

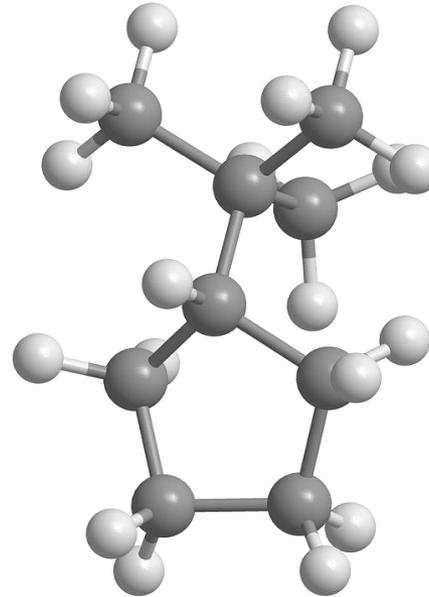
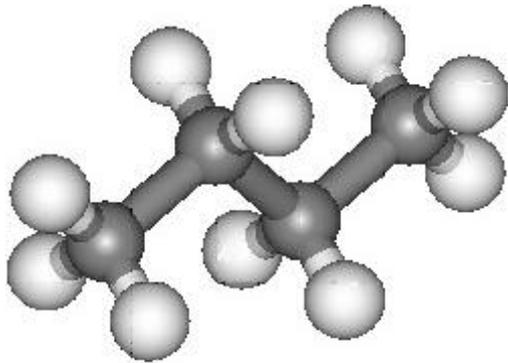
---

# UNIDAD 3

---

## ALCANOS Y CICLOALCANOS

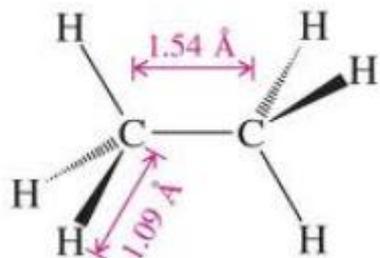
# ALCANOS Y CICLOALCANOS



Constituidos exclusivamente por carbono e hidrógeno y son moléculas sin **ningún** grupo funcional

Las uniones entre átomos de carbono (con hibridación  $sp^3$ ) son enlaces simples.

$$\theta = 109.5^\circ, d_{C-C} = 1.54 \text{ \AA}, d_{C-H} = 1.09 \text{ \AA}$$



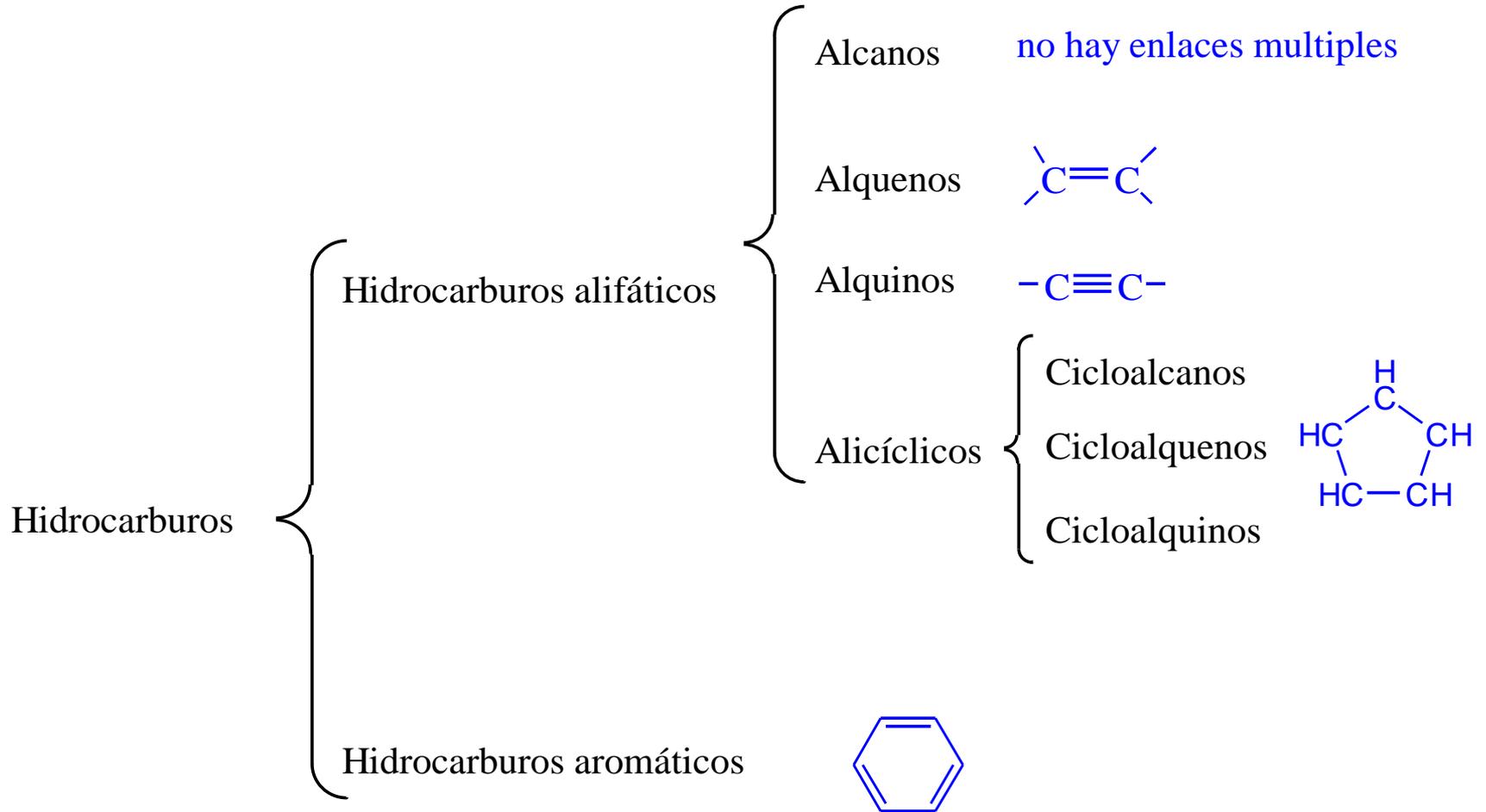
Son muy importantes porque:

su estudio nos permitirá entender el comportamiento del **esqueleto de los compuestos orgánicos** (conformaciones, isómeros y su diversidad)

constituyen una de las **fuentes de energía y materias primas** más importantes para la sociedad actual (petróleo y sus derivados).

