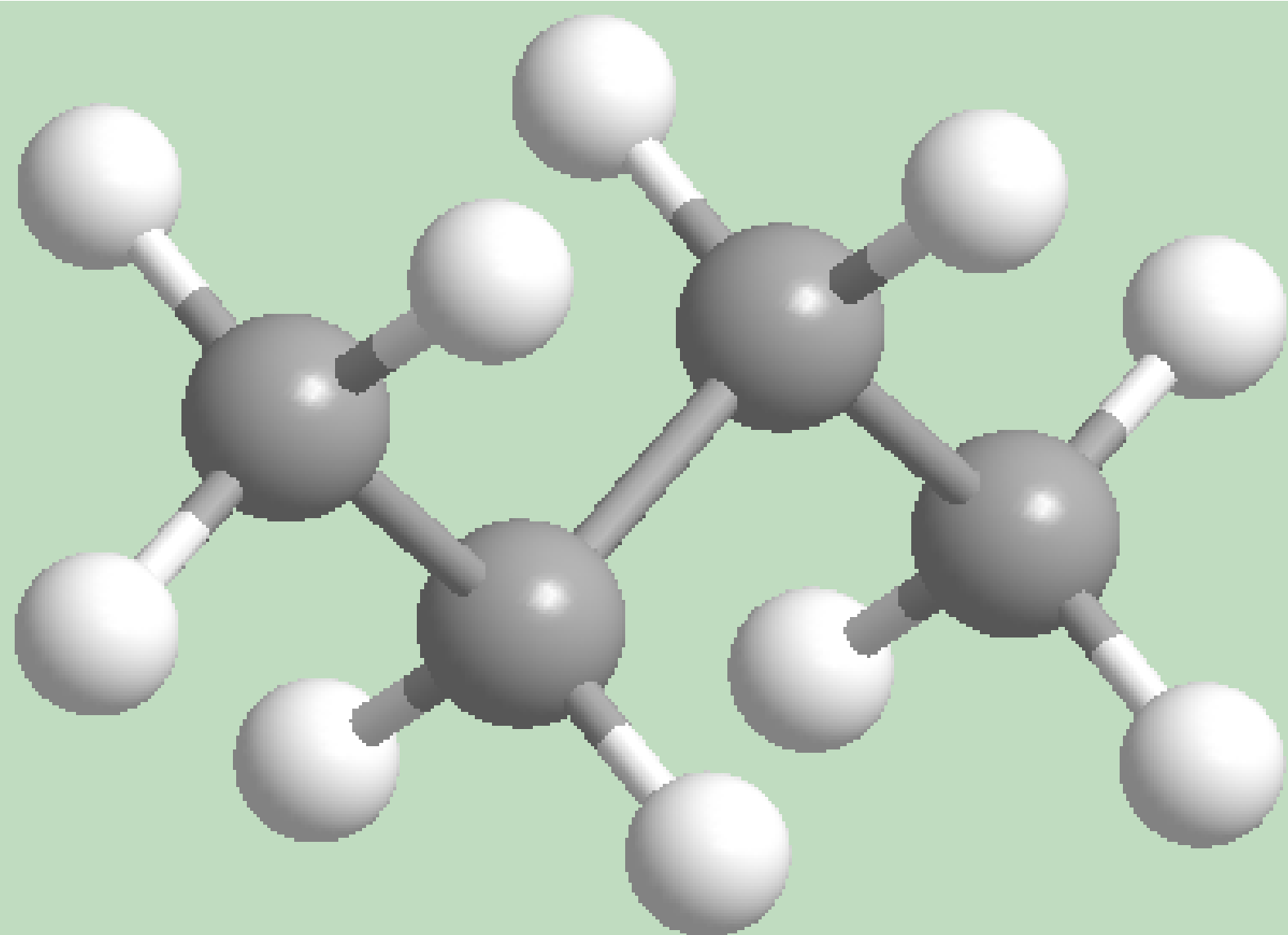


ALCANOS

Propiedades, síntesis y Reactividad



Germán Fernández

Academia Minas

Centro Universitario

Calle Uría 43-1º Oviedo

Tel. 985 24 12 67 - 985 24 59 06.

En Oviedo, desde 1961

Los derechos de copia, reproducción y modificación de este documento son propiedad de Germán Fernández. El presente documento se almacena y distribuye a través de las webs:

<http://www.rincondelgrado.com>

<http://www.quimicaorganica.net>

<http://www.quimicaorganica.org>



Solo está permitida la distribución de este material desde los servidores indicados. La descarga de este libro electrónico es totalmente gratuita, estando prohibido cualquier beneficio económico durante su distribución.



Este libro electrónico se distribuye de forma **gratuita**, como material de apoyo en los cursos de química orgánica, impartidos por Academia Minas de Oviedo, tanto en forma presencial como Online.



Puedes consultar todas las dudas que surjan en el estudio de este material en los foros:

<http://www.quimicaorganica.org/foro.html>

<http://www.rincondelgrado.com/node/173>

<http://www.quimicaorganica.net/forum>



Academia Minas emplea la tecnología de Adobe, Acrobat Connect, para impartir cursos en línea.

<http://www.rincondelgrado.com/node/179>

<http://www.quimicaorganica.org/cursos-online/index.php>

<http://www.quimicaorganica.net/cursos-online.html>



Aprovecho la ocasión para enviarte un saludo, deseando que este material sea de interés y ayude a preparar de modo más eficaz la asignatura.

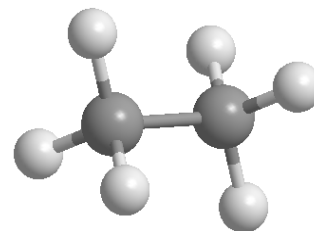
En Oviedo, a 23 de Julio de 2011

Germán Fernández

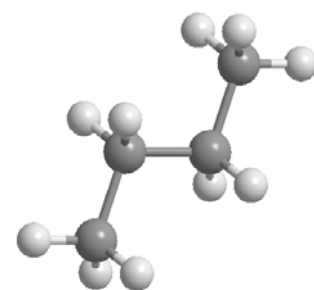
CONTENIDOS

1. INTRODUCCIÓN
2. TIPOS DE ALCANOS
3. PROPIEDADES FÍSICAS DE LOS ALCANOS
4. NOMENCLATURA DE ALCANOS
5. ISÓMEROS CONFORMACIONALES
6. PROYECCIÓN DE NEWMAN
7. DIAGRAMAS DE ENERGÍA POTENCIAL
8. COMBUSTIÓN DE ALCANOS
9. PROBLEMAS RESUELTOS

Alcanos



Etano



Butano



ALCANOS

1. INTRODUCCIÓN

Tipos de alcanos

Los alcanos son hidrocarburos (formados por carbono e hidrógeno) que solo contienen enlaces simples carbono-carbono. Se clasifican en lineales, ramificados, cíclicos y policíclicos.

