

QUÍMICA ORGÁNICA

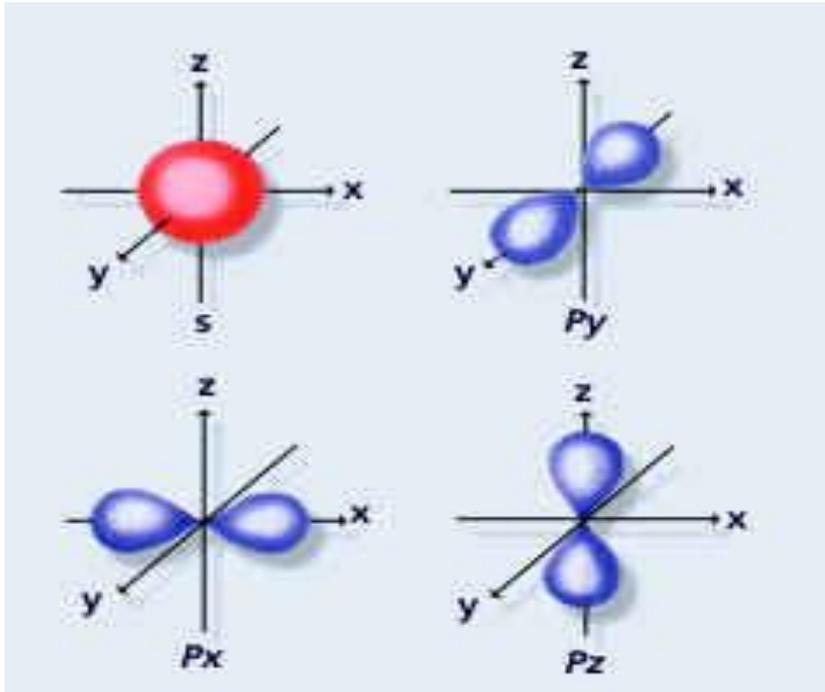
Mecánica Cuántica:

Desarrolla expresiones matemáticas para describir el movimiento de un electrón en función de su energía. Se conocen como *ecuaciones de onda* (dualidad onda-partícula).

Las soluciones de una ecuación de onda son las *funciones de onda* y cada una de ellas corresponde a un nivel de energía diferente para el electrón.

La función de onda revela la probabilidad de encontrar el electrón en cualquier lugar particular

La región del espacio en la que es probable que se encuentre un electrón se denomina **orbital**



Configuración electrónica. Regla de exclusión de Pauli

Se distribuyen siguiendo el principio de exclusión de Pauli:

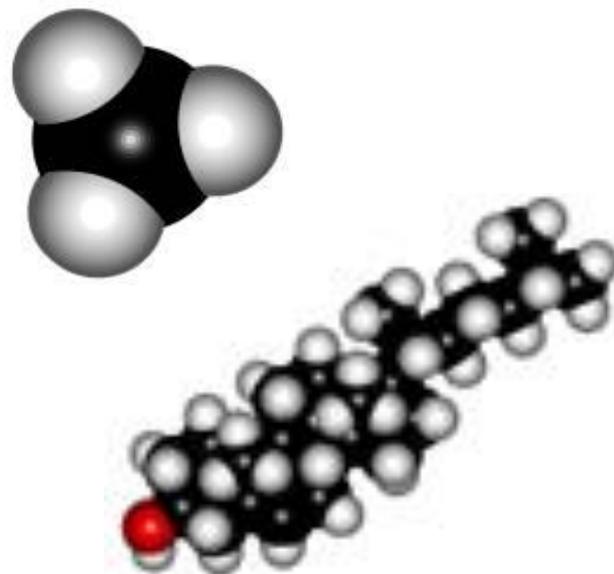
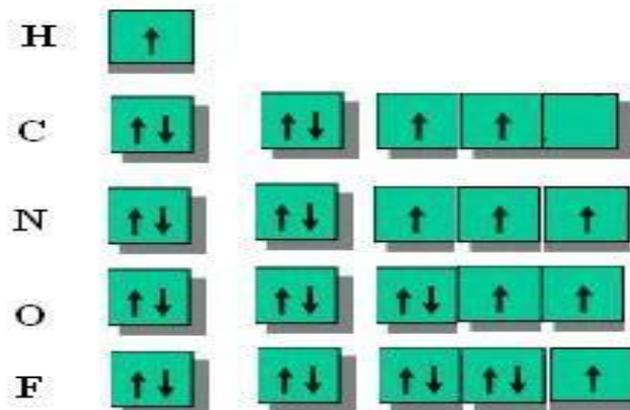
- (1) Un orbital atómico determinado puede ser ocupado por solo 2 electrones, que para ello deben tener espines opuestos.
- (2) Estos electrones de espines opuestos se consideran apareados.
- (3) Los electrones de igual spin tienden a separarse lo máximo posible

Orbitales moleculares:

En las moléculas, al igual que en los átomos aislados, los electrones ocupan orbitales, de acuerdo a las mismas reglas. Se agregan 2 supuestos:

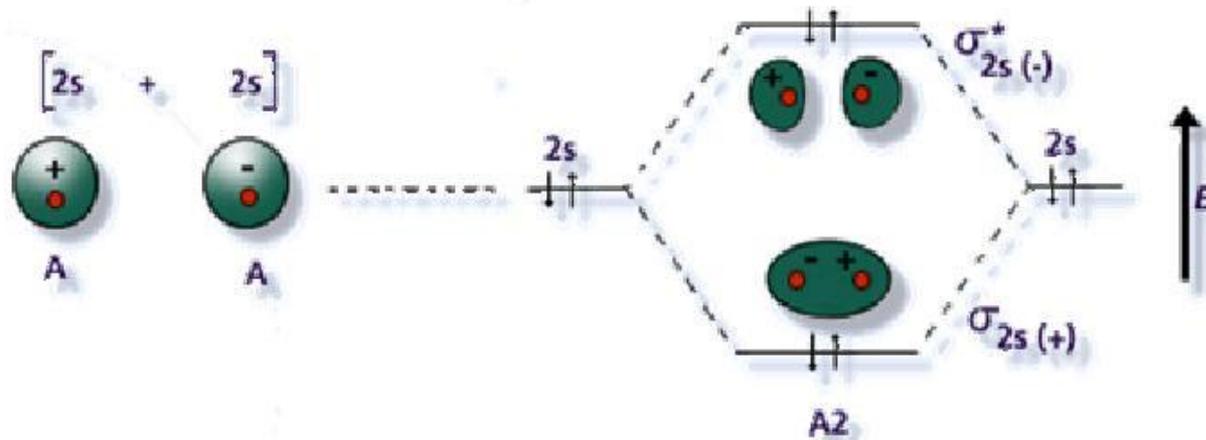
- (1) cada par de electrones esta localizado esencialmente cerca de dos núcleos
- (2) La forma de estos orbitales moleculares deslocalizados, y su disposición con respecto a los demás, están relacionadas de un modo sencillo con las formas y disposiciones de los orbitales atómicos de los átomos que componen la molécula

Configuraciones electrónicas



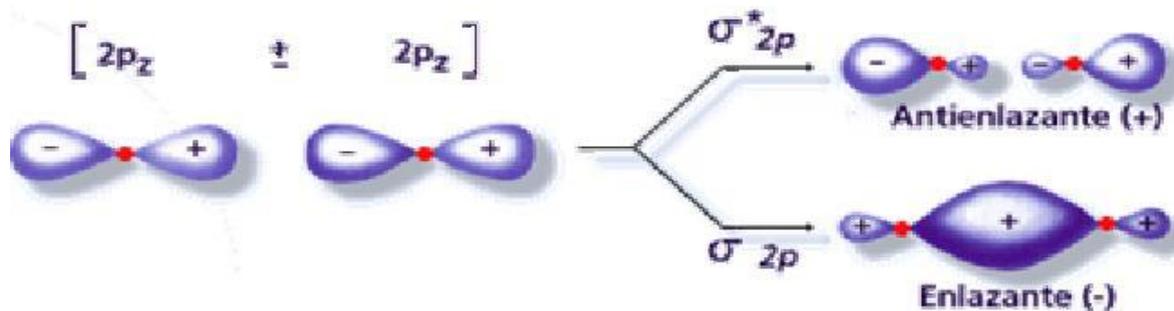
El enlace covalente

Formación de los OM en la molécula de hidrógeno



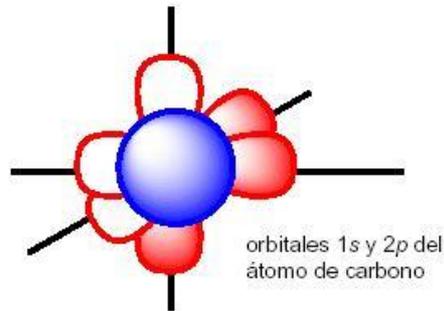
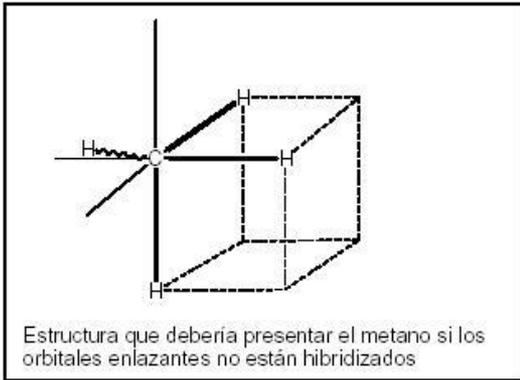
<http://es.geocities.com/quimicorganica>

Formación de los OM en la molécula de flúor

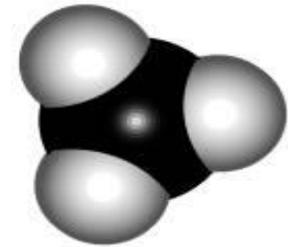


<http://es.geocities.com/quimicorganica>

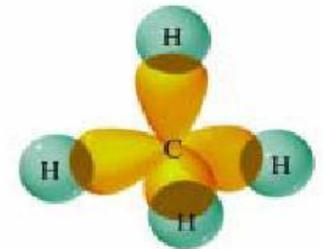
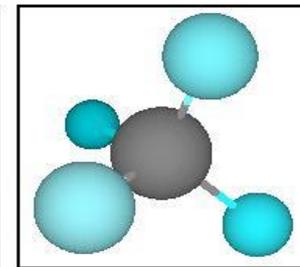
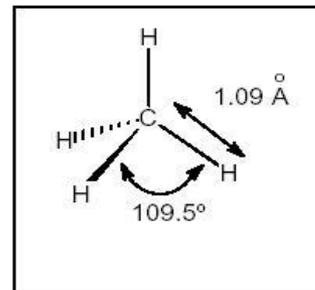
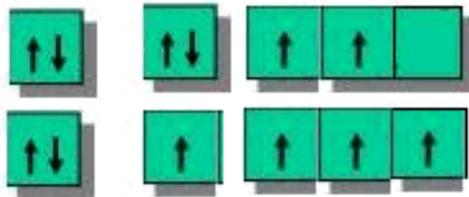
La unión C-H. Una molécula orgánica sencilla: CH_4



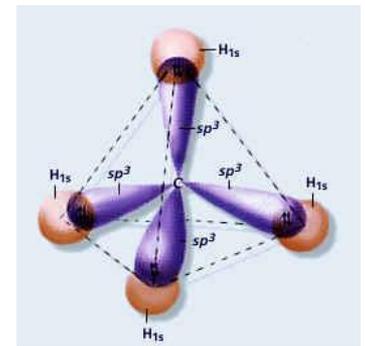
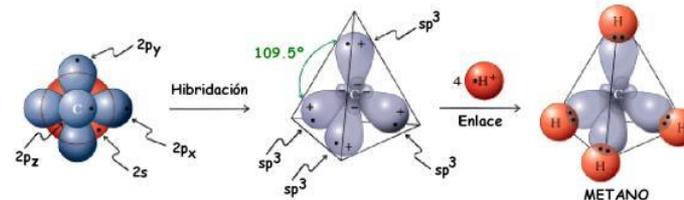
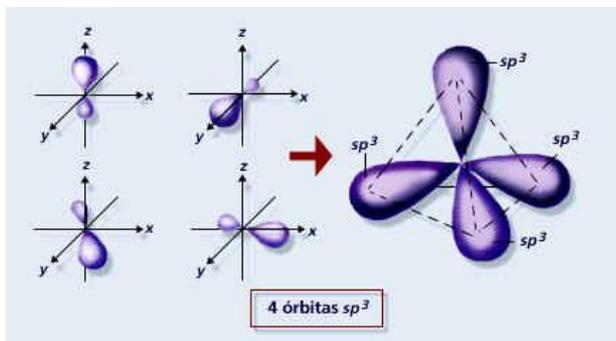
<http://es.g>



Distancias y ángulos de enlace en la molécula de metano

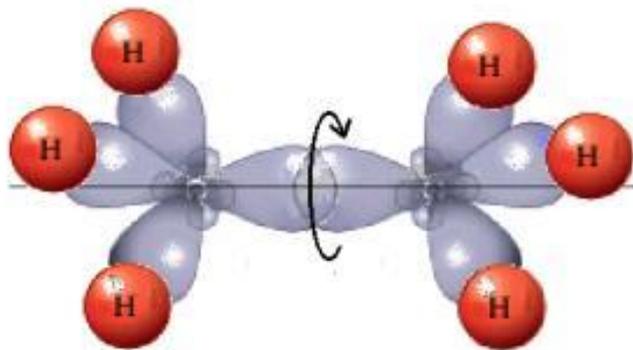
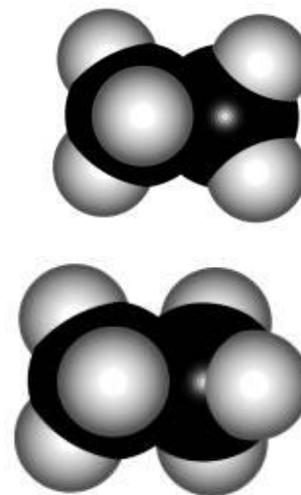
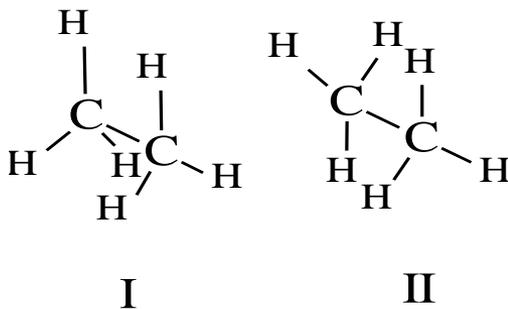
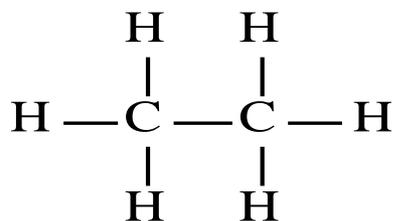
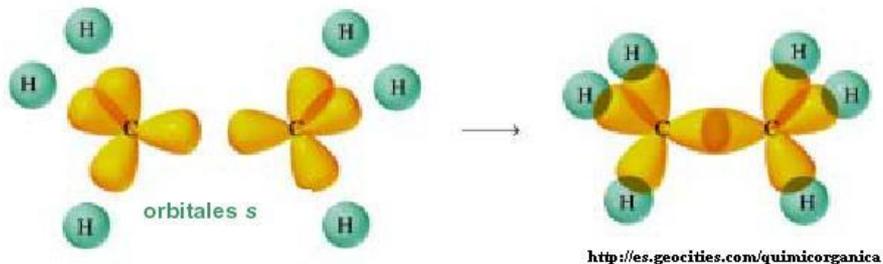


<http://es.geocities.com/quimicorganica>

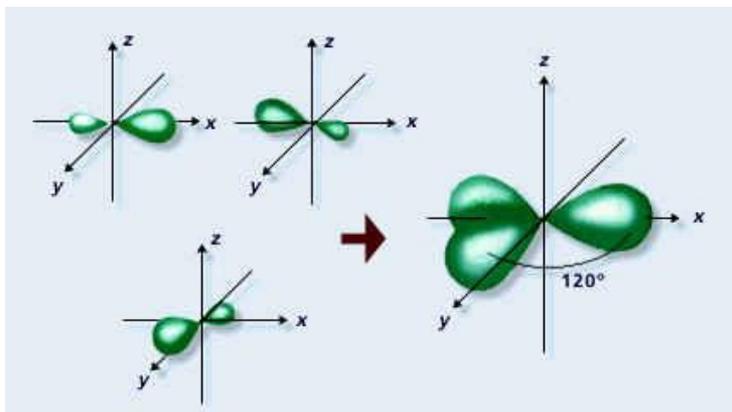


La unión entre dos átomos de C: C_2H_6

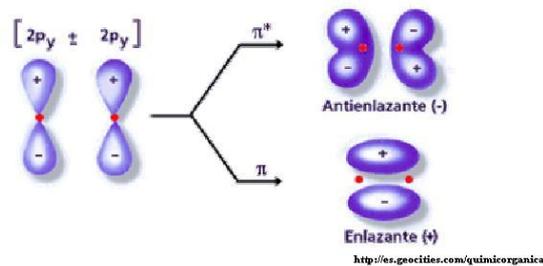
Formación de enlaces en la molécula de etano



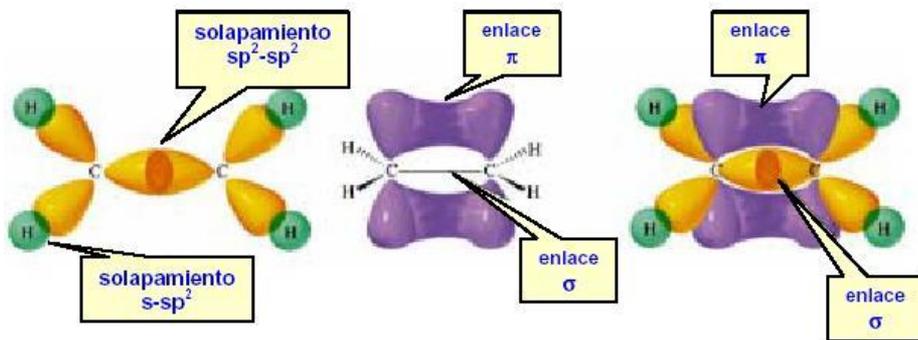
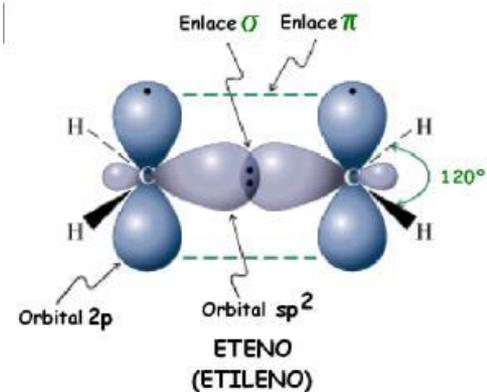
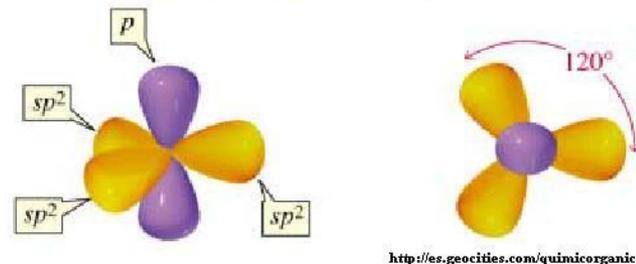
La unión entre dos átomos de C: C_2H_4



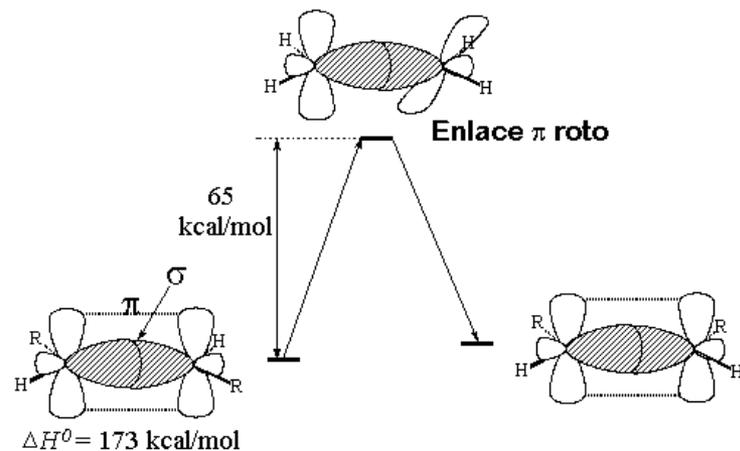
Formación de orbitales moleculares π y π^* por solapamiento lateral de OA p



Vista frontal y vista superior de un átomo de carbono con hibridación sp^2

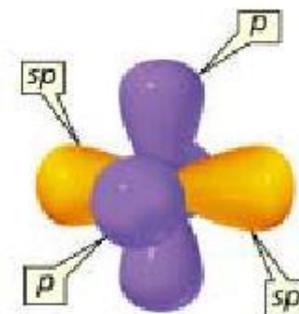
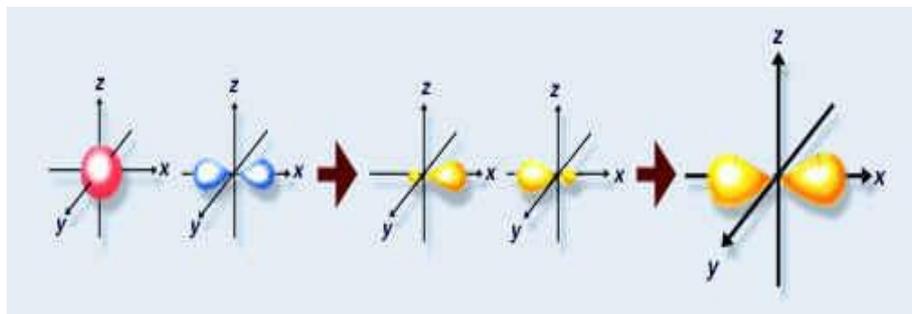


<http://es.geocities.com/quimicorganica>

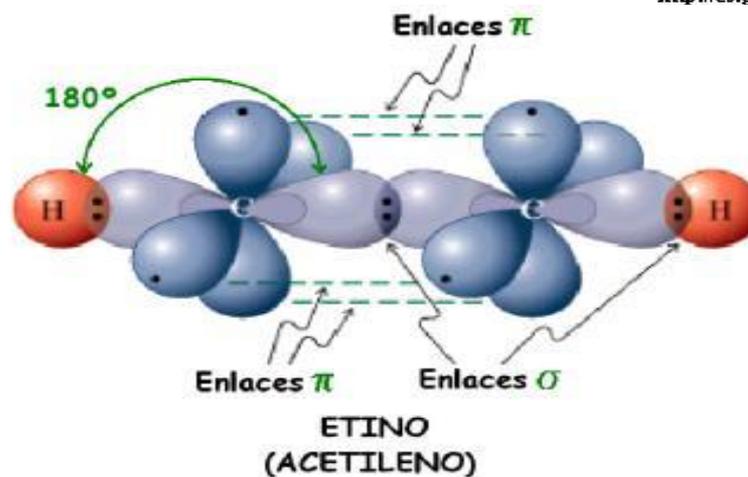


La unión entre dos átomos de C: C_2H_2

Configuración orbital de un átomo de carbono con hibridación sp

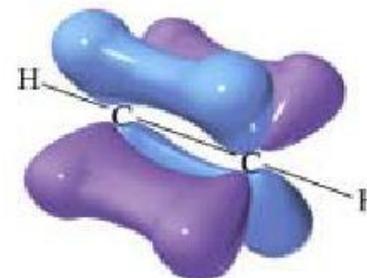
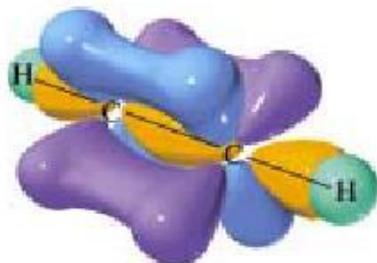


<http://es.geocities.com/quimicorganica>

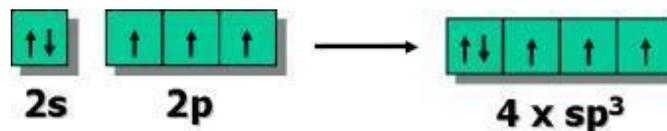
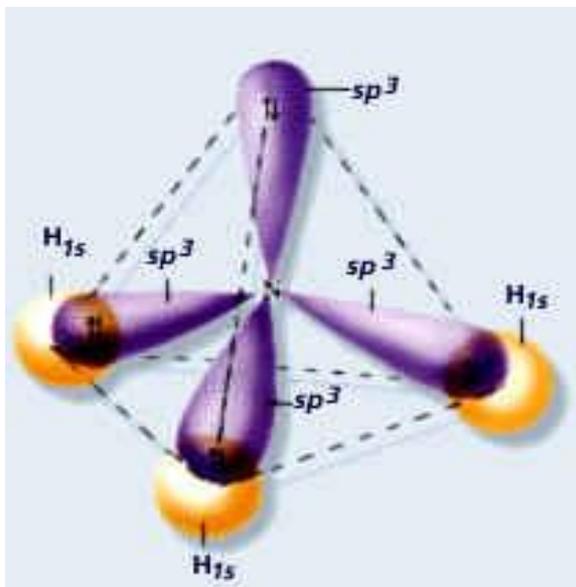


Sistema de enlaces σ y π de la molécula de acetileno

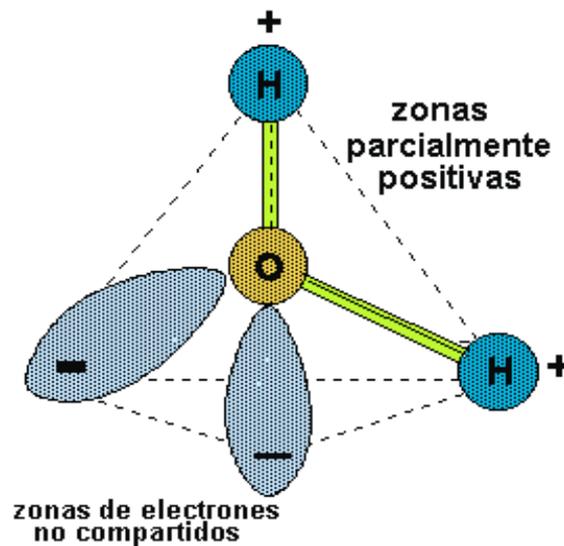
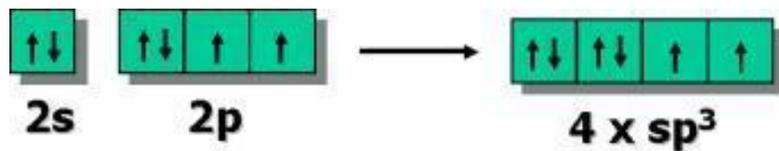
Densidad electrónica π en la molécula de acetileno



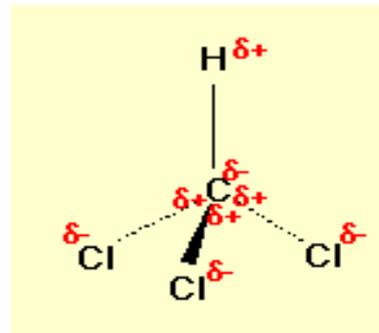
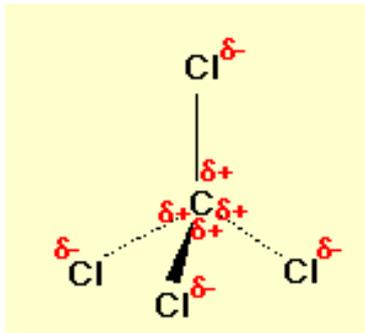
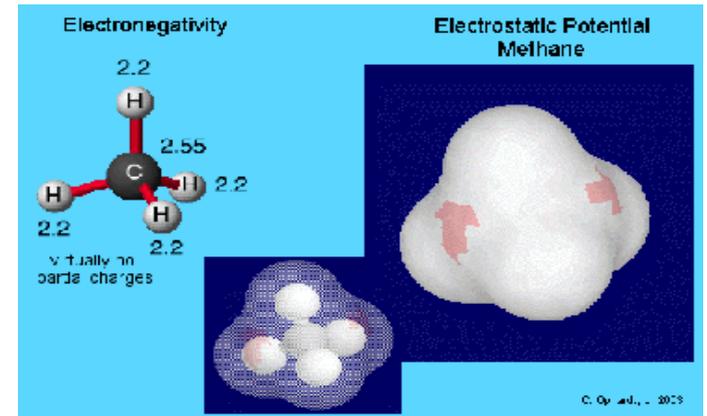
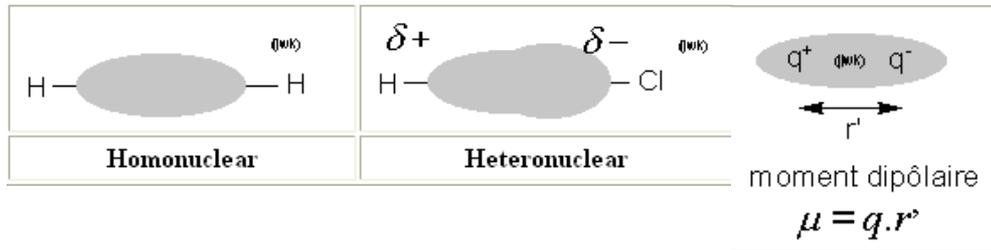
Pares de electrones no compartidos: NH₃



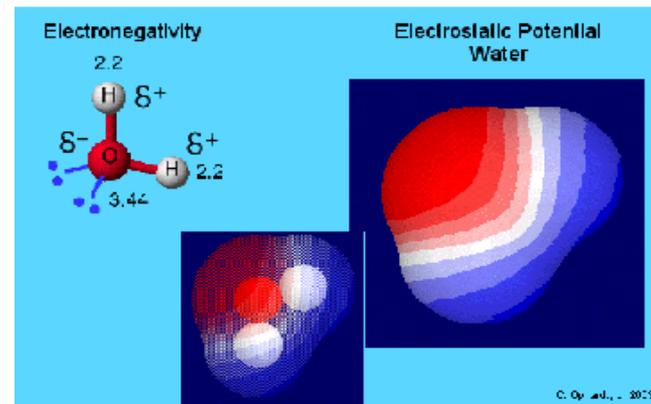
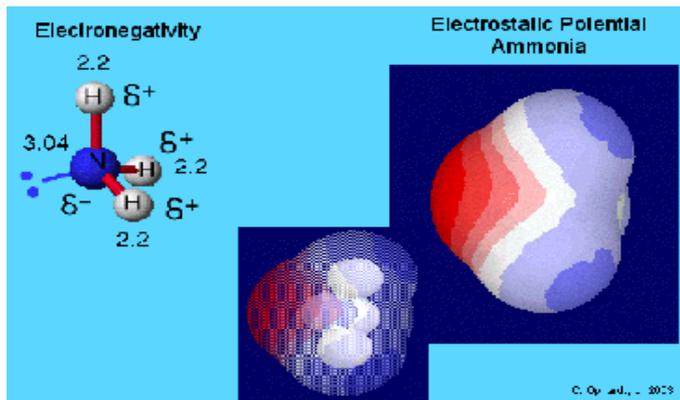
Pares de electrones no compartidos: H₂O



Polaridad de las moléculas



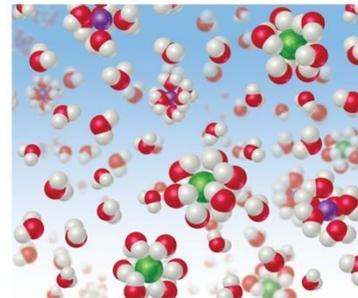
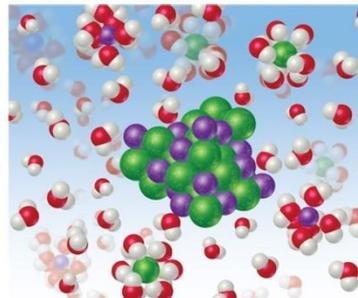
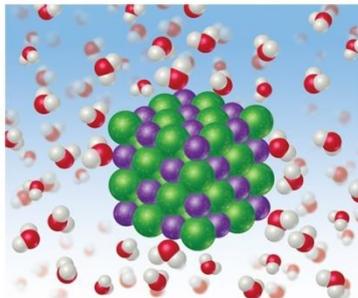
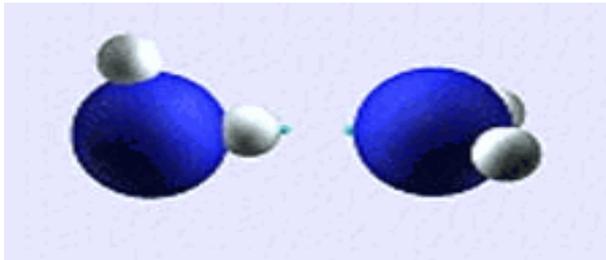
En los enlaces polares no hay coparticipación perfecta de electrones (covalencia pura), sino que cada núcleo retendrá mayor participación en función de su afinidad por estos (covalencia polar). Una situación limite es la transferencia electrónica completa de é al núcleo mas electronegativo (enlace iónico)