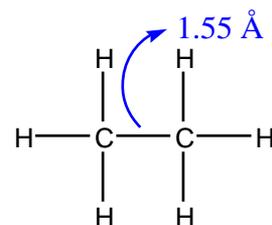
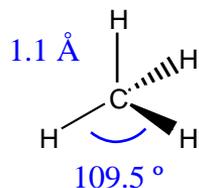
Hidrocarburo	Tipo de Enlace C-C	Fórmula molecular Acíclico	Fórmula molecular Monocíclico
Alcanos	enlaces simples	$C_nH_{2n+2}$	$C_nH_{2n}$

# Los alcanos entre los hidrocarburos



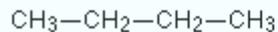
# ESTRUCTURA Y PROPIEDADES

Hibridación  $sp^3$

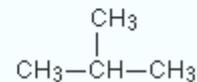


<b>Ejemplo</b>	$\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_3$	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\   \\ \text{CH}_3-\text{C}-\text{H} \\   \\ \text{CH}_3 \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{CH}_2-\text{CH}_2 \\   \quad   \\ \text{CH}_2-\text{CH}_2 \end{array}$
Tipo de cadena	<b>Lineal</b>	<b>Ramificada</b>	<b>Cíclica</b>
Fórmula general	$\text{C}_n\text{H}_{2n+2}$	$\text{C}_n\text{H}_{2n+2}$	$\text{C}_n\text{H}_{2n}$

Los alcanos con cuatro o más carbonos presentan isomería estructural



**Butano**

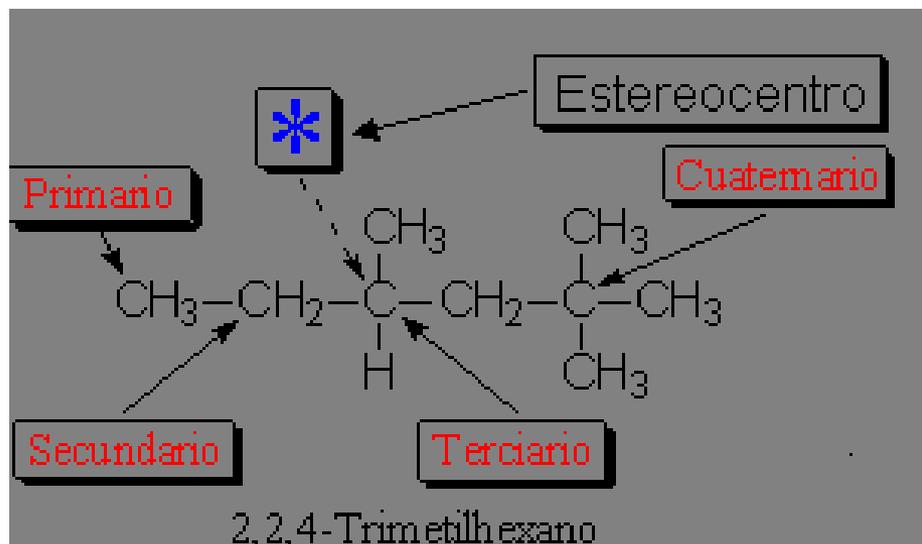


**2-metilpropano**

El número de isómeros crece rápidamente con el número de átomos de carbono del alcano

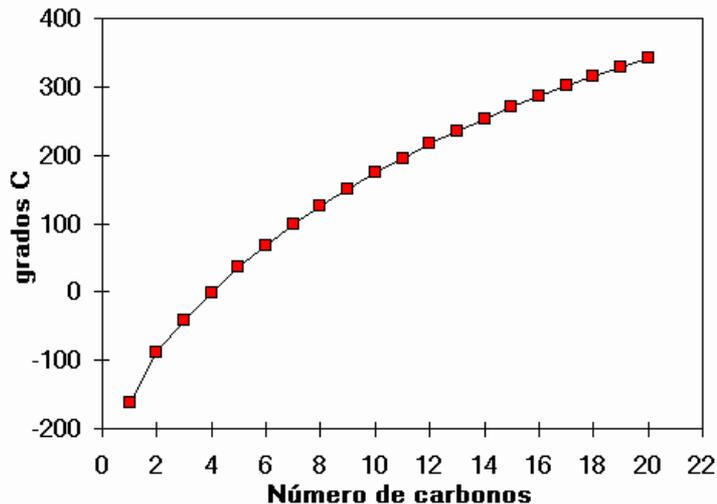
Número átomos C	Posibles Isómeros
1-3	1
4	2
5	3
6	5
7	9
8	18
9	35
10	75
15	4.347
20	366.319

Tipos de átomos de carbono según la sustitución



# PROPIEDADES FÍSICAS

## Punto de ebullición



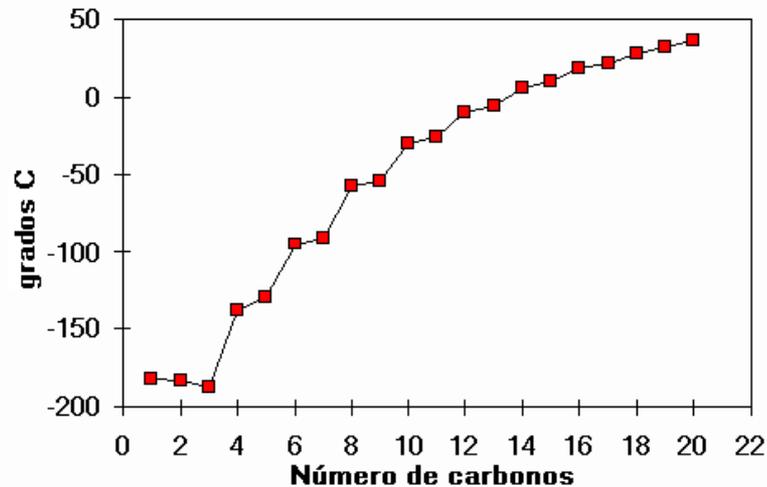
El punto de ebullición aumenta con el tamaño del alcano porque las fuerzas intermoleculares atractivas (**fuerzas de van der Waals y de London**) son más efectivas cuanto mayor es la superficie de la molécula.

Isómeros C <sub>5</sub> H <sub>12</sub>	Puntos de ebullición
$\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_3$	36.1
$\begin{array}{c} \text{CH}_3-\text{CH}-\text{CH}_2-\text{CH}_3 \\   \\ \text{CH}_3 \end{array}$	27.8
$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\   \\ \text{CH}_3-\text{C}-\text{CH}_3 \\   \\ \text{CH}_3 \end{array}$	9.5

Estos alcanos tienen el mismo número de carbonos y sus puntos de ebullición son muy distintos. La superficie efectiva de contacto entre dos moléculas disminuye cuanto más ramificadas sean éstas.