Nomenclatura de alcanos

Los alcanos se nombran terminando en -ano el prefijo que indica el número de carbonos de la molécula (metano, etano, propano...)

Propiedades físicas de los alcanos

Los puntos de fusión y ebullición de alcanos son bajos y aumentan a medida que crece el número de carbonos debido a interacciones entre moléculas por fuerzas de London. Los alcanos lineales tienen puntos de ebullición más elevados que sus isómeros ramificados.

Isómeros conformacionales

Los alcanos no son rígidos debido al giro alrededor del enlace C-C. Se llaman conformaciones a las múltiples formas creadas por estas rotaciones.

Proyección de Newman

La energía de las diferentes conformaciones puede verse en las proyecciones de Newman. Así, en el caso del etano la conformación eclipsada es la de mayor energía, debido a las repulsiones entre hidrógenos.

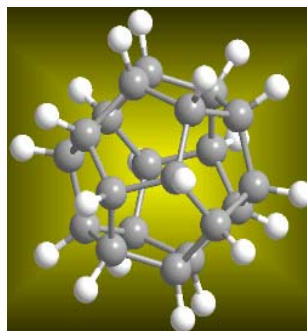
Diagramas de energía potencial

Las diferentes conformaciones de los alcanos se puede representar en un diagrama de energía potencial donde podemos ver que conformación es más estable (mínima energía) y la energía necesaria para pasar de unas conformaciones a otras.

Combustión de alcanos

Dada su escasa reactividad los alcanos también se denominan parafinas. Las reacciones más importantes de este grupo de compuestos son las halogenaciones radicalarias y la combustión. La combustión es la combinación del hidrocarburo con oxígeno, para formar dióxido de carbono y agua.

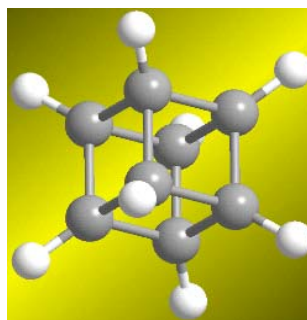
Dodecaedrano



Modelo molecular del Dodecaedrano

La síntesis total del dodecaedrano fue realizada en 1983 por Leo A. Paquette, Robert J. Ternansky, Douglas W. Balogh y Gary Kentgen

Cubano



Modelo molecular del cubano

Sólido cristalino sintetizado en 1964 por el profesor Philip Eaton de la Universidad de Chicago



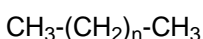
2. TIPOS DE ALCANOS

Alcanos lineales y ramificados

Los alcanos son hidrocarburos que sólo contienen enlaces sencillos. Se clasifican en alcanos lineales, ramificados, cíclicos y policíclicos.

Serie homóloga

Los alcanos lineales forman una serie homóloga ya que sólo difieren en el número de $-\text{CH}_2-$ y pueden obtenerse a partir de una fórmula general:



Isómeros

Se llaman isómeros a compuestos que tienen la misma fórmula molecular pero diferente estructura. El butano y el 2-metilpropano son isómeros de fórmula C_4H_{10} .

3. PROPIEDADES FÍSICAS DE LOS ALCANOS

Interacción por fuerzas de London

En los alcanos, los puntos de fusión aumentan al aumentar el tamaño molecular, a mayor superficie se produce una mayor atracción debido a las fuerzas de London.

Puntos de ebullición en alcanos

Los puntos de ebullición también aumentan con el peso molecular, cuanto más pesada es una molécula más energía requiere para pasar del estado líquido al gaseoso.

Alcanos lineales y ramificados

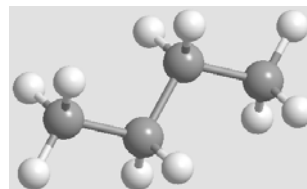
Los alcanos ramificados poseen superficies más pequeñas que sus isómeros lineales, por lo que las fuerzas atractivas son menores, dando lugar a puntos de fusión y ebullición más bajos.

Solubilidad en agua

Los alcanos son insolubles en agua dada su casi nula polaridad. Sus densidades se sitúan entre 0.6 y 0.8 g/ml por lo que flotan en el agua.

Alcanos lineales

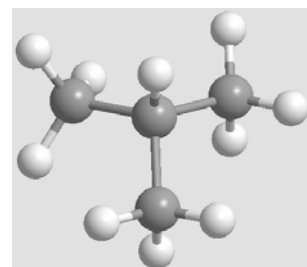
Los alcanos lineales presentan una cadena carbonada sin ramificaciones. Son alcanos lineales el etano, propano, butano, pentano, hexano, heptano.....



Modelo del Butano

Alcanos ramificados

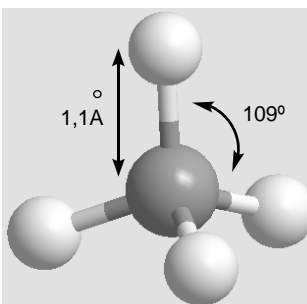
Los alcanos ramificados, están formados por una cadena lineal, de la que parten sustituyentes (ramificaciones)



Modelo del metilpropano

Estructura de los alcanos

Los alcanos presentan carbonos con hibridación sp^3 con ángulos de enlace de 109.5° y distancias de enlace sobre 109 pm.



Modelo molecular del metano



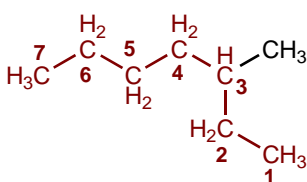
4. NOMENCLATURA DE ALCANOS

Estructura del nombre

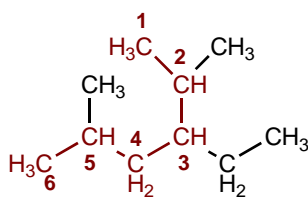
El nombre de un alcano está compuesto de dos partes, un prefijo que indica el número de carbonos de la cadena seguido del sufijo **-ano** que caracteriza este tipo de compuestos, (met-**ano**, et-**ano**, prop-**ano**, but-**ano**).