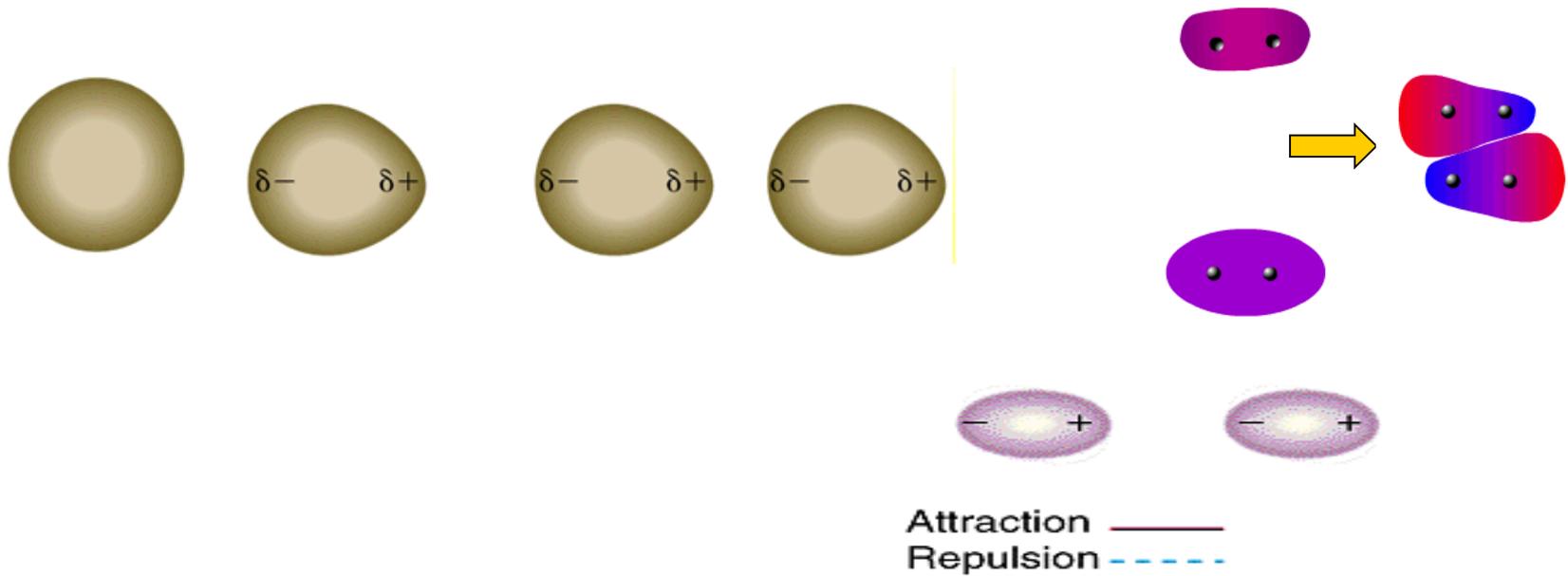
Interacciones moleculares atractivas

Fuerzas intermoleculares

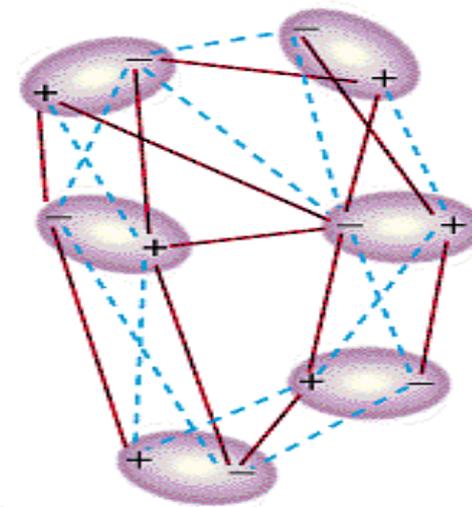
- Fuerzas de London o dipolo instantáneo-dipolo inducido
- Fuerzas dipolo-dipolo
- Fuerzas ion-dipolo
- Fuerzas puente de Hidrogeno



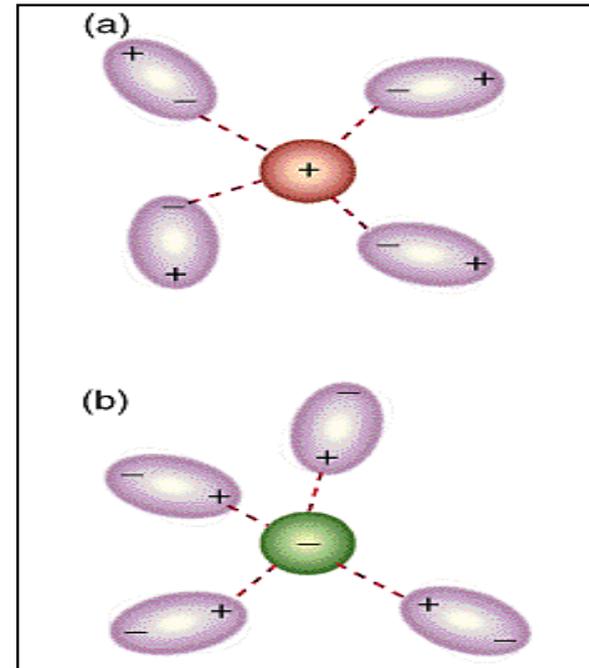
Fuerzas de London o dipolo instantáneo- dipolo inducido



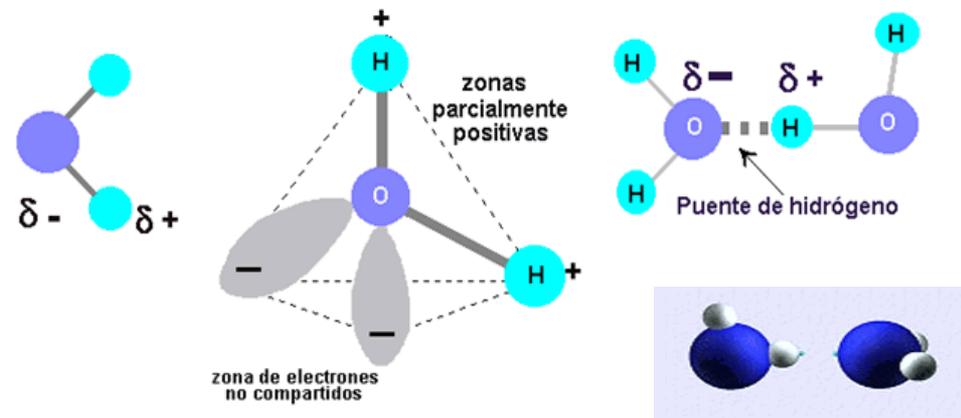
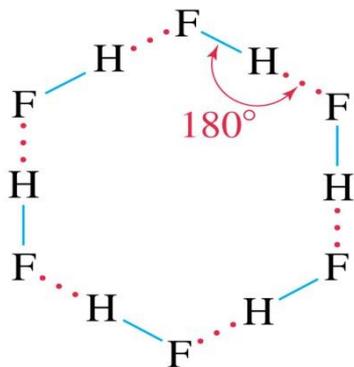
Fuerzas dipolo-dipolo



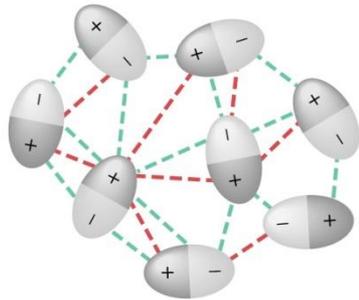
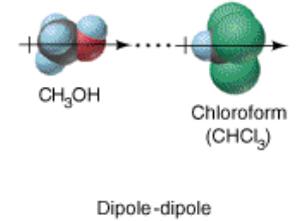
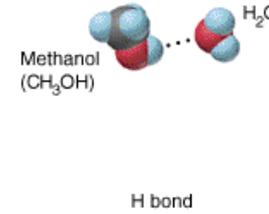
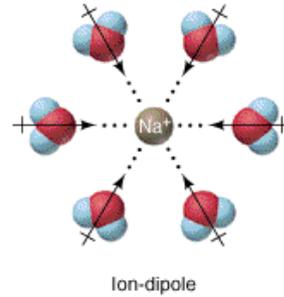
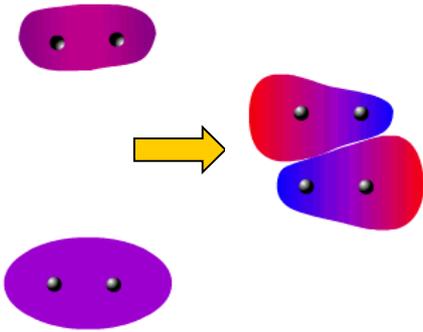
Fuerzas ion-dipolo



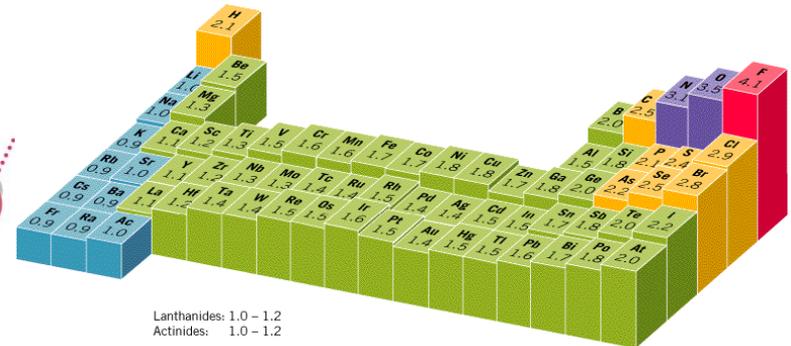
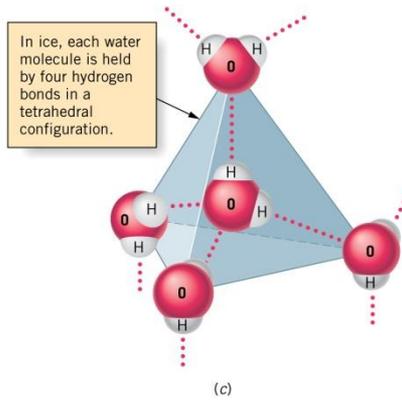
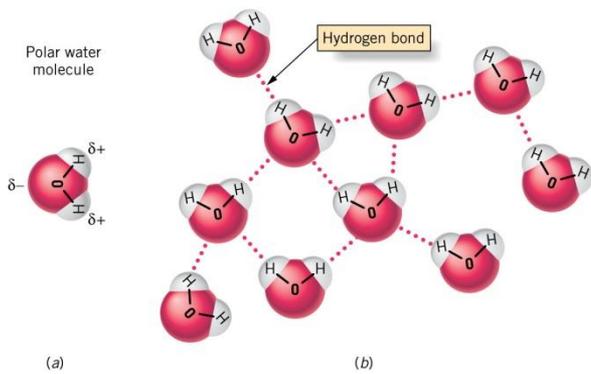
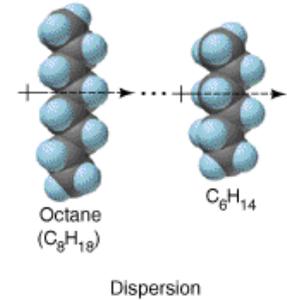
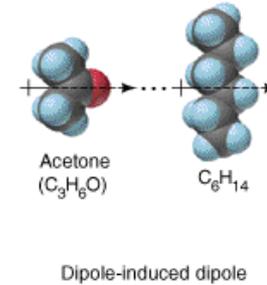
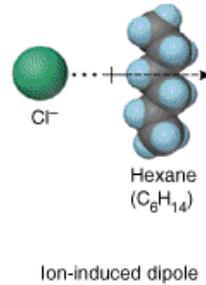
Fuerzas puente de hidrógeno



Interacciones moleculares atractivas



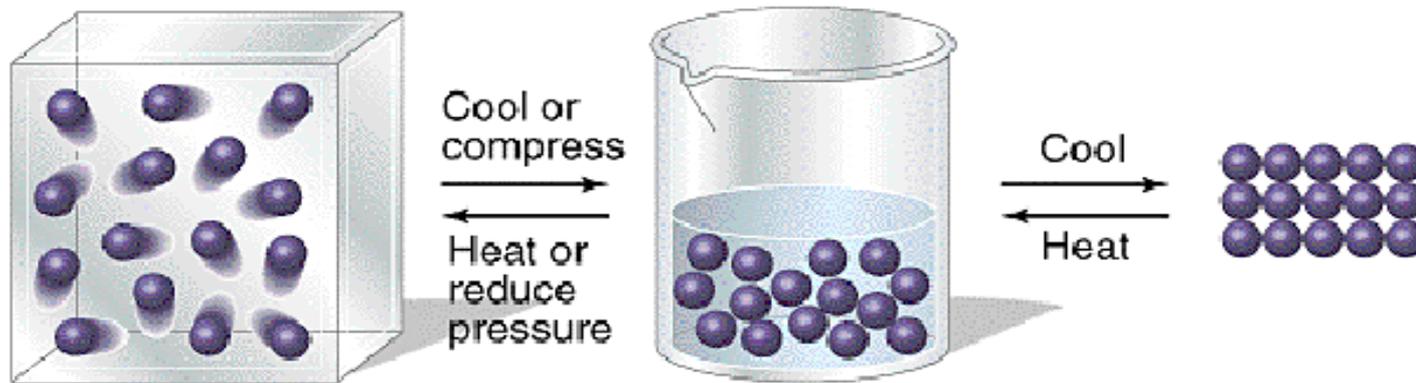
Attractions (—) are greater than repulsions (---), so the molecules feel a net attraction to each other.



Enlaces intermoleculares y propiedades físicas:

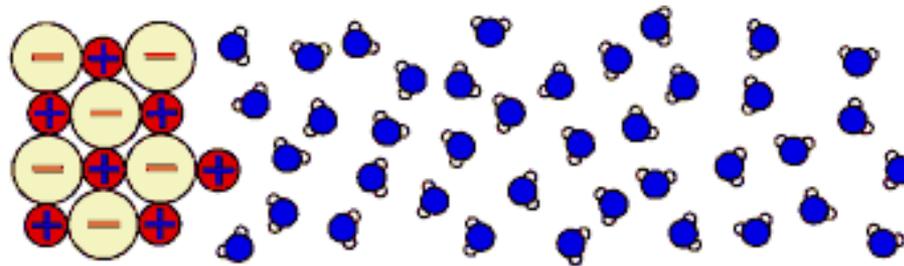
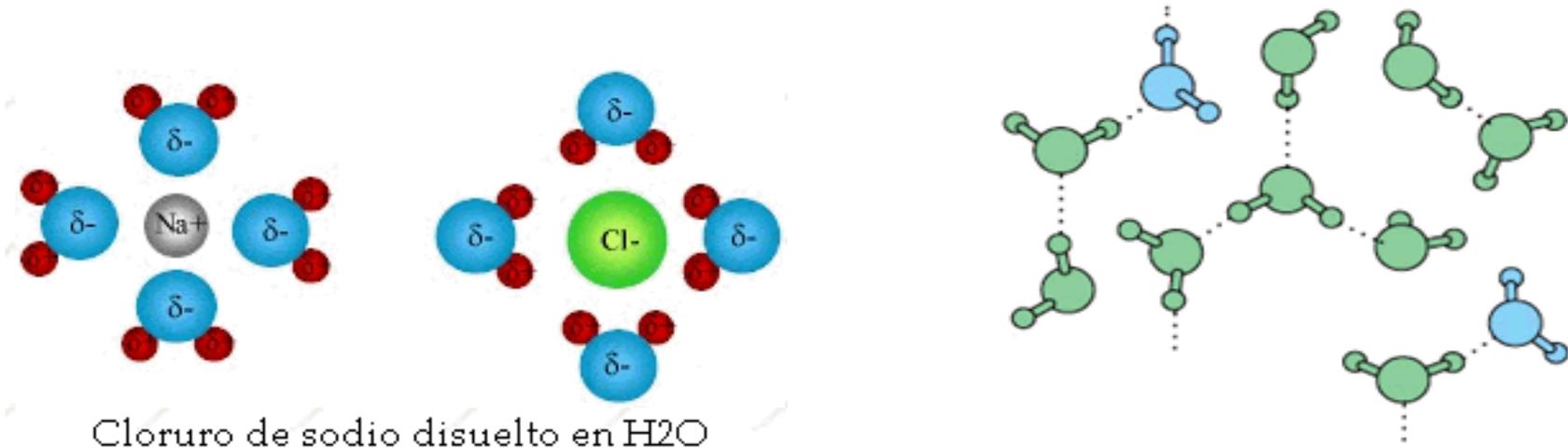
Punto de fusión. Fusión es el cambio desde una disposición muy ordenada de partículas en el retículo cristalino al más desordenado que caracteriza a los líquidos. La fusión se produce cuando se alcanza una temperatura a la cual la energía térmica de las partículas es suficientemente grande como para vencer las fuerzas intercrystalinas que las mantienen en posición.

Punto de ebullición La ebullición implica la separación de moléculas individuales o de pares de iones con cargas opuestas, del seno del líquido. Esto sucede cuando se alcanza la temperatura suficiente para que la energía térmica de las partículas supere las fuerzas de cohesión que las mantienen en el líquido.

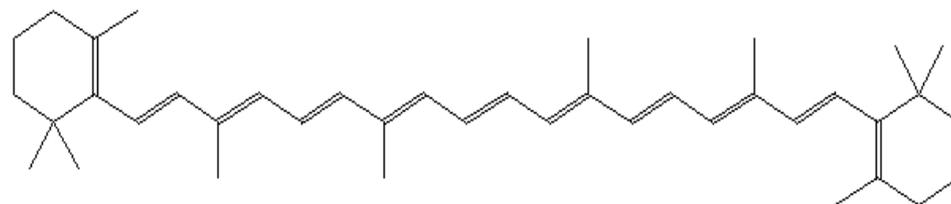
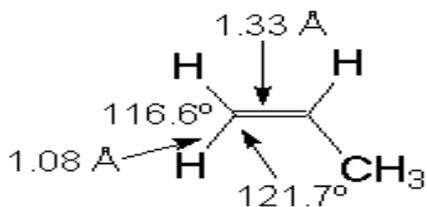


Solubilidad:

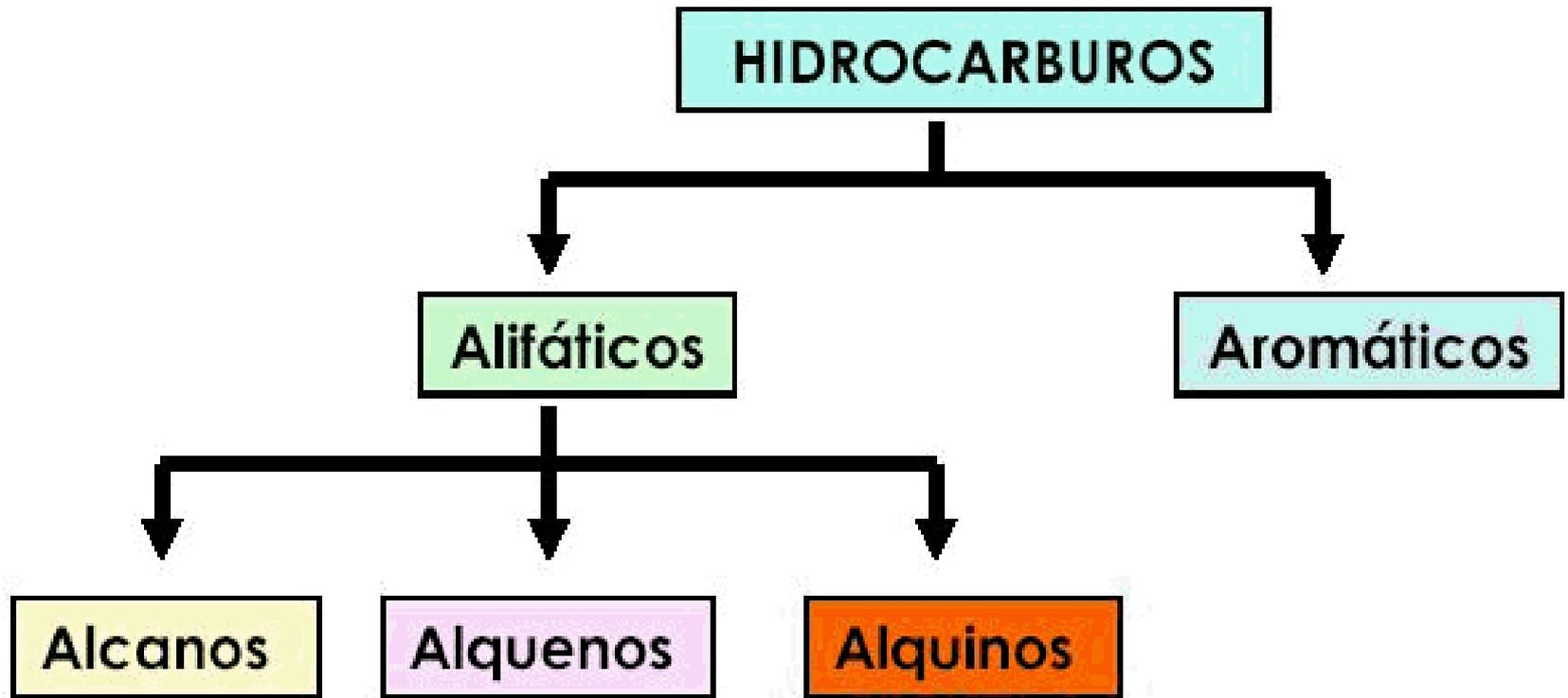
Cuando se disuelve un sólido o un líquido, las unidades estructurales (iones o moléculas) se separan unas de otras y el espacio entre ellas pasa a ser ocupado por moléculas de disolvente. Durante la disolución, al igual que en la fusión o ebullición, debe suministrarse energía para vencer las fuerzas interiónicas o intermoleculares. La energía requerida para romper los enlaces intermoleculares entre las moléculas de soluto y entre las moléculas de solvente es aportada por la formación de enlaces intermoleculares entre soluto y solvente.



El Chemical Abstracts ha informado la existencia de más de 18 millones de compuestos orgánicos. Es posible clasificar estos compuestos en familias. Las características estructurales que hacen posible esta clasificación, se llaman grupos funcionales. Un grupo funcional es un conjunto de átomos en una molécula, que presenta un comportamiento químico característico. Químicamente un grupo funcional dado se comporta casi igual en cada molécula de la que forma parte. En las representaciones estructurales de los grupos funcionales de la siguiente tabla, se completa la valencia del C mediante uniones con otro C o H



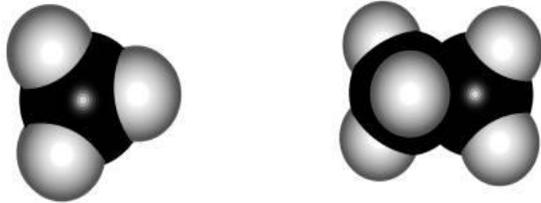
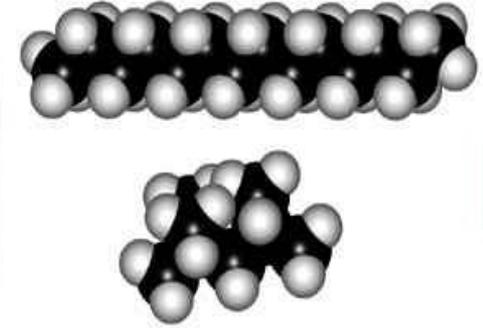
FAMILIA	G. FUNCIONAL	EJEMPLO
ALCANOS	R-R''	CH ₃ -CH ₂ -CH ₂ -CH ₃
ALQUENOS	R-CH=CH-R'	CH ₃ -CH=CH-CH ₃
ALQUINOS	R-C≡C-R'	CH ₃ -C≡C-CH ₃
ALCOHOLES	R-OH	CH ₃ -CH ₂ -OH
HALOALCANOS(X = Cl, Br ó I)	R-X	CH ₃ -CH ₂ -Br
ÉTERES	R-O-R'	CH ₃ -O-CH ₂ -CH ₃
ALDEHIDOS	$\begin{array}{c} \text{:O:} \\ \parallel \\ \text{R}-\text{C}-\text{H} \end{array}$	CH ₃ -CH ₂ -CHO
CETONAS	$\begin{array}{c} \text{:O:} \\ \parallel \\ \text{R}-\text{C}-\text{R}' \end{array}$	CH ₃ -CO-CH ₂ -CH ₃
ÁCIDOS	$\begin{array}{c} \text{:O:} \\ \parallel \\ \text{R}-\text{C}-\text{OH} \end{array}$	CH ₃ -CH ₂ -COOH
ÉSTERES	$\begin{array}{c} \text{:O:} \\ \parallel \\ \text{R}-\text{C}-\text{OR}' \end{array}$	CH ₃ -CH ₂ -COO-CH ₃
AMINAS	R-NR'R''	CH ₃ -CH ₂ -NH ₂
AMIDAS	$\begin{array}{c} \text{:O:} \\ \parallel \\ \text{R}-\text{C}-\text{NR}'\text{R}''\text{R}''' \end{array}$	CH ₃ -CH ₂ -CONHCH ₃
NITRILOS	R-C≡N	CH ₃ -CH ₂ -CN



Alcanos

Moléculas con enlace C-C y enlace C-H.

Debido a la capacidad de unión del C es posible representar moléculas de mayor peso molecular que presentan estos dos elementos, simplemente por reemplazo de H por grupos CH₃ (llamados metilos) en cualquier enlace C-H de la molécula. Así por ejemplo a partir de la molécula CH₄, se pueden representar la molécula C₂H₆, o las moléculas C₁₄H₃₀ o C₆H₁₄



El enlace simple C-C es consecuencia del traslape s de orbitales sp³ del C. La unión de tres, cuatro, cinco o más átomos de carbono con enlaces sencillos C-C, genera la familia de los alcanos.

Los alcanos pertenecen a su vez a una familia mayor, llamada hidrocarburos, por presentar sus moléculas únicamente C e H.

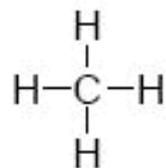
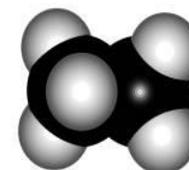
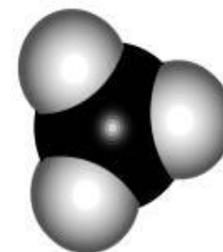
Los alcanos se suelen denominar hidrocarburos saturados. Este último nombre se debe al hecho de presentar la máxima cantidad de H por carbono.

Los alcanos (junto con otros hidrocarburos) también se conocen como alifáticos, nombre derivado de *aleiphas* (gr.:grasas)

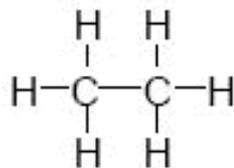
El primer miembro de la familia es el metano (CH_4). En el metano se observa, por lo tanto, 4 enlaces $\text{sp}^3\text{-s}$

El siguiente miembro de la serie es el etano, ($\text{CH}_3\text{-CH}_3$), el que presenta 1 enlace $\text{sp}^3\text{-sp}^3$ y 6 enlaces $\text{sp}^3\text{-s}$

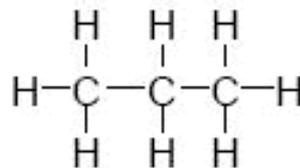
El n-propano (C_3H_8), el n-butano (C_4H_{10}) y siguientes miembros de la serie presentaran también enlaces C-C y C-H de las mismas características. Cuando los carbonos forman una cadena, estos compuestos se denominan alcanos de cadena recta.



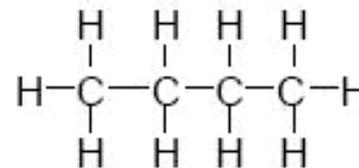
metano



etano



propano

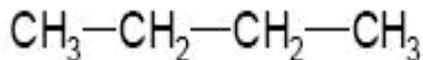


butano

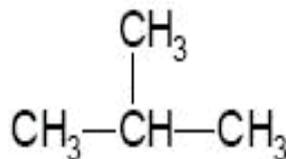
Isómeros

A partir del C_4 , existe más de una manera de disponer los carbonos e H involucrados.

Por ejemplo, pueden reconocerse 2 moléculas de butano (C_4H_{10}) y tres moléculas de pentano (C_5H_{12})



butano



2-metilpropano

Estos compuestos que presentan la misma fórmula pero sus estructuras son diferentes, se llaman isómeros, del gr. *isos* y *meros* que quiere decir “hecho de las mismas partes”.

Compuestos como los butanos, cuyos átomos están unidos de modo distinto, se denominan isómeros constitucionales o isómeros de constitución. Esta cantidad de isómeros aumenta abrumadoramente a medida que se incrementa la cantidad de átomos de carbono

La siguiente tabla presenta algunos de los principales alcanos de cadena recta.

Hidrocarburos normales (cadena lineal)

Nº de carbonos	Fórmula	Nombre	Nº total de isómeros	p.eb.°C	p.f.°C
1	CH ₄	metano	1	-162	-183
2	C ₂ H ₆	etano	1	-89	-172
3	C ₃ H ₈	propano	1	-42	-187
4	C ₄ H ₁₀	butano	2	0	-138
5	C ₅ H ₁₂	pentano	3	36	-130
6	C ₆ H ₁₄	hexano	5	69	-95
7	C ₇ H ₁₆	heptano	9	98	-91
8	C ₈ H ₁₈	octano	18	126	-57
9	C ₉ H ₂₀	nonano	35	151	-54
10	C ₁₀ H ₂₂	decano	75	174	-30
11	C ₁₁ H ₂₄	undecano		196	-26
12	C ₁₂ H ₂₆	dodecano		216	-10
20	C ₂₀ H ₄₂	eicosano	366319	334	+36
30	C ₃₀ H ₆₂	tricontano	4.11x10 ⁹	446	+66

Grupos alquilo:

El nombre de un compuesto de cadena ramificada es construido a partir de una cadena lineal seleccionada, agregando el nombre de los sustituyentes (reemplazo de H) (reglas de nomenclatura) Un posible tipo de sustitución es el grupo alquilo. Estos son formados a partir del alcano correspondiente por remoción de un hidrogeno

El nombre grupo alquil se deriva de alcano simplemente cambiando la terminación ano por il.

La letra R se utiliza para designar cualquier grupo alquilo (Ej. R= CH₃-, C₂H₅-, etc.). Los alcanos son representados por la formula genérica RH.

Grupos alquilo corrientes (R-) y fragmentos relacionados

Grupo	Nombre	Abreviación
CH ₃ -	metilo	Me
CH ₃ -CH ₂ -	etilo	Et
CH ₃ -CH ₂ -CH ₂ -	<i>n</i> -propilo	<i>n</i> -Pr
$\begin{array}{c} \text{CH}_3\text{CH}- \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$	isopropilo	<i>i</i> -Pr
CH ₃ -CH ₂ -CH ₂ -CH ₂ -	<i>n</i> -butilo	<i>n</i> -Bu
$\begin{array}{c} \text{CH}_3\text{CHCH}_2- \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$	isobutilo	
$\begin{array}{c} \text{CH}_3\text{CHCH}- \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$	sec-butilo	
$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3\text{C}- \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$	<i>t</i> -butilo (o <i>ter</i> -butilo)	<i>t</i> -Bu
CH ₃ -CH ₂ -CH ₂ -CH ₂ -CH ₂ -	<i>n</i> -pentilo (o <i>n</i> -amilo)	<i>n</i> -Am
$\begin{array}{c} \text{CH}_3\text{CHCH}_2\text{CH}_2- \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$	isopentilo (isoamilo)	<i>i</i> -Am
-CH ₂ -	metileno	
$\begin{array}{c} \\ -\text{C}-\text{H} \\ \end{array}$	metino	

Algunas definiciones:

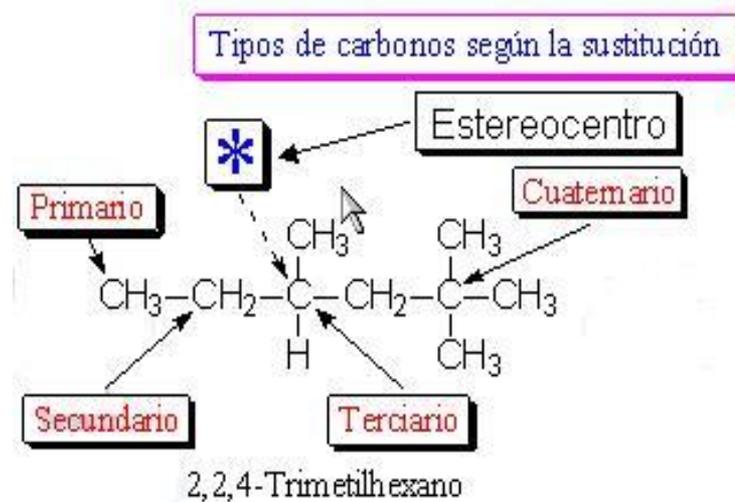
Frecuentemente cuando se refiere a grupos o átomos de carbono en la molécula, se utilizan los términos primario, secundario y terciario y cuaternario .

Un átomo de carbono primario es aquel que esta unido únicamente a otro átomo de carbono. Un átomo de carbono secundario es aquel que esta unido a otros dos átomos de carbono.

Un átomo de carbono terciario es aquel que esta unido a otros tres átomos de carbono.

Un átomo de carbono cuaternario es aquel que esta unido a otros cuatro átomos de carbono.

Se denomina estereocentro a aquel átomo de carbono que se encuentra unido a 4 sustituyentes distintos



Nomenclatura:

Las reglas desarrolladas y adoptadas para la nomenclatura de compuestos orgánicos son referidas como el sistema de nomenclatura IUPAC (International Unión of Pure and Applied Chemistry).

Las reglas de nomenclatura IUPAC

Básicamente el sistema nomenclador considera la estructura, como derivada de un esqueleto de cadena de carbono simple que presenta modificaciones. El esqueleto fundamental contiene una cadena continua de átomos de carbono, considerado como alcano no ramificado, cuyos nombre y formula puede ser alguno de los que se describen en la tabla de alcanos de cadena recta.

