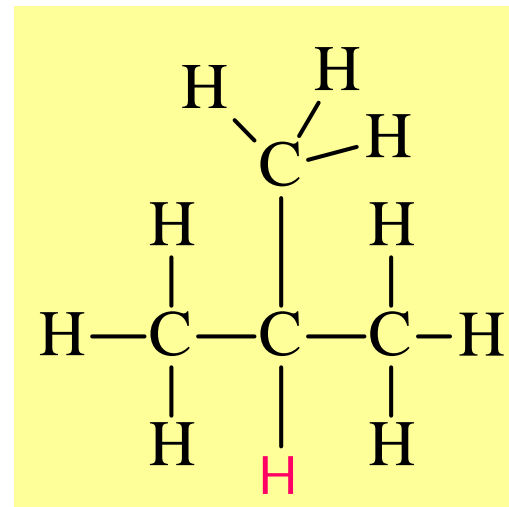
### 3. Nomenclatura IUPAC. Grupos isobutilo

---



isobutilo

Un carbono primario



*tert*-butilo

Un carbono terciario

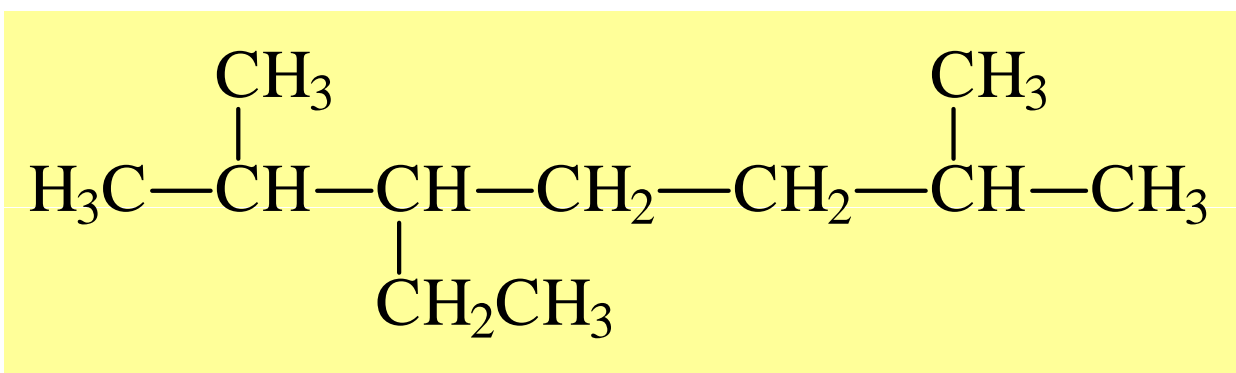


### 3. Nomenclatura IUPAC. Ordenar por orden alfabético

---

Ordenar por orden alfabético de nombre.

Ignorar di-, tri-, etc. cuando se ordena por orden alfabético.



3-etil-2,6-dimetilheptano

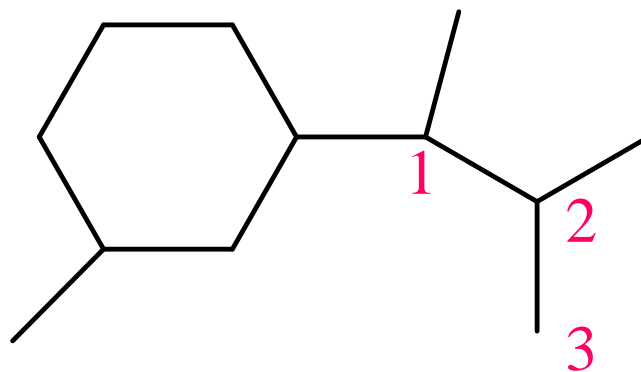
### 3. Nomenclatura IUPAC. Substituyentes complejos

---

Si la ramificación tiene una rama, numerar los átomos de carbono desde el punto de unión.

Numera la ramificación utilizando un localizador.

Se utiliza paréntesis para el nombre de la ramificación.



1-metil-3-(1,2-dimetilpropil)ciclohexano

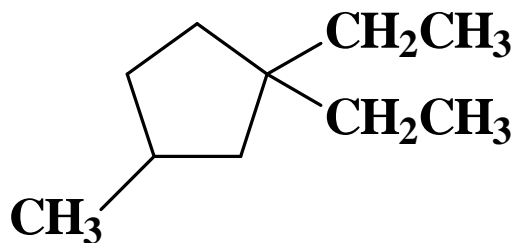
### 3. Nomenclatura de Cicloalcanos

---

Los cicloalcanos sustituidos utilizan el cicloalcano como nombre base, nombrando a los grupos alquilo como sustituyentes.

Los carbonos del anillo se numeran dando el número más bajo posible a los carbonos que soportan los sustituyentes.

Se nombran los sustituyentes por orden alfabético y después el esqueleto cíclico base.



1,1-diethyl-3-metil-ciclopentano

### 3. Cicloalcanos

---

El ciclopropano se utilizaba antes como **anestésico general** ya que sus vapores, como los de otros alcanos y cicloalcanos, causan somnolencia y pérdida del conocimiento.

Después de inhalarlo, el ciclopropano pasa por los pulmones a la sangre. Debido a su naturaleza no polar, rápidamente abandona la sangre y atraviesa las membranas no polares que rodean el sistema nervioso central, donde produce anestesia.