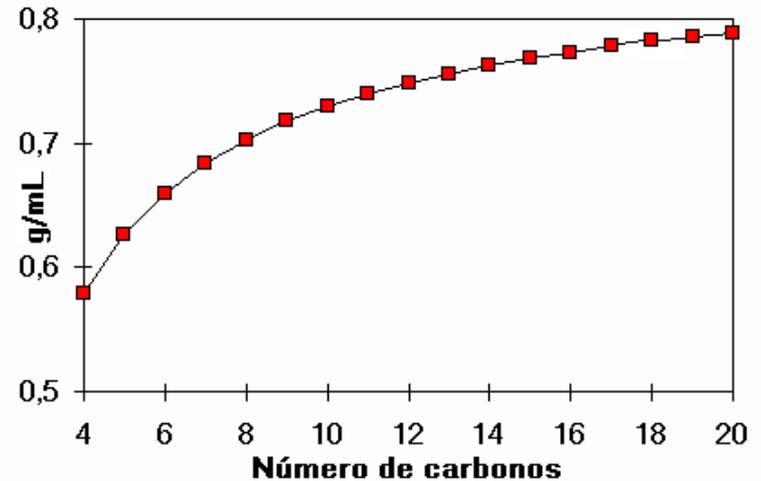
Las fuerzas intermoleculares son menores en los alcanos ramificados y tienen puntos de ebullición más bajos.

## Punto de fusión



El punto de fusión también aumenta con el tamaño del alcano por la misma razón. Los alcanos con número de carbonos impar se empaquetan peor en la estructura cristalina y poseen puntos de ebullición un poco menores de lo esperado.

## Densidad



Cuanto mayor es el número de carbonos las fuerzas intermoleculares son mayores y la cohesión intermolecular aumenta, resultando en un aumento de la proximidad molecular y, por tanto, de la densidad. Nótese que en todos los casos es inferior a uno.

---

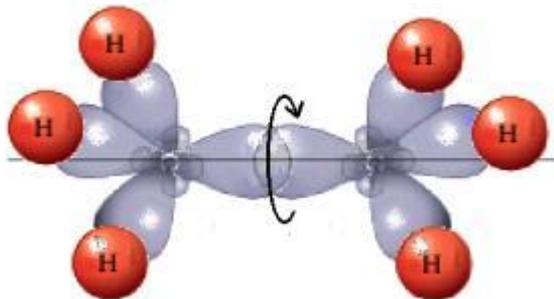
## Solubilidad

Los alcanos son apolares, por lo que se disuelven en disolventes orgánicos apolares o débilmente polares como benceno, tetracloruro de carbono, cloroformo, éter etílico, etc. Se dice que son hidrofóbicos (repelen el agua) ya que no se disuelven en agua.

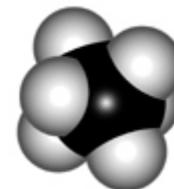
---

# CONFORMACIONES

## ANÁLISIS CONFORMACIONAL DEL ETANO



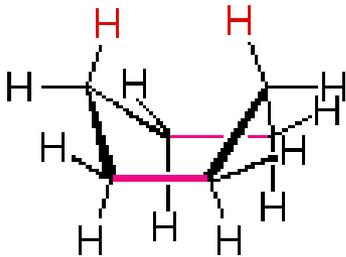
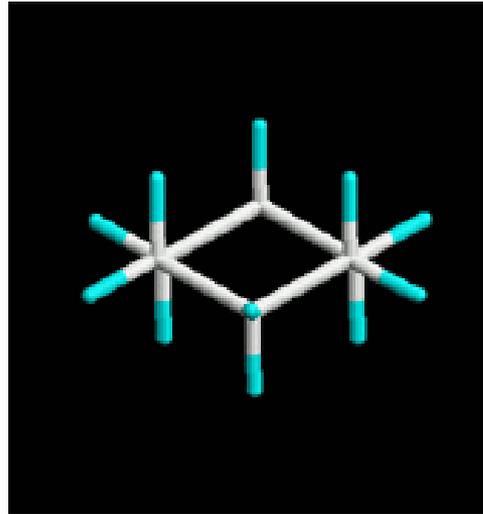
El enlace C-C simple tiene libertad de giro a lo largo de su eje. Eso provoca diferentes conformaciones en la molécula del alcano



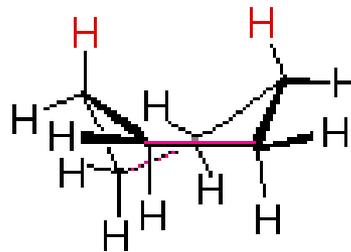
Conformación	Vista lateral	Vista frontal
Alternada		
Eclipsada		

A temperatura ambiente se interconvierten con mucha facilidad

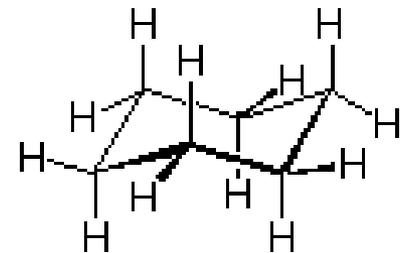
# ANÁLISIS CONFORMACIONAL DEL CICLOHEXANO



Conformación de bote



Conformación de bote torcido



Conformación de silla

---

## **PETRÓLEO**

El origen de los hidrocarburos

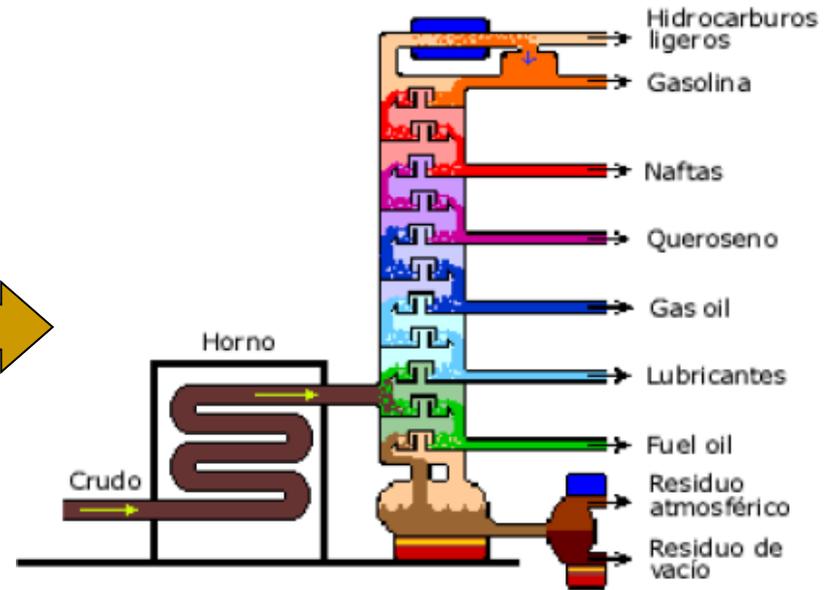
**<https://www.youtube.com/watch?v=mMhiFnPx3ic>**