Elección de la cadena principal

Encontrar y nombrar la cadena más larga de la molécula. Si la molécula tiene dos o más cadenas de igual longitud, la cadena principal será la que tenga el mayor número de sustituyentes.



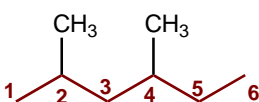
3-Metilheptano



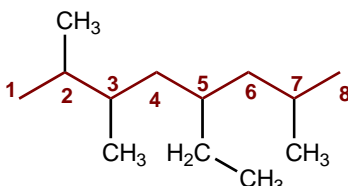
3-Etil-2,5-dimetilhexano

Numeración de la cadena principal

Numerar los carbonos de la cadena más larga comenzando por el extremo más próximo a un sustituyente. Si hay dos sustituyentes a igual distancia de los extremos, se usa el orden alfabético para decidir como numerar.



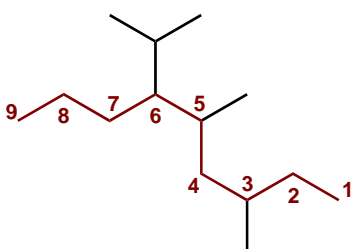
2,4-Dimetilhexano



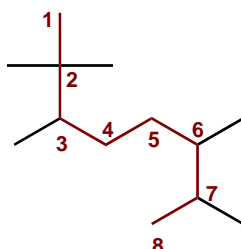
5-Etil-2,3,7-trimetiloctano

Formación del nombre

El nombre del alcano se escribe comenzando por el de los sustituyentes en orden alfabético, con los respectivos localizadores, y a continuación se añade el nombre de la cadena principal. Si una molécula contiene más de un sustituyente del mismo tipo, su nombre irá precedido de los prefijos di, tri, tetra, ect



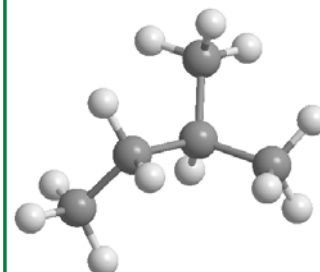
6-Isopropil-3,5-dimetilnonano



2,2,3,6,7-Pentametiloctano

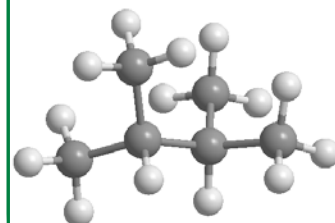
Metilbutano

Molécula con cadena principal de cuatro carbonos que presenta un metilo en la posición 2

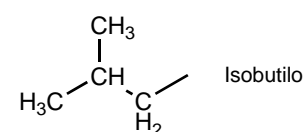
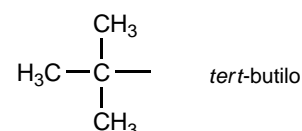
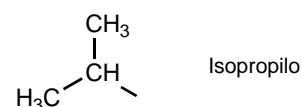


2,3-Dimetilbutano

Molécula con cadena principal de cuatro carbonos y dos sustituyentes (metilos) en posiciones 2,3.



Gupos con nombres comunes



5. ISÓMEROS CONFORMACIONALES

Conformaciones del etano

En el modelo molecular del etano, representado a la derecha, podemos ver que los metilos pueden girar fácilmente uno respecto al otro. La energía necesaria para este giro, es de tan solo 3 kcal/mol. Se puede decir que hay rotación libre alrededor de los enlaces simples.

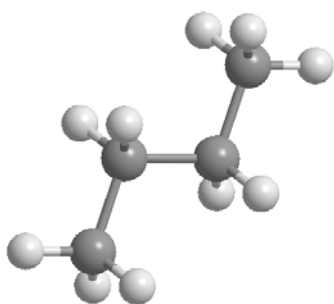
Conformaciones alternada y eclipsada del etano

Hay dos maneras de dibujar la molécula de etano: la conformación alternada y la eclipsada. En la conformación alternada cada átomo de hidrógeno del primer carbono se encuentra situado entre dos átomos de hidrógeno del segundo carbono, lo que evita repulsiones y hace que esta conformación sea de baja energía. En la conformación eclipsada todos los átomos de hidrógeno del primer carbono se hallan enfrentados a los del segundo. La rotación del metilo entorno al enlace C-C, permite el paso de la conformación alternada a la eclipsada y viceversa.

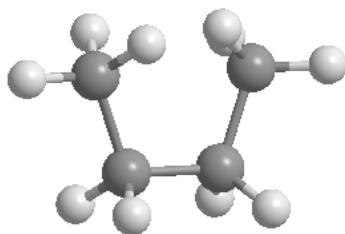
Las múltiples formas del etano creadas por rotación alrededor del enlace C-C son conformaciones y el estudio de las mismas se denomina análisis conformacional.

Isómeros conformacionales del butano

En el butano la rotación alrededor del enlace C₂-C₃ también genera conformaciones alternadas y eclipsadas, entre las que destacan: conformación sin, conformación anti y conformación gauche. En estos modelos moleculares se representan las conformaciones anti, sin y gauche del butano.



Butano ANTI

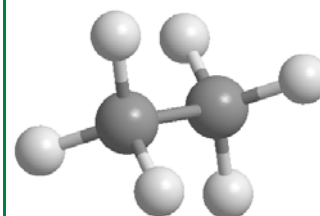


Butano SIN

La conformación anti es la de mayor estabilidad del butano, los grupos metilo están alejados y no interaccionan. La conformación gauchees de menor estabilidad, en ella existe una interacción entre metilos que están situados a 60°, llamada interacción gauche.

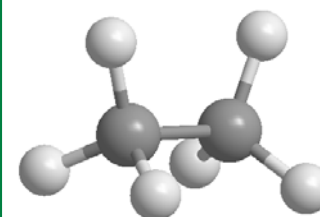
Etano alternado

Es la conformación de menor energía del etano. Evita las repulsiones entre los hidrógenos de carbonos vecinos.