## 4. Propiedades físicas

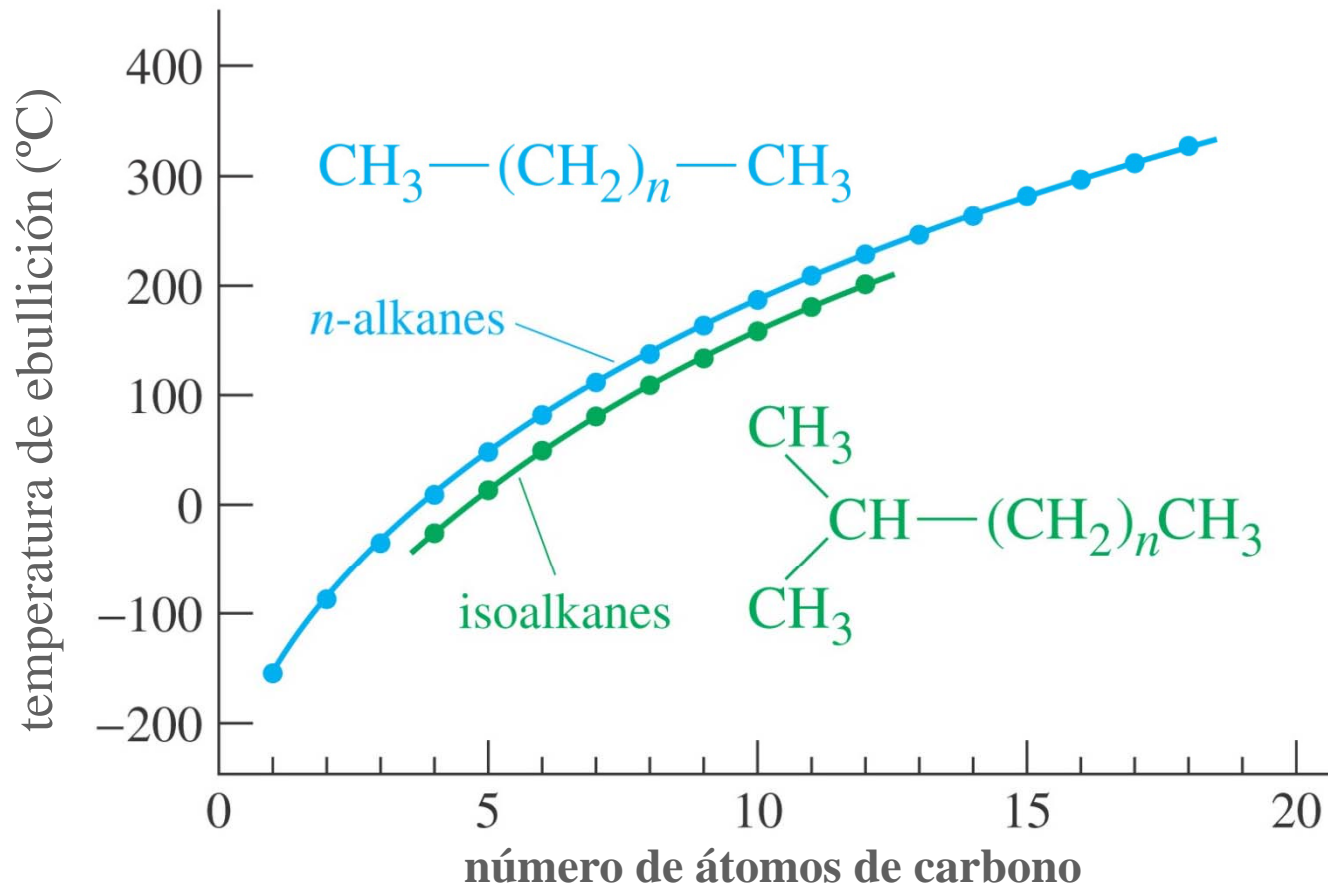
---

- **Solubilidad**: hidrofóbico
- **Densidad**: menor que 1 g/ml
- **Puntos de ebullición** aumentan con el incremento de los átomos de carbono (menor para las cadenas ramificadas).
- **Puntos de fusión** aumentan con el incremento de los átomos de carbono (menor para un número de átomos de carbono impar).

## 4. Propiedades físicas. Puntos de ebullición de alcanos

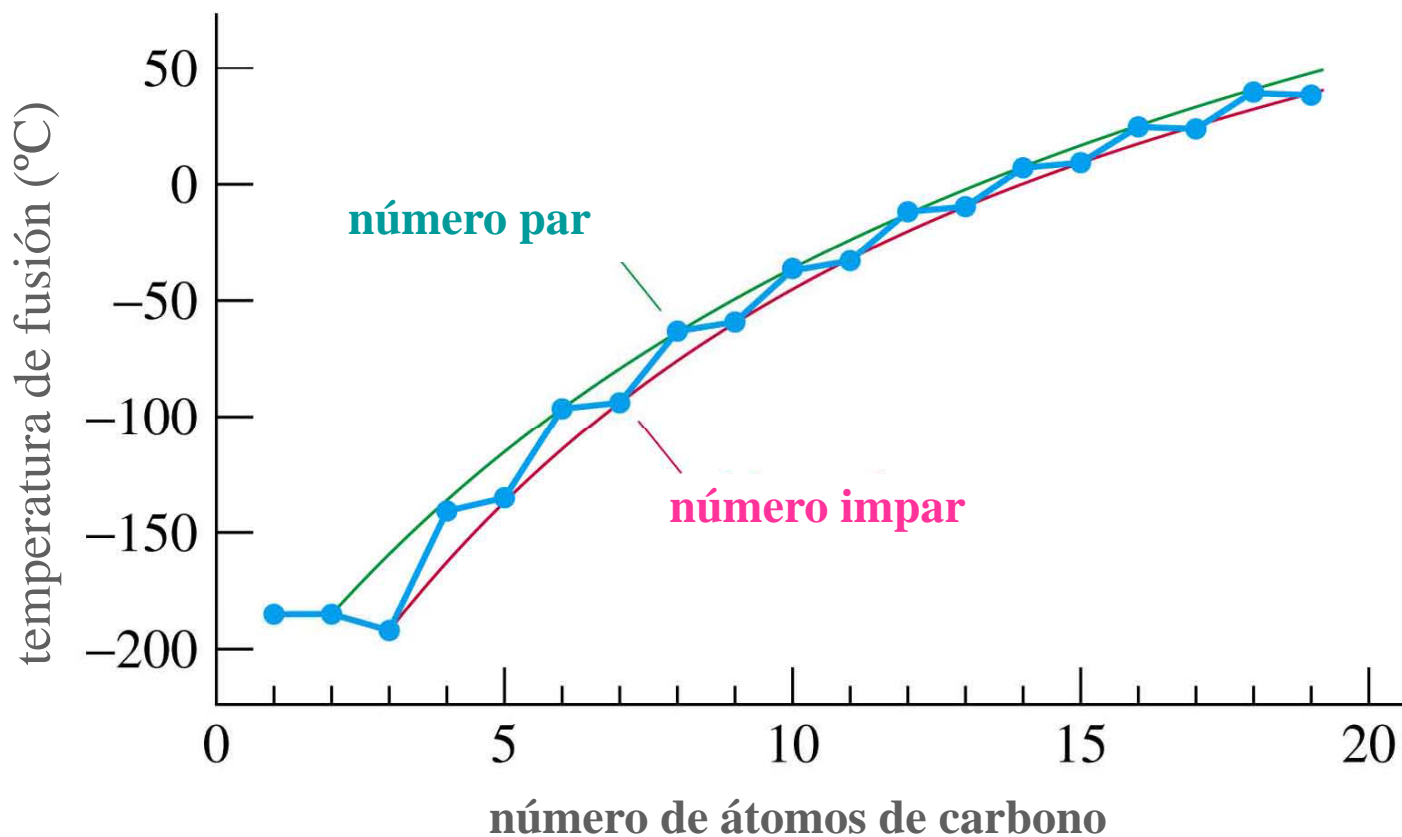
---

Alcanos ramificados tienen menor superficie de contacto, luego las fuerzas intermoleculares son más débiles.