**¿Cómo funciona una destilería?**

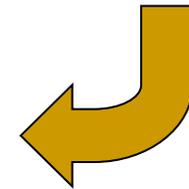
**<https://www.youtube.com/watch?v=tFJ064TLW4E&t=1s>**

---

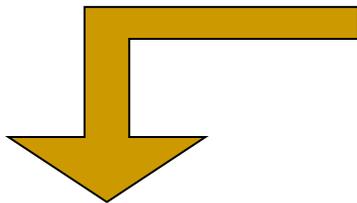
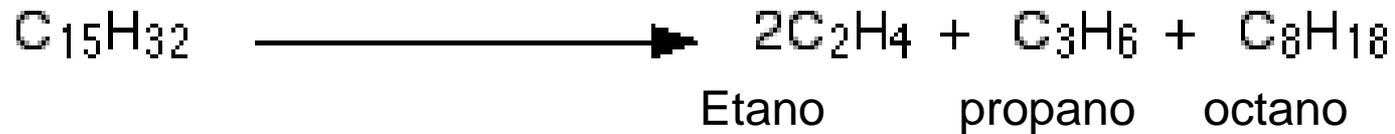
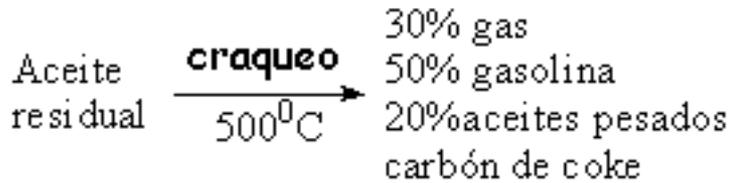
# PETRÓLEO



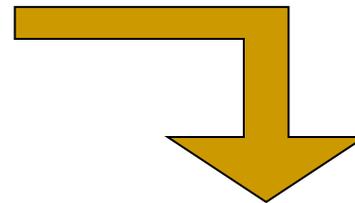
Cantidad (%Volumen)	Punto de ebullición (°C)	Atomos de carbono	Productos
1-2	<30	1-4	Gas natural, metano, propano, butano, gas licuado
15-30	30-200	4-12	Eter de petróleo (C <sub>5,6</sub> ), ligroína (C <sub>7</sub> ), nafta, gasolina cruda
5-20	200-300	12-15	Queroseno
10-40	300-400	15-25	Gas-oil, Fuel-oil, aceites lubricantes, ceras, asfaltos
8-69	>400	>25	Aceite residual, parafinas, brea



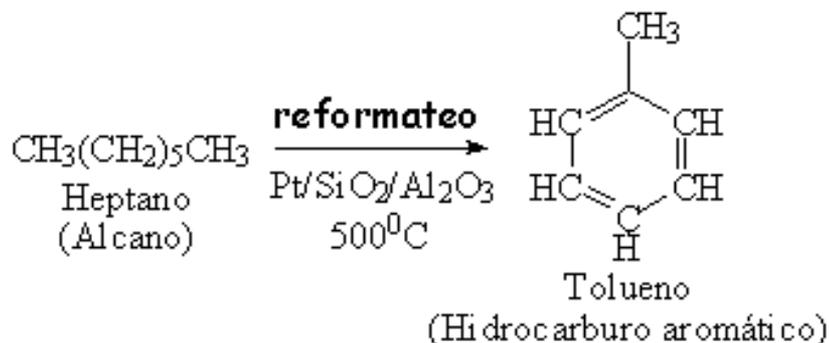
El **craqueo** es el proceso por el que se rompen químicamente las moléculas de hidrocarburo más grandes y complejas en otras más pequeñas y simples, para incrementar el rendimiento de obtención de gasolina a partir del petróleo. El craqueo se realiza mediante la aplicación de calor y presión y, más modernamente, mediante el uso de catalizadores apropiados (zeolitas, etc.)



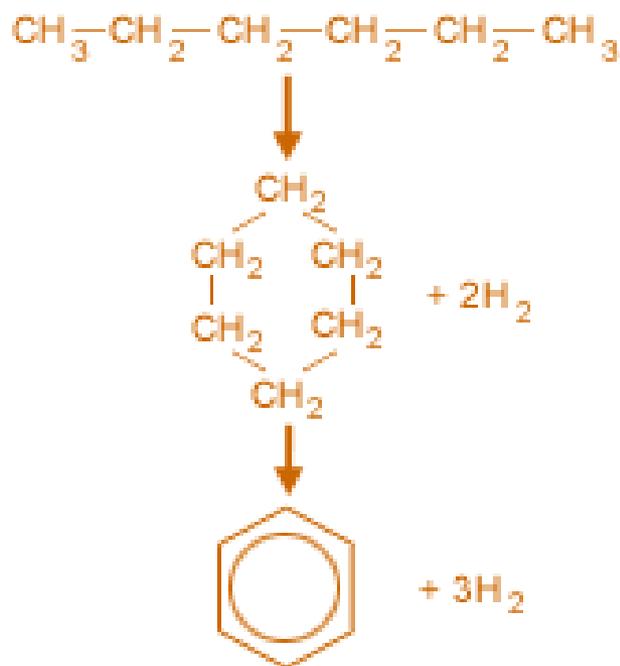
**Cracking catalítico**  
**zeolitas**



**Cracking térmico**  
**450-750 °C**  
**70 atm**



El **reforming** es un proceso por el que las moléculas lineales de hidrocarburos se ciclan pudiendo llegar a convertirse en hidrocarburos aromáticos