Los nombres que allí figuran constituyen la raíz de los nombres de otros compuestos orgánicos.

Los hidrocarburos saturados son nombrados según la tabla precedente (la terminación común en todos ellos es –ano

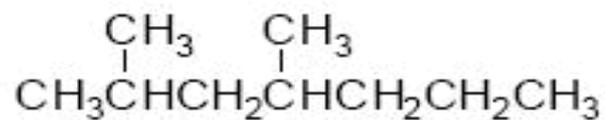
(1) El nombre del compuesto de cadena ramificada esta basado en el nombre del alcano correspondiente a la cadena continua de átomos de carbono mas larga en el compuesto (cadena fundamental).

(2) Los átomos de carbono de la cadena continua más larga, son numerados de modo tal que los sustituyentes distintos a hidrogeno tendrán asociados números que corresponden a su posición en la cadena fundamental. Dado que esta cadena puede ser numerada comenzando de cualquier extremo de la cadena, la dirección de numeración adoptada será aquella que de la los sustituyentes los números mas bajos posibles. Muchos de los sustituyentes serán [grupos alquilo](#) cuyos nombres son derivados formalmente de los alcanos de menor peso molecular.

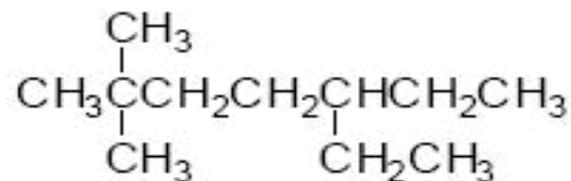
(3) Cuando dos o mas átomos (distintos de hidrogeno), grupos de átomos o cadenas laterales (sustituyentes alquil) son iguales, se utilizan los prefijos di, tri, tetra, etc.

(4) El nombre del compuesto estará formado por el nombre de la cadena hidrocarbonada mas larga con la terminación adecuada, precedido por el nombre y posición numerada de los sustituyentes, ordenados según alfabeto.

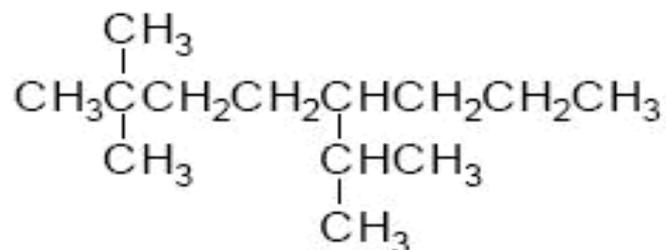
Notar que la cadena continua más larga (cadena fundamental) no siempre podrá tener una disposición completamente horizontal (o vertical)



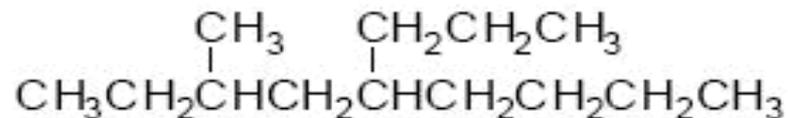
2,4-dimetil heptano



5-etil-2,2-dimetilheptano



5-isopropil-2,2-dimetiloctano



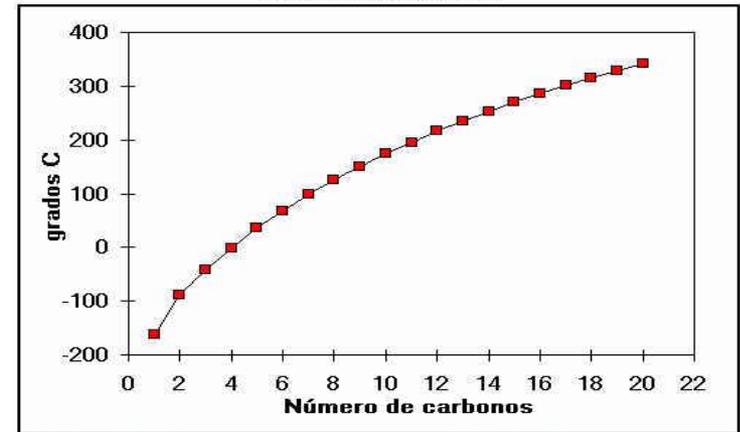
3-metil-5-npropilnonano

Propiedades Físicas

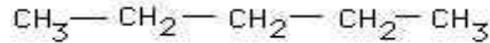
Hidrocarburos normales (cadena lineal)

Nº de carbonos	Fórmula	Nombre	Nº total de isómeros	p.eb. °C	p.f. °C
1	CH ₄	metano	1	-162	-183
2	C ₂ H ₆	etano	1	-89	-172
3	C ₃ H ₈	propano	1	-42	-187
4	C ₄ H ₁₀	butano	2	0	-138
5	C ₅ H ₁₂	pentano	3	36	-130
6	C ₆ H ₁₄	hexano	5	69	-95
7	C ₇ H ₁₆	heptano	9	98	-91
8	C ₈ H ₁₈	octano	18	126	-57
9	C ₉ H ₂₀	nonano	35	151	-54
10	C ₁₀ H ₂₂	decano	75	174	-30
11	C ₁₁ H ₂₄	undecano		196	-26
12	C ₁₂ H ₂₆	dodecano		216	-10
20	C ₂₀ H ₄₂	eicosano	366319	334	+36
30	C ₃₀ H ₆₂	tricontano	4.11x10 ⁹	446	+66

Punto de ebullición

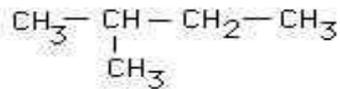


Isómeros C₅H₁₂

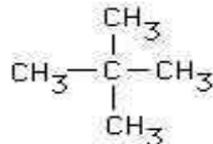


Puntos de ebullición

36.1

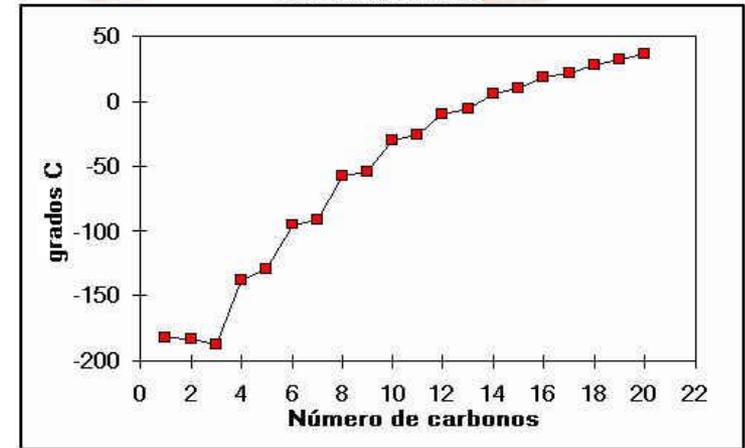


27.8



9.5

Punto de fusión

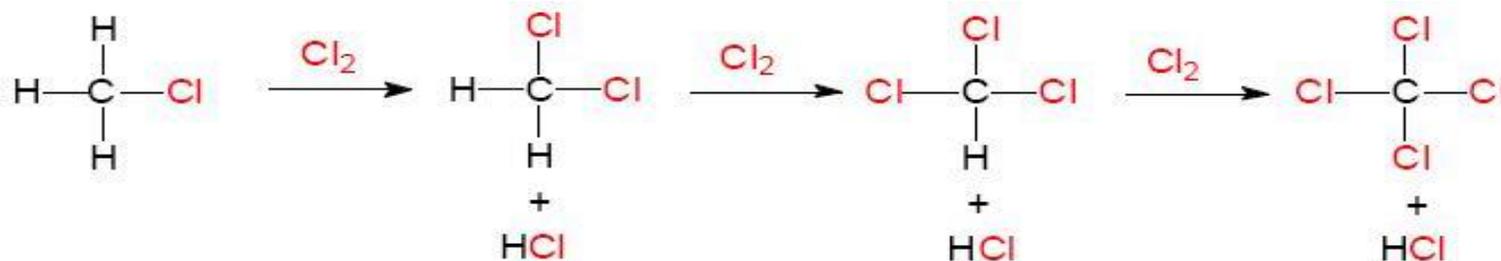


Propiedades Químicas

Los alcanos son extremadamente no reactivos. No reaccionan con la mayoría de los agentes químicos, tal como ácidos y bases. No son oxidados por oxidantes fuertes, tal como ion permanganato.

Los alcanos reaccionan con los halógenos y con el oxígeno. Como miembros de una serie homologa, su comportamiento químico es similar.

Reacciones de halogenación



Mecanismo de Reacción

Para poder llevar a cabo la cloración del metano se necesita calor o luz.

Cuando se irradia la mezcla de metano o cloro con luz, el cloro gas absorbe energía activando al cloro e iniciando la reacción.

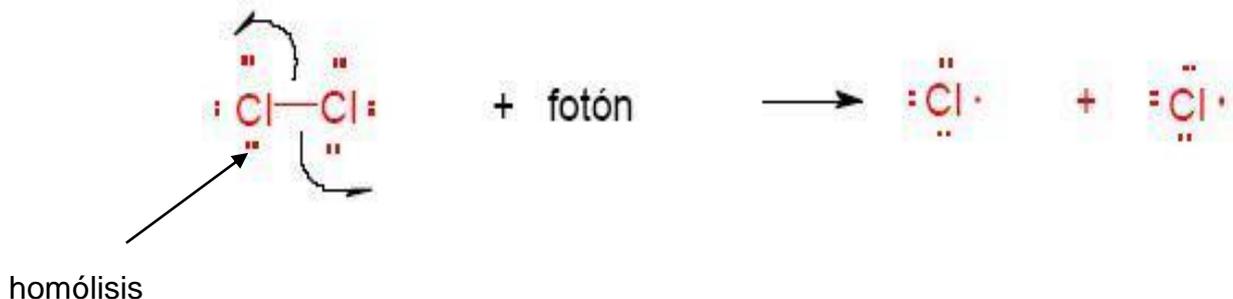
Para explicar estos hechos se ha propuesto un mecanismo de reacción en cadena. Este consta de 3 etapas

1º **Etapa de iniciación**: en esta etapa se generan especies radicalarias a partir de moléculas neutras.

2º. **Etapa de propagación**: Puede constar de varios pasos caracterizados porque en cada uno de ellos las especies radicalarias generan otras especies radicalarias.

3º. **Etapa de terminación**: En los pasos de la etapa de terminación se destruyen las especies radicalarias.

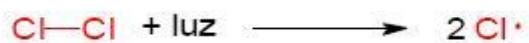
1º. Etapa de iniciación.



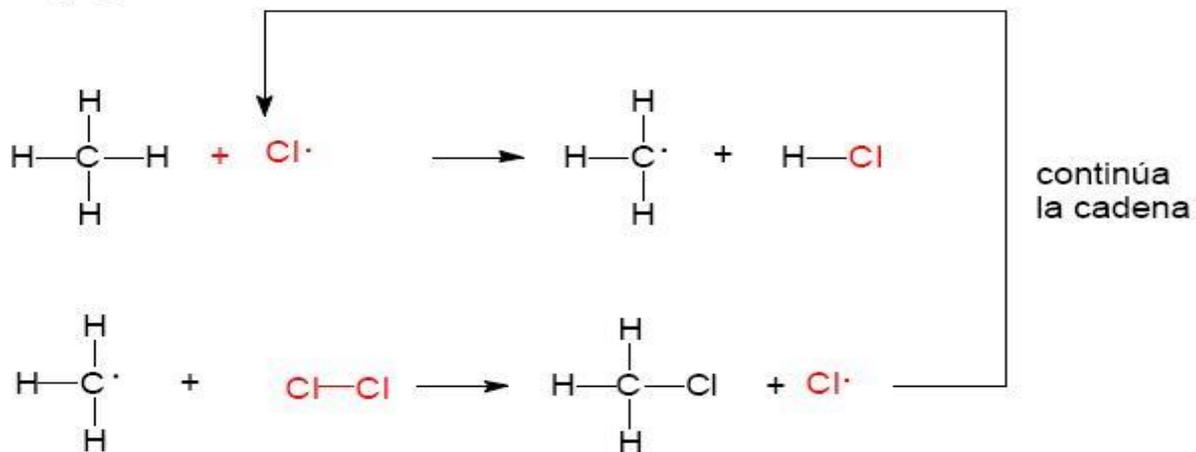
2º Etapa de propagación.



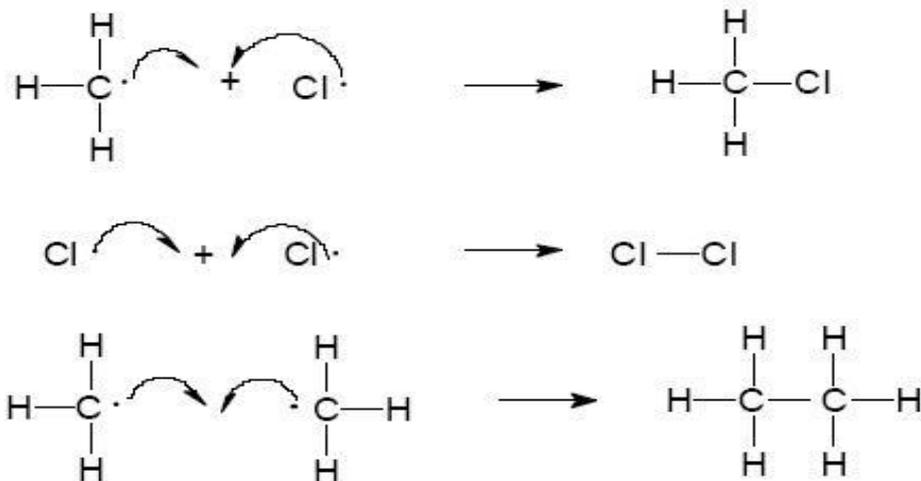
Iniciación



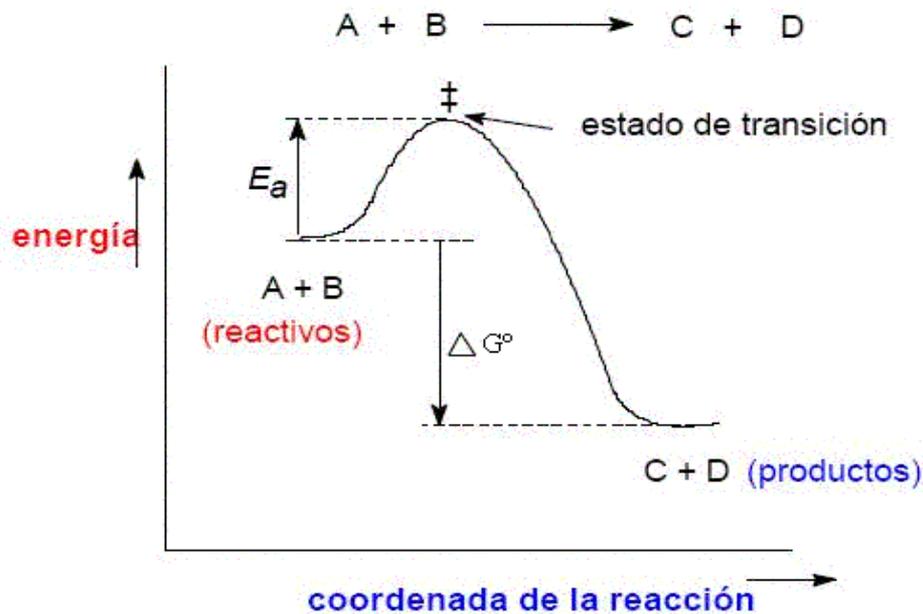
Propagación



3º Etapa de terminación.



Cinética de la reacción:



2º Etapa de propagación.



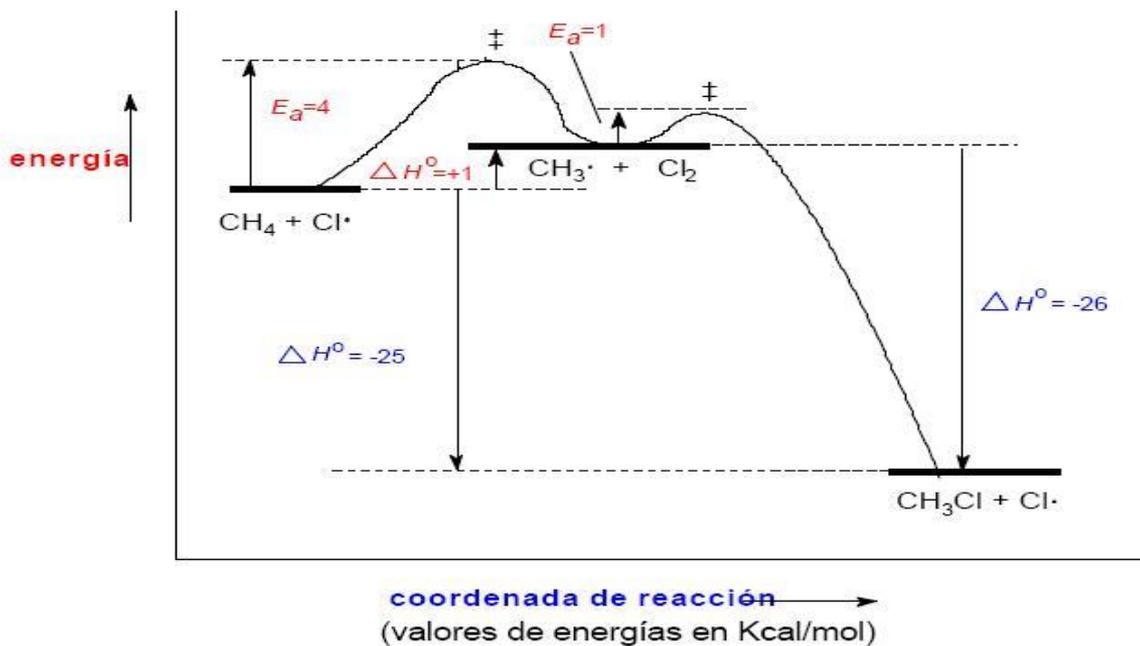
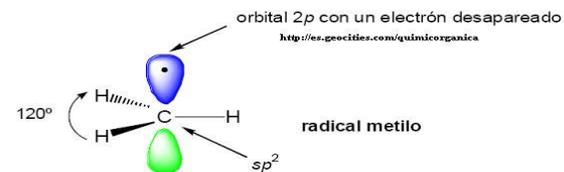
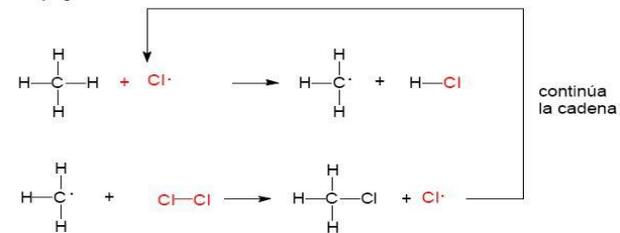
<http://es.geocities.com/quimicorganica>

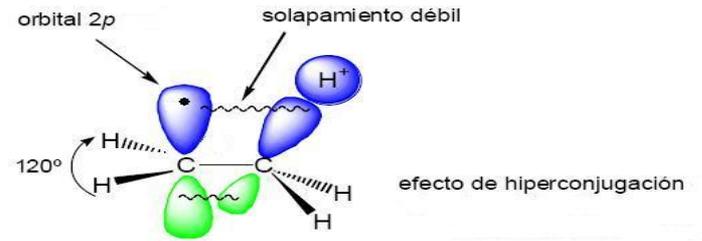
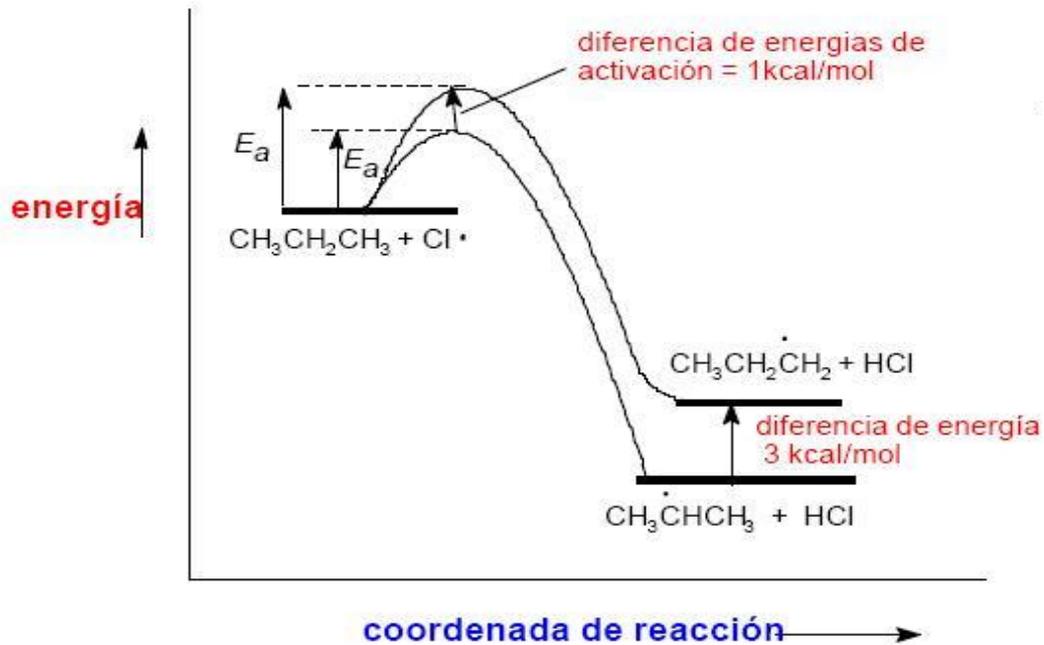
<http://es.geocities.com/quimicorganica>

Iniciación



Propagación





aumento de la estabilidad de los radicales con el grado de sustitución

Oxidación (Combustión)

La combustión de los alcanos es una de las reacciones orgánicas más importantes.

La combustión de gas natural, gasolina y fuel implica en su mayor parte la combustión de alcanos.

Sin embargo, esta combustión deja de ser una reacción orgánica típica porque en primer lugar los reactivos de la reacción son en realidad mezclas de alcanos y en segundo lugar porque el producto deseado de la reacción es el calor que desprende y no los productos obtenidos en ella.

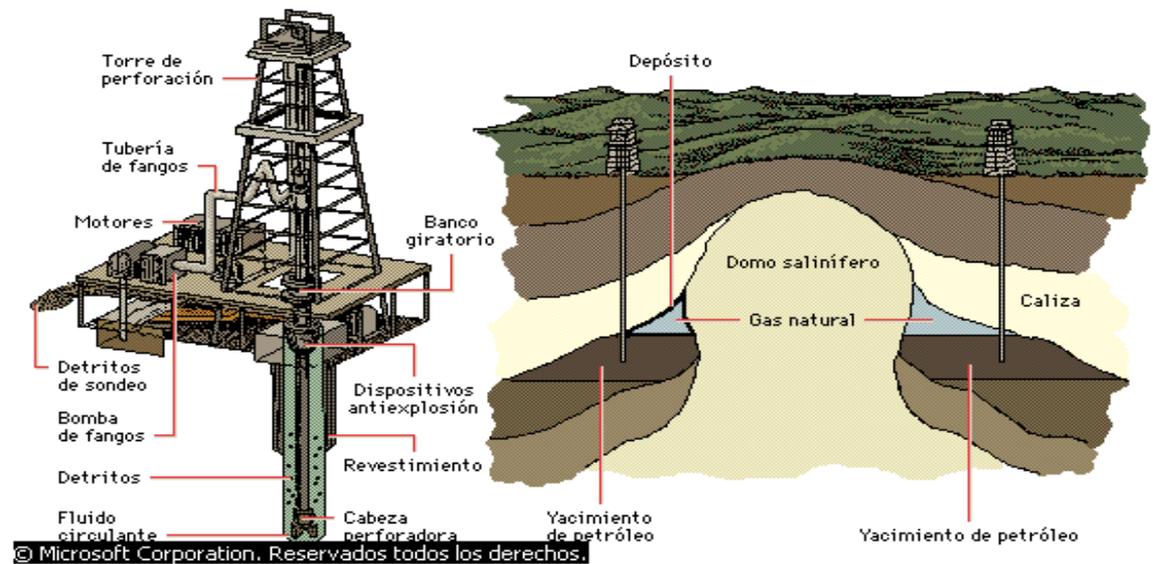
De hecho, los productos generados en el proceso de combustión de los alcanos son, por lo general, compuestos sin interés y su eliminación, debido a su volumen, constituye un importante problema.

La ecuación para la combustión de un alcano, por ejemplo el metano, es la siguiente:

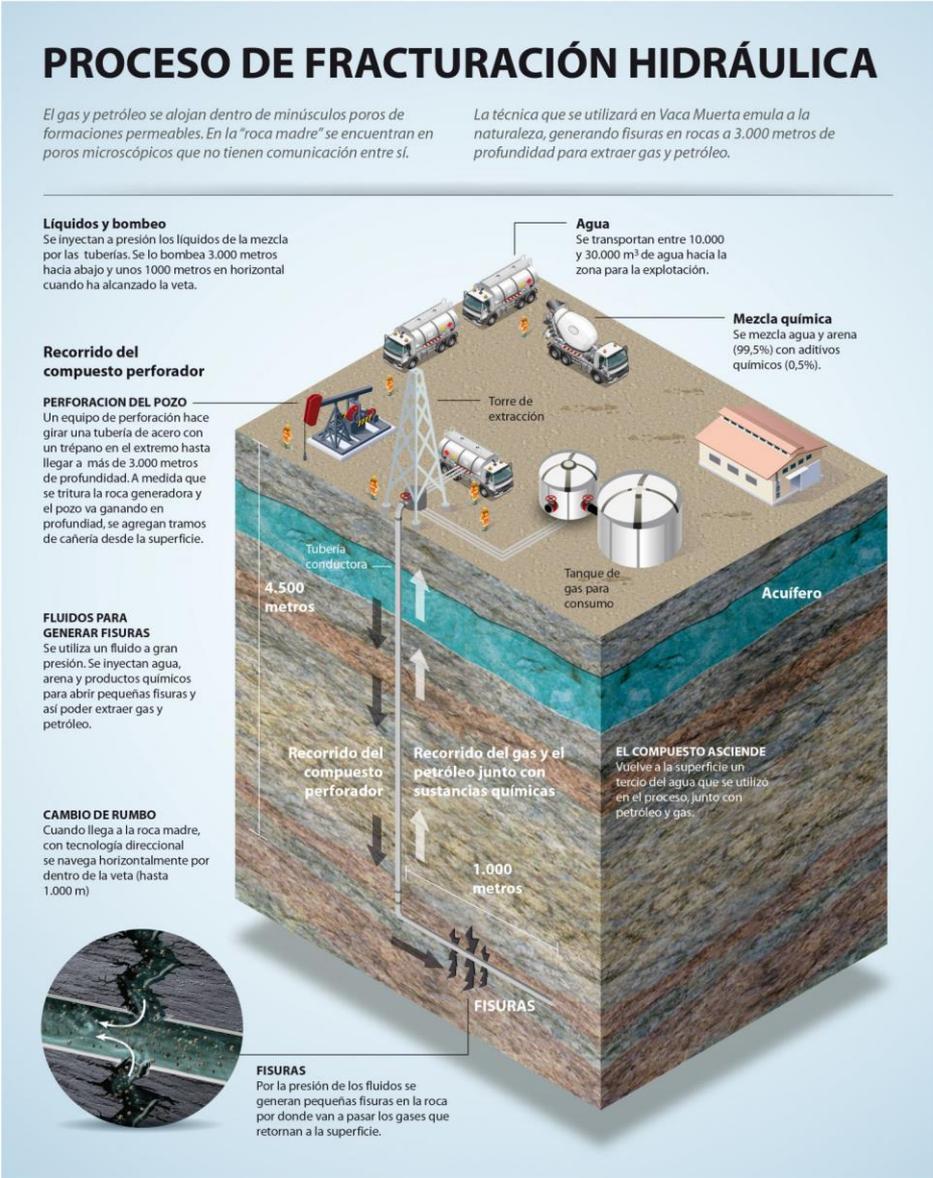
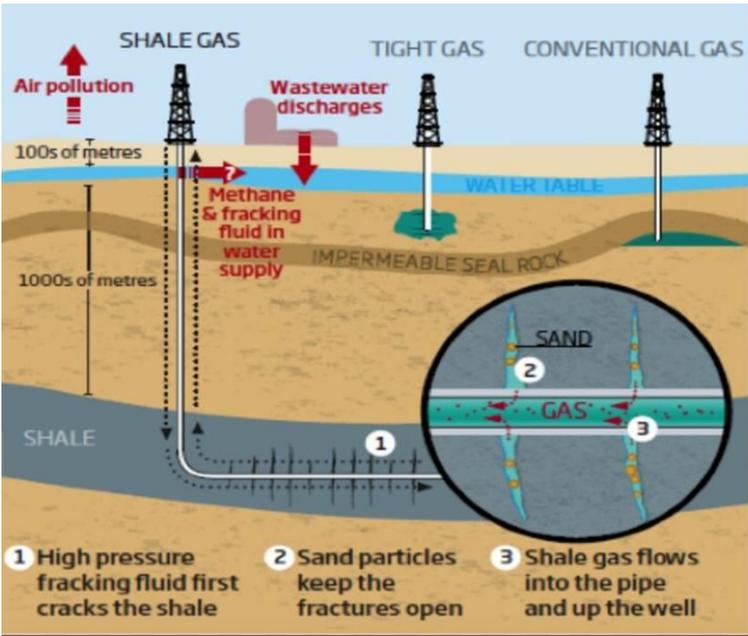


COMBUSTIBLES

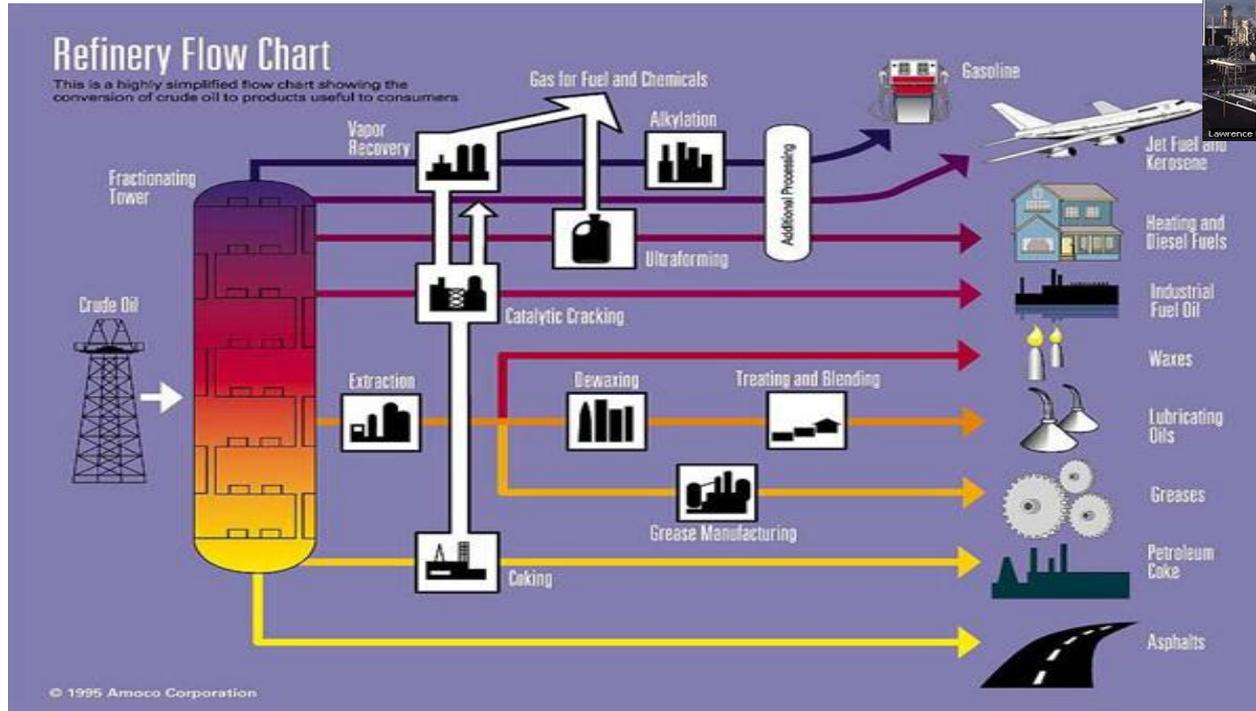
Petróleo



El petróleo se formó principalmente a partir de antiguas plantas y bacterias microscópicas que vivieron en el océano y en mares de agua salada. Cuando esos microorganismos murieron y cayeron al fondo marino, se mezclaron con arena y sedimentos y formaron un barro rico en compuestos orgánicos. A medida que las capas de sedimentos se iban acumulando sobre ese fango orgánico, el barro se iba calentando y poco a poco se iba comprimiendo en un esquisto o lodolita, transformándose químicamente el material orgánico en petróleo y gas natural. En ocasiones, el petróleo y el gas natural podían llenar lentamente los pequeños agujeros de las rocas porosas cercanas, que los geólogos llaman rocas almacén. Como esas rocas, por lo general, estaban llenas de agua, el líquido y los hidrocarburos gaseosos (que son menos densos y más ligeros que el agua) ascendían a través de la corteza de la Tierra, recorriendo a veces largas distancias. Una parte de esos hidrocarburos podía encontrar una capa impermeable (no porosa) de roca en un anticlinal, un domo de sal, una trampa de falla o una trampa estratigráfica. La roca impermeable puede aprisionar los hidrocarburos, creando un depósito de petróleo y gas natural. Los fluidos y los gases capturados en esas trampas geológicas suelen estar separados en tres capas: agua (densidad más alta, capa inferior), petróleo (capa media) y gas natural (densidad baja, capa superior).