## 4. Propiedades físicas. Puntos de fusión de alcanos

---

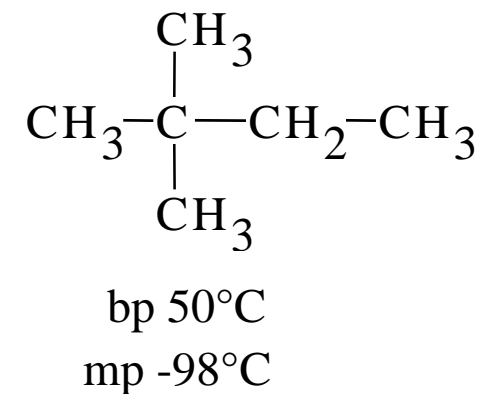
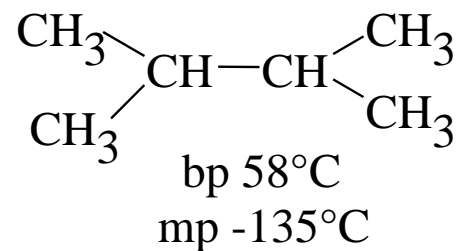
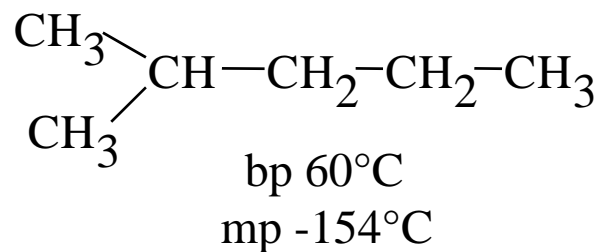


Alcanos ramificados se empaquetan más eficientemente en un estructura cristalina, mayor punto de fusión.

## 4. Propiedades físicas. Alcanos ramificados

---

Ejemplos:



---

Punto de ebullición bajo

Punto de fusión alto



## 5. Aplicaciones y fuentes de los alcanos

---

La **destilación** permite separar los alcanos en fracciones con puntos de ebullición similares.

Estas fracciones son apropiadas para diferentes **usos** dependiendo de sus propiedades físicas (volatilidad, viscosidad).

### Fuentes

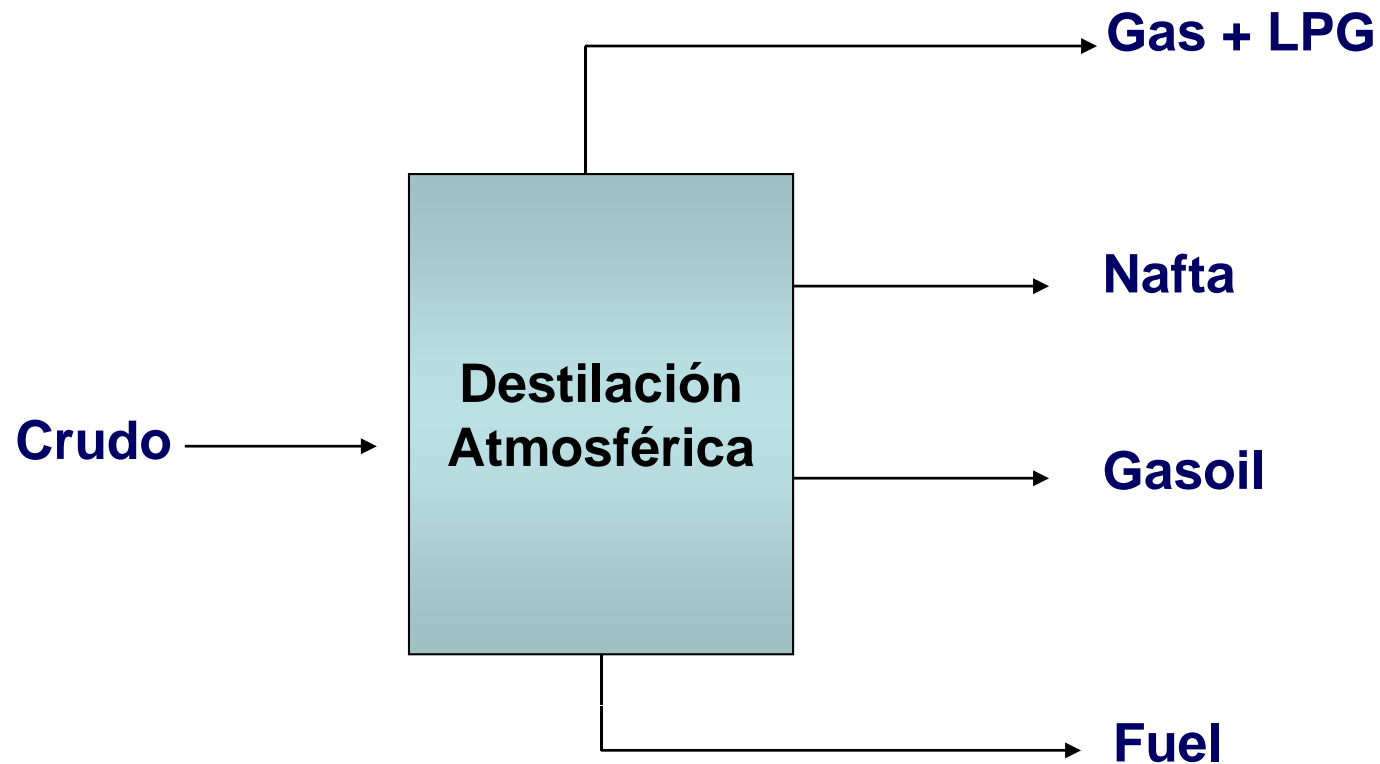
- $C_1$ - $C_2$ : gases (gas natural)
- $C_3$ - $C_4$ : gases licuados del petróleo (LPG)
- $C_5$ - $C_8$ : gasolina
- $C_9$ - $C_{16}$ : diesel, keroseno, jet fuel
- $C_{17}$  y mayor: aceites lubricantes, combustibles

## 5. Fuente de alcanos: Refino

---



Topping no se realiza a más de 450 °C



**A  $T_{amb}$  y  $P_{atm}$  se encuentran en estado gaseoso pero cuando son sometidos a una presión relativamente baja pasan a estado líquido, lo que permite almacenarlos en botellas y depósitos. Esta característica facilita su almacenamiento y transporte.**

## **Gases Licuados del Petróleo (GLP)**

**Propano  $C_3H_8$**

**Butano  $C_4H_{10}$**

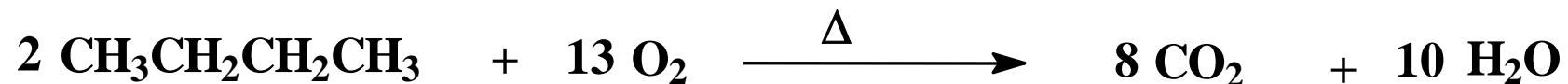
**NOTA**

**Un 60% del GLP mundial proviene de pozos de Gas Natural, porcentaje que irá incrementándose en el futuro frente a su contribución de los destilados de refinería.**

