

UNED

Principales compuestos químicos

Rosa M.^a Claramunt Vallespí
M.^a del Pilar Cornago Ramírez
Soledad Esteban Santos
M.^a Ángeles Farrán Morales
Marta Pérez Torralba
Dionisia Sanz del Castillo

Principales compuestos químicos

ROSA M.^a CLARAMUNT VALLESPÍ
M.^a DEL PILAR CORNAGO RAMÍREZ
SOLEDAD ESTEBAN SANTOS
M.^a ÁNGELES FARRÁN MORALES
MARTA PÉREZ TORRALBA
DIONISIA SANZ DEL CASTILLO

UNIVERSIDAD NACIONAL DE EDUCACIÓN A DISTANCIA

PRINCIPALES COMPUESTOS QUÍMICOS

Quedan rigurosamente prohibidas, sin la autorización escrita de los titulares del Copyright, bajo las sanciones establecidas en las leyes, la reproducción total o parcial de esta obra por cualquier medio o procedimiento, comprendidos la reprografía y el tratamiento informático, y la distribución de ejemplares de ella mediante alquiler o préstamo públicos.

© *Universidad Nacional de Educación a Distancia
Madrid, 2013*

www.uned.es/publicaciones

© *Rosa M.^a Claramunt Vallespí, M.^a del Pilar Cornago Ramírez,
Soledad Esteban Santos, M.^a Ángeles Farrán Morales,
Marta Pérez Torralba y Dionisia Sanz del Castillo*

ISBN electrónico: 978-84-362-6827-0

Edición digital: diciembre de 2013

ÍNDICE DE CONTENIDOS

Presentación

Presentación autoras

UNIDAD DIDÁCTICA I

Tema 1. Hidrocarburos I: Alcanos. Alquenos. Dienos y polienos

Rosa M.^a Claramunt Vallespí

- 1.1. Introducción
- 1.2. Alcanos
- 1.3. Alquenos
- 1.4. Dienos y polienos

Términos significativos introducidos en el tema

¿Sabías que...?

Ejercicios de autocomprobación

Soluciones a los ejercicios de autocomprobación

Tema 2. Hidrocarburos II. Alquinos. Cicloalcanos. Hidrocarburos aromáticos

Soledad Esteban Santos

- 2.1. Introducción
- 2.2. Alquinos

- 2.3. Cicloalcanos
- 2.4. Hidrocarburos aromáticos

Términos significativos introducidos en el tema

¿Sabías que...?

Ejercicios de autocomprobación

Soluciones a los ejercicios de autocomprobación

Tema 3. Derivados halogenados. Alcoholes

Dionisia Sanz del Castillo

- 3.1. Introducción
- 3.2. Nomenclatura y clasificación
- 3.3. Polarización del enlace C-X
- 3.4. Características físicas
- 3.5. Isomería óptica
- 3.6. Reacciones de sustitución nucleófila
- 3.7. Reacciones de eliminación nucleófil
- 3.8. Derivados halogenados aromático
- 3.9. Otras reacciones de los derivados halogenados: formación de compuestos organometálicos
- 3.10. Reactividad general de los alcoholes

Términos significativos introducidos en el tema

¿Sabías que...?

Ejercicios de autocomprobación

Soluciones a los ejercicios de autocomprobación

Tema 4. Fenoles y éteres. Aminas y nitroderivados

Ángeles Farrán Morales

- 4.1. Introducción
- 4.2. Fenoles
- 4.3. Éteres
- 4.4. Aminas y nitroderivados

Términos significativos introducidos en el tema

¿Sabías que?

Ejercicios de autocomprobación

Soluciones a los ejercicios de autocomprobación

**Tema 5. Compuestos carbonílicos: aldehídos y cetonas.
Ácidos carboxílicos y sus derivados. Nitrilos**

Marta Pérez Torralba

- 5.1. Introducción
- 5.2. Compuestos carbonílicos: aldehídos y cetonas
- 5.3. Ácidos carboxílicos y sus derivados
- 5.4. Nitrilos
- 5.5. Derivados aromáticos

Términos significativos introducidos en el tema

¿Sabías que...?

Ejercicios de autocomprobación

Soluciones a los ejercicios de autocomprobación

Tema 6. Química de las biomoléculas

M.^a del Pilar Cornago Ramírez

- 6.1. Introducción
- 6.2. Elementos químicos que componen los seres vivos
- 6.3. Biomoléculas orgánicas
- 6.4. Glúcidos
- 6.5. Lípidos
- 6.6. Proteínas
- 6.7. Ácidos nucleicos

Términos significativos introducidos en el tema

¿Sabías que...?

Ejercicios de autocomprobación

Soluciones a los ejercicios de autocomprobación

UNIDAD DIDÁCTICA II

**Tema 7. Hidrógeno. Metales alcalinos.
Metales alcalinotérreos**

Rosa M.^a Claramunt Vallespí

- 7.1. Introducción
- 7.2. Hidrógeno
- 7.3. Metales alcalinos

7.4. Metales alcalino-térreos

Términos significativos introducidos en el tema

¿Sabías que....?

Ejercicios de auto comprobación

Soluciones a los ejercicios de auto comprobación

Tema 8. Elementos de los grupos del boro y el carbono

Ángeles Farrán Morales

8.1. Introducción

8.2. Elementos del grupo del boro

8.3. Elementos del grupo del carbono

Términos significativos introducidos en el tema

¿Sabías que....?

Ejercicios de auto comprobación

Soluciones a los ejercicios de auto comprobación

Tema 9. Elementos del grupo del nitrógeno y del grupo del oxígeno

Marta Pérez Torralba

9.1. Introducción

9.2. Elementos del grupo del nitrógeno

9.3. Elementos del grupo del oxígeno

Términos significativos introducidos en el tema

¿Sabías que....?

Ejercicios de auto comprobación

Soluciones a los ejercicios de auto comprobación

Tema 10. Halógenos y gases nobles

Dionisia Sanz del Castillo

10.1. Introducción

10.2. Halógenos. Propiedades

10.3. Halógenos en la naturaleza

10.4. Obtención de los halógenos

10.5. Aplicaciones de los halógenos y sus compuestos

- 10.6. Reactividad de los halógenos
- 10.7. Gases nobles. Propiedades
- 10.8. Aplicaciones de los gases nobles
- 10.9. Compuestos de los gases nobles

Términos significativos introducidos en el tema

¿Sabías que...?

Ejercicios de auto comprobación

Soluciones a los ejercicios de auto comprobación

Tema 11. Metales de transición. Introducción a los compuestos de coordinación

M.^a del Pilar Cornago Ramírez

- 11.1. Introducción
- 11.2. Enlace metálico
- 11.3. Características de los metales de transición
- 11.4. Preparación y usos de algunos metales de transición
- 11.5. Compuestos de algunos metales de transición
- 11.6. Introducción a los compuestos de coordinación
- 11.7. El enlace en los compuestos de coordinación. Teoría del campo cristalino
- 11.8. Formación de compuestos de coordinación. Aplicaciones

Términos significativos introducidos en el tema

¿Sabías que...?

Ejercicios de auto comprobación

Soluciones a los ejercicios de auto comprobación

Tema 12. Química nuclear

Soledad Esteban Santos

- 12.1. Introducción
- 12.2. Descubrimiento de la radiactividad
- 12.3. El núcleo atómico: características y estabilidad
- 12.4. Procesos de desintegración
- 12.5. Energía de enlace nuclear
- 12.6. Estabilidad nuclear
- 12.7. Radiactividad inducida: reacciones de bombardeo
- 12.8. Obtención de elementos artificiales: los transuránicos

- 12.9. Cinética de la desintegración radiactiva
- 12.10. Fisión nuclear: cara y cruz de la energía nuclear
- 12.11. Fusión nuclear
- 12.12. Aplicaciones de los isótopos radiactivos
- 12.13. Efectos biológicos de la radiación

Términos significativos introducidos en el tema

¿Sabías que...?

Ejercicios de autocomprobación

Soluciones a los ejercicios de autocomprobación

Bibliografía

Unidades SI

Listado de elementos químicos

Tabla Periódica

Índice alfabético de términos

RESUMEN DEL CONTENIDO

- Tema 1.** Hidrocarburos I: Alcanos. Alquenos. Dienes y polienos.
- Tema 2.** Hidrocarburos II. Alquinos. Cicloalcanos. Hidrocarburos aromáticos.
- Tema 3.** Derivados halogenados. Alcoholes.
- Tema 4.** Fenoles y éteres. Aminas y nitroderivados.
- Tema 5.** Compuestos carbonílicos: aldehídos y cetonas. Ácidos carboxílicos y sus derivados. Nitrilos.
- Tema 6.** Química de las biomoléculas.
- Tema 7.** Hidrógeno. Metales alcalinos. Metales alcalinotérreos.
- Tema 8.** Elementos de los grupos del boro y el carbono.
- Tema 9.** Elementos del grupo del nitrógeno y del grupo del oxígeno.
- Tema 10.** Halógenos y gases nobles.
- Tema 11.** Metales de transición. Introducción a los compuestos de coordinación.
- Tema 12.** Química nuclear.

PRESENTACIÓN

La asignatura *Principales Compuestos Químicos* se incluye dentro del módulo de Formación Básica del Grado en Química. El objetivo general de dicha asignatura es proporcionar un conocimiento básico, por una parte, de la reactividad y propiedades de los compuestos orgánicos y biomoléculas y, por otra, de la química de los elementos de los grupos de la Tabla Periódica y compuestos más importantes a los que dan lugar, así como de las reacciones propias de las sustancias radiactivas. En todo momento se ha procurado conectar estos contenidos con su fundamento físico-químico y con los principios generales de la Química, intentando proporcionar una base para poder justificar de forma razonada muchos de esos aspectos.