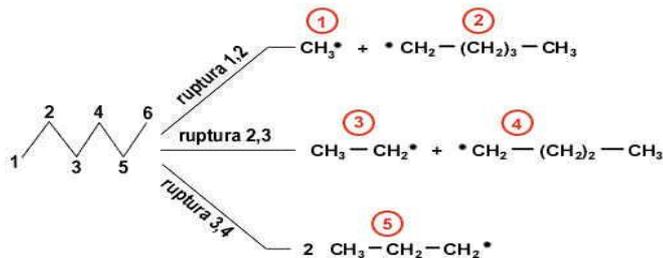
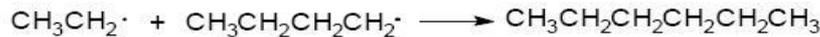
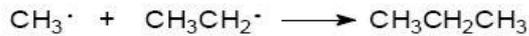
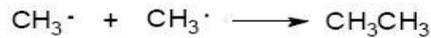
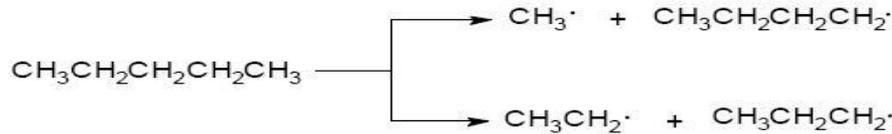
Combustibles Líquidos



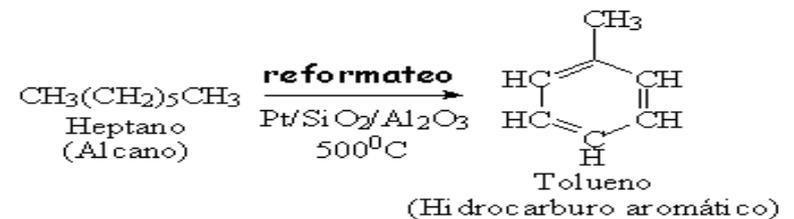
Punto de ebullición (°C)	Átomos de carbono	Productos
<30	1-4	Gas natural, metano, propano, butano, gas licuado
30-200	4-12	Eter de petróleo (C _{5,6}), ligroína (C ₇), nafta, gasolina cruda
200-300	12-15	Queroseno
300-400	15-25	Gas-oil, Fuel-oil, aceites lubricantes, ceras, asfaltos
>400	>25	Aceite residual, parafinas, brea

Craqueo y Reforming

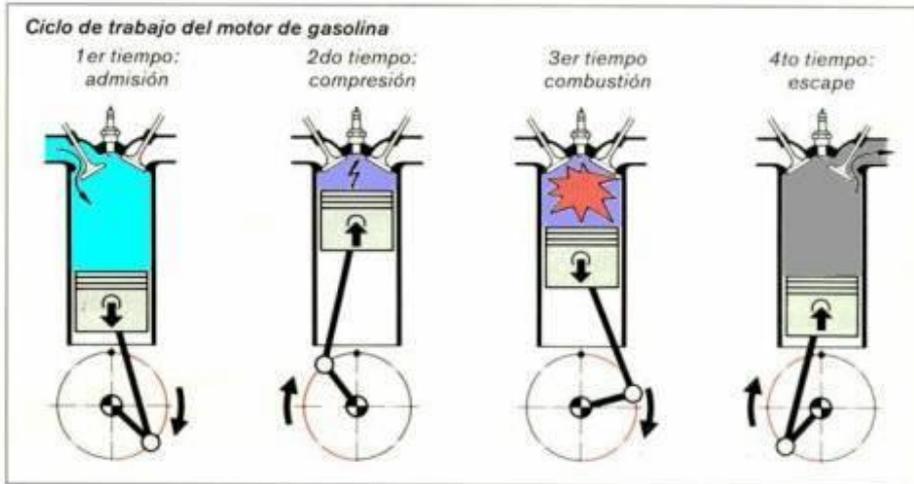
Las moléculas de alcanos se pueden romper por acción del calor (proceso de pirólisis). Los enlaces carbono-carbono se rompen generando radicales alquilo más pequeños. La ruptura se produce de forma aleatoria a lo largo de la cadena.



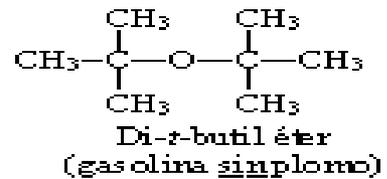
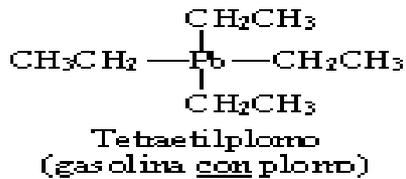
Aceite
residual $\xrightarrow[500^{\circ}\text{C}]{\text{craqueo}}$ 30% gas
50% gasolina
20% aceites pesados
carbón de coke



Naftas: Índice de Octano



Aditivos



Octanaje

$\begin{array}{c} \text{H}_3\text{C} \quad \text{CH}_3 \quad \text{CH}_3 \\ | \quad | \quad | \\ \text{H}_3\text{C} - \text{C} - \text{C} - \text{CH} - \text{CH}_3 \\ | \quad | \quad | \\ \text{H}_2 \quad \text{H}_2 \quad \text{H}_2 \end{array}$

 Iso Octano (Rango de 100)

$\begin{array}{c} \text{H}_2 \quad \text{H}_2 \quad \text{H}_2 \\ | \quad | \quad | \\ \text{H}_3\text{C} - \text{C} - \text{C} - \text{C} - \text{CH}_3 \\ | \quad | \quad | \\ \text{H}_2 \quad \text{H}_2 \quad \text{H}_2 \end{array}$

 n-heptano (Rango de 0)

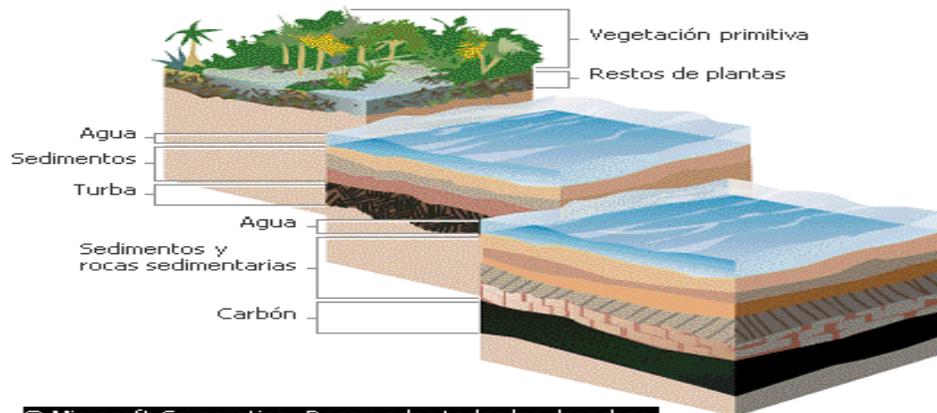
El octanaje, o índice de octano o número de octanos se refiere exclusivamente a la calidad antidetonante que se incorpora a la gasolina.

La medida de la calidad antidetonante que se requiere en el combustible para que este resista o evite su tendencia a la auto detonación o autoencendido del mismo.

Con el nivel adecuado se evita la auto detonación y se logra un solo foco de llama dado por el encendido en el momento preciso, con lo cual se obtiene una combustión más efectiva.

Alvarado, Delgado- Linares, Medina Rol de la Química Orgánica en los procesos de conversión de hidrocarburos. Educación Química, 26, 4, 2015, P. 288-298
<https://doi.org/10.1016/j.eq.2015.08.001>

Combustibles sólidos



© Microsoft Corporation. Reservados todos los derechos.

Análisis inmediato: Humedad + Cenizas + Materia Volátil + Carbono Fijo



Arthur Tress/Photo Researchers, Inc.

El carbón mineral se formó a partir de generaciones de plantas que murieron en antiguos pantanos y ciénagas, y que se fueron asentando bajo sedimentos. Este material vegetal formó primero un material orgánico compacto denominado turba. Con el paso del tiempo, la presión y el calor que ejercían la acumulación y el engrosamiento de las capas de sedimentos sobre la turba provocaban la salida gradual de la humedad. Esto aumentaba el contenido de carbono de la turba, que al final se convertía en carbón.

Rangos de Carbón:

Los diferentes tipos de carbón se clasifican según su contenido de carbono fijo. La turba, la primera etapa en la formación de carbón, tiene un bajo contenido de carbono fijo y un alto índice de humedad. El lignito, el carbón de peor calidad, tiene un contenido de carbono mayor. El carbón bituminoso tiene un contenido aún mayor, por lo que su poder calorífico también es superior. La antracita es el carbón con el mayor contenido en carbono y el máximo poder calorífico. La presión y el calor adicionales pueden transformar el carbón en grafito, que es prácticamente carbono puro. Además de carbono, el carbón contiene hidrocarburos volátiles, azufre y nitrógeno, así como diferentes minerales que quedan como cenizas al quemarlo.

Carbón vegetal

El carbón vegetal es un producto sólido, frágil y poroso con un alto contenido en carbono, del orden del 80%; se produce por calentamiento de materiales carbonosos como la madera, a temperaturas de 400 a 600 °C, en ausencia de aire.

La pirólisis consiste en el cambio químico de los componentes de la madera por medio de calor, en ausencia de oxígeno. Se considera que la pirólisis de los materiales leñosos se inicia a temperaturas del orden de 250 - 300 °C y que transcurre con la producción, en proporciones variables, de gases, líquidos y un residuo carbonoso que es el carbón vegetal.

En la pirólisis de la madera se distinguen tres fases claramente diferenciadas:

- 1.- La primera fase $30 < T < 170$ °C corresponde fundamentalmente a la deshidratación de la madera y destilación de algunos aceites esenciales; unido todo ello a una pequeña degradación de la madera.
- 2.- La segunda fase $170 < T < 270$ °C transcurre con abundante desprendimiento de gases, CO₂ y CO principalmente, y destilación de líquidos acuosos.
- 3.- La tercera fase, $270 < T < 600$ °C, es la pirólisis propiamente dicha, el desprendimiento de materiales volátiles es máximo. El residuo sólido resultante es el carbón vegetal.

El rendimiento en carbón del proceso puede variar dentro de límites muy amplios dependiendo del tipo de madera, de su contenido en agua y de las condiciones en que se haya operado en la pirólisis (tiempo de calentamiento y temperatura alcanzada). El poder calorífico del carbón oscila entre 7.000 y 8.000 kcal/kg. muy superior al de la madera que oscila entre 3.000 y 5.000 kcal/kg.



Fig. 1



Fig. 2



Fig. 3



Fig. 4



Fig. 5



Fig. 6



Fig. 7



Fig. 8



Fig. 9



Combustibles gaseosos

Gas natural, mezcla de gases entre los que se encuentra en mayor proporción el metano. Se utiliza como combustible para usos domésticos e industriales y como materia prima en la fabricación de plásticos, fármacos y tintes.

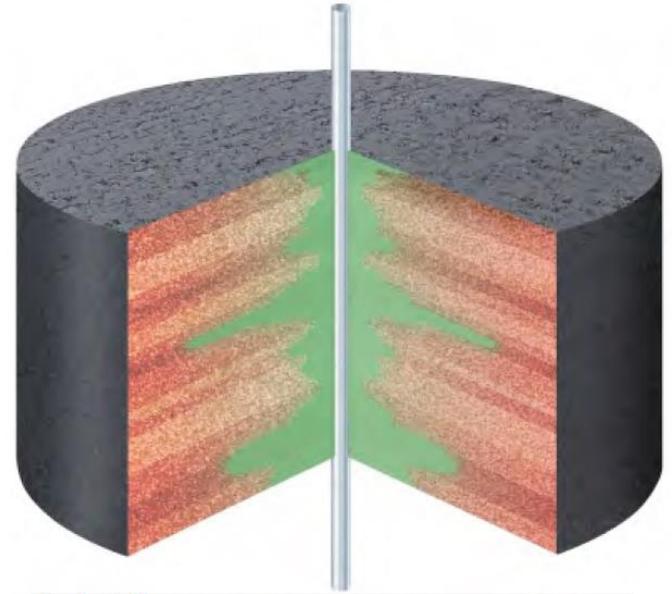
La proporción en la que el metano se encuentra en el gas natural es del 75 al 95% del volumen total de la mezcla (por este motivo se suele llamar metano al gas natural). El resto de los componentes son etano, propano, butano, nitrógeno, dióxido de carbono, sulfuro de hidrógeno, helio y argón. Antes de emplear el gas natural como combustible se extraen los componentes más pesados, como el propano y el butano.

El gas natural se utiliza como combustible doméstico e industrial, además de por su gran poder calorífico, porque su combustión es regulable y produce escasa contaminación. También se emplea como materia prima en la industria petroquímica en la obtención de amoníaco, metanol, etileno, butadieno y propeno.

GNC



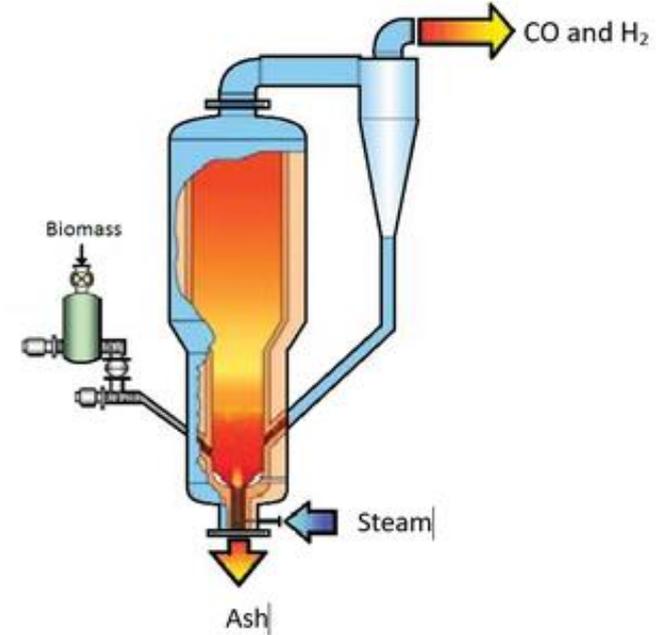
Dr. Ing. José Luis Zacur



Combustibles gaseosos

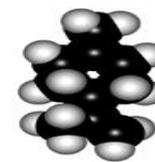
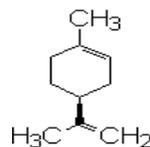
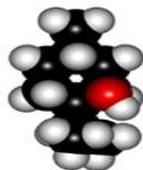
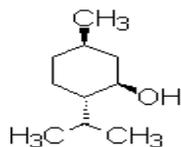
Gas de agua, gas venenoso, inflamable e incoloro, mezcla de hidrógeno y monóxido de carbono, y en general con pequeñas cantidades de nitrógeno, metano y dióxido de carbono. Se produce por combustión de biomasa en presencia de vapor de agua

Gas envasado: Varios hidrocarburos como el propano, el butano y el pentano, o mezclas de esos gases, se licúan para emplearlos como combustible. Gracias a los llamados gases embotellados, que suelen almacenarse en bombonas o tanques metálicos, pueden utilizarse cocinas o estufas en localidades carentes de suministro centralizado de gas.



Compuestos alicíclicos.

La versatilidad del carbono para formar enlaces permite que una molécula pueda cerrarse sobre sí misma, dando lugar a anillos carbonados. Los ejemplos en la naturaleza son numerosísimos. Los anillos pueden presentar enlaces C-C simple o dobles



Mentol:(-)-Mentol (p.f. 44°C)

Es el principal componente de la esencia de menta. Es un sólido blanco de sabor ardiente, Tf: 440 °C. El mentol tiene propiedades ligeramente anestésicas o, mejor, refrescantes. Se emplea en dermatología, y anestésico en otorrinolaringología, para el tratamiento de la faringitis. Posee propiedades antisépticas

R-(+)-limoneno

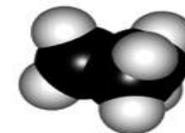
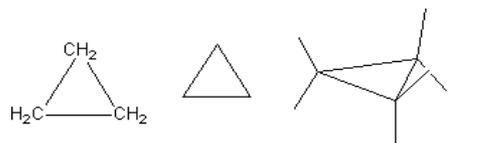
(p.eb. 176°C)

El limoneno abunda en la naturaleza. Es un líquido aceitoso que puede extraerse fácilmente de la cáscara del limón y responsable de su olor.

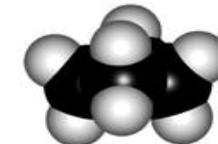
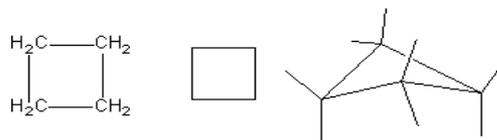
Nomenclatura

La fórmula general de un cicloalcano con un solo anillo es C_nH_{2n} . Por cada anillo que posea un compuesto, su fórmula empírica pierde 2 H respecto del alcano no cíclico. Se nombran igual que los hidrocarburos de cadena abierta anteponiendo la palabra ciclo. La presencia de sustituyentes se indica por su posición numerada en el anillo, de modo de contar con los números más bajos posibles.

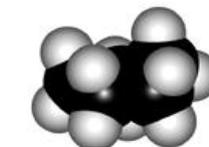
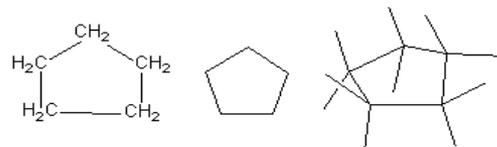
Ciclopropano



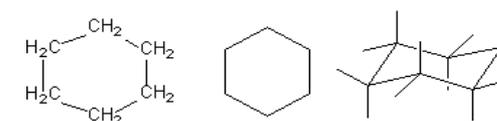
Ciclobutano



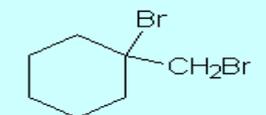
Ciclopentano



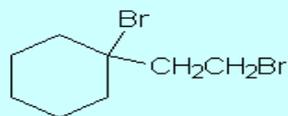
Ciclohexano



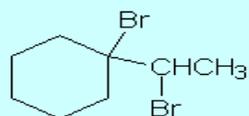
Ejemplos de nomenclatura:



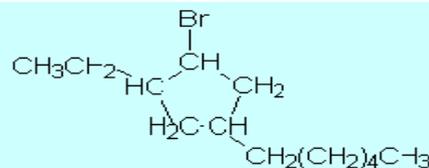
1-bromo-1-bromometilciclohexano



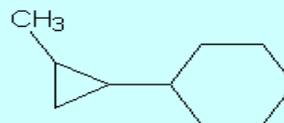
1-bromo-1-(2-bromoetil)ciclohexano



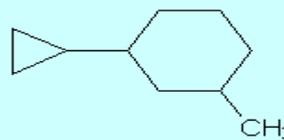
1-bromo-1-(1-bromoetil)ciclohexano



1-bromo-2-etil-4-hexilciclopentano

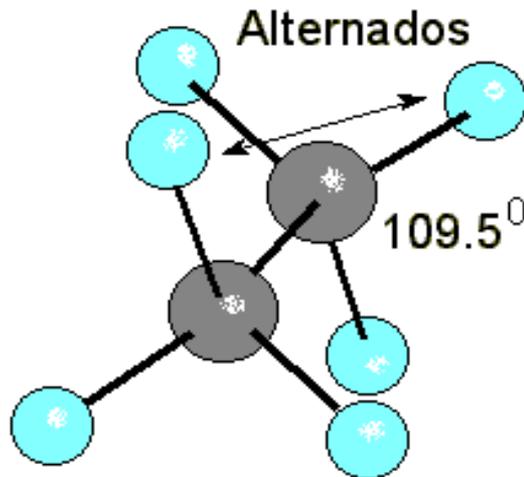


(2-metilciclopropil)ciclohexano



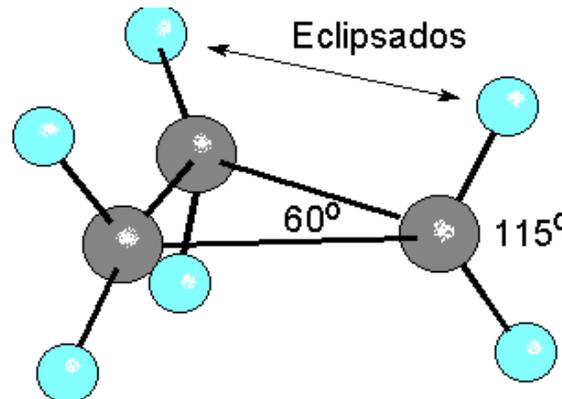
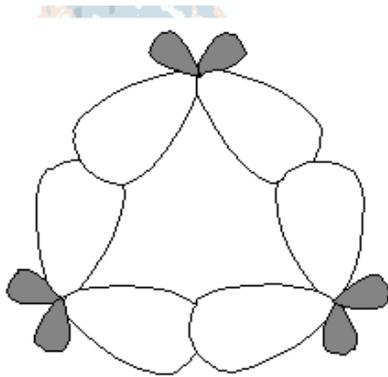
1-ciclopropil-3-metilciclohexano

Estructura



En un alcano acíclico el solapamiento frontal de los orbitales híbridos sp^3 es máximo, dando lugar a un enlace C-C de gran fortaleza ($\Delta H^\circ_{cc} = 90 \text{ kcal/mol}$).

Por otra parte, los hidrógenos pueden adoptar una conformación alternada donde minimicen sus interacciones estéricas y orbitálicas.

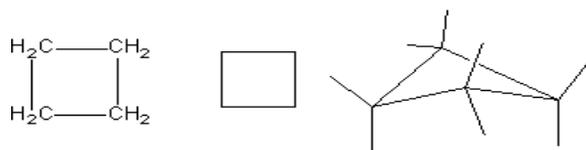


El ángulo interno del ciclopropano es de 60° , mucho más pequeño que el ángulo natural de los híbridos sp^3 (109.5°). Por tanto el solapamiento no puede ser frontal y es más imperfecto. Esto se demuestra experimentalmente porque el enlace C-C es mucho más débil ($\Delta H^\circ_{cc} = 65 \text{ kcal/mol}$) que en un alcano acíclico.

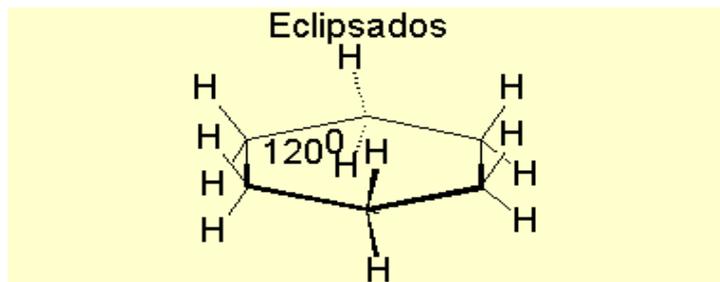
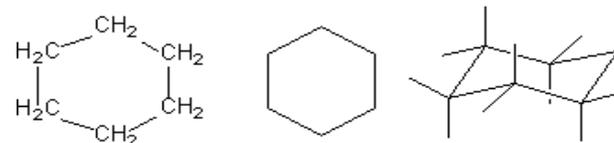
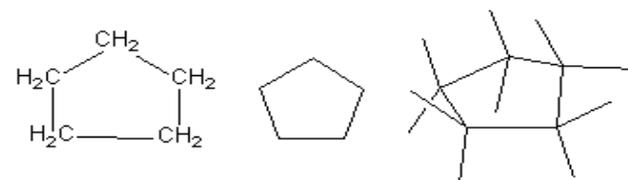
Además de la distorsión en el solapamiento de los orbitales híbridos debido al pequeño tamaño del anillo, los hidrógenos de carbonos contiguos están inevitablemente eclipsados. Esto confiere una inestabilidad añadida a la molécula.

El conjunto de estos dos factores (tensión de anillo y tensión de eclipsamiento) permite explicar la diferencia entre el calor de combustión calculado, como si fuera un alcano acíclico, y el experimental.

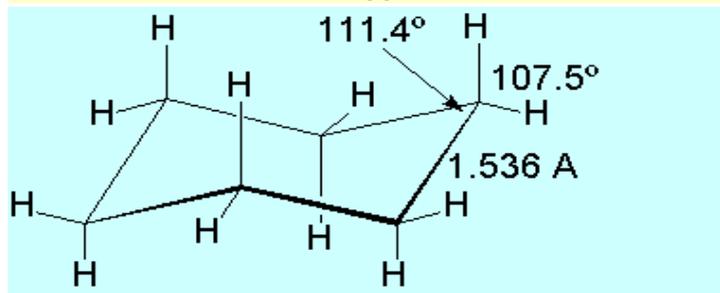
La tensión en el anillo es menor para los miembros siguientes inmediatos



El ciclohexano es especial puesto que no tiene tensión de anillo. Probablemente esta es la causa de que sea una unidad muy abundante en sustancias naturales.

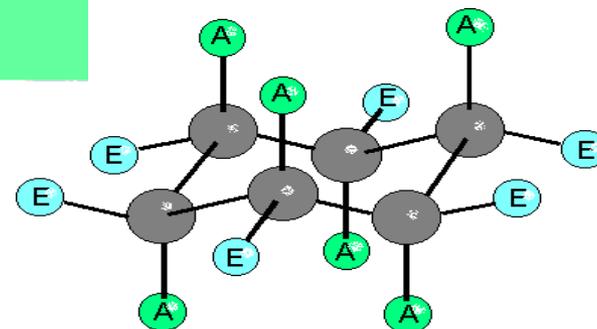


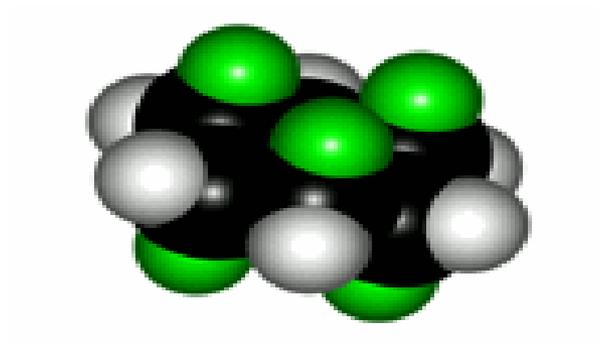
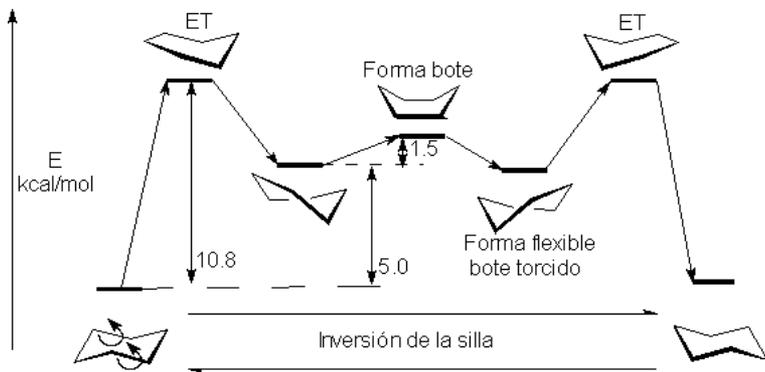
Si el ciclohexano fuera plano, el anillo tendría un ángulo interno de 120° , muy inadecuado para una hibridación sp^3 . Además, todos los hidrógenos estarían eclipsados.



En realidad el ciclohexano no es plano sino que adopta una conformación denominada **silla**, donde los ángulos internos son próximos a los ideales de la hibridación sp^3 . En esta conformación todos los hidrógenos están alternados.

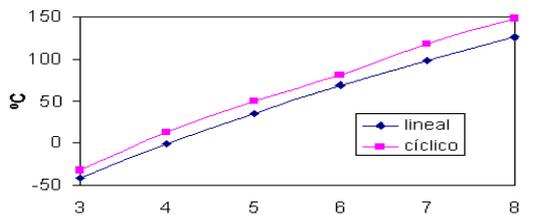
Se distinguen dos posiciones: las ecuatoriales y las axiales



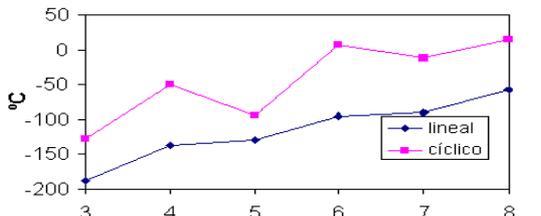


Propiedades físicas

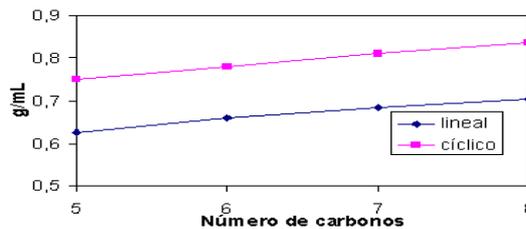
Tienen p.eb. y p.f. más altos y densidades mayores que los correspondientes alcanos alicíclicos lineales: mayor rigidez y simetría fuerzas intermoleculares de atracción (London) más efectivas.



Punto de ebullición



Punto de fusión

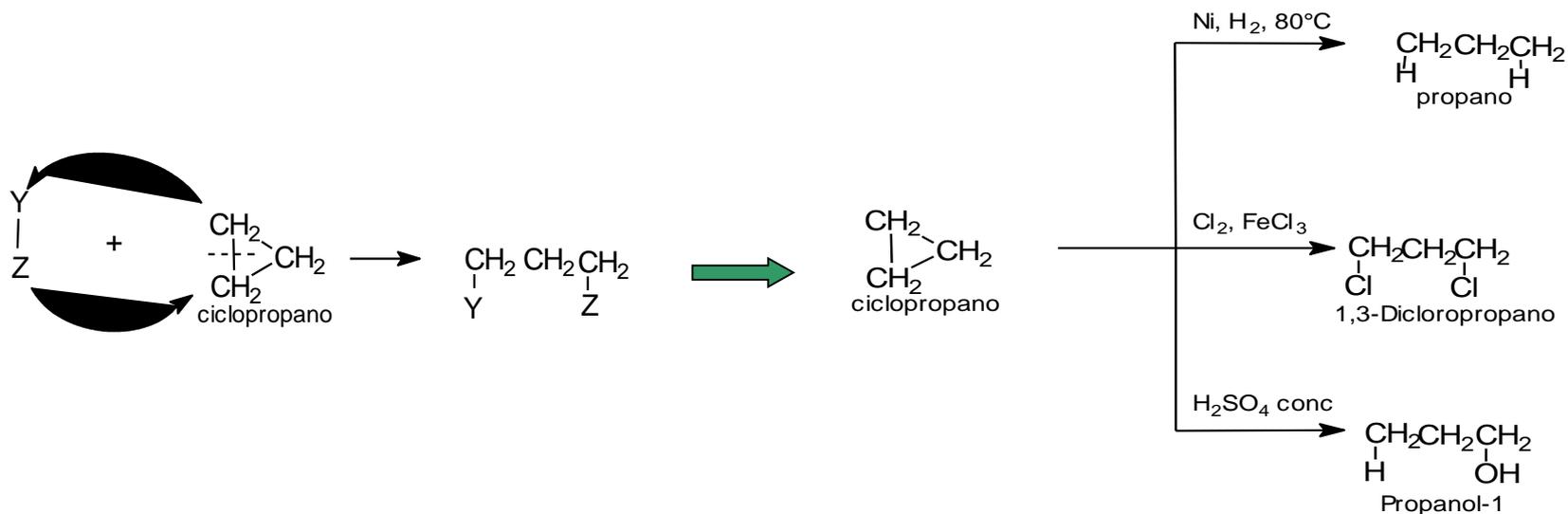


Densidad

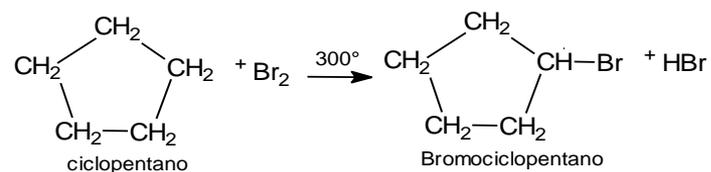
José Luis Zacur

Propiedades Químicas

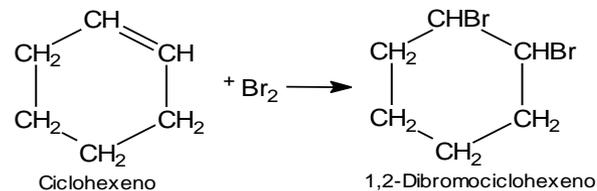
Los primeros cicloalcanos, que presentan tensión molecular son inusualmente reactivos. Así el ciclopropano presentan reacciones de adición con ruptura del anillo:



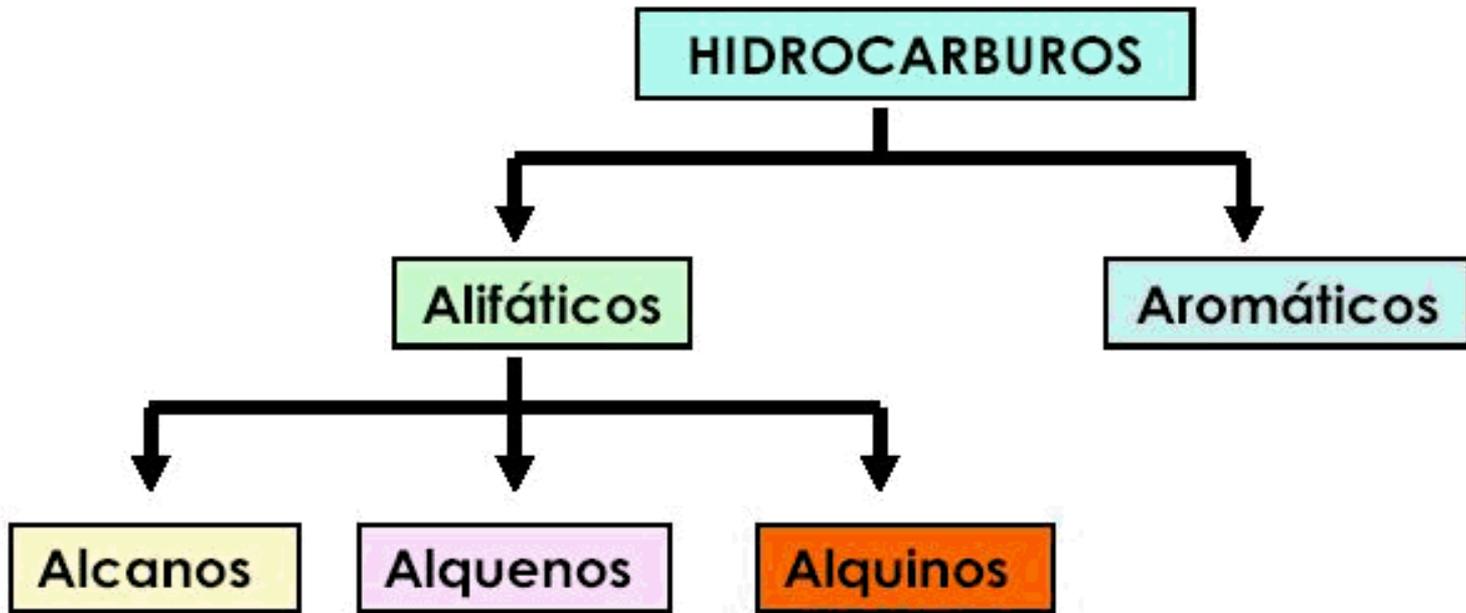
Los restantes miembros de esta familia presentan reacciones similares a los de cadena abierta



Otros alicíclicos presentan las reacciones características de sus grupos funcionales:

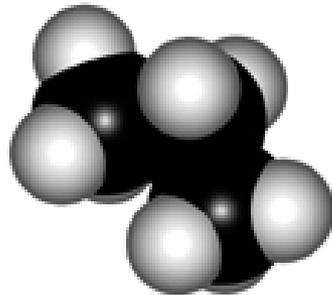


Clasificación de Hidrocarburos.