El objetivo es aumentar el índice de octanos de la gasolina

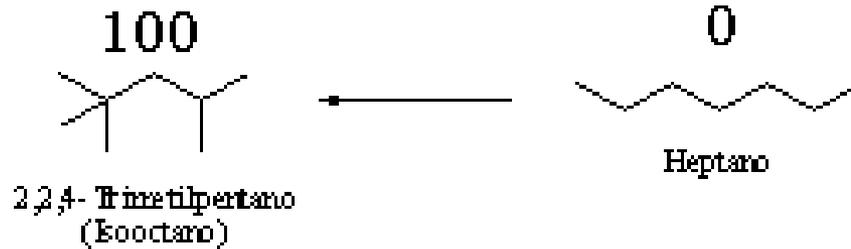
Hexano 25

Ciclohexano 83

Benceno 106

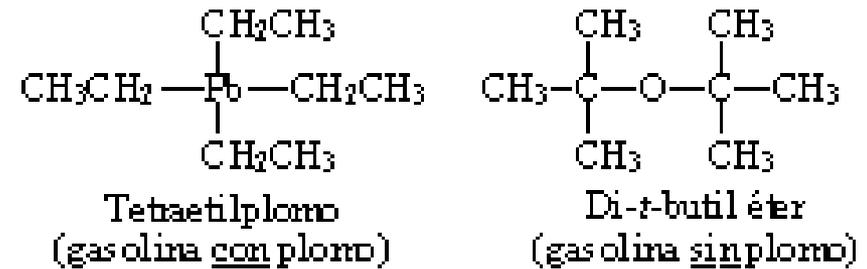
El proceso tiene lugar a 500°C y 20 atm con un catalizador de platino finamente dividido sobre óxido de aluminio

### Índice de octano para gasolinas



El índice de octano marca la capacidad de autoignición de la gasolina bajo presión. Cuanto mayor índice más difícil es la autoignición

### Aditivos



Puede subirse el octanaje de una mezcla de alcanos mediante el uso de aditivos que impidan su autoignición prematura en el ciclo de explosión de un motor

## Fracciones Gaseosas

Metano  
Etano  
Propano  
Butano  
Etileno  
Propileno  
Butilenos  
Butadieno

## Petróleo bruto Gas natural

## Fracciones Líquidas y Sólidas

Benceno  
Tolueno  
Xileno  
Gasolina ligera  
Fracciones aromáticas pesadas  
Parafinas

### Productos de transformación

Acetileno  
Acetaldehído  
Acetona  
Acrilonitrilo  
Alcohol butílico  
Alcohol etílico  
Alcohol isopropílico  
Alcohol metílico  
Alcoholes de síntesis  
Cloruro de vinilo  
Dicloroetano  
Etilenglicol  
Etilbenceno  
Estireno  
Fenol  
Formaldehído  
Glicerol  
Isopreno  
Óxido de etileno  
Propileno-glicol  
Tripropileno  
Tetrapropileno

### Aplicaciones

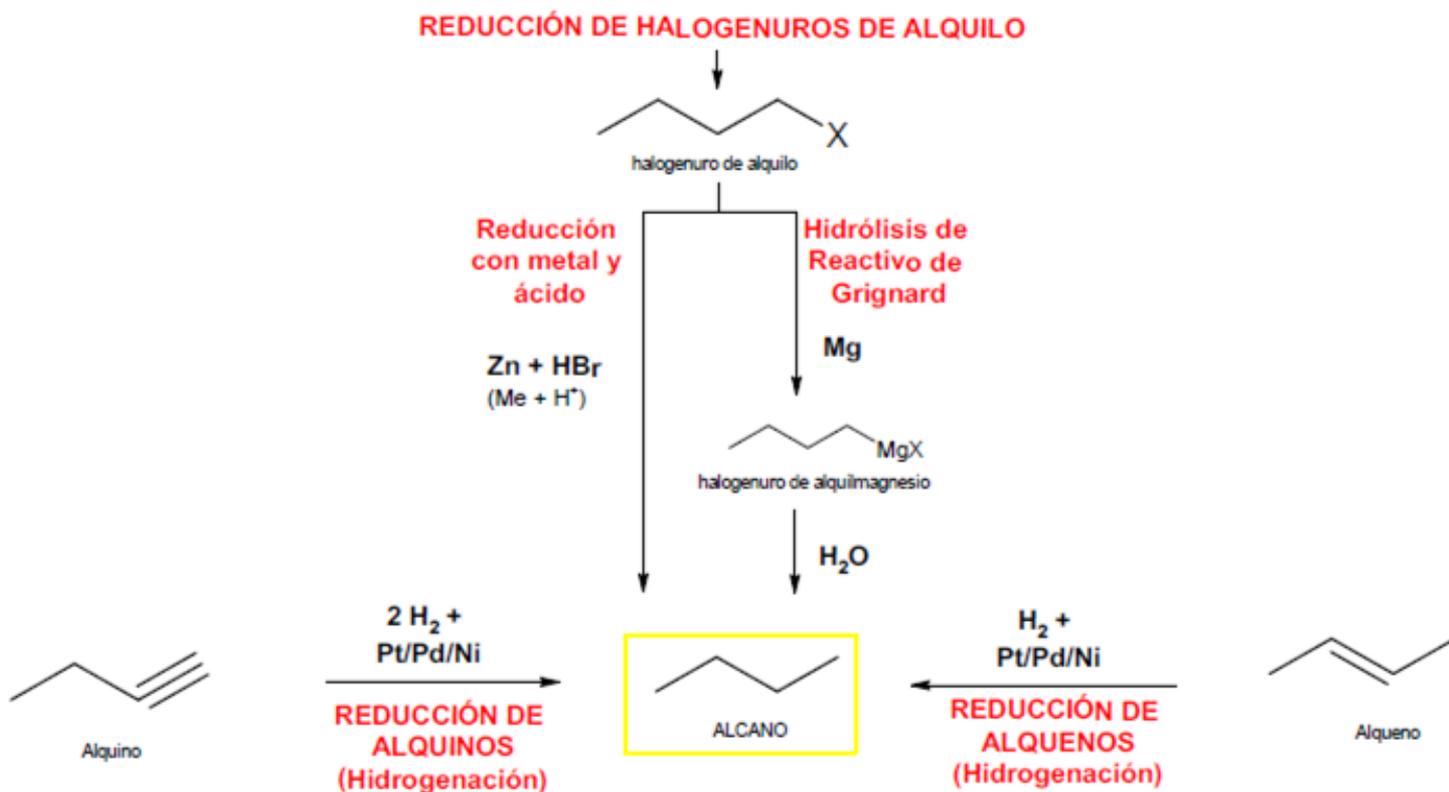
Abonos nitrogenados  
Materias plásticas  
Disolventes  
Fibras sintéticas  
Fibras artificiales  
Anticongelantes  
Cauchos sintéticos  
Detergentes  
Plastificantes  
Insecticidas  
Colorantes  
Explosivos  
Resinas