De esta manera, los contenidos de las otras asignaturas teóricas que forman parte del bloque de Química de Primer Curso del Grado en Química se complementan con los de ésta. Al estudiar en ella el comportamiento y las características de unas sustancias determinadas, se concretan los contenidos de carácter general tratados en las demás.

En función de todo lo anterior, en este texto se ha desarrollado el programa de la asignatura de *Principales Compuestos Químicos*, organizándolo en torno a doce temas. A su vez, los contenidos correspondientes se han distribuido en dos Unidades Didácticas, cada una de las cuales incluye seis temas.

Dentro de la primera Unidad Didáctica, los cinco primeros temas se dedican a los distintos tipos de compuestos orgánicos, haciendo énfasis en sus propiedades, ya que son las que van a determinar, en

definitiva, su comportamiento químico. Así, en los temas 1 y 2 se estudian los hidrocarburos, mientras que las funciones orgánicas más importantes se tratan en los temas 3, 4 y 5 (Derivados halogenados y alcoholes, Fenoles, éteres, aminas y nitroderivados y Compuestos carbonílicos, ácidos carboxílicos y derivados, respectivamente). Esta Unidad finaliza con un tema en el que se contemplan las características más destacables de las biomoléculas y su importancia en el funcionamiento de los seres vivos (Tema 6).

En la segunda Unidad Didáctica se lleva a cabo el estudio de la Química Inorgánica. Los elementos de los grupos principales de la Tabla Periódica y sus compuestos más importantes se tratan en los temas del 7 al 10 (Hidrógeno, metales alcalinos y metales alcalinotérreos, Elementos de los grupos del boro y el carbono, Elementos del grupo del nitrógeno y del grupo del oxígeno y Halógenos y gases nobles, respectivamente), mientras que el tema 11 se centra en los elementos del bloque *d* y en los compuestos de coordinación. Finalmente, no podía faltar el análisis de los fenómenos que tienen lugar en el interior del núcleo atómico, así como las características de los procesos más importantes en los que intervienen las llamadas sustancias radiactivas, por lo cual el tema 12 (y último del programa) se ha dedicado a la Química Nuclear.

En cuanto a la estructura de cada tema, al final de cada uno se han incluido varios epígrafes: Términos significativos introducidos en el tema, ¿Sabías que...?, Ejercicios de autocomprobación y Soluciones a los ejercicios de autocomprobación, con los que se pretende alcanzar también un segundo objetivo, el de inculcar en los estudiantes un interés por el aprendizaje de la Química que les permita valorar sus aplicaciones en diferentes contextos.

PRESENTACIÓN AUTORAS

Rosa M.^a Claramunt Vallespí es doctora en Ciencias Químicas por las Universidades de Barcelona y Montpellier. Catedrática de química orgánica en la UNED desde 1986, su labor docente e investigadora en centros nacionales y extranjeros se ha desarrollado en diferentes áreas de la química. Autora de varios textos educativos y de divulgación científica, ha publicado los resultados de su trabajo en revistas de alto índice de impacto. Tiene reconocidos seis quinquenios de actividad docente y cinco sexenios de actividad investigadora.

Soledad Esteban Santos es doctora en Ciencias Químicas y licenciada en Sociología por la UCM. Profesora titular de Química General ejerce también su docencia en los másteres universitarios de Ciencia y Tecnología Química y de Formación del Profesorado de Educación Secundaria. Asimismo es directora de cursos del Programa de Formación de Profesorado de la UNED. Autora de textos y otros materiales didácticos de enseñanza a distancia, así como de artículos en investigación experimental y en didáctica de la química, educación a distancia y divulgación científica.

M.^a del Pilar Cornago Ramírez es licenciada en Ciencias Químicas y en Farmacia por la UCM y doctora en Ciencias Químicas por la UNED. Profesora titular del área de Química Orgánica en la UNED, ejerce su labor docente en Química General Bioquímica y en el máster universitario de Ciencia y Tecnología Química. También imparte y dirige varios cursos de Formación de Profesorado. Es autora de diversos textos educativos y materiales didácticos y su labor investigadora desarrollada en el CSIC y en la UNED, se traduce en publicaciones en revistas de alto índice de impacto.

M.^a Ángeles Farrán Morales es licenciada en Ciencias Químicas por la Universidad Complutense de Madrid, máster en Química por la Universidad de Aberdeen y doctora en Ciencias Químicas por la Universidad de Bowling Green (Estados Unidos). Ha realizado estancias posdoctorales de investigación en Holanda, Inglaterra, Italia y Japón. Desde el año 2009, es profesora de la UNED. Imparte docencia en asignaturas regladas de Licenciatura, Máster y Doctorado en el Departamento de Química Orgánica y Bioorgánica. Además de su labor docente realiza también una labor investigadora en el campo de la química orgánica.

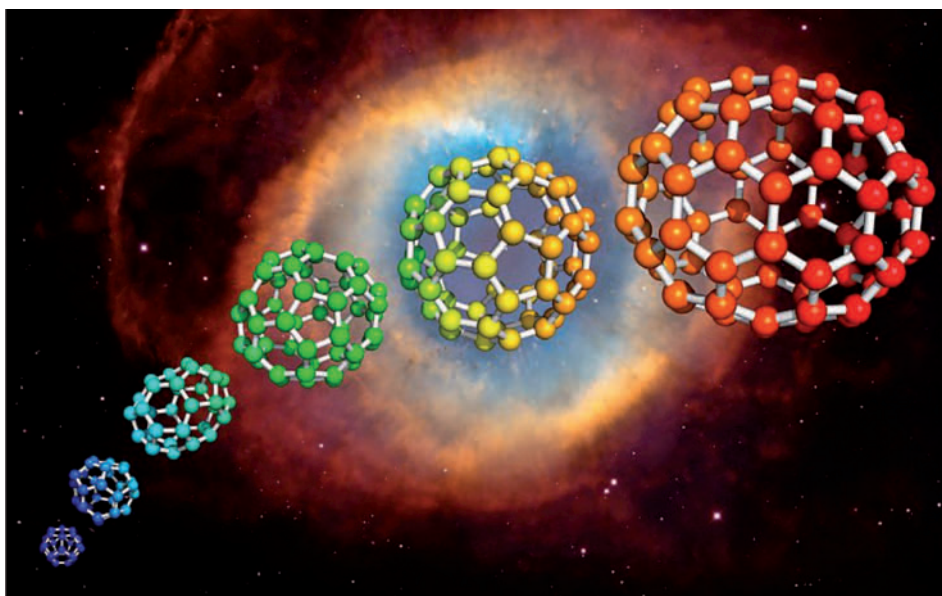
Dionisia Sanz del Castillo es doctora en Ciencias Químicas por la UCM. Es catedrática del área de Química Orgánica de la Facultad de Ciencias de la UNED. Es autora de diversos textos y materiales didácticos específicos de la enseñanza a distancia. Su labor investigadora la ha desarrollado en la UNED, UCM, Instituto de Química Médica (CSIC), en las Universidades de Marsella y Montpellier (Francia) y en la empresa Rhône-Poulenc en Lyon.

Marta Pérez Torralba es licenciada en Ciencias Químicas por la Universidad de Alcalá de Henares y doctora en Ciencias Químicas por la UNED. Es profesora del área de Química Orgánica en la UNED y autora de textos y materiales didácticos específicos de la enseñanza a distancia. Asimismo, ha sido profesora tutora durante varios años en el Centro Asociado de Madrid (UNED). Su labor investigadora la ha desarrollado en el Instituto de Química Orgánica (CSIC), en la UNED, en la Universidad de Alcalá de Henares y en la Universidad de Viena (Austria).

UNIDAD DIDÁCTICA I

HIDROCARBUROS I: ALCANOS. ALQUENOS. DIENOS Y POLIENOS

Rosa M.^a Claramunt Vallespí



Estructura de los fullerenos C_{24} , C_{28} , C_{32} , C_{50} , C_{60} y C_{70}

SUMARIO

- 1.1. Introducción
 - 1.2. Alcanos
 - 1.2.1. Nomenclatura y fórmulas
 - 1.2.2. Isomería
 - 1.2.3. Estructura y conformaciones
 - 1.2.4. Propiedades físicas
 - 1.2.5. Reactividad
 - 1.2.6. Fuentes naturales de alcanos
 - 1.3. Alquenos
 - 1.3.1. Nomenclatura
 - 1.3.2. Isomería de posición y geométrica
 - 1.3.3. Propiedades físicas
 - 1.3.4. Reactividad
 - 1.4. Dienos y polienos
 - 1.4.1. Dienos conjugados
- Términos significativos introducidos en el tema
- ¿Sabías que...?
- Ejercicios de autocomprobación
- Soluciones a los ejercicios de autocomprobación

OBJETIVOS

General

Se trata de reconocer a varios grupos de hidrocarburos, los alcanos, los alquenos y los dienos, describiendo su estructura y justificando sus propiedades físicas y su reactividad.

Específicos

1. Definir qué son los compuestos orgánicos, y establecer el concepto de grupo funcional que permite su agrupación en familias.
2. Enumerar los diferentes tipos de hidrocarburos e indicar qué es una serie homóloga.
3. Describir las diferentes representaciones de los compuestos orgánicos.
4. Nombrar y formular alcanos, grupos alquilo, alquenos y dienos.
5. Comprender las razones por las que los alcanos dan reacciones de sustitución y los alquenos de adición.
6. Analizar los diferentes tipos de isomería que presentan estos hidrocarburos.

CONOCIMIENTOS PREVIOS

- El enlace covalente.
- Orbitales híbridos: sp^3 , sp^2 y sp .
- Orbitales moleculares: enlaces σ y π .
- Electronegatividad y polaridad de los enlaces.
- Fuerzas intermoleculares: puntos de fusión y de ebullición.
- Teorías ácido-base.