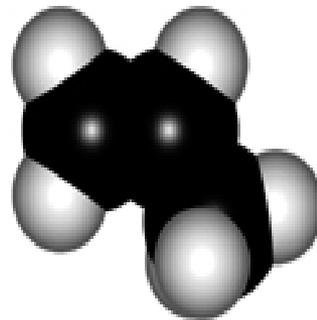


Alquenos u olefinas

- Son hidrocarburos insaturados, que contienen únicamente los elementos carbono e hidrógeno. Caracterizados por la presencia de dobles enlaces C=C, que se constituye en su grupo funcional.
- Compuestos muy reactivos que reaccionan con halógenos, hidrógeno ácido, oxidantes, ozono y presentan reacciones de polimerización.
- Su reactividad se debe a la naturaleza de su grupo funcional, un doble enlace que contiene electrones p, relativamente fáciles de transferir.



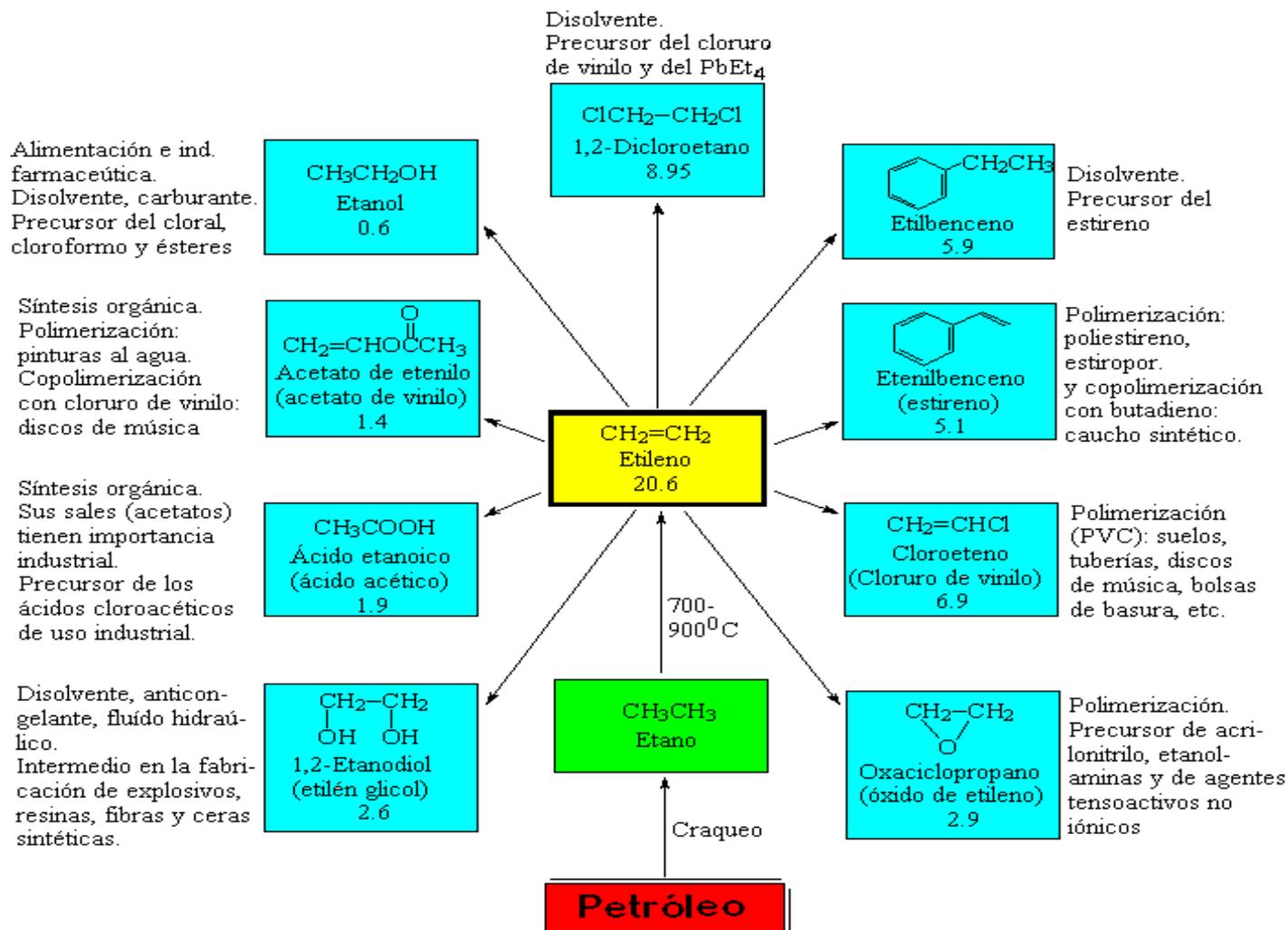
Propano



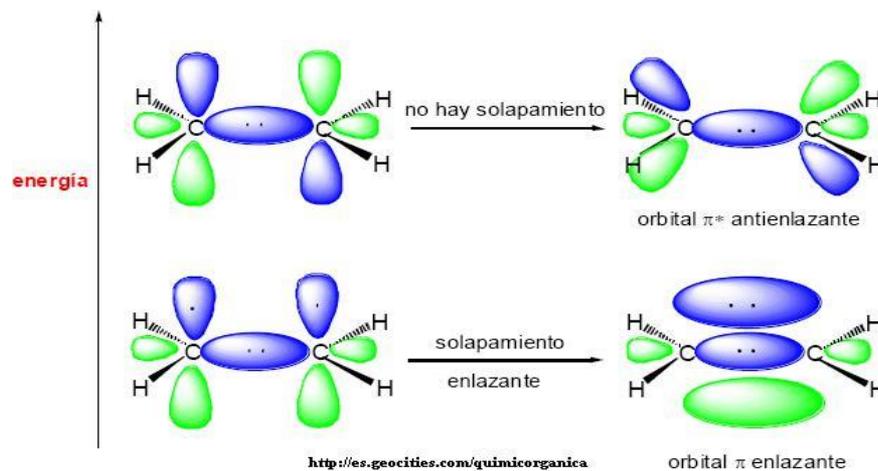
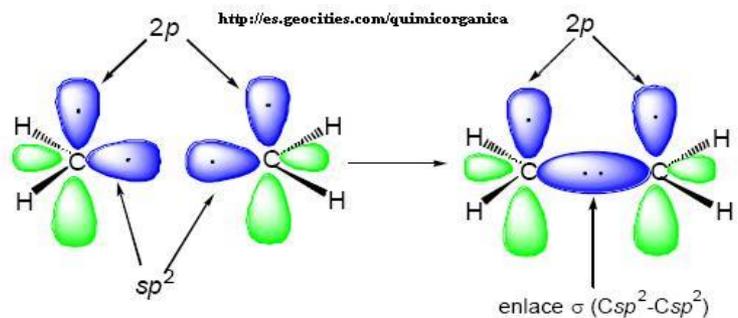
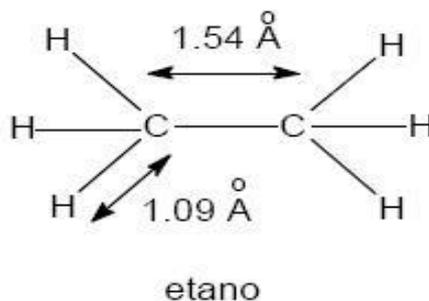
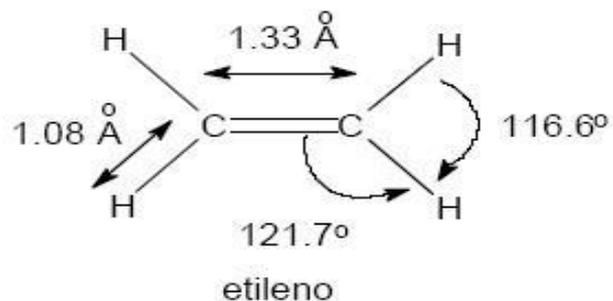
Propeno

El alqueno más simple es el etileno : C_2H_4

El **etileno** permite preparar unos 50 derivados simples de gran importancia industrial, de los que los más importantes, en miles de toneladas anuales de producción, son los siguientes

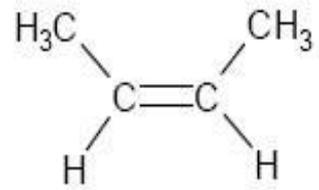
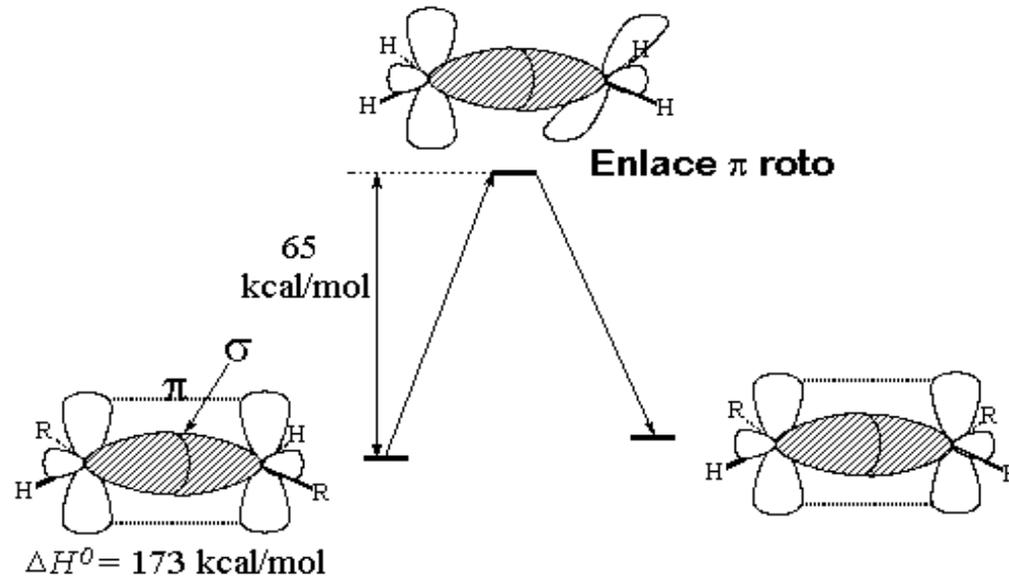


Estructura:

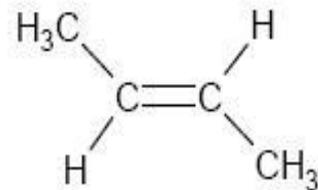


El solapamiento de los orbitales p es menos eficaz que el solapamiento frontal por el que se forman los orbitales sigma. Por consiguiente un enlace pi es más débil que un enlace sigma.

Isomería Geométrica



cis-2-buteno

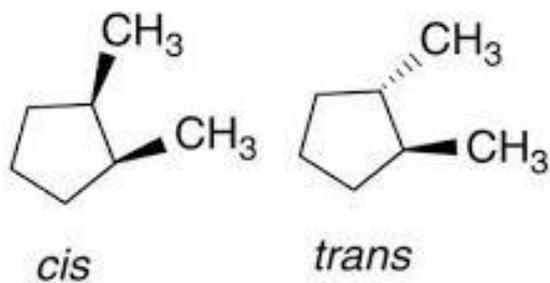


trans-2-buteno

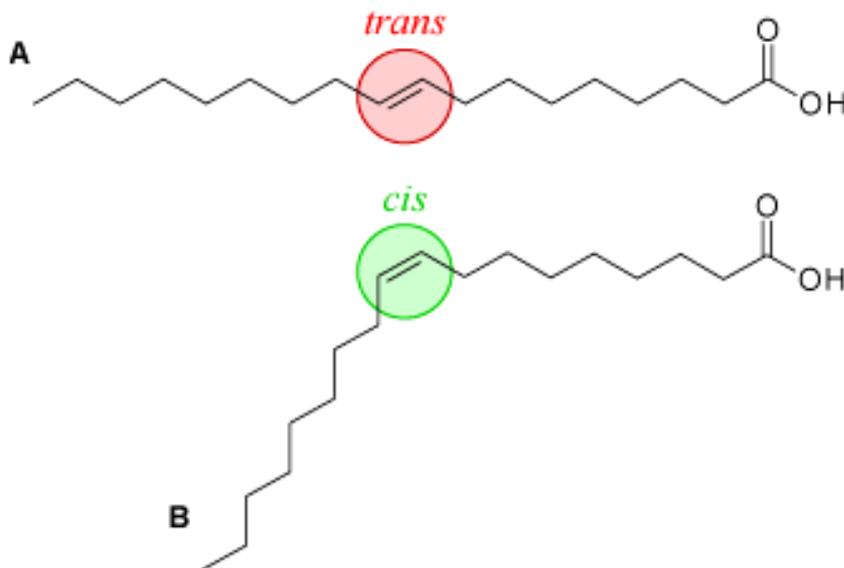
Nomenclatura:

- Se busca la cadena más larga que contenga el doble enlace.
- La cadena se numera de tal forma que al doble enlace presenten los números que indican la posición, más pequeños posibles (excepto cuando hay otra función que domine)
- Si hay sustituyentes, se les asigna los números que les correspondan. En caso de haber dos numeraciones equivalentes, se tomará aquella que da los números más pequeños a los sustituyentes.
- En cicloalquenos, la numeración comienza por el doble enlace y se sigue el sentido de giro que da los números más pequeños posibles a los sustituyentes

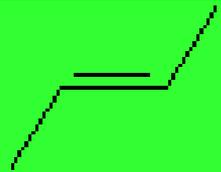
En alquenos disustituídos hay que anteponer la estereoquímica cis ó trans de los sustituyentes

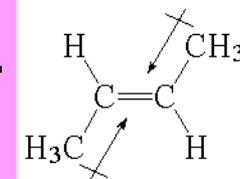
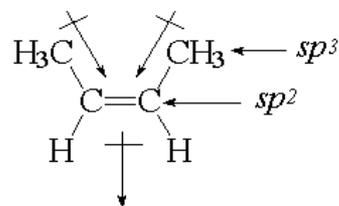


stereoisomers of
1,2-dimethylcyclopentane



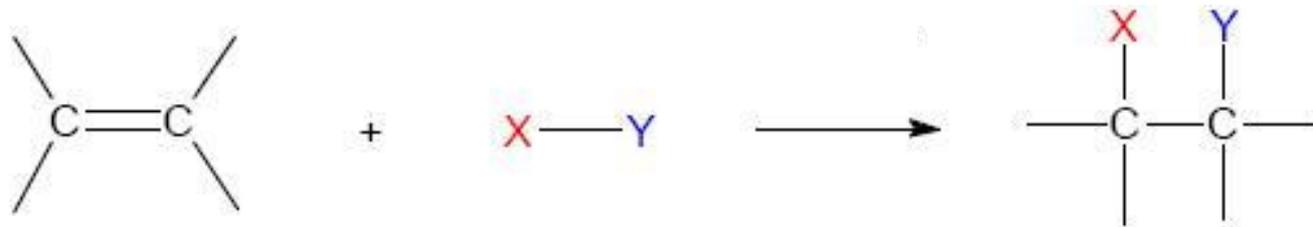
Propiedades Físicas

Alcano	Formula	p.eb.	p.f.
Etano	CH ₃ CH ₃	-89°	-183°
Eteno	CH ₂ =CH ₂	-104°	-169°
Propano	CH ₃ CH ₂ CH ₃	-42°	-188°
Propeno	CH ₂ =CHCH ₃	-48°	-185°
Butano	CH ₃ (CH ₂) ₂ CH ₃	-1°	-138°
1-Buteno	CH ₂ =CHCH ₂ CH ₃	-6°	-185°
<i>cis</i> -2-Buteno		4°	-139°
<i>trans</i> -2-Buteno		1°	-105°



Propiedades Químicas

- El enlace π es energéticamente más débil que la mayoría de los enlaces σ , por lo que la adición de un reactivo al doble enlace ocurre con ruptura del enlace π , formándose dos nuevos enlaces σ , energéticamente favorecidos.
- El doble enlace carbono-carbono es atacado por agentes electrofílicos. Los electrones π , debido a bajo involucramiento en la unión de los núcleos de C, son polarizables y susceptibles de ser tomados por átomos o grupos de átomos con carencia de electrones.
- El tipo de reacción (característica de los alquenos y en general de los hidrocarburos insaturados) recibe el nombre de **adición electrofílica a carbono insaturado**.



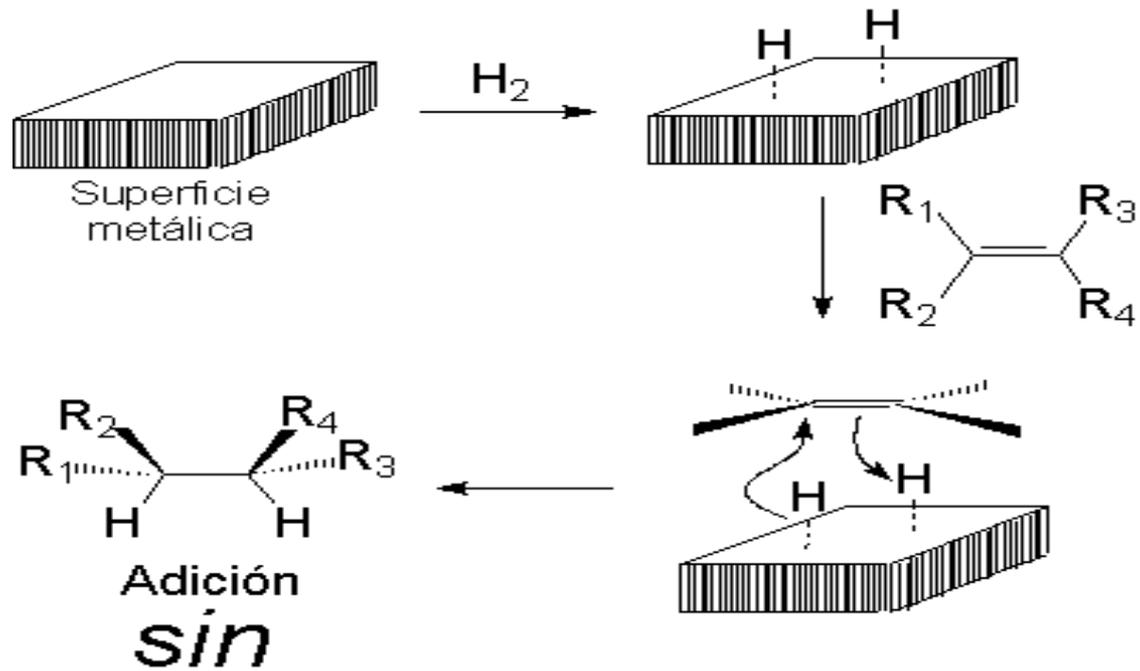
reacción general de adición al doble enlace

Los mecanismos por los que puede efectuarse esta reacción son de varios tipos

Concepto de electrófilo y nucleófilo: Naturaleza del reactivo atacante.

- Un ácido es aquella especie capaz de aceptar electrones y una base es un dador de un par de electrones.
- Los electrófilos son reactivos aceptores de electrones y por consiguiente son ácidos de Lewis.
- Los nucleófilos son reactivos dadores de electrones y por tanto bases de Lewis.
- La diferencia electrófilo/ácido de Lewis o nucleófilo/base de Lewis se basa en conceptos cinéticos y termodinámicos.
- La basicidad y la acidez son conceptos termodinámicos y por tanto se refieren a la posición de equilibrio entre un dador de electrones y un ácido. Por ejemplo, cuando se afirma que una base es fuerte se entiende que, en la reacción con ácidos, el equilibrio está desplazado hacia la derecha.
- Al contrario que el concepto de acidez/basicidad, la electrofilia y la nucleofilia son conceptos cinéticos: un buen nucleófilo es una especie química que reacciona rápidamente con electrófilos.

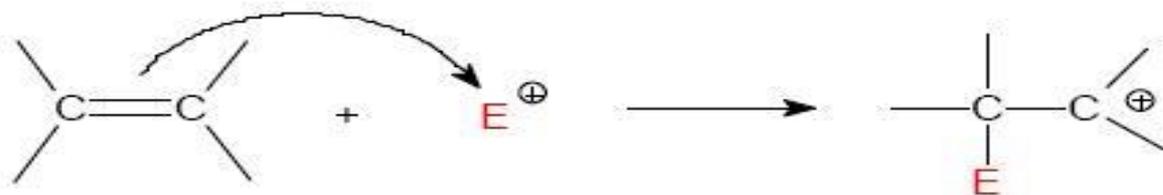
Mecanismo de cicloadición



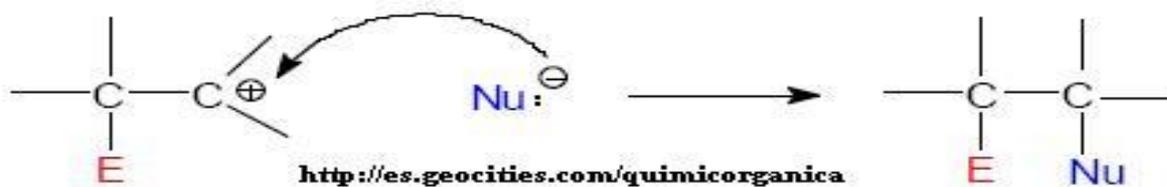
Mecanismo iónico

Mecanismo general de la adición a alquenos

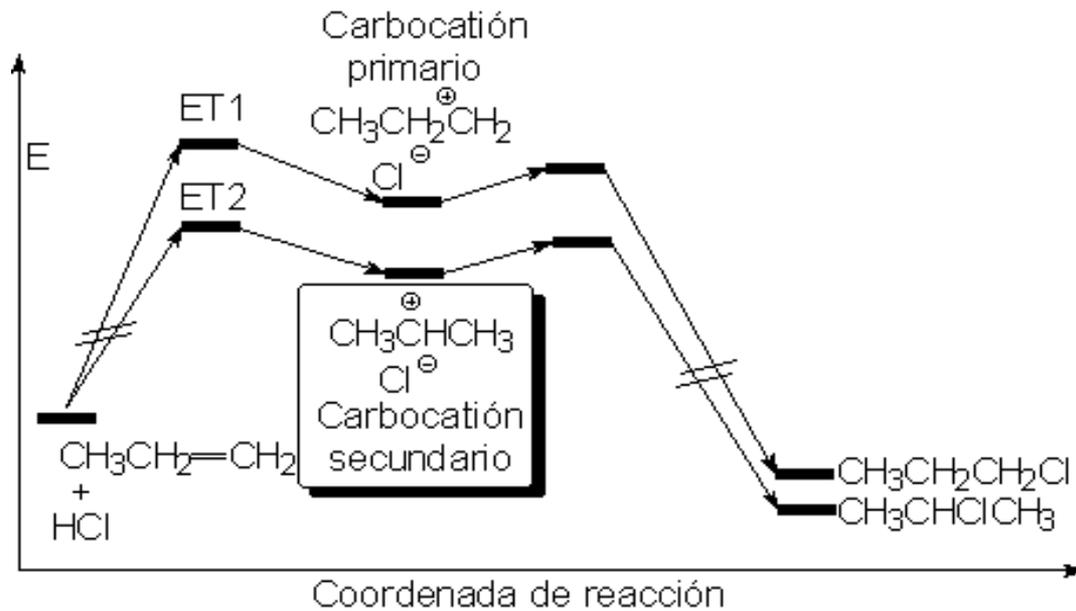
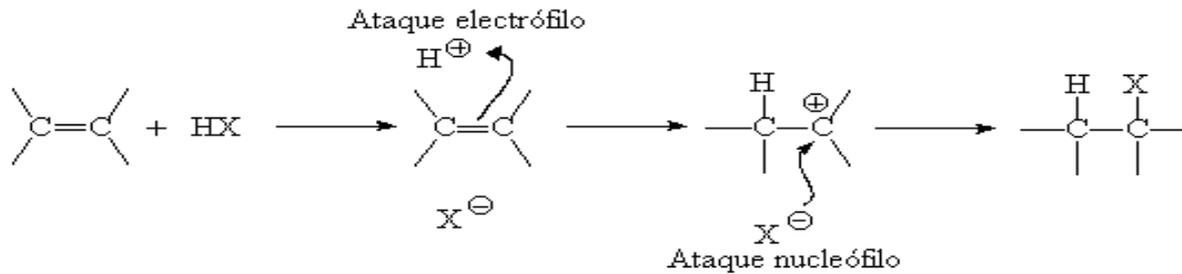
Paso 1: ataque del enlace π al electrófilo



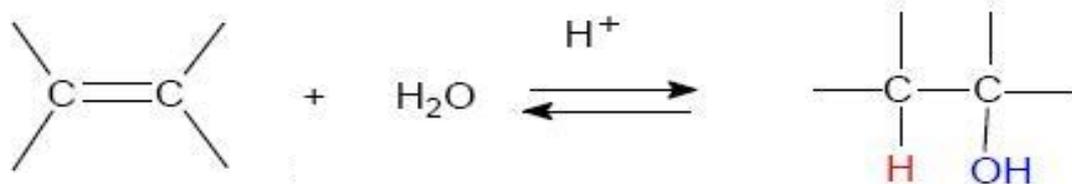
Paso 2: ataque del nucleófilo al carbocatión



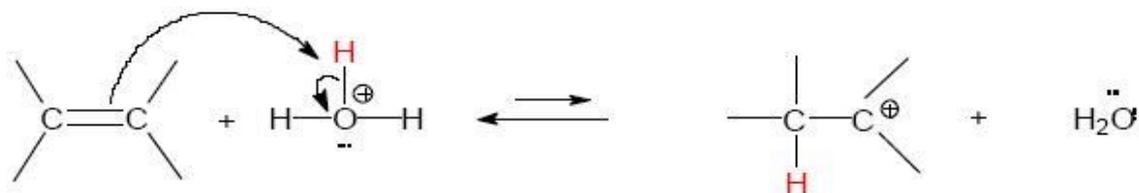
Adición de hidrácidos



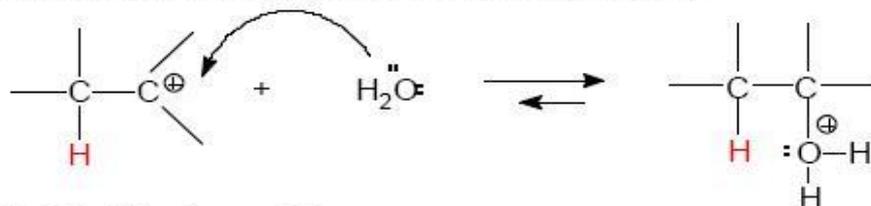
Adición de H₂O



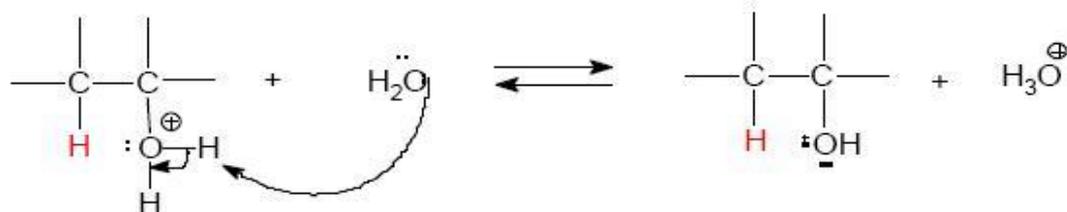
1°. Protonación del doble enlace



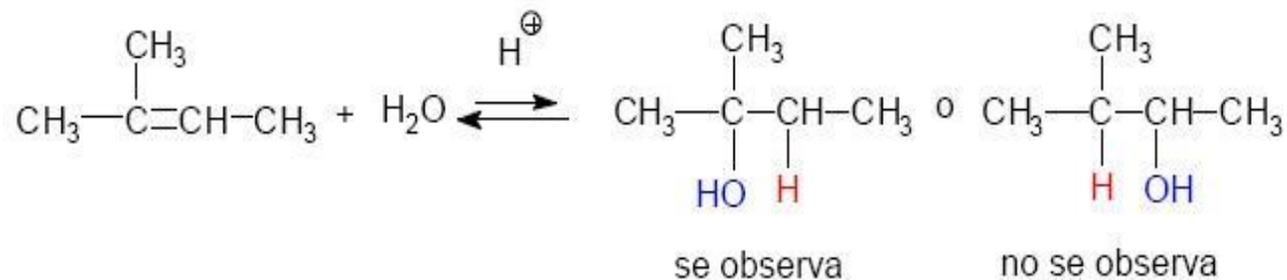
2°. Ataque nucleofílico del H₂O al carbocatión



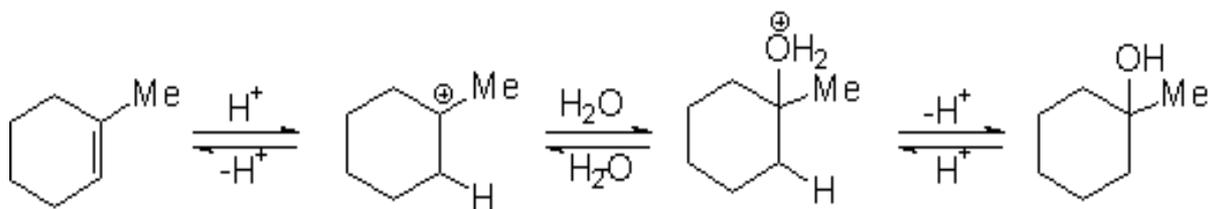
3°. Pérdida de protón



Adición de H₂O

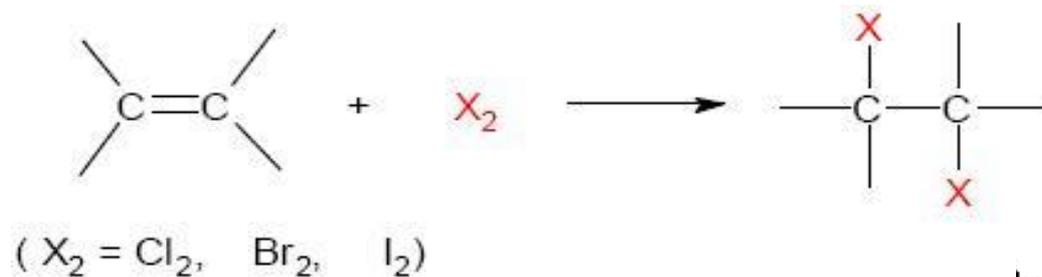


Adición de agua a olefinas

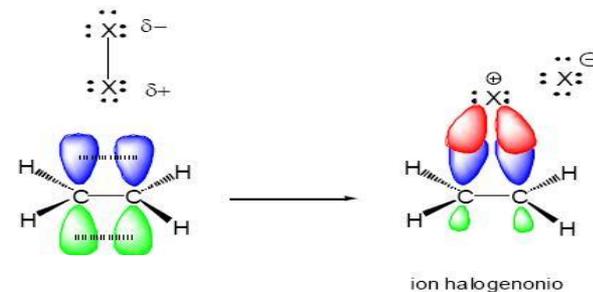
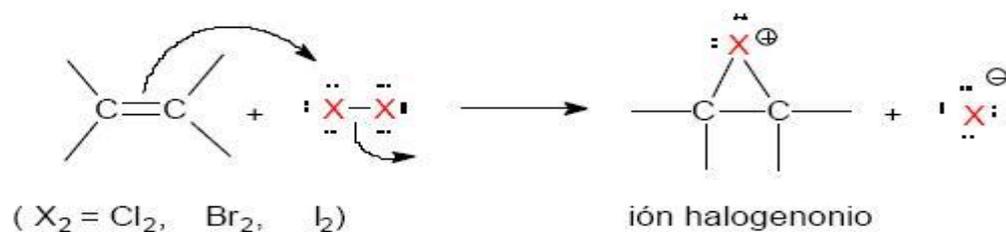