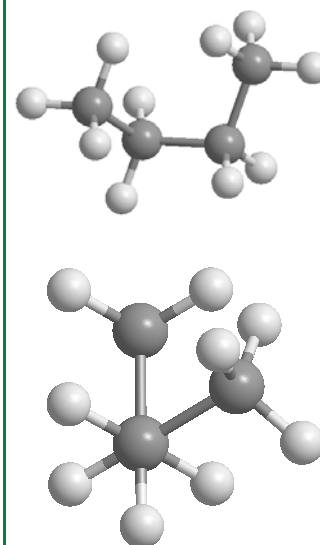


Etano eclipsado

Los hidrógenos se encuentran enfrentados (eclipsados) dando lugar a una conformación de alta energía.



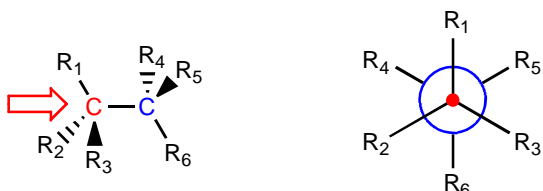
Butano Gauche



6. PROYECCIÓN DE NEWMAN

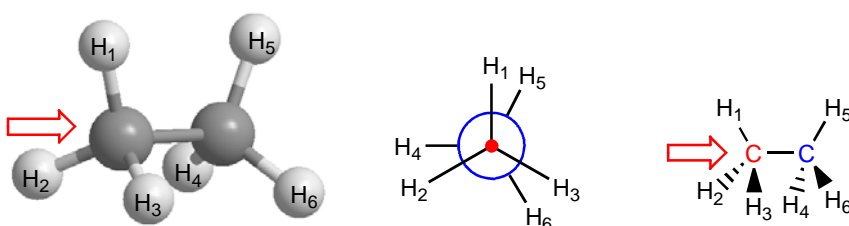
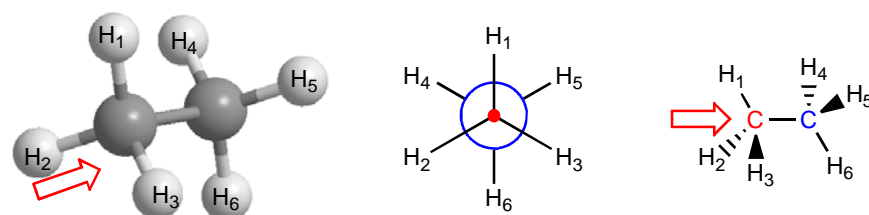
¿Qué es una proyección de Newman?

La proyección de Newman se obtiene al mirar la molécula a lo largo del eje C-C. El carbono frontal se representa por un punto, del que parten los tres enlaces que lo unen a los sustituyentes. El carbono de atrás se representa por un círculo y los enlaces que salen de este carbono se dibujan a partir de este círculo.



Proyección de Newman del etano alternado y eclipsado

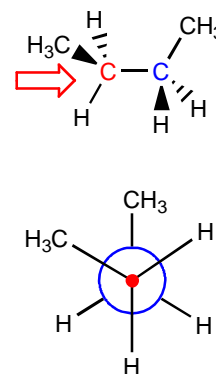
Las conformaciones del etano se pueden representar fácilmente con esta proyección. En el caso de la conformación eclipsada para hacer mas visibles los tres hidrógenos posteriores, éstos se dibujan ligeramente girados respecto a la posición totalmente eclipsada.



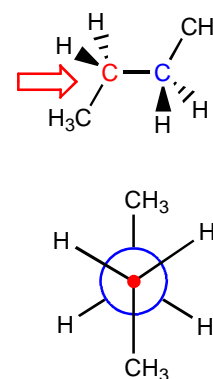
Proyección de Newman para las conformaciones del butano

En la columna derecha se incluyen las conformaciones sin, anti y gauche del butano, con sus respectivas proyecciones de Newman, en las que se pueden observar las interacciones entre grupos metilo. La conformación más estable es la **anti** (no presenta repulsiones metilo-metilo), siendo la conformación **sin** la de mayor inestabilidad (energía elevada) debido al eclipsamiento metilo-metilo.

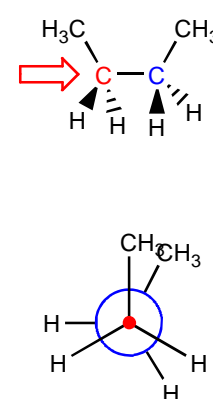
Proyección butano gauche

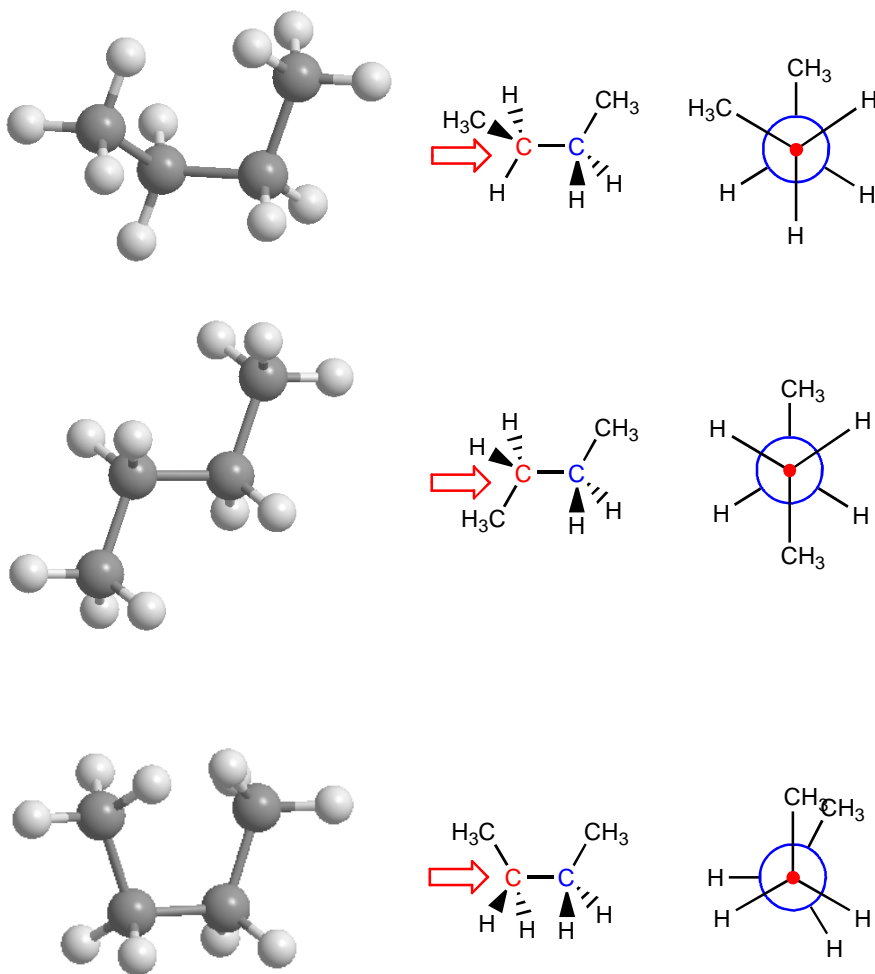
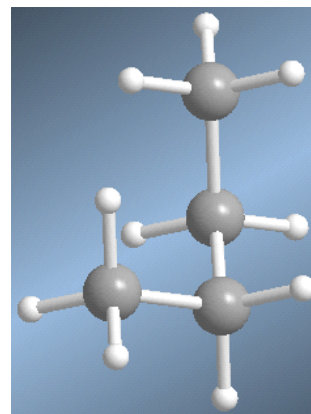