1. INTRODUCCIÓN

Los *compuestos orgánicos* son sustancias químicas que *contienen carbono*, y prácticamente siempre hidrógeno. Son muy abundantes, su número es muy elevado, y ello se debe a que el elemento carbono se une consigo mismo mediante enlaces covalentes fuertes (sencillos ó múltiples), originando cadenas lineales, ramificadas o cíclicas. También forma enlaces fuertes con hidrógeno, elementos electronegativos (oxígeno, nitrógeno, azufre, fósforo o halógenos) y algunos metales. Estos compuestos se conocen como *moléculas orgánicas*.

Todas las moléculas orgánicas contienen carbono, pero no todas las sustancias que contienen carbono lo son. Los carburos, los carbonatos y los óxidos de carbono, entre otros, no son compuestos orgánicos.

El descubrimiento, en 1828, por el químico alemán Friedrich Wöhler de que la sustancia inorgánica cianato de amonio podía convertirse en urea, una sustancia orgánica que se encuentra en la orina de muchos animales, se considera el inicio o aparición de la química orgánica. Hasta entonces, los químicos creían que para sintetizar sustancias orgánicas, era necesaria la intervención de lo que llamaban «la fuerza vital», es decir, de los organismos vivos. El experimento de Wöhler rompió la barrera entre sustancias orgánicas e inorgánicas.

En la actualidad los compuestos orgánicos se clasifican en dos tipos: i) *naturales*, de origen biológico (seres vivos, restos fósiles); ii) *artificiales*, fabricados por el ser humano en el laboratorio a partir sobre todo de dos fuentes principales, carbón y petróleo, o por modificación química de los naturales.

Todo ese gran número de compuestos orgánicos pueden agruparse en familias o tipos a partir de sus características estructurales. En Química Orgánica se conoce como **grupo funcional** al átomo, o grupo de átomos, que define la estructura de una familia particular de compuestos orgánicos y al mismo tiempo determina sus propiedades.

Los compuestos orgánicos más sencillos se denominan **hidrocarburos**, y contienen únicamente átomos de carbono e hidrógeno.

El carbono, primer elemento del Grupo 14 de la Tabla Periódica, es un elemento no metálico y su configuración electrónica es $1s^2 2s^2 2p^2$. Como se muestra en la figura 1.1 al formar compuestos con hidrógeno, los átomos de carbono pueden:

- Establecer cuatro enlaces covalentes sencillos por hibridación sp^3 (forma tetraédrica con ángulos de $109,5^\circ$), como en el **metano** que es el hidrocarburo más sencillo, que pertenece a la familia de los **alcanos**.
- Participar en enlaces covalentes dobles por hibridación sp^2 (forma trigonal plana con ángulos de 120°) y formación de un enlace σ y un enlace π , como en el **eteno**, de la familia de los **alquenos**.
- Formar enlaces covalentes triples mediante hibridación sp (forma lineal con ángulos de 180°), y formación de un enlace σ y dos enlaces π , como en el **etino**, de la familia de los **alquinos** (Tema 2).

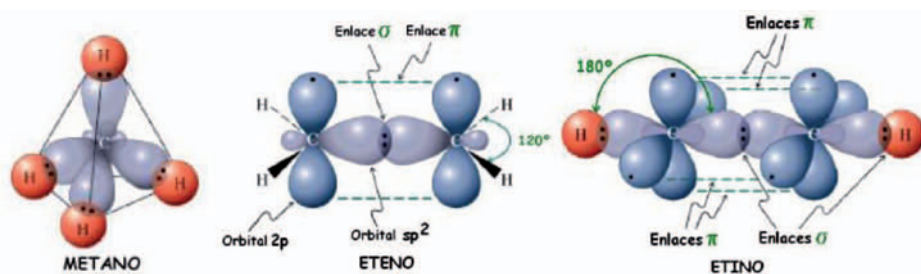


FIGURA 1.1. Orbitales híbridos del carbono: sp^3 en el metano, sp^2 en el eteno y sp en el etino

1.2. ALCANOS

Los **hidrocarburos saturados** o **alcanos** son compuestos formados por carbono e hidrógeno, con todos los átomos de carbono con hibri-

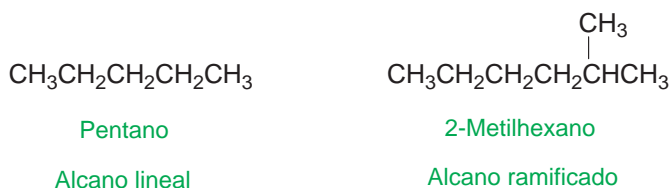
dación sp^3 y enlaces covalentes sencillos σ . Poseen el número máximo de hidrógenos que es posible enlazar a cada carbono, y de ahí el término hidrocarburo saturado utilizado para describirlos.

A diferencia del resto de los compuestos orgánicos no están caracterizados por ningún grupo funcional específico.

Los *alcanos de cadena abierta* o *hidrocarburos alifáticos* tienen la fórmula general C_nH_{2n+2} donde n toma el valor de los números naturales 1, 2, 3, 4... A medida que aumenta n en la fórmula general C_nH_{2n+2} se genera la *serie homóloga de los alcanos* en la que cada miembro difiere de su vecino inmediato en un grupo CH_2 (denominado metileno).

El alcano más sencillo es el metano de *fórmula molecular* CH_4 (Figura 1.1), principal componente del gas natural. Otros alcanos conocidos son el etano, propano y butano con dos, tres y cuatro átomos de carbono, respectivamente (Tabla 1.1).

Los alcanos se clasifican en *lineales* cuando constan de una única cadena carbonada, y *ramificados* cuando a los átomos de carbono de la cadena carbonada más larga van unidas otras de menor extensión.



1.2.1. Nomenclatura y fórmulas

Para los compuestos orgánicos existe una nomenclatura sistemática formulada por la *International Union of Pure and Applied Chemistry*, que se conoce como la nomenclatura IUPAC. A continuación se mencionan las reglas a utilizar para nombrar a los alcanos con más de cuatro átomos de carbono.

1. La cadena continua de mayor longitud de átomos de carbono o *cadena principal* se indica mediante un *prefijo* derivado de los numerales griegos, *pent-* para cinco átomos de carbono, *hex-* para seis átomos de carbono, *hept-* para siete átomos de carbono, *oct-* para ocho

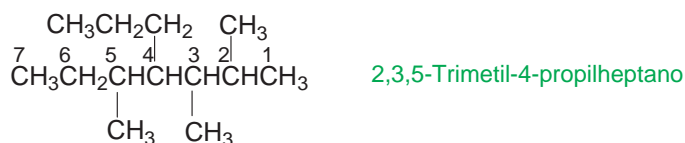
átomos de carbono, *non-* para nueve átomos de carbono, *dec-* para diez átomos de carbono, ..., al que se añade el *sufijo -ano*.

2. Las posiciones y el nombre de las *ramificaciones* de la cadena principal se añaden como *prefijos* al nombre del hidrocarburo de cadena más larga. La posición de unión se expresa por la numeración de la cadena más larga, comenzando por el extremo más próximo a la ramificación. En cualquier caso el número (o localizador) debe ser el más bajo posible y, en el nombre los radicales aparecen por orden alfabético.

En la tabla 1.1 se representa la *fórmula semidesarrollada* de algunos miembros de la serie junto con su nombre IUPAC, y en algunos casos además el nombre común (o vulgar o trivial) por el que se conocen. También se incluyen los *grupos alquilo*, que son las agrupaciones atómicas o *radicales* obtenidos a partir del alcano cuando se quita un átomo de hidrógeno quedando con una valencia libre. Como puede verse el nombre de estos últimos se forma *sustituyendo* la terminación *-ano* del hidrocarburo por *-ilo*. Los radicales pueden ser *primarios* (etilo, propilo, butilo, isobutilo, 1-pentilo), *secundarios* (isopropilo o 1-metiletilo, *sec*-butilo o 1-metilpropilo, *sec*-pentilo o 1-metilbutilo, 3-pentilo o 1-etilpropilo) o *terciarios* (*terc*-butilo), según el carácter del átomo de carbono que lleva la valencia libre.

La denominación de *primario*, *secundario*, *terciario* o *cuaternario* para los átomos de carbono, se refiere al número de otros átomos de carbono a los que está unido, *uno*, *dos*, *tres* y *cuatro*, respectivamente.

A continuación, se indica un ejemplo de aplicación de las reglas de nomenclatura:



La cadena más larga tiene *siete átomos de carbono*, por lo tanto se trata de un *heptano*. Las ramificaciones son *tres* radicales *metilo* en las posiciones 2, 3 y 5 y *un propilo* en posición 4. Los radicales cuando se nombran como sustituyentes pierden la «o» final, es decir, son grupos *alquil*. Como puede observarse los radicales aparecen por orden alfabético, es decir *metil* antes que *propil*, y no se considera para ello la letra que indica su número, es decir, en este caso *tri*.