## 6. Reacciones de alcanos

---

- **Combustión**



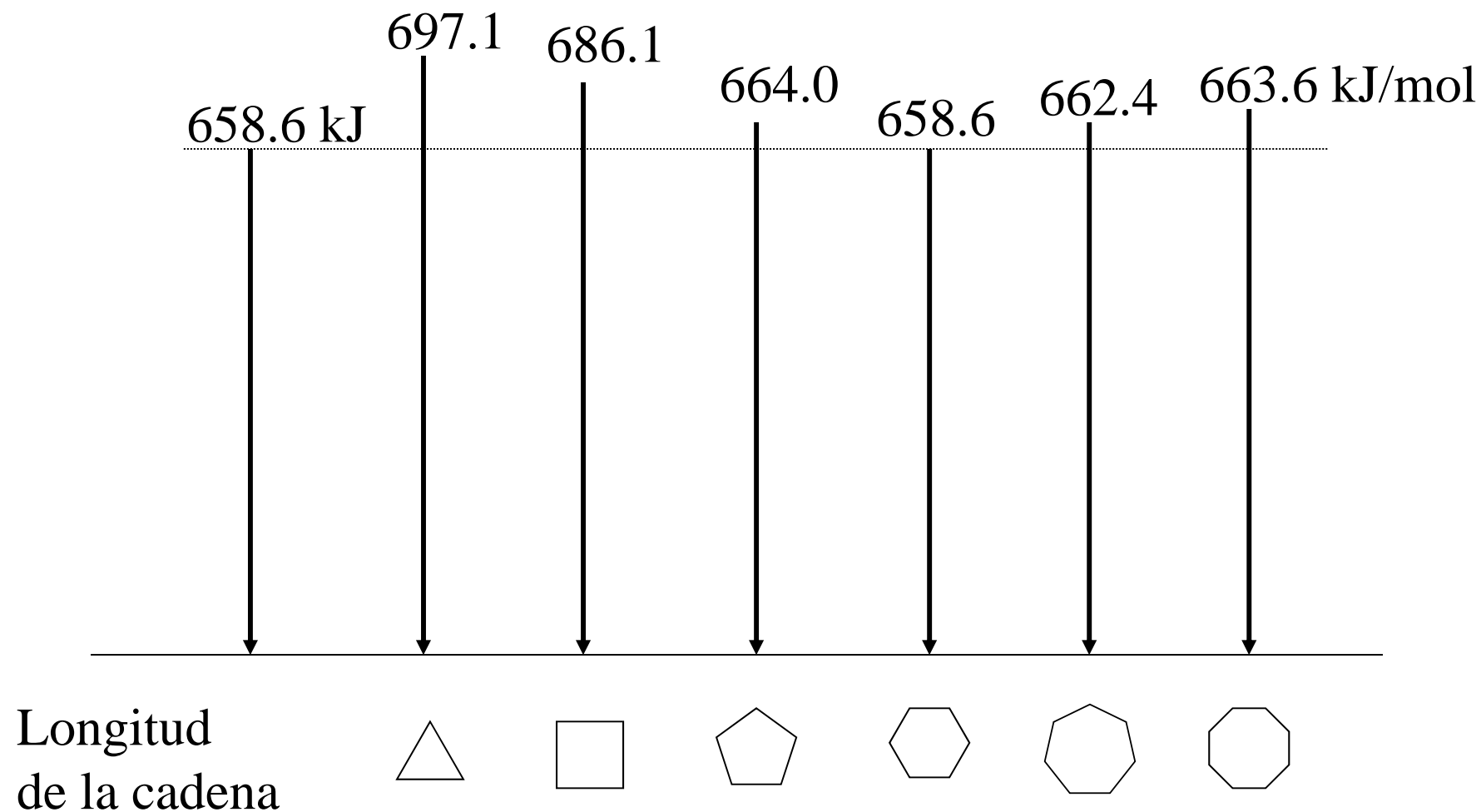
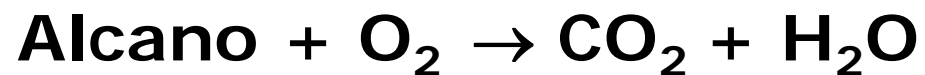
- **Cracking e hidrocracking** (industrial)

Alcanos de cadena larga  $\xrightarrow{\text{catalizador}}$  alcanos de cadena corta