Proyección butano anti

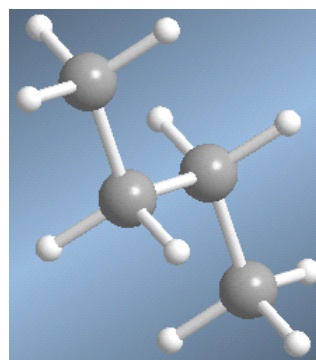


Proyección butano sin

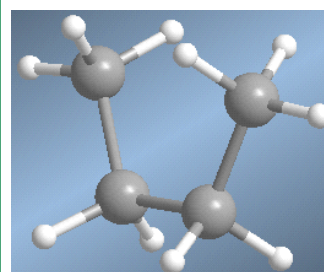


**Butano gauche**

Conformación alternada del Butano que presenta una interacción entre grupos metilo situados a 60°, llamada interacción gauche.

Butano anti

Los metilos están a 180° minimizándose las repulsiones. Es la conformación más estable del butano

Butano sin

Conformación eclipsada del butano que presenta una interacción de eclipse CH₃/CH₃. Es la conformación de más alta energía.

7. DIAGRAMAS DE ENERGÍA POTENCIAL**Diferencia de energía entre conformaciones**

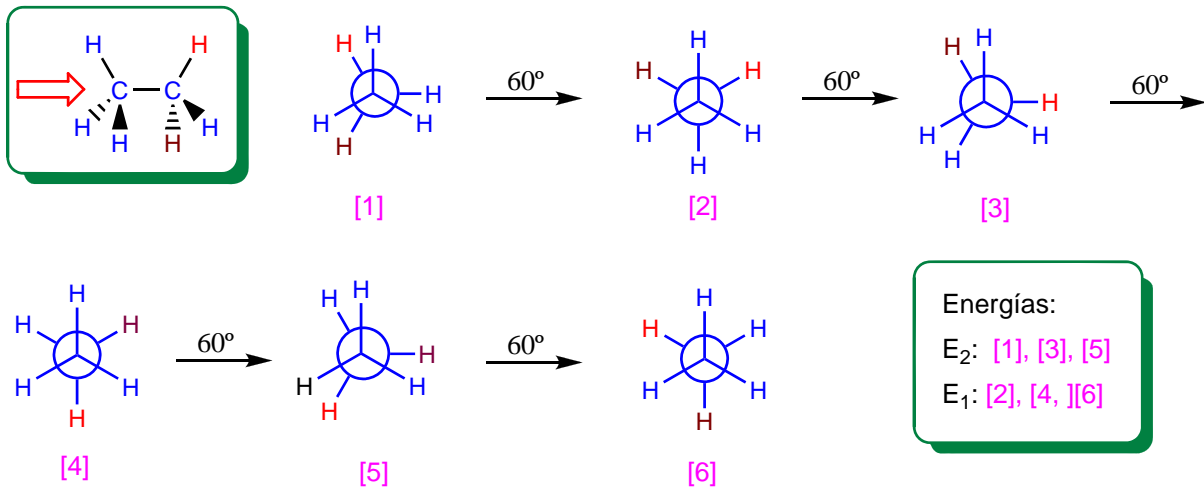
Las diversas conformaciones del etano no tienen la misma energía, esto se debe a la repulsión electrónica entre hidrógenos. Cuando vamos girando la molécula a partir de una conformación alternada, la distancia entre los átomos de hidrógenos de los respectivos grupos metilo empieza a disminuir, produciendo un aumento de la repulsión entre los pares de electrones enlazantes de los enlaces C-H. La energía potencial del sistema aumenta hasta llegar a la conformación eclipsada.

Diagrama de energía potencial del etano

Las diferencias de energía entre las distintas conformaciones pueden verse representando gráficamente la energía de cada conformación frente al ángulo girado. Como puede observarse en el diagrama del etano, las conformaciones eclipsadas son los máximos de energía y las alternadas los mínimos.



Para obtener el diagrama de energía potencial del etano partimos de la conformación eclipsada y vamos realizando giros de 60° hasta recorrer los 360°.



Clasificamos las distintas conformaciones según energía. Las alternadas [1], [3] y [5] tienen la misma energía, que llamaremos E_1 (en el diagrama la tomaremos como cero). Las conformaciones [2], [4] y [6] tienen más energía debido a los eclipsamientos hidrógeno-hidrógeno. Estas conformaciones eclipsadas están unas 12 KJ/mol por encima de las alternadas.