### Productos de transformación

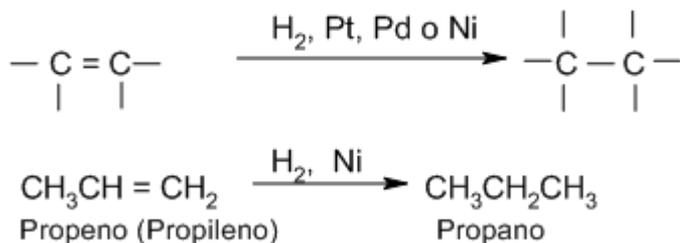
Etilbenceno  
Estireno  
Fenol  
Ciclohexano  
Ácido adípico  
Dodecilbenceno  
Ácidos sulfónicos  
Toluendiisocianato  
T.N.T.  
Ortoxileno  
Anhídrido ftálico  
Xilenos  
Ácido tereftálico  
Ácido acético  
Negro de carbono  
Resinas de petróleo  
Olefinas superiores  
Aditivos  
Parafinas cloradas

# PREPARACIÓN DE ALCANOS

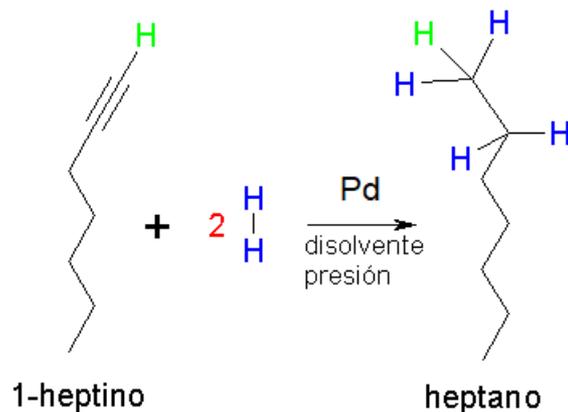
Los alcanos se obtienen de forma natural mediante el fraccionamiento del petróleo. Pero este proceso da lugar a mezclas difíciles de purificar. Si queremos obtener un alcano puro es más conveniente plantear en el laboratorio un esquema de preparación (síntesis) adecuado.



## Hidrogenación de alquenos y alquinos



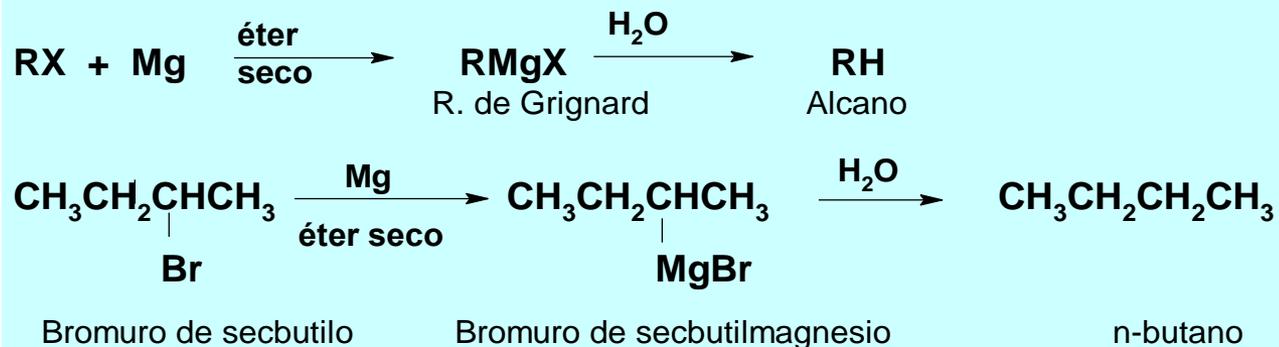
Los alquenos reaccionan con hidrógeno, en la superficie porosa de un metal de transición, para dar alcanos. La nube  $\pi$  del doble enlace interacciona con el hidrógeno dando lugar a dos nuevos enlaces  $\sigma$  C-H.



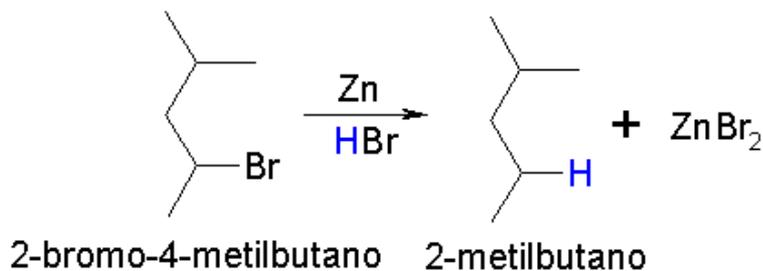
Los alquinos también reaccionan con hidrógeno (2 moles), de una forma análoga a los alquenos, para dar alcanos. Las dos nubes  $\pi$  del triple enlace interaccionan con sendas moléculas de hidrógeno, dando lugar a cuatro nuevos enlaces  $\sigma$  C-H.