- **Halogenación**

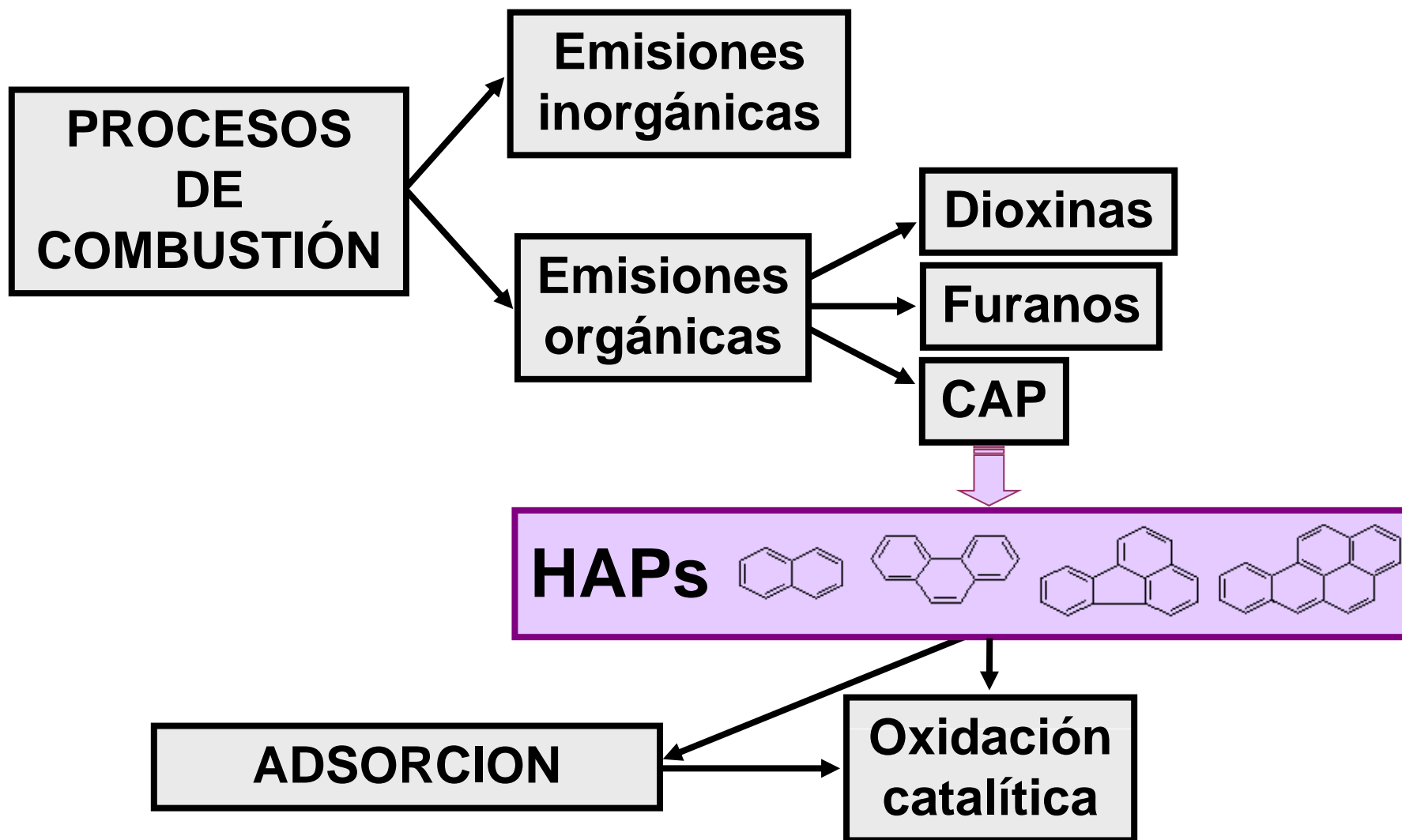


## 6. Estabilidad de cicloalcanos. Calores de Combustión/CH<sub>2</sub>

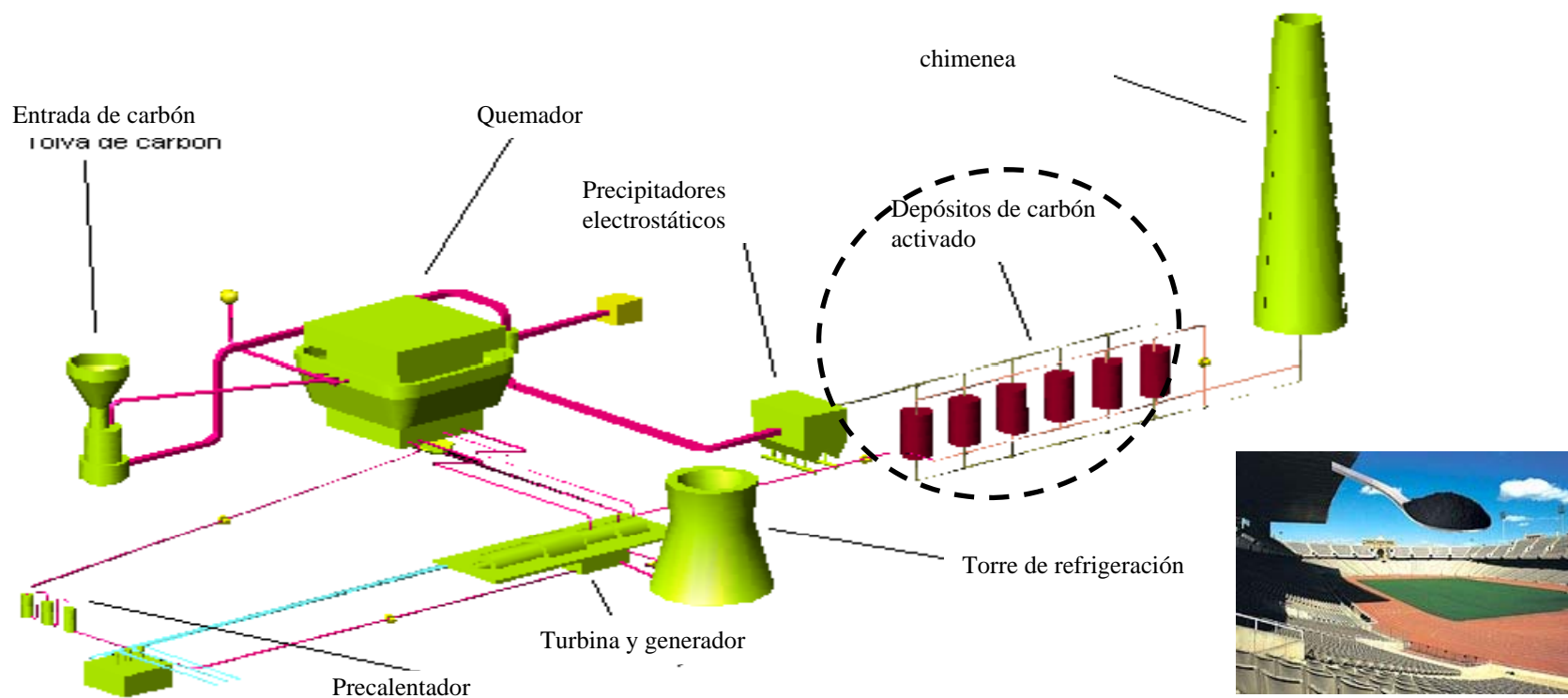


## 6. Reacciones de alcanos

---



## 6. Reacciones de alcanos: combustión

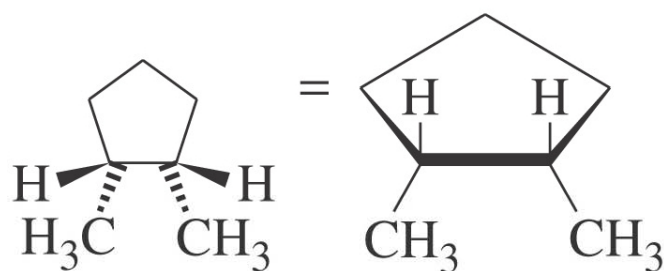


**Retención de Hidrocarburos Aromáticos Policíclicos (HAPs) de corrientes calientes de gas**

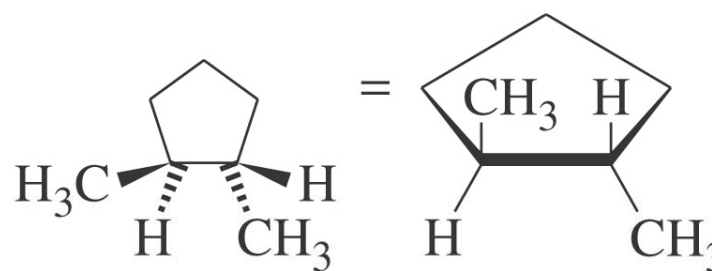
## 7. Estereoisomería de configuración en alcanos Isomería Geométrica

Los isómeros geométricos son estereoisómeros de configuración debidos a la presencia en las moléculas orgánicas de centros estereogénicos.

En alcanos se da cuando existe un ciclo y se habla de isomería *cis-trans*.