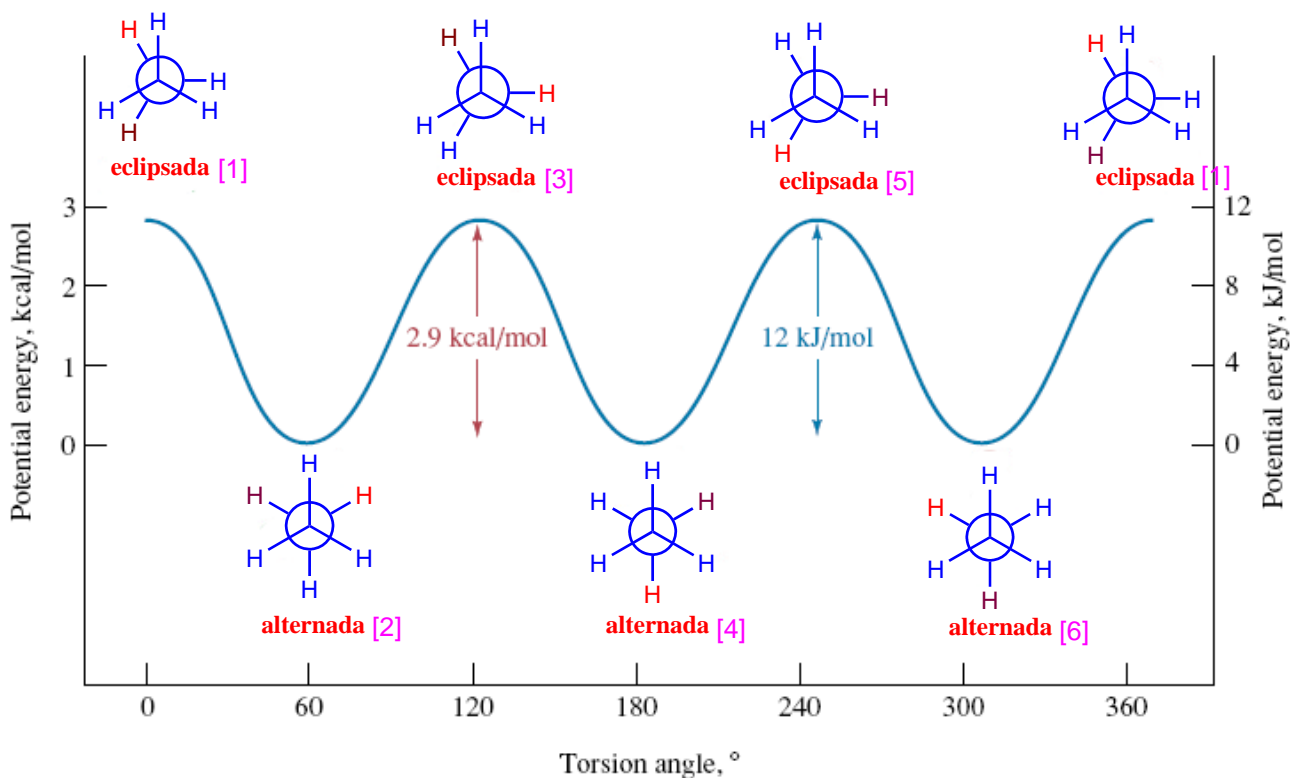
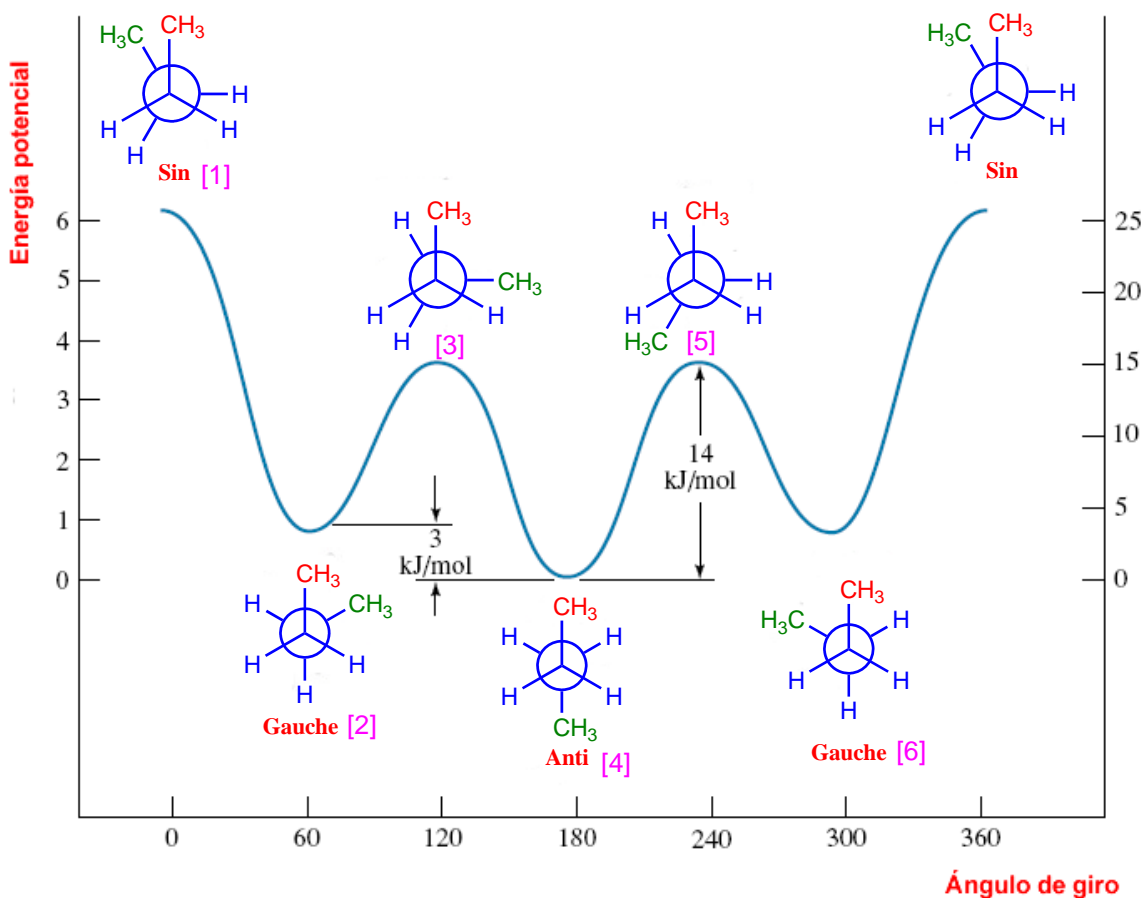
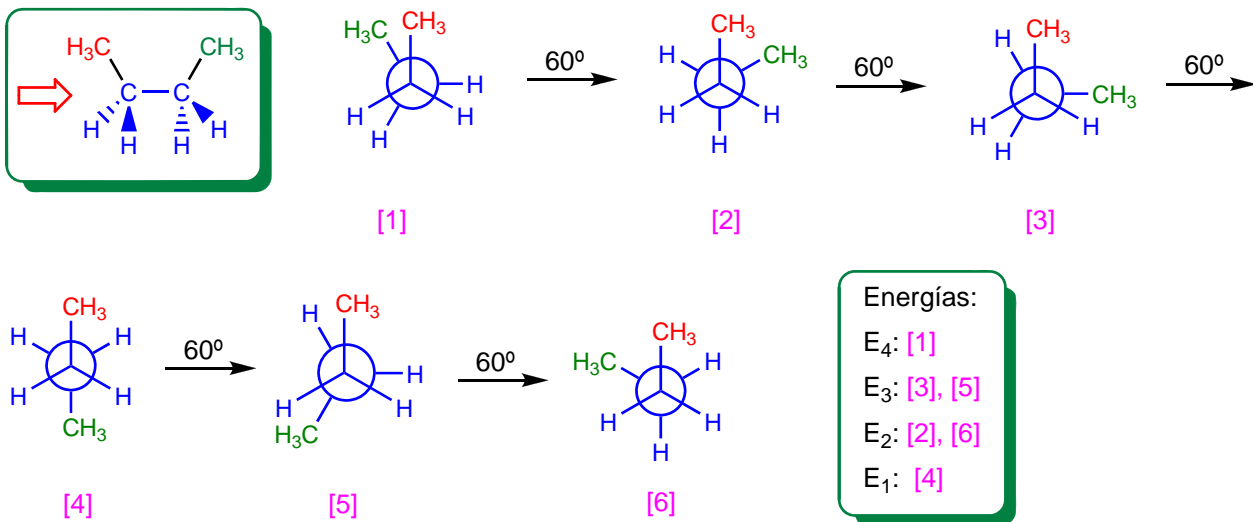