Deshidratación de alcoholes

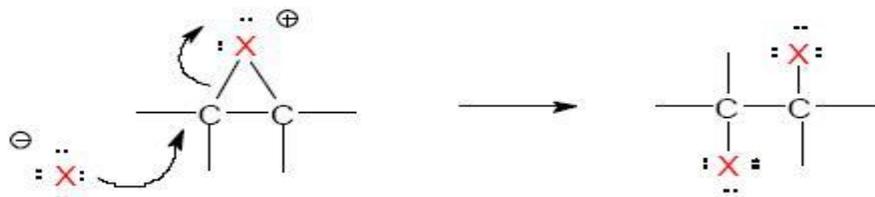
Adición de Halógenos



1º. Formación de un catión halogenonio cíclico



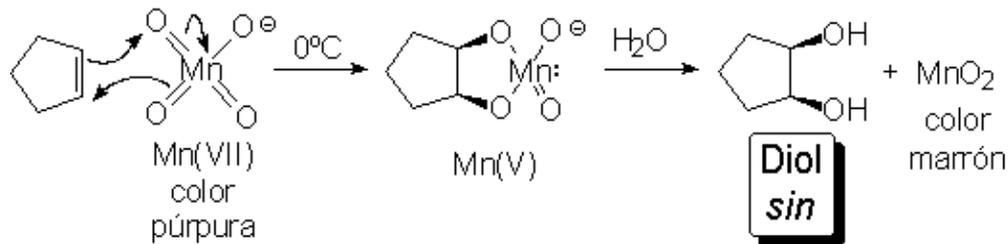
2º. Ataque nucleofílico al ión halogenonio



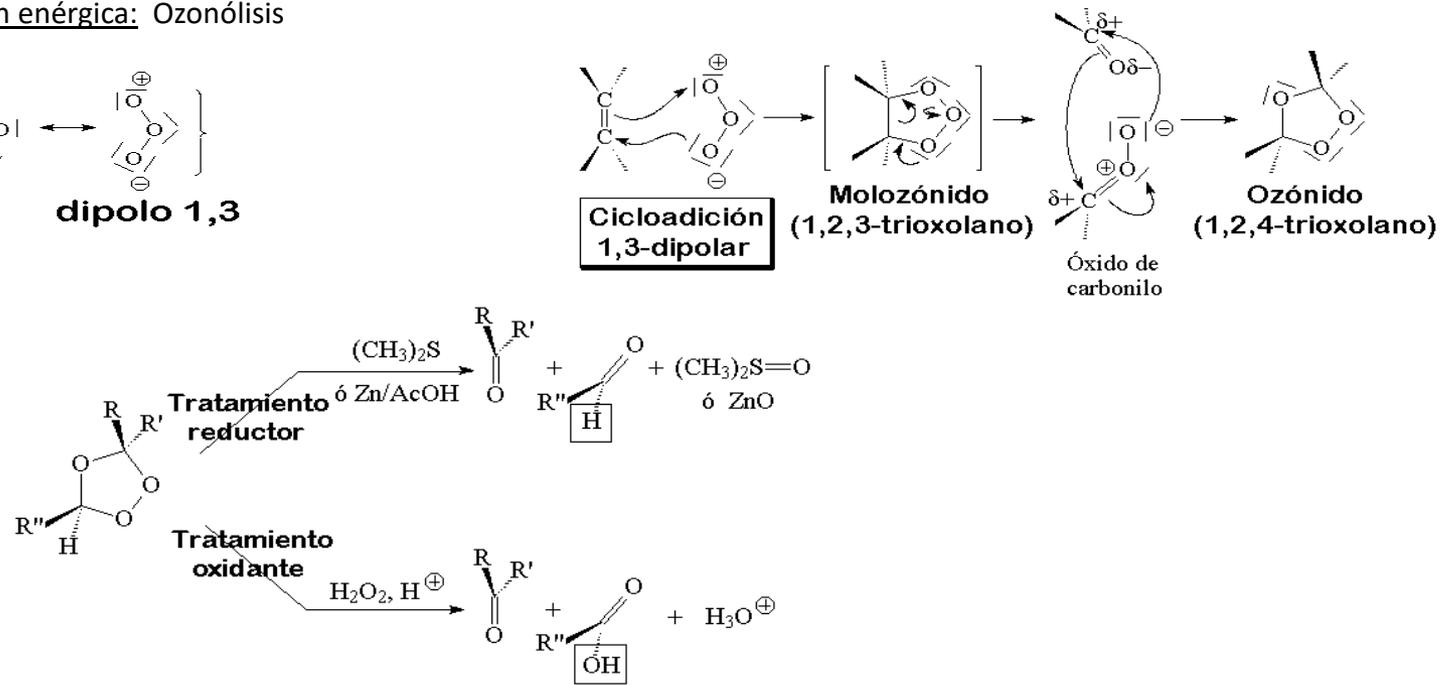
Reacciones de oxidación

La oxidación de olefinas puede llevarse a cabo de forma suave o enérgica.

Oxidación suave: Test de Baeyer (disolución diluida de permanganato en frío):



Oxidación enérgica: Ozonólisis

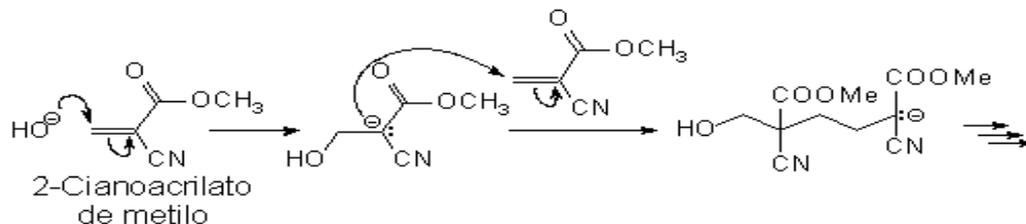
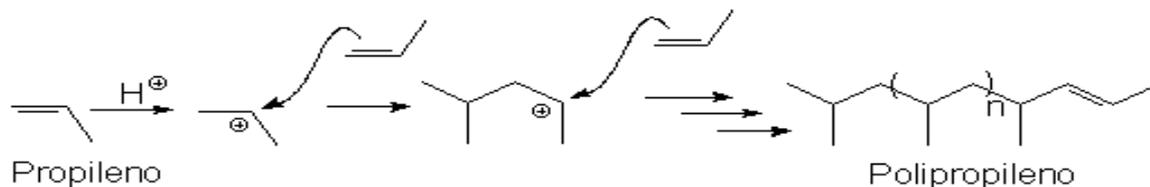


Reacciones de Polimerización

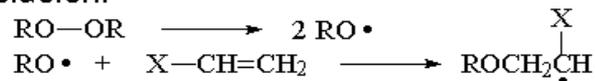
- Las olefinas pueden reaccionar consigo mismas para dar lugar a moléculas de longitud variable.
- Si se unen dos moléculas se obtienen **dímeros**.
- Si las cadenas formadas son de longitud corta se denominan **oligómeros**
- Si son largas (miles de unidades de monómero), **polímeros**. Los polímeros son compuestos que tienen una enorme importancia industrial y se emplean para la fabricación de elementos que son esenciales en numerosas áreas de nuestra vida cotidiana (fibras sintéticas para tejidos, envases, tuberías, etc.).



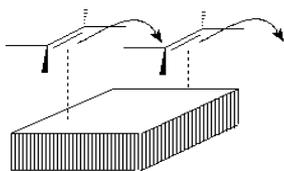
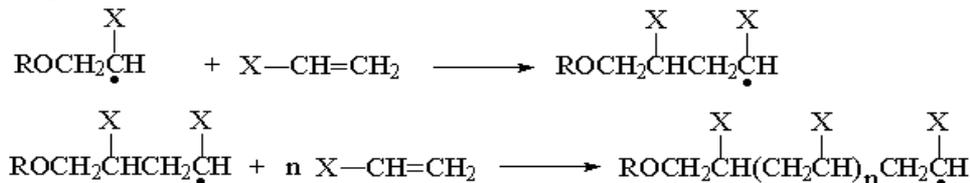
Reacciones de Polimerización



Iniciación:



Propagación:



Ziegler-Natta

Polimerización catiónica:

La protonación de una olefina produce un carbocatión electrófilo que puede ser atacado por la nube p de otra olefina

Polimerización aniónica:

propio de olefinas pobres en electrones, es decir, aquellas que tienen sustituyentes electronegativos.

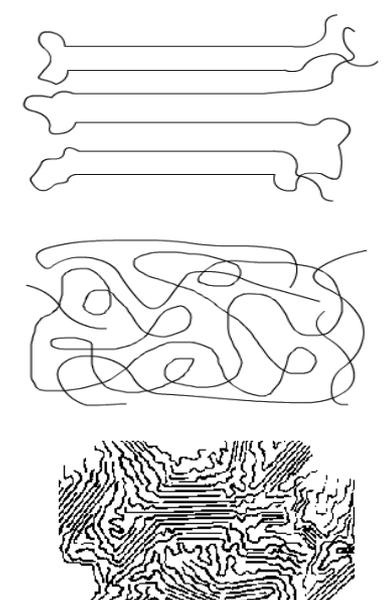
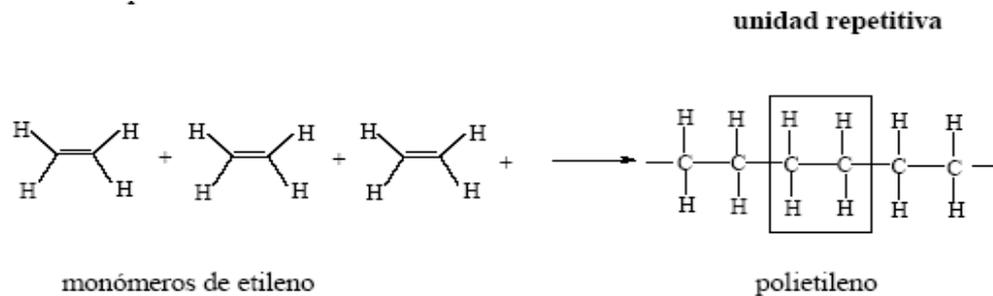
Polimerización radicalaria:

se reconocen las etapas típicas de este mecanismo

Polimerización catalizada por metales:

Permite un control de la longitud y la estereoquímica del polímero final. De gran importancia para condicionar y controlar las propiedades del polímero. Este proceso valió la obtención del premio Nobel a sus autores.

PLÁSTICOS o Polímeros sintéticos

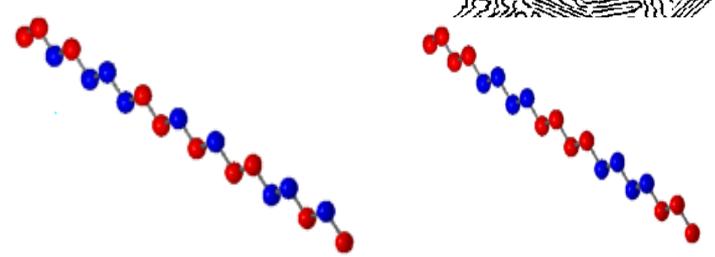
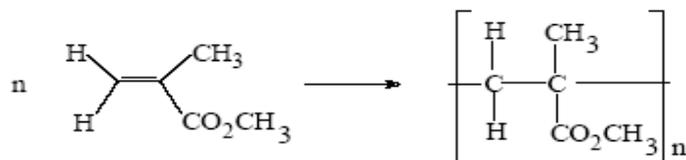


Clasificación

a) según su **composición**:

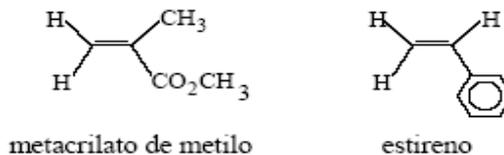
HOMOPOLÍMEROS: formados por una única unidad repetitiva.

Ej. : polimetacrilato de metilo



COPOLIMEROS: formados por más de una unidad repetitiva.

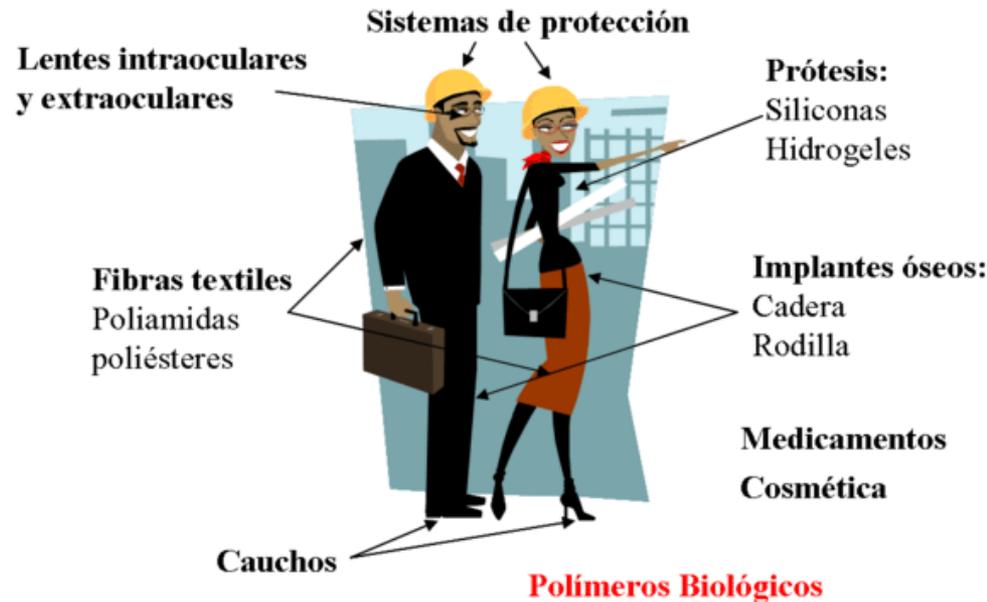
Ej. : 2 monómeros:



- ◆ al azar AABBBBABABABBBAAABBBABBABABAB
- ◆ en forma alternada ABABABABABABABABAB
- ◆ en bloque AAAABBBAAAABBBAAAABBB

b) según su estructura

- ◆ lineales: formados por monómeros difuncionales. Ej.: polietileno, poliestireno.
- ◆ ramificados: se requiere el agregado de monómeros trifuncionales, por ejemplo, glicerol.
- ◆ Entrecruzados: Se forma un material compuesto por una molécula tridimensional continua, toda ella unida por enlaces covalentes (resinas urea-formaldehído y fenol-formaldehído).

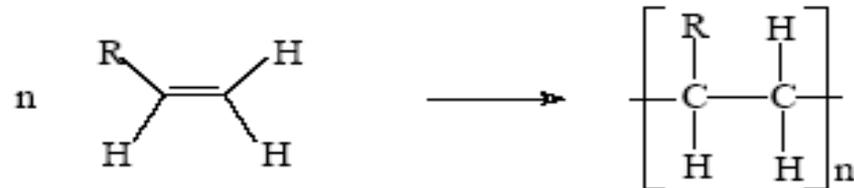


c) según la **reacción de polimerización**:

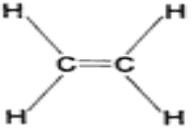
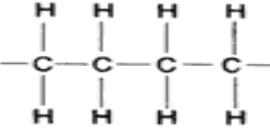
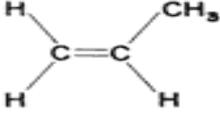
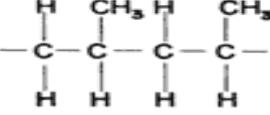
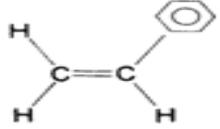
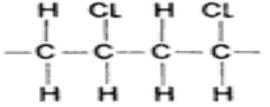
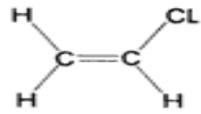
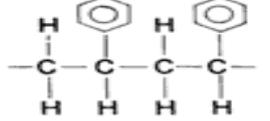
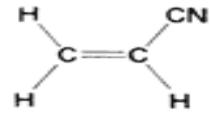
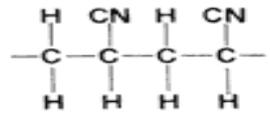
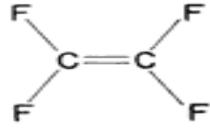
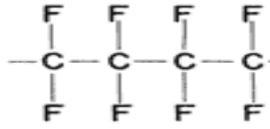
- **polimerización por reacción en cadena (o adición)**

Se genera una partícula reactiva (radical, anión o catión) a partir de una molécula de monómero y ésta se adiciona a otro monómero de manera repetitiva.

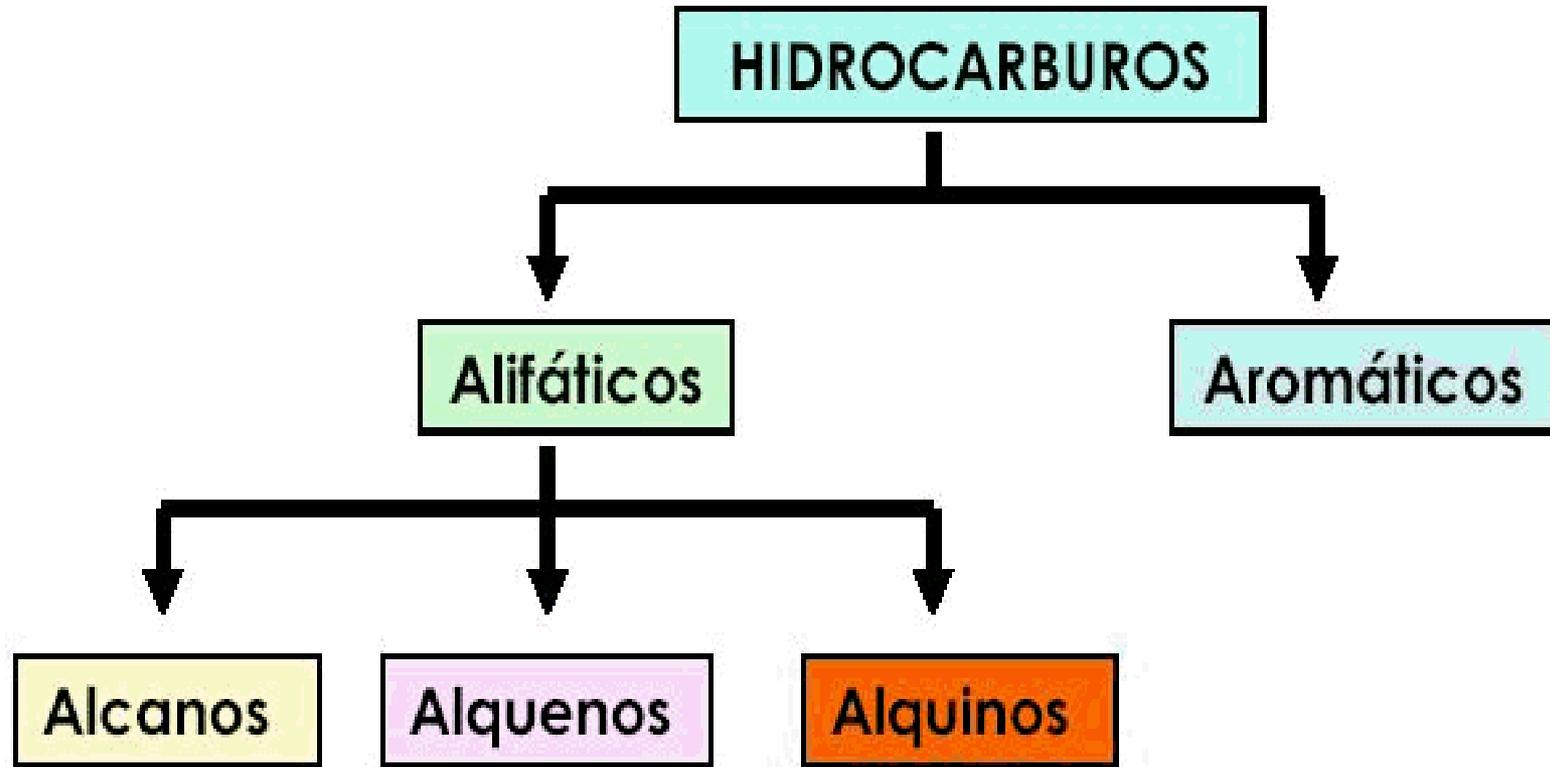
Ej. : polimerización de monómeros vinílicos:



Monómero	R	Polímero
Etileno	H	polietileno
Estireno	Ph	poliestireno
Cloruro de vinilo	Cl	PVC
Propileno	CH ₃	Polipropileno
Acrilonitrilo	CN	Poliacrilonitrilo
Acetato de vinilo	OCOCH ₃	Acetato de polivinilo
No existe*	OH	Alcohol polivinílico

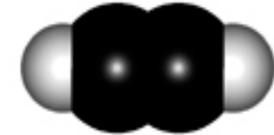
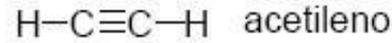
<i>Monómero</i>	<i>Polímero</i>	<i>Usos principales</i>
 <p>etileno</p>	 <p>polietileno</p>	bolsas, botellas, juguetes
 <p>propileno</p>	 <p>polipropileno</p>	botellas, detergente, artículos moldeados
 <p>estireno</p>	 <p>poliestireno</p>	artículos moldeados, espuma aislante
 <p>cloruro de vinilo</p>	 <p>cloruro de polivinilo (PVC)</p>	Discos fonográficos, películas, artículos de piel artificial, mangueras
 <p>acrilonitrilo</p>	 <p>poliacrilonitrilo</p>	Fibras (Orlón, Milón)
 <p>tetrafluoroetileno</p>	 <p>politetrafluoroetileno</p>	Teflón, películas resistentes al calor

Clasificación de Hidrocarburos.

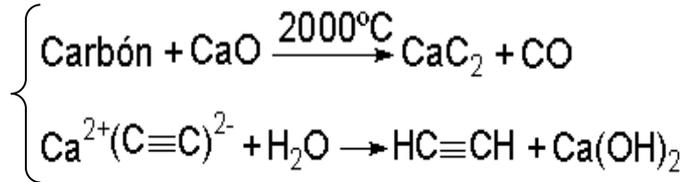
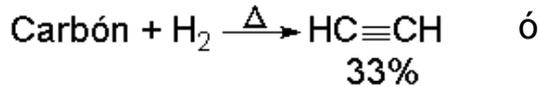


Alquinos o acetilenos.

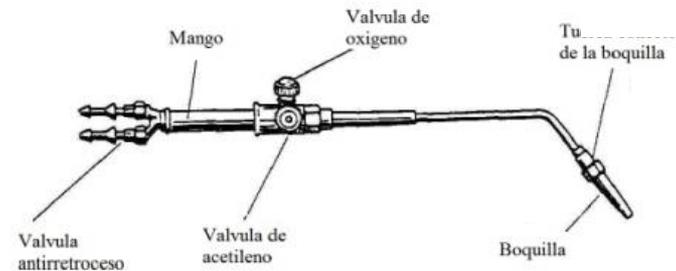
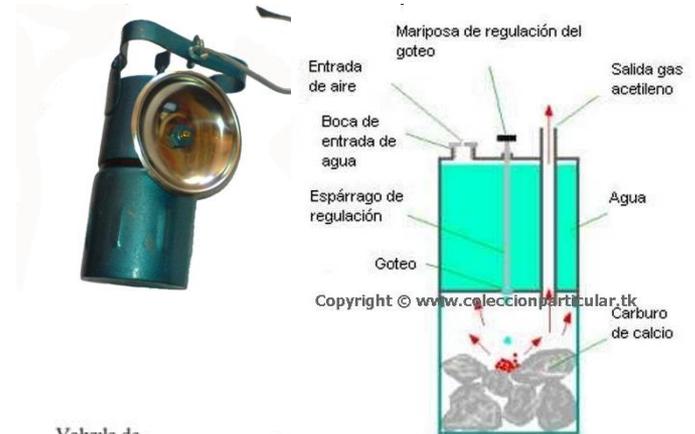
C_2H_2 acetileno. Nombre IUPAC etino.



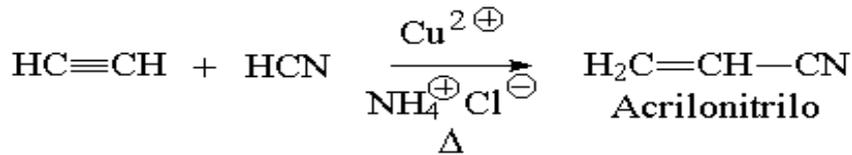
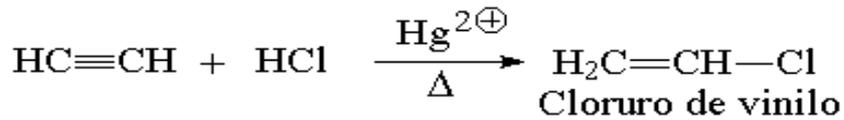
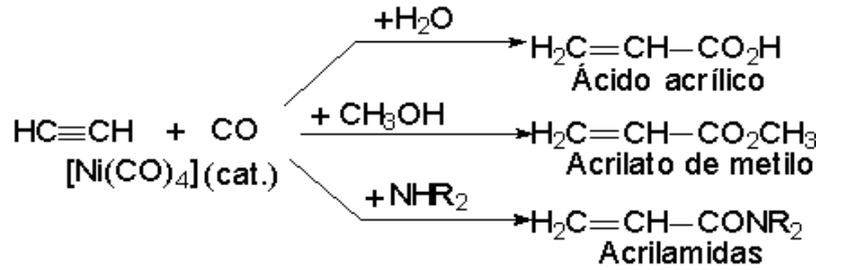
Métodos de obtención



La combustión del acetileno libera una gran cantidad de energía y, alimentada con oxígeno, supera fácilmente los $2000^\circ C$. Su uso como fuente de luz fue importante. Actualmente es utilizado en soldaduras (soplete oxiacetilénico).



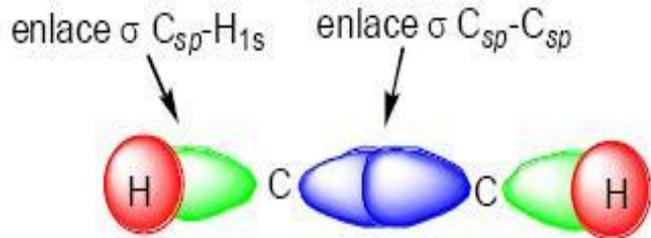
La aplicación industrial del acetileno se basa en su transformación en monómeros para posterior polimerización:



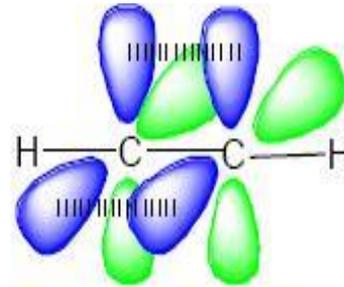
Síntesis de monómeros



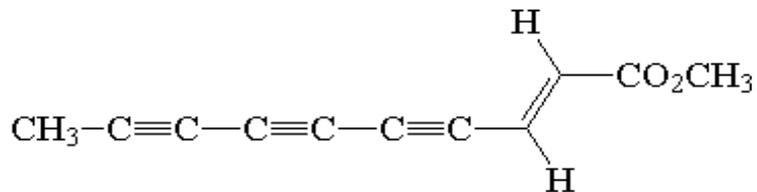
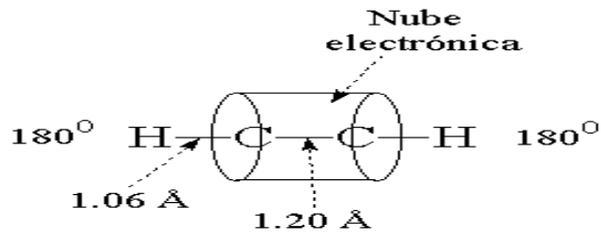
Estructura:



sistema de orbitales σ del acetileno

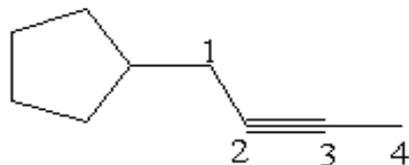
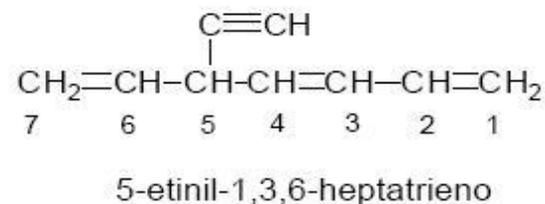
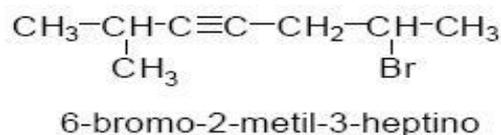
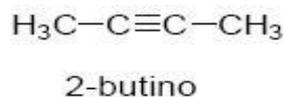


sistema de orbitales π del acetileno



Nomenclatura:

- Se busca la cadena más larga que contenga el triple enlace.
- La cadena se numera de tal forma que al triple enlace le queden los números más pequeños posibles (excepto cuando hay otra función que domine).
- Si hay sustituyentes, se les asigna los números que les correspondan. En caso de haber dos numeraciones equivalentes, se tomará aquella que da los números más pequeños a los sustituyentes.
- Los sustituyentes que poseen un enlace triple se denominan **alquini-**.
- Cuando hay una cadena abierta con enlaces triples y dobles (**alqueniños**) la numeración se empezará por el extremo más próximo a alguno de ellos. Si el doble y el triple enlaces se encuentran equidistantes, el doble enlace toma la prioridad.
- En caso de haber otro sustituyentes con orden de prioridad mayor, la numeración empezará por ellos.