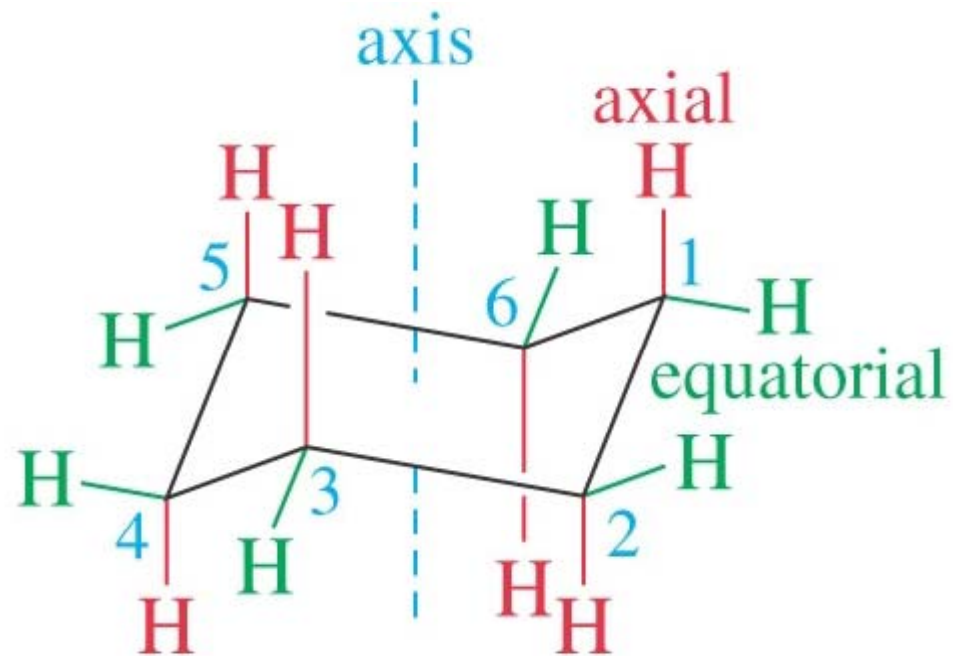
cis-1,2-dimetilciclopentano



trans-1,2-dimetilciclopentano



## 7. Ciclohexano: Isomería Cis-Trans



## 7. Estereoisomería de configuración Isomería Geométrica

Son isómeros geométricos los derivados disustituídos del ciclohexano, en conformación silla.

Ciclohexano sustituido en los carbonos C(1) y C(2)

- Los isómeros *trans* corresponden con los conformeros a, a y e, e
- Los isómeros *cis* corresponden a los conformeros e, a y a, e

Ciclohexano sustituido en los carbonos C(1) y C(3)

- Los isómeros *trans* corresponden a los conformeros e, a y a, e
- Los isómeros *cis* corresponden a los conformeros a, a y e, e

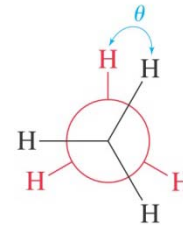
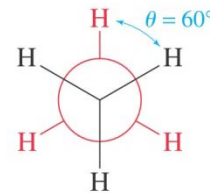
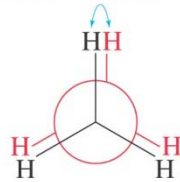
Ciclohexano sustituido en los carbonos C(1) y C(4)

- Los isómeros *trans* corresponden con los conformeros a, a y e, e
- Los isómeros *cis* corresponden a los conformeros e, a y a, e

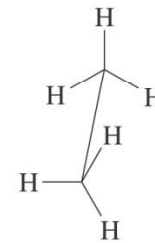
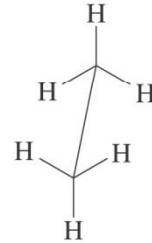
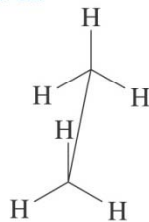
## 8. Isomería conformacional de alcanos

La existencia de estos estereoisómeros se debe a rotaciones libres alrededor de los enlaces sencillos.

Newman projections:  $\theta = 0^\circ$



Sawhorse structures:



- Confórmeros eclipsados:

Estas conformaciones corresponden a los *niveles de energía potencial más elevados*.

## 8. Isomería conformacional de alcanos

---

- Confórmeros alternados

A estas conformaciones corresponde el *nivel de energía potencial menos elevado*.

Los sustituyentes de los dos átomos que pertenecen al enlace principal están alternados según los valores del ángulo diedro de este enlace (aproximadamente  $+60$ ,  $-60$ ,  $+120$ ,  $-120$  ó  $180^\circ$ ).

Entre las conformaciones alternadas existe una conformación preferencial (o real) que corresponde a un nivel de energía potencial mínima (el ángulo diedro del enlace principal es aproximadamente  $180^\circ$ ). Esta conformación representa la conformación más estable, la única para la mayoría de las moléculas orgánicas.

## 8. Conformaciones de alcanos

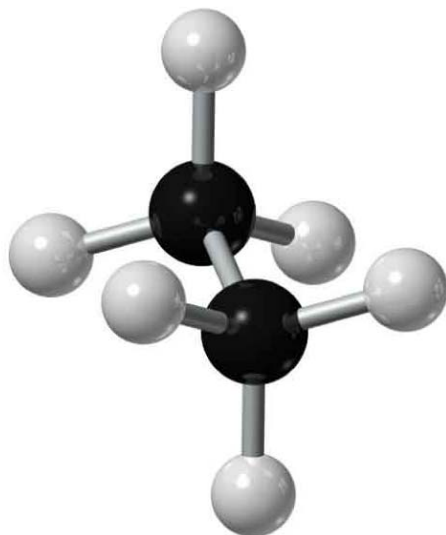
---

En general, las estructuras que resultan de la libre rotación de un enlace sencillo C-C difieren en energía.

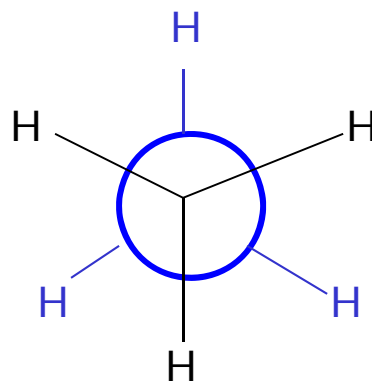
El conformero de menor energía es el que prevalece.

## 8. Conformaciones del etano (1)

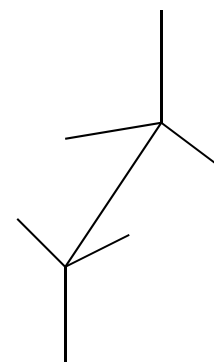
- La conformación alternada tiene la menor energía.
- Ángulo diedro =  $60^\circ$



modelo



Proyección  
de Newman

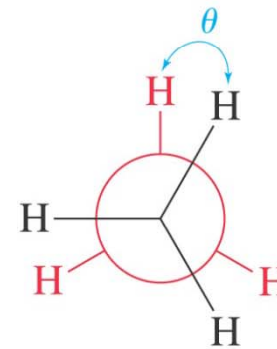
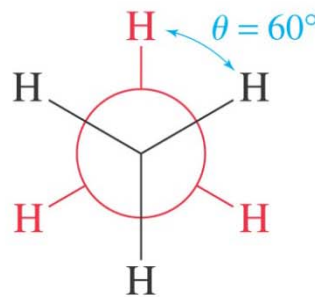
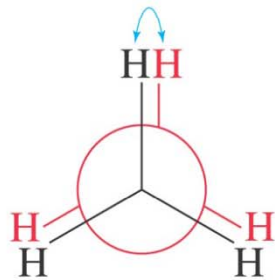


caballete

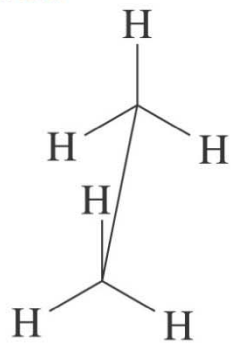
## 8. Conformaciones del etano (2)