Diagrama de energía potencial del butano

En el diagrama del butano existen mas conformaciones que una alternada y una eclipsada. La conformación alternada que tiene los metilos lo más lejos posible uno del otro se llama anti [4] y es la más estable, al tener las mínimas repulsiones. La rotación del carbono de atrás 60° da lugar a una eclipsada [5] con dos interacciones metilo-hidrógeno, un nuevo giro da lugar a otra alternada llamada gauche [6]. Un tercer giro deja los metilos enfrentados (eclipsados) se denomina conformación sin [1] y es la de mayor energía potencial.

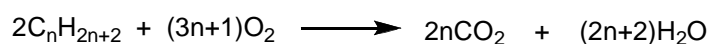


8. COMBUSTIÓN DE ALCANOS

El proceso de la combustión

La combustión es un proceso general de todas las moléculas orgánicas, en la cual los átomos de carbono de la molécula se combinan con el oxígeno convirtiéndose en moléculas de dióxido de carbono (CO₂) y los átomos de hidrógeno en agua líquida (H₂O). La combustión es una reacción exotérmica, el calor desprendido se llama calor de combustión y en muchos casos puede determinarse con exactitud, lo que permite conocer el contenido energético de las moléculas.

Reaccion de combustión ajustada



Estabilidad de isómeros

Comparando calores de combustión de alcanos isómeros se observa que sus valores no son iguales. Así el 2-metilpropano desprende en su combustión -685.4 kcal/mol, mientras que el butano desprende -687.4 kcal/mol. Estos datos demuestran que el butano tiene un contenido energético superior al 2-metilpropano y por tanto es termodinámicamente menos estable.

Metano Hídrico



El metano hídrico es una sustancia cristalina parecida al hielo, compuesta de moléculas de agua y metano.

Mechero electrico

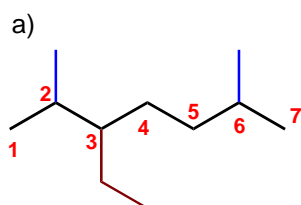
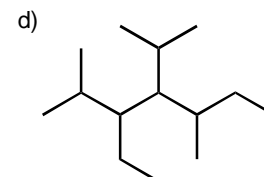
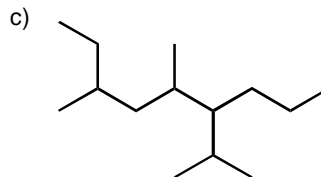
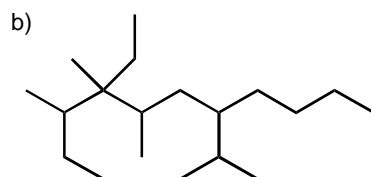
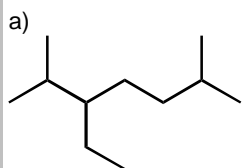


Incorpora sensor infrarrojo de encendido por proximidad. Puede conectarse a una toma fija de gas o a un cartucho de gas por lo que es completamente independiente dentro del espacio de trabajo del laboratorio. Tomas diferentes para gas natural, propano/butano y gas ciudad. Tiene un sistema de protección de exceso de temperatura.



9. PROBLEMAS RESUELTOS DE ALCANOS

PROBLEMA 1. Nombrar las siguientes moléculas según las normas de nomenclatura IUPAC.

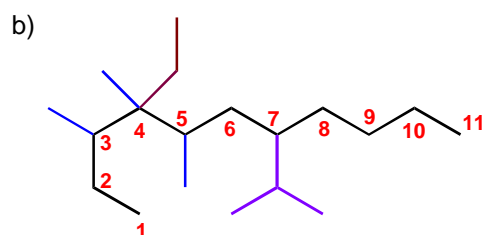


Cadena principal: la de mayor longitud (7 carbonos) heptano.

Numeración: localizador más bajo al etilo.

Sustituyentes: etilo en 3 y metilos en 2,6.

Nombre: 3-Etil-2,6-dimetilheptano.

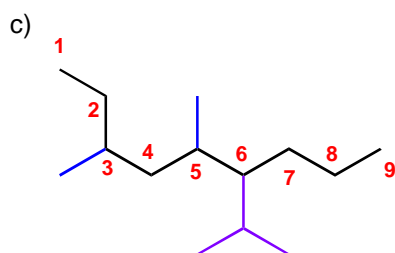


Cadena principal: la de mayor longitud (11 carbonos) undecano

Numeración: comienza por el extremo más próximo al primer sustituyente.

Sustituyentes: etilo en 4, isopropilo en 7 y metilos en 3,4,5.

Nombre: 4-Etil-3,4,5-trimetil-7-isopropilundecano.

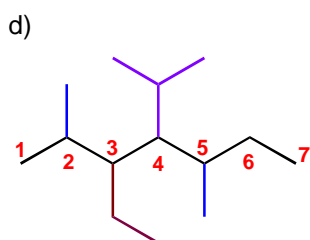


Cadena principal: la de mayor longitud (9 carbonos) nonano.