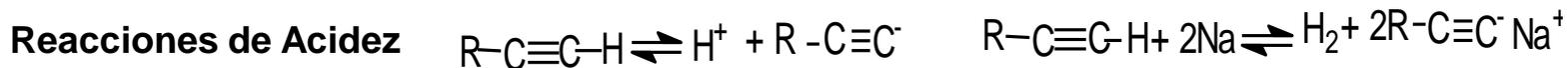


Propiedades Físicas

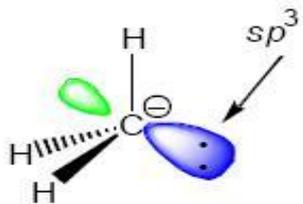
Compuesto	p.f. (°C)	p.eb. (°C)	μ(D)
butano	-138.3	-0.5	0
1-buteno	-185.0	-6.3	0.3
1-butino	-122.5	8.1	0.8



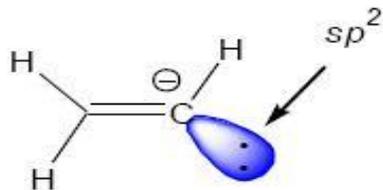
Propiedades Químicas



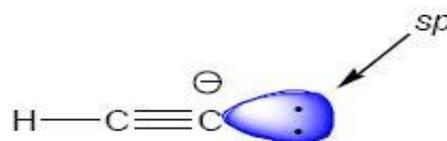
	H ₃ C-CH ₃	H ₂ C=CH ₂	HC≡CH
pK _a	50	44	25



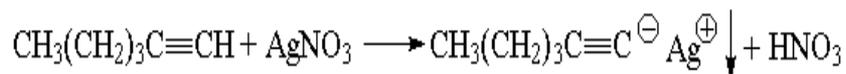
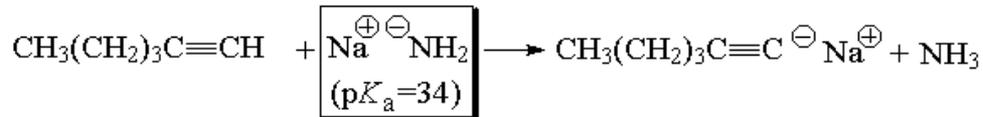
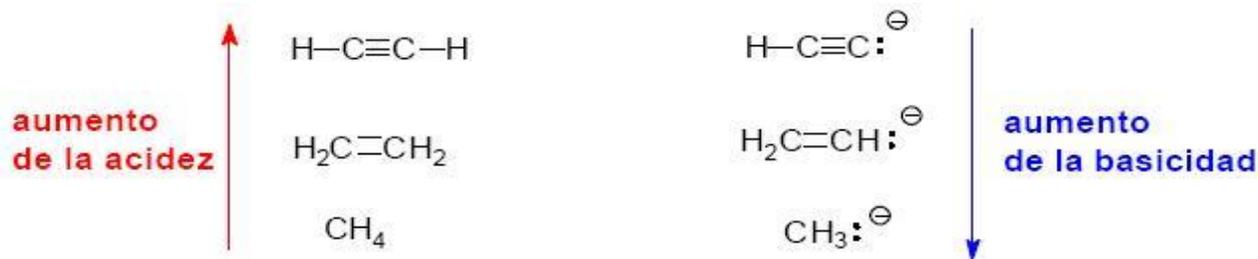
anión metilo



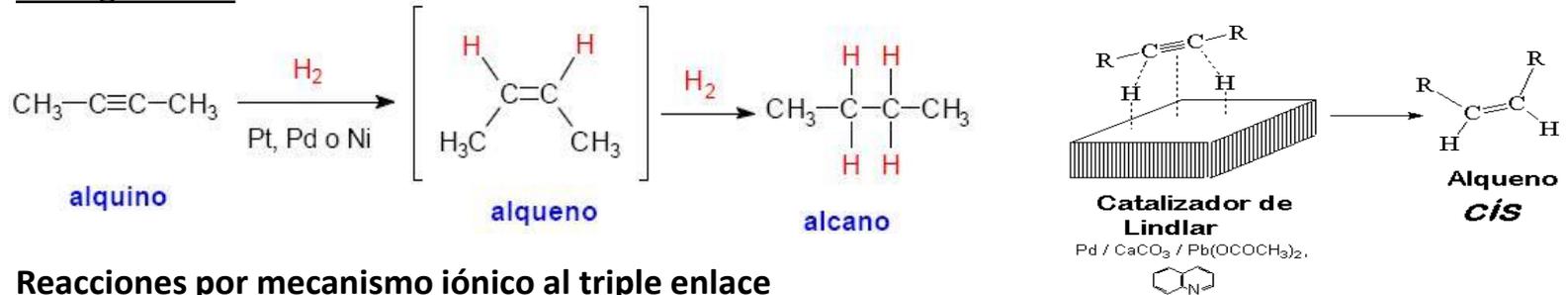
anión vinilo



anión acetiluro

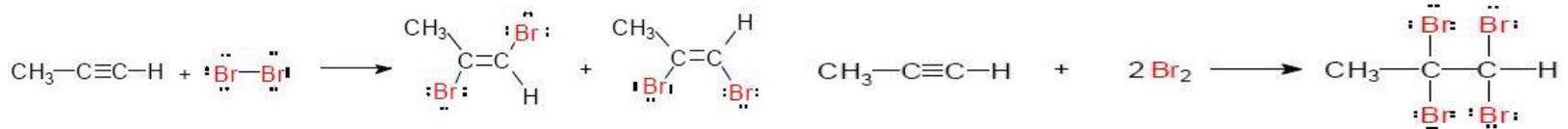


Hidrogenación

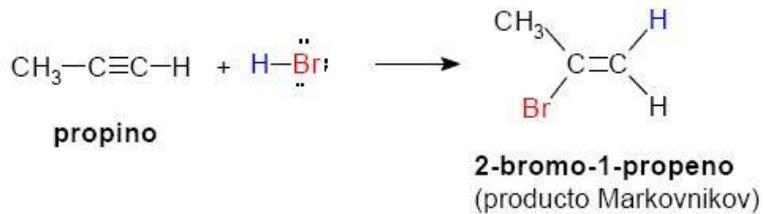


Reacciones por mecanismo iónico al triple enlace

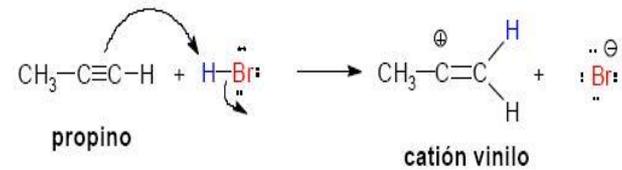
Halogenación



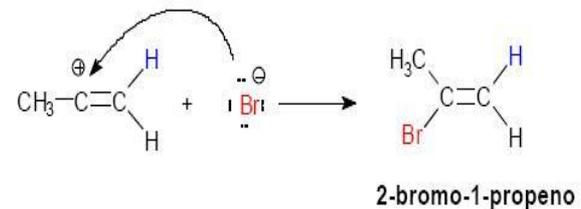
Adición de halogenuros de hidrógeno (H-X).



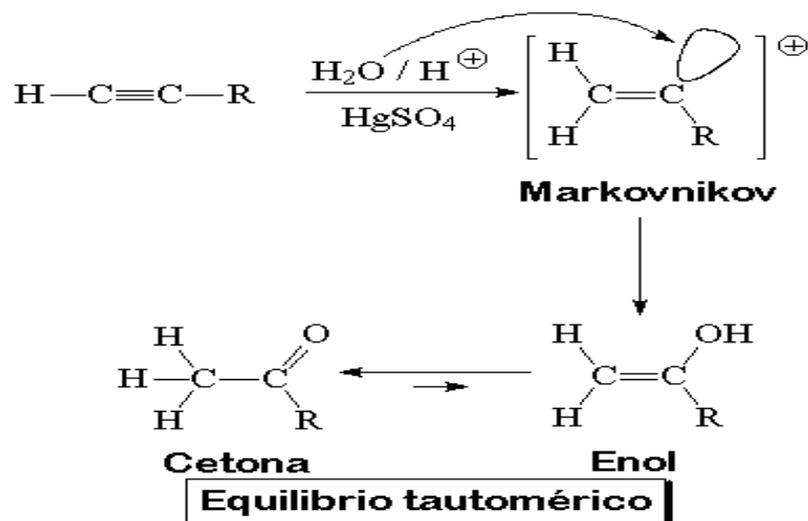
1^{er} Paso: adición del protón



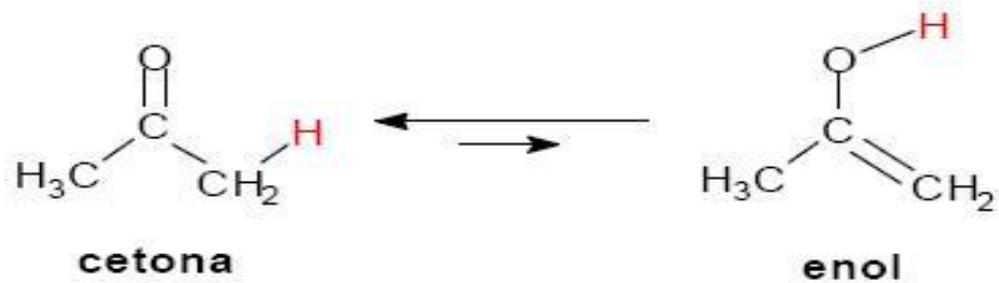
2^o Paso: adición del nucleófilo



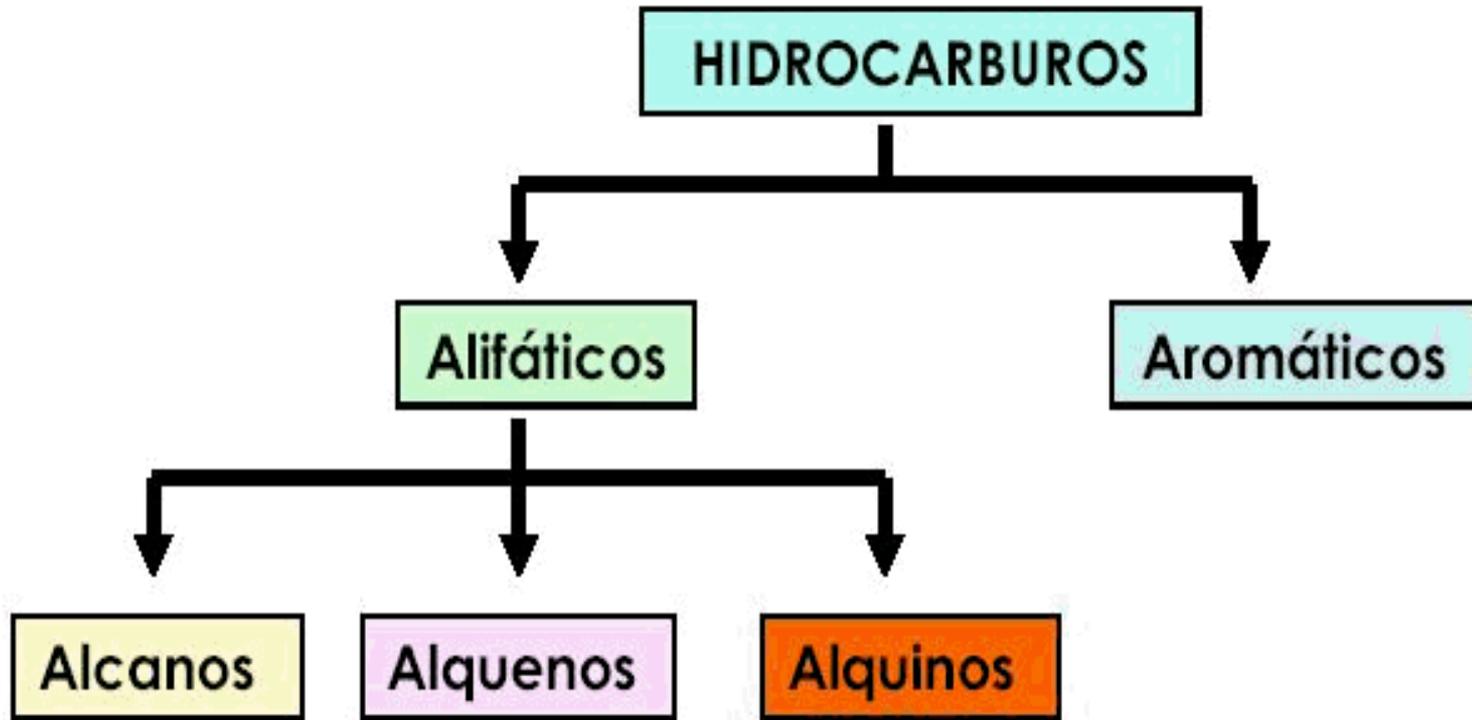
Adición de H₂O Tautomería



Tautomería ceto-enólica

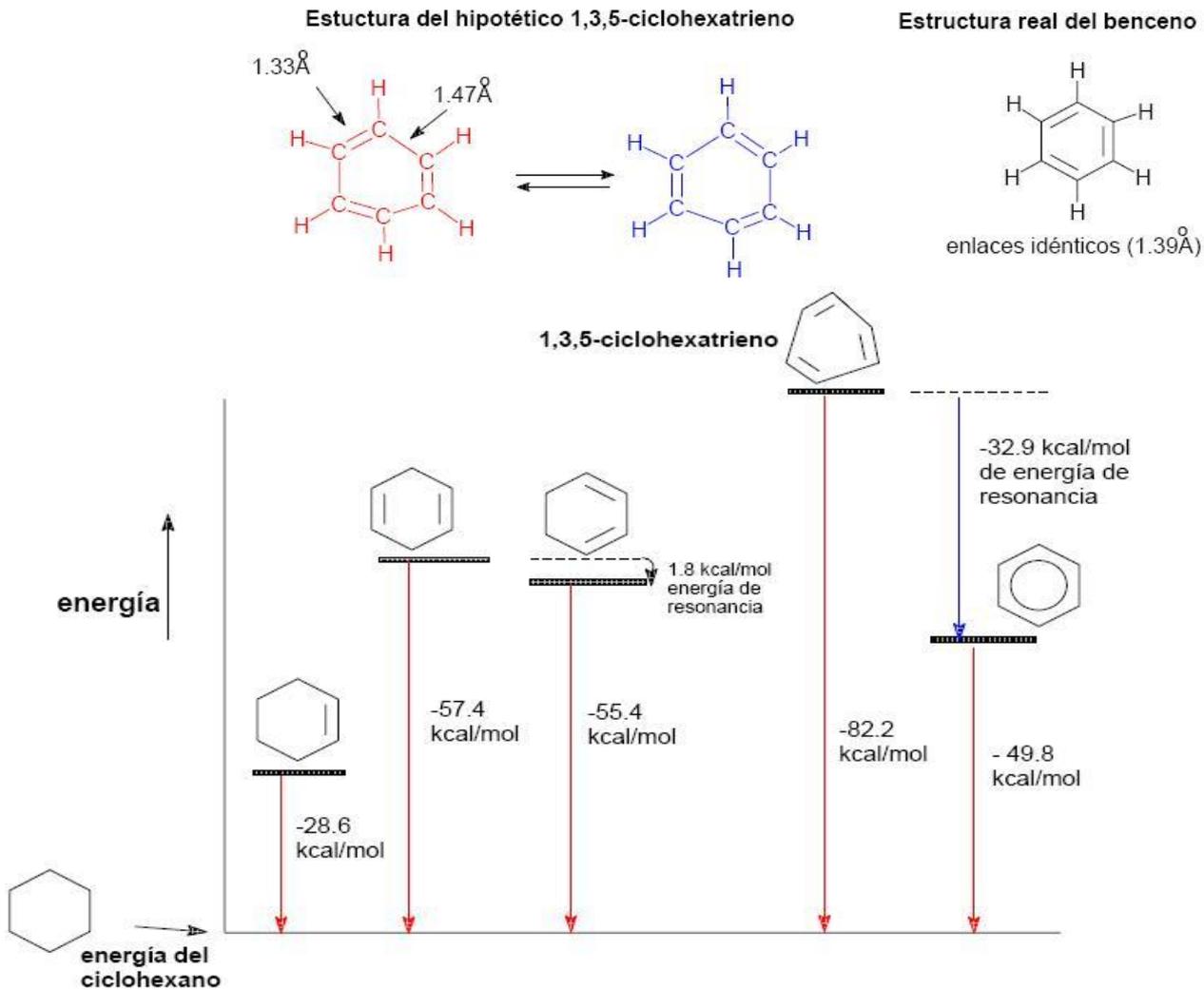


Clasificación de Hidrocarburos.

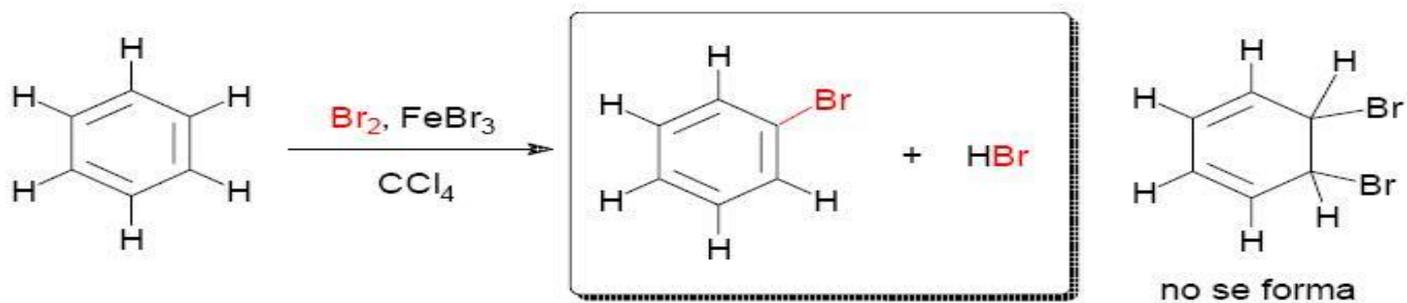
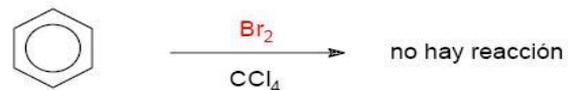
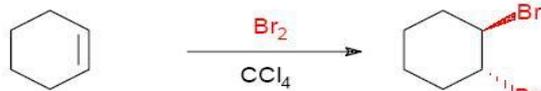
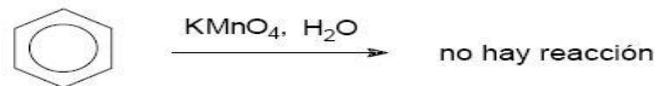
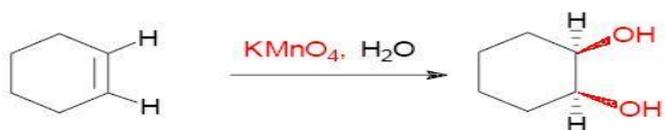


Compuestos Aromáticos - Benceno

C_6H_6 . La cantidad de H presupone una alta insaturación de la molécula.

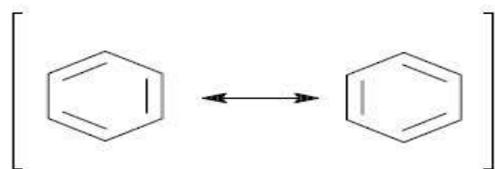


Reactividad

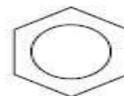


Diferentes representaciones del benceno

Estructura:

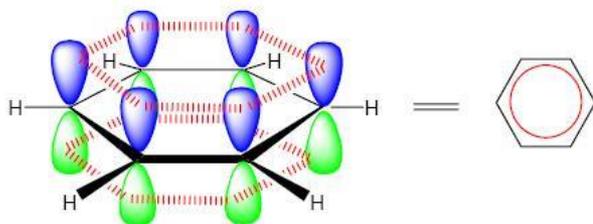


representación de resonancia



orden de enlace = $1 \frac{1}{2}$

Representación de la densidad electrónica π del benceno



Aromaticidad

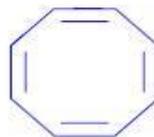
Anulenos: polienos cíclicos con enlaces simples y dobles alternados. Por ejemplo, el benceno es el anuleno de seis miembros y por tanto se le puede llamar [6]anuleno. El ciclobutadieno es el [4]anuleno, el ciclooctatetraeno es el [8]anuleno y el ciclopentaeno es el el [10]anuleno.



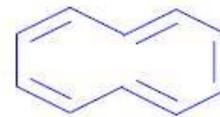
ciclobutadieno
[4]anuleno



benceno
[6]anuleno

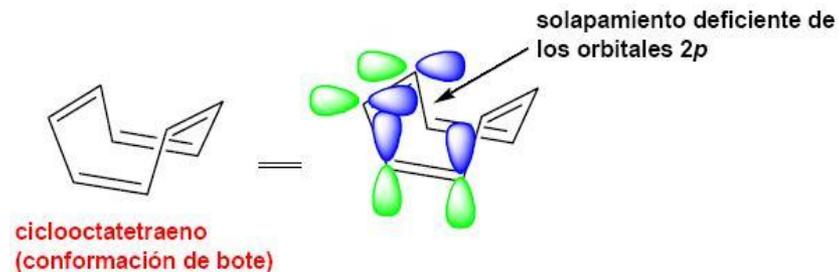


ciclooctatetraeno
[8]anuleno



ciclodcapentaeno
[10]anuleno

El ciclooctatetraeno ([8]anuleno), por ejemplo, no presenta la química típica de los compuestos aromáticos. El bromo se decolora fácilmente en contacto con este compuesto y el permanganato oxida sus dobles enlaces. El ciclooctatetraeno no es plano. Su conformación más estable es de bote lo que provoca un deficiente solapamiento entre los orbitales 2p adyacentes.

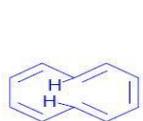


Condiciones de Aromaticidad

No todos los anulenos son compuestos aromáticos. Para que un compuesto sea aromático, y por tanto posea una elevada estabilidad termodinámica y una reactividad química diferente de la de los alquenos y polienos conjugados, debe cumplir las siguientes condiciones:

- 1) Su estructura debe ser cíclica y debe contener enlaces dobles conjugados.
- 2) Cada átomo de carbono del anillo debe presentar hidridación sp^2 , u ocasionalmente sp , con al menos un orbital p no hidridizado.
- 3) Los orbitales p deben solaparse para formar un anillo continuo de orbitales paralelos. La estructura debe ser plana o casi plana para que el solapamiento de los orbitales p sea efectivo.
- 4) Además debe cumplir la **regla de Hückel** cuyo enunciado es el siguiente:

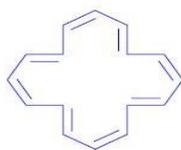
Para que un compuesto sea aromático el número de electrones pi en el sistema cíclico tiene que ser $4n+2$, siendo n un número entero.



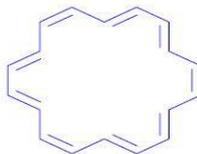
[10]anuleno
(no aromático)



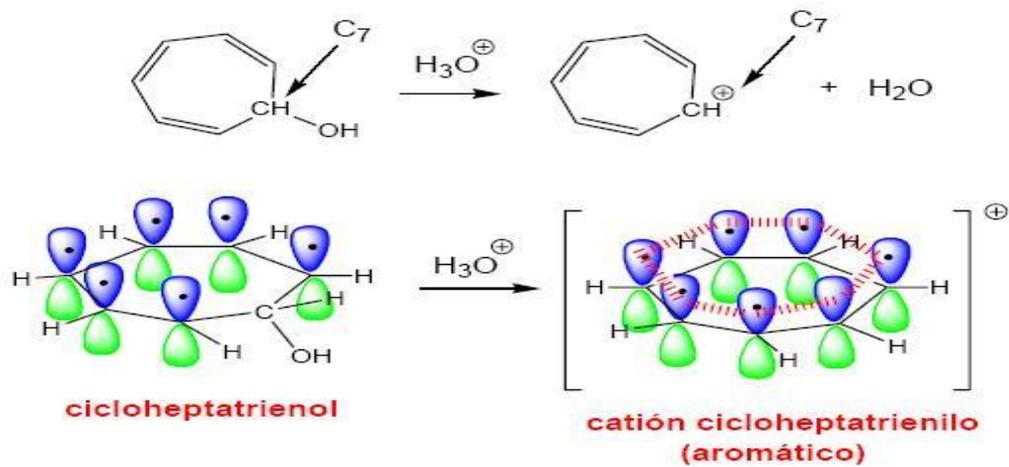
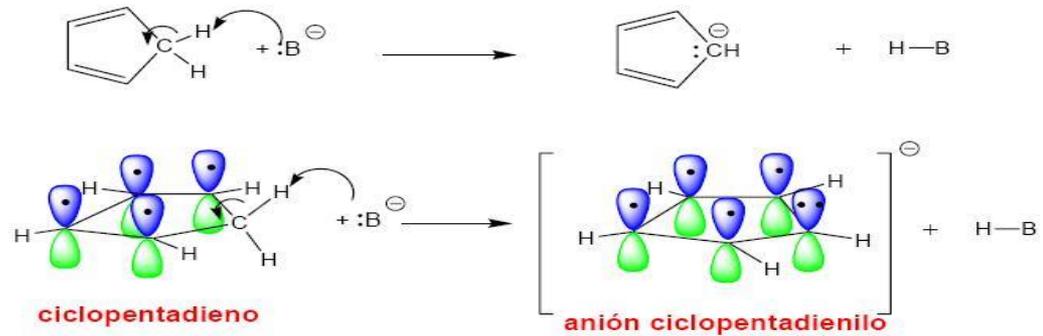
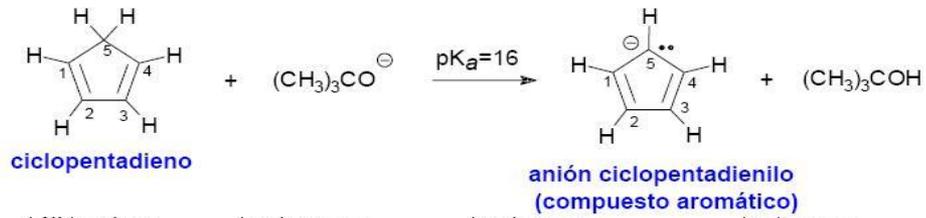
[14]anuleno
(aromático)



[16]anuleno
(no aromático)



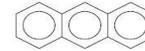
[18]anuleno
(aromático)



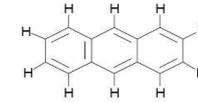
Anillos condensados



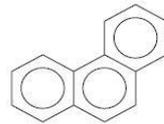
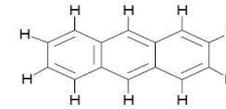
naftaleno



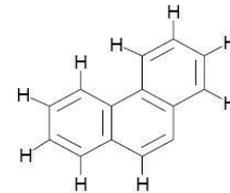
antraceno



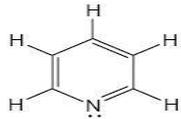
naftaleno: estructuras resonantes de Kekulé



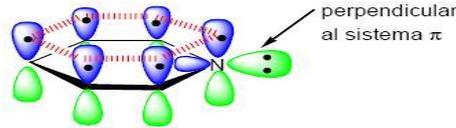
fenantreno



Compuestos heterocíclicos aromáticos



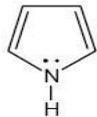
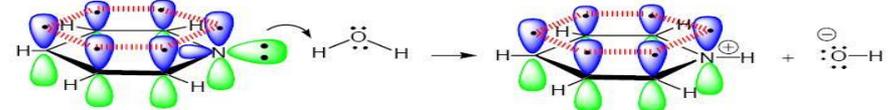
piridina



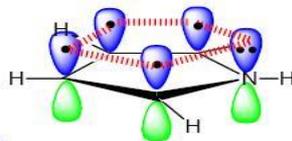
piridina



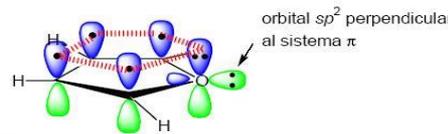
cation piridinio



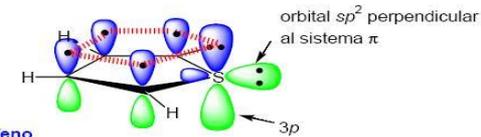
pirrol



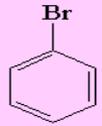
furano



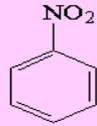
tiofeno



Nomenclatura



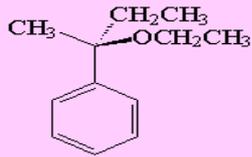
Bromobenceno



Nitrobenceno



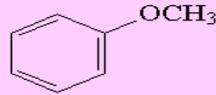
tert-Butilbenceno



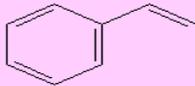
(S)-2-Etoxi-2-fenilbutano



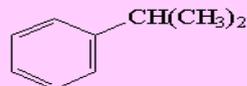
Fenol



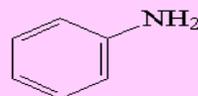
Metoxibenceno (Anisol)



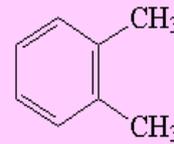
Etenilbenceno
Vinilbenceno
(Estireno)



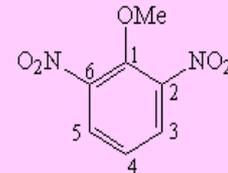
Isopropilbenceno
(Cumeno)



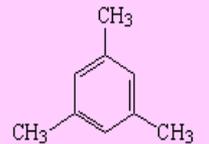
Anilina



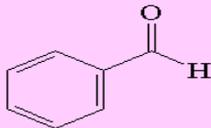
orto-dimetilbenceno
(orto-Xileno)



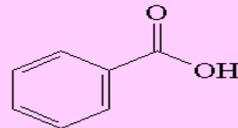
2,6-Dinitrometoxibenceno
(2,6-Dinitroanisol)



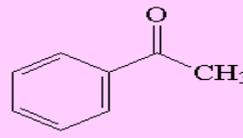
1,3,5-Trimetilbenceno
(Mestileno)



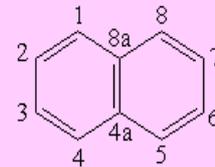
Benzaldehído



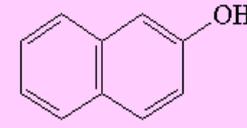
Ácido benzoico



Fenil metil cetona
(Acetofenona)



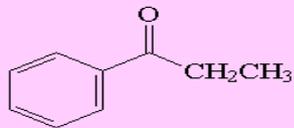
Nafatleno



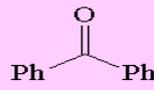
2-Naftol
β-Naftol



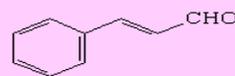
Antraceno



Etil fenil cetona
(Propiofenona)



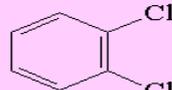
Difenilcetona
(Benzofenona)



3-fenilpropenal
(Aldehído cinámico)



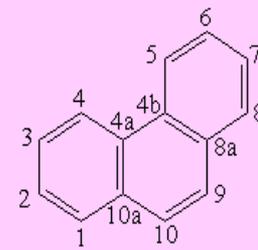
Ácido 3-fenilpropenoico
(Ácido cinámico)



orto-Diclorobenceno

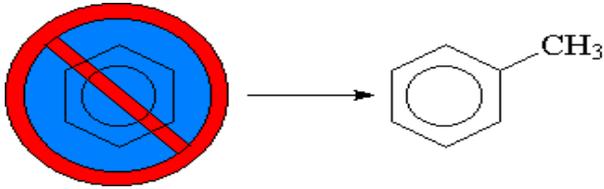


meta-Bromonitrobenceno



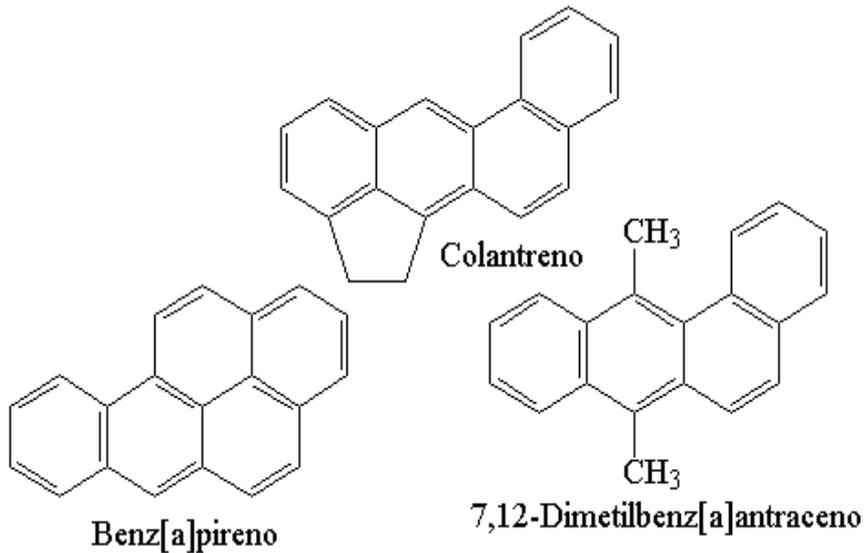
Fenantreno

Propiedades fisiológicas



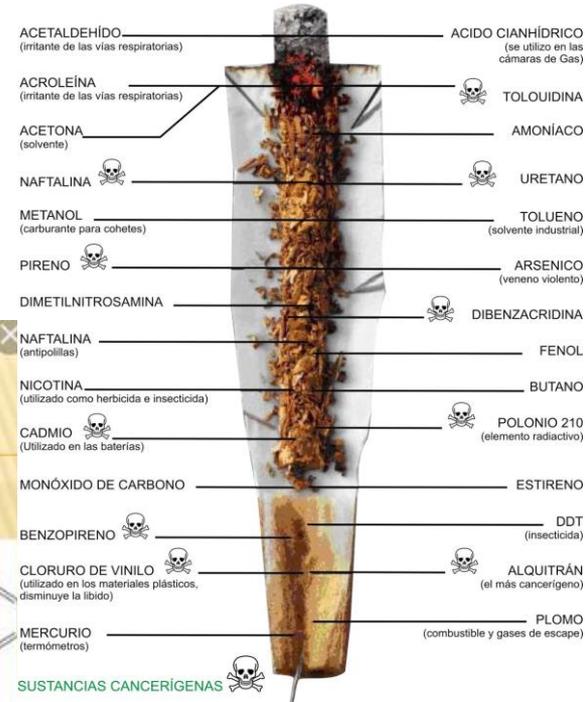
El benceno es un compuesto con demostradas propiedades carcinogénicas. Las normas internacionales son muy estrictas y sólo permiten un contenido a nivel de la ppb en la atmósfera.

La combustión de materia orgánica (gasolinas, incendios forestales, tabaco, carnes a la brasa) produce hidrocarburos aromáticos policíclicos que son demostrados carcinógenos .





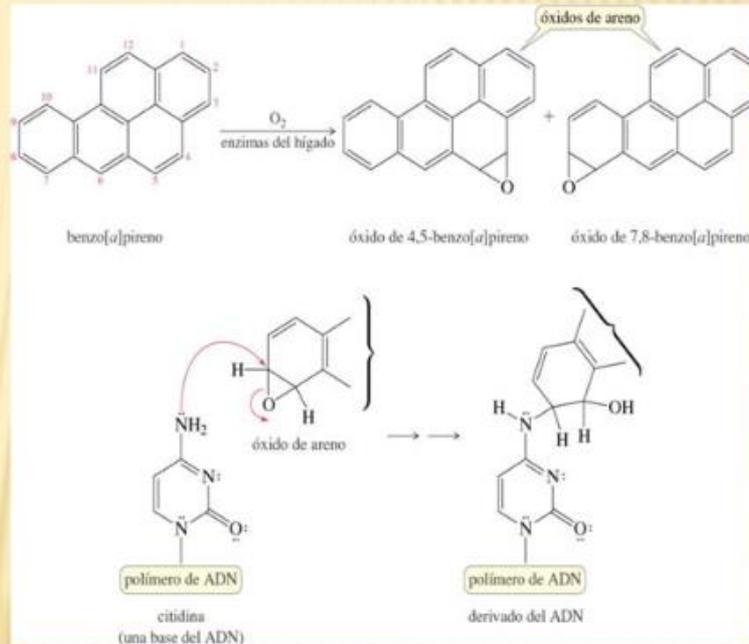
AUTOPSIA DE UN ASESINO



EFEECTO CANCERÍGENO DEL BENZO[A]PIRENO.