# Reducción de haluros de alquilo

## a) Hidrólisis de Reactivos de Grignard

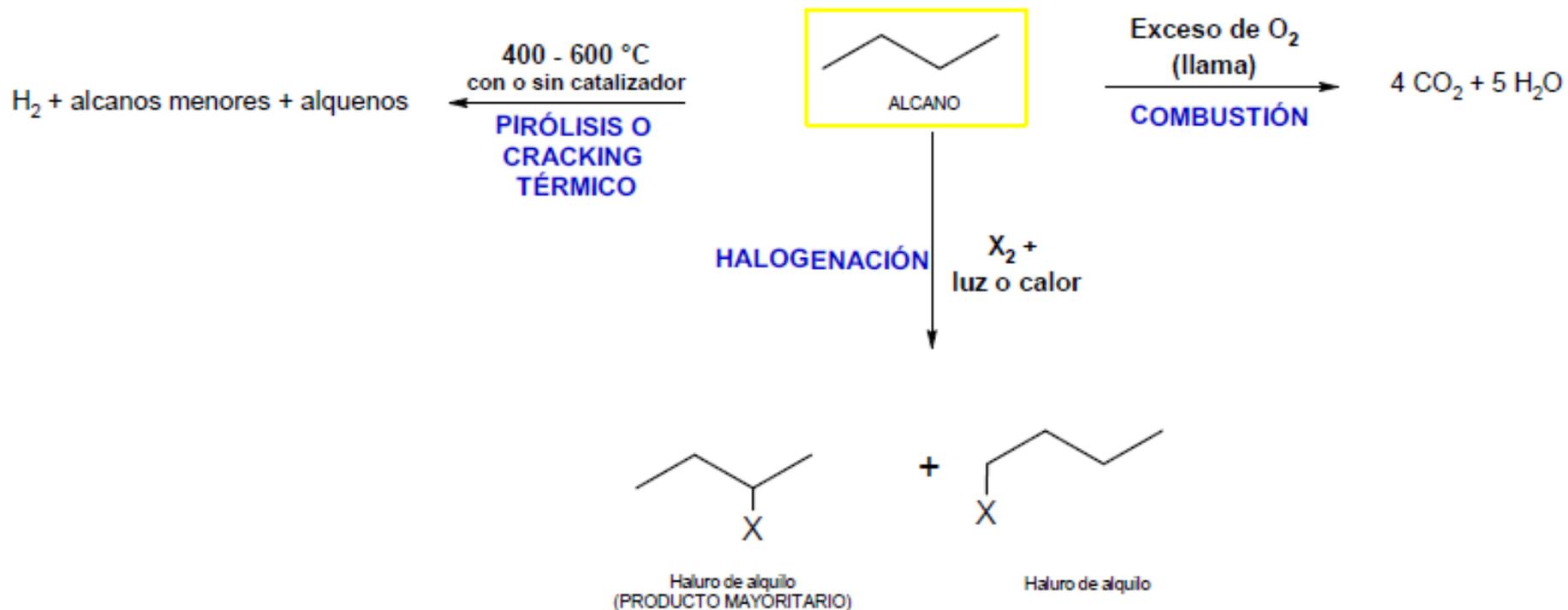


## b) Reducción con metal y ácido



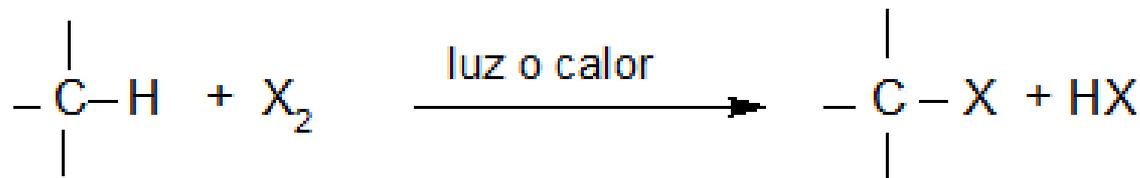
En un haluro de alquilo el C unido al Br tiene una densidad electrónica baja por el efecto de la mayor electronegatividad del halógeno. El metal Zn, muy rico en electrones apantallados y fáciles de ceder (características típicas de un reductor), dona dos electrones al carbono con lo que se forma  $\text{Zn}^{2+}$  (el metal se oxida) y se rompe el enlace C-Br. El carbono que ha recibido electrones (se ha reducido) los comparte con el protón del HBr, formandose  $\text{ZnBr}_2$  como subproducto.

# REACTIVIDAD



## REACCIONES DE ALCANOS

### HALOGENACIÓN

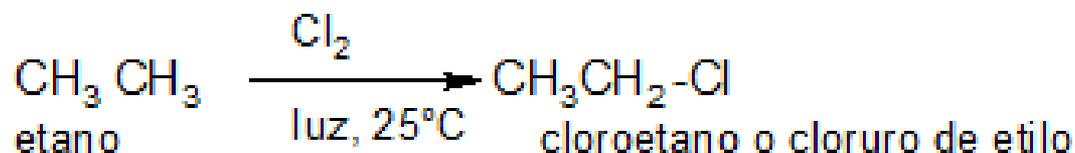


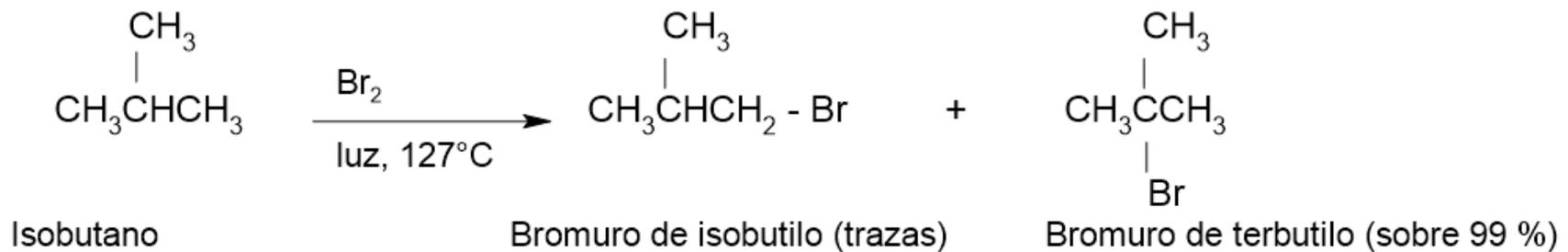
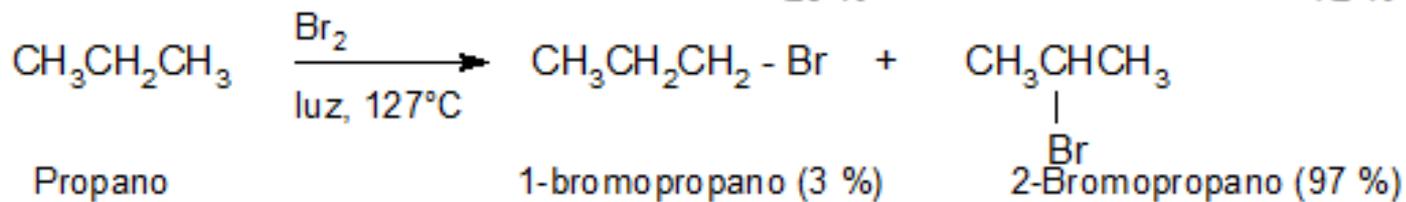
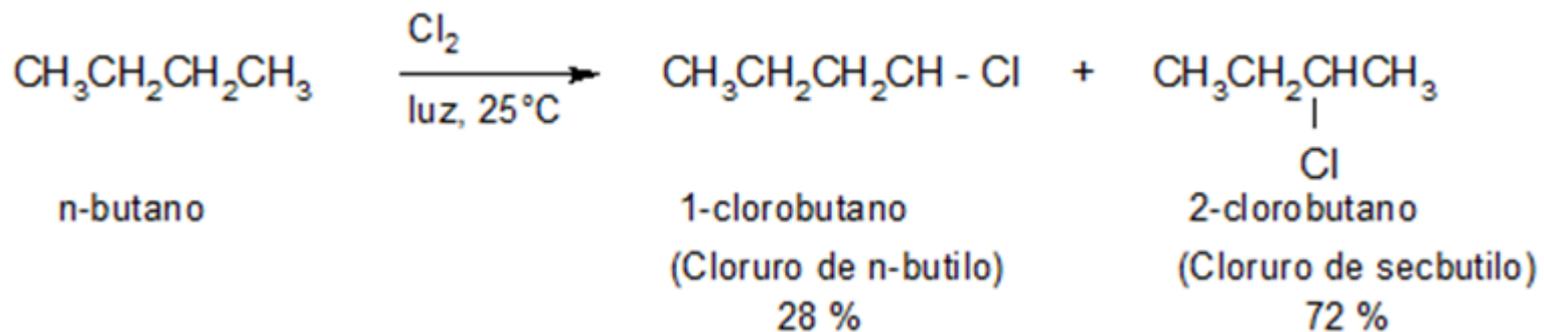
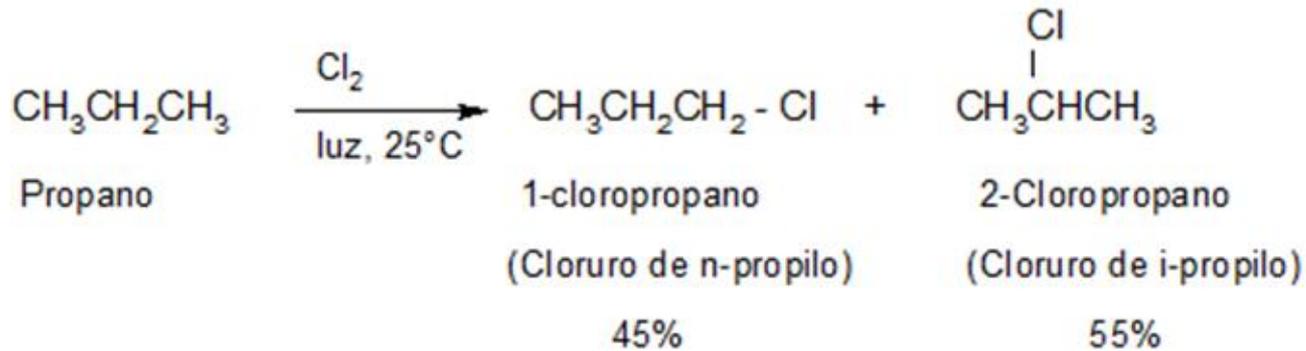
Generalmente una mezcla