Numeración: comienza en el extremo más cercano al primer sustituyente.

Sustituyentes: isopropilo en 6 y metilos en 3,5.

Nombre: 6-Isopropil-3,5-dimetilnonano.



Cadena principal: la de mayor longitud y más ramificada (7 carbonos) heptano.

Numeración: parte del extremo más cercano a un sustituyente.

Sustituyentes: etilo en 3; metilos en 2,5; isopropilo en 4.

Nombre: 3-Etil-4-isopropil-2,5-dimetilheptano.



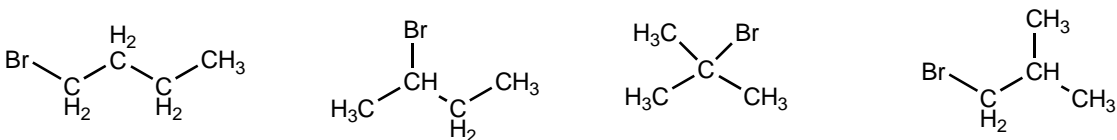
PROBLEMA 2. Proponer las fórmulas estructurales de los isómeros relacionados por las fórmulas moleculares mostradas en cada caso.

a) C_4H_9Br (4 bromoalcanos)

b) C_3H_9N (4 aminas)

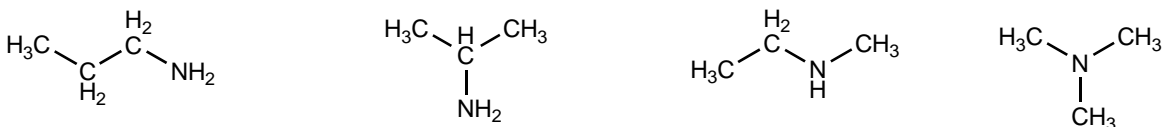
a) En primer lugar calculamos las insaturaciones de la fórmula molecular C_4H_9Br , comparándola con la fórmula molecular de un alcano (compuesto saturado) C_nH_{2n+2} . Un compuesto saturado de 4 carbonos debe tener 10 hidrógenos, que son los que tiene la fórmula, si contamos el halógeno como un hidrógeno. Por tanto la fórmula C_4H_9Br es de un haloalcano saturado (sin dobles enlaces ni ciclos).

Los dos primeros isómeros los dibujamos a partir de una cadena lineal de cuatro carbonos. Los otros dos a partir de la cadena ramificada 2-metilpropano.



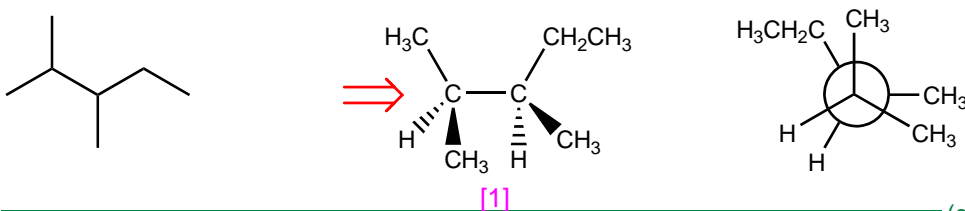
b) Cuando en una fórmula molecular hay nitrógeno, se cambia por CH, para calcular las insaturaciones. Haciendo este cambio, la fórmula nos queda: C_4H_{10} . Esta fórmula es la de un alcano (saturado) de 4 carbonos.

Los isómeros de fórmula C_3H_9N no pueden presentar ciclos ni dobles enlaces (compuestos saturados)



PROBLEMA 3. Dibujar las conformaciones más estable y menos estable del 2,3-dimetilpentano entre los carbonos C_3-C_4 .

Primero dibujamos la molécula de 2,3-dimetilpentano en el espacio. La conformación más estable será una de las alternadas y la menos estable una de las eclipsadas.

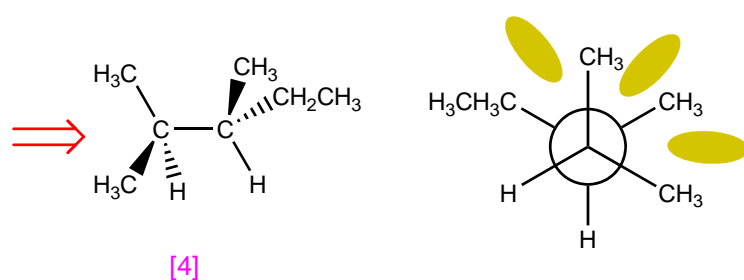
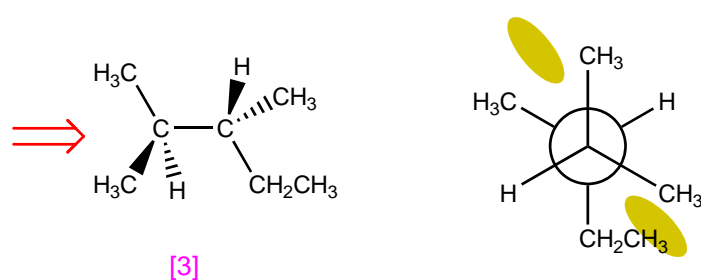
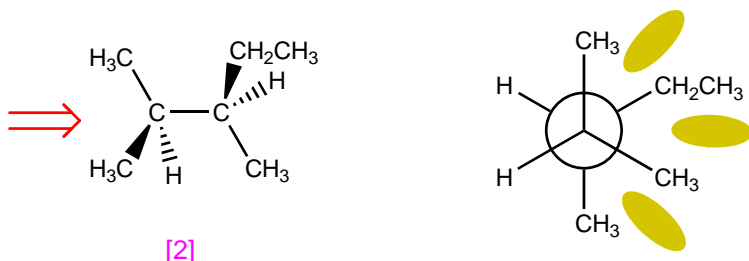


[1]

(c) Germán Fernández



La conformación [1] es la más inestable de la molécula al ser eclipsada y tener los grupos voluminosos enfrentados en el espacio. Así, presenta dos eclipsamientos importantes: metilo-etilo y metilo-metilo. Estas importantes interacciones pueden observarse en la proyección de Newman.



La conformación [3] es la de menor energía, por tener 2 interacciones Gauche, mientras que las conformaciones [2] y [4] tienen tres interacciones.