Tabla 1.1. Algunos ejemplos de alcanos y grupos alquilo

Alcano	Nombre IUPAC (Nombre común)	Alquilo	Nombre
CH ₄	Metano	CH ₃ —	Metilo
CH ₃ CH ₃	Etano	CH ₃ CH ₂ —	Etilo
CH ₃ CH ₂ CH ₃	Propano	CH ₃ CH ₂ CH ₂ — CH ₃ CHCH ₃ 	Propilo Isopropilo
CH ₃ CH ₂ CH ₂ CH ₃	Butano	CH ₃ CH ₂ CH ₂ CH ₂ — CH ₃ CH ₂ CHCH ₃ 	Butilo sec-Butilo
CH ₃ CHCH ₃ CH ₃	2-Metilpropano (Isobutano)	CH ₃ CHCH ₂ — CH ₃ CH ₃ CCH ₃ CH ₃	Isobutilo terc-Butilo
CH ₃ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	Pentano	CH ₃ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ — CH ₃ CH ₂ CH ₂ CHCH ₃ CH ₃ CH ₂ CHCH ₂ CH ₃ 	1-Pentilo (Pentilo) 1-Metilbutilo (sec-Pentilo) 3-Pentilo 1-Etilpropilo

Los alcanos, al igual que el resto de compuestos orgánicos, se representan mediante la *fórmula estructural* que muestra el orden en el que se unen los átomos y los tipos de enlace. En las *fórmulas* estructurales *desarrolladas* se muestran todos los enlaces (una línea para cada par de electrones) carbono-carbono y carbono-hidrógeno (Figura 1.2.a para el butano). La *fórmula* estructural simplificada *enlace-línea* es aquella en la que *no se muestran explícitamente los átomos de carbono e hidrógeno*, los átomos de carbono se encuentran donde una línea se junta con otra y en los extremos, resultando cadenas en zigzag como consecuencia de la hibridación sp^3 del átomo de carbono (disposición tetraédrica y ángulos entre dos enlaces C–H cualesquiera de 109,5°) (Figura 1.2.b). Cada átomo de carbono posee átomos de hidrógeno suficientes para satisfacer su necesidad de tener cuatro enlaces.

La representación que tiene en cuenta la estructura del átomo de carbono en un espacio de tres dimensiones y la disposición de todos

los átomos de hidrógeno unidos a cada carbono, da lugar a la *fórmula espacial* (Figura 1.2.c). Y para facilitar la visualización de la estructura tridimensional de una molécula orgánica se utilizan también los *modelos moleculares*, como el de *bolas y varillas* (Figura 1.2.d) y el *compacto* o *CPK* (Corey-Pauling-Koltun) o de *espacio lleno* (Figura 1.2.e), donde los átomos de carbono e hidrógeno poseen diferente tamaño y color:

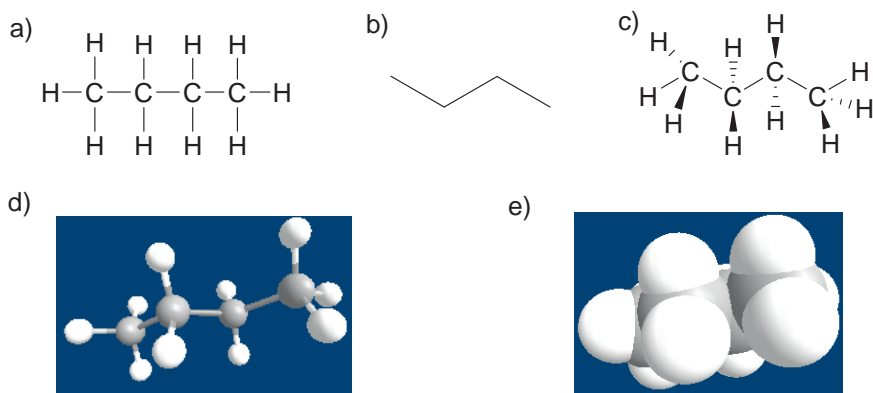


FIGURA 1.2. Fórmulas del butano: a) desarrollada; b) enlace-línea; c) espacial; d) modelo de bolas y varillas; e) modelo compacto o CPK.

1.2.2. Isomería

Si examinamos ahora las fórmulas del butano y el isobutano que se muestran en la tabla 1.1, se observa que la fórmula molecular es la misma para ambos, C_4H_{10} . Sin embargo su estructura molecular es diferente, se trata de dos *isómeros constitucionales* o *estructurales*, que se diferencian entre sí en que los átomos de la molécula están enlazados de forma distinta. En este caso se trata de *isomería de cadena*.

Isomería es la propiedad que presentan determinados compuestos químicos, denominados isómeros, que poseen la misma fórmula molecular pero difieren en su fórmula estructural. Es decir, poseen idéntica composición atómica y la misma masa molecular, pero tienen distintas, tanto las estructuras moleculares como las propiedades.

Para la fórmula molecular C_5H_{12} existen además del *pentano* indicado en la tabla 1.1 otros dos isómeros, el *isopentano* y el *neopentano* (Figura 1.3).

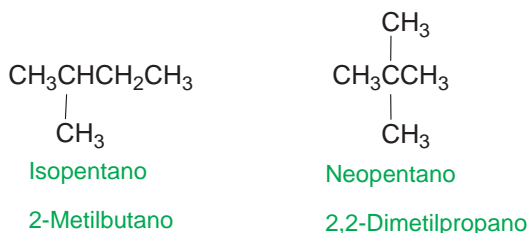


FIGURA 1.3. Isómeros constitucionales del pentano.

Con la fórmula molecular C_6H_{14} existen cinco alcanos isómeros y nueve para C_7H_{16} , siendo el crecimiento en isómeros constitucionales exponencial a medida que se avanza en la serie homóloga de los alcanos. Se aconseja que se intenten representar las estructuras moleculares de los diferentes isómeros para cada una de las fórmulas moleculares mencionadas.

A medida que se avance en el estudio de los Temas, aparecerán diferentes tipos de isomería constitucional o estructural. En los alcanos, la *isomería de cadena*, se caracteriza porque en los distintos isómeros varía la disposición de los átomos de carbono en el esqueleto carbonado, originando cadenas carbonadas diferentes.

1.2.3. Estructura y conformaciones

Se ha mencionado ya en la introducción que el *metano*, CH_4 , consiste en un átomo de carbono con hibridación sp^3 que solapa sus cuatro orbitales híbridos con los orbitales s de cuatro átomos de hidróge-

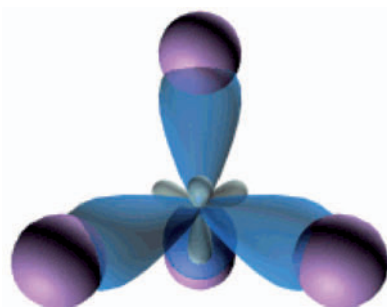


FIGURA 1.4. Estructura del metano.

no para formar cuatro enlaces σ carbono-hidrógeno con ángulos de $109,5^\circ$. La molécula tiene pues forma tetraédrica con el átomo de carbono situado en el centro del tetraedro y los átomos de hidrógeno en sus vértices (Figura 1.4).

El *etano* C_2H_6 , su homólogo superior, consta de dos átomos de carbono con hibridación sp^3 que por solapamiento de dos orbitales híbridos, uno de cada átomo de carbono, origina un enlace σ carbono-carbono entre ambos. Los restantes orbitales híbridos, tres en cada carbono, solapan con los orbitales s de los seis átomos de hidrógeno. La molécula tiene forma de dos tetraedros unidos por un vértice común, cada átomo de carbono se sitúa en el centro de un tetraedro, y los seis vértices restantes están ocupados por átomos de hidrógeno (Figura 1.5).

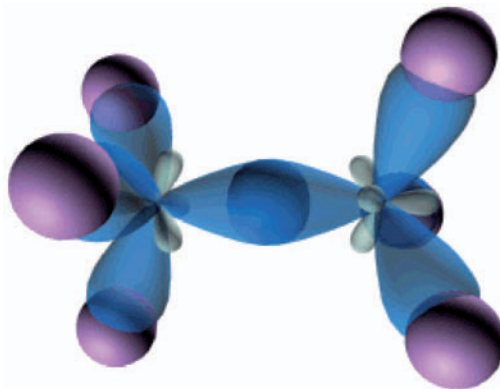


FIGURA 1.5. Estructura del etano.

La estructura de los demás alcanos es análoga a la del metano y etano, todos sus átomos de carbono poseen hibridación sp^3 y todos los enlaces, carbono-carbono y carbono-hidrógeno, son enlaces σ fuertes, con elevada energía de disociación y por tanto difíciles de romper. Las distancias de enlace promedio son: carbono-carbono, $C-C$ $1,54 \text{ \AA}$, y carbono-hidrógeno, $C-H$ $1,102 \text{ \AA}$.

En los alcanos puede ocurrir la rotación alrededor del enlace sencillo carbono-carbono, generalmente a temperatura ambiente con la energía térmica de las propias moléculas. A este giro se le denomina libre por la facilidad con que tiene lugar, pasando así de una a otra de esas disposiciones espaciales distintas, denominadas *conformaciones*. En la figura 1.6 se muestran dos conformaciones extremas para el eta-

no, en la *eclipsada* los sustituyentes del primer carbono se enfrentan directamente a los del otro carbono, en la *alternada* se sitúan entre ellos, exactamente en la mitad (60°).

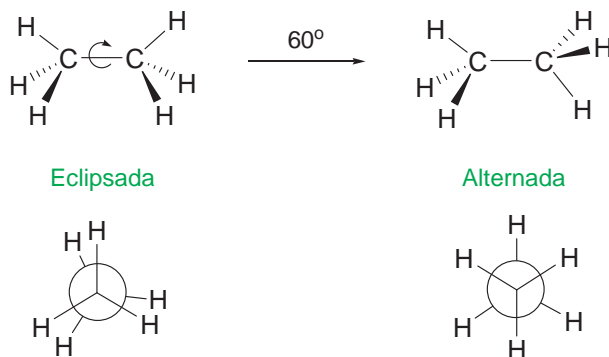


FIGURA 1.6. Representación en cuña (arriba) y proyección de Newman (abajo) de las conformaciones eclipsada y alternada del etano.