Reactividad

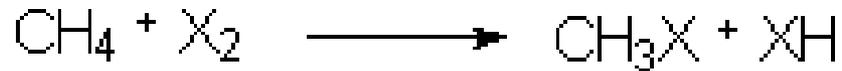
X<sub>2</sub>: F<sub>2</sub> > Cl<sub>2</sub> > Br<sub>2</sub> > I<sub>2</sub>

H: 3° > 2° > 1° > CH<sub>3</sub> - H





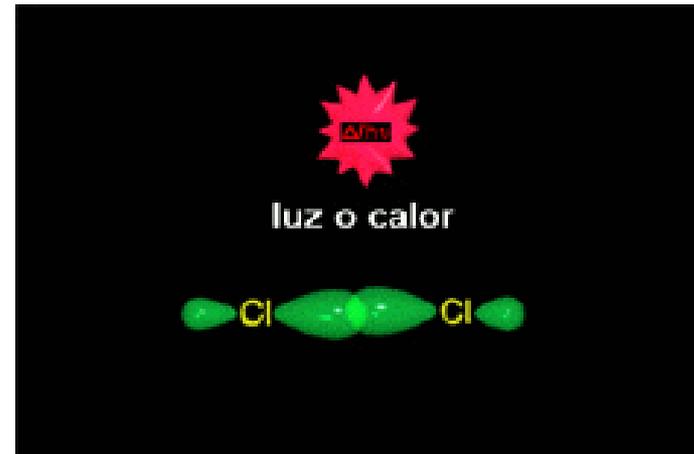
## Entalpía de reacción de los diferentes halógenos



F	Cl	Br	I
-103	-25	-7	+13

Las reacciones de alcanos con cloro y bromo transcurren a velocidades moderadas y son fáciles de controlar; las reacciones con fluor a menudo son demasiado rápidas y es difícil controlarlas. El yodo o no reacciona o lo hace lentamente.

Las reacciones del cloro y el bromo con los alcanos no ocurre en la oscuridad, son reacciones fotoquímicas, catalizadas por la luz ultravioleta



Son reacciones de sustitución que transcurren a través de radicales libres

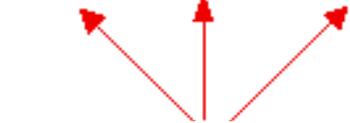
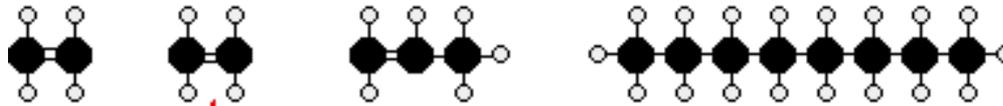
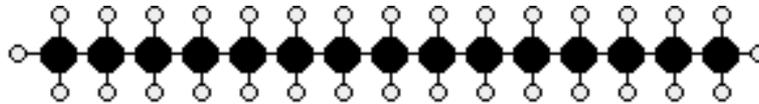
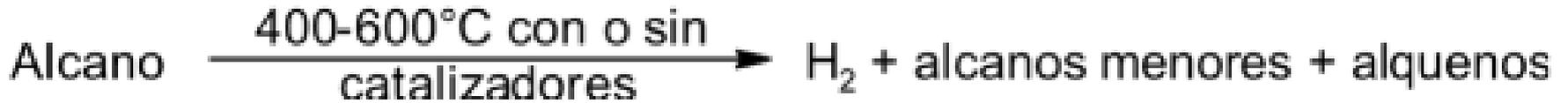
## UTILIDAD SINTÉTICA DE LA HALOGENACIÓN DE ALCANOS

Ventajas	Reactivo	Inconvenientes
	$F_2$	El $F_2$ es caro y corrosivo Las reacciones son violentas
El $Cl_2$ es barato	$Cl_2$	Selectividad baja Problemas de perhalogenación
El $Br_2$ es líquido y más fácil de manejar. Es altamente selectivo	$Br_2$	El $Br_2$ es relativamente caro
	$I_2$	Termodinámica en contra



# CRAKING

Proceso de ruptura de largas cadenas de hidrocarburos en pequeñas unidades. Transcurre a altas presiones y temperaturas, que pueden moderarse con uso de catalizadores (zeolitas)



Se forman dobles enlaces

Cracking catalítico

Cracking térmico

## COMBUSTIÓN

La combustión de alcanos es la forma habitual de liberar la energía almacenada en los combustibles fósiles.

La combustión es una reacción de oxidación en la cual todos los átomos de carbono de la molécula se convierten en  $\text{CO}_2$  y los átomos de hidrógeno en  $\text{H}_2\text{O}$ . Lleva asociado un valor de  $\Delta H^\circ$  muy negativo, que libera en forma de calor.