- El conformero eclipsado tiene la mayor energía.
- Ángulo diedro =  $0^\circ$

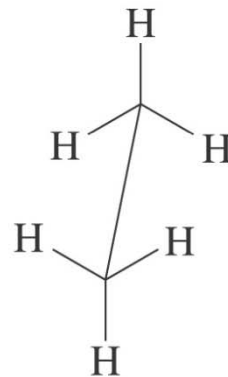
*Newman projections:*  $\theta = 0^\circ$



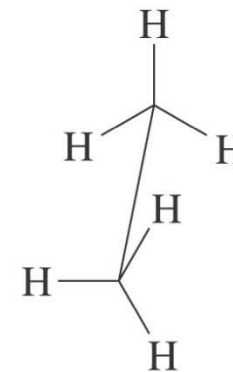
*Sawhorse structures:*



eclipsada,  $\theta = 0^\circ$



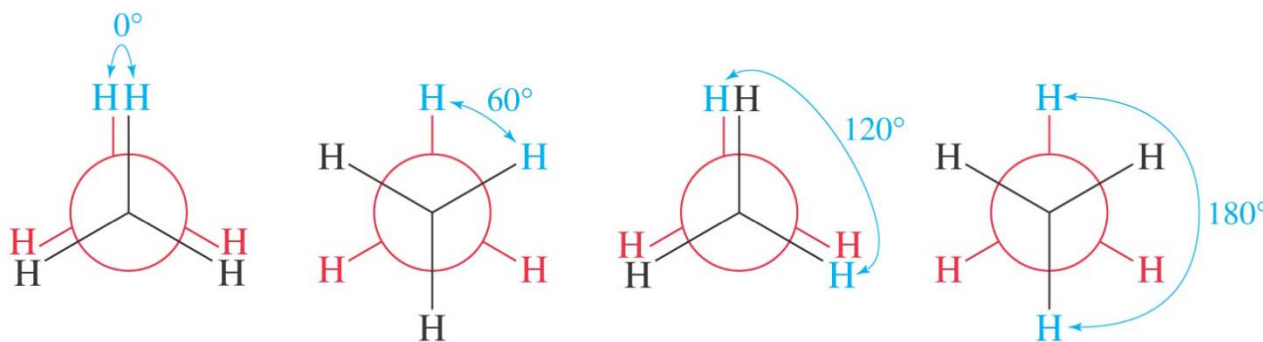
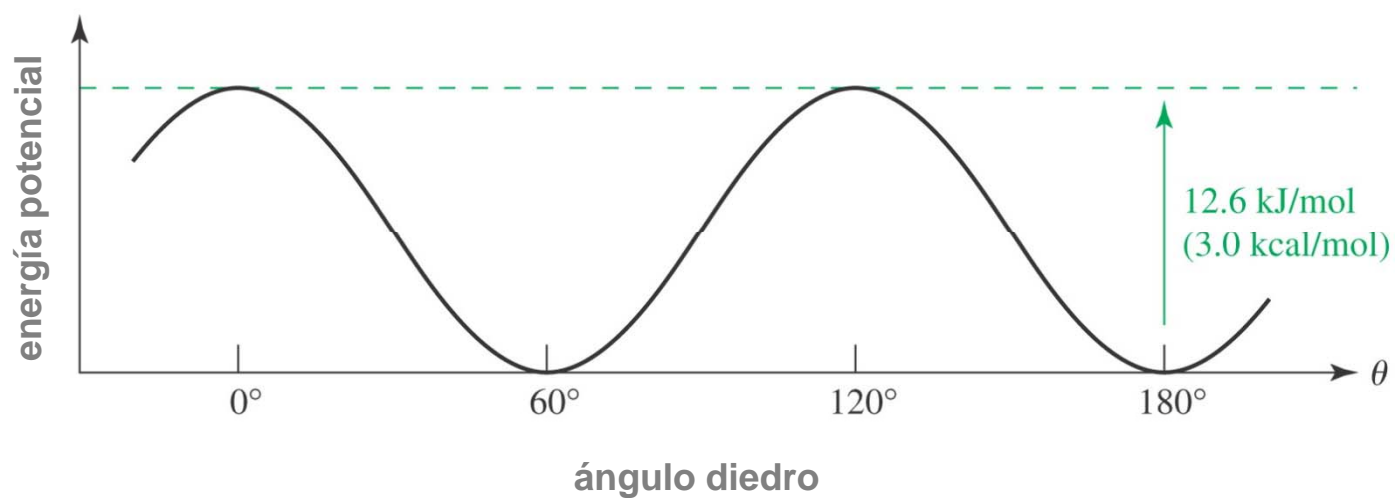
alternada,  $\theta = 60^\circ$



sesgada,  $\theta =$  cualquier otro valor

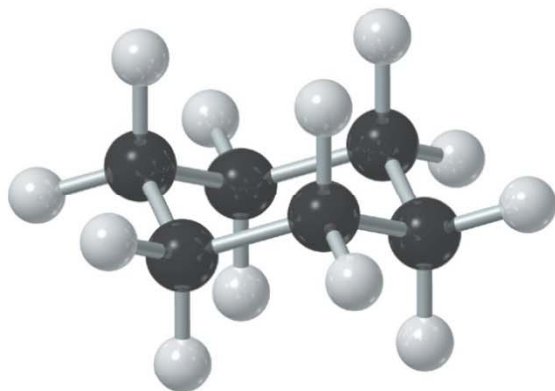
## 8. Análisis conformacional del etano

Tensión torsional: resistencia a la rotación, 12,6 kJ/mol

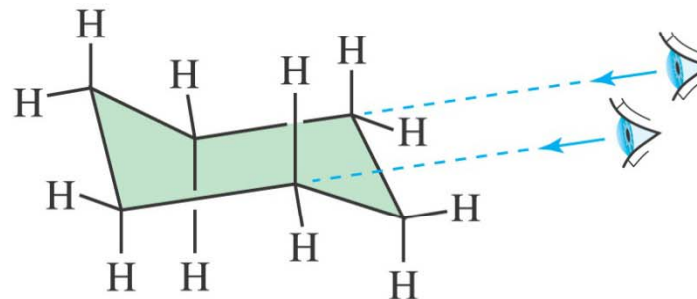




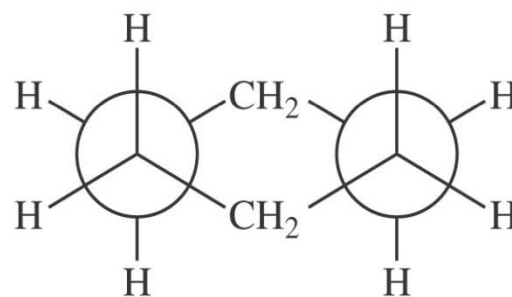
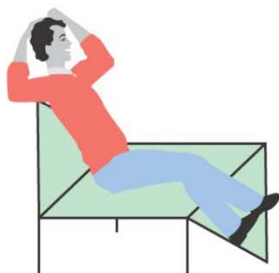
## 8. Ciclohexano: Conformación silla