La *proyección de Newman* es una forma de representación bidimensional muy útil para las conformaciones en un enlace simple carbono-carbono de una molécula orgánica. Consiste en visualizar la estructura a lo largo del enlace que une ambos átomos de carbono y proyectarla sobre el plano, de tal forma que los grupos unidos al átomo de carbono más próximo al observador se dibujan enlazados al punto central de un círculo, que representaría al átomo, mientras los del más alejado se dibujan como si partieran desde detrás del círculo, y por tanto sus enlaces sólo son visibles parcialmente.

Entre las conformaciones *eclipsada* y *alternada* existen infinitas disposiciones *sesgadas* intermedias que no es posible separar ni aislar en condiciones normales. En general las moléculas tienen preferencia por la conformación alternada por ser menores las repulsiones entre los átomos de hidrógeno. La diferencia de energía entre las conformaciones alternada y eclipsada es de unos $12,5 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$, que se puede vencer fácilmente a temperatura ambiente, y las moléculas rotan constantemente.

1.2.4. Propiedades físicas

De modo general los alcanos pueden considerarse compuestos covalentes puros, es decir, apolares, ya que la pequeña polaridad que pudieran tener sus enlaces C–H es totalmente compensada por la simetría de sus átomos de carbono tetraédricos. No poseen átomos con pares de electrones sin compartir, ni átomos con orbitales vacíos, es decir, no hay centros ácidos ni centros básicos.

Los *alcanos lineales*, de superficie y masa molecular pequeñas, poseen atracciones intermoleculares también pequeñas y son gaseosas a temperatura ambiente: metano, etano, propano y butano.

A medida que se avanza en la serie homóloga, crece la masa molecular y las atracciones intermoleculares (fuerzas de van der Waals) son más fuertes. Así se llega a un término de la serie que será líquido, y más adelante a otro que será sólido a temperatura ambiente; del pentano al heptadecano son líquidos y del octadecano en adelante sólidos.

Los puntos de ebullición de los alcanos no ramificados aumentan con cierta regularidad, entre un homólogo y el siguiente suele haber una variación de 30 a 40 °C, aunque a medida que se avanza en la serie las diferencias se hacen menores hasta llegar a los sólidos, en los que las diferencias son ya del orden de 15 °C (Tabla 1.2).

En los puntos de fusión el incremento es menos regular (Tabla 1.2), pero si la comparación se realiza entre alcanos con número par de átomos de carbono por un lado (hexano/octano/decano) y entre alcanos con número impar por otro (pentano/heptano/nonano), aparece de nuevo un aumento progresivo regular en cada una de las dos series. En los alcanos pares, las cadenas se adaptan mejor unas a otras y la atracción intermolecular aumenta, sus redes cristalinas son más estables y los puntos de fusión más elevados.

En cuanto a los *alcanos ramificados* que poseen mayor esfericidad, sus puntos de ebullición son más bajos que los correspondientes isómeros de cadena lineal (ver pentano, isopentano y neopentano). En cambio los puntos de fusión de algunos alcanos con ramificaciones, que dan lugar a moléculas simétricas y adaptables unas a otras, pueden ser anormalmente elevados (ver 2,2,3,3-tetrametilbutano).

Los alcanos al ser moléculas apolares se disuelven en disolventes poco polares como tetracloruro de carbono, sulfuro de carbono, cloroformo y otros hidrocarburos líquidos, y son insolubles en disolven-

tes polares como el agua. Son poco densos, los líquidos poseen una densidad que nunca sobrepasa el valor de $0,80 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$.

TABLA 1.2. Propiedades físicas de algunos alcanos

Alcano	Punto de ebullición (°C)	Punto de fusión (°C)
Metano	-164	-182
Etano	-89	-172
Propano	-42	-188
Butano	0	-138
*Isobutano	-12	-158
Pentano	36	-130
*Isopentano	29	-160
*Neopentano	9	-17
Hexano	69	-95
*Isohexano	61	-154
*2,2-Dimetilbutano	50	-98
Heptano	98	-91
Octano	125	-57
*2,2,3,3-Tetrametilbutano	107	100
Nonano	151	-54
Decano	174	-30

* Alcanos ramificados

1.2.5. Reactividad

Los enlaces en los alcanos son de tipo σ , muy fuertes, por lo que son poco reactivos. Fueron denominados *parafinas* (del latín *parum* = apenas + *affinis* = afinidad) en alusión a su poca o escasa afinidad o reactividad química, nombre que aún se mantiene.

En condiciones normales no reaccionan con ácidos fuertes como los ácidos clorhídrico, sulfúrico o nítrico, ni con álcalis fuertes como hidróxido sódico o potásico. Tampoco lo hacen con oxidantes enérgicos como dicromato o permanganato potásico, o con reductores como hidrógeno o metales alcalinos (sodio o potasio).

Debido a la escasa polaridad de sus enlaces, la mayoría de las reacciones que tienen lugar en los alcanos transcurren a través de radicales libres (*mecanismo radical*).

En este punto conviene señalar que no debe confundirse el término *radical* referido a los grupos *alquilo* como sustituyentes de la cadena hidrocarbonada más larga o principal, utilizado en la nomenclatura de alcanos (apartado 1.2.1), con el de *radical libre* que define la especie química obtenida por ruptura homolítica (homólisis) de un enlace covalente y que se representa por R^\bullet (Figura 1.7), donde el átomo de carbono tiene siete electrones, uno de ellos desapareado o libre que se representa por un punto.

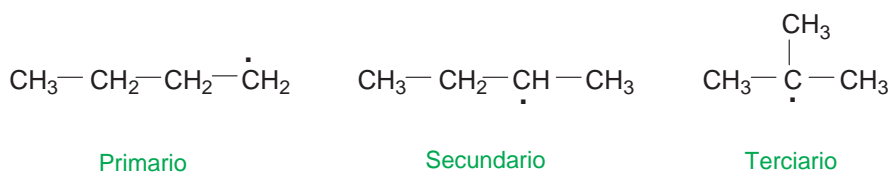
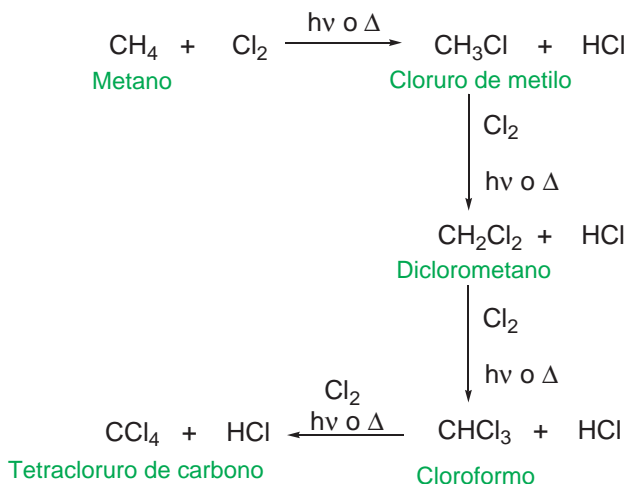


FIGURA 1.7. Ejemplos de radicales libres de carbono.

Reacciones de sustitución

La reacción de sustitución más importante es la *halogenación*, es decir, la sustitución de átomos de hidrógeno por átomos de halógeno. Tiene lugar cuando un alcano se trata con un halógeno en fase gaseosa en presencia de luz ultravioleta ($h\nu$) o calor (Δ).

Así el metano reacciona con cloro en presencia de luz o a temperaturas superiores a 250°C para formar cloruro de metilo, liberando ácido clorhídrico, HCl. Sin embargo, la reacción es más compleja, ya que ocurren polisustituciones obteniéndose una mezcla de cuatro derivados clorados en reacciones sucesivas.



La reacción, denominada *en cadena*, consta de tres etapas fundamentales:

Iniciación, que tiene lugar cuando las moléculas de Cl_2 absorben energía suficiente para disociarse en dos átomos de cloro (ruptura homolítica), cada uno con un electrón desapareado, representados por Cl^\bullet .

Propagación, los átomos de cloro Cl^\bullet colisionan con las moléculas de metano dando lugar a radicales libres metilo $\text{H}_3\text{C}^\bullet$, que combinados con la molécula de cloro forman el producto CHCl_3 o cloroformo y un nuevo radical cloro Cl^\bullet que vuelve a iniciar el proceso.

Terminación, consumo de partículas reactivas sin generación de otras nuevas. Existen así tres reacciones que detienen el proceso: la unión de dos radicales Cl^\bullet para regenerar la molécula de cloro, la formación del cloruro de metilo, y la unión de dos radicales $\text{H}_3\text{C}^\bullet$ para formar etano, $\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_3$.

El mecanismo a través de radicales libres que se ha descrito para la cloración del metano se aplica a la halogenación de cualquier alcano y con cualquier halógeno. Así en la cloración del etano se sustituyen sucesivamente sus átomos de hidrógeno por átomos de cloro llegando a formarse incluso el producto hexasustituido, el hexacloroetano $\text{Cl}_3\text{C}-\text{CCl}_3$, resultando una mezcla que contiene hasta nueve derivados clorados. La complejidad aumenta en el propano y homólogos superiores. Las reacciones de halogenación tienen un valor preparativo prácticamente nulo ya que no es fácil ni rentable separar los diferentes productos formados.

Reacciones de oxidación

Los alcanos arden, es decir, reaccionan con el oxígeno, lo que da lugar a que la aplicación más importante sea su uso como combustibles. La reacción, que sólo tiene lugar a temperatura elevada o si se inicia mediante una chispa o una llama, conduce a dióxido de carbono y agua.