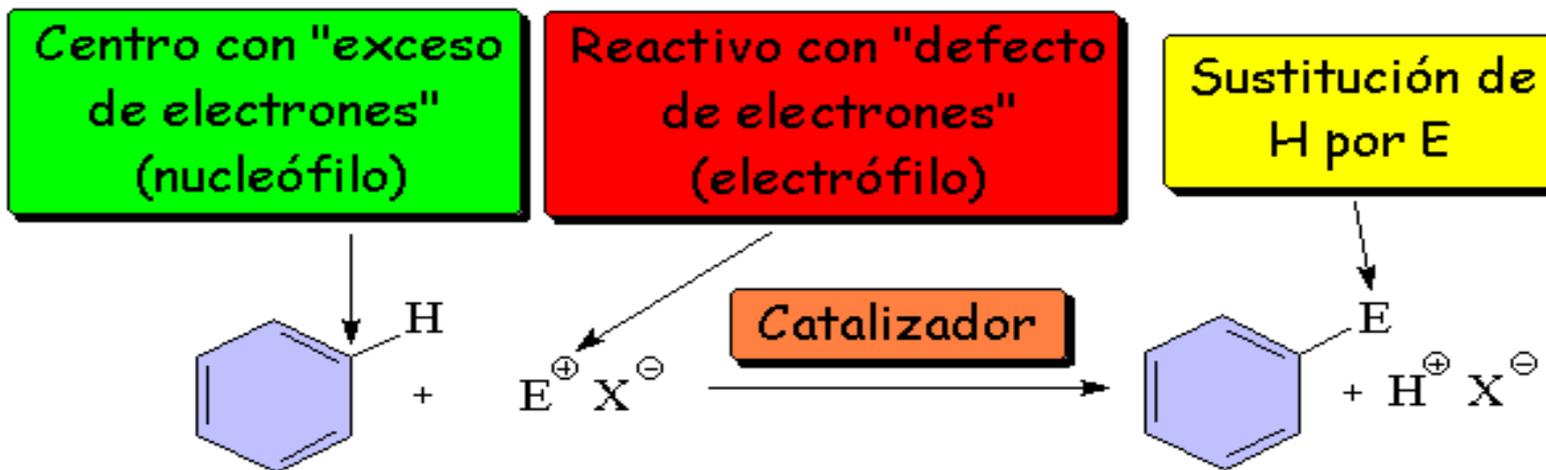
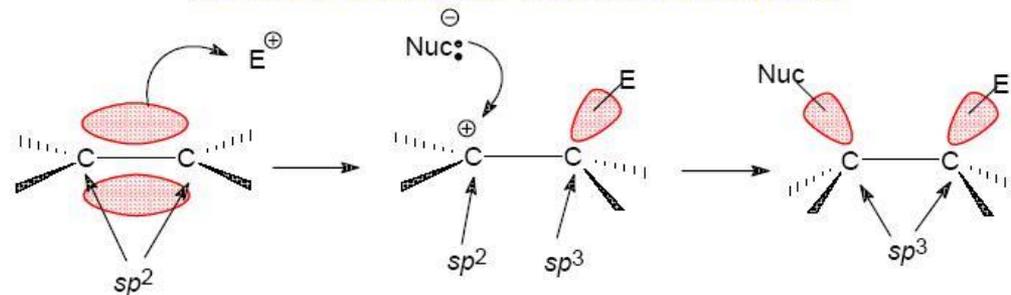
El benzo[a]pireno, uno de los carcinógenos más estudiados, se forma cuando los compuestos orgánicos experimentan una combustión incompleta.

Sus efectos cancerígenos se deben a su epoxidación a óxidos de areno, los cuales pueden ser atacados por las bases nucleofílicas del ADN. Las cadenas de ADN modificadas no pueden transcribirse de forma adecuada y en la replicación producen mutaciones.



Propiedades Químicas

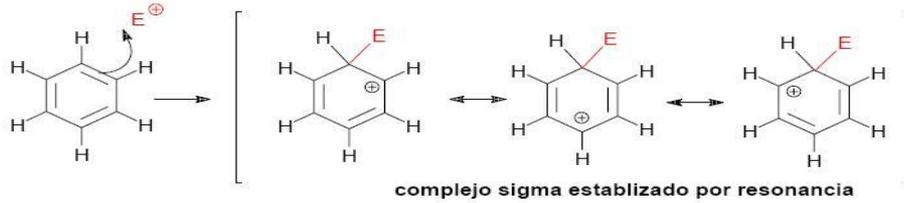
Mecanismo de la adición electrofílica a un alqueno



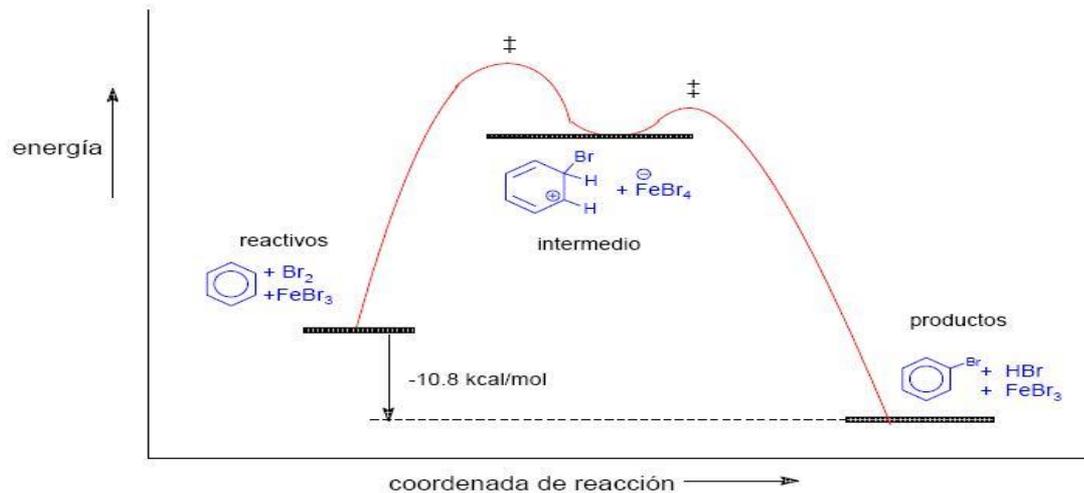
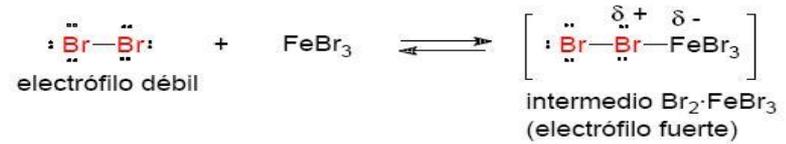
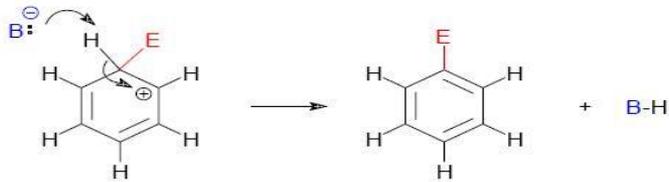
Mecanismo de la Sustitución Electrófila Aromática (SEAr)

Mecanismo de la Sustitución Electrófila Aromática

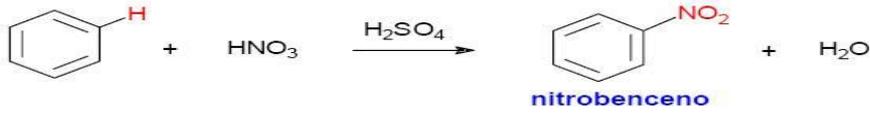
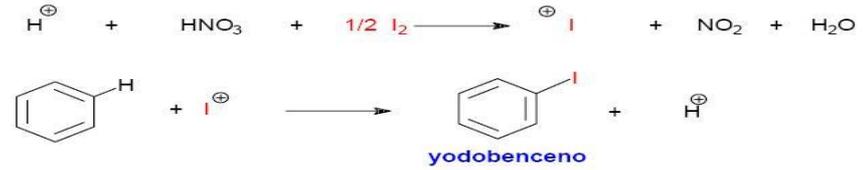
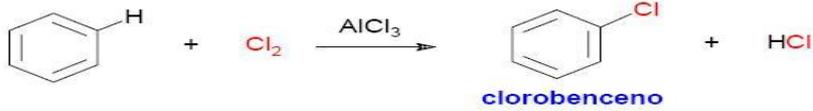
1º. Adición del electrófilo al anillo aromático



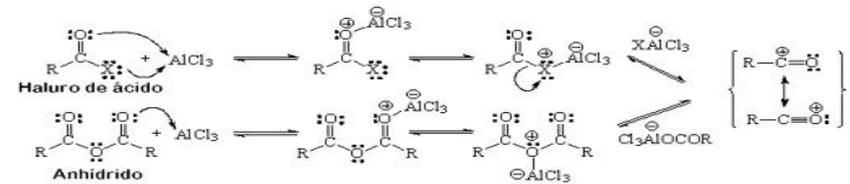
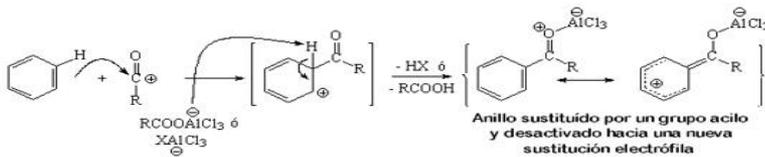
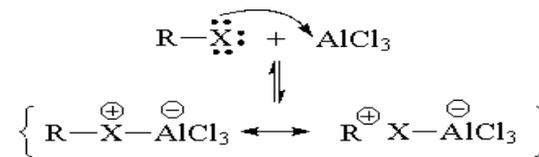
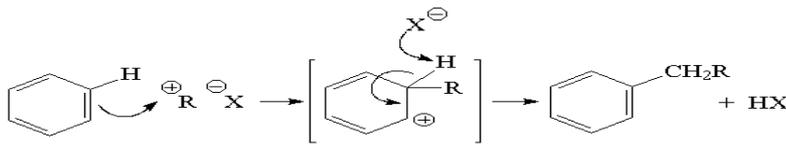
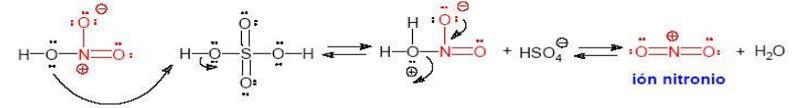
2º. Pérdida de protón en el complejo sigma y recuperación de la aromaticidad



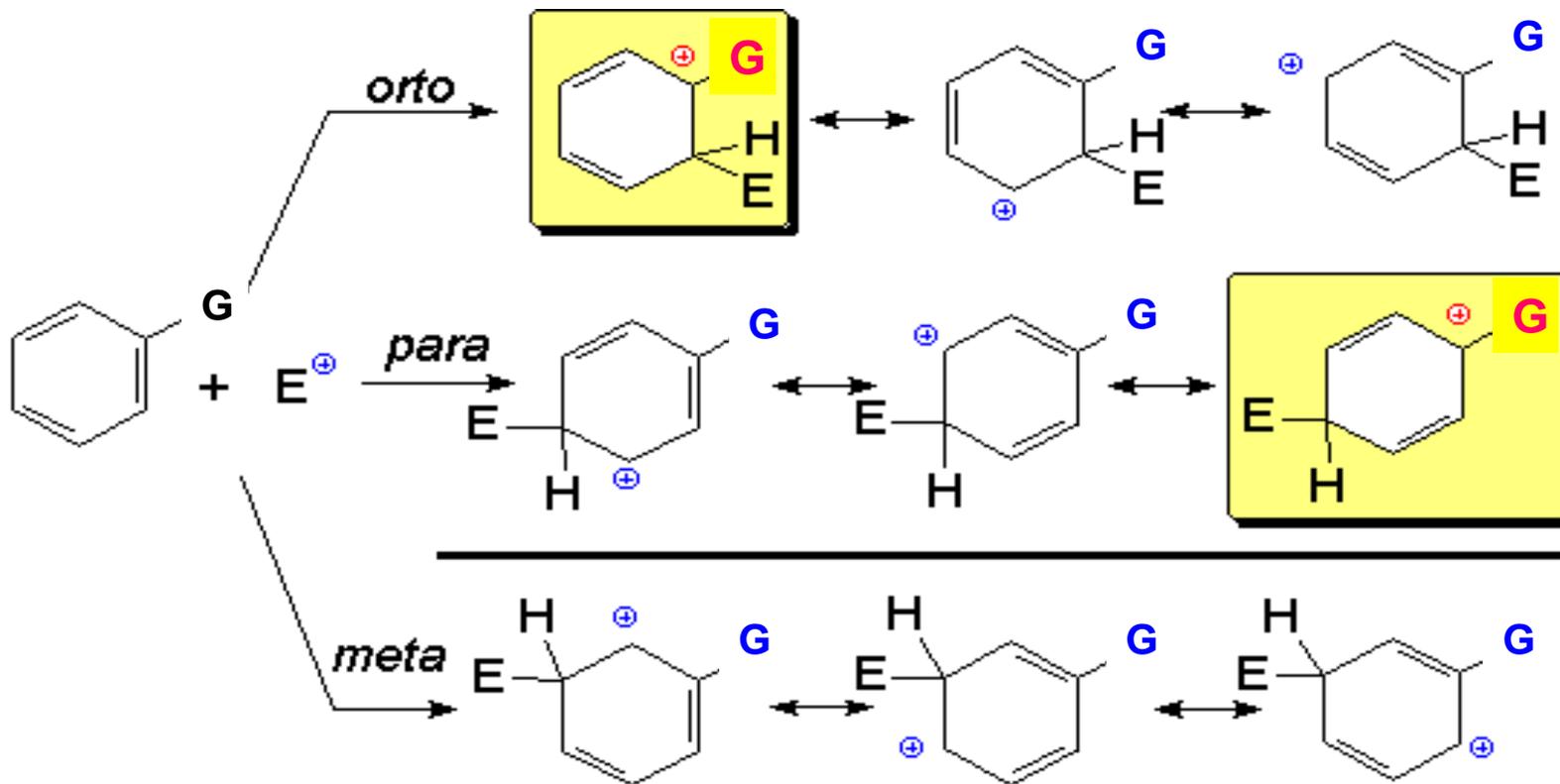
Ejemplos de algunas reacciones SEAr



1º. Generación del ión nitronio



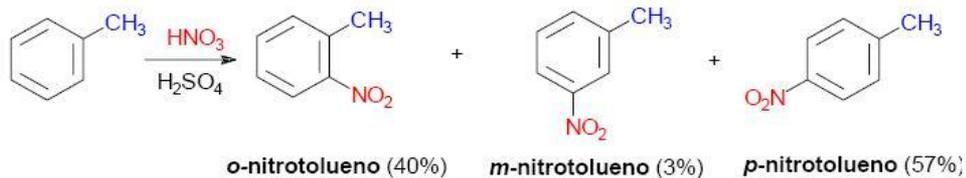
Reacciones en anillos sustituidos.



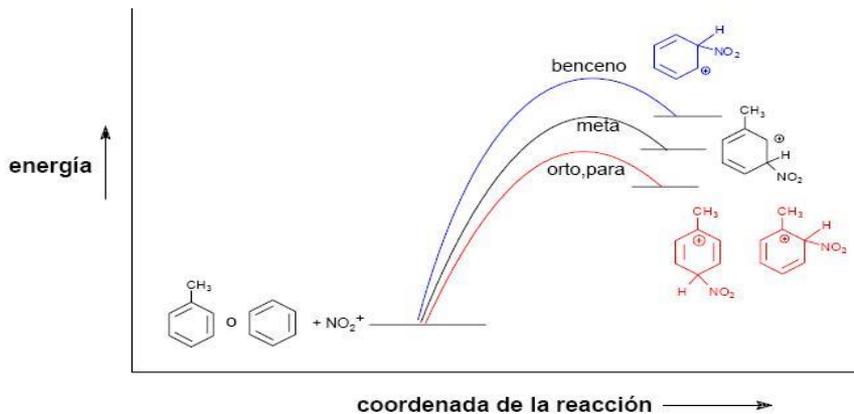
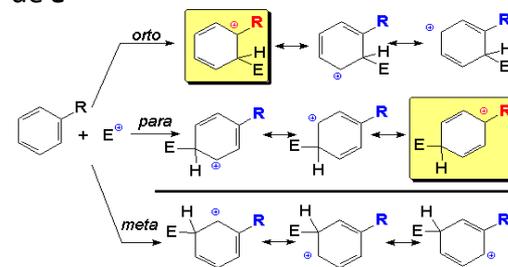
G {
 Grupo dador de e^-
 Grupo atractor de e^-

Reacciones en anillos sustituidos.

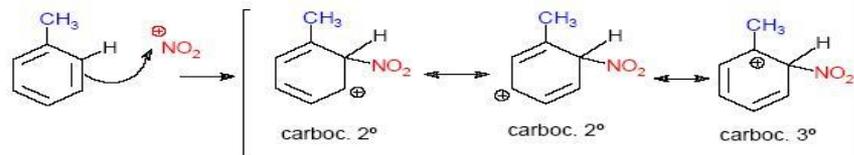
Nitración del tolueno



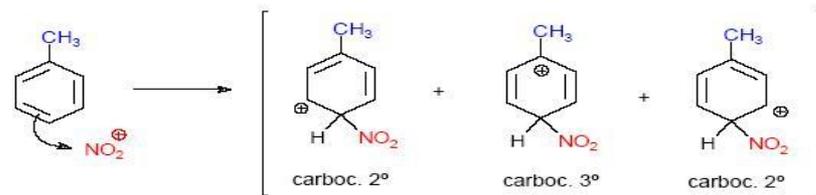
Grupo dador de e



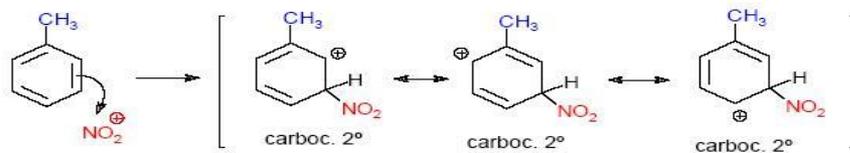
Ataque orto en la nitración del tolueno



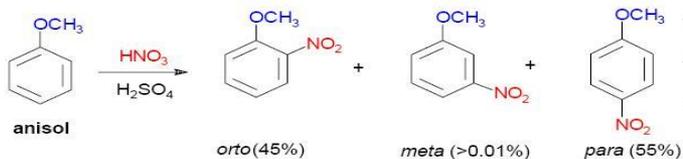
Ataque para en la nitración del tolueno



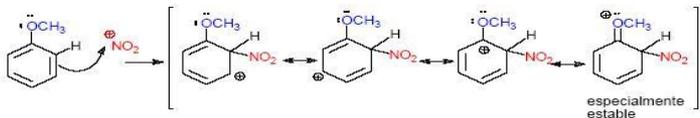
Ataque meta en la nitración del tolueno



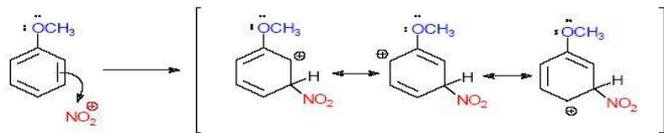
Reacciones en anillos sustituidos.



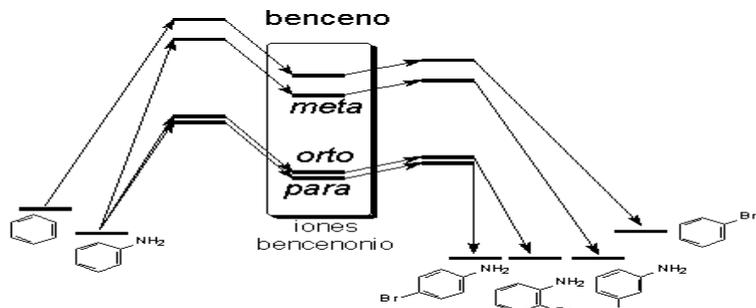
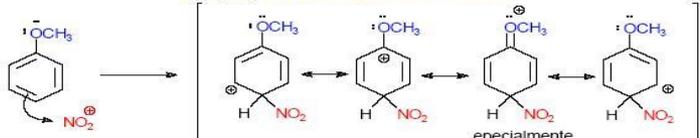
ataque orto en la nitración del anisole



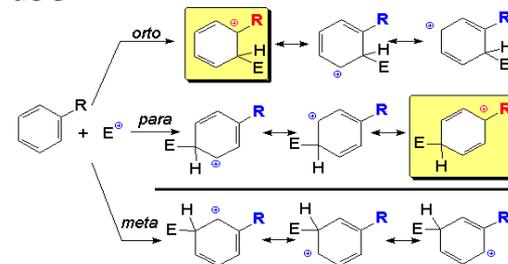
ataque meta en la nitración del anisole



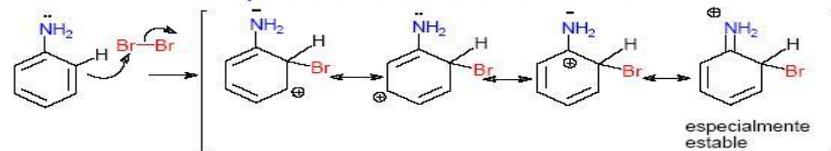
ataque para en la nitración del anisole



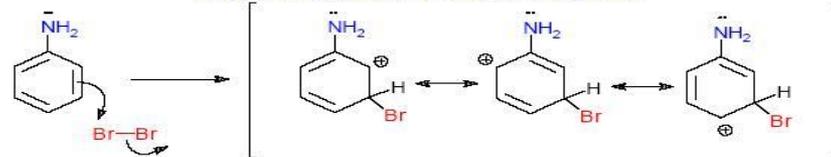
Grupo dador de e



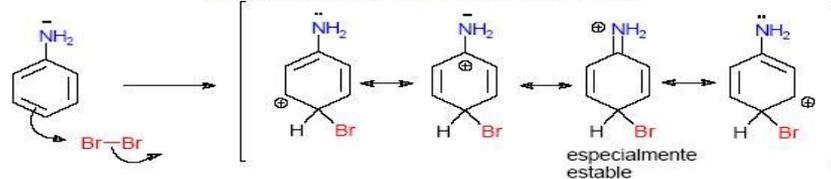
ataque orto en la bromación de la anilina



ataque meta en la bromación de la anilina

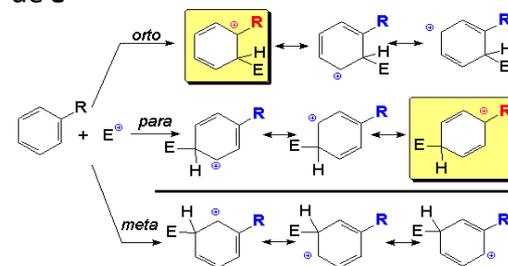


ataque para en la bromación de la anilina



Reacciones en anillos sustituidos.

Grupo dador de e^-

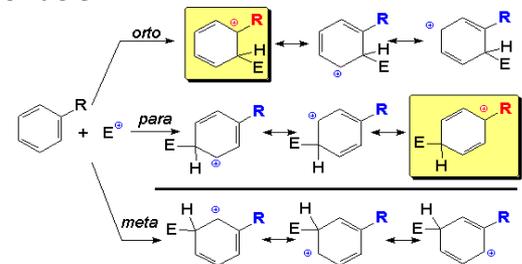
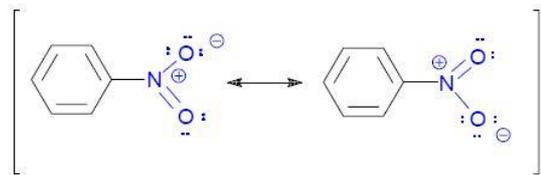
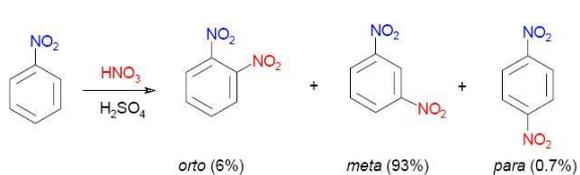


Grupos activantes y dirigentes *orto-para*

$\text{—}\ddot{\text{O}}\ominus$	$\text{—}\overset{\text{R}}{\text{N}}\text{—R}$	$\text{—}\ddot{\text{O}}\text{—H}$	$\text{—}\ddot{\text{O}}\text{—R}$	$\text{—}\overset{\text{H}}{\text{N}}\text{—}\overset{\text{O}}{\text{C}}\text{—R}$	—R
fenóxidos	anilinas	fenoles	éteres de fenilo	anilidas	alquilbencenos

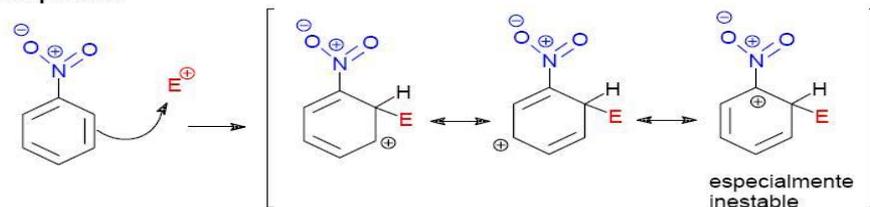
Reacciones en anillos sustituidos.

Grupo atractor de δ

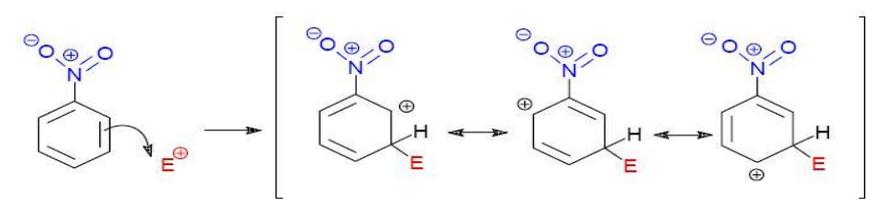


Estructuras resonantes en la reacción $\text{S}_{\text{E}}\text{Ar}$ del nitrobenzeno

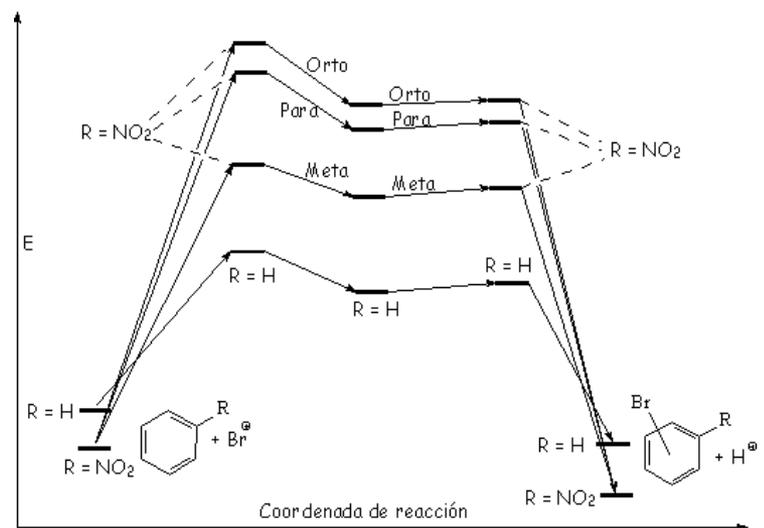
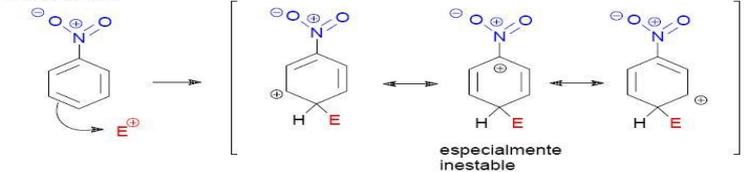
ataque orto



ataque meta

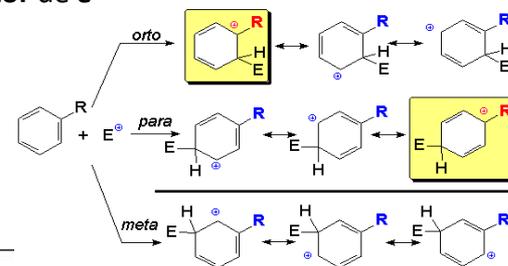


ataque para



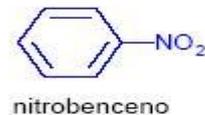
Reacciones en anillos sustituidos.

Grupo atractor de ϵ

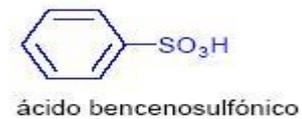
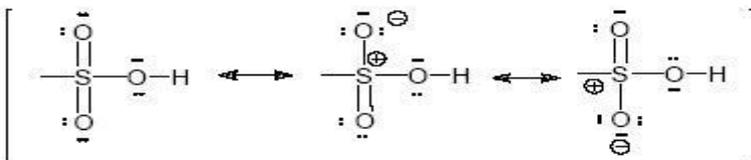


Grupos desactivantes y *meta* dirigentes

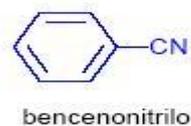
$-\text{NO}_2$
nitro



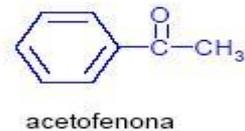
$-\text{SO}_3\text{H}$
ácido sulfónico



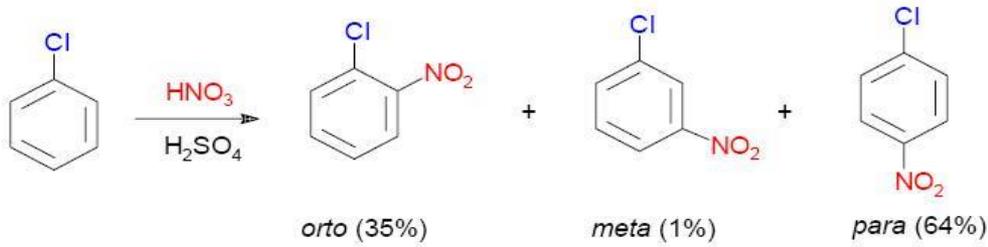
$-\text{C}\equiv\text{N}$
ciano



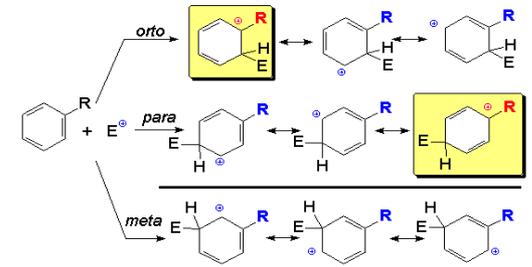
$\text{C}=\text{O}$
aldehído o cetona



¿Que ocurre con los halógenos?

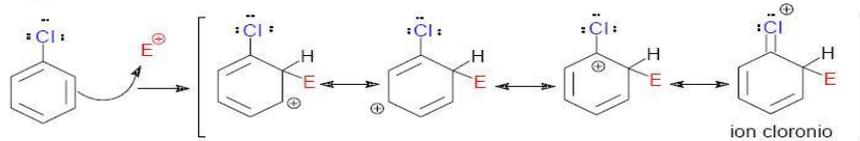


Grupo atractor de δ^-

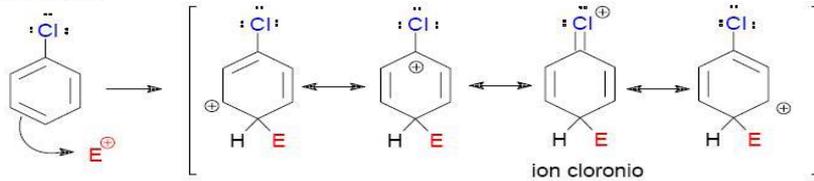


Estructuras resonantes para la reacción S_EAr del clorobenceno

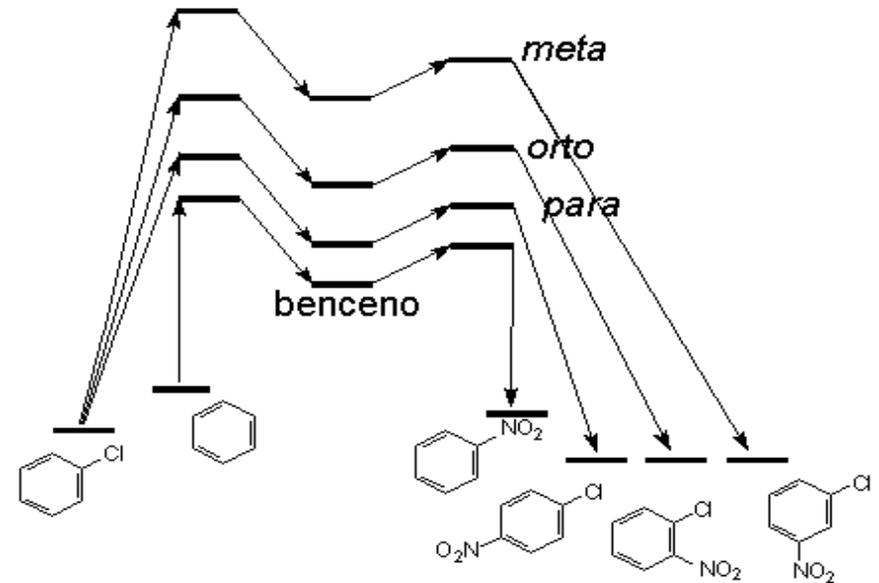
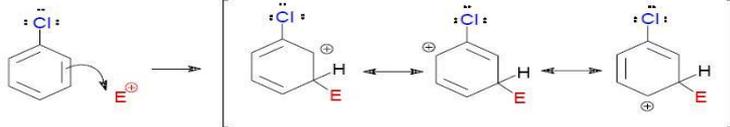
ataque *orto*



ataque *para*



ataque *meta*



Los halógenos son sustituyentes **desactivantes** y orientadores **orto, para**