conformación silla

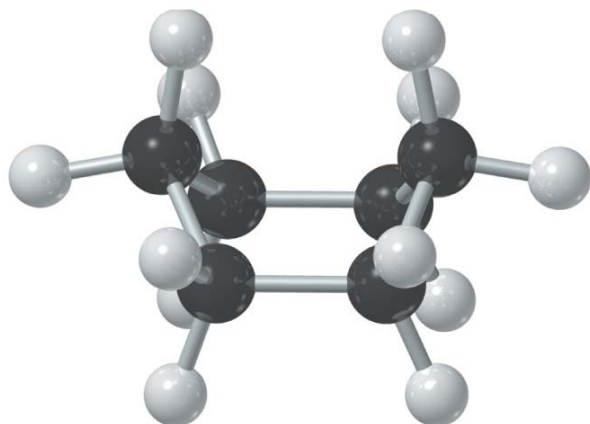


vista a lo largo de los enlaces C-C del asiento de la silla

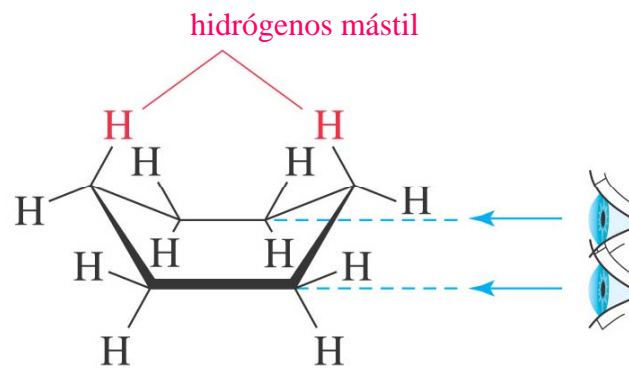


proyección de Newman

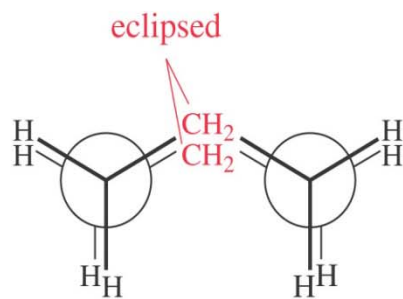
## 8. Ciclohexano: Conformación bote



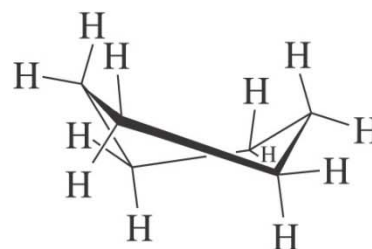
conformación bote



bote simétrico

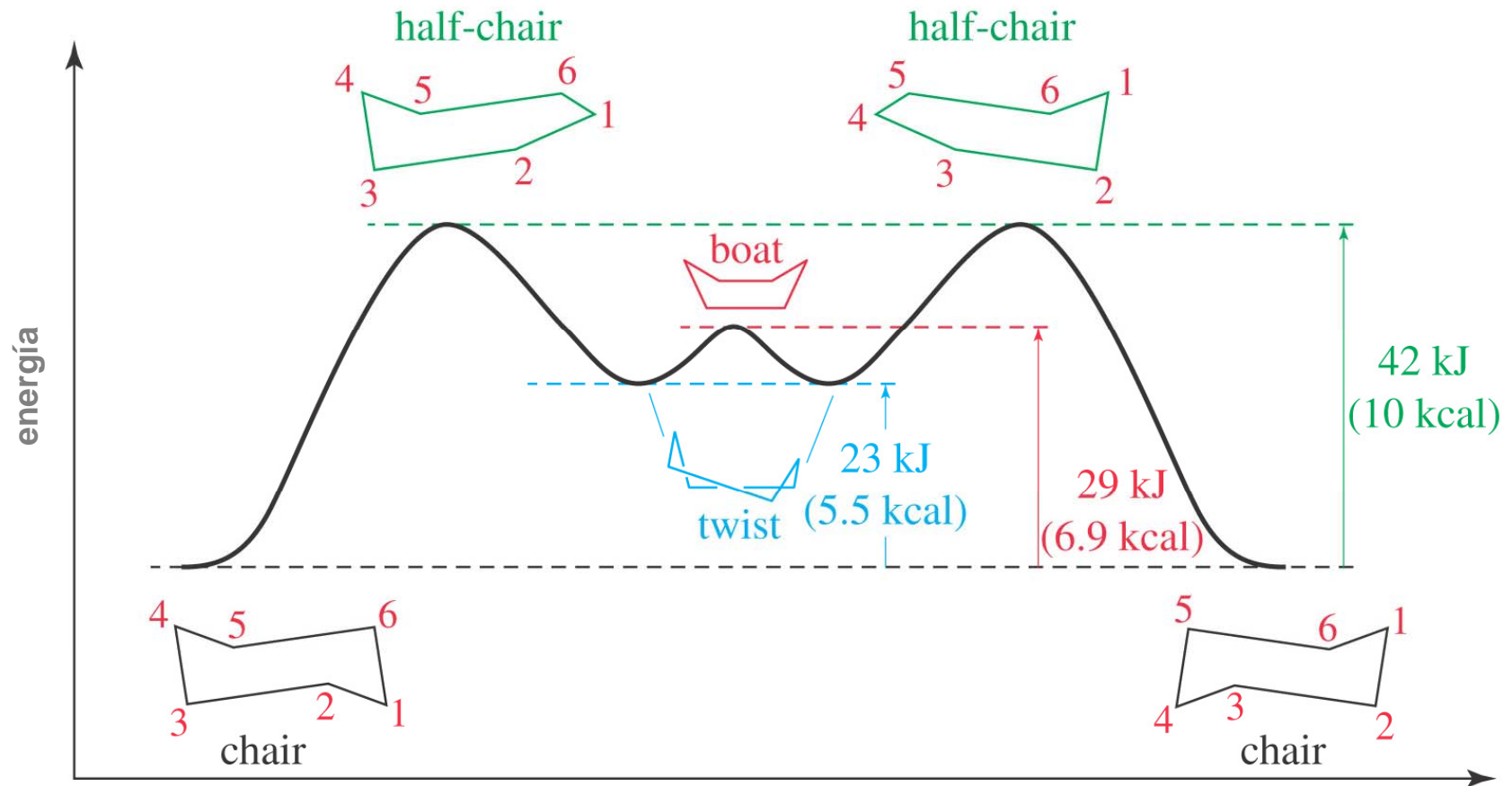


proyección de Newman



barca torcida

## 8 .Energía Conformacional del Ciclohexano



# Tema 11. ALCANOS

---

1. Clasificación de los hidrocarburos
2. Fórmulas moleculares de alcanos
3. Nomenclatura de alcanos
4. Propiedades físicas de alcanos
5. Aplicaciones y fuentes de alcanos
6. Reacciones de alcanos
7. Estereoisomería configuracional en cicloalcanos
8. Conformación de alcanos

*Las imágenes utilizadas para la preparación de este tema proceden de dos libros de Química Orgánica:*

- *L.G. Wade, Organic Chemistry, 6<sup>a</sup>Ed. Pearson International, 2005*
- *K.P.C. Vollhardt, Organic Chemistry, 4<sup>a</sup>Ed, Freeman 2003*