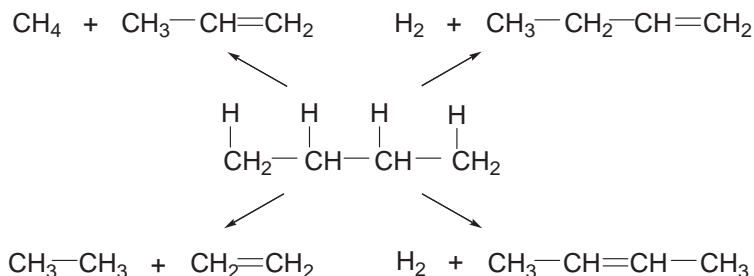


El calor desprendido en la reacción se denomina *calor de combustión*. Para el metano es de $890 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ y el del resto de los alcanos puede calcularse de modo aproximado, sumando a este valor el desprendido por cada grupo CH_2 adicional, estimado en $660 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$. Los calores de combustión permiten evaluar la estabilidad de los alcanos, y en general un alcano ramificado es más estable que su isómero menos ramificado.

Reacciones de pirólisis

Estas reacciones tienen lugar cuando los alcanos se calientan a alta temperatura en ausencia de oxígeno. Se producen rupturas homolíticas de enlaces carbono-hidrógeno y carbono-carbono dando lugar a la formación de radicales libres que se recombinan o desproporcionan originando una mezcla de alcanos y alquenos de masa molecular menor que la del alcano de partida.

Veamos un ejemplo: el calentamiento del butano a temperaturas superiores a $600 \text{ }^\circ\text{C}$ da lugar a mezcla de *alquenos* por eliminación de moléculas de metano, etano e hidrógeno.



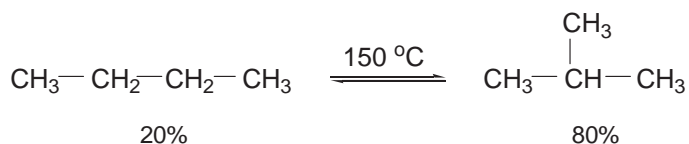
En la industria del petróleo este proceso de *pirólisis de alcanos*, se conoce con el nombre de *craqueo térmico*. El *craqueo catalítico* es aquel

que tiene lugar mediante el uso de catalizadores y permite trabajar a temperaturas más bajas, con el consiguiente ahorro energético.

Reacciones de isomerización

Estas reacciones permiten transformar alcanos lineales en sus isómeros ramificados y tienen lugar cuando los alcanos se calientan con un ácido de Lewis, como el cloruro o el bromuro de aluminio, que ejerce el papel de catalizador. Son reacciones de equilibrio desplazadas hacia los productos termodinámicamente más estables, que suelen ser los alcanos ramificados.

Así el butano se transforma en isobutano en presencia de bromuro de aluminio a 150 °C, y se llega siempre a la misma proporción de isómeros independientemente de si se parte de butano o de isobutano.



Lo mismo ocurre con otros alcanos en los que el equilibrio puede establecerse entre más de dos isómeros: a una temperatura determinada y en presencia de un catalizador ácido se llega siempre a una mezcla con la misma proporción. El *mecanismo* de reacción es *iónico*, transcurre a través de carbocationes formados por abstracción de un anión hidruro por el ácido de Lewis.

Un *carbocación* es una especie química cargada positivamente con un átomo de carbono sólo con seis electrones en su capa externa y un orbital vacío, que se obtiene por ruptura heterolítica (heterolisis) de un enlace covalente, en este caso carbono-hidrógeno.

El equilibrio que se establece entre los carbocationes está desplazado hacia los más estables, los terciarios, y por ello se llega a mezclas de hidrocarburos ricas en alcanos ramificados. Como se muestra en la figura 1.8 el paso de un carbocatión secundario a uno terciario tiene lugar por transposición o desplazamiento, desde la posición 3 a la posición 2, de un metilo (el señalado con el número 4) con su par de electrones, es decir como carbanión, a la vez que de nuevo un anión hidruro pasa de la posición 2 a la 3.

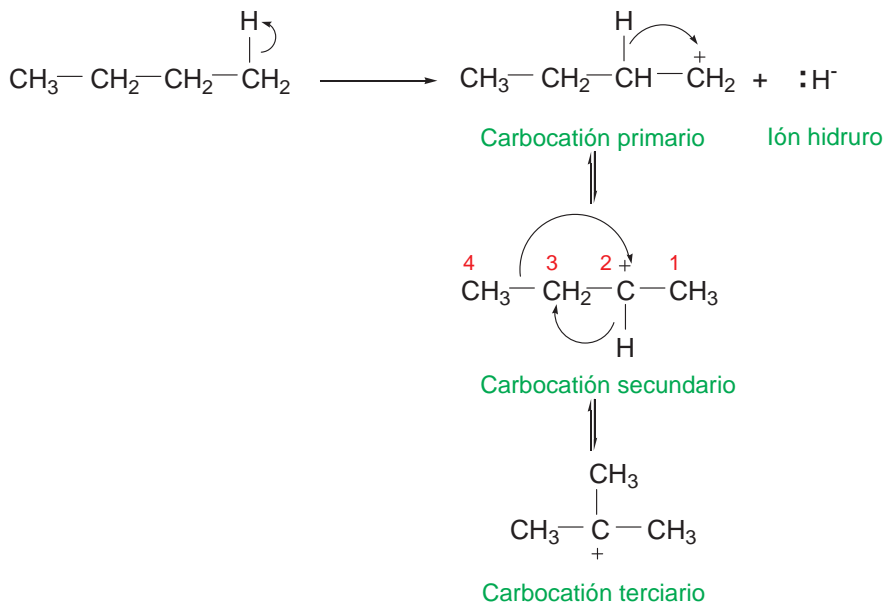


FIGURA 1.8. Isomerización de carbocationes por desplazamiento de ión hidruro o carbanión metilo.

Un *carbanión* es una especie química cargada negativamente con un átomo de carbono con ocho electrones externos, un par de ellos sin compartir, que se obtiene por ruptura heterolítica (heterolisis) de un enlace covalente, en este caso carbono-carbono.

En resumen, los radicales libres R^\bullet , los carbocationes R^+ y los carbaniones R^- son los principales *intermedios de reacción* a través de los cuales transcurren las reacciones orgánicas, como se verá en los temas siguientes.

1.2.6. Fuentes naturales de alcanos

Los alcanos se encuentran en el gas natural y el petróleo junto con otros compuestos, principalmente hidrocarburos de distintos tipos. A escala industrial, los métodos de preparación de alcanos tienen poco interés y se obtienen a partir de estas materias primas.

En el gas natural hay metano y etano, de pequeña masa molecular, cuya principal aplicación es como combustibles. Actualmente el gas

natural sirve también como materia prima en síntesis orgánica, en especial para la obtención de derivados del metano.

El petróleo es una mezcla líquida mucho más compleja de al menos 500 compuestos, formada por alcanos, cicloalcanos y en menor cantidad hidrocarburos aromáticos o arenos. Los alcanos de 1 a 4 átomos de carbono pueden ser extraídos como gases y se comercializan como *gas de petróleo licuado*. Los alcanos de masa molecular más grande se obtienen por destilación fraccionada del petróleo.

Hay dos fracciones denominadas *éter de petróleo*, una de punto de ebullición 40-60 °C que contiene pentano y hexano y otra de punto de ebullición 70-90 °C que incluye hexano y heptano. A 100-120 °C tenemos la *ligroína*, con alcanos de 6, 7 y 8 átomos de carbono.

Las *gasolinas naturales* se encuentran en la fracción recogida entre 70-200 °C que contiene principalmente hidrocarburos saturados de 7 a 11 átomos de carbono mezclados con cicloalcanos (*naftenos*). El intervalo de ebullición no es la única característica de la gasolina utilizada como combustible en los motores de explosión sino que hay otras como el porcentaje de hidrocarburos ramificados o el contenido en hidrocarburos aromáticos, que se miden mediante el *índice de octano*. Este índice es una escala arbitraria basada en comparar las propiedades antidetonantes de una gasolina con las de mezclas de heptano que las tiene pésimas (su índice es 0) y de isoocetano o 2,2,4, trimetilpentano que las tiene excelentes (su índice es 100). Así, una gasolina de 98 octanos tiene las mismas propiedades antidetonantes que una mezcla formada por un 2% de heptano y un 98% de isoocetano.

El *queroseno* se recoge en el intervalo 175-275 °C, contiene alcanos de 11 a 16 átomos de carbono. Se usa como combustible, para calefacción, y carburante para tractores y reactores.

El *gasóleo*, cuyo intervalo de ebullición es 250-350 °C, pero puede llegar a 400 °C, contiene alcanos de 15 a 22 átomos de carbono, sirve como carburante de motores diesel y junto con la fracción anterior para procesos de craqueo.

Las *parafinas* corresponden a la fracción sólida obtenida por destilación a presión reducida del *fuel* o residuo oleoso que queda después de la destilación del gasóleo.

Por último, *lubricantes*, *asfaltos* y *alquitranes* constituyen el residuo no destilable del petróleo. Después de someter dicho residuo a

una extracción con propano líquido, los lubricantes se encuentran en la parte soluble, mientras que en la parte insoluble quedan los alquitranes y asfaltos.

1.3. ALQUENOS

Los *alquenos* son hidrocarburos insaturados que *contienen un doble enlace carbono-carbono* y su fórmula general es C_nH_{2n} . En la figura 1.1 se ha indicado ya la estructura del *eteno* o *etileno*, el primer miembro de esta serie homóloga, de fórmula molecular C_2H_4 con hibridación sp^2 de los dos átomos de carbono y la formación de dos enlaces, uno σ y uno π , entre ellos, así como enlaces σ con los átomos de hidrógeno. Todos los enlaces σ están en el mismo plano y las dos nubes electrónicas del enlace π están situadas por encima y por debajo de ese plano de la molécula. En la figura 1.9 se representa la fórmula espacial del eteno, junto con una nueva vista de los enlaces σ y π mencionados. Las distancias de enlace promedio en los alquenos son: carbono-carbono, $C=C$ 1,34 Å, y carbono-hidrógeno, $C-H$ 1,086 Å, ambas menores que en los alcanos.

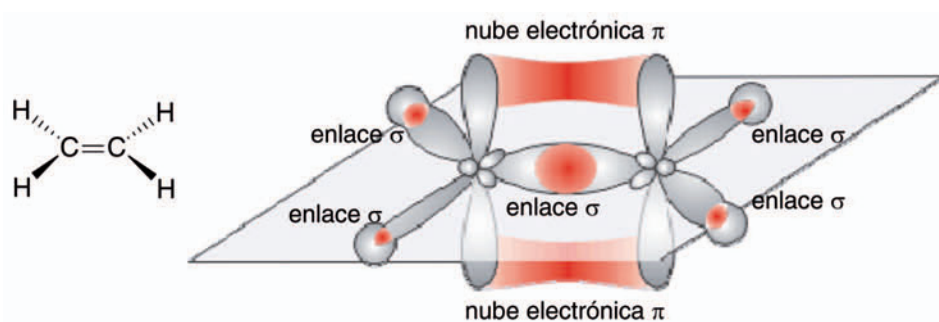
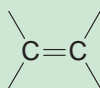


FIGURA 1.9. Geometría del doble enlace en la molécula del eteno.

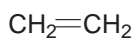
La agrupación atómica o *grupo funcional* que define a la familia de los alquenos y determina sus propiedades es el *doble enlace carbono-carbono*, es decir, el grupo:



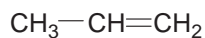
1.3.1. Nomenclatura

Para nombrar a los alquenos de acuerdo con la nomenclatura IUPAC hay que tener en cuenta las siguientes reglas:

1. Elegir como cadena principal la más larga que contenga el doble enlace.
2. Numerar los átomos de carbono de la cadena principal de manera que el doble enlace tenga el número más bajo posible.
3. Utilizar la terminación o sufijo *-eno* en lugar de *-ano*.

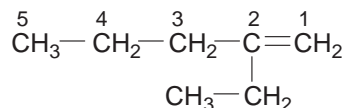


Eteno



Propeno

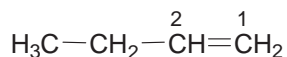
Así para nombrar el compuesto que se indica a continuación, la cadena más larga con un doble enlace es una cadena de cinco átomos de carbono (*pent-*). Como hay un doble enlace se trata de un alqueno y su localización entre los carbonos primero y segundo hace que la molécula sea un *1-penteno*. El grupo *etilo* está unido al *segundo* átomo de *carbono* y por ello el nombre del alqueno es *2-etil-1-penteno*.



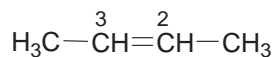
2-Etil-1-penteno

1.3.2. Isomería de posición y geométrica

Los alquenos presentan *isomería de posición de grupo funcional* originada por la distinta localización del doble enlace, el grupo funcional, en la cadena hidrocarbonada. Por ejemplo, es la que tiene lugar entre el 1-buteno y el 2-buteno:



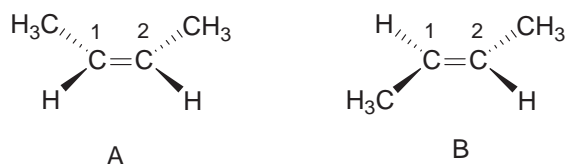
1-Buteno



2-Buteno

Además, si examinamos ahora la molécula del 2-buteno, existen dos posibles representaciones espaciales: en la fórmula **A** los dos

hidrógenos están situados del mismo lado del plano del papel (hacia el lector con el enlace en trazo grueso), y en la fórmula **B** en lados opuestos (uno hacia delante en trazo grueso y otro hacia atrás con el enlace en trazo discontinuo).



Para pasar de la estructura **A** a la **B** es necesario girar el carbono 1, 180° alrededor del doble enlace, pero este giro está impedido ya que se chocaría con las dos nubes electrónicas del enlace π (Figura 1.9). **A** y **B** tienen diferente *configuración*, se trata de compuestos diferentes, son *isómeros geométricos*, la disposición en el espacio de los sustituyentes es distinta. También se llaman *isómeros cis-trans*, la molécula **A** con los dos hidrógenos del mismo lado se denomina *cis* o (*Z*)-2-buteno (del alemán Zusammen que significa juntos) y la molécula **B** que los tiene en lados opuestos *trans* o (*E*)-2-buteno (del alemán Entgegen que significa contrarios).

Este tipo de isomería aparece en los alquenos en los que cada carbono está unido a dos sustituyentes distintos. No existe en el eteno, ni en el propeno donde uno de los carbonos forma enlaces con dos sustituyentes diferentes, pero el otro no. La isomería geométrica pertenece a una clase más general denominada *estereoisomería*.

Presentan *estereoisomería* aquellos compuestos que tienen fórmulas moleculares idénticas y sus átomos presentan la misma distribución, pero su *disposición en el espacio es distinta*. Los estereoisómeros o *isómeros espaciales* tienen la misma fórmula en un plano y hay que representarlos en el espacio tridimensional para visualizar las diferencias.

1.3.3. Propiedades físicas

Los alquenos tienen propiedades físicas muy similares a las de los alcanos. Los que poseen menos de cinco átomos de carbono son gaseosos, hasta los términos de la serie con 17 o 18 átomos de carbono son líquidos y a partir de éstos sólidos.

Los puntos de ebullición de los 1-alquenos, inferiores a los de sus isómeros con el doble enlace en otra posición de la molécula, son 4-6 °C más bajos que los de los correspondientes alcanos, existiendo la misma variación en grados que en estos últimos al pasar de un alqueno a su homólogo superior.

Respecto a los puntos de fusión, al igual que en los alcanos, la variación al avanzar en la serie es más irregular, debido a la influencia de la estructura cristalina que depende de la forma y superficie moleculares.

Una característica distinta con respecto a los alcanos es que los alquenos suelen ser algo más polares, por el hecho de que existen enlaces de átomos de carbono sp^3 con átomos de carbono sp^2 que son más electronegativos. La diferencia en electronegatividad da lugar a una polaridad de enlaces que se traduce, si la geometría lo permite, en polaridad de la molécula. Así el propeno, el 1-buteno y el (*Z*)-2-buteno tienen un momento dipolar de 0,3-0,4 D, mientras que el (*E*)-2-buteno posee momento dipolar nulo.

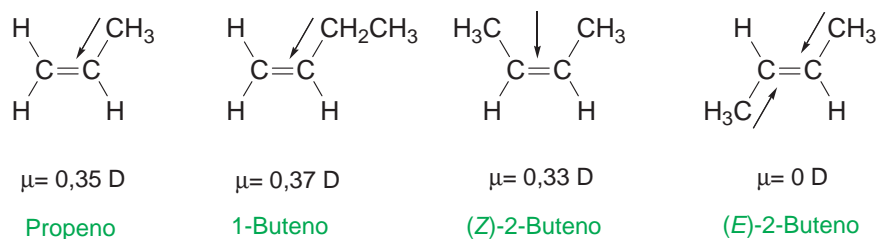


FIGURA 1.10. Momento dipolar μ en Debyes (D) de algunos alquenos.

1.3.4. Reactividad

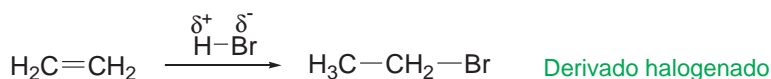
La particular estructura de un doble enlace con dos nubes electrónicas π , una por cada lado del plano según se ha visto en la figura 1.9, es responsable de su reactividad frente a agentes electrófilos. El alqueno se comporta como una base que comparte su par de electrones π con el reactivo ácido o electrófilo atacante. De este modo los alquenos experimentan reacciones de adición electrófila tanto con ácidos (de Lewis o de Brönsted) como con oxidantes.

Un agente o reactivo *electrófilo* es una especie química atraída hacia zonas ricas en electrones, que participa en una reacción química aceptando un par de electrones.

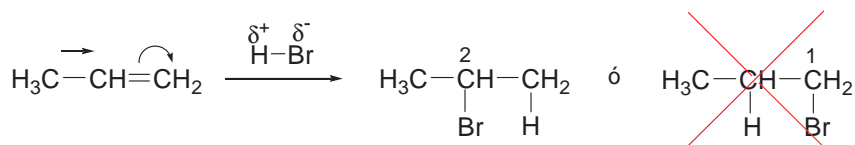
Adición de haluros de hidrógeno

Cuando se pasa una corriente de haluro de hidrógeno (HF, HCl, HBr o HI) sobre un alqueno se produce rápidamente la adición del reactivo formándose un derivado halogenado, el *haluro* o el *halogenuro de alquilo* (R-X) correspondiente, el doble enlace carbono-carbono se transforma en un enlace sencillo.

Consideremos la adición de HBr al alqueno más sencillo, el eteno. Se trata de un sustrato simétrico y se obtiene un único producto de reacción.



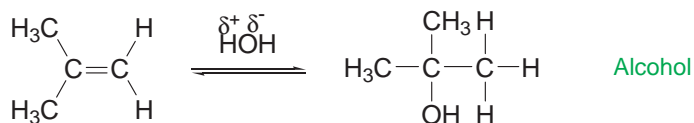
Veamos qué ocurre cuando el reactivo es asimétrico como en el caso del propeno. La adición de HBr puede originar dos productos diferentes, pero sólo se obtiene aquel que tiene el átomo de halógeno en posición 2.



Ello es debido a que el HBr es una molécula polar con un extremo positivo en el átomo de hidrógeno y otro negativo en el átomo de bromo. Este resultado está de acuerdo con la *regla* empírica propuesta por Vladimir *Markovnikov* que podemos resumir del modo siguiente: *el fragmento más positivo de un reactivo del tipo HX se une al átomo de carbono que posee un mayor número de átomos de hidrógeno*.

Adición de agua

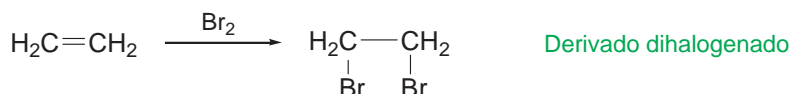
La adición de agua, H₂O, a un alqueno sigue también la regla de Markovnikov y da lugar a la formación de alcoholes, R-OH:



Se trata de una reacción reversible, la adición está favorecida en ácido diluido, y la inversa o de eliminación de agua en ácido concentrado.

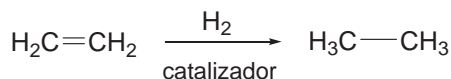
Adición de halógenos

En la adición de halógenos a un alqueno se unen dos nuevos grupos a los átomos de carbono del doble enlace, y este se transforma en un enlace sencillo.



Adición de hidrógeno

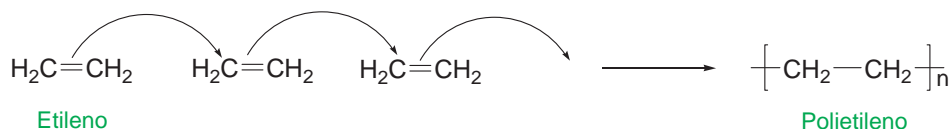
La adición de hidrógeno al doble enlace de un alqueno para originar el alcano correspondiente se conoce como reacción de hidrogenación, y transcurre en presencia de catalizadores de platino, paladio o níquel.



El *calor de hidrogenación* de un alqueno se define como la diferencia de energía entre el alqueno de partida y el alcano obtenido y constituye una medida de su estabilidad.

Polimerización

La polimerización es la reacción de adición de un alqueno a otro por el doble enlace y así sucesivamente para formar largas cadenas, denominadas polímeros. El eteno o etileno es el *monómero* que origina el polietileno, de acuerdo con la secuencia de reacciones siguiente:

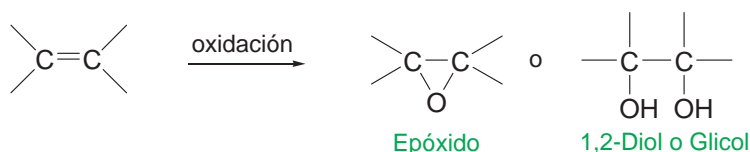


Hay distintos tipos de polímeros, todos ellos con numerosas aplicaciones.

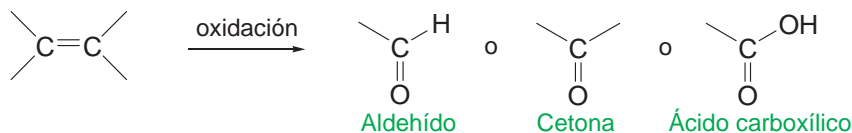
Oxidación

Los alquenos son fácilmente oxidados por acción de permanganato, ozono, tetróxido de osmio, etc.

Puede ocurrir que se oxide únicamente el enlace π sin ruptura del enlace σ :



O bien que tenga lugar la oxidación del enlace π con ruptura del enlace σ :



1.4. DIENOS Y POLIENOS

Los *dienos* son hidrocarburos insaturados que poseen dos dobles enlaces en su molécula, con lo que su fórmula general es C_nH_{2n-2} . Para nombrarlos se elige la cadena más larga que incluya a los dos dobles enlaces y se numera de forma que les correspondan los números más bajos. Se cambia la terminación -ano del alcano por *-adieno*.

En la figura 1.11 encontramos ejemplos de diferentes *tipos de dienos* según la posición que ocupan los dobles enlaces en la cadena carbonada.

Los *dienos aislados* son aquellos en los que los dobles enlaces están separados por dos o más enlaces sencillos, como ocurre en el 1,5-hexadieno y el (*E*)-1,4-heptadieno. Presentan las mismas reacciones que las de los alquenos.

En los *dienos conjugados*, como el 1,3-butadieno o el (*Z*)-1,3-pentadieno, los enlaces dobles y sencillos se encuentran alternados y esta disposición les confiere mayor estabilidad y una reactividad particular.

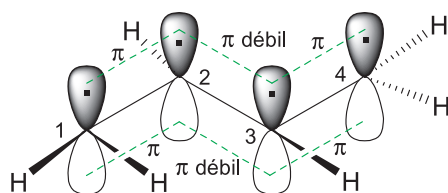


FIGURA 1.12. Interacciones entre orbitales atómicos p que originan enlaces π en el 1,3-butadieno.

- los dos dobles enlaces del 1,3-butadieno tienen menor carácter de doble enlace que el de un alqueno.

Estas características dan una mayor estabilidad al 1,3-butadieno. Una explicación similar es válida para los demás dienos conjugados donde se habla de *deslocalización* o *conjugación* de los *enlaces π* en la cadena poliénica.

Las moléculas que poseen un número par de dobles enlaces alternados se conocen como *polienos conjugados* y algunas tienen gran importancia. Entre las moléculas naturales destaca el β-caroteno que se encuentra en la zanahoria y en el organismo se convierte en vitamina A (Tema 6), y el licopeno del tomate y de la sandía, siendo responsables del color de dichos vegetales. Ambos poseen propiedades antioxidantes, y actúan protegiendo a las células humanas del estrés oxidativo, producido por la acción de los radicales libres.

Una de las principales aplicaciones, consecuencia de la reactividad de los dienos conjugados, es su polimerización para dar cauchos artificiales o sintéticos.

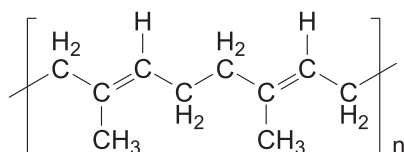


FIGURA 1.13. Fórmula de un caucho artificial, la gutapercha, obtenido por polimerización del 2-metil-1,3-butadieno donde todos los dobles enlaces son *trans*.

TÉRMINOS SIGNIFICATIVOS INTRODUCIDOS EN EL TEMA

Alcanos lineales	Fórmula desarrollada	Modelo molecular compacto o de espacio lleno
Alcanos ramificados	Fórmula enlace-línea	Modelo molecular de bolas y varillas
Alenos	Fórmula espacial	Moléculas orgánicas artificiales
Alquenos	Fórmula molecular	Moléculas orgánicas naturales
Calor de combustión	Fórmula semidesarrollada	Monómero
Calor de hidrogenación	Grupo alquilo	Parafinas
Carbono primario	Grupo funcional	Pirólisis
Carbono secundario	Halogenación	Polienos
Carbono terciario	Hidrocarburos alifáticos	Polimerización
Carbono cuaternario	Hidrocarburos insaturados	Proyección de Newman
Carbanión	Hidrocarburos saturados	Radical libre primario
Carbocatión primario	Heterólisis	Radical libre secundario
Carbocatión secundario	Homólisis	Radical libre terciario
Carbocatión terciario	Índice de octano	Reacción de adición
Compuestos orgánicos	Intermedio de reacción	Reacción de isomerización
Configuración	Isomería <i>cis-trans</i>	Reacción de oxidación
Conformación alternada	Isomería constitucional o estructural	Reacción de sustitución
Conformación eclipsada	Isomería de cadena	Regla de Markovnikov
Craqueo catalítico	Isomería de posición de grupo funcional	Representación en cuña
Craqueo térmico	Isomería geométrica	Serie homóloga
Dienos	Mecanismo iónico	
Electrófilo	Mecanismo radical	
Estereoisómero		
Familia de compuestos orgánicos		

¿SABÍAS QUÉ...

... los fullerenos son la tercera forma más estable del carbono, tras el diamante y el grafito?

De la familia de los fullerenos, que se representan en la imagen de la portada de este tema, los más populares son C_{60} y C_{70} descubiertos en 1985 por Harold Kroto, James Heath, Sean O'Brien, Robert Curl y Richard Smalley en un experimento que consistió en hacer incidir un rayo laser sobre un trozo de grafito. A Kroto, Curl y a Smalley se les concedió el Premio Nobel de Química en 1996, por su contribución al descubrimiento de esta clase de compuestos.

El C_{60} se llama buckminsterfullereno y su estructura es la de un balón de fútbol, constituido por 20 hexágonos y 12 pentágonos con un átomo de carbono en cada uno de los vértices de los hexágonos y un enlace a lo largo de cada arista. El nombre viene del arquitecto Richard Buckminster Fuller con motivo de la similitud de la molécula con una de sus construcciones (domo geodésico). En el C_{60} cada átomo de carbono está unido a otros tres átomos utilizando para ello orbitales sp^2 con un electrón en cada orbital. El cuarto electrón de valencia de cada carbono se encontraría en un orbital p perpendicular a la superficie esférica, de esta manera los orbitales se solapan formando un continuo de orbitales con electrones p por dentro y fuera de la esfera. Presentan reacciones de adición, pero no pueden experimentar reacciones de sustitución ya que no tienen hidrógenos. El C_{60} presenta dos tipos de enlaces, los *enlaces 6-6* compartidos por hexágonos adyacentes y los *enlaces 5-6* compartidos por un pentágono y un hexágono. Los enlaces 6-6 son más cortos (1,39 Å), que los enlaces 5-6 (1,43 Å), y más parecidos a los dobles enlaces por lo cual la mayoría de las adiciones se llevan a cabo en un enlace 6-6.

Estas moléculas abren un nuevo campo de aplicaciones en la fabricación de polímeros, superconductores, estructuras con metales o con otros átomos atrapados en su interior, así como de nuevos catalizadores e incluso productos de aplicación farmacéutica.